



Katedra Fizyki Teoretycznej  
i Informatyki Kwantowej

ROZPRAWA DOKTORSKA

**Teoretyczne badanie struktury  
oscylacyjno-elektronowej cząsteczki NaRb  
z uwzględnieniem efektów relatywistycznych**

mgr inż. Marcin Wiatr

promotor  
prof. dr hab. Józef E. Sienkiewicz  
promotor pomocniczy  
dr inż. Patryk Jasik

Gdańsk 2017

# Podziękowania

Wyrażam swoją wdzięczność  
moim rodzicom  
za nieustające wsparcie w czasie trwania studiów doktoranckich  
i pisanie rozprawy doktorskiej.

Pragnę szczególnie podziękować  
profesorowi Józefowi E. Sienkiewiczowi i doktorowi Patrykowi Jasikowi  
za opiekę naukową, ofiarowany mi czas i cenne rady.

Chciałbym również podziękować  
profesorowi Hermannowi Stollowi i profesorowi Andreasowi Köhnowi  
z Instytutu Chemii Teoretycznej na Uniwersytecie w Stuttgarcie  
za współpracę i opiekę naukową w czasie stażu.

Dziękuję także  
doktorowi Yuriemu Aoto  
za dyskusję nad praktycznymi aspektami obliczeń w trakcie stażu.

# Spis treści

<b>Spis rysunków</b>	<b>vii</b>
<b>Spis tablic</b>	<b>ix</b>
<b>1. Wstęp</b>	<b>10</b>
<b>2. Opis teoretyczny</b>	<b>12</b>
2.1. Symetria cząsteczki . . . . .	12
2.2. Odseparowanie ruchu jąder od ruchu elektronów . . . . .	13
2.3. Momenty przejść dipolowych i czynniki Francka-Condon . . . . .	16
2.4. Reguły wyboru . . . . .	18
2.5. Szereg Dunhama, parametry spektroskopowe . . . . .	19
2.6. Efekty relatywistyczne . . . . .	19
2.7. Model hamiltonianu walencyjnego . . . . .	21
2.8. Baza obliczeniowa . . . . .	24
2.9. Metody obliczeniowe . . . . .	27
<b>3. Wyniki i dyskusja</b>	<b>30</b>
3.1. Potencjały nierelatywistyczne cząsteczki . . . . .	30
3.1.1. Asymptoty . . . . .	30
3.1.2. Krzywe adiabatyczne energii potencjalnej . . . . .	31
3.1.3. Analiza i porównania . . . . .	36
3.2. Potencjały relatywistyczne cząsteczki . . . . .	48
3.2.1. Asymptoty . . . . .	49
3.2.2. Krzywe adiabatyczne energii potencjalnej . . . . .	50
3.2.3. Analiza i porównania . . . . .	56
3.3. Momenty przejść dipolowych . . . . .	61
3.4. Czynniki Francka-Condon . . . . .	62
<b>4. Perspektywy rozwoju badań</b>	<b>65</b>
<b>5. Podsumowanie</b>	<b>78</b>
<b>Literatura</b>	<b>84</b>
<b>Załączniki</b>	<b>85</b>



<b>A. Potencjały nierelatywistyczne cząsteczki NaRb</b>	<b>86</b>
<b>B. Potencjały relatywistyczne cząsteczki NaRb</b>	<b>101</b>

## Spis rysunków

2.1. Elementy symetrii przykładowej, heterojądrowej cząsteczki dwuatomowej. . . . .	13
2.2. Cząsteczka AB we współrzędnych kartezjańskich. . . . .	15
2.3. Zestaw możliwych wyznaczników Slatera przeznaczonych do obliczeń MCSCF budowany w ramach spinorbitali nieaktywnych i przestrzeni aktywnej. . . . .	28
3.1. Dziewięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii $\Sigma^+$ . . . . .	32
3.2. Dziewięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii $\Sigma^+$ . . . . .	33
3.3. Pięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii $\Pi$ . . . . .	34
3.4. Pięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii $\Pi$ . . . . .	34
3.5. Dwie policzone krzywe energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii $\Delta$ . . . . .	35
3.6. Dwie policzone krzywe energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii $\Delta$ . . . . .	35
3.7. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu podstawowego cząsteczki NaRb. . . . .	39
3.8. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $3^1\Sigma^+$ cząsteczki NaRb. . . . .	40
3.9. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $6^1\Sigma^+$ cząsteczki NaRb. . . . .	41
3.10. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $1^3\Sigma^+$ cząsteczki NaRb. . . . .	43
3.11. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $1^1\Pi$ cząsteczki NaRb. . . . .	45
3.12. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $2^1\Pi$ cząsteczki NaRb. . . . .	46
3.13. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $4^1\Pi$ cząsteczki NaRb. . . . .	46
3.14. Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu $2^1\Sigma^+$ i $1^3\Pi$ cząsteczki NaRb. . . . .	48
3.15. Krzywe energii potencjalnej dla stanów $(1-14)0^+$ . . . . .	53
3.16. Krzywe energii potencjalnej dla stanów $(1-14)0^-$ . . . . .	54
3.17. Krzywe energii potencjalnej dla stanów $(1-21)1$ . . . . .	54
3.18. Krzywe energii potencjalnej dla stanów $(1-9)2$ . . . . .	55
3.19. Krzywe energii potencjalnej dla stanów $(1-2)3$ . . . . .	55
3.20. Poziomy oscylacyjne stanów relatywistycznych $(2)0^+$ i $(3)0^+$ oraz korespondujących z nimi nierelatywistycznych $2^1\Sigma^+$ i $1^3\Pi$ . . . . .	58

3.21. Porównanie regularnych przerw oscylacyjnych $\Delta_Q = \nu(v'', J'' = 0) - \nu(v'' + 1, J'' = 0)$ dla stanów $2^1\Sigma^+$ i $1^3\Pi$ pomiędzy teoretycznymi i wynikami wynikającymi z analizy deperturbacyjnej. . . . .	59
3.22. Różnice pomiędzy poziomami oscylacyjno-rotacyjnymi $\Delta_Q = \nu(v'', J'' = 25) - \nu(v'' + 1, J'' = 25)$ dla obecnie policzonych stanów $(2)0^+$ , $(3)0^+$ i $(2)1$ w porównaniu z eksperymentalnymi różnicami gałęzi $Q$ dla progresji $2^1\Pi \rightarrow 2^1\Sigma^+/1^3\Pi$ . . . . .	60
3.23. Momenty przejść dipolowych pomiędzy wyszczególnionymi stanami: $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ , $1^1\Sigma^+ - 3^1\Sigma^+$ , $1^1\Sigma^+ - 1^1\Pi$ i $1^1\Sigma^+ - 2^1\Pi$ . . . . .	61
3.24. Momenty przejść dipolowych pomiędzy stanami $(1)0^+ - (2)0^+$ i $(1)0^+ - (3)0^+$ wraz z momentem przejścia pomiędzy korespondującymi stanami nierelatywistycznymi $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ . . . . .	62
3.25. Czynniki Francka-Conzona pomiędzy stanami $(1)0^+ - (2)0^+$ . . . . .	63
3.26. Czynniki Francka-Conzona pomiędzy stanami $(1)0^+ - (3)0^+$ . . . . .	63
3.27. Czynniki Francka-Conzona pomiędzy stanami $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ . . . . .	64
4.1. Geometria cząsteczki $Rb_3$ . . . . .	65
4.2. Najniższe $^4\Sigma$ i $^4\Pi$ molekuly $Rb_3$ (geometria liniowa). . . . .	69
4.3. Wykres powierzchniowy $^4A'$ dla molekuly $Rb_3$ o kącie wiązania $60^\circ$ w podejściu Soldana (podejście 1). . . . .	71
4.4. Wykres konturowy $^4A'$ dla molekuly $Rb_3$ o kącie wiązania $60^\circ$ w podejściu Soldana (podejście 1). . . . .	71
4.5. Wykres powierzchniowy $^4A'$ dla molekuly $Rb_3$ o kącie wiązania $60^\circ$ w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2). . . . .	72
4.6. Wykres konturowy $^4A'$ dla molekuly $Rb_3$ o kącie wiązania $60^\circ$ w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2). . . . .	72
4.7. Wykres powierzchniowy $^4A'$ dla molekuly $Rb_3$ o kącie wiązania $60^\circ$ w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3). . . . .	73
4.8. Wykres konturowy $^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3). . . . .	73
4.9. Wykres powierzchniowy $^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w podejściu Soldana (podejście 1). . . . .	74
4.10. Wykres konturowy $^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w podejściu Soldana (podejście 1). . . . .	74
4.11. Wykres powierzchniowy $^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2). . . . .	75
4.12. Wykres konturowy $^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2). . . . .	75

4.13. Wykres powierzchniowy ${}^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3). . . . .	76
4.14. Wykres konturowy ${}^4A'$ dla liniowej molekuly $Rb_3$ w obecnym podej- ściu z bazą B (podejście 3). . . . .	76

## Spis tablic

2.1. Parametry uśrednionego, bezspinowego pseudopotencjału rdzenia atomu sodu: $B_{lk}^A, \beta_{lk}^A$ . . . . .	23
2.2. Parametry uśrednionego, bezspinowego pseudopotencjału rdzenia atomu rubidu: $B_{lk}^B, \beta_{lk}^B$ . . . . .	23
2.3. Parametry pseudopotencjału atomu sodu reprezentującego oddziaływanie spin-orbita: $C_{lk}^A, \gamma_{lk}^A$ . . . . .	24
2.4. Parametry pseudopotencjału atomu rubidu reprezentującego oddziaływanie spin-orbita: $C_{lk}^B, \gamma_{lk}^B$ . . . . .	24
2.5. Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali $s, p, d$ i $f$ atomu sodu. . . . .	26
2.6. Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali $s, p, d$ i $f$ atomu rubidu. . . . .	26
3.1. Porównanie nierelatywistycznych energii asymptotycznych z wynikami eksperymentalnymi i teoretycznymi innych autorów. . . . .	31
3.2. Parametry spektroskopowe stanów $(1-9)^1\Sigma^+$ cząsteczki NaRb . . . . .	36
3.3. Parametry spektroskopowe stanów $(1-9)^3\Sigma^+$ cząsteczki NaRb . . . . .	42
3.4. Parametry spektroskopowe stanów $(1-5)^1\Pi$ cząsteczki NaRb . . . . .	43
3.5. Parametry spektroskopowe stanów $(1-5)^3\Pi$ cząsteczki NaRb . . . . .	47
3.6. Parametry spektroskopowe stanów $(1-2)^1\Delta$ cząsteczki NaRb . . . . .	47
3.7. Parametry spektroskopowe stanów $(1-2)^3\Delta$ cząsteczki NaRb . . . . .	47
3.8. Porównanie energii asymptotycznych z rozszczepieniem spin-orbita z innymi wynikami eksperymentalnymi i teoretycznymi. . . . .	49
3.9. Parametry spektroskopowe wybranych stanów $0^+$ cząsteczki NaRb . . . . .	56
3.10. Parametry spektroskopowe wybranych stanów $0^-$ cząsteczki NaRb . . . . .	57
3.11. Parametry spektroskopowe wybranych stanów 1 cząsteczki NaRb . . . . .	57
3.12. Parametry spektroskopowe wybranych stanów 2 cząsteczki NaRb . . . . .	58
4.1. Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali $s, p, d$ i $f$ atomu rubidu w podejściu Soldana. . . . .	67
4.2. Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali $s, p, d$ i $f$ atomu rubidu w terazniejszym podejściu z bazą A. . . . .	68
4.3. Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali $s, p, d$ i $f$ atomu rubidu w terazniejszym podejściu z bazą B. . . . .	68
4.4. Porównanie wartości energetycznych poziomu $5s5p^2P^0$ rubidu dla trzech podejść z wynikami eksperymentalnymi Sansonettiego. . . . .	69



4.5. Porównanie parametrów spektroskopowych dla ${}^4A'$ otrzymanego za pomocą trzech podejść dla molekuly $Rb_3$ o kacie wiązania $60^\circ$ . . . . .	77
4.6. Porównanie parametrów spektroskopowych dla ${}^4A'$ otrzymanego za pomocą trzech podejść dla liniowej molekuly $Rb_3$ . . . . .	77
A.1. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) ${}^1\Sigma^+$ . . .	86
A.2. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) ${}^3\Sigma^+$ . . .	89
A.3. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-5) ${}^1\Pi$ . . .	92
A.4. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-5) ${}^3\Pi$ . . .	95
A.5. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-2) ${}^1\Delta$ i (1-2) ${}^3\Delta$ . . . . .	98
B.1. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) $0^+$ . . . .	101
B.2. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-14) $0^+$ . .	104
B.3. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) $0^-$ . . . .	107
B.4. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-14) $0^-$ . .	110
B.5. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) 1. . . .	113
B.6. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-18) 1. . .	116
B.7. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (19-21) 1. . .	119
B.8. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) 2. . . .	122
B.9. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-2) 3. . . .	125

# 1. Wstęp

Alkaliczne molekuly dwuatomowe są od wielu lat obiektem intensywnych badań doświadczalnych i obliczeń teoretycznych. Głównym celem niniejszej rozprawy jest przedstawienie teoretycznych metod obliczeniowych oraz ich rezultatów dla struktury oscylacyjno-elektronowej cząsteczki NaRb z uwzględnieniem efektów relatywistycznych. Źródłem wyników teoretycznych są wykorzystane kwantowo-chemiczne metody oparte na pseudopotencjałach, opisujące oddziaływania pomiędzy rdzeniami atomowymi (jądra oraz całkowicie zapełnione powłoki elektronowe) oraz rdzeni z elektronami walencyjnymi. Otrzymane w tej pracy rezultaty są krzywymi adiabatycznymi energii potencjalnej w ujęciu nierelatywistycznym, jak i z uwzględnieniem efektów relatywistycznych. Na podstawie tych krzywych można teoretycznie wyznaczyć parametry spektroskopowe. Znając strukturę oscylacyjno-elektronową można również obliczyć momenty przejść dipolowych oraz czynniki Francka-Conдона.

Dodatkowym celem niniejszej rozprawy jest przedstawienie perspektywy rozwoju badań. Jako przykład, pokazana jest możliwość rozszerzenia nierelatywistycznego przejścia z molekuly dwuatomowej do molekuly trójatomowej. W tym wypadku przedstawiłem wyniki wybranych stanów kwartetowych dla dwóch geometrii molekuly Rb<sub>3</sub>.

Cząsteczka NaRb jest molekułą heterojądrową. Można ją uznać za atrakcyjny obiekt badań, ponieważ znajduje zastosowanie w wielu eksperymentach obejmujących dynamikę kolizji, spektroskopię fotoasocjacyjną i chłodzenie laserowe [1–4]. NaRb jest specjalnym kandydatem na dwuskładnikowy kondensat Bosego-Einsteina [5].

Badania doświadczalne nad cząsteczką NaRb sięgają roku 1928. W tym czasie Walter i Barrat zaobserwowali pasmo w zielonym regionie widma [6]. W 1936 roku Kusch, na podstawie przejść  $^1\Sigma^+ - ^1\Pi$ , wykorzystując spektroskopię magnetyczno-rotacyjną, znalazł czerwony układ pasm [7]. W 1987 roku przedstawiono laserowo indukowaną fotodysocjację cząsteczki NaRb. Pierwsze ilościowe doświadczenie polegało na napromieniowaniu liniami lasera argonowego mieszaniny w komorze gazowej par sodu i rubidu dla różnych długości fali [1]. W latach 1981-1996 proces fotodysocjacji molekuly NaRb był badany przez bezdopplerowskie techniki laserowe [8–12]. Eksperymenty badające ultrazimne kolizje w pułapkach optycznych na próbkach zawierających dwa rodzaje atomów (sodu i rubidu) były przeprowadzone przez Younga i wsp. [13]. W 2002 roku kompleks  $2^1\Sigma^+ - 1^3\Pi$  cząsteczki NaRb był prawdziwym wyzwaniem dla międzynarodowej grupy badawczej [14] wykorzystującej: wysokiej rozdzielczości urządzenia spektroskopowe oparte o pomiary natężenia fluorescencji indukowanej laserowo, obliczenia *ab initio* struktury subtelnej oraz analizę deper-turbacyjną. Dwa lata później, przeprowadzono dokładne badania stanu podstawo-

wego  $1^1\Sigma^+$  cząsteczki NaRb. Wybrano spektroskopię fourierowską, która była w stanie zapewnić obfite i dokładne dane spektroskopowe potrzebne do budowy dokładnego potencjału energetycznego [15]. W tym samym roku Jastrzębski i inni [16] przeprowadzili pierwszy szczegółowy eksperymentalny opis stanu  $3^1\Sigma^+$  cząsteczki NaRb. Wykorzystali oni dwie różne metody spektroskopowe wysokiej rozdzielczości: fourierowską opartą na fluorescencji indukowanej laserowo i optyczno-optyczną metodę typu V opartą na podwójnym rezonansie polaryzacji znakowania. Trzy niskowzbudzone stany cząsteczki NaRb były studiowane przez Docenkę i wsp. [17, 18] przy pomocy spektroskopii fourierowskiej. W 2005 roku krzywa  $6^1\Sigma^+$  została utworzona za pomocą odwrotnego podejścia perturbacyjnego przez Kortykę i in. [19]. Rok później przeprowadzono badania nad stanem  $1^1\Pi$  przy pomocy spektroskopii wzbudzeniowej na przejściu  $1^1\Pi \leftarrow 1^1\Sigma^+$  [20].

Wykorzystując pakiet programów CIPSI z Tuluzy (np. art. [21]) przeprowadzono większość badań teoretycznych. Badania te opierały się na metodzie oddziaływania konfiguracji poprzez wykorzystanie wielokonfiguracyjnej funkcji falowej. Dwa podejścia do obliczeń struktury elektronowej przeprowadzili Korek i wsp. [22, 23]: bez uwzględnienia i z uwzględnieniem efektów relatywistycznych. W pierwszym artykule użyli metody *ab initio* opartej na nieempirycznych pseudopotencjałach parametryzowanych  $l$ -zależnymi potencjałami polaryzacyjnymi i oddziaływaniem konfiguracji uwzględniającym tylko elektrony walencyjne. Energie potencjalne zostały policzone dla 28 niskoleżących molekularnych stanów. W drugim artykule efekty spinowo-orbitalne zostały wzięte pod uwagę poprzez półempiryczny pseudopotencjał dodany do elektrostatycznego Hamiltonianu. Użyta została baza gaussowska dla dwóch atomów. W 2001 roku Zaitsevskii i wsp. [24] zastosowali rachunek zaburzeń do obliczenia energii potencjalnej jedenastu najniższych stanów elektronowych. Wykorzystując pakiet programów CIPSI badania teoretyczne nad strukturą elektronową zostały przeprowadzone przez Dardouriego i wsp. [25] w 2012 roku. Przy pomocy podobnego podejścia *ab initio*, dwa lata później, Chaieb i inni [21] wykorzystali efektywny potencjał rdzenia i potencjał polaryzacyjny rdzenia z  $l$ -zależnymi funkcjami obciążenia.

Początek każdego rozdziału poprzedzony jest krótkim opisem jego zawartości. Omówione zostaną kolejne rozdziały pracy doktorskiej. Drugi rozdział stanowi opis teoretyczny cząsteczki. W trzecim rozdziale zawarte są wyniki i dyskusja dla potencjałów nierelatywistycznych i relatywistycznych. W czwartym zawarte są perspektywy rozwoju badań. Rozdział piąty stanowi podsumowanie rozprawy doktorskiej.

## 2. Opis teoretyczny

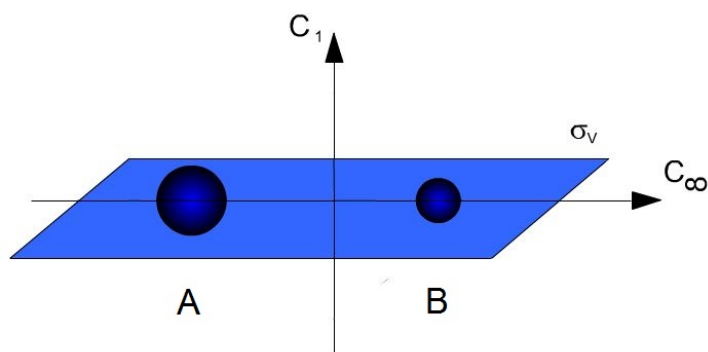
W tym rozdziale przedstawiony jest teoretyczny opis cząsteczki. Wprowadzenie do niego stanowi jej symetria. Opiera się ona na modelu bryły sztywnej oraz na elementach teorii grup. Po wprowadzeniu opisywane jest rozdzielanie ruchu jąder od ruchu elektronów, a jego konsekwencjami są dwa przybliżenia: adiabatyczne i Born-Oppenheimera. Kolejny etap stanowi wyprowadzenie czynników Francka-Condon, wychodząc od definicji momentów przejść dipolowych. Potem omówione są reguły wyboru dla przypadków Hunda (a) i (c). Piąty podrozdział opisuje szereg Dunhama odnoszący się do rozwarstwienia struktur energetycznych: energii stanów elektronowych, energii poziomów oscylacyjnych i energii poziomów rotacyjnych. Omówiłem parametry spektroskopowe nie wchodzące w jego skład. W podrozdziale szóstym zajmuję się efektami relatywistycznymi w ramach rachunku zaburzeń uwzględniając dodatkowe człony uwzględniane w hamiltonianie elektronowym. Są to poprawka do energii kinetycznej, rozmycie ładunku elektronów ze względu na ich ruch relatywistyczny i oddziaływanie spin-orbita. Następny podrozdział odnosi się do wykorzystanych przy pomocy pakietu obliczeniowego MOLPRO [26, 27] dwóch podejść do obliczeń struktury elektronowej (bez i z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita). Podrozdział ósmy i dziewiąty opisują użytą bazę obliczeniową oraz metody obliczeniowe zaimplementowane w tym pakiecie.

### 2.1. Symetria cząsteczki

Grupy punktowe charakteryzują się tym, że posiadają co najmniej jeden wspólny punkt przecięcia wszystkich osi i płaszczyzn symetrii cząsteczki. Grupy punktowe można podzielić na grupy o skończonej i nieskończonej liczbie elementów. Te drugie nazywamy ciągłymi grupami punktowymi [28].

Operacją symetrii nazywamy takie przemieszczenie ciała, w którego wyniku pozycja i orientacja ciała są nierozróżnialne od położenia początkowego [29]. Operacją symetrii realizującą obrót wokół prostej nazywamy obrotem właściwym. Oznaczamy go jako  $C_n$ , gdzie kąt obrotu wynosi  $\phi = 2\pi/n$ . Gdy  $n \rightarrow \infty$ , to mamy do czynienia z granicznym przypadkiem grupy  $C_n$ . Oznaczamy go jako  $C_\infty$ . Jeżeli oś symetrii przechodząca przez wszystkie atomy umożliwia ich obrót o dowolny kąt  $\phi$ , to taką cząsteczkę nazywamy cząsteczką liniową. Symbolem  $\sigma_v$  oznaczamy odbicie względem płaszczyzny zawierającej oś najwyższej symetrii.

Cząsteczka AB jest liniowa i składa się z dwóch różnych atomów, więc jest niesymetryczna względem swego środka. Ciągłą grupą punktową opisującą tę cząsteczkę jest  $C_{\infty v}$ . Zawiera ona odbicia  $\sigma_v$  w dowolnej płaszczyźnie zawierającej oś  $C_\infty$  [28, 30]. Na rysunku 2.1 przedstawiono model bryły sztywnej dla takiej cząsteczki, oznaczając poszczególne operacje symetrii.



**Rys. 2.1.** Elementy symetrii przykładowej, heterojądrowej cząsteczki dwuatomowej.

Warto nadmienić, że w praktyce obliczeniowej wykorzystywane są tylko abelowe punktowe grupy symetrii, więc dokonuje się zmiany rozdzielczości grupy punktowej na tę o niższej symetrii. Odpowiednikiem grupy  $C_{\infty v}$  jest  $C_{2v}$  [31, 32].

## 2.2. Odseparowanie ruchu jąder od ruchu elektronów

Większość studiów teoretycznych w fizyce molekularnej i chemii kwantowej związana jest z przybliżonym rozwiązaniem niezależnego od czasu równania Schrödingera. Oddzielenie ruchu jąder i elektronów ma tutaj znaczenie zasadnicze. Podstawowy strukturalny model molekuly (przestrzenne rozmieszczenie atomów) jest możliwy dzięki temu, że jądra atomowe mają wiele tysięcy razy większą masę niż elektrony. Na rysunku 2.2 przedstawiono rozważany model dwuatomowej cząsteczki AB we współrzędnych kartezjańskich. W poniższych rozważaniach poprawki relatywistyczne są pominięte, a więc użyte jest podejście nierelatywistyczne [33, 34]. Odniesienie do efektów relatywistycznych jest zawarte w podrozdziale 2.6.

Niezależne od czasu równanie Schrödingera dla dwuatomowej molekuly heterojądrowej wygląda następująco

$$\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R})\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.1)$$

gdzie  $\{\mathbf{r}\}$  i  $\{\mathbf{R}\}$  są odpowiednio zbiorami współrzędnych elektronów i jąder atomowych. Całkowity molekularny hamiltonian można przedstawić w postaci

$$\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) + \hat{H}_{el}(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.2)$$

gdzie  $\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R})$  oznacza operator energii kinetycznej jąder

$$\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{N=A,B} \frac{\nabla_N^2}{M_N} = -\frac{\hbar^2}{2M_A} \nabla_A^2 - \frac{\hbar^2}{2M_B} \nabla_B^2. \quad (2.3)$$

Tutaj  $M_A$  i  $M_B$  są masami odpowiednich jąder atomowych. Operator  $\hat{H}_{el}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  w równaniu (2.2) oznacza hamiltonian elektronowy. Jest on sumą dwóch członów: operatora energii kinetycznej elektronów  $\hat{T}_{el}(\mathbf{r})$  i operatora energii potencjalnej  $\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$

$$\hat{H}_{el}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \hat{T}_{el}(\mathbf{r}) + \hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (2.4)$$

Operator energii kinetycznej elektronów  $\hat{T}_{el}(\mathbf{r})$  można przedstawić w postaci

$$\hat{T}_{el}(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2, \quad (2.5)$$

gdzie  $m_e$  oznacza masę elektronu, a  $n$  liczbę elektronów. Natomiast poszczególne człony operatora energii potencjalnej  $\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  w równaniu (2.4) w układzie jednostek CGS są następujące:

$$\hat{V}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = -\sum_{i=1}^n \frac{Z_A e^2}{|\mathbf{r}_{iA}|} - \sum_{i=1}^n \frac{Z_B e^2}{|\mathbf{r}_{iB}|} + \frac{Z_A Z_B e^2}{|\mathbf{R}_{AB}|} + \sum_{\substack{i=1 \\ i < j}}^n \frac{e^2}{|\mathbf{r}_{ij}|}, \quad (2.6)$$

gdzie  $Z_A$  i  $Z_B$  są liczbami atomowymi. Wektory wodzące oraz reprezentacje położenia poszczególnych jąder atomowych i elektronów przedstawione są na rysunku 2.2. Całkowitą funkcję falową  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  można rozwinąć w szereg

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_{k=1}^{\infty} \chi_k(\mathbf{R}) \Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \quad (2.7)$$

gdzie sumowanie odbywa się po wszystkich  $k$  stanach elektronowych,  $\chi_k(\mathbf{R})$  jest jądrową funkcją falową oraz  $\Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})$  jest elektronową funkcją falową z parametryczną zależnością od  $\mathbf{R}$ .

Wykorzystując ortonormalność zbioru funkcji falowych  $\{\Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})\}$  i równanie elektronowe Schrödingera

$$\hat{H}_{el}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) = E_l^{el}(\mathbf{R}) \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}), \quad (2.8)$$

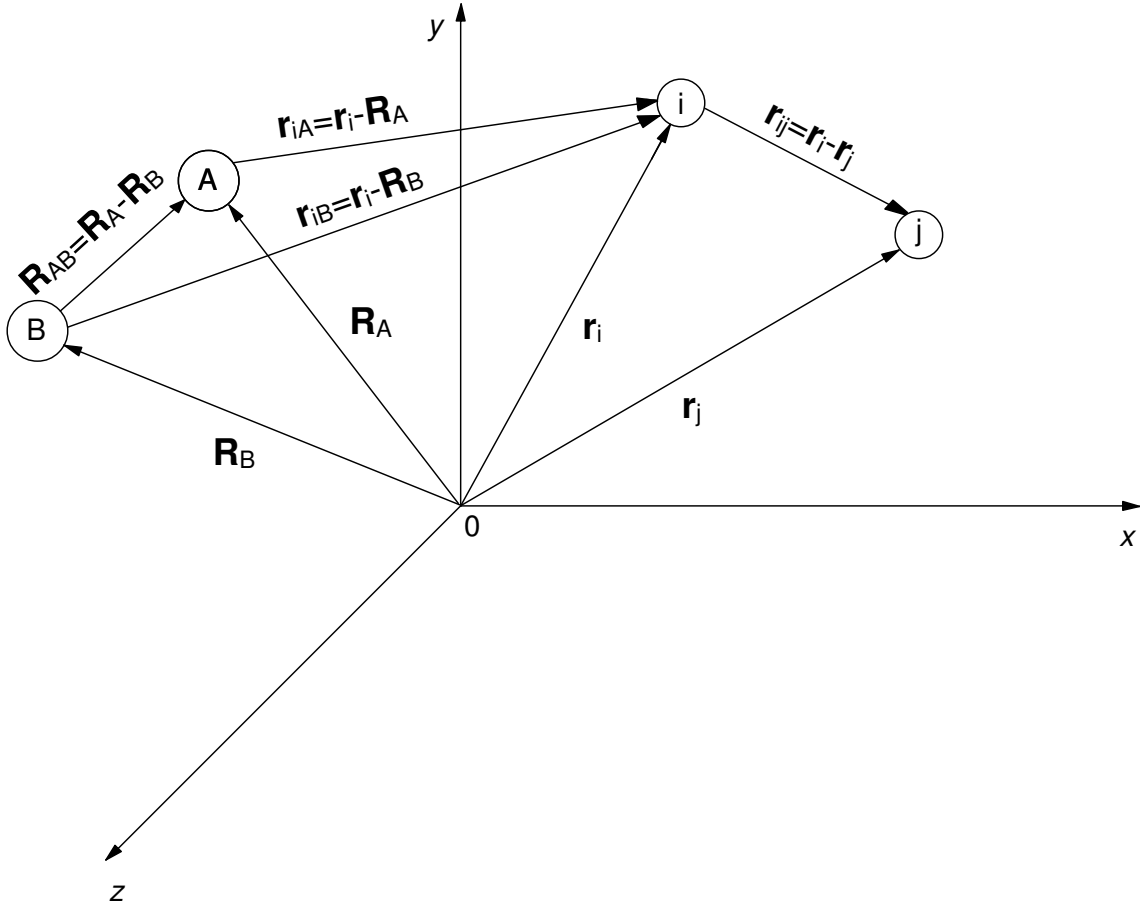
można przekształcić równanie (2.1) do postaci

$$\begin{aligned} & (\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) + E_l^{el}(\mathbf{R})) \chi_l(\mathbf{R}) + \sum_{k=1}^{\infty} \chi_k(\mathbf{R}) \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) \Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} \\ & - \hbar^2 \sum_{N=A,B} \frac{1}{M_N} \sum_{k=1}^{\infty} \nabla_N \chi_k \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \nabla_N \Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} = E \chi_l(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Separując człony o takim samym indeksie  $l$ , a następnie wykorzystując działanie operatora  $\nabla_N$  na obie strony warunku normalizacyjnego  $\int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^2 d\mathbf{r} = 1$ , ostatecznie równanie przybiera postać

$$(\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) + E_l^{el}(\mathbf{R})) \chi_l(\mathbf{R}) + \chi_l(\mathbf{R}) \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r}$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^{\infty} \chi_k(\mathbf{R}) \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) \Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} \\
& - \hbar^2 \sum_{N=A,B} \frac{1}{M_N} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq l}}^{\infty} \nabla_N \chi_k \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \nabla_N \Psi_k^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} = E \chi_l(\mathbf{R}). \quad (2.10)
\end{aligned}$$



**Rys. 2.2.** Cząsteczka AB we współrzędnych kartezjańskich: symbolami  $i, j$  oznaczono elektrony, a symbolami  $A, B$  oznaczono jądra atomowe. Rysunek opracowano na podstawie [35].

### Przybliżenie adiabaticzne

Przejdzie ze stanu elektronowego  $k$  do stanu  $l$  staje się niemożliwe ze względu na natychmiastowe dostosowywanie się ruchu elektronów do niewielkiej zmiany położenia jąder. W związku z tym wprowadza się przybliżenie adiabaticzne, w konsekwencji którego zostają usunięte dwa ostatnie człony równania (2.10). Powstaje więc równanie

$$(\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) + E_l^{el}(\mathbf{R}))\chi_l(\mathbf{R}) + \chi_l(\mathbf{R}) \int \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) \Psi_l^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} = E \chi_l(\mathbf{R}). \quad (2.11)$$

Warto zauważyć, że analogiczne równanie można otrzymać ograniczając szereg (2.7) do jednego wyrazu, np.  $k = 1$ . Fizycznie jest to związane z nieprzecinaniem się stanów o tej samej symetrii - nie ma przeskoku do innego stanu elektronowego [30, 33].

### Przybliżenie Borna-Oppenheimera

Drugi człon równania (2.11) jest relatywnie mały, ponieważ zawiera pochodną elektronowej funkcji falowej po współrzędnych jądrowych. Elektronowa funkcja falowa jest wolnozmienną funkcją  $\mathbf{R}$ .

Dodatkowe pominięcie drugiego członu równania (2.11) nosi nazwę przybliżenia Borna-Oppenheimera. Ostatecznie równanie wygląda następująco

$$(\hat{T}_{nuc}(\mathbf{R}) + E_l^{el}(\mathbf{R}))\chi_l(\mathbf{R}) = E\chi_l(\mathbf{R}). \quad (2.12)$$

Wraz z separacją ruchu elektronów od ruchu jąder oraz dokonaniem odpowiednich przybliżeń otrzymano równanie opisujące ruch jąder w obecności energii potencjalnej  $E_l^{el}(\mathbf{R})$  [30, 33].

### 2.3. Momenty przejść dipolowych i czynniki Francka-Conдона

Klasyczna definicja momentu dipolowego dla zbioru ładunków  $q_k$  z ich wektorami położenia  $\mathbf{r}_k$  jest następująca

$$\boldsymbol{\mu} = \sum_k q_k \mathbf{r}_k. \quad (2.13)$$

Analogiczne równania można przedstawić odpowiednio dla elektronów i jąder atomowych w cząsteczce AB:

$$\boldsymbol{\mu}^{el}(\mathbf{r}) = e \sum_{i=1}^n \mathbf{r}_i \quad (2.14)$$

oraz

$$\boldsymbol{\mu}^{nuc}(\mathbf{R}) = Q_A \mathbf{R}_A + Q_B \mathbf{R}_B, \quad (2.15)$$

gdzie ładunek elektronu oznaczono przez  $e$ , a ładunki jąder atomowych oznaczone są przez  $Q_A$  i  $Q_B$ . Współrzędnymi elektronów oraz jąder atomowych są odpowiednio  $\mathbf{r}_i$  oraz  $\mathbf{R}_A$  i  $\mathbf{R}_B$  [35].

Całkowity moment dipolowy dla cząsteczki może być zapisany jako suma powyższych momentów dipolowych

$$\boldsymbol{\mu}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \boldsymbol{\mu}^{el}(\mathbf{r}) + \boldsymbol{\mu}^{nuc}(\mathbf{R}). \quad (2.16)$$

W przybliżeniu oddziaływanie pola elektromagnetycznego z cząsteczką polega na oddziaływaniu z elektrycznym momentem dipolowym cząsteczki

$$E_{\boldsymbol{\mu}} = \mathbf{E} \cdot \boldsymbol{\mu}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad (2.17)$$



gdzie przez  $\mathbf{E}$  oznaczono pole elektryczne. Jeśli uznamy moment dipolowy jako operator, to prawdopodobieństwo przejścia pomiędzy dwoma molekularnymi stanami (początkowym  $i$  a końcowym  $f$ )  $P_{fi}$  jest proporcjonalne do kwadratu następującego elementu macierzowego zbudowanego z całkowych molekularnych funkcji falowych

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int \int \Psi_f(\mathbf{r}, \mathbf{R})^* \boldsymbol{\mu}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \Psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) d\mathbf{r} d\mathbf{R}. \quad (2.18)$$

Dla wybranego stanu początkowego  $i$  lub końcowego  $f$ , molekularną funkcję falową możemy zapisać jako jeden człon rozwinięcia

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \chi(\mathbf{R}) \Psi^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}). \quad (2.19)$$

Stosując do elementu macierzowego (2.18) równanie (2.19), rozdzielając całkowy moment dipolowy na sumę (2.16) i dokonując uporządkowania, równanie (2.18) wygląda następująco

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\mu}_{fi}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = & \int \chi_f(\mathbf{R})^* \left[ \int \Psi_f^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \boldsymbol{\mu}^{el}(\mathbf{r}) \Psi_i^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} \right] \chi_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \\ & + \int \left[ \int \Psi_f^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \Psi_i^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} \right] \chi_f(\mathbf{R})^* \boldsymbol{\mu}^{nuc}(\mathbf{R}) \chi_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Drugi człon równania (2.20) znika ze względu na ortogonalność elektronowych funkcji falowych  $\int \Psi_f^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \Psi_i^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r} = \delta_{fi}$ . Stąd element macierzowy opisujący elektronowy moment przejścia dipolowego jest następujący

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}^{el}(\mathbf{R}) = \int \Psi_f^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R})^* \boldsymbol{\mu}^{el}(\mathbf{r}) \Psi_i^{el}(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r}. \quad (2.21)$$

Dokonując podstawienia (2.21) do równania (2.20), molekularny dipolowy moment przejścia można przedstawić w postaci

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \int \chi_f(\mathbf{R})^* \boldsymbol{\mu}_{fi}^{el}(\mathbf{R}) \chi_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R}. \quad (2.22)$$

W następstwie przybliżenia Borna-Oppenheimera (jądra można uznać za nieruchome w stosunku do znacznie szybciej poruszających się elektronów) można otrzymać następujące wyrażenie

$$\boldsymbol{\mu}_{fi}^{mol}(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \overline{\boldsymbol{\mu}_{fi}^{el}} \int \chi_f(\mathbf{R})^* \chi_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R}, \quad (2.23)$$

gdzie  $\overline{\boldsymbol{\mu}_{fi}^{el}}$  jest uśrednioną wartością elektronowego dipolowego momentu przejścia. Powyższe wyrażenie (2.23) daje podstawę dla zasady Francka-Condon - w czasie przejścia elektronowego geometria molekuly i prędkość ruchu jąder nie ulega zmianie. Podsumowując, relację pomiędzy prawdopodobieństwem przejścia między dwoma molekularnymi stanami a uśrednionym zdelokalizowanym momentem dipolowym można zapisać w następujący sposób

$$P_{fi} \propto \left( \overline{\boldsymbol{\mu}_{fi}^{el}} \right)^2 \left[ \int \chi_f(\mathbf{R})^* \chi_i(\mathbf{R}) d\mathbf{R} \right]^2, \quad (2.24)$$

gdzie kwadrat całki nakładania jądrowych funkcji falowych stanowi czynnik Francka-Condon [28, 30].

## 2.4. Reguły wyboru

Sprzężenia pomiędzy ruchem elektronów a ruchem rotacyjnym cząsteczki zostały sklasyfikowane przez Hunda. Zmiany liczb kwantowych przy przechodzeniu z jednego stanu kwantowego do drugiego zachodzą według określonych reguł wyboru. W niniejszym rozdziale omówione zostaną reguły wyboru dla przypadków Hunda (a) i (c) w odniesieniu do cząsteczki dwuatomowej heterojądrowej. Różnica pomiędzy przypadkiem Hunda (a) i (c) polega na tym, że w przypadku Hunda (c) oddziaływanie orbitalnego momentem pędu z całkowitym spinem staje się silniejsze niż oddziaływanie z osią międzyjądrową. Reguły wyboru są następstwem oszacowania elementów macierzowych elektrycznego momentu dipolowego [31, 36, 37].

Jedną z podstawowych reguł wyboru dla każdego układu atomowego dotyczy liczby kwantowej całkowitego momentu pędu  $J$  - jej wartość przy przejściu ze stanu początkowego do końcowego spełnia warunek

$$\Delta J = 0, \pm 1 \quad (J = 0 \not\rightarrow J = 0). \quad (2.25)$$

### Przypadek Hunda (a)

Kwantowa liczba  $\Lambda$  (rzut orbitalnego momentu pędu elektronu na prostą wyznaczoną przez oś cząsteczki) definiuje stany dla danej konfiguracji elektronowej. Przyjmuje ona wartości  $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$  o specjalnych oznaczeniach  $\Sigma, \Pi, \Delta, \dots$ . Przejście między stanami spełnia następujący warunek

$$\Delta \Lambda = 0, \pm 1. \quad (2.26)$$

Biorąc pod uwagę symetrię funkcji molekularnej ze względu na odbicie w płaszczyźnie cząsteczki - nie ma przejść pomiędzy stanami  $\Sigma^+$  i  $\Sigma^-$ , co można zapisać następująco

$$\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^+, \Sigma^- \leftrightarrow \Sigma^-, \Sigma^+ \not\leftrightarrow \Sigma^-. \quad (2.27)$$

Podsumowując, dozwolone są przejścia

$$\Sigma^+ \leftrightarrow \Sigma^+, \Sigma^- \leftrightarrow \Sigma^-, \Pi \leftrightarrow \Sigma^+, \Pi \leftrightarrow \Sigma^-, \Pi \leftrightarrow \Pi, \Pi \leftrightarrow \Delta, \Delta \leftrightarrow \Delta, \dots \quad (2.28)$$

Reguła wyboru związana z multipletowością stanów stanowi, że tylko dla tych o takiej samej wartości spinu, może dojść do zmiany stanu kwantowego

$$\Delta S = 0. \quad (2.29)$$

### Przypadek Hunda (c)

Kwantowa liczba  $\Omega$  definiuje rzut całkowitego elektronowego momentu pędu na oś międzyjądrową. Reguła wyboru dla tej liczby kwantowej jest następująca

$$\Delta \Omega = 0, \pm 1. \quad (2.30)$$

Analogicznie do (2.27), odbicie w płaszczyźnie zawierającej międzyjądrową oś zachodzi tylko dla  $\Omega = 0$

$$0^+ \leftrightarrow 0^+, 0^- \leftrightarrow 0^-, 0^+ \not\leftrightarrow 0^-. \quad (2.31)$$

Podsumowując, przejścia dozwolone dla liczby kwantowej  $\Omega$  są analogiczne jak w przypadku liczby kwantowej  $\Lambda$  (2.28).

## 2.5. Szereg Dunhama, parametry spektroskopowe

Obraz struktury energetycznej cząsteczki dwuatomowej może zostać przedstawiony za pomocą szeregu Dunhama opisującego wartości energii rotującego oscylatora [38]. Jest to jedno z dobrze znanych podejść do analizy widm oscylacyjno-rotacyjnych cząsteczek dwuatomowych. Ten szereg obrazuje rozkład poziomów energetycznych zależnych od liczb kwantowych: oscylacyjnej  $v$  i rotacyjnej  $J$ . Odpowiadają one danemu stanowi elektronowemu  $E$ . Postać szeregu jest następująca

$$E_{vJ} = \sum_{k,l=0}^{\infty} Y_{kl} \left( v + \frac{1}{2} \right)^k [J(J+1) - \Lambda^2]^l. \quad (2.32)$$

Energie wszystkich poziomów oscylacyjno-rotacyjnych mogą być opisane przez zbiór stałych molekularnych  $Y_{kl}$ . Niektóre z tych stałych posiadają specjalne oznaczenia

$$Y_{01} = B_e, Y_{10} = \omega_e, Y_{00} = E^{el}(R_e), \quad (2.33)$$

gdzie  $B_e$  jest stałą rotacyjną a  $\omega_e$  - stałą oscylacyjną. Współczynnik  $Y_{00}$  równy jest wartości krzywej energii potencjalnej dla parametru  $R_e$  (równowagowa długość wiązania), inaczej tę wartość nazywamy energią termu elektronowego  $T_e$  [30]. Niewchodzącą w skład szeregu Dunhama energię wertykalnego przejścia  $T_{ev}$ , wyznacza się na podstawie przejścia z położenia  $R_e$  stanu podstawowego do danego stanu wzbudzonego.

Do pozostałych parametrów spektroskopowych, niewchodzących w skład szeregu Dunhama, należą głębokość studni potencjału  $D_e$  oraz energia dysocjacji  $D_0$ . Różnica pomiędzy nimi jest energią zerowego poziomu cząsteczki:

$$D_e - D_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega, \quad (2.34)$$

gdzie  $\omega$  oznacza częstość oscylacji wiązania [39].

## 2.6. Efekty relatywistyczne

W tym podrozdziale poszczególne poprawki relatywistyczne zostaną omówione w kontekście molekuly dwuatomowej AB. Biorąc pod uwagę efekty relatywistyczne,

kilka dodatkowych członów powinno zostać dodanych do nierelatywistycznego elektronowego hamiltonianu (2.4). Hamiltonian zawierający dodatkowe człony nazywamy perturbacyjnym hamiltonianem Breit-Pauliego. Oznaczamy go symbolem  $\hat{H}_{BP}$ . Dla dwuatomowej cząsteczki wieloelektronowej może on zostać zapisany w następujący sposób

$$\hat{H}_{BP} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{MV} + \hat{H}_D + \hat{H}_{SO}, \quad (2.35)$$

gdzie zastosowano oznaczenia:  $\hat{H}_0$  - nierelatywistyczny elektronowy hamiltonian,  $\hat{H}_{MV}$  - człon tzw. masa-prędkość,  $\hat{H}_D$  - człon Darwina i  $\hat{H}_{SO}$  - człon spinowo-orbitalny. Wszystkie człony są przedstawione w układzie jednostek CGS. Człony  $\hat{H}_{MV}$  i  $\hat{H}_D$  dają bezspinowy wkład do relatywistycznych obliczeń i odpowiedzialne są za tzw. efekt skalarny. Człon masa-prędkość związany jest z relatywistycznym przyrostem masy elektronu. Przyjmuje on następującą postać

$$\hat{H}_{MV} = -\frac{\hbar^4}{8m_e^3c^2} \sum_{i=1}^n \nabla_i^4, \quad (2.36)$$

gdzie  $n$  oznacza liczbę elektronów. Kolejny człon,  $H_D$ , jest poprawką Darwina do energii kulombowskiej. Wynika on z rozmycia się ładunku elektronów ze względu na ich ruch relatywistyczny. Można go zapisać w postaci

$$\hat{H}_D = \frac{\hbar^2\pi}{2m_e^2c^2} \left\{ \sum_{i=1}^n [Z_A e^2 \delta^3(\mathbf{r}_{iA}) + Z_B e^2 \delta^3(\mathbf{r}_{iB})] - 2 \sum_{\substack{i=1 \\ i < j}}^n e^2 \delta^3(\mathbf{r}_{ij}) \right\}. \quad (2.37)$$

Relatywistyczny człon związany z oddziaływaniem pomiędzy spinem a orbitalnym momentem pędu elektronu, tzw. operator spin-orbita, wygląda następująco

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SO} = & \frac{g_s \mu_B}{c} \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{Z_A}{r_{iA}^3} \left( \mathbf{r}_{iA} \times \frac{\mathbf{v}_i}{2} \right) \cdot \mathbf{s}_i + \frac{Z_B}{r_{iB}^3} \left( \mathbf{r}_{iB} \times \frac{\mathbf{v}_i}{2} \right) \cdot \mathbf{s}_i \right\} \\ & - \frac{g_s \mu_B}{c} \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{e}{r_{ij}^3} \left[ \mathbf{r}_{ij} \times \left( \frac{1}{2} \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j \right) \right] \cdot \mathbf{s}_i, \end{aligned} \quad (2.38)$$

gdzie  $\mathbf{v}_i$  oznacza prędkość  $i$ -tego elektronu przy ustalonych współrzędnych jądrowych,  $g_s$  to czynnik elektronowy Landego ( $g_s \approx 2$ ) a  $\mu_B$  to magneton Bohra ( $\mu_B = \frac{e\hbar}{2mc}$ ). Pierwszy człon odpowiada za bezpośrednie oddziaływanie spin-orbita, a drugi za oddziaływanie spin-inna orbita (oddziaływanie pomiędzy spinem a orbitalnym momentem pędu, które pochodzą od różnych atomów).

Podstawiając  $\mathbf{v}_i = \frac{\mathbf{p}_i}{m}$ , gdzie  $\mathbf{p}_i$  jest pędem elektronu i wprowadzając następujące operatory momentu pędu

$$\begin{aligned} \mathbf{l}_{ij} &= \frac{1}{\hbar} (\mathbf{r}_{ij} \times \mathbf{p}_i), \\ \mathbf{l}_{iA} &= \frac{1}{\hbar} (\mathbf{r}_{iA} \times \mathbf{p}_i), \end{aligned}$$

$$\mathbf{l}_{iB} = \frac{1}{\hbar} (\mathbf{r}_{iB} \times \mathbf{p}_i) \quad (2.39)$$

oraz dokonując odpowiednie przekształcenia operatora  $H_{SO}$  (2.38) można otrzymać jego prostszą postać

$$\hat{H}_{SO} = 2\mu_B^2 \sum_{i=1}^n \left\{ \frac{Z_A}{r_{iA}^3} \mathbf{l}_{iA} \cdot \mathbf{s}_i + \frac{Z_B}{r_{iB}^3} \mathbf{l}_{iB} \cdot \mathbf{s}_i \right\} - 2\mu_B^2 \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^n \frac{1}{r_{ij}^3} \mathbf{l}_{ij} \cdot (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j). \quad (2.40)$$

Tutaj jest nawet lepiej widoczne, że pierwsza część operatora spinowo-orbitalnego  $\hat{H}_{SO}$  przedstawia sprzężenie spin-orbita każdego elektronu w polu dwóch jąder o ładunkach  $Z_A$  i  $Z_B$ . Jest to operator jednoelektronowy uwzględniony w moich obliczeniach. Druga część przedstawia międzyelektronowe oddziaływanie (spin-inna orbita). Jest to operator dwuelektronowy [40–44].

## 2.7. Model hamiltonianu walencyjnego

W tym podrozdziale zastosowane są dwa podejścia do obliczeń struktury elektronowej cząsteczki dwuatomowej: bez i z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita. Poszukiwane jest rozwiązanie równania Schrödingera w przybliżeniu Borna-Oppenheimera. W rozważanej cząsteczce NaRb dwa elektrony walencyjne ( $n = 2$ ) są brane bezpośrednio pod uwagę, natomiast rdzenie  $\text{Na}^+$  i  $\text{Rb}^+$  są zastępowane przez  $l$ -zależne pseudopotencjały. W poniższych wzorach indeksy  $A$  i  $B$  identyfikują, odpowiednio atomy sodu i rubidu. Model hamiltonianu walencyjnego opracowano na podstawie [45–47]. Wzory są przedstawione w jednostkach atomowych ( $m_e = e = \hbar = 1$ ).

Całkowity hamiltonian walencyjny może zostać przedstawiony w postaci

$$\hat{H}_{val} = \hat{H}_{nrel} + \hat{H}_{so}, \quad (2.41)$$

gdzie  $\hat{H}_{nrel}$  oznacza podejście do obliczeń struktury elektronowej bez oddziaływania spin-orbita, a  $\hat{H}_{so}$  opisuje człon spinowo-orbitalny. Oba operatory można przedstawić w następujący sposób

$$\hat{H}_{nrel} = \hat{T}_{val} + \hat{V}_{val} + \hat{V}_{cc} + \sum_{\lambda=A,B} (\hat{V}_{av}^\lambda + \hat{V}_{pol}^\lambda) \quad (2.42)$$

i

$$\hat{H}_{so} = \sum_{\lambda=A,B} \hat{V}_{so}^\lambda, \quad (2.43)$$

gdzie poszczególne człony oznaczają:  $\hat{T}_{val}$  - operator energii kinetycznej elektronów walencyjnych w postaci

$$\hat{T}_{val} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \nabla_i^2, \quad (2.44)$$

$\hat{V}_{val}$  - operator energii potencjalnej elektronów walencyjnych w postaci

$$\hat{V}_{val} = \sum_{\substack{i=1 \\ i < j}}^n \frac{1}{r_{ij}}, \quad (2.45)$$

$\hat{V}_{cc}$  - operator energii potencjalnej oddziaływania pomiędzy rdzeniami atomowymi w postaci

$$\hat{V}_{cc} = \frac{Q_A Q_B}{R}. \quad (2.46)$$

W powyższym członie symbolami  $Q_A$  i  $Q_B$  oznaczono ładunki rdzeni poszczególnych atomów a przez  $R$  odległość między nimi. Człony wyszczególnione sumą po  $\lambda$  przedstawione są w dalszych podrozdziałach. Są nimi  $\hat{V}_{av}^\lambda$  - efektywny potencjał rdzenia z uwzględnieniem skalarne go efektu relatywistycznego,  $\hat{V}_{pol}^\lambda$  - efektywny potencjał polaryzacyjny rdzenia oraz  $\hat{V}_{so}^\lambda$  - pseudopotencjał reprezentujący oddziaływanie spin-orbita.

### **Efektywny potencjał rdzenia z uwzględnieniem skalarne go efektu relatywistycznego**

Bezspinowy pseudopotencjał uśredniony po orbitalnej liczbie kwantowej  $l$ , może zostać przedstawiony w następujący sposób:

$$\hat{V}_{av}^\lambda = \sum_{i=1}^n \left[ -\frac{Q_\lambda}{r_{\lambda i}} + \sum_{lk} B_{lk}^\lambda \exp(-\beta_{lk}^\lambda r_{\lambda i}^2) \hat{P}_l^\lambda \right], \quad (2.47)$$

gdzie  $n$  oznacza liczbę elektronów walencyjnych (w tym przypadku  $n = 2$ ),  $Q_\lambda$  - ładunek rdzenia danego atomu,  $r_{\lambda i}$  - odległość pomiędzy rdzeniem atomu  $\lambda$  a elektronem walencyjnym  $i$ . Indeks  $l$  oznacza orbitalną liczbę kwantową, natomiast indeks  $k$  numeruje poszczególne współczynniki  $B_{lk}^\lambda$  i  $\beta_{lk}^\lambda$  dla danej liczby  $l$ . Współczynniki przedstawione są w tabelach 2.1 i 2.2. Operator  $\hat{P}_l^\lambda$  jest projektorem na podprzestrzeń Hilberta o kątowej symetrii  $l$  w odniesieniu do rdzenia  $\lambda$ . Można go przedstawić w notacji Dirac'a jako

$$\hat{P}_l^\lambda = \sum_{m=-l}^l |\lambda l m\rangle \langle \lambda l m|. \quad (2.48)$$

**Tab. 2.1.** Parametry uśrednionego, bezspinowego pseudopotencjału rdzenia atomu sodu:  $B_{lk}^A, \beta_{lk}^A$  [48].

$l$	$k$	$B_{lk}^A$	$\beta_{lk}^A$
0	1	10,839	1,3780
1	1	2,303	0,6639
2	1	-1,777	0,9249

**Tab. 2.2.** Parametry uśrednionego, bezspinowego pseudopotencjału rdzenia atomu rubidu:  $B_{lk}^B, \beta_{lk}^B$  [49].

