جمهورية العـــراق

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة القادسيـــة – كلية العلوم

قســـم علوم الكيمياء

الطاقة الدورانية في الجزيئات ثنائية الذرة

بحث مقدم الى مجلس كلية العلوم قسم علوم الكيمياء

وهو جزء من متطلبات نيل درجة البكالوريوس في علوم الكيمياء

من قبل الطالب

زينب علي هداوي

بإشراف

أ.م.د حميد جبار حزيران الجبوري

1440 هـ

2019م

بسم الله الرحمن الرحيم

﴿نَرْفَعُ دَرَجَاتٍ مَنْ نَشَاءُ وَفَوْقَ كُلِّ ذِي عِلْمٍ عَلِيمٌ﴾

صدق الله العلي العظيم

سورة يوسف (جزء من الآية 76)

الإهداء

الى رسول الانسانية ونور الاسلام محمد (صل الله علية وآله وسلم)

والى اهل بيته الاطهار الذين قيل فيهم :

(ملح الارض , و زينة الدنيا ,وحلى العالم ,والسنام الاضخم ,والكاهل الاعظم ,ولباب كل جوهر كريم ,وسر كل عنصر شريف ,والطينة البيضاء, والمغرس المبارك ,والنصاب الوثيق, ومعدن الفهم ,وينبوع العلم. . . .)

الى نبض الحياة ومنبع الحنان . . . . . أمي

الى معلمي الغالي ومنار دربي . . . . . أبي

الى سندي وأعزاء قلبي. . . . . .اخوتي واخواتي

الشكر والتقدير

الشكر والحمد لله سياج النعم الذي قدرني في مواصلة دراستي واكمال جهدي المتواضع , الذي هو ثمرة لجهود بذلت لمساعدتي في اتمامه لذا , اجد نفسي ملزماً لتقديم عرفان الجميل لكل من اسهم في ابداء او تقديم اي رأي او مشورة ولكل من احيوا قلبي بنور علمهم.

لذا اتقدم بشكري وتقديري لمشرفي الاستاذ المساعد الدكتور

(حميد جبار حزيران الجبوري)

لتوجيه ومتابعته وإشرافه المتواصل خلال مرحلة البحث واتقدم بالشكر والعرفان الى عمادة كلية العلوم

وقسم علوم الكيمياء واساتذته لما بذلوه من جهود علمية خلال مراحل دراستي الاولية والعليا .

وأخيرا أودُ ان اشكر أسرتي لما قدموا لي من دعم مادي ومعنوي .

دوران الجزيئات

الجزيئة هي تركيب مستقر لذرتين او اكثر مربوطة بعضها مع بعض بقوة كافية بحيث تظهر عملياً كجسيم واحد .

فاذا كانت طاقة النظام اقل من مجموع طاقات الذرات المكونة لها فأن الجزيئة تتكون واذا حصل زيادة في الطاقة بطريقة ما فأن الذرات تتنافر بعضها عن بعض من دون ان تكون جزيئة .

والجزيئات على اساس القيم النسبية لعزم القصور الذاتي . فأذا كان دوران الجسيم حول ثلاثة ابعاد او محاور متعامدة مع بعضها من مركز ثقل الجزيئة . فأن الجزيئة يكون لها ثلاث انواع اساسية من عزم القصور الذاتي والتي لها I_x , I_y,I_z

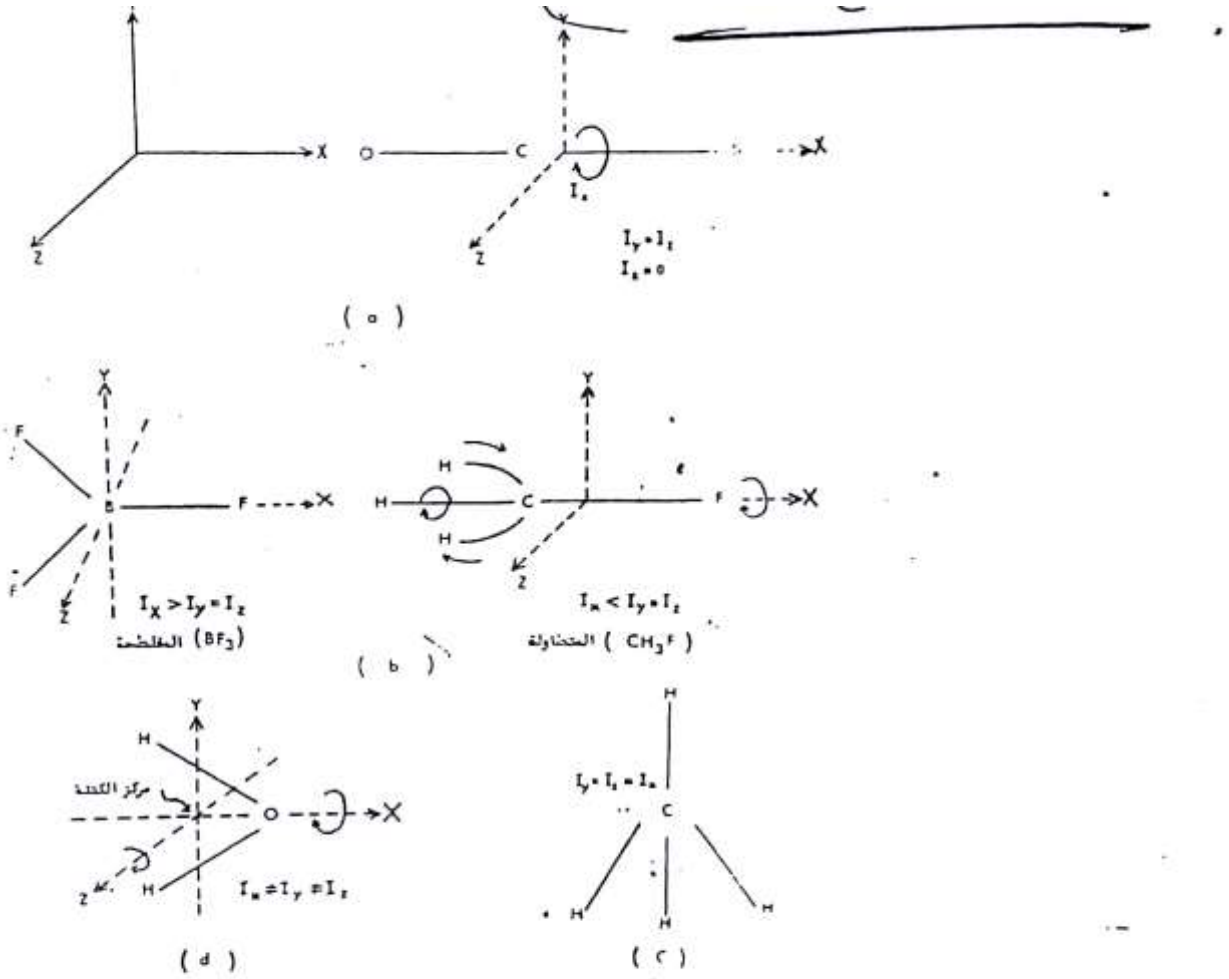
وقبل ان تقوم بدراسة الطاقة الدورانية واطيافها ، سوف نقوم بتقديم انواع الجزيئات على اساس اشكالها (محاورها الرئيسية) ونوع عزوم القصور الذاتية التي يمتلكها وبشكل موجز

