الباب الثاني

الجهد الثابت وجهد العمق الطولي (البئر)

Constant potential, and well potential

مقدمة :

تبين المعادلة $(-\frac{h}{2m}\frac{d^2}{dx^2}+V)\ \psi=E\psi$ لشرودنجر الزمن المستقل لجسيم يتحرك في بعد واحد وهي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية لمتغيرواحد بمعني حل أما بالنسبة للطاقة أو لدالة الموجه، وكما هو واضح تعتمد علي الشكل الدالي للجهد V ولأشكال معينه للجهد ، الشكل المغلق التام، والحلول التحليلية يمكن إيجادها وأما بالنسبة لأشكال أخري للجهد تحل المعادلة عدديا.

والحل العام لحركة جسيم واحد مائة تتطلب ثلاثة أبعاد Z, Y, X أو أنظمة إحداثية لثلاثة أبعاد أخري والمقابل لمعادلة شرودنجر – هي معادلة تفاضلية من الرتبة الثانية في المتغيرات الثلاثة. فنظام الجسيمات (N) تتطلب إحداثيات ثلاثة لكل جسيم لحالة أو لكل العدد 3N لوصف النظام. إذا معادلة شرودنجر العامة لجسيمات N هي معادلة تفاضلية من الرتبة الثانية في المتغيرات 3N. علاوة علي ذلك لوجود تفاعل بين الجسيمات فالمتغيرات تعتبر مزدوجة؛ بمعني حركة كل جزئي تؤثر في الآخر وعلي هذا نجد أن المشكلة تعددت وتعقدت.

حركة الجسيم في الفراغ (الفضائي) :

حيث لا يوجد مجال لجهد يؤثر علي جسيم متحرك في فراغ. لذا فان معادلة هاميلتوينان تحتوي علي معامل لطاقة كيناتيكية فقط. ولو استخدمنا الحل العام لبعد واحد- فإن معادلة الموجه والمذكورة مسبقاً وهي :

$$\psi(x,t) = a \exp\left[2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - vt\right)\right] \qquad (١ - ٤)$$

وبأخذ معادلة شرودنجر الزمن- المتوقف علي time dependent وهي :

$$\frac{h^2}{2m}\frac{\partial^2 \psi}{dx^2} = ih\frac{d\psi}{dt} \qquad (٢ - ٢)$$

ولنجري التفاضل علي المعادلة (١) مع الاحتفاظ لـ (X) ثم الاستبدال في المعادلة (١) لنحصل علي :

$$\frac{h^2}{2m}\left(-\frac{4\pi^2}{\lambda^2}\psi\right) = ih\frac{d\psi}{dt} \qquad (٣ - ٢)$$

$$ih\frac{d\psi}{dt} = \frac{h^2}{2m\lambda^2}\psi \qquad (٤ - ٢)$$

أو :

$$ih\frac{\partial\psi}{dt} = \frac{P^2}{2m\lambda^2}\psi = E\psi \qquad (٤ - ٢)$$

وبتعديل المعادلة (1-3) علي الصورة (1-4) الشق الأيسر ونعرفها. وبالنسبة للشق الأيمن لتعطي الطاقة الحركية فقط، هذه ليست أكثر من معادلة زمن- متوقف .

فلو أن الجسيم يتحرك في مجال ثابت الجهد (V) فالحل هو ذاته ماعدا أن الطاقة E في المعادلة (1-4) تستبدل بالعلاقة (E-V) .

ولنتعقب مبدأ عدم التأكد لهيسنبرج كتطبيق لتحرك جسيم في الفضاء، فمن اجل اقل درجة عدم تأكد .

$$\Delta E \Delta t = \frac{h}{2} \qquad (٥ - ٢)$$

بالاستبدال في علاقة بلانك نحصل علي

$$h\Delta V \Delta t = \frac{h}{2} \qquad (٦ - ٢)$$

أو :

$$\Delta V\,\Delta t = \frac{1}{2\pi}$$

حيث ناتج (vt) في مضروب 2π في المعادلة (1-1) وحيث يوجد فراغ فضاء حر أو سطح غير متأكد للنصف في دالة الموجه بالنسبة لتحرك الجسيم. وهذا يعني غالبا ومع ذلك فانه يمكن معالجة الجسيم رياضيا بواسطة معادلة الموجه ولا نستطيع إيجاد أو تعيين ادني أو أقصي سعة موجة كما هو في حدود الموجه العادية

