

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الكيمياء



مذكرة مقدمة ضمن استكمال متطلبات نيل شهادة ماستر أكاديمي

في الكيمياء.

التخصص: كيمياء تحليلية

من إعداد: سليمان منال

التوصيف عن طريق التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء

ونمذجة الخصائص الجزيئية للمعقد



نوقشت علنا يوم: 17 جوان 2021.

أمام لجنة المناقشة:

رئيسا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ محاضر -أ-	حمادة جميلة
مناقشا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ محاضر -أ-	زروقي حياة
مؤطرا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ محاضر -أ-	زنخري لويزة
مساعد مؤطر	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	دكتوراه	باباعمي نور الهدى

السنة الجامعية : 2020 / 2021



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

الاهداء

أهدي ثمرة جهدي هذا

إلى من مسحت دمعتي عند الغناء ورسمت فرحتي يوم الهناء, إلى من كانت دعواتها سر
نجاحي إلى من حملت كرها ووضعت كرها, إلى من كانت الجنة تحت أقدامها, وصية الله في
الأرض.

حفظها الله أمي...

إلى من ضحى بالعمر وتجرع كأس الشقاء والغناء, إلى من لا ترد له دعوة باب الجنة
الثاني

أبي حفظه الله...

أطال الله في عمرك ومتعك بالصحة والعافية وجزاك عنا كل خير.

إلى الدين قاسموني حلو العيش ومرارته إلى من تضحك عيونهم حين أنجح وتبكي حين
أضماً.

إلى كافة اخوتي.

إلى الروح الطيبة والوجه البشوش والقلب السخي خالي عبد المالك رحمه الله, أسأل المولى
عز وجل أن يسكنه فسيح جناته مع النبيين والصدقيين والشهداء والصالحين.

إلى من تحملت معي متاعب هذا الجهد وتقاسمت معي الشقاء إلى ابنة خالتي إزدهار.

أسأل الله أن يمدها بالصحة والعافية ويحقق لها كل أمنية, جزاكي الله كل خير.

والى كل أهلي وأقاربي ...

إلى دفعة كيمياء 2021

إليكم جميعاً أهدي عملي..

منال سليمانى

شكر و عرفان

الحمد لله الذي هدانا لهذا ومكنا لنهتدي لولا أن هدانا الله، لك الحمد على إنعامنا بنعمة العقل، ونور الفهم والإرادة على إتمام هذا العمل، ونقول اللهم لك الحمد حتى ترضى ولك الحمد إذا رضيت ولك الحمد بعد الرضى.

أتقدم بأيات الشكر والعرفان للأستاذة المشرفة الدكتورة "لويذة زنجري" على كل مجهوداتها المبدولة وعلى ماقدمته لي من توجيهات ونصائح قيمة فإلهمني أسمى معاني الشكر والتقدير وجزاكي الله خير جزاء وأبقاكي منبع نور للعلم وطلابه.

فمع وضع اللمسات الأخيرة لعملي اغتنمت الفرصة لأتوجه بهذه السطور التي تحمل في ثناياها أسمى عبارات الشكر والتقدير للجنة المناقشة ما عساني إلا أن أقول شكرا لكم أيها الأساتذة الكرام حمادة جميلة، زروقي حياة لقبولكم دعوة المناقشة.

كما أتقدم بالشكر والعرفان الى طاقم كلية الرياضيات وعلوم المادة من أساتذة وعاملين وطلبة وخاصة طالبة سنة الثانية ماستر "كيمياء تحليلية" دفعة 2021 وأتقدم أيضا بالشكر إلى كل من ساعدني من قريب أو بعيد وأفادني ولو بكلمة.

قائمة الجداول

الصفحة	العنوان	رقم
13	المواد الكيميائية المستعملة لتحضير مركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$	1
18	الأرقام الموجية للمجموعات الوظيفية (Cm^{-1}) مرفقة بنوع الاهتزاز	2
24	تحديد نوع الروابط المحيطة بالذرة المركزية، قيمتها النظرية والتجريبية	3
25	تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في الحلقة الرباعية (الرابطات C-O و C-C)	4
26	تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة (Ethylenediammonium)	5
27	تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة الماء (H_2O)	6
28	تحديد قيمة الزاوية للرابطات (O-Y) النظرية والتجريبية	7

قائمة الأشكال والصور

الصفحة	العنوان	الرقم
6	صورة توضيحي لتجربة في بيشر	01
7	صورة توضيحية لأداة مستعملة للسحق في الحالة الصلبة	02
8	صورة توضح آلية التحضير الحراري في المذيب المائي والغير المائي	03
8	صورة توضح آلية السحق الميكانيكي	04
10	شكل يوضح امتصاص الأشعة تحت الحمراء	01
14	اسقاط الهيكل على طول المحور (b)	05
19	طيف الأشعة تحت الحمراء لمركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$	06
22	صورة أثناء عملية التحسين الهندسي	07
23	صورة بعد انتهاء عملية التحسين الهندسي	08
24	صورة للجزيئة النظرية	09
24	التجريبية للجزيئة صورة	10

الفهرس

أ	الإهداء
ب	شكروعرفان
ج	قائمة الجداول
د	قائمة الأشكال
1	مقدمة عامة
2	الإشكالية والهدف من البحث
الجزء النظري	
الفصل الأول : المعقدات وتقنيات توصيفها	
6	1-I تعريف المعقدات
6	2-I طرق تحضير المعقدات باستعمال مبدأ الكيمياء اللينة
6	1-2-I التحضير في بيشر عند درجة حرارة الغرفة
6	2-2-I التحضير في الحالة الصلبة
7	3-2-I التحضير بطريقة (Sol-gel)
7	4-2-I التحضير الحراري في المذيب المائي
7	5-2-I التحضير الحراري في المذيب غير المائي
8	3-I تقنيات توصيف المادة
9	1-3-I انعراج الأشعة السينية (RX)
9	1-1-3-I مبدأ انعراج الأشعة السينية
9	2-1-3-I انعراج الأشعة السينية على مسحوق
9	3-1-3-I انعراج الأشعة السينية على البلورة
9	2-3-I مطيافية الأشعة تحت الحمراء (IR):
9	1-2-3-I تعريف الطريقة
10	2-2-3-I مبدأ مطيافية الأشعة تحت الحمراء :
10	3-2-3-I جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء
11	4-2-3-I نتائج توصيف المادة باستعمال طيف IR
الفصل الثاني : الطريقة التجريبية لتوصيف مركب [Y(C₄O₄)₃(C₂H₁₀N₂)_{1.5}4H₂O]	
13	مقدمة
13	1-II المواد الكيميائية المستعملة لتحضير مركب [Y(C ₄ O ₄) ₃ (C ₂ H ₁₀ N ₂) _{1.5} 4H ₂ O]
13	2-II طريقة تحضير المركب
13	3-II توصيف المركب
14	4-II وصف المركب
14	5-II نتائج توصيف المركب
الجزء التجريبي	
الفصل الثالث : التحليل بمطيافية الأشعة تحت الحمراء لمركب [Y(C₄O₄)₃(C₂H₁₀N₂)_{1.5}×4H₂O]	
17	مقدمة
17	1-III الهدف من الدراسة
17	2-III مبدأ الدراسة
18	3-III تحديد المعلومات النوعية والكمية من طيف الأشعة تحت الحمراء
20	4-III تحليل نتائج الطيف المسجل
الفصل الرابع : النمذجة الجزيئية للمركب	
22	مقدمة
22	IV- وصف منهجية النمذجة الجزيئية

22	1-IV-تصميم المركب
23	2-IV- التحسين الهندسي للمركب
23	3-IV-الخصائص البنيوية الجزيئية
23	4-IV- الخصائص الذرية
23	5-IV-خصائص الروابط في الجزيئ
24	1-5-IV- تحديد نوع الروابط المحيطة بالذرة المركزية وقيمتها التجريبية والنظرية
25	1-1-5-IV- مقارنة وتحليل نتائج الجدول
25	2-5-IV- تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في الحلقة الرباعية (C-C)،(C-O)
26	1-2-5-IV- مقارنة وتحليل نتائج الجدول
26	3-5-IV- تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة (ethylenediammonium)
26	1-3-5-IV- مقارنة وتحليل نتائج الجدول
27	4-5-IV- تحديد قيمة الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة الماء (H ₂ O)
27	1-4-5-IV- مقارنة وتحليل نتائج الجدول
27	6-IV- خصائص الزوايا
28	1-6-IV- تحديد قيمة الزاوية (O-Y) النظرية والتجريبية
29	1-1-6-IV- تحليل ومقارنة نتائج الجدول
30	الخاتمة

