

VIZSGÁLATOK A STRONCIUMOXID KÉK SÁVJAIN

KOVÁCS ISTVÁN lev. tag

Előadta a Fizikai Állandó Bizottság 1951 december 12-én tartott ülésén

1. §. Bevezetés

A KFKI Spektroszkópai Osztályának Molekula Csoportja a laboratórium rendbehozatala után az intézet Runge-Paschen felállítású, nagy diszperziójú konkáv rács-spektrográfiájának beállítását tűzte ki első feladatául, amely előfeltételt képezte a csoport mindennemű tudományos munkájának. Mindjárt a vizsgálatok elején kellemetlen felfedezést tettünk: kiderült ugyanis, hogy a rácsbeállítás korrigálása ellenére a vonalak legnagyobb részének egyik oldalán egy zavaró kísérő vonal (satellit) jelenik meg, mely különösen molekulaszpektrumok felvételére teljesen alkalmatlanná teszi a berendezést. Hónapokig tartó igen beható kísérletsorozat elvégzése után megállapítottuk, hogy az említett zavar a rés felállításának konstrukciós hibájából adódik és kiküszöbölhető, ha a fényforrást nem a rácsra, hanem a résre képezzük le, úgyhogy közben a résnek csak egy kisebb darabját használjuk fel, azt a részt, melyet a rés konstrukciós hibája ellenére pontosan be lehetett állítani. Miután a rács-spektrográf ilyen módon molekulaszpektroszkópai kutatásokra alkalmassá vált, néhány ellenőrző felvétel készítettünk a MgO zöld sávrendszeréről és a mérési eredményeket összehasonlítottuk az irodalomban ugyanezen színekre található adatokkal.

A tulajdonképpeni kutatások csak ezek után kezdődtek meg. Első kutatási témának a SrO sávós színekének vizsgálatát választottuk. A téma választásánál az a cél lebegett előttünk, hogy egyfelől adalékot szolgáltatassunk az irodalomban hosszabb ideje eldöntetlen vitához, mely a SrO egyik sávrendszerének analizálásával kapcsolatban merült fel, másfelől pedig, hogy ezen túlmenően tovább bővítsük a SrO molekulára vonatkozó eddigi ismereteinket.

A SrO sávós színekéből három sávrendszer ismeretes, egy az ultraibolya, egy a kék és egy az infravörös tartományban. Az említett sávrendszerek közül ezideig csak az infravörös sávrendszer néhány sávjának rotációs analizálásával foglalkozott *Mahla*¹, valamint *Almkvist* és *Lagerqvist*². *Mahla* vizsgálatai szerint az infravörös sávrendszer alsó állapota nem a SrO molekula alapállapota, hanem valamilyen gerjesztett állapot, és szerinte az infravörös sávrendszerben található perturbációk ezen alsó állapot perturbációira vezethetők vissza. Ugyancsak *Mahla* szerint ezen infravörös sávrendszernek sem az alsó, sem a felső állapota nem közös az ezideig még ki nem analizált kék sávrendszer egyik állapotával sem. *Almkvist* és *Lagerqvist* szerint azonban *Mahla*

