

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ И РАДИАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕХОДА $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ ДИМЕРА СТРОНЦИЯ

А.Д. Смирнов

А.А. Гуров

В.В. Федоров

А.И. Карнюшкин

aagurov@bmstu.ru

fedorov@bmstu.ru

kai-himik@bmstu.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

Аннотация

Решение определенных задач в различных областях науки и техники требует знания некоторых характеристик атомов и молекул. К числу таких характеристик относятся энергетические и радиационные параметры указанных частиц. В связи с этим необходимо создание базы справочных данных, которые, во-первых, регулярно обновлялись, а, во-вторых, были бы доступны различным специалистам (например, конструкторам, инженерам, ученым и др.), работающим в таких областях, как химические термодинамика и кинетика, атомная и молекулярная физика, газовая и радиационная динамика, квантовая электроника и химия и т. д. Рассчитаны значения энергетических и радиационных параметров: факторов Франка — Кондона и коэффициентов Эйнштейна, колебательных энергий и сил осциллятора, волновых чисел электронно-колебательных переходов в системе полос $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулярной частицы димера стронция. Расчеты проведены на основе построенных потенциальных кривых возмущенного осциллятора Морзе. Расчетные радиационные параметры электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера стронция получены впервые, поэтому они являются весьма актуальными для пополнения баз справочных данных. Значения рассчитанных факторов Франка — Кондона, коэффициентов Эйнштейна и волновых чисел колебательных полос могут быть использованы при создании газовых лазеров

Ключевые слова

Потенциальная кривая, уравнение Шредингера, молекулярные постоянные, радиационные параметры

Поступила 19.02.2024

Принята 11.06.2024

© Автор(ы), 2025

Введение. В последнее время существенно выросло число экспериментальных и теоретических работ, посвященных получению «холодных» атомов, необходимых для синтеза «холодных» двухатомных молекул [1–3]. В основе получения атомов лежит методика низкотемпературной фотоассоциации. Важность исследований по получению «холодных» атомов и молекул обусловлена, во-первых, изучением динамики столкновения холодных частиц, во-вторых, проведением химических реакций при низких значениях температуры. Для синтеза «холодных» молекул из «холодных» атомов требуются данные по спектроскопическим молекулярным постоянным и сведения о радиационных параметрах. Радиационными параметрами (характеристиками) называются величины, определяющие распределение интенсивностей в электронно-колебательно-вращательных переходах двухатомных молекул. Наиболее полно вопросы, связанные с интенсивностями двухатомных молекул, изучены в [4–6]. Для практического использования в них рекомендованы максимально надежные радиационные параметры некоторых двухатомных молекул, имеющих огромное прикладное значение.

Значения радиационных параметров электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$, $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ димеров щелочных металлов (Cs_2 , Rb_2 , K_2 , Na_2 , Li_2) рассчитаны в [7–11]. В расчетах использован квантово-химический метод, основанный на полуэмпирических потенциальных кривых. Эффективность такого метода при нахождении указанных характеристик подтверждает хорошая сходимость рассчитанных и экспериментальных данных.

Цель работы — расчет значений радиационных параметров электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера стронция Sr_2 . Спектральный анализ электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ для этой частицы выполнен с использованием лазерных методик и техники высокого разрешения [12]. В результате получены молекулярные постоянные для основного и возбужденного электронных состояний. Значения радиационных параметров электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ частицы Ca_2 приведены в [13]. По сравнению с перечисленными димерами щелочных металлов основные электронные состояния для димеров Mg_2 , Ca_2 и Sr_2 являются слабосвязанными. Такие димеры, как Ca_2 и Sr_2 могут быть потенциальными «кандидатами» для практического применения, например, при создании газовых лазеров [14].

Построение потенциальных кривых. Для построения потенциальных кривых использована модель потенциальной кривой возмущенного осциллятора Морзе [15]:

$$U(R) = V_e \left(y^2 + \sum_{n=4}^{\infty} b_n y^n \right),$$

где V_e, b_n — параметры потенциальных кривых (функций); $y = 1 - \exp[-\alpha(R - R_e)]$, R, R_e — данное и равновесное межъядерные (межъядерные) расстояния, α — параметр потенциальных кривых; $n = 4-15$ — номер параметра потенциальных кривых.

