

دراسة نظرية لأطياف الانبعاث للنظير  ${}^6\text{LiD}$  لجزيئة  $\text{LiH}$ ضياء حمدي العميدي\*  
الاع مصطفى نيبان\*  
رجاء خضر محمد\*\*

استلام البحث 20، كانون الاول، 2012

قبول النشر 11، اذار، 2014

## الخلاصة:

دراسة أطياف الانبعاث تتمثل بحساب قيم الخطوط الطيفية  $P(J)$ ،  $R(J)$  للحالة  $\Sigma^+ 1$ . وإيجاد العلاقة بين الخطوط الطيفية والعدد الكمي الدوراني  $(J)$  للمدى  $(J = 0 \rightarrow J = 25)$ . وحساب الطاقة الاهتزازية للمستويات  $(v = 0 \rightarrow v = 25)$  ومن ثم إيجاد منحني فورترات والمتمثل بالعلاقة بين العدد الموجي و  $m$  للنظير  ${}^6\text{LiD}$  لجزيئة هايدريد الليثيوم. اذ تم حساب قيم الخطوط الطيفية  $R(J)$ ،  $P(J)$  للنظير  $(\text{LiD})$  للحزمة  $(1-0)$ . وقد وجد ان قيم الخط الطيفي  $P(J)$ ،  $R(J)$  تتأثر بالمقدار  $(B_v - B_{v'})J^2$  حيث يكون  $B_{v'}$  اصغر من  $B_v$  فنجد ان قيم الخط الطيفي  $R(J)$  تزداد بزيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $J$ . في حين تتناقص قيم الخط الطيفي  $P(J)$  عند زيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $J$ . بالإضافة الى ذلك نجد فقدان الخط الطيفي  $Q(J)$ .

الكلمات مفتاحية: المستويات الالكرونية، أطياف الانبعاث، الخطوط الطيفية، منحني فورترات، العدد الكمي الدوراني، جزيئة الليثيوم.

## المقدمة:

لانتقالات  $X^1\Sigma^+ - X^1\Sigma^+$ ،  $A^1\Pi$ ،  $A^1\Sigma^+$ ،  $a^3\Pi_{o+}$  [8]. وحساب الطاقة الدورانية والاهتزازية وقيم الخطوط الطيفية ومن ثم حساب مضاعف لامبدا لجزيئة  $\text{Na}_2$  للحالة  $5^1\Pi_g$  باستخدام طيف رنيني مضعف بصري- بصري [9].

## النظرية:

تتضمن حساب قيم الخطوط الطيفية  $P(J)$ ،  $R(J)$  باستخدام المعادلات الآتية [10].

$$R(J) = v_0 + 2B_{v'} + (3B_v - B_{v'})J + (B_v - B_{v'})J^2 \dots \dots \dots (1)$$

$$P(J) = v_0 - (B_{v'} + B_{v'})J + (B_{v'} - B_v)J^2 \dots \dots \dots (2)$$

ولا تمثل التغير في الطاقة الاهتزازية بين المستوي المتهيج  $G_{v'}$  والمستوي الأرضي  $G_v$  اذ ان  $v_0 = G_{v'}$   $G_v = \dots \dots \dots (3)$

$$G_{v'} Y_{10} = \left(v + \frac{1}{2}\right) Y_{20} - \dots \dots \dots (4)$$

$$\left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \dots \dots \dots (4)$$

العدد الكمي الاهتزازي

$$v = 0, 1, \dots \dots \dots 25.$$

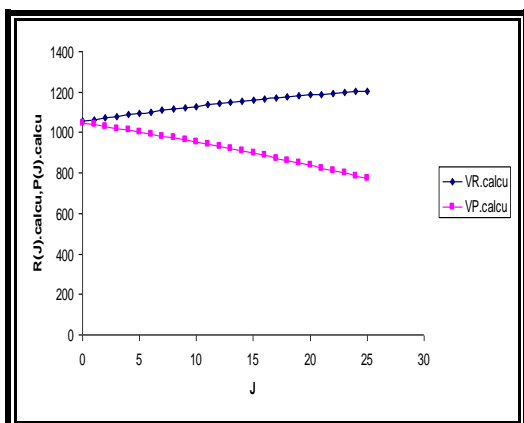
$B_{v'}$ ،  $B_v$  تمثل ثابت الدوران المتهيج والأرضي والذي يساوي [11].

