

BH分子8个 Λ -S态和23个 Ω 态光谱性质的理论研究

邢伟 李胜周 孙金锋 李文涛 朱遵略 刘锋

Theoretical study on spectroscopic properties of 8 Λ -S and 23 Ω states for BH molecule

Xing Wei Li Sheng-Zhou Sun Jin-Feng Li Wen-Tao Zhu Zun-Lue Liu Feng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 103101 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220038

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220038>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

$\text{SiH}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$ 的势能曲线、光谱常数、振转能级和自旋-轨道耦合理论研究

Accurate theoretical study of potential energy curves, spectroscopic parameters, vibrational energy levels and spin-orbit coupling interaction on $\text{SiH}^+(\text{X}^1\Sigma^+)$ ion

物理学报. 2021, 70(15): 153301 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210450>

AlH^+ 离子5个-S态和10个态的光谱性质以及激光冷却的理论研究

Theoretical study of spectroscopic properties of 5 -S and 10 states and laser cooling for AlH^+ cation

物理学报. 2018, 67(19): 193101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180926>

BH^+ 离子基态及激发态的势能曲线和跃迁性质的研究

Potential energy curves and transition properties for the ground and excited states of BH^+ cation

物理学报. 2018, 67(4): 043101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172409>

icMRCI+Q理论研究 BF^+ 离子电子态的光谱性质和预解离机理

icMRCI+Q study on spectroscopic properties and predissociation mechanisms of electronic states of BF^+ cation

物理学报. 2018, 67(6): 063301 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172114>

LiCl 阴离子的光谱性质和跃迁性质

Spectroscopic and transition properties of LiCl anion

物理学报. 2022, 71(4): 043101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211688>

Na_2^+ 离子较低电子态势能曲线和光谱常数的理论研究

Theoretical study on potential curves and spectroscopic constants of low-lying electronic states of Na_2^+ cation

物理学报. 2018, 67(24): 243101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181690>

BH 分子 8 个 Λ -S 态和 23 个 Ω 态 光谱性质的理论研究*

邢伟^{1)†} 李胜周¹⁾ 孙金锋²⁾ 李文涛³⁾ 朱遵略²⁾ 刘锋¹⁾

1) (信阳师范学院物理电子工程学院, 信阳 464000)

2) (河南师范大学物理学院, 新乡 453000)

3) (潍坊科技学院, 寿光 262700)

(2022 年 1 月 7 日收到; 2022 年 2 月 7 日收到修改稿)

本文利用内收缩多参考组态相互作用方法计算了 BH 分子 8 个低电子态 ($X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^3\Sigma^+$, $1^5\Sigma$ 和 $1^5\Pi$) 和在自旋-轨道耦合效应下所产生的 23 个 Ω 态的势能曲线、以及 $X^1\Sigma_{0+}^+$, $a^3\Pi_{0+}$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$ 和 $A^1\Pi_1$ 态之间 6 对跃迁的跃迁偶极矩. 为了获得精确的势能曲线, 计算中修正了单双电子激发、核价相关效应、相对论效应和基组截断带来的误差. 获得的 BH 分子的光谱和跃迁数据与现有的理论值和实验值符合得很好. 计算结果表明: BH 分子的 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 2, J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 2, J'' = 1, -)$ 跃迁具有较大的爱因斯坦 A 系数和加权的吸收振子强度、高度对角化分布的振动分支比, $A^1\Pi_1$ 态具有较短的辐射寿命. 另外, $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态对 $A^1\Pi_1(v' = 0) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0)$ 循环跃迁的影响可以忽略. 因此, 基于 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 1, J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 3, J'' = 1, -)$ 循环跃迁, 我们提出了用一束主冷却激光 ($\lambda_{00} = 432.45$ nm) 和两束再泵浦激光 ($\lambda_{10} = 479.67$ nm 和 $\lambda_{21} = 481.40$ nm) 冷却 BH 分子的方案, 并评价了冷却效果.

关键词: 势能曲线, 光谱常数, 自旋-轨道耦合, 跃迁偶极矩

PACS: 31.50.Df, 95.30.Ky, 31.15.aj, 33.70.Ca

DOI: 10.7498/aps.71.20220038

1 引言

BH 分子在天体物理^[1-3]和激光冷却分子^[4,5]中起着重要作用. 获得 BH 分子精确的光谱和跃迁数据对识别太阳光球和太阳黑子中的 BH 分子、分析激光冷却 BH 分子的可行性和构建激光冷却方案至关重要.

实验上随着光谱技术的发展, 科学家们利用气相光谱技术从微波到紫外区域对 BH 分子进行高分辨的电子和振动-转动光谱研究^[6-14]. 例如, John 等^[6]测量了近紫外区域 $A^1\Pi \leftrightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁的 0-0, 1-0, 1-1, 2-1, 2-2, 3-2 和 3-3 振转带.

Luh 和 Stwalley^[7]利用实验^[6]中的光谱常数和 RKR 方法构建了 $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$ 和 $B^1\Sigma^+$ 态的势能曲线. Pianalto 等^[8]利用傅里叶变换光谱仪记录了 $X^1\Sigma^+$ 态 1-0, 2-1 和 3-2 振转带的红外发射光谱. Douglass 等^[9]利用激光诱导荧光 (LIF) 技术观察到 $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁的 0-1 和 1-2 振转带. Fernando 和 Bernath^[10]利用傅里叶变换光谱记录了 433 nm 附近 $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁的 0-0, 1-1 和 2-2 振转带. Persico^[11]对 $A^1\Pi$ 态的各种衰减通道进行了相对完整的研究, 并推导出 $X^1\Sigma^+$ 态离解能 D_e 的最佳实验值. Clark 等^[12]利用光子共振增强的多光子电离光谱观察了 $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁的 2-0 振转带. Shayesteh 和 Ghazizadeh^[13]利用获得的 $X^1\Sigma^+$ 态的光谱数据并结合同

* 国家自然科学基金 (批准号: 61275132, 11274097)、河南省自然科学基金 (批准号: 212300410233)、河南省高等学校重点科研项目 (批准号: 21A140023) 和信阳师范学院南湖学者奖励计划青年项目资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wei19820403@163.com

位素拟合,报道了 $X^1\Sigma^+$ 态的Dunham系数.Brazier^[14]利用发射光谱对 $b^3\Sigma^- \rightarrow a^3\Pi$ 跃迁进行了研究.这些实验集中于研究该分子 $X^1\Sigma^+$, $A^1\Pi$, $a^3\Pi$ 和 $b^3\Sigma^-$ 态的光谱性质,报道了这4个电子态精确的光谱常数和分子常数、 $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁的部分数据(Franck-Condon因子、爱因斯坦A系数 $A_{v'v''}$ 和 $A^1\Pi$ 态的辐射寿命 $\tau_{v'}$);但未报道考虑自旋-轨道耦合(SOC)后 Ω 态的光谱和跃迁数据.

近年来,随着从头计算方法的快速发展,人们对BH分子基态和激发态电子结构进行了高精度的理论研究^[5,15–20]. Petsalakis和Theodorakopoulos^[15,16], Miliordos和Mavridis^[17]以及王新强等^[18]利用多参考组态相互作用方法(MRCI)结合大的相关一致基组计算了BH分子一些 Λ -S电子态的势能曲线,并获得了这些电子态的光谱常数.Koput^[19]采用多参考平均耦合对泛函(MR-ACPF)方法,结合相关一致核价基确定了 $X^1\Sigma^+$ 态的势能曲线,为了获得可靠的光谱常数,在计算中包含高阶电子相关、标量相对论(SR)效应、绝热和非绝热效应修正.Yan和Yan^[20]纳入SR效应,采用考虑Davidson修正(+Q)的显关联MRCI(MRCI-F12 + Q + SR)方法对 $X^1\Sigma^+$ 和 $A^1\Pi$ 态的电子结构进行了高精度的研究,并报道了势能曲线、光谱常数、振动能级 ΔG_v 、惯性转动常数 B_v 和离心畸变常数 D_v , $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁数据(Franck-Condon因子、跃迁能量和 $A^1\Pi$ 态的 $\tau_{v'}$). Gao和Gao^[5]基于光谱和跃迁特性研究了激光冷却BH分子的可行性,得到了 $A^1\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 跃迁高度对角化的Franck-Condon因子.然而, $a^3\Pi \rightarrow X^1\Sigma^+$ 是自旋禁阻跃迁,只有在考虑SOC效应后, $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态到 $X^1\Sigma^+_{0+}$ 态的跃迁才可以发生;在他们的研究中未涉及 $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态对 $A^1\Pi_1 \leftrightarrow X^1\Sigma^+_{0+}$ 光学循环的影响.此外,他们在构建BH分子电子态的势能曲线时没有考虑基组截断误差和相对论(SR和SOC)效应的影响.因此,本文纳入SR和SOC效应、核价相关效应(CV)和外推势能到完全基组(CBS)极限对BH分子的光谱和跃迁特性进行深入的研究.