المقدمة العامة

العلم بحر واسع وعجلة العلم في تقدم مستمر ولا تقف أبداً، لذلك نجد في كل يوم ماهو جديد في المجالات العلمية المختلفة، ومما لا شك فيه أضحى ظاهرة تصنيع المعقدات موضوع العلم الحديث ومحور اهتمامه، يكمن ذلك من خلال تحضيرها ودراسة بنيتها البلورية استناداً على إحدى طرق التحليل الطيفي، حيث أصبحت عمود الدراسة في مجال الكيمياء والفيزياء والصيدلة وغيرها، وازداد ظهورها فضلاً لما آلت إليه تطبيقاتها الواسعة وتنوعها وانتشارها في مختلف المناحي الكيميائية والصناعية⁽²⁴⁾.

ولدراسة المعقدات تدرس العديد من الخصائص العامة كالخواص الفيزيائية والخواص الكيميائية، وان معرفة خصائص الجزيء (الخصائص الذرية، خصائص الروابط، خصائص الزوايا) والتمعن في الترتيب الدقيق لشبكة البلورية لمادة ما تجعل الباحث يستدل على أهم الخصائص ليتنبأ بميدان (مجال) استخدام هذه المادة، يضاف إلى ذلك دراسة موسعة لكل من طيفي UV-Vis و IR⁽²⁵⁾.

وفي غالب الأحيان يلجأ الباحث إلى النمذجة الجزيئية التي أصبحت من بين الأدوات القوية في ميدان الكيمياء، إذ تملك القدرة على فهم المشاكل المتعلقة بالجزيء، بفضل البرامج المتوفرة لديها التي ساعدت على تفسير على بنية الجزيئات وتفاعلاتها وتكميل المعلومات التي تم الحصول عليها من القياسات الطيفية وحل المشكلات النظرية⁽²⁶⁾.

قسم هذا العمل إلى أربعة فصول وخاتمة، مبدوءة بمقدمة عامة تضمنت دور البارز والهام للمعقدات في مختلف المجالات العلمية، كما تضمنت الطرق الكيميائية المعتمدة خلال البحث للوصول إلى النتائج التي هي محل الدراسة.

- الفصل الأول "المعقدات وطرق تحضيرها باستعمال مبدأ الكيمياء اللينة"، تطرقنا إلى تقنيات توصيف المادة والتي شملت مطيافية الأشعة السينية (انعراج الأشعة السينية على مسحوق، انعراج الأشعة السينية على بلورة)، إضافة إلى ذلك مطيافية الأشعة تحت الحمراء وختمنا الفصل بنتائج توصيف المادة باستعمال هذه الأخيرة.

- الفصل الثاني "المواد والطريقة التجريبية"، عرّجنا فيه إلى المواد، طريقة التحضير موضحة في ذلك وصف المركب ونتائج توصيفه.

- الفصل الثالث "النتائج ومناقشتها"، تطرقنا إلى المبدأ والهدف من الدراسة، تحديد المعلومات النوعية والكمية لطيف IR، مناقشة وتحليل النتائج المتحصل عليها من خلال عرض المنحنى الطيفي للمركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \cdot 4H_2O]$.

- الفصل الرابع "النمذجة الجزيئية"، تطرقنا إلى تصميم المركب والبرنامج المستعمل لذلك، ثم إجراء التحسين الهندسي ومعرفة الخصائص البنوية والجزيئية والذرية وحساب وتحديد نوع الروابط والزوايا النظرية والتجريبية في الجزيء وإجراء المقارنة بينهما.

ختمنا كل ذلك بخلاصة وأجزنا فيها نبذة مختصرة حول الأهمية البارزة لموضوع الدراسة.

-أسأل الله التوفيق-

الإشكالية والهدف من البحث

إشكالية البحث : -

من خلال المعلومات الواردة في المقال العلمي⁽¹⁾، تطرق الباحثين الى تشخيص مركب تناسقي معروف بصيغته المجملة $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$ باستعمال الأشعة السينية. أما من خلال العمل الذي نحن بصدد انجازه سوف نقوم بدراسة المركب باستعمال طيف الأشعة تحت الحمراء لأنها لم تدرس من قبل، فكيف تتم هذه الدراسة وماهي المعلومات الممكن الحصول عليها؟

الهدف من البحث:-

هو إثراء مكتبة الأشعة تحت الحمراء والتدقيق والتعرف على عصابات الامتصاص، لمركب بنيته البلورية معروفة مسبقا. إذ تمكننا هذه الدراسة من التمعن وإدراك وإسناد كل العصابات الظاهرة في الطيف إلى مجموعتها الوظيفية ولا سيما تلك المتعلقة بالذرة المركزية للمعقد مع المرتبطات المحيطة بها.

الجزء النظري



الفصل الأول

المعدات وتقنيات توصيفها

I-1- تعريف المعدات:

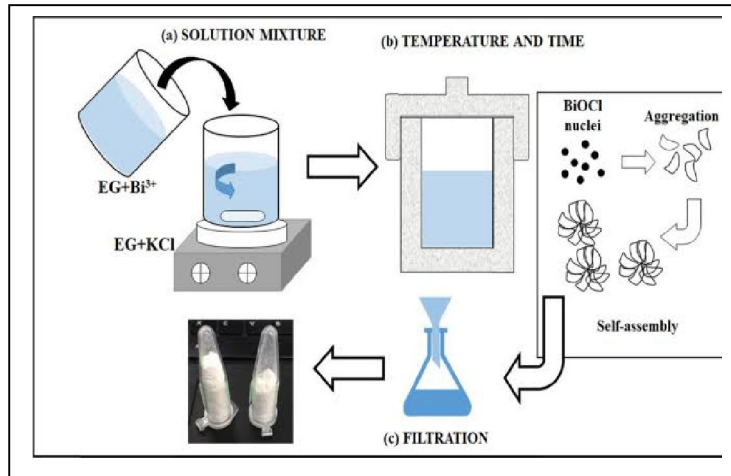
المعدات عبارة عن مركبات كيميائية تتألف من ذرة مركزية، وهي غالبا ماتكون أيون معدني مرتبط مع مجموعة من المرتبطات بواسطة روابط تناسقية أو تساهمية ، وتملك شكل العام التالي: $[ML_n]^x$.⁽²⁾

I-2- طرق تحضير المعدات باستعمال مبدأ الكيمياء اللينة

تصنف الكيمياء اللينة من بين التفاعلات الكيميائية التي تحدث عند درجة حرارة الغرفة أي يتم اعتماد شروط تجريبية مناسبة لحدوث مثل هذه التفاعلات ونذكر بعض منها:

I-2-1- التحضير في بيشر عند درجة حرارة الغرفة :

نضع في بيشر حجم معين من المذيب (سواء ماء أو أي مذيب آخر) ونضيف إليه حجم محدد لكل متفاعل ، مع التحريك المستمر حتى الحصول على راسب يرشح ثم يغسل جيدا مع التجفيف عند درجة حرارة منخفضة ثم نحفظ به في علبة صغيرة توجه لإجراء التحاليل فيزيو كيميائية لفترة زمنية قد تستغرق أيام أو أسابيع أو حتى شهور.....، وفي الأخير نقوم بمعاينة المادة بواسطة مجهر ضوئي أو الكتروني وهذا من أجل تحديد طبيعة المادة هل هي بلورات أو مسحوق أو ألياف.



صورة 1: توضيحي لتجربة في بيشر.

وهي من بين الطرق التي أدت إلى تصنيع مركب الايثريوم والذي سوف أسلط عليها الضوء في هذه المذكرة.

