



Научно-исследовательский журнал «Chemical Bulletin»

<https://cb-journal.ru>

2024, Том 7, № 1 / 2024, Vol. 7, Iss. 1 <https://cb-journal.ru/archives/category/publications>

Научная статья / Original article

Шифр научной специальности: 1.4.4. Физическая химия (химические науки)

УДК 544.174.3

DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-1-22-31

## Квантовая модель ангармонических колебаний двухатомной молекулы с переменной силовой константой и малым значением коэффициента ангармоничности

<sup>1</sup> Лякишев В.К. \*,

<sup>2</sup> Перфильев М.С.,

<sup>1</sup> Иркутский государственный университет,

<sup>2</sup> PhD в области математики, независимый исследователь,

\* Ответственный автор E-mail: [lyakishevvladislavkonst@mail.ru](mailto:lyakishevvladislavkonst@mail.ru)

**Аннотация:** в данной работе рассмотрены колебания двухатомной молекулы в рамках квантовой механики как ангармонического осциллятора с малыми значениями коэффициента ангармоничности. На основе общеизвестных моделей квантовых гармонического и ангармонического осцилляторов создана новая модель с переменным значением силовой константы молекулы  $k$ , зависящим от колебательного квантового числа  $n$  и коэффициента ангармоничности  $x_e$ . Математический анализ этой модели подтвердил ее физическую состоятельность. В качестве примера рассчитана энергия колебаний молекулы кислорода в рамках представленной в работе модели.

**Ключевые слова:** молекулярные колебания, квантовый гармонический осциллятор, квантовый ангармонический осциллятор, силовая константа молекулы, потенциал Морзе, коэффициент ангармоничности, молекула кислорода, теорема о вириале

**Для цитирования:** Лякишев В.К., Перфильев М.С. Квантовая модель ангармонических колебаний двухатомной молекулы с переменной силовой константой и малым значением коэффициента ангармоничности // Chemical Bulletin. 2024. Том 7. № 1. С. 22 – 31. DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-1-22-31

Поступила в редакцию: 17 ноября 2023 г.; Одобрена после рецензирования: 20 января 2024 г.; Принята к публикации: 30 марта 2024 г.

## Quantum model of anharmonic vibrations of a diatomic molecule with a variable force constant and a small value of the anharmonicity coefficient

<sup>1</sup> Lyakishev V.K. \*,

<sup>2</sup> Perfilyev M.S.,

<sup>1</sup> Irkutsk State University,

<sup>2</sup> PhD in Mathematics, Independent Researcher,

\* Corresponding author E-mail: [lyakishevvladislavkonst@mail.ru](mailto:lyakishevvladislavkonst@mail.ru)

**Abstract:** in this work, vibrations of a diatomic molecule are considered within the framework of quantum mechanics as an anharmonic oscillator with small values of the anharmonicity coefficient. Based on well-known models of quantum harmonic and anharmonic oscillators, a new model with a variable value of the molecule force constant was created here. The force constant  $k$  depends on the vibrational quantum number  $n$  and the anharmonicity coefficient  $x_e$ . Mathematical analysis of this model confirmed its physical validity. As an example, the vibrational energy of an oxygen molecule was calculated within the framework of the model presented in the work.

**Keywords:** molecular vibration, quantum harmonic oscillator, quantum anharmonic oscillator, molecular force constant, Morse potential, anharmonicity coefficient, oxygen molecule, virial theorem

**For citation:** Lyakishev V.K., Perfilyev M.S. Quantum model of anharmonic vibrations of a diatomic molecule with a variable force constant and a small value of the anharmonicity coefficient. Chemical Bulletin. 2024. 7 (1). P. 22 – 31. DOI: 10.58224/2619-0575-2024-7-1-22-31

The article was submitted: November 17, 2023; Approved after reviewing: January 20, 2024; Accepted for publication: March 30, 2024.

### Введение

Молекулярные колебания как неотъемлемая часть явлений микромира исследовались многочисленными авторами в сотнях научных работ. Как известно, при молекулярных колебаниях меняется геометрия молекулы, т.е. происходит изменение положения атомов друг относительно друга. В общем случае  $n$ -атомная молекула обладает  $3n-6$  колебаниями. У линейных молекул  $3n-5$  колебаний, у двухатомных молекул

всего один тип колебаний, при котором меняется межатомное расстояние [1].

