

دراسة الخواص الحرارية والطيفية لجزيئة BH₂Cl

عدي مازن عبد المنعم

الجامعة المستنصرية ، كلية العلوم ، قسم الفيزياء.

E-mail: hoopemail@yahoo.com

الخلاصة

تم إجراء دراسة نظرية باستخدام مجموعة من البرمجيات الخاصة بالنمذجة الجزيئية للخواص الحرارية والطيفية لجزيئة BH₂Cl، ورسم منحنى طاقة الجهد للجزيئة بتغير طول الاصرة B-Cl ومنها حسبت طاقة التفكك الطيفية فكانت De=2.45 eV، ودراسة انحلال اهتزاز الجزيئة وتردداتها حيث كانت جميعها فعالة في طيف رامان و IR بسبب التغييرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة.

أما الخواص الثيرموديناميكية (الحرارية) فتم حساب قيمها عند درجة حرارة الغرفة. 298K فكانت بالنسبة لحرارة التكوين (-) $\Delta H^{\circ}f$ 24.8kcal/mol والمحتوى الحراري (H=-2478.2cal/mol) والسعة الحرارية كانت قيمتها $C_p = 13.63\text{cal/K.mol}$ والانتروبي (S=56cal/K.mol) وقيم هذه الخواص تم حسابها عند درجات حرارية متغيرة (100-3000)K ورسمت العلاقات البيانية لكل خاصية مع درجة الحرارة. كذلك حساب طول الأصرة B-Cl فكانت قيمتها (1.75608Å)، وكانت كافة النتائج قريبة من الدراسات العملية السابقة.

الكلمات الدالة: تركيب جزيئة BH₂Cl، طبيعة جزيئة BH₂Cl، اطياف رامان و IR، حرارة التكوين ($\Delta H^{\circ}f$).

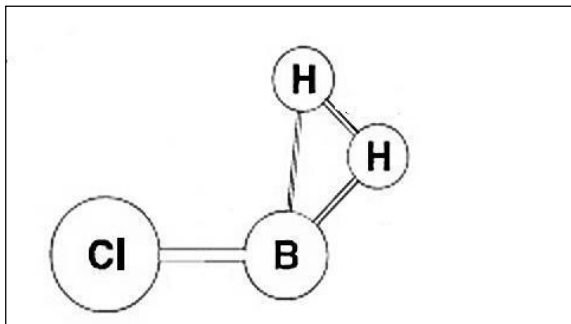
$$n = 3N - 6 \dots\dots\dots (1)$$

حيث ان:

n: تمثل عدد انماط الاهتزاز.

N: تمثل عدد الذرات للجزيئات الغير خطية.

وكما هو موضح في الشكل (١)،



شكل (١) يوضح جزيئة BH₂Cl.

أن مادة الجرافيت تعتبر من المواد الكيميائية المهمة والتي تدخل في مجال صناعة البطاريات عند درجات حرارة أعلى من K820 ومع ذلك، يمكن التحكم في إنتاج مادة الجرافيت عن طريق تغيير نسبة المواد المتفاعلة بالحقق في عملية ترسيب البخار الكيميائي، حيث تم العثور على أن BH₂Cl، BCH₃Cl₂، BHCl₂ و B₂Cl₄ هي من المواد

الجانب النظري للدراسة:

اجريت العديد من الدراسات العملية والنظرية لجزيئات مختلفة من حيث تركيبها الهندسي ونوع الأصرة، من خلال الاعتماد على اساسيات مختلفة مثلا لقطبية وغير القطبية والتي يتم من خلالها تحديد طبيعة تلك الجزيئات من حيث القطبية اي على اساس التماثل، كما فيجزيئة الكلوروبورين Chloroborane(BH₂Cl) وهي من الجزيئات الجديدة في الدراسات التطبيقية والنظرية، وتعتبرجزيئة الكلوروبورين غير متماثلة وتتألف من اربعة ذرات وثلاث اواصر كما في الشكل (١)، كذلك أن طاقة التفكك للجزيئة تمثل الفرق ما بين طاقة الجزيئة في حالة الاتزان الافتراضية وطاقة الذرات المنفصلة من بعضها [1]، وتمتلك ايضاً جزيئة BH₂Cl ستة انماط اهتزاز [2] حيثان أطياف الحركة الاهتزازية للجزيئات المتعددة الذرات تكون معقدة حيث يمكن وصف حركتها الاهتزازية بدلالة حركات بسيطة تسمى أنماط الاهتزاز الاعتيادية (Normal modes of Vibration) [1,3] والتي تخضع للعلاقة:

