

الباب الثاني

الجهد الثابت وجهد العمق الطولي (البئر)

Constant potential, and well potential

مقدمة :

تبين المعادلة $\psi = E\psi$ (-\frac{h}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V) لشروندجر الزمن المستقل

لجسيم يتحرك في بعد واحد وهي معادلة تفاضلية من الدرجة الثانية لمتغير واحد بمعنى حل أما بالنسبة للطاقة أو لدالة الموجه، وكما هو واضح تعتمد علي الشكل الدالي للجهد V وأشكال معينه للجهد، الشكل المطلق التام، والحلول التحليلية يمكن إيجادها وأما بالنسبة لأشكال أخرى للجهد تحل المعادلة عددياً.

والحل العام لحركة جسيم واحد مائة تتطلب ثلاثة أبعاد Z, Y, X أو أنظمة إحداثية لثلاثة أبعاد أخرى 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؛ بمعنى 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 هاميلتونيان تحتوي علي معامل لطاقة كيناتيكية فقط. ولو استخدمنا الحل العام لبعء واحد - فإن معادلة الموجه والمذكورة مسبقاً

وهي :

$$\psi(x,t) = a \exp\left[2\pi i \left(\frac{x}{\lambda} - vt\right)\right] \quad (1 - 1)$$

وبأخذ معادلة شرودنجر الزمن- المتوقف علي time dependent وهي :

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

ولنجري التفاضل علي المعادلة (1) مع الاحتفاظ لـ (X) ثم الاستبدال في المعادلة (1) لنحصل علي :

$$\frac{h^2}{2m} \left(-\frac{4\pi^2}{\lambda^2} \psi\right) = ih \frac{d\psi}{dt} \quad (2 - 3)$$

$$ih \frac{d\psi}{dt} = \frac{h^2}{2m\lambda^2} \psi \quad (2 - 4)$$

أو :

$$ih \frac{\partial \psi}{dt} = \frac{P^2}{2m\lambda^2} \psi = E\psi \quad (2 - 4 - 1)$$

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 الجسم يتحرك في مجال ثابت الجهد (V) فالحل هو ذاته ما عدا 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 .

$$\Delta E \Delta t = \frac{h}{2} \quad (5 - 2)$$

بالاستبدال في علاقة بلانك نحصل علي

$$h \Delta V \Delta t = \frac{h}{2} \quad (6 - 2)$$

$$\Delta V \Delta t = \frac{1}{2\pi} \quad \text{أو :}$$

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 فإنه يمكن معالجة الجسيم رياضيا بواسطة معادلة الموجه ولا نستطيع إيجاد أو تعيين ادني أو أقصى سعة موجة كما هو في حدود الموجه العادية

حركة جسيم في صندوق ذو بعد واحد محدد :

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

$$\lambda = 2L \quad (2-7a)$$

$$\lambda = L \quad (2-7b)$$

$$3\lambda = 2L \quad (2-7c)$$

$$2L = L \quad (2-7d)$$

وعلي العموم :

$$\lambda = \frac{2L}{n} \quad (8) \quad 2$$

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

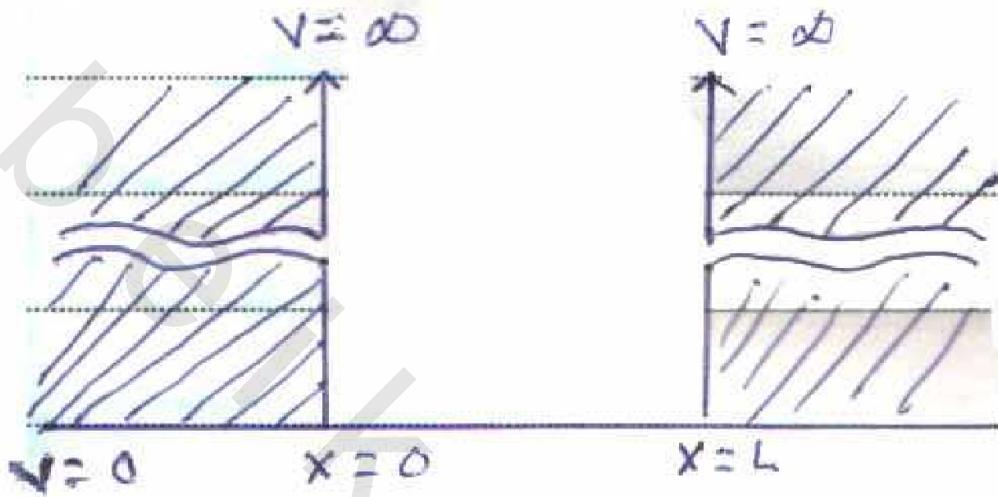
$$\frac{h}{mv} = \frac{2L}{n} \quad (9) \quad 2$$