Рассчитанные параметры потенциальных кривых для основного (числитель) и возбужденного (знаменатель) электронных состояний димера стронция приведены ниже:

$V_e, \text{см}^{-1}$	1060 / 5046
$\alpha, \text{Å}^{-1}$	1,117 / 0,967
$R_e, \text{Å}$	4,446 / 3,952
b_4	0,000580704 / 0,053019013
b_5	0,000844546 / 0,144719707
b_6	0,012725267 / -0,135035885
b_7	-0,012346884 / 0,147890429
b_8	0,021609359 / -0,09691167
b_9	-0,011260893 / 0,027483177
b_{10}	0,01627822 / 0,039103105
b_{11}	-0,009054047 / -0,106527356
b_{12}	0,013364571 / 0,126475151
b_{13}	-0,008788892 / -0,126313641
b_{14}	0,012154400 / 0,068866648
b_{15}	-0,008762526 / -0,002565746

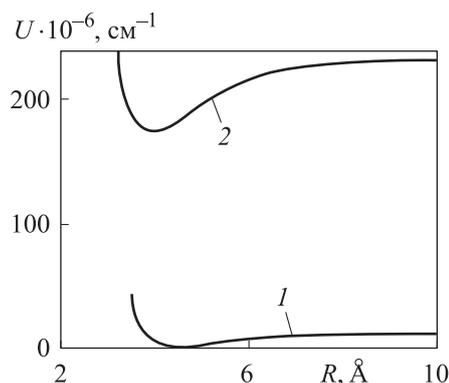
При расчете значений параметров использованы экспериментально найденные спектроскопические постоянные. Потенциальные кривые основного и возбужденного электронных состояний молекулярной частицы димера стронция показаны на рисунке.

Расчеты молекулярных постоянных. Основываясь на потенциальных кривых вычислены значения колебательной энергии E_v и молекулярные постоянные (вращательные B_v и центробежные D_v, H_v).

Колебательные энергии определяют численным решением волнового уравнения Шредингера методом Нумерова — Кулея [16]:

$$\frac{d^2 \psi_v(R)}{dR^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2 [E_v - U(R)]} \psi_v(R) = 0,$$

где $\psi_v(R)$ — волновая функция потенциальной энергии; μ — приведенная масса молекулы; h — постоянная Планка; $U(R)$ — потенциальная энергия состояния. При расчете значений колебательной энергии для основного и возбужденных состояний применен вариационно-итерационный метод [16].



Потенциальные кривые основного (1) и возбужденного (2) состояний электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера стронция

Расчет значений вращательных и центробежных молекулярных постоянных выполнен по соотношениям теории возмущений модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [17]:

$$B_v = \beta \langle v | R^{-2} | v \rangle; \quad D_v = \beta^2 \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{E_u - E_v};$$

$$H_v = \beta^3 \sum_{t \neq v} \sum_{u \neq v} \frac{\langle v | R^{-2} | v \rangle \langle u | R^{-2} | t \rangle \langle t | R^{-2} | v \rangle}{(E_u - E_v)(E_t - E_v)} - \beta^2 B_v \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2};$$

где $\beta = h/(8\pi^2\mu C)$, C — скорость света; v, u, t — номера колебательных состояний; $E_u - E_v, E_t - E_v$ — разность колебательных энергий соответствующих уровней; $\langle u | R^{-2} | v \rangle = \int_0^\infty \psi_u(R) R^{-2} \psi_v(R) dR$ — матричный элемент.

При расчетах значений постоянных использован метод возмущений [17]. Результаты расчета приведены в табл. 1.

Рассчитанные на основе потенциальных кривых значения колебательной энергии, вращательные и центробежные молекулярные постоянные аппроксимированы степенными функциями вида

$$E_v = \omega_e(v + 0,5) - \omega_e x_e(v + 0,5)^2 + \dots; \quad B_v = B_e - \alpha_e(v + 0,5) + \dots;$$

$$D_v = D_e - \beta_e(v + 0,5) + \delta_e(v + 0,5)^2 + \dots;$$

$$H_v = H_e - \xi_e(v + 0,5) + \varepsilon_e(v + 0,5)^2 + \dots$$

Здесь $\omega_e, \omega_e x_e$ — частота колебания и экспериментальная поправка ангармоничности к ней; B_e, D_e, H_e — первые слагаемые вращательной и центробежных молекулярных постоянных; $\alpha_e, \delta_e, \epsilon_e$ — экспериментальные поправки к вращательной и центробежным постоянным, полученные аппроксимацией (выполнено их сравнение с литературными данными); β_e, ξ_e — вращательная и центробежная постоянные.