analízise hibás és az említett megállapítások közül egyik sem állja meg a helyét. Szerintük ugyanis az infravörös sávrendszer alsó állapota a SrO molekula alapállapota és ez az állapot közös a kék sávrendszer alsó állapotával, továbbá az említett perturbációk ennek megfelelően nem az alsó, hanem a felső állapot perturbációjára vezethetők vissza. *Almkvist* és *Lagerqvist* ugyanis észrevették, hogy az infravörös sávrendszer két sávja sávfejének a távolsága éppen megegyezik a kék sávrendszer $v'' = 1$ és $v'' = 0$ nivóinak a vibrációs analízisekből ismert távolságával és ebből jutottak arra a következtetésre, hogy az infravörös és a kék sávrendszer közös alsó állapottal rendelkeznek. Ennek alapján elkészítették még egyszer az infravörös sávrendszer vibrációs és rotációs analízisét, mely teljesen eltérő eredményeket adott *Mahla* eredményeitől. A vita eldöntéséhez szükségesnek mutatkozott a kék sávrendszer rotációs analízise, mert ennek révén válhat csak ismeretessé a sávrendszer alsó állapotának finomszerkezete, amelyet így összehasonlíthatunk az infravörös sávrendszer alsó állapotának finomszerkezetével és csak így állapítható meg minden kétséget kizáró módon ezek azonossága vagy különbözősége, vagyis *Almkvist* és *Lagerqvist* feltevésének helyessége vagy helytelensége. Ha a feltevés helyes, akkor különösen indokolt az alsó állapot részletes ismerete, minthogy ebben az esetben ez a SrO molekula alapállapota. *Almkvist*nek és *Lagerqvist*nek az infravörös sávrendszerre vonatkozó méréseiből csak a két legalsó rezgési nivónak, a $v'' = 0, v'' = 1$ nivóknak finomszerkezete ismeretes és ezekből a SrO molekula kémiai disszociációs energiájára következtetéseket levonni csak nagyon kevés lehet.

Ezen okoknál fogva a kék sávrendszer rotációs analízisét tűztük ki célul. A kék sávrendszerrel a vibrációs analízist először *Mecke* és *Guillery*³ végezték el és a sávfejek elhelyezkedésére vonatkozóan a következő élfórmulát kapták:

$$\nu_f = 24,638 + 516 n' - 3 n'^2 - 648 n'' + 3 \cdot 9 n''^2, \quad (1)$$

ahol n' és n'' egész számok.

Néhány évvel később a vibrációs analízist *Mahanti*⁴ is elvégezte, ő a következő élfórmulát kapta:

$$\begin{aligned} \nu_f = 24,702 \cdot 81 + 519 \cdot 09 \left(v' + \frac{1}{2} \right) - 3 \cdot 50 \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 - \\ - 653 \cdot 47 \left(v'' + \frac{1}{2} \right) + 4 \cdot 02 \left(v'' + \frac{1}{2} \right)^2, \end{aligned} \quad (2)$$

ahol v' és v'' a felső, ill. alsó állapot vibrációs kvantumszámait jelentik.

A fenti élfórmulák alapján megállapíthatók az egyes sávok helyei a sávrendszeren belül, ha v' és v'' helyébe a megfelelő rezgési kvantumszámokat helyettesítjük. Ennek alapján a 0—1, 0—3, 1—1, 1—4 sávokat lefényképeztük és foglalkoztunk a sávok rotációs analízisével.

2. §. Kísérleti rész

A színek előállításához fényforrás gyanánt a legalkalmasabbnak bizonyult az egyenáramú ív stronciumsóval átitatott szénelektrodok között. A szénelektrodokat előzőleg a Spektroszkópiai Osztály Ipari Csoportja által meghonosított tisztító eljárással spektroszkópiai célokra alkalmazhatóvá tettük. Az átitatás úgy történt, hogy az elektromos úton kb. 1000 C⁰-ra izzított szénelektrodra az előzőleg gondosan vízmentesített és elporított stronciumsót rászórtuk egészen addig, amíg a sóolvadékot a szén felszívta. Az átitatásnak ez a módja tapasztalataink szerint előnyösebbnek bizonyult más eljárásoknál (mint pl. a furatában stronciumsót tartalmazó szénrúd izzításánál⁵⁾), mert az ív egyenletesebben ég s az izzó olvadékot nem szórja széjjel. Az átitatásra használt stronciumsók (SrCl₂, SrBr₂, Sr(NO₃)₂) közül — amint azt a Zeiss-féle háromprizmás spektrográffal készült felvételek mutatták — a SrCl₂ esetében jelentkezett a SrO molekula sávos spektruma a legerősebben. A sávok erősségének további fokozását lehetett elérni úgy, hogy az alsó szénelektrodot valamivel vastagabb rézköppennyel vettük körül, amelyen normális nyomású, lassú oxigénáramot vezettünk keresztül. Az ív gerjesztésére használt egyenáramú feszültség 220 V, az iváram erőssége 6 A, az ív hossza kb. 10 mm volt.