$l$	$k$	$B_{lk}^B$	$\beta_{lk}^B$
0	1	65,136000	1,10670
1	1	2,987200	0,31777
1	2	2,880100	0,30313
2	1	-1,957400	0,37996
2	2	-1,897200	0,37277
3	1	-0,026739	0,08895

## Efektywny potencjał polaryzacyjny rdzenia

Efektywny potencjał polaryzacyjny rdzenia opisujący korelację pomiędzy rdzeniem atomowym a elektronami walencyjnymi może być zapisany w następujący sposób

$$\hat{V}_{pol}^\lambda = -\frac{1}{2}\alpha_\lambda \mathbf{F}_\lambda^2, \quad (2.49)$$

gdzie  $\alpha_\lambda$  oznacza dipolową polaryzowalność danego rdzenia atomowego ( $\alpha_A = 0,9947 a_0^3$  [50],  $\alpha_B = 8,67 a_0^3$  [51, 52]).  $\mathbf{F}_\lambda$  jest polem elektrycznym działającym na rdzeń  $\lambda$  pochodzącym od drugiego rdzenia i elektronów walencyjnych. Pole elektryczne działające na poszczególne rdzenie  $A$  i  $B$  może być przedstawione za pomocą następujących wzorów

$$\mathbf{F}_A = \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{r}_{Ai}}{r_{Ai}^3} [1 - \exp(-\delta_A r_{Ai}^2)] - \frac{Q_B \mathbf{R}}{R^3} [1 - \exp(-\delta_A R^2)] \quad (2.50)$$

i

$$\mathbf{F}_B = \sum_{i=1}^n \frac{\mathbf{r}_{Bi}}{r_{Bi}^3} [1 - \exp(-\delta_B r_{Bi}^2)] - \frac{Q_A \mathbf{R}}{R^3} [1 - \exp(-\delta_B R^2)], \quad (2.51)$$

gdzie  $\delta_A$  i  $\delta_B$  są parametrami obciążenia odpowiednich rdzeni atomowych ( $\delta_A = 0,62 a_0^{-2}$  [50],  $\delta_B = 0,23 a_0^{-2}$  [51, 52]).

## Pseudopotencjał reprezentujący oddziaływanie spin-orbita

Człon pseudopotencjału zależny od spinu może zostać przedstawiony w następujący sposób

$$\hat{V}_{so}^{\lambda} = \sum_{i=1}^{n_{\lambda}} \sum_l \frac{2\Delta V_{i,l}^{\lambda}}{2l+1} \hat{P}_l^{\lambda} \mathbf{l}_{\lambda i} \cdot \mathbf{s}_i \hat{P}_l^{\lambda}, \quad (2.52)$$

gdzie  $\mathbf{l}_{\lambda i} = \mathbf{r}_{\lambda i} \times \mathbf{p}_i$  oznacza orbitalny moment pędu w odniesieniu do rdzenia  $\lambda$ , gdzie przez  $\mathbf{p}_i$  oznaczono pęd elektronu. We wzorze (2.52)  $\mathbf{s}_i$  oznacza spin elektronu. W tym członie - operatorze jednoelektronowym - nie uwzględniono oddziaływania spin-inna orbita.  $\Delta V_{i,l}^{\lambda}$  jest różnicą pomiędzy korespondującymi relatywistycznymi pseudopotencjałami i można ją zapisać w postaci podobnej do radialnej części uśrednionego bezspinowego pseudopotencjału  $\hat{V}_{av}^{\lambda}$  (2.47)

$$\Delta V_{i,l}^{\lambda} = V_{i,l+1/2}^{\lambda} - V_{i,l-1/2}^{\lambda} = \sum_k C_{lk}^{\lambda} \exp(-\gamma_{lk}^{\lambda} r_{\lambda i}^2). \quad (2.53)$$

Poszczególne parametry pseudopotencjału reprezentującego operator spin-orbita przedstawiono w tabelach 2.3 i 2.4.

**Tab. 2.3.** Parametry pseudopotencjału atomu sodu reprezentującego oddziaływanie spin-orbita:  $C_{lk}^A$ ,  $\gamma_{lk}^A$  [48].

$l$	$k$	$C_{lk}^A$	$\gamma_{lk}^A$
1	1	0,015867	0,6639
2	1	-0,001224	0,9249

**Tab. 2.4.** Parametry pseudopotencjału atomu rubidu reprezentującego oddziaływanie spin-orbita:  $C_{lk}^B$ ,  $\gamma_{lk}^B$  [49]. Na czerwono oznaczono zmodyfikowane przez mnie parametry pseudopotencjału umożliwiające odpowiednie dopasowanie rozszczepienia spin-orbita.

$l$	$k$	$C_{lk}^B$	$\gamma_{lk}^B$
1	1	-2,9502	0,31777
1	2	2,8551	0,30313
2	1	1,9574	0,37996
2	2	-1,8972	0,37277

## 2.8. Baza obliczeniowa

Spinorbitale będące funkcjami jednoelektronowymi a zarazem budulcem wyznacznika Slatera można zdefiniować następująco

$$\phi_i^{el}(\mathbf{r}_j, \sigma_j) = \varphi_i(\mathbf{r}_j) \alpha(\sigma_j) \quad (2.54)$$



i

$$\overline{\phi}_i^{el}(\mathbf{r}_j, \sigma_j) = \varphi_i(\mathbf{r}_j)\beta(\sigma_j), \quad (2.55)$$

gdzie  $\varphi_i(\mathbf{r}_j)$  jest  $i$ -tym orbitalem molekularnym ( $\mathbf{r}_j$  reprezentuje położenie  $j$ -tego elektronu) a  $\alpha(\sigma_j)$  i  $\beta(\sigma_j)$  są dwiema możliwymi funkcjami spinowymi ( $\sigma_j$  oznacza zmienną spinową  $j$ -tego elektronu). W obliczeniach teoretycznych orbital molekularny  $\varphi_i(\mathbf{r}_j)$  może zostać rozpisany jako liniowa kombinacja orbitali atomowych, a te z kolei są tworzone jako liniowa kombinacja  $m$  bazowych funkcji gaussowskich  $\eta_k$

$$\varphi_i(\mathbf{r}_j) = \sum_{k=1}^m C_{ik}\eta_k(\mathbf{r}_j). \quad (2.56)$$

Biorąc pod uwagę współrzędne kartezjańskie cząsteczki (patrz rysunek 2.2) funkcje gaussowskie są dobierane jako iloczyn dwóch czynników, z których pierwszy jest kartezjańskim a drugi wykładniczym

$$\eta_k(\mathbf{r}_j) = N(l_k, m_k, n_k; \alpha_k) x_j^{l_k} y_j^{m_k} z_j^{n_k} \exp(\alpha_k r_j^2), \quad (2.57)$$

gdzie  $r_j = |\mathbf{r}_j|$  natomiast  $l_k, m_k, n_k$  są liczbami całkowitymi charakteryzującymi typ funkcji Gaussa a  $N(l_k, m_k, n_k; \alpha_k)$  stanowi czynnik normalizacyjny. W ostatnim wzorze pominięto, w celu zachowania ogólności, indeks  $\lambda$  odnoszący się do rozpatrywanych w pracy atomów.

Funkcje gaussowskie można klasyfikować ze względu na parametr  $t$ , który definiuje się za pomocą sumy

$$t = l_k + m_k + n_k \quad (2.58)$$

i stosuje się następujące oznaczenia w zależności od wartości  $t$ :

- a)  $t = 0$  funkcja gaussowska typu  $s$ ,
- b)  $t = 1$  funkcja gaussowska typu  $p$ ,
- c)  $t = 2$  funkcja gaussowska typu  $d$ ,
- d)  $t = 3$  funkcja gaussowska typu  $f$ .

W przypadkach (a) i (b) istnieje bezpośrednia zależność pomiędzy funkcjami gaussowskimi i rzeczywistymi orbitalami atomowymi. Dla przypadków (c) i (d) oraz funkcji gaussowskich wyższego rzędu istnieje więcej czynników kartezjańskich danego typu niż rzeczywistych orbitali atomowych związanych z liczby kwantowej całkowitego momentu pędu  $l$  [53].

Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich  $\alpha_k$  zastosowane w obliczeniach przedstawiono w tabelach 2.5 i 2.6. W przypadku atomu sodu dla orbitali  $s$  i  $p$  zastosowałem bazę ECP10SDF [54] a dla orbitali  $d$  i  $f$  bazę CC-PVQZ [55]. W przypadku atomu rubidu dla orbitali  $s$  i  $p$  zastosowałem bazę ECP36SDF [56, 57] a dla orbitali  $d$  i  $f$  bazę ECP28MDF [58]. Baza została rozszerzona o dodatkowe współczynniki, które zostały starannie dobrane. Jest to procedura żmudna i czasochłonna. Opiera się ona na odpowiednim dopasowywaniu otrzymywanych potencjałów do danych eksperymentalnych, głównie asymptot atomowych.

**Tab. 2.5.** Wykładniki bazowych funkcji gausowskich orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  i  $f$  atomu sodu.

typ orbitalu / nazwa bazy			
$s$	$p$	$d$	$f$
ECP10SDF	ECP10SDF	CC-PVQZ	CC-PVQZ
2,603336	0,499206	0,211600	0,200600
0,517217	0,079219	0,103900	0,100900
0,058196	0,029946	0,051000	
0,023141	0,012605		
dodatkowe rozszerzenie danej bazy			
331,972817	124,919753	1,787376	0,398814
144,377908	19,823516	0,877639	0,050752
65,954600	3,145794	0,430939	
13,103510	0,005306	0,025034	
4,596767	0,002233	0,012288	
1,612565	0,000940	0,006032	
0,146354		0,002961	
0,102758			
0,009202			
0,006548			
0,003659			
0,001455			
0,000417			

**Tab. 2.6.** Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  i  $f$  atomu rubidu.

typ orbitalu / nazwa bazy			
$s$	$p$	$d$	$f$
ECP36SDF	ECP36SDF	ECP28MDF	ECP28MDF
0,718288	0,161967	0,859432	2,431531
0,273978	0,050771	0,608150	0,721517
0,032306	0,022133	0,211260	0,211260
0,015232	0,009934	0,071000	
		0,025490	
dodatkowe rozszerzenie danej bazy			
78,729874	5,258465	2,425571	8,194323
12,943370	1,648345	1,716379	0,061857
4,937015	0,516699	1,214541	
2,866915	0,004459	0,023862	
2,323530	0,002001	0,009151	
1,883135	0,000898	0,007758	
0,104504	0,000403	0,003285	
0,068519		0,001180	
0,007182		0,000423	
0,003809			
0,003386			
0,001597			
0,000139			

## 2.9. Metody obliczeniowe

Metody wariacyjne opierają się na funkcjonale energii  $\epsilon$  dla funkcji próbnych i na zasadzie wariacyjnej. Wielkość  $\epsilon$  jest oszacowaniem energii własnej układu

$$\epsilon[\varphi] = \frac{\int \varphi^* \hat{H} \varphi d\tau}{\int \varphi^* \varphi d\tau} \quad (2.59)$$

dla funkcji próbnej  $\varphi$ . Zasada wariacyjna mówi o tym, że dokładna energia stanu podstawowego  $E_0$  jest dolną granicą energii dla wynikającego z funkcji próbnych  $\varphi$  funkcjonału energii  $\epsilon$  (2.59) (tzn.  $\epsilon \geq E_0$ ). Procedura wyznaczania przybliżonych funkcji i wartości własnych rozpatrywanego układu opiera się na minimalizowaniu funkcjonału energii (2.59) dla funkcji próbnych. Odmianą metody wariacyjnej jest metoda Ritza, w której funkcję próbną przedstawia się w postaci liniowej kombinacji funkcji bazowych  $\{\chi_i\}$  wynikających z przesłanek dotyczących własności danego układu

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^N c_i \chi_i(\mathbf{r}). \quad (2.60)$$

Minimalizowanie zagadnienia opartego o funkcje bazowe prowadzi do układu równań liniowych jednorodnych, z których metodą diagonalizacji wyznacza się przybliżenia energii i funkcji falowej stanów podstawowego i wzbudzonych [33, 59, 60].

Do zastosowanych metod obliczeniowych opartych na metodach wariacyjnych należą: ograniczona metoda Hartree-Focka (ang. Restricted Hartree Fock, w skrócie RHF), wielokonfiguracyjna metoda pola samouzgodnionego z zupełną przestrzenią aktywną (ang. Multiconfigurational Self Consistent Field/Complete Active Space Self Consistent Field, w skrócie MCSCF/CASSCF) i wieloreferencyjna metoda oddziaływania konfiguracji (ang. Multireference Configuration Interaction, w skrócie MRCI) [33, 60].

Metoda Hartree-Focka (HF) ma funkcję próbną przedstawioną w postaci pojedynczego wyznacznika Slatera  $\Phi_{HF}$  zbudowanego ze spinorbitali atomowych. W przypadku zagadnienia dwuelektronowego wyznacznik ma wymiar 2 na 2. W ograniczonej metodzie Hartree-Focka (RHF) wyznacznik Slatera jest zbudowany ze spinorbitali zdefiniowanych we wzorach (2.54) i (2.55). Można go zapisać następująco

$$\Phi_{RHF}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \sigma_1, \sigma_2) = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \phi_1^{el}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \overline{\phi_1^{el}}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \\ \phi_2^{el}(\mathbf{r}_1, \sigma_1) & \overline{\phi_2^{el}}(\mathbf{r}_2, \sigma_2) \end{vmatrix}, \quad (2.61)$$

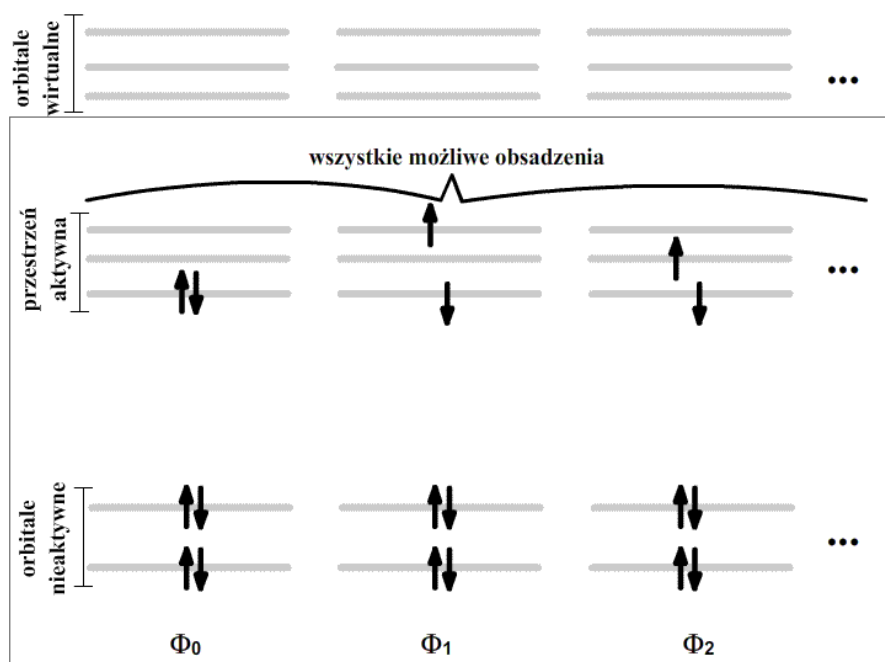
gdzie  $\mathbf{r}_1$  i  $\mathbf{r}_2$  oznaczają wektory wodzące elektronów we współrzędnych kartezyjskich a  $\sigma_1$  i  $\sigma_2$  oznaczają zmienne spinowe danego elektronu. Minimalizację energii przeprowadza się wykorzystując wariację orbitali i jako rezultat otrzymuje się układ równań Focka, którego rozwiązanie daje poszukiwane orbitale optymalne [33, 59].

W metodzie oddziaływania konfiguracji (CI) wariacyjna funkcja falowa (będąca zarazem funkcją próbną) jest liniową kombinacją wyznaczników Slatera

$$\Psi = \sum_{I=0}^n C_I \Phi_I, \quad (2.62)$$

gdzie  $\Phi_0 = \Phi_{HF}$  lub  $\Phi_{RHF}$  a kolejne wyznaczniki  $\Phi_I$  dla  $I = 1 \dots n$  są tworzone przez wzbudzenia elektronów na wyższe orbitale. Następnie wykorzystując podane rozwinięcie (2.62) stosuje się metodę Ritza, która prowadzi do diagonalizacji równania wiekowego [33].

W wielokonfiguracyjnej metodzie pola samouzgodnionego (MCSCF) kombinacja liniowa brana pod uwagę stanowi obcięte rozwinięcie CI [35] (2.62) a orbitale przedstawione są w postaci rozwinięcia LCAO-MO, gdzie każdy orbital molekularny jest przedstawiony jako liniowa kombinacja orbitali atomowych. Współczynniki  $C_I$  przy wyznacznikach optymalizowane są metodą Ritza. Poza tym optymalizuje się również orbitale molekularne. Zastosowanym sposobem tworzenia wyznaczników w rozwinięciu MCSCF jest metoda zupełnej przestrzeni aktywnej CASSCF. W skład wyznaczników wchodzi orbitale nieaktywne i przestrzeń aktywna. Przedstawione to zostało na rysunku 2.3.



**Rys. 2.3.** Zestaw możliwych wyznaczników Slatera przeznaczonych do obliczeń MCSCF budowany w ramach spinorbitali nieaktywnych i przestrzeni aktywnej. Nieaktywnymi nazywa się orbitale powłok wewnętrznych, które są podwójnie obsadzone, natomiast w przestrzeni aktywnej znajdują się wyższe orbitale dla których stosuje się wszystkie możliwe obsadzenia. Powyżej określonej granicy energetycznej orbitale nie są brane pod uwagę.

W przypadku metody jednoreferencyjnej CI przestrzenią modelową jest jeden wyznacznik Slatera - wyznacznik Hartree-Focka. W wieloreferencyjnej metodzie CI (MRCI) przestrzenią modelową jest zestaw pewnej liczby wyznaczników. Rozwinięcie CI (2.62) otrzymujemy przez zastępowanie spinorbitali występujących w przestrzeni modelowej z zajętych orbitali aktywnych metody CASSCF innymi spinorbitalami wirtualnymi (wzbudzenia do orbitali zewnętrznych - powyżej określonej granicy energetycznej) [33, 60].

W praktyce obliczeniowej, tylko w pierwszej iteracji dla największej odległości stosuje się metodę RHF. Początkowe orbitale są w niej wygenerowane dla jonu NaRb<sup>+</sup>. Następnie, startując z tych orbitali w metodzie wielokonfiguracyjnej pola samouzgodnionego z zupełną przestrzenią aktywną dokonuje się dodatkowej reorganizacji orbitali i osiąga się poprawny układ poziomów energetycznych na poziomie wieloreferencyjnej metody oddziaływania konfiguracji. W kolejnych iteracjach konfiguracja orbitali wynika z poprzedniego kroku. Jest to jedna z metod osiągania zbieżności.

W przypadku obliczeń nierelatywistycznych w metodach obliczeniowych jest użyty hamiltonian  $\hat{H}_{nrel}$  (2.42). W przypadku potencjałów zawierających oddziaływanie spin-orbita stany własne hamiltonianu  $\hat{H}_{val}$  są uzyskane przez jego diagonalizację w oparciu o funkcje własne  $\hat{H}_{nrel}$  (2.41). Rozszczepienie spin-orbita jest obliczane poprzez utworzenie i diagonalizację macierzy spinowo-orbitalnej pomiędzy stanami skalarno-relatywistycznymi - obliczone elementy macierzowe dają wkład do macierzy na poziomie MRCI [32].

## 3. Wyniki i dyskusja

W tym rozdziale przedstawiony jest zestaw rezultatów teoretycznych obliczeń dla molekuly NaRb. W pierwszej kolejności przedstawione są adiabatyczne krzywe energii potencjalnej bez uwzględnienia efektów relatywistycznych, parametry spektroskopowe dla tych krzywych, porównanie potencjałów z wynikami innych autorów. Potem następuje podobne zestawienie dla krzywych z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita. Następnym etapem jest przedstawienie wybranych momentów przejść dipolowych i czynników Francka-Condon w ujęciu nierelatywistycznym i relatywistycznym. Wszystkie krzywe zostały policzone przy pomocy pakietu programów MOLPRO [26, 27]. Natomiast parametry spektroskopowe zostały wyznaczone w programie LEVEL 8.0 [61]. Te parametry to wyszczególnione w sekcji teoretycznej:  $R_e$  - równowagowa długość wiązania,  $D_e$  - energia wiązania,  $D_0$  - energia dysocjacji,  $T_{ev}$  - energia wertykalnego przejścia,  $T_e$  - energia termu elektronowego dla  $R_e$  stanu podstawowego,  $\omega_e$  - stała oscylacyjna oraz  $B_e$  - stała rotacyjna.

### 3.1. Potencjały nierelatywistyczne cząsteczki

Policzyłem potencjały nierelatywistyczne (bez oddziaływania spin-orbita). Odpowiadają one przypadkowi Hunda (a). Modelowym hamiltonianem na poziomie metod obliczeniowych jest wtedy  $\hat{H}_{nrel}$  (2.41).

#### 3.1.1. Asymptoty

Obliczone potencjały cząsteczki NaRb zbiegają do następujących asymptot atomowych:  $Na(3s)+Rb(5s)$ ,  $Na(3s)+Rb(5p)$ ,  $Na(3p)+Rb(5s)$ ,  $Na(3s)+Rb(4d)$ ,  $Na(3s)+Rb(6s)$ ,  $Na(3s)+Rb(6p)$  i  $Na(3s)+Rb(5d)$ . W tabeli 3.1 przedstawiam wyniki asymptotyczne dla stanów wzbudzonych i porównuję z wynikami innych autorów.

Większość innych badań teoretycznych została przeprowadzona za pomocą pakietu programów CIPSI (np. [21]). W odróżnieniu do pozostałych autorów moje wyniki obliczeniowe zostały wykonane przy pomocy pakietu programów MOLPRO [26, 27]. Zgodność otrzymanych wyników w tej pracy z danymi eksperymentalnymi jest bardzo dobra. Różnice wartości danych asymptot atomowych - pomiędzy tymi, które zostały wyznaczone eksperymentalnie a obliczonymi przez mnie obecnie - nie przekraczają  $4 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku pozostałych autorów można zauważyć znaczące rozbieżności dla asymptoty  $Na(3s)+Rb(6s)$ , które przekraczają  $30 \text{ cm}^{-1}$ . Dokładność wyników uzyskanych w MOLPRO wynika z odpowiedniej metody osiągnięcia zbieżności dla asymptot atomowych oraz odpowiedniego rozszerzenia bazy obliczeniowej.

**Tab. 3.1.** Porównanie nierelatywistycznych energii asymptotycznych z wynikami eksperymentalnymi i teoretycznymi innych autorów. Energie przedstawiono w  $\text{cm}^{-1}$ . Wyniki doświadczalne zostały podane przez Sansonettiego [62–64], a pozostałe to wyniki obliczeń teoretycznych.

Asymptoty	Bieżące wyniki	Sansonetti [62, 63]	Chaieb i in. [21]	Dardouri i in. [25]	Korek i in. [22]
$Na(3s)+Rb(5p)$	12739,47 [65]	12737,35	12757,16	12737,87	12737,20
$Na(3p)+Rb(5s)$	16967,03 [65]	16967,63	16967,61	16967,61	16969,10
$Na(3s)+Rb(4d)$	19357,64 [65]	19355,38	19355,17	19355,65	19355,10
$Na(3s)+Rb(6s)$	20128,52 [65]	20132,51	20097,68	20097,00	20101,30
$Na(3s)+Rb(6p)$	23764,67	23766,75	23783,27	23776,00	23799,00
$Na(3s)+Rb(5d)$	25700,42	25702,31	25702,61	-	25709,10
$Na(4s)+Rb(5s)$	25737,59	25740,00	25733,90	25741,44	-
$Na(3s)+Rb(7s)$	26307,57	26311,44	26292,93	-	-

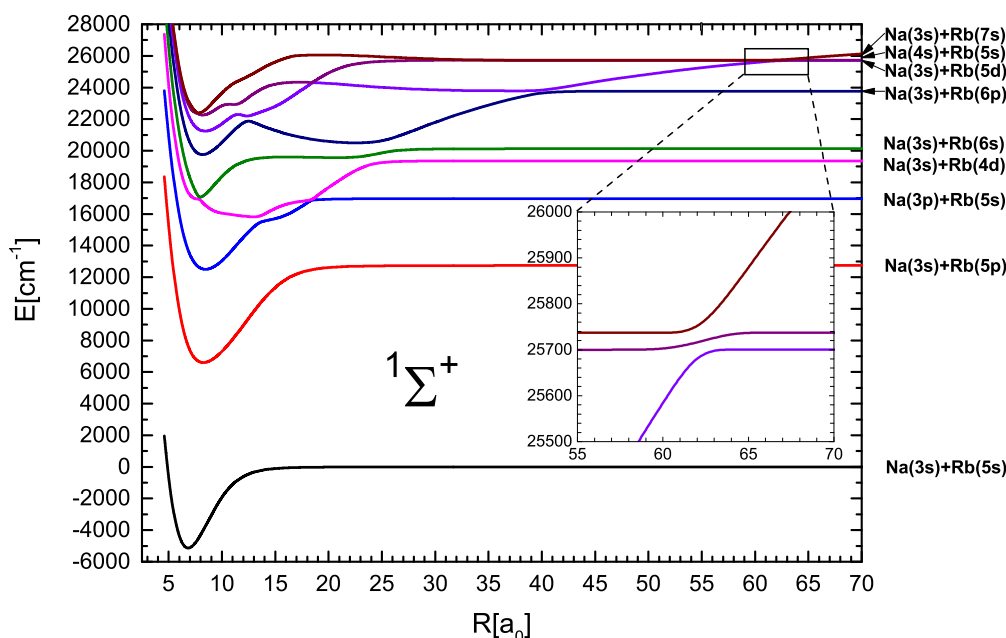
### 3.1.2. Krzywe adiabatyczne energii potencjalnej

Policzyłem dziewięć krzywych energii potencjalnej dla stanów singletowych jak i trypletowych w symetrii  $\Sigma^+$ , po pięć krzywych energii potencjalnej stanów singletowych i trypletowych w symetrii  $\Pi$  oraz po dwie krzywe energii potencjalnej stanów singletowych i trypletowych w symetrii  $\Delta$ . Wszystkie krzywe adiabatyczne zostały wyznaczone w zakresie od  $4,6 a_0$  do  $86,0 a_0$ . Charakterystyczne fragmenty krzywych dla danej multipletowości oraz przy określonej symetrii są przedstawione kolejno na rysunkach 3.1-3.6. Każde zestawienie połączone jest z ogólnym opisem kształtu krzywych.

Bardzo ważnym elementem ogólnej analizy kształtu krzywych jest pojęcie avoided-crossing (AC). Jest to miejsce, w którym przestaje działać przybliżenie Borna-Oppenheimera. W cząsteczce dwuatomowej niemożliwe jest przecinanie krzywych potencjalnych tej samej symetrii. W odróżnieniu od cząsteczki dwuatomowej dla cząsteczki wieloatomowej termy są funkcjami kilku parametrów (niezależnych odległości międzyjądrowych) - np. w przypadku molekuly trójatomowej mamy 3 stopnie swobody, przy czym dla układu  $N$  jąder mamy ich  $3N-6$ . Dla molekul wieloatomowych przecięcia są nieuniknione. Przy avoided crossing fizyczny charakter adiabatycznego stanu elektronowego zmienia się, np. z jonowego na kowalencyjny [66]. Dodatkowe charakterystyczne nieregularności występują w krzywych o tzw. charakterze egzotycznym, których nie da się opisać potencjałem Morse'a [28, 33].

Rysunek 3.1 przedstawia stany policzone przeze mnie w symetrii  $1^1\Sigma^+$ . Są one zawsze numerowane wraz ze wzrostem asymptotycznej energii. Stan podstawowy  $1^1\Sigma^+$  i pierwszy stan wzbudzony  $2^1\Sigma^+$  mają kształt regularny. Natomiast wyżej wzbudzone stany  $3-9^1\Sigma^+$  wykazują charakter egzotyczny. Krzywe  $3^1\Sigma^+$  i  $4^1\Sigma^+$  mają charakterystyczne AC dla dwóch odległości około  $18,4 a_0$  i  $13,8 a_0$ . Dla pierwszej odległości przerwa energetyczna wynosi poniżej  $30 \text{ cm}^{-1}$  a dla drugiej wynosi ona w przybliżeniu  $413 \text{ cm}^{-1}$ . Kolejne charakterystyczne nieregularności dla stanu  $4^1\Sigma^+$

występują w wyniku interakcji z wyższym stanem wzbudzonym  $5^1\Sigma^+$ . Są one w odległości około  $24,5 a_0$  i  $7,8 a_0$ . Przerwa energetyczna dla pierwszej odległości wynosi blisko  $590 \text{ cm}^{-1}$  a dla drugiej nie przekracza  $140 \text{ cm}^{-1}$  [65]. Następne AC znajduje się



**Rys. 3.1.** Dziewięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii  $\Sigma^+$ .

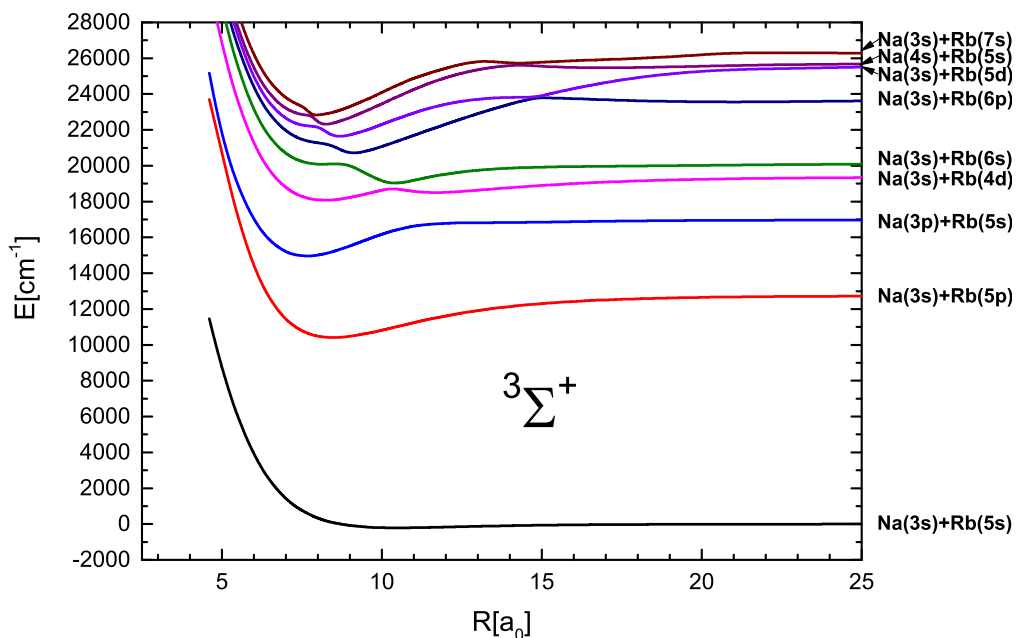
między stanami  $5^1\Sigma^+$  i  $6^1\Sigma^+$  w odległości  $25 a_0$ , a wartość przerwy energetycznej wynosi około  $762 \text{ cm}^{-1}$ . Między stanami  $6^1\Sigma^+$  i  $7^1\Sigma^+$  są również nieregularności. Charakterystyczne AC można zauważyć w oddziaływaniu między tymi stanami w okolicach  $40 a_0$  i wynosi blisko  $148 \text{ cm}^{-1}$ . Kolejne AC występuje w okolicach  $12,2 a_0$ , gdzie przerwa energetyczna wynosi w przybliżeniu  $323 \text{ cm}^{-1}$ . Następne widoczne dwa avoided crossing znajdują się między stanami  $7^1\Sigma^+$  i  $8^1\Sigma^+$ , gdzie dla odległości  $18,4 a_0$  przerwa energetyczna wynosi około  $55 \text{ cm}^{-1}$ , a dla  $11,2 a_0$  wynosi około  $645 \text{ cm}^{-1}$ . Między stanami  $8^1\Sigma^+$  a  $9^1\Sigma^+$  występują dwa avoided crossing w odległościach  $35 a_0$  i  $7,6 a_0$ . Przerwy energetyczne dla nich przyjmują wartość odpowiednio około  $1 \text{ cm}^{-1}$  i  $43 \text{ cm}^{-1}$ .

Powiększony fragment rysunku 3.1 przedstawia dwa AC dotyczące miejsca gdzie w okolicach  $62 a_0$  bardzo blisko między sobą znajdują się trzy stany  $7^1\Sigma^+$ ,  $8^1\Sigma^+$  i  $9^1\Sigma^+$ . Przerwa energetyczna pomiędzy stanami  $7^1\Sigma^+$  i  $8^1\Sigma^+$  wynosi około  $15 \text{ cm}^{-1}$  a w przypadku stanów  $8^1\Sigma^+$  i  $9^1\Sigma^+$  ma wartość około  $22 \text{ cm}^{-1}$ .

Na rysunku 3.2 przedstawiono stany policzone w symetrii  $^3\Sigma^+$ . Trzy najniższe stany mają kształt regularny. Natomiast wyżej wzbudzone stany wykazują charak-



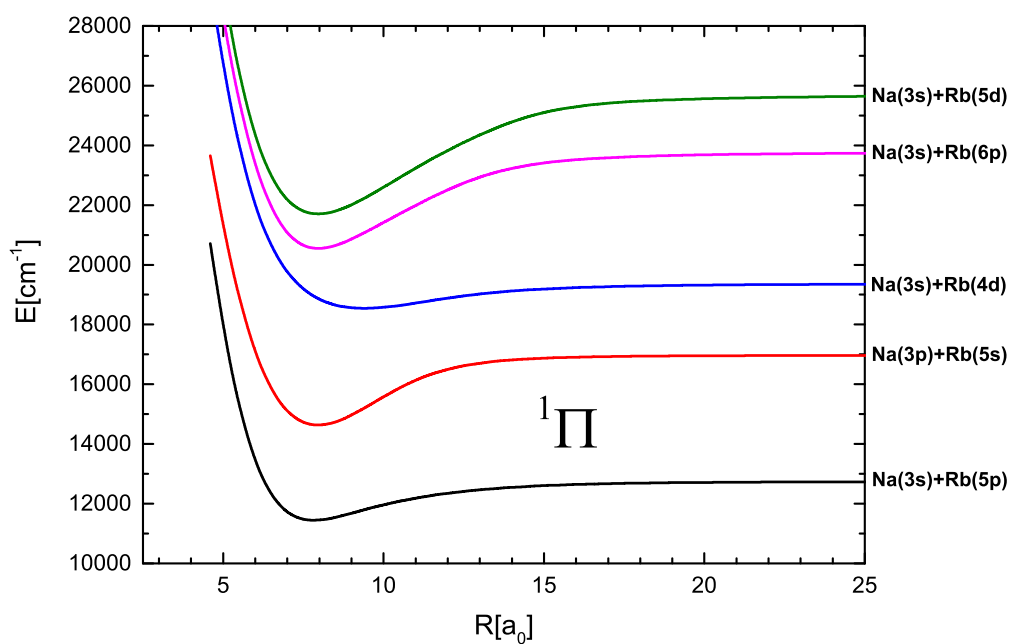
ter egzotyczny. Można zauważyć charakterystyczne AC pomiędzy  $4^3\Sigma^+$  i  $5^3\Sigma^+$  w okolicach  $10,4 a_0$  i wartość przerwy energetycznej wynosi około  $306 \text{ cm}^{-1}$ . Rozdziela ono dwie studnie potencjału stanu  $4^3\Sigma^+$ . Kolejne charakterystyczne AC występuje



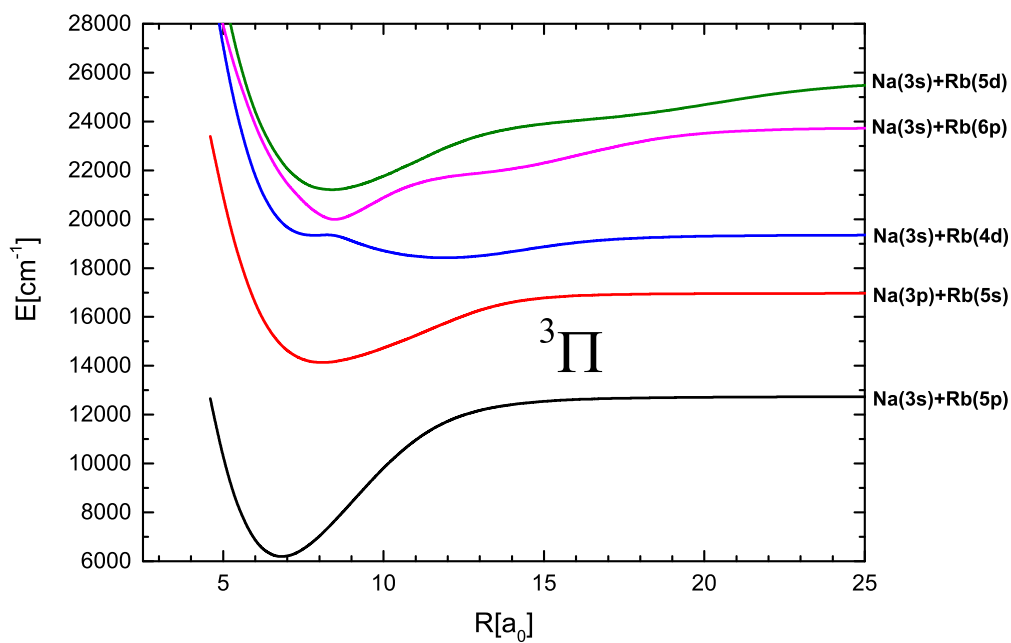
**Rys. 3.2.** Dziewięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii  $\Sigma^+$ .

przy oddziaływaniu stanu  $5^3\Sigma^+$  z  $6^3\Sigma^+$ , gdzie przerwa energetyczna dla odległości  $9 a_0$  przyjmuje wartość około  $716 \text{ cm}^{-1}$ . Dwa AC występują pomiędzy stanami  $6^3\Sigma^+$  i  $7^3\Sigma^+$ , gdzie przerwy energetyczne wynoszą  $76 \text{ cm}^{-1}$  i  $584 \text{ cm}^{-1}$  dla odległości międzyatomowych przyjmujących wartość  $14,8 a_0$  oraz  $8,4 a_0$ . Pojedyncze avoided crossing występuje pomiędzy  $7^3\Sigma^+$  i  $8^3\Sigma^+$  w odległości  $8 a_0$ , gdzie przerwa energetyczna wynosi blisko  $240 \text{ cm}^{-1}$ . Rozpatrując stan  $8^3\Sigma^+$  i  $9^3\Sigma^+$ , dwa AC można zauważyć w odległościach  $14,2 a_0$  i  $7,8 a_0$  o wartościach przerw energetycznych wynoszących odpowiednio około  $110 \text{ cm}^{-1}$  i  $19 \text{ cm}^{-1}$ .

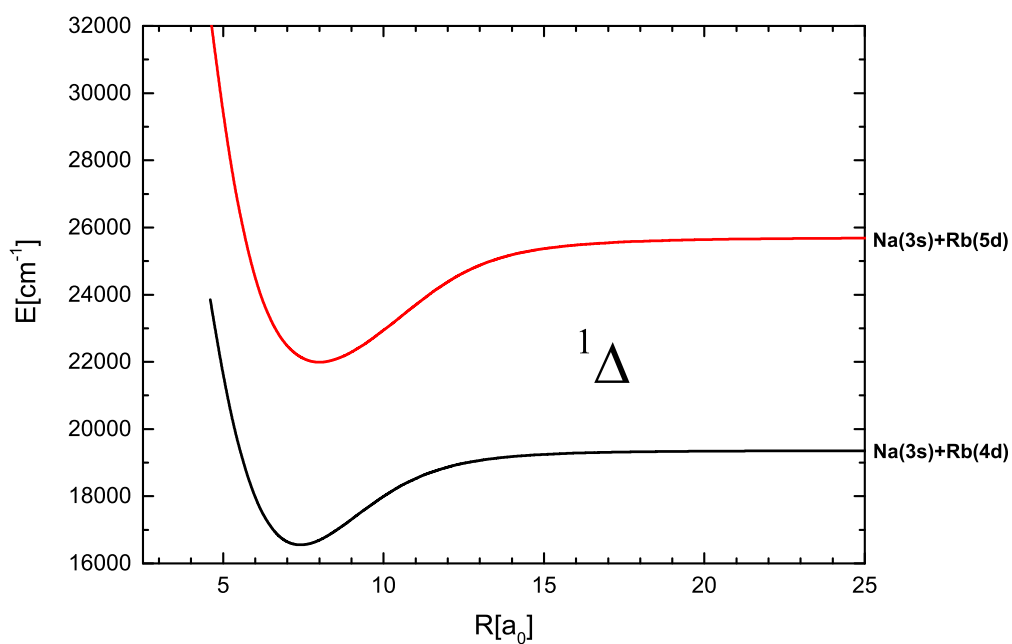
Biorąc pod uwagę symetrię  $^1\Pi$ , wszystkie pięć stanów ( $1-5^1\Pi$ ) ma kształt regularny (rysunek 3.3), natomiast w przypadku  $^3\Pi$  na rysunku 3.4 można zauważyć trzy charakterystyczne AC. Pierwsze pomiędzy  $3^3\Pi$  i  $4^3\Pi$  w odległości  $8,4 a_0$  o przerwie energetycznej wynoszącej  $634 \text{ cm}^{-1}$ . Poza tym, kolejne dwa można zauważyć w odległościach  $18,8 a_0$  i  $10,4 a_0$  dla stanów  $4^3\Pi$  i  $5^3\Pi$ , gdzie przerwy energetyczne odpowiednio wynoszą około  $1100 \text{ cm}^{-1}$  oraz  $856 \text{ cm}^{-1}$ . Natomiast w symetrii  $^{1,3}\Delta$  wszystkie krzywe są regularne (rysunki 3.5 i 3.6).



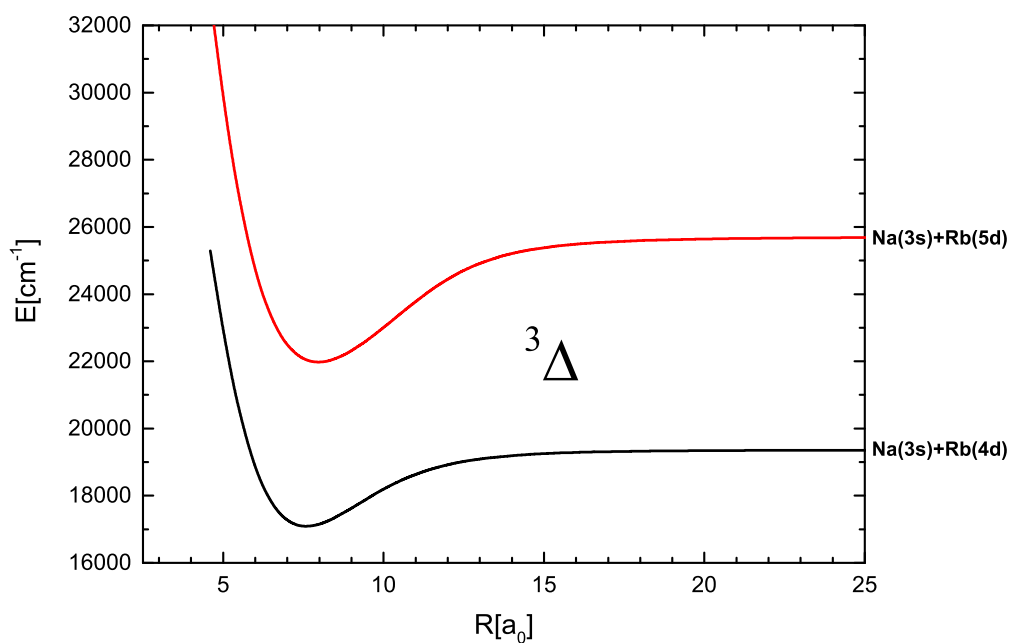
**Rys. 3.3.** Pięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii  $\Pi$ .



**Rys. 3.4.** Pięć policzonych krzywych energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii  $\Pi$ .



Rys. 3.5. Dwie policzone krzywe energii potencjalnej stanów singletowych w symetrii  $\Delta$ .



Rys. 3.6. Dwie policzone krzywe energii potencjalnej stanów trypletowych w symetrii  $\Delta$ .

### 3.1.3. Analiza i porównania

W tym podrozdziale zostaną omówione parametry spektroskopowe dla wybranych stanów, a następnie kształty krzywych energii potencjalnej w porównaniu do innych autorów dla tych stanów - kolejno dla danej konfiguracji elektronowej i multipletowości. Z tym że kształty stanów  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$  są omawiane na jednym rysunku 3.14 ze względu na swoje znaczenie w deperturbacji oraz w związku z dalszym odniesieniem do stanów ze sprzężeniem spin-orbita. Wszystkie tabele krzywych nierelatywistycznych znajdują się w załączniku A.

**Tab. 3.2.** Parametry spektroskopowe  $R_e$  [a<sub>0</sub>],  $D_e$ ,  $T_{ev}$ ,  $T_e$ ,  $\omega_e$ ,  $B_e$  i  $D_0$  [cm<sup>-1</sup>] stanów  $(1-9)^1\Sigma^+$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5s)$	6,83	5141			106,93	0,0713	5087	[65] Wiatr i in. (2015) T
		6,89	5031			106,85	0,0702	4977	[15] Docenko i in. (2004) E
		6,89				106,84	0,0701		[67] Docenko i in. (2002) E
			5031						[68] Zemke i Stwalley (2001) E
		6,89				106,86	0,0702		[12] Kasahara i in. (1996) E
		6,89	5030			106,86	0,0702		[9] Wang i in. (1991) E
		6,72	5320			106,97	0,0736	5263	[8] Takahashi i Kato (1981) E
		6,84	4844			106,67	0,0710	4792	[21] Chaieb i in. (2014) T
		6,80	4848						[25] Dardouri i in. (2012) T
		6,84							[69] Aymar i Dulieu (2005) T
		6,84					107,30		[24] Zaitsevskii i in. (2001) T
		7,01	4490			103,90	0,0676		[22] Korek i in. (2000) T
		6,86	4920			106,00			[70] Igel-Mann i in. (1986) T
$2^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5p)$	8,25	6144	12724	11736	67,54	0,0488	6110	[65] Wiatr i in. (2015) T
		8,32	6080		11689				[18] Docenko i in. E (2007)
		8,29	6042	12499	11559	66,79	0,0483	6008	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,27	6025		11454				[25] Dardouri i in. (2012) T
		8,45			11396	66,40	0,0466		[22] Korek i in. (2000) T
$3^1\Sigma^+$	$Na(3p) + Rb(5s)$	8,46	4467	18786	17641	63,49	0,0464	4436	[65] Wiatr i in. (2015) T
		8,52	4419		17568	63,60	0,0458	4387	[16] Jastrzebski i in. (2005) E
		8,51	4256	18634	17554	65,10	0,0459	4225	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,40	4255		17460				[25] Dardouri i in. (2012) T
8,61			17315	63,80	0,0449		[22] Korek i in. (2000) T		
$4^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(4d)$	12,93	3541	22447	20958	35,74	0,0202	3523	[65] Wiatr i in. (2015) T
		12,91	3511	22365	20688	26,08	0,0199	3493	[21] Chaieb i in. (2014) T
		9,68	3247		20967				[25] Dardouri i in. (2012) T
$5^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(6s)$	7,97	3093	23703	22177	155,25	0,0520	3015	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,89	2840	23406	22101	102,73	0,0534	2775	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,13	1928		23012				[25] Dardouri i in. (2012) T
drugie minimum		20,64	562		24707	8,61	0,0079	558	[65] Wiatr i in. (2015) T
20,64	534						[21] Chaieb i in. (2014) T		
$6^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(6p)$	8,18	4009	25864	24897	71,10	0,0496	3973	bieżące wyniki T
					24858	70,34	0,0490		[19] Kortyka i in. (2005) E
		8,21	3899	25638	24728	70,54	0,0493	3864	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,65	3599		24893				[25] Dardouri i in. (2012) T
		22,66	3268		25638	12,94	0,0065	3261	bieżące wyniki T
22,51	3304						[21] Chaieb i in. (2014) T		
22,51	3287						[25] Dardouri i in. (2012) T		
$7^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5d)$	8,41	4461	27373	26380	59,16	0,0469	4432	bieżące wyniki T
		8,46	4331	27170	26215	59,04	0,0464	4302	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,47	4324		26228				[25] Dardouri i in. (2012) T
		12,36	3508		27333	63,95	0,0219	3476	bieżące wyniki T
		12,37	3439						[21] Chaieb i in. (2014) T
37,40	1912		28929	4,69	0,0024	1910	bieżące wyniki T		
37,21	1894						[21] Chaieb i in. (2014) T		
$8^1\Sigma^+$	$Na(4s) + Rb(5s)$	8,20	3485	28049	27394	71,11	0,0493	3449	bieżące wyniki T
		8,22	3345	27962	27233	75,46	0,0492	3310	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,24	3329		27258				[25] Dardouri i in. (2012) T
		11,16	2822		28057	45,35	0,0281	2799	bieżące wyniki T
11,25	2728						[21] Chaieb i in. (2014) T		
$9^1\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(7s)$	7,80	3665	28265	27513	111,30	0,0542	3610	bieżące wyniki T
		7,87	3535	28067	27602	82,43	0,0536	3497	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,10	3521		27613				[25] Dardouri i in. (2012) T

Dokonując przeglądu danych zestawionych w tabeli 3.2 można zauważyć, że stan podstawowy  $1^1\Sigma^+$  jest potencjałem, który ma najwięcej opracowań ze wszystkich  $1^1\Sigma^+$  - zarówno teoretycznych (T) jak i eksperymentalnych (E). Przechodząc do jego opisu można zauważyć, że wyznaczona przeze mnie energia dysocjacji  $D_e$  [65] przyjmuje wartość  $5141\text{ cm}^{-1}$ . Porównując tę wartość z otrzymaną przez Docenko i in. [15] (najnowsze wyniki otrzymane przy użyciu spektroskopii fourierowskiej) można zauważyć, że jest o  $110\text{ cm}^{-1}$  głębsza. Do najstarszych wyników eksperymentalnych (otrzymanych przy pomocy fluorescencji indukowanej laserowo) należą wyniki zaprezentowane przez Takahashiego i Kato [8]. W tym wypadku obliczona przeze mnie energia dysocjacji jest o  $179\text{ cm}^{-1}$  mniejsza. Przeprowadzając zestawienie najnowszych wyników teoretycznych otrzymanych przez Chaieba i in. [21] oraz Dardouriego i in. [25] można zauważyć, iż w porównaniu z Docenko i in. [15] energie dysocjacji przyjmują mniejsze wartości. W pierwszym przypadku różnica wynosi  $187\text{ cm}^{-1}$  a w drugim wynosi  $183\text{ cm}^{-1}$ . Natomiast w przypadku podejścia jakie zaprezentował Korek i in. [22] energia dysocjacji w porównaniu z eksperymentem [15] jest o ponad  $500\text{ cm}^{-1}$  mniejsza.

Biorąc pod uwagę obliczoną przeze mnie [65] równowagową długość wiązania  $R_e = 6,83\text{ a}_0$  można zauważyć różnicę o  $0,06\text{ a}_0$  z wynikami Docenko i in. [15]. Co więcej, ta różnica z wynikami eksperymentalnymi [15] jest porównywalna dla wyników Chaieba i in. [21], Aymara i Dulieu [69] oraz Zaitsevskii i in. [24]. Wśród wszystkich wyników teoretycznych można zauważyć, że moja stała oscylacyjna  $\omega_e = 106,93\text{ cm}^{-1}$  ma najlepszą zgodność z wynikami eksperymentalnymi [15]. W tym wypadku różnica wynosi  $0,08\text{ cm}^{-1}$ . Różnice z eksperymentem dla wyników, które otrzymali Chaieb i in. [21], Korek i in. [22] oraz Zaitsevskii i in. [24], wynoszą odpowiednio  $0,18$ ;  $2,95$  i  $0,45\text{ cm}^{-1}$ . Docenko i in. [15] przedstawili stałą rotacyjną  $B_e$  o wartości  $0,0702\text{ cm}^{-1}$  i ma ona bardzo dobrą zgodność z wynikami zaprezentowanymi przeze mnie ( $0,0713\text{ cm}^{-1}$ ) jak i z najnowszymi wynikami teoretycznymi otrzymanymi przez Chaieba i in. [21] ( $0,0710\text{ cm}^{-1}$ ).

W przypadku stanu  $2^1\Sigma^+$ , głębokość studni potencjału  $D_e$  wyznaczona przeze mnie wynosi  $6144\text{ cm}^{-1}$  i jest o  $64\text{ cm}^{-1}$  głębsza od wyznaczonej przez Docenko i in. [18] ( $6080\text{ cm}^{-1}$ ) (kształt tego stanu dodatkowo będzie omówiony na zbiorczym rysunku 3.14). W wypadku energii otrzymanej przez Chaieba i in. [21] oraz Dardouriego i in. [25], rozbieżności od wartości eksperymentalnej [18] są mniejsze odpowiednio o  $38$  i  $55\text{ cm}^{-1}$ . Biorąc pod uwagę energię termu elektronowego  $T_e$ , otrzymałem najlepszą zgodność z najnowszym eksperymentalnym wynikiem [18] i różnica ta wynosi tylko  $47\text{ cm}^{-1}$ . Jeśli wziąć pod uwagę inne teoretyczne rezultaty, rozbieżności są większe i wynoszą odpowiednio  $130\text{ cm}^{-1}$  dla Chaieba i in. [21],  $235\text{ cm}^{-1}$  dla Dardouriego in. [25] oraz  $293\text{ cm}^{-1}$  dla Korca i in. [22].

Kolejnym rozpatrywanym stanem jest  $3^1\Sigma^+$ . Energia dysocjacji  $D_e$  otrzymana eksperymentalnie przez Jastrzębskiego i in. [16] ma wartość  $4419\text{ cm}^{-1}$ . W porów-

naniu z otrzymaną przeze mnie wartością jest ona o  $48 \text{ cm}^{-1}$  płytsza. Porównując ten sam wynik eksperymentalny z innymi wynikami teoretycznymi można zauważyć rozbieżności przekraczające  $100 \text{ cm}^{-1}$  (Chaieb i in. [21] oraz Dardouri i in. [25]). Przechodząc do energii termu elektronowego  $T_e$  wynik najbliższy eksperymentalnemu został otrzymany przez Chaieba i in. [21] - rozbieżność wynosi  $14 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku mojej krzywej rozbieżność wynosi  $73 \text{ cm}^{-1}$ . Dla innych wyników teoretycznych [22, 25] różnice przekraczają  $100 \text{ cm}^{-1}$ . Występuje bardzo dobra zgodność wyznaczonej przeze mnie stałej oscylacyjnej  $\omega_e$  ( $63,49 \text{ cm}^{-1}$ ) z wynikami otrzymanymi przez Jastrzębskiego i in. [16] ( $63,60 \text{ cm}^{-1}$ ) gdzie różnica przyjmuje wartość  $0,11 \text{ cm}^{-1}$  [65].