$$V = \frac{nh}{2mL} \quad (10) \quad 2$$

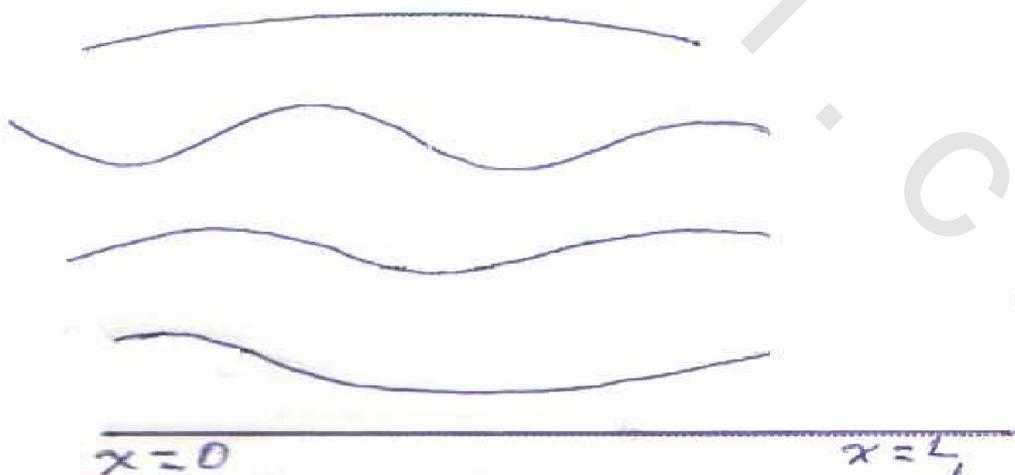
بالتربيع للمعادلة (1-10) :

$$V^2 = \frac{n^2 h^2}{2m^2 L^2} \quad (2-11)$$

$$E = \frac{1}{2} m V^2 = \frac{n^2 h^2}{8m L^2} \quad (2-12)$$



شكل (٢-١) طاقة الجهد لحجرة أحادية البعد $V=0$ ما بين $X=0$. $X=L$ وتصبح مفاجئة بما لا نهاية عند $X<0$ 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، لناخذ هاميلتونيان بجانب الصندوق والجهد بصفر، لنحصل علي :

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

وعندما يكون الجسم خارج الصندوق يكون الجهد لانهائي لنحصل علي :

$$\hat{H}(x < 0; x > L) = -\frac{h^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \infty \quad (١٤- ٢)$$

ونحن نعلم بأن معادلة شرودنجر تتضمن :

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

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 :

$$\psi(0) = \psi(L) = \text{Zero} \quad (١٦- ٢)$$

مثال: اثبت أن الأطوال الموجية المتاحة لجسيم في محور واحد فقط

$$\text{محدود تعطي بالعلاقة } \lambda = \frac{2L}{n} \quad (\text{المعادلة 2-8})$$

العل

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

ومن معادلة دي بروجلي :

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

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

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

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

وبتساوي المعادلتين فإن λ :

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

ودالة الزاوية (جا) - جيب الزاوية لها قيمة بصفر الإزاحة زاوية

بصفر، ولو أن الإزاحة لها قيمة عددية مضاعفة للحد π ، نجد أن :

$$\psi(0) = A \sin(0) \quad (١٧- ٢)$$

$$\psi(L) = A \sin(n\pi) \quad (١٨- ٢)$$

حيث A تمثل الإزاحة أو السعة للدالة والإزاحة لجيب دالة زاوية يجب

أن يكون مستمرة للحد x إذا :

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

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 تغيير في جيب الزاوية للدالة ψ .