عدي مازن عبد المنعم

$$V(r) = \sum \frac{Z_A}{A|R_A-r|} - \int \frac{\rho(r')}{(r-r')} dr' \dots\dots\dots (3)$$

حيث ان: r هي بعد الشحنة الموجبة و Z_A : هي الشحنة النووية للذرة A والتي تبعد مسافة R_A ، والدالة $\rho(r')$ تمثل الكثافة الالكترونية. والحد الاول يمثل مساهمة الانوية بالجهد الالكتروستاتيكي إما الحد الثاني فيمثل المساهمة الالكترونية. اما بالنسبة لمبادئ الديناميكية الحرارية (الثرموداينميك) والتي تهتم بتحولات الطاقة للمادة في الفراغ الذي تحتله المادة (النظام System) وما يتبع ذلك من تحول في مستوى طاقته الداخلية التي هي نوع من انواع الطاقة الكامنة في النظام والتي تلعب دور في كثير من المفاهيم والتي منها السعة الحرارية ووحدتها $cal.Mol^{-1}.deg^{-1}$ ، ويمكن كتابة العلاقة بين الحرارة المنتقلة الى مادة ودرجة حرارتها بالشكل الاتي [8]:

$$dQ = nCdT \dots\dots\dots (4)$$

حيث ان: dQ : كمية الحرارة، n : عدد المولات، c : السعة الحرارية الجزيئية، dT : التغير في درجة الحرارة بسبب dQ ومن المعروف السعة الحرارية يمكن كتابتها بالشكل الاتي:

$$R = C_p - C_v \dots\dots\dots (5)$$

حيث ان: R : الثابت العام للغازات، C_p : السعة الحرارية بثبوت الضغط C_v : السعة الحرارية بثبوت الحجم. وان السعة الحرارية بثبوت الضغط للجزيئات غير الخطية متعددة الذرات تعطى بالعلاقة.

$$C_p = (3/2)R + (3N - 5) \dots\dots\dots (6)$$

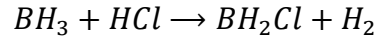
كذلك المحتوى الحراري (الانتالبي) Enthalpy وهي من الدوال المهمة حيث يعطى بالعلاقة التالية:

$$H = U + PV \dots\dots\dots (7)$$

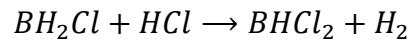
حيث إن:
 H : الانتالبي
 U : الطاقة الداخلية
 P : الضغط
 V : الحجم
وتعد الانتالبي دالة للضغط ودرجة الحرارة والطاقة الداخلية لجميع المواد ما عدا الغازات التي تسلك سلوكاً مثالياً

الأكثر فعالية في تلك العملية مع الظروف المختلفة (نسبة المواد المتفاعلة بالحقن، الضغط ودرجة الحرارة) [4].

كذلك يمكن الحصول على جزيئة BH_2Cl من خلال حدوث عدد من التفاعلات للبورين، مثال على ذلك عند ابدل ذرة الهيدروجين H بدل من ذرة الكلور Cl في جزء من جزيئة BH_3 ، ويمكن أنجاز ذلك بواسطة تفاعل HCl الغازي كما في المعادلة الكيميائية التالية [5]:



كذلك ادخلت جزيئة BH_2Cl في العديد من الاستخدامات الصناعية المهمة منها صناعة البطاريات الطويلة الامد مثل بطاريات أجهزة الموبايل واجهزة الحاسوب المحمول كغلاف عزل حراري لاستقرار درجة الحرارة من 10 الى 100 درجة سيليزية وتعتبر السمة الخاصة لتلك المادة وذلك من خلال عدد من البحوث اجريت على جزيئة BH_2Cl وتفاعلها مع HCl في تكوين $BHCl_2$ كمركب اساسي يدخل في تكوين أجزاء تلك البطاريات كما في المعادلة الكيميائية التالية [6]:



