

٣- دوران الجزيئات

الجزيئه هي تركيب مستقر لذرتين او اكثر مربوط بعضها ببعض بقوة كافية بحيث تظهر عمليا كجسيم واحد. فإذا كانت طاقة النظام اقل من مجموع طاقة الذرات المكونة لها فان الجزيئات تتكون، واذا حصل زيادة في الطاقة بطريقة ما فان الذرات تتنافر بعضها عن بعض من دون ان تتكون جزيئه.

والجزيئات تصنف على اساس قيم النسبية لعزم القصور الذاتي. فإذا كان دوران الجسيم حول ثلات ابعاد او محاور متعامدة مع بعضها من مركز ثقل الجزيئه فان الجزيئه يكون لها ثلاثة انواع اساسية من عزم القصور الذاتي والتي يرمز لها I_z , I_y , I_x .

و قبل ان نقوم بدراسة الطاقة الدورانية و اطيافها، سوف نقوم بتقديم انواع الجزيئات على اساس اشكالها (محاورها الرئيسية) و نوع عزوم القصور الذاتية التي تمتلكها.

١-٣ جزيئات خطية

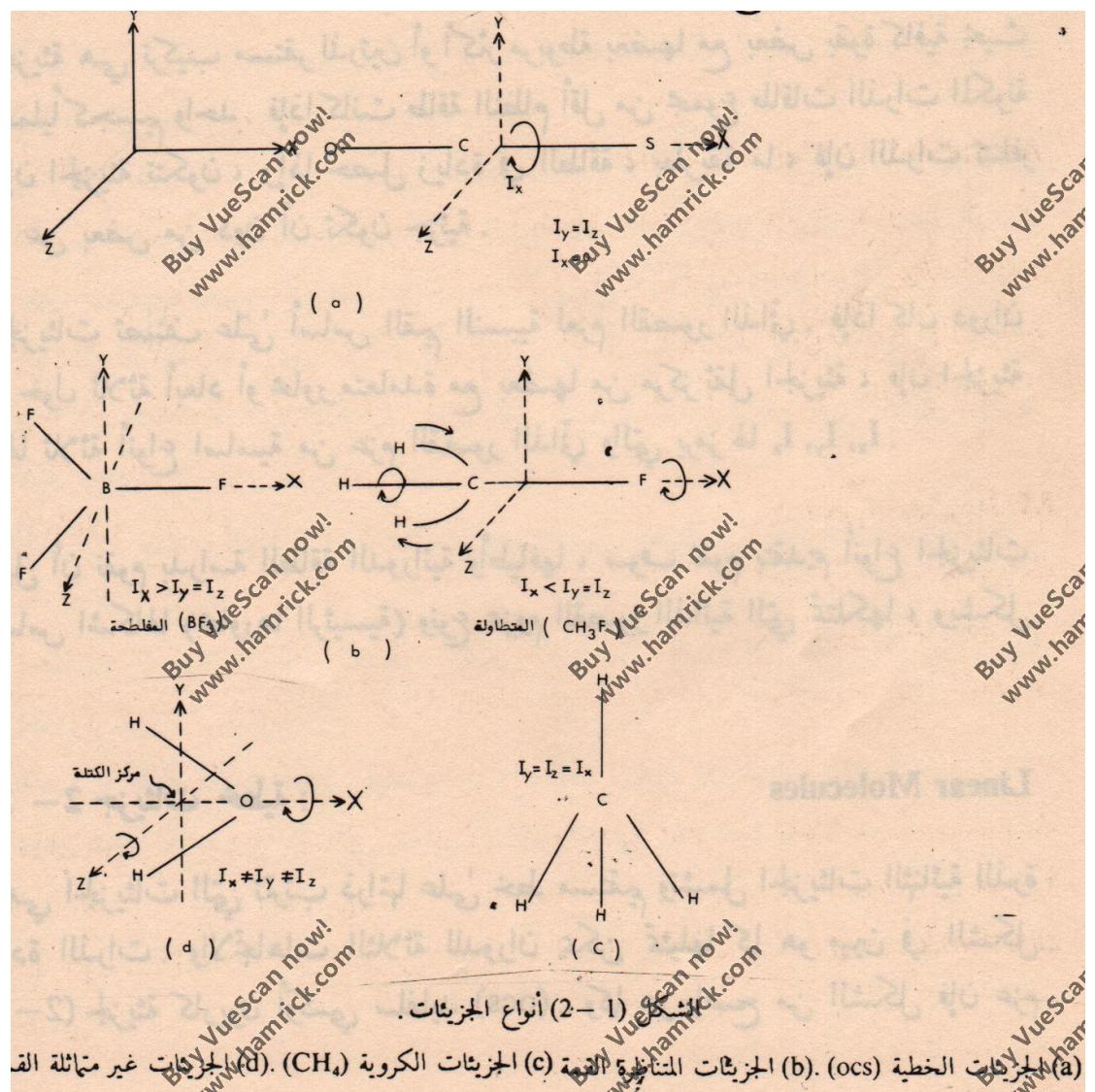
وهي جزيئات التي تترتب ذراتها على خط مستقيم وتشمل الجزيئات ثنائية الذرة والمتعددة الذرات ، والاتجاهات الثلاثة للدوران يمكن تمثيلها كما مبين في الشكل التالي لجزيئه كاربون اوکسي سلفايد (SCO) وكما موضح من الشكل فان عزم القصور الذاتي I_x يختلف عن كل من I_y , I_z حيث ان $I_y = I_z$ وعزم القصور الذاتي I_x صغير جدا ويمكن تقريره الى الصفر وهذه الجزيئات تعطي اطيافا بسيطة في منطقة المايكروويف.