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

لنحصل علي :

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

بحل خطوات المعاملات علي اليسار فإننا نحصل :

$$\frac{d^2}{dx^2} A \sin \frac{n \pi x}{L} = \frac{n \pi}{L} A \cos \frac{n \pi x}{L} \quad (2-21)$$

وبالتفاضل مرة أخرى :

$$\frac{d^2}{dx^2} A \sin \frac{n \pi x}{L} = \frac{n^2 \pi^2}{L^2} A \sin \frac{n \pi x}{L} \quad (2-22)$$

$$\frac{h^2}{2md^2} A \sin \frac{n \pi x}{L} = \frac{n^2 \pi^2}{8mL^2} A \sin \frac{n \pi x}{L} \quad (2-23)$$

المعادلة ١٩ تعتبر دالة ذاتية لهاميلتونيان وبالمقارنة ٢٠ بالمعادلة (٢٣-

٢) نجد أن :

$$E = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} \quad \text{مرة أخرى}$$

ولتقييم الثابت (A) في المعادلة (2-19)، نحتاج لتفسير فيزيائي لدالة الموجه. فدالة الموجه (ψ) قد تفسر كإزاحة احتمالية، (ψ^2) أو حاصل مضروب $\psi \cdot \psi$ لو الدالة معقدة تفسر كدالة احتمالية وبمعني آخر (ψ^2) 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. بمعنى :

Davison- Germer electron- diffraction experient

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = 1 \quad (2-24)$$

في هذه الحالة فان دالة الموجه يجب أن تكون بصفر، فيما عدا
عندما $0 \leq x \leq 1$ معطية :

$$\int_{-\infty}^0 0 dx + \int_0^L |\psi|^2 dx + \int_L^{\infty} 0 dx = 1 \quad (2-24)$$

أو أن التكامل :

$$\int_0^L |\psi|^2 dx = 1 \quad (2-24')$$

مطلوب تعليق مشابه لأي دالة موجه لجسيم أحادي، المربع الصحيح
لدالة علي الشكل المتاح الفراغي الذي يجب أن يكون مساويا للوحدة
هذا يعتبر معلوم كشرط تفسيري .

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

$$A^2 \int_0^L \text{Sin}^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1 \quad (2-25)$$

العدد الصحيح بأخذ القيمة $L/2$ إذا:

$$A^2 \frac{L}{2} = 1 \quad (2-26)$$

$$A^2 = \frac{L}{2} \quad (2-26')$$

$$A^2 = \sqrt{2/L} \quad (2-26'')$$

وكذلك :

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \text{Sin} \frac{n\pi x}{L} \quad (2-27)$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{L} \int_0^L \frac{n \pi x}{L} \sin \frac{n \pi x}{L} dx$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_m(x) \psi_n(x) dx = \frac{2}{L} \left\{ \frac{\sin \left[\frac{\pi}{L} (n-r) x \right]}{\frac{2\pi}{L} (n-r)} - \frac{\sin \left[\frac{\pi}{L} (n+r) x \right]}{\frac{2\pi}{L} (n+r)} \right\} \Bigg|_0^L = 0$$

$$= 0 \quad (2-28)$$

وفي هذه نقول أن الدوال متعامدة إحصائياً orthogonal وبالتالي فإن أي دالتين ذاتيتين مختلفتين eigenfunction مقابلة لأعداد الكم المختلفة سوف تكون متعامدة دائماً فلو أن الدوال معقدة كالدوال يجب أن يكون $\psi_m^* \psi_n$ 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 فإن 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 :

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \quad (2-29)$$

الموجه :

$$\psi_{n_x, n_y, n_z} = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin \frac{n_x \pi x}{a} \sin \frac{n_y \pi y}{b} \sin \frac{n_z \pi z}{c} \quad (2-30)$$

حيث V - تمثل حجم الصندوق والمعادلة التي هنا يمكن حلها بطريقة الاتجاه المباشر المستقيم للحجرة التي تأخذ أشكالاً مختلفة أخرى، 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 $9.1 \times 10^{-31} \text{kg}$ في صندوق طوله 1.0nm وتتحرك كرة بكتلة (m) قدرها 1.0g 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 $n = 1$

$$E = \frac{(6626 \times 10^{-34})^2}{8 \times 9.1 \times 10^{-31} \times (10^{-9})^2} = 6025 \times 10^{-20} \text{ J.}$$

وعند $n = 2$:

$$E_2 = \frac{n^2 h^2}{8mL^2} = 24123 \times 10^{-19} \text{ J.}$$

$$\therefore \Delta E = E_2 - E_1 = 24123 \times 10^{-19} \text{ J.}$$

في حالة الإلكترون .