ان حساب تردد الاهتزاز (vibration frequency) والاحداثيات الاعتيادية (normal coordinates) من ثوابت القوى هي الطريقة الاكثر شيوعاً [7] من خلال المعادلة:

$$\bar{\nu} = \sum_{ij}^{3N} L_j (F_{ij} - \lambda M_{ij}) \dots\dots\dots (2)$$

حيث ان حل هذه المعادلة التجريبية للحصول على جذور المحددة λ وتقييم التردد الاهتزازي الاساسي والمتجهات الذاتية (Eigenvector) تعين الاحداثيات الاعتيادية حيث ان:

$\bar{\nu}$: تردد الاهتزاز.

F_{ij} عنصر مصفوفة ثوابت القوى.

λ : دالة القيمة الذاتية Eigen Value.

M_{ij} : عنصر مصفوفة الكتل الذرية.

L_j : قيم معاملات الجمع.

اما بالنسبة للجهد الالكتروستاتيكي (جهد الكهروستاتيكية الساكنة) فان توزيع الالكترونات يتحكم بالجهد الكهروستاتيكي الذي يصف التفاعل ما بين طاقة الجزيئة مع القطبية الموجبة ويمكن حساب الجهد الكهروستاتيكي من المعادلة الاتية:

صناعة البطاريات وبالأخص البطاريات طويلة الأمد وبالتالي عملها بشكل أفضل، وذلك بالأعتماد على مجموعة من البحوث والمصادر التي اجريت ضمن نطاق تطبيقي حديث لعدد من الشركات التقنية لجزيئة BH_2Cl .

طرائق الحسابات:

اجريت الحسابات الرياضية باستخدام عدة برامج تنتمي الى برامجيات النمذجة الجزيئية وهي :

١- برنامج pc-model

يعتمد هذا البرنامج على طرائق النمذجة الجزيئية [10] التي تعتمد مبادئ الميكانيك الجزيئي (Molecular Mechanics) والذي هو جزء من ميكانيك الكم اخذ بنظر الاعتبار الترتيب الالكتروني عند اجراء طرائق الحساب المتمثلة بطريقة (Ab-initio) المعروفة، وتستخدم دوال تحليلية بسيطة $f(r, \theta, \Phi)$ حيث r تمثل طول الاصرة و θ الزاوية المحصورة بين ثلاث ذرات في الجزيئة و Φ زاوية ثنائية السطح (زاوية محصورة بين مستويين) للحصول على افضل وضعية هندسية متوازنة للجزيئة لتكوين ملف يحتوي الاحداثيات الداخلية للوضعية التي تتم بموجبها تكوين الجزيئة هندسياً.

ويتعامل هذا البرنامج مع كل انواع الجزيئات الصغيرة والكبيرة والعضوية واللاعضوية ويعتمد على اقل مقدار للطاقة الجزيئية عند اجراء الحسابات [11].

٢- برنامج winmopac 7.21

يعتبر احد التحسينات لبرنامج Mopac وهذا مختصر للصيغة Semi-Empirical Molecular Orbital Program ويعني برنامج الاوربيتال الجزيئي شبه التجريبي. ويقوم هذا البرنامج بقراءة القيم الناتجة من برنامج pc-model، وبعدها تحسب الكثير من الخصائص الطيفية مثل الاطياف الجزيئية والكميات الثيرموديناميكية وثوابت القوى، ومن خلالها يرسم منحني طاقة الجهد للجزيئة [12].