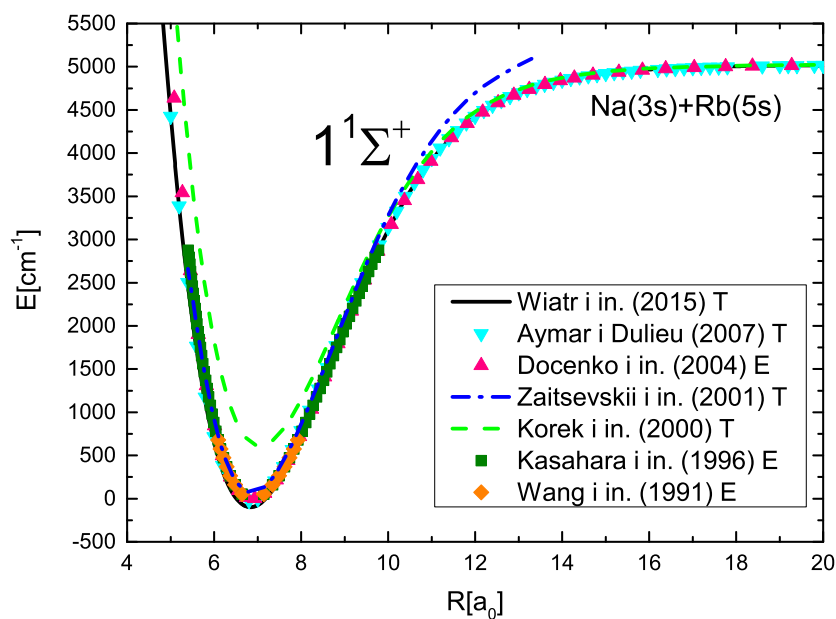
Następnym rozpatrywanym stanem jest  $6^1\Sigma^+$ . Posiada on dwie studnie potencjału. Zestawiając otrzymane przeze mnie dane z dostępnymi danymi eksperymentalnymi otrzymanymi przez Kortykę i in. [19] można porównać parametry spektroskopowe pierwszej studni. Stan ten był badany polaryzacyjną spektroskopią znakowania. Wyznaczona eksperymentalnie [19] energia termu elektronowego  $T_e$  wynosi  $24857 \text{ cm}^{-1}$ . Porównując ją z danymi przedstawionymi przeze mnie ( $24897 \text{ cm}^{-1}$ ) jest o  $40 \text{ cm}^{-1}$  mniejsza, natomiast w wypadku danych przedstawionych przez Chaieba i in. [21] ( $24728 \text{ cm}^{-1}$ ) jest mniejsza o  $129 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku Dardouriego i in. [25] wynosi  $36 \text{ cm}^{-1}$  więcej. Przechodząc do eksperymentalnej stałej oscylacyjnej  $\omega_e = 70,34 \text{ cm}^{-1}$ , rozbieżność w moim wypadku wynosi  $0,76 \text{ cm}^{-1}$  a w wypadku Chaieba i in. [21]  $0,20 \text{ cm}^{-1}$ . Natomiast rozbieżności wobec eksperymentalnej stałej rotacyjnej  $B_e=0,0490 \text{ cm}^{-1}$  [19] są bardzo małe, dla moich obliczeń wynoszą  $0,0006 \text{ cm}^{-1}$  a dla Chaieba i in. [21] odpowiednio  $0,0003 \text{ cm}^{-1}$ .

Kolejny etap stanowi zestawienie wybranych policzonych przeze mnie krzywych energii potencjalnej z krzywymi eksperymentalnymi i teoretycznymi innych autorów. Na rysunkach porównawczych wszystkie teoretyczne potencjały (dla każdej symetrii) zostały przesunięte o energię dysocjacji  $D_e=5030,85 \text{ cm}^{-1}$  otrzymaną w najnowszym eksperymencie przeprowadzonym przez Docenko i in. [15].

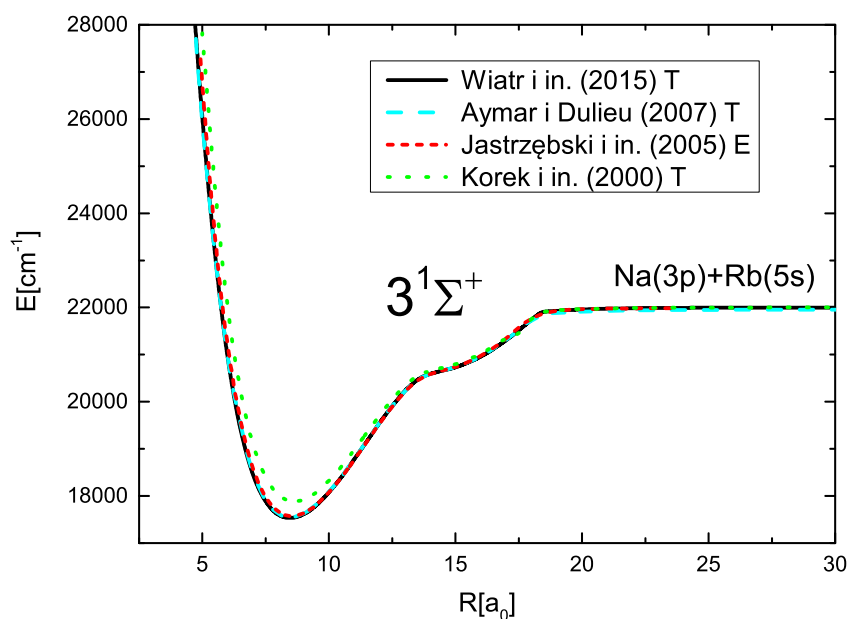
Na rysunku 3.7 przedstawiono porównanie stanu  $1^1\Sigma^+$  z innymi wynikami teoretycznymi [22, 24, 71] oraz eksperymentalnymi [9, 12, 15]. Na rysunku można zauważyć dobrą zgodność krzywej adiabatycznej otrzymanej przez Zaitsevskiego i in. [24] z krzywymi eksperymentalnymi w pobliżu minimum potencjału, natomiast w dalekozasięgowym obszarze można zauważyć dużą rozbieżność. W przypadku wyników Korca i in. [22] w regionie Francka-Condon można zauważyć spore rozbieżności, a dla dalszych odległości międzyjądrowych ich zanik. Zarówno krzywa otrzymana przeze mnie [65] jak i Aymara i Dulieu [71] ma dobrą zgodność z krzywą eksperymentalną.

Kształt krzywej  $3^1\Sigma^+$  jest egzotyczny (rys. 3.8). W tym wypadku krzywa otrzymana przeze mnie [65] oraz Aymara i Dulieu [71] ma dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi Jastrzębskiego i in. [16]. Teoretyczny potencjał Korca i in. [22]

jest płytszy w pobliżu minimum krzywej eksperymentalnej [16].



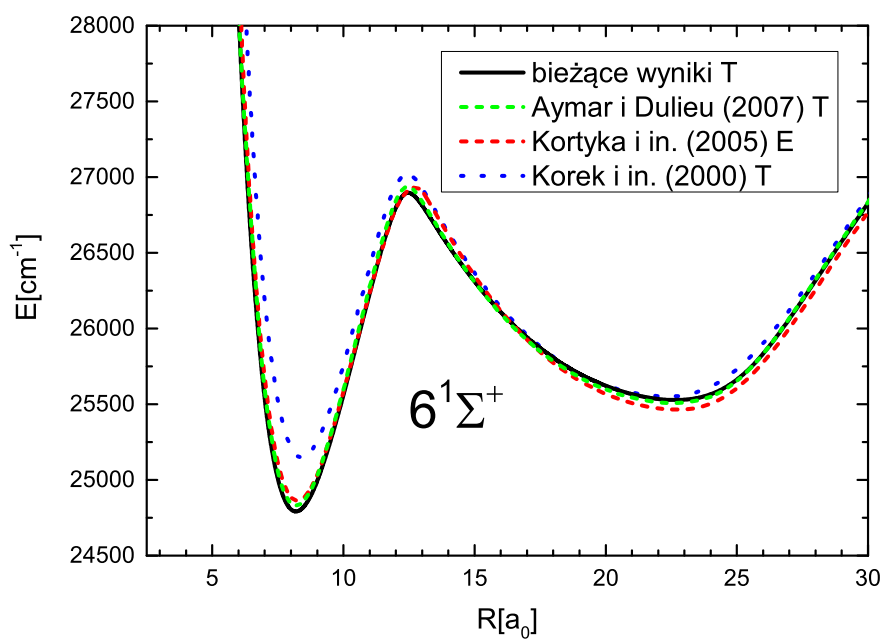
**Rys. 3.7.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu podstawowego cząsteczki NaRb [65] z eksperymentalnymi danymi: Docenko i in. [15], Kasahary i in. [12] oraz Wanga i in. [9] jak również z wynikami teoretycznymi: Aymara i Dulieu [71], Zaitsevskiego i in. [24] oraz Korka i in. [22].



**Rys. 3.8.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu  $3^1\Sigma^+$  cząsteczki NaRb [65] z eksperymentalnymi danymi: Jastrzębskiego i in. [16] jak również z wynikami teoretycznymi: Aymara i Dulieu [71] oraz Korka i in. [22].

W przypadku krzywej  $6^1\Sigma^+$ , pierwsza studnia potencjału otrzymana przez Korka i in. [22] jest płytsza od tej, którą otrzymali eksperymentalnie Kortyka i in. [19]. Porównanie moich wyników teoretycznych z wynikami Aymara i Dulieu [71] daje dobrą zgodność w przypadku pierwszego minimum. Głębokość drugiej studni potencjału eksperymentalnego [19] jest większa od bieżących wyników oraz pozostałych krzywych teoretycznych [22, 71]. Bariera doświadczalna jest przesunięta względem otrzymanych teoretycznie w prawo.





**Rys. 3.9.** Porównanie bieżącej krzywej energii potencjalnej stanu  $6^1\Sigma^+$  cząsteczki NaRb z eksperymentalnymi danymi Kortyka i in. [19] jak również z wynikami teoretycznymi Aymara i Dulieu [71] oraz Korca i in. [22].

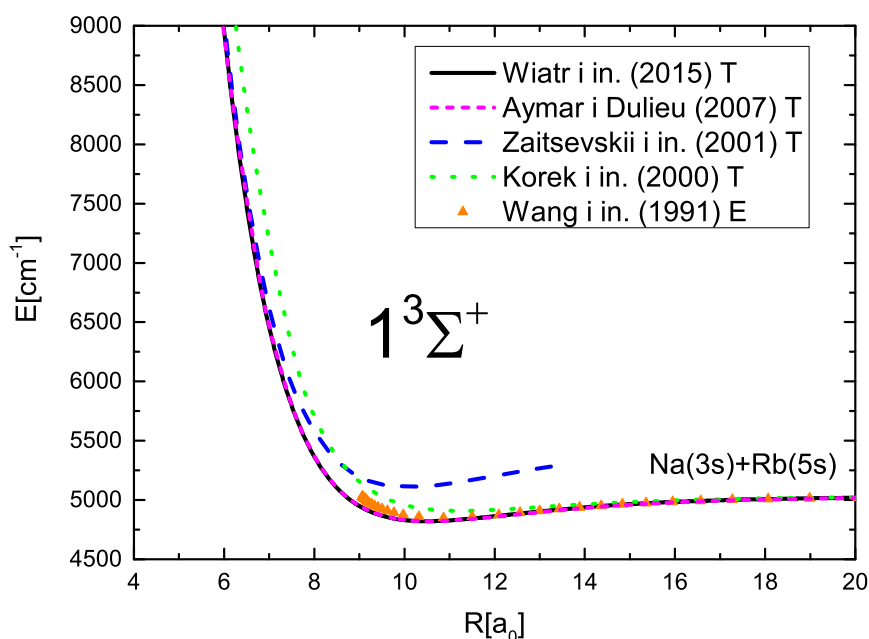
**Tab. 3.3.** Parametry spektroskopowe stanów  $(1-9)^3\Sigma^+$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stany	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5s)$	10,50	210	6815	4931	20,22	0,0298	200	[65] Wiatr i in. (2015) T
			183						[68] Zemke i Stwalley (2001) E
		10,87	182		4848	18,86	0,0282		[9] Wang i in. (1991) E
			568			48,48		544	[8] Takahashi i Kato (1981) E
		10,68	195	6621	4648	19,30	0,0291	186	[21] Chaieb i in. (2014) T
		10,70	194		4653				[25] Dardouri i in. (2012) T
				5110	21,70			[24] Zaitsevskii i in. (2001) T	
		11,22			4363	15,30	0,0264		[22] Korek i in. (2000) T
$2^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5p)$	8,47	2330	16850	15550	61,78	0,0462	2299	[65] Wiatr i in. (2015) T
		8,55	2172	16811	15429	60,43	0,0454	2142	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,67	2155		15324				[25] Dardouri i in. (2012) T
		8,67			15202	58,60	0,0443		[22] Korek i in. (2000) T
$3^3\Sigma^+$	$Na(3p) + Rb(5s)$	7,65	2010	20455	20097	79,37	0,0567	1971	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,67	1842	20372	19968	80,45	0,0565	1803	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,79	1848		19967				[25] Dardouri i in. (2012) T
		7,85			19837	76,80	0,0540		[22] Korek i in. (2000) T
$4^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(4d)$	8,22	1286	24135	23212	65,37	0,0491	1253	[65] Wiatr i in. (2015) T
		8,27	1193	23992	23006	64,02	0,0486	1161	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,12	2098		22116				[25] Dardouri i in. (2012) T
		11,68	855		23644	40,09	0,0243	835	[65] Wiatr i in. (2015) T
drugie minimum		777						[21] Chaieb i in. (2014) T	
$5^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(6s)$	10,40	1111	26025	24158	103,82	0,0306	1059	[65] Wiatr i in. (2015) T
		10,45	1035	25933	23906	81,69	0,0304	987	[21] Chaieb i in. (2014) T
		10,53	1028						[25] Dardouri i in. (2012) T
$6^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(6p)$	9,10	3059	27299	25846	110,85	0,0399	3004	bieżące wyniki T
		9,12	2958	27200	25669	105,12	0,0399	2905	[21] Chaieb i in. (2014) T
		9,17	2928		25689				[25] Dardouri i in. (2012) T
		21,01	204		28702	8,87	0,0075	199	bieżące wyniki T
drugie minimum		198						[21] Chaieb i in. (2014) T	
$7^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(5d)$	8,66	4072	27963	26769	120,29	0,0439	4012	bieżące wyniki T
		8,64	3963	27871	26583	121,73	0,0445	3905	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,68	3960		26592				[25] Dardouri i in. (2012) T
$8^3\Sigma^+$	$Na(4s) + Rb(5s)$	8,19	3445	28509	27433	157,37	0,4953	3367	bieżące wyniki T
		8,15	3303	29122	27275	138,81	0,0500	3228	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,33	3348		27239				[25] Dardouri i in. (2012) T
		16,87	269						bieżące wyniki T
drugie minimum		265						[21] Chaieb i in. (2014) T	
$9^3\Sigma^+$	$Na(3s) + Rb(7s)$	7,88	3523	29131	27925	183,34	0,05207	3431	bieżące wyniki T
		8,05	2890	29847	28246	87,21	0,06354	2850	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,94	2881		28253				[25] Dardouri i in. (2012) T
		14,25	589		30860	49,01	0,01631	564	bieżące wyniki T
drugie minimum		568						[21] Chaieb i in. (2014) T	

W tabeli 3.3 przedstawiono parametry spektroskopowe stanów  $(1-9)^3\Sigma^+$ . Dokonując porównania wyników dla stanu  $1^3\Sigma^+$  dla równowagowej długości wiązania  $R_e$  i energii dysocjacji  $D_e$ , można zauważyć, że dla krzywej obliczonej przeze mnie wynoszą one odpowiednio 10,50  $a_0$  oraz 210  $\text{cm}^{-1}$ . Wartości eksperymentalne otrzymane przez Wanga i in. [9] odpowiednio wynoszą 10,87  $a_0$  oraz 182  $\text{cm}^{-1}$ . Wartości różnic wynoszą odpowiednio 0,37  $a_0$  i 28  $\text{cm}^{-1}$ . W przypadku teoretycznych rezultatów otrzymanych przez Chaieba i in. [21] oraz Dardouriego i in. [25] występuje lepsza zgodność ze stałymi  $R_e$  i  $D_e$  otrzymanymi eksperymentalnie. Różnice z danymi Chaieba i in. [21] wynoszą odpowiednio 0,19  $a_0$  i 13  $\text{cm}^{-1}$  a z danymi Dardouriego i in. [25] wynoszą odpowiednio 0,17  $a_0$  i 12  $\text{cm}^{-1}$  [65].

Patrząc na rysunek 3.10 można zauważyć, że dwie teoretyczne krzywe energii potencjalnej zgadzają się bardzo dobrze z wynikami eksperymentalnymi otrzymanymi przez Wanga i in. [9]. Należą do nich krzywa otrzymana przeze mnie [65] oraz Aymara i Dulieu [71]. Zgodność ta jest widoczna w szczególności dla większych odległości międzyjądrowych. Krzywa Korke i in. [22] ma dużą zgodność przy zbliżaniu

się do asymptoty, natomiast krzywa Zaitsevskiego i in. [24] w części odpychającej.



**Rys. 3.10.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu  $1^3\Sigma^+$  cząsteczki NaRb [65] z eksperymentalnymi danymi Wang i in. [9] jak również z wynikami teoretycznymi Aymara i Dulieu [71], Zaitsevskiego i in. [24] oraz Korka i in. [22].

**Tab. 3.4.** Parametry spektroskopowe stanów  $(1-5)^1\Pi$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^1\Pi$	$Na(3s) + Rb(5p)$	7,81	1297	16966	16583	61,91	0,0542	1267	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,91	1319			60,38	0,0528		[20] Pashov i in. (2006) E
		7,89	1319		16528	61,17	0,0534		[9] Wang i in. (1991) E
		7,73					0,0557	1492	[8] Takahashi i Kato (1981) E
		7,96	1112	16987	16489	54,58	0,0524	1084	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,71			16420	58,80			[24] Zaitsevskii i in. (2001) T
		8,37			16321	51,60	0,0495		[22] Korek i in. (2000) T
$2^1\Pi$	$Na(3p) + Rb(5s)$	7,95	2336	20401	19772	73,39	0,0525	2299	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,99	2311		19693	73,10	0,0521	2275	[17] Docenko i in. (2005) E
		7,97			19692	73,26	0,0524		[24] Zaitsevskii i in. (2001) E
		7,82				73,50	0,0544	2541	[8] Takahashi i Kato (1981) E
		7,99	2104	20391	19706	74,52	0,0520	2068	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,86			19475	70,30			[24] Zaitsevskii i in. (2001) T
		8,14			19529	71,90	0,0503		[22] Korek i in. (2000) T
$3^1\Pi$	$Na(3s) + Rb(4d)$	9,38	814	25113	23685	37,41	0,0376	795	[65] Wiatr i in. (2015) T
		9,62	647	25208	23551	36,65	0,0359	630	[21] Chaieb i in. (2014) T
		9,76			23284	35,90	0,0349		[22] Korek i in. (2000) T
$4^1\Pi$	$Na(3s) + Rb(6p)$	7,96	3219	26402	25686	74,08	0,0523	3182	bieżące wyniki
		8,01	3183		25640	73,72	0,0518		[72] Bang i in. (2009) E
		7,99	3075	26394	25552	69,66	0,0520	3039	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,16			25422	69,20	0,0499		[22] Korek i in. (2000) T
$5^1\Pi$	$Na(3s) + Rb(5d)$	7,96	4001	27485	26840	71,94	0,0524	3965	bieżące wyniki
		8,01	3831	26924	26715	68,18	0,0518	3797	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,17			26576	68,50	0,0498		[22] Korek i in. (2000) T

W tabeli 3.4 przedstawiono parametry spektroskopowe stanów  $(1-5)^1\Pi$ . Biorąc pod uwagę stan  $1^1\Pi$  wyznaczona przez mnie energia dysocjacji  $D_e$  ( $1297 \text{ cm}^{-1}$ ) zga-

dza się bardzo dobrze z dwoma eksperymentalnymi wynikami ( $1319 \text{ cm}^{-1}$ ) [9, 20]. W moim wypadku różnica wynosi  $22 \text{ cm}^{-1}$ , natomiast dla najnowszych wyników teoretycznych [21] jest dużo większa i wynosi  $207 \text{ cm}^{-1}$ . Przechodząc do energii termu elektronowego  $T_e$ , porównanie wyników z eksperymentalnymi [9] i najnowszymi teoretycznymi [21] jest dosyć rozsądne. Różnice pomiędzy wynikami otrzymanymi przeze mnie oraz tymi otrzymanymi przez Chaieba i in. [21] do danych eksperymentalnych nie przekraczają  $60 \text{ cm}^{-1}$  w moim wypadku a  $40 \text{ cm}^{-1}$  w przypadku Chaieba. Dla starszej teoretycznej publikacji [22] różnice przekraczają  $100 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku policzonej przeze mnie stałej wibracyjnej  $\omega_e$  osiągnięta została bardzo dobra zgodność z wynikami eksperymentalnymi. Różnice wynoszą  $1,53 \text{ cm}^{-1}$  dla wyników Pashova i in. [20] oraz tylko  $0,74 \text{ cm}^{-1}$  dla Wanga i in. [9]. Różnica dla najnowszych teoretycznych wyników [21] i najnowszej wartości eksperymentalnej [20] przekracza  $5 \text{ cm}^{-1}$ .

Kolejnym rozpatrywanym stanem jest  $2^1\Pi$ . Dla wyznaczonej energii dysocjacji  $D_e$  [65] można zauważyć bliską zgodność z najnowszym eksperymentalnym wynikiem dostarczonym przez Docenko i in. [17]. Rozbieżność z wynikiem eksperymentalnym wynosi tylko  $25 \text{ cm}^{-1}$ , podczas gdy w przypadku Chaieba i in. [21] wynosi  $207 \text{ cm}^{-1}$ . Otrzymany rezultat  $R_e = 7,95 a_0$  jest w dobrej zgodności z dwoma eksperymentalnymi wynikami:  $7,99 a_0$  [17] i  $7,97 a_0$  [24]. Jakkolwiek Chaieb i in. [21] zaprezentowali taką samą wartość jak Docenko. Wyznaczona stała oscylacyjna  $\omega_e = 73,39 \text{ cm}^{-1}$  jest w bardzo dobrej zgodności ze wszystkimi danymi otrzymanymi z eksperymentu, zaprezentowanymi w tabeli 3.4. Różnice nie przekraczają  $0,3 \text{ cm}^{-1}$ . W wypadku innych prac teoretycznych [21, 22] są większe rozbieżności z danymi eksperymentalnymi [8, 17, 24].

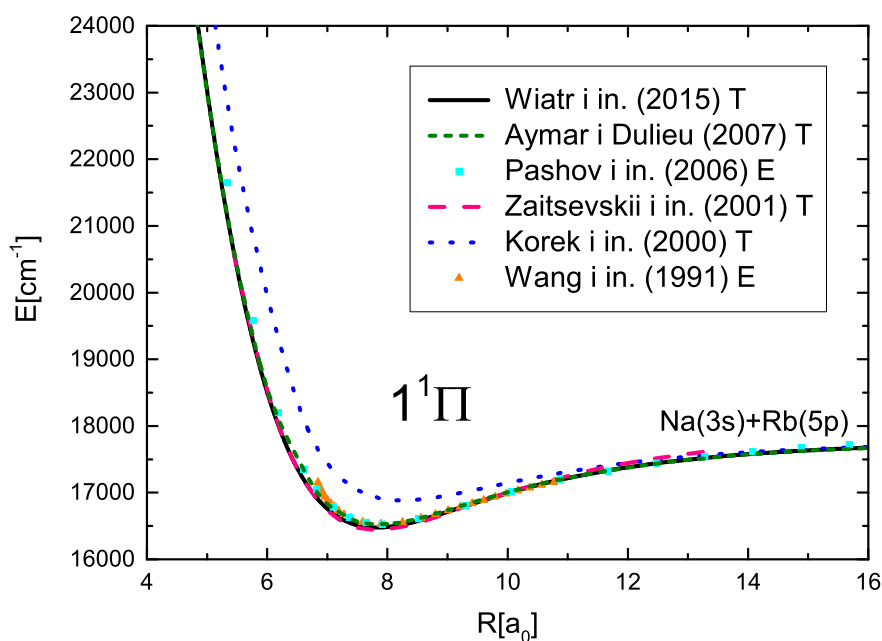
Biorąc pod uwagę stan  $4^1\Pi$  można zauważyć, że równowagowa długość wiązania  $R_e = 7,96 a_0$  jest o  $0,05 a_0$  mniejsza od wyniku eksperymentalnego Banga i in. [72]. W przypadku wyników teoretycznych Chaieba i in. [21] różnica z wynikami eksperymentalnymi wynosi  $0,02 a_0$ , a w wypadku Korca i in. [22]  $0,15 a_0$ . Przechodząc do  $D_e$ , w relacji do eksperymentalnej energii dysocjacji [72] dla tego stanu, można zauważyć, że dla moich wyników jest ona o  $36 \text{ cm}^{-1}$  głębsza a w przypadku Chaieba i in. [21] jest o  $108 \text{ cm}^{-1}$  płytsza. Wynik Banga i in. [72] dla energii termu elektronowego  $T_e$  wynosi  $25640 \text{ cm}^{-1}$ . W moim przypadku wynik jest o  $46 \text{ cm}^{-1}$  większy, a w przypadku Chaieba i in. [21] jest o  $88 \text{ cm}^{-1}$  mniejszy a dla Korca i in. [22] różnica przekracza  $200 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku stałej oscylacyjnej  $\omega_e$  otrzymany przeze mnie wynik teoretyczny stanowi najlepsze dopasowanie - rozbieżność wynosi tylko  $0,36 \text{ cm}^{-1}$ . W przypadku dwóch pozostałych prac teoretycznych [21, 22] przekracza  $4 \text{ cm}^{-1}$ . Zestawiając stałą rotacyjną  $B_e$  z moimi wynikami różnica wynosi  $0,0005 \text{ cm}^{-1}$ , w przypadku Chaieba i in. [21]  $0,0002 \text{ cm}^{-1}$  a dla Korca i in. [22]  $0,0019 \text{ cm}^{-1}$ .

Porównując policzone adiabatyczne krzywe energii  $1^1\Pi$  potencjalnej [24, 65, 71]

z potencjałami Pashova i in. [20] oraz Wanga i in. [9] można zauważyć bardzo dobrą zbieżność (rysunek 3.11). Jedyne widoczne odchylenie dotyczy adiabatycznego potencjału Korcka i in. [22].

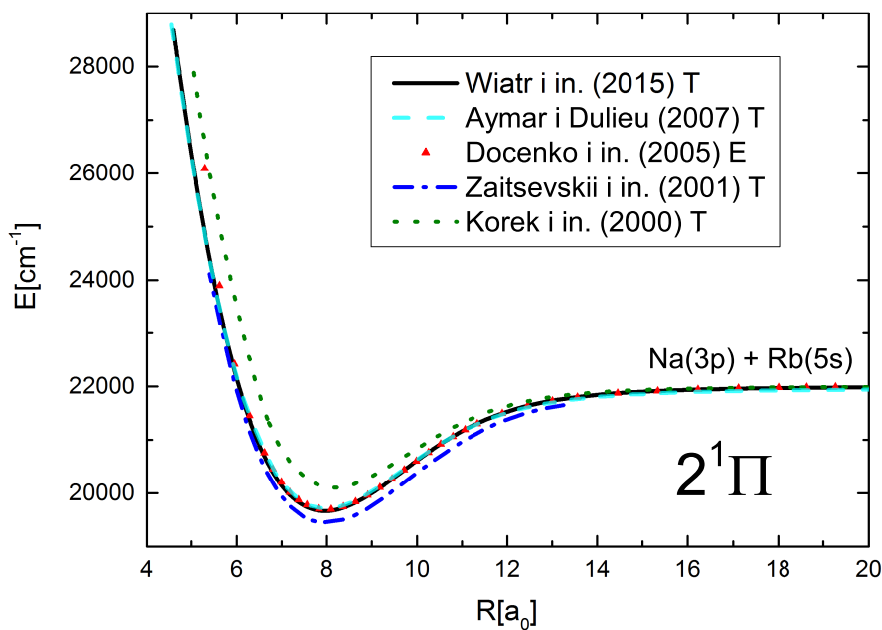
Porównując policzoną przeze mnie krzywą teoretyczną  $2^1\Pi$  [65] z innymi teoretycznymi [22, 24, 71] i dostępnym eksperymentalnym potencjałem [17] można zauważyć, że kształt krzywej policzonej przeze mnie [65] jak i Aymara i Dulieu [71] ma prawie całkowitą zgodność z eksperymentem za wyjątkiem części odpychającej (rysunek 3.12). Krzywa policzona przez Zaitsevskiiego i in. [24] znajduje się poniżej policzonej przeze mnie [65] a krzywa Korcka [22] osiąga zgodność wraz ze zbliżaniem się do asymptoty atomowej.

Porównując  $4^1\Pi$  na rysunku 3.13 z krzywą Banga i in. [72], można zauważyć dobrą zbieżność z moimi wynikami [65]. Rezultat Korcka i in. [22] znajduje się powyżej krzywej eksperymentalnej [72].

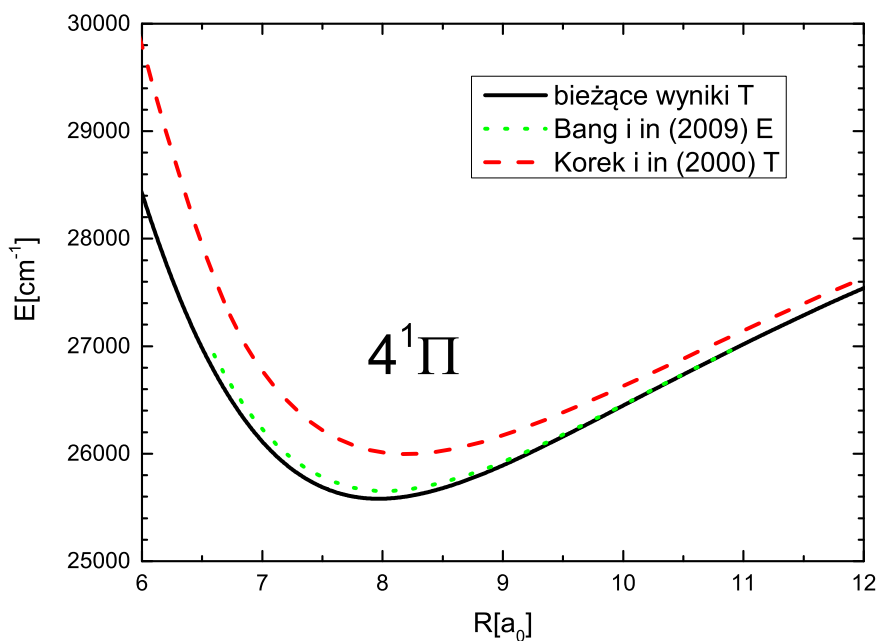


**Rys. 3.11.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu podstawowego cząsteczki NaRb [65] z eksperymentalnymi danymi Pashova i in. [20] oraz Wanga i in. [9] jak również z wynikami teoretycznymi Aymara i Dulieu [71], Zaitsevskiiego i in. [24] oraz Korcka i in. [22].





**Rys. 3.12.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu  $2^1\Pi$  [65] cząsteczki NaRb z eksperymentalnymi danymi Docenko i in. [17] jak również z wynikami teoretycznymi Aymara i Dulieu [71], Zaitsevskiego i in. [24] oraz Korcka i in. [22].



**Rys. 3.13.** Porównanie bieżącej krzywej energii potencjalnej stanu  $4^1\Pi$  cząsteczki NaRb z eksperymentalnymi danymi Banga i in. [72] i wynikami teoretycznymi Korcka i in. [22].

**Tab. 3.5.** Parametry spektroskopowe stanów  $(1-5)^3\Pi$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^3\Pi$	$Na(3s) + Rb(5p)$	6,82	6559	11267	11321	104,43	0,0715	6507	[65] Wiatr i in. (2015) T
		6,87	6378		11361				[18] Docenko i in. (2007) E
		6,84	6307	11294	11294	102,88	0,0710	6256	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,00			11303	103,50	0,0679		[22] Korek i in. (2000) T
$2^3\Pi$	$Na(3p) + Rb(5s)$	8,08	2834	19909	19273	61,89	0,0507	2803	[65] Wiatr i in. (2015) T
		8,13	2705	19796	19104	58,58	0,0503	2675	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,33			18946	58,50	0,0479		[22] Korek i in. (2000) T
$3^3\Pi$	$Na(3s) + Rb(4d)$	11,95	935	24947	23564	30,11	0,0233	920	[65] Wiatr i in. (2015) T
		12,00	907	24924	23292	33,17	0,0231	891	[21] Chaieb i in. (2014) T
$4^3\Pi$	$Na(3s) + Rb(6p)$	8,48	3785	26856	25120	110,88	0,0462	3730	bieżące wyniki
		8,45	3688	26743	24939	101,30	0,0465	2631	[21] Chaieb i in. (2014) T
$5^3\Pi$	$Na(3s) + Rb(5d)$	8,35	4494	27432	26347	64,71	0,0475	4462	bieżące wyniki
		8,40	4355	27331	26191	66,71	0,0471	4324	[21] Chaieb i in. (2014) T

W tabeli 3.5 przedstawiono parametry spektroskopowe stanów  $(1-5)^3\Pi$ . W wypadku stanu  $1^3\Pi$  możemy zauważyć pewne rozbieżności. Policzona przeze mnie energia dysocjacji wynosi  $6559\text{ cm}^{-1}$  i jest większa o  $181\text{ cm}^{-1}$  od wyniku Docenko i in. [18] ( $6378\text{ cm}^{-1}$ ), podczas gdy w przypadku Chaieba i in. [21] otrzymana energia w zestawieniu z eksperymentem jest mniejsza o  $71\text{ cm}^{-1}$ . Gdy weźmie się pod uwagę policzoną przeze mnie energię termu elektronowego  $T_e$  z innymi teoretycznymi rezultatami [21, 22], po raz kolejny zauważamy najlepszą zgodność z wynikami eksperymentalnymi [72]. Różnica w moim przypadku wynosi  $40\text{ cm}^{-1}$ , podczas gdy dla innych rezultatów przekracza  $55\text{ cm}^{-1}$ .

W tabelach 3.6, 3.7 przedstawiono parametry spektroskopowe stanów  $(1-2)^1\Delta$  i  $(1-2)^3\Delta$  w zestawieniu z innymi wynikami teoretycznymi [21, 22].

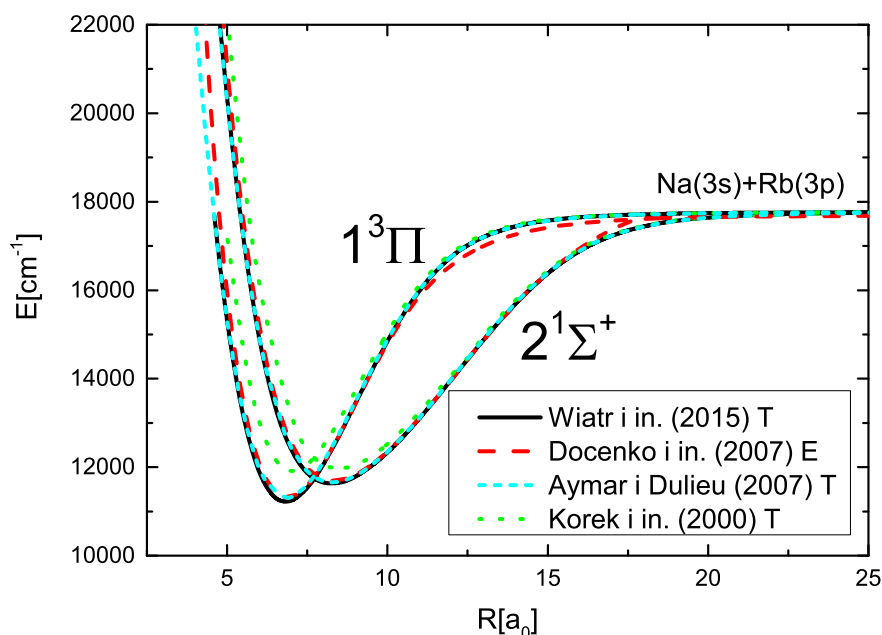
**Tab. 3.6.** Parametry spektroskopowe stanów  $(1-2)^1\Delta$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^1\Delta$	$Na(3s) + Rb(4d)$	7,40	2812	21827	21687	80,63	0,0605	2771	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,48	2605	21775	21594	80,15	0,0594	2566	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,66			21575	76,60	0,0568		[22] Korek i in. (2000) T
$2^1\Delta$	$Na(3s) + Rb(5d)$	8,00	3715	27760	27126	71,59	0,0519	3680	bieżące wyniki
		8,06	3593	27587	26953	69,76	0,0511	3558	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,17			26962	66,70	0,0499		[22] Korek i in. (2000) T

**Tab. 3.7.** Parametry spektroskopowe stanów  $(1-2)^3\Delta$  cząsteczki NaRb. Litera T oznacza rezultaty teoretyczne a przez literę E oznaczono wyniki eksperymentalne.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
$1^3\Delta$	$Na(3s) + Rb(4d)$	7,59	2274	22492	22224	76,29	0,0577	2236	[65] Wiatr i in. (2015) T
		7,67	2084	22478	22115	76,17	0,0565	2048	[21] Chaieb i in. (2014) T
		7,86			22077	70,80	0,0539		[22] Korek i in. (2000) T
$2^3\Delta$	$Na(3s) + Rb(5d)$	7,97	3727	27804	27115	74,53	0,0523	3689	bieżące wyniki
		8,02	3599	27701	26947	74,48	0,0517	3563	[21] Chaieb i in. (2014) T
		8,17			26942	71,10	0,0499		[22] Korek i in. (2000) T

Kolejny etap stanowi przedstawienie dwóch stanów zbiegających do asymptoty  $Na(3s) + Rb(3p)$  czyli  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$ .



**Rys. 3.14.** Porównanie krzywych energii potencjalnej stanu  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$  cząsteczki NaRb [65] z eksperymentalnymi danymi Docenko i in. [18] jak również z wynikami teoretycznymi Aymara i Dulieu [71] oraz Korka i in. [22].

Na rysunku 3.14 można zauważyć porównanie policzonych przeze mnie stanów energetycznych  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$  [65] z otrzymanymi eksperymentalnie Docenko i in. [18] jak również innych teoretycznych rezultatów otrzymanych przez Aymara i Dulieu [71] oraz Korka i in. [22]. Jest bardzo wyraźne, że kształt potencjałów otrzymanych przeze mnie [65] oraz Aymara i Dulieu [71] zgadza się dobrze z krzywymi otrzymanymi eksperymentalnie [18], podczas gdy teoretyczne krzywe energii potencjalnej otrzymane przez Korka i in. [22] są płytsze. Tylko małe różnice są widoczne dla większych międzyjądrowych odległości odpowiednio o pomiędzy 13 a 18  $a_0$  dla  $1^3\Pi$  i  $2^1\Sigma^+$ . Przypuszczam, że te małe różnice są spowodowane problemami z dopasowaniem części eksperymentalnej i analitycznej opisanej przez Docenko i in. [18].

### 3.2. Potencjały relatywistyczne cząsteczki

Policzyłem relatywistyczne krzywe energii potencjalnej (z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita). Odpowiadają one przypadkowi Hunda (c). Modelowym hamiltonianem na poziomie metod obliczeniowych jest  $\hat{H}_{val}$  (2.41).



### 3.2.1. Asymptoty

Obliczone potencjały z rozszczepieniem spin-orbita zbiegają do następujących asymptot atomowych:  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$ ,  $Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$ ,  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$ ,  $Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$ . W tabeli 3.8 przedstawiam wyniki asymptotyczne dla stanów wzbudzonych i porównuje z wynikami innych autorów. Rezultaty teoretyczne, które wyznaczali Korek i Fawwaz [23] są otrzymane przy pomocy pakietu programów CIPSI. Ze względu na to, że w podejściu relatywistycznym została wykorzystana taka sama baza i metody obliczeniowe jak przed uwzględnieniem rozszczepienia, zgodność wyników otrzymanych przeze mnie w tej pracy z danymi eksperymentalnymi jest nadal bardzo dobra. Wartość bezwzględna różnicy pomiędzy wynikami doświadczalnymi przedstawionymi przez Sansonettiego [62–64] a tymi wyznaczonymi przeze mnie nie przekracza  $4 \text{ cm}^{-1}$ . Jak można zauważyć w przypadku danych teoretycznych, które otrzymali Korek i Fawwaz [23] dla siedmiu asymptot są znaczące rozbieżności przekraczające  $10 \text{ cm}^{-1}$  (patrz tabela 3.8).

**Tab. 3.8.** Porównanie energii asymptotycznych z rozszczepieniem spin-orbita z innymi wynikami eksperymentalnymi i teoretycznymi. Energie przedstawiono w  $\text{cm}^{-1}$ . Wyniki doświadczalne zostały przedstawione przez Sansonettiego [62–64], a teoretyczne rezultaty dostarczyli Korek i Fawwaz [23]. Ostatnie dwie kolumny oznaczają różnice pomiędzy danymi eksperymentalnymi a wynikami teoretycznymi, którymi w pierwszym wypadku są bieżące wyniki, a w drugim te obliczone przez Korka i Fawwaza [23].

Asymptoty	Bieżące wyniki	Sansonetti [62, 63]	Korek i Fawwaz [23]	$\Delta_{S-B}$	$\Delta_{S-K}$
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$	12579,55	12578,95	12578,32	-0,60	0,63
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$	12818,89	12816,55	12815,99	-2,34	0,56
$Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	16953,82	16956,17	16967,48	2,35	-11,31
$Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	16973,63	16973,37	17004,41	-0,26	-31,04
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$	19357,39	19355,20	19354,87	-2,19	0,33
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$	19358,05	19355,65	19354,87	-2,40	0,78
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6s^2S_{1/2})$	20128,54	20132,51	20101,35	3,97	31,16
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$	23713,37	23715,08	23748,14	1,71	-33,06
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$	23790,91	23792,59	23825,73	1,68	-33,14
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$	25698,73	25700,54	25707,75	1,81	-7,21
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$	25701,57	25703,50	25710,72	1,93	-7,22
$Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	25737,57	25740,00	25760,09	2,43	-20,09
$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$	26307,64	26311,44	26300,98	3,80	10,46

### 3.2.2. Krzywe adiabatyczne energii potencjalnej

Policzyłem czternaście krzywych energii potencjalnej stanów  $\Omega = 0^+$  oraz  $0^-$ , dwadzieścia jeden krzywych energii potencjalnej dla  $\Omega = 1$ , dziewięć krzywych energii potencjalnej dla  $\Omega = 2$  i dwie dla  $\Omega = 3$ . Charakterystyczne fragmenty krzywych są przedstawione na końcu wywodu kolejno na rysunkach 3.15-3.19. Tutaj także można przeprowadzić podobną analizę dotyczącą charakterystycznych avoided crossings.

Rysunek 3.15 przedstawia krzywe z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita w symetrii  $0^+$ . Krzywa stanu podstawowego  $(1)0^+$  ma kształt regularny. Wraz ze wzrastającą energią najniższe charakterystyczne avoided crossing można zauważyć pomiędzy stanami  $(2)0^+$  i  $(3)0^+$  zbiegającymi odpowiednio do asymptot  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$ . Wartość przerwy energetycznej dla odległości  $R = 7,8 a_0$  wynosi  $143 \text{ cm}^{-1}$ . Przyjrzyjmy się charakterystycznym AC dla stanów  $(4)0^+$ ,  $(5)0^+$  i  $(6)0^+$  zbiegających kolejno do asymptot  $Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$ . W odległości  $18,4 a_0$  różnica energii pomiędzy stanami  $(5)0^+$  i  $(4)0^+$  wynosi około  $29 \text{ cm}^{-1}$ , a w przypadku stanów  $(6)0^+$  i  $(5)0^+$  przyjmuje wartość około  $47 \text{ cm}^{-1}$ . Drugie avoided crossing pomiędzy stanami  $(4)0^+$  i  $(5)0^+$  występuje w odległości  $13,8 a_0$  i wartość przerwy wynosi w przybliżeniu  $413 \text{ cm}^{-1}$ . Niedaleko od niego znajduje się avoided crossing w odległości  $R = 12,2 a_0$  pomiędzy stanami  $(5)0^+$  i  $(6)0^+$ . Wartość różnicy energetycznej w tym punkcie wynosi około  $74 \text{ cm}^{-1}$ . Wraz ze wzrostem energii możemy zauważyć AC pomiędzy stanami  $(6)0^+$  i  $(7)0^+$ , gdzie dla odległości  $7,8 a_0$  przerwa energetyczna wynosi  $137 \text{ cm}^{-1}$ . Stan  $(7)0^+$  zbiega do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$  a  $(8)0^+$  do  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6s^2S_{1/2})$ . Pomiedzy tymi stanami występuje AC w odległości  $10,4 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi około  $44 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(8)0^+$  i  $(9)0^+$  mają charakterystyczne avoided crossing dla dwóch odległości  $R = 25 a_0$  i  $R = 8,2 a_0$ . W tym przypadku przerwy energetyczne wynoszą odpowiednio  $762 \text{ cm}^{-1}$  i  $412 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(9)0^+$  i  $(10)0^+$  zbiegają odpowiednio do asymptot  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$ . W odległości  $40 a_0$  pomiędzy wymienionymi stanami występuje AC o przerwie energetycznej wynoszącej w przybliżeniu  $72 \text{ cm}^{-1}$ . Kolejne dwa AC występują w odległościach  $12,8 a_0$  i  $11,8 a_0$  z odstępami energetycznymi o wartościach  $50 \text{ cm}^{-1}$  i  $22 \text{ cm}^{-1}$ . Dla odległości  $38 a_0$  znajduje się AC pomiędzy stanami  $(10)0^+$  i  $(11)0^+$ . Wartość przerwy energetycznej wynosi w tym miejscu  $88 \text{ cm}^{-1}$ . Kolejne AC pomiędzy tymi stanami znajduje się w odległości  $12,4 a_0$  a odstęp energetyczny wynosi  $318 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(11)0^+$  i  $(12)0^+$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$ . Charakterystyczne AC występuje pomiędzy nimi w odległości  $18,4 a_0$ , gdzie wartość przerwy energetycznej wynosi około  $50 \text{ cm}^{-1}$ . Blisko niego w okolicach  $18,8 a_0$  znajduje się AC pomiędzy stanami  $(12)0^+$  i  $(13)0^+$  gdzie odstęp energetyczny wynosi  $15 \text{ cm}^{-1}$ .

Stany  $(13)0^+$  i  $(14)0^+$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$ . AC pomiędzy tymi stanami występuje w odległości  $9,2 a_0$  a odstęp energetyczny wynosi  $25 \text{ cm}^{-1}$ .

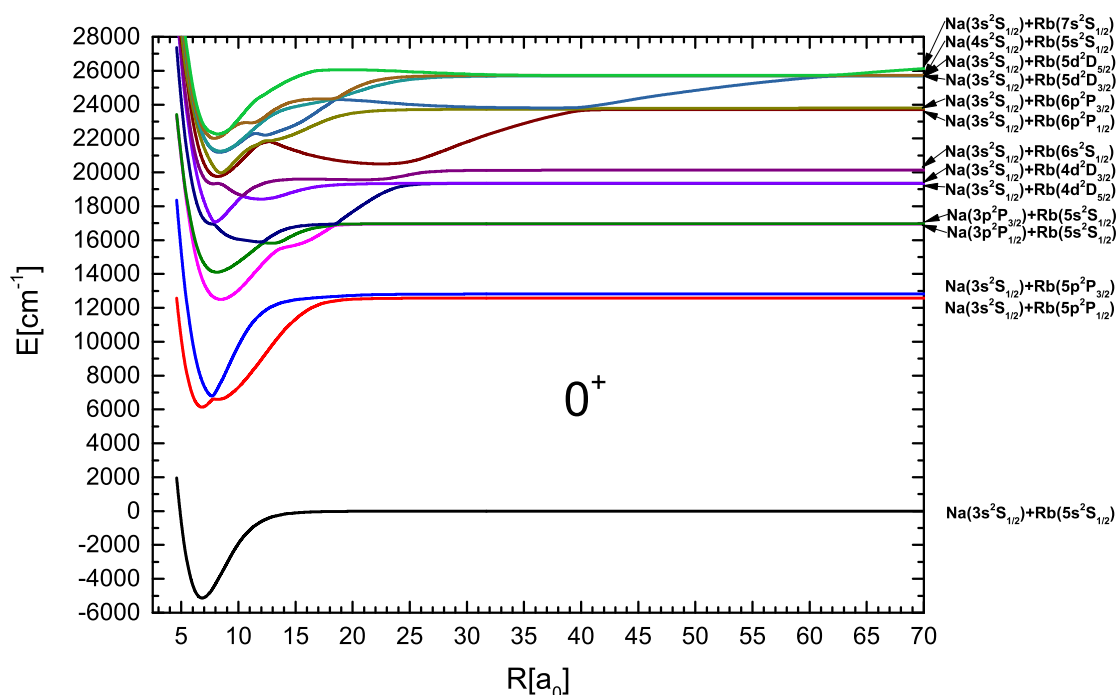
Rysunek 3.16 przedstawia krzywe z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita w symetrii  $0^-$ . Krzywe  $(1)0^-$ ,  $(4)0^-$  i  $(5)0^-$  mają kształt regularny i zbiegają do asymptot  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ ,  $Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ . Stany  $(2)0^-$  i  $(3)0^-$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$ . Charakterystyczne AC pomiędzy tymi stanami występuje w odległości  $11,8 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi  $179 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(6)0^-$  i  $(7)0^-$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$ . Pomędzy tymi stanami znajdują się charakterystyczne AC w odległościach  $15,4 a_0$  oraz  $10,2 a_0$  a wartości odstępów energetycznych wynoszą odpowiednio około  $6 \text{ cm}^{-1}$  i w przybliżeniu  $59 \text{ cm}^{-1}$ . Stan  $(8)0^-$  zbiega do asymptoty atomowej  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6s^2S_{1/2})$ . Stan  $(7)0^-$  oddziałuje z nim w dwóch odległościach  $10,4 a_0$  i  $8,4 a_0$  a odstęp energetyczny wynosi około  $306 \text{ cm}^{-1}$  i  $635 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(8)0^-$  i  $(9)0^-$  mają trzy charakterystyczne AC w odległościach  $8,8 a_0$ ,  $8,2 a_0$  i  $5,4 a_0$ , a przerwy energetyczne wynoszą dla nich odpowiednio  $36 \text{ cm}^{-1}$ ,  $47 \text{ cm}^{-1}$ ,  $107 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(9)0^-$  i  $(10)0^-$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$ . Pomędzy tymi stanami AC występuje w odległości  $10,4 a_0$  a odstęp energetyczny w tym miejscu wynosi około  $190 \text{ cm}^{-1}$ . Charakterystyczne dwa AC, w których uczestniczą stany  $(10)0^-$ ,  $(11)0^-$  i  $(12)0^-$ , występują w okolicach  $15 a_0$ . W przypadku stanów  $(10)0^-$  i  $(11)0^-$  przerwa energetyczna wynosi  $67 \text{ cm}^{-1}$ , a pomiędzy stanami  $(11)0^-$  i  $(12)0^-$  wynosi  $27 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(11)0^-$  i  $(12)0^-$  zbiegają odpowiednio do asymptot  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$ . Pomędzy stanami  $(12)0^-$  a  $(13)0^-$  występuje charakterystyczne AC w odległości  $8,2 a_0$ , a wartość przerwy energetycznej wynosi w przybliżeniu  $70 \text{ cm}^{-1}$ . Stany  $(13)0^-$  i  $(14)0^-$  zbiegają do asymptot atomowych  $Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$ . Charakterystyczne dwa avoided crossing pomiędzy tymi stanami występują w odległościach  $14,4 a_0$  i  $11,6 a_0$  z wartościami przerw energetycznych wynoszącymi odpowiednio  $33 \text{ cm}^{-1}$  i  $147 \text{ cm}^{-1}$ . Dla stanu  $(14)0^-$  występuje również nieregularność w okolicach  $8 a_0$ .

Rysunek 3.17 przedstawia krzywe z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita w symetrii 1. Stan  $(1)1$  jest regularny i zbiega do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ . Stan  $(2)1$  zbiega do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$  a stany  $(3-4)1$  do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$ . Charakterystyczne AC pomiędzy stanami  $(2)1$  i  $(3)1$  występuje w odległości  $11,6 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi około  $134 \text{ cm}^{-1}$ . Następne charakterystyczne avoided crossing znajduje się pomiędzy stanami  $(3)1$  i  $(4)1$  w odległości  $6,8 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi około  $145 \text{ cm}^{-1}$ . Pomędzy stanami  $(4)1$  a  $(5)1$  występuje AC w odległości  $4,8 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi  $134 \text{ cm}^{-1}$ . Stan  $(5)1$  zbiega do asymptoty  $Na(3p^2P_{1/2})+$

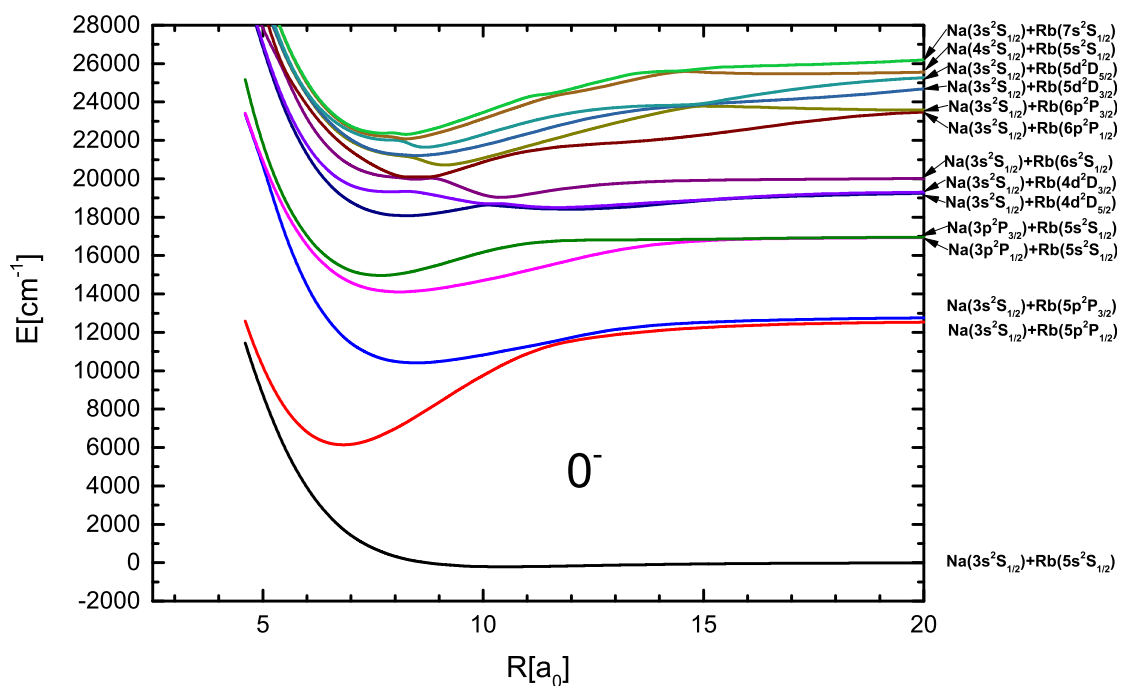
$Rb(5s^2S_{1/2})$  a stany (6-7)1 do asymptoty  $Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$ . Charakterystyczne AC występuje pomiędzy stanami (5)1 i (6)1 w odległości  $16,4 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi  $12 \text{ cm}^{-1}$ . Pomiedzy stanami (6)1 a (7)1 dla bardzo małych odległości wynoszących odpowiednio  $6,6 a_0$  i  $5,6 a_0$  występują AC a wartości przerw energetycznych wynoszą odpowiednio  $12 \text{ cm}^{-1}$  i  $37 \text{ cm}^{-1}$ . Stany (8-9)1 zbiegają do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$ , a stany (10-11)1 zbiegają do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$ . Stan (12)1 zmierza ku asymptocie  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6s^2S_{1/2})$ . Dla stanów (8)1 i (9)1 występują dwa AC w odległościach  $15,4 a_0$  i  $10,8 a_0$  o wartościach przerw energetycznych wynoszących odpowiednio  $7 \text{ cm}^{-1}$  i  $44 \text{ cm}^{-1}$ . Pomiedzy stanami (10)1 a (11)1 dla odległości występują AC wynoszących odpowiednio  $11,6 a_0$ ,  $7,2 a_0$  i  $5,4 a_0$ . Przerwy energetyczne dla danego zbioru odległości wynoszą kolejno  $3 \text{ cm}^{-1}$ ,  $24 \text{ cm}^{-1}$  i  $36 \text{ cm}^{-1}$ . Dla stanów (11)1 i (12)1 mamy dwa charakterystyczne avoided crossings dla odległości  $10,4 a_0$  i  $8,4 a_0$ , wartości odstępów energetycznych wynoszą tam odpowiednio  $306 \text{ cm}^{-1}$  i  $634 \text{ cm}^{-1}$ . Stan (13)1 zmierza do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$  a stany (14-15)1 zmierzają do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$ . Pomiedzy (12)1 a (13)1 znajdują się trzy avoided crossings w odległościach  $8,8 a_0$ ,  $8,2 a_0$  i  $5,6 a_0$ . Wartości energii przerw pomiędzy stanami wynoszą dla nich odpowiednio  $22 \text{ cm}^{-1}$ ,  $29 \text{ cm}^{-1}$  i  $31 \text{ cm}^{-1}$ . Pomiedzy stanami (13)1 a (14)1 występują trzy avoided crossings występujące w odległościach  $10,4 a_0$ ,  $7,6 a_0$  i  $5,4 a_0$ . Wartości przerw energetycznych dla danych odległości wynoszą kolejno  $178 \text{ cm}^{-1}$ ,  $8 \text{ cm}^{-1}$  i  $51 \text{ cm}^{-1}$ . Natomiast pomiędzy stanami (14)1 a (15)1 są cztery AC. Występują one dla odległości  $18 a_0$ ,  $13,2 a_0$ ,  $8,8 a_0$  i  $5,0 a_0$ . Wartości odstępów energetycznych wynoszą kolejno  $53 \text{ cm}^{-1}$ ,  $14 \text{ cm}^{-1}$ ,  $56 \text{ cm}^{-1}$  i  $78 \text{ cm}^{-1}$ . Stany (16-17)1 i (18-19)1 zbiegają odpowiednio do następujących asymptot atomowych  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$ . Pomiedzy stanami (15)1 i (16)1 znajdują się trzy charakterystyczne AC w odległościach  $14,8 a_0$ ,  $7,8 a_0$  i  $5,2 a_0$ . Ich wartości wynoszą odpowiednio  $71 \text{ cm}^{-1}$ ,  $25 \text{ cm}^{-1}$  i  $29 \text{ cm}^{-1}$ . Przedstawione na rysunku stany (16)1 i (17)1 mają dwa avoided crossings w odległościach  $15 a_0$  i  $6 a_0$  o wartościach przerw energetycznych wynoszących odpowiednio  $15 \text{ cm}^{-1}$  i  $20 \text{ cm}^{-1}$ . Pomiedzy stanami (17)1 i (18)1 dla odległości  $8,4 a_0$  i  $5,2 a_0$  są dwa ACs o wartościach przerw wynoszących odpowiednio  $36 \text{ cm}^{-1}$  i  $152 \text{ cm}^{-1}$ . Dla stanów (18)1 i (19)1 dla odległości  $18 a_0$  i  $7,2 a_0$  są dwa avoided crossings o wartościach odstępów energetycznych wynoszących odpowiednio  $2 \text{ cm}^{-1}$  i  $4 \text{ cm}^{-1}$ . Stany (20)1 i (21)1 zbiegają odpowiednio do asymptot  $Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$  i  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$ . Pomiedzy stanami (19)1 i (20)1 są aż cztery avoided crossings dla odległości wynoszących odpowiednio  $16 a_0$ ,  $12,6 a_0$ ,  $8,2 a_0$  i  $5,4 a_0$ . Wartości AC dla tych odległości wynoszą odpowiednio około  $4 \text{ cm}^{-1}$ ,  $16 \text{ cm}^{-1}$ ,  $45 \text{ cm}^{-1}$  i  $86 \text{ cm}^{-1}$ . Stany (20)1 i (21)1 mają trzy avoided crossing w odległościach wynoszących około  $14,4 a_0$ ,  $11,8 a_0$  i  $8 a_0$  o wartościach przerw energetycznych wynoszących około  $28 \text{ cm}^{-1}$ ,  $161 \text{ cm}^{-1}$  i  $240 \text{ cm}^{-1}$ .