A színeképet a bevezetésben említett Runge—Paschen felállítású, Hochheim-ötvözzel bevont nagy konkávráccsal állítottuk elő, melynek Rowland-féle, ill. lemeztartó köre 6·5 m átmérőjű, karcólatsűrűsége 32000 karcolat hüvelykenként, diszperziója az első rendben: cca. 1.29 Å lemez-milliméterenként. Felvételeink első rendben készültek: a vizsgált színeképtartományban a második rendben jelentkező, zavaró ultraibolya színeképvonalakat üvegszűrő közbeiktatásával küszöböltük ki.

Felvételeinknél Ilford „Rapid Process Pancromatic“ lemezeket használtunk („Maximal Energie“ előhívóval). Az expozíciós idő 30 perc és 2 óra között változott. Hullámhosszmérésnél összehasonlítási alapul célszerűen a vas-ív spektrumát fényképeztük felvételeinkre. A vasvonalak hullámhosszait a Harrison-féle⁶ táblázatból vettük. A színeképvonalakat az intézetbe nemrég érkezett legújabb típusú Zeiss—Abbe-féle komparátorral mértük ki, a hullámszámokra való átszámítás a Kayser-táblázat alapján történt.

3. §. Analízis

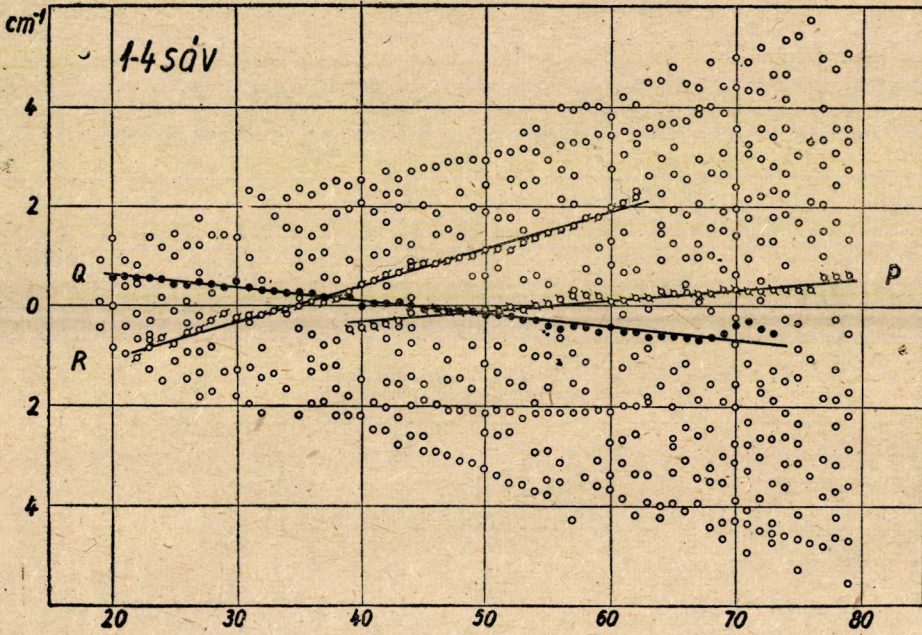
Rotációs analízis

A felvételek igen áttekinthetetlen és bonyolult képet mutatnak. A rács nagy diszperziója következtében az egyes sávok fejei rátekintéssel egyáltalában nem ismerhetők fel. A sávokon belül az egyes ágakat szintén nagyon nehezen lehet felismerni, aminek az az oka, hogy az egyes sávok egymásba átnyúlnak, egymást átfedik s ezáltal a vonalak nagy sokasága látszólag teljes összevisszaságban, rendszertelenül követi egymást. Így igen sok egymásra eső, vagy

