

دراسة الجهد الطويل المدى لـ $H_2, N_2, O_2, NO, N_2O, H_2O, NH_3, CH_4$ في الحالة الأرضية

سناء كاظم خلف

قسم الفيزياء – كلية التربية – جامعة البصرة

الملخص

تم في هذا البحث حساب معاملات فاندرفالز لمجموعة من الجزيئات في حالة الطاقة الأرضية ، وهي معامل قوة التشتت لثلاثة جزيئات متفاعلة V_{abc} (لكل منها ثنائي قطب) ، ومعامل الاعاقة $f_6(R)$ لجزيئين متفاعلين ولمسافات فاصلة مختلفة، ثم دراسة جهد التفاعل $V(R)$ لجزيئين متفاعلين و المعتمد على تأثير معامل الاعاقة لمجموعة الجزيئات المدروسة . ونتائجنا لم تقارن مع نتائج باحثين آخرين لعدم توفر النتائج لدينا.

الكلمات المفتاحية

معاملات قوة التشتت ، معاملات فاندرفالز ، الاعاقة ، الجهد الطويل المدى

المقدمة

المواد الصلبة الجزيئية حيث تهيء الميكانيكية الرئيسية للتجاذب بين الجزيئات وتحدث نتيجة تآثر دوران الألكترونات في الجزيئة او الذرة بدوران الالكترونات في الجزيئات او الذرات المجاورة مما يسبب نوعا من الأستقطاب الأني بين هذه الذرات او الجزيئات وكنتيجة لهذا الأستقطاب الأني تتولد قوى تجاذب فاندرفالز. هناك جزءان لطاقيه فاندرفالز ، الجزء الأكثر أهميه عند المسافات القصيرة هو التنافر بين الألكترونات في الأوربيتالات الممتلئة للذرتين. أما الجزء الأخر لطاقيه فاندرفالز هو التجاذب الذي ينتج عندما تقوم الألكترونات في

تتكون المواد الصلبة من ذرات او أيونات او جزيئات مترابطة بعضها مع بعض وهذا التراص يعطي للمواد الصلبة الصفات الخاصة بها . ان القوة التي تربط بين ذرتين (او اكثر) في جزيئة ما تسمى أصرة . والأصرة الكيميائية هي قوة فيزيائية ذات طبيعة كهربائية تجاذبية بين الذرات ومن هذه الاواصر أصرة فاندرفالز (Vander Waals bonds). ان طاقة الترابط الناتجة من هذه الاصرة ضعيفة مقارنة بالواصر الاخرى كما ان هذه الاصرة توجد في جميع التجمعات الذرية والجزيئية الا ان أهميتها تزداد في

كبيرة تأخذ بنظر الاعتبار التجاذب بين متعددات اقطاب آنية لذرة او جزيئة واحدة ومتعددات اقطاب محتثة للذرة او الجزيئة الاخرى ، متعددات الاقطاب المحتثة هذه تنشأ من المجال الكهربائي لمتعددات الاقطاب الآنية ، وقوة التجاذب التي تنتجها تدعى بطاقة التشتت . لحساب طاقة التشتت هذه بين جسمين متفاعلين او اكثر تواجهنا صعوبة في تجميع الحدود الناتجة من التفاعلات بين عزم متعددات الاقطاب لكل من الجسيمات المتفاعلة . الا ان هذه الصعوبة يمكن التغلب عليها وذلك بمعرفة معاملات الاستقطاب للجسام المتفاعلة و عندها يمكن حساب طاقة التفاعل بين جسمين او اكثر حسب صيغة تكامل كازميربولدر (Cosimir-polder)

ان الجهد الطويل المدى بين جسمين متفاعلين a, b يعطى بالعلاقة (Chaoyan and Babb 1998) ،
(Marinescu et al (1994)

$$V(R) = -\frac{C_6}{R^6} - \frac{C_8}{R^8} - \frac{C_{10}}{R^{10}} \dots(1)$$

وعندما يتضمن معاملات الاعاقة فانه يكتب بالعلاقة التالية (Chaoyan and Babb 1998)

$$V(R) = -\frac{C_6 f_6(R)}{R^6} - \frac{C_8 f_8(R)}{R^8} - \frac{C_{10} f_{10}(R)}{R^{10}} \dots\dots\dots(2)$$