٣- برنامج version of MOPAC2008

تم في هذه الدراسة استخدام MOPAC200 وهو نسخة معدلة من برنامج (MOPAC 7.1) ويمتلك نفس اساليبه في الحسابات، وهذا مختصر لصيغة (Molecular Orbital

او قريباً من هذا السلوك [1]، ويمكن أيضاً توضيح الصيغة التفاضلية للانثالبية وهي :

$$dH = du + pdv + vdpd \dots\dots\dots (8)$$

ولكن القانون الأول للثيرمودينامك في التغييرات متناهية

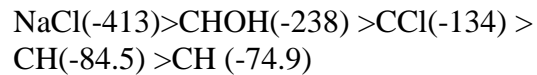
الصغير :-

$$Tds = du + pdvT \dots\dots\dots (9)$$

ومن خلال المعادلة (٧) نحصل على المعادلة التالية:-

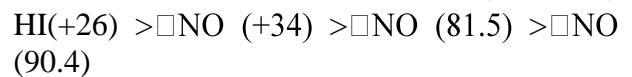
$$dH = Tds + vd \dots\dots\dots (10)$$

اما حرارة التكوين او انثالبي التكوين (Heat of formation) وهي صفة مميزة تتعلق باستقرار المركب فاذا كانت موجبة كبيرة فالمركب غير مستقر واذا كانت سالبة فالمركب مستقر، أي عندما تكون معظم حرارة التكوين سالبة هذا يعني أن تكوين المركب من عناصره الاولية في الغالب طارد للحرارة (q) او T وفي هذه الحالة يكون أكثر استقرار بسبب أن المحتوى الحراري للمركب الناتج أقل من مجموع المحتويات الحرارية للعناصر الداخلة في تركيبه كما في (CH_3OH, CH_4, \dots)، وكلما زادت الطاقة المنطلقة زاد ثبات المركب الناتج (يصعب تفكيكه):



وكلما زادت الطاقة الممتصة كلما قل ثبات المركب

(سهل تفكيكه):



كذلك من خلال العلاقة (٩) وبتبوت الضغط يمكن تمثيل علاقة طردية بين الحرارة الداخلة و الخارجة من نظام المركب (q) مع التغير في مقدار انثالبي التكوين ΔH_f كما في المعادلة التالية [1]:-

$$\Delta H_f = q \dots\dots\dots (11)$$

ومن الدوال الاخرى الانتروبي Entropy (S) والذي

يعتبر مقياس للعشوائية الناتجة للمركب بسبب التغير في

درجات الحرارة حيث يعطى بالعلاقة [9]:

$$dS = dQ_R/T \dots\dots\dots (12)$$

تكمين اهمية البحث في تطوير وتحديد المدى الحراري

(الثيرموديناميكي) المطلوب في المواد الصناعية والمتمثلة في

(PACKAGE)، يشمل أيضا نفس الموصفات الموجودة فينموذج RM1 و PM6، وهو برنامج نمذجي استخدم في البحث لتحديد طبيعة الأواصر واشكالها الهندسية بشكل دقيق لجزيئات معقدة في الحالة الصلبة والسائلة، وتكون حساباته دقيقة جدافي درجات الحرارة العالية عندما يتغير الشكل الهندسي للجزيئة (مستقرة ام غير مستقرة)، كذلك يمكن من خلال هذا البرنامج تصنيف العناصر والمجاميع الرئيسية للمعادن والبلورات [13].

النتائج والمناقشة:- Discussion and Results

١- الخواص الطيفية

من خلال دراسة منحنى الجهد للجزيئة الذي يمثل العلاقة بين الطاقة الكلية للجزيئة (Total Energy) وبين طول الاصرة الفاعلة في الجزيئة تم تحديد قيمة اقل طاقة للمنحنى وتمثل نقطة الاتزان (قعر المنحنى) وقيمتها عند المسافة (Å1.53) تساوي (-453.76eV) حيث تتفكك الجزيئة عند القيمة (Deq=2.45eV).