közvetlen egymás közelébe eső vonal látható, amelyeket komparátor alatt nem is igen lehet szétválasztani, hanem egyetlen diffuz vonalnak tűnnek elő. Ez azután az intenzitásviszonyokat is látszólag meghamisítja. Ezen nehézségek miatt a sávokon belüli egyes ágak felismerésére főként az először *Loomis* és *Wood*⁷ által ismertetett eljárást követtük. Az eljárás lényege abban áll, hogyha valamilyen módon sikerült néhány olyan vonalat felfedezni, amely vonalak hullámszámainak második különbségei állandóknak mutatkoznak, vagyis más szóval az egyik ág egy valószínű szakaszát sikerült felismerni, akkor ezen vonalak hullámszámainak felhasználásával készítünk egy olyan parabolát, mely az észlelt vonalak hullámszámaihoz a legjobban simul s ennek segítségével extrapolálunk a szakasz elé és mögé. Ily módon egy hipotetikus ág vonalainak hullámszámainak nyerjük. A következőkben felmérjük egy diagrammban az így számított ág minden egyes vonalától a jobbra és balra következő ágvonallig terjedő szakaszban található összes szomszédos vonalnak az említett vonaltól számított különbségeit. Ha az eredetileg felvett ág valóban a vizsgált sávnak egyik ága, akkor a valamilyen futószám függvényében ábrázolt diagrammban az említett ág vonalainak megfelelő pontok az abszcissa tengely környékén fognak feküdni. Az eljárás tehát lehetővé teszi a szakaszt megelőző és követő vonalak hullámszámainak felismerését. Ezen felül azonban — és ez az eljárás legnagyobb előnye — megállapíthatók még az ugyanezen sávhoz tartozó *többi* ágak hullámszámai is. Mivel ugyanis egyazon sáv összes ágai ugyanazon kvadrátikus tagot tartalmaznak, az egymásra következő vonalak távolságai a rotációs kvantumszám nagyobb értékeinél hasonló nagyságrendűek, és ennek következtében ugyanebben a diagrammban a többi ágak vonalai is egy-egy szabályos görbe mentén helyezkednek el és így azok is jól felismerhetők. Más sávok ágainak vonalai ebben a diagrammban a kvadrátikus tag különbözősége miatt rendszertelenül helyezkednek el. A mellékelt 1. ábrán a viszonyok könnyen tanulmányozhatók.

Az összes eddig analizált sávok esetében ilyen módon három ágat lehetett felismerni. Tekintettel arra, hogy az infravörös sávrendszer analízise azt mutatta, hogy az alsó állapot egy $^1\Sigma$ állapot, akkor amennyiben ez az alsó állapot közös a kék sávrendszer alsó állapotával, ez a tény arra mutat, hogy a felső állapot egy $^1\Pi$ állapot. Ha eldöntöttük, hogy a felfedezett ágak közül melyik a P és melyik az R ág, valamint a rotációs kvantumszámokat az ág egyes vonalaihoz helyesen rendeltük hozzá, akkor a $0-1$ és az $1-1$ sáv alsó állapotaira vonatkozó kombinációdifferenciáknak, azaz a $\Delta_2 F''(J) = R(J-1) - P(J+1)$ különbségeknek meg kell egyezniük az infravörös sávrendszer ugyancsak $v'' = 1$ alsó állapotára vonatkozó kombinációdifferenciákkal. Mint a vizsgálatok mutatták, ez a megegyezés kielégítőnek mondható, ami az infravörös és a kék sávrendszer alsó állapotainak közös volta mellett bizonyít. A $0-1$ és $1-1$ sávok analízise alapján képezhetők voltak a $v' = 0$ és a $v' = 1$ felső állapotokra vonatkozó kombinációdifferenciák, vagyis a $\Delta_2 F'_i(J) = R(J) - P(J)$ és

$\Delta_2 F'_c(J) = R(J-1) - Q(J-1) + Q(J+1) - P(J+1)$ különbségek is, amelyeknek helyes analízis esetén meg kell egyezniük a 0—3 és az 1—4 sávok felső állapotainak megfelelő kombinációdifferenciáival. Ezen sávok analízise azután az alsó $v''=3$ és $v''=4$ -es állapotok állandóinak kiszámítását teszi lehetővé, ami értékes kiegészítést adja az *Almkvist* és *Lagerqvist* által az alsó állapot $v''=0$ és $v''=1$ -es nivóira adott analízisnek és az alapállapot diszociációs energiájának pontosabb meghatározására ad alkalmat.