حركة جسيم في صندوق ذو بعد واحد محدد :

والحل لتلك المشكلة لجسيم في صندوق لبعد واحد بسيط ولنفرض جسيم يتحرك كتلته (m) في اتجاه واحد وتحت تأثير طاقة $Vx = 0$ أي في المحور X وفي منطقة محدودة ما بين $x = L,\ x = 0$ لطول موجه مسموح بها للاهتزازات المبينة، انظر الشكل (1) وشكل (2) .

$$\lambda = 2L \qquad (2\text{-}7a)$$

$$\lambda = L \qquad (2\text{-}7b)$$

$$3\lambda = 2L \qquad (2\text{-}7c)$$

$$2L = L \qquad (2\text{-}7d)$$

وعلي العموم :

$$\lambda = \frac{2L}{n} \qquad ٢ (- ٨)$$

حيث (n)- العدد الكلي، هذه النتيجة يمكن أن تستخدم مع علاقة دي بروجلي لتعين الطاقة، لنحصل علي:

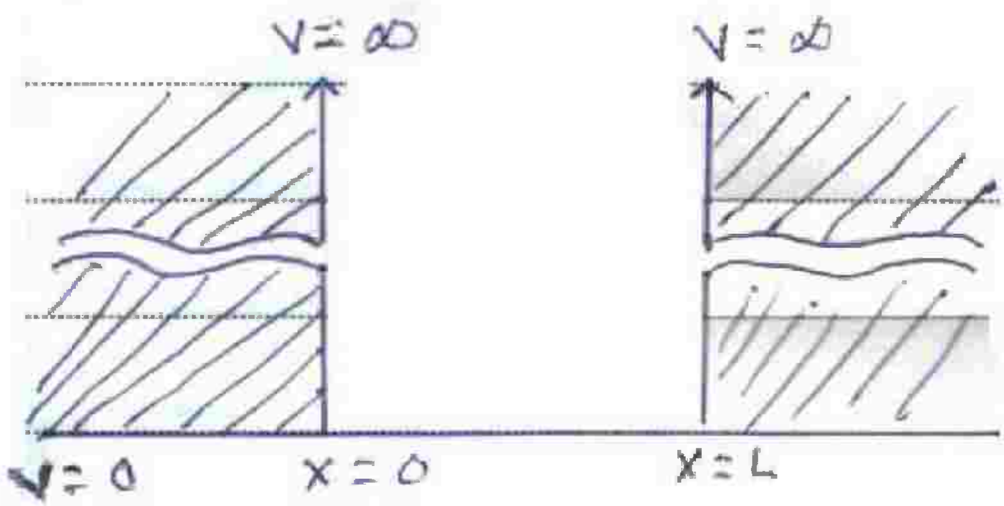
$$\frac{h}{mv} = \frac{2L}{n} \qquad ٢ (- ٩)$$