حيث C_6, C_8, C_{10} هي معاملات قوة التشتت بين جسمين متفاعلين ويحسب من حاصل ضرب استقطابيات متعددة الاقطاب المعتمدة على التردد في صيغة كازمير بولدر التكاملية (Easa and Yousif 1982) وكما يلي

$$\epsilon(la, lb) = \frac{(2la+2lb)!}{4(2la)!(2lb)!} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \alpha_{la}(i\omega)\alpha_{lb}(i\omega)d\omega \dots\dots\dots(3)$$

حيث

$$C_6 = \epsilon(1,1) \dots\dots\dots(4)$$

$$C_8 = \epsilon(1,2) + \epsilon(2,1) \dots\dots\dots(5)$$

الاوربيبتالات المشغولة في الذرات المختلفة بتنظيم حركاتها لكي تتجنب بعضها بعضا جهد الأماكن بحيث ينتج عنها تلقائيا تجاذب من النوع ثنائي قطب-ثنائي قطب المحتث كما يعرف هذا النوع من الطاقة الكامنة بطاقة لوندن (London energy).

أن مساهمة قوة فاندرفالز الطويلة المدى (قوة التشتت) للتفاعل بين نظامين باكثر من الكترون يعتبر ذو اهمية كبيرة ، حيث تلعب دورا مهما في وصف العديد من الظواهر الكيميائية والفيزيائية مثل الالتصاق ، الشد السطحي والامتصاص الفيزيائي (Banerjee and Autschbach 2008) .

في هذا البحث تم حساب الجزء الثاني لطاقة فاندرفالز (جزء التجاذب) وذلك من خلال حساب معاملات فاندرفالز الطويلة المدى والتي نحتاج لحسابها الى حساب استقطابيات متعددة القطب الديناميكية (المعتمدة على التردد) بدلالة شدة المهتز وتردد الانتقال والتي أخذت من المصدر (Margoliash and Meath 1978) والمشتقة بطريقة (pseudospectral dipole oscillator strength distributions (DOSDs) النظرية .

ان طاقة التشتت بين ذرتين او جزيئتين والتي تمثل طاقة التأثير المتبادل للذرتين او الجزيئتين عند مسافات

$$C_{10} = \epsilon(1,3) + \epsilon(3,1) + \epsilon(2,2) \quad \dots\dots\dots (6)$$

المهتز Z_i (oscillator strengths) وتردد الانتقال ω_i (transition frequency) Luyckx, et al 1978, (Kharchenko, et al 1996) وكما يلي

وان $\alpha_{\ell a}(i\omega)$ ، $\alpha_{\ell b}(i\omega)$ هما استقطابيات متعددة الاقطاب الديناميكية للجسمين المتفاعلين a و b على التوالي عند الترددات الخيالية . والتي يعبر عنها بدلالة شدات

$$\alpha_{2\ell}(\omega) = \sum_{i=1}^n \frac{Z_{i\ell}}{(\omega_{i\ell}^2 - \omega^2)} \quad \dots\dots\dots (7)$$

اما $f_6(R)$ ، $f_8(R)$ ، $f_{10}(R)$ هي معاملات الجهود الطويلة المدى (معاملات الاعاقة retardation coefficients) والتي ترتبط مع الدالة المولدة والتي تصح لجميع قيم R الصغيرة والكبيرة والتي تعطى بالعلاقة (Marinescu et al 1994)

$$F_{2(n+2)}(R, \ell a, \ell b) = \int_0^{\infty} d\omega \alpha_{\ell a}(i\omega) \alpha_{\ell b}(i\omega) \exp(-2\omega \alpha_{fs} R) p_n(\omega \alpha_{fs} R) \quad \dots\dots\dots (8)$$

حيث α_{fs} ثابت التركيب الدقيق ، $p_n(\omega \alpha_{fs} R)$ يمثل متعددة حدود وان (Marinescu et al 1994)

$$f_6(R) = \frac{1}{\pi C_6} F_6(R,1,1) \quad \dots\dots\dots (9)$$

$$f_8(R) = \frac{1}{3\pi C_8} F_8(R,1,2) \quad \dots\dots\dots (10)$$

$$f_{10}(R) = \frac{1}{18\pi C_{10}} \left[\frac{4}{5} F_{10}(R,1,3) + F_{10}(R,2,2) \right] \quad \dots\dots\dots (11)$$