1. ábra

Az állandók kiszámítására a következő eljárást alkalmaztuk. Ismeretes, hogy az R és P vonalak a $\Delta J = \mp 1$, a Q -vonalak pedig a $\Delta J = 0$ átmenetek révén jönnek létre s ennek megfelelően a következő formulákkal állíthatók elő:

$$R\text{-ág: } \nu = \nu_0 + (B' + B'')(J+1) + (B' - B'' - D' + D'')(J+1)^2 - \\ - 2(D' + D'')(J+1)^3 - (D' - D'')(J+1)^4$$

$$Q\text{-ág: } \nu = \nu_0 + (B' - B'')J + (B' - B'' - D' + D'')J^2 - \\ - 2(D' - D'')J^3 - (D' - D'')J^4$$

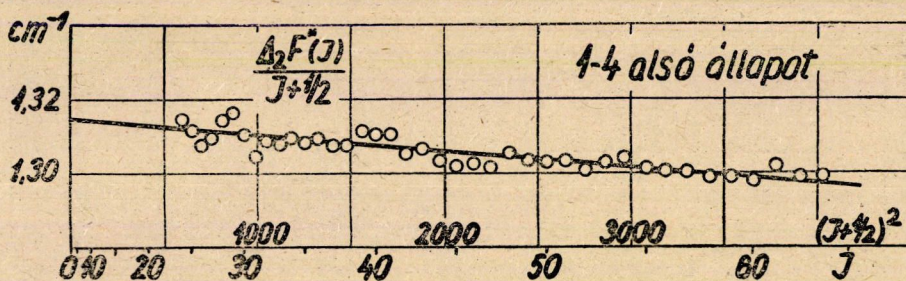
$$P\text{-ág: } \nu = \nu_0 - (B' + B'')J + (B' - B'' - D' + D'')J^2 + \\ + 2(D' + D'')J^3 - (D' - D'')J^4,$$

ahol ν_0 az úgynevezett nullvonal hullámszáma, B' és D' a felső, B'' és D'' az alsó állapot rotációs állandói, míg a J a rotációs kvantumszám. Egyszerű számításal meggyőződhetünk arról, hogy

$$\frac{\Delta_2 F(J)}{J + \frac{1}{2}} = 4B - 8D \left(J + \frac{1}{2} \right)^2,$$

ahol a $\Delta_2 F''(J)$ alkalmazása esetén az alsó, $\Delta_2 F'(J)$ alkalmazása esetén pedig a felső állapot rotációs állandói szerepelnek.

Ha most $\frac{\Delta_2 F(J)}{J + \frac{1}{2}}$ -t felrakjuk egy koordináta-rendszerben, melynek x tengelye $\left(J + \frac{1}{2} \right)^2$ lépték szerint van számozva, akkor egyenes vonalat kell kapnunk, melynek az ordinátatengellyel való metszéspontja $4B$ és iránytangense $-8D$. A pontok közé az egyenest úgynevezett súlypont-módszerrel húzzuk be, amely abban áll, hogy a pontokat felosztjuk két egyenlő számú pontot tartalmazó csoportra, ahol mindegyik pont akkora súllyal szerepel, ahány kombinációdifferenciából számítottuk s mindegyik csoportnak kiszámítjuk a súlypontját. Ilyen módon két pontot kapunk, amelyeken keresztül meghúzzuk az egyenest. Ezzel az eljárással mind a felső, mind pedig az alsó állapot rotációs állandóit meghatározhatjuk. Megvilágításul szolgáljon a 2. ábra. Az így meghatározott értékeket táblázatba foglaltuk.



