

МОДЕЛИРОВАНИЕ ШИРОКОПОЛОСНОГО КONTИНУУМА ГАЗОРАЗРЯДНОЙ ПЛАЗМЫ СМЕСИ КРИПТОН+КСЕНОН

© 2005 г. А. В. Логинов, доктор физ.-мат. наук

ВНЦ “Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова”, Санкт-Петербург

E-mail: loginov@soi.spb.su

С помощью полуэмпирической процедуры расчета изучен широкополосный континуум, наблюдаемый в эмиссионных ВУФ спектрах газоразрядной плазмы в смеси Kr + Xe. В предположении, что упомянутый континуум обусловлен связанно-свободными переходами $\nu, 0^+(^3P_1) \rightarrow \epsilon, 0^+(^1S_0)$ в молекулах $KrXe^*$ и Xe_2 , получено распределение заселенности по колебательным уровням состояний $0^+(^3P_1)$ обеих молекул и определена их колебательная температура при различных способах возбуждения спектра. С целью получить лучшее согласие расчетного и экспериментального спектров предложено модифицировать отталкивательную ветвь потенциальной кривой $0^+(^1S_0)$ молекулы $KrXe^*$.

Коды OCIS: 300.2140, 300.6210, 350.5400.

Поступила в редакцию 19.05.2005.

1. Введение

Спектры газоразрядной плазмы инертных газов всегда представляли собой объект для научных исследований. Основной прикладной интерес этих исследований сосредоточен на разработке источников излучения – как широкополосных, так и лазерных – в вакуумной ультрафиолетовой области. Попытки интерпретировать экспериментальные спектры как эмиссионные спектры двухатомных молекул инертных газов стимулировали появление многочисленных работ, посвященных расчету межъядерных потенциалов упомянутых молекул. Первоначально эти работы концентрировались на гомоядерных димерах, для которых были получены обширные результаты по потенциальным кривым. В последние годы очередь дошла и до смешанных (гетероядерных) молекул инертных газов. К настоящему моменту в литературе имеются межъядерные потенциалы гетероядерных молекул, рассчитанные для различных комбинаций инертных газов, образующих эти молекулы (см., например, [1] и ссылки там). Наличие потенциальных кривых в свою очередь позволяет проводить расчеты, предсказывающие диапазон длин волн и форму спектра той или иной молекулы. С другой стороны, из сравнения вычисленного и экспериментального спектров можно получить подсказку по поводу корректировки использованных потенциалов.

Что касается пары Kr + Xe, то в работах [1–3] спектры газоразрядной плазмы смеси инертных газов криптона и ксенона изучались в широком диапазоне экспериментальных условий. Исследовались разряд в капилляре [1, 2], барьерный разряд [3], варьировались давления основного (криптон) и примесного (ксенон) газов, регулировалась температура разряда путем охлаждения стенок разрядного капилляра. Основным результатом этих работ состоит в том,

что вид спектров определяется излучением молекул $KrXe^*$ и Xe_2 . При этом излучение гомоядерной молекулы Xe_2 представляет собой хорошо известный континуум [4, 5], интерпретируемый как результат связанно-свободных переходов с колебательных уровней первых двух возбужденных электронных состояний $0^+(^3P_1)$ и $1(^3P_2)$ молекулы ксенона на отталкивательную ветвь ее основного состояния $0^+(^1S_0)$. Излучение смешанной молекулы $KrXe^*$ при общем давлении смеси 10–100 гПа концентрируется в узком спектральном интервале в области резонансной линии атома Xe (~148 нм), а при повышении давления до 200–400 гПа в дополнение к указанной узкой полосе в спектре появляется сравнительно широкий континуум в области 150–160 нм.

С прикладной точки зрения для авторов упомянутых выше экспериментальных работ [1–3] основной интерес представляло узкополосное излучение молекулы $KrXe^*$. Этот интерес связан с открывающейся возможностью “закачать” энергию, вкладываемую в разряд, в излучение в узком спектральном интервале и получить генерацию. Вариант детальной интерпретации узкополосного излучения представлен в работе [6].