ان صيغة تكامل كازمير بولدر لثلاثة اجسام متفاعلة [Chaoyan, et al 1996] يعطى بالعلاقة التالية

$$V_{abc} = \frac{3}{\pi} \int_0^{\infty} \alpha_{\ell a}(i\omega) \alpha_{\ell b}(i\omega) \alpha_{\ell c}(i\omega) d\omega \quad \dots\dots\dots (12)$$

نلاحظ من المعادلات اعلاه ان حساباتنا تختزل الى معرفة استقطابيات متعددة الاقطاب عند الترددات الخيالية للانظمة المتفاعلة .
الحسابات
 قيم لشدة المهتز وعشرة قيم لتردد الانتقال اخذت من المصدر (Margoliash and Meath 1978) .

وبالتعويض عن $\omega = i\omega$ في المعادلة (7) واستخدم بعض القواعد الرياضية فان صيغة كازمير بولدر التكاملية لثلاثة جزيئات متفاعلة a ، b ، c المعادلة (12) فانها تختزل الى

لحساب معامل قوة التشتت لثلاثة جزيئات متفاعلة متماثلة او مختلفة ، تم التعويض عن معاملات الاستقطاب متعددة الاقطاب الديناميكية $\alpha_{\ell}(\omega)$ بدلالة شدة المهتز المؤثرة Z_i وتردد الانتقال المؤثر ω_i (استخدمت عشرة

$$V_{abc} = \frac{3}{2} \sum_i \sum_j \sum_k \frac{Z_{il} Z_{jl} Z_{kl} (\omega_{il} + \omega_{jl} + \omega_{kl})}{\omega_{il} \omega_{jl} \omega_{kl} (\omega_{il} + \omega_{jl}) (\omega_{il} + \omega_{kl}) (\omega_{kl} + \omega_{il})} \dots\dots\dots(13)$$

ولمزيد من التفاصيل راجع المصدر (Khalff 1997)

ولحساب الجهود الطويلة المدى (معاملات الاعاقة) فقد استخدمت المعادلة (8) وبعد التعويض عن $\alpha_\ell(\omega)$ بدلالة شدة المهتز وتردد الانتقال المعادلة (7) نحصل على

$$F_{2(n+2)}(R, \ell_a, \ell_b) = (\alpha_{fs} R)^3 \sum_{i,j} Z_i Z_j \int_0^\infty dx \frac{e^{-2x} p_n(x)}{(x_i^2 + x^2)(x_j^2 + x^2)} \dots\dots\dots(14)$$

حيث $X = \omega \alpha_{fs} R$ وبالتعبير عن متعددة الحدود بالصيغة

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^{2(n+1)} \beta_{nm} X^m \dots\dots\dots(15)$$

فان المعادلة (14) تكتب بالشكل

$$F_{2(n+2)}(R, \ell_a, \ell_b) = (\alpha_{fs} R)^3 \sum_{m=0}^{2(n+1)} \beta_{nm} \sum_{i,j} Z_i Z_j \int_0^\infty \frac{X^m e^{-2x} dx}{(x_i^2 + x^2)(x_j^2 + x^2)} \dots\dots\dots(16)$$

ان التكامل اعلاه يمكن فصله الى تكاملين

$$\int_0^\infty \frac{X^m e^{-2x} dx}{(x_i^2 + x^2)(x_j^2 + x^2)} = (x_j^2 - x_i^2)^{-1} [I_m(x_i) - I_m(x_j)] \dots\dots\dots(17)$$

حيث

$$I_m(X_i) = \int_0^\infty dx \frac{X^m e^{-2x}}{x_i^2 + x^2}$$

أي ان المعادلة (16) يمكن اعادة كتابتها لنحصل على

$$F_{2(n+2)}(R, \ell_a, \ell_b) = (X_j^2 - X_i^2)^{-1} (\alpha_{fs} R)^3 \sum_{i,j} Z_i Z_j \left[\sum_{m=0}^{2(n+1)} \beta_{nm} I_m(X_i) - \sum_{m=0}^{2(n+1)} \beta_{nm} I_m(X_j) \right] \dots\dots\dots(18)$$