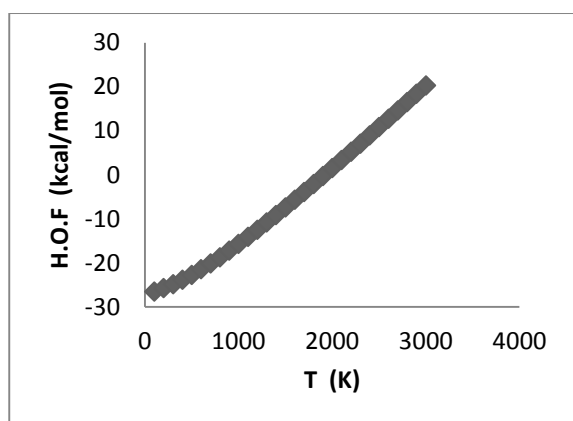
وحسبت انماط ترددات الاهتزاز للجزيئة والتي كانت عددها ستة (3N-6=9)، وباستخدام برنامج (Win Mopac) وقيست قيم الترددات وانواعها معبر عنها بالعدد الموجي ($\bar{\nu}$) وظهرت النتائج تقارب القيم النظرية مع العملية لعدد من الأنماط الى حدما وكما واضح في الجدول (١)، حيث ان نتيجة التفاعل بين الجزيئة وبين المجال الكهربائي للشعاع الساقط يؤدي الى انقال الجزيئة الى مستوى الالكروني الارضي الى مستوى طاقة خيالي وبعد عودة الجزيئة الى وضع الاستقرار تعود الى مستوى اعلى من المسوي الذي انتقلت منه معطية بذلك طيف رامان stock's ذو الطاقة الاقل اي انحراف نحو الاطوال الموجية الطويلة بسبب امتصاص الجزيئة لجزء من الطاقة الساقطة عليها، او تنتقل الجزيئة من مستوى اعلى من المستوي الالكترن الارضي (S°) معطية بذلك طيف رامان anti-stock's، وبسبب التغييرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة وكون الجزء الممتص من قبل الجزيئة للشعاع الساقط يقع ضمن مدى (IR)، لذلك فان انحلال الجزيئة وتردداتها كانت جميعها فعالة في طيف رامان و (IR).

جدول (١)

يضم قيم الترددات الاهتزاز لجزيئة BH₂Cl العملية والنظرية.

Normal Modes	type of mode	Wavenumber ($\bar{\nu}$) cm ⁻¹	Wavenumber (cm ⁻¹) Exp.[13,14,15]	Wavelength λ (nm)	Wavelength λ (nm) Exp.[13,14,15]
١	BH ₂ deform	882.11	868.5	11336.454	11514.104
٢	B-Cl stretch	915.91	919.7	10918.103	10873.11
٣	BH ₂ Bending	1110.01	1044.2	9008.927	9576.709
٤	BH ₂ Bending-scissors	1279.64	1291.2	7814.697	7744.733
٥	BH ₂ sym.-stretch	2895.85	2709.7	3453.217	3690.445
٦	BH ₂ ansym.-stretch	2986.67	2826.4	3348.210	3538.069

3000K ورسمت العلاقة بين حرارة التكوين ودرجة الحرارة كما في الشكل (٣) الذي يبين التناسب الطردي بينهما كما في العلاقة (١١).



الشكل (٣) يبين العلاقة بين حرارة التكوين ودرجة الحرارة.

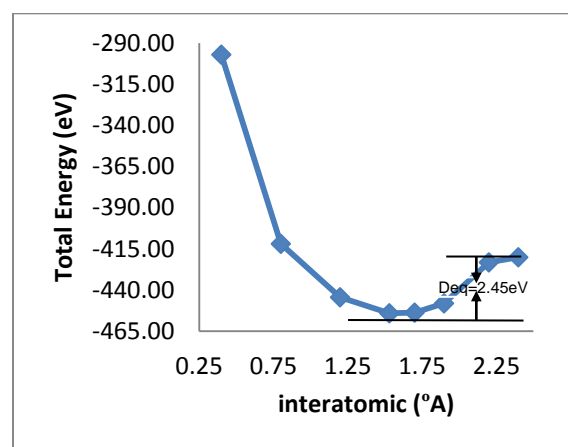
ب- حساب المحتوى الحراري (الانثالبي):

(Enthalpy) H

وهي دالة للضغط ولدرجة الحرارة وللطاقة الداخلية وهي ناتجة من حاصل جمع الطاقة الداخلية للنظام U مع الطاقة الخارجية له PV ويمثل المحتوى الحراري للنظام ولا يمكن إيجاد القيم التجريبية Enthalpy المواد وقياسها بشكل عملي، ولكن يمكن إيجاد قيم التغير في الانثالبيات، وحسبت المحتوى الحراري لدرجات حرارية مختلفة (100-3000K) والشكل (٤) يبين ان التغير Enthalpy يزداد كلما زادت درجة الحرارة.

