

٥- تعداد الجزيئات في مستويات الطاقة الدورانية Population of Rotational Energy Levels

صحيح ان احتمالية جميع الانتقالات للتغيرات المسموحة $\nabla J = \pm 1$ تكون متساوية كما اظهرت بعض الحسابات ذلك ، ولكن هذا لا يعني ان جميع الخطوط الطيف تكون متساوية في الشدة وفي الحقيقة ان شدة الخطوط الطيفية تتناسب طرديا مع العدد الاولى للجزيئات في كل مستوى.

ان الشدة النسبية للخطوط الطيفية الدورانية بدلالة نموذج الدوار الصلد يمكن دراستها باتباع توزيع ماكسويل-بولتزمان التي تعطينا التوزيع النسبي للجزيئات حسب مستويات الطاقة الدورانية للجزيئه. اي ان:

$$\frac{N_{(J)}}{N_{(0)}} = (2J + 1) \exp \left[-\frac{(E_{(J)} - E_{(0)})}{KT} \right] \quad (1)$$

حيث ان $N_{(J)}$ يمثل عدد الجزيئات في مستوى الطاقة الدوراني $E_{(J)}$ في درجة حرارة المطلقة T . و $N_{(0)}$ عدد الجزيئات في الحالة المستقرة $(J=0)$ ويمثل الحد $(2J+1)$ درجة انحلال المستوى J (حيث ان مستويات الطاقة الدورانية المعرفة بدلالة عدد الكم J لها متوجه للزم الزاوي الدوراني قيمته العددية $\hbar\sqrt{J(J+1)}$ و له عدة اتجاهات في الفضاء تساوي M_J, \hbar ، وعدد هذه الاتجاهات تساوي $(2J+1)$ ، اذ ان $1.38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$. و K ثابت بولتزمان ويساوي $1.38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$ ، وبما ان $E_{(0)}$ تساوي صفر لان $J=0$ ، و E_J تساوي $BhCJ(J+1)$ فان المعادلة (1) تصبح:

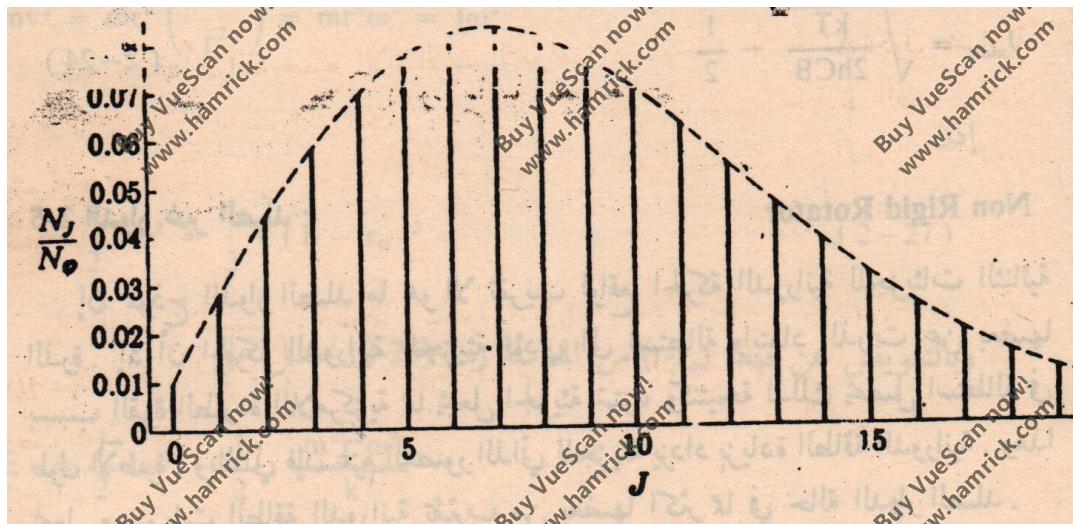
$$\frac{N_{(J)}}{N_{(0)}} = (2J + 1) \exp \left[-\frac{BhCJ(J+1)}{KT} \right] \quad (2)$$