Rysunek 3.18 przedstawia krzywe z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita w symetrii 2. Stany (1)2 i (2)2 mają kształt regularny. Natomiast pomiędzy stanami (3)2 i (4)2 zbiegającymi do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$  dla odległości równej  $11 a_0$  występuje AC o wartości przerwy energetycznej wynoszącej około  $36 \text{ cm}^{-1}$ . Przy oddziaływaniu stanu (4)2 z wyższym stanem (5)2 zbiegającym do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$  w okolicach  $10,8 a_0$  występuje AC o wartości odstępów energetycznych wynoszącego około  $36 \text{ cm}^{-1}$ . Stany (6)2 i (7)2 mają bardzo pofalowany kształt. Pomiedzy stanami 5(2) i 6(2) występuje AC w odległości  $8,4 a_0$  o wartości przerwy energetycznej wynoszącej około  $634 \text{ cm}^{-1}$ . Pomiedzy stanami (6)2 i (7)2 są trzy AC w odległościach  $18,8 a_0$ ,  $10,4 a_0$  i  $6,2 a_0$  a wartości przerw energetycznych wynoszą odpowiednio około  $1089 \text{ cm}^{-1}$ ,  $860 \text{ cm}^{-1}$  i  $545 \text{ cm}^{-1}$ . Stan (7)2 zbiega do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$  a stany (8)2 i (9)2 zbiegają do asymptoty  $Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$ . Poza tym stany (8)2 i (9)2 znajdują się bardzo blisko siebie.

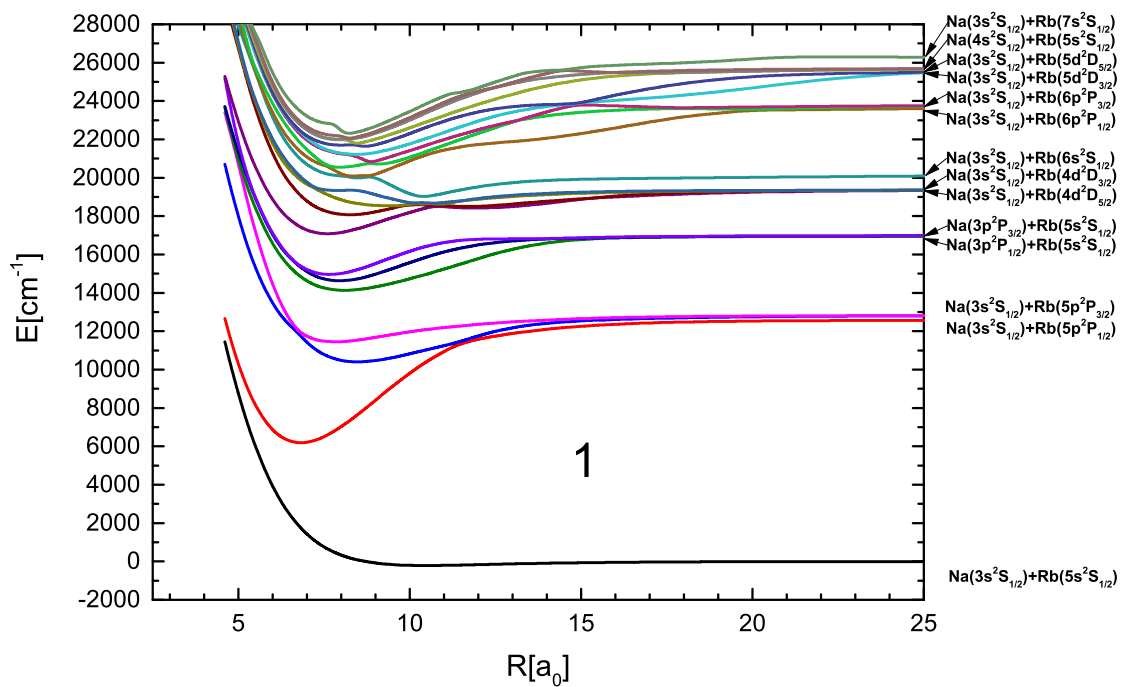
Rysunek 3.19 przedstawia krzywe z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita w symetrii 3. Obie krzywe mają kształt regularny.



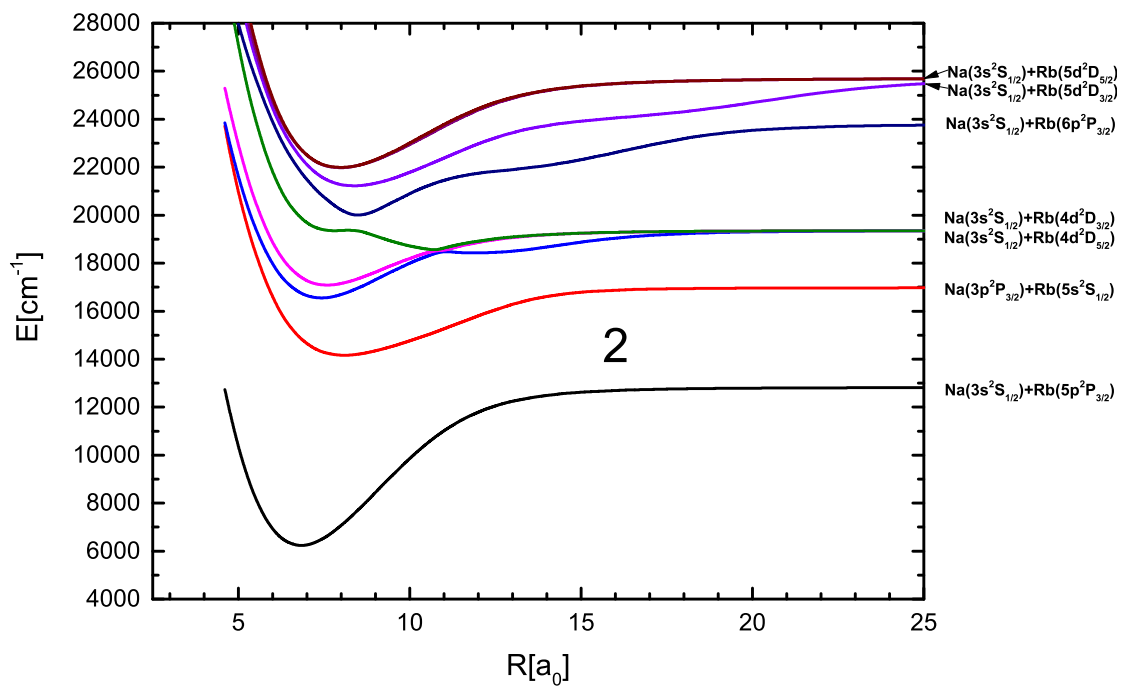
Rys. 3.15. Krzywe energii potencjalnej dla stanów (1-14) $0^+$ .



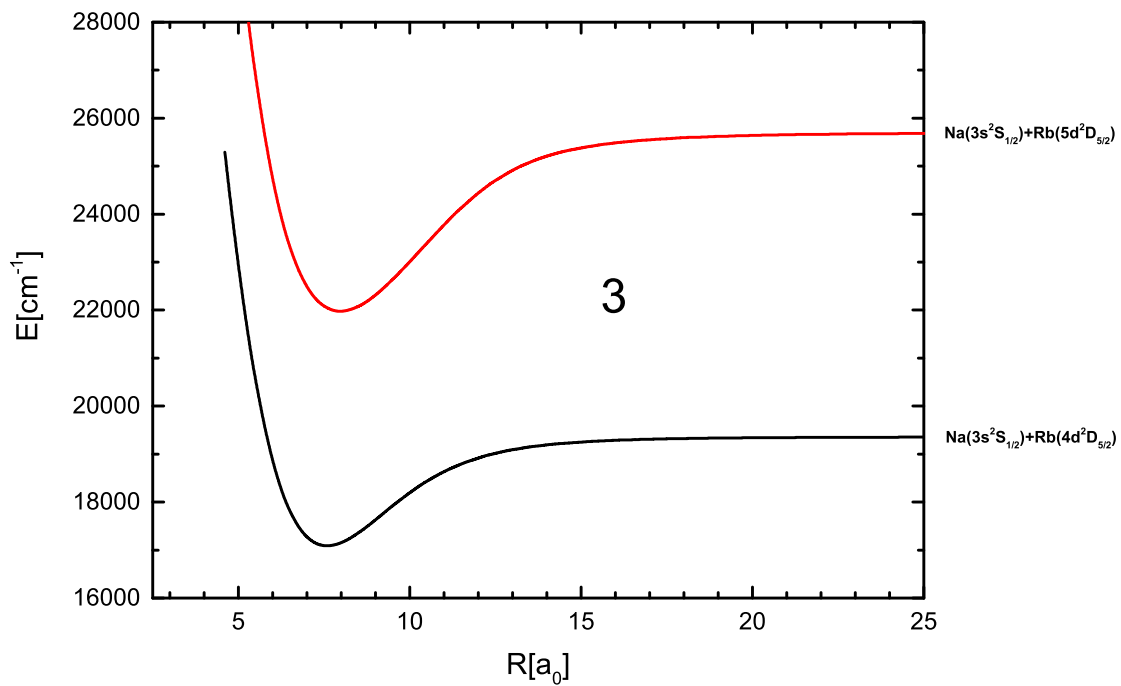
Rys. 3.16. Krzywe energii potencjalnej dla stanów (1-14) $0^-$ .



Rys. 3.17. Krzywe energii potencjalnej dla stanów (1-21)1.



Rys. 3.18. Krzywe energii potencjalnej dla stanów (1-9) 2.



Rys. 3.19. Krzywe energii potencjalnej dla stanów (1-2) 3.

### 3.2.3. Analiza i porównania

W tej sekcji w tabelach 3.9, 3.10, 3.11 i 3.12 przedstawiłem parametry spektroskopowe w porównaniu z wynikami teoretycznymi Korke i Fawwaza [23]. Są to parametry w reprezentacji relatywistycznej. Obecnie nie ma dostępnych danych eksperymentalnych w tej reprezentacji, więc tabele porównawcze zostaną ukazane w formie zestawienia ze względu na brak odniesienia do wyników referencyjnych. Wszystkie tabele krzywych relatywistycznych znajdują się w załączniku B.

Jednakże rozszerzenie obliczeń na podejście relatywistyczne może mieć znaczenie w odwrotnym podejściu perturbacyjnym związanym z dopasowaniem tzw. spacingów, czyli odstępami pomiędzy poziomami oscylacyjno-rotacyjnymi, które odpowiednio charakteryzują dane doświadczalne. Odpowiednie poziomy oscylacyjno-rotacyjne zostaną przedstawione na rysunku 3.20.

**Tab. 3.9.** Parametry spektroskopowe wybranych stanów  $0^+$  cząsteczki NaRb.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło	
(1)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	6,83	5141		0	106,29	0,07094		bieżące wyniki	
		6,78	5263		0	107,90	0,07228		[23] Korek i Fawwaz	
(2)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$	6,82	6451	11217	11269	103,92	0,07117	6399	bieżące wyniki	
		6,77	6578		11259	105,70	0,07259		[23] Korek i Fawwaz	
		7,83			11784					bieżące wyniki
		7,80			11794					[23] Korek i Fawwaz
		8,22	5989		11731	62,39	0,04898	5958		bieżące wyniki
drugie minimum		8,20			11765				[23] Korek i Fawwaz	
(4)0 <sup>+</sup>	$Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,46	4455	18785	17640	63,33	0,04621	4423	bieżące wyniki	
		8,34	4525		17705	64,90	0,04774		[23] Korek i Fawwaz	
(5)0 <sup>+</sup>	$Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,09	2868	19886	19246	61,65	0,05040	2838	bieżące wyniki	
(9)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{1/2})$	7,94	2968		19261	78,60	0,05266		[23] Korek i Fawwaz	
		8,18	3957	25865	24897	70,78	0,04934	3922	bieżące wyniki	
(10)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$	8,13	4067		24941	72,00	0,05031		[23] Korek i Fawwaz	
		8,47	3826	26841	25106	110,45	0,04603	3771	bieżące wyniki	
(11)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$	8,40	3962		25126	118,50	0,04709		[23] Korek i Fawwaz	
		8,36	4513	27367	26327	63,39	0,04724	4481	bieżące wyniki	
		8,30			26439	62,90	0,04822		[23] Korek i Fawwaz	
		11,51			27431				bieżące wyniki	
		11,50			27576				[23] Korek i Fawwaz	
drugie minimum		12,36	3506		27333	63,58	0,02177	3474	bieżące wyniki	
		12,30	3112		27498				[23] Korek i Fawwaz	
(12)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$	8,41	4457	27407	26385	60,01	0,04678	4427	bieżące wyniki	
		8,30	4495		26475	61,60	0,04829		[23] Korek i Fawwaz	
(13)0 <sup>+</sup>	$Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	7,90	3739	27760	27139	80,34	0,05276	3699	bieżące wyniki	
		7,87	3752		27222	79,50	0,05368		[23] Korek i Fawwaz	
(14)0 <sup>+</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$	8,20	4055	28049	27394	71,03	0,04909	4019	bieżące wyniki	
		8,14	3558		27463	72,80	0,05022		[23] Korek i Fawwaz	



**Tab. 3.10.** Parametry spektroskopowe wybranych stanów  $0^-$  cząsteczki NaRb.

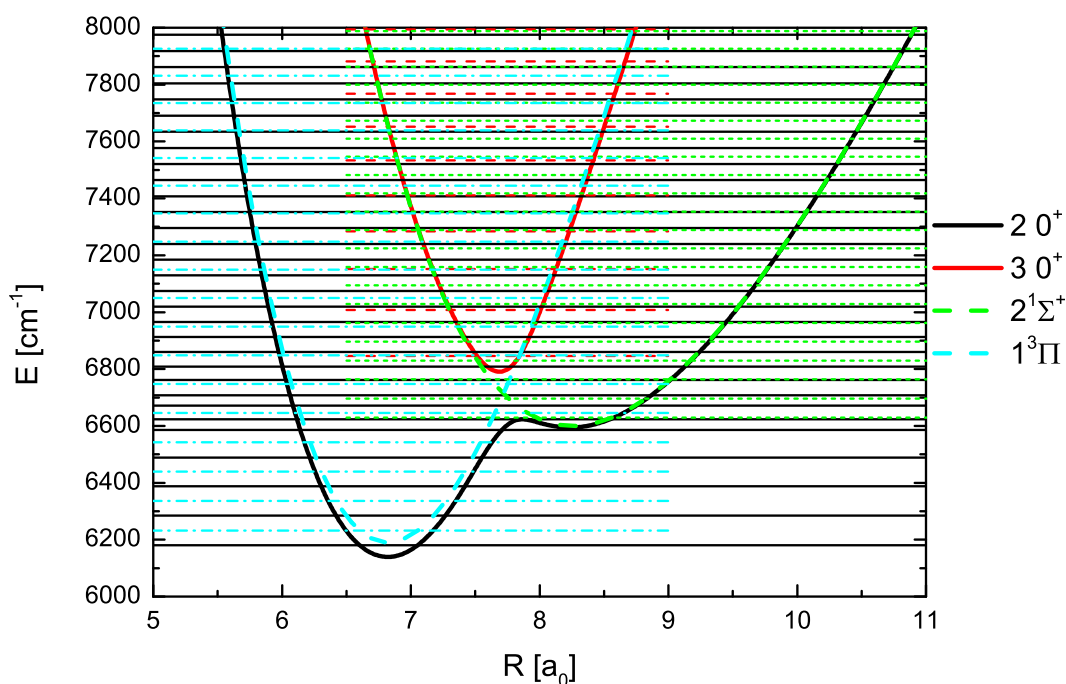
Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
(1)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	10,50	210	6815	5351	20,17	0,02966	200	bieżące wyniki
		10,22	284		4979	22,40	0,03183		[23] Korek i Fawwaz
(2)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$	6,81	6449	11218	11272	104,19	0,07121	6397	bieżące wyniki
		6,77	6577		11263	105,90	0,07261		[23] Korek i Fawwaz
(3)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$	8,47	2409	16850	15550	61,72	0,04598	2379	bieżące wyniki
		8,41	2444		15635	62,60	0,04696		[23] Korek i Fawwaz
(4)0 <sup>-</sup>	$Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,09	2849	19885	19245	61,68	0,05041	2818	bieżące wyniki
		8,13	2956		19288	46,40	0,04976		[23] Korek i Fawwaz
(5)0 <sup>-</sup>	$Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	7,65	2017	20456	20098	79,17	0,05642	1977	bieżące wyniki
		7,59	2130		20104	79,40	0,05763		[23] Korek i Fawwaz
(6)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$	8,22	1286	24135	23212	65,21	0,04882	1253	bieżące wyniki
		8,16	2384		23227	66,40	0,04988		[23] Korek i Fawwaz
bariera		10,10			23786				bieżące wyniki
		10,20			23860				[23] Korek i Fawwaz
druga studnia		11,94	939		23559	29,92	0,02327	924	bieżące wyniki
		11,59			23654	65,30	0,02476		[23] Korek i Fawwaz
(10)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$	9,10	3086	27298	25846	110,45	0,03973	3030	bieżące wyniki
		9,06	3137		25945	114,40	0,04046		[23] Korek i Fawwaz
(11)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$	8,44	4495	27402	26344	76,09	0,04624	4457	bieżące wyniki
		8,30	4511		26460	63,20	0,04821		[23] Korek i Fawwaz
(14)0 <sup>-</sup>	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$	8,23	4019	28049	27429	151,60	0,04942	3943	bieżące wyniki
		8,18	4045		27500	177,50	0,04960		[23] Korek i Fawwaz

**Tab. 3.11.** Parametry spektroskopowe wybranych stanów 1 cząsteczki NaRb.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
(1)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	10,50	210	6816	4931	20,17	0,02966	200	bieżące wyniki
		10,22	284		4979	22,60	0,03186		[23] Korek i Fawwaz
(2)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{1/2})$	6,82	6400	11267	11320	104,16	0,07111	6348	bieżące wyniki
		6,76	6530		11310	106,00	0,07269		[23] Korek i Fawwaz
(3)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$	8,47	2413	16829	15547	61,63	0,04598	2382	bieżące wyniki
		8,41	2444		15634	62,50	0,04696		[23] Korek i Fawwaz
(4)1		7,82	1373	16987	16586	61,90	0,05383	1342	bieżące wyniki
		7,77	1445		16634	62,40	0,05510		[23] Korek i Fawwaz
(5)1	$Na(3p^2P_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,08	2821	19909	19274	61,77	0,05048	2790	bieżące wyniki
		8,00	2928		19303	63,40	0,05200		[23] Korek i Fawwaz
(6)1	$Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	7,95	2342	20401	19773	73,19	0,05223	2305	bieżące wyniki
		7,86	2381		19849	74,60	0,05381		[23] Korek i Fawwaz
(7)1		7,65	2017	20457	20098	79,18	0,05642	1977	bieżące wyniki
		7,59	2126		20105	81,70	0,05765		[23] Korek i Fawwaz
(8)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$	7,58	2274	22492	22224	76,11	0,05737	2236	bieżące wyniki
		7,56	2281		22336	75,80	0,05820		[23] Korek i Fawwaz
bariera		10,79			23657				bieżące wyniki
		10,70			23761				[23] Korek i Fawwaz
drugie minimum		11,95	934		23564	30,03	0,02321	919	bieżące wyniki
		11,88			23668	30,40	0,02355		[23] Korek i Fawwaz
(9)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{3/2})$	8,22	1286	24135	23212	65,21	0,04882	1253	bieżące wyniki
		8,16	1391		23227	66,10	0,04987		[23] Korek i Fawwaz
(16)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$	8,43	4486	27430	26354	73,14	0,04662	4449	bieżące wyniki
		8,28	4494		26743	63,70	0,04848		[23] Korek i Fawwaz
(19)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$	7,85	3693	27818	27150	43,54	0,05146	3671	bieżące wyniki
		8,05	3726		27266	75,70	0,05107		[23] Korek i Fawwaz
(20)1	$Na(4s^2S_{1/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,23	3700	27963	27179	168,15	0,04865	3616	bieżące wyniki
		8,16	3727		27316	94,90	0,04995		[23] Korek i Fawwaz
(21)1	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(7s^2S_{1/2})$	8,19	4015	28509	27433	157,03	0,04854	3937	bieżące wyniki
		8,19	4045		27498	180,90	0,04947		[23] Korek i Fawwaz

**Tab. 3.12.** Parametry spektroskopowe wybranych stanów 2 cząsteczki NaRb.

Stan	Asymptota	$R_e$	$D_e$	$T_{ev}$	$T_e$	$\omega_e$	$B_e$	$D_0$	Źródło
(1)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5p^2P_{3/2})$	6,82	6591	11316	11369	104,15	0,07101	6539	bieżące wyniki
		6,76	6720		11358	106,20	0,07277		[23] Korek i Fawwaz
(2)2	$Na(3p^2P_{3/2})+Rb(5s^2S_{1/2})$	8,08	2812	19934	19302	61,80	0,05052	2781	bieżące wyniki
		8,00	2900		19331	63,20	0,05190		[23] Korek i Fawwaz
(3)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$	7,40	2811	21828	21687	80,43	0,06024	2771	bieżące wyniki
		7,36	2836		21782	80,30	0,06131		[23] Korek i Fawwaz
		11,02			23634				bieżące wyniki
		11,00			23735				[23] Korek i Fawwaz
bariera								bieżące wyniki	
drugie minimum		11,97	930		23568			bieżące wyniki	
		11,90			23676			[23] Korek i Fawwaz	
(4)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(4d^2D_{5/2})$	7,59	2274	22492	22224	76,10	0,05737	2236	bieżące wyniki
		7,56	2279		22339	75,70	0,05819		[23] Korek i Fawwaz
(6)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(6p^2P_{3/2})$	8,48	3796	26870	25136	110,76	0,04594	3741	bieżące wyniki
		8,42	3912		25178	115,60	0,04691		[23] Korek i Fawwaz
(7)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{3/2})$	8,36	4477	27463	26363	64,82	0,04724	4444	bieżące wyniki
		8,27	4483		26488	64,60	0,04857		[23] Korek i Fawwaz
(8)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$	7,97	3728	27804	27115	74,01	0,05201	3691	bieżące wyniki
		7,87	3746		27226	79,10	0,05371		[23] Korek i Fawwaz
(9)2	$Na(3s^2S_{1/2})+Rb(5d^2D_{5/2})$	8,00	3716	27824	27126	71,11	0,05177	3681	bieżące wyniki
		7,92	3692		27283	72,60	0,05289		[23] Korek i Fawwaz

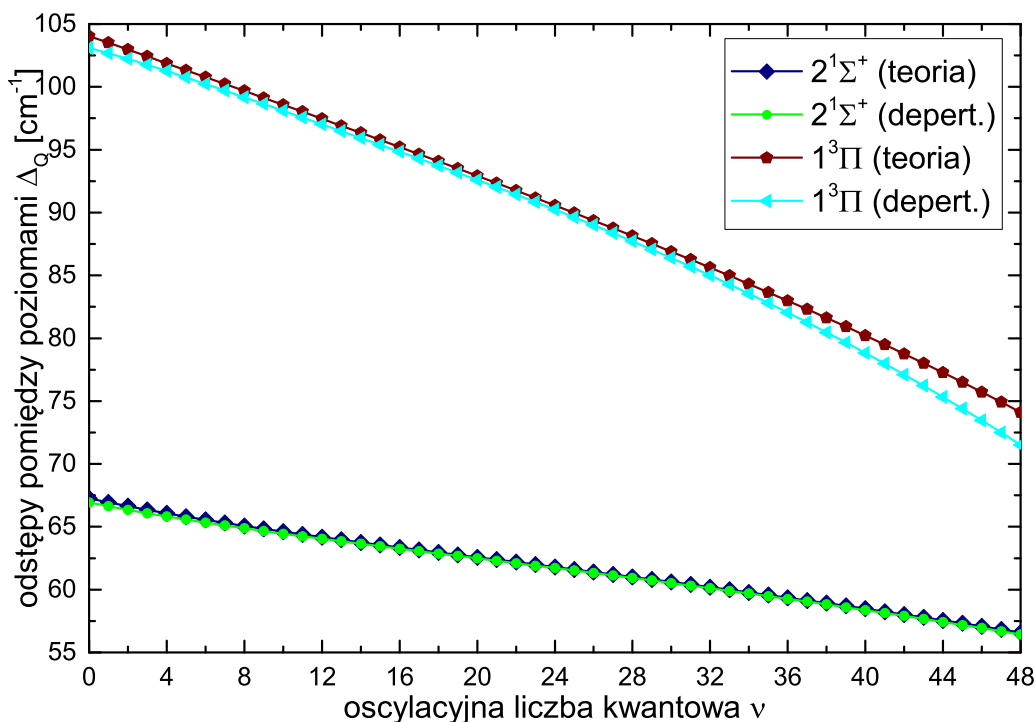


**Rys. 3.20.** Poziomy oscylacyjne stanów relatywistycznych  $(2)0^+$  i  $(3)0^+$  oraz korespondujących nierelatywistycznych  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$ .

Na rysunku 3.20 przedstawiono poziomy oscylacyjne stanów  $(2)0^+$  i  $(3)0^+$  w reprezentacji relatywistycznej oraz korespondujących stanów nierelatywistycznych  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$ . Każdy stan ma własne poziomy oscylacyjne w przypisanym kolorze. Można zauważyć, że w okolicach drugiego minimum stanu  $(2)0^+$  zmienia się odstęp energetyczny poziomów oscylacyjnych. Stan  $1^3\Pi$  ma płytsze minimum niż  $(2)0^+$ .

Minimum stanu  $(3)0^+$  znajduje się powyżej przecięcia stanów  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$ . Charakterystyczne AC pomiędzy  $(2)0^+$  i  $(3)0^+$  występuje w odległości około  $7,8 a_0$  a wartość przerwy energetycznej wynosi  $143 \text{ cm}^{-1}$ .

Rezultaty relatywistyczne mogą być pomocne w oznaczaniu widma i znajdowaniu efektywnych schematów dla formowania ultrazimnej molekuly w głęboko związanym stanie podstawowym. Jednym ze skomplikowanych przypadków jest opis widma fluorescencji indukowanej laserowo dla przejścia  $2^1\Pi$  do kompleksu  $2^1\Sigma^+/1^3\Pi$  przedstawionego przez Docenko i in. [18]. Sprzężenie spin-orbita pomiędzy singletowymi i trypletowymi stanami tego kompleksu jest odpowiedzialne za silne nieregularności w odstępach energetycznych dla poziomów oscylacyjnych i rotacyjnych. Na rysunku 3.21 porównuję oscylacyjne odstępów energetyczne policzone dla moich krzywych energii potencjalnej [65] z tymi otrzymanymi eksperymentalnie [18]. Można zauważyć bardzo dobrą zgodność pomiędzy odstępami pochodzącymi ze stanu  $2^1\Sigma^+$  i tymi pochodzącymi z eksperymentu po przeprowadzeniu depertubacji. To samo można powiedzieć na podstawie porównania stanu  $1^3\Pi$ . Wyjątek stanowią wyższe kwantowe liczby oscylacyjne dla tego stanu.

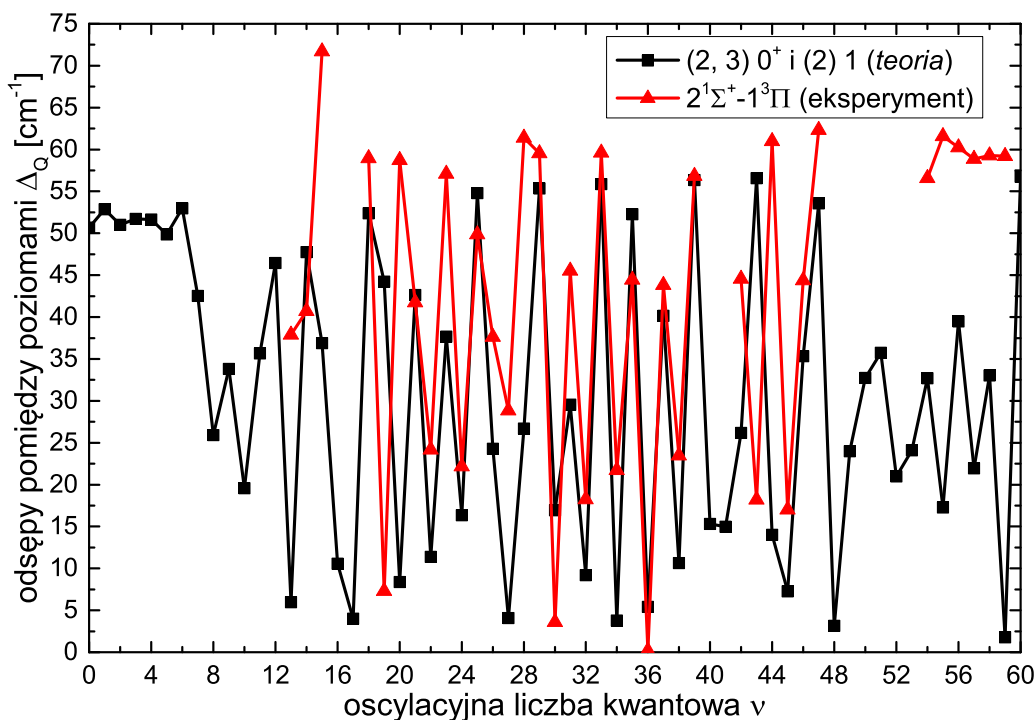


**Rys. 3.21.** Porównanie regularnych przerw oscylacyjnych  $\Delta_Q = \nu(v'', J'' = 0) - \nu(v'' + 1, J'' = 0)$  dla stanów  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$  pomiędzy teoretycznymi [65] i wynikami wynikającymi z analizy deperturbacyjnej [18].

Całkiem inna sytuacja występuje, kiedy dochodzi do porównania odstępów pomiędzy poziomami oscylacyjnymi dla wyników eksperymentalnych i obecnych teoretycznych uwzględniających efekty relatywistyczne (rys. 3.22). Jako przykład zostały

wzięte różnice pomiędzy poziomami oscylacyjno-rotacyjnymi pochodzącymi od stanów  $2^1\Sigma^+$  i  $1^3\Pi$  dla  $J'' = 25$  i porównanie ich z najbardziej odpowiednimi różnicami pochodzącymi ze stanów  $(2)0^+$ ,  $(3)0^+$  i  $(2)1$ .

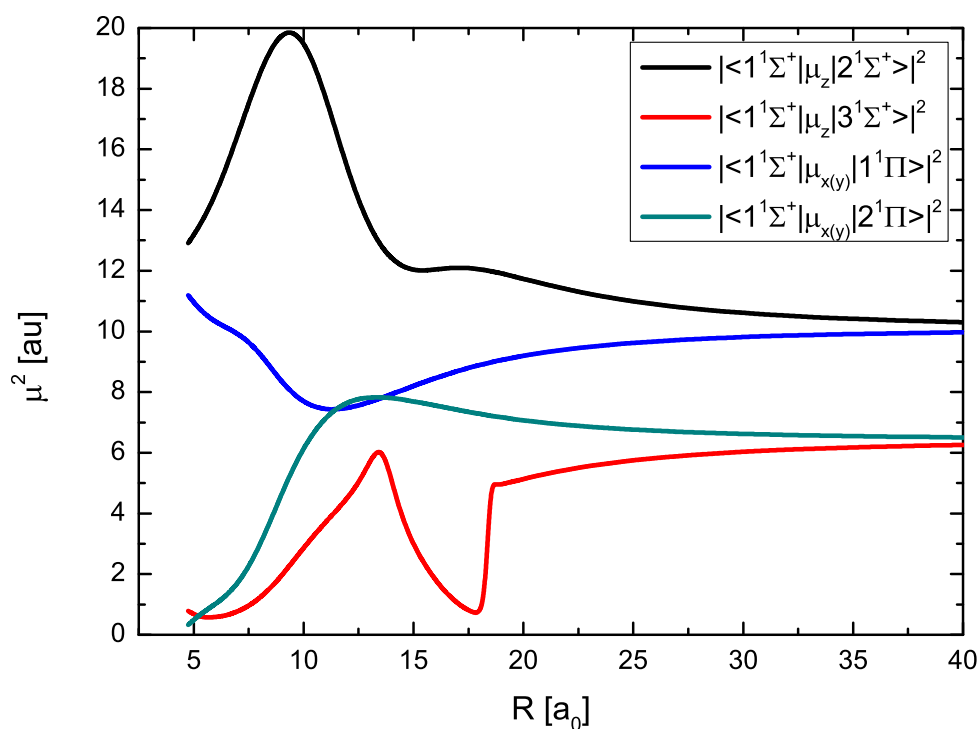
Porównanie wskazuje na znaczące podobieństwo w położeniu poszczególnych pików. Na rysunku 3.22 konsekwentnie jest pominięta nieopisana część eksperymentalnego widma. Wiedza na temat liczby poziomów oscylacyjno-rotacyjnych stanów  $(2)0^+$ ,  $(3)0^+$  i  $(2)1$  leżących poniżej  $2^1\Sigma^+(v'' = 2, J'' = 25)$  daje możliwość znalezienia punktu dopasowania obu obszarów danych. Na tym poziomie jest raczej trudno dokładnie dopasować odstępy pomiędzy poziomami, ponieważ już małe przesunięcia w przypisaniu poziomów po stronie eksperymentalnej i małe niedokładności po stronie teoretycznej dają narastające rozbieżności. Niemniej jednak, można zauważyć, że relatywistyczne potencjały są wygodniejsze w wykorzystaniu, jeśli są przyjmowane jako dane początkowe. Ponadto, w tym przypadku nie będzie potrzeby przeprowadzenia spinowo-orbitalnej deperturbacji. Widma cięższych cząsteczek alkalicznych mogą być więc interpretowane bezpośrednio przy wykorzystaniu potencjałów relatywistycznych [73].



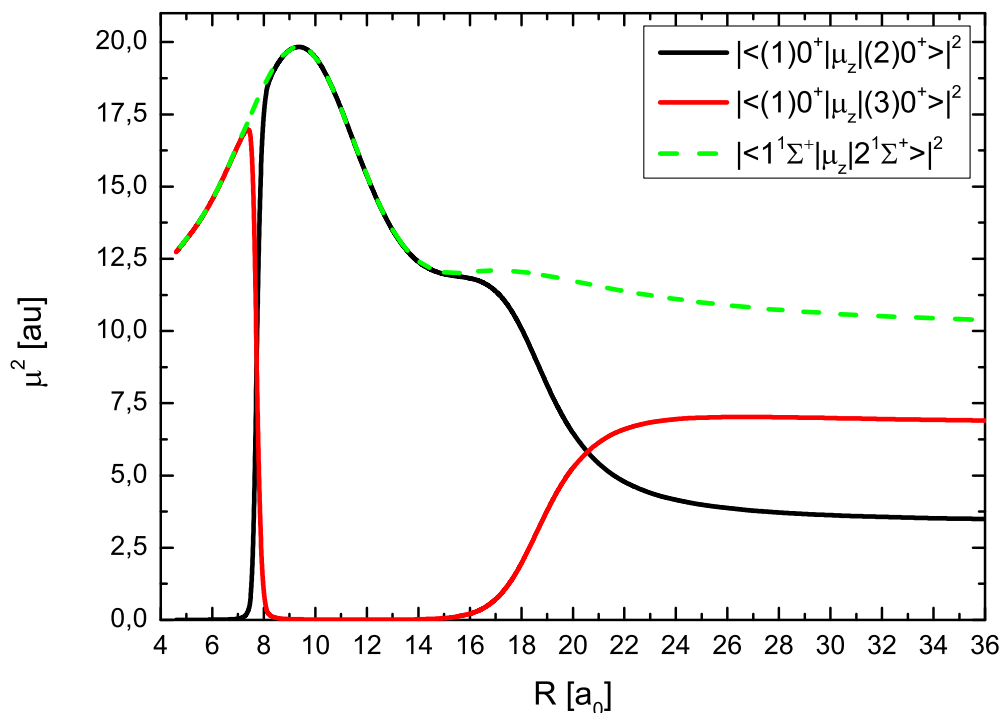
**Rys. 3.22.** Różnice pomiędzy poziomami oscylacyjno-rotacyjnymi  $\Delta_Q = \nu(v'', J'' = 25) - \nu(v'' + 1, J'' = 25)$  dla obecnie policzonych stanów  $(2)0^+$ ,  $(3)0^+$  i  $(2)1$  w porównaniu z eksperymentalnymi różnicami gałęzi  $Q$  dla progresji  $2^1\Pi \rightarrow 2^1\Sigma^+/1^3\Pi$  [18].

### 3.3. Momenty przejść dipolowych

Poniżej na rysunku 3.23 przedstawiono wartości kwadratów momentów przejść dipolowych pomiędzy wybranymi stanami nierelatywistycznymi dla różnych odległości międzyjądrowych  $R$ . Do wybranych stanów w reprezentacji nierelatywistycznej należą przejścia:  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ ,  $1^1\Sigma^+ - 3^1\Sigma^+$ ,  $1^1\Sigma^+ - 1^1\Pi$ ,  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Pi$ . Kształty krzywych są szybkozmienne. Rysunek 3.24 przedstawia wartości kwadratów momentów przejść dipolowych pomiędzy stanami  $(1)0^+ - (2)0^+$  i  $(1)0^+ - (3)0^+$  oraz  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ . Jak można zauważyć suma kwadratów momentów dipolowych przejść pomiędzy stanami  $(1)0^+ - (2)0^+$  i  $(1)0^+ - (3)0^+$  daje moment dipolowy przejścia pomiędzy stanami  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ .



**Rys. 3.23.** Momenty przejść dipolowych pomiędzy wyszczególnionymi stanami:  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Sigma^+$ ,  $1^1\Sigma^+ - 3^1\Sigma^+$ ,  $1^1\Sigma^+ - 1^1\Pi$  i  $1^1\Sigma^+ - 2^1\Pi$ .



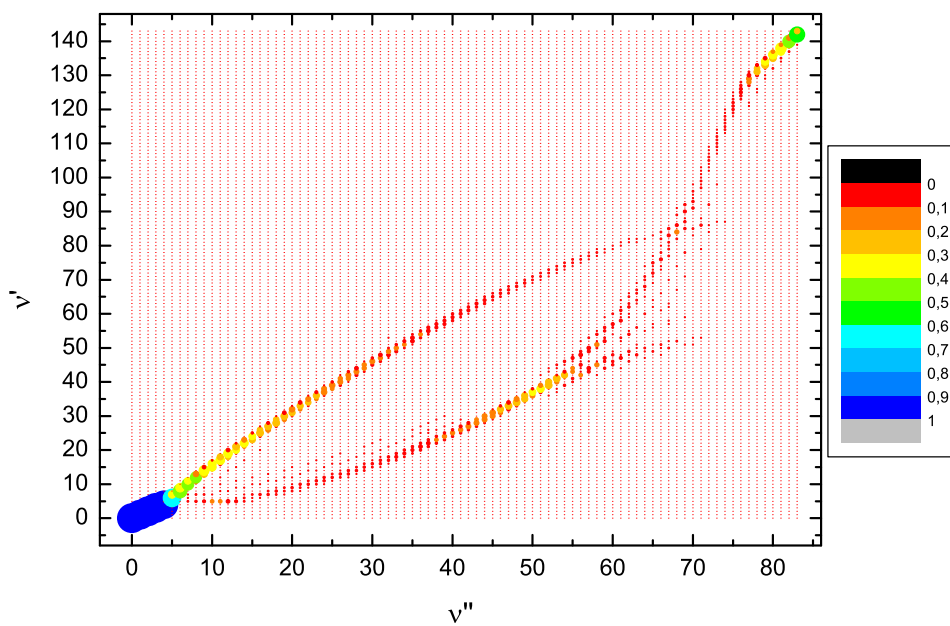
**Rys. 3.24.** Momenty przejść dipolowych pomiędzy stanami  $(1)0^+$  -  $(2)0^+$  i  $(1)0^+$  -  $(3)0^+$  wraz z momentem przejścia pomiędzy korespondującymi stanami nierelatywistycznymi  $1^1\Sigma^+$  -  $2^1\Sigma^+$ .

### 3.4. Czynniki Francka-Condona

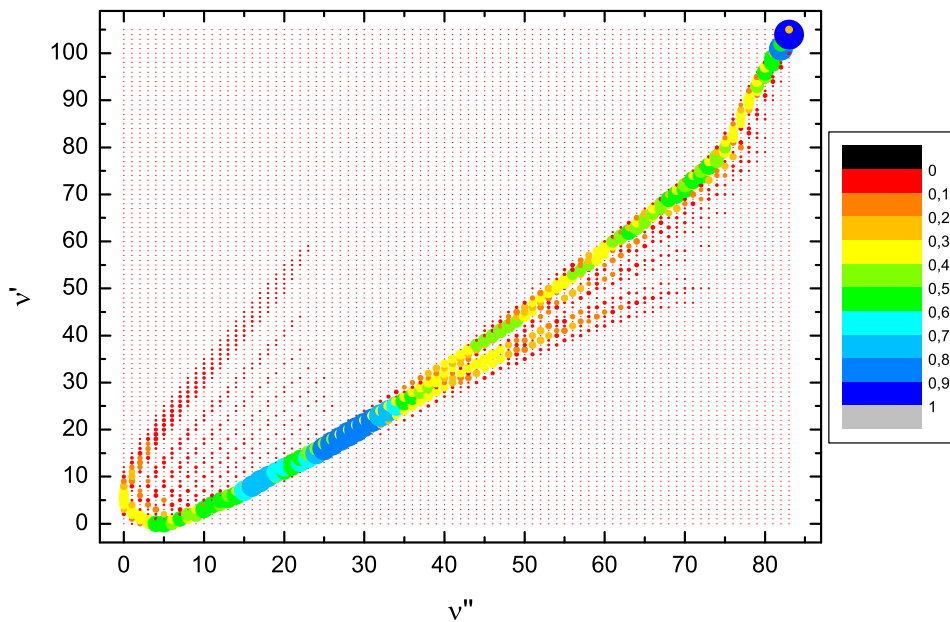
Poniższe rysunki 3.25, 3.26, 3.27 przedstawiają czynniki Francka-Condona. Poszczególne barwy w ramce po prawej obrazują prawdopodobieństwo przejścia z wybranych danych stanów oscylacyjnych:  $\nu''$  oznacza poziomy oscylacyjne niższego stanu a  $\nu'$  poziomy oscylacyjne stanu znajdującego się wyżej energetycznie. Czynniki Francka-Condona mówią o względnych intensywnościach linii odpowiadających przejściom oscylacyjnym. Wszystkie przejścia elektronowe są pionowe, tzn. że zachodzą bez zmiany położenia jąder.

Wyszczególnione zostaną zakresy liczb oscylacyjnych dla których prawdopodobieństwo zbliża się do jedności. Na przejściu ze stanu  $(1)0^+$  do  $(2)0^+$  (rys. 3.25) największe prawdopodobieństwo występuje w zakresie najniższych poziomów oscylacyjnych nie przekraczających 10 poziomu dla stanu początkowego i końcowego. Na przejściu ze stanu  $(1)0^+$  do  $(3)0^+$  (rys. 3.26) zakresy są następujące: w okolicach 25-35 oscylacyjnej liczby kwantowej dla początkowego stanu i 15-25 dla stanu końcowego oraz dla kolejnego przejścia w okolicach  $\nu'' = 85$  i  $\nu' = 105$ . Na przejściu ze stanu  $1^1\Sigma^+$  do  $2^1\Sigma^+$  zakresy dotyczą najwyższych liczb oscylacyjnych  $\nu''$

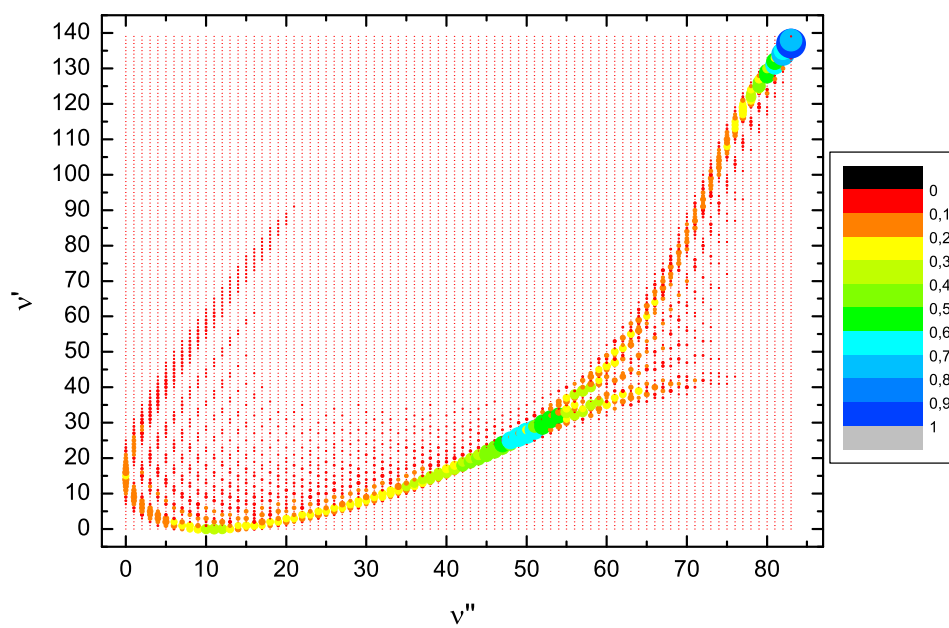
wynoszącej około 80-85 i  $\nu'$  w zakresie około 135-140 (rys. 3.27).



Rys. 3.25. Czynniki Francka-Conдона pomiędzy stanami  $(1)0^+$  -  $(2)0^+$ .



Rys. 3.26. Czynniki Francka-Conдона pomiędzy stanami  $(1)0^+$  -  $(3)0^+$ .

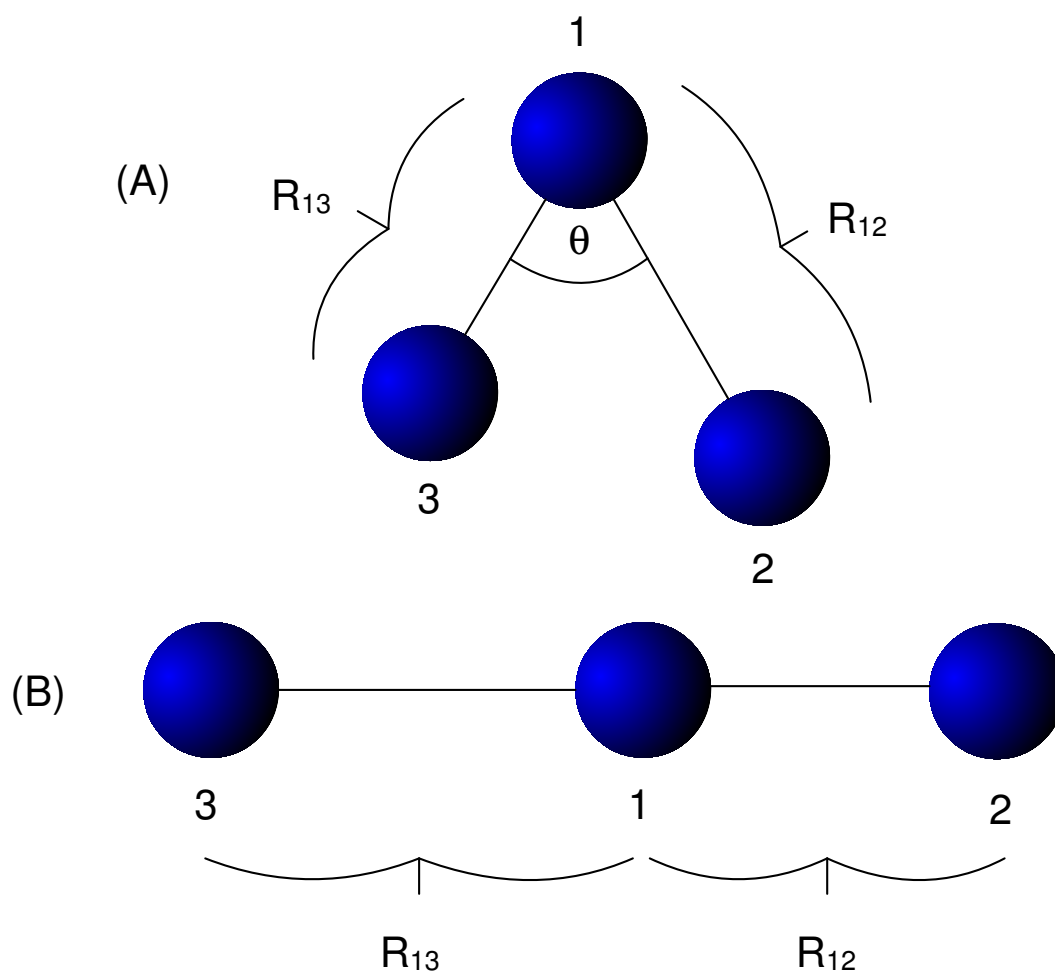


Rys. 3.27. Czynniki Francka-Conдона pomiędzy stanami  $1^1\Sigma^+$  -  $2^1\Sigma^+$ .



## 4. Perspektywy rozwoju badań

W tym rozdziale przedstawione są możliwości rozszerzenia obliczeń z molekuly dwuatomowej do cząsteczek trójatomowych. Omówiona zostanie cząsteczka  $Rb_3$  jako rozszerzenie podejścia obliczeniowego dla omawianej w tej dysertacji molekuly. Początek rozpoczyna się krótkim wprowadzeniem teoretycznym a następny etap stanowi prezentacja i omówienie wyników. Przedstawione zostaną wyniki w podejściu nierelatywistycznym. W związku z rozwojem eksperymentalnych technik związanych z procesem fotoasocjacji potrzebna jest wiedza na temat kolizji atomu z dimerem i właściwości powstałych w ten sposób trymerów. Powierzchnie energetyczne trymerów pełnią ważną rolę w opisie kwantowej dynamiki dla bardzo niskich energii. Informacje na temat najniższego stanu kwartetowego są ważne w pułapkowaniu magnetycznym [75].



**Rys. 4.1.** Geometria cząsteczki  $Rb_3$ . (A) - nieliniowa geometria cząsteczki, (B) - liniowa geometria cząsteczki.

W przypadku ogólnej, nieliniowej geometrii cząsteczkę można opisać punktową grupą symetrii  $C_s$  (zawiera element tożsamościowy i płaszczyzną symetrii) [32, 39,

76]. Ciągłe grupy punktowe opisujące molekuly liniowe to  $C_{\infty v}$  i  $D_{\infty h}$ . Dla molekuly homojądrowej takiej jak  $Rb_3$  możemy rozpatrywać dwa przypadki. Pierwszy z nich to przypadek równych odległości międzyjądrowych ( $D_{\infty h}$  - symetryczna liniowa molekula)  $R_{12} = R_{13}$ , a drugi występuje gdy  $R_{12} \neq R_{13}$  ( $C_{\infty v}$  - niesymetryczna liniowa molekula). Na rysunku 4.1 przedstawiono geometrię cząsteczki  $Rb_3$  za pomocą modelu bryły sztywnej. Przykładem nieliniowej geometrii jest cząsteczka, której kąt wiązania  $\theta \neq 180^\circ$ . W niniejszym podrozdziale będziemy rozważać kąt wiązania  $\theta = 60^\circ$ . Odnosząc się do rysunku 4.1, warto zauważyć, że w praktyce obliczeniowej wykorzystywane są tylko abelowe punktowe grupy symetrii, czyli  $C_{2v}$  jako odpowiednik grupy  $C_{\infty v}$  i  $D_{2h}$  jako odpowiednik  $D_{\infty h}$ . Warto nadmienić, że symetria cząsteczki ma również w tym wypadku swoje konsekwencje w oznaczaniu stanów [76].