Целью настоящей работы является изучение широкого длинноволнового континуума в спектре молекулы $KrXe^*$. Стимулом для ее выполнения, с одной стороны, послужило наличие экспериментальных спектров [1–3], полученных для различных видов разряда и при различных параметрах разряда. Подчеркнем при этом, что, несмотря на разнообразие условий эксперимента, структура спектра оставалась неизменной. С другой стороны, совсем недавно появились потенциальные кривые [7] для электронных состояний молекулы $KrXe^*$, предположительно участвующих в формировании спектра. Поэтому для моделирования континуума молекулы $KrXe^*$ можно применить методику, разработанную нами ранее при интерпре-

тенциалом $0^+(^3P_1)$, показало, что первые восемь колебательных состояний ($v = 0-7$) локализованы во внутренней яме, разность энергий $E_{v=7} - E_{v=6} \approx 36 \text{ см}^{-1}$, $E_{v=1} - E_{v=0} \approx 63 \text{ см}^{-1}$. Состояния при $v = 8-10$, $12-15$ локализованы во внешней яме, разность энергий $E_{v=9} - E_{v=8} \approx 5,5 \text{ см}^{-1}$. Таким образом, величина колебательного кванта внутренней ямы примерно на порядок превосходит таковую для внешней ямы.

Учитывая соотношение “внутреннего” и “внешнего” колебательных квантов, можно предположить, что при высоких общих давлениях в смеси $\text{Kr} + \text{Xe}$ столкновительная релаксация идет по колебательным уровням как внешней, так и внутренней ям. Соответственно излучение молекулы KrXe^* может происходить со дна как внешней ($\lambda \approx 148 \text{ нм}$), так и внутренней ($\lambda \approx 153 \text{ нм}$) ям. При понижении давления релаксация идет преимущественно по тому каналу, где колебательный квант меньше, т. е. по колебательным уровням внешней ямы. Поэтому при понижении давления излучение молекулы KrXe^* идет со дна внешней ямы и локализуется соответственно в области $\sim 148 \text{ нм}$. Исходя из рис. 1, можно предположить, что переходы из внутренней ямы кривой $0^+(^3P_1)$ совершаются на отталкивательную ветвь основного состояния $0^+(^1S_0)$, образуя континуум в области $\sim 153 \text{ нм}$. В то же время переходы из внешней ямы кривой $0^+(^3P_1)$ попадают на высокие связанные колебательные уровни состояния $0^+(^1S_0)$, образуя квазинепрерывную узкую полосу в области $\sim 148 \text{ нм}$.

Примерно то же самое можно было бы сказать и о переходах из состояния $1(^3P_2)$, поскольку внутренний и внешний минимумы соответствующей потенциальной кривой расположены примерно при тех же значениях межъядерного расстояния, что и минимумы кривой $0^+(^3P_1)$ (рис. 1). Однако решение колебательного уравнения с потенциалом $1(^3P_2)$, выполненное в настоящей работе для колебательных уровней с $v = 0-5$, показало, что волновые функции этих уровней локализованы во внешней яме. Следовательно, можно полагать, что переходы из состояния $1(^3P_2)$ должны происходить со дна внешней ямы и их вкладом в широкополосный континуум можно пренебречь.

Что касается состояния $1(^3P_1)$, потенциальная кривая для которого на рис. 1 не приведена, то достаточно будет сказать, что согласно [7] это кривая с одним минимумом при $R = 5,896 \text{ Å}$ и глубиной 45 см^{-1} . Межъядерное расстояние, при котором этот потенциал становится отталкивательным, равно $4,858 \text{ Å}$. Поэтому считаем, что переходы из этого состояния вносят заметный вклад только в узкополосное излучение в области $\sim 148 \text{ нм}$.

Таким образом, для интерпретации широкополосного континуума в спектре молекулы KrXe^* надо рассмотреть связанно-свободные переходы

$$v, 0^+(^3P_1) \rightarrow \epsilon, 0^+(^1S_0),$$

происходящие с участием нижних колебательных состояний, локализованных во внутренней яме кривой $0^+(^3P_1)$. Напомним, что это состояния с $v = 0-7$. Забегая вперед, отметим, что согласно настоящим расчетам заметные вклады дают только состояния с $v = 0, 1$.