Таблица 1

**Значения колебательной энергии, вращательных
и центробежных молекулярных постоянных для основного
и возбужденного состояний электронного перехода $A^1 \Sigma_u^+ - X^1 \Sigma_g^+$
молекулы димера стронция**

v	Основное				Возбужденное			
	E_v	B_v	$D_v \cdot 10^8$	$H_v \cdot 10^{14}$	E_v	B_v	$D_v \cdot 10^9$	$H_v \cdot 10^{15}$
0	20,052	0,01930	1,754	2,620	42,460	0,02452	8,222	1,951
1	59,549	0,01911	1,790	2,812	126,870	0,02439	8,266	2,105
2	98,238	0,01890	1,829	3,060	210,620	0,02427	8,316	2,366
3	136,117	0,01869	1,870	3,301	293,710	0,02415	8,366	2,474
4	173,188	0,01849	1,913	3,558	376,139	0,02404	8,417	2,565
5	209,449	0,01828	1,958	3,836	457,907	0,02392	8,470	2,653
6	244,906	0,01807	2,006	4,143	539,015	0,02381	8,523	2,741
7	279,545	0,01786	2,056	4,475	619,461	0,02369	8,578	2,831
8	313,380	0,01764	2,108	4,839	699,247	0,02358	8,633	2,923
9	346,405	0,01742	2,164	5,238	778,370	0,02346	8,690	3,018
10	378,622	0,01720	2,222	5,677	856,833	0,02335	8,747	3,115
11	410,030	0,01698	2,284	6,159	934,633	0,02324	8,806	3,216
12	440,628	0,01676	2,349	6,694	1011,773	0,02313	8,866	3,320
13	470,418	0,01653	2,419	7,291	1088,250	0,02302	8,928	3,427
14	500,799	0,01630	2,493	8,002	1164,066	0,02291	8,990	3,539
15	527,570	0,01606	2,571	9,080	1235,219	0,02280	9,053	3,658

Параметры степенных функций являются фундаментальными спектроскопическими молекулярными постоянными.

Рассчитанные значения молекулярных постоянных приведены в табл. 2. Для сравнения в ней также указаны экспериментальные значения этих характеристик из [12].

Таблица 2

Сравнение расчетных (числитель) и экспериментальных (знаменатель) значений молекулярных постоянных для основного и возбужденного состояний электронного перехода $A^1 \Sigma_u^+ - X^1 \Sigma_g^+$ димера стронция

Параметр, см ⁻¹	Основное	Возбужденное
ω_e	40,260 / 40,320	85,01 / 85,07
$\omega_e x_e$	-0,404 / -0,4054	-0,33 / -0,33
$\omega_e y_e$	$0,42 \cdot 10^{-3} / 0,43 \cdot 10^{-3}$	$-0,23 \cdot 10^{-4} / -0,25 \cdot 10^{-4}$
B_e	0,0190 / 0,0194	0,025 / 0,024
α_e	$-1,92 \cdot 10^{-4} / -2,00 \cdot 10^{-4}$	$-0,12 \cdot 10^{-3} / -0,12 \cdot 10^{-3}$
D_e	$1,80 \cdot 10^{-8} / 2,00 \cdot 10^{-8}$	$8,20 \cdot 10^{-9} / 8,00 \cdot 10^{-9}$
H_e	$-2,80 \cdot 10^{-14} / -$	$-1,70 \cdot 10^{-15} / -$

Расчеты радиационных параметров. Радиационные параметры: коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения $A_{v'v''}$, с⁻¹; силы осциллятора для поглощения $f_{v'v''}^{\Pi}$; факторы Франка — Кондона $q_{v'v''}$; волновые числа электронно-колебательных полос $\nu_{v'v''}$, см⁻¹.

