

تحديد طاقة السويات المنشطرة النووية للمركب NH_3SO_3

الدكتور ناصر اسماعيل*

(تاريخ الإيداع 14 / 11 / 2012. قُبِلَ للنشر في 27 / 2 / 2013)

□ ملخص □

تم في هذا البحث إيجاد قيم سويات الطاقة المسموحة لشاردة الأزوت N^+ في المركب (sulfamic NH_3SO_3 acid) عند تغيّر الزاوية β° بين محور الجزئ والمحور الرئيسي للحقل المغناطيسي المطبق عليه في المجال $0^\circ - 180^\circ$. ولاحظنا انشطار سويات الطاقة بوجود الحقل المغناطيسي الشديد، وبالتالي حسبنا مساهمة رباعي الأقطاب الكهربائي النووي في عملية الانشطار، وبلغت قيمتها كمعدل $E_0 = -0.1987 \text{ neV}$ ، وكذلك طاقتي السويات المنشطرة عند القيمة العظمى والصغرى للسبين النووي. علاوة على ذلك، حسبنا الفرق في التردد $\Delta\omega$ عند كل قيمة زاوية β° .

الكلمات المفتاحية: تفاعل زيمان - رباعي الأقطاب الكهربائي - الرنين المغناطيسي النووي - طاقة سويات الانشطار.

* مدرس - قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة تشرين - اللاذقية - سورية

Determining the nuclear splitting level energies of NH_3SO_3 compound

Nasser Ismail*

(Received 14 / 11 / 2012. Accepted 27 / 2 / 2013)

□ ABSTRACT □

In this research the nuclear splitting level allowed energies are found for N^+ in the NH_3SO_3 compound (**sulfamic acid**) when the angle β° between molecular axis and the axis of the applied magnetic field in the range $0^\circ - 180^\circ$. We noticed the splitting level by acting the strong magnetic field. Therefore, we calculated the contribution of electric quadruple in the splitting process and its average value was $E_0 = -0.1987 \text{ neV}$. Moreover, the splitting level energies were calculated at minimum and maximum spin values. In addition, we found the frequency difference $\Delta\omega$ at each value of β -angle.

Keywords: Zeeman interaction; nuclear electric quadruple; nuclear magnetic resonance (NMR); splitting level energy.

*Assistant Professor , Faculty of science , Tishreen University, Lattakia, Syria

مقدمة:

تُطبق مطيافية NMR في مجال الترددات الراديوية التي تقع تردداتها في المجال (10 kHz – 900 MHz) من الطيف الكهرطيسي. وكما هو معلوم لا تبدي جميع النوى ظاهرة NMR، وإنما النوى التي سببها يحقق الشرط $I > 1/2$ | تعطي إشارة الرنين المغناطيسي النووي [1,2]. وعندما تُطبق حقل مغناطيسي خارجي منتظم B_0 على مادة ما فإن التفاعلات التالية تُساهم في طاقة السوية النووية.

• **تفاعل Zeeman:** يحصل بين النواة التي عزمها المغناطيسي μ والحقل المغناطيسي المطبق B_0 . وتُعطي طاقة التأثير المتبادل بالعلاقة التالية:

$$E_z = -\mu \cdot B_0 = -\gamma B_0 I_z = -\hbar \omega_L m_I \quad (1)$$

$$\omega_L = \gamma B_0$$

حيث γ ثابت الجير ومغناطيسي، ω_L تردد لارمور، أي تردد تجاوب النواة المعزولة في B_0 الحقل المغناطيسي الخارجي، I_z مركبة العزم الزاوي النووي وفق المحور z ، m_I العدد الكوانتي المغناطيسي، $\hbar = h/2\pi$ ثابت بلانك.

• **تفاعل ثنائيات الأقطاب المغناطيسية:** يُمثل تفاعلات ثنائيات الأقطاب المغناطيسية السبينية μ_j و μ_k ، r_{jk} المسافة الفاصلة بين العزمين. وتُعطي طاقة التأثير المتبادل بالنسبة إلى N سبين بالعلاقة [3]:

$$E_D = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \left[\frac{\mu_j \cdot \mu_k}{r_{jk}^3} - \frac{3(\mu_j \cdot r_{jk})(\mu_k \cdot r_{jk})}{r_{jk}^5} \right] \quad (2)$$

• **تفاعل الانزياح الكيميائي:** يُعبّر عن تأثير البنية الالكترونية المحيطة بالنواة حيث كل بيئة كيميائية مختلفة تقدم لنا انزياحات كيميائية مختلفة، لأن الحقل المغناطيسي المطبق يولد استقطاب الكتروني الذي بدوره يُحرّض حقل مغناطيسي يتناسب مع الحقل المغناطيسي المطبق كما في العلاقة [3]:

$$E_{CS} = \sigma_{zz} \omega_L I_z \quad (3)$$

حيث σ_{zz} مركبة تنسور الحجب الكيميائي.