$$V = \frac{nh}{2mL} \qquad ٢ (- ١٠)$$

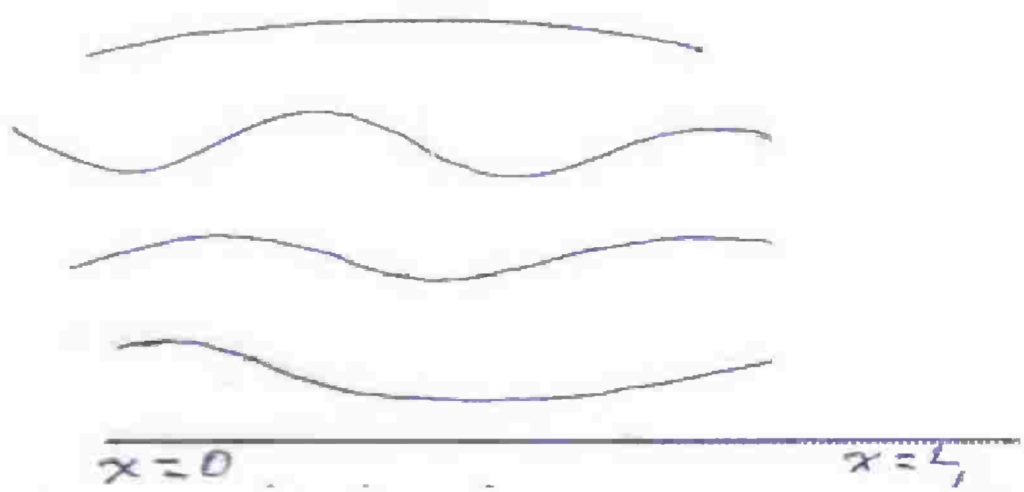
بالتربيع للمعادلة (1-10) :

$$V^2 = \frac{n^2h^2}{2m^2L^2} \qquad ٢ (- ١١)$$

$$E = \frac{1}{2}mV^2 = \frac{n^2h^2}{8mL^2} \qquad (٢ - ١٢)$$



شكل (١-٢) طاقة الجهد لحجرة أحادية البعد V=O ما بين X=L ،X=O وتصبح مفاجئه بما لا نهاية عند X<O ولكل X<L



شكل (٢-٢) عدد الاهتزازات المسموح بها في الكمان

حقيقة لا تستخدم معادلة شرودنجر لإيجاد (١٢- ٢) وعلي أي حال فالحل الموضوع علي معادلة شرودنجر، لنأخذ هاميلتونيان بجانب الصندوق والجهد بصفر، لنحصل علي :

$$\hat{H}(0 \le x \le L) = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + 0 \qquad (١٣ -٢)$$

وعندما يكون الجسيم خارج الصندوق يكون الجهد لانهائي لنحصل علي :

$$\hat{H}(x\langle o;\ x\rangle L) = -\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \infty \qquad (١٤ -٢)$$

ونحن نعلم بأن معادلة شرودنجر تتضمن :

$$\hat{H}\,\psi = E\psi \qquad (١٥ -٢)$$

من ناحية المسافات، فالطريق الوحيد في المعادلة (١٥- ١) يجب أن يحتفظ بكل المسافات للطاقة المحدودة ولدالة الموجه ψ وتكون مساوية صفر للجهد خارج الحدود، وتأخذ القيمة نفسها عند المسافة X = 0 وهذا يعني أن :

$$\psi(o) = \psi(L) = Zero \qquad (١٦) \ -٢$$

مثال: اثبت أن الأطوال الموجية المتاحة لجسيم في محور واحد فقط محدود تعطي بالعلاقة $\lambda = \frac{2L}{n}$ (المعادلة 2-8)

الحل

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{m^2v^2}{m\times 2} = \frac{P^2}{2m}$$

ومن معادلة دي بروجلي :

$$P = \frac{h}{\lambda} \qquad ; \qquad \lambda = \frac{h}{P}$$

$$\therefore\ \lambda=\frac{h}{\sqrt{2mE}};\qquad E=\frac{h^2}{2m\lambda^2}$$

ومن المعادلات (1-12) نجد أن الطاقة الحركية بالعلاقة :

$$E=\frac{n^2h^2}{8mL^2}$$

وبتساوي المعادلتين فإن λ :

$$=\frac{h}{\sqrt{2m\frac{n^2h^2}{8mL^2}}}=\frac{h}{\sqrt{\frac{n^2h^2}{4L^2}}}=\frac{h}{\frac{n\,h}{2a}}=\frac{2L}{n}$$

ودالـة الزاويـة (جـا)- جيـب الزاويـة لهـا قيمـة بـصفر الإزاحـة زاويـة بصفر، ولو أن الإزاحة لها قيمة عددية مضاعفة للحد π ، نجد أن :

$$\psi\ (0)=A\sin(o) \qquad (٢-١٧)$$

وكذلك : $\psi\ (L)=A\sin(n\,\pi)$ (٢- ١٨)

