نوع الوثيقة : رسالة جامعية

عنوان الوثيقة : *دراسة في مقارنة دالة الجهد خماسية المعاملات لجزيئات ثنائية الذرة*

Comparative study of five-parameter potential energy function of diatomic molecule

لغة الوثيقة : العربية

المستخلص : توجد طرق مختلفة يمكن بواسطتها دراسة منحنى الجهد للجزيئات ثنائية الذرة. اشهرها طريقة حساب نقط الانقلاب للحركة الترددية للجزيء وهي الطريقة المنسوبة إلى رايدبرج – كلاين – ريس ((RKR و كذلك طريقة فرض دوال تجريبية بحيث توجد قيم عوامل هذه الدوال بدلالة الثوابت الجزيئية. استخدمنا الطريقة الاخيرة لفرض أربع دوال تجريبية ذات خمس عوامل ومن ثم تجريبها على خمسة عشر عنصراً و مقارنتها بنتائج إلى رايدبرج – كلاين – ريس ((RKR المعملية و بنتائج دالة مورس (١٩٢٩) الثلاثية العوامل و دالة هيلبرت – هيرشفيلدر (١٩٤١) الخماسية العوامل و أخيراً دالة السناني (١٩٩٩) الخماسية العوامل. كذلك تطرقنا في البحث لدراسة الجزيئات ثنائية الذرة في المدى البعيد وايجاد طاقة الانحلال بطرق متعددة . حيث أوجدنا ثوابت المدى البعيد ((the long-rang constants و طاقة الانحلال عن طريق ال (near-dissociation method) و كذلك عن طريق ال (extended near-dissociation method) . بالاضافة الى ذلك تم استخدام طريقة بيرج – سبونر (Birge) -Sponer methodو المكونات الذرية ((atomic product method لايجاد طاقة الانحلال للجزيئات ثنائية الذرة

المشرف : أ.د.محمد رفيع، د. ريم أبوراس الطويرقي

سنة النشر : ٢٠٠٥