جزيئات خطية

وهي الجزيئات التي تترتب ذراتها على خط مستقيم وتشمل الجزيئات الثنائية الذرة والمتعددة الذرات والاتجاهات الثلاث للدوران يمكن تمثيلها كما هو مبين في الشكل (2-Ia) الجزيئة كاربون اوكسي سلفايد (ocs) وكما هو موضح من الشكل فأن عزم القصور الذاتي يختلف عن كل من Iy,Iz حيث ان Iy=Iz وعزم القصور الذاتي Ia صغير جداً ويمكن تقريبة الى الصفر وهذا الجزيئات تعطي اطيافاً بسيطة في منطقة المايكروويف

جزيئات متناظرة القمة

مثل جزيئة فلوريد المثيل CH3F حيث ترتبط ذرات الهيدروجين الثلاثة بذرة الكاربون من جانب واحد ، وترتبط ذرة الفلور بالجانب الاخر من ذرة الكاربون ، يعتبر المحور x هو محور الدوران وذلك لوقوع مركز الثقل على هذا المحور وكذلك فأن عزم القصور الذاتي باتجاها z,y متساوين (Iy=Iz) بينما عزم القصور الذاتي حول المحور x (Ia) لا يمكن اهماله لانه يشمل دوران ذرات الهيدروجين الثلاثة والواقعة خارج محور الدوران (x)



الشكل (1 –2) أنواع الجزيئات.

(a) الجزيئات الخطية (ocs) .(b) الجزيئات المتناظرة القمة (c) الجزيئات الكروية (CH_4) .(d) الجزيئات غير متماثلة التما

جزيئات كروية القمة

وهي الجزيئة التي يتماثل فيها الانواع الثلاثة من عزم القصور الذاتي (Ix,Iy=Iz) ومثال على هذا النوع هي جزيئة الميثان CH4 وعلية فأن هذا النوع من الجزيئات لا يمتلك عزماً لثنائي القطب dipole moment في اي من الاتجاهات الدورانية نتيجة لتماثل الجزيئة . لذلك فأن هذا الجزيئات تعتبر فعالة في منطقة المايكروويف

جزيئات غير متناظرة القمة

وهذا الجزيئة تحتوي على ثلاث انواع مختلفة من عزم القصور الذاتي اي ان

(Ix≠ Iy ≠Iz) ومثال على هذا النوع من الجزيئات هي الماء الشكل (2-Id) ويظهر ان التعبير عن الطاقات الدورانية والطيف الدوراني لهذه الجزيئات هو اعقد بكثير مما ذكر في حالة الجزيئات الخطية والجزيئات المتناظرة والقمة .

