

D - 40

UNIVERZITET U NOVOM SADU - PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET  
KATEDRA ZA FIZIKU

---



D I P L O M S K I R A D

ÅNGSTRÖM-OV SISTEM TRAKA

$^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  MOLEKULA

Kandidat:

Guti Andraš

Novi Sad 1973.

---

Koristim se prilikom da izrazim  
svoju zahvalnost vanrednom profesoru  
Dr. Ivanu Janiću i Dr. Jevremu Janjiću  
za njihove savete i pomoći u izradi  
diplomskog rada.



## S A D R Ž A J

UVOD . . . . .	1
I TEORIJSKI DEO	
1. Rotacija i oscilacija dvoatomskim molekulama . . . . .	3
a) Kruti rotator . . . . .	3
b) Harmonijski oscilator . . . . .	7
c) Anharmonijski oscilator . . . . .	10
d) Elastični rotator . . . . .	17
e) Oscilujudi rotator . . . . .	19
f) Simetrična čigra . . . . .	22
2. Elektronska stanja i elektronski prelazi . . . . .	25
a) Elektronska energija i ukupna energija . . . . .	25
b) Oscilatorna struktura elektronskih prelaza . .	27
c) Rotaciona struktura elektronskih traka . . . . .	29
3. Multipletna struktura elektronskih stanja . . . . .	33
II EKSPERIMENTALNI DEO	
1. Snimanje spektra . . . . .	35
2. Određivanje čela traka . . . . .	36
3. Obrada rezultata - oscilatorna analiza . . . . .	36
4. Disocijacione energije . . . . .	39
5. Analiza rotacione strukture . . . . .	41
a) Rotaciona struktura trake (0,0) . . . . .	41
b) Rotaciona struktura trake (0,1) . . . . .	44
6. Rotacione konstante, moment inercije i ravnotežno rastojanje izmedju atoma. . . . .	47
7. Konstrukcija potencijalne krive . . . . .	51
ZAKLJUČAK. . . . .	55
LITERATURA	

## U V O D

Ispitivanje molekulskih spektara daje vredne podatke o strukturi molekula, koje su važne za fiziku, astrofiziku i fizičku hemiju. Analizom molekulskih spektara mogu se direktno izračunati diskretni energijski nivoi molekula. Iz ovih se može dobiti konkretna slika o elektronskoj strukturi, o rotaciji jezgara unutar molekula i o njihovoj vibraciji (oscilovanju). Ispitivanje elektronske strukture molekula omogućava teorijsko objašnjenje hemijske valence. Iz vibracionih frekvencija moguće je izračunati sile, koje deluju među atomima u molekulima, kao i disocijacione energije. Na osnovu rotacionih frekvencija mogu se dobiti vrlo tačni podaci za geometrijski raspored jezgara unutar molekula - naročito za međusobno rastojanje jezgara.

Na osnovu ovih ispitivanja gasova može se objasniti više fizičke i hemijske osobine tih gasova (specifična topelota, magnetna susceptibilitet itd.). Na osnovu ovih podataka može se unapred teorijski proračunati hemijska ravnoteža i moguće je ispitivanje elementarnih hemijskih procesa.

Rezultat ispitivanja molekulskih spektara daje dokaze za postojanje nekih molekula, koji su bili u hemiji nepoznati, ili njihovo postojanje bilo nesigurno, kao na primer  $\text{CH}_2$ ,  $\text{OH}$ ,  $\text{C}_2$ ,  $\text{Ne}_2$  itd.

Ispitivanje spektara dvoatomskih molekula važno je i za nuklearnu fiziku, jer neke nuklearne osobine karakteristično utiču na takav spektar. Ispitivanjem takvih spektara mogu se u nekim slučajevima identifikovati neki retki izotopi.

Za astrofiziku isto tako je od velike koristi ispitivanje molekulske spektara. Na osnovu tih spektara mogu se detektovati postojanje određenih molekula na nekim zvezdama, planetama, kometama i u interstelarnom prostoru, kao i izvući određene zaključke o fizičkim stanjima koje vladaju u tom prostoru.

Molekul ugljen monoksida detektovan u stelarnim izvorima, javlja se kao produkt sagorevanja i zbog njegove izoelektronske strukture sa  $N_2$  (koji čini glavni deo zemljine atmosfere) bio je cilj mnogih ispitivanja.

U ovom radu je ispitivan Ångström-ov sistem elektronskog spektra  $^{12}_C\ ^{16}_O$  molekula u intervalu od  $6200 \text{ \AA}$  do  $4500 \text{ \AA}$ .

1875. god. Ångström i Thalen detektovali su u acetilenском пламену группу трака које се прореджују према љубичастом делу спектра и налазе се у области  $6200 - 4123 \text{ \AA}$ . Овој групи трака дали су назив "Други позитивни систем". Педесет година касније, Birge је показао да овај систем припада  $B^1\Sigma - A^1\Pi$  elektronsком прелазу CO molekula.

I

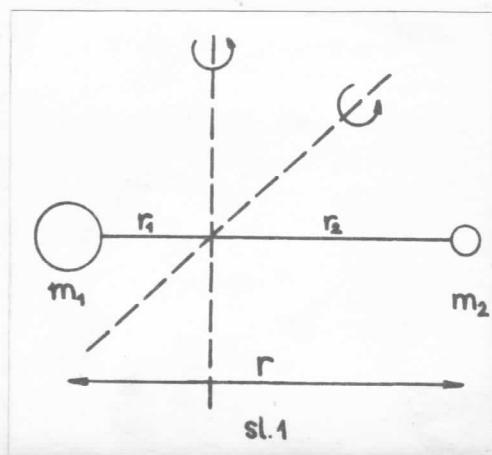
TEORIJSKI DEO

## 1. ROTACIJA I OSCILACIJA DVOATOMSKIH MOLEKULA

### a) KRUTI ROTATOR

MOLEKUL KAO KRUTI ROTATOR. Najjednostavniji model obrtnog molekula je kruti rotator (slika 1). Pretpostavljajući da su atomi materijalne tačke  $m_1$  i  $m_2$  koje se nalaze na međusobnom stalanom rastojanju  $r$ , zanemaruje se sa jedne strane konačna dimenzija atoma,

(što je i opravdano, jer masa atoma se praktično nalazi skoncentrisana u jezgru, čija je dimenzija reda veličine  $10^{-12}$  cm, dok je dimenzija atoma red veličine  $10^{-8}$  cm) a sa druge strane se ne uzima u obzir, da atomi u stvari nisu kruto vezani. U mehanici rotaciona energija nekog krutog tela se izračunava po formuli:



sl.1

$$E = \frac{1}{2} I \omega^2, \quad (1)$$

gde je  $I$ , moment inercije sistema u odnosu na osu oko koje se vrši rotacija. Veza izmedju uglovne brzine  $\omega$ , i rotacione frekvencije  $\nu_{\text{rot}}$  data je izrazom:

$$\omega = 2\pi\nu_{\text{rot}}. \quad (2)$$

Moment impulsa sistema je  $P = I\omega$ . Tako izraz (1) postaje:

$$E = \frac{P^2}{2I}. \quad (1a)$$

Oscilatorna energija ustvari zavisi od momenta inercije:

$$I = \sum m_i r_i^2 = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2, \quad (3)$$

gde je  $r_1 = \frac{m_2}{m_1+m_2} r$  i  $r_2 = \frac{m_1}{m_1+m_2} r$ .

Uvrštenjem poslednjih izraza u (3) dobija se:

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2 = \mu r^2, \quad (4)$$

gde je  $\mu$  redukovana masa sistema.

ENERGIJSKI NIVOI. Rešavanjem Schrödinger-ove jednačine

$$\Delta \Psi + \frac{8\bar{u}^2 m}{h^2} (E - U) \Psi = 0. \quad (5)$$

za  $m = \mu$  i  $U = 0$  ( $U = 0$  sve dotle dok je rotator krut):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} + \frac{8\bar{u}^2 \mu}{h^2} E \Psi = 0, \quad (6)$$

gde je  $x^2 + y^2 + z^2 = r^2$  konstantna veličina.

Regularna rešenja  $\Psi$  (jednoznačna, konačna i neprekidna funkcija) postoje samo za odredjene vrednosti  $E$ . Svojstvene vrednosti su:

$$E = \frac{h^2 J(J+1)}{8\bar{u}^2 \mu r^2} = \frac{h^2 J(J+1)}{8\bar{u}^2 I}, \quad (7)$$

gde je  $J$  rotacioni kvantni broj, koji može da ima vrednosti  $0, 1, 2, \dots$ . Kako moment impulsa ima vrednost:

$$P = \frac{h}{2\bar{u}} \sqrt{J(J+1)}, \quad (8)$$

rotaciona frekvencija

$$\nu_{\text{rot}} = \frac{\hbar}{4\bar{u}^2 I} \sqrt{J(J+1)} \quad (9)$$

raste linearno sa  $J$ . za razliku od energije diskretnih nivoa, koja raste kvadratno sa  $J$ .

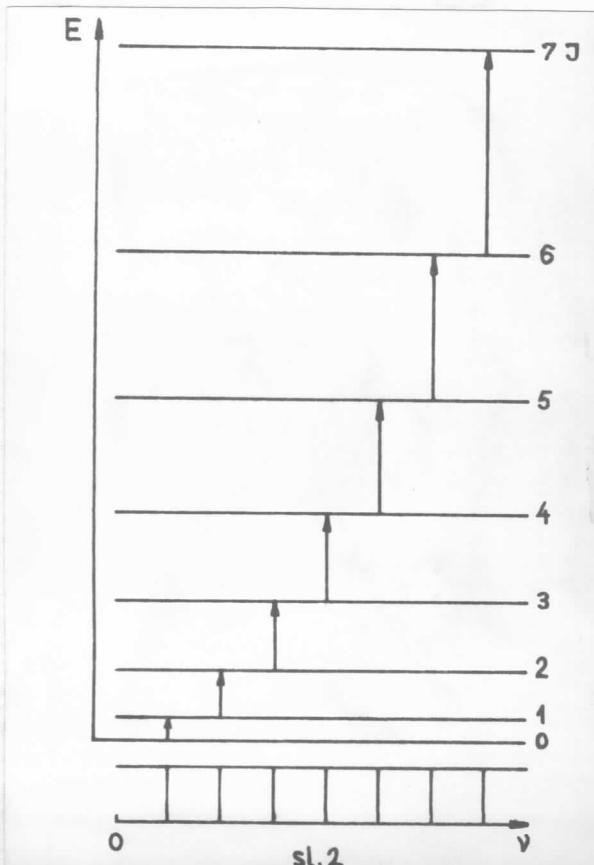
Na slici 2 prikazana je u glavnim crtama energijska šema i spektar koji nastaje kod krutog rotatora u slučaju apsorpcije.

**SPEKTAR KOD KRUTOG ROTATORA.** Prema klasičnoj elektrodinamici neko intramolekularno kretanje dovodi do emisije svetlosti samo onda, kada se sa kretanjem promeni moment električnog dipola. Kod krutog rotatora emisija nastaje onda, kada rotirajuća materijalna tačka poseduje nanelektrisanje, ili permanentni električni dipolni moment.

Kod dvoatomskih molekula, sastavljenih od različitih atoma

(kao CO) javlja se permanentni dipolni moment, jer se kod ovakvih molekula težište pozitivnih i negativnih nanelektrisanja ne poklapa. Električni moment dipola kod takvih molekula usmeren je u pravcu ose koje spaja jezgra. U toku rotacije, projekcija dipolnog momenta na jedan odredjeni pravac, se menja periodično sa frekvencijom koja je jednaka frekvenciji rotacije. Tako, prema klasičnoj teoriji rotator bi zračio svetlost frekvencije  $\nu_{\text{rot}}$ .

Prema kvantnoj teoriji do emisije kvanta svetlosti dolazi onda, kada rotator prelazi <sup>iz</sup> energetskog stanja sa višom energijom  $E'$ , u energetsko stanje sa nižom energijom  $E''$ .



Apsorpcija se dešava obrnuto. Talasni broj emitovanog ili apsorbovanog kvanta jednak je:

$$\tilde{\nu} = \frac{E'}{hc} - \frac{E''}{hc}. \quad (10)$$

Uvodjenjem oznake za rotacioni term  $F(J)$ , koji je prema jednačini (7) određen sa izrazom

$$F(J) = \frac{E}{hc} = \frac{h}{8\bar{u}^2 c I} J(J+1) = BJ(J+1), \quad (11)$$

gde je

$$B = \frac{h}{8\bar{u}^2 c I} \quad (12)$$

rotaciona konstanta.

Korišćenjem jednačine (11), jednačina (10) postaje:

$$\tilde{\nu} = F(J') - F(J'') = BJ'(J'+1) - BJ''(J''+1). \quad (13)$$

Da bi se izračunale izračene ili apsorbovane frekvencije, treba poznavati pravilo izbora za kvantni broj  $J$ .

Izračunavanjem matričnih elemenata momenta dipola, dobija se da oni nestaju - jednaki su nuli - sem, ako je  $J' = J'' \pm 1$ , odnosno

$$\Delta J = J' - J'' = \pm 1. \quad (14)$$

Pri takvom izboru oznaka (gornje stanje obeleženo je sa jednom crtom, donje sa dva) kod rotatora je uvek  $J' > J''$ , zato se uzima u obzir samo  $\Delta J = +1$ . Tako se dobija da su izračene ili apsorbovane linije rotatora:

$$\tilde{\nu} = F(J'+1) - F(J'') = B(J'+1)(J'+2) - BJ''(J''+1) = 2B(J'+1),$$

gde  $J'$  može da prima celobrojne 0, 1, 2, ... vrednosti.  
Jednačina

$$\tilde{\nu} = 2B(J+1) \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

predstavlja spektar krutog rotatora, koji se sastoji iz serije ekvidistantnih linija. Prva linija se nalazi kod ( $J=0$ )  $2B$  i rastojanje uzastopnih linija je konstantno  $2B$ . (slika 2)

### b ) HARMONIJSKI OSCILATOR.

MOLEKUL KAO HARMONIJSKI OSCILATOR. Najjednostavnija pretpostavka za oscilovanje dvoatomskih molekula je, da atomi osciluju harmonički na pravoj, koja spaja te atome. Takvo kretanje atoma se opisuje kao harmoničko oscilovanje jedne materijalne tačke oko ravnotežnog položaja - model harmonijskog oscilatora.

U klasičnoj mehanici prosto harmoničko kretanje je predstavljeno kretanjem materijalne tačke mase  $m$ , pod uticajem privlačne sile  $F$ , koja je usmerena uvek ka ravnotežnom stanju i srazmerna je rastojanju  $x$  (elongacija) od ravnotežnog položaja.

$$F = -kx = m \frac{d^2x}{dt^2}, \quad (16)$$

$k$  je direkciona konstanta. Rešenje diferencijalne jednačine je:

$$x = x_0 \sin(2\bar{\omega}v_{osc} t + \varphi), \quad (17)$$

gde je:

$$v_{osc} = \frac{1}{2\bar{\omega}} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (18)$$

frekvencija oscilovanja,  $x_0$  - amplituda oscilovanja i  $\varphi$  - početna faza. Kako je sila negativni izvod potencijalne energije iz  $F = -kx$ , sledi:

$$U = \frac{1}{2} kx^2 = 2\bar{\omega}^2 m v_{osc}^2 x^2. \quad (19)$$

harmonički

Prema ovoj jednačini može se ~~izkušnji~~ oscilator odrediti i kao sistem čija je potencijalna energija srazmerna kvadru rastojanja od ravnotežnog položaja, tj. kriva potencijalne energije je parabola (Slika 3).

Povratna sila, s kojom atomi jednog dvoatomskog molekula deluju međusobno, kada su oni izvedeni iz ravnotežnog stanja srazmerna je približno promeni rastojanja jezgara. Ako se to prihvati kao aproksimacija, onda atomi vrše harmonijske

oscilacije unutar molekula.

Za prvi atom mase  $m_1$  važi jednačina

$$m_1 \frac{d^2 r_1}{dt^2} = -k(r - r_e),$$

za drugi analogno  $m_2 \frac{d^2 r_2}{dt^2} = -k(r - r_e)$ , gde su  $r_1$  i  $r_2$  rastojanja atoma od težišta (slika 1),  $r$  je međusobno rastojanje atoma, a  $r_e$  je ravnotežno rastojanje jezgara. Korišćenjem jednačine (3) i bilo koje od ovih jednačina se dobija:

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \frac{d^2 r}{dt^2} = -k(r - r_e).$$

Ako se uvede redukovana masa  $\mu$ , a pod znakom diferencijala umesto  $r$  se stavi  $(r - r_e)$ . Što je dozvoljeno zbog  $r_e = \text{const.}$  dobija se

$$\mu \frac{d^2(r - r_e)}{dt^2} = -k(r - r_e). \quad (20)$$

Ova jednačina je ekvivalentna sa jednačinom (16), stot razlikom da je sada umesto  $x$  stavljeno  $(r - r_e)$ . Tako je svedena oscilacija dvaju atoma jednog molekula na oscilovanje jedne materijalne tačke mase  $\mu$ .

**ENERGIJSKI NIVOI.** Kvantnomehaničko rešenje problema oscilovanja jezgara dvoatomskog molekula se dobija stavljanjem vrednosti prema (19) za potencijalnu energiju u talasnu jednačinu.

