

Spectroscopie infrarouge et Raman et (DRX) de composé pharmaceutique 2.4.5Trimethoxybenzaldehyde C10H12O4 comparée par la (DFT)

تحت اشراف الأستاذ القاضل بوراوي حازم lehazem@yahoo.fr

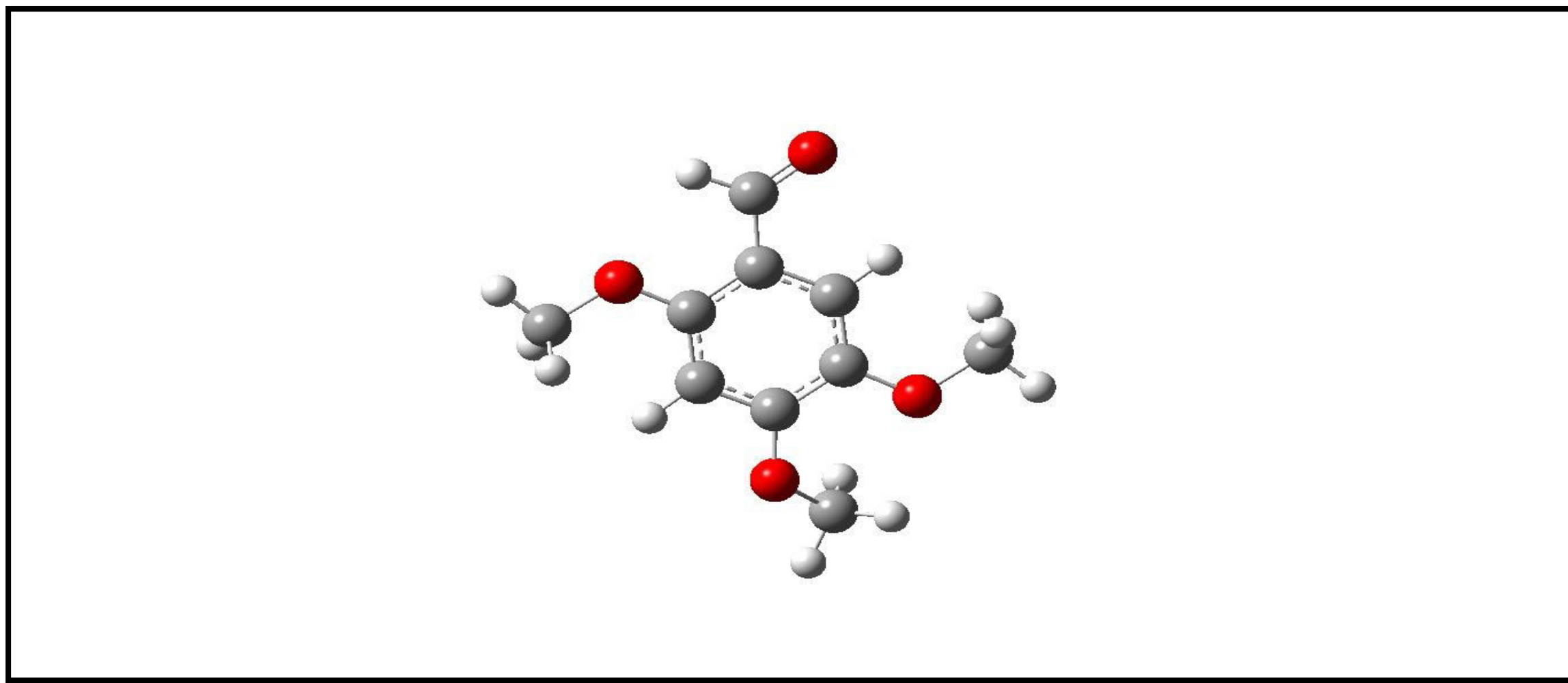
من اعداد : سماحي فايزة smahifaiza8@gmail.com
شبيحاتي مريم meriem037@gmail.com

ملخص: نظرية الكثافة الوظيفية هي تقنية مكثفة بشكل جيد لحساب أوضاع الاهتزاز وتعطي عموماً نتائج قريبة جداً من نتائج التجربة توافق جيداً بنسبة 0.80% في حساب زوايا الربط من ميكانيكا الكم باستخدام الوظيفة B3LYP والقاعدة 6-311G مقارنة بالتجربة.