الاطياف الجزيئية

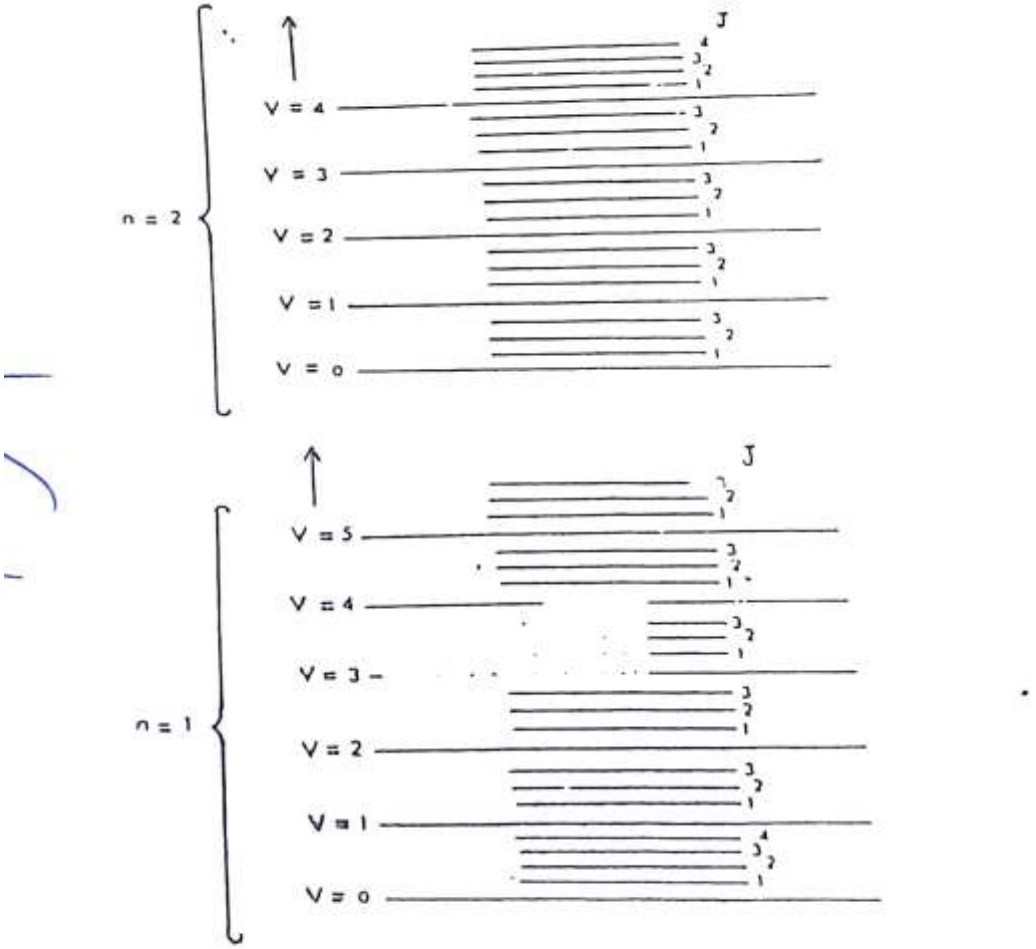
ان الاطياف الذرية تتكون من خطوط ناتجة من انتقالات الكترونية بين مستويات الطاقة الالكترونية للذرة كما جاء في الفصل الاول اما الاطياف الجزيئية فأنها تظهر على شكل حزم عريضة تظهر عند تحليلها بمحال ذو قوة عالية كمجموعة من الخطوط الطيفية الناتجة عن عدد من الانتقالات

هناك انواع عديدة من الحالات الطاقية للجزيئات تشمل مستويات الطاقة الدورانية ومستويات الطاقة الاهتزازية ومستويات الطاقة الالكترونية

ولكن فصل الطاقات بهذا الشكل ما هو الا صورة تقريبية للواقع المعقد اذ ان فصل مستويات الطاقة الالكترونية يتم بتطبيق تقريب بورن – اوبنهايمر كما ان الحركة الدورانية يصاحبها عادة حركة اهتزازية نتيجة الى اهتزاز النواتين نسبة لبعضها لبعض .

ان اغلب الانتقالات الالكترونية للجزيئات يصاحبها ايضاً تغير في مستويات الطاقة الاهتزازية مما يؤدي الى ظهور حزم عريضة كذلك فأن الاطياف الاهتزازية

يصاحبها تغير في مستويات الطاقة الدورانية . ان الفروقات بين مستويات الطاقة الالكترونية تكون اكبر بكثير من فروقات مستويات الطاقة الاهتزازية والتي بدورها تكون اكبر بكثير من مستويات الطاقة الدورانية الشكل (2) يوضح مستويات الطاقة الالكترونية والاهتزازية والدورانية حيث (n) يمثل مستويات لطاقة الالكترونية في الجزيئة



الشكل (2-2) نموذج لمستويات الطاقة الجزيئية الثلاثة بيانياً.

إن كل مستويات طاقة الكترونية مقسم الى مستويات طاقة اهتزازية ثانوية والمتمثلة بعدد الكم الاهتزازي (الجهة اليسرى من لشكل) بكل المستويات الاهتزازية يتناسق معها عدد من المستويات الدورانية والتي تتحده بعدد الكم الدوراني (J) و المبين على الجانب الايمن من الشكل.

إن طيف الدوران للجزيئات هو عبارة عن قياس الانتقالات التي تحصل بين مستويات الطاقة الدورانية المسموح بها. وتحصل الانتقالات الدورانية في منطقتي مطيافية. الموجة الصغرى (Microwave) ومنطقة تحت الحمراء البعيدة ويعزى الامتصاص في منطقة المايكرويف الى التغيرات الدورانية ولكى تعطى الجزيئة طيفا دورانياً يجب أن تمتلك عزماً كهربائيا ثنائي القطب من جانب آخر إذا حصل الانتقال في مستويات الطاقة الاهتزازية (نتيجة زيادة طاقة الاثارة) فإن الانبعاثات سوف تظهر نسبة للتغيرات في أعداد الكم الاهتزازية إضافة الى التغيرات في مستويات الدوران. وهذا الامتصاص أو الانبعاث الناتج عن الحركات الدورانية والاهتزازية للجزيئات تكون في الاغلب في منطقة الاشعة تحت الحمراء. وتتقسم اشعة تحت الحمراء الى ثلاثة مناطق رئيسية حي الاشعة تحت البعيدة (far I.R) وتتراوح بين 200 cm^{-1}– 10: الأشعة تحت الحمراء الوسطئ (Mid I.R) وتتراوح بين 4000cm^{-1} - 200 والأشعة تحت الحمراء القريبة (near I.R) وتتراوح بين 12000cm^{-1} - 4000

وبسبب الصعوبات العملية في توليد وتشخيص الاشارات عند الترددات الواطئة فأن الاشعة تحت الحمراء البعيدة نادراً ما تستخدم في المطيافية. وتعنى منطقة الاشعة تحت الحمراء الوسطى والقريبة بدراسة الانتقالات الاهتزازية الصرفة إضانة الى الانتقالات الاهتزازية الدورانية

ان جميع الاطياف التي تظهر في منطقتي الاشعة المرئية بنفسجية للطيف لايمكن أن تفسر على انها أنا أطياف دورانية أو اهتزازية لأنها في الحقيقة اعقد ما هو متوقع بالنسبة لهذا النوع من الاطياف . كما أن الترددات في هاتين المنطقتين اعلى من الترددات في الدوران أو الاهتزاز وتعزى هذه الاطياف الى الانتقالات الالكترونية في الجزيئات - الجدول رقم (1 -2) يبين الحدود النموذجية لمناطق الطيف المختلفة حسب نوع الانتقال والاجهزة المستخدمة .

جدول رقم (1) طيف الاشعاع الكهرومغناطيسي

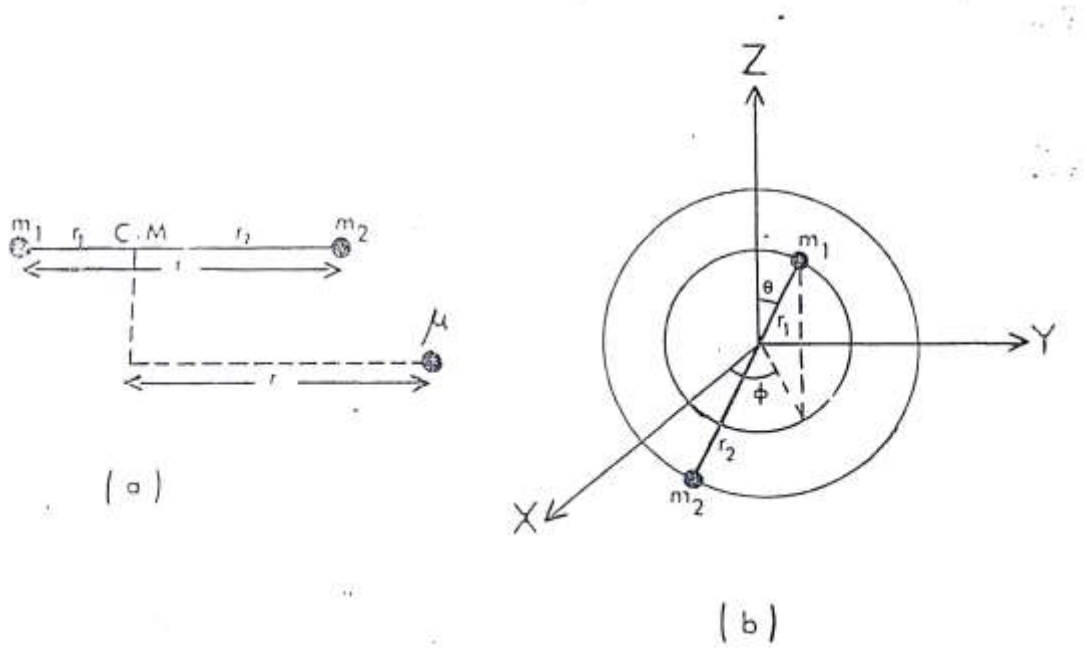
نوع الاشعاع	الطول	الموجي CM	العدد الموجي CM-1	التردد HZ	الطاقة سعرة مول-1	التأثيرات
الراديو الموجه الطويلة	10^{-12}	10^{6}	10^{-6}	$3x10^{4}$	$3x10^{-6}$	التغير باتجاه الحركة المغزلية
الموجه القصيرة	10^{-10}	10^{4}	10^{-4}	$3x10^{6}$	$3x10^{-2}$	الدورانية
التلفزيون	10	10^{2}	1	$3x10^{8}$	2.85	الدورانية
الرادار	10	1	10	$3x10^{10}$	285	اهتزاز (كيلو سعرة)
المايكروويف	10	10^{-1}	10^{2}	$3x10^{11}$	258	كيلو سعرة الغلاف الداخلي
تحت الحمراء	10	10^{-2}	10^{4}	$3x10^{12}$	71.4	كيلو سعرة الغلاف التكافؤ
تحت الحمراء القريبة	10	10^{-4}	10^{4}	$3x10^{14}$	96	كيلو سعرة
المرئي	10	4x10	10^{4}	$3x10^{14}$	10^{8}	الانتقالات النووية
الفوق بنفسجية	10	3x10	10^{8}	$3x10^{4}$	10^{10}	
اشعة x	10	10-1	10^{10}	$3x10^{8}$		
اشعة كاما	10	10-10	10^{8}	$3x10^{20}$		
الاشعة الكونية	10	10-12	10^{12}	$3x10^{22}$		

الطاقة الدورانية للجزيئة الخطية (الدوار الصلد)