٢- الخواص الحرارية (التيرموديناميكية):

حسبت بعض الخصائص الحرارية المتعلقة بجزيئة BH₂Cl كحرارة التكوين (H.O.F) والانتروبي (Entropy) والسعة الحرارية (Heat Capacity) والمحتوى الحراري (الانثالبي) (Enthalpy) باستخدام برنامج (Win Mopac) وبطريقة MNDO-PM3 ورسمت العلاقات البيانية بين هذه الخصائص الحرارية ودرجة الحرارة وكما يلي:-



الشكل (٢) يبين تغير الطاقة الكلية مع طول الاصرة B-Cl لجزيئة BH₂Cl.

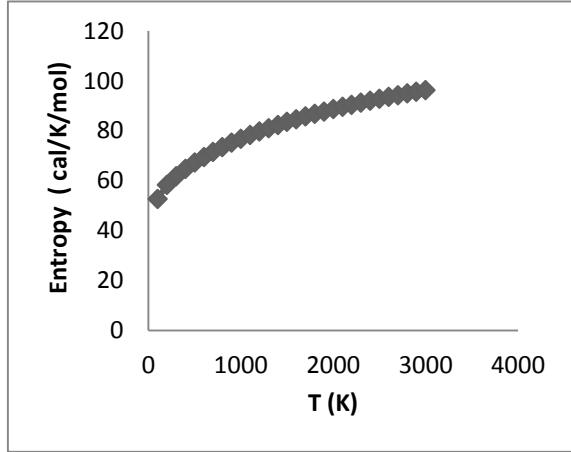
أ. حساب حرارة التكوين القياسية:

(Heat of Formation) (ΔH°f)

حسبت حرارة التكوين القياسية عند درجة حرارة K298 وضغط 1atm وكانت تساوي -24.8kcal/mol، وهي قريبة من القيمة العملية (-20.5 Kcal/mol) [16]، كذلك حسبت حرارة التكوين لقيم متغيرة من درجات الحرارة (100-

عدي مازن عبد المنعم

الحرارة (100-3000K) والشكل (٦) يبين العلاقة الطردية بين الانتروبي ودرجة الحرارة.



الشكل (٦) يبين العلاقة بين الانتروبي (S) ودرجة الحرارة.

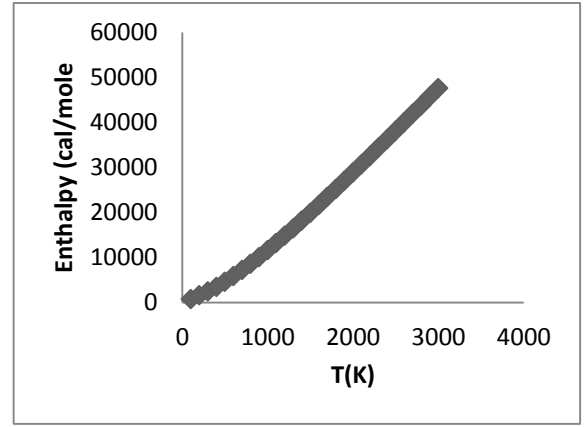
كذلك تم تحديد طول الأصرة $r(B-Cl)$ عن طريق استخدام برنامج MOPAC2008 في الجزيئة والتي تساوي (1.75608\AA) بالمقارنة مع القيمة العملية والتي كانت قريبة منها بمقدار $r(B-Cl)=1.7353\text{\AA}$ [3]، حيث تعتمد طاقة الربط وطبيعة الأصرة (B-Cl) على ارتفاع درجات الحرارة .T

الاستنتاجات

من خلال النتائج يتضح ان الاصرة (B-Cl) هي الاصرة الوحيدة الفعالة في الجزيئة BH_2Cl حيث ان تردد اهتزازات المط والانحناء يعتمد بصورة كبيرة على كتل الذرات المهتزة حيث كلما كانت الذرات خفيفة الوزن كلما كانت اهتزازاتها كبيرة حسب العلاقة [18]:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