3. Моделирование экспериментального спектра

Для большей осмысленности дальнейшего изложения кратко напомним методику работ [8, 9]. Она основана на численном расчете плотности распределения энергии $I_v(\lambda)$, излученной при связанно-свободном переходе $v \rightarrow \epsilon$ с колебательного уровня v связанного электронного состояния в отталкивательное состояние. Получив набор функций $I_v(\lambda)$ для разных значений колебательного квантового числа v , попытаемся аппроксимировать наблюдаемое распределение интенсивности $I(\lambda)$, представив функцию $I(\lambda)$ в виде разложения

$$I(\lambda) = \sum_v C_v I_v(\lambda). \quad (1)$$

Здесь весовые коэффициенты C_v ищутся по методу наименьших квадратов (МНК) с помощью программы BARSIC [10] и интерпретируются нами как относительные заселенности колебательных уровней v .

Зависимость плотности распределения энергии излучения от длины волны определяется с точностью до константы следующим выражением [11]:

$$I_v(\lambda) = \epsilon^{-1/2} \lambda^{-6} |\langle \psi_v(R) | \mu(R) | \psi_\epsilon(R) \rangle|^2. \quad (2)$$

Здесь λ – длина волны связанно-свободного перехода $v \rightarrow \epsilon$, $\psi_v(R)$ – колебательная волновая функция уровня v верхнего связанного состояния $0^+(^3P_1)$, $\mu(R)$ – функция дипольного момента перехода $0^+(^3P_1) \rightarrow 0^+(^1S_0)$ [7], $\psi_\epsilon(R)$ – колебательная волновая функция нижнего отталкивательного состояния $0^+(^1S_0)$, соответствующая положительному значению энергии ϵ ; амплитуда функции $\psi_\epsilon(R)$ нормирована при больших значениях R на величину $\pi^{-1/2} \epsilon^{-1/4}$, R – межъядерное расстояние.

Волновые функции были найдены численным интегрированием колебательного уравнения Шредингера

$$d^2\psi/dR^2 + (E - U(R))\psi = 0 \quad (3)$$

по методу Нумерова в модификации [12]. Межъядерный потенциал $U(R)$ возбужденного состояния $0^+(^3P_1)$ был взят из работы [7]. Для основного состояния $0^+(^1S_0)$ были рассмотрены два варианта потенциала – из работы [7], а также результат корректировки по рецепту разд. 6 (см. ниже).

Если предположить, что распределение заселенности имеет равновесный характер, т. е.

$$C_\nu/C_0 = \exp(-\Delta E_\nu/kT), \quad (4)$$

где под ΔE_ν понимается энергетический интервал между колебательными уровнями ν и нулевым, то по величинам C_ν и C_0 можно оценить колебательную температуру T . Напомним, что величины E_ν получаем при решении колебательного уравнения Шредингера (3).

Таким образом, вышеизложенный подход предполагает, что экспериментальный спектр можно с хорошей точностью аппроксимировать переходами только с одного из возбужденных состояний. Соображения, по которым это приближение принимается в данной работе, представлены в предыдущем разделе.

4. Вклад молекулы Xe_2

Изложенную выше процедуру можно было бы реализовать с привлечением функций $I_\nu(\lambda)$, полученных лишь для молекулы KrXe^* , если бы в наблюдаемые спектры [1–3], которые следует рассматривать в качестве функции $I(\lambda)$ в разложении (1), не давало вклад излучение молекулы Xe_2 . Поскольку разделить вклады молекул KrXe^* и Xe_2 в наблюдаемые спектры *a priori* не представляется возможным, постольку было решено добавить в разложение (1) функции $I_\nu(\lambda)$, полученные нами ранее [8, 9] при моделировании спектра электро-разрядной плазмы ксенона как проявления связан-