ان دراسة الطاقة الدورانية للجزيئات الثنائية الذرة يعتمد على نموذج الدوار الصلد الذي يتألف من كتلتين المسافة بينهما ثابتة . والجزيئات الثنائية الذرة هي جزيئة خطية حيث أن الطرق المعتمدة في الجزيئة الثنائية الذرة تنطبق نفسها على الجزيئات الخطية المتعددة الذرات

نفرض ان الجزيئة الثنائية الذرة تتكون من ذرتين (m2 , m1) مرتبطتين مع بعضها ببعد ثابت (r) لا يتغير اثناء الدوران وبذلك يمكن إهمال الحركة الاهتزازية

الشكل نفرض أن هذا النظام يملك مركز كتلة (Center of Mass) للدوران dقع في مركز الاحداثيات كما هو موضح في الشكل (2) حيث أن r1 يمثل بعد الكتلةm1 عن مركز الكتلة وr2 بعد الكتلة m2 عن مركز الكتلة وبذلك يكون:



الشكل (3 – 2) a- الدوار الصلد لجزيئة ثنائية الذرة
(b) – نظام الاحداثيات الفعلية

ومن تعريف مركز الكتلة يمكن كتابة العلاقات التالية

$$M1r1 = m2r2$$

او

$$R1 = \frac{m2}{m1+m2}2$$

$$R2 = \frac{m2}{m1+m2}2$$

وباستخدام قوانين الفيزياء الكلاسيكية تكون الطاقة الحركية للدوار الصلد الجزيئة ثنائية الذرة تساوي :

$$T=\frac{1}{2}m1v_2^1 m2\ v_2^1$$

ولما كانت المسافة r2 r1 تبقى ثابته اثناء الدوران ، لذا يمكننا استعمال علاقة السرعة الزواية .

$$\omega = \frac{v}{r} \text{ or } v = \omega r$$

لتحصل على :-

$$T=\frac{1}{2}m1\omega^2 r_2^2 m2\omega^2\ v_2^1$$

بالتعويض عن r2 r1 من المعادلة في المعادلة نحصل

$$T=\frac{1}{2}\omega^2 \ \frac{m1m2}{m1+m2}\ r2$$

$$T=\frac{1}{2}\omega^2\mu r^2$$

حيث ان μ تدعي بالكتلة المصغرة وكذلك فأن عزم القصور الذاتي (1) moment of intertia للكتلتين حول محور عمودي على المحور بين القوى ومارا بمركز ثقل الجزيئة (CM) هو

$$I=m1\ r_1^2 + m2_1^2$$

$$I= \frac{m1m2}{m+m2}r2$$

$$I = \mu r2$$

اذ ان المعادلة رقم ( ) تساوي

$$T = \frac{1}{2}\omega^2 I$$

وهذا المعادلة تمثل قيمة الطاقة الحركية لنموذج الكرتين والتي يمكن ان تأخذ اية قيمة ما دامت السرعة الزاوية يمكن ان تتغير بشكل مستمر

وعند معالجة الحركة الدورانية من وجهة نظر ميكانيك الكم فأن معادلة شرودنكر

$$\nabla^2\psi + \frac{2\mu}{n^2}(E - 1)\psi = 0$$

ولما كانت الطاقة الكامنة للدوار الصلد في حالة حركية دورانية ثابتة (لا توجد قوة خارجية مؤثرة علية) لذلك يمكن ان نفرضها تساوي صفراً وعلية نبسط المعادلة اعلاه بالشكل التالي :-

$$\nabla^2\psi + \frac{2\mu}{n^2} E\,\psi = 0$$

وباستخدام الاحداثيات القطبية بأخذ معامل لابلاسبان (∇^2) الصيغة التالية :

$$\nabla^2 \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{sin\partial}\frac{\partial}{\partial 0}\left(sin\frac{\partial}{\partial 0}\right) + + \frac{1}{sin20}\frac{\partial 2}{\partial \varphi 0}$$

وفي حال اعتبار (r) ثابتاً نحصل على

$$\nabla^2 \frac{1}{r^2}\frac{1}{sin\theta}\frac{\partial}{\partial 0}\left(sin\frac{\partial}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{sin2\theta}\frac{\partial 2}{\partial \varphi 2}$$

$$E = \frac{h^2}{21} J\,(J+1)\quad J = 0,1,2,3$$

حيث ان J هو عدد الكم للزخم الزاوي للوار الصلد (الجزيئة الثنائية الصلدة) وبمقارنة المعادلتين نجد ان الفرق بين الميكانيك الكلاسيكي الذي يعطي قيماً مستمرة غير محددة للطاقة وبين ميكانيك الكم الذي يعطي قيماً محددة للطاقة وفي علم الاطياف تستخدم عادة قيمة (F) بوحدات العدد الموجي (cm-1) بدلاً من مستوى الطاقة وهي

$$F = \frac{E}{hc} \text{ cm-1}$$

حيث ان c سرعة الضوء بوحدات (cm / sec) وعلية تصبح المعادلة كما يلي

$$F(J) = \frac{h}{8\pi 2\, Ic} \; J\,(J+1) \text{ cm-1}$$

وبما ان h كمية ثابتة فأنه عادة يعبر عنها في مجال الاطياف الجزيئية بالحرف (B) والذي يسمي بثابت الدوران وبذلك تصبح المعادلة كما يلي

$$F(J) = B \; J\,(J+1) \text{ cm-1}$$

$$B = \frac{h}{8\pi 2\, Ic} = \frac{27.99\, x\, 10^{-40}}{1}$$

تعدد الجزيئات في مستويات الطاقة الدورانية population of Rotational Energy Levels

صحيح أن احتمالية جميع الانتقالات للتغيرات المسموحة $\Delta J = \mp 1$ تكون متساوية كما أظهرت بعس الحسابات ذلك ولكن هذا لا يعني أن جميع خطوط الطيف تكون متساوية في الشدة. وفي الحقيقة أن شدة الخطوط الطيفية تتناسب طرديا مع العدد الأولي للجزيئة في كل مستوى