2. ábra

I. TÁBLÁZAT

Felső állapot			Alsó állapot				
v'	B'	D'	v''	B''	D''	Lagerqvist és Almkvist adatai	
						B''	D''
0	0.2928	$0.47 \cdot 10^{-6}$	0			0.3367_8	$0.35_4 \cdot 10^{-6}$
1	0.2916	$0.54 \cdot 10^{-6}$	1	0.3346	$0.33 \cdot 10^{-6}$	0.3347_4	$0.37_8 \cdot 10^{-6}$
2			2				
3			3	0.3306	$0.48 \cdot 10^{-6}$		
4			4	0.3288	$0.57 \cdot 10^{-6}$		

Ha a $v'' = 1$ állapotra kapott értéket összehasonlítjuk az *Almkvist* és *Lagerqvist* által ugyanezen állapotra kapott értékkel, akkor e két érték egyezését olyan jónak találjuk, hogy ennek alapján kimondhatjuk azt, hogy az infravörös és a kék sávrendszer alsó állapotai közösek.

A felső $v' = 0$ és $v' = 1$ állapotokra kapott B -értékeket a $B'_e = B'_e - \alpha'_e \left(v' + \frac{1}{2} \right)$ formula alapján összefoglalhatjuk a következő egyenletbe:

$$B'_e = 0.2934 - 0.0012 \left(v' + \frac{1}{2} \right).$$

Ebből az r_e magtávolságra a következő érték adódik:

$$B'_e = \frac{h}{8\pi^2 c \mu r_e^2}; r_e = 2.06 \cdot 10^{-8} \text{ cm.}$$

Hasonlóan kapjuk az alsó állapotokra a mérési adatok alapján:

$$B''_e = 0.3375 - 0.00195 \left(v'' + \frac{1}{2} \right).$$

Vibrációs analízis

A sávok nullhelyeinek, az úgynevezett nullvonalak helyeinek meghatározására két eljárást is alkalmaztunk. Az egyik az a szokásos eljárás, melynél képezzük az

$$\frac{1}{2} [R(J-1) + P(J)] \sim \nu_0 + (B' - B'')J^2,$$

ill.

$$Q(J) \sim \nu_0 + (B' - B'')J(J+1)$$

kifejezést, amelyet felmérünk J^2 [ill. $J(J+1)$] léptékű koordinátarendszerben; ezáltal egyenes vonalat kapunk, melynek az ordinát tengellyel való metszéspontja éppen ν_0 , iránytangense pedig a rotációs állandók különbsége.

Ennél a grafikus eljárásnál jóval alkalmazhatóbbnak bizonyult egy másik, új eljárás, melyet itt alkalmaztunk először. Az eljárás részletes elméleti ismertetéséről más helyen lesz szó⁸, itt csak a felhasznált formulákat közöljük:

$$\nu_0 - B'' = \frac{1}{4} \{ [P(J) + R(J-2)](J+1) - [P(J+1) + R(J-1)](J-1) \}$$

$$\nu_0 = \frac{1}{2} \{ Q(J-1) \cdot (J+1) - Q(J) \cdot (J-1) \}.$$

Ennek az eljárásnak nemcsak az az előnye, hogy ezzel a ν_0 értékét számítással pontosan meg lehet határozni, hanem az is, hogy ezzel újabb módszert szolgáltatathatunk a perturbációk felismerésére, valamint a perturbációs eltérésekből a perturbáló és perturbált termek $J=0$ nivói egymástól való távolságainak meghatározására. Az új módszerrel így számított ν_0 értékeket táblázatban tüntetjük fel.