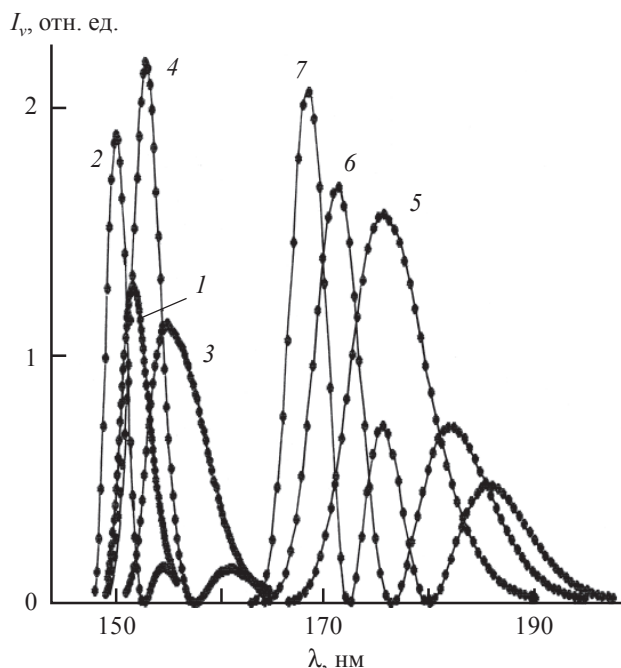


Рис. 2. Зависимости $I_\nu(\lambda)$ для молекул KrXe^* (1–4) и Xe_2 (5–7). $\nu = 0$ (1, 3, 5), 1 (2, 4, 6), 2 (7). Кривые 1, 2 получены с потенциалом $0^+(^1S_0)$ [7], 3, 4 – с потенциалом $0^+(^1S_0)_{\text{cor}}$, 5–7 взяты из работы [8].

но-свободных переходов ν , $0^+(^3P_1) \rightarrow \epsilon$, $0^+(^1S_0)$ в молекуле Xe_2 . Эти функции были найдены с помощью метода, описанного в предыдущем разделе, с потенциалом $0^+(^3P_1)$ из работы [13] и потенциалом $0^+(^1S_0)$ из работы [14], функция дипольного момента при этом аппроксимировалась константой. Функции $I_\nu(\lambda)$ молекул KrXe^* и Xe_2 приведены на рис. 2.

Очевидно, что функции $I_\nu(\lambda)$, описывающие вклад различных молекул в наблюдаемый спектр, должны входить в разложение (1) с весовыми коэффициентами, учитывающими концентрации этих молекул в плазме и заселенности соответствующих состояний. Однако в данном случае ситуация упрощается тем, что функции $I_\nu(\lambda)$ молекул KrXe^* и Xe_2 располагаются на шкале длин волн, не перекрываясь между собой (рис. 2).

5. Результаты моделирования с *ab initio*-потенциалами $0^+(^3P_1)$, $0^+(^1S_0)$

В качестве экспериментальных кривых $I(\lambda)$ были взяты спектр барьерного разряда [3] в смеси $\text{Kr} + \text{Xe}$ (общее давление смеси 400 гПа, примесь Xe 1%) и спектр капиллярного разряда [1, 2], полученный при тех же параметрах смеси. Коэффициенты C_ν в разложении (1) определялись по МНК по программе [10]. Их значения (а также дисперсии ΔC_ν), нормированные на величины C_0 для KrXe^* и Xe_2 соответственно, приведены в таблице. Напомним (рис. 2), что наборы кривых $I_\nu(\lambda)$, полученные для KrXe^* и Xe_2 , не перекрываются на шкале длин волн, поэтому соответствующие наборы коэффициентов C_ν можно рассматривать независимо. Полагалось *a priori*, что коэффициенты C_ν должны монотонно убывать с ростом ν , поэтому в процессе подгонки число базисных функций $I_\nu(\lambda)$ в формуле (1) увеличивалось до тех пор, пока значения соответствующих коэффициентов C_ν удовлетворяли этому требованию. В результате (см. таблицу) в аппроксимирующее выражение (1) вошли две функции $I_\nu(\lambda)$ ($\nu = 0, 1$), полученные для KrXe^* , и шесть функций $I_\nu(\lambda)$ ($\nu = 0–5$), полученные для Xe_2 . В этой же таблице для каждого из заселенных уровней приведены значения энергии E_ν и значения колебательной температуры, рассчитанные по формуле (4). Напомним, что величины E_ν найдены при решении колебательного уравнения (3) с межъядерными потенциалами $0^+(^3P_1)$ для KrXe^* [7] и Xe_2 [13].

Судя по дисперсиям, коэффициенты C_ν определены вполне приемлемо. Их значения убывают с ростом колебательного числа ν , а на неравенство $C_5 > C_4$ следует смотреть как на индикатор для обрыва суммирования в разложении (1). Определенным критерием разумности представленных резуль-

Заселенность колебательных состояний ν , $0^+(^3P_1)$ молекул KrXe^* , Xe_2 и колебательная температура в барьерном разряде и в разряде постоянного тока в капилляре

