

**РАДИАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕХОДА
 $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ ДВУХАТОМНОГО ЭКСИПЛЕКСА CsXe**

А. Д. Смирнов

УДК 539.194

<https://doi.org/10.47612/0514-7506-2022-89-3-309-314>

Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана,
Москва, Россия; e-mail: adsmir@mail.ru

(Поступила 2 декабря 2021)

Проведены расчеты радиационных параметров — коэффициентов Эйнштейна, сил осциллятора, факторов Франка—Кондона, волновых чисел электронно-колебательных переходов в системе полос $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ двухатомного эксиплекса CsXe ($0 \leq v' \leq 15$, $0 \leq v'' \leq 14$) на основе потенциальных кривых Гульберта—Гиришфельдера. Необходимые для расчета радиационных параметров колебательные энергии и соответствующие волновые функции найдены в результате численного решения радиального уравнения Шрёдингера.

Ключевые слова: двухатомный эксиплекс, потенциальная кривая, коэффициент Эйнштейна, сила осциллятора, фактор Франка—Кондона.

The radiation parameters are calculated: Einstein coefficients, oscillator strengths, Frank-Condon factors, wavenumbers of electronic-vibrational transitions in the system of bands $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ of the molecule CsXe ($0 \leq v' \leq 15$, $0 \leq v'' \leq 14$). The calculations are conducted on the basis of Hulbert–Hirschfelder potential curves. The vibrational energies and corresponding wave functions necessary for the calculation of radiation parameters are found as a result of numerical solution of the radial Schrodinger equation.

Keywords: diatomic exiplex molecule, potential energy curve, Einstein coefficients, oscillator strengths, Franck–Condon factors.

Введение. Знание радиационных параметров двухатомных эксиплексных молекул необходимо для создания лазерных источников непрерывного излучения. Этот вид лазеров имеет высокий квантовый выход и, как следствие, достаточно высокий КПД (до 2—4 %) [1]. Мощность лазерных источников достигает единиц киловатт. Излучение этих лазеров занимает спектральный интервал от 100 до 560 нм и из-за малой длины волны может быть сфокусировано в пятно маленького размера. Применение этих лазеров разнообразно, в частности, они используются для очень точного травления различных материалов, в приложениях, связанных с электронными печатными схемами, в производстве высокотемпературных сверхпроводников. Такие лазеры широко применяются в медицине, в области глазной хирургии при проведении лазерной коррекции зрения и операциях, где необходимо выжигание биологических тканей, а также в исследованиях, где требуется источник мощного УФ-излучения с высоким КПД (например, в фотохимии).

В работах [2—6] рассчитаны радиационные параметры для электронных переходов гомоядерных димеров щелочных металлов и их катионов (Li_2 , Na_2 , K_2 , Rb_2 , Cs_2 , Li_2^+ , Na_2^+ , K_2^+). В [7—14] радиационные параметры рассчитаны для гетероядерных димеров и молекулярных ионов димеров (NaK , $NaRb$, $NaCs$, KRb , $NaLi$, $LiCs$, $RbCs$, KLi , $CsLi^+$, LiK^+ , NaK^+ , $NaCs^+$). Расчеты проводились на основе полуэмпирических потенциальных функций молекул. Сравнение результатов расчета с экспериментальными данными показало эффективность метода расчета. В настоящей работе проведены расчеты радиационных параметров для электронного перехода $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ двухатомного эксиплекса CsXe.

RADIATION PARAMETERS FOR THE ELECTRON TRANSITION $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ OF THE DIATOMIC EXIPLEX CsXe

А. Д. Смирнов (Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russia; e-mail: adsmir@mail.ru)

Кроме замкнутых оболочек в молекуле CsXe имеется один валентный электрон от атома цезия. В [15] с использованием одноэлектронного псевдопотенциального приближения рассчитаны молекулярные постоянные для основного и возбужденных электронных состояний молекулы CsXe.