تم حل التكامل $I_m(x_i)$ بالاستعانة بتحويلات لابلاس ومن ثم تطبيق صيغة كاوس لاقوري (Gauss Laquerre) التكاملية والتي تعطى بالعلاقة التالية

$$\int_0^{\infty} f(y)e^{-y} dy = \sum_i w_i f(y_i)$$

حيث y_i تمثل العقد (nodes) و w_i تمثل الوزن (weight) واستخدمنا 15 نقطة اخذت من المصدر [Abramowitz and Stegun (1970)]. اي ان التكامل يكتب بالشكل

$$I_m(x_i) = \frac{-m}{x_i} \int_0^{\infty} x^{m-1} e^{-sx} \tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right) dx + \frac{s}{x_i} \int_0^{\infty} x^m e^{-sx} \tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right) dx \quad \dots\dots\dots(19)$$

هذه المعادلة تصح عندما $x_i \neq x_j$ اما في حالة $x_j = x_i$ فاننا نحتاج ان نأخذ الغاية عليها عندما $x_i \rightarrow x_j$ لذا نحتاج الى قيمة

$$\frac{dI_m(x_i)/dx_i}{2x_i} = \frac{-m}{2x_i^3} \int_0^{\infty} x^{m-1} e^{-sx} \left[\tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right) + \frac{1}{2} \sin\left(2 \tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right)\right) \right] dx$$

$$+ \frac{s}{2x_i^3} \int_0^{\infty} x^m e^{-sx} \left[\tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right) + \frac{1}{2} \sin\left(2 \tan^{-1}\left(\frac{x}{x_i}\right)\right) \right] dx \quad \dots\dots\dots(20)$$

حيث $S = 2$. الان نستطيع الحصول على معاملات الاعاقة من المعادلات (9, 10, 11)، ثم التعويض في المعادلة (2) للحصول على جهد التفاعل الكلي لزوج من الجزيئات المتفاعلة.

النتائج

استقطابية ثنائي القطب للجزيئة المدروسة والتي عوض عنها بدلالة شدة المهتز وتردد الانتقال لاحظ المعادلة (13).
تم حساب معامل الاعاقة $f_0(R)$ لمجموعة الجزيئات المدروسة مرة في حالة تماثل زوج الجزيئات المتفاعلة ومرة ثانية في حالة اختلاف الزوج المتفاعل من الجزيئات والشكل رقم (1) يمثل العلاقة بين معاملات الاعاقة لمجموعة من الجزيئات المتفاعلة مع المسافة الفاصلة بين الجزيئات، حيث نلاحظ من الشكل ان معامل الاعاقة يبدأ بأعلى قيمة وهي الواحد الصحيح عند المسافات الفاصلة الصغيرة ويتناقص تدريجيا مع زيادة المسافة الفاصلة. وهذا التصرف مشابه تماما لتصرف الذرات والايونات (Khalff 1997) وجزيئات الهاليدات القلوية (Khalff 2001).

في هذا البحث تم حساب معاملات فاندرفالز الخاصة بتفاعل ثنائي قطب -ثنائي قطب فقط وذلك لتوفير قيم شدة المهتز وتردد الانتقال للجزيئات المدروسة فقط في حالة ثنائي القطب والمأخذة من المصدر (Margoliash and Meath 1978). تم حساب معامل قوة التشتت V_{abc} لثلاثة جزيئات متفاعلة متماثلة جميعا او م مختلفة والقيم موضحة في الجدول رقم (1) ولم نستطيع مقارنتها مع نتائج باحثين اخرين لعدم توفرها لدينا. نلاحظ من الجدول ان اعلى قيمة لمعامل قوة التشتت لثلاثة جزيئات متماثلة هي لـ $(CH_4-CH_4-CH_4)$ واقل قيمة لـ $(H_2-H_2-H_2)$ ، اما لجزيئين متماثلتين والثالثة مختلفة فنلاحظ ان اعلى قيمة هي لـ $(H_2-H_2-H_2O)$ ، بينما للجزيئات الثلاثة المختلفة عن بعضها البعض فان اعلى قيمة لـ $(CH_4-H_2O-N_2O)$ واقل قيمة لـ $(H_2-N_2-O_2)$. ان هذه القيم تعتمد اساسا على قيمة

تم حساب جهد التفاعل $V(R)$ لمجموعة الجزيئات المدروسة، والشكل رقم (2) يمثل العلاقة بين جهد التفاعل والمسافة