حيث ν : التردد، k : ثابت القوى، μ : كتلة الذرات المهتزة. أما بالنسبة للخواص الحرارية حيث نلاحظ التناسب الطردية لكل من (ΔH°_f) و C_p و H و S مع درجة الحرارة وتفسير ذلك حسب ميكانيك الكم، حيث ان الطاقات الحرارية الناشئة عن كل من الحركة الانتقالية والحركة الدورانية والحركة الاهتزازية للجزيئة هي طاقات مكممة وتتناسب جميعها طردياً مع درجة الحرارة، ففي درجة حرارة الغرفة واعلى بقليل يساهم كل من الحركة الدورانية والانتقالية (هي

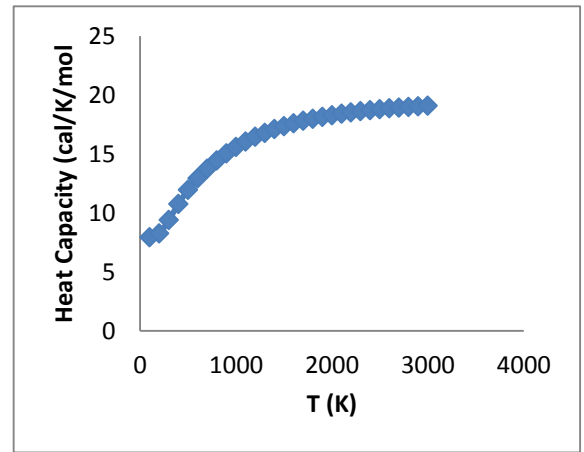


الشكل (٤) يبين العلاقة بين المحتوى

الحراري (H) ودرجة الحرارة.

ج- السعة الحرارية: (Heat Capacity) (C_p)

وهي دالة لدرجة الحرارة وتتناسب طردياً معها حيث بازدياد درجة الحرارة يزداد عدد الجزيئات في مستوى الطاقة الاهتزازية العليا وتزداد السعة الحرارية لكل نمط اهتزاز. وكانت قيمة السعة الحرارية بثبوت الضغط وعند درجة حرارة 298K وضغط 1 atm (9.925 cal/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (10.52 J/mol) [17]. وايضاً حسب السعة الحرارية لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100-3000K) والشكل (٥) يوضح التناسب الطردية بينهما.



الشكل (٥) يبين العلاقة بين السعة الحرارية (CP)

ودرجة الحرارة.

د- الانتروبي (S) (Entropy)

يصف الانتروبي التوزيع العشوائي واللانتظام النسبي للجزيئات المكونة للنظام، وحسبت قيمة الانتروبي عند درجة الحرارة القياسية (298K) وكانت قيمتها (66.80 cal/k/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (61.409) [17] وحسبت الانتروبي لقيم مختلفة من درجات

Number 69 National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg MD, 20899. 2003.

- [10] Doresett H. and White A. “*Over viweof molecular modeling & Abintio Molecular Orbital Methodessuhablefor use with EnergeticMaterials*”, DSTO Aeronautical & maritime research laboroatory Commonwealth of Australin. 2000.
- [11] Ami Lakdawala. Minmin Wang. Neysa Nevins. Dinnis C. Liotta, Danuta Rusinska Roszak. MarekLozynski & games p. snyder. “*pc-model of Molecular Mechanic*”; BMC Chem. Biol. 1:2. 2001.
- [12] Frank L. fort & karlsohlberg, “*Molecular Structures of Thermochemical*”. 2003.
- [13] MOPAC2008, James J. P. Stewart, *Stewart Computational Chemistry*, Colorado Springs, CO, USA, <http://openmopac.net>. 2008.
- [14] Stewart J. J. P. “*Optimization of Parameters for Semiempirical Methods V: Modification of NDDO Approximations and Application to 70 Elements*” J.Mol. Modeling 13, 1173-1213. 2007.
- [15] Bernhard H. Schlegel and Anwar, Baboul G., Stephen J. Harris. *Physical Chemistry, General Motors Research & DeVelopment*, Warren, Michigan 48090-9055 ReceiVed: March 5. 1996.
- [16] Estimated from DGauss results of DFT calculations, using the B88-PW91functional and the DZVP basis set, in CAChe 6.0, Fujitsu Ltd,. 2003.
- [17] Bonnie J. McBride, Michael J. Zehe, September; Sanford Gordon Glen Research Center, Cleveland, Ohio. 2002.
- [18] Banwell C.N. “*fundamental of molecular spectroscopy*”, McGraw-Hillcompany. 1983.