Построение потенциальных кривых. Для аппроксимации потенциальных кривых основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe, полученных в [15], использована пятипараметрическая потенциальная функция Гульберта—Гиршфельдера [16]:

$$U(R) = D_{\text{dis}}[(1 - \exp(-\rho q))^2 + B \rho^3 q^3 \exp(-2\rho q(1 + C \rho q))], \quad (1)$$

где $\rho = \frac{\omega_e}{2R_e (B_e D_{\text{dis}})^{1/2}}$, \AA^{-1} ; D_{dis} — энергия диссоциации молекулы, см^{-1} ; ω_e — частота колебания молекулы, см^{-1} ; B_e — вращательная постоянная, см^{-1} ; $q = R - R_e$, R_e — равновесное межъядерное расстояние, \AA , R — межъядерное расстояние, \AA ; B , C — параметры потенциальной функции Гульберта—Гиршфельдера.

На рис. 1 приведены потенциальные кривые для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe. Для их построения использованы равновесные межъядерные расстояния, колебательные и вращательные постоянные из работы [15]. На основе построенных потенциальных кривых рассчитаны квантованные значения колебательной энергии E_v , вращательные и центробежные спектроскопические постоянные. Уравнение Шрёдингера имеет вид:

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

где h — постоянная Планка; μ — приведенная масса ядер молекулы. Уравнение (2) не имеет точного аналитического решения для потенциальной функции Гульберта—Гиршфельдера. Приближенное решение волнового уравнения проведено методом Нумерова—Кулея [17]. Численное решение уравнения Шрёдингера выполнено в интервале межъядерного расстояния 2.0—20.0 \AA с шагом интегрирования 0.0002 \AA . В табл. 1 приведены результаты расчета колебательной энергии, вращательных и центробежных молекулярных постоянных для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe (в ней и далее для численных данных в скобках приведен десятичный порядок величин). Колебательная энергия, рассчитанная для уровня с колебательным квантовым числом $v = 14$ основного электронного состояния, составляет 87 % от энергии диссоциации ($D_{\text{dis}}(X) = 108 \text{ см}^{-1}$ [15]). Для возбужденного электронного состояния рассчитанная энергия колебательного уровня $v = 17$ составляет 72 % от энергии диссоциации ($D_{\text{dis}}(A) = 408 \text{ см}^{-1}$ [15]).

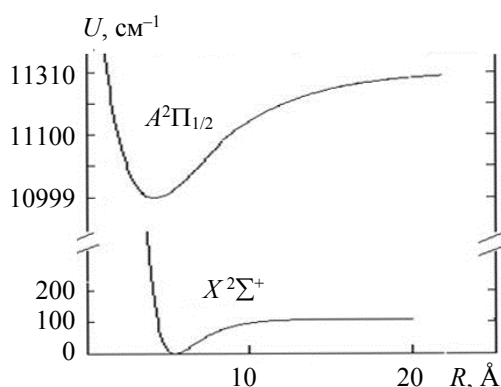


Рис. 1. Потенциальные кривые для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe

Расчет вращательных и центробежных молекулярных постоянных проведен по соотношениям теории возмущений для модели вращающегося осциллятора двухатомной молекулы [18]:

$$B_v = \beta \langle v | R^{-2} | v \rangle, \quad (3)$$

$$D_v = \beta^2 \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)}, \quad (4)$$

$$H_v = \beta^3 \sum_{t \neq v} \sum_{u \neq v} \frac{\langle v | R^{-2} | u \rangle \langle u | R^{-2} | t \rangle \langle t | R^{-2} | v \rangle}{(E_u - E_v)(E_t - E_v)} - \beta^2 B_v \sum_{u \neq v} \frac{\langle u | R^{-2} | v \rangle^2}{(E_u - E_v)^2}, \quad (5)$$