حيث A تمثل الإزاحة أو السعة للدالة والإزاحة لجيب دالة زاوية يجب أن يكون مستمرة للحد X إذا :

$$\psi_n\ (x)=A\sin\frac{n\pi\ x}{L} \qquad ٢(- ١٩)$$

n- رقم لعدد اكبر من الصفر، يؤدي كل متطلبات، كما أن n- لا تأخذ قيمة الصفر، وإلا تأخذ دالة الموجة القيمة صفر علي كل الفراغ. ومتفق علي أن n- تأخذ رقما لتصبح موجبه، وأمام إشارة سالب ما هي إلا تغير في جيب الزاوية للدالة ψ.

وبتطبيق معادلة (2-13) – هاميلتونيان علي دالة الموجه (2-19) لنحصل علي :

$$-\frac{h^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}A\sin\frac{n\pi x}{L}=EA\sin\frac{n\pi\ x}{L} \qquad (٢-٢٠)$$

بحل خطوات المعاملات علي اليسار فإننا نحصل :

$$\frac{d^2}{dx^2} A\sin\frac{n\pi x}{L} = \frac{n\pi}{L} A\cos\frac{n\pi x}{L} \qquad (٢-٢١)$$

وبالتفاضل مرة أخري :

$$\frac{d^2}{dx^2} A\sin\frac{n\pi x}{L} = \frac{n^2\pi^2}{L^2} A\sin\frac{n\pi x}{L} \qquad (٢-٢٢)$$

$$-\frac{h^2}{2m\,dx^2} A\sin\frac{n\pi x}{L} = \frac{n^2\pi^2}{8mL^2} A\sin\frac{n\pi x}{L} \qquad (٢-٢٣)$$

المعادلة ١٩ تعتبر دالة ذاتية لهاميلتونيان وبالمقارنة ٢٠ بالمعادلة (٢٣-٢) نجد أن :

$$E = \frac{n^2h^2}{8mL^2}$$ مرة أخري

ولتقييم الثابت (A) في المعادلة (2-19)، نحتاج لتفسير فيزيائي لدالة الموجه. فدالة الموجه (ψ) قد تفسر كإزاحة احتمالية، (ψ 2) أو حاصل مضروب $\psi * \psi$ لو الدالة معقدة تفسر كدالة احتمالية وبمعني أخر (χ 2) ψ فإننا نعتبر احتمالية وجود الجسيم عند الموضع x .

وهذا يعني أن المسافة (X) والمسافة الازاحية dx + x هي منطقة وجود الجسيم. وهذا التفسير يمكن تحقيقه من تجربة الحيود الالكتروني لدافيسون- جيرمر. بمعني :

Davison- Germer electron- diffraction experiment

ولو أن دالة الزمن – متوقف، إذا $[\psi(x,t)]^2$ تعتبر أن الجسيم عند الوضع x في الزمن t وفي هذه الحالة نعلم أن الجسيم موجود في أي مكان في الفراغ. والاحتمالية الكلية تعتبر الوحدة وهذا يتضمن أن :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2\, dx = 1 \qquad (٢-٢٤)$$

في هـذه الحالـة فـان دالـة الموجـه يجـب أن تكـون بـصفر، فيمـا عـدا عندما $0\le x\le 1$ معطية :

$$\int_{-\infty}^{o} odx+\int_{o}^{L}|\psi|^2\,dx+\int_{L}^{\infty} odx=1 \qquad (٢-٢٤')$$

أو أن التكامل :

$$\int_{o}^{L}|\psi|^2\,dx=1 \qquad (٢-٢٤'')$$

مطلوب تعليق مشابه لأي دالـة موجـه لجـسيم أحـادي، المربـع الـصحيح لدالة علي الشكل المتاح الفراغي الذي يجب أن يكون مساويا للوحدة هذا يعتبر معلوم كشرط تفسيري .

فلو استبدلنا المعادلة (2-19) إلي المعادلة (2-24\\)فإننا نحصل علي:

$$A^2\int_{o}^{L} Sin^2\frac{n\Pi x}{L}dx=1 \qquad (٢-٢٥)$$

العدد الصحيح بأخذ القيمة $L/2$ إذا:

$$A^2\frac{L}{2}=1 \qquad ٢-(٢٦)$$

$$A^2=\frac{L}{2} \qquad ٢-(٢٦')$$

$$A^2=\sqrt{2/L} \qquad ٢-(٢٦'')$$

وكذلك :

$$\psi_n(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\;Sin\frac{n\Pi x}{L} \qquad ٢-(٢٧)$$

" توضيح لضرب دالتين ذاتيتين مختلفتين مع بعضهما مقابل لقيم المختلفة (المختلفة لـ n) ثم نكامل الناتج طبقا للفراغ المسموح" فإننا n- نحصل علي :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n'}(x)\psi_n(x)\,dx=\frac{2}{L}\int_o^L \frac{n\,\pi x}{L}\sin\frac{n'\pi\,x}{L}\,dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_{n'}(x)\psi_n(x)\,dx=\frac{2}{L}\left\{\frac{\sin\left[\frac{\pi}{L}(n-n')x\right]}{\frac{2\pi}{L}(n-n')}-\frac{Sin\left[\frac{\pi}{L}(n+n')x\right]}{\frac{2\pi}{L}(n+n')}\right\}\int_o^L=0$$

$$=0 \qquad (2\text{-}28)$$

وفي هذه نقول أن الدوال متعامدة إحصائيا orthogonal وبالتالي فان أي دالتين ذاتيتين مختلفتين eigenfuction مقابلة لأعداد الكم المختلفة سوف تكون متعامدة دائما فلو أن الدوال معقدة كالدوال يجب أن يكون $\psi_{n'}^{*}\psi_n$ والنتيجة المجموعة التامة لدوال ذاتية فتكون المسألة مجموعة تامة لدوال خطية مستقلة. حيث يمكن أخذها لإيجاد دالة الفراغ التي تشكل قاعدة للكمية الموجهة في علم الجبر. وعليه فان مبدأ هيسنبرج وتمثيل شرودنجر يعتبر ترابط في ميكانيكا الكم.

ومسألة جهد الحجرة لثلاث أبعاد متعامدة أمر بسيط بحيث يكون معلوم في بعد واحد ولتأخذ المعادلة :

$$E_{nx},n_y,n_z=\frac{h^2}{8m}\left(\frac{n^2x}{a^2}+\frac{n^2y}{b^2}+\frac{n^2z}{c^2}\right) \qquad (٢-٢٩)$$

الموجه :

$$\psi_{nx},n_y,n_z=\sqrt{\frac{8}{V}}\,\sin\frac{n_x\pi\chi}{a}\sin\frac{n_y\pi\,y}{b}\sin\frac{n_z\pi\,z}{c}$$

(٢-٣٠)

حيث V- تمثل حجم الصندوق والمعادلة التي هنا يمكن حلها بطريقة الاتجاه المباشر المستقيم للحجرة التي تأخذ أشكالا مختلفة أخري، دائرة (بعدين)، كرة (ثلاثين أبعاد) وهكذا...

وفي سياق الشرح الأول مبينا أن الجهد يكون بصفر أو ثابت محدد خلال جهد الحجرة فلو أن الجهد ليس صفرا ثابتا ، فكل المستويات سوف تتحرف بواسطة قيمة لثابت. ولا يوجد تغير في دوال الموجه.

مثال: يتحرك إلكترون بكتلة (m) قدرها 9.1 × 10-31kg في صندوق طوله 1.0nm وتتحرك كرة بكتلة (m) قدرها 1.0gm في صندوق طوله 1.0m احسب طاقة الحالة الأرضية والفرق في الطاقة $\Delta E = E_2 - E_1$ بين الحالتين n =2 والحالة المستقرة n=1 لهما

الحل

نستخدم المعادلة : $E = \frac{h^2}{8mL^2}$ عند n = 1

$$E = \frac{(6.626\times 10^{-34})^2}{8\times 9.1\times 10^{-31}\times (10^{-9})^2} = 6.025\times 10^{-20}\ J.$$

وعند : n = 2

$$E_2 = \frac{n_2^2 h^2}{8mL^2} = 2.4123\times 10^{-19}\ J.$$

$$\therefore\ \Delta E = E_2 - E_1 = 2.4123\times 10^{-19}\ J.$$

في حالة الإلكترون .