٢-٣ جزيئات متاظرة القمة

مثل جزيئه فلوريد المثيل CH_3F حيث ترتبط ذرات الهيدروجين الثلاثة بذرة كاربون من جانب واحد وترتبط ذرة الفلور بالجانب الآخر من ذرة الكاربون، كما مبين في الشكل (b) يعتبر المحور x هو محور الدوران وذلك لوقوع مركز الثقل على هذا المحور وكذلك فان عزم القصور الذاتي باتجاه y , z متساوين ($I_y = I_z$) بينما عزم

القصور الذاتي حول المحور x (I_x) لا يمكن اهماله لانه يشمل دوران ذرات الهيدروجين الثلاثة والواقعة خارج محور الدورات (x) وهذا النوع يدعى بالجزئيات المتناظرة القمة المتطاولة prolate و هناك نوع اخر من الجزيئات يدعى بالجزئيات المتناظرة القمة المفلطحة oblate مثل جزيئه BF_3 كما موضحة في الشكل ، فان الذرات الاربعة تقع في سطح واحد وفي هذه الحالة تكون العلاقة بين العزوم تساوي

$$I_x > I_y = I_z$$



٣-٣ جزيئات كروية القمة

وهي الجزيئات التي يتماثل فيها الانواع الثلاثة من عزم القصور الذاتي ($I_x = I_y = I_z$) ومثال على هذا النوع هي جزيئه الميثان CH_4 كما في الشكل (c) وعليه فان هذا النوع من الجزيئات لا يمتلك عزما لثائي القطب في اي من الاتجاهات الدورانية نتيجة لتماثل الجزيئات. لذلك تعتبر هذه الجزيئات غير فعالة في منطقة المايكرويف.

٣-٤ جزيئات غير متاظرة القمة

وهذه الجزيئات تحتوي على ثلات انواع مختلفة من عزم القصور الذاتي اي ان ($I_x \neq I_y \neq I_z$) ومثال على هذه النوع من الجزيئات هي جزيئه الماء كما في الشكل (d) ويظهر التعبير عن الطاقة الدورانية والطيف الدوراني لهذه الجزيئات اعقد بكثير مما ذكر في حالة الجزيئات الخطية او الجزيئات المتاظرة القمة.

٣-الأطياف الجزيئية

ان الأطياف الذرية تتكون من خطوط ناتجة من انتقالات الكترونية بين مستويات الطاقة الالكترونية للذرة اما الاطياف الجزيئية فانه تظهر على شكل حزم عريضة تظهر عند تحليلها بمحلول ذو قوه عاليه كمجموعه من الخطوط الطيفية الناتجه عن عدد من الانتقالات. هناك انواع عديدة من الحالات الطاقية Energy states للجزيئات تشمل مستويات الطاقة الدورانية rotational energy levels ومستويات الطاقة الاهتزازية vibrational energy levels ومستويات الطاقة الالكترونية electrical energy levels اي ان

$$E = E_r + E_v + E_e$$