

دراسة الخواص الطيفية والحرارية لجزيئة ثاني اوكسيد الفسفور PO₂ ودراسة تأثير الاصرة (P - O) في هذه الخواص الطيفية

مزهـر باقر صالح*

استلام البحث 19، كانون الاول، 2010
قبول النشر 3، نيسان، 2012

الخلاصة :

تم في هذا البحث دراسة الخواص الطيفية والحرارية لجزيئة (PO₂). إذ تم دراسة منحنى الجهد للاصرة (P - O) إذ كانت طاقة أنحلال الجزيئة (4.332 eV) أما ترددات الجزيئة فكانت جميعها فعالة في IR بسبب التغير في الأستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة. أما الخواص الترموديناميكية (الحرارية) مثل حرارة التكوين (ΔH f) فكانت (-54.16 kcal/mol) والمحتوي الحراري (H) وكان (2366.45 Cal/mol) والسعة الحرارية بثبوت الضغط (Cp) وكانت (10.6 Cal/k/mol) والانتروبي (S) إذ كان (59.52 Cal/k/mol) فضلا عن طاقة جيبس الحرة (G) وكانت (-15370.51 kcal/mol) وكانت هذه القيم عند درجة حرارة 298K. إن قيم هذه الخصائص تم حسابها عند درجات حرارة مختلفة من (100-3000) k وتم رسم العلاقات البيانية التي توضح ذلك، وكانت النتائج كافة قريبة من النتائج العملية.

الكلمات المفتاحية: منحنى الجهد، الخواص الحرارية، الخواص الطيفية.

المقدمة :

علم الأطياف يعني التأثيرات المتبادلة بين المادة والأشعاع كما أن الأطياف كافة تنشأ عن أنتقالات بين حالات طاقة معينة. فالأطياف الجزيئية تظهر حزمًا عريضة وعند تحليلها بدقة تبدو مجموعة من الخطوط الطيفية الناتجة عن عدد من أنتقالات بين مستويات الطاقة المختلفة

إن العدد الكلي لمستويات الطاقة لأي جزيئة كبير جداً كذلك فإن الطاقة يجب أن تقسم إلى طاقات مختلفة وهي [1]:

$$E_{total} = E_T + E_N + E_R + E_V + E_E \quad \dots 1$$

اذ أن E_T تمثل الطاقة الأنتقالية، E_N : الطاقة النووية، E_R : الطاقة الدورانية، E_V : الطاقة الأهتزازية، E_E : الطاقة الألكترونية. إن الجزيئة هي مجموعة كرات ذوات كتل مختلفة توافق ذرات الجزيئة ونوابض مختلفة الأطوال توافق الأواصر التي تربط الذرات في الجزيئة وأن تقلص وتمدد هذه الأواصر الكيميائية شبيهة إلى حد ما بسلوك النابض الذي يخضع إلى قانون هوك (Hook's Law) ونتيجة لذلك يدعى أن نموذج الجزيئة الثنائي الذرة المهتزة بالانموذج المتذبذب التوافقي البسيط (Simple Harmonic Oscillatar Model) وإن التردد

الكلاسيكي لهذا المتذبذب يعطى بالعلاقة [4,3,2,1]:

$$\nu_{vib} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad \dots 2$$

وهذه المعادلة تصف الحركة الأهتزازية للجزيئة الثنائية الذرة التي كتلتها المختزلة (μ) والتي تتذبذب تحت تأثير قوة (k) ووفقاً لميكانيك الكم فإن حلول معادلة شرودنجر للنظام المتذبذب التوافقي البسيط لتعطين قيم مستويات الطاقة الأهتزازية تتمثل في المعادلة:

$$E_v = (v + \frac{1}{2})h\nu_{vib} \quad \dots 3$$

اذ يمثل (v) عدد الكم الأهتزازي ويأخذ القيم 0, 1, 2, 3, وأن ν_{vib} يمثل التردد الكلاسيكي للمتذبذب التوافقي. ويعد الانموذج المهتز التوافقي انموذجاً تقريبياً اذ يمكن رسم العلاقة بين طاقة الجهد للاهتزاز وبين المسافة البينية بحسب المعادلة [5].