حيث ان (C) تمثل سرعة الضوء بوحدات (cm/sec) ، و (B) بوحدات العدد الموجي (cm^{-1})

المعادلة (2) تشير الى ان عدد الجزيئات التي تشغل الحالة الدورانية (J) تزداد بزيادة عدد الكم (J) الى قيمة عظمى ثم يقل عدد الجزيئات بعد ذلك بسبب وجود الدالة الاساسية في المعادلة (2).

الشكل التالي يوضح العلاقة بين العدد النسبي للجزيئات $\frac{N_{(J)}}{N_{(0)}}$

لجزيئات غاز اول اوكسيد الكاربون وعدد الكم الدوراني (J).



ويمكنا ببعض الحسابات البسيطة ان نبين بان قيمة N_J تختلف باختلاف قيم (J). فلو اخذنا قيمة معينة ل B تساوي (2cm^{-1}) عند درجة حرارة الغرفة ($T=300 \text{ K}^0$) ، فان العدد النسبي للجزيئات في المستوى $J=1$ الى $J=0$ (واهمال درجة الانحلالية) يكون:

$$\frac{N_1}{N_0} = e^{-2(6.63 \times 10^{-34}) \times 3 \times 10^8 (1 \times 2) / (1.38 \times 10^{-23})(300)}$$

$$\frac{N_1}{N_0} = e^{-0.019} = 0.98$$

وتبين هذه القيمة ان العدد النسبي للجزيئات عند درجة حرارة الغرفة متساوية تقريبا وكذلك يلاحظ من الشكل السابق ان عدد الجزيئات في

المستويات الدورانية لا يتناقص باستمرار مع تزايد قيمة J ولكنها يزداد ليصل إلى قيمة قصوى ثم يتناقص بعدها. ويمكن حساب العدد الأقصى عند قيمة معينة J من تكامل المعادلة التالية:

$$\frac{dN}{dJ} = 2N_o e^{-BhCJ(J+1)/KT} + (2J+1)N_o \left(\frac{-BhC}{KT}\right)$$

$$(2J+1)e^{-BhCJ(J+1)/KT} = 0$$

لينتج :

$$J_{\max} = \sqrt{\frac{KT}{2hCB}} - \frac{1}{2} \quad (3)$$

٦- الدوار غير الصلد Non Rigid Rotator

ان نموذج الدوار الصلد ما هو الا تقرير لواقع الحركة الدورانية للجزيئات الثنائية الذرة. اذ ان الحركة الدورانية للجزيئه تؤدي الى استطالة وابتعاد الذرات عن بعضها بسبب القوة الطاردة المركزية مما يجعل الجزيئه تهتز، وكنتيبة لذلك يحصل استطالة في طول الاصره. وبالتالي فان عزم القصور الذاتي للجزيئه يزداد بزيادة الطاقة الدورانية . وهذا يجعل مستويات الطاقة الدورانية تقترب من بعضها اكثر مما في حالة الدوار الصلد.

يمكن معالجة مسألة الدوار غير الصلد وذلك بفرض ان جسيم كتلته (m) يدور حول نقطة ثابتة بسرعة زاوية مقدارها (ω). المسافة بين الكتلة ومركز الدوران في حالة السكون تساوي (r_0) وعند دوران الجسم حول النقطة تمتد هذه المسافة، اي لا تبقى ثابتة اثناء الدوران بل تتغير نتيجة القوة الطاردة لتصبح (r) هذه القوة تساوي ($mr\omega^2$) وهذه القوة تتعادل مع قوة داخلية اي وهي القوة الارجاعية restoring force ، وتساوي $K(r-r_0)$ وباتجاه نقطة الدوران. وهذه القوه يمكن تمثيلها بالمعادلة التالية: