دراسة الخواص الطيفية والحرارية لجزيئة الكلورفوم $CHCl_3$ ودراسة تاثير الاصرة (C-H) و(C-Cl) على هذه الخواص الطيفية

عدي محسن نايف* رافد عباس علي** مخلص مولود اسماعيل*

تاريخ التسليم:٢٠٠٦/٣/٢٧
تاريخ القبول: ٢٠٠٦/١١/٢٦

الخلاصة

تمت في هذا البحث دراسة الخواص الطيفية والحرارية لجزيئة ($CHCl_3$) إذ تم دراسة منحني الجهد للآصرة (C-H) و (C-Cl) حيث كانت طاقة الانحلال للآصرة (C-H) هي (2.65eV) وطاقة الانحلال للآصرة (C-Cl) هي (1.88eV) كذلك تم دراسة انحلال اهتزاز الجزيئة وترددتها و كانت جميعها فعالة في طيف رامان وIR بسبب التغيرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة. إضافة إلى ذلك تم حساب القيم الطاقية للمدارات الجزيئية الHomo وال Lumo وكانت لأعلى مدار مشغول Homo هي (-10.879 eV) وأوطأ مدار غير مشغول Lumo (0.7972 eV) كما تم حساب كل من كثافة الشحنة Total Charge Density وجهد الكهروسلبية Electrostatics Potential من خلال الرسوم التوضيحية ببعدين وثلاثة أبعاد.

أما بالنسبة للخواص الثرموديناميكية (الحرارية) مثل حرارة التكوين(ΔH^o_f) بوحدة kcal/mol والمحتوى الحراري (H) بوحدة Cal/mol والسعة الحرارية (C_p) بوحدة Cal/k/mol والانتروبي (S) بوحدة Cal/k /mol إضافة إلى طاقة جبسن الحرة (G) بوحدة kcal/mol وكانت قيمها عند درجة حرارة 298K كالأتي (-19.734, -20.874, 77.974, 16.3386, 3502.1041) على التوالي، حيث إن قيم هذه الخصائص تم حسابها عند درجات حرارة مختلفة من K (100-3000) وتم رسم العلاقات البيانية التي توضح ذلك ، وكانت كافة النتائج قريبة من النتائج العملية.

Study of Spectroscopy and Thermodynamic Properties for $CHCl_3$ Molecular and Influence Its of Bonds (C-H) and (C-Cl) on Spectroscopy Properties

Abstract

In This research studies spectroscopy and thermodynamic properties of Chloroform molecule CHCl3, Also the study includes plot of molecule potential energy curve of (C-H) and (C-Cl) bonds, Then the dissociated energy which was (2.65 eV) for (C-H) and (1.88eV) for (C-Cl), And study covers the vibration modes of CHCl3 and frequencies which were active in Raman and IR spectra due to the change of polarization and dipole moment at molecule. Orbit energy Homo was (-10.879 eV) for higher orbit energy occupied and (0.7972 eV) for Lumo lower orbit energy unoccupied. Also total charge density and electrostatic potential were calculated from the diagrams in two and three dimensions. Thermodynamic properties such as Heat of Formation ($\Delta H^\circ f$) kcal/mol, Enthalpy (H) cal/mol, Heat Capacity (C_p) cal/k/mol, Entropy (S) cal/k/mol, and Gebb's energy (G) kcal/mol were calculated at room temperature and were (-20.874, 3502.104, 16.339, 77.974, -19.734)respectively.