При определении значений параметров $A_{v'v''}$ и $f_{v'v''}^{\Pi}$ использована зависимость дипольного момента от межъядерного расстояния [18]. Указанные параметры связаны с функцией дипольного момента $\mu_e(R)$ (ат. ед.) соотношениями [19]:

$$A_{v'v''} = 2,026 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'v''}^3 (2 - \delta_{0, \Lambda' + \Lambda''})}{2 - \delta_{0, \Lambda''}} \left[\langle \Psi_{v'}(R) | \mu_e(R) | \Psi_{v''}(R) \rangle \right]^2;$$

$$f_{v'v''}^{\Pi} = 3,0376 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'v''} (2 - \delta_{0, \Lambda' + \Lambda''})}{2 - \delta_{0, \Lambda''}} \left[\langle \Psi_{v'}(R) | \mu_e(R) | \Psi_{v''}(R) \rangle \right]^2,$$

где $\delta_{0, \Lambda}$ — символ Кронекера, $\delta_{0, \Lambda} = 1$ при значении проекции орбитального момента количества движения электронов на межъядерную ось $\Lambda = 0$, $\delta_{0, \Lambda} = 0$ при $\Lambda' = 1, 2, \dots$ для возбужденных состояний Π, Δ, \dots ; $\delta_{0, \Lambda''}$, $\delta_{0, \Lambda' + \Lambda''}$ — символ Кронекера для основного и возбужденных состояний; $\Psi_{v'}(R)$, $\Psi_{v''}(R)$ — колебательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний.

Факторы Франка — Кондона $q_{v'v''}$, характеризующие относительное распределение интенсивностей электронно-колебательных полос, представляют собой квадраты интеграла перекрытия колебательных волновых функций комбинирующих электронных состояний:

$$q_{v'v''} = \left| \int_0^{\infty} \Psi_{v'}(R)\Psi_{v''}(R)dR \right|^2.$$

Расчеты волновых чисел электронно-колебательных полос $\nu_{v'v''}$ электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ осуществлялись по соотношению $\nu_{v'v''} = T_e' + E'(v) + E''(v)$, где T_e' — электронная энергия возбужденного состояния; $E'(v), E''(v)$ — колебательные энергии возбужденного и основного электронных состояний.

Радиационные параметры электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы димера стронция определены для интервалов значений волновых чисел возбужденного и основного электронных состояний: $0 \leq v' \leq 5, 0 \leq v'' \leq 8$. Эти параметры могут быть включены в базу справочных данных [20]. Результаты расчета приведены в табл. 3.

Таблица 3

Значения радиационных параметров электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ молекулы димера стронция

Параметр	v'					
	0	1	2	3	4	5
$v'' = 0$						
$A_{v'v''}, c^{-1}$	$3,26 \cdot 10^3$	$5,67 \cdot 10^4$	$2,74 \cdot 10^6$	$8,96 \cdot 10^6$	$2,19 \cdot 10^6$	$1,09 \cdot 10^6$
$f_{v'v''}^{\Pi}$	$2,40 \cdot 10^{-4}$	$2,78 \cdot 10^{-4}$	$1,40 \cdot 10^{-2}$	$4,32 \cdot 10^{-3}$	$1,05 \cdot 10^{-2}$	$5,39 \cdot 10^{-3}$
$q_{v'v''}, c^{-1}$	0,00009	0,00084	0,04283	0,01267	0,03015	0,01676
$\nu_{v'v''}, c^{-1}$	17380,3	17464,7	17548,4	17631,8	17713,5	17789,6
$v'' = 1$						
$A_{v'v''}, c^{-1}$	$4,29 \cdot 10^4$	$3,36 \cdot 10^5$	$1,29 \cdot 10^6$	$1,56 \cdot 10^{-3}$	$2,72 \cdot 10^{-2}$	$2,92 \cdot 10^{-5}$
$f_{v'v''}^{\Pi}$	$2,14 \cdot 10^{-4}$	$1,66 \cdot 10^{-3}$	$6,33 \cdot 10^{-3}$	$3,21 \cdot 10^6$	$5,68 \cdot 10^6$	$5,89 \cdot 10^3$
$q_{v'v''}, c^{-1}$	0,00065	0,00503	0,01902	0,04618	0,07971	0,00009
$\nu_{v'v''}, c^{-1}$	17340,9	17425,2	17508,9	17591,8	17674	17750,6

