

حساب الطاقة الدورانية والاهتزازية لايون نظير $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$

نہا مجید حمید قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة المثنى - العراق

الخلاصة

تم في هذا البحث حساب الطاقة الدورانية والطاقة الاهتزازية لايون نظير الـ $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$ في الحالة الأرضية وموازنتها مع قيم الطاقة الدورانية وقيم الطاقة الاهتزازية لايون $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ باستخدام معادلات الطاقة الدورانية ومعادلات الطاقة الاهتزازية .
واستخدم برنامج الماتكاد في حسابات النتائج النظرية.

calculation of rotational and vibrational energy of the Isotope ion $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$

Nyha Majeed Hameed

Department of Physics - College of science -University of Al-Muthanna - Iraq

Abstract

In this research ,we calculate rotational energy and vibrational energy of the Isotope ion $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$ in the ground state and compare them with the values of rotational energy and vibrational energy of the ion $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ using the equations of rotational energy and equations of vibrational energy . Mathcad program used in the calculations of theoretical results.

1-المقدمة:

1-AL-AMIEDY, Dhia Hamdi, SALEH,

Zeyad Adnan, TAHA, Dukra Kamal .

حساب شدة الاهتزاز في الحالة الأرضية والتهيجة للجزيئات ثنائية الذرة أما في دراستنا هذه تم حساب الطاقة الاهتزازية في الحالة الأرضية لايون الجزيئة ثنائية الذرة ونظيرها .

2-الجزء النظري

عند اتحاد ذرة الهيدروجين مع ذرة البريليوم فان الأصرة الرابطة فيما بينهما هي أصرة تساهمية ولما كانت الجزيئة مستقرة فيمكنها أن تتأين مكونة بذلك $(BeH)^+$. وفي حالة إبدال ذرة بنظيرها فأن المسافة البينية لا تتغير، إلا أن التغير يحصل في الكتلة الكلية وبذلك يتغير عزم القصور الذاتي وقيمة ثابت الدوران . وتم حساب طاقة الدوران من المعادلة الآتية (2,8):

$$\mathcal{E}_{ROT} = 2BJ(J+1).....(1)$$

إذ أن:

 $\mathcal{E}_{ROT}$: طاقة الدورانية

B : ثابت الدوران

J : عدد الكم الدوراني وقيمته (0,1,2,.....)

ويمكن إيجاد ثابت الدوران من المعادلة الآتية [9]

$$B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}.....(2)$$

إذ أن:

h : ثابت بلانك

I : عزم القصور الذاتي

c : سرعة الضوء

أما طاقة الاهتزاز فحسبت بالمعادلة الآتية (3,10)

$$\mathcal{E}_v = w_e(v + \frac{1}{2}) - w_e x_e(v + \frac{1}{2})^2.....(3)$$

إذ أن:

we : ثابت التوافقية

we xe : ثابت اللاتوافقية

v : العدد الكمي الاهتزازي وقيمته (0,1,2)

إن طيف الدوران للجزيئات هو قياس الانتقالات التي تحصل بين مستويات الطاقة الدورانية المسموح بها وتحصل هذه الانتقالات في منطقة المايكروويف والأشعة تحت الحمراء البعيدة. ويعزى الامتصاص في منطقة المايكروويف إلى التغيرات الدورانية الصرفة. أي أن الجزيئة يمكنها أن تدور كليا حول المحور المار خلال مركز الثقل وعموديا على الخط الذي يربط المحور البيني للنوى [1,2] . وعند دراسة الجزيئات الخطية التي تمتلك عزوما ثنائية القطبين في منطقة المايكروويف يظهر طيفا مكونا من سلسلة من الخطوط المتتابعة ولقد درس كل من [4,5,6] :

1-AL-AMIEDY, D.H., ALAZAWI

.WASAN R., SADIK, Z.S

2-D.H. Al-Amiedy, B.T. Chiad and

Z.A.Saleh .

3-AL-AMIEDY, Dhia Hamdi ,

SALEH, Zeyad Adnan,; TAHA, Dukra

Kamal.

تأثير الدوران على الجهد في الجزيئات ثنائية الذرة اما في دراستنا هذه فيتم دراسة تأثير الدوران على الطاقة في ايون الجزيئة ثنائية الذرة ونظيرها .