وأما في حالة الكره :

$$E_1 = \frac{(6.626\times 10^{-34})^2\times 1^2}{8\times 10^{-3}\times 1^2} = 5.495\times 10^{-65}\ J.$$

$$E_2 = \frac{(6.626\times 10^{-34})^2\times 2^2}{8\times 10^{-3}\times 1^2} = 2.195\times 10^{-64}\ J.$$

$$\therefore\ \Delta E = E_2 - E_1 = 1.65\times 10^{-64}\ J.$$

لاحظ فرق الطاقة الصغير جدا في حالة الكرة ويكاد لا يذكر عن ما هو في حالة انتقال الإلكترون.

مثال: اوجد الاحتمالية لوجود إلكترون في منطقة ما بين :

L= 0.49nm، L= 0.51nm، وما هي الاحتمالية في المنطقة ما بين L= 0.2nm، L= 0.0nm

الحل

المنطقة الأولي: هي منطقة متناهية في الصغر. والاحتمالية في النقطة علي النحو dx = 0.02 nm، dx = 0.51- 0.49 = 0.02 باستخدام الدالة $\psi_x^2\, dx$ وتكون في هذه الحالة عند نقطة المنتصف x = 0.5 nm

$$\psi^2_{x=0.5} = \frac{2}{L}\sin^2\frac{n\pi\, x}{L}dx$$

$$= \frac{2}{1}Sin^2\left(\frac{0.5\times 180^\circ\times 2}{1.0}\right)(0.02) = 0.04nm$$

$$1 - \cos^2\theta$$

أي أن احتمالية 0.04 : 1 أو 1 :25

والجزئية الثانية فإن المنطقة $0 \le x \le 0.2nm$ ليست متناهية في الصغر. وبالتالي لابد من تكامل الدالة ψ^2 لحدود تلك المنطقة مابين 0، 0.2 nm

لنأخذ التعبير في المعادلة (25)

$$\psi^2 = A^2 \int_0^{0.2} \sin^2\frac{n\pi\, x}{L}dx$$

$$= \frac{2}{L}equation(26)\int_0^{0.2} \sin^2\frac{n\pi\, x}{L}dx$$

$$=\frac{x}{L}-\frac{1}{2n\Pi}\sin\frac{2n\pi x}{L}\int_{0}^{0.2}$$

$$=\frac{0.2}{1.0}-\frac{1}{2x\frac{22}{7}}\sin 0.4\pi\,,\, n=1$$

$$=\ 0.2\ \ 0.159\ \sin 72=\ 0.04878$$

أي أن الاحتمالية ما بين $1:20.50$

مثال: احسب درجة عدم التأكد في عزم الحركة والسرعة لإلكترون يتحرك في صندوق طوله $1A^\circ$ ، ذرة إيدروجين تتحرك في مسافة $10A^\circ$ وأخيرا لكرة لها كتلة $1g$ تتحرك في مسافة $10cm$

الحل

عدم التأكد في عزم الحركة يتأتي من العلاقة لدي بروجلي بالعلاقة:

$$P_x=\frac{h}{L}$$

ومن العلاقة $P^2=m^2V^2$ أي أن $P=m\,v$ ويكون التأكد في السرعة أيضا علي النحو إذا: $V=P/m$

فبالنسبة لإلكترون نجد أن :

$$\Delta P=\frac{h}{L}=\frac{6.626\times10^{-34}}{1\times10^{-10}}=6.626\times10^{-24}\ kgms^{-1}$$

$$\Delta V=\frac{6.626\times10^{-24}}{9.1\times10^{-31}}=7.28\times10^{6}\ m/s$$

وبالنسبة لذرة الأيدروجين حيث إن : $m=1.6726\times10^{-27}\,kg$

فإن :

$$\Delta P=\frac{6626\times10^{-34}}{10\times10^{-10}}=6626\times10^{-25}\ kgms^{-1}$$

$$\Delta V=\frac{6626\times10^{-25}}{16726\times10^{-27}}=39615\times10^{2}\ m/s^{-1}$$