إن الشدة النسبية للخطوط الطيفية الدورانية بدلالة نموذج الدوار الصلد يمكن دراستها بأتباع توزيع ماكسويل بولتزمان التي تعطينا التوزيع النسبي للجزيئات حسب مستويات الدلاقة الدورانية للجزيئة

اي أن

$$\frac{N(J)}{N(o)} = (2J+1) \exp\left[-\left(E(J) - E(o)\right) / kt\right]$$

حيث ان N(o) يمثل عدد الجزيئات في مستوى الطاقة الدوراني E(J) في درجة الحرارة المطلقة T و N(o) عدد الجزيئات في الحالة المستقرة (J=o). ويمثل

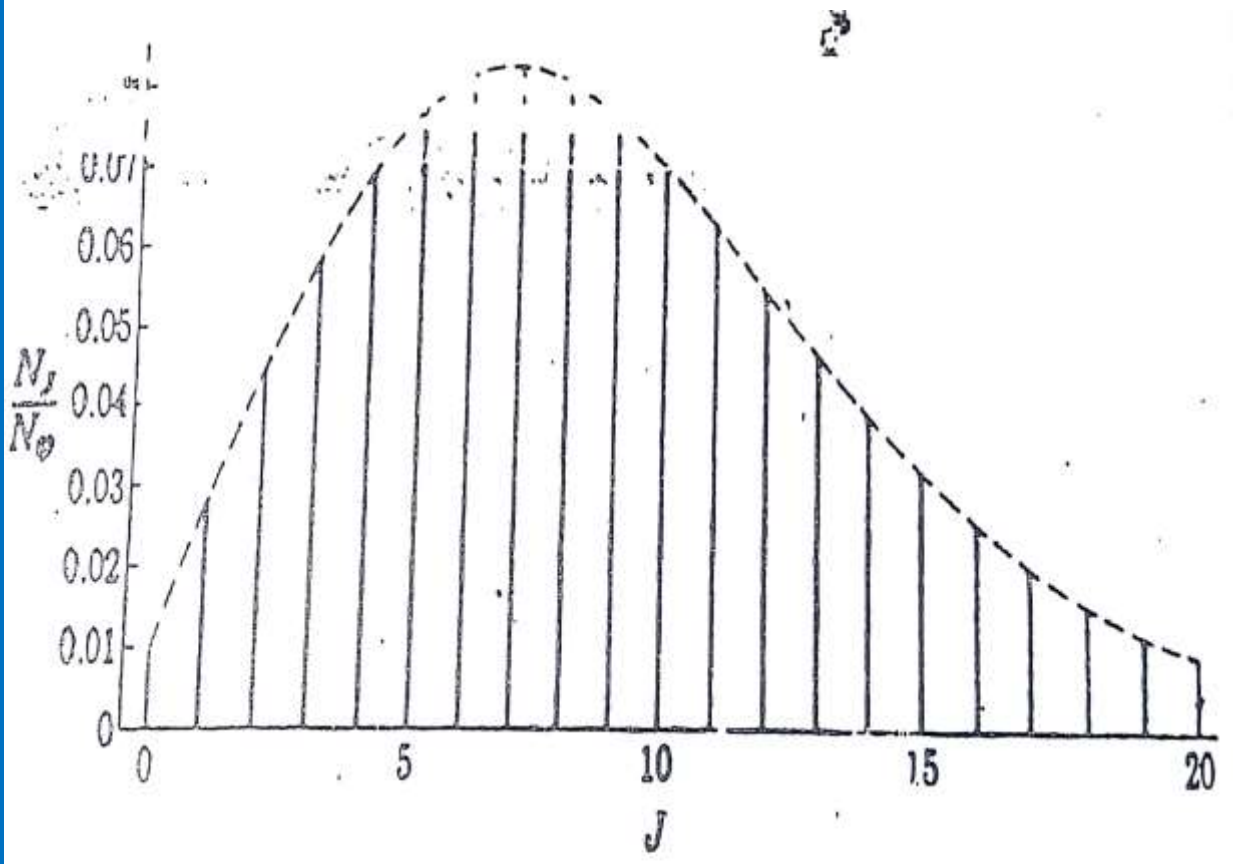
الحد (2J +1) درجة انحلال المستوى J حيث أن مستويات الطاقة الدورانية المعرفة بدلالة عدد الكم J لها متجه للزحم الزاري الدوراني قيمته العددية ($n\sqrt{J\,(J+1)}$) وله عدة اتجاهات في الفضاء تساوي ($M_J n$) وعدد هذه الاتجاهات تساوي (2J +1) إذ ان ($MJ = o\overline{+}\ 1\ ,\ \overline{+}\ 2 \ldots\ \overline{+}\ J$) ثابت k,k, ثابت لولتزمان ويساوي $1.38 \times 10^{-23}\ J.K^{-1}$ وبما ان E(o)تساوي صفر لأن E,H=0 تساوي BhcJ(J+1) فإن المعادلة تصبح

$$\frac{N(J)}{N(o)} = (2J+1)\ \exp\ [-\ BhCI\ (J+1)\ /\ kt]$$

حيث (C) تمثل سرعة الضوء بوحدات (cm/sec) , (B) بوحدات العدد الموجي (Cm^{-1})

المعادلة تشير الى أن عدد الجزيئات التي تشغل الحالة الدورانية (J) تزداد بزيادة عدد الكم (J) الى قيمة عظمي ثم يقل عدد الجزيئات بعد ذلك بسبب وجود الدالة الاسية في المعادلة

الشكل (3) يوضح لعلاقة بين العدد النسبي للجزيئات $\frac{N(J)}{N(o)}$ لجزيئات غاز اول أوكسيد الكاربون وعدد الكم الدوراني (J)



الشكل (2-5) العدد النسبي لجزيئات أول اوكسيد الكاربون موزعة على مستويات الطاقة الدورانية.

