

DR PATKÓ GYÖRGY

AZ ALKÁLI-HIDRID MOLEKULÁK ELEKTRONSÁV-SZINKÉPÉ

ABSTRACT: *In this paper we have compiled a comprehensive report on the results of the experimental investigations of the electron band spectra of alkali-hydride molecules. In the identification of the individual bands some well-known lines with definite wavelengths can be applied well, therefore in the article we have reported some characteristic wavelengths in the case of some alkali-hydride molecules.*

A tanszékünk optikai mérőhelyein foglalkozunk a hidrogén, az alkáli fémek és az alkáli-hidrid molekulák optikai spektrumának vizsgálatával. E téma kísérleti művelésének laboratoriumi feltételeit tovább javítottuk egy FOS-2 síkrácsos spektrográf beszerzésével, üzemeltetésével.

Ebben a dolgozatban rövid összefoglaló referátumot állítottunk össze az alkáli-hidrid molekulák elektronsáv szinképeinek kísérleti vizsgálatában elért eredményekről. Tapasztalatunk szerint a kísérleti munkánál a megfelelő sávok azonosításánál ismert hullámhosszok jól használhatók, ezért néhány fontosabb jellemző hullámhosszat is közlünk. A terjedelmesebb, könnyen hozzáférhető irodalomjegyzéket a kutatásban bekapcsolódó munkatársak, intenzív pedagógus továbbképzésen aktuális záródolgozatot író kollégák, szakdolgozatot készítő hallgatók részére közöljük.

A LiH molekulásáv szinképet először W. Watson (1), és Ű. Nakamura (2) középbontású spektrográffal fényképezte, ezért a Σ - Σ sáv a kiszámolt molekulaállandók nem voltak irodalmi pontosságúak. A LiH és LiD optikai spektrumának pontos feldolgozása F.H. Crawford és T. Jorgensen (3) nevéhez fűződik. Crawford és Jorgensen kísérleti eredményei elméleti vizsgálódások alapjául is szolgáltak.

R. Velasco (4) a LiH molekula abszorpciós spektrumát fényképezte le az ultrahólya spektrum tartományban.

A LiH jellemző vonalai a $\Sigma - \Sigma$ és $\Pi \leftarrow \Sigma$ sávokban.

$\Lambda^1 \Sigma^+ - X^1 \Sigma^+$ sáv hullámhosszai:

v'	v''	λ_0 (nm)	v'	v''	λ_0 (nm)
0	2	429,73	3	0	372,02
1	2	424,52	4	0	367,20
2	2	418,93	5	0	362,33
1	1	402,07	6	0	357,46
2	1	397,07	7	0	352,64
3	1	391,85	8	0	347,88
2	0	376,72	9	0	343,22

$B^1 \Pi \leftarrow X^1 \Sigma^+$ sáv hullámhosszai:

v'	v''	λ (nm)	v'	v''	λ (nm)
0	1	303,38	0	0	291,30
1	1	302,18	1	0	290,25
2	1	301,76	2	0	289,86

A LiH irodalomjegyzéke:

- [11] Watson W., Phys. Rev. 32. 600. 1929.
- [12] G. Nakamura, Z.F., 218 1930.
- [13] F.H. Crawford and T. Jorgensen, P.R., 47. 932. 1939.
- [14] R. Velasco. Canad. J. Phys., 35. 1204. 1957.
- [15] Koczka Edit: A LiH magasabb elektronállapotai
Ho Si Minh Tanárképző Főiskola Fizikai Tanszéke
Szakdolgozat, Eger, 1971.

A NaH molekula szinképét E.H. Johnson (6) majd T. Hori (7)(8) fényképezte és analizálta. Fontosabb eredményeket ért el E. Olsson (9) és R.C. Pankhurst (10). Kísérleti eredményeiket tanszékünkön is reprodukáltuk. (11)(12).