- the interaction of two alkali-metal atoms", physical Review A . vol: 50, No.4
5. M.Abromowitz and Irene A.stegun, (1970), "Hand Book of Mathematical function with formulas graphs, and mathematical tables". Dover publications inc, Newyork . p.923.
 6. P.Kharchenko,J.F.Babb, and A. Dalgarno (1996), "Long – range interactions of sodium atoms " , physical Review A . vol: 55, No.5.
 7. R . Luyckx , ph . Coulon and H . N . W . Lekker kerker (1978), " Dispersion forces between nobel gas atoms", J.chem.phys . vol: 69, No.2424.
 8. S.I.Easa and F.N. Yousif, (1982), "Long-Range interaction coefficients between H, He⁺, He and Li⁺". Int. J.Quant.Chem . vol : XX1 . No. 1117.
 9. S.K.Khalff, (1997), "Long – range Dispersion potential between Atoms and Ions ".M.sc.Thesis, university of Basrah .
 10. S.K.Khalff, (2001), "Calculating Vander waals potential for Alkali Halides Molecules " , Journal of Basrah Researches ' vol:2,No.27.
 11. Z. Chao yan, J.F.Babb, and A. Dalgarno, (1996), "Variational calculations of dispersion coefficients for interaction among H, He, and Li atoms ". physical Review A . vol: 54, No.4.

الفاصلة حيث نلاحظ من الشكل ان جهد التفاعل يساوي قيمة C_6 عند المسافات الفاصلة الصغيرة أي ان تأثير معامل الاعاقة مهمل عند المسافات الفاصلة الصغيرة ولكن يبدأ تأثير معامل الاعاقة بشكل واضح عند المسافات الفاصلة الكبيرة . وهذا التصرف يتطابق تماما مع نتائج المصادر (Khalff(1997), khalff2001) .

نستنتج من هذا البحث ان الشكل العام لتصرف معامل الاعاقة مع المسافة الفاصلة وكذلك الشكل العام لتصرف الجهد الكلي مع المسافة الفاصلة يكون متماثل لجميع الانظمة المدروسة (الذرات والايونات ، جزيئات الهاليدات القلوية ، الجزيئات المدروسة حاليا) .

المصادر

1. A.Banerjee and J.Autschbach, (2008), "Time dependent density functional theory calculation of Vander waals coefficient c_6 of alkali – metal atoms Li, Na, k, alkali dimmers Li_2 , Na_2 , k_2 and sodium clusters Na_n " . ar Xiv : 0801. 1388v1 [physics. Atm – clus].
2. D.J.Margoliash and W.J.Meath, (1978), "Pseudospectral dipole oscillator strength distributions and some related two body interaction coefficients for H, He, Li, N, O, H_2 , N_2 , O_2 , NO , N_2O , H_2O , NH_3 , and CH_4 ". J.Chem.Phys,vol:68, No.4.
3. M.Marinescu, H.R.sadeghpour, and A.Dalgarno, (1994), "Dispersion coefficients for alkali-metal dimers", physical Review A vol: 49, No.2
4. M.Marinescu, J.F.Babb, and A. Dalgarno (1994), "Long-rang potentials ,including retardation, for