I-2-2- التحضير في الحالة الصلبة:

تستخدم هذه الطريقة لإنتاج المركبات البلورية عند درجة حرارة عالية، تكون المتفاعلات فيها في شكل مساحيق مختلطة بنسب متكافئة، يتم سحقها في هاون ويمكن بعد ذلك ضغط المسحوق على شكل حبيبات

باستخدام مكبس أحادي، هذا الاجراء بسيط يسمح بتحضير كميات كبيرة من المنتج في وقت واحد، ولكن المساحيق التي تم الحصول عليها تكون ميكرو مترية.



صورة 2: توضح الأدوات المستعملة لسحق في الحالة الصلبة.

I-2-3- التحضير بطريقة (Sol-gel):

تستخدم طريقة sol و gel كمرحلة وسيطية لتحضير مادة ما، تتفاعل المتفاعلات فيما بينها لتشكل لنا gel ليس راسب كالعادة ، وفق طريقتين :
أولاً: الطريقة DSC (حذف الاستقرار) : تتم انطلاقاً من مادة غروية (خفض الضغط أو إضافة حمض) حتى الوصول إلى حالة هلام (المادة المتشكلة).

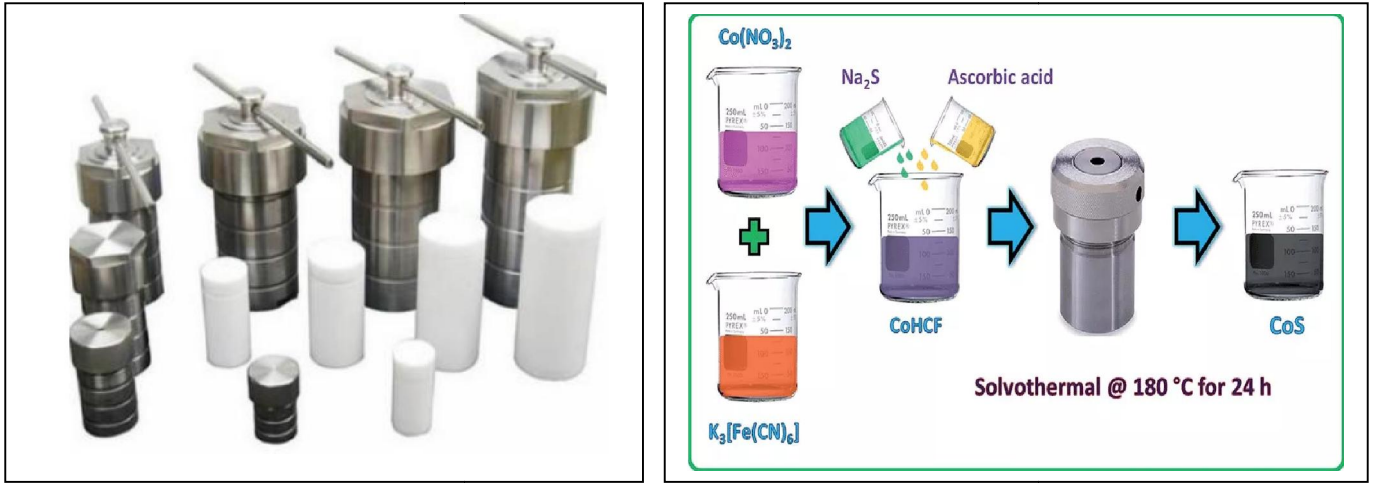
ثانياً : طريقة PEM (البلمرة) : عبارة عن تفاعل يعطي سلسلة طويلة من وحدات متكررة بها روابط هيدروجينية، بحيث ينتج لنا مادة غروية والتي بدورها تؤدي إلى تشكل الهلام ،تحدث وفق تفاعلين أساسيين و هما الإماهة والتكاثف (تحت درجة حرارة الغرفة).

I-2-4- التحضير الحراري في المذيب المائي :

يتم فيها تحضير المعدات وفق تفاعلات مائية عند درجة حرارة منخفضة، أي إذابة المتفاعلات الصلبة في الماء، تتكون الطريقة الحرارية المائية من كواشف تسخين في وجود الماء في حاوية مغلقة، يزيد الضغط ويبقى الماء شديد السخونة سائلاً فوق نقطة الغليان العادي والضغط يتجاوز الضغط الجوي.

I-2-5- التحضير الحراري في المذيب غير المائي :

تتم وفق تفاعلات غير المائية، بمعنى إذابة المتفاعلات الصلبة في أي مذيب آخر (عضوي أو معدني).⁽³⁾
خلال الطريقتين الأخيرتين في تحضير المعدات نستعمل التركيب الجزئي الموضح في الصورة:



صور3: توضح آلية التحضير الحراري في المذيب المائي والغير مائي.

I-2-6- التحضير الميكانيكي:

تسمح هذه التقنية بطحن دقيق وسريع للعينات عند درجات حرارة منخفضة وطاقة أقل تضمن السحق الجيد للحبيبات بفضل التجهيز الذي تحتوي عليه الآلة.



صورة 4: توضح آلية السحق الميكانيكي.

I-3 - تقنيات توصيف المادة:

هناك العديد من الأبحاث العلمية والتجارب المخبرية التي لجأ إليها الباحثين والعلماء من أجل التعرف على البنية الكيميائية للمركبات ولدينا البعض منها :

I-3-1- انعراج الأشعة السينية (RX):**-تمهيد:**

الأشعة السينية هي نطاق من الطيف الكهرومغناطيسي تقع بين أشعة غاما عالية الطاقة والأشعة فوق بنفسجية الأقل في الطاقة ،وبالتالي هي أشعة غير مرئية ،لأن طاقة فوتوناتها أكبر من طاقة الأشعة المرئية بكثير مما يعني أن ترددها كبير وطولها الموجي قصير ،ويعبر عنها بوحدة (A°) .⁽⁴⁾

I-1-3-1- مبدأ انعراج الأشعة السينية

يتم إنتاج الأشعة السينية عادة بتشجيع أنود كهربائي بالكترونات السريعة ،يتم نزع الإلكترونات من الكاتود ومن ثم تسريعها في الفولطية الكاتودين V_0 والأنود، لتصطدم بعدها بالأنود مصدرة الأشعة السينية ،يظهر التحليل الطيفي لهذه الأشعة مايلي :

❖ **طيف الكبح:** يعود إشعاع الكبح إلى انحراف خط سير الإلكترون الذي يحمل الطاقة E_0 نتيجة تعرضه

للحقل الكهرومغناطيسي مما يؤدي إلى تخفيف سرعته وإصدار فوتون يحمل فرق في الطاقة .

❖ **طيف المميز:** خطوط طيفية تظهر عند طاقات محددة، و تشكل مايدعى بالطيف المميز ، يصطدم الإلكترون

المسرع بإحدى الإلكترونات الذرية،نازعا إياه من الطبقة الذرية التي كانت تشغلها مما يؤدي إلى حدوث فراغ في هذه الطبقة ،يقوم أحد الإلكترونات من الطبقات الأعلى بمأ الفراغ، مصدرا الفرق في الطاقة على شكل فوتون ذي طاقة محددة وتعادل فرق في الطاقة بين السويتين.⁽⁵⁾

I-3-1-2- انعراج الأشعة السينية على مسحوق: تقنية تستخدم لتوصيف البنية البلورية لعينة على شكل مسحوق أو

حبيبات بلورية، والتوجه في العينات الصلبة المسحوقة أو متعددة البلورات ،كما تستخدم لتحديد المواد المجهولة ،إذ يعتبر طريقة لتحديد الاجتهادات في المواد البلورية .