где $\langle u | R^{-2} | v \rangle = \int_0^\infty \psi_u(R) R^{-2} \psi_v(R) dR$ — матричный элемент; $\beta = h/8\pi^2 c \mu$; c — скорость света. Суммирование в формулах (4) и (5) проведено в соответствии со значениями v в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Результаты расчета колебательных энергий E_v , вращательных B_v и центробежных D_v и H_v молекулярных постоянных (см^{-1}) для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe

$A^2\Pi_{1/2}$				
v	E_v	B_v	D_v	H_v
0	14.21	0.01470	1.6401(-8)	-0.727(-13)
1	41.60	0.01442	1.7741(-8)	-0.860(-13)
2	67.61	0.01414	1.9270(-8)	-1.062(-13)
3	92.24	0.01384	2.1017(-8)	-1.312(-13)
4	115.49	0.01354	2.3024(-8)	-1.630(-13)
5	137.36	0.01322	2.5348(-8)	-2.040(-13)
6	157.85	0.01289	2.8083(-8)	-2.578(-13)
7	176.96	0.01255	3.1262(-8)	-3.297(-13)
8	194.69	0.01219	3.5071(-8)	-4.297(-13)
9	211.04	0.01181	3.9655(-8)	-5.787(-13)
10	226.01	0.01141	4.5222(-8)	-8.288(-13)
11	239.60	0.01099	5.2004(-8)	-13.188(-13)
12	251.81	0.01053	6.0189(-8)	-24.147(-13)
13	262.64	0.01005	6.9703(-8)	-50.445(-13)
14	272.09	0.00952	7.9718(-8)	-114.447(-13)
15	280.16	0.00894	8.7533(-8)	-267.745(-13)
16	286.85	0.00829	8.9985(-8)	-626.102(-13)
17	292.16	0.00756	—	—
$X^2\Sigma^+$				
v	E_v	B_v	D_v	H_v
0	3.32	0.0088088	6.2142(-8)	8.441(-13)
1	9.95	0.0088034	6.2714(-8)	8.740(-13)
2	16.56	0.0087985	6.3301(-8)	8.937(-13)
3	23.15	0.0087935	6.3889(-8)	9.153(-13)
4	29.72	0.0087884	6.4480(-8)	9.374(-13)
5	36.27	0.0087833	6.5073(-8)	9.599(-13)
6	42.80	0.0087781	6.5669(-8)	9.828(-13)
7	49.31	0.0087727	6.6266(-8)	10.060(-13)
8	55.80	0.0087673	6.6866(-8)	10.295(-13)
9	62.27	0.0087618	6.7467(-8)	10.534(-13)
10	68.72	0.0087561	6.8071(-8)	10.776(-13)
11	75.15	0.0087504	6.8677(-8)	11.021(-13)
12	81.56	0.0087445	6.9285(-8)	11.270(-13)
13	87.95	0.0087386	6.9895(-8)	11.522(-13)
14	94.32	0.0087325	7.0506(-8)	11.774(-13)

Рассчитанные на основе построенных потенциальных кривых колебательные энергии, вращательные и центробежные постоянные для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe аппроксимированы степенными функциями, параметры которых являются спектроскопическими молекулярными постоянными:

$$E_v = \omega_e(v + 0.5) - \omega_e x_e(v + 0.5)^2 + \dots, \quad (6)$$

$$B_v = B_e - \alpha_e(v + 0.5) + \dots, \quad (7)$$

$$D_v = D_e - \beta_e(v + 0.5) + \dots, \quad (8)$$

$$H_v = H_e - \xi_e(v + 0.5) + \dots \quad (9)$$

В табл. 2 рассчитанные по соотношениям (6)—(9) молекулярные постоянные для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe сравниваются с данными [15]. Рассчитанные на основе потенциальных кривых вращательный параметр α_e и центробежные постоянные D_e , H_e , отсутствующие в работе [15], сопоставлены с рассчитанными значениями при использовании колебательных и вращательных данных [15] по эмпирическим соотношениям Пекериса [19]:

$$\alpha_e = 6B_e^2 \left[(\omega_e x_e / B_e)^{1/2} - 1 \right] / \omega_e, \quad (10)$$