وأما في حالة الكرة :

$$E_1 = \frac{(6626 \times 10^{-34})^2 \times 1^2}{8 \times 10^{-3} \times 1^2} = 5495 \times 10^{-65} \text{ J.}$$

$$E_2 = \frac{(6626 \times 10^{-34})^2 \times 2^2}{8 \times 10^{-3} \times 1^2} = 2195 \times 10^{-64} \text{ J.}$$

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

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 :

$L = 0.49\text{nm}$ ، $L = 0.51\text{nm}$ ، وما هي الاحتمالية في المنطقة ما

بين $L = 0.2\text{nm}$ ، $L = 0.0\text{nm}$

العل

المنطقة الأولى: هي منطقة متناهية في الصغر. والاحتمالية في النقطة

$dx = 0.02\text{ nm}$ علي النحو $dx = 0.51 - 0.49 = 0.02$ باستخدام

الدالة $\psi_x^2 dx$ وتكون في هذه الحالة عند نقطة المنتصف $x = 0.5\text{ nm}$

$$\psi_{x=0.5}^2 = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

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

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

أي أن احتمالية 0.04 : 1 أو 1 : 25

والجزئية الثانية فإن المنطقة $0 \leq x \leq 0.2\text{nm}$ ليست متناهية في

الصغر. وبالتالي لابد من تكامل الدالة ψ^2 لحدود تلك المنطقة ما بين

$0.2\text{ nm}, 0$

لنأخذ التعبير في المعادلة (25)

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

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

$$= \frac{x}{L} - \frac{1}{2n\pi} \sin \frac{2n\pi x}{L} \int_0^{0.2}$$

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

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

أي أن الاحتمالية ما بين 20. 50 : 1

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

العل

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

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

ومن العلاقة $P^2 = m^2 v^2$ أي أن $P = m v$ ويكون التأكد في

$$V = \frac{P}{m}$$

السرعة أيضا علي النحو إذا: فبالنسبة لإلكترون نجد أن :

$$\Delta P = \frac{h}{L} = \frac{6626 \times 10^{-34}}{1 \times 10^{-10}} = 6626 \times 10^{-24} \text{ kgms}^{-1}$$

$$\Delta V = \frac{6626 \times 10^{-24}}{9.1 \times 10^{-31}} = 728 \times 10^6 \text{ m/s}$$

وبالنسبة لذرة الأيدروجين حيث إن $m = 16726 \times 10^{-27} \text{ kg}$:

فإن :

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

$$\Delta V = \frac{6626 \times 10^{-25}}{16726 \times 10^{-27}} = 39615 \times 10^2 \text{ m/s}^{-1}$$

وبالنسبة للكرة :

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

$$\Delta V = \frac{6626 \times 10^{-33}}{1 \times 10^{-3}} = 6626 \times 10^{-30} \text{ ms}^{-1}$$