2 计算方法

H原子第一激发态(2P_u)与基态(2S_g)的能级间隔大于B原子的第一激发态(4P_g)与相应基态(2P_u)的能级间隔.因此,BH分子前两个离解极限

是 $B(^2P_u) + H(^2S_g)$ 和 $B(^4P_g) + H(^2S_g)$.利用Wigner-Witmer定则,推算出这两个离解极限产生8个 Λ -S态($X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^3\Sigma^+$, $1^5\Sigma^-$ 和 $1^5\Pi$),在SOC效应的作用下,这8个 Λ -S态将产生23个 Ω 态.为了探讨电子态之间的相互作用对光谱和跃迁特性的影响,我们对8个 Λ -S态和23个 Ω 态的电子结构进行了研究.本文在MOLPRO 2010.1程序包^[21] C_{2v} 点群中计算BH分子8个 Λ -S态、23个 Ω 态的势能曲线和电子态之间的跃迁偶极距.在0.06322—1.04322 nm的核间距内,首先基于Hartree-Fock(HF SCF)方法处理基态($X^1\Sigma^+$)的电子波函数,为了描述原子轨道,两个原子都使用相关一致基组aug-cc-pV6Z(AV6Z)^[22].然后利用态平均的完全活性空间自洽场(SA-CASSCF)和内收缩MRCI(icMRCI)方法分别处理静态电子相关和动态电子相关.活性空间包括所有的价轨道(B原子的2s2p轨道和H原子的1s轨道)和B原子3s轨道,即4个电子在6个分子轨道上.此外,SA-CASSCF和icMRCI方法用于计算激发态($a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^3\Sigma^+$, $1^5\Sigma^-$ 和 $1^5\Pi$)的电子结构.由于icMRCI方法仅考虑了单双电子激发,本文使用Davidson修正(+Q)^[23]估计三阶和四阶电子激发对相关能的贡献.每个电子态的核间距间隔为0.02 nm,为了显示势能曲线的细节信息,在0.10322—0.20122 nm范围内,核间距间隔为0.002 nm.

为了获得8个电子态精确的势能曲线,在上述计算的基础上,本文考虑了CV效应、SR效应并外推势能到CBS极限.具体处理方法为:在icMRCI + Q理论水平上使用cc-pCVTZ(CVTZ)基组^[24]计算CV.CV贡献的势能为: $\Delta E_{\text{corr}} = E_{\text{corr}}(\text{all-electron}) - E_{\text{corr}}(\text{frozen-core})$,其中 $E_{\text{corr}}(\text{all-electron})$ 为BH分子的6个电子都参与计算获得的相关能, $E_{\text{corr}}(\text{frozen-core})$ 为所有价轨道上的电子参与计算获得的相关能;在icMRCI + Q理论水平上利用包含三阶Douglas-Kroll-Hess(DKH3)^[25]近似的cc-pV5Z-DK基组^[26]计算SR效应.为了消除AV6Z存在的基组截断误差,本文在icMRCI + Q方法结合AV6Z和AV5Z基组获得的势能曲线基础上,利用Oyeyemi等^[27]提出的外推公式将这8个电子态的势能曲线外推至CBS极限,表示为icMRCI + Q/56;将CV和SR贡献的势能加到icMRCI + Q/56势能里,便得到icMRCI + Q/56 + CV + SR理论水平上8个 Λ -S态的势能曲线,如图1所示.

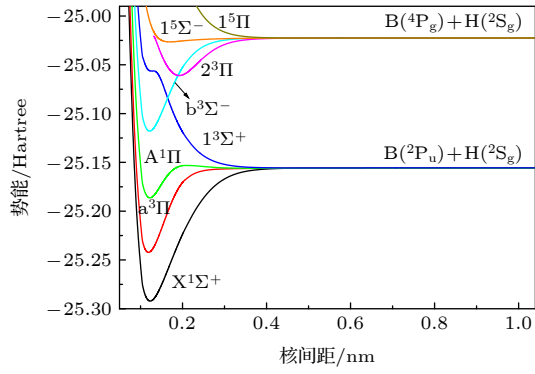
图 1 BH 分子 8 个 Λ -S 态的势能曲线

Fig. 1. Potential energy curves of 8 Λ -S states of the BH molecule.

本文利用 icMRCI + Q 方法结合全电子 CVTZ 基组进行 SOC 计算. 采用带 Breit-Pauli SOC 算符^[28]

(H_{SO}) 和不带 H_{SO} 的全电子 CVTZ 基组来计算势能. 这两种能量的差值即为 SOC 效应对总能量的贡献. 将 SOC 效应贡献的能量加到 icMRCI + $Q/56$ + CV + SR 结果的势能中, 便得到 icMRCI + $Q/56$ + CV + SR + SOC 理论水平上 23 个 Ω 态精确的势能曲线, 如图 2 所示.

基于上述势能曲线, 利用 LEVEL 8.2 程序^[29]求解核运动的振转 Schrödinger 方程, 获得 7 个束缚 Λ -S 态 ($X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^3\Sigma^+$ 和 $1^5\Sigma^-$) 以及 17 个束缚和准束缚 Ω 态的光谱常数 (T_e , R_e , ω_e , $\omega_e x_e$, B_e , α_e 和 D_e) 和分子常数; 然后, 基于 $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi_0^+$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$ 和 $A^1\Pi_1$ 态的势能曲线和 icMRCI/AV6Z + SOC 理论水平的跃迁偶极

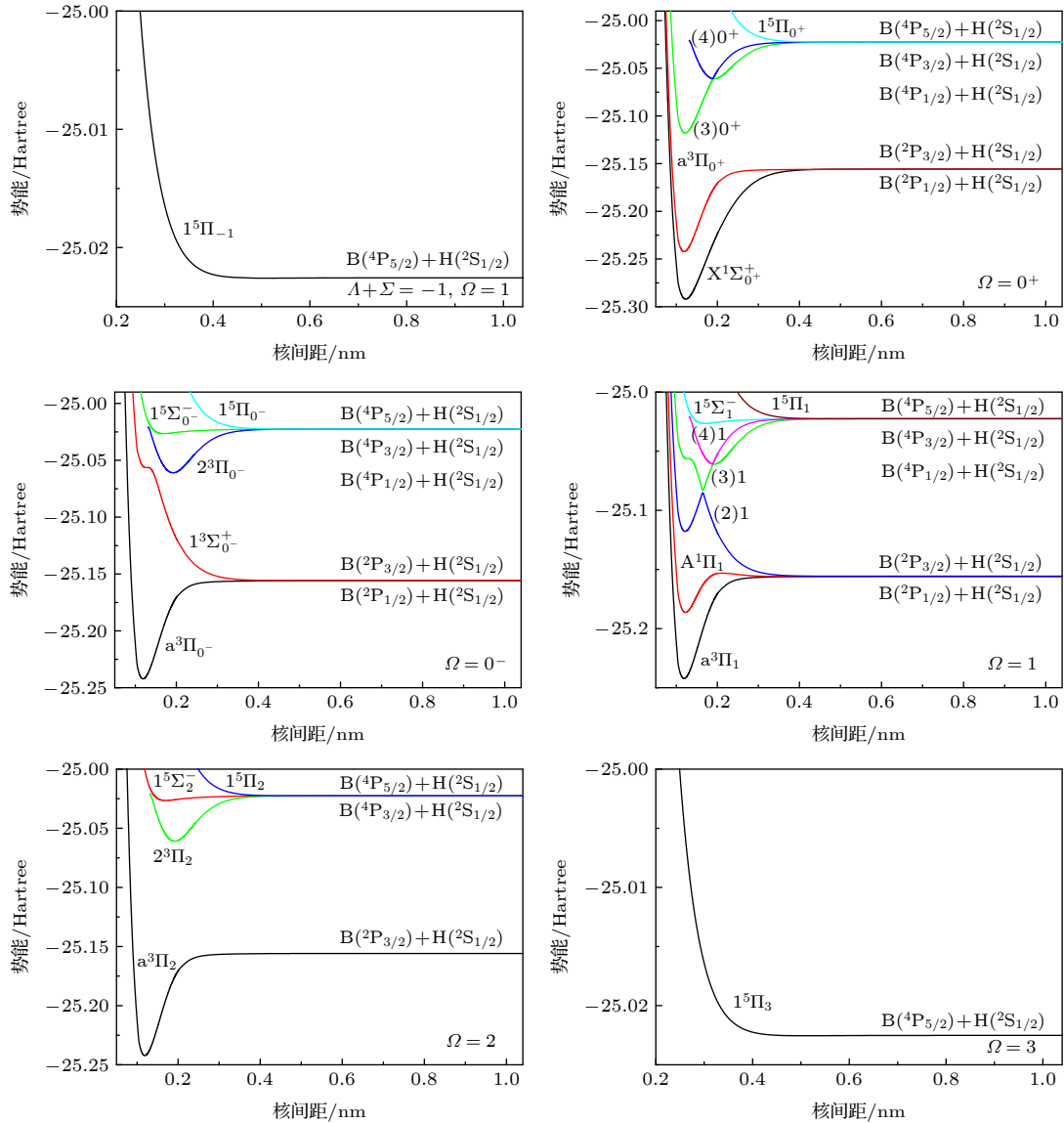
图 2 BH 分子 23 个 Ω 态的势能曲线

Fig. 2. Potential energy curves of 23 Ω states of the BH molecule.