Продолжение табл. 3

Параметр	ν'					
	0	1	2	3	4	5
$\nu'' = 2$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$1,64 \cdot 10^5$	$1,03 \cdot 10^6$	$3,07 \cdot 10^6$	$5,52 \cdot 10^6$	$6,40 \cdot 10^6$	$1,64 \cdot 10^5$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$8,21 \cdot 10^{-4}$	$5,13 \cdot 10^{-3}$	$1,50 \cdot 10^{-2}$	$2,68 \cdot 10^{-2}$	$3,08 \cdot 10^{-2}$	$8,21 \cdot 10^{-4}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,0025	0,01558	0,04558	0,08051	0,0914	0,0025
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17302,2	17386,6	17470,2	17553,2	17635,4	17711,3
$\nu'' = 3$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$4,38 \cdot 10^5$	$2,18 \cdot 10^6$	$4,81 \cdot 10^6$	$5,78 \cdot 10^6$	$3,51 \cdot 10^6$	$4,37 \cdot 10^5$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$2,20 \cdot 10^{-3}$	$1,08 \cdot 10^{-2}$	$2,37 \cdot 10^{-2}$	$2,82 \cdot 10^{-2}$	$1,70 \cdot 10^{-2}$	$2,20 \cdot 10^{-3}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,0067	0,03309	0,07218	0,08545	0,05115	0,0067
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17264,4	17348,8	17432,4	17515,4	17597,6	17673,4
$\nu'' = 4$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$9,17 \cdot 10^5$	$3,55 \cdot 10^6$	$9,17 \cdot 10^5$	$3,77 \cdot 10^6$	$5,24 \cdot 10^5$	$9,17 \cdot 10^5$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$4,63 \cdot 10^{-3}$	$1,76 \cdot 10^{-3}$	$4,63 \cdot 10^{-3}$	$1,85 \cdot 10^{-2}$	$2,55 \cdot 10^{-3}$	$4,63 \cdot 10^{-3}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,01409	0,05394	0,01409	0,05649	0,00792	0,01409
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17227,4	17311,7	17227,4	17478,3	17560,5	17636,3
$\nu'' = 5$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$1,61 \cdot 10^6$	$4,66 \cdot 10^6$	$4,71 \cdot 10^6$	$1,24 \cdot 10^6$	$2,26 \cdot 10^5$	$1,61 \cdot 10^6$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$8,15 \cdot 10^{-3}$	$2,34 \cdot 10^{-2}$	$2,34 \cdot 10^{-2}$	$6,09 \cdot 10^{-3}$	$1,10 \cdot 10^{-3}$	$8,15 \cdot 10^{-3}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,02477	0,07156	0,07197	0,01888	0,00316	0,02477
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17191,2	17275,5	17359,2	17442,1	17524,3	17620
$\nu'' = 6$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$2,45 \cdot 10^6$	$5,17 \cdot 10^6$	$2,94 \cdot 10^6$	$2,22 \cdot 10^4$	$1,83 \cdot 10^6$	$2,45 \cdot 10^6$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$	$2,61 \cdot 10^{-2}$	$1,47 \cdot 10^{-2}$	$1,10 \cdot 10^{-4}$	$8,97 \cdot 10^{-3}$	$1,25 \cdot 10^{-2}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,03789	0,07982	0,04531	0,00039	0,0269	0,03789
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17155,7	17240,1	17323,7	17406,7	17488,9	17564,5
$\nu'' = 7$						
$A_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	$3,35 \cdot 10^6$	$4,91 \cdot 10^6$	$1,15 \cdot 10^6$	$5,21 \cdot 10^5$	$2,95 \cdot 10^6$	$3,35 \cdot 10^6$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$1,71 \cdot 10^{-2}$	$2,49 \cdot 10^{-2}$	$5,76 \cdot 10^{-3}$	$2,59 \cdot 10^{-3}$	$1,45 \cdot 10^{-2}$	$1,71 \cdot 10^{-2}$
$q_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	0,05185	0,07611	0,01789	0,00772	0,0441	0,05185
$\nu_{\nu'\nu''}, c^{-1}$	17121,1	17205,5	17289,2	17372,1	17454,3	17529,8