I-3-1-3- انعراج الأشعة السينية على البلورة: هي تقنية تستخدم لإيجاد البنية الكاملة للمواد البلورية، فتكون العينة المدروسة

بلورة وحيدة كما يشير اسمها، وتطبق على بلورات الأجسام الغير عضوية البسيطة والجزيئات الضخمة.⁽⁶⁾

I-3-2- مطيافية الأشعة تحت الحمراء (IR):

والتي سوف أسلط عليها الضوء في مذكرتي وهي كالآتي:

تمهيد: ترسل لنا الشمس ضوئها على شكل حزمة من الأشعة تختلف بحسب طول موجتها ،فتتمكن العين البشرية من رؤية قسم محدد منها وتقف عاجزة عن البقية ،لكن حب الإنسان لاستكشاف المجهول دفعه للبحث والنقضي عن تلك الأشعة الغير مرئية، ليكتشف طيف منها يدعى الأشعة تحت الحمراء IR والتي أصبحت أساسا لعدد من الأجهزة التكنولوجية الحديثة.⁽⁷⁾

← فماذا تمثل هذه المطيافية وعلى ماذا تعتمد وماهو الجهاز المستعمل لذلك ؟

I-3-2-1- تعريف الطريقة: هي أحد فروع علم الأطياف التي تتعامل مع المنطقة تحت الحمراء من الطيف

الكهرومغناطيسي ،وتشمل مجموعة من التنفيذات أشهرها مطيافية الامتصاص، وتستخدم هذه المطيافية في تحديد المجاميع الفعالة في المركبات قيد الدراسة ،وتعتبر مطيافية الأشعة تحت الحمراء من الطرق الأساسية في دراسة المواد إذ تمكنا من

التعرف على بنية المادة من دون التأثير على خصائصها وينحصر مجالها ($14000-20\text{cm}^{-1}$)، إذ تنقسم الاهتزازات في الروابط إلى قسمين: الشد و التني.⁽⁸⁾

وجميع أنواع الروابط تستجيب بهذا المقدار من الطاقة لتحداث فيها اهتزازات من هذا النوع لذا تمتص في المنطقة تحت الحمراء بشرط أن يؤدي الامتصاص تغير فيعزم ثنائي القطبي الكهربائي وهذه الاهتزازات مكماة، وحدوثها يعني أن المركب يمتص طاقة تحت الحمراء في جزء معين من الطيف، حيث ينقسم مجال الأشعة تحت الحمراء إلى ثلاث مناطق:

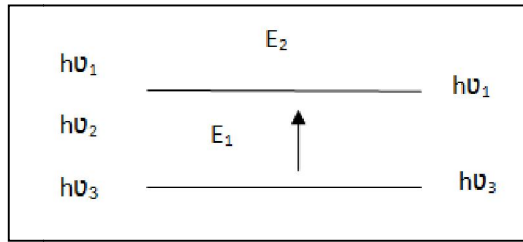
← الأشعة تحت الحمراء البعيدة ($20- 650\text{cm}^{-1}$).

← الأشعة تحت الحمراء المتوسطة ($650-4000\text{cm}^{-1}$).

← الأشعة تحت الحمراء القريبة ($4000-1400\text{cm}^{-1}$).

I-3-2-2-مبدأ مطيافية الأشعة تحت الحمراء :

تهتز الجزيئات الطبيعية تبعا لجميع أنماط اهتزازها ولكن بسيطات ضعيفة جدا ،مع ذلك يملك الفوتون مركبة كهربائية جيبية إذا كان تواتر الفوتون يوافق تواتر اهتزاز الأنماط العادية للجزيء، فان الجزيء سوف يدخل في الرنين ويهتز ببيطات كبيرة جدا، أو بعبارة أخرى الفوتون الذي طاقته تكون مساوية لطاقة الضرورية للجزيء حتى يمر من حالة طاقة منخفضة إلى حالة مثارة يمتص وتحول طاقته إلى طاقة اهتزاز⁽⁸⁾، كما هو موضح في الشكل التالي :



شكل 1: يوضع امتصاص أشعة تحت الحمراء

يؤدي امتصاص بعض الفوتونات الواردة إلى ظهور خطوط توافق الفوتونات التي لم يتم انبعاثها في منحني طيف الأشعة ماتحت الحمراء للجزيء، يميز هذا الامتصاص الروابط الذرات بما أن كل نمط اهتزاز يوافق حركة وحيدة للجزيء، يوجد إذا توافق مباشر بين تواتر الإشعاع الممتص وبنية الجزيء.

I3-3-2--جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء:

هو جهاز بسيط، يتم استخدامه للتعرف على التركيب الكيميائي للمركبات، حيث تمتص كل مادة عضوية عددا مميزا من الموجات يميزها عن غيرها، إذ يصنف من أفضل الأجهزة الطيفية وهذا بفضل مكونات الأساسية الذي يحتوي عليها وهي كالتالي:


مصدر الأشعة تحت الحمراء، حامل للعينة، الكاشف.

ويتميز بذاكرة حاسب آلي تقوم بتحليل الموجات المتجمعة على الكاشف وتحويلها حاسوبيا ورسم الطيف الناتج عن الامتصاص أو بعبارة أخرى عندما يمتص الجزيء الأشعة تحت الحمراء يحدث اهتزاز لذرات هذا الجزيء أو يحدث إنتقال للذرات بنسبة لبعضها البعض في الجزيء، مما يؤدي إلى تغير دوري في طول الروابط الكيميائية ، أو تغير في الزوايا بين الروابط الكيميائية في الجزيء، وقد تنتج كل حركة اهتزازية من حركة ذرتين أو قد تشمل مجموعة من الذرات ويتوقف عدد

الانتقالات الاهتزازية في الجزيء على عدد الذرات المكونة له، ويتوقف طول الموجة أو التردد الذي يحدث عنده هذا الامتصاص على عوامل عديدة منها كتلة الذرة، قوة الروابط المكونة للجزيء والشكل الهندسي لذرات في الجزيء.⁽⁹⁾

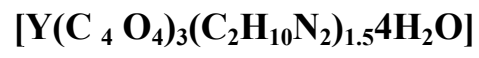
I-3-2-4- نتائج توصيف المادة باستعمال طيف IR:

- الحصول على المجاميع الشائعة كمجموعة كربونيل والنتريل و لهيدروكسيل
- معرفة نوع الروابط بين الذرتين فيما إذا مفردة أو مزدوجة.
- معرفة نوع البروتونات المرتبطة بذرات الكربون.
- معرفة أطوال الروابط.⁽¹⁰⁾



الفصل الثاني

الطريقة التجريبية لتوصيف مركب



مقدمة

يتم تصنيع (تحضير) مركب كيميائي بناء على مزج أو دمج نسب ثابتة من عنصرين أو أكثر لتكوين مادة كيميائية محددة التركيب، أي تكون نسبة المادة الكيميائية أو ما يسمى بالمركب الكيميائي ثابتة وفق اعتبارات فيزيائية محددة⁽¹¹⁾، وبناء على المعلومات المذكورة أعلاه سوف ندرس في هذا الفصل الطريقة التجريبية التي بواسطتها تم توصيف مركب $\{[Y(C_4O_4)_3(H_2O)_4]_{1.5}(C_2H_{10}N_2)\}$ ، والمقتبسة من مرجع المنشور العلمي⁽¹⁾، والذي تم إنجازها من طرف الأستاذة الباحثة N. Audubrand et T. Bataille، L. Zenkhri.

II-1- المواد الكيميائية المستعملة لتحضير مركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}.4H_2O]$:

جدول 1: المواد الكيميائية المستعملة لتحضير مركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}.4H_2O]$.