Кратцера [20]:

$$D_e = 4B_e^3 / \omega_e^2, \quad (11)$$

и Кэмбла и др. [21]:

$$H_e = 2D_e(12B_e^2 - \alpha_e\omega_e) / 3\omega_e^2. \quad (12)$$

Т а б л и ц а 2. Колебательные, вращательные и центробежные постоянные (см^{-1}) для основного и возбужденного электронных состояний молекулы CsXe

Постоянные		$A^2\Pi_{1/2}$	$X^2\Sigma^+$
ω_e	I	28.77	6.65
	II	28.77	6.65
$\omega_e x_e$	I	0.69	0.01
	II	0.69	0.01
B_e	I	0.01483	0.00881
	II	0.01475	0.00881
α_e	I	2.6(-4)*	4.6(-6)*
	II	2.6(-4)	4.8(-6)
D_e	I	1.58(-8)**	6.18(-8)**
	II	1.60(-8)	6.18(-8)
H_e	I	-0.64(-13)***	8.3(-13)***
	II	-0.62(-13)	8.4(-13)

Примечание. I — данные [15]; II — расчет.

* Расчет по соотношению (10) с использованием спектроскопических постоянных [15].

** Расчет по соотношению (11) с использованием спектроскопических постоянных [15].

*** Расчет по соотношению (12) с использованием спектроскопических постоянных [15].

Расчет радиационных параметров. К радиационным параметрам относятся коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения $A_{v'v''}$, силы осциллятора $f_{v'v''}$, факторы Франка—Кондона $q_{v'v''}$, волновые числа электронно-колебательных полос $\nu_{v'v''}$, функция зависимости дипольного момента электронного перехода от межъядерного расстояния $\mu_e(R)$. Коэффициент Эйнштейна (с^{-1}) и сила осциллятора для поглощения (безразмерная величина) связаны с функцией $\mu_e(R)$ (ат. ед.) соотношениями [22]:

$$A_{v'v''} = 2.026 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'v''}^3 (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \left[\langle \psi_{v'}(R) | \mu_e(R) | \psi_{v''}(R) \rangle \right]^2, \quad (13)$$

$$f_{v'v''}^{\text{погл}} = 3.0376 \cdot 10^{-6} \frac{\nu_{v'v''} (2 - \delta_{0,\Lambda'+\Lambda''})}{(2 - \delta_{0,\Lambda''})} \left[\langle \psi_{v'}(R) | \mu_e(R) | \psi_{v''}(R) \rangle \right]^2, \quad (14)$$

где Λ — проекция орбитального момента количества движения электронов на межъядерную ось ($\Lambda = 0, 1, 2, \dots$ для состояний $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$); $\delta_{0,\Lambda}$ — символ Кронекера, равный 1, если $\Lambda = 0$, и нулю для других значений Λ ; $\nu_{v'v''}$ — волновое число электронно-колебательного перехода (см^{-1}); $\psi_{v'}(r)$, $\psi_{v''}(r)$ — колебательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний.

Т а б л и ц а 3. Результаты расчета радиационных параметров $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ электронного перехода молекулы CsXe