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} + \frac{8\bar{u}^2 \mu}{h^2} (E - \frac{1}{2} kx^2) \Psi = 0. \quad (21)$$

Rešenja ove jednačine su različita od nula za sledeće diskrette vrednosti  $E$ :

$$E(v) = \frac{\hbar}{2\bar{u}} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \left(v + \frac{1}{2}\right) = \hbar \nu_{\text{osc}} \left(v + \frac{1}{2}\right), \quad (22)$$

gde je  $v$  - oscilatorni kvantni broj, i ima celobrojne vrednosti ( $v = 0, 1, 2, \dots$ )

Ekvidistantni energijski nivoi harmonijskog oscilatora prikazani su na slici 3. Apscisa isprekidane krive predstavlja rastojanje od ravnotežnog (minimum) stanja.

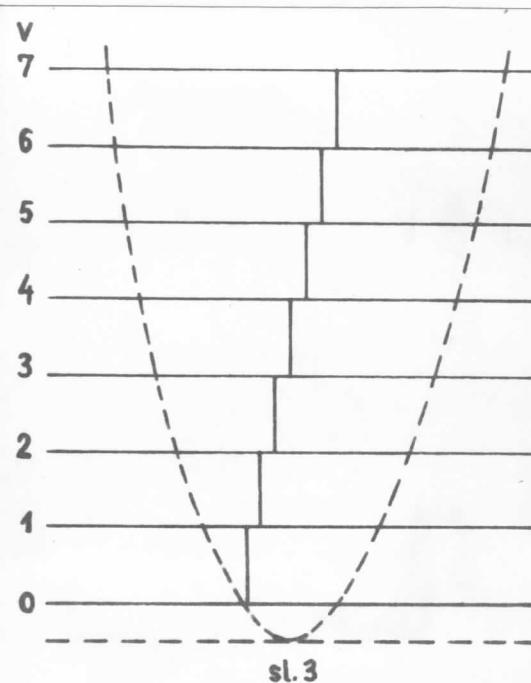
Oscilatorni termovi su predstavljeni kao

$$G(v) = \frac{E(v)}{hc} = \frac{\nu_{osc}}{c} (v + \frac{1}{2}). \quad (23)$$

$\frac{\nu_{osc}}{c}$  se često obeležava kao  $\omega$ .  
Tako

$$G(v) = \omega (v + \frac{1}{2}), \quad (24)$$

gde je  $\omega$  oscilatorna frekvencija  
data u  $\text{cm}^{-1}$ .



SPEKTAR HARMONIJSKOG OSCILATORA. Ako molekul poseduje dipolni momenata u ravnotežnom stanju, što je slučaj kod molekula nejednakih jezgara, sa promenom međusobnog rastojanja jezgara menja se i moment dipola. Prema klasičnoj elektrodinamici u tom slučaju se dešava emisija ili apsorpcija, ako se predpostavi da se moment dipola u prvoj aproksimaciji menja linearno sa rastojanjem rezgara.

Prema kvantnoj teoriji do emisije dolazi tako, da oscilator prelazi iz stanja sa većom energijom u stanje sa manjom energijom. Apsorpcija je obrnut proces. Talasni broj emitovane ili apsorbovane svetlosti dat je sa izrazom:

$$\tilde{\nu} = \frac{E(v')}{hc} - \frac{E(v'')}{hc} = G(v') - G(v''). \quad (25)$$

Izračunavanjem matričnih elemenata momenta dipola, dobija se pravilo izbora za rotacioni kvantni broj kod harmonijskog oscilatora:

$$\Delta V = V' - V'' = \pm 1. \quad (26)$$

Kod sistema koji nije tačno harmonijski oscilator, mogući su prelazi i za  $|\Delta v| > 1$ .

Koristeći se formulom (24) i pravilom izbora (26) sledi:

$$\tilde{V} = G(v+1) - G(v) = \omega. \quad (27)$$

Frekvencija emitovane svetlosti srazmerna je frekvenciji oscilatora  $V_{osc}(=c\omega)$  kao i prema klasičnoj teoriji. Dozvoljeni prelazi su predstavljeni na slici 3, sa vertikalnim linijama. Kako jednačina (27) važi za bilo koju početnu vrednost  $v$ , različiti prelazi se dešavaju sa istom frekvencijom.

Uporedjivanjem dosada dobivenih teorijskih zaključaka za spektar krutog rotatora i harmonijskog oscilatora sa eksperimentalnim rezultatima apsorpcionih spektara halogenskih hidrida, (primer HCl), dolazi se do sledećih zaključaka: U daleko infracrvenom delu spektra, javlja se spektar, koji se sastoji iz serije skoro ekvidistantnih linija, a to je rotacioni spektar. U bliskom infracrvenom delu spektar se, uistvari sastoji iz jedne jake linije - oscilatorni spektar, jezgra vrše skoro harmonijske oscilacije. Na osnovu ove pretpostavke, pojave traka slabijih intenziteta, dva-tri puta veće frekvencije, mogu se povezati sa odstupanjima od harmonijskog oscilatora.

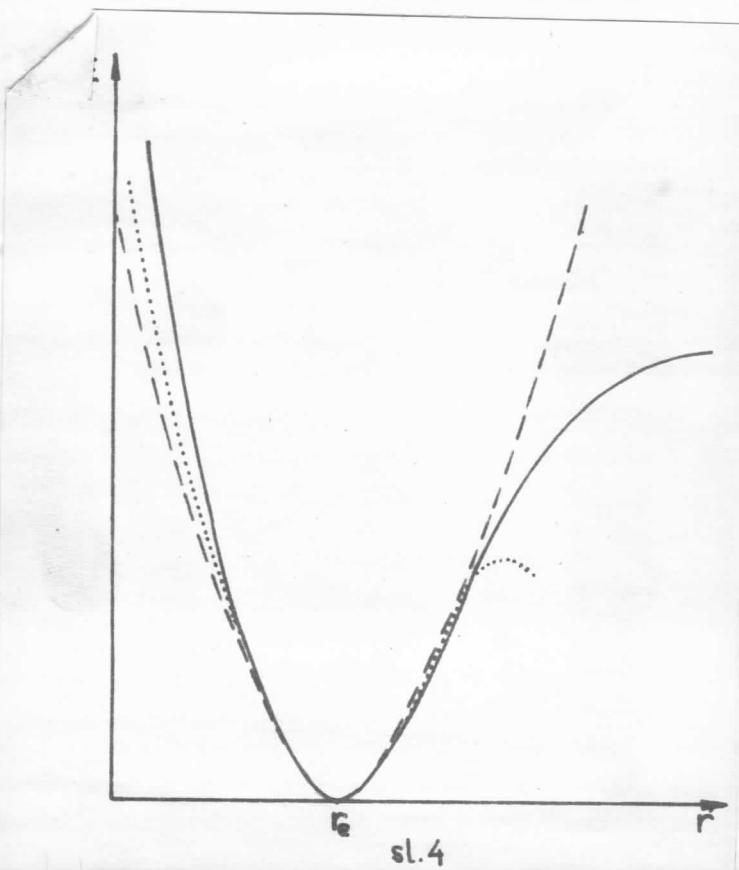
### c) ANHARMONIJSKI OSCILATOR

MOLEKUL KAO ANHARMONIJSKI OSCILATOR. Prema jednačini (19) harmonijski oscilator karakteriše potencijalna kriva koja ima oblik parabole. Potencijalna energija, kao i elastična sila raste sa rastojanjem od ravnotežnog položaja. U molekulima - ako se atomi nalaze na velikom medjusobnom rastojanju - privlačna sila jednaka je nuli, a vrednost potencijalne energije je konstantna. Potencijalna kriva molekula treba da ima oblik kao puna linija na slici 4. Minimum krive odgovara ravnotežnom stanju. Oko ravnotežnog stanja kriva se može aproksimirati sa parabolom (isprekidana linija), zato model harmonijskog oscilatora dobro prikazuje glavne karakteristike oscilatornog spektra. U prvoj

aproksimaciji dodaje se kvadratnoj funkciji harmonijskog oscilatora jedan član koji zavisi od trećeg stepena  $(r-r_e)^3$

$$U = f(r-r_e)^2 - g(r-r_e)^3. \quad (28)$$

Koefficijent  $g$  je mnogo manji od  $f$ . Ni ova funkcija (tačkasta kriva) nema potpuno isti oblik kao stvarne potencijalne krive, ali daje bolju aproksimaciju. Za još bolju aproksimaciju, uzima se četvrti i viši stepen od  $(r-r_e)$ .



sl. 4

Materijalna tačka, koja se kreće pod dejstvom sile, čija je potencijalna kriva na slici 4 nacrtana punom linijom, naziva se anharmonijski oscilator.

Svođenje kretanja jezgara dvoatomskih molekula na anharmonijske oscilovanje jedne materijalne tačke, vrši se istim metodom kao što je bilo u slučaju harmonijskog oscilatora.

**ENERGIJSKI NIVOI.** U slučaju male anharmoničnosti ( $g \ll f$ ) uvrštenjem jednačine (28) u talasnu jednačinu [koja može da sadrži i više stepene od  $(r-r_e)^3$ ], i njenim rešavanjem dobijaju se svojstvene vrednosti energije - tj. vrednosti energije anharmonijskog oscilatora:

$$E_v = hc\omega_e(v + \frac{1}{2}) - hc\omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + hc\omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 + \dots, \quad (29)$$

odgovarajuće vrednosti termova:

$$G_v = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 + \dots, \quad (30)$$

konstante su  $W_e X_e \ll W_e$  i  $W_e Y_e \ll W_e X_e$ . Predznak drugog člana zavisi od predznaka konstante  $g$ ; ako je  $g$  pozitivno, onda je i  $W_e X_e$  pozitivno. Često se  $W_e Y_e$  zanemaruje, zbog male vrednosti.

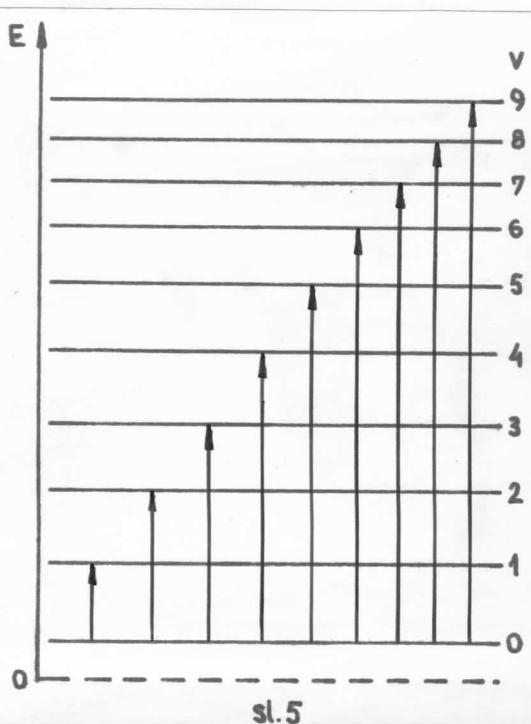
Prema (30) energijski nivoi anharmonijskog oscilatora nisu ekvidistantni, već njihovo međusobno rastojanje sa povećanjem  $v$  sporo opada. Na slici 5 prikazani su energijski nivoi u glavnim crtama. Multa energija anharmonijskog oscilatora dobija se iz (30) za  $w=0$ :

$$G(0) = \frac{1}{2} W_e - \frac{1}{4} W_e X_e + \frac{1}{8} W_e Y_e + \dots \quad (31)$$

Ako se energijski nivoi računaju u odnosu na najniži multi energijski nivo, dobija se:

$$G_0(v) = W_0 v - W_0 X_0 v^2 + W_0 Y_0 v^3 + \dots \quad /32/$$

gde je:



$$W_0 = W_e - W_e X_e + \frac{3}{4} W_e Y_e + \dots, \quad W_0 X_0 = W_e X_e - \frac{3}{2} W_e Y_e + \dots, \quad (33)$$

$$W_0 Y_0 = W_e Y_e + \dots$$

SPEKTAR ANHARMONIJSKOG OSCILATORA. Kao kod harmonijskog oscilatora i kod anharmonijskog oscilatora postoji spektar samo onda, kada je uz kretanje vezan dipolni moment.

Pravilo izbora harmonijskog oscilatora  $\Delta v = \pm 1$  (aproksimativno važi i za anharmonijski oscilator) daje najintenzivnije prelaze. Precizniji račun pokazuje i prelaze  $\Delta v = \pm 2, \pm 3$ , ali sa brzo opadajućim intenzitetom.

Mogući prelazi u apsorpciji su prikazani na slici 5. Prelazi za  $\Delta v = 2, 3$  približno imaju dva, tri puta veću frekvenciju, nego što je prelaz  $\Delta v = 1$ . Za sistem apsorpcionih traka

iz (30) + (32) dobija se:

$$\tilde{V}_{\text{aps.}} = G(v') - G(0) = G_o(v') = \omega_0 v' - \omega_0 x_0 v'^2 + \omega_0 y_0 v'^3 + \dots \quad (33)$$

Apsorpcione frekvencije neposredno daju položaj oscilatornih nivoa iznad najnižeg oscilatornog nivoa.

Zanemarujući članove trećeg reda, međusobne rastojanja apsorpcionih nivoa (u  $\text{cm}^{-1}$ ) data je jednačinom:

$$\begin{aligned} \Delta G_{v+\frac{1}{2}} &= G(v+1) - G(v) = G_o(v+1) - G_o(v) = \\ &= \omega_e - 2\omega_e x_e - 2\omega_e x_e v = \omega_0 - \omega_0 x_0 - 2\omega_0 x_0 v. \end{aligned} \quad (34)$$

Druge razlike imaju sledeći oblik:

$$\Delta^2 G_{v+1} = \Delta G_{v+\frac{3}{2}} - \Delta G_{v+\frac{1}{2}} = -2\omega_e x_e = -2\omega_0 x_0. \quad (35)$$

Ove razlike neposredno daju  $\omega_e x_e = \omega_0 x_0$ . Ova veličina je mera za anharmoničnost oscilatora.

Analizom infracrvenog apsorpcionog spektrra nekog dvoatomskog molekula, mogu se na osnovu položaja apsorpcionih traka odrediti vibracione konstante  $\omega_e$  i  $\omega_e x_e$  (ili  $\omega_0$ ,  $\omega_0 x_0$ ). Naprimjer za prelaz (1-0):

$$\tilde{V}(1-0) = \Delta G_{1/2} = \omega_e - 2\omega_e x_e = \omega_0 - \omega_0 x_0. \quad (36)$$

Vibraciona FREKVENCIJA I DIREKCIJONA KONSTANTA. Prema klasičnoj teoriji vibraciona frekvencija u stanju  $v$  iznosi:

$$V_{\text{osc.}}(v) = C \Delta G_v. \quad (37)$$

Vibraciona frekvencija u stanju  $v$ , nalazi se izmedju susednih vibracionih kvanata  $\Delta G_{v+\frac{1}{2}}$  i  $\Delta G_{v-\frac{1}{2}}$ . Na osnovu (37) i (34).

$$\begin{aligned} V_{\text{osc.}}(v) &= C (\Delta G_{v+\frac{1}{2}} - \Delta G_{v-\frac{1}{2}}) = C [( \omega_e - 2\omega_e x_e ) - 2\omega_e x_e (v - \frac{1}{2})] = \\ &= C [(\omega_e - \omega_e x_e) - 2\omega_e x_e v]. \end{aligned} \quad (38)$$

Za stanje sa  $v = -\frac{1}{2}$ , koje se ne može ostvariti, za koja je vibraciona energija jednaka nuli [jedn. (29)] :

$$V_{osc.}(-\frac{1}{2}) = C W_e. \quad (39)$$

$W_e$  određuje vibracionu frekvenciju, s kojom bi anharmonijski oscilator raspolagao prema klasičnoj teoriji pri infinitezimalnim amplitudama. Anharmonicitet se primećuje i u najnižem oscilatornom stanju, jer je odgovarajuća klasična oscilatorna frekvencija nešto manja od  $W_e$  :

$$V_{osc.}(0) = C(W_e - W_e x_e) = CW_0. \quad (40)$$

Iz oscilatorne frekvencije  $W_e$ , koja pripada bezkonačno malim amplitudama, može se izračunati direkciona konstanta harmonijskog oscilatora, na osnovu jednačine (19) i (39):

$$k_e = 4\bar{\mu}^2 \mu c^2 W_e^2 = 5,888 \cdot 10^{-2} / \mu_A W_e^2 \text{ din/cm}, \quad (41)$$

gde je  $\mu_A = \mu_N$ , redukovana masa u atomskim jedinicama mase,  $N$  - Avogadro-ov broj.