Separacja ruchu jąder i elektronów jest przeprowadzona w analogiczny jak w rozdziale 2.2 (dla  $N = 3$  mamy powierzchnie energii potencjalnej). Model hamiltonianu walencyjnego jest rozszerzony na przypadek trójatomowy (więcej informacji można znaleźć w nocie bibliograficznej [45]).

Omówione zostaną trzy podejścia obliczeniowe polegające na doborze różnych pseudopotencjałów, baz funkcyjnych i metod obliczeniowych dzięki, którym wyznaczyłem najniższy stan  $^4A'$  dla dwóch kątów wiązania  $\theta = 60^\circ$  oraz  $\theta = 180^\circ$ . We wszystkich obliczeniach oddziaływanie spin-orbita nie było brane pod uwagę.

W pierwszym podejściu obliczeniowym wzorowałem się na artykułach Soldana [75, 77]. W cząsteczce  $Rb_3$  zastosowany został pseudopotencjał o małym rdzeniu (zawierający 28 elektronów) ECP28MWB [58] dla każdego atomu rubidu i 27 pozostałych elektronów zostało branych bezpośrednio pod uwagę w obliczeniach. Poza tym, nie został wykorzystany efektywny potencjał polaryzacyjny rdzenia. Wykorzystana została baza obliczeniowa przedstawiona w tabeli 4.1. Do zastosowanych metod obliczeniowych należały ograniczona metoda Hartree-Focka (RHF) oraz jednoreferencyjny ograniczony otwartopowłokowy wariant metody sprzężonych klastrów z pojedynczymi, podwójnymi i nieiteracyjnymi potrójnymi wzbudzeniami (RCCSD(T)) [75].

**Tab. 4.1.** Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  i  $f$  atomu rubidu w podejściu Soldana [77].

typ orbitalu / nazwa bazy			
$s$	$p$	$d$	$f$
25,0	15,0	1,35	0,07
10,0	2,838138	0,45	
4,0	1,371168	0,15	
1,6	0,6624	0,05	
0,64	0,32	0,016667	
0,256	0,154589		
0,1024	0,0746809		
0,04096	0,0360777		
0,016384	0,006		
0,0065536			
0,00262144			

Przechodząc do podejścia 2, jest ono analogiczne jak dla molekuly NaRb. W rozważanej cząsteczce  $\text{Rb}_3$  trzy elektrony walencyjne są brane bezpośrednio pod uwagę, natomiast rdzenie  $\text{Rb}^+$  są zastępowane przez pseudopotencjały zależne od liczby kwantowej  $l$ . Zastosowany został wcześniej omówiony i przedstawiony (w tabeli 2.2) efektywny potencjał rdzenia z uwzględnieniem skalarne go efektu relatywistycznego oraz efektywny potencjał polaryzacyjny rdzenia. Metody obliczeniowe są takie same jak w podrozdziale 2.9, z tym że nie było konieczności używania specjalnych metod osiągnięcia zbieżności dla pierwszej iteracji. Zastosowana baza obliczeniowa jest modyfikacją bazy zawartej w tabeli 2.6. Jest ona przedstawiona w postaci tabeli 4.2. Niech nazywa się bazą A.

**Tab. 4.2.** Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  i  $f$  atomu rubidu w teraźniejszym podejściu z bazą A.

typ orbitalu / nazwa bazy			
$s$	$p$	$d$	$f$
ECP36SDF	ECP36SDF	ECP28MDF	ECP28MDF
0,718288	0,161967	0,859432	2,431531
0,273978	0,050771	0,608150	0,721517
0,032306	0,022133	0,211260	0,211260
0,015232	0,009934	0,071000	
		0,025490	
dodatkowe rozszerzenie			
78,729874	5,258465	2,425571	
12,943370	1,648345	1,716379	
4,937015	0,516699	1,214541	
2,866915	0,004459	0,023862	
2,323530	0,000403	0,009151	
1,883135		0,007758	
0,104504		0,003285	
0,068519		0,001180	
0,007182		0,000423	
0,003386			
0,001597			
0,000139			

Podjęcie 3 stanowi analogiczne podjęcie jak w metodzie 2 z doбором innej bazy obliczeniowej (baza B) - tabela 4.3.

**Tab. 4.3.** Wykładniki bazowych funkcji gaussowskich orbitali  $s$ ,  $p$ ,  $d$  i  $f$  atomu rubidu w teraźniejszym podejściu z bazą B.

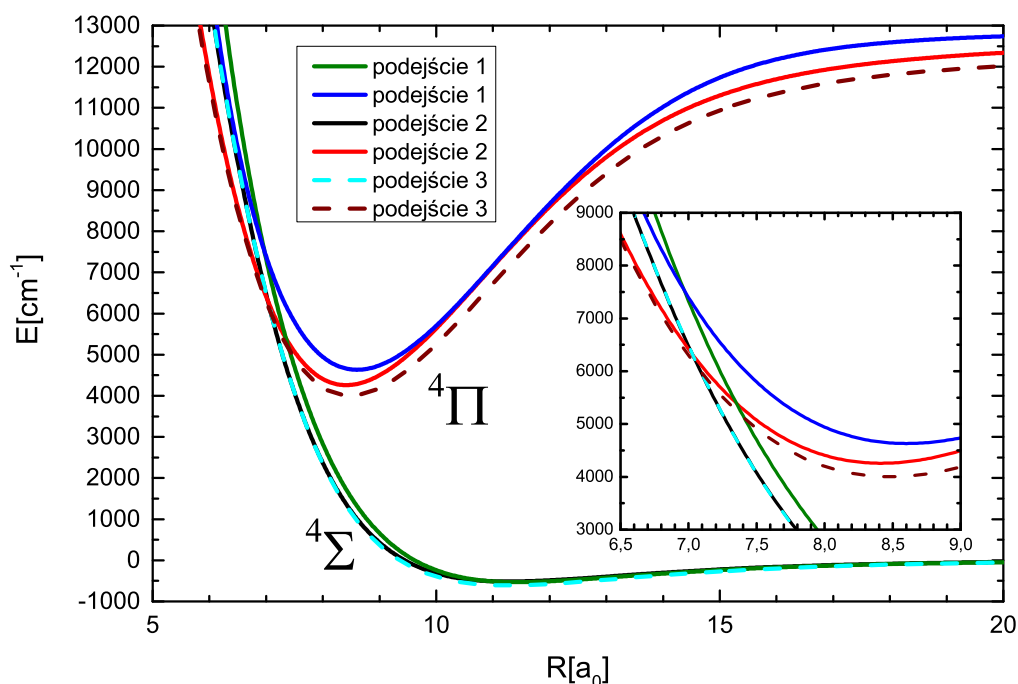
typ orbitalu / nazwa bazy			
$s$	$p$	$d$	$f$
def2-TZVPP	def2-TZVPP	def2-TZVPP	def2-TZVPP
7,474462	5,672064	0,259079	0,852450
6,729618	3,332018	0,042507	
2,781664	0,801501	0,011909	
0,534522	0,363022		
0,223688	0,157339		
0,032410	0,040000		
0,014171	0,016000		

Kolejny etap stanowią analiza i porównania. Wykorzystując ww. trzy podjęcia, obliczyłem wartość wzbudzenia atomu rubidu, kiedy elektron walencyjny przechodzi z orbitalu  $5s$  na orbital  $5p$ . W poniższej tabeli 4.4 przedstawiam porównanie wyników dla tego wzbudzenia.

**Tab. 4.4.** Porównanie wartości energetycznych poziomu  $5s5p^2P^o$  rubidu dla trzech podejść z wynikami eksperymentalnymi Sansonettiego [62, 63].

Sansonetti [62, 63]	podejście 1	podejście 2	podejście 3
12737,35	12902,91	12739,20	12428,89

W przypadku podejścia 1 rozbieżność z wynikami eksperymentalnymi [62, 63] wynosi około  $166 \text{ cm}^{-1}$ , w przypadku podejścia 2 wynosi poniżej  $2 \text{ cm}^{-1}$ , a dla podejścia 3 przekracza  $305 \text{ cm}^{-1}$ .

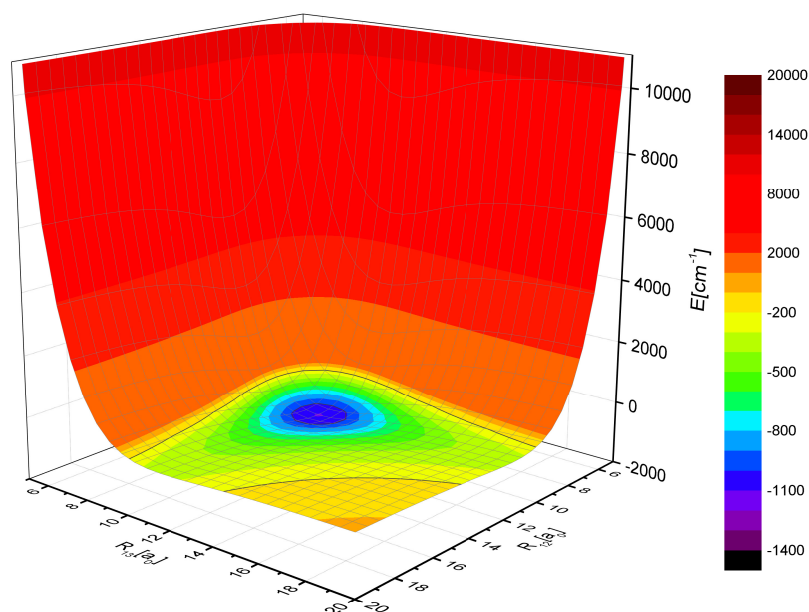


**Rys. 4.2.** Najniższe  $4\Sigma$  i  $4\Pi$  molekuly  $Rb_3$  (geometria liniowa).

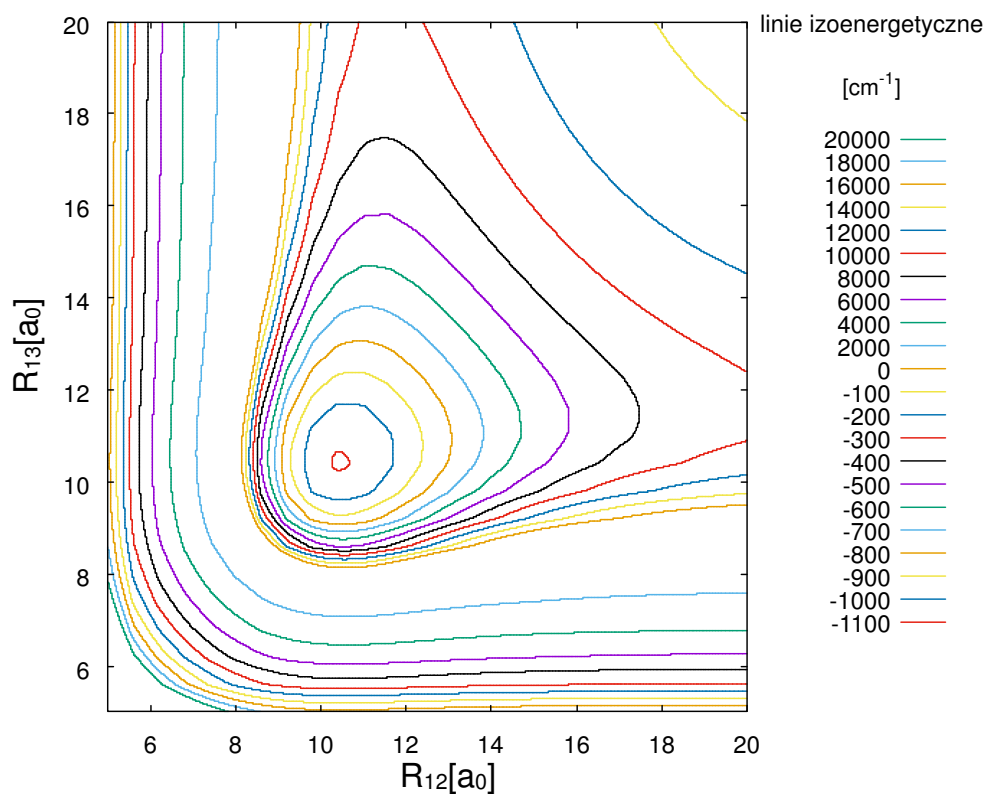
Na rysunku 4.2 przedstawiłem dwa najniższe kwartety ( $4\Sigma, 4\Pi$ ) otrzymane za pomocą trzech podejść. W tym przypadku odległość międzyjądrowa  $R$  spełnia następujące założenie  $R = R_{13} = R_{12}$ . Stany  $4\Pi$  dla trzech podejść korelują do wzbudzenia, kiedy elektron przechodzi z orbitalu  $5s$  do  $5p$ . Aby zapewnić odpowiednie dopasowanie podejścia 1 do wyników Soldana [75] w wybranym wariancie metody sprzężonych klasterów uwzględniono korelację elektronową. Stany  $4\Sigma$  obliczone za pomocą podejść 2 i 3 mają przesuniętą część odpychającą w kierunku mniejszych odległości względem wyników otrzymanych podejściem 1. Minimum potencjału  $4\Pi$  otrzymane podejściem 2 znajduje się powyżej minimum otrzymanego podejściem 3 a poniżej minimum otrzymanego podejściem 1. Na powiększonym fragmencie pokazano momenty przecięcia stanów  $4\Sigma$  i  $4\Pi$ . Dla podejść 2 i 3 miejsca przecięć praktycznie

się pokrywają, natomiast dla podejścia 1 przecięcie znajduje się na skali wyższych energii.

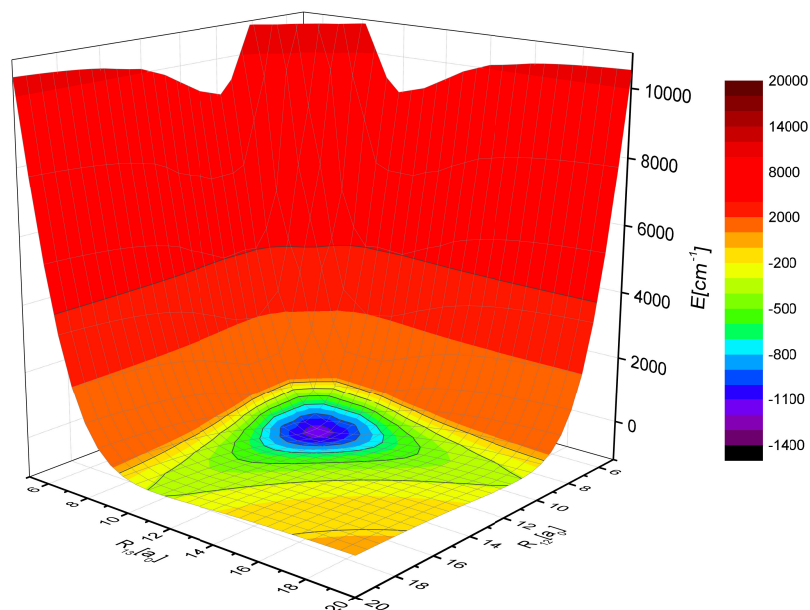
Przedstawiłem również wykresy powierzchniowy i konturowy (linie izoenergetyczne) dla najniższego stanu  ${}^4A'$  cząsteczki  $Rb_3$  dla geometrii z kątami wiązania  $\theta = 60^\circ$  i  $\theta = 180^\circ$  otrzymanych za pomocą trzech podejść. Geometrii z kątem wiązania  $\theta = 60^\circ$  odpowiadają następujące wykresy: podejście 1 - rysunki 4.9 i 4.10, podejście 2 - rysunki 4.11 i 4.12, podejście 3 - rysunki 4.13 i 4.14. Geometrii liniowej odpowiadają następujące wykresy: podejście 1 - rysunki 4.9 i 4.10, podejście 2 - rysunki 4.11 i 4.12, podejście 3 - rysunki 4.13 i 4.14. Wykresy zostały przedstawione dla odległości  $R_{12}$  i  $R_{13}$  w zakresach od 5 do 20  $a_0$  z krokiem 0,6  $a_0$ . Wykresy konturowe otrzymano przy pomocy B-spline'ów rzędu trzeciego z generacją 1000 punktów dla konturu.



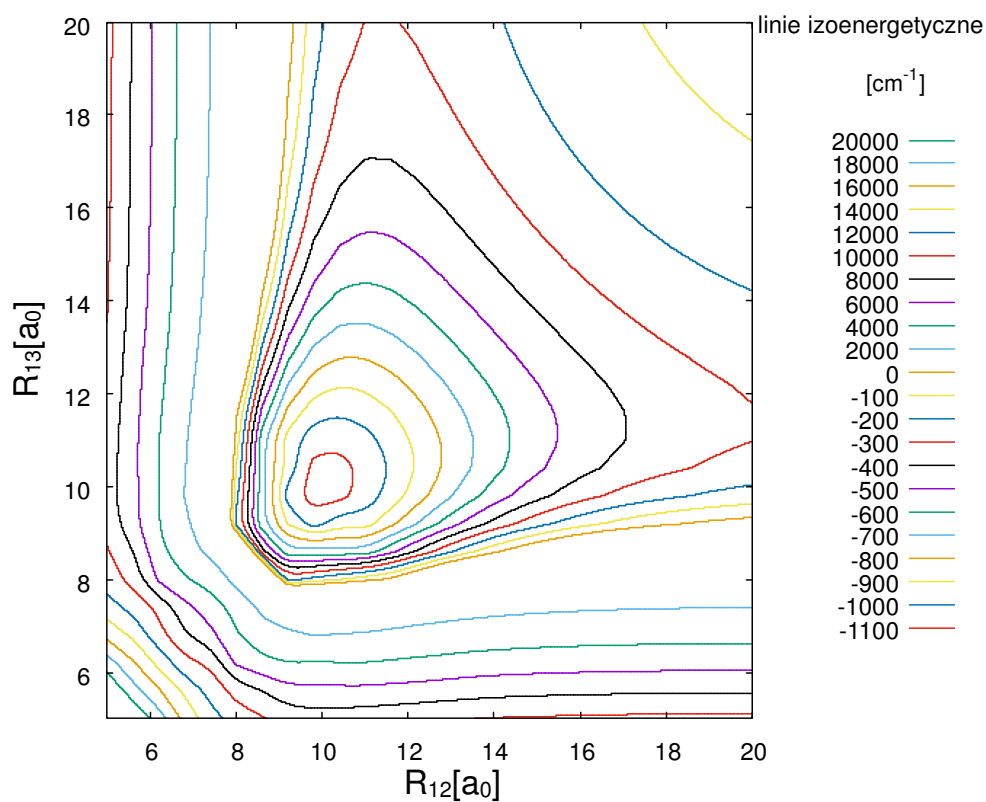
Rys. 4.3. Wykres powierzchniowy  ${}^4A'$  dla molekuly  $Rb_3$  o kącie wiązania  $60^\circ$  w podejściu Soldana (podejście 1).



Rys. 4.4. Wykres konturowy  ${}^4A'$  dla molekuly  $Rb_3$  o kącie wiązania  $60^\circ$  w podejściu Soldana (podejście 1).

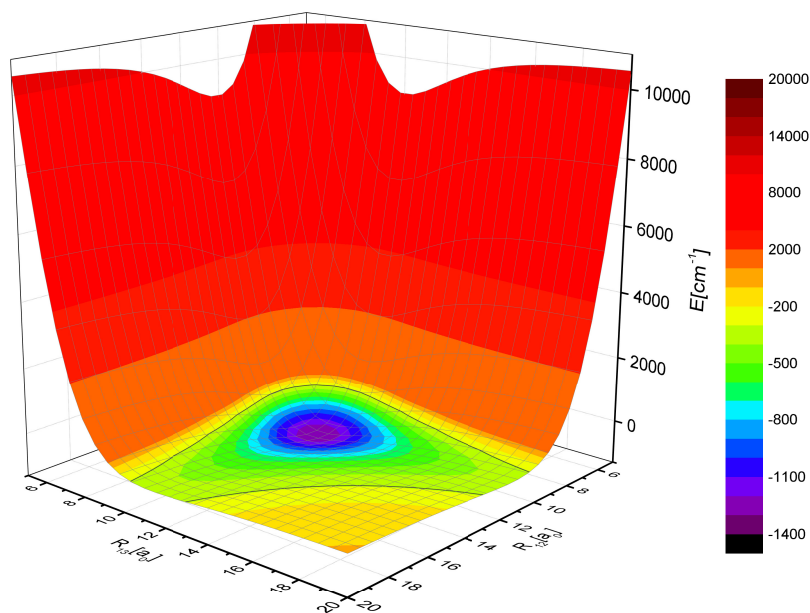


**Rys. 4.5.** Wykres powierzchniowy  $^4A'$  dla molekuly  $Rb_3$  o kącie wiązania  $60^\circ$  w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2).

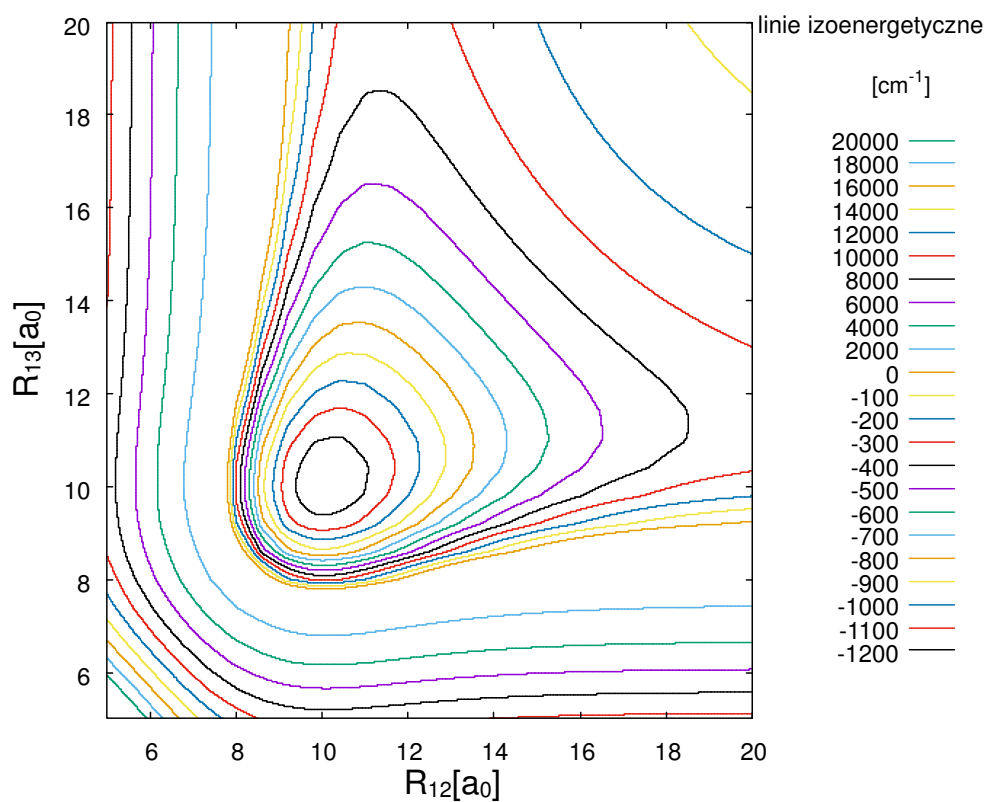


**Rys. 4.6.** Wykres konturowy  $^4A'$  dla molekuly  $Rb_3$  o kącie wiązania  $60^\circ$  w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2).

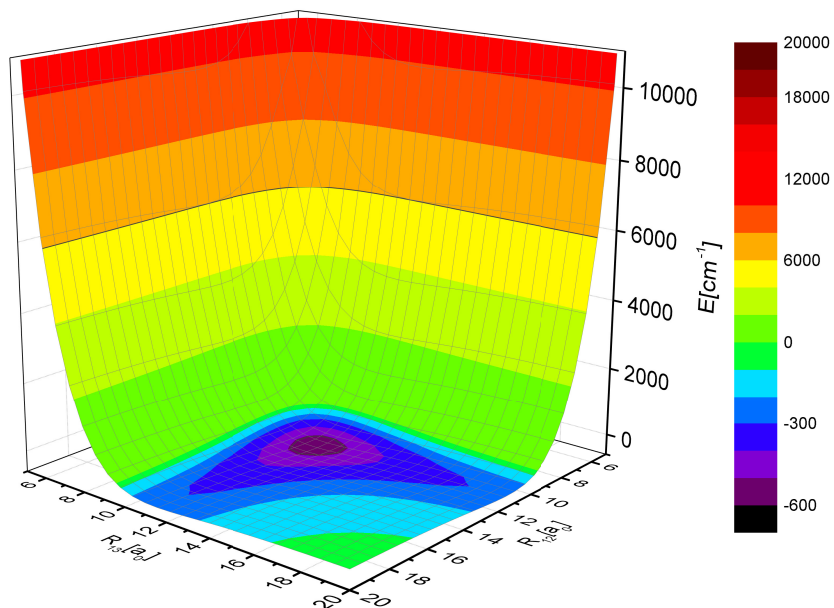




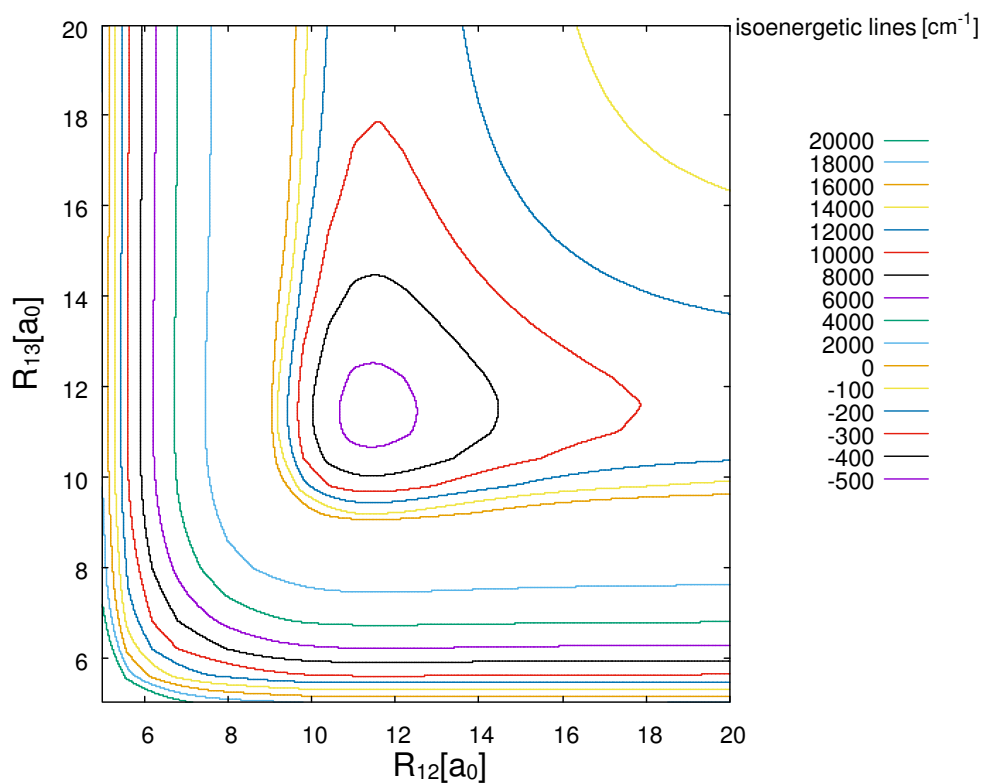
Rys. 4.7. Wykres powierzchniowy  ${}^4A'$  dla molekuly  $Rb_3$  o kącie wiązania  $60^\circ$  w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3).



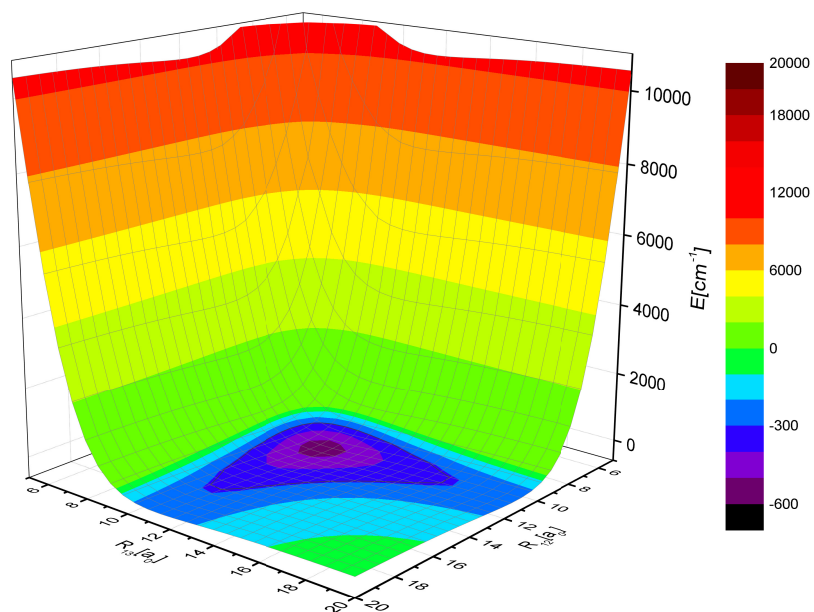
Rys. 4.8. Wykres konturowy  ${}^4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3).



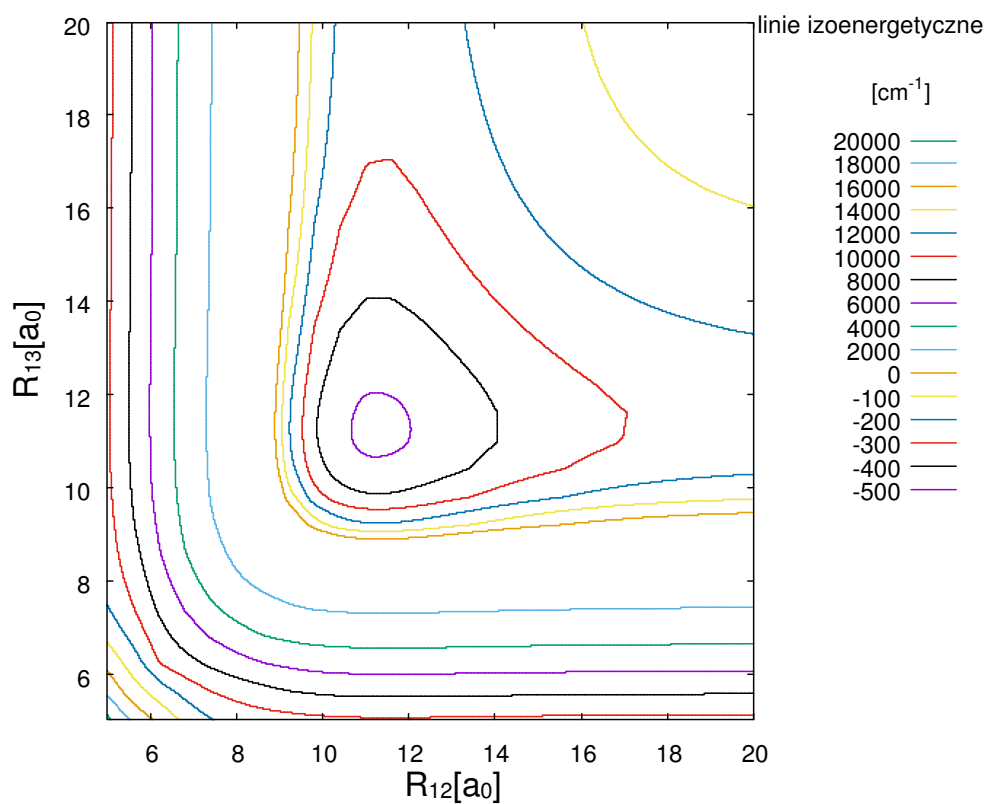
**Rys. 4.9.** Wykres powierzchniowy  $4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w podejściu Soldana (podejście 1).



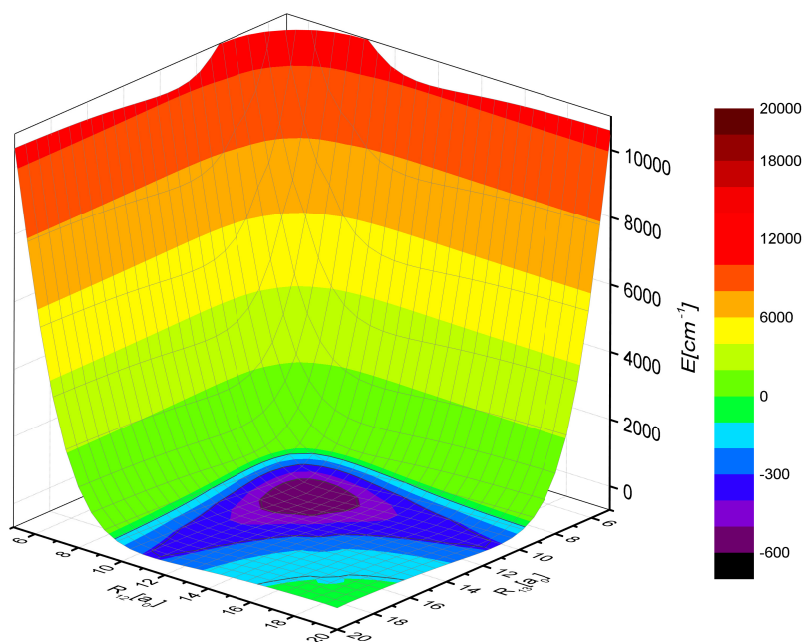
**Rys. 4.10.** Wykres konturowy  $4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w podejściu Soldana (podejście 1).



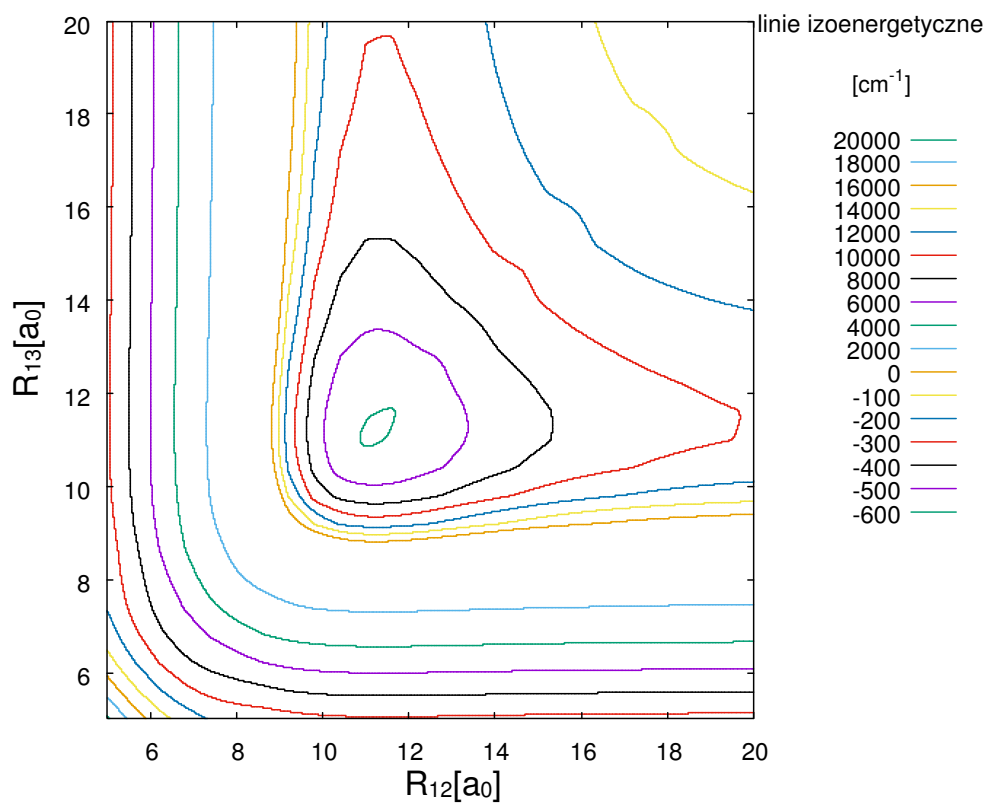
**Rys. 4.11.** Wykres powierzchniowy  ${}^4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2).



**Rys. 4.12.** Wykres konturowy  ${}^4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w obecnym podejściu z bazą A (podejście 2).



**Rys. 4.13.** Wykres powierzchniowy  $4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3).



**Rys. 4.14.** Wykres konturowy  $4A'$  dla liniowej molekuly  $Rb_3$  w obecnym podejściu z bazą B (podejście 3).

Poniżej przedstawiono tabele parametrów spektroskopowych (diagonala wykresów  $R_{13} = R_{12}$ ) dla kąta wiązania  $60^\circ$  oraz dla liniowej geometrii molekuly  $Rb_3$  (tab. 4.5 i 4.6).

**Tab. 4.5.** Porównanie parametrów spektroskopowych dla  $^4A'$  otrzymanego za pomocą trzech podejść dla molekuly  $Rb_3$  o kacie wiązania  $60^\circ$ .

minimum	$R_e[a_0]$	$D_e[cm^{-1}]$
podejście 1	10,44	1116,9023
podejście 2	10,04	1161,2274
podejście 3	10,06	1295,9797

**Tab. 4.6.** Porównanie parametrów spektroskopowych dla  $^4A'$  otrzymanego za pomocą trzech podejść dla liniowej molekuly  $Rb_3$ .

minimum	$R_e[a_0]$	$D_e[cm^{-1}]$
podejście 1	11,39	539,0084
podejście 2	11,22	523,8443
podejście 3	11,19	619,0275

W przypadku kąta wiązania  $60^\circ$  krzywa otrzymana za pomocą podejścia 2 ma o  $0,4 a_0$  przesunięte minimum w kierunku mniejszych odległości względem podejścia 1, natomiast ta otrzymana za pomocą podejścia 3 o  $0,38 a_0$ . Krzywa otrzymana za pomocą podejścia 1 ma najpłytsze minimum. Minimum otrzymane za pomocą podejścia 2 jest o  $44 cm^{-1}$  głębsze a w podejściu 3 o około  $180 cm^{-1}$ .

W przypadku kąta wiązania  $180^\circ$  krzywa otrzymana za pomocą podejścia 2 ma o  $0,17 a_0$  przesunięte minimum w kierunku mniejszych odległości względem podejścia 1, natomiast ta otrzymana za pomocą podejścia 3 o  $0,2 a_0$ . Minimum otrzymane za pomocą podejścia 1 znajduje się pomiędzy minimum podejścia 2, a minimum podejścia 3. Minimum w podejściu 2 jest o około  $15 cm^{-1}$  płytsze a minimum w podejściu 3 o około  $80 cm^{-1}$  głębsze.

Podsumowując, wyniki otrzymane za pomocą podejść 2 i 3 mają minimum położone blisko siebie - świadczy to o ich podobieństwie a różnicę w głębokości studni można tłumaczyć różnicą w rozszerzeniu bazy obliczeniowej (ilość i doбором bazowych funkcji gaussowskich). Wyniki otrzymane w podejściu 1 są zgodne tymi otrzymanymi za pomocą podejść 2 i 3.

## 5. Podsumowanie

W pracy przedstawiono wyznaczone krzywe nierelatywistyczne i relatywistyczne cząsteczki NaRb oraz parametry spektroskopowe, momenty przejść dipolowych i czynniki Francka-Condon dla tych krzywych. Kolejny etap stanowiło przedstawienie perspektywy rozwoju badań w oparciu o cząsteczkę Rb<sub>3</sub>.

Treść opisu teoretycznego w głównej części rozprawy dotyczy heterojądrowej molekuly dwuatomowej. W przypadku otrzymanych rezultatów dla molekuly NaRb osiągnięto bardzo dobrą zgodność z asymptotycznymi wynikami eksperymentalnymi dostarczonymi przez Sansonettiego [62–64] zarówno w podejściu nierelatywistycznym jak i z uwzględnieniem oddziaływania spin-orbita. Różnice dla asymptot atomowych nie przekraczały 4 cm<sup>-1</sup>. Dla obu podejść przeprowadzono skrupulatną analizę miejsc, w których występują charakterystyczne ACs. Dla krzywych nierelatywistycznych Przeprowadzona została analiza wybranych potencjałów z wynikami eksperymentalnymi i innymi teoretycznymi pod względem parametrów spektroskopowych i kształtu. W przypadku krzywych relatywistycznych dokonano zestawienia otrzymanych parametrów spektroskopowych z wynikami Korcka i Fawwaza [23]. Ukazano relację pomiędzy obrazami nierelatywistycznym i relatywistycznym w kontekście poziomów oscylacyjnych. Stwierdzono możliwość wykorzystania ujęcia relatywistycznego w badaniach eksperymentalnych [73]. Przedstawiono momenty przejść dipolowych oraz czynniki Francka-Condon dla wybranych stanów oraz ukazano ich relację w ujęciu nierelatywistycznym i relatywistycznym. Pokazano miejsca dla czynników Francka-Condon, gdzie prawdopodobieństwo przejścia na wykresach pomiędzy wybranymi stanami jest duże.

W przypadku molekuly Rb<sub>3</sub> przedstawiono wybrane geometrie cząsteczki i konsekwencje ich zastosowania. Dokonano opisu trzech podejść obliczeniowych. Przechodząc do rezultatów, osiągnięto bardzo dobrą zgodność z wynikami eksperymentalnymi w przypadku obecnego podejścia ze zmodyfikowaną bazą (metoda 2) (patrz tabela 4.4). Konsekwencją bogato rozszerzonej bazy (baza A - ilość bazowych funkcji gaussowskich) jest duża czasochłonność obliczeń. W przypadku obecnego podejścia z bazą B (metoda 3) obliczenia są krótsze, aczkolwiek zgodność asymptotyczna z eksperymentem jest mniejsza. Dokonano porównania najniższych <sup>4</sup>Σ i <sup>4</sup>Π dla liniowej molekuly o równych długościach wiązania oraz najniższego <sup>4</sup>A' dla dwóch kątów wiązania otrzymanych trzema metodami. Przeprowadzono porównanie parametrów spektroskopowych. Obliczenia mogą zostać rozszerzone na uwzględnienie efektów relatywistycznych przez wyliczenie spinowo-orbitalnych macierzy pomiędzy stanami nierelatywistycznymi uwzględniającymi efekt skalarny. Efekty relatywistyczne w tym przypadku zostały pominięte jako wprowadzenie do porównania z bazową metodą porównawczą.

Podsumowując, otrzymałem bardzo dobre wyniki dla cząsteczki NaRb - wykazała to dogłębna analiza otrzymanych krzywych nierelatywistycznych. W przypadku krzywych relatywistycznych otrzymałem też bardzo dobrą zgodność z eksperymentem na poziomie asymptot atomowych oraz przedstawiłem możliwości ich wykorzystania w badaniach eksperymentalnych. Dokonując rozszerzenia metod na homojądrową molekułę trójatomową Rb<sub>3</sub> otrzymałem zgodne wyniki z bazową metodą porównawczą (wyniki otrzymane w oparciu o artykuły Soldana [75, 77]).

## Literatura

- [1] A. Sharma, G.L. Bhale, M.A.N. Razvi i M.N. Dixit. *Opt. Commun.*, 61:1, 1987.
- [2] H. Wang i W.C. Stwalley. *J. Chem. Phys.*, 108:5767, 1998.
- [3] W.C. Stwalley i H. Wang. *J. Mol. Spectrosc.*, 195:194, 1999.
- [4] J.T. Bahns, P.L. Gould i W.C. Stwalley. *Adv. Atom. Mol. Opt. Phys.*, 42:171, 2000.
- [5] S.B. Weiss, M. Bhattacharya i N.P. Bigelow. *Phys. Rev. A*, 68:042708, 2003.
- [6] J.M. Walter i S. Barrat. *Proc. R. Soc. Lond. Ser. A*, 199:257, 1928.
- [7] P. Kusch. *Phys. Rev.*, 49:218, 1936.
- [8] N. Takahashi i H. Kato. *J. Chem. Phys.*, 75:4350, 1981.
- [9] Y. Wang, M. Kajitani, S. Kasahara, M. Baba, K. Ishikawa i H. Kato. *J. Chem. Phys.*, 95:6229, 1991.
- [10] Y. Wang, K. Matsubara i H. Kato. *J. Chem. Phys.*, 97:811, 1992.
- [11] K. Matsubara, Y. Wang, K. Ishikawa, M. Baba, A.J. McCaffery i H. Kato. *J. Chem. Phys.*, 99:5036, 1993.
- [12] S. Kasahara, T. Ebi, M. Tanimura, H. Ikoma, K. Matsubara, M. Baba i H. Kato. *J. Chem. Phys.*, 105:1341, 1996.
- [13] Y.E. Young, R. Ejnisman, J.P. Shaffer i N.P. Bigelow. *Phys. Rev. A*, 62:055403, 2000.
- [14] M. Tamanis, R. Ferber, A. Zaitsevskii, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov, and H. Chen, J. Qi, H. Wang i W.C. Stwalley. *J. Chem. Phys.*, 117:17, 2002.
- [15] O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, H. Knockel i E. Tiemann. *Phys. Rev. A*, 69:042503, 2004.
- [16] W. Jastrzębski, P. Kortyka, P. Kowalczyk, O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, H. Knockel i E. Tiemann. *Eur. Phys. J. D*, 36:57, 2005.
- [17] O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, A. Pashov, H. Knockel i E. Tiemann. *Eur. Phys. J. D*, 36:49, 2005.
- [18] O. Docenko, M. Tamanis, R. Ferber, E.A. Pazyuk, A. Zaitsevskii, A.V. Stolyarov, A. Pashov, H. Knockel i E. Tiemann. *Phys. Rev. A*, 75:042503, 2007.



- [19] P. Kortyka, W. Jastrzębski i P. Kowalczyk. *Chem. Phys. Lett.*, 404:323, 2005.
- [20] A. Pashov, W. Jastrzębski, P. Kortyka i P. Kowalczyk. *J. Chem. Phys.*, 124: 204308, 2006.
- [21] M. Chaieb, H. Habli, L. Mejrissi, B. Oujia i F.X. Gadea. *Int. J. Quantum Chem.*, 114:731, 2014.
- [22] M. Korek, A.R. Allouche, M. Kobeissi, A. Chaalan, M. Dagher, K. Fakherddin i M. Aubert-Frecon. *Chem. Phys.*, 256:1, 2000.
- [23] M. Korek i O. Fawwaz. *Int. J. Quantum Chem.*, 109:938, 2009.
- [24] A. Zaitsevskii, S.O. Adamson, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov, O. Nikolayeva, O. Docenko, I. Klincare, M. Auzinsh, M. Tamanis, R. Ferber i R. Cimiraaglia. *Phys. Rev. A*, 63:052504, 2001.
- [25] R. Dardouri, K. Issa, B. Oujia i F.X. Gadea. *Int. J. Quantum Chem.*, 112:2724, 2012.
- [26] H.-J. Werner, P.J. Knowles, R. Lindh, F.R. Manby, M. Schütz, P. Celani, T. Korona, G. Rauhut, R.D. Amos, A. Bernhardsson, A. Berning, D.L. Cooper, M.J.O. Deegan, A.J. Dobbyn, F. Eckert, C. Hampel, G. Hetzer, A.W. Lloyd, S.J. McNicholas, W. Meyer, M.E. Mura, A. Nicklaß, P. Palmieri, R. Pitzer, U. Schumann, H. Stoll, A.J. Stone, R. Tarroni i T. Thorsteinsson. *MOLPRO is a package of ab initio programs*. Cardiff, UK, 2006.
- [27] H.-J. Werner, P.J. Knowles, G. Knizia, F. R. Manby, M. Schütz, P. Celani, T. Korona, R. Lindh, A. Mitrushenkov, G. Rauhut, K. R. Shamasundar, T.B. Adler, R.D. Amo, A. Bernhardsson, A. Berning, D.L. Cooper, M.J.O. Deegan, A.J. Dobbyn, F. Eckert, E. Goll, C. Hampel, A. Hesselmann, G. Hetzer, T. Hrenar, G. Jansen, C. Köppl, Y. Liu, A.W. Lloyd, R.A. Mata, A.J. May, S.J. McNicholas, W. Meyer, M.E. Mura, A. Nicklass, D.P. O'Neill, P. Palmieri, D. Peng, K. Pflüger, R. Pitzer, M. Reiher, T. Shiozaki, H. Stoll, A.J. Stone, R. Tarroni, T. Thorsteinsson i M. Wang. *MOLPRO is a package of ab initio programs*. Cardiff, UK, 2012.1.
- [28] L.D. Landau i J.M. Lifszyc. *Mechanika kwantowa. Teoria nierelatywistyczna*. Wydawnictwo Naukowe PWN, 2011.
- [29] F.A. Cotton. *Chemical Applications of Group Theory*. John Willey and Sons, Texas, 1990.
- [30] P. Kowalczyk. *Fizyka cząsteczek. Energie i widma*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2000.

- [31] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure. I. Spectra of Diatomic Molecules*. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida 1989.
- [32] H.-J. Werner i P.J. Knowles. *MOLPRO Users Manual Version 2012.1*. University College Cardiff, 2012.
- [33] L. Piela. *Idee chemii kwantowej*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 2006.
- [34] I. Mayer. *Simple theorems, proofs, and derivations in quantum chemistry*. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2003.
- [35] A. Shabo i N.S. Ostlund. *Modern Quantum Chemistry. Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*. Dover Publications, Inc, Mineola, New York 1996.
- [36] H. Haken i H. Ch. Wolf. *Fizyka molekularna z elementami chemii kwantowej*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa 1998.
- [37] J.M. Hollas. *Modern spectroscopy*. John Willey and Sons, 1998.
- [38] J.L. Dunham. *Phys. Rev.*, 41:721, 1932.
- [39] P. Atkins. *Chemia Fizyczna*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2012.
- [40] A.J. Thakkar. *J. Chem. Phys.*, 85:4509, 1986.
- [41] J.M. Brown i A. Carrington. *Rotational Spectroscopy of Diatomic Molecules*. Cambridge University Press, 2003.
- [42] S. Wilson. *Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry, Volume 3: Molecules in the Physicochemical Environment: Spectroscopy, Dynamics and Bulk Properties*. John Wiley and Sons, 2002.
- [43] H. Lefebvre-Brion i R.W. Field. *The Spectra and Dynamics of Diatomic Molecules*. Elsevier Academic Press, 2004.
- [44] K. Balasubramanian. *Relativistic Effects in Chemistry. Part A: Theory and Techniques*. John Wiley and Sons, 1997.
- [45] M. Dolg i X. Cao. *Chem. Rev.*, 112:403, 2012.
- [46] E. Czuchaj, M. Krośnicki i H. Stoll. *Chem. Phys.*, 263:7, 2001.
- [47] P. Łobacz, P. Jasik i J.E. Sienkiewicz. *Cent. Eur. J. Phys.*, 11(9):1107, 2013.
- [48] S. Soorkia, F. Le Quere, C. Leonard i D. Figen. *Mol. Phys.*, 105:1095, 2007.

- [49] H. Silberbach, P. Schwerdtfeger, H. Stoll i H. Preuss. *J. Phys. B: Mol. Phys.*, 19:501, 1986.
- [50] P. Fuentealba, H. Preuss, H. Stoll i L.V. Szentpaly. *Chem. Phys. Lett.*, 89:418, 1982..
- [51] L.V. Szentpaly, P. Fuentealba, H. Preuss i H. Stoll. *Chem. Phys. Lett.*, 93:555, 1982..
- [52] P. Fuentealba, H. Stoll, L.V. Szentpaly, P. Schwerdtfeger i H. Preuss. *J. Phys. B*, 16:L323, 1983..
- [53] D.B. Cook. *Handbook of Computational Quantum Chemistry*. Dover Publications, Inc., Mineola, New York, 2005.
- [54] P. Fuentealba, H. Preuss, H. Stoll i L.V. Szentpaly. *J. Phys. B*, 89:418, 1982..
- [55] B. Prascher, D.E. Woon, K.A. Peterson, T.H.Jr. Dunning i A.K. Wilson. *Theor. Chem. Acc.*, 128:69, 2011.
- [56] L.V. Szentpaly, P. Fuentealba, H. Preuss i H. Stoll. *Chem. Phys. Lett.*, 93:555, 1982..
- [57] P. Fuentealba, H. Stoll, L.V. Szentpaly, P. Schwerdtfeger i H. Preuss. *J. Phys. B*, 16:L323, 1983..
- [58] I.S. Lim, P. Schwerdtfeger, B. Metz, H. Stoll. *J. Chem. Phys.*, 122:104103, 2005.
- [59] W. Kołos. *Chemia kwantowa*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, 1978.
- [60] R.F. Nalewajski. *Podstawy i metody chemii kwantowej. Wykłady*. Wydawnictwo Naukowe PWN, Warszawa, 2001.
- [61] R. J. Le Roy. *LEVEL 8.0. A Computer Program for Solving the Radial Schrödinger Equation for Bound and Quasibound Levels*. University of Waterloo, Waterloo, Ontario N2L 3G1, Canada, 2012.
- [62] J.E. Sansonetti. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 37:1659, 2008..
- [63] J.E. Sansonetti. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 35:301, 2006.
- [64] J.E. Sansonetti. *J. Phys. Chem. Ref. Data Erratum*, 37:1183, 2008..
- [65] M. Wiatr, P. Jasik i J.E. Sienkiewicz. *Phys. Scr.*, 90:054012, 2015.
- [66] David J. Tannor. *Introduction to Quantum Mechanics. A Time-Dependent Perspective*. University Science Books. Sausalito, California, 2007.

- [67] O. Docenko, O. Nikolayeva, M. Tamanis, R. Ferber, E.A. Pazyuk i A.V. Stolyarov. *Phys. Rev. A*, 66:052508, 2002.
- [68] W.T. Zemke i W.C. Stwalley. *J. Chem. Phys.*, 114:10811, 2001.
- [69] M. Aymar i O. Dulieu. *J. Chem. Phys.*, 122:204302, 2005.
- [70] G. Igel-Mann, U. Wedig, P. Fuentealba i H. Stoll. *J. Chem. Phys.*, 84:5007, 1986.
- [71] M. Aymar i O. Dulieu. *Mol. Phys.*, 105:1733, 2007.
- [72] Nguyen Huy Bang, A. Grochola, W. Jastrzębski i P. Kowalczyk. *Opt. Mat.*, 31:527, 2009.
- [73] M. Wiatr, P. Jasik, T. Kilich, J.E. Sienkiewicz i H. Stoll. *wysłane do Physical Review Letters*, arXiv:1703.394, 2017.
- [74] Z. Kęcki. *Podstawy spektroskopii molekularnej*. Państwowe Wydawnictwo Naukowe, Warszawa, 1975.
- [75] P. Soldan. *J. Chem. Phys.*, 132:234308, 2010.
- [76] G. Herzberg. *Molecular Spectra and Molecular Structure. III. Electronic Spectra and Electronic Structure of Polyatomic Molecules*. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida 1991.
- [77] P. Soldan, M.T. Cvitas i J.M. Hutson. *Phys. Rev. A*, 67:054702, 2003.