Параметр	ν'	ν''								
		0	1	2	3	4	5	6	7	8
$q_{\nu'\nu''}$	0	0	0	0.00002	0.00011	0.00051	0.00178	0.00514	0.01253	0.02626
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		0	0	3.37(+2)	2.01(+3)	8.88(+3)	3.11(+4)	8.94(+4)	2.17(+5)	4.54(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		0	0	4.37(-6)	2.61(-5)	1.15(-4)	1.04(-4)	1.16(-3)	2.83(-3)	5.93(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		10891.9	10885.3	10878.6	10872.1	10865.5	10858.9	10852.4	10845.9	10839.4
$q_{\nu'\nu''}$	1	0	0.00003	0.00024	0.00117	0.00420	0.01167	0.02598	0.04726	0.07083
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		0	5.78(+2)	4.31(+3)	2.10(+4)	7.48(+4)	2.07(+5)	4.59(+5)	8.33(+5)	1.24(+6)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		0	5.56(-6)	5.56(-5)	2.71(-4)	9.67(-4)	2.68(-3)	5.95(-3)	1.08(-2)	1.61(-2)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		10919.3	10912.6	10906.0	10899.4	10892.9	10886.3	10879.8	10873.3	10866.8
$q_{\nu'\nu''}$	2	0.00002	0.00027	0.00164	0.00045	0.01823	0.00271	0.03892	0.08199	0.07859
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		3.92(+2)	4.90(+3)	2.58(+4)	1.17(+5)	3.29(+5)	1.17(+5)	7.00(+5)	1.46(+6)	1.40(+6)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		5.01(-6)	6.28(-5)	3.83(-4)	1.50(-3)	4.24(-3)	1.73(-3)	9.02(-3)	1.89(-2)	1.80(-2)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		10945.3	10938.7	10932.0	10925.5	10918.9	10912.3	10905.8	10899.3	10892.8
$q_{\nu'\nu''}$	3	0.00043	0.00150	0.00757	0.02326	0.04966	0.07638	0.08391	0.06123	0.02281
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		2.84(+3)	2.88(+4)	1.40(+5)	4.28(+5)	9.11(+5)	1.39(+6)	1.52(+6)	1.11(+6)	4.10(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		3.61(-5)	3.67(-4)	1.79(-3)	5.48(-3)	1.17(-2)	1.79(-2)	1.96(-2)	1.42(-2)	5.28(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		10969.9	10963.3	10956.2	10950.1	10943.5	10936.9	10930.4	10923.9	10913.4
$q_{\nu'\nu''}$	4	0.00084	0.00675	0.02532	0.05759	0.08576	0.08251	0.04431	0.00608	0.00480
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		1.59(+4)	1.27(+5)	4.75(+5)	1.08(+6)	1.59(+6)	1.52(+6)	8.18(+5)	1.12(+5)	8.79(+4)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		2.01(-4)	1.61(-3)	6.04(-3)	1.37(-2)	2.04(-2)	1.95(-2)	1.04(-2)	1.43(-3)	1.13(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		10993.2	10986.5	10979.9	10973.3	10966.8	10960.2	10953.7	10947.2	10940.7
$q_{\nu'\nu''}$	5	0.00374	0.02266	0.06159	0.09460	0.08265	0.03196	0.00024	0.01894	0.04691
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		7.14(+4)	6.32(+5)	1.17(+6)	4.79(+6)	1.56(+6)	6.02(+5)	4.64(+3)	3.52(+5)	8.70(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		3.03(-4)	5.46(-3)	1.48(-2)	2.27(-2)	1.98(-2)	7.65(-3)	6.90(-5)	4.49(-3)	1.11(-2)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		11015.0	11008.4	11001.8	10995.2	10988.6	10982.1	10975.6	10969.0	10962.6
$q_{\nu'\nu''}$	6	0.01355	0.05833	0.10413	0.08905	0.02580	0.00103	0.03439	0.5058	0.01927
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		2.62(+5)	1.12(+6)	2.00(+6)	1.70(+6)	4.93(+5)	1.92(+4)	6.50(+5)	9.54(+5)	3.63(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		3.30(-3)	1.42(-2)	1.52(-2)	2.15(-2)	6.27(-3)	2.44(-4)	8.24(-3)	1.21(-2)	4.61(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		11035.5	11028.9	11022.9	11015.7	11009.1	11002.5	10996.0	108989.5	10983.0
$q_{\nu'\nu''}$	7	0.04011	0.11095	0.10715	0.02737	0.00382	0.04760	0.04716	0.00592	0.00978
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		7.84(+5)	2.169(+6)	2.08(+6)	5.28(+5)	7.36(+4)	9.13(+5)	9.02(+5)	1.13(+5)	1.85(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		9.83(-3)	2.71(-2)	2.61(-2)	6.65(-3)	9.27(-4)	1.15(-2)	1.14(-2)	1.43(-3)	2.34(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		11054.6	11048.0	11041.0	11034.8	11028.2	11021.7	11015.2	11008.6	11002.1
$q_{\nu'\nu''}$	8	0.09555	0.14256	0.04316	0.00458	0.05863	0.04225	0.00029	0.02638	0.04040
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		1.88(+6)	2.80(+6)	8.44(+5)	9.01(+4)	1.14(+6)	8.18(+5)	5.45(+3)	5.08(+5)	7.74(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		2.36(-2)	3.51(-2)	1.06(-2)	1.13(-3)	1.43(-2)	1.03(-2)	6.86(-5)	6.41(-3)	9.78(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		11072.4	11065.7	11059.1	11052.5	11045.9	11039.4	11032.9	11026.4	11019.9
$q_{\nu'\nu''}$	9	0.17850	0.09743	0.00103	0.06866	0.04134	0.00106	0.04242	0.03137	0
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		3.56(+6)	1.93(+6)	2.05(+4)	1.35(+6)	8.11(+5)	2.03(+4)	8.27(+5)	6.09(+5)	0
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		4.44(-2)	2.41(-2)	2.56(-4)	1.69(-2)	1.02(-2)	2.61(-4)	1.04(-2)	7.66(-3)	0
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		110889.2	11082.1	11075.5	11068.9	11062.3	11055.7	11049.2	11042.7	11036.2
$q_{\nu'\nu''}$	10	0.25039	0.00991	0.07396	0.05167	0.00409	0.05547	0.01876	0.00724	0.03944
$A_{\nu'\nu''}, \text{с}^{-1}$		5.04(+6)	1.99(+5)	1.47(+6)	1.02(+6)	8.12(+4)	1.09(+6)	3.68(+5)	1.42(+5)	7.70(+5)
$f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$		6.27(-2)	2.47(-3)	1.84(-2)	1.28(-2)	1.01(-3)	1.37(-2)	4.61(-3)	1.78(-3)	9.70(-3)
$\nu_{\nu'\nu''}, \text{см}^{-1}$		11103.7	11097.1	11090.4	11083.9	11077.3	11070.7	11064.2	11057.7	11051.2