المتفاعلات	الصيغة الكيميائية	الكمية	الحجم
3.4-dihydroxy-3-2-dione·cyclobutène-1	$H_2C_4O_4$	0.1mmol	
Nitrated'yttrium hexahydraté	$Y(NO_3)_3.6H_2O$		20ml
Ethylène diamine	$C_2H_8N_2$	0.5 mmol	

II-2- طريقة تحضير المركب :

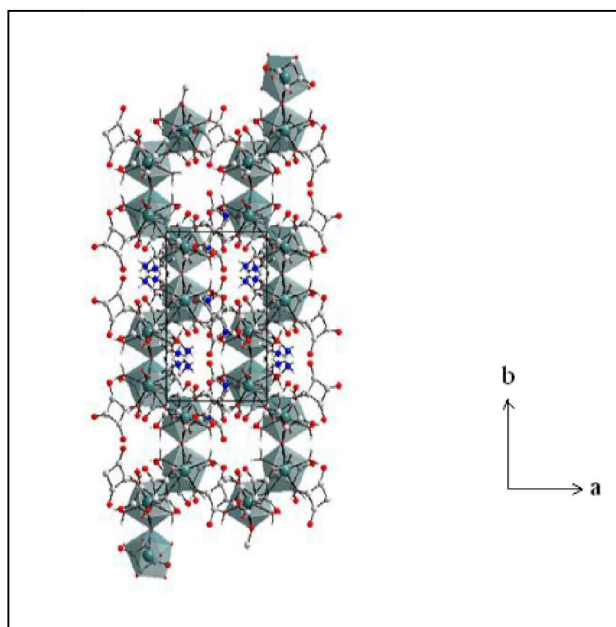
حسب المعلومات الواردة في مرجع المنشور العلمي⁽¹⁾، اتضح أن المركب ذو الصيغة المجملة الأتية $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$ ، تم تحضيره انطلاقاً من محلول مائي، وهذا بإذابة 20ml من $Y(NO_3)_3.6H_2O$ (نترات الايثريوم) في 0.5mmol من $C_2H_8N_2$ و 0.1 mmol من $H_2C_4O_4$ وبعد التبخير البطيء في درجة حرارة الغرفة للمتفاعلات، بعد فترة زمنية (بضع ساعات)، ونلاحظ تكوين المركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$ ⁽¹⁾.

II-3- توصيف المركب :

يتميز المركب الكيميائي بوجود بنية كيميائية خاصة به، يتم التعبير عنها باستخدام الصيغة الجزيئية التي تحدد وتكشف عن نسبة الذرات الموجودة في هذا المركب، كما تكشف أيضاً عن نسبة الذرات الموجودة في الجزيء المكون للذرات التي تحتوي عليها المادة⁽¹²⁾، واعتماداً على ماورد في هذه النبذة سوف نلقي الضوء على وصف المركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$ ⁽¹⁾.

II-4- وصف المركب :

قام الباحثين بتحديد البنية البلورية ل $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5}4H_2O]$ في مجموعة فراغية، ثم التنقيح بواسطة المربعات الصغرى باستخدام برنامج (Logiciel hyperchem)، والذي أدى الى ظهور جميع مواضع ذرات الهيدروجين بفارق فورييه، يوصف التركيب البلوري للمركب من نوع ثنائي الأبعاد (bi-dimensionnelle) ، بحيث يتكون من واحد ونصف من أمينات ثنائية البروتونات $(C_2H_{10}N_2)^{2+}$ ، وذرة اثيريوم محاطة بأربعة جزيئات من الماء وأربعة من ثنائي أنيون رباعي الحمض ، يحاط اثيريوم في الطبيعة بثمانية ذرات أكسجين وبالتالي يعطي قاعدة مربعة من الشكل YO_8 ، تشكلت هذه الوحدات من خلال مساهمة أربعة ذرات أكسجين لأربعة أربطة مربعة، وأربع ذرات أكسجين من أربعة جزيئات تشكل المياه المكونة لسلسلة الخطية Y-squarate-Y (zigzag) على طول المحور (b)، تشارك الأمينات الموجودة بين هذه السلاسل من خلال روابطها القوية N-H...O الهيدروجينية لربط هذه السلاسل وبالتالي تشكل طبقات في مستوى (ab)، كما هو موضح في الشكل 1.(13)



صورة 5: إسقاط الهيكل على طول المحور (b)


II-5- نتائج توصيف المركب :

من خلال التجارب المنجزة من طرف الباحثين⁽¹⁾، توصلوا الى تكوين معقد تناسقي. يتكون هذا المركب من ذرة مركزية متحدة مع كل من المرتبطات الماء، الاثيلين ثنائي أمين و حمض اليكواريك والمعروف بصيغته الكيميائية :



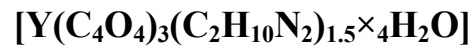
تحليل الدراسات

السابقة



الفصل الثالث

التحليل بمطيافية الأشعة تحت الحمراء لمركب



مقدمة :

تعتمد كافة الطرائق التحليل الطيفي على ظاهرة التأثير المتبادل بين الضوء والمادة ممثلة بذراتها (الطيوف الذرية)، أو جزيئاتها (الطيوف الجزيئية)، ويكون هذا التأثير المتبادل في معظم الأحيان فيزيائياً، أي أن المادة تحافظ على كافة خصائصها عندما يزول هذا التأثير المطبق عليها.⁽¹⁴⁾

سنتهم في هذا الفصل بوصف المجموعات الوظيفية المتواجدة في المركب المعروف بصيغته الكيميائية $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$ ، باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء.

III-1- الهدف من الدراسة :

يتمحور الهدف في هذه الدراسة على الأهمية البارزة التي تعتمد عليها النظرية التجريبية للأشعة تحت الحمراء في تحديد المركبات العضوية (القائمة على الكربون)، حيث قام الباحثين خلال هذه التجربة باستخدام برنامج (Logiciel hyperchem) الذي يسمح لنا بالرؤية العينية للاهتزازات الجزيئية⁽¹⁷⁾ للمواد العضوية ولا عضوية، البلورية وغير بلورية، والمتمحورة في شقين أساسيين:

- اهتزاز التمدد والانكماش .
- اهتزاز الانحناء .

في حالة تسليط ضوء الأشعة تحت الحمراء على المركبات العضوية، يتم امتصاص بعض الترددات فقط مما يجعلنا نطرح التساؤل.

- لماذا تمتص المركبات العضوية بعض الترددات في المرحلة الأولى ؟

لتوضيح ذلك نحتاج الى مناقشة الروابط الكيميائية بمزيد من التفصيل، الروابط الكيميائية ليست صلبة فهي مرنة وقادرة على التمدد والانحناء، في الواقع انهم دائماً في حالة حركة تهتز الروابط القادرة على امتصاص الضوء من الطاقة المماثلة لهذا الاهتزاز، هذا الامتصاص يؤدي الى القفز الى الحالة المثارة .

وبعد لقاء الضوء على المعلومات الأساسية والمفتاحية، سوف تضيف لنا رصيذا غنيا حول اجراءات التحليل النوعي والكمي وأهميتها البارزة في اثناء مناقشة طيف التجريبي بعد مقارنته بالطيف النظري.⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾

III-2- مبدأ الدراسة :

يعتمد توصيف المجموعات الوظيفية على تحليل أطياف الأشعة تحت الحمراء التي تم تسجيلها، وذلك بالرجوع الى جداول البيانات الأشعة تحت الحمراء المستخدمة لتعيين الامتصاصات لمختلف المجموعات الوظيفية الموجودة في المركب المراد توصيفه.⁽¹⁸⁾

III-3- تحديد المعلومات النوعية والكمية من طيف الأشعة تحت الحمراء:

- تمثل الصورة (6) ، طيف الأشعة تحت الحمراء للمركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \cdot 4H_2O]$.