距, 获得这 5 个 Ω 态之间跃迁的 Franck-Condon 因子和 $A_{v'v''}$. 由于振动分支比 ($R_{v'v''}$) 决定了不同电子振动态之间跃迁光子损失路径的相对强度、振子强度决定了跃迁体系吸收或发射的能力、并且天文学家通常使用吸收振子强度 ($f_{v'J' \leftarrow v''J''}$) 和加权的吸收振子强度 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$, 所以将计算这 5 个 Ω 态之间跃迁的 $R_{v'v''}$, $f_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 和 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$. 最后, 计算激发 Ω 态 ($a^3\Pi_{0+}$, $a^3\Pi_1$ 和 $A^1\Pi_1$) 的 τ_v 以及 $A^1\Pi_1$ ($v' = 0, J' = 1, +$) \leftrightarrow $X^1\Sigma^+_0$ ($v'' = 0, J'' = 1, -$) 跃迁的多普勒温度 (T_{Doppler}) 和回弹温度 (T_{Recoil}).

3 结果与讨论

3.1 7 个 Λ -S 态的光谱常数

icMRCI + $Q/56$ + CV + SR 理论水平上计算的 Λ -S 态的离解关系列于表 1. 由表 1 可知, 本文结果与实验估计值^[30]和理论^[31]符合非常好, 因此本文利用的方法很好地描述了 BH 分子的解离情况.

由图 1 可知, $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $1^3\Sigma^+$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$ 和 $1^5\Sigma^-$ 为束缚态, $1^5\Pi$ 态为排斥态. 为方便讨论, 表 2 列出了本文计算的 7 个束缚 Λ -S 态光谱常数、挑选的实验值^[7,8,10–14]和其它理论值^[5,15–20].

$X^1\Sigma^+$ 态在 R_e 处的主要电子组态为 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^0 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.8995), 小括号里为组态波函数系数的平方. 它的势阱深度为 29954.56 cm^{-1} , 包含 22 个振动态. 由表 2 可知, 本文计算的 R_e , ω_e , B_e 和 D_e 与实验值^[8,10,12,13]吻合, 它们与实验值^[8,10,12,13]的最大偏离分别为 0.00027 nm (0.219%), 2.62 cm^{-1} (0.1108%), 0.014 cm^{-1} (0.1164%) 和 0.0661 eV (1.8122%); 仅文献^[15–19]中的 R_e 值和文献^[5,15,17–20]中的 D_e 值分别比本文的计算值稍微接近实验值^[8,13]和实验值^[11].

第一激发态 $a^3\Pi$ 和第二激发态 $A^1\Pi$ 通过 $3\sigma \rightarrow$

1π 的单电子激发形成, 它们在各自 R_e 处的主要电子组态分别为 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^1 1\pi^1 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.9413) 和 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^1 1\pi^1 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.9129). $a^3\Pi$ 态的势阱深度为 18961.07 cm^{-1} , 包含 12 个振动态. $A^1\Pi$ 态在 $R = 0.21289 \text{ nm}$ 附近出现势垒, 势垒顶部的势能高于无穷远处的势能, 势阱深度为 7342.74 cm^{-1} , 包含 4 个振动态, 这与实验^[12]和理论^[16]的结论相同. 由表 2 知, 本文计算的这两个态的光谱常数与实验值^[7,10–12,14]吻合很好.

第三激发态 $b^3\Sigma$ 态通过 $3\sigma \rightarrow 1\pi$ 的双电子激发形成, 其在 R_e 处的主要电子组态为 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^0 1\pi^2 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.8939). $b^3\Sigma$ 态的势阱深度为 20938.32 cm^{-1} , 包含 14 个振动态, 它与 $1^3\Sigma^+$ 态的排斥部分在 $R = 0.16467 \text{ nm}$ 处交叉, 计算表明 $b^3\Sigma$ 态的预解离始于 $v' = 2, J' = 11$ 能级.

$1^3\Sigma^+$ 态由 $3\sigma \rightarrow 4\sigma$ 的单电子激发形成, 其在 R_e 处的主要电子组态为 $2\sigma^2 3\sigma^1 1\pi^0 4\sigma^1 5\sigma^0$ (0.8001), 并在 $R = 0.13122 \text{ nm}$ 附近出现势垒, 势垒高于无穷远处, 局域势阱深度为 24.80 cm^{-1} , 不包含任何振动态. 本文的结论与 Miliordos 和 Mavridis^[17]的相同.

$2^3\Pi$ 态具有明显的多参考特征, 其在 R_e 处主要价电子组态为 $1\sigma^2 2\sigma^1 3\sigma^2 1\pi^1 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.6130) 和 $1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^0 1\pi^1 4\sigma^1 5\sigma^0$ (0.2370). 因此, 从 $a^3\Pi$ 态到 $2^3\Pi$ 态的主要电子跃迁是 $2\sigma \rightarrow 3\sigma$ 和 $3\sigma \rightarrow 4\sigma$. $2^3\Pi$ 态与 $b^3\Sigma$ 态在 $R = 0.18920 \text{ nm}$ 处交叉, 交叉点位于 $2^3\Pi$ 态的 R_e 附近, $2^3\Pi(v' \geq 0)$ 能级将受到 $b^3\Sigma^-(v' \geq 6)$ 能级的微扰, 这解释了实验上未报道 $2^3\Pi$ 态光谱的原因.

弱束缚态 $1^5\Sigma^-$ 通过 $2\sigma \rightarrow 1\pi$ 和 $3\sigma \rightarrow 1\pi$ 的双电子激发形成, 其在 R_e 处的主要价电子组态为 $1\sigma^2 2\sigma^1 3\sigma^1 1\pi^2 4\sigma^0 5\sigma^0$ (0.9645). 它的势阱深度为 882.07 cm^{-1} , 仅包含 3 个振动态. $2\sigma \rightarrow 1\pi$ 和 $3\sigma \rightarrow 4\sigma$ 的双电子激发形成排斥态 $1^5\Pi$.

表 1 BH 分子前两个离解极限产生的 8 个 Λ -S 态的离解关系

Table 1. Dissociation relationships of the 8 Λ -S states generated from the first two dissociation asymptotes of the BH molecule.

离解极限	Λ -S 态	能级 ^a / cm^{-1}		
		本文	实验 ^[30]	理论 ^[31]
$B(^2P_u) + H(^2S_g)$	$X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $1^3\Sigma^+$	0.00	0.00	0.00
$B(^4P_g) + H(^2S_g)$	$b^3\Sigma^-$, $1^5\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^5\Pi$	28907.66	$28644.99 + x^b$	28932.70

a, 4P_g 态能级为 $^4P_{1/2}$, $^4P_{3/2}$ 和 $^4P_{5/2}$ 能级的算术平均值减去 $^2P_{3/2}$ 与 $^2P_{1/2}$ 能级的算术平均值; b, $^4P_{5/2}$ 能级外推值的不确定度.

表 2 icMRCI + $Q/56$ + CV + SR 理论水平上 BH 分子 7 个 Λ -S 态的光谱常数
 Table 2. Spectroscopic parameters of the 7 Λ -S states of BH at level of icMRCI + $Q/56$ + CV + SR.

Λ -S 态	来源	T_e/cm^{-1}	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e x_e/\text{cm}^{-1}$	B_e/cm^{-1}	$\alpha_e/(10^2 \text{ cm}^{-1})$	D_e/eV
$X^1\Sigma^+$	本文	0	0.12295	2367.28	48.7782	12.0395	37.0985	3.7137
	实验 ^[8]	0	0.12322	2366.73	49.3384	12.0255	42.1516	
	实验 ^[10]	0	—	2366.73	49.3398	12.0258	42.1565	
	实验 ^[12]	0	—	2364.66	47.7098	12.0257	42.1591	3.6476 ± 0.0037^a
	实验 ^[13]	0	0.12322	2366.73	49.3405	12.0255	42.1450	
	理论 ^[5]	0	0.12290	2352.0	44.0	12.086	—	3.6863
	理论 ^[15]	0	0.12301	2379	46.79	12.07	—	3.70
	理论 ^[16]	0	0.12312	2378		12.055		3.578 ^b
	理论 ^[17]	0	0.1230	2359	48.8	—	41.8	3.6773
	理论 ^[18]	0	0.12327	2368.48	50.6957	12.110	43.05	3.6580
	理论 ^[19]	0	0.12300	—	—	—	—	3.6751
	理论 ^[20]	0	0.12293	2365.69	47.2310	12.0801	41.6	3.6851
$a^3\Pi$	本文	10944.32	0.11899	2625.97	59.4177	12.8919	41.6404	2.3507
	实验 ^[14]	x^c	0.11900	2625.14	55.7840	12.8931	41.5610	2.3867
	理论 ^[5]	10645.0	0.11900	2961.0	109.6	12.904	—	2.3806
	理论 ^[15]		0.11913	2653	62.70	12.87	—	2.38
	理论 ^[17]	10583	0.11900	2625	60.4	—	45.5	2.3677
	理论 ^[18]	9557.67	0.11925	2598.98	46.6300	12.9400	42.53	2.3135
$A^1\Pi$	本文	23203.52	0.12223	2253.28	36.8310	11.8343	11.6254	0.8368
	实验 ^[10]	23135.44	0.12195 ^d	2251.46	56.5725	12.20035	53.7670	0.697 ^d
	实验 ^[12]	23105.10	—	2342.41	127.7618	12.19986	53.6736	0.7786 ± 0.0037^a
	理论 ^[5]	22997.90	0.12210	2404.60	147.3	12.2795	—	0.9098
	理论 ^[15]		0.12213	2320	136.5	12.24	—	0.71
	理论 ^[16]	23061	0.12235	2290	—	12.20	—	0.73 ^b
	理论 ^[17]	23144	0.1222	2341	129.6	—	85.1	0.8109
	理论 ^[18]	22260.89	0.12267	2280.26	93.6233	12.229	60.83	0.7536
	理论 ^[19]	23099.84	0.12212	2343.96	128.178	12.2836	74.0	0.8938
$b^3\Sigma^-$	本文	38238.63	0.12164	2440.89	54.4477	12.2508	33.6712	2.5959
	实验 ^[14]	$x^c + 27152.75$	0.121625	2438.10	55.562	12.3426	43.087	2.5987
	理论 ^[15]		0.12256	2345	48.45	12.16	—	2.54
	理论 ^[17]	37708	0.1217	2430	57.3	—	45.9	2.5845
	理论 ^[18]	36859.52	0.12199	2428.33	55.409	12.284	44.31	2.5403
$2^3\Pi$	本文	50730.46	0.19215	1273.89	20.7896	4.94471	3.0957	1.0467
	理论 ^[15]		0.19338	1425	57.04	4.88	—	1.04
	理论 ^[17]	50216	0.1931	1295	38.6	—	9.9	1.0321
$1^3\Sigma^+$	本文	51738.07	0.12592	—	—	—	—	0.0031
	理论 ^[17]	51688	0.123					
$1^5\Sigma^-$	本文	58295.54	0.16981	634.868	167.676	6.51936	192.641	0.1093
	理论 ^[17]	57674	0.1701	528	87.3	—	153.2	0.1084