II. TÁBLÁZAT

$\nu'' \backslash \nu'$	0	1
0		
1	23,988·94	24,502·71
2		
3	22,721·31	
4		22,612·98

A ν_0 értékekből egyszerű számítással meg lehet adni a sávfejek hullámszámait:

$$\nu_f = \nu_0 - \frac{(B' + B'')^2}{4(B' - B'')}.$$

Ennek alapján meghatároztuk a 0—1, 1—1, 0—3 és 1—4 sávok fejeinek hullámszámait és táblázatba foglalva összehasonlítottuk *Mecke* és *Guillery*³, valamint *Mahanti*⁴ értékeivel. Tekintettel arra, hogy mi rotációs analízis alapján számítottuk a ν_f értékeket, a mi értékeink pontosabbak, mint az említett szerzők által kis diszperziójú prizmás spektrográf segítségével végrehajtott vibrációs analízisek eredményei. A megegyezés ennek figyelembevételére alapján igen jónak mondható.

III. TÁBLÁZAT

$\nu'' \backslash \nu'$	0	1
0		
1	23,990·32 23,991·29 23,993·9	24,502·41 24,504·62 24,506·9
2		
3	22,723·58 22,723·90 22,729·1	
4		22,613·50 22,615·58 22,621·4

Megjegyzés a III. táblázathoz. Minden kockában a legfelső adat *Mahanti* értékei (2)-ből számítva, a legalsó adat *Mecke* és *Guillery* értékei (1)-ből számítva, és a középső adat a mi mérési eredményünk.

4. §. Összefoglalás

Ez az előadás a folyamatban lévő munka előzetes beszámolójaként tekintendő. Az eddigi eredmények kiértékelése azonban már most sem hagy semmi kétséget afelől, hogy a SrO infravörös és kék sávrendszere közös alsó állapottal bír és ez a közös állapot a SrO eddig ismert legmélyebb, tehát nagy valószínűséggel alapállapota. Ugyancsak megállapítható volt, hogy a kék sávrendszer ${}^1\Pi - {}^1\Sigma$ átmenet. Ezen felül megadtuk a kianalizált sávok rotációs és vibrációs állandóit.

A részletes közlés tartalmazni fogja a kianalizált sávok ágainak hullám-számait, a kombinációdifferenciákat, ezek kiegyenlített értékeit, az alapállapotnak, valamint a kék sávrendszer felső állapotának disszociációs energiáit.

Ezek az adatok kiegészítését fogják képezni a molekulaszpektroszkópikusok által már évek óta folytatott kísérletsorozatnak, mely a periódusos rendszer második oszlopában álló elemek oxidjai állandóinak meghatározását tűzte ki célul. Így a BeO, MgO, BaO, CaO mellé most a SrO sorakozik. Ismeretes ugyanis, hogy az említett állandókat elméletileg nem lehet előre kiszámítani, mivel a molekula hullámegyenletének elektron-része matematikai nehézségek miatt nem oldható meg. Az előadásban ismertetett kísérleti eredmények egy részét képezik azoknak az adatoknak, melyek alapján hozzá lehet majd fogni olyan elmélet felállításához, mely lehetővé teszi, hogy az egyes molekula-típusok állandóira sokkal nagyobb pontossággal következtethessünk előre, mint az eddig volt lehetséges.

Ki kell emelnem, hogy ez a munka az első molekulaszpektroszkópiai kísérleti munka, mely a felszabadulás óta Magyarországon készült. Nagy nehézséget okozott az, hogy nem volt itt senkinek sem ilyen irányú tapasztalata, s így a munkával teljesen magunkra voltunk utalva. Éppen ezért a legnagyobb elismeréssel és köszönettel adózom munkatársaimnak, a KFKI Spektroszkópiai Osztály Molekula Csoportja tagjainak, név szerint *Budó Ágoston* akadémikusnak, aki az elvi irányításban, *Mátrai Tibor*, *Deézsy Irén*, *Koczks Edit* kartársaknak és *Scari Ottó* aspiránsnak, akik a fényképezés, a fáradságos komparálás és numerikus számítások végrehajtásában buzgó és odaadó munkájukkal értékes segítséget jelentettek.