Pri malim amplitudama u izrazu za potencijalnu energiju (28) može se zanemariti član  $(r-r_e)^3$  sa višim stepenima i upoređivanjem jednačine (19) sa jednačinom (28) :

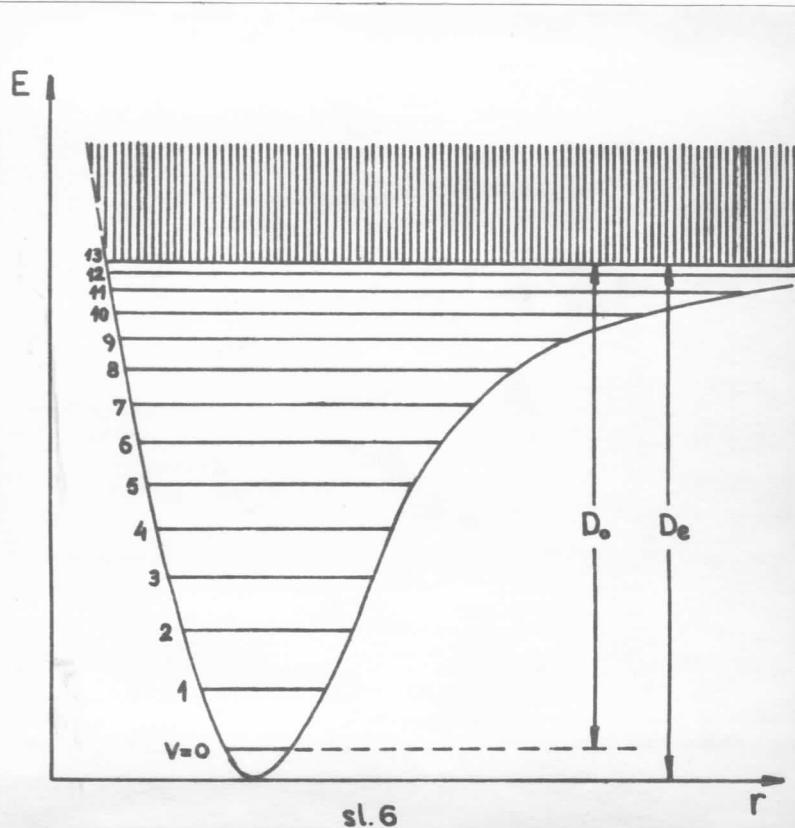
$$U_{r \rightarrow r_e} = f(r-r_e)^2 = \frac{1}{2} k_e (r-r_e)^2, \quad (42)$$

$k_e$  određuje onu parabolu, koja najbolje prikazuje stvarnu potencijalnu krivu u blizini minimuma.

KONTINUALNI SPEKTAR I DISOCIJACIJA. Ako anharmonijski oscilator, čija je potencijalna kriva data na slici 6, dobija veću energiju od energije koja odgovara horizontalnoj asymptoti, materijalna tačka se potpuno udaljuje od ravnotežnog položaja i više se ne vraća nazad. Ovo kretanje materijalne tačke odgovara potpunom udaljavanju atoma u molekulu, disocijaciji.

Iznad horizontalne asymptote nastavlja se diskretan oscilatorni spektar sa kontinualnim spektrom, koji odgovara disocijačiji.

Visina asymptote (početak kontinualnog spektra) iznad najnižeg oscilatornog nivoa, jednaka je radu, koju treba izvršiti da bi se molekul disocirao. To je tzv. disociaciona energija  $D_o$ . Sa slike se vidi da je  $D_o$  (dato u  $\text{cm}^{-1}$ ) jednaka zbiru svih oscilatornih kvanata:



sl. 6

$$D_o = \sum_v \Delta G_{v+\frac{1}{2}}. \quad (43)$$

Energijska razlika izmedju minimuma potencijalne energije i asymptote,  $D_e$  malo je veće od  $D_o$ , i to tačno za vrednost mulfte energije anharmonijskog oscilatora.

$$D_e = D_o + G(0) = D_o + \frac{1}{2} w_e - \frac{1}{4} w_e x_e + \frac{1}{8} w_e y_e + \dots \quad (44)$$

Kako iznad asymptote ne postoje diskretni energijski nivoi, maksimum  $G(v)$  treba da bude jednako  $D_e$ :

$$D_e = G_{\max}(v). \quad (45)$$

Prema (37) kod granične vrednosti  $\Delta G=0$ , oscilatorna frekvencija postaje nula, a period oscilacije bezkonačan. To je razumljivo, jer je disocijacija aperiodički proces.

Ako se uzima prema jednačini (32) da izraz  $\omega_0 v - \omega_0 x_0 v^2$  dobro predstavlja sve oscilatorne nivoe, [ΔG prema (34) linearna funkcija v] onda pri

$$V_D = \frac{\omega_0}{2\omega_0 x_0} \quad (46)$$

$\Delta G_v$  postaje nula. Tako, manja celobrojna vrednost od v odgovara oscilatornom nivou neposredno ispred disocijacije. Prema napred izloženom, kod disocijacije postoji konačan broj oscilatornih nivoa do disocijacije, dok u slučaju ionizacije postoji bezkonačno diskretnih nivoa.

U ovom slučaju (kada se uzima linearna veza između  $\Delta G$  i  $v$ )  $D_o$  ili  $D_e$  su određeni:

$$D_o = \omega_0 V_D - \omega_0 x_0 V_D^2 = \frac{\omega_0^2}{4\omega_0 x_0} \quad \text{ili} \quad D_e = \frac{\omega_e^2}{4\omega_e x_e} \quad (47)$$

MATEMATIČKO PREDSTAVLJANJE POTENCIJALNE KRIVE. Izraz, koji sadrži drugi i treći stepen  $\omega(r-r_e)$  [izraz (28)] predstavlja potencijalnu krivu dvoatomskog molekula samo u okolini ravnotežnog položaja. Morse je dao takav izraz koji dobro aproksimira (predstavlja) potencijalnu krivu i pri velikim vrednostima r:

$$U(r-r_e) = D_e [1 - e^{-\beta(r-r_e)}]^2, \quad (48)$$

gde je  $D_e$  disocijaciona energija u odnosu na minimum,  $\beta$  je konstanta.

Rešenje Schrödinger - ove jednačine, ako se na mesto U stavi gornji izraz, daje za oscilatorne termove:

$$G(v) = \beta \sqrt{\frac{Deh}{2\bar{u}^2 c \mu}} (v + \frac{1}{2}) - \frac{\hbar \beta^2}{c 80^2 \mu} (v + \frac{1}{2})^2, \quad (49)$$

Prema jednačini (30) koeficijent uz  $(v + 1/2)$  je  $W_e$ , tako da je

$$\beta = \sqrt{\frac{2\bar{u}^2 c \mu}{Deh}} W_e = 1,2177 \cdot 10^{-7} W_e \sqrt{\frac{u_e}{De}}, \quad (50)$$

gde je  $\mu_A$  redukovana masa u atomskim jedinicama mase, dok je  $D_e$  dato u  $\text{cm}^{-1}$ .

#### 4) ELASTIČNI ROTATOR

Molekul je u stanju da vrši oscilacije na pravoj koja spaja dva jezgra, prema tome molekul se ne može predstaviti kao kruti rotator. Za bolje opisivanje rotacije molekula uzima se model elastičnog rotatora, koji se sastoji iz dve materijalne tačke koje su spojene sa elastičnom oprugom bez mase.

U takvom sistemu sa promenom rotacije, menja se, zbog dejstva centrifugalne sile, rastojanje izmedju jezgara, što uslovljava promenu i momenta inercije.

Rastojanje izmedju jezgara u molekulu koji rotira, određeno je jednakosću centifugalne sile i elastične sile. Centrifugalna sila drži ravnotežu sa elastičnom silom, koja se javlja zbog toga, što je sistem izведен iz ravnotežnog položaja  $r_e$ , za malo rastojanje  $r_c - r_e$ .

Izjednačavanjem centrifugalne sile

$$F_c = \mu \omega^2 r_c = \frac{P^2}{\mu r_c^3}, \quad (51)$$

gde je  $\omega$  uglovna brzina,  $P = I\omega = \mu r_c^2 \omega$  moment impulsa, sa elastičnom silom - k  $(r_c - r_e)$  dobija se:

$$r_c - r_e = \frac{P^2}{\mu r_c^3 k} \approx \frac{P^2}{\mu r_e^3 k}. \quad (52)$$

Kinetička energija rotacije [prema (1a)] je  $\frac{P^2}{2I_c}$ . Kod elastičnog rotatora dodaje se član  $\frac{1}{2} k(r_c - r_e)^2$ , tako da ukupna energija rotacije:

$$E = \frac{P^2}{2\mu r_c^2} + \frac{1}{2} k(r_c - r_e)^2. \quad (53)$$

Uvrštenjem  $r_c$  iz (52) i zanemarivanjem više stepena  $r_c - r_e$  dobija se:

$$E = \frac{P^2}{2\mu r_e^2} - \frac{P^4}{2\mu^2 r_e^6 k} + \dots \quad (54)$$

Prema kvantnoj teoriji moment impulsa je  $\frac{\hbar}{2\bar{u}}\sqrt{J(J+1)}$ . Energija elastičnog rotatora iz (54) :

$$E = \frac{\hbar^2}{8\bar{u}^2\mu r_e^2} J(J+1) - \frac{\hbar^4}{32\bar{u}^4\mu^2 r_e^6 k} J^2(J+1)^2 + \dots \quad (55)$$

Prelazeći na termske vrednosti zanemarivanjem viših stepena za rotacione termove se dobija:

$$F(J) = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2, \quad (56)$$

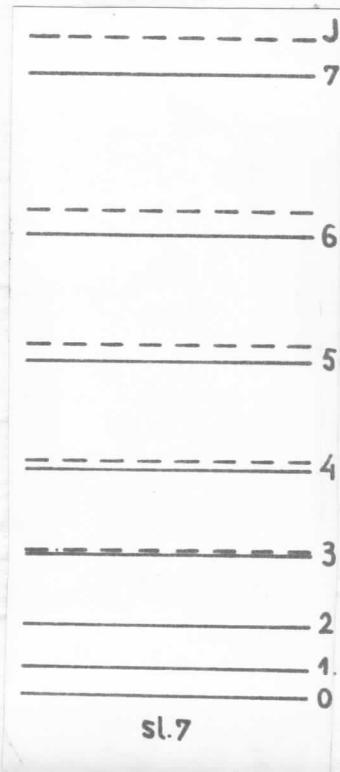
gde je

$$B = \frac{\hbar}{8\bar{u}^2\mu r_e^2 c} ; \quad D = \frac{\hbar^3}{32\bar{u}^4\mu^2 r_e^6 k c}. \quad (57)$$

Uzimajući da je  $k = 4\bar{u}^2\omega^2 c^2 \mu$ , veza izmedju rotacionih konstanta B i D je sledeća:

$$D = \frac{4B^3}{\omega^2}. \quad (58)$$

Rotaciona konstanta D je mera dejstva centrifugalne sile. Vrednost te konstante je praktično zanemarljiva ( $D < 10^{-4}B$ ) u odnosu na rotacionu konstantu B, zato se može zanemariti odstupanje molekula od modela krutog rotatora, dok odstupanja od modela harmonijskog oscilatora nisu zanemarljiva. Na slici (7) prikazan je u glavnim crtama uticaj konstante D. Pune linije predstavljaju rotacione nivoe elastičnog rotatora, a isprekidane linije predstavljaju nivoe krutog rotatora.



e) OSCILUJUĆI ROTATOR.

Dosada je govoreno o rotaciji i oscilaciji molekuža posebno. Na osnovu fine strukture rotacionih traka može se međutim pretpostaviti, da se rotacija i oscilacija dešavaju istovremeno. Zato se posmatra model oscilujućeg rotatora (ili obrtnog oscilatora) kod koga se rotacija i oscilacija dešavaju istovremeno.

ENERGIJSKI NIVOI. Kad bi bila zanemarljiva interakcija izmedju rotacije i oscilacije, energija oscilujućeg rotatora bila bi jednaka zbiru oscilatorne energije anharmonijskog oscilatora (30) i rotacione energije elastičnog rotatora (56).

Na svakom oscilatornom nivou na slici 5, bila bi superpinirana serija rotacionih nivoa sa slike 7. Uzimajući u obzir činjenicu, da za vreme oscilacija stalno se menja rastojanje izmedju jezgara i tako se menja moment inercije kao i vrednost rotacione konstante  $B$ .

Kako je period oscilacije mali u odnosu na period rotacije (oko 100 puta manji), očigledno je da se za rotacionu konstantu  $B$  u datom oscilatornom stanju koristi prosečna vrednost i to:

$$B_v = \frac{h}{8\bar{a}^2 c \mu} \left[ \frac{1}{\bar{r}^2} \right], \quad (59)$$

gde je  $\left[ \frac{1}{\bar{r}^2} \right]$  prosečna vrednost  $\frac{1}{r^2}$  za vreme oscilacije. Očekuje se da će vrednost  $B_v$  postati manja od  $B_e$ , jer zbog anharmoniciteta sa porastom oscilacija raste prosečno međusobno rastojanje jezgara.  $B_e$  odgovara ravnotežnom stanju  $r_e$ :

$$B_e = \frac{h}{8\bar{a}^2 c \mu r_e^2} = \frac{h}{8\bar{a}^2 c I_e} = \frac{2798 \cdot 10^{-40}}{I_e}. \quad (60)$$

U prvoj aproksimaciji, posle komplikovanog kvantomehaničkog proračuna za  $B_v$  se dobija:

$$B_v = B_e - \alpha_e (v + \frac{1}{2}) + \dots \quad (61)$$

Konstanta  $\alpha_e$  je mala u osnovu na  $B_e$ , kao što je odstupanje zbog oscilacije malo u odnosu na međusobno rastojanje jezgara.

Na isti način treba uvesti prosečnu rotacionu konstantu  $D_v$  sa kojom se uzima u obzir dejstvo centrifugalne sile u oscilatornom stanju  $v$ . Analogno sa gornjim izrazom

$$D_v = D_e + \beta_e (v + \frac{1}{2}) + \dots, \quad (62)$$

gde je  $\beta_e$  malo u odnosu na

$$D_e = \frac{4 B_e^3}{\omega_e^2} \quad (63)$$

koji se odnosi na stanje bez oscilacije (58).

Za rotacione termove datog oscilatornog nivoa dobija se:

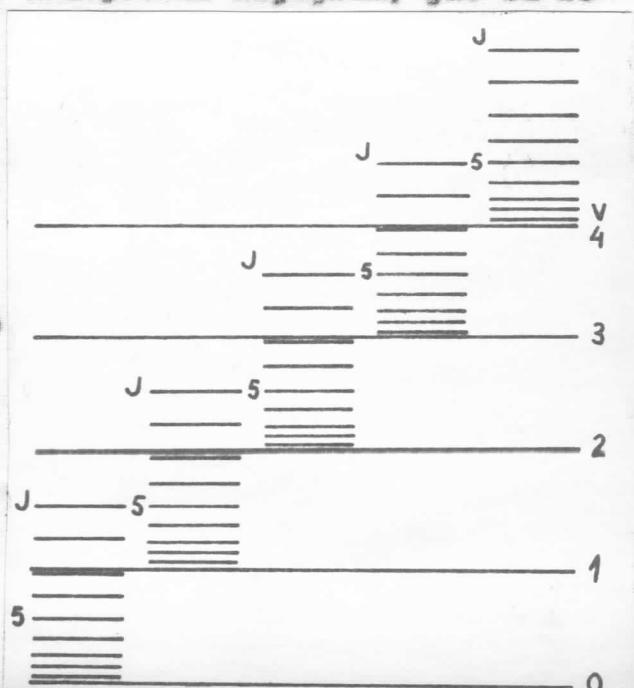
$$F_v(J) = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots, \quad (64)$$

gde je drugi član u odnosu na prvi zanemarljivo mali. Ako se na gore opisan način uzima u obzir interakcija izmedju rotacije i oscilacije, za termove oscilujućeg rotatora se dobija:

$$T = G(v) + F_v(J) = \omega_e (v + \frac{1}{2}) - \omega_e \chi_e (v + \frac{1}{2})^2 + \dots + B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots \quad (65)$$

Na slici 8 prikazan je energetski dijagram, gde su rotacioni nivoi prikazani sa kratkim horizontalnim linijama, oscilatori nivoi ( $J=0$ ) sa dužim horizontalnim linijama.

SPEKTAR OSCILUJUĆEG ROTATORA. Pravilo izbora je isto kao što je bilo kod rotatora i kod oscilatora posebno, tj. v može da se menja za bilo kojim



celebrojnu vrednost,  $\Delta V = \pm 1$  daje najintenzivnije prelaze.  $J$  može da se menja samo za jedinicu. Dozvoljeni prelaz je i  $\Delta V = 0$ , ali to ne daje rotacioni oscilatorni spektar, već daje samo čist rotacioni spektar.

Ako se uzima određeni oscilatorni prelaz iz  $v'$  u  $v''$ , uz zanemarivanja rotacione konstante  $B_v$ , za talasne brojeve linije, koje tada nastaju, dobija se prema (65):

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + B'_v J'(J'+1) - B''_v (J''+1)J'', \quad (66)$$

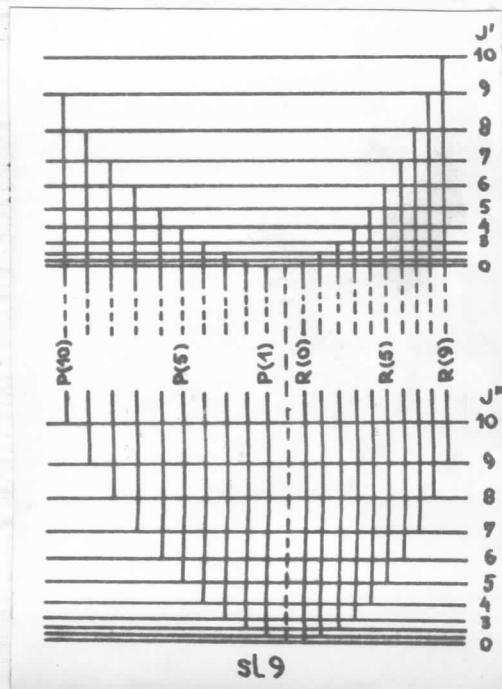
gde je  $\tilde{V}_0 = G(v') - G(v'')$ , talasni broj čiste oscilatornog prelaza, ne uzimajući u obzir rotaciju ( $J' = J'' = 0$ ).