# Załączniki

## A. Potencjały nierelatywistyczne cząsteczki NaRb

Tab. A.1. Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb  $(1-9)^1\Sigma^+$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	$1^1\Sigma^+$	$2^1\Sigma^+$	$3^1\Sigma^+$	$4^1\Sigma^+$	$5^1\Sigma^+$	$6^1\Sigma^+$	$7^1\Sigma^+$	$8^1\Sigma^+$	$9^1\Sigma^+$
86,0	0,00	12739,48	16967,03	19357,64	20128,52	23764,64	25700,41	25737,54	26307,59
84,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,52	23764,63	25700,40	25737,54	26307,57
82,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,52	23764,63	25700,40	25737,53	26307,56
80,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,51	23764,61	25700,39	25737,52	26307,55
78,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,63	20128,51	23764,60	25700,38	25737,52	26307,53
76,0	0,00	12739,46	16967,03	19357,63	20128,50	23764,58	25700,37	25737,51	26307,51
74,0	0,00	12739,46	16967,03	19357,63	20128,50	23764,57	25700,36	25737,50	26292,95
72,0	0,00	12739,45	16967,03	19357,63	20128,49	23764,55	25700,34	25737,49	26210,11
70,0	0,00	12739,45	16967,03	19357,62	20128,48	23764,52	25700,32	25737,47	26122,48
68,0	0,00	12739,44	16967,04	19357,61	20128,47	23764,50	25700,30	25737,46	26029,65
66,0	-0,01	12739,43	16967,04	19357,61	20128,46	23764,46	25700,26	25737,43	25931,12
64,0	-0,01	12739,42	16967,04	19357,60	20128,44	23764,41	25700,22	25737,41	25826,37
62,0	-0,01	12739,41	16967,04	19357,59	20128,42	23764,36	25699,83	25715,08	25737,37
60,0	-0,01	12739,39	16967,04	19357,58	20128,39	23764,28	25583,88	25700,20	25737,33
58,0	-0,02	12739,37	16967,05	19357,57	20128,36	23764,18	25467,93	25700,10	25737,28
56,0	-0,02	12739,34	16967,05	19357,55	20128,32	23764,05	25331,09	25700,01	25737,21
54,0	-0,03	12739,31	16967,05	19357,53	20128,26	23763,87	25183,86	25699,91	25737,12
52,5	-0,03	12739,27	16967,06	19357,50	20128,21	23763,69	25065,90	25699,84	25737,04
48,0	-0,05	12739,12	16967,07	19357,40	20127,97	23762,73	24666,64	25699,84	25736,66
46,0	-0,07	12739,01	16967,08	19357,32	20127,80	23761,76	24463,68	25700,16	25736,39
44,0	-0,09	12738,87	16967,09	19357,22	20127,56	23759,51	24242,78	25700,99	25736,02
42,0	-0,12	12738,66	16967,10	19357,08	20127,22	23751,12	24006,06	25702,75	25735,50
40,0	-0,16	12738,38	16967,11	19356,87	20126,72	23669,63	23817,39	25706,17	25734,77
39,0	-0,19	12738,19	16967,11	19356,73	20126,39	23546,55	23794,92	25708,85	25734,28
38,0	-0,22	12737,96	16967,11	19356,55	20125,97	23399,02	23789,34	25712,43	25733,70
37,0	-0,26	12737,69	16967,11	19356,33	20125,44	23238,43	23788,82	25717,11	25732,99
36,0	-0,31	12737,36	16967,11	19356,04	20124,76	23066,81	23790,87	25723,17	25732,12
35,0	-0,36	12736,95	16967,11	19355,66	20123,86	22884,35	23794,93	25730,52	25731,42
34,0	-0,43	12736,45	16967,09	19355,16	20122,65	22690,69	23800,99	25729,62	25740,66
33,0	-0,52	12735,83	16967,06	19354,47	20120,94	22485,37	23809,31	25727,89	25752,65
32,0	-0,63	12735,04	16967,02	19353,48	20118,45	22267,95	23820,26	25725,65	25767,22
31,0	-0,76	12734,05	16966,94	19352,04	20114,67	22038,22	23834,29	25722,70	25784,60
30,5	-0,84	12733,46	16966,89	19351,05	20112,02	21918,80	23842,63	25720,87	25794,39
30,0	-0,93	12732,79	16966,82	19349,80	20108,63	21796,51	23851,94	25718,73	25804,93
29,5	-1,04	12732,03	16966,74	19348,22	20104,23	21671,56	23862,28	25716,22	25816,21
29,0	-1,15	12731,16	16966,64	19346,18	20098,45	21544,34	23873,73	25713,26	25828,22
28,5	-1,28	12730,16	16966,51	19343,50	20090,74	21415,45	23886,34	25709,74	25840,93
28,0	-1,43	12729,02	16966,35	19339,94	20080,31	21285,82	23900,16	25705,52	25854,29
27,5	-1,60	12727,70	16966,14	19335,11	20065,99	21156,89	23915,25	25700,42	25868,25
27,0	-1,80	12726,17	16965,88	19328,45	20046,15	21030,82	23931,64	25694,21	25882,73
26,5	-2,02	12724,39	16965,56	19319,03	20018,51	20910,68	23949,35	25686,59	25897,64
26,0	-2,28	12722,30	16965,16	19305,39	19980,41	20800,59	23968,39	25677,14	25912,84
25,5	-2,57	12719,85	16964,64	19285,10	19929,63	20705,17	23988,72	25665,33	25928,21
25,0	-2,91	12716,94	16963,99	19254,17	19866,35	20628,22	24010,31	25650,43	25943,58
24,5	-3,31	12713,46	16963,16	19206,46	19795,38	20571,13	24033,06	25631,49	25958,79
24,0	-3,77	12709,28	16962,10	19134,14	19726,07	20532,44	24056,89	25607,18	25973,65
23,5	-4,31	12704,22	16960,73	19030,80	19668,05	20509,10	24081,62	25575,79	25987,98
23,0	-4,95	12698,03	16958,97	18895,39	19625,74	20497,93	24107,08	25535,04	26001,58
22,5	-5,70	12690,40	16956,67	18732,08	19597,83	20496,39	24133,03	25482,06	26014,27

R	1 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	2 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	3 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	4 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	5 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	6 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	7 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	8 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	9 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>
22,0	-6,60	12680,92	16953,67	18546,63	19580,74	20502,73	24159,21	25413,45	26025,85
21,5	-7,67	12669,02	16949,73	18344,02	19571,20	20515,83	24185,28	25325,56	26036,12
21,0	-8,96	12653,96	16944,53	18128,02	19566,88	20535,05	24210,87	25215,15	26044,89
20,5	-10,52	12634,76	16937,63	17901,60	19566,20	20560,10	24235,55	25080,20	26051,90
20,0	-12,44	12610,08	16928,46	17667,34	19568,10	20590,91	24258,84	24920,59	26056,89
19,8	-13,32	12598,29	16923,99	17572,02	19569,41	20604,88	24267,62	24850,20	26058,24
19,6	-14,28	12585,22	16918,96	17476,03	19570,97	20619,79	24276,05	24776,34	26059,18
19,4	-15,33	12570,69	16913,32	17379,57	19572,73	20635,67	24284,06	24699,26	26059,69
19,2	-16,48	12554,55	16906,97	17282,83	19574,68	20652,53	24291,58	24619,24	26059,72
19,0	-17,73	12536,61	16899,84	17186,04	19576,77	20670,41	24298,50	24536,62	26059,24
18,8	-19,10	12516,64	16891,79	17089,46	19578,97	20689,32	24304,52	24451,92	26058,20
18,6	-20,61	12494,43	16882,65	16993,41	19581,26	20709,29	24307,79	24367,26	26056,56
18,4	-22,27	12469,71	16871,24	16899,22	19583,60	20730,34	24268,33	24322,87	26054,24
18,2	-24,09	12442,21	16802,11	16862,51	19585,97	20752,49	24180,78	24324,36	26051,19
18,0	-26,10	12411,62	16709,31	16849,39	19588,32	20775,79	24089,46	24327,66	26047,32
17,8	-28,33	12377,62	16617,84	16835,06	19590,64	20800,25	23996,88	24330,53	26042,54
17,6	-30,79	12339,86	16528,29	16819,06	19592,88	20825,91	23903,66	24332,60	26036,73
17,4	-33,52	12297,99	16441,10	16801,17	19595,01	20852,80	23810,21	24333,71	26029,77
17,2	-36,55	12251,63	16356,66	16781,16	19597,00	20880,93	23716,94	24333,73	26021,50
17,0	-39,93	12200,40	16275,36	16758,79	19598,81	20910,35	23624,21	24332,50	26011,77
16,8	-43,69	12143,91	16197,59	16733,81	19600,38	20941,08	23532,43	24329,89	26000,05
16,6	-47,89	12081,80	16123,72	16705,97	19601,69	20973,13	23441,97	24325,72	25981,51
16,4	-52,59	12013,71	16054,09	16674,99	19602,67	21006,54	23353,24	24319,80	25944,84
16,2	-57,86	11939,32	15989,02	16640,59	19603,28	21041,32	23266,64	24311,92	25904,63
16,0	-63,76	11858,35	15928,76	16602,49	19603,45	21077,49	23182,53	24302,49	25866,39
15,8	-70,40	11770,56	15873,49	16560,43	19603,11	21115,07	23101,31	24289,18	25816,64
15,6	-77,87	11675,78	15823,32	16514,14	19602,19	21154,06	23023,31	24273,71	25768,87
15,4	-86,30	11573,89	15778,25	16463,42	19600,61	21194,48	22948,83	24255,36	25719,00
15,2	-95,80	11464,86	15738,15	16408,13	19598,27	21236,33	22878,12	24232,56	25665,10
15,0	-106,53	11348,71	15702,71	16348,24	19595,06	21279,62	22811,35	24206,00	25609,32
14,8	-118,67	11225,54	15671,43	16283,90	19590,86	21324,35	22748,57	24174,77	25550,91
14,6	-132,41	11095,51	15643,44	16215,57	19585,53	21370,53	22689,72	24138,35	25489,87
14,4	-147,98	10958,84	15617,41	16144,16	19578,91	21418,17	22634,57	24096,21	25426,16
14,2	-165,63	10815,82	15591,17	16071,43	19570,82	21467,25	22582,71	24047,86	25359,67
14,0	-185,66	10666,79	15561,28	16000,39	19561,05	21517,75	22533,56	23992,93	25290,29
13,8	-208,40	10512,12	15522,69	15935,73	19549,36	21569,60	22486,32	23931,17	25218,01
13,6	-234,20	10352,27	15469,40	15883,08	19535,47	21622,63	22440,08	23862,52	25143,13
13,4	-263,50	10187,69	15397,13	15846,42	19519,09	21676,46	22393,87	23787,14	25066,41
13,2	-296,76	10018,92	15305,75	15825,62	19499,84	21730,32	22346,95	23705,41	24989,01
13,0	-334,50	9846,50	15198,23	15817,54	19477,34	21782,55	22299,27	23618,36	24916,22
12,8	-377,29	9671,04	15078,05	15818,60	19451,13	21829,52	22252,65	23525,63	24837,48
12,6	-425,78	9493,16	14948,04	15825,94	19420,72	21863,37	22213,12	23429,56	24765,46
12,4	-480,65	9313,56	14810,30	15837,51	19385,53	21869,91	22192,85	23331,23	24696,56
12,2	-542,64	9132,93	14666,47	15851,86	19344,96	21837,31	22201,36	23232,77	24630,48
12,0	-612,54	8952,01	14517,91	15867,91	19298,36	21770,10	22230,95	23137,43	24566,36
11,8	-691,19	8771,59	14365,88	15884,86	19245,04	21679,76	22265,20	23050,34	24502,76
11,6	-779,45	8592,45	14211,55	15902,12	19184,30	21574,11	22288,71	22979,21	24437,82
11,4	-878,17	8415,42	14056,12	15919,29	19115,44	21457,63	22287,66	22933,07	24369,22
11,2	-988,20	8241,31	13900,80	15936,16	19037,82	21333,24	22253,86	22916,08	24294,44
11,0	-1110,33	8070,93	13746,83	15952,74	18950,87	21203,20	22189,85	22921,31	24211,22
10,8	-1245,27	7905,11	13595,49	15969,26	18854,21	21069,42	22105,06	22934,30	24118,40
10,6	-1393,62	7744,64	13448,10	15986,17	18747,62	20933,61	22008,76	22940,82	24016,09
10,4	-1555,78	7590,32	13306,01	16004,21	18631,19	20797,36	21907,49	22930,93	23905,20
10,2	-1731,97	7442,92	13170,60	16024,37	18505,33	20662,18	21805,64	22900,01	23786,94
10,0	-1922,13	7303,26	13043,29	16047,93	18370,83	20529,51	21706,25	22848,36	23662,66
9,8	-2125,90	7172,19	12925,49	16076,41	18228,91	20400,85	21611,66	22779,59	23533,85
9,6	-2342,56	7050,66	12818,68	16111,59	18081,22	20277,73	21523,81	22698,87	23402,26

R	1 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	2 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	3 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	4 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	5 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	6 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	7 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	8 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>	9 <sup>1</sup> Σ <sup>+</sup>
9,4	-2571,02	6939,76	12724,35	16155,44	17929,83	20161,90	21444,46	22611,75	23269,99
9,2	-2809,73	6840,83	12644,08	16210,10	17777,28	20055,30	21375,33	22523,68	23109,13
9,0	-3056,70	6755,45	12579,58	16277,83	17626,49	19960,23	21318,21	22439,93	22953,92
8,8	-3309,41	6685,62	12532,72	16360,99	17480,85	19879,38	21275,00	22365,65	22808,96
8,6	-3564,80	6633,75	12505,62	16461,94	17344,17	19815,89	21247,83	22306,07	22677,52
8,4	-3819,23	6602,79	12500,75	16583,04	17220,77	19773,43	21239,13	22266,57	22563,37
8,2	-4068,41	6596,27	12521,04	16726,44	17115,71	19756,21	21251,71	22252,73	22470,88
8,0	-4307,35	6618,39	12569,93	16891,88	17037,21	19769,04	21288,95	22270,34	22405,17
7,8	-4530,30	6674,05	12651,52	16968,42	17104,98	19817,34	21354,93	22325,16	22372,25
7,6	-4730,65	6768,91	12770,61	16954,47	17330,58	19907,14	21454,63	22379,31	22422,45
7,4	-4900,88	6909,44	12932,78	16979,11	17596,34	20045,10	21594,12	22435,02	22564,82
7,2	-5032,46	7102,95	13144,41	17053,69	17904,12	20238,46	21780,64	22549,71	22743,61
7,0	-5115,80	7357,58	13412,70	17187,47	18259,94	20495,07	22022,55	22734,65	22951,35
6,8	-5140,25	7682,27	13745,55	17390,34	18671,48	20823,33	22329,27	23000,40	23216,08
6,6	-5094,03	8086,72	14151,53	17673,01	19147,89	21232,15	22711,05	23355,79	23559,50
6,4	-4964,42	8581,14	14639,58	18047,05	19699,63	21730,87	23178,73	23809,04	23995,76
6,2	-4737,92	9176,00	15218,75	18524,69	20338,13	22329,06	23743,41	24368,91	24537,69
6,0	-4400,59	9881,58	15897,69	19118,63	21075,32	23036,19	24416,14	25044,66	25197,79
5,8	-3938,62	10707,30	16684,09	19841,63	21922,99	23861,11	25207,38	25845,29	25987,95
5,6	-3339,11	11660,88	17583,94	20705,79	22892,02	24811,28	26126,49	26778,39	26918,67
5,4	-2591,11	12747,16	18600,85	21721,64	23991,51	25891,79	27180,98	27848,85	27998,01
5,2	-1686,92	13966,94	19735,46	22896,64	25227,96	27104,41	28375,60	29057,40	29230,36
5,0	-623,52	15315,73	20985,14	24233,39	26604,62	28446,72	29711,37	30399,32	30615,15
4,8	596,11	16783,10	22344,02	25727,58	28121,26	29912,09	31184,70	31863,82	32145,80
4,6	1962,21	18352,92	23803,25	27366,51	29774,57	31490,54	32786,68	33434,88	33809,14



**Tab. A.2.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb  $(1-9)^3\Sigma^+$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	$1^3\Sigma^+$	$2^3\Sigma^+$	$3^3\Sigma^+$	$4^3\Sigma^+$	$5^3\Sigma^+$	$6^3\Sigma^+$	$7^3\Sigma^+$	$8^3\Sigma^+$	$9^3\Sigma^+$
86,0	0,00	12739,48	16967,03	19357,64	20128,52	23764,64	25700,41	25737,54	26307,59
84,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,52	23764,63	25700,40	25737,54	26307,57
82,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,52	23764,63	25700,40	25737,53	26307,56
80,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,64	20128,51	23764,61	25700,39	25737,52	26307,55
78,0	0,00	12739,47	16967,03	19357,63	20128,51	23764,60	25700,38	25737,52	26307,53
76,0	0,00	12739,46	16967,03	19357,63	20128,50	23764,58	25700,37	25737,51	26307,51
74,0	0,00	12739,46	16967,03	19357,63	20128,50	23764,57	25700,36	25737,50	26307,48
72,0	0,00	12739,45	16967,03	19357,63	20128,49	23764,55	25700,34	25737,49	26307,45
70,0	0,00	12739,45	16967,03	19357,62	20128,48	23764,52	25700,32	25737,47	26307,42
68,0	0,00	12739,44	16967,04	19357,61	20128,47	23764,50	25700,30	25737,46	26307,37
66,0	-0,01	12739,43	16967,04	19357,61	20128,46	23764,46	25700,26	25737,43	26307,31
64,0	-0,01	12739,42	16967,04	19357,60	20128,44	23764,41	25700,22	25737,41	26307,23
62,0	-0,01	12739,41	16967,04	19357,59	20128,42	23764,36	25700,16	25737,37	26307,14
60,0	-0,01	12739,39	16967,04	19357,58	20128,39	23764,28	25700,09	25737,33	26307,02
58,0	-0,02	12739,37	16967,05	19357,57	20128,36	23764,18	25699,98	25737,28	26306,85
56,0	-0,02	12739,34	16967,05	19357,55	20128,32	23764,05	25699,83	25737,21	26306,64
54,0	-0,03	12739,31	16967,05	19357,53	20128,26	23763,87	25699,61	25737,12	26306,34
52,5	-0,03	12739,27	16967,06	19357,50	20128,21	23763,70	25699,39	25737,04	26306,04
48,0	-0,05	12739,12	16967,07	19357,40	20127,97	23762,88	25698,15	25736,66	26304,53
46,0	-0,07	12739,01	16967,08	19357,32	20127,80	23762,25	25697,08	25736,39	26303,36
44,0	-0,09	12738,87	16967,09	19357,22	20127,56	23761,34	25695,39	25736,02	26301,67
42,0	-0,12	12738,66	16967,10	19357,08	20127,22	23759,95	25692,68	25735,50	26299,26
40,0	-0,16	12738,38	16967,11	19356,87	20126,74	23757,81	25688,33	25734,77	26295,92
39,0	-0,19	12738,19	16967,11	19356,73	20126,41	23756,33	25685,27	25734,29	26293,84
38,0	-0,22	12737,96	16967,11	19356,56	20126,02	23754,47	25681,43	25733,71	26291,48
37,0	-0,26	12737,69	16967,12	19356,35	20125,54	23752,13	25676,66	25733,00	26288,86
36,0	-0,31	12737,36	16967,11	19356,08	20124,95	23749,19	25670,75	25732,14	26286,01
35,0	-0,36	12736,95	16967,11	19355,74	20124,21	23745,48	25663,51	25731,08	26283,02
34,0	-0,43	12736,45	16967,09	19355,31	20123,28	23740,84	25654,75	25729,76	26280,01
33,0	-0,52	12735,83	16967,06	19354,75	20122,11	23735,03	25644,28	25728,13	26277,16
32,0	-0,63	12735,05	16967,02	19354,03	20120,64	23727,79	25631,98	25726,07	26274,69
31,0	-0,76	12734,07	16966,94	19353,08	20118,75	23718,84	25617,77	25723,46	26272,84
30,5	-0,84	12733,48	16966,89	19352,50	20117,62	23713,63	25609,95	25721,91	26272,23
30,0	-0,93	12732,82	16966,83	19351,82	20116,34	23707,89	25601,68	25720,15	26271,86
29,5	-1,04	12732,07	16966,75	19351,04	20114,88	23701,57	25592,98	25718,15	26271,78
29,0	-1,15	12731,21	16966,65	19350,13	20113,23	23694,66	25583,88	25715,88	26272,00
28,5	-1,28	12730,24	16966,53	19349,07	20111,36	23687,14	25574,41	25713,31	26272,54
28,0	-1,43	12729,14	16966,38	19347,82	20109,24	23679,00	25564,61	25710,39	26273,42
27,5	-1,60	12727,87	16966,20	19346,37	20106,85	23670,26	25554,52	25707,05	26274,65
27,0	-1,80	12726,42	16965,97	19344,67	20104,14	23660,94	25544,17	25703,26	26276,23
26,5	-2,02	12724,75	16965,68	19342,67	20101,08	23651,11	25533,59	25698,93	26278,18
26,0	-2,28	12722,83	16965,33	19340,32	20097,64	23640,85	25522,77	25694,00	26280,46
25,5	-2,57	12720,61	16964,90	19337,56	20093,78	23630,28	25511,68	25688,38	26283,07
25,0	-2,91	12718,03	16964,38	19334,31	20089,48	23619,56	25500,25	25681,96	26285,97
24,5	-3,30	12715,05	16963,73	19330,48	20084,69	23608,88	25488,36	25674,66	26289,10
24,0	-3,76	12711,57	16962,94	19325,96	20079,39	23598,49	25475,78	25666,34	26292,37
23,5	-4,29	12707,51	16961,97	19320,63	20073,58	23588,67	25462,19	25656,90	26295,62
23,0	-4,92	12702,76	16960,78	19314,34	20067,23	23579,73	25447,11	25646,22	26298,58
22,5	-5,65	12697,20	16959,32	19306,92	20060,36	23572,06	25429,86	25634,18	26300,70
22,0	-6,52	12690,66	16957,53	19298,17	20053,01	23566,05	25409,50	25620,71	26300,81
21,5	-7,54	12682,97	16955,36	19287,88	20045,23	23562,14	25384,70	25605,77	26296,09
21,0	-8,76	12673,92	16952,70	19275,81	20037,08	23560,78	25353,76	25589,46	26279,99
20,5	-10,21	12663,23	16949,48	19261,70	20028,68	23562,42	25314,50	25571,96	26244,10

R	$1^3\Sigma^+$	$2^3\Sigma^+$	$3^3\Sigma^+$	$4^3\Sigma^+$	$5^3\Sigma^+$	$6^3\Sigma^+$	$7^3\Sigma^+$	$8^3\Sigma^+$	$9^3\Sigma^+$
20,0	-11,94	12650,63	16945,57	19245,30	20020,12	23567,51	25264,45	25553,67	26192,10
19,8	-12,72	12644,97	16943,79	19238,03	20016,69	23570,59	25240,84	25546,24	26169,60
19,6	-13,56	12638,92	16941,88	19230,33	20013,25	23574,32	25214,96	25538,81	26147,08
19,4	-14,47	12632,46	16939,82	19222,19	20009,83	23578,70	25186,66	25531,42	26124,97
19,2	-15,44	12625,55	16937,61	19213,58	20006,42	23583,75	25155,84	25524,11	26103,53
19,0	-16,49	12618,17	16935,24	19204,50	20003,04	23589,49	25122,42	25516,94	26082,96
18,8	-17,62	12610,28	16932,70	19194,91	19999,68	23595,93	25086,32	25509,97	26063,37
18,6	-18,84	12601,85	16929,99	19184,82	19996,34	23603,07	25047,52	25503,25	26044,81
18,4	-20,15	12592,84	16927,09	19174,19	19993,04	23610,90	25005,99	25496,86	26027,29
18,2	-21,56	12583,22	16924,01	19163,02	19989,76	23619,42	24961,73	25490,88	26010,77
18,0	-23,08	12572,94	16920,73	19151,29	19986,50	23628,62	24914,76	25485,38	25995,20
17,8	-24,72	12561,96	16917,26	19139,00	19983,25	23638,47	24865,12	25480,46	25980,49
17,6	-26,48	12550,23	16913,58	19126,11	19980,00	23648,93	24812,84	25476,24	25966,51
17,4	-28,38	12537,71	16909,70	19112,62	19976,74	23659,97	24757,95	25472,82	25953,15
17,2	-30,43	12524,34	16905,62	19098,52	19973,43	23671,51	24700,51	25470,34	25940,26
17,0	-32,63	12510,07	16901,34	19083,78	19970,05	23683,49	24640,54	25468,93	25927,68
16,8	-35,00	12494,84	16896,87	19068,40	19966,57	23695,81	24578,08	25468,76	25915,25
16,6	-37,55	12478,59	16892,23	19052,36	19962,94	23708,37	24513,17	25469,98	25902,80
16,4	-40,30	12461,25	16887,42	19035,64	19959,11	23721,01	24445,82	25472,77	25890,14
16,2	-43,25	12442,76	16882,47	19018,23	19955,02	23733,58	24376,07	25477,31	25877,08
16,0	-46,43	12423,04	16877,41	19000,10	19950,59	23745,89	24303,94	25483,78	25863,45
15,8	-49,83	12402,01	16872,27	18981,23	19945,75	23757,67	24229,47	25492,37	25849,02
15,6	-53,48	12379,60	16867,07	18961,59	19940,39	23768,60	24152,74	25503,23	25833,62
15,4	-57,39	12355,71	16861,88	18941,17	19934,40	23778,22	24073,97	25516,49	25817,07
15,2	-61,57	12330,26	16856,73	18919,93	19927,66	23785,63	23993,70	25532,19	25799,23
15,0	-66,04	12303,14	16851,69	18897,84	19920,01	23788,28	23914,16	25550,22	25780,07
14,8	-70,81	12274,25	16846,82	18874,89	19911,29	23772,73	23848,38	25570,10	25759,89
14,6	-75,89	12243,48	16842,18	18851,04	19901,31	23709,88	23825,06	25590,37	25739,81
14,4	-81,28	12210,72	16837,83	18826,28	19889,84	23623,60	23819,86	25606,90	25723,51
14,2	-87,00	12175,85	16833,83	18800,61	19876,66	23530,61	23815,58	25610,20	25719,77
14,0	-93,06	12138,73	16830,24	18774,06	19861,51	23433,78	23808,86	25593,18	25734,59
13,8	-99,44	12099,25	16827,08	18746,68	19844,08	23333,80	23798,48	25561,13	25760,89
13,6	-106,14	12057,27	16824,35	18718,56	19824,06	23230,94	23783,63	25519,60	25790,02
13,4	-113,17	12012,65	16821,99	18689,88	19801,12	23125,32	23763,64	25470,58	25814,36
13,2	-120,49	11965,27	16819,89	18660,88	19774,90	23017,05	23737,90	25414,47	25824,10
13,0	-128,09	11915,01	16817,83	18631,94	19745,02	22906,23	23705,79	25351,12	25809,08
12,8	-135,93	11861,74	16815,45	18603,58	19711,12	22792,96	23666,75	25280,15	25767,25
12,6	-143,97	11805,37	16812,25	18576,51	19672,84	22677,38	23620,25	25201,12	25704,73
12,4	-152,13	11745,83	16807,51	18551,70	19629,83	22559,62	23565,83	25113,58	25627,87
12,2	-160,35	11683,05	16800,26	18530,36	19581,81	22439,87	23503,08	25017,22	25540,61
12,0	-168,52	11617,03	16789,27	18514,03	19528,57	22318,33	23431,75	24911,83	25445,15
11,8	-176,51	11547,80	16773,06	18504,48	19470,03	22195,22	23351,68	24797,40	25342,85
11,6	-184,19	11475,44	16749,96	18503,71	19406,25	22070,79	23262,88	24674,15	25234,59
11,4	-191,34	11400,11	16718,25	18513,73	19337,57	21945,32	23165,56	24542,50	25120,95
11,2	-197,75	11322,04	16676,29	18536,25	19264,73	21819,13	23060,08	24403,07	25002,43
11,0	-203,14	11241,56	16622,77	18572,18	19189,25	21692,58	22947,06	24256,68	24879,44
10,8	-207,17	11159,09	16556,85	18620,43	19114,48	21566,12	22827,31	24104,25	24751,23
10,6	-209,44	11075,20	16478,27	18674,31	19049,11	21440,28	22701,87	23946,85	24586,83
10,4	-209,48	10990,59	16387,33	18711,18	19017,47	21315,77	22572,05	23785,67	24420,99
10,2	-206,71	10906,11	16284,87	18695,08	19056,97	21193,57	22439,38	23621,99	24254,37
10,0	-200,44	10822,81	16172,18	18632,76	19161,98	21075,07	22305,68	23457,25	24087,82
9,8	-189,86	10741,96	16050,91	18551,80	19305,60	20962,41	22173,07	23293,06	23922,44
9,6	-174,02	10665,06	15923,06	18465,50	19474,01	20859,15	22044,09	23131,20	23759,58
9,4	-151,78	10593,87	15790,95	18379,83	19657,98	20771,92	21921,81	22973,72	23600,89
9,2	-121,81	10530,50	15657,17	18298,55	19843,23	20714,61	21810,24	22822,93	23448,35
9,0	-82,52	10477,39	15524,66	18224,82	20000,05	20716,32	21715,30	22681,49	23304,29
8,8	-32,07	10437,41	15396,67	18161,77	20088,08	20813,09	21647,78	22552,52	23171,45

R	$1^3\Sigma^+$	$2^3\Sigma^+$	$3^3\Sigma^+$	$4^3\Sigma^+$	$5^3\Sigma^+$	$6^3\Sigma^+$	$7^3\Sigma^+$	$8^3\Sigma^+$	$9^3\Sigma^+$
8,6	31,70	10413,88	15276,85	18112,70	20107,47	20986,62	21633,16	22439,78	23053,02
8,4	111,30	10410,68	15169,22	18081,30	20097,08	21146,27	21730,69	22348,55	22952,68
8,2	209,66	10432,27	15078,27	18071,65	20086,27	21227,51	21976,24	22292,25	22874,68
8,0	330,16	10483,79	15008,96	18088,42	20091,09	21272,15	22178,91	22418,82	22823,88
7,8	476,67	10571,16	14966,77	18136,87	20122,07	21325,77	22197,41	22805,84	22824,78
7,6	653,65	10701,16	14957,77	18222,96	20187,98	21409,34	22233,40	22826,89	23224,49
7,4	866,14	10881,50	14988,65	18353,45	20297,37	21534,83	22313,17	22894,18	23400,90
7,2	1119,84	11120,93	15066,74	18535,93	20459,22	21711,70	22446,91	23015,79	23568,45
7,0	1421,13	11429,30	15200,05	18778,89	20683,22	21948,92	22644,06	23200,73	23791,94
6,8	1777,04	11817,60	15397,23	19091,75	20979,92	22255,67	22914,67	23458,99	24086,23
6,6	2195,21	12297,87	15667,55	19484,83	21360,77	22641,55	23269,57	23801,47	24462,99
6,4	2683,82	12883,11	16020,79	19969,24	21838,02	23116,62	23720,36	24239,78	24933,89
6,2	3251,34	13586,79	16467,08	20556,63	22424,59	23691,30	24279,14	24785,98	25510,88
6,0	3906,30	14422,23	17016,79	21258,90	23133,61	24376,15	24958,04	25452,12	26206,01
5,8	4656,89	15401,29	17680,45	22087,55	23977,95	25181,51	25768,54	26249,53	27030,82
5,6	5510,49	16532,04	18469,24	23052,92	24969,35	26117,01	26720,58	27188,02	27995,61
5,4	6473,05	17814,32	19397,04	24163,03	26117,19	27190,75	27821,40	28274,83	29108,29
5,2	7548,49	19230,02	20487,27	25422,22	27426,96	28408,35	29074,44	29513,35	30373,07
5,0	8738,12	20725,64	21787,44	26829,61	28898,14	29771,92	30478,16	30901,89	31788,92
4,8	10040,32	22223,27	23356,11	28377,70	30521,72	31279,48	32025,18	32432,56	33348,33
4,6	11450,54	23711,72	25171,91	30051,74	32277,76	32862,25	33701,96	34090,75	35036,70

**Tab. A.3.** Adyabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-5)<sup>1</sup>Π. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	1 <sup>1</sup> Π	2 <sup>1</sup> Π	3 <sup>1</sup> Π	4 <sup>1</sup> Π	5 <sup>1</sup> Π
86,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,42
84,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,42
82,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,41
80,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,66	25700,41
78,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,66	25700,40
76,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,65	25700,40
74,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,64	25700,39
72,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,64	25700,38
70,0	12739,47	16967,03	19357,64	23764,63	25700,37
68,0	12739,47	16967,03	19357,63	23764,62	25700,36
66,0	12739,47	16967,03	19357,63	23764,60	25700,35
64,0	12739,46	16967,03	19357,62	23764,58	25700,33
62,0	12739,46	16967,02	19357,62	23764,56	25700,30
60,0	12739,45	16967,02	19357,61	23764,54	25700,27
58,0	12739,44	16967,02	19357,60	23764,50	25700,23
56,0	12739,43	16967,02	19357,59	23764,46	25700,18
54,0	12739,42	16967,01	19357,57	23764,40	25700,11
52,5	12739,40	16967,01	19357,55	23764,35	25700,04
48,0	12739,35	16966,99	19357,49	23764,11	25699,70
46,0	12739,30	16966,98	19357,44	23763,95	25699,45
44,0	12739,25	16966,96	19357,37	23763,72	25699,09
42,0	12739,17	16966,94	19357,28	23763,42	25698,56
40,0	12739,07	16966,90	19357,16	23762,99	25697,76
39,0	12739,00	16966,88	19357,07	23762,72	25697,23
38,0	12738,92	16966,85	19356,97	23762,38	25696,56
37,0	12738,82	16966,82	19356,85	23761,99	25695,73
36,0	12738,71	16966,78	19356,71	23761,51	25694,70
35,0	12738,56	16966,73	19356,53	23760,92	25693,42
34,0	12738,39	16966,67	19356,31	23760,21	25691,82
33,0	12738,18	16966,59	19356,04	23759,34	25689,83
32,0	12737,91	16966,50	19355,70	23758,26	25687,35
31,0	12737,58	16966,37	19355,27	23756,94	25684,29
30,5	12737,39	16966,30	19355,01	23756,16	25682,50
30,0	12737,17	16966,21	19354,72	23755,29	25680,50
29,5	12736,92	16966,12	19354,40	23754,32	25678,30
29,0	12736,65	16966,01	19354,03	23753,23	25675,86
28,5	12736,33	16965,88	19353,61	23752,02	25673,16
28,0	12735,98	16965,74	19353,13	23750,67	25670,18
27,5	12735,58	16965,58	19352,59	23749,15	25666,90
27,0	12735,13	16965,39	19351,97	23747,45	25663,30
26,5	12734,61	16965,17	19351,26	23745,55	25659,35
26,0	12734,01	16964,91	19350,44	23743,42	25655,02
25,5	12733,34	16964,62	19349,50	23741,03	25650,29
25,0	12732,56	16964,27	19348,41	23738,35	25645,14
24,5	12731,67	16963,87	19347,16	23735,34	25639,53
24,0	12730,64	16963,39	19345,70	23731,97	25633,43
23,5	12729,45	16962,83	19344,01	23728,18	25626,81
23,0	12728,06	16962,17	19342,05	23723,92	25619,63
22,5	12726,44	16961,38	19339,77	23719,13	25611,83
22,0	12724,56	16960,44	19337,11	23713,74	25603,34
21,5	12722,35	16959,31	19334,02	23707,66	25594,06
21,0	12719,75	16957,96	19330,41	23700,78	25583,84
20,5	12716,69	16956,32	19326,20	23692,96	25572,50

R	1 <sup>1</sup> Π	2 <sup>1</sup> Π	3 <sup>1</sup> Π	4 <sup>1</sup> Π	5 <sup>1</sup> Π
20,0	12713,07	16954,33	19321,28	23684,03	25559,74
19,8	12711,44	16953,42	19319,10	23680,10	25554,16
19,6	12709,69	16952,43	19316,77	23675,94	25548,24
19,4	12707,82	16951,36	19314,29	23671,54	25541,97
19,2	12705,81	16950,20	19311,65	23666,86	25535,30
19,0	12703,66	16948,94	19308,84	23661,88	25528,16
18,8	12701,36	16947,57	19305,84	23656,58	25520,51
18,6	12698,88	16946,08	19302,66	23650,93	25512,27
18,4	12696,22	16944,45	19299,26	23644,89	25503,37
18,2	12693,36	16942,68	19295,64	23638,42	25493,72
18,0	12690,29	16940,76	19291,79	23631,47	25483,22
17,8	12686,99	16938,65	19287,68	23623,99	25471,74
17,6	12683,45	16936,34	19283,29	23615,93	25459,17
17,4	12679,63	16933,82	19278,62	23607,21	25445,35
17,2	12675,53	16931,06	19273,63	23597,76	25430,10
17,0	12671,12	16928,03	19268,30	23587,50	25413,24
16,8	12666,37	16924,70	19262,60	23576,32	25394,56
16,6	12661,25	16921,04	19256,52	23564,12	25373,81
16,4	12655,75	16917,01	19250,01	23550,77	25350,74
16,2	12649,84	16912,56	19243,04	23536,13	25325,05
16,0	12643,46	16907,64	19235,57	23520,04	25296,45
15,8	12636,61	16902,20	19227,56	23502,32	25264,62
15,6	12629,23	16896,16	19218,96	23482,77	25229,21
15,4	12621,29	16889,46	19209,73	23461,16	25189,90
15,2	12612,75	16881,98	19199,79	23437,27	25146,37
15,0	12603,56	16873,65	19189,09	23410,80	25098,32
14,8	12593,68	16864,33	19177,57	23381,47	25045,49
14,6	12583,05	16853,89	19165,14	23348,97	24987,71
14,4	12571,64	16842,17	19151,71	23312,97	24924,85
14,2	12559,37	16828,99	19137,22	23273,11	24856,89
14,0	12546,19	16814,12	19121,55	23229,07	24783,90
13,8	12532,04	16797,33	19104,63	23180,49	24706,02
13,6	12516,86	16778,33	19086,36	23127,07	24623,48
13,4	12500,56	16756,81	19066,64	23068,55	24536,56
13,2	12483,09	16732,40	19045,40	23004,71	24445,58
13,0	12464,35	16704,70	19022,58	22935,44	24350,83
12,8	12444,28	16673,24	18998,11	22860,71	24252,60
12,6	12422,76	16637,55	18972,00	22780,61	24151,12
12,4	12399,72	16597,06	18944,27	22695,35	24046,58
12,2	12375,06	16551,23	18914,98	22605,25	23939,11
12,0	12348,65	16499,48	18884,26	22510,69	23828,77
11,8	12320,39	16441,22	18852,32	22412,16	23715,65
11,6	12290,17	16375,92	18819,41	22310,13	23599,79
11,4	12257,86	16303,12	18785,88	22205,10	23481,29
11,2	12223,32	16222,48	18752,16	22097,52	23360,31
11,0	12186,43	16133,81	18718,72	21987,78	23237,05
10,8	12147,06	16037,15	18686,12	21876,20	23111,85
10,6	12105,11	15932,79	18655,00	21763,08	22985,11
10,4	12060,48	15821,35	18626,05	21648,66	22857,38
10,2	12013,10	15703,75	18600,03	21533,24	22729,28
10,0	11963,00	15581,31	18577,80	21417,21	22601,63
9,8	11910,26	15455,71	18560,29	21301,15	22475,37
9,6	11855,12	15328,99	18548,59	21185,93	22351,67
9,4	11797,98	15203,58	18543,88	21072,76	22231,95
9,2	11739,51	15082,24	18547,54	20963,29	22117,91
9,0	11680,69	14968,06	18561,11	20859,65	22011,64
8,8	11622,94	14864,43	18586,32	20764,56	21915,61

R	1 <sup>1</sup> Π	2 <sup>1</sup> Π	3 <sup>1</sup> Π	4 <sup>1</sup> Π	5 <sup>1</sup> Π
8,6	11568,20	14775,00	18625,14	20681,33	21832,75
8,4	11519,03	14703,69	18679,76	20613,91	21766,49
8,2	11478,73	14654,66	18752,63	20566,97	21720,76
8,0	11451,40	14632,33	18846,53	20545,92	21700,07
7,8	11442,03	14641,43	18964,55	20556,92	21709,53
7,6	11456,58	14687,00	19110,28	20606,93	21754,90
7,4	11501,94	14774,49	19287,92	20703,56	21842,62
7,2	11585,98	14909,78	19502,50	20855,01	21979,85
7,0	11717,56	15099,19	19760,17	21069,76	22174,54
6,8	11906,43	15349,47	20068,47	21356,24	22435,38
6,6	12163,15	15667,62	20436,35	21722,65	22771,81
6,4	12498,97	16060,76	20874,08	22176,66	23193,91
6,2	12925,56	16535,70	21392,73	22725,40	23712,29
6,0	13454,60	17098,53	22003,50	23375,35	24337,81
5,8	14097,31	17754,06	22716,85	24132,24	25081,16
5,6	14863,73	18505,21	23541,55	25001,02	25952,34
5,4	15761,84	19352,65	24483,70	25986,10	26959,66
5,2	16796,65	20294,74	25545,66	27091,87	28108,62
5,0	17969,22	21328,05	26725,60	28323,05	29400,53
4,8	19276,02	22448,53	28018,40	29683,88	30831,26
4,6	20708,79	23652,91	29418,77	31175,37	32390,60

**Tab. A.4.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-5)<sup>3</sup>Π. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	1 <sup>3</sup> Π	2 <sup>3</sup> Π	3 <sup>3</sup> Π	4 <sup>3</sup> Π	5 <sup>3</sup> Π
86,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,42
84,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,42
82,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,67	25700,41
80,0	12739,48	16967,03	19357,65	23764,66	25700,41
78,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,66	25700,40
76,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,65	25700,40
74,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,64	25700,39
72,0	12739,48	16967,03	19357,64	23764,64	25700,38
70,0	12739,47	16967,03	19357,64	23764,63	25700,37
68,0	12739,47	16967,03	19357,63	23764,62	25700,36
66,0	12739,47	16967,03	19357,63	23764,60	25700,35
64,0	12739,46	16967,03	19357,62	23764,58	25700,33
62,0	12739,46	16967,02	19357,62	23764,56	25700,30
60,0	12739,45	16967,02	19357,61	23764,54	25700,27
58,0	12739,44	16967,02	19357,60	23764,50	25700,23
56,0	12739,43	16967,02	19357,59	23764,46	25700,18
54,0	12739,42	16967,01	19357,57	23764,40	25700,11
52,5	12739,40	16967,01	19357,55	23764,35	25700,04
48,0	12739,35	16966,99	19357,49	23764,11	25699,70
46,0	12739,30	16966,98	19357,44	23763,95	25699,43
44,0	12739,25	16966,96	19357,37	23763,72	25699,05
42,0	12739,17	16966,94	19357,28	23763,42	25698,46
40,0	12739,07	16966,90	19357,16	23762,98	25697,52
39,0	12739,00	16966,88	19357,07	23762,70	25696,85
38,0	12738,92	16966,85	19356,97	23762,36	25695,97
37,0	12738,82	16966,82	19356,85	23761,95	25694,82
36,0	12738,71	16966,78	19356,71	23761,45	25693,28
35,0	12738,56	16966,73	19356,53	23760,83	25691,22
34,0	12738,39	16966,67	19356,31	23760,05	25688,42
33,0	12738,18	16966,59	19356,03	23759,07	25684,57
32,0	12737,91	16966,50	19355,69	23757,82	25679,22
31,0	12737,58	16966,37	19355,25	23756,21	25671,73
30,5	12737,39	16966,30	19354,99	23755,23	25666,90
30,0	12737,17	16966,21	19354,70	23754,10	25661,13
29,5	12736,92	16966,12	19354,36	23752,80	25654,24
29,0	12736,65	16966,01	19353,97	23751,30	25645,99
28,5	12736,33	16965,88	19353,53	23749,55	25636,08
28,0	12735,98	16965,74	19353,02	23747,51	25624,17
27,5	12735,58	16965,57	19352,44	23745,12	25609,82
27,0	12735,12	16965,38	19351,76	23742,31	25592,53
26,5	12734,60	16965,16	19350,97	23738,99	25571,69
26,0	12734,01	16964,90	19350,05	23735,05	25546,57
25,5	12733,33	16964,60	19348,96	23730,35	25516,38
25,0	12732,54	16964,25	19347,67	23724,72	25480,22
24,5	12731,64	16963,84	19346,13	23717,93	25437,15
24,0	12730,60	16963,34	19344,28	23709,70	25386,30
23,5	12729,38	16962,76	19342,06	23699,67	25326,90
23,0	12727,96	16962,06	19339,36	23687,37	25258,47
22,5	12726,30	16961,21	19336,07	23672,18	25180,88
22,0	12724,35	16960,17	19332,03	23653,28	25094,50
21,5	12722,03	16958,91	19327,04	23629,62	25000,22
21,0	12719,28	16957,34	19320,84	23599,80	24899,52
20,5	12715,98	16955,38	19313,09	23562,03	24794,47

R	1 <sup>3</sup> Π	2 <sup>3</sup> Π	3 <sup>3</sup> Π	4 <sup>3</sup> Π	5 <sup>3</sup> Π
20,0	12712,01	16952,91	19303,35	23514,10	24687,69
19,8	12710,19	16951,73	19298,78	23491,51	24645,17
19,6	12708,23	16950,44	19293,75	23466,73	24603,08
19,4	12706,10	16949,00	19288,22	23439,57	24561,61
19,2	12703,80	16947,41	19282,14	23409,89	24520,97
19,0	12701,29	16945,64	19275,45	23377,54	24481,34
18,8	12698,57	16943,67	19268,09	23342,42	24442,89
18,6	12695,61	16941,46	19259,97	23304,44	24405,75
18,4	12692,38	16938,99	19251,03	23263,57	24370,02
18,2	12688,85	16936,22	19241,18	23219,82	24335,76
18,0	12684,99	16933,11	19230,32	23173,24	24302,98
17,8	12680,77	16929,60	19218,37	23123,95	24271,66
17,6	12676,14	16925,63	19205,20	23072,10	24241,74
17,4	12671,05	16921,15	19190,71	23017,91	24213,10
17,2	12665,45	16916,06	19174,78	22961,61	24185,63
17,0	12659,27	16910,27	19157,29	22903,49	24159,15
16,8	12652,46	16903,67	19138,11	22843,87	24133,48
16,6	12644,92	16896,14	19117,12	22783,10	24108,43
16,4	12636,57	16887,52	19094,21	22721,53	24083,78
16,2	12627,30	16877,64	19069,26	22659,55	24059,30
16,0	12616,99	16866,29	19042,20	22597,56	24034,74
15,8	12605,51	16853,25	19012,97	22535,96	24009,86
15,6	12592,69	16838,22	18981,54	22475,16	23984,37
15,4	12578,38	16820,90	18947,96	22415,56	23958,00
15,2	12562,35	16800,93	18912,31	22357,55	23930,41
15,0	12544,37	16777,89	18874,76	22301,49	23901,27
14,8	12524,18	16751,34	18835,57	22247,71	23870,20
14,6	12501,45	16720,77	18795,10	22196,50	23836,78
14,4	12475,85	16685,66	18753,79	22148,09	23800,57
14,2	12446,96	16645,45	18712,20	22102,64	23761,04
14,0	12414,32	16599,60	18670,96	22060,21	23717,66
13,8	12377,39	16547,62	18630,78	22020,80	23669,84
13,6	12335,60	16489,07	18592,39	21984,26	23616,94
13,4	12288,26	16423,65	18556,53	21950,34	23558,34
13,2	12234,61	16351,21	18523,89	21918,64	23493,44
13,0	12173,84	16271,80	18495,10	21888,62	23421,73
12,8	12105,04	16185,71	18470,66	21859,55	23342,81
12,6	12027,22	16093,42	18451,00	21830,56	23256,52
12,4	11939,36	15995,66	18436,40	21800,56	23162,94
12,2	11840,40	15893,30	18427,05	21768,29	23062,43
12,0	11729,29	15787,35	18423,08	21732,32	22955,63
11,8	11605,03	15678,90	18424,55	21691,08	22843,39
11,6	11466,72	15569,01	18431,52	21642,95	22726,71
11,4	11313,59	15458,70	18444,05	21586,34	22606,67
11,2	11145,11	15348,89	18462,25	21519,81	22484,37
11,0	10960,97	15240,30	18486,28	21442,25	22360,89
10,8	10761,17	15133,54	18516,39	21352,91	22237,32
10,6	10546,00	15029,04	18552,88	21251,58	22114,74
10,4	10316,06	14927,09	18596,15	21138,56	21994,26
10,2	10072,28	14827,94	18646,66	21014,75	21877,05
10,0	9815,86	14731,82	18704,91	20881,61	21764,33
9,8	9548,31	14639,04	18771,34	20741,23	21657,35
9,6	9271,40	14550,05	18846,31	20596,37	21557,47
9,4	8987,17	14465,54	18929,83	20450,58	21466,13
9,2	8697,93	14386,51	19021,22	20308,56	21385,00
9,0	8406,29	14314,31	19118,25	20176,92	21315,99
8,8	8115,15	14250,71	19215,30	20066,06	21261,39



R	1 <sup>3</sup> Π	2 <sup>3</sup> Π	3 <sup>3</sup> Π	4 <sup>3</sup> Π	5 <sup>3</sup> Π
8,6	7827,77	14197,94	19299,78	19993,69	21223,94
8,4	7547,79	14158,74	19351,31	19985,75	21206,92
8,2	7279,25	14136,39	19360,03	20058,05	21214,23
8,0	7026,73	14134,75	19345,29	20197,73	21250,46
7,8	6795,31	14158,30	19334,83	20384,18	21320,92
7,6	6590,74	14212,12	19348,49	20605,56	21431,49
7,4	6419,40	14302,00	19400,11	20857,47	21588,38
7,2	6288,45	14434,38	19501,04	21140,15	21797,42
7,0	6205,85	14616,37	19662,01	21457,65	22063,33
6,8	6180,39	14855,74	19893,91	21817,34	22389,59
6,6	6221,68	15160,78	20208,10	22228,68	22779,36
6,4	6340,14	15540,17	20616,45	22701,10	23237,00
6,2	6546,82	16002,74	21131,20	23241,34	23769,93
6,0	6853,23	16557,05	21764,61	23850,97	24391,42
5,8	7271,03	17210,91	22528,42	24525,74	25121,62
5,6	7811,56	17970,71	23432,98	25261,33	25981,42
5,4	8485,29	18840,70	24486,19	26061,07	26983,27
5,2	9301,20	19822,17	25692,09	26935,75	28130,06
5,0	10266,06	20912,87	27048,87	27899,69	29418,50
4,8	11383,94	22106,79	28542,39	28973,74	30840,59
4,6	12656,02	23394,52	30048,02	30282,81	32383,60

**Tab. A.5.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb  $(1-2)^1\Delta$  i  $(1-2)^3\Delta$ .  
 Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ .  
 Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	$1^1\Delta$	$2^1\Delta$	$1^3\Delta$	$2^3\Delta$
86,0	19357,65	25700,43	19357,65	25700,43
84,0	19357,65	25700,43	19357,65	25700,43
82,0	19357,65	25700,43	19357,65	25700,42
80,0	19357,65	25700,42	19357,65	25700,42
78,0	19357,65	25700,42	19357,65	25700,42
76,0	19357,65	25700,42	19357,65	25700,42
74,0	19357,65	25700,42	19357,65	25700,42
72,0	19357,65	25700,41	19357,65	25700,41
70,0	19357,65	25700,41	19357,65	25700,41
68,0	19357,64	25700,40	19357,64	25700,40
66,0	19357,64	25700,40	19357,64	25700,40
64,0	19357,64	25700,39	19357,64	25700,39
62,0	19357,64	25700,38	19357,64	25700,38
60,0	19357,63	25700,37	19357,63	25700,36
58,0	19357,63	25700,35	19357,63	25700,35
56,0	19357,62	25700,33	19357,62	25700,32
54,0	19357,61	25700,30	19357,61	25700,29
52,5	19357,61	25700,27	19357,61	25700,27
48,0	19357,57	25700,15	19357,57	25700,14
46,0	19357,55	25700,06	19357,55	25700,05
44,0	19357,52	25699,93	19357,52	25699,93
42,0	19357,48	25699,76	19357,48	25699,76
40,0	19357,42	25699,51	19357,42	25699,51
39,0	19357,38	25699,35	19357,38	25699,35
38,0	19357,33	25699,16	19357,33	25699,16
37,0	19357,27	25698,93	19357,27	25698,93
36,0	19357,20	25698,64	19357,20	25698,64
35,0	19357,12	25698,30	19357,12	25698,30
34,0	19357,01	25697,87	19357,01	25697,87
33,0	19356,89	25697,35	19356,89	25697,35
32,0	19356,73	25696,70	19356,73	25696,70
31,0	19356,53	25695,88	19356,53	25695,89
30,5	19356,41	25695,40	19356,41	25695,41
30,0	19356,28	25694,86	19356,28	25694,87
29,5	19356,13	25694,25	19356,13	25694,27
29,0	19355,96	25693,57	19355,95	25693,59
28,5	19355,76	25692,80	19355,76	25692,83
28,0	19355,54	25691,93	19355,54	25691,97
27,5	19355,30	25690,95	19355,30	25691,00
27,0	19355,01	25689,83	19355,01	25689,90
26,5	19354,69	25688,57	19354,69	25688,66
26,0	19354,32	25687,14	19354,32	25687,24
25,5	19353,89	25685,50	19353,89	25685,64
25,0	19353,40	25683,64	19353,40	25683,81
24,5	19352,83	25681,51	19352,83	25681,73
24,0	19352,17	25679,07	19352,17	25679,35
23,5	19351,40	25676,27	19351,40	25676,62
23,0	19350,50	25673,04	19350,51	25673,48
22,5	19349,45	25669,32	19349,46	25669,86
22,0	19348,21	25665,01	19348,23	25665,69
21,5	19346,75	25660,00	19346,77	25660,86
21,0	19345,01	25654,17	19345,04	25655,23
20,5	19342,93	25647,34	19342,99	25648,66

R	1 <sup>1</sup> Δ	2 <sup>1</sup> Δ	1 <sup>3</sup> Δ	2 <sup>3</sup> Δ
20,0	19340,44	25639,31	19340,53	25640,96
19,8	19339,31	25635,71	19339,41	25637,51
19,6	19338,09	25631,86	19338,20	25633,81
19,4	19336,77	25627,74	19336,91	25629,87
19,2	19335,35	25623,32	19335,51	25625,64
19,0	19333,81	25618,58	19334,00	25621,10
18,8	19332,14	25613,49	19332,37	25616,23
18,6	19330,34	25608,02	19330,60	25610,99
18,4	19328,38	25602,13	19328,69	25605,36
18,2	19326,26	25595,78	19326,61	25599,29
18,0	19323,94	25588,93	19324,37	25592,74
17,8	19321,42	25581,52	19321,92	25585,67
17,6	19318,68	25573,50	19319,27	25578,01
17,4	19315,69	25564,82	19316,38	25569,70
17,2	19312,42	25555,38	19313,23	25560,68
17,0	19308,85	25545,12	19309,80	25550,87
16,8	19304,93	25533,94	19306,06	25540,18
16,6	19300,64	25521,74	19301,96	25528,51
16,4	19295,93	25508,40	19297,47	25515,75
16,2	19290,74	25493,79	19292,56	25501,76
16,0	19285,04	25477,75	19287,18	25486,41
15,8	19278,74	25460,12	19281,26	25469,52
15,6	19271,79	25440,69	19274,76	25450,91
15,4	19264,11	25419,26	19267,59	25430,37
15,2	19255,60	25395,56	19259,70	25407,66
15,0	19246,18	25369,33	19251,00	25382,51
14,8	19235,71	25340,24	19241,38	25354,64
14,6	19224,08	25307,94	19230,74	25323,69
14,4	19211,13	25272,04	19218,97	25289,32
14,2	19196,71	25232,11	19205,91	25251,11
14,0	19180,62	25187,67	19191,44	25208,62
13,8	19162,66	25138,22	19175,37	25161,40
13,6	19142,60	25083,20	19157,51	25108,93
13,4	19120,17	25022,07	19137,67	25050,71
13,2	19095,07	24954,25	19115,59	24986,21
13,0	19066,98	24879,19	19091,02	24914,93
12,8	19035,55	24796,41	19063,68	24836,38
12,6	19000,37	24705,49	19033,27	24750,17
12,4	18961,02	24606,18	18999,43	24655,95
12,2	18917,05	24498,38	18961,82	24553,54
12,0	18867,96	24382,24	18920,05	24442,90
11,8	18813,26	24258,14	18873,72	24324,16
11,6	18752,42	24126,71	18822,44	24197,67
11,4	18684,96	23988,79	18765,80	24063,96
11,2	18610,39	23845,44	18703,42	23923,79
11,0	18528,29	23697,83	18634,95	23778,08
10,8	18438,33	23547,25	18560,13	23627,93
10,6	18340,29	23395,02	18478,76	23474,56
10,4	18234,13	23242,52	18390,78	23319,33
10,2	18119,99	23091,11	18296,29	23163,68
10,0	17998,26	22942,20	18195,59	23009,16
9,8	17869,62	22797,22	18089,26	22857,41
9,6	17735,06	22657,70	17978,15	22710,21
9,4	17595,94	22525,25	17863,46	22569,43
9,2	17453,99	22401,69	17746,76	22437,18
9,0	17311,32	22289,06	17630,06	22315,74
8,8	17170,49	22189,70	17515,81	22207,70