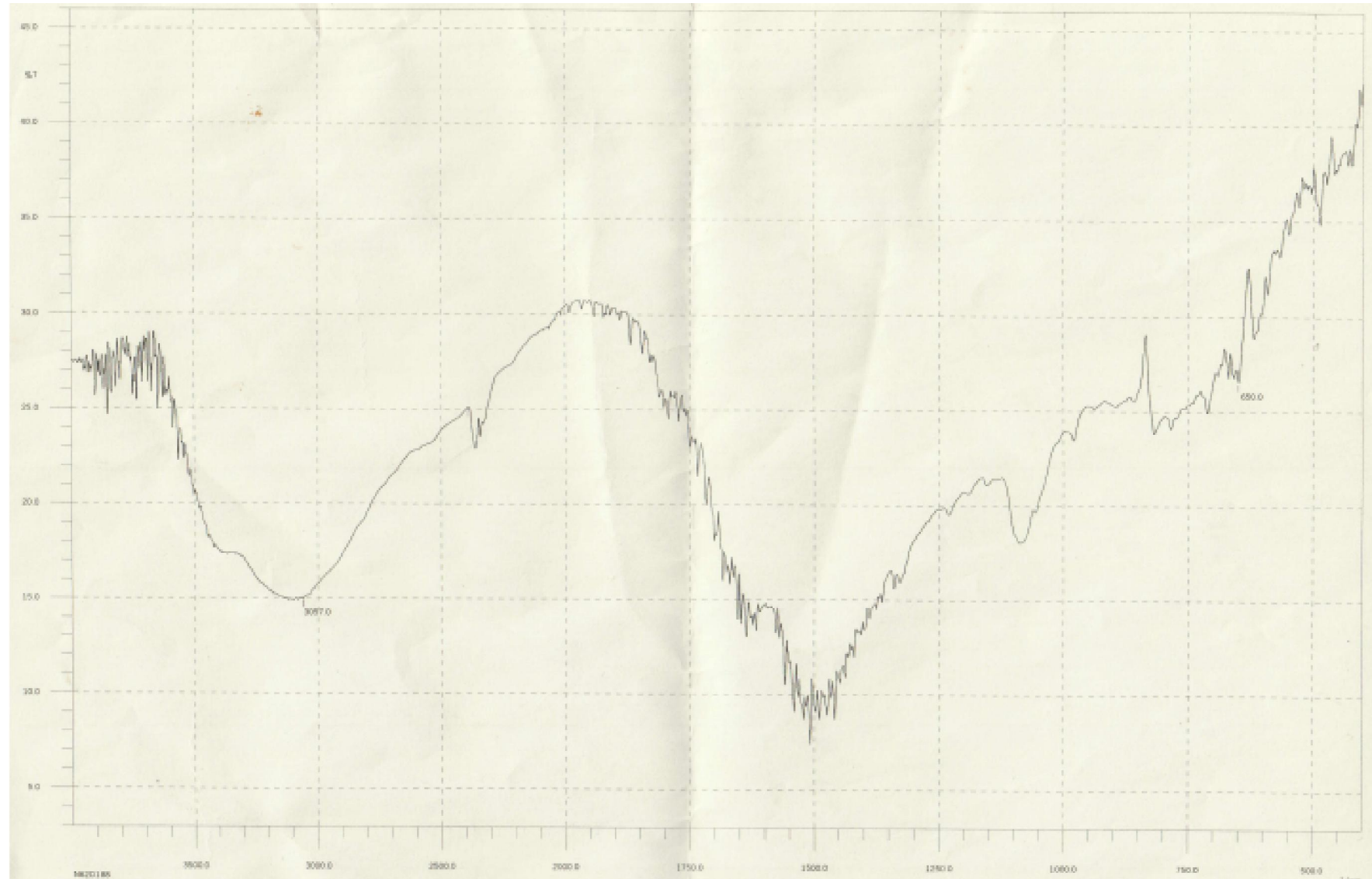
والذي تم تسجيله في نطاق التردد من $(400-4000\text{cm}^{-1})$ في درجة حرارة الغرفة.

- نلاحظ من خلال الطيف المسجل في عملنا التطبيقي، وجود عصابات امتصاص مختلفة، والسبب في هذا الاختلاف هو أطوال الموجات المتغير حسب الروابط وشدة الامتصاص.

- في الجدول (2)، تم سرد مجمل الأرقام الموجية للمجموعات الوظيفية ب (cm^{-1}) مرفقة بنوع الاهتزاز.

جدول 2: الأرقام الموجية للمجموعات الوظيفية ب (cm^{-1}) مرفقة بنوع الاهتزاز.

المرجع	الوظيفية	الرقم الموجي في المجموعة الوظيفية في هذا العمل	نوع الاهتزاز
[18]	حلقة رباعية	1095	$\nu\text{C-C}$
[18]	حلقة رباعية	1456.2	$\nu\text{C-O}$
[18]	الرابط الهيدروجينية ل OH الماء	3057	$\nu\text{O-H}$
[18]		453	$\nu\text{Y-O}$
[19]	حلقة رباعية الماء	448	$\nu\text{Y-O}_{\text{H}_2\text{O}}$
[19]		1525	$\nu\text{C=C}$
[19]	حلقة رباعية	1575	$\nu\text{C=O}$
[19]	حلقة رباعية	3418	$\nu\text{N-H}$
[19]	/	2329.8	$\nu\text{C-H}$
[19]	/	1650	$\nu\text{C-N}$



صورة 6: توضح طيف الأشعة تحت الحمراء للمركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \cdot 4H_2O]$.

III-4- تحليل نتائج الطيف المسجل:

يظهر الطيف قمة عند 1095 cm^{-1} الموافقة لاهتزازات الرابطة (C-C) في الحلقة الرباعية لحمض السكواريك، ذات ذروة ضعيفة وعريضة جدا بينما تمثل القمة 1456.2 cm^{-1} استطالة الرابطة (C-O) لحمض السكواريك عالي الكثافة لنفس الحلقة الأيونية، وتظهر القمة 3057 cm^{-1} اهتزاز الرابطة الهيدروجينية OH لجزيئات الماء، لتمثل الرابطة (Y-O) الموافقة لقيمة 453 cm^{-1} بقمة ضعيفة جدا، والرابطة (Y-O_{H2O})، الموافقة للقيمة 448 cm^{-1} وتظهر الرابطة (C=O) المجموعة الوظيفية الحمضية عند القيمة 1575 cm^{-1} ، في حين تظهر (C=C) اهتزاز الحلقة الرباعية عند القيمة 1525 cm^{-1} ، ويظهر Amine (C-N) امتصاص وظيفة ال Y عند القيمة 1650 cm^{-1} بينما تظهر امتصاص الرابطة (N-H) و (C-H) عند القيمة 3418 cm^{-1} و 2329.8 cm^{-1} على التوالي، وهذا بعد مقارنة النتائج المعمول بها في هذه التجربة مع نتائج الأبحاث العلمية السابقة. (18)(19)



الفصل الرابع

النمذجة الجزيئية للمركب

مقدمة :

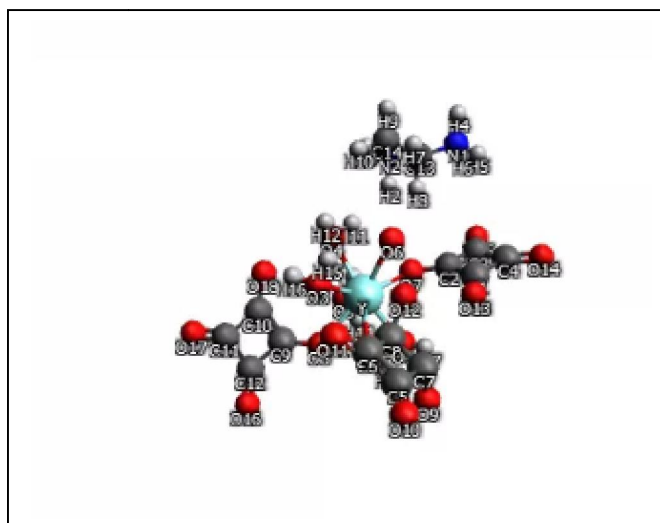
النمذجة الجزيئية (ميكانيكا الجزيئية والديناميكا الجزيئية)، في الحقيقة هي مصطلح عام يجمع تقنيات مختلفة للوصف الجزيئي ، والكيمياء الحاسوبية تسمح بعرض ومحاكاة وتحليل وحساب وتجميع خصائص الجزيئات، كما تسمح أيضا بتحديد بنية وطاقة الجزيئات ، إن نمذجة جزيء بواسطة جهاز الحاسوب تعطي عموما عرض بياني لهندسة أو شكل الجزيء، تتركز الميكانيكا الجزيئية على حقل قوة تجريبي وهي طريقة غير كمية في حقيقة النظام الإلكتروني غير معتمد مباشرة، ولكن نتائجه تكون مقدرة بحساب غير مباشر، الذرات ممثلة بكرات مرتبطة بسيفان أو نوابض وأي تشوه في البنية يؤدي الى تغيير في الطاقة الكامنة في النظام وتتركز الديناميكا الجزيئية على محاكاة الحركات داخل الجزيئات التي يمكن تصورها مباشرة في الزمن الحقيقي، أي تقليل الطاقة وتدقيق البنى ثلاثية الأبعاد (3D).⁽²⁰⁾

IV- وصف منهجية النمذجة الجزيئية:

إن الصيغ المرسومة للمركب المدروس تحمل نسبة أخطاء عالية من ناحية أطوال الروابط وتموضع المجموعات الوظيفية، وبالتالي اجراء الحسابات عليها سيؤدي الى نتائج غير معتمدة، لذلك يعد التحسين الهندسي من أهم الخطوات لدعم دقة الحساب بتطبيق يتم تغيير لتموضع الجزيء المرسوم حتى يصل الى أفضل هيكل مستقر عند أدنى حالة للطاقة، ويعتمد التحسين الهندسي على خوارزميات ومعادلات هندسية صممت خصيصا لتحاكي سلوك الذرات داخل تركيب الجزيئات المختلفة.⁽²¹⁾

IV-1- تصميم المركب:

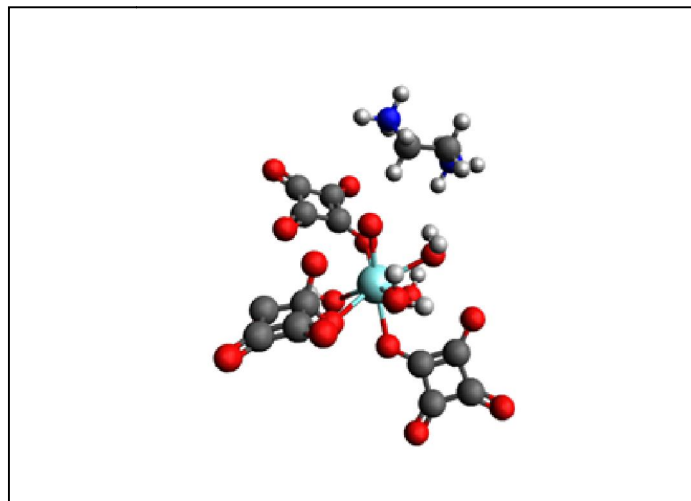
تم تصميم مركب باستعمال برنامج (Avogadro) فحصلنا على المركب المبين في الصورة (7)، يظهر في هذه الصورة المصممة أن المركب ثنائي البعد زواياه غير منتظمة وأطوال الروابط مصممة بشكل عشوائي.



الصورة 7: أثناء عملية التحسين الهندسي

IV-2- التحسين الهندسي للمركب:

تم إجراء التحسين الهندسي بنفس البرنامج مع إختيار الحقل ، أثناء عملية التحسين الهندسي يتم حساب أقل طاقة تجعل المركب مستقر ويتحول الى مركب ثلاثي الأبعاد، تحدد الزوايا بشكل ملائم ويتحسن الشكل الهندسي لها ولأطوال الروابط، فنتحصل على الصورة (8) الموالية.



الصورة 8: صورة بعد انتهاء عملية التحسين الهندسي

IV-3- الخصائص البنوية الجزيئية:**IV-4- الخصائص الذرية:**

خلال عملية التحسين الهندسي لوحظ أن كل ذرة من ذرات المركب (43) شغلت احداثيات في معلم متعامد ومتجانس، Christograph (X، Y، Z)، كما هي موضحة في الملحق رقم (1) بالاضافة الى ذلك تم تحديد التكافؤ المحسوب لكل ذرة.

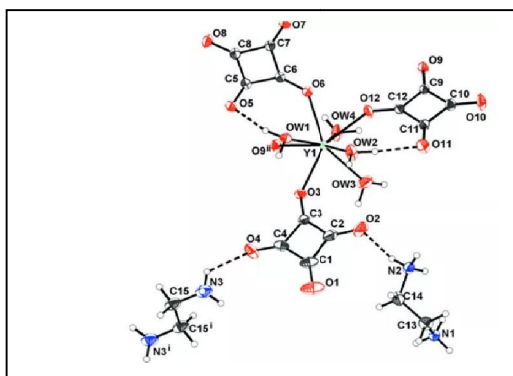
IV-5- خصائص الروابط في الجزيئ :

يوضح الملحق رقم (2) أطوال الروابط التي تم حسابها بواسطة برنامج (Avogadro) للجزيء لمركب $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \cdot 4H_2O]$ بعد التحسين الهندسي.

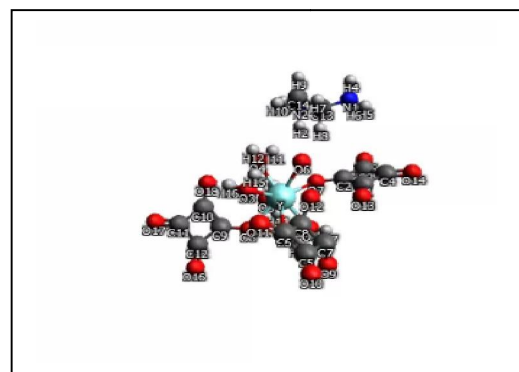
IV-5-1- تحديد نوع الروابط المحيطة بذرة المركزية وقيمتها التجريبية و النظرية، كما هو موضح في الجدول الموالي .

جدول 3 : نوع الروابط المحيطة بذرة المركزية وقيمتها التجريبية و النظرية.

الرقم	نوع الرابطة	طول الرابطة (A°)	طول الرابطة (A°)
		دراسة نظرية	دراسة تجريبية
1	Y-O ₁	2.291	2.297
2	Y-O ₂	2.292	2.304
3	Y-O ₃	2.286	2.314
4	Y-O ₄	2.289	2.351
5	Y-O ₅	2.294	2.377
6	Y-O ₆	2.301	2.386
7	Y-O ₇	2.288	2.409
8	Y-O ₈	2.299	2.428



صورة 10: جزيئة التجريبية



صورة 9: جزيئة النظرية

- الرابطة C-O:

الرقم	نوع الرابطة	طول الرابطة (A°)	طول الرابطة (A°)
		دراسة النظرية	دراسة التجريبية
1	C-O	1.355	1.237
2	C-O	1.351	1.265
3	C-O	1.351	1.261

IV-5-2-1- مقارنة وتحليل نتائج الجدول :

نلاحظ من خلال نتائج الجدول أعلاه أن قيم أطوال الروابط النظرية والتجريبية الخاصة بالرابطة C-C في الحلقة الرباعية متذبذبة نوعا ما إذ سجلت اختلافات نوعا ما ضئيلة مما يفسر حدوث تغير على مستوى الحركة الاهتزازية لذرات في هذه الحلقة مما أثرت على طول الروابط.

أما فيما يخص جدول الخاص بنتائج الرابطة C-O من نفس الحلقة الرباعية، نلاحظ اختلافات في قيمة أطوال الروابط النظرية والتجريبية أي أن القيم التجريبية تكون أقل من القيم النظرية.

IV-5-3- تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة (ethylene diammonium).

جدول 5: قيم ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة (ethylene diammonium).

الرقم	نوع الرابطة	طول الرابطة (A°)	طول الرابطة (A°)
		دراسة النظرية	دراسة التجريبية
1	C-C	1.516	1.504
2	N-C	1.452	1.487
3	C-N	1.452	1.491

IV-5-3-1- مقارنة وتحليل نتائج الجدول:

نلاحظ من خلال نتائج الجدول أعلاه تقارب كبير في قيم أطوال الروابط التجريبية والنظرية وهذا ما يؤكد استقرار الرابطة الهيدروجينية للمركب خلال هذا العمل مما أدى الى اتزان في البنية الهندسية له.

IV-5-4- تحديد قيمة ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة الماء (H₂O):

جدول 6: قيم ونوع الروابط النظرية والتجريبية في جزيئة الماء (H₂O).

الرقم	نوع الرابطة	طول الرابطة (A°)	طول الرابطة (A°)
		دراسة النظرية	دراسة التجريبية
1	O-H	0.989	0.94
2	O-H	0.988	0.93
3	O-H	0.989	0.94
4	O-H	0.987	0.94
5	O-H	0.988	0.93
6	O-H	0.989	0.94

IV-5-4-1- مقارنة وتحليل نتائج الجدول :

نلاحظ من خلال نتائج الجدول أعلاه أن قيم أطوال الروابط الخاصة بجزيئة الماء في المرحلة النظرية والتجريبية متقاربة جدا وبما أن جزيئة H₂O مستقطبة لجزيئتي الماء المتجاورتين تكون رابطة هيدروجينية وفق الفرق في الكهروسالبية الى ذرة الأكسجين، مما تضمن استقرار على مستوى روابط هذا المركب (1.2.3).