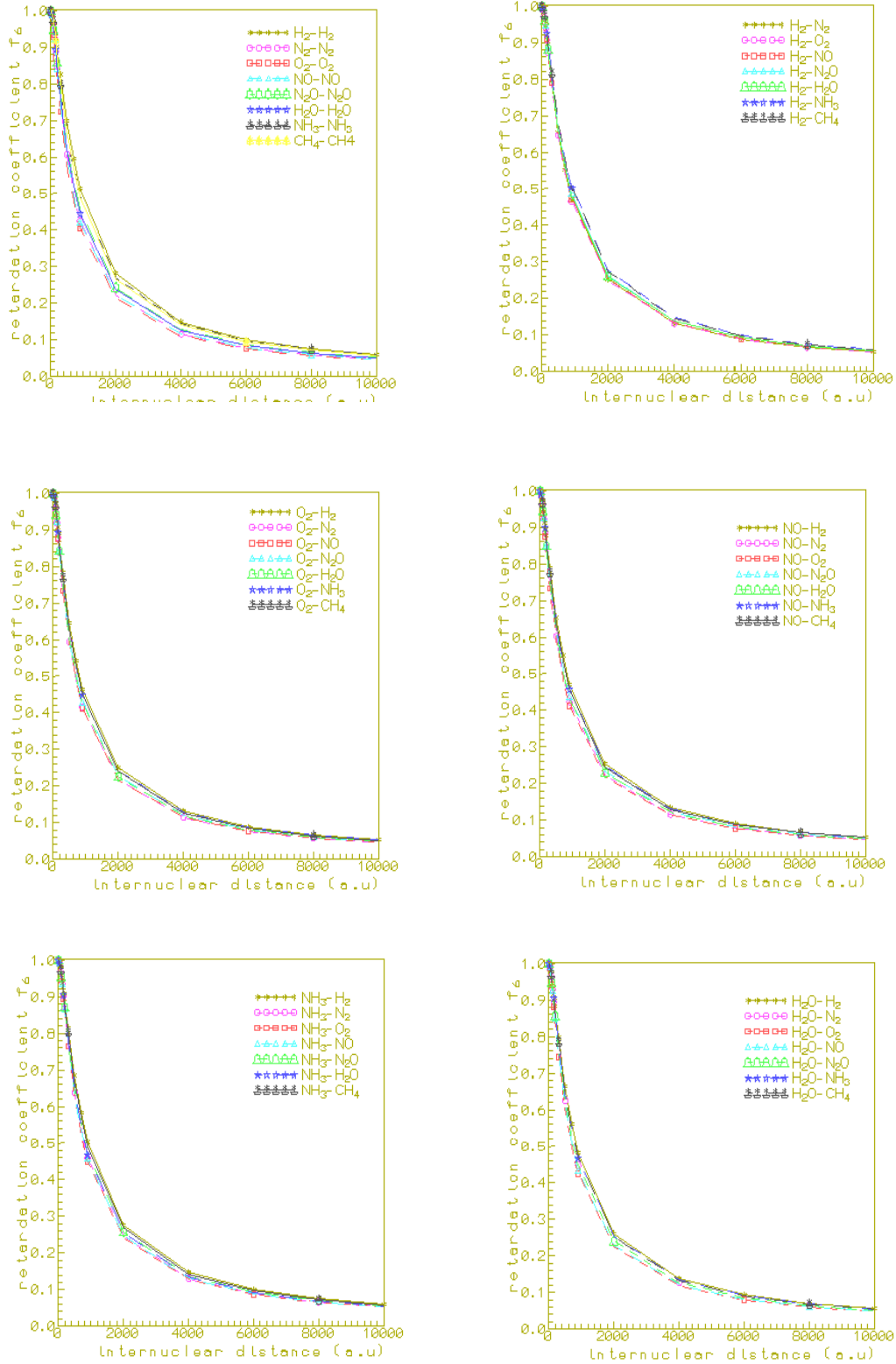
helium atoms" . Physical Review A ,
vol : 58, No.2.
13.