أما الطيف الاهتزازي فيحدث في منطقة الأشعة تحت الحمراء القريبة والأشعة تحت الحمراء الوسطى ويمكن إيجاد طاقتها من معادلة الطاقة الاهتزازية. وان اتحاد الجزيئة مع الشعاع الكهرومغناطيسي يمكن أن يحصل فيما لو استطاعت الجزيئة المهتزة من أن تكون عزما متذبذبا لثنائي القطبين والذي يمكنه الاتحاد مع المجال الكهربائي للإشعاع [3]، ولقد درس كل من [7]:

في الجدول (3) والشكل (1)، إذ نجد أن في الدراسات السابقة تتأثر الطاقة الاهتزازية بالعدد الكمي الاهتزازي في الحالة الأرضية والتهيجة للجزيئات ثنائية الذرة [7]. ووجدنا نفس هذا التأثير ينطبق على ايونات الجزيئات ثنائية الذرة ونظيرها.

جدول (1) يوضح قيم الثوابت الطيفية لايون جزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ ونظيرها (8)

Molecule	Electronic state	Spectroscopic constants		
		$w_e(\text{cm}^{-1})$	$w_{ex_e}(\text{cm}^{-1})$	$r_e(\text{cm}^{-1})$
$(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$	$X^1\Sigma^+$	2221.7	39.79	1.605×10^{-8}
$(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$	$X^1\Sigma^+$	1647.64	21.85	1.311×10^{-8}

جدول (2) يوضح أعلى وأقل قيمة لطاقة الجهد لايون جزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ ونظيرها

الجزيئة	قيمة الطاقة الدورانية		قيمة الطاقة الاهتزازية	
	أعلى قيمة cm^{-1}	أقل قيمة cm^{-1}	أعلى قيمة cm^{-1}	أقل قيمة cm^{-1}
$(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$	6.29×10^4	6288.95	1.894×10^4	1.1×10^3
$(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$	3.45×10^4	3.84×10^3	1.489×10^4	818.35

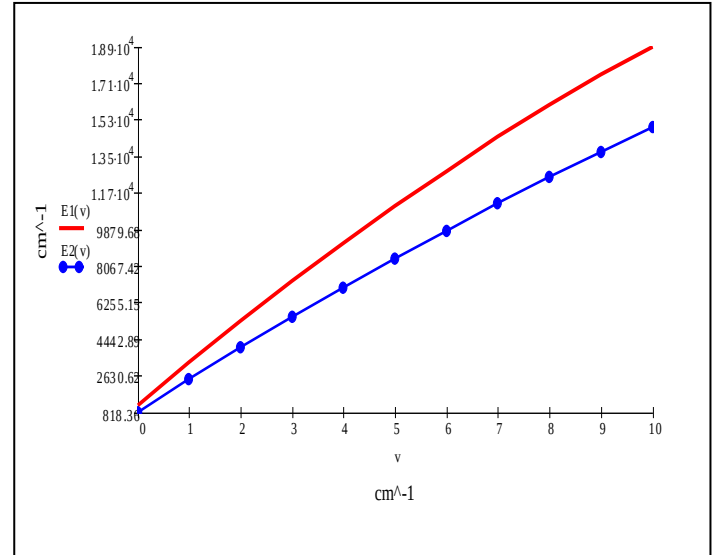
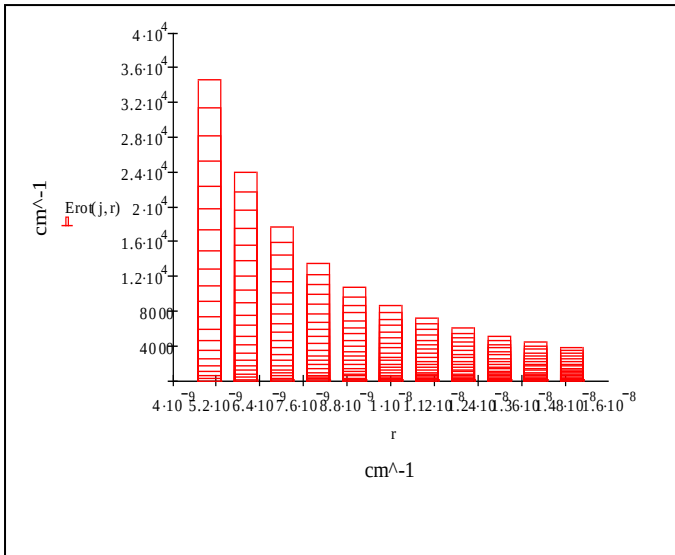
جدول (3) يوضح قيم الطاقة الاهتزازية لايون جزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ ونظيرها