• **تفاعل رباعي الأقطاب الكهربائي النووي:** كما هو معلوم أن ثنائي الأقطاب الكهربائي يتفاعل مع الحقل المطبق، بينما رباعي الأقطاب يتفاعل مع تدرج الحقل الكهربائي المتولد عن توزيع الشحنات الكهربائية حول النواة. ونحصل على طاقة انشطار رباعي الأقطاب من المرتبة الأولى من العلاقة [4,5]:

$$E_Q^{(1)} = \frac{1}{4} \frac{\omega_Q}{2I(2I-1)} \{ (3 \cos^2 \beta - 1)(3m_I^2 - I(I+1)) \}$$

$$\omega_Q = \frac{e^2 q Q}{\hbar} \quad (4)$$

حيث ω_Q تردد رباعي الأقطاب، Q عزم رباعي الأقطاب الكهربائي، $e q$ تدرج الحقل الكهربائي، العدد الكوانتي المغناطيسي $m_I = +1, \dots, -1$ ، β زاوية دوران الجزء حول المحور z .

سندرس في هذا العمل مساهمة مفعول زيمان الذي يتناسب طردياً مع الحقل المغناطيسي المطبق، ومساهمة رباعي الأقطاب من الدرجة الأولى المستقلة عن الحقل المغناطيسي المطبق. وبالتالي تُعطي طاقة السوية النووية بالعلاقة:

$$E_m = E_m^{(0)} + E_m^{(1)} = -\hbar\omega_L m_l + \frac{1}{4} \frac{\omega_Q}{2I(2I-1)} \{(3\cos^2\beta - 1)(3m_l^2 - I(I+1))\} \quad (5)$$

أهمية البحث وأهدافه:

تكمُن أهمية هذا العمل في تطبيق حقل مغناطيسي شديد $B_0=7.187$ T نظريا على العينة NH_3SO_3 لتقليل مساهمة رباعي الأقطاب من الدرجة الثانية على سويات الطاقة النووية. ومن جهة أخرى، دراسة تأثير حد رباعي الأقطاب من المرتبة الأولى على الخط المركزي في طيف NMR للعينة تحت الدراسة الذي يؤدي إلى انزياح طاقة النواة.

طرائق البحث و مواده:

يُبين الجدول (1) الوسطاء المطبقة على العينة [6,7]:

جدول (1) : الوسطاء المطبقة على العينة.

Parameter Nucleus	$B_0(T)$	Q (fm ²)	ω_Q (MHz)	$\gamma(T^{-1}s^{-1})$	I
¹⁴ N	7.187	2.05	0.794	1.93×10^7	1

النتائج والمناقشة:

يتضمن الجدول(2) النتائج المحسوبة من العلاقة (5) من أجل $m_l = +1, 0, -1$.

جدول (2): يحتوي على قيم طاقة انشطار السويات النووية، والترددات الموافقة لهذه السويات.

β°	E_1 (neV)	E_0 (neV)	E_{-1} (neV)	ω_{01} (MHz)	ω_{-10} (MHz)	$\Delta\omega$ (MHz)
0	-18.2873	-0.8376	19.1249	16.5399	18.9219	2.382
10	-18.4732	-0.4658	18.9390	17.0686	18.3931	1.3245
20	-18.8109	0.2095	18.6013	18.0289	17.4329	-0.5959
30	-18.9006	0.3889	18.5116	18.2839	17.1779	-1.1059
40	-18.6361	-0.1400	18.7761	17.5317	17.9300	0.3982
50	-18.3305	-0.7511	19.0817	16.6628	18.7989	2.1360
60	-18.3456	-0.7209	19.0665	16.7058	18.7559	2.0500
70	-18.6635	-0.0851	18.7486	17.6098	17.8519	0.2421
80	-18.9079	0.4035	18.5043	18.3046	17.1571	-1.1474
90	-18.7894	0.1665	18.6228	17.9677	17.4940	-0.4736
100	-18.4484	-0.5154	18.9638	16.9979	18.4638	1.4658
110	-18.2885	-0.8335	19.1237	19.5434	18.9184	2.3750