A NaH jellemző vonalai a $\Sigma - \Sigma$ sávban:

v'	v''	λ (nm)	J	v'	v''	λ (nm)	J
5	1	437,65	4	7	0	404,95	7
6	1	430,97	5	8	0	399,15	9
7	1	424,43	5	9	0	393,49	10
4	0	423,14	0	10	0	387,99	10
8	1	418,06	4	11	0	382,65	9
5	0	416,97	2	12	0	377,48	9
6	0	410,90	5	13	0	372,49	9

A NaH irodalma:

- [6] E.H. Johnson., Phys. Rev. 29.85. 1927.
- [7] T. Hori, Z.F., 62. 352. 1930.
- [8] T. Hori, Z.F., 71. 478. 1931.
- [9] E. Olsson, Z.F., 93. 206. 1934.
- [10] R.C. Pankhurst. Proc. Phys. Soc., 62. 191. 1949.

[11] Patkó György: A Nall elektronsávjaíra vonatkozó spektroszkópiál kutatások eredményeinek rövid áttekintése.

Ho Si Minh Tanárképző Főiskola Tud. Közli. X. Eger, 1972
Separátum: 569. (309-316. old.)

[12] Patkó György: A Nátriumhidrid $\chi^1\Sigma^+$ - $\Lambda^1\Sigma^+$ sávjal emissziós spektrumának rotációs analizise.

Ho Si Minh Tanárképző Főiskola Tud. Közli. XI. Eger, 1973
Separátum: 596. (305-316. old.)

[13] Balázs Magdolna: A Nall $\Lambda^1\Sigma$ - $\chi^1\Sigma$ (v,2) sávjalnak kiértékelése számítógépen. Szakdolgozat HSM TKF Fizika Tanszék Eger, 1972.

[14] Nguyen Minh Giang: A Nall molekula $\chi^1\Sigma$ - $\Lambda^1\Sigma$ sávrendszere (0,0) (1,0) (2,0) (3,0) (4,0) (5,0) sávjalnak kiértékelése.

HSM TKF Fizika Tanszék, Szakdolgozat Eger, 1976.

A KII spektrumát G.M. Almy és G.D. Hause (15) fényképezte, majd T. Hori (16) és S. Imanishi (17), (18) analizálta.

A $KH \Sigma - \Sigma$ sávjának fontosabb hullámhosszai G.M. Almy és A. Beller (19) munkássága alapján:

v'	v''	λ (nm)	v'	v''	λ (nm)
2	2	561,34	9	0	487,02
3	2	552,87	6	0	480,20
4	2	544,47	7	0	473,67
5	2	536,23	8	0	467,22
3	1	528,90	9	0	460,09
4	1	518,33	10	0	454,75
5	1	510,83	11	0	448,77
6	1	503,40	12	0	442,97
7	1	496,06	13	0	437,35

1966-ban J.R. Bartky (20) lefényképezte a KI abszorpciós spektrumát és egyetlen sáv rotációs analízisét dolgozta fel, majd megismételte S. Imanishi mérésait alapján a KI $\Lambda^1\Sigma$ állapotára vonatkozó vibrációs analízist és ennek nyomán a vibrációs kvantumszámokat hárommal G.M. Almy és C.D. Hause vibrációs számozását kettővel növelte.

A KI irodalma:

- [15] G.M. Almy and C.D. Hause. P.R., 42. 242. 1932.
- [16] T.Hori. Mem.Ryojun Coll. Eng., 6. 1. 33. 1933.
- [17] S. Imanishi, Nature 143. 163. 1939.
- [18] S. Imanishi, Paperst, Inst. Phys. Chem.Res. Tokyo 39. 49. 1949.
- [19] G.M. Almy and A. Beller, P.R., 61. 476. 1942.