*Magyar Tudományos Akadémia
Központi Fizikai Kutató Intézet
Spektroszkópiai Osztálya.*

IRODALOM

- ¹ Mahla K.: Zs. f. Phys. 81 (1933), 625.
- ² Almkvist G., Lagerqvist A.: Ark. f. Fys. 1 (1949), 477; 2 (1950), 233.
- ³ Mecke R., Guillery M.: Phys. Zs. 28 (1928), 514.
- ⁴ Mahanti P. C.: Phys. Rev. 42 (1932), 609.
- ⁵ Brodersen P. H.: Zs. f. Phys. 79 (1932), 613.
- ⁶ M. I. T. Wavelength Tables, 1939, (London: Chapman and Hall)
- ⁷ Loomis F. W., Wood R. W.: Phys. Rev. 32 (1928), 223.
- ⁸ Kovács F.: Act. Phys. Hung. Megjelenés alatt.

HOZZÁSZÓLÁS

KOVÁCS ISTVÁN ELŐADÁSÁHOZ

BUDÓ ÁGOSTON lev. tag:

Az előadás kezdetén említett rácsbeállítással kapcsolatban röviden megszeretném jegyezni, hogy a beállításnál felmerült nehézségek főleg a rács és a rés jelenlegi állítási lehetőségeiben fennálló hiányosságoknak tulajdonítandók. A rácsot ugyanis — szemben a korszerű, három egymásra merőleges forgástengellyel rendelkező konstrukciókkal — csak két kitérő tengely körül lehet elforgatni és hasonlóan hiányos a rés állíthatósága is. Ily módon a rács és a rés kezdeti állásában tapasztalt több, egyidejűleg fellépő hibát (a rés nem volt pontosan a Rowland-körön, nem volt párhuzamos a rácskarcolatokkal és a rács normálisa nem feküdt a lemeztartó kör síkjában) csak igen hosszadalmas munkával lehetett kiküszöbölni és ezt is csak úgy, hogy bizonyos engedelményeket kellett tenni a fényforrás optimális leképezési viszonyait illetőleg. A rács beállítására fordított sok idő és munka, bár a tulajdonképpeni kutatások megkezdését késleltette, mégis hasznos volt, mert a nyert tapasztalatok alapján a konstrukciós hibák könnyen kijavíthatók, továbbá a Spektroszkópiai Intézetnek az 5 éves terv keretében felépülő új épületébe való átköltözése során a rács újbóli felállítása előreláthatólag nem fog nagyobb nehézségeket okozni.

A SrO sávrendszerének rezgési szerkezetét már 1928-ban felismerték, a sávok rotációs szerkezetét azonban a most ismertetett vizsgálatokig azóta sem, noha a rotációs analízis szükségességére ujabban is rámutattak: 1949-ben Almkvist és Lagerqvist, akik azt is jelezték, hogy az analízis közlésére vissza fognak térni. Ez is mutatja, hogy a SrO molekula energiaállapotaira vonatkozólag már az előadásban ismertetett eddigi vizsgálatok is értékes eredményt jeleltenek.

Az a tény, hogy az egyes sávok az átfedések és a teljesen ki nem küszöbölhető idegen vonalak miatt igen sok vonalat tartalmaznak, a rotációs analízis helyességét illetőleg alapos ellenőrzést, ill. kritikát tesz szükségessé. Az analízis alátámasztására egyetlen sávon belül is az előadásban említett Loomis-féle eljárás mellett még több, más ellenőrzési módszer is alkalmazást nyert.

Ezek egybehangzó volta, továbbá a több sávból nyert megfelelő kombinációdifferenciáknak egy nagy rotációs kvantumszám-közben való egyezése az eddigi vizsgálatok szerint nagy mértékben kielégítő. A további sávok analízise az előadásban körvonalazott célok elérésén kívül egyúttal az eddigi bizonyítékok súlyát is növelni fogja.