وبالنسبة للكرة :

$$\Delta P=\frac{6626\times10^{-34}}{10}=6626\times10^{-33}\ kgms^{-1}$$

$$\Delta V=\frac{6626\times10^{-33}}{1\times10^{-3}}=6626\times10^{-30}\ ms^{-1}$$

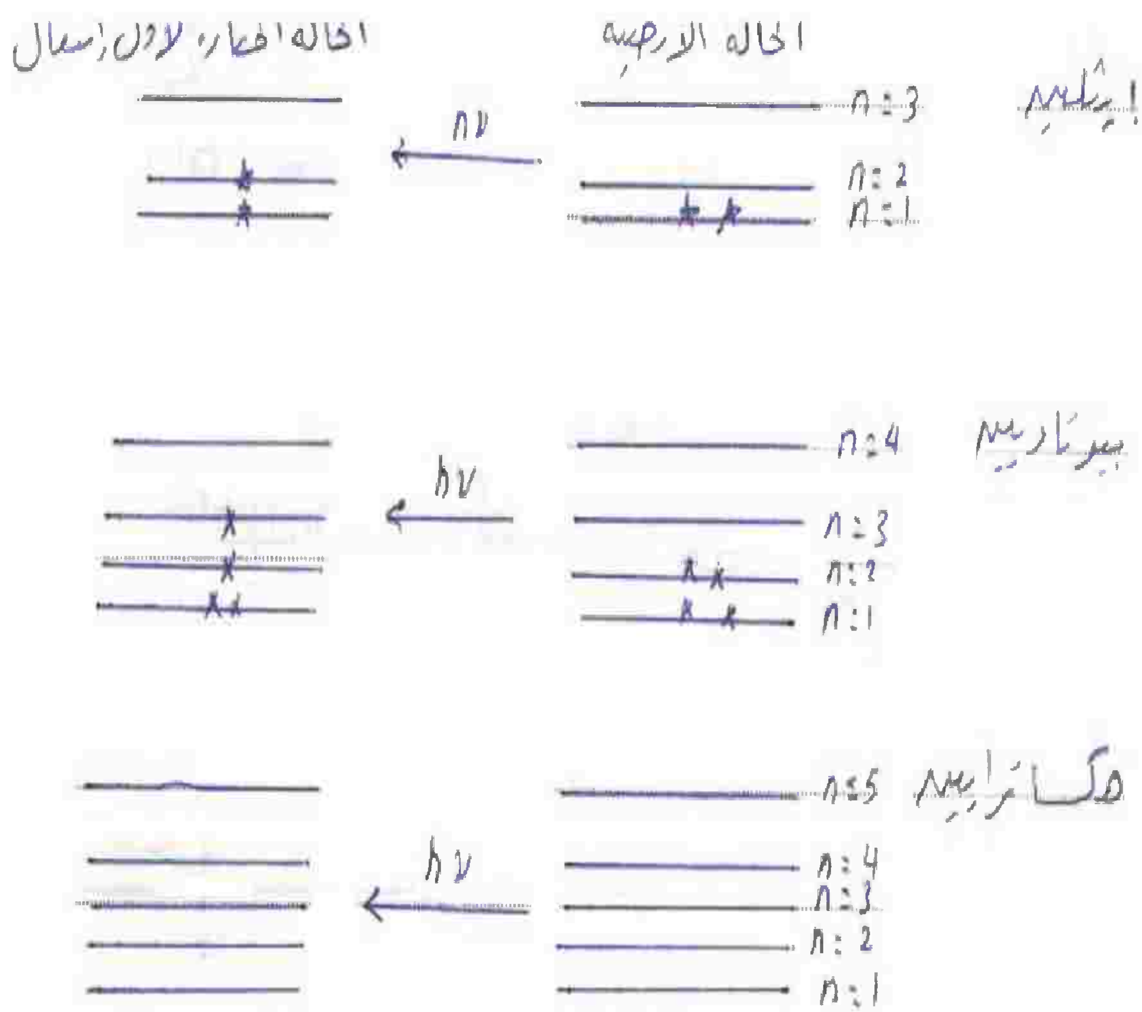
نظرية الإلكترون الحر لطيف الأنظمة الثنائية الازدواجية :