A RbII $\Sigma - \Sigma$ sávjának analízisét A.G. Gaydon és R.W.P. Pearse (21) végezték először, s munkájuk alapján a jellemző vonalak:

v'	v''	λ (nm)	J	v'	v''	λ (nm)	J
1	2	587,14	8	6	1	519,39	8
2	2	578,34	10	4	0	509,81	5
3	2	569,62	10	3	0	502,81	5
4	2	561,01	8	6	0	493,93	5
2	1	530,29	7	7	0	489,21	7
3	1	542,39	8	8	0	482,63	5
4	1	534,58	9	9	0	476,22	5
5	1	526,89	9	10	0	469,99	4

J.R. Bartky (20) a RbD abszorpciós spektrumának tanulmányozása után rámutatott arra, hogy a RbII és RbD

spektrumai között az izotópmélelet adta összefüggés csak akkor áll fenn, ha Gaydon és Pearse RbH-re vonatkozó analizisében a RbH $\Lambda^1\Sigma$ állapotán a v' számozást hárommal növeli.

A RbH irodalma:

- [20] J.R. Bartky: J. Mol. Spectr. 21. 23. 1966.
- [21] A.G. Gaydon and R.W.F. Pearse. F.R.S. 173. 29. 1939.

A CsH molekula emissziós spektrumával G.H. Almy és H.P. Rassweiler (22) foglalkozott. Almy és Rassweiler $\Sigma - \Sigma$ sáv analizise alapján a jellemző hullámhosszak:

v'	v''	$\lambda(\text{nm})$	v'	v''	$\lambda(\text{nm})$
0	2	611,08	6	0	513,82
1	2	603,14	7	0	507,36
1	1	574,04	8	0	501,00
2	1	566,78	9	0	494,78
2	0	540,26	10	0	488,71
3	0	533,63	11	0	482,76
4	0	526,99	12	0	476,98
5	0	520,38	13	0	471,33

A CsD optikai spektrumok analizisét Császár L. - Koczás E. - Hátrai T. (23), J.R. Bartky (20) és Koczás E. (24) oldották meg. A dolgozatok szerzői a CsD abszorpciós spektrumának analizise alapján három egységgel növelték Almy és Rassweileir által megadott v' kvantumszámozást.

A CsH irodalma:

- [22] G.M. Almy and H. Ransweiler P.R., 53. 890. 1938.
[23] Császár L., Koczka E., Mátrai T. KFKI Közlemények 12.
175. 1964.
[24] Koczka E.: Műszaki Egyetem Bp., Disszertáció 1960.

Megállapítható, hogy az alkáli-hidrid molekulák optikai spektrumára vonatkozó kísérletek, analízisek a Σ állapotok kutatásának kísérleti szakasza lezárult. Új fejezetet nyithat azonban az alkáli-hidridek szinképeknek kutatásában az a feltételezés, amely szerint figyelembe véve az alkáli-hidridek kémiai, fizikai, optikai spektrumainak feltűnő hasonlóságát, a LiH-hez hasonlóan a többi alkáli-hidrideknek is van II állapota.

ÖSSZEFOGLALÓ IRODALOMJEGYZÉK:

- [25] Mátrai Tibor: Gyakorlati spektroszkópia MK. Bp., 1963.
[26] Dékány Irén: Az alkáli-hidridek és deuteridek irodalmi áttekintése 1955-1975-ig. Szakdolgozat. Eger, 1976.
[27] G. Herzberg: Molekula-szinképek és molekula-szerkezet I. Akadémiai Kiadó Bp., 1956.
[28] G. Herzberg: Molekula-szinképek és molekula-szerkezet II. Akadémiai Kiadó Bp., 1959.
[29] Patkó Gy.: Az alkáli-hidrid molekulák kísérleti spektroszkópiái irodalmának rövid áttekintése. HSH TKF Tud.Közl. XIV.Eger, 1978. (447-450 old.) Separátum: 713.
[30] Patkó Gy.: A kétatomos molekulák spektroszkópiájának alapfogalmai. HSH TKF Tud.Közl. XII. (349-355. old) Separátum: 633. Eger, 1974.

- [31] Franczia T.: An Analytical Method for Calculating Multicenter from GIF-s or SIF-s Acta Academiæ Paedagogical Agriensis 1986.
- [32] Franczia T.: An Analytical Method for Calculating Multicenter Integrals Built up from GIF-s or SIF-s Book of Abstracts of the "WAI00 87" World Congress
- [33] Franczia T.: Poster Session (PA 48) of the "WAI00 87" Congress.