a, 文献^[11]中的值; b, D_0 值; c, x 表示 $a^3\Pi$ 态相对于 $X^1\Sigma^+$ 态的 T_e 值; d, 文献^[7]中的值.

3.2 17 个 Ω 态的光谱常数

SOC 效应使 B 原子的基态 2P_u 和第一激发态 4P_g

分别分裂成 $^2P_{1/2}$ 和 $^2P_{3/2}$ 组分以及 $^4P_{1/2}$, $^4P_{3/2}$ 和 $^4P_{5/2}$ 组分. 因此, 前两个离解极限 $B(^2P_u) + H(^2S_g)$ 和 $B(^4P_g) + H(^2S_g)$ 分裂成 5 条离解极限, 即 $B(^2P_{1/2}) +$

$H(^2S_{1/2})$, $B(^2P_{3/2}) + H(^2S_{1/2})$, $B(^4P_{1/2}) + H(^2S_{1/2})$, $B(^4P_{3/2}) + H(^2S_{1/2})$ 和 $B(^4P_{5/2}) + H(^2S_{1/2})$. 表 3 中列入了这 5 个离解极限的能量间隔及它们所产生的 23 个 Ω 态.

由表 3 可知, 本文利用 icMRCI + $Q/56+CV+SR+SOC$ 计算的 B 原子 $^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$, $^4P_{1/2} - ^2P_{3/2}$, $^4P_{3/2} - ^4P_{1/2}$ 和 $^4P_{5/2} - ^4P_{3/2}$ 的能量间隔分别与相应实验值^[30] 的差别仅为 0.715 cm^{-1} , $263.915 - x\text{ cm}^{-1}$, 0.600 cm^{-1} 和 0.410 cm^{-1} . 17 个束缚和准束缚 Ω 态的光谱常数见表 4.

由图 1 可知, $X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$ 和 $1^5\Sigma^-$ 态势能曲线不与其它电子态的势能曲线交叉, 考虑 SOC 效应后, 这 4 个 Λ -S 态所产生的 9 个 Ω 态 ($X^1\Sigma^+_{0+}$,

$a^3\Pi_{0-}$, $a^3\Pi_{0+}$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$, $A^1\Pi_1$, $1^5\Sigma^-_{0-}$, $1^5\Sigma^-_{1-}$ 和 $1^5\Sigma^-_{2-}$) 的光谱常数与相应 Λ -S 态的光谱常数差别很小, 并且这 9 个 Ω 态在各自 R_e 处波函的 Λ -S 成分全部来自相应的 Λ -S 态. 当 $R < 0.44322\text{ nm}$ 时, $a^3\Pi_{0-}$, $a^3\Pi_{0+}$, $\{\text{rm } a\}^3\Pi_1$ 和 $\{\text{rm } a\}^3\Pi_2$ 的势能依次增加. 由表 4 可知, 在各自 R_e 处, $a^3\Pi_{0+} - a^3\Pi_{0-}$ 的分裂能为 0.01 cm^{-1} ; $a^3\Pi_1 - a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_2 - a^3\Pi_1$ 的分裂能分别为 3.95 cm^{-1} 和 4.17 cm^{-1} , 它们与 Brazier^[14] 报道的 $a^3\Pi$ 态的 SOC 分裂能 4.3878 cm^{-1} 吻合地很好. 在 $R = 0.44322\text{ nm}$ 附近, $a^3\Pi_{0+}$ 态势能曲线与 $a^3\Pi_1$ 态势能曲线交叉, 当 $R > 0.44322\text{ nm}$ 时, $a^3\Pi_{0+}$ 的势能大于 $a^3\Pi_1$ 态的势能, 这导致 $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态的离解极限分别为 $B(^2P_{3/2}) + H(^2S_{1/2})$ 和 $B(^2P_{1/2}) + H(^2S_{1/2})$.

表 3 BH 分子 23 个 Ω 态的离解关系Table 3. Dissociation relationships of the 23 Ω states of the BH molecule.

原子态(B + H)	Ω 态	能级/ cm^{-1}	
		本文	实验 ^[30]
$B(^2P_{1/2}) + H(^2S_{1/2})$	$0^-, 0^+, 1$	0.00	0.00
$B(^2P_{3/2}) + H(^2S_{1/2})$	$2, 1(2), 0^+, 0^-$	14.572	15.287
$B(^4P_{1/2}) + H(^2S_{1/2})$	$0^-, 0^+, 1$	28910.63	$28647.43 + x^a$
$B(^4P_{3/2}) + H(^2S_{1/2})$	$2, 1(2), 0^+, 0^-$	28914.67	$28652.07 + x^a$
$B(^4P_{5/2}) + H(^2S_{1/2})$	$3, 2(2), 1(2), 0^+, 0^-$	28921.41	$28658.40 + x^a$

a, $^4P_{5/2}$ 能级外推值的不确定度.

表 4 利用 icMRCI + $Q/56 + CV + SR + SOC$ 理论计算获得的 17 个 Ω 态的光谱常数Table 4. Spectroscopic parameters obtained by the icMRCI + $Q/56 + CV + SR + SOC$ calculations for the 17 Ω states.

Ω 态	T_e/cm^{-1}	R_e/nm	ω_e/cm^{-1}	$\omega_e x_e/\text{cm}^{-1}$	B_e/cm^{-1}	$10^2\alpha_e/\text{cm}^{-1}$	D_e/eV	在 R_e 附近主要的 Λ -S 态/%
$X^1\Sigma^+_{0+}$	0	0.12295	2367.28	48.7783	12.0395	37.0985	3.7138	$X^1\Sigma^+$ (100.00)
$a^3\Pi_{0-}$	10940.36	0.11899	2625.93	59.4165	12.8918	41.6426	2.3506	$a^3\Pi$ (100.00)
$a^3\Pi_{0+}$	10940.37	0.11899	2625.93	59.4192	12.8918	41.6424	2.3506	$a^3\Pi$ (100.00)
$a^3\Pi_1$	10944.32	0.11899	2625.97	59.4140	12.8919	41.6403	2.3513	$a^3\Pi$ (100.00)
$a^3\Pi_2$	10948.49	0.11899	2626.01	59.4131	12.8919	41.6384	2.3509	$a^3\Pi$ (100.00)
$A^1\Pi_1$	23203.52	0.12223	2253.28	36.8317	11.8338	11.7034	0.9051	$A^1\Pi$ (100.00)
(3)0 ⁺ 第一势阱	38244.33	0.12163	2438.08	44.7281	12.2925	38.3041	1.5501	$b^3\Sigma^-$ (100.00)
(3)0 ⁺ 第二势阱	50725.86	0.19213	—	—	—	—	0.0026	$2^3\Pi$ (100.00)
(3)1	38244.35	0.12163	2447.69	54.2934	12.3167	37.6149	0.8995	$b^3\Sigma^-$ (100.00)
(4)1	45758.49	0.16496	4850.09	1293.00	6.73952	4.02168	1.6629	$1^3\Sigma^+$ (100.00)
$2^3\Pi_{0-}$	50726.07	0.19214	1274.00	20.8450	4.94470	3.09611	1.0466	$2^3\Pi$ (100.00)
(4)0 ⁺	50726.51	0.18860	2344.54	77.7976	16.5616	29.6976	1.0478	$b^3\Sigma^-$ (99.82), $2^3\Pi$ (0.18)
(5)1	50728.05	0.18863	2531.33	412.671	5.20415	61.4752	1.0476	$b^3\Sigma^-$ (99.92), $2^3\Pi$ (0.08)
$2^3\Pi_2$	50734.85	0.19215	1273.86	20.7903	4.94471	3.09520	1.0467	$2^3\Pi$ (100.00)
$1^3\Sigma^+_{0-}$	51738.08	0.12592	—	—	—	—	0.0031	$1^3\Sigma^+$ (100.00)
$1^5\Sigma^-_{0-}$	58295.53	0.16981	634.857	167.653	6.51872	192.471	0.1096	$1^5\Sigma^-$ (100.00)
$1^5\Sigma^-_{2-}$	58295.55	0.16981	634.862	167.660	6.51884	192.502	0.1096	$1^5\Sigma^-$ (100.00)
$1^5\Sigma^-_{2-}$	58295.57	0.16981	634.867	167.669	6.51902	192.550	0.1095	$1^5\Sigma^-$ (100.00)

在-25.084165 至-25.060894 Hartree 的能量范围内, $b^3\Sigma$ 态的势能曲线与 $1^3\Sigma^+$ 和 $2^3\Pi$ 态的势能曲线交叉; 考虑 SOC 效应后, 这 3 个 Λ -S 态分裂出的 $\Omega = 0^+$ 和 1 的成分出现避免交叉, 这导致 (3)0⁺, (4)0⁺, (3)1, (4)1 和 (5)1 态势能曲线的形状和相应 Λ -S 态势能曲线的形状不同, 并且这 5 个 Ω 态出现了一些局域势阱; 因此, 这 5 个 Ω 态的光谱常数也有很大的变化.