$$U(r) = \frac{1}{2}k(r - r_e)^2 \quad \dots 4$$

اذ U : طاقة الجهد، k : ثابت القوة، r : المسافة بين

$$\sum L_j = \sum (F_{ij} - \lambda M_{ij}) \quad \dots 7$$

اذ ان حل هذه المعادلة التجريبية للحصول على جذور المحددة λ وتقييم الترددات الاهتزازية الاساسي والمتجهات (Eigen Vector) تعين الاحداثيات الاعتيادية اذ ان F_{ij} : عنصر مصفوفة ثوابت القوى ، λ : دالة القيمة الذاتية Eigen Value ، M_{ij} : عنصر مصفوفة الكتل الذرية ، L_j : قيم معاملات الجمع . ان الخواص الكهروستاتيكية للجزيئات هي العامل الاساسي الذي يسهم في شرح الخواص الكيميائية للعناصر والبنى التركيبية لمركباتها ومن هذه الخواص الجهد الكهروستاتيكي للجزيئة والذي يعرف بأنه نسبة بين الطاقة الكامنة الكهربائية للجزيئة الى مقدار شحنتها أو انه طاقة الجهد للجزيئة عند البعد (r) والذي يعطى بالعلاقة الاتية [12] :

$$V = \sum \frac{Z_A}{|r - r_A|} - \int \frac{\rho(r')}{|r' - r|} dr' \quad \dots 8$$

اذ ان r يمثل البعد بين النقطة والشحنة النقطية ، Z_A هي العدد الذري ، r_A تمثل نصف قطر الذرة و $\rho(r')$ كثافة الشحنة الالكترونية . نلاحظ من العلاقة ان الحد الاول يمثل مساهمة الأنوية بالجهد الكهروستاتيكي والحد الثاني يمثل مساهمة الألكترونات لحسب توزيعها بالجزيئة [13] . اما مبادئ الديناميكية الحرارية (الثرموداينميك) التي تهتم بتحويلات الطاقة للمادة في الفراغ الذي تحتله المادة (النظام System) وما يتبع ذلك من تحول في مستوى طاقته الداخلية التي هي نوع من انواع الطاقة الكامنة في النظام والتي تؤدي دوراً في كثير من المفاهيم والتي منها السعة الحرارية (وهي كمية الحرارة اللازمة لرفع حرارة كتل (g) من المادة درجة حرارية واحدة ووحدها $\text{cal.Mol}^{-1}.\text{deg}^{-1}$) ويمكن كتابة العلاقة بين الحرارة المنتقلة الى مادة ودرجة حرارتها بالشكل الاتي [14]:

$$dQ = nC_dT \quad \dots 9$$

اذ ان dQ : كمية الحرارة ، n : عدد المولات ، C : السعة الحرارية الجزيئية ، dT : التغير في درجة الحرارة بسبب dQ . ومن المعروف ان السعة الحرارية يمكن كتابتها بالشكل الاتي:

$$R = C_p - C_v \quad \dots 10$$

اذ ان R : الثابت العام للغازات ، C_p : السعة الحرارية بثبوت الضغط ، C_v : السعة الحرارية

الذرتين ، r_e : مسافة الأتزان بين الذرتين . ان اهتزاز الجزيئات في الحقيقة ليس اهتزازاً توافقياً بسيطاً فعند تقلص الأصرة فان الذرات تقترب من بعضها وتزداد الطاقة لكي تتمكن الذرات من القيام بشغل مقابل قوى التنافر القوية والقصيرة المدى كما ان مط الأصرة تبعد الذرات عن بعضها مما يتطلب طاقة أيضاً الى أن تصل الى نقطة تفقد عندها الأواصر مرونتها فتتفكك الى ذرات اذ تصبح الطاقة غير مكممة.