$$B_v = Y_{01} - Y_{11} \dots \dots \dots (5)$$

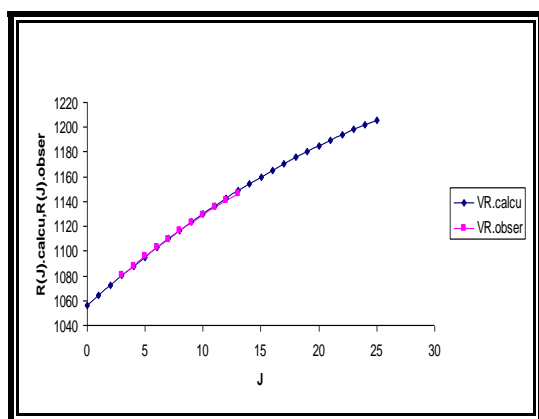
ان دراسة أطياف الانبعاث للجزيئات الثنائية الذرة في منطقة الأشعة تحت الحمراء تشير الى وجود تراكيب دورانية لحزم الأطياف الاهتزازية. وبذلك فان دراسة هذه الأطياف سيوفر لنا فرصة لدراسة الانتقالات التي تتضمن تغيير في مستويات الطاقة الدورانية والاهتزازية معاً لذلك فان الطاقة الدورانية الاهتزازية للجزيئة الثنائية الذرة تكون من حاصل جمع الطاقة الاهتزازية والدورانية حسب تقريب Born\_ Openhimer [1]. فعند حدوث انتقال بين مستويات الطاقة الدورانية- الاهتزازية الذي يتضمن التغيرات في أعداد الكم الدورانية والاهتزازية  $v, J$  فعند الانتقال من المستوى المتهيج الى المستوى الأرضي يتم الحصول على طيف الانبعاث والمتمثل بالخطوط الطيفية  $P(J)$ ،  $R(J)$ ،  $Q(J)$  [2]. هناك دراسات عديدة لحساب قيم الخطوط الطيفية حيث تم حساب قيم الخطوط الطيفية ومن ثم إيجاد مضاعف لمبدا لجزيئة  $\text{K}_2$  للانتقالات الالكرونية  $X^1\Sigma_g^+ - B^1\Pi_4$  [3 - 5]. ودراسة خواص  $\text{LiH}$  وتحليل الانتقالات الدورانية الاهتزازية للانتقالات  ${}^6\Pi^+$ ،  ${}^3\Sigma^+$ ،  $B^1\Pi$ ،  $A^3\Sigma^+$ ،  $X^1\Sigma^+$  [6]. وحساب قيم الخطوط الطيفية للنظائر  ${}^{135}\text{BaO}$ ،  ${}^{136}\text{BaO}$ ،  ${}^{137}\text{BaO}$  للحالة الأرضية [1]. وحساب الثوابت الطيفية ودالة عزم ثنائي القطب لطيف الأشعة تحت الحمراء لجزيئة  $\text{LiH}$  [7]، وحساب الخطوط الطيفية لجزيئة  $\text{CaO}$

\*قسم الفيزياء - كلية العلوم للبنات- جامعة بغداد

\*\*قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة كربلاء



شكل (1) : العلاقة بين الخطوط الطيفية  $R(J).calcu$  ،  $P(J).calcu$  مقاسة بوحدات  $(cm^{-1})$  والعدد الكمي الدوراني  $J$  للحزمة (1-0) للنظير  ${}^6LiD$  لجزيئة هايدريد الليثيوم.



شكل (2) : العلاقة بين الخطوط الطيفية  $R(J).calcu$  ،  $R(J).obser$  مقاسة بوحدات  $(cm^{-1})$  والعدد الكمي الدوراني  $J$  للحزمة (1-0) للنظير  ${}^6LiD$  لجزيئة هايدريد الليثيوم.

اذ ان  $Y_{11}$  ثابت قيمة صغيرة جداً وتكون موجبة ،  $Y_{01}$  معامل دنهام للدوران (ثابت الدوران) والذي يساوي [13] .

$$Y_{01} = \frac{h}{8\pi I C} \dots\dots(6)$$

تم حساب قيمة ثابت تشويه الطرد المركزي  $centrifugal\ distortion\ constant$  للمستوي المتهيج  $D_v$  ، والمستوي الأرضي  $D_v''$  علماً ان قيمة  $D_v'' \approx D_v$  وذلك باستخدام المعادلة الآتية [12]

$$D_v = \frac{4B_v^3}{Y_{10}^2} \dots\dots(7)$$

$$m = J+1 \dots\dots R(J) , m = -J \dots\dots P(J)$$

إيجاد منحي فورترات العلاقة بين  $R(J)$  ،  $P(J)$  واستخدام المعادلة الآتية [13]

$$R,P(J) = v_0 + (B_v + B_v'')m + (B_v' - B_v'')m^2 \dots\dots(8)$$

تم حساب الخطوط الطيفية  $R(J)$  ،  $P(J)$  في حال إدخال ثابت تشويه الطرد المركزي باستخدام العلاقة الآتية [15] .