Abstract

A theoretical study by using series of software that associated with molecular pattern for spectroscopic and thermal characteristics for BH₂Cl has been done, and drawing potential energy curve for molecule with variation of band length between B-Cl, from which the calculation of the spectral dissociation energy which was found to be (De=2.45eV), Also the molecular

الدوران والانتقال للجزيئة من مكان الى آخر في مجال IR, Microwave) في قيم الخواص اعلاه. اما في درجات الحرارة العالية فان الحركة الالكترونية (انتقال الالكترونات التي تحتاج الى طاقات عالية في مجال (UV, VIS) تلعب دورا مهما حيث ان الطاقات العالية تحدث انتقالات الكترونية. كذلك ان الزيادة في قيم الانتروبي بزيادة درجة الحرارة يعود الى الزيادة في الانتشار الطاقى المرتبط بالطاقات الدورانية والاهتزازية، اما بالنسبة لحرارة التكوين فان القيم السالبة تدل على استقرارية الجزيئة.

References

- [1] Schrader B., “*Infrared & Raman Spectroscopy*”. VCHpublishers Inc. NewYork 1995.
- [2] Kulkarni, H.C.; S.U.J. Organomet. Chem. 239.232, 1982.
- [3] Mckellar, A.R. “*Molecular spectroscopy*” National Research Council nrc, Canada, 1999.
- [4] Deng, J. Wang, T. Zeng, Q. Cheng L. and Litong, Zhang, “Thermodynamic investigation of the gas-phase reactions in the chemical vapor deposition of boroncarbide with BCl₃-CH₄-H₂precursors” Journal of Molecular Structure Volume 861, Issues 1-3,30 July 2008, Pages 103-116.
- [5] Agnello P.D., Sedgwick T.O., Cotte J., *J. Electrochem. Soc.* 140, 2703. 1993.
- [6] Kawashima , Yoshiyuki; Takeo, Harutoshi; Sugie, Masaaki; Matsumura, Chi; Hirota Eizi, “Microwave spectrum of Chloroborane”, *The Journal of Chemical Physics*, Volume 99, Issue 2, July 15, pp.820-826. 1993.
- [7] Hezberg. G. “*Molecular Spectra and Molecular Structure Infrared & Raman Spectra of polyatomic Molecules*”, Van Nostrand Reinhold Co. New York. 1971.
- [8] Smith G.M. and Van Ness H.C., ltd. “*Introduuctionto chemical Engineering Thermodynamic*”, McGraw-Hill kogausha. 1975.
- [9] Afeefy HY, Liebman JF, Stein SE Neutral Thermochemical Data In: Linstrom PJ, Mallard, WG, Eds. NIST Chemistry WebBook, NIST Standard Reference

disintegration has been studied , and its frequency that take place and its active value at Raman spectrum and I.R due to the variations in polarization and diapole moment for molecular.

On theother hand, the thermodynamic characteristics, and its value at room temperature (298 k) where the heat of Formation ($\Delta H^{\circ}f=-24.8\text{kcal/mol}$), Enthalpy ($H=-2478.2\text{cal/mol}$), Heat Capacity ($C_p=13.63\text{cal/K.mol}$), Entropy ($S=56\text{cal/K.mol}$) and the value of this characteristics have been calculated at different temperature from (100-3000K), and every characteristic was drawn with temperature finally, the bond length B-Cl has been calculated and its value (1.75608\AA), and all the results in this research was approached to the previous work .

Keywords: Installation molecule BH_2Cl , the nature of the molecule BH_2Cl , Raman spectrum and I.R, heat of Formation ($\Delta H^{\circ}f$).