Молекула	ν	$E_\nu, \text{см}^{-1}$	Барьерный разряд				Капиллярный разряд			
			I		II		I		II	
			$C_\nu \pm \Delta C_\nu$		$C_\nu \pm \Delta C_\nu$	T, K	$C_\nu \pm \Delta C_\nu$	T, K	$C_\nu \pm \Delta C_\nu$	T, K
KrXe^*	0	−395,98	$1,00 \pm 0,40$		$1,00 \pm 0,16$		$1,00 \pm 0,29$		$1,00 \pm 0,14$	
	1	−333,25	$0,30 \pm 0,33$	76	$0,20 \pm 0,12$	56	$0,40 \pm 0,24$	98	$0,25 \pm 0,11$	65
Xe_2	0	−5114,2	$1,00 \pm 0,32$		$1,00 \pm 0,21$		$1,00 \pm 0,21$		$1,00 \pm 0,15$	
	1	−5024,9	$0,66 \pm 0,39$	300	$0,67 \pm 0,26$	321	$0,64 \pm 0,26$	287	$0,64 \pm 0,19$	288
	2	−4945,6	$0,45 \pm 0,37$	308	$0,46 \pm 0,26$	312	$0,43 \pm 0,26$	283	$0,43 \pm 0,19$	287
	3	−4865,1	$0,42 \pm 0,37$	416	$0,43 \pm 0,26$	425	$0,32 \pm 0,26$	318	$0,34 \pm 0,19$	332
	4	−4786,1	$0,32 \pm 0,38$	411	$0,34 \pm 0,27$	438	$0,27 \pm 0,25$	357	$0,27 \pm 0,19$	360
	5	−4706,0	$0,59 \pm 0,34$		$0,53 \pm 0,23$		$0,48 \pm 0,23$		$0,41 \pm 0,17$	

Примечание: I – данные получены с потенциалом $0^+(^1S_0)$ из работы [7], II – данные получены с потенциалом $0^+(^1S_0)_{\text{cor}}$.

татов можно считать сравнительно небольшое изменение колебательной температуры T по мере увеличения ν , в связи с чем распределение заселенности по колебательным уровням можно считать близким к равновесному. Наконец, сама близость численных данных, полученных при моделировании экспериментальных спектров, наблюдаемых при совершенно различных условиях, свидетельствует в пользу предложенного подхода.

Графическое сравнение модельных (сплошные линии) и экспериментальных (точки) спектров представлено на рис. 3. Максимумы в области 157 и 173 нм на экспериментальных спектрах принято связывать соответственно с широкополосным континуумом молекулы KrXe^* и вторым континуумом молекулы Xe_2 . Легко видеть, что континуум молекулы Xe_2 , особенно его длинноволновое крыло, удалось аппроксимировать вполне удовлетворительно. Аппроксимация континуума молекулы KrXe^* оставляет желать лучшего. Наличие провала в расчетном спектре только отчасти можно приписать неучету вклада коротковолнового крыла (так называемого “первого континуума” [4, 5]) континуума молекулы Xe_2 , которое нельзя аппроксимировать функциями $I_\nu(\lambda)$, приведенными на рис. 2 [8, 9]. В основном провал обусловлен тем, что функции $I_\nu(\lambda)$ для KrXe^* (кривые 1, 2 на рис. 2) заметно (на 5–6 нм) сдвинуты в коротковолновую область. Кроме того, видно, что ширина модельного континуума недостаточна для хорошей аппроксимации экспериментального спектра. Ширина модельного континуума составляет 5–6 нм, а экспериментальная ширина – 10–12 нм. Нетрудно понять, что уширить расчетный континуум и одновременно сдвинуть его в длинноволновую область можно, например, увеличив крутизну отталкивательной ветви потенциала $0^+(^1S_0)$. Этот вариант более детально рассмотрен в следующем разделе.

6. Корректировка потенциала $0^+(^1S_0)$

Длина волны λ связанно-свободного перехода $\nu \rightarrow \epsilon$ определяется выражением

$$\lambda = 1/(E_\nu - \epsilon), \quad (5)$$

где E_ν – энергия колебательного уровня ν возбужденного связанного электронного состояния $0^+(^3P_1)$, ϵ – положительное значение энергии, соответствующее отталкивательной ветви основного состояния $0^+(^1S_0)$. При этом предполагается, что как E_ν , так и ϵ отсчитываются от уровня $\text{Kr}(4p^6\ ^1S_0) + \text{Xe}(5p^6\ ^1S_0)$. Будем считать, что длинноволновая и коротковолновая границы спектра $I_\nu(\lambda)$ определяются соответственно теми значениями ϵ , которые отвечают так называемым переходам с левой (R_L) и правой (R_R) поворотных точек уровня ν . То есть

$$\lambda_{\max} = 1/[E_\nu - \phi(R_L)], \quad \lambda_{\min} = 1/[E_\nu - \phi(R_R)],$$