Iz prethodno relacije (66) za  $\Delta J = +1$  i  $\Delta J = -1$  dobija se:

$$\tilde{V}_R = \tilde{V}_0 + 2B'_v + (3B'_v - B''_v)J + (B'_v - B''_v)J^2; \quad J = 0, 1, 2, \dots \quad (67)$$

$$\tilde{V}_P = \tilde{V}_0 - (B'_v + B''_v)J + (B'_v - B''_v)J^2; \quad J = 1, 2, \dots \quad (68)$$

gde je uzeto za  $J'' = J$ . Kako  $J$  može da primači niz vrednosti ove jednačine daju dva sistema linija, koje se nazivaju R i P granama. Uzimajući u obzir ograničenje za  $J$  ( $J$  se može menjati samo za jedinicu). Kod  $\tilde{V}_0$  ne dobija se linija - nulta linija. Ta linija odgovara prelazu između dva stanja, bez rotacije i zove se još početkom trake. Ove dve grane se mogu predstaviti i sa jednom istom formulom. Na slici 9 prikazan je u glavnim crtama dijagram energijskih nivoa fine strukture rotaciono-oscilatorne trake.



### f) SIMETRIČNA ČIGRA

DVOATOMSKI MOLEKUL KAO SIMETRIČNA ČIGRA. Dosada je bilo pretpostavljeno da je u odnosu na osu molekula moment inercije nula. Kao model za rotaciju molekula uzet je jednostavni rotator. U stvarnosti oko atoma kruže elektroni, tako da moment inercije u odnosu na osu molekula nije nula, iako je taj moment zbog male mase elektrona mali.

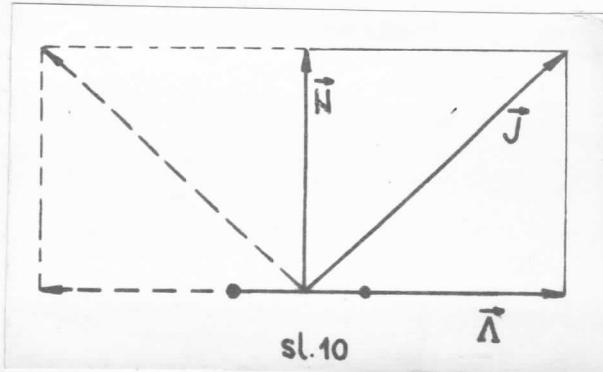
Kruto telo kod koga se dva glavna momenta inercije poklapaju, naziva se simetričnom čigrom.

Ako se zanemaruje drugo, finije kretanje elektrona, kao da su jezgra opkoljena sa "krutim" elektronskim oblacima, onda se može smatrati molekul kao simetrična čigra.

Moment inercije u odnosu na molekulsku osu  $I_A$  je mnogo manji od momenta inercije  $I_B$  u odnosu na osu koja prolazi kroz težište i стоји normalno na molekulsku osu. Momenti impulsa međutim imaju isti red veličine, jer se elektroni mnogo brže kreću od jezgara.

Ukupni moment impulsa nije više normalan na osu simetrije (molekulska osa), kao što je bio slučaj kod krutog rotatora, jer sada, pored rotacije oko ose koja je normalna na osu simetrije, moguća je i rotacija oko ose simetrije.

Prema kvantnoj mehanici, zanemarujući spin elektrona, komponenta ukupnog momenta impulsa u smeru ose simetrije (u ovom slučaju to je moment impulsa koji potiče od rotacije elektrona), može da prima vrednosti koji su celebrojni umnošci  $\hbar/2\bar{u}$ . Obeležavajući taj moment impulsa sa  $\vec{\Lambda}$  ( $\vec{N}$  - normalna komponenta - u odnosu na molekulsku osu - ukupnog momenta impulsa  $\vec{J}$ ).



sl.10

$$|\vec{\Lambda}| = \Delta \frac{\hbar}{2\bar{u}}. \quad (69)$$

gde je  $\Delta$  kvantni broj momenta impulsa elektrona u odnosu na osu molekule. Ukupni moment impulsa  $\vec{J}$  može da prima vrednosti:

$$|J| = \sqrt{J(J+1)} \frac{\hbar}{2\bar{u}} . \quad (70)$$

Na slici 10 prikazan je vektorski dijagram simetrične čigre. Isprekidane linije prikazuju slučaj kada se elektroni oko ose molekula kreću u suprotnom smeru.  $\vec{J}$  je uvek veće od  $\vec{\Lambda}$ , zato za dato  $\Delta$  kvantni broj  $J$  može da prima vrednosti:

$$J = \Delta, \Delta+1, \Delta+2, \Delta+3, \dots \quad (71)$$

ENERGIJSKI NIVOI. Egzatno rešavanje talasne jednačine simetrične čigre je moguće i energijski nivoi (u  $\text{cm}^{-1}$ ) su:

$$E(J) = BJ(J+1) - (A-B)\Delta^2, \quad (72)$$

gde su

$$B = \frac{\hbar}{8\bar{u}^2 c I_B} ; \quad A = \frac{\hbar}{8\bar{u}^2 c I_A} \quad (73)$$

$I_B = \mu r^2$ , moment inercije molekula (kao i što je bilo i ranije korišćeno),  $I_A$  moment inercije elektrona u odnosu na osu molekula. Vrednost konstante  $A$  je, zbog male vrednosti  $I_A$ , mnogo veća od vrednosti konstante  $B$ . Rotacioni nivoi simetrične čigre su ekvivalentni sa nivoima jednostavnog rotatora, samo što sada dolazi do pomeranja za  $(A-B)\Delta^2$ , koje je za dato elektronsko stanje konstantno. U skladu sa (71), nestaju nivoi za  $J < \Delta$ . U jednačini (72) smer  $\vec{\Lambda}$  nije bitno, tako da su energije za stanja, koja su označena punom i isprekidanim linijom na slici 10, iste. Energijski nivoi su degenerisani.

SPEKTAR. Pravilo izbora za simetričnu čigru daje:

$$\text{za } \Delta=0 \quad \Delta J = \pm 1, \quad (74)$$

$$\text{za } \Delta \neq 0 \quad \Delta J = 0, \pm 1. \quad (75)$$

U prvom slučaju zbog  $\Delta = 0$ , u (72) nestaje član  $(A-B)\Delta^2$  i pravilo izbora ostaje nepromjenjeno, tako da je sve isto kao kod jednostavnog rotatora.

U drugom slučaju ( $\Delta \neq 0$ ), izuzev jednog konstantnog pomeranja energijske veze su iste. Pored prelaza  $\Delta J = \pm 1$  javljaju se i prelazi sa  $\Delta J = 0$ , tzv. Q grana.

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + F'(J) - F''(J). \quad (76)$$

Ako se u jednačini (72) stavlja umesto  $B$ ,  $B_V$ , dobija se za granu Q:

$$\tilde{V}_Q = \tilde{V}_0 + (B_V'' - B_V')\Delta^2 + (B_V' - B_V'')J + (B_V' - B_V'')J^2. \quad (77)$$

Korekcioni član  $(B_V'' - B_V')\Delta^2$  treba dodati i granama P i R za koje važe i dalje relacije (67) i (68).

## 2. ELEKTRONSKA STANJA I ELEKTRONSKI PRELAZI

### a) ELEKTRONSKA ENERGIJA I UKUPNA ENERGIJA

Atomi su unutar molekula spojeni preko elektrona. Očekuje se da kao i kod atoma i molekuli imaju različita elektronska stanja, u zavisnosti od orbita koje zauzimaju elektroni. Elektronska stanja, slično kao kod atoma S, P, D, ... obeležavaju se kod molekula sa  $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ . Ukupna energija molekula (ako se zanemaruje spin i magnetne interakcije) je određena sa potencijalnom i kinetičkom energijom elektrona i jezgara. Pri nepokretnim jezgrima elektronska energija bi bila funkcija rastojanja od jezgara. Kako je masa elektrona prema masi jezgara jako mala, a elektroni se kreću brže od jezgara, tako elektronska energija poprima one energetske vrednosti, koje pripadaju trenutnom položaju jezgara, koja se kreću. Za promenu položaja jezgara treba uložiti energiju ne samo za savladjivanje Coulomb-ovog odbijanja izmedju jezgara, već i za promenu elektronske energije. Tako oscilacije jezgara se vtiče pod dejstvom potencijalne energije, koja se sastoji iz elektronske energije  $E_{el}$  i iz energije koja potiče iz Coulomb-ovog potencijala  $V_n$ . Elektronske stanje molekula je stabilno samo onda, kada potencijalna kriva poseduje minimum. Za dvoatomski molekul Coulomb-ov potencijal ima vrednost

$$V_n = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (78)$$

gde je  $r$  rastojanje izmedju jezgara.

Kod dvoatomskih molekula za elektronske prelaze uzima se minimum potencijalne krive<sup>\*</sup> stabilnog elektronskog stanja (minimum  $E_{el} + V_n$ ) i naziva se elektronskom energijom  $E_e$  za dato stanje. Za multi energijski nivo obično se uzima minimum najnižeg elektronskog stanja (osnovno stanje). Molekul poseduje još energiju rotacije  $E_r$  i energiju koja odgovara oscilacijama atoma (jezgrima) u molekulu-rotaciona energija  $E_v$ .

\* Krive koje prikazuju promenu efektivne potencijalne energije jezgara (elektronska energija  $E_{el} +$  Columb-ov potencijal  $V_n$  jezgara) nazivaju se potencijalnim krivama.

U prvoj aproksimaciji pojedini vidovi kretanja u molekulu mogu se smatrati nezavisnim, tako ukupna energija molekula u dobroj aproksimaciji predstavljena je kao suma ova tri vida energije.

$$E = E_e + E_v + E_r. \quad (79)$$

Termiske vrednosti (u jedinicama talasnog broja):

$$T = T_e + G + F \quad (80)$$

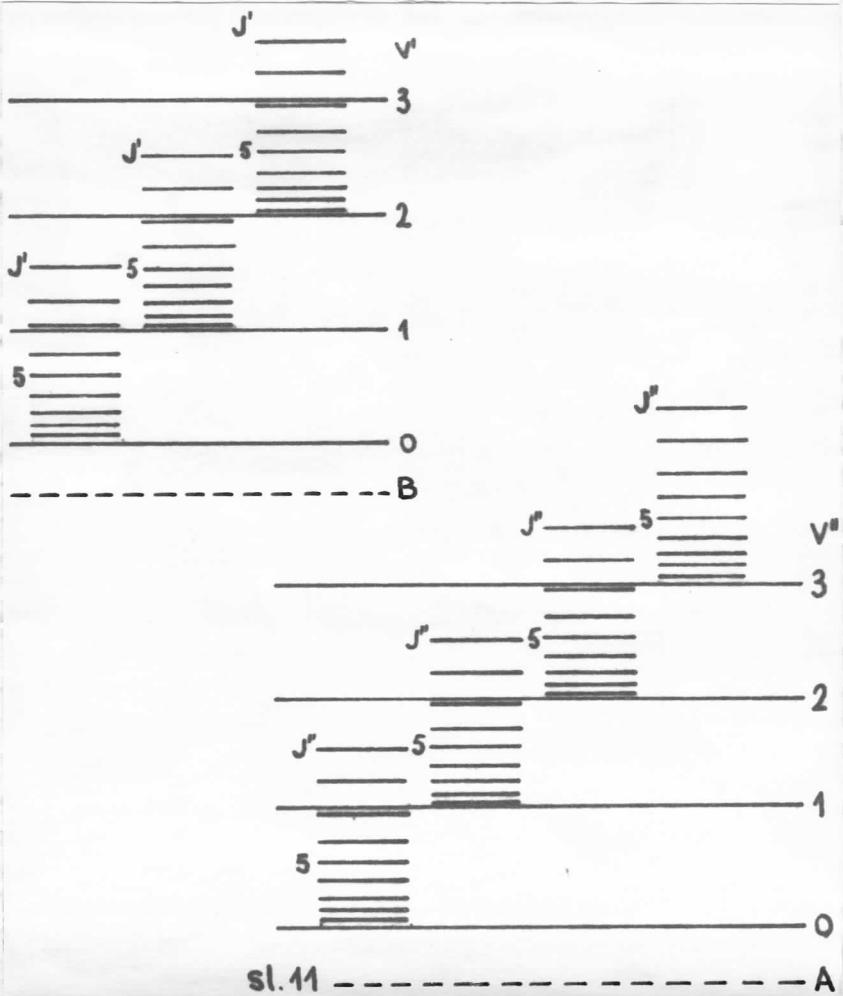
Za opisivanje rotacije i oscilacija molekula u različitim elektronskim stanjima se koristi model oscilujućeg rotatora.

$$G = \omega_e(v + \frac{1}{2}) - \omega_e x_e(v + \frac{1}{2})^2 + \omega_e y_e(v + \frac{1}{2})^3 + \dots \quad (81)$$

$$F = B_v J(J+1) - D_v J^2(J+1)^2 + \dots \quad (82)$$

Uopšte F prema G je male i u F drugi član se može zanemariti u odnosu na prvi kao jako malu vrednost.

U jednačini (82) korišćenjem vrednosti  $B_v$  i  $D_v$  uzima se u obzir glavni deo interakcije izmedju rotacije i oscilacije, isto tako  $\omega_e, \omega_e x_e, \omega_e y_e, \dots$  tako su izabrani, da odgovaraju funkciji potencijalene energije  $U(r-r_e) = E^{el} + V_n$ , time je uzet u obzir glavni deo interakcije izmedju oscilacije i elektronskog kretanja. Zanemarljuvu korekciju daje interakcija izmedju elektronskog kretanja i rotacije. Na slici 11 prikazani su energetski nivoi za elektronska stanja A i B.



### b) OSCILATORNA STRUKTURA ELEKTRONSKIH PRELAZA

Prema jednačini (80) za talasne brojeve za prelaz između dva elektronska stanja (u emisiji ili u apsorpciji) se dobija:

$$\tilde{v} = \tau' - \tau'' = (\tau'_e - \tau''_e) + (G' - G'') + (F' - F''). \quad (83)$$

Za dati elektronski prelaz  $\tilde{v}_e = \tau'_e - \tau''_e$  je konstantno: Prema (83) ostali deo,  $\tilde{v}_v + \tilde{v}_r$  daje rotaciono-oscilatorni septar. Bitna razlika je to, da  $G'$  i  $G''$  pripadaju različitim serijama oscilatornih termova, sa različitim  $w_e$  i  $w_{eXe}$  i da  $G'$  može biti i manji od  $G''$ . Isto tako  $F'$  i  $F''$  pripadaju različitim serijama rotacionih termova, sa različitim  $B_e$  i  $\alpha_e$ .

Da bi se dobila opšta slika, zbog manje vrednosti  $F$  u odnosu na  $G$ ,  $\tilde{V}_r (= F' - F'')$  se zanemaruje. Na taj način se dobija gruba struktura elektronskog prelaza, bez rotacije ( $F' = F'' = 0$ ). Ova struktura se naziva još i oscilatornom.

$$\begin{aligned}\tilde{V} = \tilde{V}_e + w'_e(v' + \frac{1}{2}) - w'_e x'_e (v' + \frac{1}{2})^2 + w'_e y'_e (v' + \frac{1}{2})^3 + \dots - \\ - [w''_e(v'' + \frac{1}{2}) - w''_e x''_e (v'' + \frac{1}{2})^2 + w''_e y''_e (v'' + \frac{1}{2})^3 + \dots].\end{aligned}\quad (84)$$

Jednostavnije napisano:

$$\begin{aligned}\tilde{V} = \tilde{V}_{oo} + w'_o v' - w'_o x'_o v'^2 + w'_o y'_o v'^3 + \dots - \\ - (w''_o v'' - w''_o x''_o v''^2 + w''_o y''_o v''^3 + \dots)\end{aligned}\quad (85)$$

za prelaz  $v' = 0 \rightarrow v'' = 0$  [traka (0.0)] dobija se korišćenjem (84 i (85)):

$$\begin{aligned}\tilde{V}_{oo} = \tilde{V}_e + (\frac{1}{2} w'_e - \frac{1}{4} w'_e x'_e + \frac{1}{8} w'_e y'_e + \dots) - \\ - (\frac{1}{2} w''_e - \frac{1}{4} w''_e x''_e + \frac{1}{8} w''_e y''_e + \dots),\end{aligned}\quad (86)$$

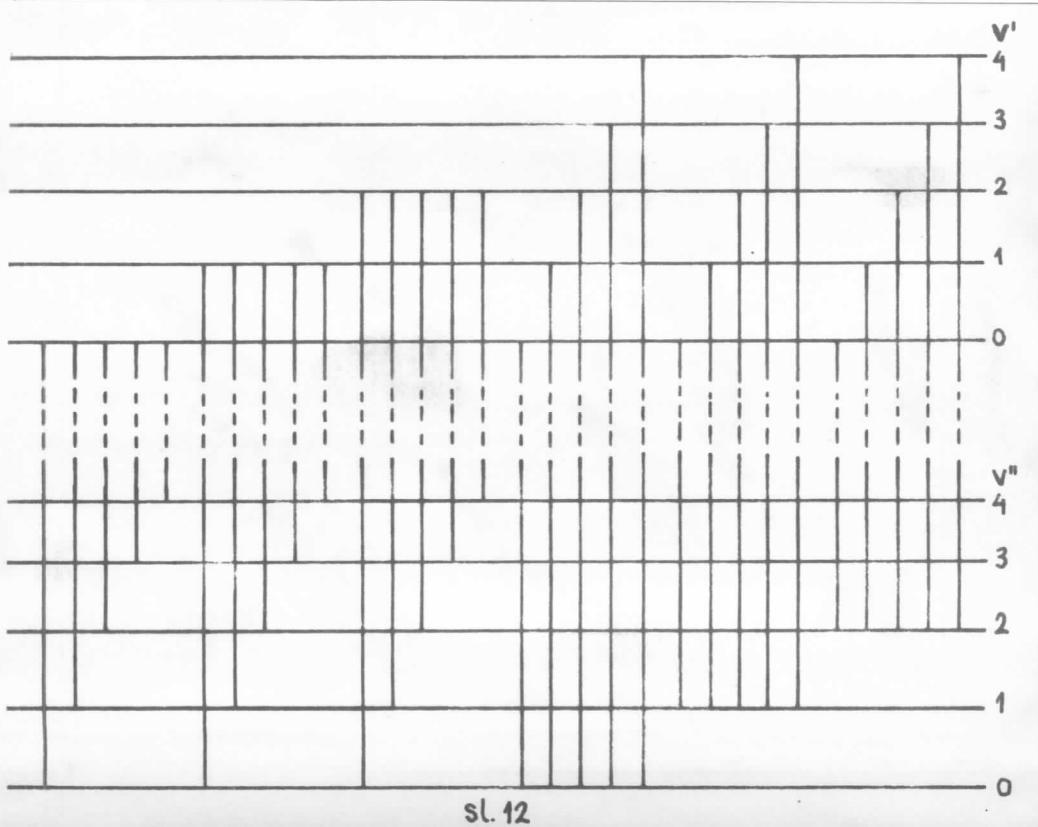
član  $w'_e y'_e$  se može zanemariti.