R	$1^1\Delta$	$2^1\Delta$	$1^3\Delta$	$2^3\Delta$
8,6	17034,48	22106,32	17406,94	22115,98
8,4	16906,72	22042,00	17306,90	22043,90
8,2	16791,11	22000,28	17219,68	21995,25
8,0	16692,07	21985,11	17149,84	21974,36
7,8	16614,50	22000,87	17102,54	21986,13
7,6	16563,84	22052,06	17083,57	22036,16
7,4	16546,12	22143,28	17099,37	22130,73
7,2	16567,91	22279,05	17157,03	22276,87
7,0	16636,32	22464,59	17264,32	22482,39
6,8	16759,00	22707,52	17429,61	22755,87
6,6	16944,00	23018,68	17661,80	23106,61
6,4	17199,68	23410,79	17970,12	23544,54
6,2	17534,43	23896,85	18363,87	24080,10
6,0	17956,46	24489,34	18852,01	24723,84
5,8	18473,42	25199,87	19442,58	25486,06
5,6	19092,03	26038,70	20142,05	26376,01
5,4	19817,75	27014,01	20954,47	27400,96
5,2	20654,56	28131,00	21880,67	28565,05
5,0	21604,92	29390,91	22917,61	29868,04
4,8	22669,94	30790,34	24058,00	31304,27
4,6	23849,73	32321,38	25290,59	32862,24

## B. Potencjały relatywistyczne cząsteczki NaRb

Tab. B.1. Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9)  $0^+$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $cm^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(1) $0^+$	(2) $0^+$	(3) $0^+$	(4) $0^+$	(5) $0^+$	(6) $0^+$	(7) $0^+$	(8) $0^+$	(9) $0^+$
86,0	0,00	12579,55	12818,89	16953,82	16973,64	19357,38	19358,04	20128,52	23713,34
84,0	0,00	12579,55	12818,88	16953,82	16973,64	19357,38	19358,04	20128,52	23713,34
82,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,64	19357,38	19358,04	20128,52	23713,33
80,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,64	19357,38	19358,04	20128,51	23713,33
78,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,64	19357,37	19358,04	20128,51	23713,32
76,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,04	20128,50	23713,31
74,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,03	20128,50	23713,30
72,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,03	20128,49	23713,29
70,0	0,00	12579,53	12818,86	16953,82	16973,64	19357,36	19358,03	20128,48	23713,27
68,0	0,00	12579,53	12818,86	16953,82	16973,64	19357,36	19358,02	20128,47	23713,26
66,0	-0,01	12579,52	12818,85	16953,82	16973,64	19357,35	19358,02	20128,46	23713,24
64,0	-0,01	12579,52	12818,84	16953,82	16973,64	19357,35	19358,01	20128,44	23713,21
62,0	-0,01	12579,51	12818,83	16953,82	16973,64	19357,34	19358,00	20128,42	23713,18
60,0	-0,01	12579,50	12818,82	16953,82	16973,64	19357,33	19357,99	20128,39	23713,13
58,0	-0,02	12579,48	12818,80	16953,82	16973,64	19357,32	19357,98	20128,36	23713,07
56,0	-0,02	12579,47	12818,78	16953,82	16973,64	19357,30	19357,97	20128,32	23713,00
54,0	-0,03	12579,45	12818,75	16953,82	16973,64	19357,28	19357,95	20128,26	23712,91
52,5	-0,03	12579,43	12818,72	16953,82	16973,65	19357,26	19357,93	20128,21	23712,81
48,0	-0,05	12579,34	12818,60	16953,81	16973,65	19357,17	19357,85	20127,97	23712,34
46,0	-0,07	12579,28	12818,51	16953,80	16973,65	19357,10	19357,79	20127,80	23711,92
44,0	-0,09	12579,20	12818,40	16953,79	16973,65	19357,01	19357,72	20127,56	23711,06
42,0	-0,12	12579,09	12818,24	16953,78	16973,65	19356,88	19357,61	20127,22	23708,26
40,0	-0,16	12579,01	12818,05	16953,76	16973,65	19356,69	19357,46	20126,72	23662,76
39,0	-0,19	12578,85	12817,87	16953,74	16973,64	19356,57	19357,36	20126,39	23545,71
38,0	-0,22	12578,71	12817,68	16953,72	16973,64	19356,40	19357,25	20125,97	23398,80
37,0	-0,26	12578,55	12817,46	16953,70	16973,63	19356,20	19357,11	20125,44	23238,33
36,0	-0,31	12578,36	12817,20	16953,67	16973,62	19355,93	19356,95	20124,76	23066,77
35,0	-0,36	12578,14	12816,87	16953,63	16973,60	19355,57	19356,75	20123,86	22884,32
34,0	-0,43	12577,86	12816,47	16953,58	16973,57	19355,09	19356,51	20122,65	22690,67
33,0	-0,52	12577,52	12815,98	16953,52	16973,53	19354,41	19356,22	20120,94	22485,35
32,0	-0,63	12577,09	12815,36	16953,43	16973,47	19353,44	19355,86	20118,45	22267,94
31,0	-0,76	12576,55	12814,58	16953,32	16973,38	19352,01	19355,41	20114,67	22038,21
30,5	-0,84	12576,23	12814,12	16953,25	16973,33	19351,02	19355,14	20112,02	21918,80
30,0	-0,93	12575,87	12813,59	16953,17	16973,26	19349,78	19354,84	20108,63	21796,50
29,5	-1,04	12575,46	12813,00	16953,07	16973,17	19348,21	19354,50	20104,23	21671,55
29,0	-1,15	12574,99	12812,32	16952,96	16973,07	19346,16	19354,11	20098,45	21544,33
28,5	-1,28	12574,46	12811,55	16952,83	16972,95	19343,49	19353,66	20090,74	21415,44
28,0	-1,43	12573,86	12810,66	16952,67	16972,79	19339,93	19353,15	20080,31	21285,82
27,5	-1,60	12573,16	12809,64	16952,49	16972,61	19335,11	19352,57	20065,99	21156,89
27,0	-1,80	12572,35	12808,47	16952,27	16972,38	19328,44	19351,89	20046,15	21030,82
26,5	-2,02	12571,42	12807,11	16952,01	16972,09	19319,03	19351,10	20018,51	20910,68
26,0	-2,28	12570,34	12805,52	16951,69	16971,74	19305,39	19350,17	19980,41	20800,59
25,5	-2,57	12569,07	12803,66	16951,31	16971,31	19285,10	19349,07	19929,63	20705,17
25,0	-2,91	12567,57	12801,47	16950,85	16970,76	19254,17	19347,78	19866,35	20628,23
24,5	-3,31	12565,79	12798,89	16950,27	16970,09	19206,46	19346,24	19795,38	20571,13
24,0	-3,77	12563,66	12795,81	16949,56	16969,24	19134,14	19344,39	19726,08	20532,44
23,5	-4,31	12561,08	12792,12	16948,67	16968,17	19030,80	19342,16	19668,05	20509,10
23,0	-4,95	12557,93	12787,68	16947,53	16966,84	18895,40	19339,46	19625,74	20497,93
22,5	-5,70	12554,04	12782,30	16946,04	16965,18	18732,10	19336,16	19597,83	20496,40

R	(1) 0+	(2) 0+	(3) 0+	(4) 0+	(5) 0+	(6) 0+	(7) 0+	(8) 0+	(9) 0+
22,0	-6,60	12549,17	12775,75	16944,06	16963,12	18546,66	19332,12	19580,75	20502,73
21,5	-7,67	12542,96	12767,77	16941,35	16960,61	18344,05	19327,12	19571,21	20515,83
21,0	-8,96	12534,92	12758,03	16937,54	16957,65	18128,07	19320,91	19566,88	20535,06
20,5	-10,52	12524,29	12746,19	16932,08	16954,24	17901,66	19313,15	19566,20	20560,11
20,0	-12,44	12509,91	12731,95	16924,24	16950,41	17667,43	19303,40	19568,11	20590,92
19,8	-13,32	12502,74	12725,53	16920,23	16948,76	17572,12	19298,82	19569,41	20604,88
19,6	-14,28	12494,54	12718,71	16915,64	16947,02	17476,14	19293,78	19570,97	20619,79
19,4	-15,33	12485,15	12711,47	16910,39	16945,19	17379,69	19288,25	19572,74	20635,67
19,2	-16,48	12474,34	12703,85	16904,39	16943,23	17282,97	19282,16	19574,68	20652,54
19,0	-17,73	12461,89	12695,87	16897,57	16941,13	17186,20	19275,46	19576,77	20670,42
18,8	-19,10	12447,51	12687,58	16889,80	16938,86	17089,65	19268,09	19578,98	20689,33
18,6	-20,61	12430,92	12679,02	16880,92	16936,33	16993,67	19259,98	19581,27	20709,29
18,4	-22,27	12411,76	12670,24	16869,90	16899,04	16945,82	19251,05	19583,61	20730,34
18,2	-24,09	12389,69	12661,30	16802,33	16861,11	16943,07	19241,22	19585,97	20752,50
18,0	-26,10	12364,32	12652,24	16709,57	16848,17	16939,98	19230,38	19588,33	20775,79
17,8	-28,33	12335,27	12643,10	16618,13	16833,98	16936,49	19218,44	19590,64	20800,26
17,6	-30,79	12302,14	12633,86	16528,63	16818,11	16932,55	19205,30	19592,88	20825,91
17,4	-33,52	12264,54	12624,53	16441,48	16800,33	16928,08	19190,83	19595,02	20852,79
17,2	-36,55	12222,07	12615,07	16357,08	16780,41	16923,02	19174,93	19597,01	20880,93
17,0	-39,93	12174,35	12605,42	16275,83	16758,13	16917,27	19157,47	19598,81	20910,34
16,8	-43,69	12121,01	12595,49	16198,12	16733,23	16910,71	19138,33	19600,39	20941,06
16,6	-47,89	12061,69	12585,20	16124,30	16705,46	16903,22	19117,38	19601,69	20973,11
16,4	-52,59	11996,08	12574,43	16054,73	16674,54	16894,65	19094,52	19602,68	21006,51
16,2	-57,86	11923,86	12563,05	15989,72	16640,19	16884,83	19069,63	19603,28	21041,28
16,0	-63,76	11844,78	12550,93	15929,52	16602,14	16873,55	19042,63	19603,45	21077,44
15,8	-70,40	11758,65	12537,89	15874,31	16560,11	16860,57	19013,47	19603,11	21115,00
15,6	-77,87	11665,31	12523,76	15824,20	16513,86	16845,63	18982,13	19602,20	21153,97
15,4	-86,30	11564,68	12508,34	15779,17	16463,18	16828,41	18947,29	19600,62	21194,37
15,2	-95,80	11456,73	12491,41	15739,11	16407,92	16808,55	18911,54	19598,27	21236,19
15,0	-106,53	11341,51	12472,71	15703,70	16348,07	16785,65	18873,87	19595,07	21279,44
14,8	-118,67	11219,15	12451,97	15672,42	16283,77	16759,26	18834,56	19590,87	21324,12
14,6	-132,41	11089,81	12428,87	15644,42	16215,47	16728,88	18793,94	19585,54	21370,24
14,4	-147,98	10953,73	12403,04	15618,35	16144,11	16694,00	18752,47	19578,92	21417,79
14,2	-165,63	10811,23	12374,06	15592,04	16071,44	16654,05	18710,71	19570,82	21466,76
14,0	-185,66	10662,63	12341,48	15562,05	16000,47	16608,53	18669,29	19561,05	21517,11
13,8	-208,40	10508,35	12304,77	15523,30	15935,89	16556,92	18628,91	19549,36	21568,74
13,6	-234,20	10348,82	12263,33	15469,83	15883,31	16498,81	18590,32	19535,48	21621,44
13,4	-263,50	10184,52	12216,48	15397,39	15846,66	16433,90	18554,24	19519,09	21674,72
13,2	-296,76	10015,99	12163,49	15305,90	15825,76	16362,07	18521,37	19499,85	21727,55
13,0	-334,50	9843,78	12103,52	15198,30	15817,43	16283,37	18492,34	19477,35	21777,21
12,8	-377,30	9668,49	12035,67	15078,08	15818,00	16198,09	18467,65	19451,14	21813,33
12,6	-425,78	9490,77	11958,96	14948,04	15824,40	16106,73	18447,72	19420,72	21808,14
12,4	-480,65	9311,29	11872,38	14810,28	15833,62	16010,00	18432,84	19385,53	21782,26
12,2	-542,64	9130,76	11774,84	14666,44	15834,72	15908,78	18423,18	19344,97	21751,06
12,0	-612,54	8949,93	11665,29	14517,88	15762,94	15876,68	18418,87	19298,37	21714,87
11,8	-691,20	8769,59	11542,74	14365,83	15657,21	15889,52	18419,96	19245,05	21667,17
11,6	-779,46	8590,51	11406,23	14211,50	15547,23	15905,43	18426,51	19184,31	21572,53
11,4	-878,18	8413,52	11255,02	14056,06	15436,15	15921,89	18438,56	19115,45	21457,02
11,2	-988,21	8239,44	11088,51	13900,74	15325,33	15938,30	18456,22	19037,83	21332,90
11,0	-1110,34	8069,09	10906,37	13746,75	15215,67	15954,54	18479,65	18950,89	21202,97
10,8	-1245,28	7903,28	10708,53	13595,40	15107,85	15970,78	18509,06	18854,23	21069,24
10,6	-1393,63	7742,81	10495,25	13447,99	15002,34	15987,46	18544,78	18747,65	20933,45
10,4	-1555,80	7588,47	10267,10	13305,88	14899,50	16005,30	18587,11	18631,32	20797,21
10,2	-1731,99	7441,04	10024,98	13170,46	14799,61	16025,28	18505,29	18636,87	20662,03
10,0	-1922,15	7301,33	9770,08	13043,11	14702,89	16048,68	18370,82	18694,09	20529,36
9,8	-2125,93	7170,20	9503,89	12925,28	14609,68	16077,03	18228,91	18759,46	20400,68
9,6	-2342,60	7048,57	9228,18	12818,42	14520,44	16112,08	18081,22	18833,33	20277,54

R	(1) 0 <sup>+</sup>	(2) 0 <sup>+</sup>	(3) 0 <sup>+</sup>	(4) 0 <sup>+</sup>	(5) 0 <sup>+</sup>	(6) 0 <sup>+</sup>	(7) 0 <sup>+</sup>	(8) 0 <sup>+</sup>	(9) 0 <sup>+</sup>
9,4	-2571,06	6937,56	8944,99	12724,05	14435,83	16155,81	17929,84	18915,72	20161,67
9,2	-2809,78	6838,45	8656,65	12643,73	14356,85	16210,38	17777,28	19006,00	20055,03
9,0	-3056,75	6752,84	8365,78	12579,17	14284,83	16278,04	17626,50	19102,02	19959,92
8,8	-3309,46	6682,67	8075,33	12532,25	14221,53	16361,13	17480,86	19198,29	19879,04
8,6	-3564,86	6630,30	7788,62	12505,08	14169,15	16462,03	17344,17	19282,51	19815,64
8,4	-3819,30	6598,50	7509,43	12500,15	14130,43	16583,09	17220,77	19334,57	19773,42
8,2	-4068,49	6590,41	7242,27	12520,36	14108,63	16726,47	17115,72	19344,26	19756,39
8,0	-4307,45	6608,54	6993,34	12569,18	14107,59	16891,89	17037,21	19330,24	19769,29
7,8	-4530,41	6641,34	6784,20	12650,68	14131,77	16968,44	17104,97	19320,12	19817,59
7,6	-4730,77	6531,35	6783,70	12769,69	14186,27	16954,49	17330,58	19333,88	19907,37
7,4	-4901,01	6367,52	6915,77	12931,77	14276,84	16979,13	17596,33	19385,41	20045,30
7,2	-5032,61	6237,89	7106,81	13143,31	14409,93	17053,71	17904,11	19486,14	20238,64
7,0	-5115,97	6155,09	7360,28	13411,49	14592,64	17187,50	18259,92	19646,83	20495,22
6,8	-5140,43	6128,74	7684,31	13744,23	14832,73	17390,37	18671,45	19878,37	20823,46
6,6	-5094,24	6168,69	8088,31	14150,08	15138,48	17673,05	19147,84	20192,14	21232,26
6,4	-4964,65	6285,45	8582,42	14637,98	15518,59	18047,08	19699,54	20600,02	21730,97
6,2	-4738,17	6490,11	9177,04	15216,96	15981,86	18524,73	20337,98	21114,26	22329,15
6,0	-4400,87	6794,20	9882,43	15895,65	16536,86	19118,68	21075,08	21747,14	23036,27
5,8	-3938,92	7209,39	10708,00	16681,68	17191,46	19841,68	21922,62	22510,37	23861,19
5,6	-3339,43	7747,02	11661,43	17580,87	17952,18	20705,85	22891,50	23414,32	24811,36
5,4	-2591,44	8417,57	12747,60	18596,27	18823,81	21721,70	23990,83	24466,86	25891,81
5,2	-1687,30	9229,83	13967,27	19723,51	19812,44	22896,70	25227,07	25671,97	26876,94
5,0	-623,91	10190,94	15315,97	20883,38	20992,72	24233,44	26603,53	27027,60	27834,52
4,8	595,72	11304,83	16783,26	22082,08	22129,27	25727,62	28119,91	28517,49	28904,71
4,6	1961,81	12572,67	18353,02	23370,44	23417,66	27366,53	29772,60	29983,63	30245,61

**Tab. B.2.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-14)  $0^+$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(10) $0^+$	(11) $0^+$	(12) $0^+$	(13) $0^+$	(14) $0^+$
86,0	23790,87	25698,71	25701,55	25737,54	26307,59
84,0	23790,87	25698,70	25701,55	25737,54	26307,58
82,0	23790,86	25698,70	25701,54	25737,53	26307,57
80,0	23790,85	25698,69	25701,54	25737,53	26307,55
78,0	23790,84	25698,69	25701,53	25737,52	26307,54
76,0	23790,83	25698,68	25701,52	25737,51	26307,51
74,0	23790,81	25698,67	25701,51	25737,50	26292,95
72,0	23790,80	25698,66	25701,50	25737,49	26210,11
70,0	23790,78	25698,64	25701,48	25737,48	26122,48
68,0	23790,76	25698,63	25701,46	25737,46	26029,65
66,0	23790,73	25698,60	25701,44	25737,43	25931,12
64,0	23790,69	25698,57	25701,39	25737,41	25826,37
62,0	23790,64	25698,40	25701,16	25715,09	25737,38
60,0	23790,58	25595,45	25698,53	25701,37	25737,33
58,0	23790,50	25467,92	25698,47	25701,29	25737,28
56,0	23790,40	25331,07	25698,40	25701,22	25737,21
54,0	23790,26	25183,85	25698,32	25701,13	25737,12
52,5	23790,13	25065,89	25698,24	25701,06	25737,04
48,0	23789,40	24666,64	25698,04	25700,92	25736,66
46,0	23788,69	24463,68	25697,97	25701,05	25736,39
44,0	23787,05	24242,79	25697,85	25701,61	25736,02
42,0	23780,92	24006,30	25697,51	25703,12	25735,50
40,0	23734,70	23827,24	25696,74	25706,38	25734,77
39,0	23722,13	23811,01	25696,12	25709,01	25734,28
38,0	23719,31	23807,30	25695,29	25712,54	25733,70
37,0	23718,42	23807,12	25694,16	25717,20	25732,99
36,0	23718,23	23808,81	25692,65	25723,24	25732,12
35,0	23718,38	23812,07	25690,60	25730,55	25731,44
34,0	23718,70	23817,02	25687,81	25729,62	25740,70
33,0	23719,07	23823,99	25683,97	25727,89	25752,68
32,0	23719,32	23833,42	25678,63	25725,65	25767,24
31,0	23719,29	23845,87	25671,14	25722,70	25784,62
30,5	23719,09	23853,42	25666,31	25720,87	25794,41
30,0	23718,74	23861,94	25660,54	25718,73	25804,94
29,5	23718,20	23871,53	25653,65	25716,22	25816,22
29,0	23717,42	23882,24	25645,40	25713,26	25828,23
28,5	23716,37	23894,15	25635,48	25709,74	25840,94
28,0	23715,00	23907,32	25623,56	25705,52	25854,30
27,5	23713,25	23921,79	25609,20	25700,42	25868,26
27,0	23711,03	23937,60	25591,89	25694,21	25882,74
26,5	23708,28	23954,77	25571,02	25686,58	25897,65
26,0	23704,88	23973,30	25545,87	25677,13	25912,85
25,5	23700,68	23993,17	25515,63	25665,32	25928,21
25,0	23695,53	24014,33	25479,39	25650,43	25943,59
24,5	23689,22	24036,68	25436,24	25631,48	25958,80
24,0	23681,45	24060,13	25385,26	25607,17	25973,66
23,5	23671,88	24084,52	25325,71	25575,78	25987,98
23,0	23660,05	24109,65	25257,07	25535,03	26001,59
22,5	23645,35	24135,30	25179,22	25482,05	26014,27
22,0	23627,00	24161,17	25092,51	25413,44	26025,85
21,5	23603,96	24191,63	24997,83	25325,55	26036,12
21,0	23574,85	24212,25	24896,62	25215,13	26044,89
20,5	23537,94	24236,62	24790,93	25080,18	26051,90



R	(10) 0+	(11) 0+	(12) 0+	(13) 0+	(14) 0+
20,0	23491,05	24259,53	24683,39	24920,57	26056,89
19,8	23468,94	24268,14	24640,54	24850,19	26058,24
19,6	23444,66	24276,36	24598,10	24776,33	26059,18
19,4	23418,05	24284,12	24556,30	24699,25	26059,69
19,2	23388,94	24291,32	24515,37	24619,23	26059,72
19,0	23357,19	24297,80	24475,53	24536,62	26059,24
18,8	23322,70	24303,16	24436,97	24452,04	26058,20
18,6	23285,36	24305,45	24366,80	24400,70	26056,55
18,4	23245,15	24268,01	24317,36	24367,31	26054,24
18,2	23202,04	24180,74	24307,96	24342,96	26051,18
18,0	23156,11	24089,44	24285,15	24335,59	26047,31
17,8	23107,44	23996,87	24256,23	24335,40	26042,53
17,6	23056,19	23903,65	24226,95	24336,21	26036,72
17,4	23002,55	23810,21	24198,40	24336,63	26029,75
17,2	22946,77	23716,93	24170,81	24336,21	26021,48
17,0	22889,14	23624,20	24144,09	24334,68	26011,68
16,8	22829,96	23532,42	24118,19	24331,84	26000,01
16,6	22769,57	23441,97	24092,89	24327,52	25981,82
16,4	22708,35	23353,23	24068,01	24321,43	25944,78
16,2	22646,68	23266,63	24043,34	24313,43	25904,58
16,0	22584,95	23182,52	24018,61	24303,22	25861,84
15,8	22523,58	23101,30	23993,58	24290,50	25816,55
15,6	22462,97	23023,30	23967,97	24274,94	25768,80
15,4	22403,53	22948,82	23941,50	24256,15	25718,93
15,2	22345,64	22878,11	23913,85	24233,69	25665,03
15,0	22289,69	22811,34	23884,65	24207,09	25609,24
14,8	22236,00	22748,57	23853,58	24175,83	25550,83
14,6	22184,87	22689,71	23820,16	24139,38	25489,79
14,4	22136,53	22634,56	23783,95	24097,21	25426,08
14,2	22091,14	22582,70	23744,43	24048,86	25359,61
14,0	22048,82	22533,55	23701,05	23993,93	25290,29
13,8	22009,54	22486,37	23653,20	23932,29	25221,97
13,6	21973,23	22440,07	23600,26	23863,58	25143,68
13,4	21939,74	22393,86	23541,59	23788,23	25066,99
13,2	21908,93	22346,93	23476,59	23725,46	24989,05
13,0	21881,30	22299,25	23404,68	23619,05	24912,32
12,8	21862,88	22252,66	23325,57	23526,72	24837,49
12,6	21872,60	22213,20	23239,10	23430,59	24741,80
12,4	21874,58	22193,05	23145,41	23332,13	24648,75
12,2	21840,50	22201,57	23044,90	23233,47	24562,48
12,0	21773,32	22230,87	22938,27	23137,87	24482,48
11,8	21689,40	22264,57	22826,41	23050,51	24404,84
11,6	21630,31	22287,21	22710,36	22979,22	24315,80
11,4	21572,80	22284,98	22591,15	22933,12	24199,77
11,2	21506,11	22249,85	22469,83	22916,29	24062,67
11,0	21428,55	22184,58	22347,42	22921,64	23914,99
10,8	21339,29	22098,72	22224,96	22934,62	23761,58
10,6	21238,07	22001,49	22103,52	22941,07	23604,79
10,4	21125,37	21899,37	21984,26	22931,05	23446,18
10,2	21001,64	21796,63	21868,40	22899,98	23287,06
10,0	20868,64	21696,17	21757,25	22848,16	23128,71
9,8	20728,38	21600,12	21652,24	22779,18	22972,52
9,6	20583,60	21510,12	21555,04	22698,11	22820,07
9,4	20437,95	21427,46	21467,48	22610,19	22673,37
9,2	20295,99	21353,34	21391,72	22517,11	22542,15
9,0	20164,33	21289,37	21329,80	22398,80	22442,18
8,8	20053,20	21238,03	21283,46	22281,77	22366,70

R	(10) 0 <sup>+</sup>	(11) 0 <sup>+</sup>	(12) 0 <sup>+</sup>	(13) 0 <sup>+</sup>	(14) 0 <sup>+</sup>
8,6	19979,99	21202,47	21254,34	22179,36	22306,72
8,4	19970,35	21186,35	21244,46	22095,88	22267,02
8,2	20040,71	21193,77	21256,38	22035,57	22253,07
8,0	20179,07	21229,34	21293,35	22003,29	22270,59
7,8	20364,97	21298,29	21359,45	22004,59	22325,36
7,6	20586,52	21406,27	21459,83	22052,01	22379,37
7,4	20839,21	21558,84	21601,12	22133,88	22435,10
7,2	21123,13	21760,21	21792,40	22276,27	22549,80
7,0	21441,96	22012,32	22045,05	22464,44	22734,76
6,8	21802,60	22323,15	22364,44	22707,51	23000,51
6,6	22214,02	22706,14	22750,90	23018,83	23355,89
6,4	22685,15	23172,82	23208,29	23411,21	23809,14
6,2	23222,13	23726,48	23752,56	23897,71	24369,00
6,0	23825,91	24357,36	24418,48	24490,71	25044,74
5,8	24492,50	25093,62	25149,20	25208,45	25845,35
5,6	25219,31	25959,16	26003,29	26127,15	26778,45
5,4	26009,46	26965,07	26999,58	27180,58	27744,34
5,2	27104,38	28114,18	28129,91	28252,98	29003,96
5,0	28446,48	28976,14	29390,94	29432,82	30406,00
4,8	29831,29	29915,38	30790,58	30853,74	31955,77
4,6	30845,87	31491,17	32371,20	32396,29	33633,49

**Tab. B.3.** Adiabatyyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9)  $0^-$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(1) $0^-$	(2) $0^-$	(3) $0^-$	(4) $0^-$	(5) $0^-$	(6) $0^-$	(7) $0^-$	(8) $0^-$	(9) $0^-$
86,0	0,00	12579,55	12818,89	16953,82	16973,63	19357,38	19358,04	20128,52	23713,34
84,0	0,00	12579,55	12818,88	16953,82	16973,63	19357,38	19358,04	20128,52	23713,34
82,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,63	19357,38	19358,04	20128,52	23713,33
80,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,64	19357,38	19358,04	20128,51	23713,33
78,0	0,00	12579,54	12818,88	16953,82	16973,64	19357,37	19358,04	20128,51	23713,32
76,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,04	20128,50	23713,31
74,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,03	20128,50	23713,30
72,0	0,00	12579,54	12818,87	16953,82	16973,64	19357,37	19358,03	20128,49	23713,29
70,0	0,00	12579,53	12818,86	16953,82	16973,64	19357,36	19358,03	20128,48	23713,27
68,0	0,00	12579,53	12818,86	16953,82	16973,64	19357,36	19358,02	20128,47	23713,26
66,0	-0,01	12579,52	12818,85	16953,82	16973,64	19357,35	19358,02	20128,46	23713,24
64,0	-0,01	12579,52	12818,84	16953,82	16973,64	19357,35	19358,01	20128,44	23713,21
62,0	-0,01	12579,51	12818,83	16953,82	16973,64	19357,34	19358,00	20128,42	23713,18
60,0	-0,01	12579,50	12818,82	16953,82	16973,64	19357,33	19357,99	20128,39	23713,13
58,0	-0,02	12579,48	12818,80	16953,82	16973,64	19357,32	19357,98	20128,36	23713,08
56,0	-0,02	12579,47	12818,78	16953,82	16973,64	19357,30	19357,97	20128,32	23713,00
54,0	-0,03	12579,45	12818,75	16953,82	16973,64	19357,28	19357,95	20128,26	23712,91
52,5	-0,03	12579,43	12818,72	16953,82	16973,64	19357,26	19357,93	20128,21	23712,82
48,0	-0,05	12579,34	12818,60	16953,81	16973,64	19357,17	19357,85	20127,97	23712,39
46,0	-0,07	12579,28	12818,51	16953,81	16973,64	19357,10	19357,79	20127,80	23712,07
44,0	-0,09	12579,20	12818,39	16953,80	16973,64	19357,01	19357,72	20127,56	23711,62
42,0	-0,12	12579,09	12818,23	16953,79	16973,64	19356,88	19357,61	20127,22	23710,94
40,0	-0,16	12578,93	12818,00	16953,77	16973,63	19356,70	19357,46	20126,74	23709,92
39,0	-0,19	12578,82	12817,85	16953,76	16973,63	19356,57	19357,37	20126,41	23709,21
38,0	-0,22	12578,69	12817,67	16953,74	16973,62	19356,41	19357,25	20126,02	23708,31
37,0	-0,26	12578,54	12817,45	16953,72	16973,61	19356,22	19357,12	20125,54	23707,18
36,0	-0,31	12578,36	12817,19	16953,70	16973,59	19355,97	19356,95	20124,95	23705,72
35,0	-0,36	12578,14	12816,87	16953,66	16973,57	19355,64	19356,76	20124,21	23703,84
34,0	-0,43	12577,86	12816,47	16953,62	16973,53	19355,23	19356,52	20123,28	23701,40
33,0	-0,52	12577,52	12815,98	16953,56	16973,48	19354,68	19356,23	20122,11	23698,19
32,0	-0,63	12577,09	12815,36	16953,49	16973,42	19353,97	19355,87	20120,64	23693,96
31,0	-0,76	12576,56	12814,59	16953,39	16973,32	19353,04	19355,42	20118,75	23688,35
30,5	-0,84	12576,25	12814,13	16953,32	16973,26	19352,46	19355,16	20117,62	23684,90
30,0	-0,93	12575,89	12813,60	16953,25	16973,18	19351,79	19354,85	20116,34	23680,94
29,5	-1,04	12575,48	12813,02	16953,16	16973,09	19351,01	19354,51	20114,88	23676,41
29,0	-1,15	12575,02	12812,35	16953,06	16972,98	19350,10	19354,12	20113,23	23671,26
28,5	-1,28	12574,50	12811,59	16952,94	16972,85	19349,04	19353,68	20111,36	23665,44
28,0	-1,43	12573,91	12810,73	16952,80	16972,70	19347,81	19353,17	20109,24	23658,92
27,5	-1,60	12573,23	12809,75	16952,64	16972,51	19346,36	19352,58	20106,85	23651,68
27,0	-1,80	12572,45	12808,63	16952,44	16972,28	19344,65	19351,90	20104,14	23643,73
26,5	-2,02	12571,56	12807,34	16952,21	16972,01	19342,66	19351,10	20101,08	23635,12
26,0	-2,28	12570,53	12805,86	16951,94	16971,67	19340,31	19350,17	20097,64	23625,92
25,5	-2,57	12569,34	12804,15	16951,61	16971,27	19337,55	19349,08	20093,78	23616,24
25,0	-2,91	12567,96	12802,19	16951,22	16970,78	19334,30	19347,79	20089,48	23606,22
24,5	-3,30	12566,35	12799,91	16950,74	16970,19	19330,47	19346,24	20084,69	23596,05
24,0	-3,76	12564,47	12797,28	16950,17	16969,48	19325,95	19344,40	20079,39	23585,94
23,5	-4,29	12562,26	12794,23	16949,47	16968,61	19320,63	19342,17	20073,58	23576,12
23,0	-4,92	12559,66	12790,68	16948,63	16967,56	19314,34	19339,46	20067,23	23566,82
22,5	-5,65	12556,59	12786,55	16947,59	16966,28	19306,92	19336,17	20060,36	23558,23
22,0	-6,52	12552,93	12781,73	16946,31	16964,74	19298,17	19332,12	20053,01	23550,35
21,5	-7,54	12548,57	12776,12	16944,72	16962,87	19287,88	19327,12	20045,23	23542,61
21,0	-8,76	12543,34	12769,57	16942,75	16960,62	19275,81	19320,91	20037,08	23532,73
20,5	-10,21	12537,02	12761,94	16940,27	16957,89	19261,70	19313,15	20028,68	23514,22

R	(1) 0 <sup>-</sup>	(2) 0 <sup>-</sup>	(3) 0 <sup>-</sup>	(4) 0 <sup>-</sup>	(5) 0 <sup>-</sup>	(6) 0 <sup>-</sup>	(7) 0 <sup>-</sup>	(8) 0 <sup>-</sup>	(9) 0 <sup>-</sup>
20,0	-11,94	12529,38	12753,05	16937,17	16954,60	19245,30	19303,40	20020,12	23478,89
19,8	-12,72	12525,87	12749,11	16935,72	16953,09	19238,03	19298,82	20016,69	23459,53
19,6	-13,56	12522,08	12744,91	16934,13	16951,47	19230,33	19293,79	20013,25	23437,29
19,4	-14,47	12517,97	12740,46	16932,39	16949,71	19222,19	19288,25	20009,83	23412,20
19,2	-15,44	12513,52	12735,73	16930,49	16947,80	19213,58	19282,17	20006,42	23384,25
19,0	-16,49	12508,68	12730,71	16928,41	16945,72	19204,50	19275,46	20003,04	23353,40
18,8	-17,62	12503,43	12725,38	16926,15	16943,46	19194,91	19268,09	19999,68	23319,59
18,6	-18,84	12497,73	12719,73	16923,69	16940,99	19184,82	19259,98	19996,34	23282,80
18,4	-20,15	12491,54	12713,73	16921,02	16938,29	19174,19	19251,05	19993,04	23243,01
18,2	-21,56	12484,80	12707,36	16918,12	16935,32	19163,02	19241,22	19989,76	23200,25
18,0	-23,08	12477,48	12700,60	16914,98	16932,05	19151,29	19230,38	19986,50	23154,59
17,8	-24,72	12469,51	12693,42	16911,58	16928,45	19139,00	19218,44	19983,25	23106,14
17,6	-26,48	12460,83	12685,79	16907,90	16924,46	19126,11	19205,30	19980,00	23055,07
17,4	-28,38	12451,40	12677,69	16903,92	16920,06	19112,62	19190,83	19976,74	23001,58
17,2	-30,43	12441,13	12669,06	16899,58	16915,20	19098,52	19174,93	19973,43	22945,92
17,0	-32,63	12429,97	12659,86	16894,81	16909,87	19083,78	19157,47	19970,05	22888,37
16,8	-35,00	12417,83	12650,05	16889,49	16904,10	19068,40	19138,33	19966,57	22829,26
16,6	-37,55	12404,64	12639,55	16883,40	16897,98	19052,36	19117,38	19962,94	22768,94
16,4	-40,30	12390,32	12628,30	16876,20	16891,71	19035,65	19094,52	19959,11	22707,76
16,2	-43,25	12374,77	12616,22	16867,53	16885,51	19018,23	19069,63	19955,02	22646,12
16,0	-46,43	12357,92	12603,19	16857,08	16879,50	19000,10	19042,63	19950,59	22584,42
15,8	-49,83	12339,67	12589,10	16844,63	16873,69	18981,23	19013,47	19945,75	22523,06
15,6	-53,48	12319,92	12573,82	16829,98	16868,05	18961,59	18982,13	19940,39	22462,46
15,4	-57,39	12298,56	12557,19	16812,87	16862,56	18941,15	18947,31	19934,41	22403,01
15,2	-61,57	12275,50	12539,00	16793,00	16857,22	18911,52	18919,95	19927,66	22345,12
15,0	-66,04	12250,62	12519,05	16769,98	16852,04	18873,87	18897,85	19920,01	22289,15
14,8	-70,81	12223,82	12497,08	16743,37	16847,08	18834,55	18874,89	19911,29	22235,53
14,6	-75,89	12194,95	12472,80	16712,69	16842,37	18793,94	18851,04	19901,31	22184,48
14,4	-81,28	12163,90	12445,88	16677,41	16837,99	18752,47	18826,28	19889,84	22136,09
14,2	-87,00	12130,53	12415,93	16636,98	16833,97	18710,71	18800,62	19876,66	22090,61
14,0	-93,06	12094,69	12382,51	16590,86	16830,37	18669,29	18774,07	19861,51	22048,13
13,8	-99,44	12056,22	12345,15	16538,53	16827,21	18628,91	18746,68	19844,08	22008,39
13,6	-106,14	12014,96	12303,28	16479,57	16824,49	18590,32	18718,57	19824,06	21971,76
13,4	-113,17	11970,70	12256,31	16413,65	16822,14	18554,24	18689,88	19801,12	21937,74
13,2	-120,49	11923,24	12203,58	16340,63	16820,05	18521,37	18660,88	19774,90	21905,93
13,0	-128,09	11872,32	12144,40	16260,55	16818,01	18492,34	18631,93	19745,02	21875,78
12,8	-135,93	11817,62	12078,08	16173,68	16815,66	18467,65	18603,57	19711,12	21846,59
12,6	-143,97	11758,67	12004,01	16080,51	16812,48	18447,72	18576,50	19672,84	21817,47
12,4	-152,13	11694,77	11921,80	15981,75	16807,76	18432,84	18551,68	19629,83	21787,36
12,2	-160,35	11624,70	11831,56	15878,28	16800,52	18423,18	18530,34	19581,81	21754,98
12,0	-168,52	11546,18	11734,50	15771,13	16789,54	18418,87	18514,00	19528,57	21718,92
11,8	-176,52	11455,17	11633,68	15661,38	16773,35	18419,96	18504,45	19470,02	21677,62
11,6	-184,19	11346,04	11533,88	15550,14	16750,26	18426,49	18503,69	19406,25	21629,45
11,4	-191,34	11214,66	11438,64	15438,44	16718,55	18438,51	18513,74	19337,57	21572,82
11,2	-197,75	11060,88	11347,73	15327,22	16676,59	18456,11	18536,32	19264,73	21506,30
11,0	-203,14	10886,69	11259,19	15217,26	16623,07	18479,46	18572,31	19189,26	21428,75
10,8	-207,17	10693,94	11171,54	15109,20	16557,16	18508,82	18620,61	19114,51	21339,45
10,6	-209,45	10484,01	11084,19	15003,49	16478,57	18544,48	18674,51	19049,17	21238,15
10,4	-209,48	10258,17	10997,19	14900,48	16387,63	18586,86	18711,31	19017,63	21125,18
10,2	-206,71	10017,65	10911,01	14800,41	16285,16	18636,41	18695,11	19057,24	21001,42
10,0	-200,44	9763,90	10826,49	14703,53	16172,46	18632,75	18693,62	19162,30	20868,35
9,8	-189,87	9498,54	10744,72	14610,16	16051,19	18551,77	18758,97	19305,91	20728,05
9,6	-174,03	9223,41	10667,12	14520,76	15923,35	18465,46	18832,80	19474,30	20583,25
9,4	-151,80	8940,62	10595,41	14436,01	15791,23	18379,79	18915,18	19658,19	20437,51
9,2	-121,82	8652,51	10531,62	14356,89	15657,45	18298,51	19005,46	19843,34	20295,49
9,0	-82,54	8361,73	10478,19	14284,73	15524,94	18224,78	19101,49	20000,06	20163,75
8,8	-32,09	8071,20	10437,95	14221,30	15396,97	18161,72	19197,81	20052,45	20088,14

R	(1) 0 <sup>-</sup>	(2) 0 <sup>-</sup>	(3) 0 <sup>-</sup>	(4) 0 <sup>-</sup>	(5) 0 <sup>-</sup>	(6) 0 <sup>-</sup>	(7) 0 <sup>-</sup>	(8) 0 <sup>-</sup>	(9) 0 <sup>-</sup>
8,6	31,67	7784,19	10414,23	14168,79	15277,15	18112,65	19282,13	19979,25	20107,55
8,4	111,27	7504,36	10410,86	14129,96	15169,54	18081,24	19334,39	19969,62	20097,23
8,2	209,62	7235,76	10432,31	14108,04	15078,61	18071,59	19344,27	20039,67	20086,81
8,0	330,10	6982,97	10483,72	14106,88	15009,32	18088,36	19330,32	20090,80	20178,91
7,8	476,60	6751,09	10571,00	14130,96	14967,16	18136,80	19320,23	20121,98	20364,59
7,6	653,55	6545,86	10700,91	14185,38	14958,19	18222,88	19334,00	20187,94	20586,11
7,4	866,01	6373,65	10881,17	14275,82	14989,10	18353,36	19385,53	20297,36	20838,85
7,2	1119,68	6241,64	11120,53	14408,79	15067,23	18535,81	19486,26	20459,23	21122,90
7,0	1420,92	6157,79	11428,84	14591,40	15200,58	18778,75	19646,95	20683,25	21441,80
6,8	1776,77	6130,88	11817,06	14831,39	15397,80	19091,57	19878,49	20979,96	21802,38
6,6	2194,87	6170,51	12297,26	15137,04	15668,16	19484,60	20192,26	21360,81	22213,73
6,4	2683,38	6287,10	12882,40	15517,03	16021,43	19968,93	20600,15	21838,08	22684,90
6,2	3250,76	6491,70	13585,97	15980,17	16467,75	20556,22	21114,41	22424,64	23221,77
6,0	3905,53	6795,84	14421,27	16535,06	17017,45	21258,35	21747,33	23133,66	23825,81
5,8	4655,87	7211,18	15400,11	17189,52	17681,06	22086,81	22510,64	23978,00	24492,36
5,6	5509,13	7749,07	16530,50	17950,01	18469,75	23051,90	23414,72	24969,36	25219,14
5,4	6471,21	8420,04	17812,09	18820,93	19397,40	24161,62	24467,49	26010,44	26117,39
5,2	7546,00	9233,09	19226,01	19804,36	20487,41	25420,28	25673,01	26879,00	27427,04
5,0	8734,77	10195,06	20712,51	20904,10	21787,44	26826,93	27029,30	27837,69	28898,18
4,8	10035,85	11310,09	22069,79	22129,27	23356,12	28374,00	28520,21	28909,52	30521,70
4,6	11444,69	12579,34	23365,33	23417,66	25171,93	29989,07	30047,11	30250,63	32277,28

**Tab. B.4.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-14)  $0^-$ . Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(10) $0^-$	(11) $0^-$	(12) $0^-$	(13) $0^-$	(14) $0^-$
86,0	23790,87	25698,70	25701,55	25737,54	26307,59
84,0	23790,87	25698,70	25701,55	25737,54	26307,57
82,0	23790,86	25698,70	25701,54	25737,53	26307,56
80,0	23790,85	25698,69	25701,54	25737,52	26307,55
78,0	23790,84	25698,68	25701,53	25737,52	26307,53
76,0	23790,83	25698,68	25701,52	25737,51	26307,51
74,0	23790,81	25698,67	25701,51	25737,50	26307,48
72,0	23790,80	25698,66	25701,50	25737,49	26307,45
70,0	23790,78	25698,64	25701,48	25737,47	26307,42
68,0	23790,76	25698,62	25701,46	25737,46	26307,37
66,0	23790,73	25698,60	25701,44	25737,43	26307,31
64,0	23790,69	25698,57	25701,40	25737,41	26307,23
62,0	23790,64	25698,53	25701,36	25737,37	26307,14
60,0	23790,58	25698,48	25701,30	25737,33	26307,02
58,0	23790,51	25698,41	25701,22	25737,28	26306,85
56,0	23790,40	25698,32	25701,12	25737,21	26306,64
54,0	23790,27	25698,18	25700,97	25737,12	26306,34
52,5	23790,13	25698,03	25700,82	25737,04	26306,04
48,0	23789,50	25697,16	25700,11	25736,66	26304,53
46,0	23789,03	25696,32	25699,63	25736,39	26303,36
44,0	23788,35	25694,86	25699,01	25736,02	26301,67
42,0	23787,33	25692,33	25698,23	25735,50	26299,26
40,0	23785,78	25688,11	25697,17	25734,77	26295,92
39,0	23784,73	25685,10	25696,45	25734,29	26293,84
38,0	23783,43	25681,30	25695,53	25733,71	26291,48
37,0	23781,81	25676,55	25694,35	25733,00	26288,86
36,0	23779,83	25670,66	25692,80	25732,14	26286,01
35,0	23777,38	25663,44	25690,72	25731,08	26283,02
34,0	23774,41	25654,69	25687,90	25729,76	26280,01
33,0	23770,83	25644,24	25684,04	25728,12	26277,16
32,0	23766,59	25631,94	25678,69	25726,07	26274,69
31,0	23761,65	25617,74	25671,19	25723,46	26272,84
30,5	23758,92	25609,92	25666,35	25721,90	26272,23
30,0	23756,02	25601,65	25660,58	25720,14	26271,86
29,5	23752,94	25592,95	25653,69	25718,15	26271,78
29,0	23749,69	25583,85	25645,43	25715,88	26272,00
28,5	23746,25	25574,38	25635,51	25713,31	26272,54
28,0	23742,62	25564,58	25623,59	25710,38	26273,42
27,5	23738,75	25554,50	25609,23	25707,05	26274,65
27,0	23734,60	25544,15	25591,92	25703,25	26276,23
26,5	23730,09	25533,56	25571,06	25698,93	26278,17
26,0	23725,13	25522,72	25545,93	25693,99	26280,46
25,5	23719,59	25511,40	25515,91	25688,36	26283,07
25,0	23713,32	25479,34	25500,31	25681,95	26285,97
24,5	23706,10	25436,21	25488,38	25674,64	26289,10
24,0	23697,69	25385,25	25475,79	25666,33	26292,37
23,5	23687,78	25325,69	25462,20	25656,89	26295,62
23,0	23675,99	25257,06	25447,12	25646,20	26298,58
22,5	23661,92	25179,21	25429,87	25634,16	26300,70
22,0	23645,15	25092,49	25409,50	25620,68	26300,81
21,5	23625,65	24997,80	25384,70	25605,75	26296,09
21,0	23604,79	24896,57	25353,76	25589,43	26279,98
20,5	23587,77	24790,84	25314,50	25571,94	26244,10

R	(10) 0-	(11) 0-	(12) 0-	(13) 0-	(14) 0-
20,0	23581,00	24683,21	25264,44	25553,64	26192,10
19,8	23581,21	24640,31	25240,84	25546,21	26169,60
19,6	23582,78	24597,78	25214,95	25538,78	26147,08
19,4	23585,51	24555,86	25186,65	25531,38	26124,97
19,2	23589,27	24514,73	25155,83	25524,07	26103,53
19,0	23593,99	24474,60	25122,41	25516,90	26082,96
18,8	23599,59	24435,61	25086,31	25509,93	26063,36
18,6	23606,04	24397,93	25047,51	25503,22	26044,80
18,4	23613,29	24361,65	25005,98	25496,84	26027,28
18,2	23621,31	24326,84	24961,72	25490,85	26010,77
18,0	23630,07	24293,55	24914,76	25485,34	25995,20
17,8	23639,52	24261,74	24865,11	25480,42	25980,48
17,6	23649,62	24231,36	24812,83	25476,19	25966,51
17,4	23660,32	24202,32	24757,94	25472,76	25953,14
17,2	23671,53	24174,49	24700,50	25470,27	25940,25
17,0	23683,19	24147,71	24640,53	25468,86	25927,67
16,8	23695,18	24121,82	24578,07	25468,67	25915,24
16,6	23707,39	24096,62	24513,15	25469,88	25902,78
16,4	23719,67	24071,90	24445,80	25472,65	25890,12
16,2	23731,84	24047,45	24376,05	25477,17	25877,07
16,0	23743,67	24023,04	24303,92	25483,63	25863,42
15,8	23754,88	23998,47	24229,45	25492,18	25849,00
15,6	23765,11	23973,45	24152,75	25503,01	25833,59
15,4	23773,80	23947,75	24074,02	25516,23	25819,50
15,2	23779,98	23921,01	23994,00	25531,87	25782,91
15,0	23781,26	23890,35	23917,01	25549,81	25740,16
14,8	23767,45	23834,69	23874,26	25569,53	25693,28
14,6	23708,91	23796,37	23850,94	25589,31	25641,60
14,4	23623,36	23769,18	23835,82	25574,78	25607,49
14,2	23530,52	23735,37	23825,63	25508,58	25610,17
14,0	23433,73	23695,07	23815,76	25433,22	25593,17
13,8	23333,77	23649,03	23803,52	25348,55	25561,13
13,6	23230,92	23597,27	23787,47	25255,02	25519,59
13,4	23125,30	23539,42	23766,64	25154,51	25469,85
13,2	23017,03	23475,01	23740,27	25049,96	25368,07
13,0	22906,21	23403,58	23707,69	24944,59	25262,70
12,8	22792,95	23324,75	23668,27	24841,47	25155,07
12,6	22677,36	23238,45	23621,47	24742,38	25043,60
12,4	22559,61	23144,73	23566,81	24649,06	24927,75
12,2	22439,86	23044,03	23503,89	24562,79	24807,81
12,0	22318,32	22936,92	23432,42	24482,83	24685,26
11,8	22195,21	22824,51	23352,25	24405,10	24565,60
11,6	22070,78	22707,62	23263,39	24316,04	24463,43
11,4	21945,31	22587,48	23166,01	24199,91	24396,03
11,2	21819,12	22465,15	23060,50	24062,74	24358,64
11,0	21692,58	22341,88	22947,45	23915,01	24256,53
10,8	21566,11	22218,56	22827,67	23761,56	24104,20
10,6	21440,28	22096,35	22702,20	23604,72	23946,83
10,4	21315,77	21976,38	22572,35	23446,07	23785,66
10,2	21193,57	21859,73	22439,64	23286,88	23621,98
10,0	21075,07	21747,60	22305,90	23128,43	23457,25
9,8	20962,40	21641,21	22173,25	22972,09	23293,06
9,6	20859,12	21541,95	22044,22	22819,32	23131,21
9,4	20771,86	21451,24	21921,89	22671,86	22973,73
9,2	20714,45	21370,71	21810,27	22531,70	22822,95
9,0	20715,87	21302,37	21715,29	22401,16	22681,51
8,8	20811,80	21248,80	21647,77	22282,93	22552,55

R	(10) 0-	(11) 0-	(12) 0-	(13) 0-	(14) 0-
8,6	20982,87	21213,57	21633,37	22180,17	22439,82
8,4	21132,25	21205,86	21731,55	22096,49	22348,62
8,2	21184,85	21240,55	21977,11	22047,03	22292,44
8,0	21225,13	21280,10	22014,64	22179,17	22405,21
7,8	21293,33	21334,57	22015,83	22197,46	22372,30
7,6	21394,76	21425,53	22056,93	22233,44	22379,37
7,4	21529,28	21570,97	22145,24	22313,21	22435,10
7,2	21708,93	21774,35	22276,26	22446,94	22549,80
7,0	21947,17	22036,66	22464,44	22644,09	22734,76
6,8	22254,34	22359,44	22707,51	22914,70	23000,51
6,6	22640,35	22746,77	23018,82	23269,60	23355,89
6,4	23115,22	23203,91	23411,21	23720,38	23809,13
6,2	23688,58	23738,25	23897,69	24279,16	24368,99
6,0	24354,00	24382,22	24490,69	24958,05	25044,73
5,8	25093,55	25149,16	25183,05	25768,56	25845,34
5,6	25959,30	26003,27	26117,86	26720,59	26778,44
5,4	26965,50	26999,55	27191,35	27821,41	27848,89
5,2	28115,06	28129,87	28408,81	29057,46	29074,46
5,0	29390,97	29432,81	29772,29	30412,72	30478,19
4,8	30790,61	30827,94	31279,77	31962,84	32025,22
4,6	32321,74	32371,83	32925,19	33641,33	33702,02