الشكل () العدد النسبي لجزيئات أول اوكسيد الكاربون موزعة على مستويات الطاقة الدورانية

ويمكننا ببعض الحسابات البسيطة أن نبين بأن قيم (J) تختلف باختلاف قيم . فلو اخذنا قيمة معينة B J ($2am^{-1}$) عند درجة حرارة الغرفة (T=300K) فأن العدد النسبي للجزيئات في المستوى J=1 الى J=o وإهمال درجة الانحلالية) يكون

$$\frac{N(J)}{N(o)} = e^{-2(6.63 \times 10\text{-}34) \times 3 \times 10 \times (1 \times 2) / (1.38 \times 10\ -23)\ (300)}$$

$$= e^{-0.019} = 0.98$$

وتبين هذا القيمة ان العدد النسبي للجزيئات عند درجة حرارة متساويا تقريباً وكذلك يلاحظ من الشكل ( ) أن عدد الجزيئات في المستويات الدورانية لا يتناقص باستسرار مع تزايد قيمة J ولكنه يزداد ليصل الى قيمة قصوى ثم يتناقص بعدها ويمكن حساب العدد الاقصى عند قيمة معينة من J تكامل المعادلة الاتية.

$$\frac{dN}{dJ} = 2N\, e^{-Bhc\,(J+1)\,/\,kt} + (2J+1)\,No\,(\frac{-Bhc}{Kt}$$

لينتج

$$J_{max} = \sqrt{\frac{KT}{2hCB} - \frac{1}{2}}$$

الدوار الغير الصلد Non Rigid Rotator

إن نموذج الدوار الصلد ما هو الا تقريب لواقع الحركة الدورانية للجزيئات الثنائية الذرة. إذ أن الحركة الدورانية للجزيئة نؤدي الى استطالة وابتعاد الدرات عن بعضها بسبب القوة الطاردة اللامركزية مما يجعل الجزيئة تبتزء وكنتيجة لذلك يحصل استطالة في طول الاصرة. وبالتالي فإن عزم القصور الذاتي للجزيئة يزداد بزيادة الطاقة الدورانية . وهذا يجعل مستويات الطاقة الدورانية تقترب من بغضها اكثر بما في حالة الدوار الصلد.

يمكن معالجة مسألة الدوار غير الصلد وذلك بفرض "أن جسم كتلته (m) يدر حول نقطة ثابتة يزداد مقدارها (ω) الاسافة بين الكتلة ومركز الدوران ف حالة كون تساوي (r_o) . وعند دوران ا الجسم حول النقطة تمتد هذه المسافة اي لا تبق ثابته أثناء الدوران بل تتغير نتيجة القوة الطاردة لتصبح(r) هذه القوة تساوي($mr\omega^2$) وهذه القوة تتعادل مع قوة داخلية أعلى وهي القوة الارجاعية اما قوة وتساوي($r-r_o$) وباتجاه نقطة الدوران.

طيف الجزيئات متعددة الذرات Spectrum of the Polyatomic molecules

تصنف الجزيئات حسب القيمة النسبية لعزوم القصور الرئيسية الثلاثة كما يلي

طيف الجزيئات الخطية Spectrum of the Liner molecules

الجزيئة الخطية هي مجموعة من الذرات التي تقع على استقامة واحدة . ويمكن تطبيق اسلوب الجزيئات الثنائية الذرة على الجزيئات الخطية المتعددة الذرات مثل جزيئة الكاربون أوكسيد سلفايد (OCS) وجزيئة كلوريد الأستيلي H-C =C-Cl وسيانيد الهيدروجين (HCN) .... الخ

وتمتلك هذه الجزيئات عزم قصور ذاتي مشابه للجزيئات الثنائية الذرة (Ix = o , Iy = I2) ولكنه كبير مقارنة بالجزيئات الثنائية وعليه تتقارب مستويات طاقتها الدورانية اكثر وبالنتيجة يكون تردد خطوط طيفها الدوراني أصغر نسبياً

ان معادلة مستويات الطاقة الدورانية للجزيئات الخطية تشابه معادلة مستويات الطاقة الدورانية للجزيئات الثنائية الذرة