قيمة العدد الكمي الاهتزازي $(\text{cm}^{-1})(v)$	قيم الطاقة الاهتزازية لـ $(\text{cm}^{-1})(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$	قيم الطاقة الاهتزازية لـ $(\text{cm}^{-1})(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$
0	1.101×10^3	818.358
1	3.243×10^3	2.422×10^3
2	5.306×10^3	3.983×10^3
3	7.289×10^3	5.499×10^3
4	9.192×10^3	6.972×10^3
5	1.102×10^4	8.401×10^3
6	1.276×10^4	9.786×10^3
7	1.442×10^4	1.113×10^4
8	1.601×10^4	1.243×10^4
9	1.752×10^4	1.368×10^4
10	1.894×10^4	1.489×10^4

3-النتائج والمناقشة:

بسبب تأثير الإبدال النظائري نجد أن التغير في الكتلة يؤدي إلى التغير في قيمة ثابت الدوران فنجد أن قيمة ثابت الدوران سوف تعاني نقصانا عند زيادة الكتلة وبالتالي فإن المسافات بين الخطوط (فرق الطاقة) للجزيئة الأثقل تكون اصغر من المسافات للجزيئة الأخف [3,11,12]. نلاحظ أن قيم الثوابت الطيفية للجزيئة هي أعلى من قيمها للنظير [8] ، كما موضح في الجدول (1). لذلك نجد أن قيمة الطاقة الدورانية لايون الجزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ أقل من قيمة الطاقة الدورانية لنظير ايون الجزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$ والسبب في ذلك هو أن قيمة ثابت الدوران الذي يكون ذا قيمة أعلى للجزيئة عن قيمته للنظير وبما انه يدخل في معادلة طاقة الدوران سوف

يحدث التغير في قيم الطاقة كما موضح في الجدول (2) والشكل (2و3) ، و نلاحظ من الرسوم البيانية أن ايون الجزيئة ثنائية الذرة ونظيرها يسلك نفس سلوك أي جزيئة ثنائية الذرة إذ أن منحنى الطاقة يبدأ بأعلى قيمة طاقة عند أقل مسافة بينية إلى أن يصل إلى أقل قيمة عند نصف قطر الاتزان ثم يبدأ بالزيادة إلى أن يصل إلى قيمة تتزن فيها الجزيئة وتستقر وينطبق الشيء نفسه على نظير ايون الجزيئة إلا أن قيم الطاقة له أدنى. إذ نجد من الدراسات السابقة [4,5,6] إن قيمة ثابت الدوران تؤثر على قيمة الطاقة للجزيئات ثنائية الذرة وتسلك نفس السلوك. بالإضافة إلى ذلك نجد أن قيمة الطاقة الاهتزازية لايون الجزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^1)^+$ هي أعلى من قيمة الطاقة الاهتزازية لنظير ايون الجزيئة $(\text{Be}^9\text{H}^2)^+$ بسبب كبر قيم الثوابت الطيفية للجزيئة عن قيمها للنظير وبالتالي فإن هذه القيم تدخل في معادلة الطاقة الاهتزازية فسوف يحدث الفرق في قيم الطاقة بين الجزيئة والنظير [7,8] كما موضح

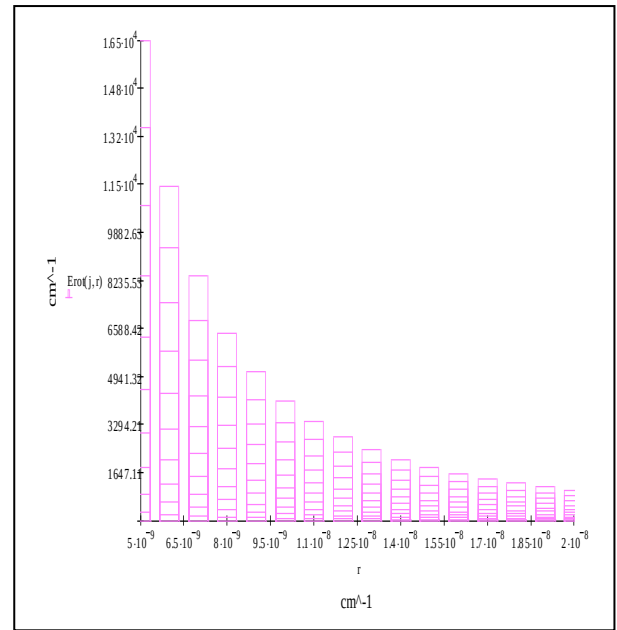


الشكل (3) علاقة الطاقة الدورانية مع نصف قطر
الجزيئة لايون نظير الجزيئة $(Be^9H^2)^+$ في
المستوي الأرضي