где $\phi(R)$ – функция, описывающая зависимость отталкивательной ветви потенциала $0^+(^1S_0)$ от межъядерного расстояния R (кривая 1 на рис. 1б). Из соотношения (5) получаем, что изменение длины волны на величину $\Delta\lambda$ соответствует изменению энергии ϵ на величину $\Delta\epsilon$ такую, что

$$\Delta\epsilon = \Delta\lambda(E_\nu - \epsilon)^2. \quad (6)$$

Из рис. 3 следует, что для улучшения аппроксимации расчетный спектр молекулы KrXe^* надо сдвинуть в длинноволновую область на 5–6 нм и одновременно уширить его до 10–12 нм. Чтобы добиться этого, следует сдвинуть $\lambda_{\min}$ на $\Delta\lambda_{\min} \sim 3$ нм, а $\lambda_{\max}$ – на $\Delta\lambda_{\max} \sim 8$ нм. Поскольку (см. коэффициенты C_ν в таблице) модельный спектр определяется в основном переходом $0 \rightarrow \epsilon$ (т. е. функцией $I_0(\lambda)$), то в качестве R_L , R_R надо взять левую и правую поворотные точки уровня $\nu = 0$ состояния $0^+(^3P_1)$ [7]. Таким образом, для расчета сдвига потенциальной кривой $\phi(R)$ в точках

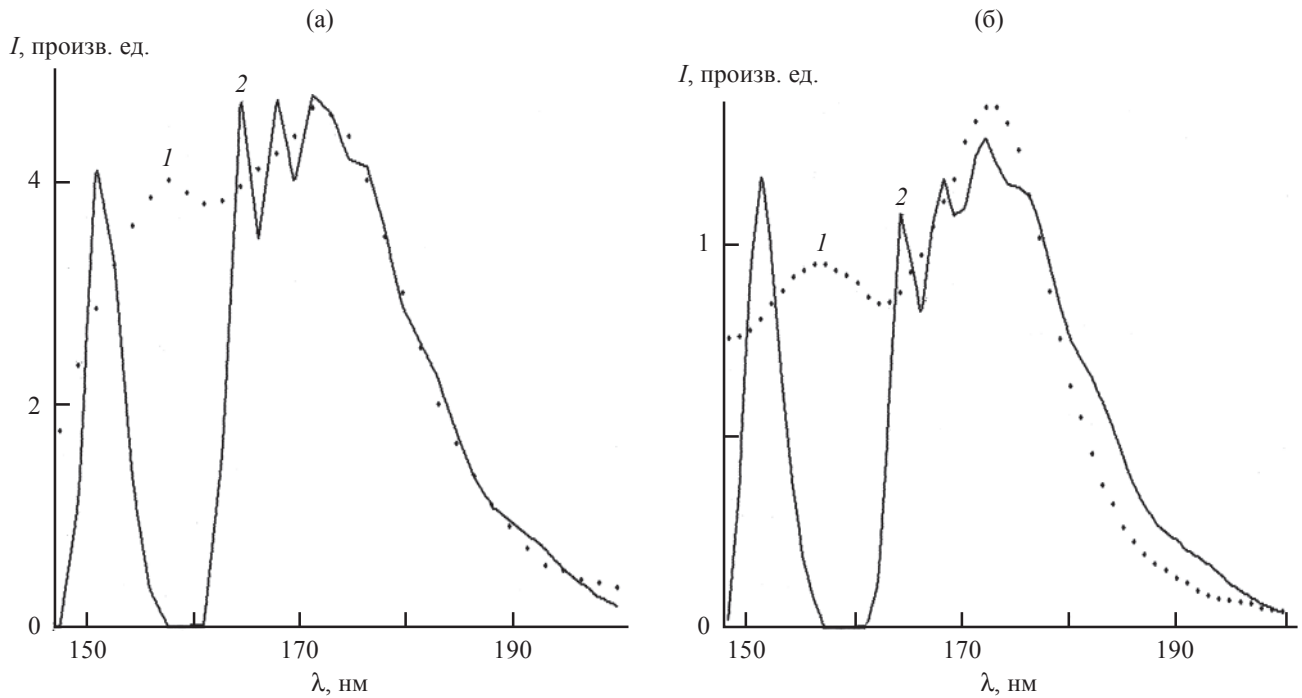


Рис. 3. Экспериментальные (точки) и модельные (сплошные линии) спектры электроразрядной плазмы смеси Kr + Xe в барьерном (а) и капиллярном (б) разрядах. Модельные спектры получены с потенциалами $0^+(^3P_1)$, $0^+(^1S_0)$ из работы [7].