Analizom grube strukture nekog sistema traka u vidljivom i u ultravioletnom delu spektra, mogu se izračunati položaji oscilatornih nivoa, oscilatorne frekvencije i anharmoniciteti, kao i direkciona konstanta u oba elektronska stanja.

Iz empirijske konstante  $\tilde{V}_{oo}$  iz (85) može se izračunati  $\tilde{V}_e$ , razlika elektronske energije u oba elektronska stanja. Jednačina (84) se odnosi na početak trake (nulta linija, prelaz  $J=0 \rightarrow J''=0$ ).

Kod elektronskih prelaza, za oscilatorni kvantni broj ne postoji strogo pravilo izbora, bilo koje oscilatorno stanje gornjeg elektronskog stanja može da se kombinuje sa bilo kojim oscilatornim stanjem donjeg elektronskog stanja.

To je dato u Deslandres-ovim tablicama. Ti prelazi su prikazani na slici 12.



### c) ROTACIONA STRUKTURA ELEKTRONSKIH TRAKA

Ako se uzima u obzir i rotacija, onda za dati oscilatorni prelaz  $\tilde{V}_o = \tilde{V}_e + \tilde{V}_v$  konstanta, dok se  $\tilde{V}_r$  menja u zavisnosti od vrednosti rotacionih kvantnih brojeva u gornjem i u donjem stanju. Za dato  $\tilde{V}_o$  mogući prelazi obrazuju jednu istu traku. Za jednu takvu traku, kao što je bilo i u slučaju rotaciono-oscilatornog spektra:

$$\tilde{V} = \tilde{V}_o + F'(J') - F''(J''), \quad (87)$$

gde je  $\tilde{V}_o$  početak trake, nulta linija.

Kod simetrične čigre za rotacione termove dobija se:

$$F_v(J) = B_v J(J+1) + (A - B_v) \Lambda^2 - D_v J^2(J+1)^2 + \dots \quad (88)$$

član koji sadrži  $\Lambda^2$  za dati oscilatorni nivo datog elektronskog stanja je konstantan. Za izračunavanje rotacionih prelaza može se zanemariti član sa  $\Lambda^2$ , a rotacioni termovi se računaju od  $J=0$  nivoa.

$$F_v(J) = B_v J(J+1) - D_v J^2 (J+1)^2 + \dots \quad (89)$$

Moment impulsa  $\vec{\Lambda}$  može biti različito za gornje ili donje stanje. Ako je  $\Lambda \neq 0$  u bilo kom stanju, prema (75) pravilo izbora za  $J$  je:

$$\Delta J = J' - J'' = 0, \pm 1. \quad (90)$$

prema tome za:

$$R \text{ granu: } \tilde{V} = \tilde{V}_0 + F'_v(J+1) - F''_v(J) = R(J) \quad (\Delta J = +1) \quad (91)$$

$$Q \text{ granu: } \tilde{V} = \tilde{V}_0 + F'_v(J) - F''_v(J) = Q(J) \quad (\Delta J = 0) \quad (92)$$

$$P \text{ granu: } \tilde{V} = \tilde{V}_0 + F'(J-1) - F''(J) = P(J) \quad (\Delta J = -1) \quad (93)$$

gde su vrednosti  $J$  ( $= J''$ ) kvantni brojevi donjeg stanja.

Uvrštenjem (88) u (90), (91) i (92) uz zanemarivanje malog borekcionog člana  $D_v$ , dobija se:

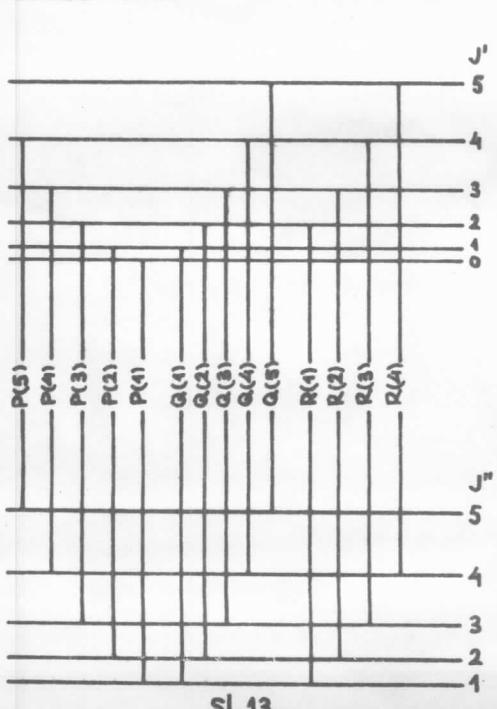
$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + 2B'_v + (3B'_v - B''_v)J + (B'_v - B''_v)J^2 = R(J) \quad (94)$$

$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 + (B'_v - B''_v)J + (B'_v - B''_v)J^2 = Q(J) \quad (95)$$

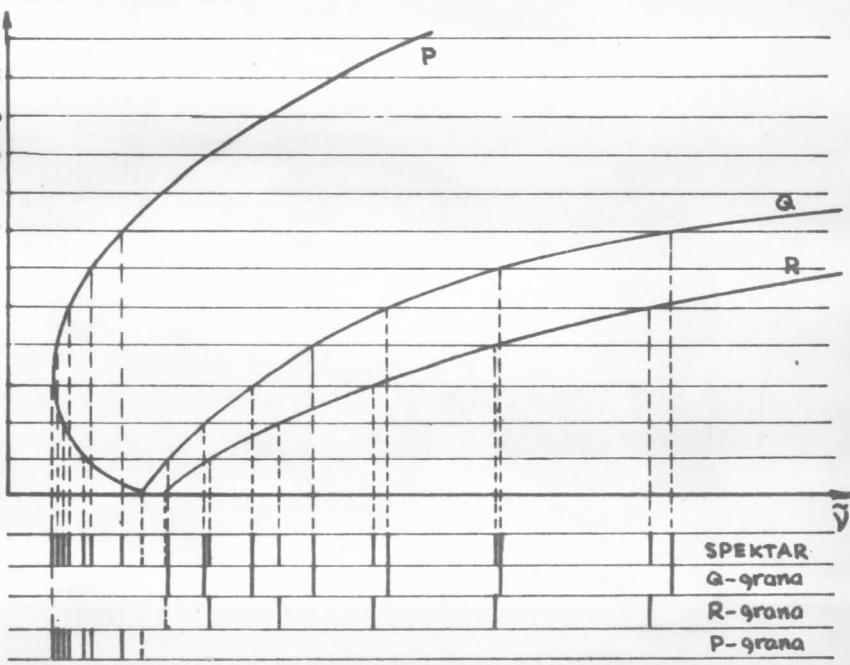
$$\tilde{V} = \tilde{V}_0 - (B'_v + B''_v)J + (B'_v - B''_v)J^2 = P(J) \quad (96)$$

Energijski dijagram je dat na slici 13. Grafički se može predstaviti Portrat-ovom dijagramu.

Na slici 14. dat je u glavnim crtama Portrat-ov dijagram jedne oscilatorne trake sa spektrom.



sl. 13



sl. 14

Sa slike se vidi da nedostaju linije  $P(0)$ ,  $Q(0)$  i  $R(0)$ .  $P$  i  $Q$  grane predstavljene su jednom formulom ( $m = J$  za granu  $P$  i  $m = J + 1$  za granu  $R$ )

$$\tilde{v} = \tilde{v}_0 + (B'_v + B''_v)m + (B'_v - B''_v)m^2. \quad (97)$$

Ako je  $B'_v - B''_v < 0$  ( $B'_v < B''_v$ ), u izrazu (94) linearni i kvadratni članovi imaju različite predznače, za jedno određeno  $J$ ,  $\tilde{v}$  dostiže maksimum (vrh parabole); u grani  $R$  se obrazuje čelo. U ovom slučaju čelo se nalazi na strani sa manjim talasnim dužinama od nulte linije; trake se proredjuju prema crvenom delu spektra. U suprotnom slučaju, kad je  $B'_v > B''_v$ , rastojanje jezgara je veće u donjem stanju, prema (96) u grani  $P$  se obrazuje čelo i trake se proredjuju prema ljubičastom delu spektra. Na osnovu (97) može se izračunati vrednost  $m_h$ , koji odgovara čelu Fortrat-ove parabole. Uvrštenjem  $\frac{d\tilde{v}}{dm} = 0$  u (97) dobija se:

$$m_h = -\frac{B'_v + B''_v}{2(B'_v - B''_v)}. \quad (98)$$

Uvrštenjem (98) u (97) dobija se rastojanje izmedju čela i nulte linije:

$$\tilde{v}_h - \tilde{v}_0 = -\frac{(B'_v + B''_v)^2}{4(B'_v - B''_v)}. \quad (99)$$

#### IZRAČUNAVANJE KOMBINACIONIH DIFERENCIJA I ROTACIONIH KONSTANTA.

Na osnovu (91), (92) i (93) i sa slike 13 sledi:

$$R(J) - Q(J) = F'_v(J+1) - F'_v(J) = \Delta_1 F'(J) \quad (100)$$

$$Q(J+1) - P(J+1) = F'_v(J+1) - F'_v(J) = \Delta_1 F'(J) \quad (101)$$

$$R(J) - Q(J+1) = F''_v(J+1) - F''_v(J) = \Delta_1 F''(J) \quad (102)$$

$$Q(J) - P(J+1) = F''_v(J+1) - F''_v(J) = \Delta_1 F''(J) \quad (103)$$

Uvrštenjem  $F(J) = B_v J (J+1)$  u izraz za kombinacione diferencije  $\Delta_1 F'(J)$  dobija se:

$$\Delta_1 F'(J) = F(J+1) - F(J) = 2 B_v (J+1) \quad (104)$$

Iz ove relacije se može izračunati rotaciona konstanta  $B_v$ .

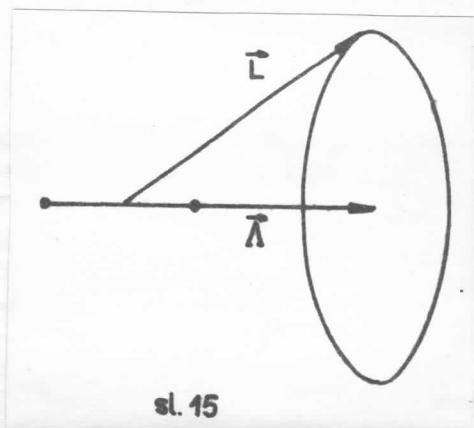
### 3. MULTIPLETNA STRUKTURA ELEKTRONSKIH STANJA

ORBITALNI MOMENT IMPULSA. U dvoatomskom molekulu, ako se smatra da je molekulska osa utvrđena, postoji aksijalno simetrično polje. U toku kretanja elektrona konstantna je samo ona komponenta orbitalnog momenta impulsa elektrona, koja spada u smeru molekulske ose. Stanje je slično kao kod atoma, koji se nalaze u jakom električnom polju. Električnom polju ovde odgovara elektrestatičko polje jezgara.  $\vec{L}$  vrši precesiju oko molekulske ose sa stalnom komponentom  $M_L \frac{h}{2\bar{u}}$ , gde  $M_L$  može da ima vrednost:

$$M_L = L, L - 1, L - 2, \dots -L$$

Na slici 14. prikazana je precesija momenta impulsa  $\vec{L}$  oko molekulske ose. U takvom električnom polju, ako se uzima suprotna orijentacija kretanja svih elektrona, energija sistema se ne menja, ali se menja  $M_L$  na  $-M_L$ . Tako nastanja, koja se razlikuju samo u predznacima  $M_L$ , imaju istu energiju (degenerisana stanja). Sa porastom jačine polja brzina precesije  $\vec{L}$  raste, tako da samo njegova komponenta  $M_L$  ostaje dobro definisana. Zato se kod dvoatomskih molekula elektronski stanja klasificiraju prema vrednostima  $|M_L|$  a ne prema  $L$ .

Ako se uvodi oznaka



sl. 15

$$\Lambda = |M_L|, \quad (106)$$

Kvantni broj  $\Lambda$  ostaje isti kao što je bilo kod simetrične čigre, i može da ima vrednosti:

$$\Lambda = 0, 1, 2, \dots L. \quad (107)$$

Prema vrednostima  $\Lambda = 0, 1, 2, 3 \dots$  odgovarajuća molekulska stanja se obeležavaju sa  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi, \dots$  analogno kao što je bilo kod atoma. Stanje  $\Sigma$  nije degenerisano, dok su stanja  $\Pi, \Delta, \Phi, \dots$  dva puta degenerisana.

SPIN. Kao i kod atoma, spinovi pojedinih elektrona daju rezultujući spin  $\vec{S}$ , kome odgovara kvantni broj, koji ima celobrojnu ili polucelobrojnu vrednost u zavisnosti od toga da li je broj elektrona u molekulu paran ili neparan. U  $\Sigma$  stanjima rezultujući spin ne rotira, sve dotle dok molekul ne vrši rotaciju i ne postoji spoljašnji magnetno polje. U stanjima  $\Delta \neq 0$ , postoji unutrašnje magnetno polje u smjeru molekulske ose. Ovo magnetno polje prouzrokuje precesiju rezultujućeg spina  $\vec{S}$ , oko molekulske ose sa stalnom komponentom  $M_S \frac{\hbar}{2\bar{u}}$ . Kvantni broj  $M_S$  se obeležava  $\Sigma$ , koji može da ima vrednost:

$$\Sigma = S, S-1, S-2, \dots -S. \quad (108)$$

Za stanja  $\Sigma (\Delta=0)$  kvatni broj  $\Sigma$  nije određeno.

TOTALNI MOMENT IMPULSA. Totalni moment impulsa elektrona oko molekulske ose  $\vec{\Omega}$  se dobija kao zbir  $\vec{\Lambda} + \vec{\Sigma}$ . Za kvatni broj  $\Omega$  se dobija:

$$\Omega = |\Lambda + \Sigma|. \quad (109)$$

Prema (107) za dato  $\Lambda \neq 0$  jedan elektronski term se cepe na  $2S+1$  komponentu. Za  $\Lambda=0$  ( $\Sigma$  je neodređeno) ne dolazi do cepanja.  $\Sigma$  stanja su singuletna sve dotle dok molekul ne rotira.  $2S+1$  je multiplicitet stanja.

XX

E K S P E R I M E N T A L N I D E O

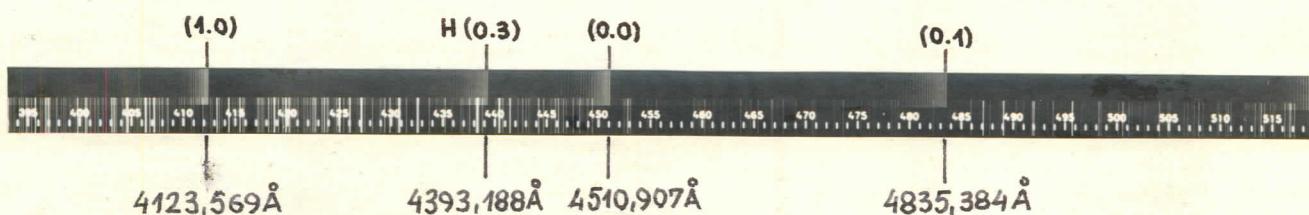
## 1. SNIMANJE SPEKTRA

Za snimanje spektra CO korišćen je cev za pražnjenje, punjen sa  $\text{CO}_2$  i pod niskom pritiskom. Za pobudjivanje korišćen je induktor. Jačina struja u cevi za vreme snimanja je bila 1,5 mA.