$1^3\Sigma^+$ 分裂出的 $1^3\Sigma_0^+$ 态、 $2^3\Pi$ 态分裂出的 $2^3\Pi_0^-$ 和 $2^3\Pi_2$ 与其它 Ω 态没有避免交叉. 由表 2 和表 4 可知, 它们的光谱常数与相应 Λ -S 态的光谱常数的差别也很小.

SOC 效应使排斥态 $1^5\Pi$ 态分裂为 $1^5\Pi_{-1}$, $1^5\Pi_0$, $1^5\Pi_0^+$, $1^5\Pi_1$, $1^5\Pi_2$ 和 $1^5\Pi_3$ 6 个 Ω 态.

3.3 跃迁特性和激光冷却方案

由 3.2 的讨论可知, 最低的 5 个 Ω 态 ($X^1\Sigma_0^+$, $a^3\Pi_0$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$ 和 $A^1\Pi_1$) 受到其他态的微扰较小, 基于电偶极跃迁的角动量选择定则 $\Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1$ 和宇称选择定则: $+\leftrightarrow -$ ($+$, $-$ 是电子态的转动能级的宇称), 利用 icMRCI/AV6Z + SOC 方法计算了它们之间 6 对跃迁 [$A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_0^+(v'', J'' = 1, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_2(v'', J'' = 2, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_0(v'', J'' = 1, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$, $a^3\Pi_0(v', J' = 0, +) \rightarrow X^1\Sigma_0^+(v'', J'' = 1, -)$ 和 $a^3\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_0^+(v'', J'' = 1, -)$] 的跃迁偶极矩, 如图 3 所示. 为了分析太阳光球和

太阳黑子光谱、建立它们的物理模型和探讨激光冷却 BH 分子的可行性, 本文基于上述的势能曲线和跃迁偶极矩, 借助于 LEVEL 8.2 程序 [29] 获得了这 6 对跃迁的 $A_{v'v''}$, 波长 $\lambda_{v'v''}$, $R_{v'v''}$, $f_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 和 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$, 如表 5—7 和附录 A 表 A1—A3 所列; 并计算了 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +)$, $a^3\Pi_0(v', J' = 0, +)$ 和 $a^3\Pi_1(v', J' = 1, +)$ 态的 τ_v , 见表 8.

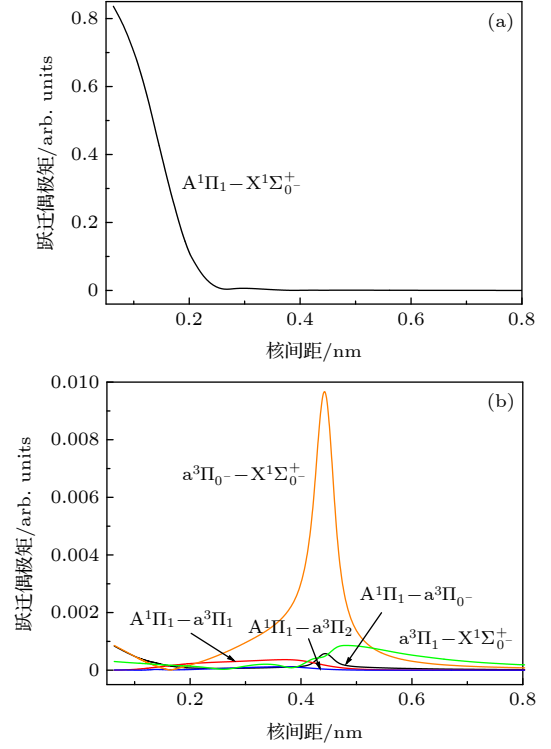


图 3 BH 分子 6 对跃迁的跃迁偶极矩曲线

Fig. 3. Curves of the transition dipole moments versus internuclear separation of six-pair states of the BH molecule.

表 5 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_0^+(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table 5. The transition wavenumber ($\tilde{\nu}$), Einstein A-coefficients ($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_0^+(v'', J'' = 1, -)$ transitions.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	23140.44	7.98×10^6	0.9912	432.45	0.0067	1-0	25243.77	9.61×10^4	0.0138	396.42	6.78×10^{-4}
0-1	20862.55	6.67×10^4	0.0083	479.67	6.89×10^{-4}	1-1	22965.88	6.80×10^6	0.9777	435.74	0.0580
0-2	18684.36	3.86×10^3	4.79×10^{-4}	535.59	4.97×10^{-5}	1-2	20787.69	4.72×10^4	0.0068	481.40	4.91×10^{-4}
0-3	16602.97	4.43×10^1	5.50×10^{-6}	602.73	7.22×10^{-7}	1-3	18706.30	1.13×10^4	0.0016	534.96	1.45×10^{-4}
0-4	14612.08	1.75	2.17×10^{-7}	684.85	3.69×10^{-8}	1-4	16715.40	7.15×10^1	1.03×10^{-5}	598.68	1.15×10^{-6}
2-0	27090.98	1.76×10^3	3.10×10^{-4}	369.39	1.08×10^{-5}	3-0	28588.60	1.08×10^3	2.66×10^{-4}	350.04	5.95×10^{-6}
2-1	24813.09	4.31×10^5	0.0759	403.30	0.0032	3-1	26310.72	1.89×10^3	4.66×10^{-4}	380.34	1.23×10^{-5}
2-2	22634.90	5.22×10^6	0.9192	442.11	0.0458	3-2	24132.53	1.16×10^6	0.2858	414.67	0.0090
2-3	20553.51	1.38×10^3	2.43×10^{-4}	486.88	1.47×10^{-5}	3-3	22051.13	2.80×10^6	0.6887	453.81	0.0259
2-4	18562.62	2.46×10^4	0.0043	539.10	3.21×10^{-4}	3-4	20060.24	4.31×10^4	0.0106	498.85	4.82×10^{-4}
2-5	16658.64	1.50×10^1	2.64×10^{-6}	600.72	2.43×10^{-7}	3-5	18156.26	5.40×10^4	0.1330	551.17	7.37×10^{-4}

表 6 $\text{a}^3\Pi_{0+}(v', J' = 0, +) \rightarrow \text{X}^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table 6. The transition wavenumber($\tilde{\nu}$), Einstein A -coefficients($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $\text{a}^3\Pi_{0+}(v', J' = 0, +) \rightarrow \text{X}^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ transitions.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	11039.10	0.1878	0.8913	906.52	2.31×10^{-9}	1-0	13546.35	5.67×10^{-4}	0.0030	738.73	4.63×10^{-12}
0-1	8761.22	0.0216	0.1027	1142.21	4.22×10^{-10}	1-1	11268.46	0.1441	0.7666	888.06	1.70×10^{-9}
0-2	6583.03	0.0012	0.0058	1520.14	4.24×10^{-11}	1-2	9090.27	0.0391	0.2082	1100.86	7.10×10^{-10}
0-3	4501.63	4.60×10^{-5}	2.18×10^{-4}	2223.00	3.40×10^{-12}	1-3	7008.88	0.0039	0.0209	1427.78	1.20×10^{-10}
0-4	2510.74	9.71×10^{-7}	4.61×10^{-6}	3985.72	2.31×10^{-13}	1-4	5017.98	2.33×10^{-4}	0.0012	1994.25	1.39×10^{-11}
2-0	15929.21	3.36×10^{-4}	0.0020	628.22	1.98×10^{-12}	3-0	18183.37	1.76×10^{-6}	1.12×10^{-5}	550.34	7.97×10^{-15}
2-1	13651.32	0.0023	0.0142	733.05	1.84×10^{-11}	3-1	15905.48	9.50×10^{-4}	0.0061	629.16	5.63×10^{-12}
2-2	11473.13	0.1081	0.6354	872.22	1.23×10^{-9}	3-2	13727.29	0.0050	0.0320	728.99	3.99×10^{-11}
2-3	9391.74	0.0507	0.2982	1065.52	8.62×10^{-10}	3-3	11645.90	0.0817	0.5216	859.28	9.03×10^{-10}
2-4	7400.84	0.0080	0.0468	1352.16	2.18×10^{-10}	3-4	9655.01	0.0542	0.3464	1036.47	8.72×10^{-10}