12. Z.chao yan and J.F.Babb, (1998), "
Long-range interactions of metastable

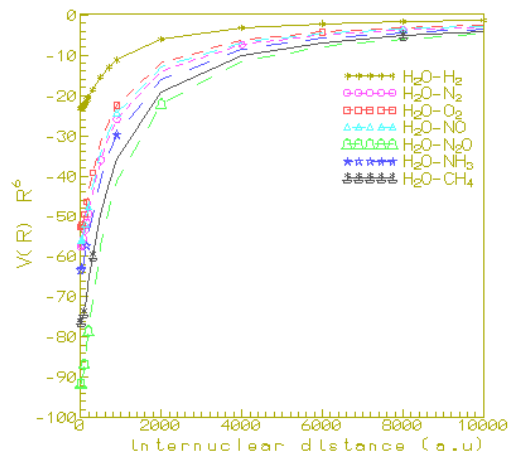
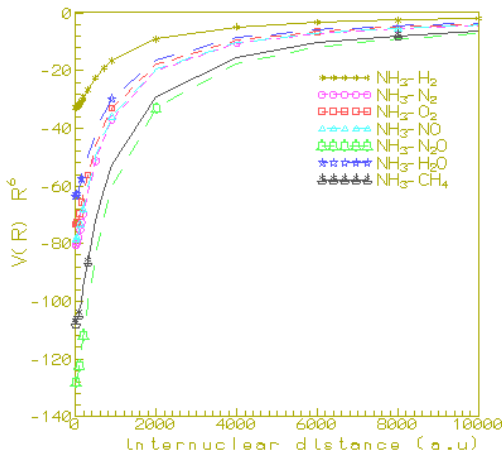
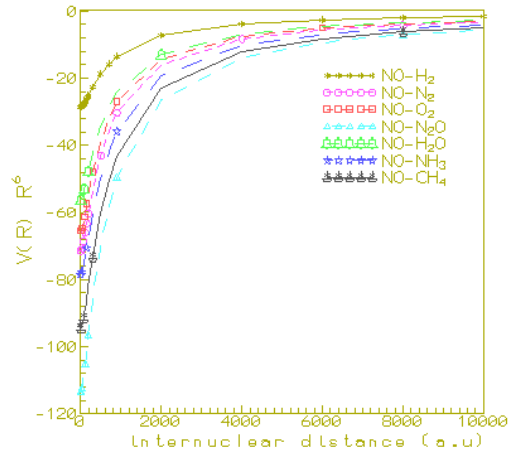
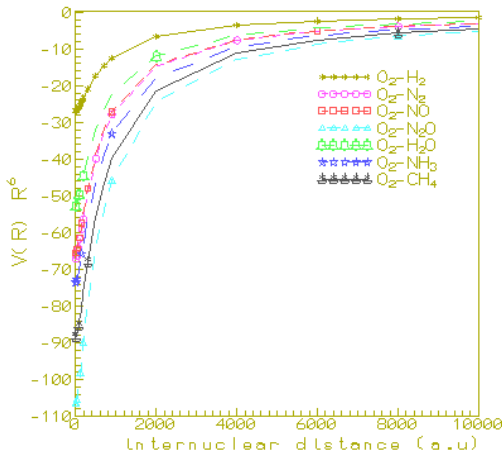
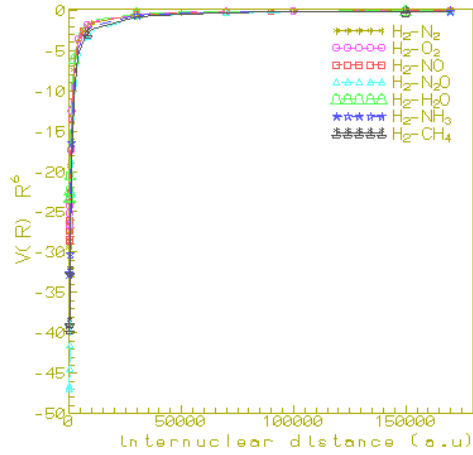
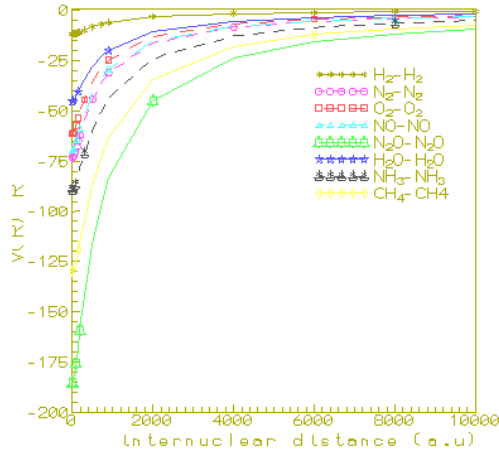
جدول رقم (1) . قيم V_{abc} لثلاثة جزيئات متفاعلة بالوحدات الذرية

