

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.

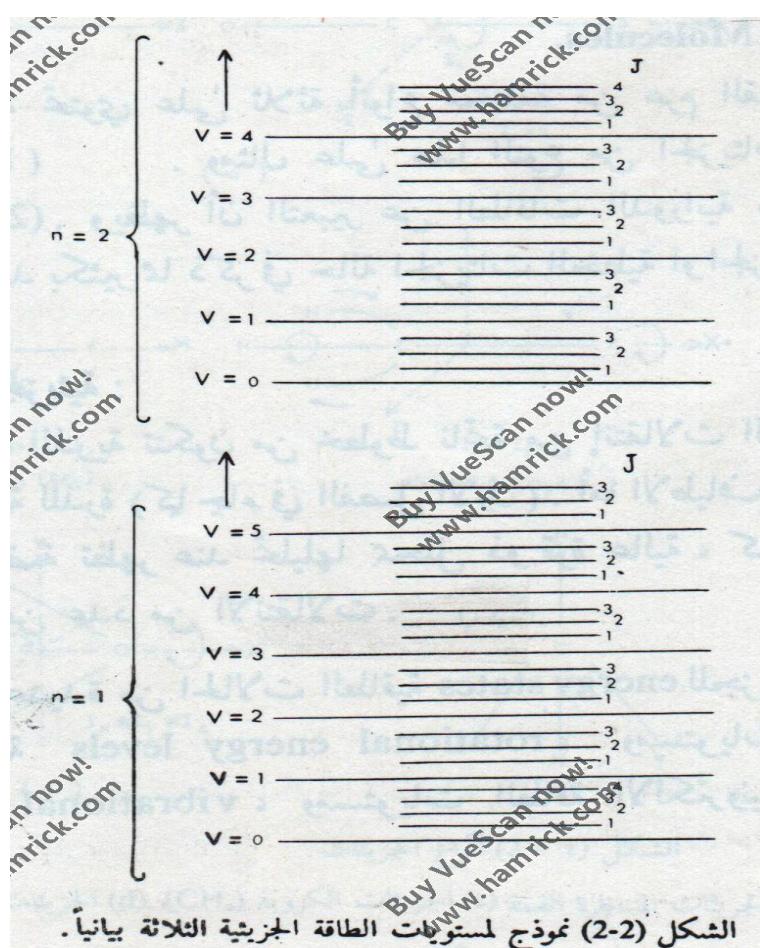
٣-الأطياف الجزيئية

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

$$E = E_r + E_v + E_e$$

لكن فصل الطاقات بهذا الشكل ما هو الا صورة تقريرية للواقع المعقد. اذ ان فصل مستويات الطاقة الالكترونية يتم بتطبيق تقرير بورن- او بنهايمر Born-Oppenheimer approximation كما ان الحركة الدورانية يصاحبها عادة حركة اهتزازية نتيجة لاهتزاز النواتين نسبة لبعضهما البعض.

ان اغلب الانتقالات الالكترونية للجزئيات يصاحبها ايضا تغير في مستويات الطاقة الاهتزازية مما يؤدي الى ظهور حزم عريضة. كذلك فان 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 التالي يوضح مستويات الطاقة الالكترونية والاهتزازية والدورانية حيث ان n يمثل مستويات الطاقة الالكترونية في الجزيئة



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

ان كل مستوى طاقة الكترونية مقسم الى مستويات طاقة اهتزازية ثانية والمتمثلة بعدد الكم الاهتزازي (V) (الجهه اليسرى من الشكل) . وكل المستويات الاهتزازية يتناسق معها عدد من المستويات الدورانية والتي تتحدد بعدد الكم الدوراني (J) والمبين على الجانب اليمين من الشكل.