表 7 $\text{a}^3\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow \text{X}^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table 7. The transition wavenumber ($\tilde{\nu}$), Einstein A -coefficients($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $\text{a}^3\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow \text{X}^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/\text{s}$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	11039.58	0.1278	0.9615	906.48	4.72×10^{-9}	1-0	13546.43	0.0081	0.0607	738.73	1.98×10^{-10}
0-1	8761.69	0.0050	0.0374	1142.14	2.91×10^{-10}	1-1	11268.54	0.1148	0.8613	888.06	4.07×10^{-9}
0-2	6583.50	1.48×10^{-4}	0.0011	1520.03	1.54×10^{-11}	1-2	9090.35	0.0099	0.0739	1100.85	5.36×10^{-10}
0-3	4502.11	3.00×10^{-6}	2.25×10^{-5}	2222.76	6.65×10^{-13}	1-3	7008.96	5.33×10^{-4}	0.0040	1427.76	4.88×10^{-11}
0-4	2511.21	3.32×10^{-8}	2.50×10^{-7}	3984.98	2.37×10^{-14}	1-4	5018.07	1.86×10^{-5}	1.39×10^{-4}	1994.22	3.32×10^{-12}
2-0	15928.88	2.81×10^{-5}	2.12×10^{-4}	628.24	4.98×10^{-13}	3-0	18182.60	1.94×10^{-6}	1.47×10^{-5}	550.37	2.63×10^{-14}
2-1	13651.00	0.0152	0.1142	733.07	3.66×10^{-10}	3-1	15904.71	5.54×10^{-5}	4.22×10^{-4}	629.19	9.84×10^{-13}
2-2	11472.81	0.1023	0.7703	872.25	3.49×10^{-9}	3-2	13726.52	0.0211	0.1607	729.04	5.04×10^{-10}
2-3	9391.41	0.0141	0.1059	1065.56	7.17×10^{-10}	3-3	11645.13	0.0912	0.6945	859.34	3.03×10^{-9}
2-4	7400.52	0.0012	0.0089	1352.22	9.71×10^{-11}	3-4	9654.23	0.0168	0.1277	1036.55	8.09×10^{-10}

表 8 $\text{A}^1\Pi_1(v', J' = 1, +)$, $\text{a}^3\Pi_{0+}(v', J' = 0, +)$ 和 $\text{a}^3\Pi_1(v', J' = 1, +)$ 态的辐射寿命 ($\tau_{v'}$)

Table 8. Spontaneous radiative lifetimes($\tau_{v'}$) for the $\text{A}^1\Pi_1(v', J' = 1, +)$, $\text{a}^3\Pi_{0+}(v', J' = 0, +)$ 和 $\text{a}^3\Pi_1(v', J' = 1, +)$ transitions.

v'	$\text{a}^3\Pi_{0+}/\text{s}$	$\text{a}^3\Pi_1/\text{s}$	$\text{A}^1\Pi_1/\text{ns}$			
			总和/ns	$\text{A}^1\Pi_1 - \text{X}^1\Sigma_{0+}^+/\text{ns}$	$\text{A}^1\Pi_1 - \text{a}^3\Pi_{0+}/\text{s}$	$\text{A}^1\Pi_1 - \text{a}^3\Pi_2/\text{s}$
0	4.75	7.52	124.18	124.18	2.71	111.48
1	5.32	7.50	143.86	143.86	3.03	90.08
2	5.88	7.53	176.12	176.12	3.58	83.05
3	6.39	7.61	246.20	246.20	4.77	93.55
4	6.85	7.78				
5	7.27	8.09				

分别利用下面的公式计算 $R_{v'v''}$ 、 $f_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 、 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 和 $\tau_{v'}$:

$$R_{v'v''} = A_{v'v''} / \sum_{v''} A_{v'v''}, \quad (1)$$

$$f_{v'J' \leftarrow v''J''} = 1.4991938 \frac{1}{\tilde{\nu}^2} \frac{2J' + 1}{2J'' + 1} A_{v'J' \rightarrow v''J''}, \quad (2)$$

$$gf_{v'J' \leftarrow v''J''} = (2J'' + 1) f_{v'J' \leftarrow v''J''}, \quad (3)$$

$$\tau_{v'} = 1/A_{v'} = 1/\sum_i A_{iv'}. \quad (4)$$

(1) 式—(4) 式中, $\tilde{\omega}$ 为跃迁波数、单位为 cm^{-1} ; g 为低能级的统计权重; $A_{i,v'}$ 是从上能级 v' 发射的第 i 个系统的总爱因斯坦 A 系数.

由表 5 知, $A^1\Pi_1(v', +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', -)$ 跃迁的 19 条振转带 (0-0, 0-1, 0-2, 1-0, 1-1, 1-2, 1-3, 2-0, 2-1, 2-2, 2-3, 2-4, 3-0, 3-1, 3-2, 3-3, 3-4, 3-5 和 3-6) 的 $Q(1)$ 支具有较大的 $A_{v'v''}$ 和 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$, 这表明这 19 条振转带的跃迁强度比较强. 因此 0-2, 1-3, 2-3, 2-4, 3-0, 3-1, 3-4, 3-5 和 3-6 也应是潜在的可观察振转带. 本文计算的 0-0, 1-0, 1-1, 2-0, 2-1, 2-2, 3-2 和 3-3 的 $\tilde{\omega}$ 稍微大于相应的实验值 [6,10,12], 它们与实验值 [6,10,12] 的最大偏差仅为 66.324 cm^{-1} (0.287%), 84.256 cm^{-1} (0.335%), 74.807 cm^{-1} (0.327%), 101.920 cm^{-1} (0.378%), 92.492 cm^{-1} (0.374%), 87.300 cm^{-1} (0.387%), 106.62 cm^{-1} (0.444%) 和 104.91 cm^{-1} (0.478%); $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁具有高度对角化的 $R_{v'v''}$ ($R_{00} = 0.9912$, $R_{11} = 0.9777$ 和 $R_{22} = 0.9192$), 并且本文获得的 0-0, 0-1, 0-2 和 0-3 振转带的 $R_{v'v''}$ 分别与 Hendricks 等 [4] 报道的相应值吻合. 另外, 我们计算的 $A^1\Pi_1(v' = 0, J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0, J'' = 1, -)$ 的 τ_{00} 为 125.28 ns, 对应的光子散射速率 ($7.98 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$) 符合快速激光冷却的要求 (10^5 — 10^8 s^{-1}) [32]. 基于获得的 $R_{v'v''}$ 和 $X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 3, J'' = 1, -) \rightarrow A^1\Pi_1(v' = 0 - 1, J' = 1, +)$ 跃迁的主冷却激光波长和再泵浦激光波长, 构建了一个需要三束激光的振动-转动态的闭合冷却方案, 如图 4 所示. 由图 4 可知, 需要一束波长 $\lambda_{00} = 432.45 \text{ nm}$ 的主激光驱动 $X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0, J'' = 1, -) \rightarrow A^1\Pi_1(v' = 0, J' = 1, +)$ 跃迁, 为了增强冷却效果, 我们增加了两束波长为 $\lambda_{10} = 479.67 \text{ nm}$ 和 $\lambda_{21} = 481.40 \text{ nm}$ 的再泵浦激光分别驱动 $X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 1, J'' = 1, -) \rightarrow A^1\Pi_1(v' = 0, J' = 1, +)$ 和 $X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 2, J'' = 1, -) \rightarrow A^1\Pi_1(v' = 1, J' = 1, +)$ 跃迁. 可见, 三束激光的波长都在可见光的范围, 可以用价格低廉的半导体激光器获得这三束激光. 此外, 本文计算的激光波长仅分别比实验 [9] 中的相应值小 0.75 nm (0.173%), 0.73 nm (0.152%), 1.00 nm (0.207%). 在冷却循环中, 每个 BH 分子至少散射 1.58×10^5 个光子才会有一个光子损失在 $X^1\Sigma_{0+}^+$ 态 $v'' \geq 3$ 能级.

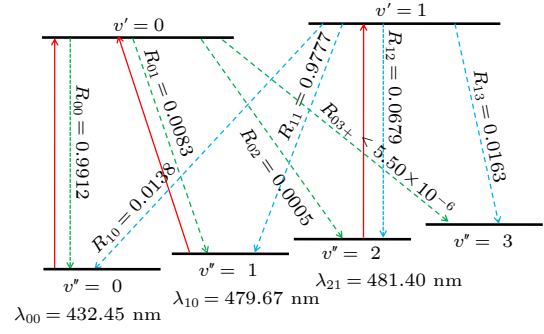


图 4 利用 $A^1\Pi_1(v') \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'')$ 跃迁进行激光冷却 BH 分子的方案. 虚线表示 $A^1\Pi_1(v' = 0, 1) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 3)$ 跃迁的自发辐射振动分支比 ($R_{v'v''}$). 红色实线表示激光驱动 $X^1\Sigma_{0+}^+(v'') \rightarrow A^1\Pi_1(v')$ 跃迁

Fig. 4. The proposed laser cooling scheme for the BH using $A^1\Pi_1(v') \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'')$ transition. The dotted line indicate the spontaneous radiation vibrational branching ratio ($R_{v'v''}$) of $A^1\Pi_1(v' = 0, 1) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 3)$ transition. The red solid line indicate the wavelength ($\lambda_{v'v''}$) at which the laser drives the $X^1\Sigma_{0+}^+(v'') \rightarrow A^1\Pi_1(v')$ transition.