Spektar je snimljen na spektrografu PGS-2 sa rešetkom 650 zareza po mm u prvom redu, pri otvoru od  $25\ \mu$ . Korišćen je film "Ilford" osetljivosti 27 Din.

Neposrednim osvetljavanjem (cev je stavljen neposredno ispred pukotine) vreme ekspozicije je bilo sledeće:

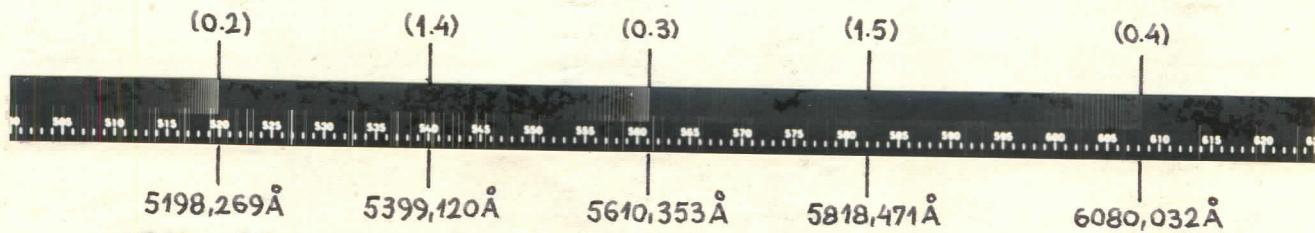
2 h za 1. film u oblasti od  $3950\text{ \AA}$  do  $5650\text{ \AA}$ , pri otvoru od  $25\ \mu$ . Ugao rešetke je bilo  $\alpha=9,95$ , položaj kasete 37. Za referentni spektar gvožđa pri otvoru od  $10\ \mu$ , u položaju kasete 41, vreme ekspozicije je bilo 5 sec.



Slika 16 Kontaktni pozitiv jednog dela 1. filma

Na ovom filmu su obuhvaćena traka za prelaze (1.0), (0.0) i (0.1) Ångström-ovog sistema i prelaz (0.3) Herzberg-ovog sistema.

Vreme ekspozicije drugog filma u oblasti  $4550\text{ \AA} - 6250\text{ \AA}$ , pri otvoru od  $25\ \mu$  bilo je 2 h 50min. Položaj kasete 37, ugao rešetke 9,95. Za referentni spektar Fe podaci su isti kao kod prvog filma.



Slika 17 kontaktni pozitiv jednog dela 2.filma  
Na drugom filmu obuhvaćeni su prelazi (0.2), (0.3), (0.4), (1.4) i (1.5) Ångström-ovog sistema.

## 2. ODREĐIVANJE ČELA TRAKA

Posle obrade filma, talasne dužine čela trake određene su metodom linearne interpolacije na komparatoru IZA-2.

U tablici I dati su rezultati merenja za čela traka, za pretvaranje talasnih dužina u talasne brojeve u vakuumu, korišćena je Kayser-ova tablica.

U tablici II dati su podaci uzeti iz literature [1] i [2], i za uporedjivanje i mereni rezultati u petoj koloni.  
Tablica II.

Čelo trake	Prelazi $v' - v''$	Intenz.	$\tilde{v}(\text{cm}^{-1})_{\text{izr.}}$	$\tilde{v}(\text{cm}^{-1})_{\text{izm.}}$	$\Delta \tilde{v}_{\text{izm.-izr.}}$
4123,6	(1.0)	7	24243,840	24244,0199	0,1799
4510,9	(0.0)	10	22162,329	22162,2947	0,0343
4835,3	(0.1)	10	20675,481	20675,1198	0,3612
5016	(1.3)	1	19930,661	-	-
5193,2	(0.2)	10	19232,088	19231,8327	0,2553
5399	(1.4)	2	18516,814	18516,7460	0,0680
5610,2	(0.3)	10	17819,742	17819,2544	0,4876
5818	(1.5)	2	17183,284	17181,8900	1,3940
6079,9	(0.4)	9	16643,097	16442,0396	1,0573

## 3. OBRADA REZULTATA - OSCILATORNA ANALIZA

Mereni rezultati su predstavljeni u Deslandres-ovoј tablici sa horizontalnim i vertikalnim diferencijama. (III tablica)

Uporedjivanjem dijagrame na slici 12 sa Deslandres-ovom tablicom, vidi se da rastojanje  $v''$ -nizova ( $v' = 0$  i 1) daje prvi oscilatorni kvant gornjeg stanja  $\Delta G'_{1/2}$ ; razlika sledeća dva  $v''$ -niza ( $v=1$  i 2) daje drugi oscilatorni kvant  $\Delta G'_{3/2}$  gornjeg stanja, itd.

Na osnovu merenih rezultata dobija se samo prvi oscilatorni kvant gornjeg stanja, što ujedno predstavlja i oscilatornu frekvenciju  $w_e$ :

$$\Delta G'_{1/2} = w_e = 2081,7252 \text{ cm}^{-1}.$$

Na isti način razlike dvaju  $v'$ -nizova daje prvi oscilatorni kvant donjeg stanja  $\Delta G''_{1/2}$ , itd.

I TABLICA

Imjerene talasne duzine i talasni brojevi čela traka Ångström-ovog sistema  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  molekula

prelazi $v' - v''$	$\lambda_1(\text{\AA})$	$\lambda_2(\text{\AA})$	ČELO TRAKE		
			L(mm)	$\lambda(\text{\AA})$	$\tilde{\nu}(\text{cm}^{-1})$
(1.0)	4120,211	4126,192	0,814	0,351	4123,569
(0.9)	4494,519	4528,619	4,646	2,196	4510,907
(0.1)	4824,165	4839,549	2,189	0,506	4835,384
(0.2)	5196,100	5264,582	1,160	0,417	5198,269
(1.4)	5393,174	5405,779	1,730	0,655	5399,120
(0.3)	5602,955	5618,633	1,758	0,714	5610,353
(1.5)	5816,376	5859,608	5,978	0,396	5818,471
(0.4)	6065,489	6102,178	10,013	2,156	6080,038

III TABLICA

Deslandres-ova tablica merenih rezultata sa odgovarajućim razlikama

$v'$	$v''$	0	1	2	3	4	5
0	22162,2947	20 675,1198	19238,8327	17819,2544	$\Delta G''_{5/2}=1412,5783$	$\Delta G''_{5/2}=1377,2148$	$16442,0396$
	$\Delta G''_{3/2}=1487,1749$	$\Delta G''_{3/2}=1443,2871$					
	$\Delta G''_{9/2}=2081,7252$						
	24244,0199						
							18516,7460
							17181,8900
							$\Delta G''_{9/2}=1334,8560$

Mereni rezultati daju:

$$\begin{aligned}\Delta G_{4_2}'' &= 1487,1749 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta G_{3_2}'' &= 1443,2871 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta G_{5_2}'' &= 1412,5783 \text{ cm}^{-1} \\ \Delta G_{7_2}'' &= 1377,2148 \text{ cm}^{-1}\end{aligned}$$

Kako ne postoji dovoljan broj podataka za nizove  $v''$  [prelazi na donje stanje (2.0), (3.0), itd.] nije moguće izračunati empirijske konstante  $a'$  i  $b'$  odnosno oscilatornu frekvenciju  $\omega'_o$  i anharmonicitet  $w'_o x'_o$ .

Korišćenjem empirijske formule

$$\tilde{V} = \tilde{V}_{00} + (a'v' - b'v'^2) - (a''v'' - b''v''^2) \quad (110)$$

iz

$$\tilde{V}_{01} = 20675,1198 = 22162,2947 - a'' + b'' \quad ;$$

$$\tilde{V}_{02} = 19234,8327 = 22162,2947 - 2a'' + 4b'' \text{ dobija se za}$$

$$a'' = 1500,3328, \quad b'' = 17,5509.$$

Kako je izraz (110) istog oblika kao i izraz (85), empirijske konstante  $a'$  i  $a''$  identični su sa oscilatornim frekvencijama  $\omega'_o$  i  $\omega''_o$ , konstante  $b'$  i  $b''$  identični su sa anharmonicitetima  $w'_o x'_o$  i  $w''_o x''_o$ . Na osnovu (33)<sup>za</sup>  $w'_e$  i  $w''_e x''_e$  imamo:

$$w''_e = 1517,8837 \text{ cm}^{-1}, \quad w''_e x''_e = 17,5509 \text{ cm}^{-1}$$

Korišćenjem podataka Gluško-a iz literature [2] za  $w'_e x'_e$ , moguće je izračunati energijski nivoi oscilatornih prelaza. Na osnovu (30) energijski nivoi (zanemarivanjem člana trećeg stepena) su dati:

$$G_v = w_e \left( v + \frac{1}{2} \right) - w'_e x'_e \left( v + \frac{1}{2} \right)^2. \quad (111)$$

Za gornje stanje  $B^1\Sigma^+$  se dobija:

$$\begin{aligned} G'_0 &= 1031,0376 \text{ cm}^{-1} & E'_0 &= 0,1278 \text{ eV} \\ G'_1 &= 3034,1628 \text{ cm}^{-1} & E'_1 &= 0,376 \text{ eV} \end{aligned}$$

Za donje stanje  $A^1\Pi$ :

$$\begin{aligned} G''_0 &= 754,5543 \text{ cm}^{-1} & E''_0 &= 0,0935 \text{ eV} \\ G''_1 &= 2237,3355 \text{ cm}^{-1} & E''_1 &= 0,27729 \text{ eV} \\ G''_2 &= 3695,0192 \text{ cm}^{-1} & E''_2 &= 0,4567 \text{ eV} \\ G''_3 &= 5097,6029 \text{ cm}^{-1} & E''_3 &= 0,6318 \text{ eV} \\ G''_4 &= 6475,0866 \text{ cm}^{-1} & E''_4 &= 0,8025 \text{ eV} \end{aligned}$$

Na grafikonu 1 su predstavljeni  $v'$ -nizovi za  $v' = 0$  i 1, koji su ustvari izmereni. Prelazi (1.2) i (1.3) su slabog intenziteta.

Na osnovu (86) uz zanemarivanje viših članova dobija se:

$$\tilde{V}_e = \tilde{V}_{00} - \left( \frac{1}{2} w_e' - \frac{1}{4} w_e' x_e' \right) + \left( \frac{1}{2} w_e'' - \frac{1}{4} w_e'' x_e'' \right)$$

$$\tilde{V}_e = \tilde{V}_{00} - G'_0 + G''_0$$

$$\tilde{V}_e = 21885,8114 \text{ cm}^{-1}.$$

#### 4. DISOCIJACIONE ENERGIJE

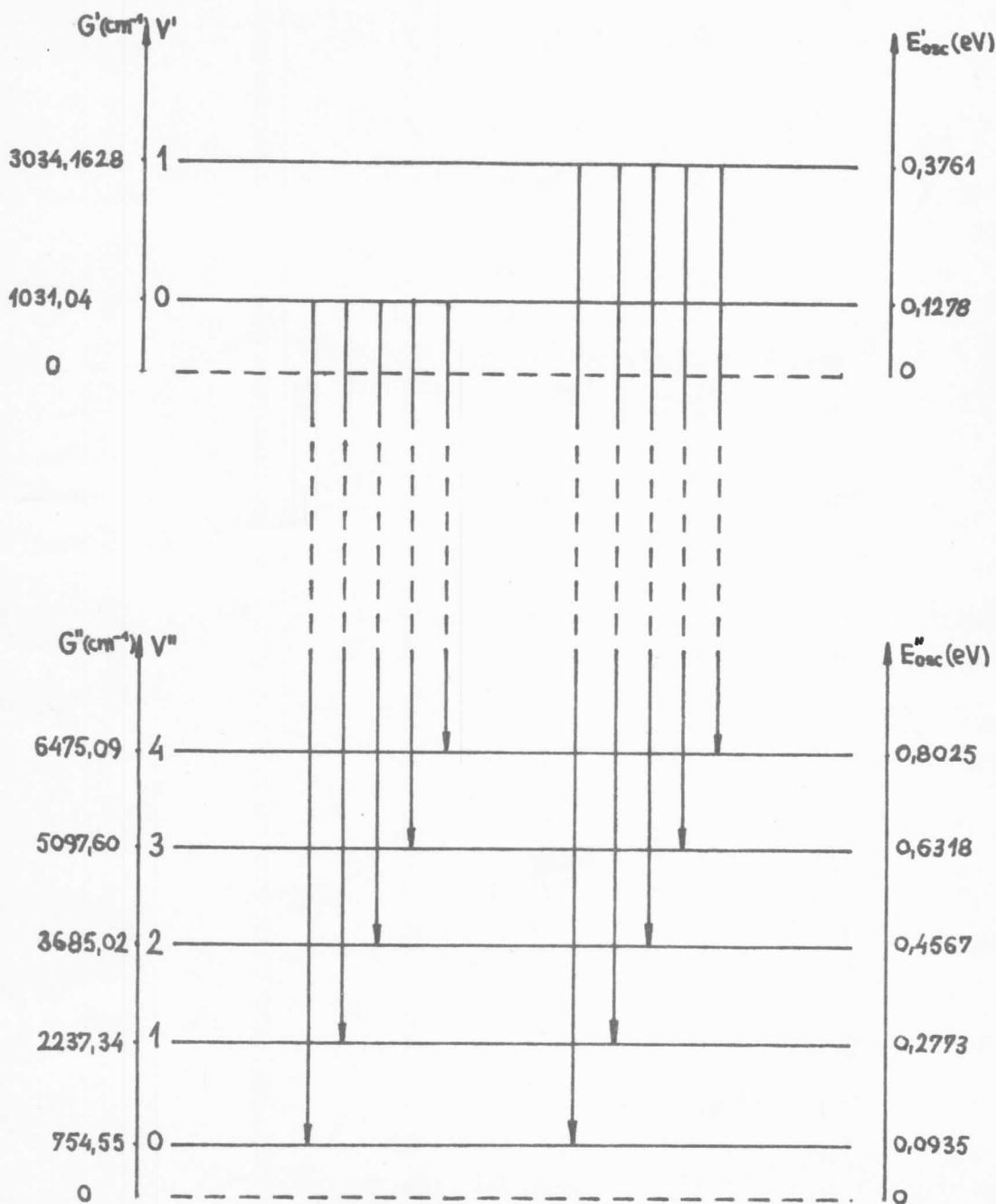
Disocijaciona energija je određena formulom (43).

Kako je u izrazu (48) za određivanje potencijalne krive (Morse-ov izraz) korišćena veličina  $D_e$ , prema (47) se izračunava  $D_e$ .

$$D_e = \frac{w_e^2}{4w_e x_e} \quad (112)$$

$$D'_e = 27568,096 \text{ cm}^{-1}, \quad D''_e = 32820 \text{ cm}^{-1}$$

Grafikon 1



Za konstruisanje potencijalne krive, prema Morse-ovom izrazu, potrebno je znati vrednost za konstantu  $\beta$ . To se izračunava prema formuli (50):

$$\beta = \sqrt{\frac{2\bar{u}^2 c \mu}{D_e}} \quad W_e = 1,2177 \cdot 10^{-7} \quad W_e \sqrt{\frac{\mu_A}{D_e}}, \quad (113)$$

gde je  $\mu_A$  redukovana masa:  $\mu_A = 6,0564$  g/mol.

$$\beta' = 4,165 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}, \quad \beta'' = 2,672 \cdot 10^8 \text{ cm}^{-1}$$

## 5. ANALIZA ROTACIONE STRUKTURE

Za analizu rotacione strukture uzeti su trake prelaza (0.0) i (0.1). Koristeći se metodom linearne interpolacije, prema formuli

$$\lambda = a + bx \quad (114)$$

odredjene su rotacione linije. Kako spektar nije dovoljno razložen oko čela, merenje je bilo otežano, kao i identifikovanje linijsa, naročito u prvom slučaju, za traku (0.0).

### a) ROTACIONA STRUKTURA TRAKE (0.0)

Iz referentnog spektra gvožđja uzete su linije sa talasnim dužinama  $\lambda_1$  i  $\lambda_2$ , i na komparatoru su odredjene njihovi položaji  $x_1$  i  $x_2$ .

$$\begin{array}{ll} \lambda_1 = 4476,022 \text{ Å} & \lambda_2 = 4525,146 \text{ Å} \\ x_1 = 138,3904 & x_2 = 131,6859 \end{array}$$

Tako su odredjene konstante a i b:  $a = 5490,0088$ ,  $b = -7,327$ .

Mereni rezultati su dati u tablici IV.