$R = R_L$, R_R по формуле (6) надо взять следующие значения: $R_L = 3,044 \text{ \AA}$, $R_R = 3,284 \text{ \AA}$, $E_{v=0} = 67651 \text{ см}^{-1}$, $\varphi(R_L) = 3915 \text{ см}^{-1}$, $\varphi(R_R) = 1490 \text{ см}^{-1}$, $\Delta\lambda_{\min} = 3 \text{ нм}$, $\Delta\lambda_{\max} = 8 \text{ нм}$. Тогда получим, что кривую $\varphi(R)$ следует “приподнять” в точках $R = 3,044$ и $3,284 \text{ \AA}$ на величину $\Delta\epsilon$, равную соответственно 3230 и 1300 см^{-1} . Результат этого “приподнимания” изображен на рис. 1б (кривая 2). Подчеркнем, что вышеуказанные соображения касаются только лишь отталкивательной ветви (положительные значения энергии) потенциала $0^+(^1S_0)$ [7]. Отрицательная ветвь никакой корректировке не подвергалась.

7. Результат моделирования спектра с потенциалом $0^+(^1S_0)_{\text{cor}}$

На рис. 2 (кривые 3, 4) приведены функции $I_v(\lambda)$ для $v = 0, 1$, рассчитанные по формуле (2) с потенциалом $0^+(^1S_0)_{\text{cor}}$. Видно, что они уширены и сдвинуты в длинноволновую область по сравнению с теми же функциями (кривые 1, 2), полученными с потенциалом $0^+(^1S_0)$ [7]. Результаты подгонки экспериментальных спектров со скорректированными функциями $I_v(\lambda)$ изображены на рис. 4, а полученные при этом коэффициенты C_v и их дисперсии при-

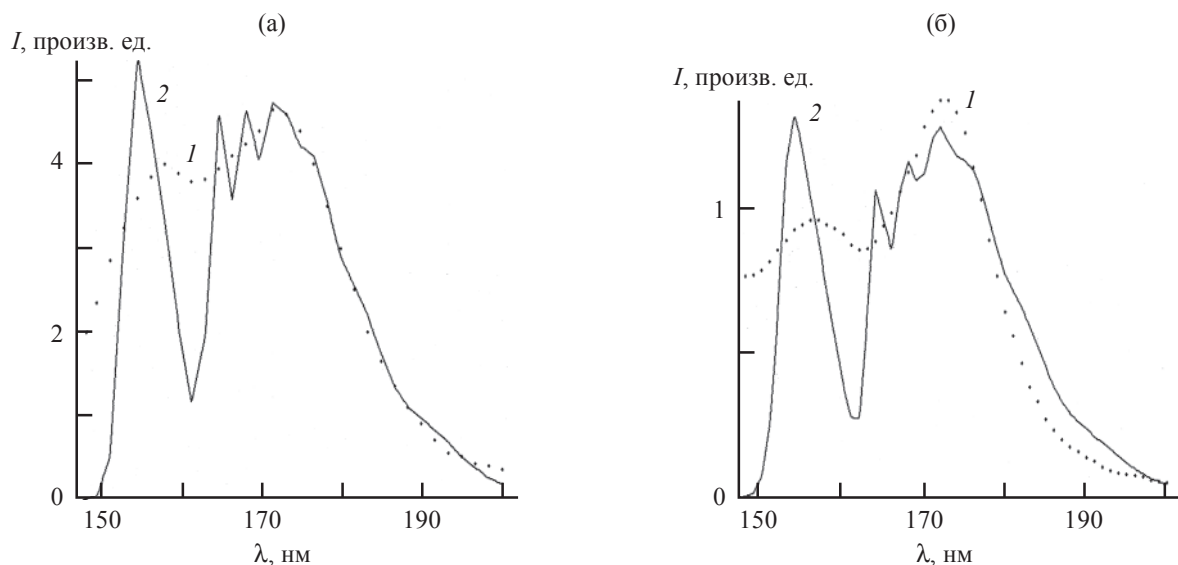


Рис. 4. Экспериментальные (1) и модельные (2) спектры электроразрядной плазмы смеси Kr + Xe в барьерном (а) и капиллярном (б) разрядах. Модельные спектры получены с потенциалом $0^+(^3P_1)$ из работы [7] и потенциалом $0^+(^1S_0)_{\text{cor}}$.