由表 6 和表 7 可知, $a^3\Pi_{0+}(v', J' = 0, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 和 $a^3\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的 $R_{v'v''}$ 也具有对角化, 但是这两对跃迁的 $A_{v'v''}$ 和 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 很小, $\tau_{v'}$ 太长 [$\tau_0(a^3\Pi_{0+}) = 4.75 \text{ s}$ 和 $\tau_0(a^3\Pi_1) = 7.52 \text{ s}$], 不满足 Di Rosa 准则 [32]. 因此, 这两对跃迁不能用于激光冷却 BH 分子. 但 $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态是 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 光学循环的中间态, 本文计算获得 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$ 和 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$ 的总 $A_{v'v''}$ 分别为 $\gamma_{\Sigma} = 8.05 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$, $\gamma_1 = 0.3686 \text{ s}^{-1}$ 和 $\gamma_2 = 0.0090 \text{ s}^{-1}$, 因此 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$ 和 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$ 的振动分支损失比分别为 $\eta_1 = \gamma_1/\gamma_{\Sigma} < 4.6 \times 10^{-8}$ 和 $\eta_2 = \gamma_2/\gamma_{\Sigma} < 1.2 \times 10^{-9}$. 这两个值远小于 YO 的实验值 4.0×10^{-4} [33], 这表明 $a^3\Pi_{0+}$ 和 $a^3\Pi_1$ 态对 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 的影响可以忽略.

Douglass 等 [9] 报道了 $A^1\Pi(v' = 0 - 2, J' = 3, +)$ 的 τ_v 分别为 (127 ± 10) , (146 ± 12) , $(172 \pm 14) \text{ ns}$, 本文计算的相应值仅比实验值小 2.42, 1.50 和 5.38 ns, 可见它们符合得很好. 因此, 本文计算的 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 3, J' = 1, +)$ 的 τ_v 也应是精确的, 另外本文计算的 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 3, J' = 1, +) \rightarrow$

$X^1\Sigma_{0+}^+(v'', J'' = 1, -)$ 的辐射宽度 $\Gamma_r[\Gamma_r = (2\pi c\tau_v)^{-1}]$ 分别为 4.27×10^{-5} , 3.69×10^{-5} , 3.01×10^{-5} 和 $2.16 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$, 这些结果表明可以快速激光冷却 BH 分子.

为了评价激光冷却效果, 基于 $A^1\Pi_1$ 态的 $\tau_{00} = 125.28 \text{ ns}$, $T_{\text{Doppler}} = h/(4\pi k_B \tau_v)$, $\lambda_{00} = 432.45 \text{ nm}$ 和 $T_{\text{Recoil}} = h^2/(mk_B \lambda^2)$, 我们计算了主冷却循环 $A^1\Pi_1(v' = 0, J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0, J'' = 1, -)$ 的 $T_{\text{Doppler}} = 30.48 \text{ }\mu\text{K}$ 和 $T_{\text{Recoil}} = 8.52 \text{ }\mu\text{K}$, 这意味本文所提出的冷却方案可以将 BH 分子冷却到微开尔文的温度.

4 结 论

本文利用 icMRCI + Q 方法连同 AV5Z 和 AV6Z 基组获得了 BH 分子 8 个 Λ -S 态和 23 个 Ω 态的势能曲线, 计算中修正了 SR 和 SOC 效应、CV 效应和基组截断带来的误差. 利用 icMRCI 方法和 AV6Z 基组计算了最低的 5 个 Ω 态 ($X^1\Sigma_{0+}^+$, $a^3\Pi_{0+}$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$ 和 $A^1\Pi_1$) 之间的跃迁偶极矩. 并且本文获得的光谱常数与现有的实验值符合得很好. 基于上述的势能曲线和跃迁偶极矩, 获得了 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 2, J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 2, J'' = 1, -)$ 跃迁较大的 $A_{v'v''}$ 和 $gf_{v'J' \leftarrow v''J''}$ 、高度对角化分布的 $R_{v'v''}$ 、 $A^1\Pi_1$ 态较短的 $\tau_{v'}$, 这些条件可以保证快速高效的激光冷却 BH 分子. 计算表明: $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$ 和 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$ 的振动分支损失比都很小, 可以忽略不计. 利用 $A^1\Pi_1(v' = 0 - 1, J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0 - 3, J'' = 1, -)$ 跃迁激光冷却 BH 分子所需的 3 束泵浦激光在可见光范围 (主泵激光 $\lambda_{00} = 432.45 \text{ nm}$, 2 束再泵浦激光 $\lambda_{10} = 479.67 \text{ nm}$ 和 $\lambda_{21} = 481.40 \text{ nm}$). 此外, 本文预测的 $A^1\Pi_1(v' = 0, J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0, J'' = 1, -)$ 的 T_{Doppler} 和 T_{recoil} 分别为 30.48 和 $8.52 \text{ }\mu\text{K}$. 这些结果表明 BH 是潜在的激光冷却候选分子, 并且可以达到微开尔文的冷却温度.

参考文献

[1] Engvold O 1970 *Sol. Phys.* **11** 183

- [2] Karthikeyan B, Raja V, Rajamanickam N, Bagare S P 2006 *Astrophys. Space. Sci.* **306** 231
- [3] Karthikeyan B, Bagare S P, Rajamanickam N, Raja V 2009 *Astropart. Phys.* **31** 6
- [4] Hendricks R J, Holland D A, Truppe S, Sauer B E, Tarbutt M R 2014 *Front. Phys.* **2** 51
- [5] Gao Y F, Gao T 2015 *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17** 10830
- [6] Johns J W C, Grimm F A, Porter R F 1967 *J. Mol. Spectrosc.* **22** 435
- [7] Luh W T, Stwalley W C 1983 *J. Mol. Spectrosc.* **102** 212
- [8] Pianalto F S, O'Brien L C, Keller P C, Bernath P F 1988 *J. Mol. Spectrosc.* **129** 348
- [9] Douglass C H, Nelson H H, Rice J K 1989 *J. Chem. Phys.* **90** 6940
- [10] Fernando W T M L, Bernath P F 1991 *J. Mol. Spectrosc.* **145** 392
- [11] Persico M 1994 *Mol. Phys.* **81** 1463
- [12] Clark J, Konopka M, Zhang L M, Grant E R 2001 *Chem. Phys. Lett.* **340** 45
- [13] Shayesteh A, Ghazizadeh E 2015 *J. Mol. Spectrosc.* **312** 110
- [14] Brazier C R 1996 *J. Mol. Spectrosc.* **177** 90
- [15] Petsalakis I D, Theodorakopoulos G 2006 *Mol. Phys.* **104** 103
- [16] Petsalakis I D, Theodorakopoulos G 2007 *Mol. Phys.* **105** 333
- [17] Miliordos E, Mavridis A 2008 *J. Chem. Phys.* **128** 144308
- [18] Wang X Q, Yang C L, Su T, Wang M S 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6873 (in Chinese) [王新强, 杨传路, 苏涛, 王美山 2009 物理学报 **58** 6873]
- [19] Koput J 2015 *J. Comput. Chem.* **36** 2219
- [20] Yan P Y, Yan B 2016 *Commun. Comput. Chem.* **4** 109
- [21] Werner H J, Knowles P J, Lindh R, Manby F R, Schütz M 2010 *MOLPRO*, version 2010.1, a package of ab initio programs, <http://www.molpro.net> [2021-12-8]
- [22] Van Mourik T, Dunning Jr T H 2000 *Int. J. Quantum Chem.* **76** 205
- [23] Langhoff S R, Davidson E R 1974 *Int. J. Quantum Chem.* **8** 61
- [24] Peterson K A, Dunning Jr T H 2002 *J. Chem. Phys.* **117** 10548
- [25] De Jong W A, Harrison R J, Dixon D A 2001 *J. Chem. Phys.* **114** 48
- [26] Wolf A, Reiher M, Hess B A 2002 *J. Chem. Phys.* **117** 9215
- [27] Oyeyemi V B, Krisiloff D B, Keith J A, Libisch F, Pavone M, Carter E A 2014 *J. Chem. Phys.* **140** 044317
- [28] Berning A, Schweizer M, Werner H J, Knowles P J, Palmieri P 2000 *Mol. Phys.* **98** 1823
- [29] Le Roy R J 2017 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **186** 167
- [30] Kramida A E, Ryabtsev A N 2007 *Phys. Scr.* **76** 544
- [31] Strasburger K 2020 *Phys. Rev. A* **102** 052806
- [32] Di Rosa M D 2004 *Eur. Phys. J. D* **31** 395
- [33] Hummon M T, Yeo M, Stuhl B K, Collopy A L, Xia Y, Ye J 2013 *Phys. Rev. Lett.* **110** 143001

附录 A

$A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$, $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_2(v'', J'' = 2, -)$ 的跃迁数据.