Параметр	ν'					
	0	1	2	3	4	5
$\nu'' = 8$						
$A_{\nu'\nu''}, \text{ c}^{-1}$	$1,18 \cdot 10^6$	$4,00 \cdot 10^6$	$1,25 \cdot 10^5$	$1,80 \cdot 10^6$	$2,46 \cdot 10^6$	$4,18 \cdot 10^6$
$f_{\nu'\nu''}^{\Pi}$	$2,14 \cdot 10^{-2}$	$2,03 \cdot 10^{-2}$	$6,32 \cdot 10^{-4}$	$8,96 \cdot 10^{-3}$	$1,21 \cdot 10^{-2}$	$2,14 \cdot 10^{-2}$
$q_{\nu'\nu''}, \text{ c}^{-1}$	0,06479	0,06217	0,00292	0,02718	0,03733	0,06479
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{ c}^{-1}$	17087,3	17171,7	17255,4	17338,3	17420,5	17495,9

Выводы. Для молекулы димера стронция выполнен расчет значений радиационных параметров, которые могут пополнить базы справочных данных. Расчет указанных параметров осуществлен на основе построенных потенциальных кривых, надежность и достоверность которых подтверждают хорошо согласующиеся рассчитанные и экспериментальные значения молекулярных постоянных.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Lang F., Winkler K., Strauss C., et al. Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, no. 13, art. 133005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.133005>
- [2] Mark M.J., Danz J.G., Haller E., et al. Dark resonances for ground-state transfer of molecular quantum gases. *Appl. Phys. B*, 2009, vol. 95, no. 2, pp. 219–225. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00340-009-3407-1>
- [3] Aikawa K., Akamatsu D., Hayashi M., et al. Coherent transfer of photoassociated molecules into the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, vol. 105, no. 20, art. 203001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.203001>
- [4] Кузяков Ю.Я., Пластинин Ю.А. Вероятности оптических переходов двухатомных молекул. М., Наука, 1980.
- [5] Кузьменко Н.Е., Кузнецова Л.А., Молякин А.Н. Вероятности электронных переходов и времени жизни электронных возбужденных состояний двухатомных молекул. *УФН*, 1979, т. 127, № 3, с. 451–478. DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.0127.197903d.0451>
- [6] Erman P. Time resolved spectroscopy of small molecules. In: *Molecular Spectroscopy*. Vol. 6. Royal Society of Chemistry, 1979, pp. 174–231.
- [7] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ димера лития. *Оптика и спектроскопия*, 2012, т. 113, № 4, с. 387–394. EDN: PDTXOP

- [8] Смирнов А.Д. Расчет спектроскопических постоянных и радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ димера натрия. *Оптика и спектроскопия*, 2010, т. 109, № 5, с. 739–745. EDN: NBSMRN
- [9] Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров для электронных переходов $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ и $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ димера калия. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2013, № 2 (49), с. 67–85. EDN: QNLDLF
- [10] Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ перехода димера цезия. *Журнал прикладной спектроскопии*, 2010, т. 77, № 5, с. 661–665. EDN: MTVWLJ
- [11] Смирнов А.Д. Расчет радиационных параметров электронного перехода $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ димеров цезия и рубидия. *Инженерный журнал: наука и инновации*, 2013, № 6. DOI: <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2013-6-790>
- [12] Gerber G., Moller R., Schneider H.J. Laser induced bound-bound and bound-continuum emission of the Sr_2 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system. *J. Chem. Phys.*, 1984, vol. 81, no. 4, pp. 1538–1552. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.447883>
- [13] Смирнов А.Д. Радиационные параметры электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера кальция. *Актуальные исследования*, 2022, № 24, с. 9–14. EDN: JBEIXH
- [14] Vidal C.R.J. The molecular constants and potential energy curves of the Ca_2 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system from laser induced fluorescence. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, no. 3, pp. 1864–1874. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.439331>
- [15] Huffaker J.N. Diatomic molecules as perturbed Morse oscillators. I. Energy levels. *J. Chem. Phys.*, 1976, vol. 64, no. 8, pp. 3175–3181. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.432654>
- [16] Cooley J.W. An improved eigenvalue corrector formula for solving the Schrödinger equation for central fields. *Math. Comp.*, 1961, vol. 15, no. 76, pp. 363–374. DOI: <https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1961-0129566-X>
- [17] Цюликe Л. Квантовая химия. Т. 1. Основы и общие методы. М., Мир, 1976.
- [18] Skomorowski W., Moszynski R., Koch C.P. Formation of deeply bound ultracold Sr_2 molecules by photoassociation near the $^1S + ^3P_1$ intercombination line. *Phys. Rev. A*, 2012, vol. 85, no. 4, art. 043414. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.85.043414>
- [19] Laher R.R., Khakoo M.A., Antic-Jovanovic A.J. Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of $^{107,109}Ag_2$. *J. Mol. Spectr.*, 2008, vol. 248, iss. 2, pp. 111–121. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jms.2007.12.003>
- [20] Кузнецова Л.А., Пазюк Е.А., Столяров А.В. Радиационные и энергетические свойства двухатомных молекул (банк данных). *Журнал физической химии*, 1993, т. 67, № 11, с. 2046–2049.