Любая молекула представляет собой динамическую систему, в которой происходят колебания ядер, движение электронов, взаимодействия частиц с нулевыми флуктуациями электромагнитного поля, испускание и поглощение связанными электронами виртуальных фотонов. Изучение этих явлений является актуальной задачей для физической химии, молекулярной

физики и квантовой механики.

Цели данной работы – вывод новой формулы энергии колебаний ангармонического осциллятора при малых значениях коэффициента ангармоничности, математический анализ этой модели и расчет энергии колебаний молекулы кислорода при помощи полученной формулы.

### Материалы и методы исследований

В качестве методологической базы в работе использованы формулы для энергии колебаний гармонического квантового осциллятора, энергии колебаний ангармонического квантового осциллятора с потенциалом Морзе и аппарат математического анализа. Идеей работы является замена табличной силовой константы  $k$  молекулы на зависящую от коэффициента ангармоничности  $x_e$  и колебательного квантового числа  $n$  силовую константу  $k$ .

### Результаты и обсуждения

В классической механике связи между атомами ведут себя подобно пружинам, в гармоническом приближении они подчиняются закону Гука  $F=kx$ , т.е. сила, которую необходимо приложить для деформации пружины, прямо пропорциональна величине этой деформации. В случае молекулярных колебаний коэффициент пропорциональности  $k$  называют силовой константой. В квантовой механике, как и в классической, потенциальная энергия гармонического осциллятора является квадратической функцией от нормальной координаты, а решение уравнения Шредингера даёт значение энергии колебаний

$$E_n = h \left( n + \frac{1}{2} \right) \nu = h \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (1)$$

где  $n=0,1,2,\dots$  – значение квантового числа.

Энергия основного состояния

$$E_0 = \frac{h\nu}{2} \text{ называется нулевой энергией [2].}$$

Для случая двухатомной молекулы роль массы  $m$  будет играть приведенная масса  $m = \frac{m_A m_B}{m_A + m_B}$ , где  $m_A$  и  $m_B$  – массы составляющих молекулу атомов А и В. Если молекула состоит из двух одинаковых атомов, то  $m_A = m_B$ , поэтому  $m = \frac{m_A}{2}$ . Тогда энергия колебаний такой молекулы

$$E_n = h \left( n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{\frac{k}{m_A}},$$

где  $n$  – колебательное квантовое число. Часто в научной литературе по молекулярной спектроскопии колебательное квантовое число обозначается буквой  $V$ .

Рассмотрим случай двухатомной молекулы. В обычных условиях молекула находится в состоянии устойчивого равновесия, а ее ядра совершают колебательные движения относительно центра инерции молекулы, причем изменение положения ядер приводит к локальному изменению электронного состояния молекулы. Известно, что электронная энергия молекулы значительно превосходит энергию колебательного движения, а энергия колебательного движения значительно превосходит энергию вращательного движения.

Пусть отклонения ядер от положения устойчивого равновесия малы, т.е.  $|u| = |R - R_0| \ll R_0$ , тогда силовая постоянная  $k = \frac{d^2 U}{dR^2}$  в точке  $R = R_0$ , где  $R$  – расстояние между ядрами,  $R_0$  – равновесное положение атомов. Кривая потенциальной энергии является

квадратической функцией  $U(R) = U(R_0) + \frac{ku^2}{2}$ , а колебания молекулы происходят по закону гармонического осциллятора, т.е. смещение

$$u = u_0 \cos(2\pi\nu t),$$

где  $u_0$  – амплитуда, а  $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$  – собственная частота колебаний [3].

Силовая постоянная колебаний молекулы  $k$  имеет порядок 1Н/см и определяется взаимодействием зарядов ядер и электронов, она характеризует упругие свойства химической связи при малых смещениях. С ростом кратности связи значение  $k$  также растет. Например, для молекулы кислорода силовая константа равна 11,76 Н/см. Более прочная связь соответствует большей силовой постоянной, но общая теоретическая зависимость между энергией диссоциации и силовой постоянной не выявлена. Для небольших молекул делаются попытки расчета силовых постоянных методами квантовой механики: полная электронная энергия молекулы записывается как функция смещения ядер относительно положения равновесия и рассчитываются вторые производные потенциальной энергии по каждой координате.