ويمكن كتابة معادلة الجهد اللاتوافقي لمورس للحصول على مستويات الطاقة الاهتزازية بدلالة العدد الكمي الاهتزازي (v) وكالاتي [5] :

$$E_v = (V + \frac{1}{2})v + (V + \frac{1}{2})^2 v \chi_e - (V + \frac{1}{2})^2 v \chi_e^2 \dots 5$$

اذ ان χ_e : ثابت اللاتوافقية ويكون ذا قيمة موجبة صغيرة جداً . ان طاقة التفكك تمثل الفرق ما بين طاقة الجزيئة في حالة الأتزان الافتراضية وطاقة الذرات المنفصلة من بعضها . ان أطيف الحركة الاهتزازية للجزيئات المتعددة الذرات تكون معقدة اذ يمكن وصف حركتها الاهتزازية بدلالة حركات بسيطة تسمى أنماط الاهتزاز الاعتيادية (Normal Mode of Vibration) التي تخضع للعلاقة [6,5] :

$$3N - 5 \quad \dots 6$$

اذ ان N : تمثل عدد الذرات للجزيئات الخطية . ان أطيف الاهتزاز تلاحظ عملياً بشكل أطيف تحت الحمراء (IR) أو أطيف رامان Raman Spectra إلا ان المنشأ الفيزيائي لهذين النوعين من الأطيف يكون مختلف [5] . ان الاهتزازات الترددية للجزيئات المتعددة الذرات سواء كانت خطية أو غير خطية تكون معقدة والسبب في ذلك هو أن طيف الأشعة تحت الحمراء يحتوي على ترددات التذبذب الأساسية والترددات فوق الأساسية والحزم الأتحادية نتيجة للطبيعة اللاتوافقية للاهتزازات الجزيئية [8,7,3,2] . ولقد تمكن العالم ولسون (E. B. Wilson) من وصف الحركة الاهتزازية من خلال مصفوفة F و M اذ ان (F) مصفوفة ثوابت القوى التي تصف التوزيع الهندسي للجزيئة بشكل تام و (M) مصفوفة تشمل على الكتل والعلاقات الفراغية المعينة للذرات ومن خلال معادلة ويلسون التي تعطي بالعلاقة [11,10,9] .

جزء من ميكانيك الكم Molecular Mechanics (MM) اخذ بالحسبان الترتيب الألكتروني عند إجراء طرائق الحساب المتمثلة بطريقة (Ab-initio) المعروفة، وتستعمل دوال تحليلية بسيطة $f(r, \Theta, \phi)$ إذ r تمثل طول الأصرة و Θ زاوية محصورة بين ثلاث ذرات في الجزيئة و Φ زاوية ثنائية السطوح (زاوية محصورة بين مستويين) للحصول على أفضل وضعية هندسية متوازنة للجزيئة لتكوين ملف يحتوي الأحداثيات الداخلية للوضعية التي تتم بموجبها تكوين الجزيئة هندسيا . ويتعامل هذا البرنامج مع كل أنواع الجزيئات الصغيرة والكبيرة والعضوية واللاعضوية ويعتمد على أقل مقدار للطاقة الجزيئية عند إجراء الحسابات [15]

برنامج WIN MOPAC 7.21

يعد أحد تحسينات برنامج Mopac وهذا مختصر للصيغة (Semi - Epirical Molecular Orbital Program) ويعنى برنامج الأوربتال الجزيئي شبه التجريبي . ويقوم هذا البرنامج بقراءة القيم الناتجة من برنامج PC Model ، وبعدها تحسب الكثير من الخصائص الجزيئية مثل الأطياف الجزيئية والكميات الثيرموديناميكية وثوابت القوى ، ومن خلالها يرسم منحني طاقة الجهد للجزيئة [16] .

النتائج والمناقشة :

الخواص الطيفية:

تم دراسة منحني الجهد (طاقة اهتزاز الجزيئة) وتم تحديد نقط الاتزان التي تكون فيها قيمة الطاقة الكلية اقل مايمكن ويوضح الشكل (1) منحني طاقة الجهد لاهتزاز الجزيئة (PO_2) إذ تبلغ الطاقة الكلية عند موضع الاتزان (قعر منحني الجهد) نحو (706.36 eV في حين تكون المسافة ($P-O$) نحو 1.60001 \AA ويلاحظ من الشكل (1) الاقتراب من السلوك التوافقي في مستويات الاهتزاز لـ ($P-O$) إذ يظهر تأثير مط الأصرة والابتعاد عن السلوك التوافقي لدخولنا في مستويات الاهتزاز العليا كلما زادت قيمة المسافة ($P-O$) أكثر حيث تزداد الطاقة حتى تصل إلى تفكك الجزيئة إذ طاقة التفكك الطيفية ($Deq=2.95 \text{ eV}$) لـ ($P-O$)

بثبوت الحجم إذ ان السعة الحرارية بثبوت الضغط للجزيئات الخطية متعددة الذرات تعطى بالعلاقة:

$$C_p = (3/2)R + (3N-5)R \quad \dots 11$$

كذلك المحتوى الحراري (الانثاليبي) Enthalpy وهي من الدوال المهمة و يعطى بالعلاقة الاتية:

$$H=U+PV \quad \dots 12$$

اذ ان H : الانثاليبي ، U : الطاقة الداخلية ، P : الضغط ، V : الحجم وتعد الانثاليبي دالة للضغط ودرجة الحرارة والطاقة الداخلية لجميع المواد ما عدا الغازات التي تسلك سلوكاً مثالياً او قريباً من هذا السلوك. اما حرارة التكوين او انثاليبي التكوين (Heat of formation) اذ تعرف (بانها حرارة التكوين القياسية ($\Delta H^{\circ}f$) وهي التغير في الانثاليبي عند تكون مول واحد من المادة من عناصرها الاساسية في الظروف القياسية) . وهي صفة مميزة تتعلق باستقرار المركب فاذا كانت موجبة كبيرة فالمركب غير مستقر واذا كانت سالبة فالمركب مستقر. ومن الدوال الاخرى الانتروبي (S) Entropy الذي يعد مقياساً للعشوائية الناتجة للمركب بسبب التغير في درجات الحرارة حيث يعطى بالعلاقة:

$$dS=dQ_R/T \quad \dots 13$$

اذ ان dS : التغير في الانتروبي، T : درجة الحرارة اما طاقة جيبس - طاقة لهملولتز Gibb's Free Energy والتي تعطى بالعلاقة [14]:

$$\Delta G = \Delta H^{\circ} - T\Delta S^{\circ} \quad \dots 14$$

وهي مؤشر يدل مسبقاً فيما اذا كانت العملية تحدث تلقائياً ام تبقى في حالة اتزان ام تسير تلقائياً بالاتجاه المعاكس وهي تتناسب عكسياً مع درجة الحرارة بثبوت الضغط .

المواد وطرائق العمل :

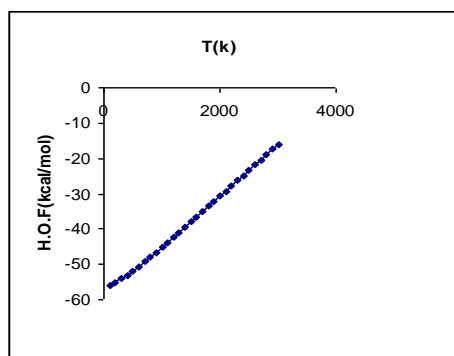
تم استعمال برنامجين حسابيين اساسيين وهما برنامج PC MODEL وبرنامج WIN MOPAC 7.21 وفيما يأتي تفصيل للبرنامجين المستعملين.

برنامج PC MODEL

يعتمد هذا البرنامج على طرائق النمذجة الجزيئية Molecular Modeling التي تعتمد مبادئ الميكانيك الجزيئي والذي هو

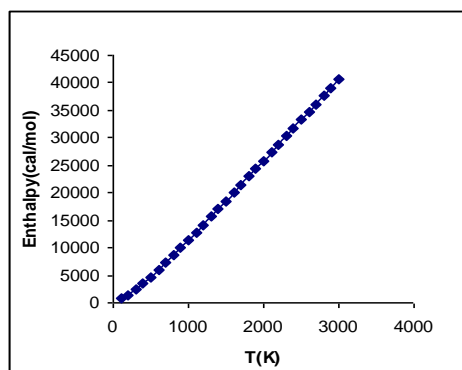
الخصائص الحرارية ودرجة الحرارة وكما يأتي

:-
حساب حرارة التكوين القياسية (ΔH_f°) Heat of Formation : حسب حرارة التكوين القياسية عند درجة حرارة 298k وضغط 1 atm وكانت تساوي (-54.16 kcal/mol) وهي قريبة من القيمة العملية وكانت (-66.74 kcal/mol) [20]. وكذلك حسب حرارة التكوين لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100-3000 k) ورسمت العلاقة بين حرارة التكوين ودرجة الحرارة كما في الشكل (2) الذي يبين التناسب الطردي بينهما .

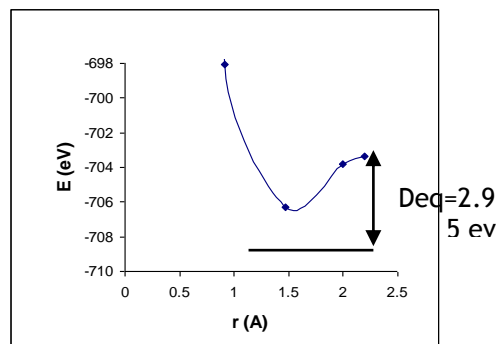


شكل (2) يبين العلاقة بين حرارة التكوين (ΔH_f°) ودرجة الحرارة (T)

حساب المحتوى الحراري (الأنثاليبي) Enthalpy H : وهي دالة للضغط ودرجة الحرارة وللطاقة الداخلية وهي ناتجة من حاصل جمع الطاقة الداخلية للنظام U مع الطاقة الخارجية له PV ويمثل المحتوى الحراري للنظام ولا يمكن إيجاد القيم التجريبية لأنثاليبي المواد ولكن يمكن إيجاد قيم التغير في هذه الأنثاليبيات ، وتم حساب المحتوى الحراري لدرجات حرارية مختلفة (100- 3000k) والشكل (3) يبين أن التغير بالأنثاليبي يزداد كلما زادت درجة الحرارة .



شكل (3) يبين العلاقة بين المحتوى الحراري (H) ودرجة الحرارة (T)



شكل (1) تغير الطاقة الكلية مع المسافة P-O لجزيئة ثاني أكسيد الفسفور

كذلك تم حساب أنماط ترددات الاهتزاز للجزيئة اللاخطية إذ ان عدد الانماط الاهتزازية لهذه الجزيئة هي (4 = 3N-5) والجدول (1) يوضح قيم الترددات معبر عنها بالعدد الموجي (ν) والتي قيست باستعمال برنامج WinMopac ومقارنتها بالنتائج العملية.

جدول (1) يوضح انماط الاهتزاز والاطوال الموجية المصاحبة لها

Vibration	Wave number (cm ⁻¹) Cal.	Wave length (nm) Cal.	Wave number (cm ⁻¹) Exp. [17,18,19]	Wave length (nm) Exp. [17,18,19]
P-O Symmetry bend	548.7	18224.48	347	28818.44
P-O Symmetry bend	548.71	18224.56	389	25706.94
P-O Symmetry stretch	843.92	11849.46	933	10718.11
P-O Symmetry stretch	1142.27	8754.49	1076	9293.68

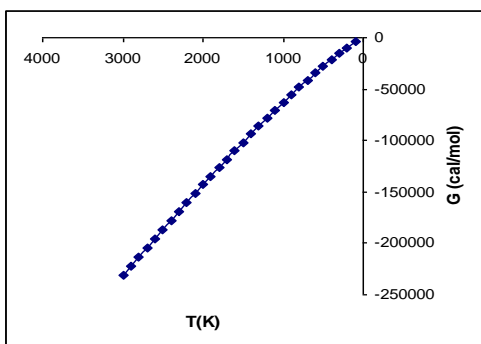
اذ يتضح من خلال الجدول (1) تقارب القيم النظرية مع العملية الى حد كبير .

الخواص الحرارية (الثيرموديناميكية): حسب بعض الخصائص الحرارية المتعلقة بجزيئة ثاني أكسيد الفسفور كحرارة التكوين (Heat of Formation) والانتروبي (Entropy) والسعة الحرارية (Heat Capacity) والمحتوى الحراري (الأنثاليبي) (Enthalpy) (وطاقة جيبس الحرة) (Gibbs Free Energy) باستعمال برنامج Win Mopac 7.21 وبطريقة MNDO-PM3 ورسمت العلاقات البيانية بين هذه

حساب طاقة جيبس الحرة (Gp) Gibbs Free Energy : هي خاصية يمكن من خلالها عرفة ان التفاعل يحدث بصورة تلقائية أم لا وحسبت قيمتها من العلاقة :-

$$G = H - TS$$

وكانت قيمتها (-15370.51 kcal/mol) ، وحسبت طاقة جيبس لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100 – 3000 k) والشكل (6) يوضح العلاقة العكسية بين طاقة جيبس الحرة ودرجة الحرارة أي أن طاقة جيبس الحرة تقل بارتفاع درجة الحرارة .

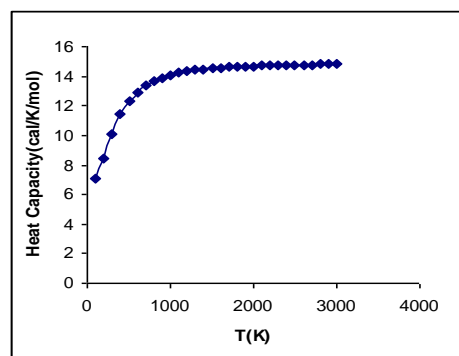


شكل (6) يبين العلاقة بين طاقة جيبس الحرة (Gp) ودرجة الحرارة (T)

الاستنتاجات:

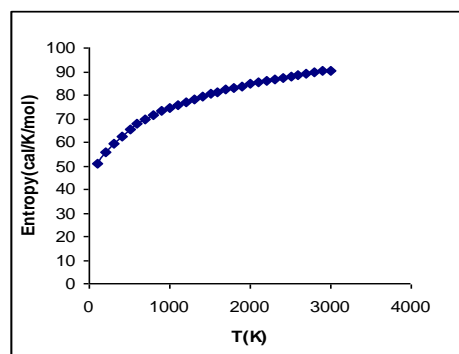
من خلال النتائج يتضح ان الاصرة الفعالة ذات القيم المختلفة للامتصاص تكون من خلال الاصرة (P-O) اذ ان قيم الامتصاص ناتج من الاصرة (P - O) اذ ان العدد الموجي (843.92 , 142.27 cm^{-1}) يعود الى مط الاصرة المتناظرة و الترددات (548.71 nm) (548.70 nm) يعود الى المط الانحنائي للاصرة (P-O) . اذ ان ترددات اهتزاز المط والانحناء تعتمد بصورة كبيرة على كتل الذرات المهتزة حيث كلما كانت الذرات خفيفة الوزن كانت اهتزازاتها اعلى . اما الخواص الحرارية فيلاحظ التناسب الطردي لكل من : ΔH^0 , S , H , C_p مع درجة الحرارة وتفسير ذلك بحسب ميكانيك الكم اذ ان في درجة حرارة الغرفة وأعلى بقليل تسهم كل من الحركة الدورانية والانتقالية في قيم السعة الحرارية وفي درجات حرارة اعلى تؤخذ بعين الاهمية الحركة الاهتزازية وفي درجات الحرارة اعلى من 1000K فان الحركة الألكترونية تؤدي دور مهما هذا بالنسبة للسعة