ведены в таблице. Сравнивая эти результаты с данными из разд. 5, видим, что корректировка потенциала $0^+(^1S_0)$ [7] привела к улучшению согласия модельных спектров с экспериментальными и уменьшению величин ΔC_v . Важно отметить, что число заселенных уровней при этом не изменилось, но колебательная температура для $KrXe^*$ уменьшилась.

Таким образом, модификация потенциала основного состояния молекулы $KrXe^*$, предложенная в разд. 6, изменила расчетный спектр в нужную сторону. Вместе с тем, процедура модификации носит исключительно эмпирический характер и вопрос об оптимальных потенциальных кривых молекулы $KrXe^*$ (как для основного, так и для возбужденных состояний) остается открытым.

8. Заключение

Итак, в работе выполнена аппроксимация экспериментальных спектров газоразрядной плазмы в смеси $Kr + Xe$. Получено распределение заселенности по колебательным уровням возбужденного электронного состояния $0^+(^3P_1)$ молекул $KrXe^*$ и Xe_2 .

Использование межъядерных потенциалов $0^+(^3P_1)$ [13] и $0^+(^1S_0)$ [14] молекулы Xe_2 позволило при этом получить удовлетворительную аппроксимацию вклада излучения молекулы Xe_2 в экспериментальный спектр. В то же время континуум, рассчитанный на основе потенциалов $0^+(^3P_1)$, $0^+(^1S_0)$ [7] молекулы $KrXe^*$, оказался сдвинутым на 5–7 нм в коротковолновую область по сравнению с экспериментальным спектром, а ширина расчетного спектра оказалась меньше экспериментальной примерно вдвое. Предложенная модификация отталкивательной ветви потенциала $0^+(^1S_0)$ [7] привела к

улучшению согласия между расчетными и экспериментальными спектрами.

Наличие на кривой $0^+(^3P_1)$ [7] двух потенциальных ям с сильно различающимися колебательными квантами позволило объяснить зависимость структуры наблюдаемого спектра от общего давления смеси.

ЛИТЕРАТУРА

1. Krylov B., Gerasimov G., Morozov A., Arnesen A., Hallin R., Heijkenskjold F. // Eur. Phys. J. D. 2000. V. 8. P. 227.
2. Герасимов Г.Н., Халлин Р., Крылов Б.Е. // Опт. и спектр. 2000. Т. 88. № 2. С. 210.
3. Герасимов Г.Н., Волкова Г.А., Халлин Р., Зверева Г.Н., Хайкеншельд Ф. // Опт. и спектр. 2000. Т. 88. № 6. С. 897.
4. Mulliken R.S. // Phys. Rev. 1964. V. 136. P. 962.
5. Mulliken R.S. // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 5170.
6. Morozov A., Krylov B., Gerasimov G., Hallin R., Arnesen A. // Eur. Phys. J. D. 2000. V. 11. P. 379.
7. Jansik B., Schimmelpfennig B., Agren H. // Phys. Rev. A. 2003. V. 67. P. 042501.
8. Логинов А.В. // Опт. и спектр. 1997. Т. 82. № 4. С. 547.
9. Loginov A.V. // Z. Phys. D. 1997. Bd. 41. S. 245.
10. Монахов В.В., Кожедуб А.В. // Тез. докл. конф. "Теоретическая, прикладная и вычислительная небесная механика". Санкт-Петербург. 1993. С. 68.
11. Coolidge A.S., James H.M., Present R.D. // J. Chem. Phys. 1936. V. 4. № 3. P. 193.
12. Hajj F.Y. // J. Phys. B. 1980. V. 13. № 23. P. 4521.
13. Vallee O., Tran Minh, Chapelle J. // J. Chem. Phys. 1980. V. 73. № 6. P. 2778.
14. Docken K.K., Schafer T.P. // J. Mol. Spectrosc. 1973. V. 46. № 3. P. 454.