Наинизшие по энергии нулевые колебания обязаны своим существованием принципу неопределенности, согласно которому частица не может находиться в одной определенной точке и одновременно иметь нулевую кинетическую энергию. Специфическое правило отбора для переходов между колебательными стационарными уровнями гармонического осциллятора записывается как  $\Delta n = \pm 1$ , т.е. спектр гармонического осциллятора состоит из одной линии с частотой  $\nu_0$ , называемой собственной (фундаментальной) частотой осциллятора, так как

возможны лишь переходы между соседними уровнями.

Для ангармонического осциллятора зависимость потенциальной энергии от координаты не является квадратической. Специфическое правило отбора для спектров ангармонического осциллятора  $\Delta n = \pm 1; \pm 2; \pm 3; \dots$ , а его спектр представляет собой систему сближающихся полос (первая полоса называется фундаментальной, а остальные полосы лежат в области более высоких частот и называются обертонами). Модель ангармонического осциллятора, колебания которого не подчиняются закону синуса, возникает в связи с тем, что вдали от положения равновесия в решении уравнения Шредингера присутствует ангармоническая поправка [4]. Энергия диссоциации (т.е. энергия, необходимая для разрушения химической связи в молекуле) может быть определена из колебательного спектра для случая ангармонического колебаний. Также нужно помнить, что необходимым условием для поглощения инфракрасного излучения молекулой является изменение ее дипольного момента при колебаниях. Поэтому двухатомные молекулы, состоящие из одинаковых атомов, не будут поглощать ИК-радиацию [5].

Флуктуации энергии единицы объема вакуума, связанные с рождением и уничтожением виртуальных частиц, и большие амплитуды колебаний приводят к достаточно сложной колебательной динамике, поэтому в целом модель гармонического осциллятора противоречит экспериментальным данным.

Рассмотрим более подробно гармонический и ангармонический осцилляторы. Уравнение Шредингера для одномерного гармонического

осциллятора имеет вид

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2\Psi = E\Psi,$$

а волновые функции получаются умножением

полиномов Чебышева-Эрмита на  $e^{-\frac{\xi^2}{2}}$ , где

$\xi = x\sqrt{\frac{k}{\hbar\omega}}$ . Волновые функции как обычно

нормируют к единице:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left( P(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \right)^2 d\xi = 1.$$

Уровни энергии гармонического осциллятора эквидистантны, т.е. равноудалены друг от друга. В случае, когда существенное значение имеют лишь низшие колебательные уровни (согласно распределению Больцмана [6] большая часть лёгких двухатомных молекул при комнатной температуре находится на нулевом колебательном уровне), модель гармонического осциллятора может быть успешно использована. Для более точного описания потенциальной кривой двухатомной молекулы используется функция Морзе  $U = D_e(1 - e^{-\beta(r-r_e)})^2$ , где  $D_e$  – энергия диссоциации, отсчитанная от минимума потенциальной кривой,  $\beta$  – некоторый постоянный для каждой молекулы параметр. При  $r = r_e$

получим значение  $U = 0$ , при больших смещениях

$x$  получим значение  $U \approx D_e$ , т.е. при больших

смещениях может произойти диссоциация молекулы. При использовании потенциала Морзе решение уравнения Шредингера существует при собственных значениях энергии колебаний

$$E_V = \hbar\omega_e \left( V + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_e x_e \left( V + \frac{1}{2} \right)^2, \quad (2)$$

где  $V$  – квантовое колебательное число,  $\omega_e$  –

колебательная постоянная молекулы, называемая

также собственной частотой колебаний и имеющая

размерность  $\text{м}^{-1}$ ,  $x_e$  – коэффициент

ангармоничности (имеет значение от нескольких

тысячных до нескольких сотых и является

безразмерной величиной). При увеличении

квантового числа  $V$  колебательные уровни

сближаются, энергия колебаний может достичь

максимального значения и тогда произойдет

диссоциация молекулы. Наибольшее квантовое

число можно найти из условия максимума энергии

$\frac{dE_V}{dV} = 0$ , оно составит  $V_{max} = \frac{1}{2x_e} - \frac{1}{2}$ . Также при