السعة الحرارية (C_p) Heat Capacity : وهي دالة لدرجة الحرارة وتتناسب طرديا معها اذ بزيادة درجة الحرارة تزداد عدد الجزيئات في مستوي الطاقة الاهتزازية العليا وتزداد السعة الحرارية لكل هيئة اهتزاز . وكانت قيمة السعة الحرارية بثبوت الضغط وعند درجة حرارة 298 k وضغط (1 atm) (10.06 Cal/k/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (9.45 Cal/k/mol) [20] . حسبت السعة الحرارية لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100 – 3000 k) والشكل (4) يوضح التناسب الطردي بينهما في درجات الحرارة الواطئة لحد درجة حرارة (1100 k) (تقريبا ، وبعد هذه الدرجة تأخذ السعة الحرارية بالاستقرار في درجات الحرارة العالية .



شكل (4) يبين العلاقة بين السعة الحرارية (C_p) ودرجة الحرارة (T)

الأنتروبي (S) Entropy : حسبت قيمة الأنتروبي عند درجة الحرارة القياسية 298 K وكانت قيمتها (59.52 Cal/k/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (60.69 Cal/k/mol) [21,20] . حسب الأنتروبي لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100- 3000 k) والشكل (5) يبين العلاقة الطردية بين الأنتروبي ودرجة الحرارة .



شكل (5) يبين شكل العلاقة بين الأنتروبي (S) ودرجة الحرارة (T)