ان طيف الدوران للجزئيات هو عبارة عن قياس الانتقالات التي تحصل بين مستويات الطاقة الدورانية المسموح بها. وتحصل الانتقالات الدورانية في منطقتى مطيافية الموجى الصغرى far infrared microwave و منطقة تحت الحمراء البعيدة region ويعزى الامتصاص في منطقة المايكروويف الى التغيرات الدورانية الصرفة pure rotational spectroscopy ولكي تعطى الجزيئات طيفا دورانيا يجب ان تمتلك عزما كهربائيا ثانئ القطب. من جانب اخر اذا حصل الانتقال في مستويات الطاقة الاهتزازية (نتيجة زيادة طاقة الاثارة) فان الانبعاثات سوف تظهر نسبة للتغيرات في اعداد الكم الاهتزازية اضافة الى التغيرات في مستويات الدوران. وهذا الامتصاص او الانبعاث الناتج من الحركات الدورانية والاهتزازية للجزئيات تكون في الاغلب في منطقة الاشعة تحت الحمراء . وتنقسم منطقة الاشعة تحت الحمراء الى قلات مناطق رئيسية هي الاشعة تحت الحمراء البعيدة وتتراوح بين $100\text{--}200\text{ cm}^{-1}$ ، والاشعة تحت الحمراء الوسطى وتتراوح بين $200\text{--}4000\text{cm}^{-1}$ والاشعة تحت الحمراء القريبة وتتراوح بين $4000\text{--}12000\text{cm}^{-1}$.

وبسبب الصعوبات العملية في توليد وتشخيص الاشارات عند الترددات الواطئة فان منطقة الاشعة تحت الحمراء البعيدة نادرا ما تستخدم في المطيافية. وتعنى منطقة الاشعة تحت الحمراء الوسطى والقريبة بدراسة الانتقالات الاهتزازية الصرفة vibrational transition اضافة الى الانتقالات الاهتزازية والدورانية rotation-vibration transition

ان جميع الاطياف التي تظهر في منطقة الاشعة المرئية visible light وال فوق البنفسجية ultraviolet للطيف لا يمكن ان تكسر على انها اطياف دورانية او اهتزازية لأنها في الحقيقة اعقد مما هو متوقع بالنسبة لهذا النوع من الاطياف. كما ان الترددات في هاتين المنطقتين أعلى من الترددات في حالة الدوران او الاهتزاز. وتعزى هذه الاطياف الى الانتقالات الالكترونية electronic transition في الجزيئات الجدول التالي يبين الحدود النموذجية لمناطق الطيف المختلفة حسب نوع الانتقال والاجهزه المستخدمة.

	الطاقة سعة / مول -	التردد Hz	البعد Cm	الطول A°	الجدول (1-2) طيف الاشعاع الكهرومغناطيسي
	10^{-6}	3×10^4	10^{-6}	10^6	10^{14}
الراديوى (الموجة الطويلة)					
التجدد في اتجاه النقطة المغزلية	10^{-4}	3×10^6	10^{-4}	10^4	10^{12}
	10^{-2}	3×10^8	10^{-2}	10^2	10^{10}
الموجة القصيرة التلفزيون	2.85	3×10^{10}	1		10^8
الدوارية الدورانية	28.5	3×10^{11}		10^{-1}	10^7
	285	3×10^{12}		10^{-2}	10^6
الميكروفيون تحت الحمراء					
البعيدة تحت الحمراء					
تحت الحمراء (كيلو سرة)	28.5	3×10^{14}	10^4	10^{-4}	10^4
تحت الحمراء القريبة					
إهتزازية (كيلو سرة)	71.4	7.5×10^{14}	2.5×10^4		
الخلف					
الانتفاثات الاكتينيزية	96	1×10^{15}		3×10^3	
غلاف					
ال noktaw					
أشعة X					
أشعة كاما	10^8	3×10^8	10^8	10^{-8}	1
أشعة كاما	10^{10}	3×10^{20}	10^{10}	10^{-10}	10^{-2}
الأشعة الكونية	10^{14}	3×10^{22}	10^{12}	10^{-12}	10^{-4}