表 A1 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table A1. The transition wavenumber ($\tilde{\nu}$), Einstein A -coefficients ($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_{0+}(v'', J'' = 1, -)$ transitions.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	12075.98	0.3676	0.9972	828.68	1.13×10^{-8}	1-0	14179.31	0.0735	0.2226	705.76	1.65×10^{-9}
0-1	9569.59	9.66×10^{-4}	0.0026	1045.72	4.74×10^{-11}	1-1	11672.92	0.2538	0.7683	857.29	8.38×10^{-9}
0-2	7187.61	4.89×10^{-5}	1.33×10^{-4}	1392.27	4.26×10^{-12}	1-2	9290.93	0.0029	0.0087	1077.08	1.50×10^{-10}
0-3	4934.38	4.57×10^{-7}	1.24×10^{-6}	2028.04	8.44×10^{-14}	1-3	7037.71	1.46×10^{-4}	4.42×10^{-4}	1421.93	1.33×10^{-11}
0-4	2817.03	1.01×10^{-9}	2.75×10^{-9}	3552.36	5.74×10^{-16}	1-4	4920.36	8.07×10^{-9}	2.44×10^{-8}	2033.82	1.50×10^{-15}
2-0	16026.52	0.0113	0.0405	624.41	1.98×10^{-10}	3-0	17524.04	0.0021	0.0100	571.05	3.06×10^{-11}
2-1	13520.13	0.1294	0.4636	740.16	3.18×10^{-9}	3-1	15017.65	0.0356	0.1696	666.36	7.09×10^{-10}
2-2	11138.15	0.1325	0.4747	898.45	4.80×10^{-9}	3-2	12635.66	0.1302	0.6210	791.97	3.67×10^{-9}
2-3	8884.92	0.0055	0.0196	1126.30	3.12×10^{-10}	3-3	10382.44	0.0349	0.1666	963.85	1.46×10^{-9}
2-4	6767.57	4.53×10^{-4}	0.0016	1478.69	4.45×10^{-11}	3-4	8265.09	0.0059	0.0279	1210.77	3.86×10^{-10}

表 A2 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table A2. The transition wavenumber ($\tilde{\nu}$), Einstein A -coefficients ($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_1(v'', J'' = 1, -)$ transitions.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	12100.86	0.0079	0.8807	826.98	2.43×10^{-10}	1-0	14204.19	3.45×10^{-6}	3.11×10^{-4}	704.52	7.68×10^{-14}
0-1	9594.01	0.0010	0.1160	1043.06	5.08×10^{-11}	1-1	11697.33	0.0083	0.7513	855.50	2.74×10^{-10}
0-2	7211.56	2.97×10^{-5}	0.0033	1387.65	2.57×10^{-12}	1-2	9314.88	0.0026	0.2335	1074.31	1.34×10^{-10}
0-3	4957.84	2.66×10^{-7}	2.96×10^{-5}	2018.44	4.86×10^{-14}	1-3	7061.17	1.61×10^{-4}	0.0145	1417.20	1.45×10^{-11}
0-4	2839.95	3.00×10^{-9}	3.31×10^{-7}	3523.69	1.65×10^{-15}	1-4	4943.27	4.23×10^{-6}	3.81×10^{-4}	2024.39	7.78×10^{-13}
2-0	16051.40	6.68×10^{-5}	0.0055	623.44	1.17×10^{-12}	3-0	17548.92	1.31×10^{-5}	0.0012	570.24	1.91×10^{-13}
2-1	13544.55	1.70×10^{-4}	0.0141	738.83	4.17×10^{-12}	3-1	15042.06	6.99×10^{-5}	0.0065	665.28	1.39×10^{-12}
2-2	11162.10	0.0066	0.5514	896.53	2.40×10^{-10}	3-2	12659.61	0.0013	0.1243	790.48	3.73×10^{-11}
2-3	8908.38	0.0045	0.3745	1123.34	2.56×10^{-10}	3-3	10405.90	0.0023	0.2161	961.68	9.60×10^{-11}
2-4	6790.49	6.16×10^{-4}	0.0511	1473.70	6.01×10^{-11}	3-4	8288.00	0.0050	0.4692	1207.42	3.28×10^{-10}

表 A3 $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_2(v'', J'' = 2, -)$ 跃迁的跃迁波数 ($\tilde{\nu}$)、爱因斯坦 A 系数 ($A_{v'v''}$)、振动分支比 ($R_{v'v''}$)、波长 ($\lambda_{v'v''}$)、加权的吸收振子强度 ($gf_{v'v''}$)

Table A3. The transition wavenumber ($\tilde{\nu}$), Einstein A -coefficients ($A_{v'v''}$), vibrational branching ratios ($R_{v'v''}$), wavelength ($\lambda_{v'v''}$), and weighted absorption oscillator strengths ($gf_{v'v''}$) for the $A^1\Pi_1(v', J' = 1, +) \rightarrow a^3\Pi_2(v'', J'' = 2, -)$ transitions.

$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$	$v'-v''$	$\tilde{\nu}/\text{cm}^{-1}$	$A_{v'v''}/s$	$R_{v'v''}$	$\lambda_{v'v''}/\text{nm}$	$gf_{v'v''}$
0-0	12067.90	3.88×10^{-4}	0.6871	829.23	1.20×10^{-11}	1-0	14171.22	8.91×10^{-5}	0.1036	706.16	1.99×10^{-12}
0-1	9561.42	1.72×10^{-4}	0.3044	1046.61	8.46×10^{-12}	1-1	11664.75	5.46×10^{-4}	0.6349	857.89	1.80×10^{-11}
0-2	7179.36	3.94×10^{-6}	0.0070	1393.87	3.43×10^{-13}	1-2	9282.68	2.21×10^{-4}	0.2576	1078.04	1.16×10^{-11}
0-3	4926.05	8.36×10^{-7}	0.0015	2031.47	1.55×10^{-13}	1-3	7029.38	2.11×10^{-6}	0.0024	1423.61	1.92×10^{-13}
0-4	2808.62	5.91×10^{-11}	1.05×10^{-7}	3563.00	3.37×10^{-17}	1-4	4911.95	1.21×10^{-6}	0.0014	2037.30	2.26×10^{-13}
2-0	16018.44	5.92×10^{-5}	0.1139	624.73	1.04×10^{-12}	3-0	17515.95	5.21×10^{-7}	0.0013	571.31	7.64×10^{-15}
2-1	13511.96	3.18×10^{-6}	0.0061	740.61	7.82×10^{-14}	3-1	15009.48	7.09×10^{-5}	0.1809	666.72	1.42×10^{-12}
2-2	11129.90	2.58×10^{-4}	0.4972	899.12	9.38×10^{-12}	3-2	12627.41	1.22×10^{-4}	0.3118	792.49	3.45×10^{-12}
2-3	8876.59	1.92×10^{-4}	0.3688	1127.36	1.09×10^{-11}	3-3	10374.10	4.11×10^{-5}	0.1049	964.63	1.72×10^{-12}
2-4	6759.16	6.85×10^{-6}	0.0132	1480.53	6.74×10^{-13}	3-4	8256.68	1.36×10^{-4}	0.3473	1212.00	8.98×10^{-12}

Theoretical study on spectroscopic properties of 8 Λ -S and 23 Ω states for BH molecule*

Xing Wei^{1)†} Li Sheng-Zhou¹⁾ Sun Jin-Feng²⁾
Li Wen-Tao³⁾ Zhu Zun-Lüe²⁾ Liu Feng¹⁾

1) (*College of Physics and Electronic Engineering, Xinyang Normal University, Xinyang 464000, China*)

2) (*School of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453000, China*)

3) (*Weifang University of Science and Technology, Shouguang 262700, China*)

(Received 7 January 2022; revised manuscript received 7 February 2022)

Abstract

In this work, the potential energy curves of eight low electronic states ($X^1\Sigma^+$, $a^3\Pi$, $A^1\Pi$, $b^3\Sigma^-$, $2^3\Pi$, $1^3\Sigma^+$, $1^5\Sigma^-$, and $1^5\Pi$) and twenty-three Ω states of BH molecule, and the transition dipole moments among the $X^1\Sigma_{0+}^+$, $a^3\Pi_{0+}$, $a^3\Pi_1$, $a^3\Pi_2$, and $A^1\Pi_1$ states are calculated by using the internally contracted multireference configuration interaction (icMRCI) method. In order to obtain the accurate potential energy curve, the errors caused by single and double electron excitation, core-valence correlation effects, relativistic effects and basis set truncation are corrected. The spectral and transition data of BH molecule are in good agreement with the available theoretical and experimental data. The calculation results show that the $A^1\Pi_1(v' = 0-2, J' = 1, +) \rightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0-2, J'' = 1, -)$ transition has large Einstein A -coefficient, weighted absorption oscillator strength, and highly diagonal vibrational branching ratio $R_{v'v''}$, and the excited state $A^1\Pi_1(v' = 0, 1)$ have short spontaneous radiation lifetimes. Moreover, the effects of $a^3\Pi_{0+}$ and $a^3\Pi_1$ states on $A^1\Pi_1(v' = 0) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0)$ cycle transition can be ignored. Therefore, according to the $A^1\Pi_1(v' = 0-1, J' = 1, +) \leftrightarrow X^1\Sigma_{0+}^+(v'' = 0-3, J'' = 1, -)$ cycle transition, we propose to apply one main cooling laser ($\lambda_{00} = 432.45$ nm) and two repumping lasers ($\lambda_{10} = 479.67$ nm and $\lambda_{21} = 481.40$ nm) to laser cooling BH molecules, and evaluation of the cooling effect.

Keywords: potential energy curves, spectroscopic parameters, spin-orbit coupling, transition dipole moments

PACS: 31.50.Df, 95.30.Ky, 31.15.aj, 33.70.Ca

DOI: 10.7498/aps.71.20220038

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 61275132, 11274097), the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 212300410233), the Key Scientific Research Program of Higher Education of Henan Province, China (Grant No. 21A140023), and the Nanhu Scholars Program for Young Scholars of XYNU, China.

† Corresponding author. E-mail: wei19820403@163.com