**Tab. B.5.** Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) 1. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(1) 1	(2) 1	(3) 1	(4) 1	(5) 1	(6) 1	(7) 1	(8) 1	(9) 1
86,0	0,00	12579,55	12818,89	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,38	19357,39
84,0	0,00	12579,55	12818,88	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,38	19357,38
82,0	0,00	12579,54	12818,88	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,38	19357,38
80,0	0,00	12579,54	12818,88	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,38	19357,38
78,0	0,00	12579,54	12818,88	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,37	19357,38
76,0	0,00	12579,54	12818,87	12818,89	16953,82	16973,63	16973,64	19357,37	19357,38
74,0	0,00	12579,54	12818,87	12818,88	16953,82	16973,63	16973,64	19357,37	19357,38
72,0	0,00	12579,54	12818,87	12818,88	16953,82	16973,63	16973,64	19357,37	19357,38
70,0	0,00	12579,53	12818,86	12818,88	16953,82	16973,63	16973,64	19357,36	19357,37
68,0	0,00	12579,53	12818,86	12818,88	16953,82	16973,63	16973,64	19357,36	19357,37
66,0	-0,01	12579,52	12818,85	12818,87	16953,82	16973,63	16973,64	19357,35	19357,37
64,0	-0,01	12579,52	12818,84	12818,87	16953,82	16973,63	16973,64	19357,35	19357,36
62,0	-0,01	12579,51	12818,83	12818,86	16953,82	16973,63	16973,64	19357,34	19357,36
60,0	-0,01	12579,50	12818,82	12818,86	16953,82	16973,63	16973,64	19357,33	19357,35
58,0	-0,02	12579,48	12818,80	12818,85	16953,82	16973,62	16973,64	19357,32	19357,34
56,0	-0,02	12579,47	12818,78	12818,84	16953,82	16973,62	16973,64	19357,30	19357,33
54,0	-0,03	12579,45	12818,75	12818,82	16953,82	16973,61	16973,64	19357,28	19357,31
52,5	-0,03	12579,43	12818,72	12818,81	16953,82	16973,61	16973,64	19357,26	19357,30
48,0	-0,05	12579,34	12818,60	12818,75	16953,81	16973,59	16973,65	19357,17	19357,24
46,0	-0,07	12579,28	12818,51	12818,71	16953,81	16973,58	16973,65	19357,10	19357,19
44,0	-0,09	12579,20	12818,39	12818,65	16953,80	16973,56	16973,65	19357,01	19357,13
42,0	-0,12	12579,09	12818,23	12818,58	16953,79	16973,54	16973,65	19356,88	19357,05
40,0	-0,16	12578,93	12818,00	12818,47	16953,77	16973,50	16973,64	19356,70	19356,93
39,0	-0,19	12578,82	12817,85	12818,40	16953,75	16973,48	16973,64	19356,57	19356,85
38,0	-0,22	12578,69	12817,67	12818,32	16953,74	16973,45	16973,63	19356,41	19356,76
37,0	-0,26	12578,54	12817,45	12818,22	16953,72	16973,42	16973,62	19356,22	19356,64
36,0	-0,31	12578,36	12817,19	12818,10	16953,69	16973,38	16973,61	19355,97	19356,50
35,0	-0,36	12578,13	12816,87	12817,96	16953,66	16973,33	16973,59	19355,64	19356,33
34,0	-0,43	12577,86	12816,47	12817,78	16953,61	16973,26	16973,56	19355,23	19356,12
33,0	-0,52	12577,52	12815,98	12817,56	16953,55	16973,18	16973,51	19354,68	19355,85
32,0	-0,63	12577,09	12815,36	12817,30	16953,47	16973,09	16973,45	19353,97	19355,52
31,0	-0,76	12576,56	12814,59	12816,96	16953,37	16972,96	16973,36	19353,04	19355,09
30,5	-0,84	12576,24	12814,13	12816,76	16953,30	16972,88	16973,30	19352,46	19354,84
30,0	-0,93	12575,89	12813,61	12816,54	16953,23	16972,80	16973,23	19351,79	19354,55
29,5	-1,04	12575,48	12813,02	12816,29	16953,14	16972,70	16973,15	19351,01	19354,22
29,0	-1,15	12575,02	12812,36	12816,01	16953,04	16972,59	16973,05	19350,10	19353,84
28,5	-1,28	12574,50	12811,60	12815,69	16952,92	16972,46	16972,93	19349,05	19353,41
28,0	-1,43	12573,90	12810,74	12815,34	16952,78	16972,31	16972,78	19347,81	19352,92
27,5	-1,60	12573,23	12809,76	12814,93	16952,61	16972,14	16972,60	19346,36	19352,35
27,0	-1,80	12572,45	12808,63	12814,47	16952,41	16971,94	16972,39	19344,66	19351,69
26,5	-2,02	12571,56	12807,35	12813,94	16952,17	16971,72	16972,12	19342,66	19350,92
26,0	-2,28	12570,53	12805,87	12813,34	16951,90	16971,45	16971,81	19340,31	19350,00
25,5	-2,57	12569,34	12804,17	12812,65	16951,56	16971,13	16971,44	19337,55	19348,93
25,0	-2,91	12567,96	12802,21	12811,86	16951,16	16970,75	16971,00	19334,30	19347,64
24,5	-3,30	12566,35	12799,94	12810,95	16950,68	16970,25	16970,51	19330,47	19346,11
24,0	-3,76	12564,47	12797,31	12809,90	16950,10	16969,61	16969,97	19325,95	19344,27
23,5	-4,29	12562,27	12794,26	12808,67	16949,41	16968,79	16969,37	19320,63	19342,05
23,0	-4,92	12559,68	12790,72	12807,25	16948,56	16967,78	16968,67	19314,34	19339,36
22,5	-5,65	12556,62	12786,60	12805,59	16947,51	16966,56	16967,84	19306,92	19336,07
22,0	-6,52	12552,98	12781,81	12803,64	16946,24	16965,08	16966,84	19298,17	19332,03
21,5	-7,54	12548,64	12776,22	12801,35	16944,66	16963,30	16965,64	19287,88	19327,04
21,0	-8,76	12543,44	12769,72	12798,63	16942,70	16961,15	16964,17	19275,81	19320,84
20,5	-10,21	12537,19	12762,15	12795,40	16940,25	16958,58	16962,38	19261,70	19313,09

R	(1) 1	(2) 1	(3) 1	(4) 1	(5) 1	(6) 1	(7) 1	(8) 1	(9) 1
20,0	-11,94	12529,62	12753,36	12791,55	16937,18	16955,48	16960,17	19245,30	19303,35
19,8	-12,72	12526,15	12749,46	12789,81	16935,75	16954,08	16959,15	19238,03	19298,78
19,6	-13,56	12522,41	12745,33	12787,93	16934,18	16952,56	16958,04	19230,33	19293,75
19,4	-14,47	12518,35	12740,95	12785,90	16932,47	16950,92	16956,82	19222,19	19288,22
19,2	-15,44	12513,95	12736,30	12783,72	16930,60	16949,15	16955,51	19213,58	19282,14
19,0	-16,49	12509,18	12731,39	12781,36	16928,56	16947,23	16954,07	19204,50	19275,45
18,8	-17,62	12504,01	12726,18	12778,81	16926,34	16945,13	16952,51	19194,91	19268,09
18,6	-18,84	12498,40	12720,67	12776,06	16923,93	16942,84	16950,81	19184,82	19259,97
18,4	-20,15	12492,30	12714,85	12773,09	16921,31	16940,32	16948,96	19174,19	19251,03
18,2	-21,56	12485,67	12708,69	12769,86	16918,47	16937,53	16946,96	19163,02	19241,18
18,0	-23,08	12478,46	12702,18	12766,37	16915,42	16934,45	16944,79	19151,29	19230,33
17,8	-24,72	12470,62	12695,31	12762,58	16912,12	16931,00	16942,43	19139,00	19218,37
17,6	-26,48	12462,09	12688,03	12758,46	16908,59	16927,14	16939,89	19126,11	19205,20
17,4	-28,38	12452,81	12680,35	12754,00	16904,79	16922,81	16937,13	19112,62	19190,71
17,2	-30,43	12442,71	12672,23	12749,14	16900,72	16917,94	16934,14	19098,52	19174,79
17,0	-32,63	12431,73	12663,63	12743,85	16896,34	16912,47	16930,91	19083,78	19157,29
16,8	-35,00	12419,79	12654,51	12738,11	16891,59	16906,35	16927,39	19068,40	19138,11
16,6	-37,55	12406,81	12644,84	12731,85	16886,34	16899,59	16923,56	19052,36	19117,12
16,4	-40,30	12392,71	12634,55	12725,04	16880,29	16892,37	16919,39	19035,65	19094,21
16,2	-43,25	12377,40	12623,58	12717,63	16872,84	16885,12	16914,82	19018,23	19069,26
16,0	-46,43	12360,80	12611,84	12709,57	16863,28	16878,35	16909,82	19000,10	19042,20
15,8	-49,83	12342,81	12599,22	12700,80	16851,33	16872,17	16904,33	18981,23	19012,97
15,6	-53,48	12323,33	12585,60	12691,29	16836,96	16866,34	16898,28	18961,59	18981,55
15,4	-57,39	12302,28	12570,82	12680,98	16820,05	16860,71	16891,62	18941,16	18947,97
15,2	-61,57	12279,52	12554,69	12669,83	16800,34	16855,20	16884,26	18912,30	18919,94
15,0	-66,04	12254,98	12536,96	12657,80	16777,49	16849,75	16876,16	18874,76	18897,85
14,8	-70,81	12228,52	12517,37	12644,88	16751,07	16844,32	16867,27	18835,58	18874,89
14,6	-75,89	12200,04	12495,57	12631,04	16720,60	16838,72	16857,71	18795,10	18851,04
14,4	-81,28	12169,41	12471,17	12616,28	16685,56	16832,33	16847,98	18753,80	18826,28
14,2	-87,00	12136,49	12443,71	12600,60	16645,41	16823,61	16839,47	18712,21	18800,62
14,0	-93,06	12101,17	12412,69	12584,00	16599,62	16811,23	16833,37	18670,97	18774,06
13,8	-99,44	12063,29	12377,51	12566,49	16547,68	16795,59	16829,03	18630,79	18746,68
13,6	-106,14	12022,71	12337,54	12548,06	16489,16	16777,19	16825,70	18592,40	18718,56
13,4	-113,17	11979,27	12292,08	12528,68	16423,77	16756,01	16823,00	18556,54	18689,88
13,2	-120,49	11932,81	12240,39	12508,31	16351,36	16731,82	16820,68	18523,90	18660,88
13,0	-128,09	11883,15	12181,66	12486,90	16271,98	16704,26	16818,48	18495,11	18631,93
12,8	-135,93	11830,09	12115,06	12464,38	16185,92	16672,91	16816,01	18470,67	18603,57
12,6	-143,97	11773,36	12039,78	12440,65	16093,67	16637,28	16812,75	18451,01	18576,50
12,4	-152,13	11712,61	11955,08	12415,62	15995,94	16596,86	16807,96	18436,41	18551,69
12,2	-160,35	11647,21	11860,49	12389,16	15893,62	16551,07	16800,67	18427,06	18530,35
12,0	-168,52	11575,86	11756,26	12361,16	15787,72	16499,35	16789,65	18423,08	18514,00
11,8	-176,52	11495,41	11644,58	12331,49	15679,31	16441,12	16773,42	18424,55	18504,46
11,6	-184,19	11398,31	11532,20	12300,02	15569,48	16375,85	16750,30	18431,50	18503,69
11,4	-191,34	11273,99	11429,12	12266,60	15459,22	16303,07	16718,57	18444,01	18513,72
11,2	-197,75	11120,93	11336,53	12231,09	15349,46	16222,44	16676,60	18462,17	18536,25
11,0	-203,14	10944,84	11248,80	12193,35	15240,93	16133,79	16623,06	18486,16	18572,20
10,8	-207,17	10749,63	11162,43	12153,25	15134,22	16037,14	16557,14	18516,21	18560,08
10,6	-209,45	10537,33	11076,27	12110,65	15029,76	15932,79	16478,54	18478,71	18552,61
10,4	-209,48	10309,31	10990,25	12065,46	14927,86	15821,36	16387,59	18390,74	18595,53
10,2	-206,71	10066,88	10904,86	12017,61	14828,74	15703,77	16285,12	18296,27	18599,57
10,0	-200,44	9811,45	10820,97	11967,10	14732,64	15581,35	16172,42	18195,59	18577,54
9,8	-189,87	9544,63	10739,71	11914,02	14639,86	15455,76	16051,15	18089,24	18551,78
9,6	-174,03	9268,28	10662,51	11858,59	14550,86	15329,07	15923,30	17978,10	18465,47
9,4	-151,79	8984,48	10591,11	11801,23	14466,34	15203,69	15791,18	17863,38	18379,80
9,2	-121,82	8695,58	10527,58	11742,58	14387,27	15082,38	15657,41	17746,66	18298,52
9,0	-82,53	8404,21	10474,33	11683,64	14315,02	14968,24	15524,90	17629,93	18224,79
8,8	-32,08	8113,30	10434,21	11625,83	14251,35	14864,65	15396,92	17515,64	18161,74

R	(1) 1	(2) 1	(3) 1	(4) 1	(5) 1	(6) 1	(7) 1	(8) 1	(9) 1
8,6	31,68	7826,10	10410,55	11571,07	14198,50	14775,27	15277,11	17406,74	18112,67
8,4	111,28	7546,26	10407,18	11521,94	14159,20	14704,02	15169,50	17306,67	18081,26
8,2	209,64	7277,84	10428,57	11481,75	14136,76	14655,05	15078,56	17219,42	18071,61
8,0	330,12	7025,41	10479,82	11454,60	14135,02	14632,77	15009,27	17149,56	18088,37
7,8	476,63	6794,09	10566,81	11445,56	14158,46	14641,90	14967,11	17102,24	18136,82
7,6	653,59	6589,58	10696,24	11460,67	14212,22	14687,50	14958,16	17083,24	18222,90
7,4	866,06	6418,30	10875,66	11506,88	14302,01	14774,97	14989,10	17099,02	18353,38
7,2	1119,75	6287,40	11113,40	11592,57	14434,33	14910,21	15067,27	17156,66	18535,84
7,0	1421,01	6204,85	11417,82	11728,08	14616,29	15099,49	15200,73	17263,94	18778,77
6,8	1776,88	6179,44	11789,27	11933,76	14855,65	15349,37	15398,32	17429,22	19091,60
6,6	2195,02	6220,78	12142,07	12317,93	15160,69	15662,19	15673,97	17661,41	19484,64
6,4	2683,56	6339,29	12490,45	12890,56	15540,11	16020,37	16062,14	17969,74	19968,98
6,2	3251,01	6546,02	12920,40	13590,82	16002,72	16467,04	16536,67	18363,52	20556,27
6,0	3905,86	6852,51	13450,96	14424,67	16557,12	17016,85	17099,36	18851,70	21258,40
5,8	4656,32	7270,42	14094,53	15402,78	17211,12	17680,49	17754,84	19442,34	22086,84
5,6	5509,73	7811,09	14861,49	16532,82	17971,16	18468,98	18506,19	20141,92	23051,87
5,4	6472,04	8485,02	15759,97	17814,40	18841,56	19352,67	19397,64	20954,48	24161,31
5,2	7547,13	9301,11	16794,96	19228,99	19824,01	20295,12	20487,41	21880,48	25418,09
5,0	8736,32	10266,33	17967,72	20720,22	20918,90	21328,59	21787,43	22917,14	26720,01
4,8	10037,95	11384,68	19274,67	22097,79	22232,23	22449,60	23356,10	24057,15	28015,51
4,6	11447,49	12657,33	20707,55	23390,96	23650,51	23718,64	25171,91	25289,25	29415,56

**Tab. B.6.** Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (10-18) 1. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(10) 1	(11) 1	(12) 1	(13) 1	(14) 1	(15) 1	(16) 1	(17) 1	(18) 1
86,0	19358,04	19358,05	20128,52	23713,34	23790,87	23790,89	25698,71	25699,53	25700,42
84,0	19358,04	19358,05	20128,52	23713,34	23790,87	23790,89	25698,70	25698,72	25701,55
82,0	19358,04	19358,05	20128,52	23713,33	23790,86	23790,89	25698,70	25698,71	25701,54
80,0	19358,04	19358,05	20128,51	23713,33	23790,85	23790,88	25698,69	25698,71	25701,54
78,0	19358,04	19358,05	20128,51	23713,32	23790,84	23790,88	25698,69	25698,71	25701,53
76,0	19358,04	19358,04	20128,50	23713,31	23790,83	23790,87	25698,68	25698,71	25701,52
74,0	19358,03	19358,04	20128,50	23713,30	23790,81	23790,87	25698,67	25698,70	25701,51
72,0	19358,03	19358,04	20128,49	23713,29	23790,80	23790,86	25698,66	25698,70	25701,50
70,0	19358,03	19358,04	20128,48	23713,27	23790,78	23790,85	25698,64	25698,69	25701,48
68,0	19358,02	19358,04	20128,47	23713,26	23790,76	23790,83	25698,63	25698,69	25701,46
66,0	19358,02	19358,04	20128,46	23713,24	23790,73	23790,82	25698,60	25698,68	25701,44
64,0	19358,01	19358,03	20128,44	23713,21	23790,69	23790,80	25698,58	25698,67	25701,41
62,0	19358,00	19358,03	20128,42	23713,18	23790,64	23790,78	25698,54	25698,65	25701,36
60,0	19357,99	19358,02	20128,39	23713,13	23790,58	23790,75	25698,49	25698,64	25701,30
58,0	19357,98	19358,02	20128,36	23713,08	23790,50	23790,72	25698,42	25698,61	25701,23
56,0	19357,97	19358,01	20128,32	23713,00	23790,40	23790,67	25698,32	25698,59	25701,12
54,0	19357,95	19358,00	20128,26	23712,91	23790,27	23790,62	25698,18	25698,55	25700,97
52,5	19357,93	19357,99	20128,21	23712,82	23790,14	23790,57	25698,03	25698,51	25700,82
48,0	19357,85	19357,95	20127,97	23712,39	23789,51	23790,33	25697,16	25698,33	25700,12
46,0	19357,79	19357,93	20127,80	23712,07	23789,04	23790,16	25696,32	25698,20	25699,63
44,0	19357,72	19357,89	20127,56	23711,61	23788,35	23789,94	25694,86	25698,00	25699,03
42,0	19357,61	19357,84	20127,22	23710,94	23787,33	23789,63	25692,34	25697,68	25698,28
40,0	19357,46	19357,77	20126,74	23709,92	23785,79	23789,20	25688,12	25697,11	25697,33
39,0	19357,37	19357,73	20126,41	23709,21	23784,73	23788,92	25685,10	25696,52	25696,84
38,0	19357,25	19357,68	20126,02	23708,32	23783,43	23788,58	25681,30	25695,69	25696,28
37,0	19357,12	19357,61	20125,54	23707,19	23781,82	23788,17	25676,55	25694,57	25695,55
36,0	19356,95	19357,54	20124,95	23705,74	23779,84	23787,68	25670,67	25693,09	25694,58
35,0	19356,76	19357,45	20124,21	23703,87	23777,41	23787,07	25663,45	25691,07	25693,34
34,0	19356,52	19357,34	20123,28	23701,44	23774,45	23786,32	25654,70	25688,31	25691,76
33,0	19356,23	19357,20	20122,11	23698,26	23770,91	23785,39	25644,24	25684,49	25689,78
32,0	19355,88	19357,04	20120,64	23694,05	23766,72	23784,23	25631,95	25679,17	25687,32
31,0	19355,43	19356,83	20118,75	23688,49	23761,87	23782,75	25617,74	25671,70	25684,26
30,5	19355,17	19356,71	20117,62	23685,06	23759,20	23781,86	25609,93	25666,87	25682,47
30,0	19354,87	19356,57	20116,34	23681,13	23756,39	23780,86	25601,66	25661,11	25680,48
29,5	19354,53	19356,42	20114,88	23676,64	23753,44	23779,72	25592,96	25654,23	25678,27
29,0	19354,15	19356,24	20113,23	23671,52	23750,35	23778,43	25583,86	25645,98	25675,84
28,5	19353,72	19356,05	20111,36	23665,74	23747,12	23776,95	25574,39	25636,07	25673,14
28,0	19353,23	19355,83	20109,24	23659,26	23743,76	23775,27	25564,59	25624,17	25670,17
27,5	19352,67	19355,58	20106,85	23652,06	23740,24	23773,34	25554,50	25609,82	25666,89
27,0	19352,04	19355,29	20104,14	23644,16	23736,52	23771,13	25544,16	25592,54	25663,28
26,5	19351,31	19354,96	20101,08	23635,60	23732,56	23768,59	25533,57	25571,70	25659,33
26,0	19350,48	19354,59	20097,64	23626,46	23728,27	23765,69	25522,74	25546,59	25655,01
25,5	19349,52	19354,16	20093,78	23616,85	23723,54	23762,37	25511,55	25516,50	25650,28
25,0	19348,43	19353,66	20089,48	23606,93	23718,22	23758,58	25480,19	25500,28	25645,13
24,5	19347,17	19353,09	20084,69	23596,87	23712,10	23754,28	25437,14	25488,37	25639,52
24,0	19345,71	19352,43	20079,39	23586,92	23704,89	23749,45	25386,30	25475,78	25633,43
23,5	19344,02	19351,66	20073,58	23577,32	23696,21	23744,07	25326,91	25462,19	25626,81
23,0	19342,05	19350,76	20067,23	23568,37	23685,58	23738,16	25258,48	25447,11	25619,62
22,5	19339,77	19349,71	20060,36	23560,33	23672,37	23731,74	25180,90	25429,86	25611,82
22,0	19337,11	19348,47	20053,01	23553,41	23655,88	23724,85	25094,53	25409,50	25603,33
21,5	19334,02	19347,01	20045,23	23547,53	23635,46	23717,48	25000,27	25384,70	25594,05
21,0	19330,41	19345,28	20037,08	23541,58	23611,20	23709,60	24899,59	25353,76	25583,83
20,5	19326,20	19343,22	20028,68	23530,11	23587,14	23701,14	24794,58	25314,50	25571,86

R	(10) 1	(11) 1	(12) 1	(13) 1	(14) 1	(15) 1	(16) 1	(17) 1	(18) 1
20,0	19321,28	19340,76	20020,12	23499,54	23575,01	23692,00	24687,86	25264,45	25553,63
19,8	19319,10	19339,63	20016,69	23480,58	23574,37	23688,14	24645,37	25240,84	25546,21
19,6	19316,77	19338,43	20013,25	23458,29	23575,37	23684,17	24603,31	25214,95	25538,77
19,4	19314,29	19337,13	20009,83	23432,91	23577,59	23680,10	24561,88	25186,65	25531,37
19,2	19311,65	19335,73	20006,42	23404,54	23580,75	23675,95	24521,29	25155,83	25524,07
19,0	19308,84	19334,22	20003,04	23373,19	23584,64	23671,77	24481,71	25122,41	25516,91
18,8	19305,84	19332,58	19999,68	23338,85	23589,05	23667,65	24443,32	25086,32	25509,93
18,6	19302,66	19330,81	19996,34	23301,49	23593,73	23663,76	24406,24	25047,51	25503,21
18,4	19299,26	19328,89	19993,04	23261,11	23598,29	23660,41	24370,59	25005,98	25496,82
18,2	19295,64	19326,82	19989,76	23217,76	23602,12	23658,15	24336,40	24961,72	25490,82
18,0	19291,79	19324,57	19986,50	23171,51	23604,36	23657,73	24303,71	24914,76	25483,18
17,8	19287,68	19322,12	19983,25	23122,49	23604,20	23659,89	24272,48	24865,11	25471,73
17,6	19283,29	19319,46	19980,00	23070,87	23601,37	23664,80	24242,66	24812,83	25459,16
17,4	19278,62	19316,57	19976,74	23016,85	23596,18	23672,01	24214,13	24757,94	25445,34
17,2	19273,63	19313,42	19973,43	22960,70	23589,10	23680,91	24186,76	24700,50	25430,10
17,0	19268,30	19309,98	19970,05	22902,71	23580,48	23691,00	24160,40	24640,53	25413,24
16,8	19262,60	19306,23	19966,57	22843,20	23570,48	23701,90	24134,86	24578,06	25394,55
16,6	19256,52	19302,12	19962,94	22782,51	23559,14	23713,36	24109,95	24513,15	25373,80
16,4	19250,01	19297,63	19959,11	22721,01	23546,46	23725,11	24085,45	24445,80	25350,73
16,2	19243,04	19292,72	19955,02	22659,09	23532,34	23736,92	24061,14	24376,05	25325,05
16,0	19235,57	19287,32	19950,59	22597,16	23516,67	23748,54	24036,77	24303,91	25296,45
15,8	19227,56	19281,40	19945,75	22535,60	23499,30	23759,68	24012,12	24229,45	25264,62
15,6	19218,96	19274,89	19940,39	22474,84	23480,05	23769,99	23986,92	24152,74	25229,22
15,4	19209,73	19267,72	19934,41	22415,27	23458,71	23778,93	23960,89	24074,11	25189,91
15,2	19199,79	19259,82	19927,66	22357,28	23435,03	23785,58	23933,64	23993,89	25146,38
15,0	19189,10	19251,10	19920,01	22301,24	23408,79	23787,38	23902,21	23917,23	25098,32
14,8	19177,57	19241,47	19911,29	22247,50	23379,82	23771,82	23843,21	23878,99	25045,50
14,6	19165,14	19230,83	19901,31	22196,33	23347,69	23709,81	23812,69	23851,48	24987,73
14,4	19151,72	19219,04	19889,84	22147,93	23311,84	23623,63	23789,62	23832,81	24924,88
14,2	19137,22	19205,98	19876,66	22102,53	23272,48	23530,66	23755,73	23822,72	24856,92
14,0	19121,56	19191,49	19861,51	22060,07	23228,16	23433,83	23714,59	23813,61	24783,94
13,8	19104,63	19175,41	19844,08	22020,66	23179,64	23333,85	23667,88	23801,98	24706,07
13,6	19086,36	19157,54	19824,06	21984,12	23126,29	23231,00	23615,64	23786,35	24623,54
13,4	19066,65	19137,68	19801,12	21950,20	23067,80	23125,42	23557,44	23765,81	24536,64
13,2	19045,41	19115,59	19774,90	21918,49	23003,74	23017,45	23492,87	23739,64	24445,67
13,0	19022,58	19091,03	19745,02	21888,42	22906,06	22934,91	23421,38	23707,20	24350,94
12,8	18998,12	19063,70	19711,12	21859,35	22792,89	22860,14	23342,63	23667,89	24252,73
12,6	18972,01	19033,30	19672,84	21830,35	22677,33	22780,09	23256,48	23621,17	24151,28
12,4	18944,27	18999,47	19629,83	21800,37	22559,59	22695,05	23163,01	23566,56	24046,77
12,2	18914,98	18961,86	19581,81	21768,04	22439,85	22604,84	23062,59	23503,65	23939,32
12,0	18884,27	18920,10	19528,57	21732,05	22318,32	22510,33	22955,82	23432,19	23829,02
11,8	18852,33	18873,78	19470,03	21690,78	22195,21	22411,84	22843,69	23352,03	23715,92
11,6	18819,42	18822,50	19406,25	21642,63	22070,78	22309,85	22727,00	23263,15	23600,09
11,4	18765,86	18785,92	19337,57	21585,99	21945,31	22204,85	22607,05	23165,77	23481,60
11,2	18703,48	18752,20	19264,73	21519,45	21819,12	22097,30	22484,78	23060,26	23360,63
11,0	18635,02	18718,80	19189,26	21441,86	21692,58	21987,59	22361,32	22947,21	23237,37
10,8	18620,37	18686,32	19114,50	21352,52	21566,11	21876,04	22237,85	22827,40	23112,17
10,6	18654,51	18674,98	19049,15	21251,19	21440,28	21762,95	22115,28	22701,98	22985,41
10,4	18626,34	18711,34	19017,59	21138,18	21315,77	21648,57	21994,82	22572,13	22857,66
10,2	18646,81	18695,12	19057,16	21014,38	21193,56	21533,19	21877,60	22439,45	22729,55
10,0	18632,76	18704,85	19162,20	20881,27	21075,06	21417,22	21764,86	22305,76	22601,88
9,8	18560,08	18771,23	19305,79	20740,92	20962,38	21301,24	21657,87	22173,12	22475,60
9,6	18548,39	18846,18	19474,17	20596,08	20859,09	21186,11	21558,01	22044,09	22351,89
9,4	18543,69	18929,69	19658,08	20450,33	20771,80	21073,08	21466,68	21921,80	22232,15
9,2	18547,34	19021,07	19843,25	20308,32	20714,30	20963,83	21385,63	21810,22	22118,11
9,0	18560,90	19118,12	19999,99	20176,70	20715,23	20860,91	21316,79	21715,23	22011,84
8,8	18586,10	19215,19	20065,79	20088,08	20760,49	20816,97	21262,58	21647,69	21915,81

R	(10) 1	(11) 1	(12) 1	(13) 1	(14) 1	(15) 1	(16) 1	(17) 1	(18) 1
8,6	18624,90	19299,73	19993,44	20107,49	20680,66	20985,97	21226,15	21633,18	21832,97
8,4	18679,49	19351,32	19985,45	20097,16	20613,63	21140,72	21213,22	21731,07	21766,79
8,2	18752,34	19360,12	20057,40	20086,70	20566,86	21202,89	21238,88	21721,00	21976,73
8,0	18846,19	19345,45	20090,98	20197,65	20545,89	21243,60	21278,82	21700,36	21975,89
7,8	18964,10	19335,10	20122,03	20383,97	20557,00	21310,93	21335,50	21709,89	21987,66
7,6	19109,71	19349,01	20187,96	20602,13	20610,32	21404,96	21435,61	21755,35	22037,68
7,4	19286,65	19401,30	20297,36	20703,50	20857,51	21533,07	21589,66	21843,21	22132,26
7,2	19489,58	19513,90	20459,22	20855,01	21140,17	21710,70	21797,63	21980,71	22278,41
7,0	19660,45	19761,75	20683,23	21069,75	21457,67	21948,20	22062,93	22175,99	22483,95
6,8	19892,99	20069,51	20979,93	21356,22	21817,37	22255,02	22387,15	22438,60	22757,46
6,6	20207,36	20437,30	21360,79	21722,59	22228,72	22640,80	22763,30	22788,73	23108,24
6,4	20615,78	20875,04	21838,05	22176,55	22701,15	23115,43	23191,59	23240,82	23546,23
6,2	21130,51	21393,81	22424,61	22725,20	23241,43	23687,31	23713,32	23773,15	24081,86
6,0	21763,82	22004,84	23133,62	23375,01	23851,20	24333,05	24376,16	24396,48	24725,72
5,8	22527,31	22718,72	23977,94	24131,65	24526,28	25077,14	25124,44	25183,03	25488,08
5,6	23430,76	23544,84	24968,98	25000,07	25262,63	25948,19	25985,11	26117,86	26378,21
5,4	24468,00	24503,50	25980,30	26066,44	26117,43	26955,54	26986,76	27191,25	27403,39
5,2	25546,66	25695,03	26931,67	27094,72	27427,03	28103,84	28132,41	28256,90	28409,11
5,0	26832,62	27050,73	27897,44	28323,49	28897,70	28976,11	29396,56	29423,04	29772,36
4,8	28377,38	28543,61	28972,36	29679,52	29837,13	30521,80	30825,24	30846,89	31279,82
4,6	30044,65	30051,42	30284,99	30839,56	31179,22	32277,42	32376,93	32397,91	32858,22

**Tab. B.7.** Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (19-21) 1. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(19) 1	(20) 1	(21) 1
86,0	25701,88	25737,54	26307,59
84,0	25701,57	25737,54	26307,58
82,0	25701,57	25737,53	26307,57
80,0	25701,56	25737,53	26307,55
78,0	25701,56	25737,52	26307,53
76,0	25701,56	25737,51	26307,51
74,0	25701,56	25737,50	26307,49
72,0	25701,55	25737,49	26307,46
70,0	25701,55	25737,47	26307,42
68,0	25701,54	25737,46	26307,37
66,0	25701,54	25737,43	26307,31
64,0	25701,53	25737,41	26307,24
62,0	25701,52	25737,38	26307,14
60,0	25701,50	25737,33	26307,02
58,0	25701,49	25737,28	26306,85
56,0	25701,46	25737,21	26306,64
54,0	25701,44	25737,12	26306,34
52,5	25701,41	25737,04	26306,05
48,0	25701,28	25736,66	26304,54
46,0	25701,19	25736,39	26303,36
44,0	25701,07	25736,02	26301,67
42,0	25700,90	25735,50	26299,26
40,0	25700,65	25734,77	26295,92
39,0	25700,49	25734,29	26293,84
38,0	25700,30	25733,71	26291,48
37,0	25700,07	25733,00	26288,86
36,0	25699,78	25732,14	26286,01
35,0	25699,44	25731,08	26283,02
34,0	25699,01	25729,76	26280,02
33,0	25698,49	25728,13	26277,17
32,0	25697,84	25726,07	26274,69
31,0	25697,03	25723,46	26272,84
30,5	25696,55	25721,91	26272,23
30,0	25696,01	25720,14	26271,87
29,5	25695,41	25718,15	26271,78
29,0	25694,73	25715,88	26272,00
28,5	25693,97	25713,31	26272,54
28,0	25693,11	25710,38	26273,42
27,5	25692,14	25707,05	26274,65
27,0	25691,04	25703,26	26276,24
26,5	25689,80	25698,93	26278,18
26,0	25688,38	25693,99	26280,46
25,5	25686,78	25688,37	26283,07
25,0	25681,95	25684,95	26285,97
24,5	25674,65	25682,86	26289,10
24,0	25666,33	25680,48	26292,37
23,5	25656,89	25677,75	26295,62
23,0	25646,21	25674,61	26298,58
22,5	25634,16	25671,00	26300,70
22,0	25620,69	25666,82	26300,81
21,5	25605,75	25661,99	26296,09
21,0	25589,44	25656,36	26279,99
20,5	25572,57	25649,79	26244,10

R	(19) 1	(20) 1	(21) 1
20,0	25559,75	25642,08	26192,10
19,8	25554,16	25638,63	26169,60
19,6	25548,25	25634,94	26147,08
19,4	25541,97	25630,99	26124,97
19,2	25535,30	25626,76	26103,53
19,0	25528,16	25622,22	26082,96
18,8	25520,51	25617,35	26063,37
18,6	25512,27	25612,11	26044,81
18,4	25503,38	25606,48	26027,29
18,2	25493,74	25600,41	26010,77
18,0	25485,38	25593,86	25995,21
17,8	25480,43	25586,78	25980,49
17,6	25476,20	25579,12	25966,51
17,4	25472,77	25570,81	25953,15
17,2	25470,28	25561,79	25940,26
17,0	25468,87	25551,98	25927,68
16,8	25468,68	25541,29	25915,25
16,6	25469,90	25529,62	25902,79
16,4	25472,68	25516,85	25890,13
16,2	25477,21	25502,86	25877,08
16,0	25483,67	25487,51	25863,44
15,8	25470,62	25492,24	25849,01
15,6	25452,01	25503,08	25833,61
15,4	25431,47	25516,48	25817,11
15,2	25408,76	25531,99	25781,42
15,0	25383,61	25549,98	25738,36
14,8	25355,74	25569,78	25691,04
14,6	25324,80	25589,84	25638,84
14,4	25290,43	25579,70	25607,21
14,2	25252,22	25514,89	25610,17
14,0	25209,75	25441,85	25593,17
13,8	25162,53	25360,17	25561,13
13,6	25110,07	25270,12	25519,60
13,4	25051,86	25172,98	25470,52
13,2	24987,38	25071,26	25383,06
13,0	24916,11	24968,12	25275,53
12,8	24837,59	24866,09	25166,22
12,6	24751,39	24767,86	25053,96
12,4	24657,21	24674,93	24938,02
12,2	24554,83	24587,83	24818,72
12,0	24444,21	24505,65	24698,33
11,8	24325,50	24422,82	24583,72
11,6	24199,04	24325,64	24489,73
11,4	24065,37	24204,38	24427,79
11,2	23925,23	24065,92	24391,69
11,0	23779,55	23918,11	24256,62
10,8	23629,42	23764,88	24104,23
10,6	23476,08	23608,34	23946,85
10,4	23320,87	23449,98	23785,67
10,2	23165,23	23291,09	23621,99
10,0	23010,73	23132,92	23457,26
9,8	22858,99	22976,81	23293,06
9,6	22711,79	22824,25	23131,21
9,4	22571,02	22676,98	22973,73
9,2	22438,76	22536,97	22822,94
9,0	22317,32	22406,54	22681,51
8,8	22209,28	22288,40	22552,54



R	(19) 1	(20) 1	(21) 1
8,6	22117,55	22185,67	22439,81
8,4	22045,46	22102,03	22348,59
8,2	21996,79	22041,74	22292,36
8,0	22009,15	22179,03	22419,38
7,8	22010,38	22197,43	22805,69
7,6	22051,47	22233,43	22826,73
7,4	22139,58	22313,19	22894,01
7,2	22282,77	22446,93	23015,61
7,0	22489,84	22644,08	23200,53
6,8	22770,51	22914,69	23458,77
6,6	23135,10	23269,59	23801,20
6,4	23594,93	23720,37	24239,46
6,2	24162,46	24279,15	24785,59
6,0	24850,54	24958,04	25451,62
5,8	25670,63	25768,56	26248,91
5,6	26632,01	26720,59	27187,25
5,4	27654,81	27741,11	27821,70
5,2	28567,78	29000,79	29074,53
5,0	29871,13	30409,32	30478,23
4,8	31300,76	31959,30	32025,25
4,6	32866,31	33637,39	33702,04

**Tab. B.8.** Adiabatyczne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-9) 2. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(1) 2	(2) 2	(3) 2	(4) 2	(5) 2	(6) 2	(7) 2	(8) 2	(9) 2
86,0	12818,89	16973,63	19357,39	19357,39	19358,05	23790,89	25698,72	25701,56	25701,57
84,0	12818,89	16973,63	19357,38	19357,39	19358,05	23790,89	25698,72	25701,56	25701,57
82,0	12818,89	16973,63	19357,38	19357,39	19358,05	23790,89	25698,71	25701,55	25701,57
80,0	12818,89	16973,63	19357,38	19357,39	19358,05	23790,88	25698,71	25701,55	25701,56
78,0	12818,89	16973,63	19357,38	19357,39	19358,05	23790,88	25698,71	25701,55	25701,56
76,0	12818,89	16973,63	19357,38	19357,39	19358,04	23790,87	25698,71	25701,54	25701,56
74,0	12818,88	16973,63	19357,38	19357,38	19358,04	23790,87	25698,70	25701,54	25701,56
72,0	12818,88	16973,63	19357,38	19357,38	19358,04	23790,86	25698,70	25701,53	25701,55
70,0	12818,88	16973,63	19357,37	19357,38	19358,04	23790,85	25698,69	25701,52	25701,55
68,0	12818,88	16973,63	19357,37	19357,38	19358,04	23790,83	25698,69	25701,51	25701,54
66,0	12818,87	16973,63	19357,37	19357,38	19358,04	23790,82	25698,68	25701,50	25701,54
64,0	12818,87	16973,63	19357,36	19357,37	19358,03	23790,80	25698,67	25701,48	25701,53
62,0	12818,86	16973,63	19357,36	19357,37	19358,03	23790,78	25698,65	25701,46	25701,52
60,0	12818,86	16973,63	19357,35	19357,37	19358,02	23790,75	25698,64	25701,43	25701,50
58,0	12818,85	16973,62	19357,34	19357,36	19358,02	23790,72	25698,61	25701,39	25701,49
56,0	12818,84	16973,62	19357,33	19357,36	19358,01	23790,67	25698,59	25701,35	25701,46
54,0	12818,82	16973,62	19357,31	19357,35	19358,00	23790,62	25698,55	25701,29	25701,44
52,5	12818,81	16973,61	19357,30	19357,34	19357,99	23790,57	25698,51	25701,23	25701,41
48,0	12818,75	16973,60	19357,24	19357,31	19357,95	23790,33	25698,33	25700,94	25701,28
46,0	12818,71	16973,58	19357,19	19357,29	19357,93	23790,16	25698,20	25700,72	25701,19
44,0	12818,65	16973,56	19357,13	19357,26	19357,89	23789,94	25697,99	25700,41	25701,07
42,0	12818,58	16973,54	19357,05	19357,21	19357,84	23789,63	25697,67	25699,98	25700,90
40,0	12818,47	16973,51	19356,93	19357,15	19357,77	23789,20	25697,09	25699,38	25700,65
39,0	12818,40	16973,49	19356,85	19357,11	19357,73	23788,91	25696,61	25699,02	25700,49
38,0	12818,32	16973,46	19356,76	19357,07	19357,68	23788,57	25695,92	25698,64	25700,30
37,0	12818,22	16973,43	19356,64	19357,01	19357,61	23788,16	25694,93	25698,24	25700,07
36,0	12818,10	16973,39	19356,50	19356,94	19357,54	23787,65	25693,53	25697,83	25699,78
35,0	12817,96	16973,34	19356,33	19356,85	19357,45	23787,02	25691,56	25697,39	25699,44
34,0	12817,78	16973,28	19356,12	19356,75	19357,34	23786,24	25688,82	25696,90	25699,01
33,0	12817,57	16973,20	19355,85	19356,62	19357,20	23785,26	25685,02	25696,33	25698,49
32,0	12817,30	16973,11	19355,52	19356,46	19357,04	23784,00	25679,71	25695,64	25697,83
31,0	12816,96	16972,98	19355,09	19356,27	19356,83	23782,37	25672,25	25694,81	25697,02
30,5	12816,77	16972,91	19354,83	19356,15	19356,71	23781,38	25667,42	25694,32	25696,54
30,0	12816,55	16972,83	19354,54	19356,01	19356,57	23780,24	25661,67	25693,77	25696,00
29,5	12816,30	16972,73	19354,20	19355,86	19356,42	23778,93	25654,79	25693,16	25695,40
29,0	12816,01	16972,62	19353,82	19355,69	19356,24	23777,41	25646,54	25692,47	25694,72
28,5	12815,70	16972,50	19353,38	19355,50	19356,05	23775,65	25636,65	25691,70	25693,95
28,0	12815,34	16972,36	19352,88	19355,28	19355,83	23773,59	25624,75	25690,84	25693,09
27,5	12814,93	16972,20	19352,30	19355,04	19355,58	23771,18	25610,42	25689,85	25692,11
27,0	12814,47	16972,01	19351,63	19354,75	19355,29	23768,34	25593,16	25688,75	25691,00
26,5	12813,95	16971,79	19350,84	19354,43	19354,96	23764,99	25572,34	25687,49	25689,75
26,0	12813,34	16971,54	19349,92	19354,06	19354,59	23761,00	25547,27	25686,07	25688,32
25,5	12812,65	16971,24	19348,83	19353,63	19354,16	23756,25	25517,13	25684,45	25686,70
25,0	12811,86	16970,89	19347,54	19353,14	19353,66	23750,55	25481,04	25682,60	25684,86
24,5	12810,94	16970,48	19346,01	19352,57	19353,09	23743,68	25438,07	25680,49	25682,75
24,0	12809,88	16970,00	19344,17	19351,91	19352,43	23735,35	25387,35	25678,08	25680,34
23,5	12808,65	16969,41	19341,95	19351,15	19351,66	23725,19	25328,12	25675,31	25677,58
23,0	12807,22	16968,72	19339,26	19350,25	19350,76	23712,72	25259,90	25672,12	25674,40
22,5	12805,53	16967,88	19335,97	19349,20	19349,71	23697,31	25182,59	25668,44	25670,75
22,0	12803,55	16966,85	19331,94	19347,97	19348,47	23678,13	25096,55	25664,18	25666,52
21,5	12801,20	16965,60	19326,96	19346,51	19347,01	23654,10	25002,72	25659,33	25661,68
21,0	12798,41	16964,05	19320,77	19344,78	19345,27	23623,78	24902,59	25653,46	25655,93
20,5	12795,06	16962,10	19313,03	19342,71	19343,20	23585,35	24798,27	25646,70	25649,30

R	(1) 2	(2) 2	(3) 2	(4) 2	(5) 2	(6) 2	(7) 2	(8) 2	(9) 2
20,0	12791,03	16959,65	19303,30	19340,24	19340,73	23536,56	24692,43	25638,75	25641,52
19,8	12789,19	16958,48	19298,73	19339,12	19339,60	23513,56	24650,36	25635,18	25638,03
19,6	12787,20	16957,19	19293,71	19337,91	19338,39	23488,33	24608,74	25631,36	25634,31
19,4	12785,04	16955,77	19288,19	19336,60	19337,08	23460,68	24567,79	25627,27	25630,34
19,2	12782,71	16954,19	19282,12	19335,18	19335,68	23430,48	24527,70	25622,88	25626,08
19,0	12780,17	16952,43	19275,44	19333,66	19334,15	23397,57	24488,65	25618,17	25621,51
18,8	12777,41	16950,47	19268,09	19332,00	19332,51	23361,87	24450,81	25613,10	25616,62
18,6	12774,40	16948,27	19259,96	19330,21	19330,73	23323,29	24414,30	25607,66	25611,36
18,4	12771,13	16945,82	19251,01	19328,26	19328,81	23281,81	24379,20	25601,79	25605,70
18,2	12767,55	16943,07	19241,14	19326,15	19326,72	23237,44	24345,58	25595,46	25599,61
18,0	12763,63	16939,98	19230,27	19323,85	19324,46	23190,26	24313,44	25588,63	25593,03
17,8	12759,35	16936,49	19218,29	19321,35	19322,00	23140,38	24282,73	25581,25	25585,94
17,6	12754,65	16932,55	19205,11	19318,62	19319,34	23087,97	24253,40	25573,26	25578,25
17,4	12749,48	16928,08	19190,59	19315,63	19316,44	23033,24	24225,33	25564,58	25569,93
17,2	12743,79	16923,02	19174,64	19312,37	19313,28	22976,45	24198,37	25555,17	25560,89
17,0	12737,53	16917,27	19157,11	19308,81	19309,84	22917,88	24172,37	25544,93	25551,07
16,8	12730,61	16910,71	19137,90	19304,90	19306,09	22857,85	24147,15	25533,76	25540,36
16,6	12722,95	16903,22	19116,86	19300,61	19301,99	22796,71	24122,49	25521,58	25528,68
16,4	12714,47	16894,65	19093,90	19295,90	19297,50	22734,82	24098,18	25508,25	25515,94
16,2	12705,06	16884,83	19068,90	19290,72	19292,58	22672,57	24074,01	25493,65	25501,90
16,0	12694,59	16873,55	19041,78	19285,02	19287,19	22610,35	24049,72	25477,62	25486,53
15,8	12682,93	16860,57	19012,47	19278,73	19281,27	22548,55	24025,06	25460,00	25469,63
15,6	12669,92	16845,63	18980,97	19271,78	19274,76	22487,60	23999,76	25440,59	25451,01
15,4	12655,38	16828,41	18948,63	19264,10	19267,60	22427,88	23973,53	25419,16	25430,46
15,2	12639,10	16808,55	18913,09	19255,60	19259,71	22369,77	23946,06	25395,48	25407,74
15,0	12620,84	16785,65	18875,66	19246,17	19251,00	22313,65	23917,01	25369,25	25382,59
14,8	12600,32	16759,26	18836,60	19235,71	19241,38	22259,84	23886,01	25340,17	25354,70
14,6	12577,24	16728,88	18796,27	19224,07	19230,74	22208,63	23852,63	25307,88	25323,76
14,4	12551,22	16694,00	18755,12	19211,13	19218,97	22160,24	23816,45	25271,98	25289,37
14,2	12521,86	16654,05	18713,70	19196,71	19205,91	22114,83	23776,94	25232,06	25251,16
14,0	12488,69	16608,53	18672,64	19180,62	19191,44	22072,47	23733,58	25187,63	25208,67
13,8	12451,17	16556,92	18632,66	19162,66	19175,37	22033,14	23685,78	25138,21	25161,43
13,6	12408,70	16498,81	18594,47	19142,60	19157,51	21996,70	23632,93	25083,18	25108,96
13,4	12360,59	16433,90	18558,83	19120,17	19137,67	21962,89	23574,40	25022,05	25050,73
13,2	12306,08	16362,07	18526,42	19095,07	19115,59	21931,31	23509,63	24954,23	24986,23
13,0	12244,33	16283,37	18497,86	19066,98	19091,02	21901,42	23438,08	24879,18	24914,94
12,8	12174,43	16198,09	18473,68	19035,55	19063,68	21872,48	23359,40	24796,40	24836,39
12,6	12095,40	16106,73	18454,28	19000,37	19033,27	21843,62	23273,39	24705,48	24750,17
12,4	12006,19	16010,00	18439,96	18961,03	18999,43	21813,74	23180,15	24606,17	24655,96
12,2	11905,76	15908,78	18430,92	18917,05	18961,82	21781,57	23080,00	24498,37	24553,54
12,0	11793,05	15804,08	18427,29	18867,96	18920,05	21745,68	22973,56	24382,24	24442,90
11,8	11667,08	15696,96	18429,13	18813,26	18873,72	21704,50	22861,65	24258,14	24324,16
11,6	11526,96	15588,47	18436,51	18752,43	18822,44	21656,41	22745,22	24126,70	24197,66
11,4	11371,97	15479,60	18449,51	18684,96	18765,80	21599,81	22625,34	23988,79	24063,96
11,2	11201,58	15371,21	18468,24	18610,40	18703,42	21533,29	22503,09	23845,43	23923,78
11,0	11015,53	15264,03	18492,82	18528,35	18634,96	21455,71	22379,53	23697,83	23778,07
10,8	10813,86	15158,59	18438,30	18523,70	18560,13	21366,35	22255,75	23547,24	23627,92
10,6	10596,88	15055,30	18340,28	18478,76	18560,93	21264,98	22132,84	23395,02	23474,55
10,4	10365,26	14954,44	18234,12	18390,78	18605,03	21151,93	22011,96	23242,51	23319,32
10,2	10119,91	14856,21	18119,98	18296,29	18656,46	21028,07	21894,28	23091,11	23163,67
10,0	9862,09	14760,84	17998,25	18195,59	18715,69	20894,88	21781,07	22942,19	23009,15
9,8	9593,29	14668,62	17869,61	18089,26	18783,17	20754,44	21673,62	22797,22	22857,41
9,6	9315,32	14580,03	17735,05	17978,15	18859,23	20609,52	21573,30	22657,69	22710,20
9,4	9030,21	14495,75	17595,94	17863,46	18943,86	20463,69	21481,60	22525,24	22569,43
9,2	8740,28	14416,79	17453,98	17746,76	19036,33	20321,66	21400,19	22401,68	22437,17
9,0	8448,13	14344,53	17311,31	17630,06	19134,36	20190,11	21331,00	22289,05	22315,73
8,8	8156,68	14280,73	17170,48	17515,81	19232,17	20079,54	21276,35	22189,69	22207,70

R	(1) 2	(2) 2	(3) 2	(4) 2	(5) 2	(6) 2	(7) 2	(8) 2	(9) 2
8,6	7869,16	14227,66	17034,47	17406,94	19316,90	20007,93	21239,03	22106,31	22115,97
8,4	7589,21	14188,08	16906,71	17306,90	19367,89	20001,41	21222,36	22041,99	22043,89
8,2	7320,90	14165,27	16791,10	17219,68	19375,67	20075,36	21230,32	21995,24	22000,27
8,0	7068,78	14163,12	16692,06	17149,84	19360,28	20216,14	21267,57	21974,34	21985,11
7,8	6837,95	14186,10	16614,48	17102,54	19349,53	20402,96	21339,52	21986,10	22000,85
7,6	6634,13	14239,33	16563,83	17083,57	19363,18	20624,02	21452,14	22036,11	22045,73
7,4	6463,75	14328,58	16546,11	17099,37	19414,93	20874,99	21611,63	22130,62	22143,10
7,2	6333,94	14460,32	16567,89	17157,03	19516,12	21156,31	21823,64	22279,50	22288,36
7,0	6252,67	14641,68	16636,30	17264,32	19677,43	21472,38	22092,57	22482,47	22495,59
6,8	6228,75	14880,41	16758,98	17429,61	19909,76	21831,05	22421,49	22755,90	22776,47
6,6	6271,80	15184,84	16943,97	17661,80	20224,44	22242,22	22813,27	23106,64	23141,17
6,4	6392,23	15563,66	17199,64	17970,12	20633,34	22715,70	23272,09	23544,59	23600,73
6,2	6601,12	16025,70	17534,39	18363,88	21148,70	23258,84	23804,80	24080,15	24167,62
6,0	6909,99	16579,55	17956,41	18852,01	21782,79	23873,88	24423,80	24723,90	24854,96
5,8	7330,49	17233,04	18473,36	19442,58	22547,32	24556,71	25201,54	25486,12	25674,47
5,6	7873,99	17992,59	19091,95	20142,05	23452,64	25301,50	26040,56	26376,06	26635,46
5,4	8550,94	18862,46	19817,65	20954,47	24506,68	26109,63	27016,86	27401,02	27737,82
5,2	9370,33	19843,98	20654,44	21880,68	25713,48	26991,29	28147,28	28565,11	28997,56
5,0	10338,91	20934,91	21604,77	22917,62	27071,37	27960,97	29405,07	29868,10	30399,26
4,8	11460,76	22237,90	22669,75	24058,00	28567,54	29038,61	30853,75	31304,33	31863,87
4,6	12737,00	23717,86	23849,52	25290,60	30102,58	30324,10	32396,29	32862,31	33434,95

**Tab. B.9.** Adiabaticzne potencjały energetyczne cząsteczki NaRb (1-2) 3. Jednostką odległości międzyatomowej  $R$  jest  $a_0$ , a jednostką energii jest  $\text{cm}^{-1}$ . Kontynuacja tabeli na dwóch kolejnych stronach.

R	(1) 3	(2) 3
86,0	19357,39	25701,56
84,0	19357,39	25701,56
82,0	19357,39	25701,55
80,0	19357,39	25701,55
78,0	19357,39	25701,55
76,0	19357,39	25701,54
74,0	19357,38	25701,54
72,0	19357,38	25701,53
70,0	19357,38	25701,52
68,0	19357,38	25701,51
66,0	19357,38	25701,50
64,0	19357,37	25701,48
62,0	19357,37	25701,46
60,0	19357,37	25701,43
58,0	19357,36	25701,39
56,0	19357,36	25701,35
54,0	19357,35	25701,29
52,5	19357,34	25701,23
48,0	19357,31	25700,94
46,0	19357,29	25700,73
44,0	19357,26	25700,43
42,0	19357,21	25700,01
40,0	19357,15	25699,44
39,0	19357,11	25699,09
38,0	19357,07	25698,72
37,0	19357,01	25698,32
36,0	19356,94	25697,90
35,0	19356,86	25697,45
34,0	19356,75	25696,95
33,0	19356,62	25696,37
32,0	19356,47	25695,68
31,0	19356,27	25694,84
30,5	19356,15	25694,35
30,0	19356,02	25693,81
29,5	19355,86	25693,19
29,0	19355,70	25692,51
28,5	19355,50	25691,74
28,0	19355,29	25690,87
27,5	19355,04	25689,90
27,0	19354,75	25688,80
26,5	19354,43	25687,55
26,0	19354,06	25686,13
25,5	19353,64	25684,53
25,0	19353,14	25682,70
24,5	19352,58	25680,61
24,0	19351,92	25678,23
23,5	19351,15	25675,50
23,0	19350,26	25672,36
22,5	19349,21	25668,75
22,0	19347,98	25664,58
21,5	19346,53	25659,74
21,0	19344,81	25654,12
20,5	19342,75	25647,55

R	(1) 3	(2) 3
20,0	19340,30	25639,84
19,8	19339,18	25636,39
19,6	19337,98	25632,70
19,4	19336,69	25628,75
19,2	19335,29	25624,52
19,0	19333,78	25619,99
18,8	19332,15	25615,12
18,6	19330,39	25609,89
18,4	19328,48	25604,25
18,2	19326,41	25598,19
18,0	19324,17	25591,64
17,8	19321,73	25584,56
17,6	19319,08	25576,90
17,4	19316,19	25568,60
17,2	19313,05	25559,58
17,0	19309,62	25549,77
16,8	19305,88	25539,08
16,6	19301,79	25527,41
16,4	19297,31	25514,65
16,2	19292,41	25500,66
16,0	19287,03	25485,31
15,8	19281,12	25468,42
15,6	19274,62	25449,81
15,4	19267,47	25429,27
15,2	19259,59	25406,56
15,0	19250,89	25381,42
14,8	19241,28	25353,54
14,6	19230,65	25322,59
14,4	19218,89	25288,21
14,2	19205,85	25250,00
14,0	19191,39	25207,51
13,8	19175,33	25160,28
13,6	19157,48	25107,80
13,4	19137,65	25049,56
13,2	19115,58	24985,05
13,0	19091,01	24913,75
12,8	19063,67	24835,19
12,6	19033,24	24748,95
12,4	18999,39	24654,71
12,2	18961,77	24552,27
12,0	18919,99	24441,60
11,8	18873,66	24322,83
11,6	18822,38	24196,30
11,4	18765,72	24062,57
11,2	18703,35	23922,36
11,0	18634,89	23776,63
10,8	18560,19	23626,45
10,6	18478,81	23473,06
10,4	18390,81	23317,80
10,2	18296,30	23162,13
10,0	18195,60	23007,60
9,8	18089,29	22855,85
9,6	17978,21	22708,63
9,4	17863,54	22567,86
9,2	17746,87	22435,60
9,0	17630,20	22314,17
8,8	17515,98	22206,14

R	(1) 3	(2) 3
8,6	17407,14	22114,43
8,4	17307,12	22042,36
8,2	17219,93	21993,72
8,0	17150,13	21972,82
7,8	17102,85	21984,60
7,6	17083,91	22034,62
7,4	17099,72	22129,16
7,2	17157,41	22275,25
7,0	17264,71	22480,76
6,8	17430,01	22754,25
6,6	17662,20	23104,97
6,4	17970,51	23542,87
6,2	18364,24	24078,35
6,0	18852,34	24721,99
5,8	19442,84	25484,07
5,6	20142,21	26373,83
5,4	20954,49	27398,56
5,2	21880,91	28562,35
5,0	22918,13	29864,97
4,8	24058,89	31307,81
4,6	25291,97	32925,24