الكلمات المفتاحية: IR، DFT، RAMAN، DRX.

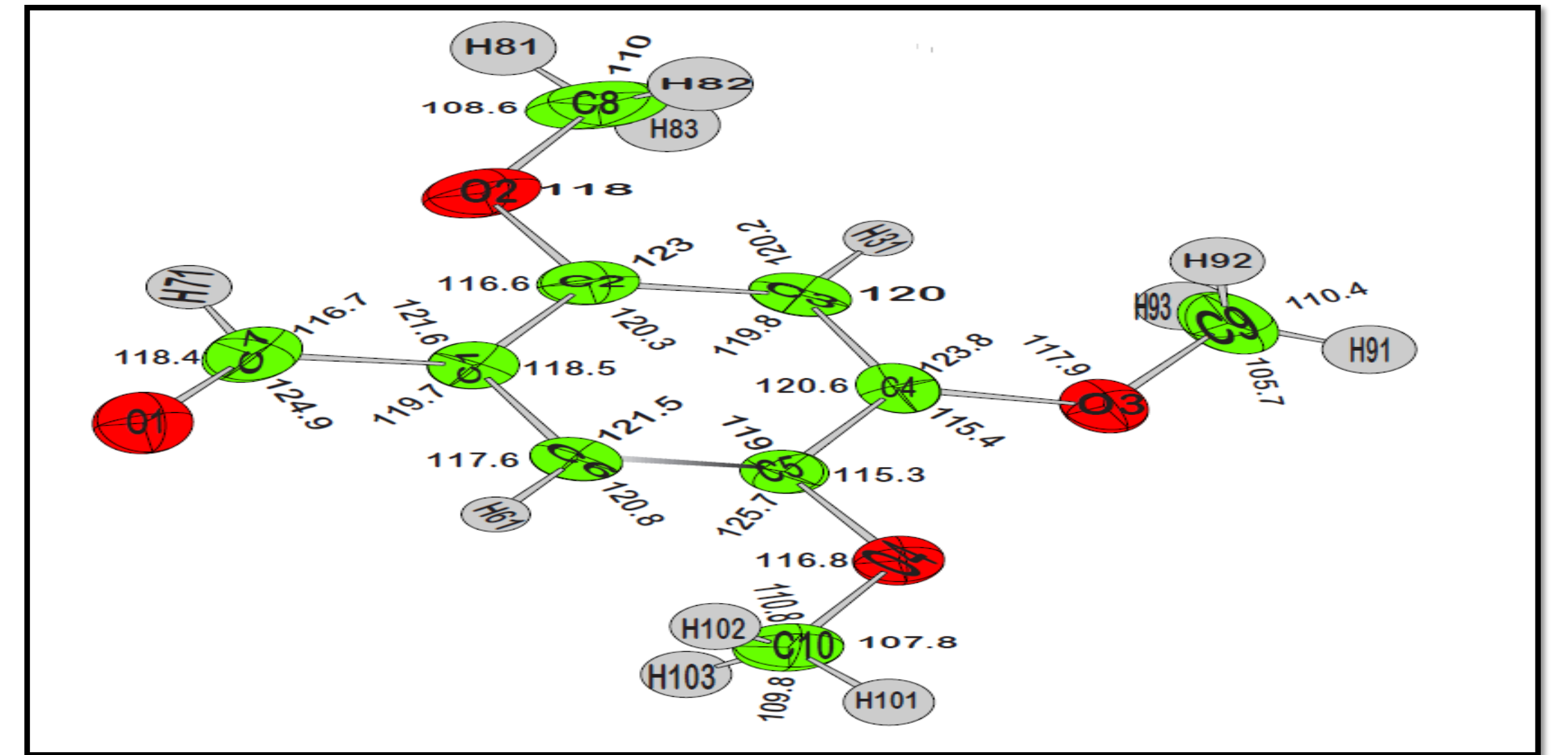
مقدمة: نقدم في هذا العمل النتائج الحسابية لمكانيك الكم فيما يتعلق بتحسين التشكل الجزيئي الذي تم الحصول عليه من DFT من أجل تحسين الجزيئي الهندسي لجزيء معزول 2.4.5Trimethoxybenzaldehyde، وذلك باستخدام برنامج Gaussian03 باستخدام وظيفة B3lyp والقاعدة 6-311G للحصول على سلسلة نتائج مشابهة جداً لتلك التي تم الحصول عليها تجريبياً. نختم هذا العمل بالمقارنة بين النتائج المحسوبة النظرية لأنماط الاهتزازات التي تم الحصول عليها من دالية الكثافة الوظيفية DFT، والترددات التجريبية لطيف رامان والأشعة تحت الحمراء.