больших значениях квантового числа  $V$  для

уточнения используют трехчленное выражение

для энергии колебаний, содержащее два

коэффициента ангармоничности [7]:

$$E_V = \hbar\omega_e \left( V + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_e x_e \left( V + \frac{1}{2} \right)^2 + \hbar\omega_e y_e \left( V + \frac{1}{2} \right)^3.$$

Запишем формулу (1) в виде

$$E_n = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad (3)$$

где  $k$  – зависящая от квантового колебательного

числа  $n$  и коэффициента ангармоничности  $x_e$

силовая постоянная молекулы.

Формулу (2) запишем в форме

$$E_n = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} - x_e \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (4)$$

Сравнивая выражения (3) и (4), получим равенство

$$\hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{\kappa}{m}} = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} - x_e \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Умножим обе части этого уравнения на  $\frac{\sqrt{m}}{\hbar(n+\frac{1}{2})}$ :

$$\sqrt{\kappa} = \sqrt{k} - \sqrt{k} x_e \left( n + \frac{1}{2} \right).$$

Возводя обе части этого равенства в квадрат, получим

$$\kappa = k - x_e k(2n + 1) = k(1 - x_e(2n + 1)) \quad (5)$$

– итоговое выражение для силовой постоянной  $\kappa$  молекулы, зависящей от колебательного числа  $n$  и табличного значения силовой постоянной

$$\kappa = k - x_e k(2n + 1) + k x_e^2 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2.$$

Ввиду малости коэффициента ангармоничности

$$x_e \text{ слагаемым } k x_e^2 \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \ll 1 \text{ можно}$$

пренебречь. Тогда

молекулы  $k$ . Подставив (5) в (3), получим выражение для энергии колебаний:

$$E_n = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n + 1)} \quad (6)$$

Проверим, соответствует ли полученная формула физической сущности ангармоничных колебаний.

Наибольшее возможное значение квантового числа  $n$  найдем из условия максимума энергии  $\frac{dE_n}{dn} = 0$ :

$$\hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n + 1)} - \frac{\hbar}{2} (2n + 1) \sqrt{\frac{k}{m}} \frac{2x_e}{2\sqrt{1 - x_e(2n + 1)}} = 0.$$

(при дифференцировании выражения (6) использовали правила дифференцирования произведения функций и сложносоставной функции).

Домножим обе части этого уравнения на  $\frac{\sqrt{1 - x_e(2n + 1)}}{\hbar \sqrt{\frac{k}{m}}}$ :

$$1 - x_e(2n + 1) - x_e \left( n + \frac{1}{2} \right) = 0,$$

откуда наибольшее возможное значение

квантового колебательного числа

$$n_{max} = \frac{2 - 3x_e}{6x_e}. \quad (7)$$

(оно может быть дробным числом).

Подставив (7) в (6), найдем энергию диссоциации молекулы

$$E_{дисс} = \frac{\sqrt{3} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}}{9x_e}. \quad (8)$$

Значение для  $(n+1)$ -го уровня энергии согласно формуле (6)

$$E_{n+1} = \hbar \left( n + \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n + 3)}.$$

Тогда разность между энергиями соседних уровней



$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar \left( n + \frac{3}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n+3)} - \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n+1)}. \quad (9)$$

Применим эквивалентное преобразование для малых значений  $t$   $\sqrt{1+t} \approx 1 + \frac{t}{2}$  [8]:

$$\begin{aligned} \sqrt{1 - x_e(2n+1)} &\approx 1 - x_e \left( n + \frac{1}{2} \right); \\ \sqrt{1 - x_e(2n+3)} &\approx 1 - x_e \left( n + \frac{3}{2} \right). \end{aligned}$$

Тогда выражение (9) примет вид

$$\Delta E = \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} (1 - 2nx_e - 2x_e), \quad (10)$$

откуда видно, что с ростом  $n$  расстояние между соседними энергетическими уровнями

$$E_n = \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} - \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 \sqrt{\frac{k}{m}} x_e - \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right)^3 \sqrt{\frac{k}{m}} \frac{x_e^2}{2}. \quad (11)$$

Любая существующая в науке модель ангармонических колебаний является неточной, в том числе и новая модель, представленная в данной работе. Сам же потенциал Морзе с хорошей точностью описывает колебательные уровни средней и нижней частей электронного терма для ряда молекул [10].