- 10- King , G.W. 1964. spectroscopy and Molecular structure, Holt, Rinehart and Winston, 1st edition New York. pp482.
- 11- Change, R. 1978. "Basic principles of spectroscopy", Mc Graw – Hill, second edition, New York. pp304.
- 12- Hertzberg, G. 2007. "Molecular Spectra and Molecular structure", Lightning Source Inc., New York. pp676.
- 13- Sathyanaragana , D. N. 2004 "Vibrational Spectroscopy theory and applications", New age international publishers, first edition, New Delhi, pp636.
- 14- Smith, J. M. Van, H.C. and Abbott, M. M. 2001, "Introduction to Chemical Engineering", Mc Graw –Hill, sixth edition, New York, pp723.
- 15- Ami, L. Minmin, W. Neysa, N. Liotta, C. Danuta, R. R. Marek, L. And James, P. S. 2001, "Calculated conformer energies for organic molecules with multiple polar functionalities are method dependent". BMC Chem. Biol. 1:2.
- 16- Frank , L. and Karl, S. 2003. " Semiempirical study of a pH – switchable rotaxane" J. Molec. Struct. ,Theochem, 621: 253-260.
- 17- Lei, J. Teslja, A. Nizamov, B. and Dagdigian, P.J. 2001" Free- Jet electronic spectroscopy of the PO2 radical', J. Physic. Chem. A, 105(33): 7828-7833.
- 18- Bauschlicher, C. Zhou, M. and Andrews, L. 2000 "A study of the reaction of phosphorus and dioxygen" J. Physic. Chem. A, 104: 3566.
- 19- Begona, S. Fritzthof von, G. Werner, M. Jose mara, V. Stefka, T. And Arturo, M. 2005 "Ionic interactions at both inter-ring contact of GroEL are involved in transmission of the allosteric signal الحرارية C_p اما الأنتروبي S فإن الزيادة في الأنتروبي بزيادة درجات الحرارة يعود الى الزيادة في الأنتشار الطاقى المرتبط بالطاقات الدورانية والأهتزازية وفي حرارة التكوين ΔH_f^0 فإن القيم السالبة تدل على استقرارية الجزيئة.
- المصادر :**
- 1- Woodward, R. B. and Hoffmann, R. 1970. "Conservation of Orbital Symmetry " Academic press . New York. 8(11):781-853
- 2- Michael, R. M. 2002 "Fundamentals of Quantum Chemistry molecular spectroscopy and modern electronic structure computations" New York. pp85.
- 3- عبد الله , خالد و محمود , عصام احمد 1992 الفيزياء الجزيئية , دار الكتب للطباعة والنشر , جامعة الموصل. 232 صفحة .
- 4- Arthur, B. 2002." Concepts of Modern physics", McGrew-Hill, sixth edition, pp556.
- 5- Schrader, B. 1995. "Infrared and Raman Spectroscopy", VCH Publishers. Inc. New York, pp765.
- 6- Mckellar, A. R. 2006. Infrared spectra of CO₂, J. Chem. physic. 125(11) :114310-114315.
- 7- Robert, C. Spiker, J. and Ira, W. 2003 . Effect of bilayer curvature on vibration Raman spectroscopic behaviour of phospholipids- water assemblies National institutes of Health , Bethesda, Md. 455(2): 588-596.
- 8- Walter, P. Carsten, S. Hartmut, F. and Hans, B. 1998. Four Transform Infrared Spectroscopy as a Probe for the Study of Hydration of Lipid Self Assemblies. I. Methodology and General Phenomena, 4(4): 281- 294.
- 9- سلومي , عصام جرجيس 1984 التطبيقات الكيميائية لنظرية المجموعة , جامعة الموصل, 446 صفحة.

21- نايف, عدي محسن و علي, رافد عباس و اسماعيل, مخلص مولود, 2007. دراسة الخواص الطيفية والحرارية لجزيئة الكلورفورم $CHCl_2$ ودراسة تأثير (C-H) و(C-Cl) على هذه الخواص الطيفية. مجلة الهندسة التكنولوجيا, العدد 3, المجلد 25.

:A time – resolved infrared difference study". Protein Society, 14(9): 2267-2274.

20- Chase, M. W.1998. "Thermochemical Tables" J. Physic Chem., NIST Standard Reference Data (JPCRD) , Fourth Edition. pp.1963

Study of Spectroscopy and Thermodynamic Properties for Phoshours dioxide PO_2 Molecular and Influence Study of Bond (P-O) on Spectroscopy Properties

*Mezher B. Saleh**

*Al–Mustansiriyah University–College of Science–Department of Physics

Abstract:

In This research a Spectroscopic complement and Thermodynamic properties for molecule PO_2 were studied . That included a calculation of potential energy . From the curve of total energy for molecule at equilibrium distance , for bond (P-O), the degenerated of bond energy was (4.332eV) instate of the vibration modes of (PO_2) molecule and frequency that was found active in IR spectra because variable inpolarization and dipole moment for molecule. Also we calculate some thermodynamic parameters of (PO_2) such as heat of formation , enthalpy , heat Of capacity , entropy and gibb's free energy Were (-54.16 kcal/mol , 2366.45 kcal/mol , 10.06 kcal /k/mol , 59.52 kcal /k /mol, -15370.51 kcal / mol) respectively under condition of room temperature and atmosphere pressure (298 k , 1 atm.). We calculate there parameters at various temperature from (100 – 3000) K . It was found that the obtained results were in a good agreement with previous experimental facts.