II- الشكل الجزيئي المتحصل عليه من ميكانيكا الكم DFT



الصورة 2

I- الشكل الهيكلي من حيود الأشعة السينية DRX



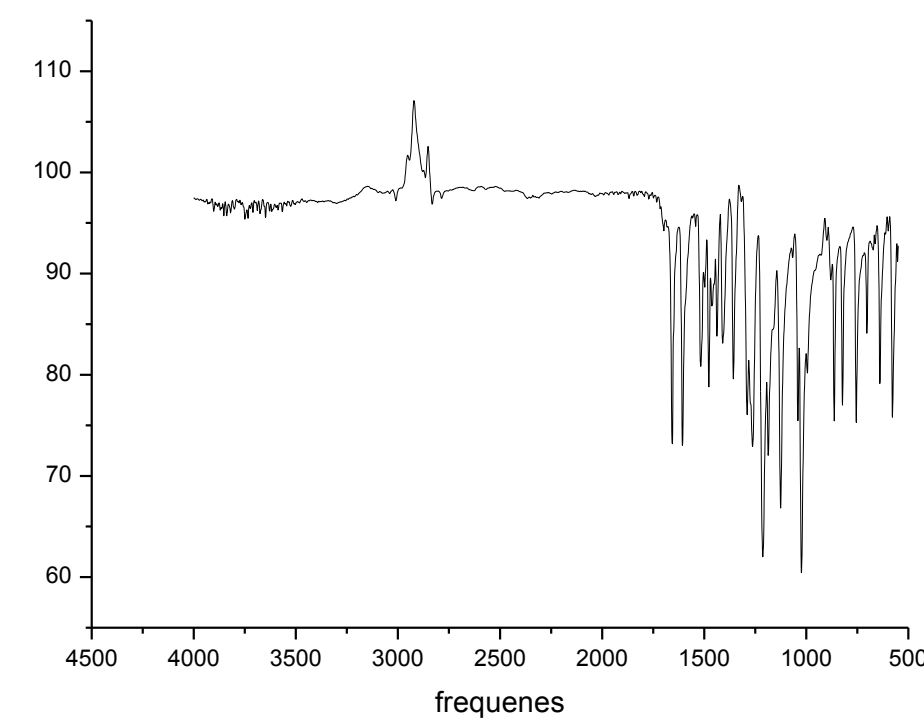
الصورة 1

مقارنة النتائج المحسوبة من DFT مع النتائج التجريبية 2.4.5 trimethoxybenzaldehyde

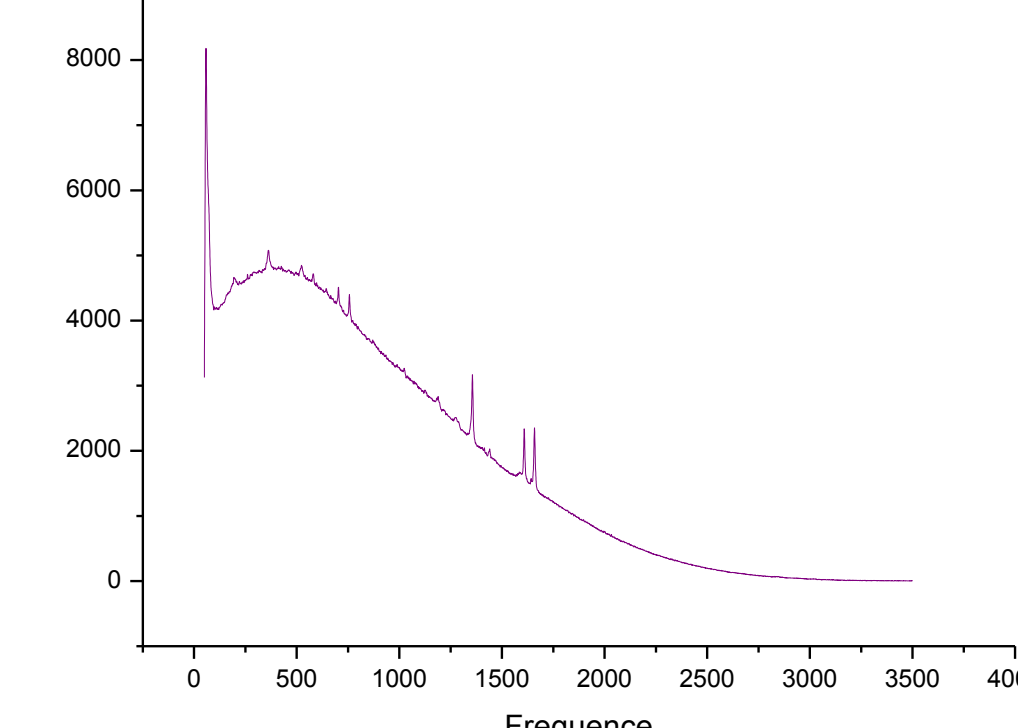
جدول 1: زوايا القيم المحسوبة من DFT مقارنة بنتائج DRX

$$ACC = \frac{val_{exp} - val_{the}}{val_{exp}} * 100$$

	Valeurs EXP (DRX) (Å)	Valeurs Thé (DFT)	ACC (%)
ANGLE (°)			
C1-C2-C3	120.32(18)	119.93	0.32%
C2-C3-C4	119.88(19)	120.85	0.80%
C3-C4-C5	120.64(19)	119.70	1.027%
C4-C5-C6	118.99(17)	118.90	0.07%
C5-C6-C1	121.59(18)	121.92	0.27%
C6-C1-C2	118.58(19)	118.65	0.05%
C6-C1-C7	119.7(2)	119.056	74.05%
C2-C1-C7	121.66(19)	122.11	0.36%
C1-C7-O1	124.9(2)	124.96	1.18%
C1-C7-H71	116.7	116.20	0.42%
O1-C7-H71	118.4	118.4	76.61%
C1-C2-O2	116.68(19)	116.67	0.41%
C3-C2-O2	123.00(19)	123.38	0.30%