120	-18.4991	-0.4140	18.9131	17.1421	18.3196	1.1775
130	-18.8308	0.0415	18.6853	17.8884	17.6718	-0.2166
140	-18.8909	0.0616	18.6753	17.9645	17.6433	-0.3212
150	-18.6083	-0.0325	18.7224	17.6073	17.7772	0.1698
160	-18.3175	-0.1295	18.7708	17.2398	17.9150	0.6752
170	-18.3628	-0.1144	18.7633	17.2969	17.8936	0.5966
180	-18.6906	-0.0052	18.7087	17.7112	17.7383	0.0270

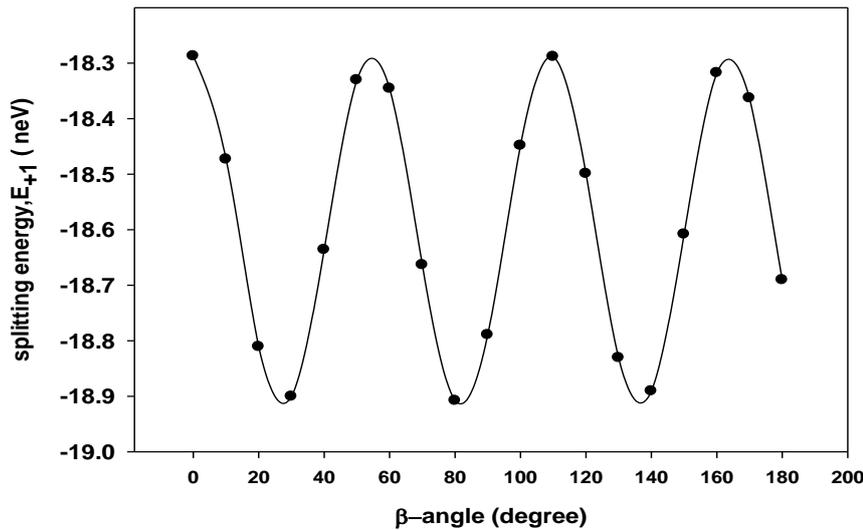
$$\omega_{-10} = \frac{E_{-1} - E_0}{\hbar} \text{ و } \omega_{01} = \frac{E_0 - E_1}{\hbar} \text{ حيث}$$

لقد دَوْنَا في الجدول (3) القيم الدنيا و العظمى، والقيم الوسطى للمقادير الموجودة في الجدول (2).

جدول (3): يحتوي على القيم الدنيا والعظمى، والمتوسطة للمقادير المحسوبة.

السوية الطاقية	القيمة العظمى	القيمة الدنيا	المتوسط
$E_1(\text{neV})$	-18.2873	-18.9079	-18.5833
$E_0(\text{neV})$	0.4035	-0.8376	-0.1987
$E_{-1}(\text{neV})$	19.1249	18.5043	18.8054
$\omega_{01}(\text{MHz})$	18.3046	16.5399	17.4261
$\omega_{-10}(\text{MHz})$	18.9219	17.1571	18.0134
$\Delta\omega(\text{MHz})$	2.382	-1.1474	0.5873

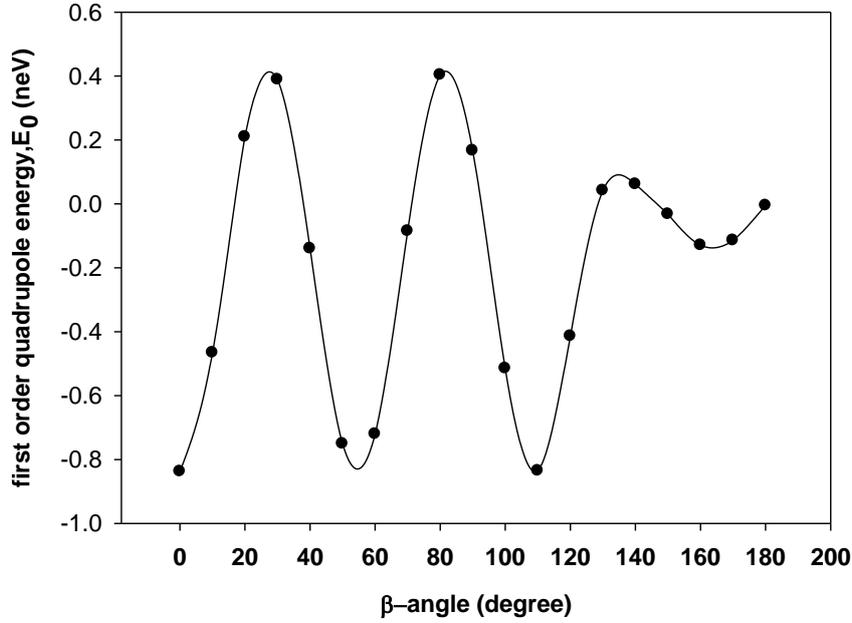
تبيّن الإشكال (2،3،4) تغيّرات طاقة الانتشار بتابعة زاوية الدوران .