Примечание. Если $q_{\nu'\nu''} < 10^{-5}$, значения $q_{\nu'\nu''}$, $A_{\nu'\nu''}$, $f_{\nu'\nu''}^{\text{погл}}$ положены равными нулю.

Факторы Франка—Кондона характеризуют относительное распределение интенсивностей электронно-колебательных полос в спектре молекулы и представляют собой квадраты интеграла перекрывания колебательных волновых функций комбинирующих электронных состояний:

$$q_{v'v''} = \left| \int_0^{\infty} \Psi_{v'}(r) \Psi_{v''}(r) dr \right|^2. \quad (15)$$

Волновые числа колебательных полос $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ электронного перехода молекулы CsXe рассчитаны по выражению

$$v_{v'v''} = T_e' + E'(v) - E''(v), \quad (16)$$

где T_e' — электронная энергия возбужденного состояния ($T_e' = 10881 \text{ см}^{-1}$ [15]); $E'(v)$, $E''(v)$ — колебательные энергии молекулы для возбужденного и основного электронных состояний.

При расчетах $A_{v'v''}$ и $f_{v'v''}$ использована зависимость дипольного момента от межъядерного расстояния $\mu_e(R)$ электронного перехода $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ молекулы CsXe, приведенная в [15]. В табл. 3 представлены некоторые рассчитанные радиационные параметры ($0 \leq v' \leq 15$, $0 \leq v'' \leq 14$).