C2-O2-C8	118.0(2)	123.38	0.96%
O2-C8-H81	108.6	111.10	2.30%
O2-C8-H82	109.1	105.03	3.73%
O2-C8-H83	109.5	111.10	1.46%
C2-C3-H31	120.2	120.2	73.06%
C4-C3-H31	120.0	116.70	2.75%
C3-C4-O3	123.87(18)	114.47	7.58%
C4-O3-C9	117.97(17)	29.47	75.01%
O3-C9-H91	105.7	111.71	4.73%
O3-C9-H92	109.2	111.06	1.51%
O3-C9-H93	110.8	110.77	0.22%
C4-C5-O4	115.30(18)	117.14	1.59%
C6-C5-O4	125.71(18)	116.02	
C5-O4-C10	116.83(17)	118.09	1.07%
O4-C10-H101	107.8	111.22	1.20%
O4-C10-H102	110.8	109.88	2.03%
O4-C10-H103	109.9	111.22	1.20%
C5-C6-H61	120.8	25.19	79.14%
C1-C6-H61	117.6	116.33	1.07%
H81-C8-H82	110.0	34.93	68%
H81-C8-H83	109.5	116.67	6.08%
H83-C8-H82	110.3	116.20	5.34%
H91-C9-H92	110.4	123.42	11.79%
H91-C9-H93	111.0	109.3	1.53%
H93-C9-H92	109.6	110.9	1.18%
H101-C10-H102	109.5	109.1	0.36%
H101-C10-H103	109.8	109.2	0.54%
H103-C10-H102	109.0	109.11	0.110%
			ACC=5.07%