$$R,P(J) = v_0 + (B_v + B_v'')m + (B_v' - B_v'')m^2 - 4D_v m^3 \dots\dots(9)$$

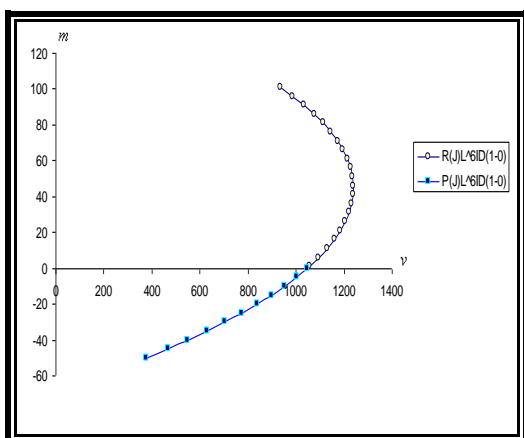
### النتائج والمناقشة :

جدول (1) معاملات دنهام (الثوابت الطيفية) للنظير  ${}^6LiD$  بوحدات  $(cm^{-1})$  لجزيئة هايدريد الليثيوم [14].

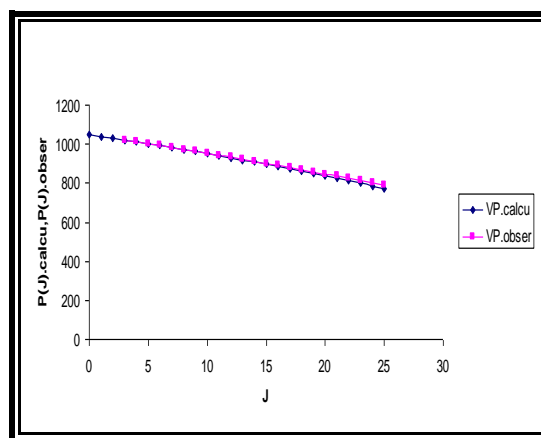
Spectroscopy constants	$\sum$ Electronic states
$Y_{01}$	1074.3087
$Y_{20}$	13.5168
$Y_{10}$	4.3901
$Y_{11}$	0.0966
$r_e$	$1.5949 \times 10^{-8} cm^{-1}$

جدول (2) : قيم الخطوط الطيفية مقاسة بوحدات  $(\text{cm}^{-1})$  للحزمة (1-0) للنظير  ${}^6\text{LiD}$  لجزيئة هايدريد الليثيوم  
علما ان  $v''=0$  ،  $v'=1$ .

v	J	R(J).calcu	R(J).obser	P(J).calcu	P(J).obser	$\delta R$	$\delta P$
0	0	1055.765		1047.2748			
1	1	1064.063		1038.5928			
2	2	1072.169		1029.7188			
3	3	1080.083	1080.2638	1020.6528	1020.911	0.181	0.2585
4	4	1087.805	1087.9234	1011.3948	1011.701	0.1186	0.3063
5	5	1095.335	1095.3642	1001.9448	1002.326	0.0294	0.3814
6	6	1102.673	1102.576	992.3028	992.796	-0.0968	0.4932
7	7	1109.819	1109.5491	982.4688	983.1204	-0.2697	0.6516
8	8	1116.773	1116.279	972.4428	973.3028	-0.4938	0.86
9	9	1123.535	1122.7652	962.2248	963.3532	-0.7696	1.1284
10	10	1130.105	1128.9963	951.8148	953.2761	-1.1085	1.4613
11	11	1136.483	1134.9735	941.2128	943.0804	-1.5093	1.8676
12	12	1142.669	1140.6845	930.4188	932.7751	-1.9843	2.3563
13	13	1148.663	1146.1292	919.4328	922.3631	-2.5336	2.9303
14	14	1154.465		908.2548	911.8544		3.5996
15	15	1160.075		896.8848	901.2551		4.3703
16	16	1165.493		885.3228	890.572		5.2492
17	17	1170.719		873.5688	879.811		6.2422
18	18	1175.753		861.6228	868.982		7.3592
19	19	1180.595		849.4848	858.089		8.6042
20	20	1185.245		837.1548	847.135		9.9802
21	21	1189.703		824.6328	836.129		11.4962
22	22	1193.969		811.9188	825.083		13.1642
23	23	1198.043		799.0128	813.995		14.9822
24	24	1201.925		785.9148	802.875		16.9602
25	25	1205.615		772.6248	791.727		19.1022



شكل (4) : منحني فورتيرات للحزمة (1-0) للنظير  ${}^6\text{LiD}$  لجزيئة هايدريد الليثيوم.



