الجمهورية العربية السورية
وزارة التعليم العالي
جامعة البعث
كلية العلوم- قسم الفيزياء

دراسة كمومية للخواص البنيوية والإلكترونية والطيفية لأيونات عناقيد الصوديوم

دراسة أُعدت لنيل درجة الماجستير في الفيزياء الإشعاعية

تقديم

كارولين جوزيف الراهب

بإشراف

الدكتور سليمان ديبو **مدرس فيزياء ذرية** **كلية العلوم - جامعة البعث**	**الدكتور عدنان كودلأ** **أستاذ الكيمياء الكوانتية** **كلية العلوم - جامعة البعث**

١٤٣٤هـ - ٢٠١٣ م

SYRIAN ARAB REPUBLIC
AL-BAATH UNIVERSITY
FACULTY OF SCIENCES
PHYSICS DEPARTMENT

Quantum Study of the structural , electronic and spectral Properties of Sodium Clusters Ions

THESIS SUBMITTED FOR MASTER DEGREE IN RADIATION PHYSIC

BY

CAROLIN JOSEF ALRAHEB

SUPERVISED BY

DR. SULEIMAN DIBO
FACULTY OF SCIENCES
AL-BAATH UNIVERSITY

PROF.DR. ADNAN KODLAA
FACULTY OF SCIENCES
AL-BAATH UNIVERSITY

1434 – 2013

ملخص البحث

باستخدام برنامج Gaussian09 تمّ تطبيق طريقة تابعية الكثافة (DFT/B3LYP(6-311+G(2d))) لدراسة تأثير تغير الكثافة الإلكترونية على خصائص عناقيد الصوديوم Na_n وذلك من خلال حساب الخصائص البنيوية والإلكترونية والطيفية لعناقيد الصوديوم المعتدلة $Na_n(n=1 , 2 , 3 , \ldots)$ وأيوناتها الموجبة Na_n^{+q} والسالبة Na_n^{-q} $(q=1 , 2)$ ومقارنة خصائص العناقيد المشحونة بخصائص العناقيد المعتدلة. حيث تم تحديد الخصائص الفيزيائية والطيفية للعناقيد المستقرة (طاقة الترابط، طول الرابطة، عرض المجال المحظور، طيف رامان، طيف تحت الأحمر ، طيف فوق البنفسجي).

أظهرت هذه الدراسة أن البنى الهندسية تتغير بشكل كبير عند تغيير شحنة العنقود سواء أصبحت شحنته سالبة أو موجبة، فهي تسعى بشكل عام لأن تصبح أكثر خطية عندما تكون شحنتها سالبة وتأخذ بنى هندسية فراغية إذا كانت موجبة الشحنة. كما لوحظ أن أكثر العناقيد تماسكاً هي العناقيد ذوات الشحنة الموجبة . أما من حيث ناقلية العناقيد فقد وُجد أنه كلما ازدادت الكثافة الإلكترونية في العنقود تزداد الناقلية من أجل نفس الحجم للعنقود ، وعند دراسة طيوف تحت الأحمر وُجد أن العناقيد المعتدلة قادرة على امتصاص الأطوال الموجية الأقصر بالمقارنة مع العناقيد السالبة Na_n^- ثم تأتي بعدها العناقيد الموجبة Na_n^+ ، وفي الطيوف فوق البنفسجية لوحظ أن العناقيد $Na_2, Na_3^+, Na_4, Na_5^+, Na_6$ قادرة على امتصاص أطوال موجية أقصر بالمقارنة مع بقية العناقيد .

Abstract

Density change effect of sodium small clusters propertieshave been studied using density functional theory(DFT/B3LYP(6-311+G(2d))), with exploitation Gussian09 program . Geometrical, electronic, likewise spectral properties of the lowest energy structures have been calculated for neutral sodium clusters Na_n (n=2-6), positively sodium clusters $\mathbf{Na_n^{+q}}$(q=1-2), and negatively sodium clusters $\mathbf{Na_n^{-q}}$, Moreover comparative have been accomplished between charged and neutral clusters properties, so physical and spectral properties have been determined for the lowest energy structures (binding energy, bond length, energy gap, ionization energy, electron affinity, Raman spectra, Infra-red spectra, Ultra Violet-visible spectra) .

We conclude that the geometrical structures change considerable when the charged clusters change as for being positively, negatively, or neutral charge . These display straight geometrical structures when these have negatively charged, whereas tridimensional geometrical structures when these have negatively charged . Likewise positively charge clusters holding together more than remaining part of negatively or neutral clusters. On the other hand negatively charge clusters are conductive more than other studied clusters . As well as are showed through the Infra-Red spectra that neutral clusters are able to absorption shorter wavelength than other clusters (negatively and positively clusters) , Whereas the study of the Ultra Violate spectra have been showed that closed clusters such as $Na_2, Na_3^+, Na_4, Na_5^+, Na_6$. are able to absorption shorter wavelength than other clusters