الشكل (1) علاقة الطاقة الاهتزازية مع عدد الكم
الاهتزازي لايون جزيئة $(Be^9H^1)^+$
ونظيره $(Be^9H^2)^+$ في المستوى الأرضي

4-الاستنتاجات:

- 1- بسبب التأثير الابدالي أنظائري نجد أن
قيم الطاقة الدورانية والاهتزازية لايون
 $(Be^9H^1)^+$ هي أعلى من قيم الطاقة
الدورانية للنظير $(Be^9H^2)^+$.
- 2- بسبب اختلاف كتلة النظير وكبرها عن
كتلة الذرة نلاحظ اختلاف قيمة ثابت
الدوران وقيم الثوابت الطيفية حيث نجد
أنها ذات قيمة أقل للنظير عن قيمها للذرة
وبالتالي نجد أن قيم الطاقة الاهتزازية
والدورانية أقل للنظير عن قيمها للجزيئة.
- 3- وجد أن ايونات الجزيئات ثنائية الذرة
تسلك نفس سلوك الجزيئات ثنائية الذرة.
- 4- من الدراسات السابقة درس تأثير
الدوران والاهتزاز على طاقة الجزيئات
ثنائية الذرة ألا إننا طبقنا في دراستنا هذه
تأثير الدوران والاهتزاز على طاقة
ايونات الجزيئات ثنائية الذرة ونظيرها
ووجد أنها تسلك نفس السلوك



الشكل (2) علاقة الطاقة الدورانية مع نصف قطر
الجزيئة لايون جزيئة $(Be^9H^1)^+$ في المستوى
الأرضي

9. Weiguo Sun and Hao Feng , J. Phys
B:AT. Mol,

Opt,Phys,32, p.5109-5121
,(1999).

10. S.kron ,M.Lange ,M. Grieser ,L.
Knoll , H. Kreckel ,J.Levin ,R.
Repnaw ,D.Schwalm
,R.Wester , P.Witle , A.Wolf and
D.Zajfman , Phys. Rev. Lett,
Vol .86, No.18 , P.4005
(2001).

11. K.N.Prithivi and

N.Rajamamickan,Rev,Mex, Fis
84,5,432,(2002).

12. P.F.Weck ,K.Kirby and P.C.
Stancil ,J .Chem .Phys, Vol,120,
No .9 P.4216-4222
,(2004).

5-المصادر:

1. G.W.King , "Spectroscopy and
Molecular Structure", Holt,
Rinehart and Winston ,NewYork
,(1964) .

2. G.N.Banwell, "Fundamental of
Molecular Spectroscopy ", 3rd
Edition , Mc Graw - Hill Book
Company (U.K) ,LMD,(1972).

3. D.Jack .Graybeal , "Molecular
Spectroscopy ", Mc Graw –
Hill Book ,(1988)

4-AL-AMIEDY, D.H., ALAZAWI,
WASAN R., SADIK, Z.S.,
Calculation of the maximum
rotational quantum number of
diatomic molecules as a function of
the temperatur., Atti. Fond. G.
Ronchi, LX,5 ,709-713,2005.

5- D.H. Al-Amiedy, B.T. Chiad and
Z.A.Saleh. Rotation effect on Morse
Potential for diatomic molecules.,
Atti Della Fond. G. Ronchi., LXII,
2,197-202 ,2007.

6-AL-AMIEDY, Dhia Hamdi,
SALEH, Zeyad Adnan,; TAHA,
Dukra Kamal.. Rotation efect on
Na₂ molecule, Morse potential for
Atti della Fond. G. Ronchi. LXIV
(4):629-634, 2009.

7- AL-AMIEDY, Dhia Hamdi,
SALEH, Zeyad Adnan, TAHA,
Calculation of the Dukra Kamal.,
vibration intensity of electronic states
X, A, B of Na₂ molecule , Atti della
Fond. G. Ronchi. LXIV,5: 771-
775,2009.

8-G. Herzberg , "Molecular Spectra and
Molecular Structure 1", Spectra of
Diatomic Molecules, Van, Nostrand ,
New York,(1950).