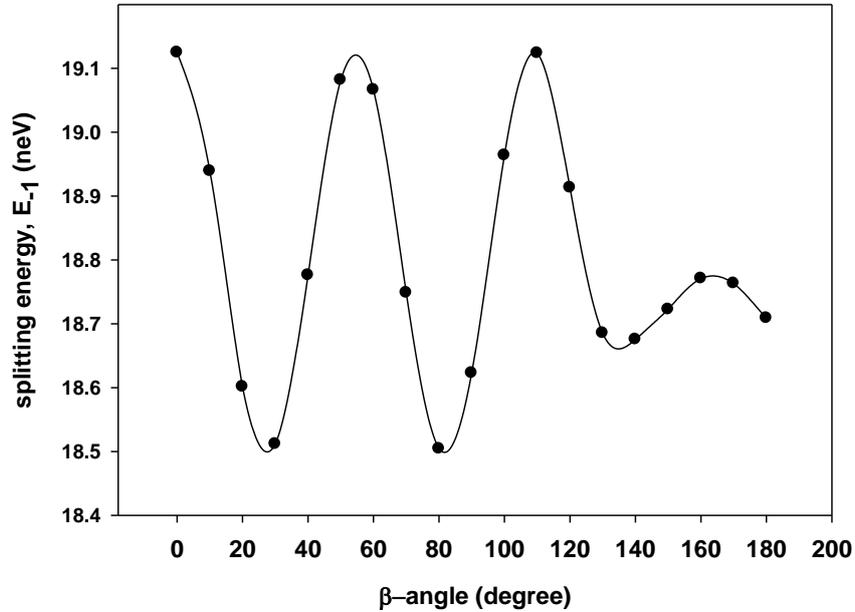
شكل (2): تغيّر الطاقة E_{-1} بتابعة زاوية الدوران.

نلاحظ من هذا الشكل أن الطاقة تتأرجح بين قيمة دنيا وقيمة عظمى بمعدل قدره -18.2873neV انظر الجدول (3).

وعندما $m_l=0$ يتلاشى حد زيمان، ويبقى فقط حد رباعي الأقطاب الذي يساهم في انشطار السوية الطاقية.



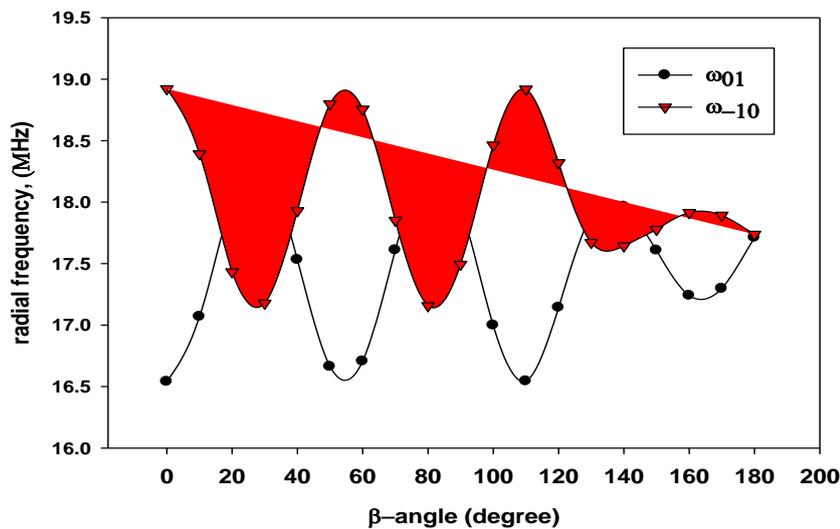
شكل (3): تغير طاقة رباعي الأقطاب من المرتبة الأولى بتابعية زاوية الدوران



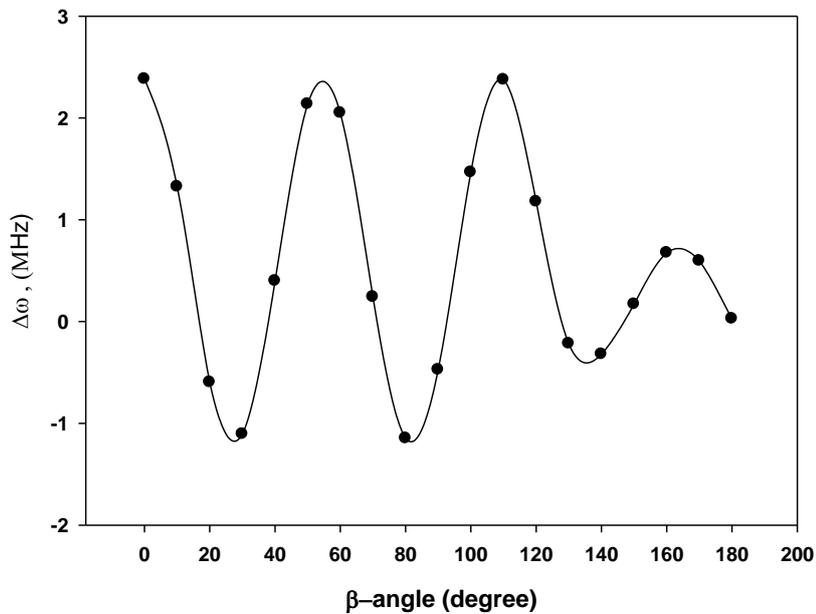
شكل (4): تغير الطاقة E_{-1} بتابعية زاوية الدوران.

نلاحظ من هذا الشكل أن الطاقة تتأرجح بين قيمة دنيا وقيمة عظمى بمعدل قدره 19.1249neV انظر الجدول (3).

نلاحظ من الشكل 4 تشوه في الطيف في المجال الزاوي $\beta^\circ > 120^\circ$ ، وهذا يتفق مع [8,9]. علاوة على ذلك، ربطنا بين تردد الانتقالات بين السويات المنشطرة وزاوية الدوران كما في الشكل (5) .



شكل (5): تغير التردد بين ω_{01} ، ω_{-10} بتابعية زاوية الدوران.



شكل(6): الفرق بين تردد الانتقاليين بتابعية زاوية الدوران.

الاستنتاجات والتوصيات

نستنتج من هذا العمل النقاط الآتية :

1. القيم المتوسطة لطاقة سويات الانشطار النووية للعينة المدروسة
 $E_{+1} = -18.2873 \text{ neV}$ ، $E_{-1} = 19.1249 \text{ neV}$.
 بينما بلغت قيمة حد رباعي الأقطاب الكهربائي النووي $E_0 = -0.1987 \text{ neV}$.
2. بلغ متوسط تردد الانتقال بين السويات المنشطرة $\omega_{01} = 17.4261 \text{ MHz}$ و
 $\omega_{-10} = 18.0134 \text{ MHz}$.
3. يشير الفرق بين ترددي الانتقال إلى القيمة $\Delta\omega = 0.5873 \text{ MHz}$.
4. إن سعة الطاقة تتغير عندما $\beta^\circ > 120^\circ$ ، وبالتالي تكون الزوايا المناسبة في المجال $0^\circ - 120^\circ$.
5. يمكننا متابعة هذا العمل بدراسة تأثير حد رباعي الأقطاب الكهربائي النووي من المرتبة الثانية.

المراجع

1. P.J.Hore,1995- nuclear magnetic resonance, Oxford Science Publications.
2. Robert M.Silverstein, Francis X. Webster,1996 – spectrometric identification of organic compounds, sixth edition, John Wily& Sons,Inc., New York.
3. Radboud Repository , 2012 – the nuclear magnetic resonance of the half-integer nuclei, University of Nijmegen.
4. Pascal P.Man, 1997 – second- order quadruple effects on Hahn echoes in fast-rotating solids at the magic angle, Physical review B,vol.55, No.13.
5. Pascal P.Man, 2000 –quadruplar coupling in nuclear magnetic resonance, general, Encyclopedia of Analytical Chemistry, John Wily& Sons,Ltd, Chichester.
6. Gerad S. Harbison, et., 2002 - ^{14}N quadruple, ^{14}N and ^{15}N chemical shift, and ^{14}N – ^1H dipolar tensors of sulfamic acid, the Journal of Physical Chemistry B, vol.106,No.40.
7. Aucaille R., et., 2008 – a study of the relaxation dynamics in a quadruple NMR system using quantum state tomography, Journal of Magnetic Resonance,192,17-26.
8. عبد الرزاق الصوفي، 2005 – دراسة توجهات جزئيات البلورات السائلة لمركب CTAB بواسطة NMR، جامعة البعث-المجلد 27 – العدد 2 .
9. عبد الرزاق الصوفي، 2012 – دراسة توجهات جزئيات البلورات السائلة لمركب SDS بواسطة NMR، جامعة البعث-المجلد 27 – العدد 2 .