النظام	V_{abc}	النظام	V_{abc}
$H_2 - H_2 - H_2$	48.473	$N_2O - N_2O - H_2$	680.677
$N_2 - N_2 - N_2$	618.260	$N_2O - N_2O - N_2$	1595.790
$O_2 - O_2 - O_2$	453.838	$N_2O - N_2O - O_2$	1437.354
$NO - NO - NO$	565.369	$N_2O - N_2O - NO$	1548.934
$H_2O - H_2O - H_2O$	308.213	$N_2O - N_2O - H_2O$	1266.761
$NH_3 - NH_3 - NH_3$	920.559	$N_2O - N_2O - NH_3$	1821.270
$CH_4 - CH_4 - CH_4$	1629.642	$N_2O - N_2O - CH_4$	2202.965
$H_2 - H_2 - N_2$	112.226	$H_2O - H_2O - H_2$	165.405
$H_2 - H_2 - O_2$	100.793	$H_2O - H_2O - N_2$	388.441
$H_2 - H_2 - NO$	108.864	$H_2O - H_2O - O_2$	349.968
$H_2 - H_2 - N_2O$	181.285	$H_2O - H_2O - NO$	377.036
$H_2 - H_2 - H_2O$	89.319	$H_2O - H_2O - N_2O$	624.821
$H_2 - H_2 - NH_3$	129.213	$H_2O - H_2O - NH_3$	442.745
$H_2 - H_2 - CH_4$	156.351	$H_2O - H_2O - CH_4$	535.566
$N_2 - N_2 - H_2$	262.048	$NH_3 - NH_3 - H_2$	344.726
$N_2 - N_2 - O_2$	557.313	$NH_3 - NH_3 - N_2$	801.698
$N_2 - N_2 - NO$	600.015	$NH_3 - NH_3 - O_2$	721.027
$N_2 - N_2 - N_2O$	992.676	$NH_3 - NH_3 - NO$	778.055
$N_2 - N_2 - H_2O$	489.890	$NH_3 - NH_3 - N_2O$	1293.7611
$N_2 - N_2 - NH_3$	701.985	$NH_3 - NH_3 - H_2O$	637.649
$N_2 - N_2 - CH_4$	849.492	$NH_3 - NH_3 - CH_4$	1113.329
$O_2 - O_2 - H_2$	212.137	$CH_4 - CH_4 - H_2$	504.612
$O_2 - O_2 - N_2$	502.728	$CH_4 - CH_4 - N_2$	1173.718
$O_2 - O_2 - NO$	488.155	$CH_4 - CH_4 - O_2$	1055.123
$O_2 - O_2 - N_2O$	806.506	$CH_4 - CH_4 - NO$	1138.708
$O_2 - O_2 - H_2O$	398.128	$CH_4 - CH_4 - N_2O$	1893.169

$O_2 - O_2 - NH_3$	569.331	$CH_4 - CH_4 - H_2O$	933.141
$O_2 - O_2 - CH_4$	688.565	$CH_4 - CH_4 - NH_3$	1346.804
$NO - NO - H_2$	246.676	$H_2 - N_2 - O_2$	235.715
$NO - NO - N_2$	582.391	$H_2 - NO - N_2O$	409.548
$NO - NO - O_2$	525.255	$H_2 - H_2O - NH_3$	238.521
$NO - NO - N_2O$	935.219	$H_2 - CH_4 - N_2$	362.860
$NO - NO - H_2O$	461.536	$N_2 - NO - N_2O$	963.452
$NO - NO - NH_3$	661.213	$N_2 - H_2O - NH_3$	557.306
$NO - NO - CH_4$	799.848	$N_2 - CH_4 - O_2$	764.589
النظام	V_{abc}		
$O_2 - NO - N_2$	541.005		
$O_2 - N_2O - H_2$	379.566		
$O_2 - H_2O - NH_3$	501.635		
$O_2 - CH_4 - H_2$	325.982		
$NO - H_2O - N_2O$	764.169		
$NO - NH_3 - CH_4$	941.138		
$N_2O - H_2 - N_2$	422.096		
$N_2O - O_2 - NO$	868.342		
$N_2O - H_2O - NH_3$	897.940		
$N_2O - CH_4 - H_2$	585.626		
$NH_3 - H_2 - N_2$	299.785		
$NH_3 - O_2 - NO$	613.644		
$NH_3 - CH_4 - NO$	941.138		
$CH_4 - H_2O - H_2$	288.594		
$CH_4 - NH_3 - N_2$	969.907		
$CH_4 - NO - O_2$	742.020		
$CH_4 - H_2O - N_2O$	1086.159		



شكل رقم (1): معاملات الإعاقة لمجموعة الجزيئات المدروسة



شكل رقم (2): جهد التفاعل الكلي المعتمد على معامل الإعاقة لمجموعة الجزيئات المدروسة

**Study the long – range potential for
H₂, N₂, O₂, NO, N₂O, H₂O, NH₃, CH₄ in ground state**

San'a Kadhim Khalff

Department of physics- college of education-University of Basrah-Basra-Iraq

Abstract

in this paper, we calculate the Vander Waals coefficient for many Molecules in ground state ,this is dispersion energy coefficient for three molecules interaction V_{abc} (each one have dipole). And the retardation coefficient $f_6(R)$ for two molecule interaction for different distances, then studying potential interaction $V(R)$ for two molecule and depended on effects retardation for molecules study .

Our results cannot comparative with other estimations.

Keyword

Dispersion energy coefficient , Vander Waals coefficient, Retardation, Long-range potential.