Identifikovanje linijsa je vršena tako da su na osnovu podataka iz literature [1] prema formulama (94), (95) i (96) izračunati su talasni brojevi za svaku liniju R, Q i P grane,

IV T A B L I C A  
Talasni brojevi rotacionih linija trake (O.O)

Red. br.	x	bx	$\lambda(\text{\AA})$	$\tilde{v}(\text{cm}^{-1})$
1.	133,6293	979,1019	4510,9069	22162,2947
2.	673	4221	5867	63,8687
3.	7228	7869	2219	65,6612
4.	7643	980,0910	09,9178	67,1558
5.	8822	9549	200	70,685
6.	9119	981,1726	08,8362	72,4756
7.	9283	2926	7162	73,0656
8.	9924	7623	2465	75,3717
9.	134,0263	982,0107	07,9981	76,5978
10.	0620	2723	7365	77,8807
11.	1708	983,0694	06,9394	81,8079
12.	2797	8679	1409	85,73,61
13.	3612	984,4643	05,5443	88,6764
14.	4286	9584	0504	91,109
15.	4800	985,3350	04,6738	92,9624
16.	5843	986,0992	03,9096	96,725
17.	6775	7820	2268	22200,0917
18.	7663	987,4327	02,5761	03,3036
19.	8145	7858	2230	05,0423
20.	9783	988,9860	01,0228	11,0633
21.	135,0480	989,4967	00,5121	12,9902
22.	1060	9217	0871	15,6288
23.	1538	990,2719	4499,7369	17,3107
24.	2267	8060	2028	19,9463
25.	2967	991,3189	98,6899	22,488
26.	3780	9146	0942	25,4274
27.	4300	992,2956	97,7132	27,3073
28.	5473	993,1551	96,8537	31,5544
29.	5940	4972	5116	33,243
30.	6617	9933	0155	35,6966
31.	7297	994,4915	95,5173	38,1647
32.	9465	996,0800	93,9288	46,021
33.	9982	4588	5500	47,896
34.	136,0552	996,8764	93,1324	22249,967
35.	2725	998,4684	91,5404	57,853
36.	3650	999,1464	90,8624	61,212
37.	4245	5823	90,4265	62,270

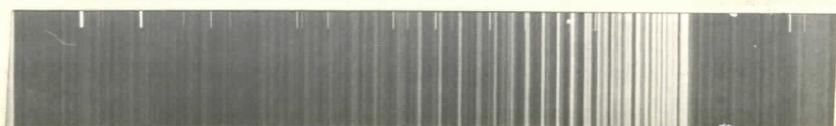
38.	6107	1000,9466	89,0622	70,139
39.	7052	1001,6390	88,3698	73,572
40.	9515	1003,4436	86,5652	82,533
41.	137,0660	1004,2826	85,7262	86,702
42.	4145	8360	85,1728	89,449
43.	4737	1007,2698	82,7390*	22301,552
44.	8060	1009,7046	80,3042	13,674
45.	8835	1010,2724	79,73,64	16,502
46.	138,2184	1012,7262	77,2826	28,728
47.	5580	1015,2145	74,7943	41,148
48.	6248	7039	74,3049	43,591
49.	139,0490	1018,8120	71,1968	59,202
50.	5160	1022,2337	67,7751	76,248
51.	140,0055	1025,0203	64,1885	94,223

V T A B L I C A  
Ozračunate vrednosti rotacionih linija trake (0.0) u  $\text{cm}^{-1}$

J	R (j)	Q (J)	P (J)
0			
1	22179,902	22172,112	22168,217
2	85,185	73,500	65,710
3.	91,162	75,582	63,897
4.	97,333	78,358	62,778
5.	22205,198	81,828	62,353
6.	13,267	85,992	62,622
7.	22,010	90,850	63,585
8.	31,457	96,402	68,242
9.	41,699	2220,2749	67,694
10.	52,433	09,588	70,638
11.	63,962	17,222	74,377
12.	76,185	25,550	78,810
13	89,102	34,572	83,937
14	22302,713	44,388	89,758
15	17,018	54,698	96,273
16	32,017	65,802	22203,482
17	47,710	77,600	11,385
18	64,097	90,092	19,982
19	81,178	22303,278	29,273
20	98,953	17,153	39,258
21		31,732	49,937
22		47,000	61,310
23		62,962	73,377
24		79,618	86,138
25		96,968	99,593
26			22313,743
27			28,585
28			44,122
29			60,353
30			77,278
31.			94,897

koje su date u tablici V. Mereni rezultati su predstavljeni na grafikonu 2 (Fertrat-ov dijagram). U tablici VI izračunate su kombinacione diferencije prema formulama (100), (101), (102) i (103). Izraz (104) korišćen je za izračunavanje rotacionih konstanata  $B_v$ .

Multe linije su izračunate na osnovu (99) formule i predstavljene su u tablici VII, zajedno sa vrednostima rotacionih konstanata, koji su dobivene na osnovu formule (61).



Uvećani snimak rotacione strukture (0.0) trake  
TABLICA VII

kvantni broj $v$	Rotacione konstante		Prelaz $v' - v''$	$\tilde{V}_o (\text{cm}^{-1})$
	$B'_v$	$B''_v$		
0	1,9475	1,60046	(1.0)	24253,6999
1	1,92075	1,57817	(0.0)	22171,418
2	-	1,55588	(0.1)	20683,6398
4	-	1,41099	(0.2)	19239,6627

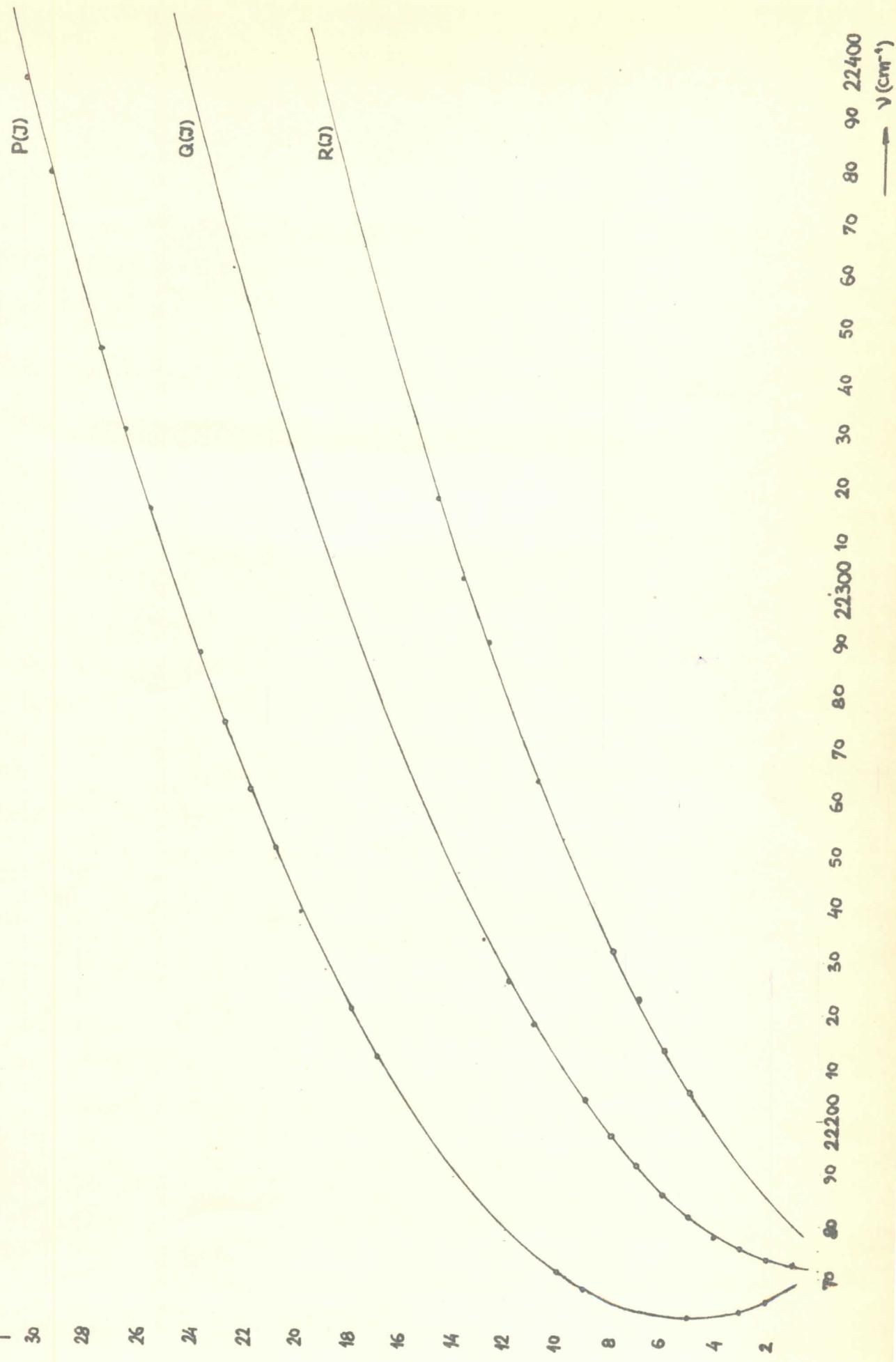
Na osnovu merenih rezultata (srednja vrednost kolone 9 i 10 u tablici VI) vrednost rotacionih konstanata za kvantni broj  $v'=0$  i  $v''=0$  su:

$$B'_o = 1,9429 \text{ cm}^{-1} \quad B''_o = 1,6028 \text{ cm}^{-1}$$

#### b) ROTACIONA STRUKTURA TRAKE (0.1)

Za traku (0.1) izvršena je rotaciona analiza ston razlikom da su rezultati tačniji i nisu izračunati vrednosti talasnih brojeva za svaku granu posebno. Kako se zna prema zaključcima na strani 31, da P-grana obrazuje čelo, identifikovane

Grafikon 2



J

28

26

24

22

20

18

16

14

12

10

8

6

4

2

Izmjereni talasni brojevi Ångström-ovog sistema  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  molekula trake (0,0) sa kombinacionim diferencijama.

$J$	$R(J)$	$\Theta(J)$	$P(J)$	$R(J)-Q(J)=\frac{Q(J+1)-P(J+1)}{\Delta_1 F'(J)}$	$R(J)-Q(J+1)=\frac{R(J)-Q(J+1)}{\Delta_1 F''(J)}$	$Q(J)-P(J+1)=\frac{Q(J)-P(J+1)}{\Delta_1 F''(J)}$	$\frac{\Delta_1 F'(J)}{J+1}$	$\frac{\Delta_1 F''(J)}{J+1}$
0								
1	22172,4756			7,3556		6,6088	3,6778	3,3044
2	73,0656	22165,6612		11,5030		9,1969	3,8343	3,0656
3	75,3717	63,8687		19,8058	19,5132	15,5860	3,9026	3,1172
4	22197,6865	81,8079	62,2947	23,2344	21,2541	19,3062	3,8724	3,2177
5	22205,0423	85,7361		31,374		21,8812	3,8934	3,1259
6	12,9902	91,109		34,8294	36,1478	25,758	3,9217	3,2196
7	22,483	96,725		67,1558	67,1558	28,2508	29,5692	3,2855
8	31,5544	22203,3036	70,6850	35,1906	33,8063	32,6186	3,2618	(3,0733)
9	51,117	08,9264		46,0593	37,9426		(3,199)	3,8383
10	63,370	17,3107						3,1618
11		25,4274						
12		33,243		56,206		44,5666	3,1690	
13	89,449			88,6764				
14	22301,552			92,9624				
15	16,502			22200,0917				
16				11,0633				
17				19,9463				
18				27,3073				
19				79,0783				
20	22317,243			38,1647		67,276	3,9539	3,2036
21				49,967				
22				61,212				
23				73,572				
24				86,702				
25								
26								
27								
28								
29								
30								

su izmerene linije, koji su dati u tablici VIII. Za referentnog spektra Fe uzete su linije:

$$\lambda_1 = 4736,314 \text{ \AA}$$

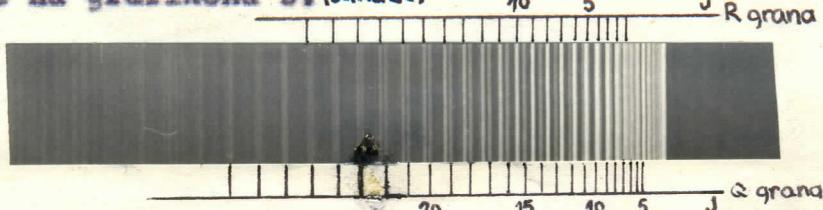
$$\lambda_2 = 4859,748 \text{ \AA}$$

$$X_1 = 103,6396$$

$$X_2 = 86,8000$$

Konstante:  $a = 54,95,9923$  i  $b = -7,33$

Kombinacione razlike su date u tablici IX. Fortrat-ov dijagram dat je na grafikonu 3. (slika 20)



Uvećani snimak rotacione strukture (0.1) trake

Na osnovu kombinacionih razlika, rotacione konstante za prelaz  $v' = 0$ ,  $v'' = 1$  su:

$$B'_0 = 1,9475 \text{ cm}^{-1}, \quad B''_1 = 1,5782 \text{ cm}^{-1}.$$

#### 6. IZRAČUNAVANJE ROTACIONE KONSTANTE, MOMENT INERCIJE I RAVNOTEŽNO RASTOJANJE IZMEDJU ATOMA

Prema (61) može se izračunati rotaciona konstanta za gornje i donje stanje. Kako nema dovoljnih podataka, za konstantu uzima se vrednost iz literature [1] :  
( $\alpha'_e = 0,027$ ).

$$B'_0 = 1,9475 + 0,0135 = 1,9610 \text{ cm}^{-1}.$$

$$\begin{aligned} \text{Vrednost } \alpha''_e \text{ je određen iz: } B''_e &= B''_1 + \frac{1}{2} \alpha''_e \\ \alpha''_e &= 0,0246 \text{ cm}^{-1}. \end{aligned}$$

Tako izračunata vrednost  $B''_e = 1,6151 \text{ cm}^{-1}$

Na osnovu (60) moment inercije se izračunava po formuli:

$$I_e = \mu r_e^2 = \frac{27,98}{B_e} \cdot 10^{-40} \text{ gcm}^2, \quad (115)$$

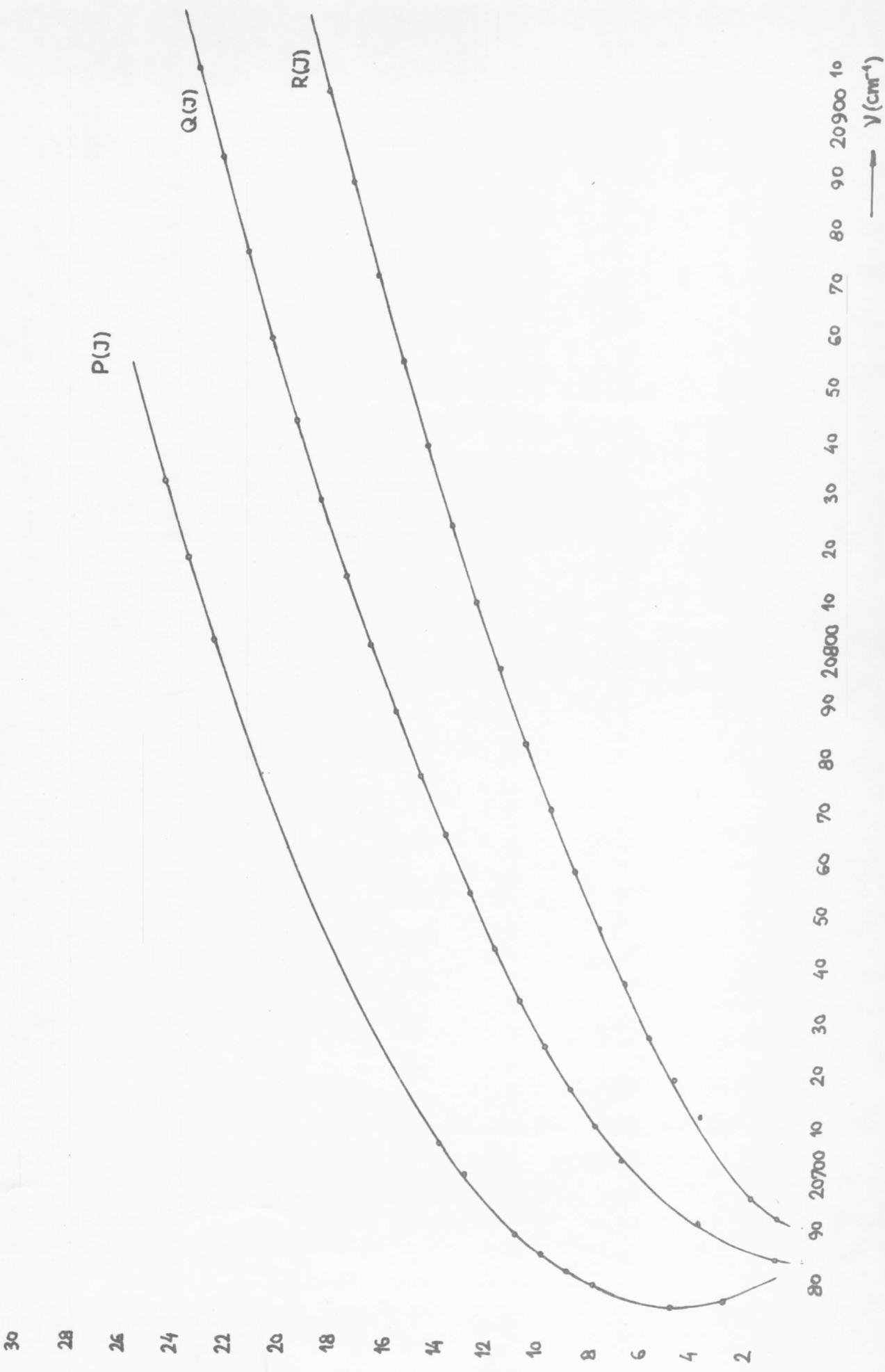
VIII T A B L I C A  
Talasni brojevi rotacionih linija trake (0.1)

red. br.	$\pi$	bx	$\lambda(\text{\AA})$	$\tilde{v}(\text{cm}^{-1})$
1.	90,100	660,7033	4835,2890	20675,5353
2.	143	1,0186	4,9737	76,8728
3.	212	1,5246	4,4677	79,0376
4.	2875	2,0792	3,9131	81,4121
5.	393	2,8519	3,1404	84,720
6.	489	3,5558	2,4365	87,7289
7.	5225	3,8015	2,1908	88,7807
8.	618	4,5018	1,4905	91,7787
9.	6445	4,6961	1,2962	92,6432
10.	7585	5,5320	0,4603	96,196
11.	805	5,6007	0,3916	96,4847
12.	9207	6,4472	29,5451	20700,1165
13.	91,0075	7,0850	8,9073	02,8529
14.	090	7,6897	8,3026	05,4421
15.	213	8,5913	7,4010	09,3107
16.	286	9,1264	6,8659	11,6062
17.	439	670,2773	5,7444	16,4218
18.	5135	0,7940	5,1983	18,7656
19.	698	2,1463	3,8460	24,5422
20.	752	2,5422	3,4501	26,274
21.	7775	2,7291	3,2632	27,0771
22.	966	4,1108	1,8815	33,0144
23.	92,011	4,4406	1,5517	34,4334
24.	0815	4,9574	1,0349	36,6565
25.	2735	6,3648	19,6275	42,7106
26.	297	6,5370	9,4553	43,4555
27.	4028	7,3121	8,6798	46,791
28.	6014	8,7683	7,2240	53,0618
29.	7468	9,8340	6,1583	57,6556
30.	9443	681,2817	4,7106	63,8937
31.	93,1092	682,4904	3,5019	69,1084
32.	2453	3,8546	2,1372	74,9966
33.	4992	5,2964	0,6959	81,2242
34.	658	6,6744	09,3179	87,1776
35.	905	8,6054	7,3869	95,5287
36.	94,065	9,4965	6,4958	99,3842