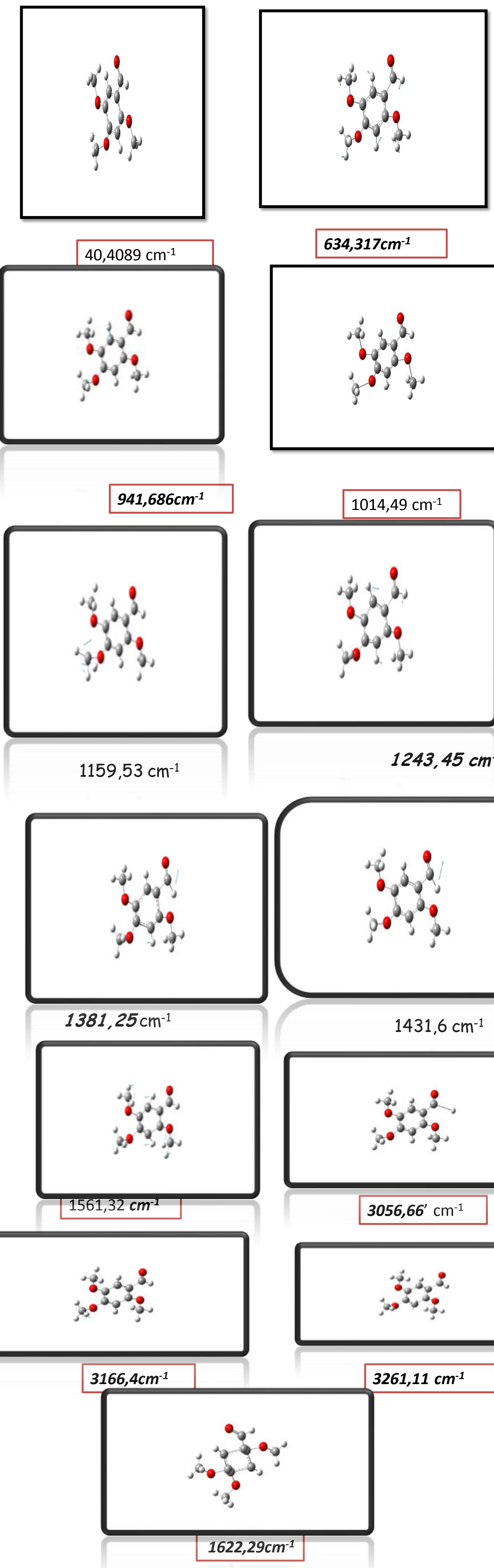


الصورة 4: طيف الأشعة تحت الحمراء التجريبي



الصورة 3: طيف رامان التجريبي

بعض الحركات الاهتزازية 2.4.5Trimethoxybenzaldehyde



الجدول 3: الأوضاع التجريبية والنظرية الطبيعية (التردد والشدة) مع طبيعة الحركة المقابلة لكل وضع

N°	freq	Intensity	Reference	Reference	Raman Exp	Nature de mouvement
1	40408.9	0.000	0.000	0.000	40409	breathing
2	63431.7	0.000	0.000	0.000	63432	breathing
3	94168.6	0.000	0.000	0.000	94169	breathing
4	10144.9	0.000	0.000	0.000	10145	breathing
5	11595.3	0.000	0.000	0.000	11595	breathing
6	12434.5	0.000	0.000	0.000	12435	breathing
7	13812.5	0.000	0.000	0.000	13813	breathing
8	1431.6	0.000	0.000	0.000	1431.6	breathing
9	1561.32	0.000	0.000	0.000	1561.32	breathing
10	3056.66	0.000	0.000	0.000	3056.66	breathing
11	3166.4	0.000	0.000	0.000	3166.4	breathing
12	3261.11	0.000	0.000	0.000	3261.11	breathing
13	1622.29	0.000	0.000	0.000	1622.29	breathing

الترددات المحسوبة قريبة نوعاً ما من تلك الملاحظة

اشد str: التواء tor: مقص scis: مطلة brella: تنفس breathing: ارتجاج الحلقة W the ring:

المراجع:

[1] Thèse de doctorat de H.Bouraoui université mentouri - constantine (2016).

استنتاج:

في الختام الحسابات النظرية للأشعة تحت الحمراء ورامان جعلت من الممكن العثور على أوضاع مختلفة من الاهتزاز المتعلق بحركات الجزيء