Для молекулярных колебаний можно применить теорему о вириале, применяемую в различных разделах физики для стабильной системы, причем теорема вириала также справедлива для квантовой механики [11].

$$\langle T \rangle \approx \langle U \rangle \approx \frac{E_{\text{полная}}}{2} = \frac{1}{2} \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{m}} \sqrt{1 - x_e(2n+1)}. \quad (13)$$

В качестве примера рассмотрим колебательный спектр молекулы кислорода в рамках представленной в работе модели.

Известно, что для молекулы кислорода  $O_2$  коэффициент ангармоничности  $x_e$  равен 0,00076 (что значительно меньше коэффициента ангармоничности для других двухатомных

молекул). Как говорят, колебательные уровни сходятся.

Формула (10) полностью совпадает с формулой разности энергий двух последовательных переходов для ангармонического осциллятора.

Возьмем первые три члена разложения функции  $\sqrt{1+t}$  в ряд Маклорена [9]:

$$\sqrt{1+t} \approx 1 + \frac{t}{2} - \frac{t^2}{8}.$$

Тогда формула (6) запишется в форме

Известно, что для гармонического осциллятора вириальная теорема записывается в форме

$$\langle T \rangle = \langle U \rangle, \quad (12)$$

где  $\langle T \rangle$  и  $\langle U \rangle$  – средние полные кинетическая и потенциальная энергии системы соответственно.

Заметим, что если значение имеют только низшие колебательные уровни, кривая потенциала Морзе близка к параболическому потенциалу гармонического осциллятора, поэтому в этом случае вириальную теорему можно записать в форме

молекул), колебательная постоянная молекулы кислорода  $w_e$  равна  $1580,19 \text{ см}^{-1} = 158019 \text{ м}^{-1}$ .

Также для расчетов используем значение скорости света  $c = 299792458 \text{ м/с}$  и значение постоянной Планка  $h = 4,13566767 \cdot 10^{-15} \text{ эВ} \cdot \text{с}$ . Тогда модифицируем формулу (6) как

$$E_n = hcw_e \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 - x_e(2n + 1)} = 0,19591858925 \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{0,99924 - 0,00152n} \text{ эВ}. \quad (14)$$

Заметим, что формулу (14) можно записать в виде

$$E_n = 0,986267181 E_h \alpha \left( n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 - 0,00152n}, \quad (15)$$

где  $E_h = 27,211386245988 \text{ эВ}$  – энергия Хартри (равна модулю электрической потенциальной энергии атома водорода в основном состоянии);

$\alpha = 0,0072973525693$  – постоянная тонкой структуры (значение, рекомендованное CODATA) является фундаментальной безразмерной физической константой, характеризующей силу электромагнитного взаимодействия.

### Выводы

Таким образом, в данной работе рассмотрены колебания двухатомной молекулы как ангармонического квантового осциллятора с малыми значениями коэффициента ангармоничности и получена новая формула для

энергии его колебаний. В этой новой модели реализована идея с переменным значением силовой константы молекулы  $k$ , зависящим от колебательного квантового числа  $n$  и коэффициента ангармоничности  $x_e$ . Математический анализ этой модели подтвердил соответствие новой формулы необходимым физическим критериям.

Также в работе рассчитана энергия колебаний молекулы кислорода при помощи полученной формулы.