37.	108	9,8116	6,1807	20800,7467
38.	3395	691,5085	4,4638	08,0938
39.	489	2,6044	3,3879	12,8358
40.	568	3,1834	2,8889	15,3483
41.	7903	4,8129	1,1791	22,4183
42.	9315	5,8442	2800,1481	26,8886
43.	9550315	6,5809	4799,4114	30,0846
44.	2615	8,2668	7,6255	37,8362
45.	401	9,2893	6,7030	41,8448
46.	7555	701,8878	4,1043	53,1390
47.	687	2,8517	3,1406	57,3316
48.	96,2775	5,7141	4790,2787	69,7958
49.	400	6,6120	4789,3803	73,709
50.	816	9,6612	6,3311	87,0076
51.	940	710,5702	5,4221	90,9796
52.	97,375	3,7588	2,2335	20904,9014
53.	473	4,4771	1,5152	08,0460

Grafikon 3

-49-



Izmereni talasni brojevi Angström-ovog sistema  $^{12}\text{C}^{16}\text{O}$  molekula trake (0.1) sa kombinacionim diferencijama.

$J$	$R(J)$	$Q(J)$	$P(J)$	$R(J)-Q(J)$ $=\Delta_1 F'(J)$	$Q(J)-P(J)$ $=\Delta_1 F''(J)$	$R(J)-Q(J+1)$ $=\Delta_1 F'(J)$	$Q(J)-P(J+1)$ $=\Delta_1 F''(J)$	$\frac{\Delta_1 F'(J)}{J+1}$	$\frac{\Delta_1 F''(J)}{J+1}$
0	20692, 6432	20584, 7200		7,9232		3,9616	2,9195		
1	96, 4874		87, 7289	20676, 8728		8,7585			
2	20711, 6062	91, 7787							
3	18, 7656	20702, 8529							
4	26, 274	09, 3107	79, 0376	33, 8036	30, 2731	23, 4211			
5	36, 6565	16, 4218	81, 4121	37, 4803	35, 0097	27, 3458	21, 8153	3, 7841	
6	46, 791	24, 5422	84, 7220	41, 2338	39, 8222	30, 3692	27, 8986	3, 8899	3, 0998
7	57, 6556	33, 0144	88, 7807	44, 5662	44, 2337	33, 1134	31, 7018	3, 8822	3, 1702
8	69, 1084	42, 7106	(96, 196)	52, 8183		36, 0940	35, 7615	(4, 0212)	3, 2510
9	81, 2242	53, 0618	20700, 1165	55, 0320		38, 5136	38, 9184	(4, 0174)	3, 0765
10	95, 5289	63, 8937	05, 4421	58, 5246		42, 4671	42, 5941	(4, 0633)	3, 2667
11	20808, 0938	74, 9966	62, 8396			45, 2001	47, 6197	3, 9310	3, 2285
12	53, 1390	87, 1776	65, 9624			47, 4217		3, 902	3, 0614
13	69, 7958	99, 3842	70, 4116			50, 6586		3, 927	3, 1661
14	87, 0076	20812, 8358	74, 1718			53, 7548		3, 8801	3, 1620
15	20904, 9014	26, 8886	78, 0128			56, 9600		3, 9117	3, 1644
16	23, 8254	41, 8443	81, 9805			60, 1190		3, 9037	3, 1631
17	43, 2292	57, 3316	85, 8976			63, 0566		3, 9006	3, 1528
18	63, 6820	73, 709	72, 7024			66, 4938		3, 9038	3, 1663
19	83, 1212	90, 9796	89, 973	90, 2329		69, 5202		3, 9044	3, 1600
20	21005, 8106	20908, 0460	15, 3483	92, 1416	92, 6977	75, 0752		3, 911	3, 1609
21	28, 6966	30, 0846	97, 7646	96, 5648		79, 1612		3, 8392	3, 1281
22		26, 6494	102, 047			80, 8320		3, 8626	3, 1664
23		47, 8646						3, 9248	3, 1089
24		65, 551						21009, 6912	21009, 6912
25		86, 1876						52, 9896	52, 9896
26									
27									
28									
29									
30									

$$i \quad r_e = \frac{4,1061}{\sqrt{\mu_A B_e}} \cdot 10^{-8} \text{ cm.} \quad (116)$$

U gornjem stanju ( $v' = 0$ ):

$$I'_e = 14,28 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^2,$$

$$r'_e = 1,12 \cdot 10^{-8} \text{ cm.}$$

U donjem stanju ( $v'' = 0$ ):

$$I''_e = 17,5 \cdot 10^{-40} \text{ cm}^2,$$

$$r''_e = 1,234 \cdot 10^{-8} \text{ cm.}$$

## 7. KONSTRUKCIJA POTENCIJALNE KRIVE

Prema Morse-ovom izrazu (48) se vrši konstruisanje potencijalne krive u gornjem i u donjem elektronском stanju. Korišćenjem izračunatih vrednosti za  $\beta'$  i  $\beta''$  (na strani 41) u tablicama X i XI dati su računski rezultati koji su predstavljeni na grafikonu 4.

Za stanje  $A^4\Pi$ :

TABLICA X

$r(10^{-8} \text{cm})$	$(r-r_e) \cdot 10^{-8} \text{cm}$	$\beta''(r-r_e)$	$e^{-\beta''(r-r_e)}$	$1-e^{-\beta''(r-r_e)}$	$[1-e^{-\beta''(r-r_e)}]^2$	$U(\text{cm}^{-1})$
1,00	- 0,234	- 0,6253	1,8776	-0,8776	0,7702	25280
1,10	- 0,134	- 0,358	1,4333	-0,4333	0,1877	6162
1,18	- 0,054	- 0,1443	1,1503	-0,1503	0,0226	741,4
1,20	- 0,034	- 0,0909	1,0942	-0,0942	0,0089	291,3
1,234	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,0
1,28	0,046	0,1229	0,855	0,115	0,0132	434,1
1,32	0,086	0,2298	0,7945	0,2055	0,0433	1392,0
1,38	0,146	0,3901	0,6771	0,3229	0,1042	3422
1,40	0,166	0,4436	0,646	0,354	0,1253	4113
1,50	0,266	0,7108	0,4916	0,584	0,2585	8483
1,60	0,366	0,9779	0,3753	0,6247	0,3903	12810
1,80	0,566	1,5123	0,2231	0,7769	0,5897	19350
2,00	0,766	2,0467	0,1287	0,8713	0,7592	24920
2,50	1,266	3,3827	0,034	0,966	0,9332	30630
3,00	1,766	4,7187	0,0091	0,9909	0,9819	32230
3,50	2,060	5,5204	0,0041	0,9959	0,9918	32550

Za stanje  $B^1\Sigma^+$ :

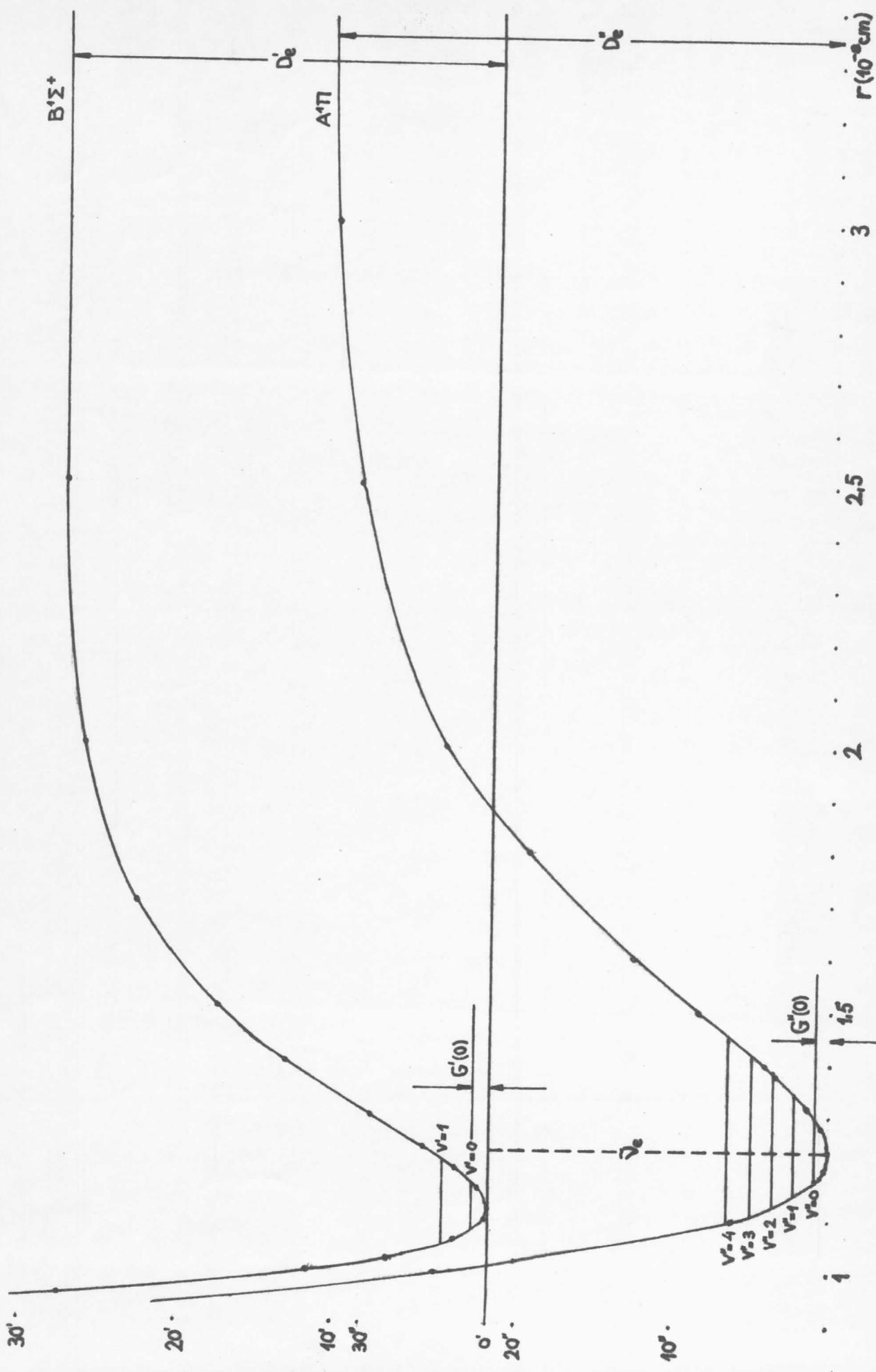
TABLICA XI

$r(10^{-8} \text{cm})$	$(r-r_e) \cdot 10^{-8} \text{cm}$	$\beta'(r-r_e)$	$e^{-\beta'(r-r_e)}$	$1-e^{-\beta'(r-r_e)}$	$[1-e^{-\beta'(r-r_e)}]^2$	$U'(\text{cm}^{-1})$
0,90	-0,22	-1,3563	3,8962	-2,8962	8,387	215800
0,95	-0,17	-0,708	2,034	-1,034	1,069	27510
1,00	-0,12	-0,4998	1,6487	-0,6487	0,4208	11601
1,02	-0,10	-0,4165	1,522	-0,478	0,2285	6299
1,06	-0,06	-0,2499	1,284	-0,284	0,0807	2223
1,10	-0,22	-0,0833	1,0833	-0,0833	0,0063	191,3
1,12	0,00	0,00	1,00	0,00	0,00	0,0
1,16	0,04	0,1666	0,8437	0,1563	0,0244	673,5
1,20	0,08	0,3332	0,7189	0,2811	0,0790	2178,35
1,24	0,12	0,4998	0,6065	0,3935	0,1584	4269
1,30	0,18	0,7494	0,4724	0,5276	0,2784	7674
1,40	0,28	1,1662	0,3104	0,6896	0,4755	13110
1,50	0,38	1,5817	0,2060	0,7940	0,6304	17380
1,70	0,58	2,4157	0,0889	0,9111	0,8301	22880
2,00	0,88	3,6652	0,0255	0,9745	0,9496	26180
2,50	1,38	5,7477	0,0030	0,9970	0,9940	27403,1
3,00	1,88	7,8302	0,0004	0,9996	0,9992	27550
3,50	2,38	9,9127	0,00005	0,9999	0,9998	27563

$U(10^3 \text{ cm}^{-1})$

Grafikon 4

- 54 -



slika 21

## Z A K L J U Č A K

U teorijskom delu rada je postepeno razvijena teorija o nastanku elektronskih spektara dvoatomskih molekula. U eksperimentalnom delu ova teorija je potvrđena.

Na osnovu snimljenog spektra Ångström-ovog sistema CO molekula izračunati su:

- oscilatorna frekvencija  $\omega_e$  i  $\omega''_e$ ,
- anharmonicitet donjeg stanja  $\omega''_e x_e$ ,
- energijski nivoi oscilatornih prelaza,
- talasni broj čisto elektronskog prelaza  $\tilde{v}_e$ ,
- disocijacione energije  $D'_e$  i  $D''_e$ .

U Deslanders-ovoј tablici (III tablica) predstavljeni su čela traka sa horizontalnim i vertikalnim razlikama. Druge horizontalne razlike (43,8878, 30,7088 i 35,3635) pokazuju da na oscilatornom prelazu (0.1) postoji perturbacija (literatura [2]).

Na osnovu rotacione analize trake (0.0), iz tablice VI vidi se da u osmoj koloni rezultat za  $J = 10$  jako odstupa od ostalih vrednosti, prema tome u grani Q za  $J=10$  postoji perturbacija. Zato su rezultati rotacione analize trake (0.1) bolje se slažu sa rezultatima rotacionih konstanata iz literaturе [1].

Na osnovu rotacione analize izračunati su:

- rotacione konstante  $B'_e$  i  $B''_e$ ,
- momenti inercije  $I'_e$  i  $I''_e$ ,
- ravnotečna rastojanja jezgara  $r'_e$  i  $r''_e$ .

Konstruisana je Morse-ova potencijalna kriva.

L I T E R A T U R A

1. Gerhard Herzberg, Molekulski spektri i struktura molekula  
I Spektar dvoatomskih molekula (na madjarskom),  
Budimpešta 1956.
2. Mr.Jevrem D. Janjić, Ispitivanje elektronskog molekulskog spektra  
 $^{12}\text{C}^{18}\text{O}$  i  $^{12}\text{C}^{18}\text{O}^+$  molekula - Doktorska disertacija -, Novi Sad 1972.
3. Dr.Ivan Janić, Eksperimentalne vežbe iz atomske fizike (II deo),  
Novi Sad 1972.
4. Mika József, Török Tibor, Emisiona spektroskopija (na madjarskom),  
Budimpešta, 1968.
5. Mátrai Tibor, Praktična spektroskopija (na madjarskom) Budimpešta  
1963.
6. V.N. Kondratjev, Struktura atoma i molekula, Beograd 1966; 236-310.
7. E.V. Špoljskij, Atomska fizika I, Beograd 1963; 408-410.
8. L.N. Dobrecov, Atomska fizika (na madjarskom), Budimpešta 1964;  
195 - 207.
9. L.D. Landau i E.M. Lifšic, Kvantna mehanika, Beograd, 1966. 260-301.
10. J.Egert, L.Hok, G.-M.Švab, Učebnik fizičke hemije, Beograd 1966,  
262-277.
11. George R.Harison, Richard C.Lord, Johan R.Loofbaurow, Praktična  
spektroskopija, Beograd 1965 212-243
12. С.К. Колинин, А.А.Янель, Л.З.Найморк, Атлас дуговога и искровога  
спектрова жељеза, Москва 1953.
13. H.Kayser, Tabelle der Schwingungszahlen, Leipzig 1925.
14. I.N. Bronstejn - K.A. Semendjajev, Matematički priručnik (na  
madjarskom), Budimpešta, 1963.