شكل (3) : العلاقة بين الخطوط الطيفية  $P(J).obser$  ،  $P(J).calcu$  مقاسة بوحدات  $(\text{cm}^{-1})$  والعدد الكمي الدوراني J للحزمة (1-0) للنظير  ${}^6\text{LiD}$  لجزيئة هايدريد الليثيوم.

2- إيجاد منحي فورتيرات العلاقة بين  $P(J)$ ،

$R(J)$  و  $m$  للنظير  $LiD$  للحمزة (1-0) كما موضح في الشكل (4).

3- من الأشكال البيانية (1)، (2)، (3)

للنظير  $LiD$  نجد انه عندما تكون  $B_v < B_{v'}$  فان قيم الخطوط الطيفية  $R(J)$  عندما  $m = J+1$  تزداد في بادئ الأمر وعند الاستمرار بزيادة قيم  $m$  تقل قيم  $R(J)$  وذلك لان الحد الثالث في المعادلة (8) سيصبح اكبر من الحد الثاني لذلك نجد قيم  $R(J)$  تتحرف نحو المنطقة الحمراء، أما قيم الخط الطيفي  $P(J)$  عندما  $m = -J$  فإنها تتناقص بزيادة قيم  $m$ . كما نجد ان الأشكال البيانية الأنفة الذكر تحتوي على الخطوط الطيفية  $P(J)$ ،  $R(J)$  فقط و لا وجود للخط الطيفي  $Q(J)$  يعود السبب في ذلك الى ان قيمة الزخم الزاوي الالكتروني للانتقالات من نوع  $\Sigma$  يساوي صفر.

### الاستنتاجات

1- ان قيم الخط الطيفي  $R(J)$  تزداد بزيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $(J)$  في حين تتناقص قيم الخط الطيفي  $P(J)$  بزيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $(J)$  بالإضافة الى فقدان الخط الطيفي  $Q(J)$ .

2- ان قيم الخط الطيفي  $R(J)$  تزداد بزيادة قيم  $(m)$ . اما قيم الخط الطيفي  $P(J)$  تتناقص بزيادة قيم  $(m)$  ولا وجود للخط الطيفي  $Q(J)$ .

### المصادر:

- 1- X. Wang and L. Andrews., 2007. " Infrared Spectra and Theoretical Calculations of Lithium Hydride Clusters in Solid Hydrogen, Neon, and Argon., J. Phys. Chem. A, 111 (27):6008\_ 6019.
- 2- H.lefebore.brion and R.w, Field , 2004 . "Speruebations in The spectra of Diatomic Molecules ". Academic Press , New- York , (1986), and the spectra and Dynamics of Diatomic Molecules , Elsevier, San Diego.
- 3- Y.B. Shi1, P.C. Stancill, and J.G.Wang, 2013. On the X  $1\Sigma^+$  rovibrational spectrum of lithium hydride ,Astronomy and Astrophysics, 551, A140 .
- 4- N. Bouloufa, P. Cacciani, R. Vetter, and A. Yiannopoulou, 2000.

جدول (3): قيم الخطوط الطيفية  $R(J)$  ،  $P(J)$  مقيسة بوحدات  $(cm^{-1})$  للحمزة (1-0) للنظير

$LiD$  لجزيئة هايدريد الليثيوم علماً أن:

$$m = J+1 \dots\dots\dots R(J)$$

$$m = -J \dots\dots\dots P(J)$$

J	M	M	R(J)	P(J)
0	1	0	1055.765	1047.275
5	6	-5	1095.335	1001.945
10	11	-10	1130.105	951.8148
15	16	-15	1160.075	896.8848
20	21	-20	1185.245	837.1548
25	26	-25	1205.615	772.6248
30	31	-30	1221.185	703.2948
35	36	-35	1231.955	629.1648
40	41	-40	1237.925	550.2348
45	46	-45	1239.095	466.5048
50	51	-50	1235.465	377.9748
55	56		1227.035	
60	61		1213.805	
65	66		1195.775	
70	71		1172.945	
75	76		1145.315	
80	81		1112.885	
85	86		1075.655	
90	91		1033.625	
95	96		986.7948	
100	101		935.1648	

