نوع الوثيقة : رسالة جامعية

عنوان الوثيقة : *تقنيات حسابية في أطياف الجزيئات ثنائية الذرة*

Computational Techniques in Diatomic Spectroscopy

لغة الوثيقة : العربية

المستخلص : إن استخدام التقنيات الحسابية في أطياف الجزيئات ثنائية الذرة يعتبر ضرورياً لحل كثير من الحالات. ونظراً لأهمية جزيء الأكسجين لنا، فالحياة مستحيلة بدونه، بالإضافة إلى أن غازي الأكسجين والأوزون يلعبان دوراً هاماً في حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية الضارة وذلك بامتصاصها وأيضاً عن طريق تحول كلاً من هذين الجزيئين للآخر من خلال التفاعلات الكيميائية. فقد أرتكز مشروع البحث الأساسي على إيجاد نموذج مثالي لدراسة طيف الامتصاص للغلاف الجوي الناتج من جزيئات الأكسجين النقية في منطقة الأشعة فوق البنفسجية ذات الأطوال الموجية (١٧٥ nm - 300 nm) ، والذي يشتمل على الطيف الشريطي لنظام هيرزبيرج I ( ) ونظام هيرزبيرج II)) و نظام الشومان رونج ( ) و كذلك على الطيف المتصل لنظام هيرزبيرج، مستخدمين بعض هذه التقنيات الحسابية. وقد قمنا في هذا البحث باستخدام برنامج BOUND لتيلي و تيلي (١٩٨٢) لبناء منحنى طاقة الجهد لجزيء الأكسجين للمستوى الأرضي ومستويات الإثارة ، و مستخدمين طريقة رايدبرج – كلاين – ريس. وكذلك باستخدام نفس البرنامج أمكن حساب مُعاملات الفرانك كوندن والتي تساهم في حساب شدة الطيف من خلال قيمة احتمالية حدوثه. يرتكز مشروع البحث على نمذجة جزيء الأكسجين لنظام هيرزبيرج II ( ) للنطاقات ( ) باستخدام برنامج النمذجة TRISING والذي تم تطويره من قبلنا، وكذلك نمذجة جزيء الأكسجين لنظام هيرزبيرج I ( ) للنطاقات ( ) ونظام الشومان رونج ( ) للنطاقات ( ) وذلك باستخدام برنامج النمذجة TRIPLET والذي قمنا بتطويره أيضاً في هذه الرسالة و تمت مقارنة الأطياف الناتجة من النمذجة بالأطياف التجريبية. باستخدام الأطياف الناتجة تمكنا أيضاً من حساب نسب شدة التذبذب لهذه الأنظمة.

المشرف : د.ريم بنت محمدالطويرقي ، أ.د.محمدرفيع

سنة النشر : ٢٠٠٥