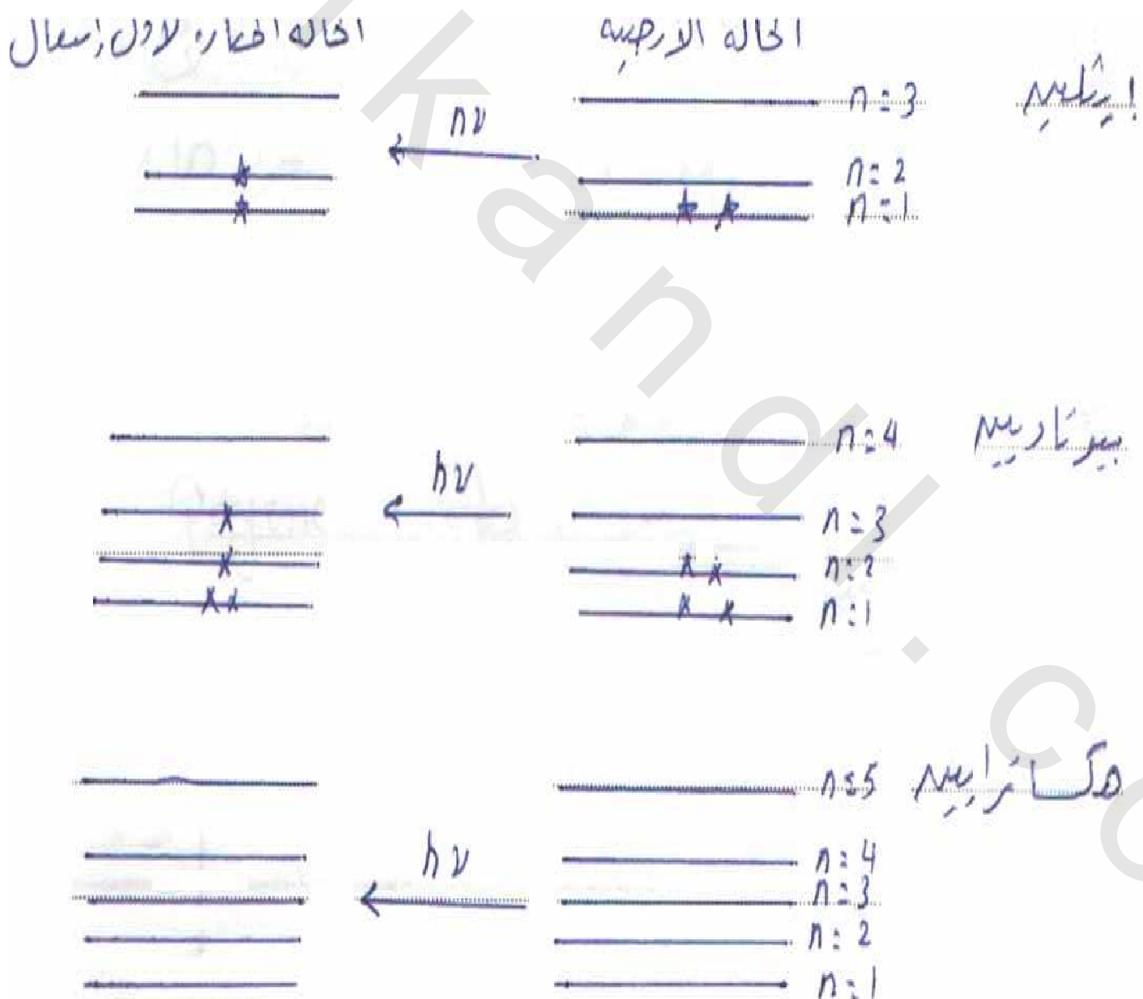
نظرية الإلكترون الحر لطيف الأنظمة الثنائية الازدواجية :

تعتبر جسم في حجرة لبعده واحد والأساس لوصف الإلكترون الحر لنظام زوجي الإلكترون π - electron كما في البلورات الخطية الثنائية الازدواجية. لنفترض حجرة لبعده 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 الإلكتروني على طول السلسلة يمكن اعتباره لإنشاء إلكترون في مدار آخر غير محتل.

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

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

$$\Delta E = \frac{[(N/2 + 1)^2 - (N/2)]h^2}{8m[(N+1)b]^2} = \frac{h^2}{8mb^2(N+1)} \quad (2-31)$$



شكل (3) 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 $1.4 \times 10^{10} m = 1.4 \text{ \AA}$ فيكون التعبير عن الانتقال في العدد الموجي هو:

$$v = \frac{154739 \text{ Cm}^{-1}}{N+1} \quad (2-32)$$

جدول (١) يبين الانتقالات المحسوبة لعدد سلسلة لبوليمر مقابل القيمة العملية لاحظ العدد غير مطابق ولكن توجد علاقة خطية بين v - المحسوبة، v - العملية لو طبقنا طريقة التربيع الأدنى -leust-squares تكون المعادلة التربيعية الأدنى هي :

$$\bar{v} \text{ fit} = 0893v_{\text{calculated}} + 17.153 \text{ Cm}^{-1}$$

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

جدول (١) الطيف المحسوب والانتقال الملاحظ لبعض المركبات العديدة

الرابطة Polyene

| $N^{(a)}$ | (b) $v_{\text{calc Cm}^{-1}}$ | (c) $v_{\text{exp Cm}^{-1}}$ | (d) $v_{\text{fit Cm}^{-1}}$ |
|-----------|----------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| 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 |