Смирнов Александр Давыдович (1946–2024) — канд. хим. наук, работал на кафедре «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Гуров Александр Алексеевич — канд. хим. наук, доцент кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Федоров Владимир Витальевич — старший преподаватель кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Карнюшкин Александр Иванович — канд. техн. наук, доцент кафедры «Химия» МГТУ им. Н.Э. Баумана (Российская Федерация, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

Просьба ссылаться на эту статью следующим образом:

Смирнов А.Д., Гуров А.А., Федоров В.В. и др. Энергетические и радиационные параметры электронного перехода $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ димера стронция. *Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Естественные науки*, 2025, № 2 (119), с. 93–106.

EDN: LDMBUL

**ENERGY AND RADIATION PARAMETERS
FOR THE ELECTRON TRANSITION $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$
OF THE STRONCIUM DIMER MOLECULE**

A.D. Smirnov

A.A. Gurov

V.V. Fedorov

A.I. Karnyushkin

aagurov@bmstu.ru

fedorov@bmstu.ru

kai-himik@bmstu.ru

BMSTU, Moscow, Russian Federation

Abstract

Solving certain problems in various fields of science and technology requires knowledge of certain characteristics of atoms and molecules. These characteristics include the energy and radiation parameters of these particles. In this regard, it is necessary to create a database of reference data that, firstly, is regularly updated, and, secondly, would be available to various specialists (for example, designers, engineers, scientists, etc.) working in such fields as chemical thermodynamics and kinetics, atomic and molecular physics, gas and radiation dynamics, quantum electronics and chemis-

Keywords

Potential energy curve, Schrodinger equation, molecular constants, radiative parameters

try, etc. The article calculates the values of energy and radiation parameters: Frank — Condon factors and Einstein coefficients, oscillatory energies and oscillator forces, wave numbers of electron-vibrational transitions in the system of $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ bands of a strontium dimer molecular particle. The calculations are based on the constructed potential curves of the perturbed Morse oscillator. The calculated radiation parameters of the strontium dimer electron transition $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ have been obtained for the first time, so they are very relevant for updating the reference databases. The values of the calculated Frank — Condon factors, Einstein coefficients, and wavenumbers of the oscillating bands can be used to create gas lasers

Received 19.02.2024

Accepted 11.06.2024

© Author(s), 2025

REFERENCES

- [1] Lang F., Winkler K., Strauss C., et al. Ultracold triplet molecules in the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2008, vol. 101, no. 13, art. 133005. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.133005>
- [2] Mark M.J., Danz J.G., Haller E., et al. Dark resonances for ground-state transfer of molecular quantum gases. *Appl. Phys. B*, 2009, vol. 95, no. 2, pp. 219–225. DOI: <https://doi.org/10.1007/s00340-009-3407-1>
- [3] Aikawa K., Akamatsu D., Hayashi M., et al. Coherent transfer of photoassociated molecules into the rovibrational ground state. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, vol. 105, no. 20, art. 203001. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.203001>
- [4] Kuzyakov Yu.Ya., Plastinin Yu.A. Veroyatnosti opticheskikh perekhodov dvukhatomnykh molekul [Probabilities of optical transitions of diatomic molecules]. Moscow, Nauka Publ., 1980.
- [5] Kuzmenko N.E., Kuznetsova L.A., Monyakin A.N. Electronic transition probabilities and lifetimes of electronically excited states of diatomic molecules. *Sov. Phys. Usp.*, 1979, vol. 22, no. 3, pp. 160–173. DOI: <https://doi.org/10.1070/PU1979v022n03ABEH005425>
- [6] Erman P. Time resolved spectroscopy of small molecules. In: *Molecular Spectroscopy*. Vol. 6. Royal Society of Chemistry, 1979, pp. 174–231.
- [7] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ electronic transitions of the lithium dimer. *Opt. Spectrosc.*, 2012, vol. 113, no. 4, pp. 345–352. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0030400X12080176>
- [8] Smirnov A.D. Calculation of spectroscopic constants and radiative parameters for $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ electronic transitions of sodium dimer. *Opt. Spectrosc.*, 2010, vol. 109, no. 5, pp. 680–686. DOI: <https://doi.org/10.1134/S0030400X10110068>