### Список источников

1. Малышев Л.Г., Повзнер А.А. Избранные главы курса физики. Молекулярная физика и термодинамика: учебное пособие / Мин-во науки и высш. обр. РФ. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2020. С. 14 – 18.
2. Кислов А.Н. Нерелятивистская квантовая механика: учебник / Мин-во науки и высш. образования РФ. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2020. С. 101 – 111.
3. Кислов А.Н. Атомная и ядерная физика: учеб. пособие. Екатеринбург: Изд-во Урал. Ун-та, 2017. С. 202 – 212.
4. Соломонов В.И., Спирина А.В., Чолах С.О. Оптическая спектроскопия атомов, молекул и твердых тел: учеб. пособие / М-во науки и высшего образования РФ. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2021. С. 75 – 78.
5. Комяк А.И. Молекулярная спектроскопия: пособие. Минск: БГУ, 2015. С. 97.
6. Алешкевич В.А. Курс общей физики. Молекулярная физика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2016. С. 68 – 69.
7. Физическая химия. Спектрохимия: лабораторный практикум / Министерство образования и науки Российской Федерации, Российский химико-технологический университет имени Д.И. Менделеева; составители: А.В. Гребенник, А.Ю. Крюков М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2017. С. 14 – 17.



8. Письменный Д.Т. Конспект лекций по высшей математике: полный курс. М.: Айрис-пресс, 2020. С. 151.
9. Выгодский М.Я. Справочник по высшей математике. М: Издательство АСТ, 2019. С. 481.
10. Денисов Г.С., Тохадзе К.Г. Возможности формулы Морза при аппроксимации энергии колебательных уровней двухатомной молекулы // Оптика и спектроскопия. 2021. Т. 129, вып. 11. С. 1375 – 1381.
11. Ишмухаметов Б.Х., Кацнельсон М.И., Поликарпов А.Ф. Одноэлектронные задачи квантовой механики в квазиклассическом рассмотрении: Учебный электронный текстовый ресурс. Екатеринбург: Изд-во Урал. Ун-та, 2018. С. 21 – 23.

### References

1. Malyshev L.G., Povzner A.A. Selected chapters of the physics course. Molecular physics and thermodynamics: textbook. Ministry of Science and Higher Education. arr. RF. Ekaterinburg: Ural Publishing House. Univ., 2020. P. 14 – 18.
2. Kislov A.N. Nonrelativistic quantum mechanics: textbook. Ministry of Science and Higher Education. education of the Russian Federation. Ekaterinburg: Ural Publishing House. Univ., 2020. P. 101 – 111.
3. Kislov A.N. Atomic and nuclear physics: textbook. allowance. Ekaterinburg: Ural Publishing House. Univ., 2017. P. 202 – 212.
4. Solomonov V.I., Spirina A.V., Cholah S.O. Optical spectroscopy of atoms, molecules and solids: textbook. Allowance. Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation. Ekaterinburg: Ural Publishing House. Univ., 2021. P. 75 – 78.
5. Komyak A.I. Molecular spectroscopy: a manual. Minsk: BSU, 2015. P. 97.
6. Aleshkevich V.A. General physics course. Molecular physics. M.: FIZMATLIT, 2016. P. 68 – 69.
7. Physical chemistry. Spectrochemistry: laboratory workshop. Ministry of Education and Science of the Russian Federation, Russian Chemical-Technological University named after D.I. Mendeleev; compilers: A.V. Grebennik, A.Yu. Kryukov M.: RKhTU im. D. I. Mendeleeva, 2017. P. 14 – 17.
8. Written D.T. Lecture notes on higher mathematics: a complete course. M.: Iris-press, 2020. P. 151.
9. Vygodsky M.Ya. Handbook of higher mathematics. M: AST Publishing House, 2019. P. 481.
10. Denisov G.S., Tokhadze K.G. Possibilities of the Morse formula in approximating the energy of vibrational levels of a diatomic molecule. Optics and Spectroscopy. 2021. T. 129, issue. 11. P. 1375 – 1381.
11. Ishmukhametov B.Kh., Katsnelson M.I., Polikarpov A.F. Single-electron problems of quantum mechanics in semiclassical consideration: Educational electronic text resource. Ekaterinburg: Ural Publishing House. Univ., 2018. P. 21 – 23.

***Информация об авторах***

Лякишев В.К., Иркутский государственный университет, lyakishevvladislavkonst@mail.ru

Перфильев М.С., PhD в области математики, доктор Международной академии естествознания, независимый исследователь, Иркутск, perfmihserg18011985@mail.ru

© Лякишев В.К., Перфильев М.С., 2024