### المناقشة:

1- تم حساب قيم الخطوط الطيفية  $R(J)$  ،  $P(J)$

للنظير  $LiD$  للحمزة (1-0) ومن الإشكال البيانية (1)، (2)، (3) وجد ان قيم الخط الطيفي  $R(J)$  ،  $P(J)$  تتأثر بالمقدار  $J^2 (B_{v'} - B_v)$  حيث يكون  $B_{v'}$  اصغر من  $B_v$  فنجد ان قيم الخط الطيفي  $R(J)$  تزداد بزيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $J$  . في حين تتناقص قيم الخط الطيفي  $P(J)$  عند زيادة قيم العدد الكمي الدوراني  $J$ . بالإضافة الى ذلك نجد فقدان الخط الطيفي  $Q(J)$  . يعود السبب في ذلك الى ان الانتقال من نوع  $\Sigma$

يكون فيه الزخم الزاوي الالكتروني  $\Lambda$  يساوي صفر . لذلك نلاحظ عدم ظهور الخط الطيفي  $Q(J)$  لأنه في حالة وجوده يظهر عند مركز الحمزة .

- state of Na<sub>2</sub> using optical- optical double resonance spectroscopy”, J. Mol. Spectr.234(2):265-269.
- 10- C.Focsa , A.Poclet, B.pinchemel, R.J.Leroy , P. f. Bernathm, 2005. "Fourier Transform spectroscopy of the  $A^1\Pi-X^1\Sigma^+$  system of CaO". ,J. Mol. Spectr. 203(2)330-338.
- 11- A. V. Groenendael, M.Tudorie, C.Focsa, B.Pinchemel and P.F. Bernath, 2005. "High-resolution Fourier transform spectroscopy of the Cao  $A^1\Sigma^+ -x^1\Sigma^+$  transition : New in sights into perturbatubations by the  $a^3\Pi_{o+}$  and  $A^1\Pi$  states” J. Mol. Spectr .234(2):255-263.
- 12- I.N. Levine., 1975. "Molecular Spectroscopy”, Wiley – Interscience .
- 13- J.D. Graybeal, 1988."Molecular spectroscopy “, McGraw- Hill.
- 14- M.Dulick, K.Q.Zang , B.Guo- and P.e.Bernath,1998. "Far- and Mid-Infrared Emissions spectroscopy of LiH and LiD” J.Molec- Spectro. 188,14-26.
- Sub-Doppler Spectroscopy of the LiH Molecule: The A-X System, Journal of Molecular Spectroscopy 202,37-43 .
- 5- G.Herzberg, 1950. "Molecular Spectra and Molecular Structure”, D.van Nostrand, Princeton, N.J.
- 6- A. Medina, J.M.M. Roco, A. C. Hern and ez, and S. Velasco, 2003. "Infrared Q-branch absorption and rotationally- hindered species in liquids, "Journal of Chemical Physics, 119 (10) : 5176-5184.
- 7- - K.K.Docken and J.Hinze.,1972 "LiH Properties, Rotation –Vibrational Analysis, and Transition Moments for  $x^1\Sigma^+$  ,  $A^1\Sigma^+$  ,  $B^1\Pi$  ,  $3\Sigma^+$  and  $3\Pi^*$ ”, J.Chem. Phys.
- 8- H.L.Cristain Focsa, B. Pinchemel. R.J.Leroy.and P.f. Bernath. 2000. "Fourier transform spectroscopy of Bao , New ground – state constants from the  $A^1\Sigma^+ -x^1\Sigma^+$  chemiluminescence's”, J. Chem. Phys.
- 9- C.C.Tsai m R.y.Cahng and T. J. Whang. 2005. "Λ - Doubling investigation of the  $5^1\Pi_g$  Rydberg

## Emission Spectra for the Isotopic Molecule Lithium Hydride $L^6iD$

*Dhia Hamdi Al-Amiedy\**

*Ala'a Mustfa Theeban \**

*Rajaa Khedir Al-Yasari \*\**

\*Physics Department, College of Science for Women. University of Baghdad, Baghdad, Iraq.

\*\*Physics Department, College of Science, University of Karbala, Karbala, Iraq

### Abstract:

A study of the emission spectra of isotopic  $L^6iD$  for electronic states  $X^1\Sigma$  has been carried out. The energies of the vibration levels ( $\nu=0,1,..25$ ) and the values of spectral lines R(J) and P(J) versus rotational quantum number ( $J=0,1..25$ ). It was found that were an increase of the value of R(J) with the increase of the values of J was found while the value of P(J) decreases with decreasing of the values of J . It was found that corresponding to R(J) and P(J) the spectral line R(J) increases when the values of m increased.