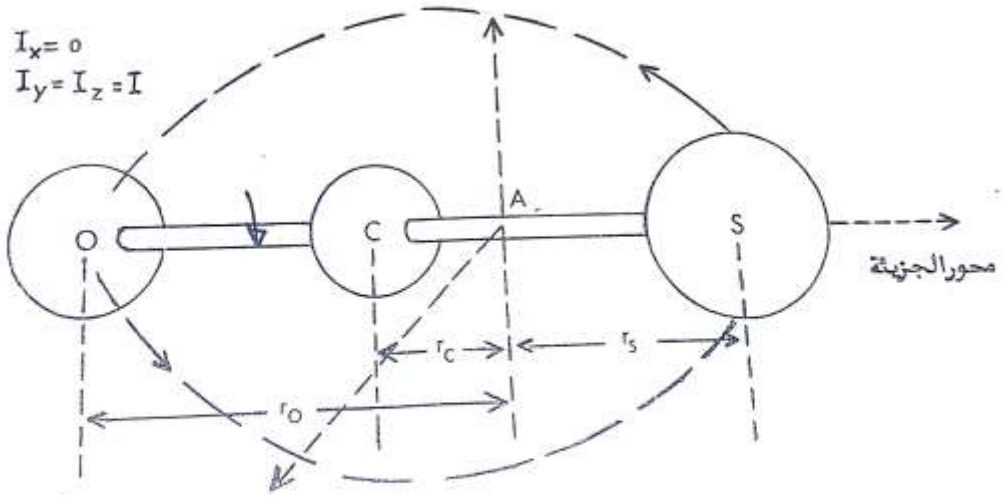
وبسبب صغر قيمة (B) ننتبجه لكبر عزم القصور الذاتي في منطقة الموجات الدقيقة (مايكروويف) أوفي منطقة الموجات تحت الحمراء البعيدة حيث في الجزيئات الثنائية الذرة تساوي تقريبا (10cm) بِينَما في الجزيئات الخطية المتعددة الذرات فإن القيمة تقترب من (1cm) أو ربما أقل من ذلك . وكلما كبرت الجزئية قلت قيمة B .

إن الجزيئة الخطية التي يكون فيها عدد الذرات مساوي الى N يكون عدد الأواصر مساوي الى (N-1). فمثلا الجزيئة الخطية الثلاثية الذرة مثل (OCS) لها اصرتين (r_{co}) و (r_c) ولكن لا يمكن أن نحصل على اكثر من قيمة واحدة لعزم القصور الذاتي. (I) من النتائج الطيفية الدورانية . لذلك لا يمكن نعيين طول آصرتين من قيمة واحدة لعزم القصور الذاتي (I) ويمكن التغلب على هذه به بدراسة نظائر لهذا

الجزيئة والتي تحتوي عل كتل مختلفة. ويتمثل الافتراض الاساسي لهذه الطريقة بأنه عند استبدال ذرة ما في جزيئة بنظير لها فأن الابعاد الجزيئة لا تتأثر بذلك أي أنها تمتلك أطوال من الأواصر نفسها فئلاً لا يمكن دراسة جزيئة OCS باستخدام النظائر

$O^{16}\ C^{12}\ S^{32}$و$O^{16}\ C^{12}\ S^{34}$ ... الخ

ويمكن توضيح خطوات هذه الطريقة بتطبيقها على جزيئة OCS موضحة في الشكل اذ ان المسافات



الشكل (3 – 2) جزيئة اوكسي كبريتيد الكاربون مع المسافات لكل ذرة من مركز الثقل A.

( ) إذ أن المسافة r (r_c r_o) تمثل بعد كتلة الكبريت والاوكسجين والكاربون عن مركز الكتلة للجزيئة على التوالي .˚

طيف الجزيئات متناظرة القمة

في الجزيئات المتعددة الذرات هناك عدد لانهائي من المحاور التي مركز الكتلة ولكنه يمكن البرهنة على أن هناك ثلاثة اتجاهات متعامدة على بعضها يكون فيها عزم القصور الذاتي في أعلى أو أوطأ قيمة له .

هذه الاتجاهات الثلاثة تسمى المحاور الاساسية والعزوم الي تملئها تسمى بعزوم القصور الذاتي الاساسية I_X I_Y =I أما بالنسبة للجزيئات المناظرة القمة المتطاولة فإن قمة الجزيئة تعاني حركة دورانية حول المحور X كما هو موضح في الشكل ( ) لجزيئة فلوريد المثيل والثاني حول المحور العمودي على المحور الرئيسي . لذلك فإننا سوف نحتاج الى عددين من اعداد الكم لوصف درجة الدوران. واحد الى I_X والثاني الى I_Y

كما أنه من المناسب رياضيا الحصول على عدد كم لكي يمثل مجموع العزم الزاوي˚ الدوراني الكلي وعادة يتم اختيارJ يمثل مجموع من العزم الزاوي . كما أنه يختار K ليمثل العزم الزاوي حول المحور X(J)

المصادر

1- مدخل نظرية تركيب الجزيئي ، ترجمة عبد المهدي طالب ، دكتور عباس جاسم حمادي ، جامعة بغداد 1982

2- كيمياء الكم ، والمطياف الجزيئي ، قبيس عبد الكريم ابراهيم ، جامعة البصرة ، 1988

3- كيمياء الفيزياوي ، تأليف دكتور نوري خليفة فياض ، جامعة بغداد ، 1988

4- الطيف تأليف ، دكتور ليلى محمد نجيب سليم ، جامعة الموصل ، 1985

5- مبادئ كيمياء الكم ، تاليف سالم محمد خليل ، جامعة الموصل ، 1982

6- كيمياء الفيزياوية ، تأليف مسلم عبد محمد ، جامعة الموصل ،

7- اساسيات ميكانيكية الكم تأليف الدكتور سالم محمد شماع ، امجد عبد الرزاق كرجية ، 1988 . جامعة الموصل

8- مفاهيم في الفيزياء الحديثة ، ، ترجمة دكتور منعم مشكور ، وسيد جابر شاكر ، جامعة الموصل ، 1980