Заключение. Рассчитаны радиационные параметры для электронного перехода $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ молекулы CsXe. Полученные данные об относительных интенсивностях спонтанного излучения и волновых числах для электронно-колебательных полос перехода $A^2\Pi_{1/2}-X^2\Sigma^+$ двухатомной эксиплексной молекулы CsXe могут быть использованы при создании лазера, а также для пополнения баз данных по радиационным параметрам двухатомных молекул.

- [1] **О. Звелто.** Принципы лазеров, Москва, Мир (1990)
- [2] **А. Д. Смирнов.** Опт. и спектр., **113**, № 4 (2012) 387—394 [**A. D. Smirnov.** Opt. Spectrosc., **113**, N 4 (2012) 345—352]
- [3] **А. Д. Смирнов.** Опт. и спектр., **109**, № 5 (2010) 739—745 [**A. D. Smirnov.** Opt. Spectrosc., **109**, N 5 (2010) 680—686]
- [4] **А. Д. Смирнов.** Вест. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. естеств. науки, № 2 (2013) 67—85
- [5] **А. Д. Смирнов.** Журн. прикл. спектр., **77**, № 5 (2010) 661—667 [**A. D. Smirnov.** J. Appl. Spectr., **77**, № 5 (2010) 609—614]
- [6] **А. Д. Смирнов.** Инженерный журнал: наука и инновации, № 6 (2013)
- [7] **А. Д. Смирнов.** Вест. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. естеств. науки, № 4 (2015) 45—56
- [8] **А. Д. Смирнов.** Опт. и спектр., **117**, № 3 (2014) 373—380 [**A. D. Smirnov.** Opt. Spectrosc., **117**, N 3 (2014) 358—365]
- [9] **А. Д. Смирнов.** Вест. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. естеств. науки, № 6 (2015) 52—62
- [10] **В. В. Федоров, А. Д. Смирнов.** Материалы науч.-тех. конф. “Современные тенденции развития науки и технологий”, 30 сентября 2015 г., Белгород, АПНИ (2015) 35—39
- [11] **А. Д. Смирнов.** Опт. и спектр., **121**, № 6 (2016) 839—847 [**A. D. Smirnov.** Opt. Spectrosc., **121**, N 6 (2016) 783—789]
- [12] **А. Д. Смирнов.** Вест. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. естеств. науки, № 1 (2017) 112—123
- [13] **А. Д. Смирнов.** Вест. МГТУ им. Н. Э. Баумана. Сер. естеств. науки, № 5 (2017) 67—77
- [14] **А. Д. Смирнов.** Журн. прикл. спектр., **86**, № 1 (2019) 33—41 [**A. D. Smirnov.** J. Appl. Spectr., **86**, № 1 (2019) 27—34]
- [15] **J. Dhiflaoi, H. Berriche, M. C. Heaven.** J. Phys. B, **49** (2016) 205101
- [16] **H. M. Hulbert, J. O. Hirschfelder.** J. Chem. Phys., **9** (1941) 61—69
- [17] **J. W. Cooley.** Math. Comp., **15** (1961) 363—374
- [18] **Л. Цюлик.** Квантовая химия. Т 1. Основы и общие методы, пер. с нем., Москва, Мир (1976)
- [19] **C. I. Pekeris.** Phys. Rev., **45** (1934) 98—103
- [20] **A. Kratzer.** Z. Phys., **3** (1920) 289—296
- [21] **E. C. Kemble, R. T. Birge, W. F. Colby.** Molecular Spectra in Gases, National Research Council, Washington, D. C. (1930)
- [22] **R. R. Laher, M. A. Khakoo, A. Antic-Jovanovic.** J. Mol. Spectr., **248** (2008) 111—121