- [9] Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ and $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ electronic transitions of potassium dimer. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2013, no. 2 (49), pp. 67–85 (in Russ.). EDN: QNLDFL
- [10] Smirnov A.D. Calculation of radiative parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ -transition of cesium dimer. *J. Appl. Spectrosc.*, 2010, vol. 77, no. 5, pp. 609–614. DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-010-9375-8>
- [11] Smirnov A.D. Energy and radiation properties of the $B^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ electronic transition of the cesium and rubidium dimers. *Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii* [Engineering Journal: Science and Innovation], 2013, no. 6. DOI: <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2013-6-790> (in Russ.).
- [12] Gerber G., Moller R., Schneider H.J. Laser induced bound-bound and bound-continuum emission of the Sr_2 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system. *J. Chem. Phys.*, 1984, vol. 81, no. 4, pp. 1538–1552. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.447883>
- [13] Smirnov A.D. Radiative parameters for the electron transition $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ of the calcium dimer molecule. *Aktualnye issledovaniya*, 2022, no. 24, pp. 9–14 (in Russ.). EDN: JBEIXH
- [14] Vidal C.R.J. The molecular constants and potential energy curves of the Ca_2 $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ system from laser induced fluorescence. *J. Chem. Phys.*, 1980, vol. 72, no. 3, pp. 1864–1874. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.439331>
- [15] Huffaker J.N. Diatomic molecules as perturbed Morse oscillators. I. Energy levels. *J. Chem. Phys.*, 1976, vol. 64, no. 8, pp. 3175–3181. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.432654>
- [16] Cooley J.W. An improved eigenvalue corrector formula for solving the Schrödinger equation for central fields. *Math. Comp.*, 1961, vol. 15, no. 76, pp. 363–374. DOI: <https://doi.org/10.1090/S0025-5718-1961-0129566-X>
- [17] Tsyulike L. *Kvantovaya khimiya. T. 1. Osnovy i obshchie metody* [Quantum Chemistry. Vol. 1. Fundamentals and general methods]. Moscow, Mir Publ., 1976.
- [18] Skomorowski W., Moszynski R., Koch C.P. Formation of deeply bound ultracold Sr_2 molecules by photoassociation near the $^1S + ^3P_1$ intercombination line. *Phys. Rev. A*, 2012, vol. 85, no. 4, art. 043414. DOI: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.85.043414>
- [19] Laher R.R., Khakoo M.A., Antic-Jovanovic A.J. Radiative transition parameters for the $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ band system of $^{107,109}Ag_2$. *J. Mol. Spectr.*, 2008, vol. 248, iss. 2, pp. 111–121. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jms.2007.12.003>
- [20] Kuznetsova L.A., Pazyuk E.A., Stolyarov A.V. Radiation and energy properties of diatomic molecules (data bank). *Zhurnal fizicheskoy khimii*, 1993, vol. 67, no. 11, pp. 2046–2049 (in Russ.).

Smirnov A.D. (1946–2024) — Cand. Sc. (Chem.), worked at the Department of Chemistry, BMSTU (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Gurov A.A. — Cand. Sc. (Chem.), Assoc. Professor, Department of Chemistry, BMSTU (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Fedorov V.V. — Senior Lecturer, Department of Chemistry, BMSTU (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Karnyushkin A.I. — Cand. Sc. (Eng.), Assoc. Professor, Department of Chemistry, BMSTU (2-ya Baumanskaya ul. 5, str. 1, Moscow, 105005 Russian Federation).

Please cite this article in English as:

Smirnov A.D., Gurov A.A., Fedorov V.V., et al. Energy and radiation parameters for the electron transition $A^1\Sigma_u^+ - X^1\Sigma_g^+$ of the strontium dimer molecule. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University, Series Natural Sciences*, 2025, no. 2 (119), pp. 93–106 (in Russ.). EDN: LDMBUL