تعتبر جسم في حجرة لبعد واحد والأساس لوصف الإلكترون الحر لنظام زوجي الإلكترون $\pi - electron$ كما في البلمرات الخطية الثنائية الازدواجية. لنفترض حجرة لبعد واحد مع ثبات الجهد في الداخل وما لا نهاية للجهد خارج الحدود وطول الصندوق. دائما ما يفترض بطول السلسلة الثنائية الازدواجية أو السلسلة المتزاوجة (Conjugated chain) رابطة واحدة عند كل نهاية وانتقالات الطيف الالكتروني علي طول السلسلة يمكن اعتباره لإنشاء إلكترون في مدار آخر غير محتل.

والشكل (3) عبارة عن شرح لعدة مركبات حاملة لرابطة مزدوجة كما في الايثلين وبيوتادايين، سداس ثلاثي الرابطة الثنائية ومجموع الطاقات للروابط الثنائية للحالة الأرضية هي 2, 10, 28 علي الترتيب في الوحدات $h^2/8mL^2$ والقيمة للحد L مختلف من واحد لأخر. ولو وجد عدد N من الالكترونات في النظام π, $\frac{N}{2}$ مستوي في الحالة الأرضية المملوء.

فأول انتقال يقابل لمدار انتقالي من (n) يساوي $\frac{N}{2}$ إلي n مساويا $\left[{}^{N}\!/_{(2+1)} \right]$ وهذا ممكن في النظام المغلق إذا كل ذرة تساهم بواحد $\pi-$ إلكترون، N إلكترون تقابل بالذرات N وطول الصندوق هو $\left[(N+1)b\right]$ حيث (b) هو متوسط طول الرباط. إذا الطاقة لأول انتقال تأخذ العلاقة الآتية :

$$\Delta E = \frac{\left[(N/2+1)^2 - (N/2) \right] h^2}{8m\left[(N+1)b\right]^2} = \frac{h^2}{8mb^2(N+1)} \qquad (٢-\ ٣١)$$



شكل (٣) يوضح مستويات الطاقة للإلكترون الحر والمدارات الممتلئة في الحالة الأرضية والانتقال لأول إلكترون لأنظمة π إلكترون لمركبات ازدواجية الأربطة

فلو أن متوسط طول الرباط المفترض هو $1.4\times 10^{-10}m = 1.4\overset{o}{A}$.

فيكون التعبير عن الانتقال في العدد الموجي هو:

$$\bar{V} = \frac{154739Cm^{-1}}{N+1} \qquad (٣٢ -٢)$$

جدول (١) يبين الانتقالات المحسوبة لعدد سلسلة لبوليمر مقابل القيمة المعملية لاحظ العدد غير مطابق ولكن توجد علاقة خطية بين $\bar{V}-$ المحسوبة، $\bar{V}-$ العملية لو طبقنا طريقة التربيع الادني leust-squares تكون المعادلة التربيعية الادني هي :

$$\bar{v}\ fit = 0.893\bar{V}_{calculated} + 17.153Cm^{-1}$$

والمعادلة التربيعية الأدني تستخدم لتقريب الطيف لأي عدد من عديد الرابطة المزدوجة ويمكن إجراء تصحيحات مماثلة لأنواع أخري للأنظمة الثنائية الازدواجية .

جدول (١) الطيف المحسوب والانتقال الملاحظ لبعض المركبات العديدة الرابطة Polyene

$N^{(a)}$	(b) $\bar{V}_{calc Cm^{-1}}$	(c) $\bar{V}_{exp.Cm^{-1}}$	(d) $\bar{V}_{fit.Cm^{-1}}$
2	51.58	61.50	63.207
4	30.948	46.080	44.785
6	22.106	39.750	36.891
8	17.193	32.900	32.504
10	14.067	29.940	29.713
20	7.369	22.371	23.732

***