IV-6- خصائص الزوايا :

بعد اجراء عملية التحسين الهندسي بواسطة البرنامج المستخدم خلال التجارب العملية، تم تحديد قيمة الزوايا بين ذرات أثناء العمل كما يوضحه الملحق رقم (3).

1-6-IV- تحديد قيمة الزاوية للرابطة (O-Y) النظرية والتجريبية:

جدول 7 : قيم الزاوية للرابطة (O-Y) النظرية والتجريبية.

الرقم	نوع الرابطة	طول الرابطة (A°)	طول الرابطة (A°)
		دراسة النظرية	دراسة التجريبية
1	O-Y	68.93	152.48
2	O-Y	119.61	73.35
3	O-Y	139.48	131.37
4	O-Y	67.10	137.19
5	O-Y	75.58	68.55
6	O-Y	71.40	77.00
7	O-Y	139.38	75.14
8	O-Y	84.69	81.46
9	O-Y	83.85	116.50
10	O-Y	133.29	147.03
11	O-Y	114.86	87.89
12	O-Y	75.14	73.57
13	O-Y	150.50	150.02
14	O-Y	85.47	103.86
15	O-Y	131.22	79.37
16	O-Y	68.02	74.04
17	O-Y	151.70	116.61
18	O-Y	73.37	81.66

الخاتمة

- خلال هذا العمل تم دراسة طريقة التجريبية لتوصيف مركب $[Y(C_4O_4)_3 (C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$ والتي تم إنجازها من طرف الأساتذة الباحثين N.Audebrand and T.bataille، L.Zenkhri وهذا باستخدام تقنية التحليل الطيفي للأشعة السينية RX.
- وبناء على الدراسات السابقة التي تم إنجازها، وبالإعتماد على الصيغة المجملة والبنية البلورية للمركب المدروس، تناولنا الدراسة في المذكرة حول التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء لنفس المركب مع أخذ بعين الإعتبار الظروف التجريبية المتخذة خلال العمل التطبيقي (درجة حرارة الغرفة، تحديد نسبة المتفاعلات)، مما سمح لنا بالتعرف وتحديد المجموعات الوظيفية المتواجدة في المركب وتفسير عصابات الامتصاص، وللحصول على شكل هندسي أكثر استقرار للمركب اعتمدنا دراسة النمذجة الجزيئية بواسطة برنامج (Avogadro).
- نستخلص من خلال هذه الدراسة الحديثة أن التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء له دورا بارزا إذ يعطي فكرة واضحة ومفصلة حول نوع الذرات والظواهر الفيزيائية التي تحدث أثناء تسليط حزمة من الضوء على المادة المدروسة.

ملاحق

قائمة الملاحق

	Element	Type	Valence	Formal Charge	Partial Charge	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
Atom 1	Y	Y	8	0	0,000	-1,68752	0,29457	0,04850
Atom 2	C	C2	3	0	0,000	-5,51245	0,55598	0,30100
Atom 3	C	C2	3	0	0,000	-4,87112	0,78836	-0,81696
Atom 4	C	C3	3	0	0,000	-6,11752	1,07593	-1,68351
Atom 5	C	C2	3	0	0,000	-6,75178	0,76919	-0,33374
Atom 6	C	C2	3	0	0,000	-1,40963	3,94334	-0,33750
Atom 7	C	C2	3	0	0,000	-0,42700	3,27535	0,28688
Atom 8	C	C2	3	0	0,000	-0,74539	5,23161	-0,12782
Atom 9	C	C2	3	0	0,000	0,31829	4,51067	0,54703
Atom 10	C	C2	3	0	0,000	1,14436	-1,31535	-0,40486
Atom 11	C	C2	3	0	0,000	2,47351	-1,77748	-0,81763
Atom 12	C	C2	3	0	0,000	2,20929	-3,01251	-0,10544
Atom 13	C	C2	3	0	0,000	0,90213	-2,45999	0,25447
Atom 14	O	O2	2	0	0,000	-0,21828	1,97220	0,57581
Atom 15	O	O3	3	0	0,000	-2,58852	1,72144	1,60093
Atom 16	O	O2	2	0	0,000	-3,56212	0,77559	-1,16933
Atom 17	O	O3	3	0	0,000	-2,98957	-1,27189	1,09482
Atom 18	O	O2	2	0	0,000	0,46353	-0,16474	-0,60485
Atom 19	O	O3	1	0	0,000	-1,17481	1,26410	-1,97444
Atom 20	O	O3	1	0	0,000	-0,64332	-0,24074	2,01302
Atom 21	O	O3	3	0	0,000	-1,92501	-1,39808	-1,48953
Atom 22	C	C3	2	0	0,000	3,38443	2,27915	0,72041
Atom 23	C	C3	2	0	0,000	2,90642	1,24080	1,71725
Atom 24	N	N3	1	0	0,000	3,12405	1,82521	-0,63415
Atom 25	N	N3	1	0	0,000	3,78652	0,08601	1,69029
Atom 26	O	O2	1	0	0,000	-5,14844	0,21253	1,54853
Atom 27	O	O2	1	0	0,000	-7,90648	0,64202	0,04035
Atom 28	O	O3	1	0	0,000	-6,33978	0,03397	-2,58497
Atom 29	O	O2	1	0	0,000	-1,00005	6,40032	-0,36798
Atom 30	O	O2	1	0	0,000	1,34892	4,80911	1,12752
Atom 31	O	O2	1	0	0,000	3,41121	-1,30828	-1,44126
Atom 32	O	O2	1	0	0,000	2,82708	-4,03600	0,13785
Atom 33	O	O2	1	0	0,000	-2,56219	3,55484	-0,91305
Atom 34	O	O2	1	0	0,000	-0,13444	-2,90446	0,98476
Atom 35	H	HO	1	0	0,000	-2,92765	1,15437	2,33724
Atom 36	H	HO	1	0	0,000	-3,38894	2,13135	1,19133
Atom 37	H	HO	1	0	0,000	-3,58801	-1,64942	0,40252
Atom 38	H	HO	1	0	0,000	-2,40145	-2,02314	1,34855
Atom 39	H	HO	1	0	0,000	-1,64136	-2,23204	-1,04083
Atom 40	H	HO	1	0	0,000	-1,24723	-1,25399	-2,19610

الملحق 1: يوضع إحداثيات الذرات في معلم متعامد ومتجانس (قيم النظرية)

	Type	Start Atom	End Atom	Bond Order	Rotatable	Length (Å)
Bond 1	C-C	C1	C2	2	No	1,30964
Bond 2	C-C	C2	C3	1	No	1,54503
Bond 3	C-C	C3	C4	1	No	1,52257
Bond 4	C-C	C4	C1	1	No	1,40865
Bond 5	C-C	C5	C6	2	No	1,34224
Bond 6	C-C	C5	C7	1	No	1,46451
Bond 7	C-C	C7	C8	1	No	1,45141
Bond 8	C-C	C6	C8	1	No	1,466
Bond 9	C-C	C9	C10	1	No	1,46649
Bond 10	C-C	C10	C11	1	No	1,44994
Bond 11	C-C	C11	C12	1	No	1,46406
Bond 12	C-C	C9	C12	2	No	1,342
Bond 13	O-Y	O1	Y	1	Yes	2,291
Bond 14	O-Y	O2	Y	1	No	2,292
Bond 15	O-Y	O3	Y	1	Yes	2,286
Bond 16	O-Y	O4	Y	1	No	2,289
Bond 17	O-Y	O5	Y	1	Yes	2,294
Bond 18	O-Y	O6	Y	1	No	2,301
Bond 19	O-Y	O7	Y	1	No	2,288
Bond 20	Y-O	Y	O8	1	No	2,299
Bond 21	C-O	C2	O3	1	Yes	1,355
Bond 22	C-O	C6	O1	1	Yes	1,351
Bond 23	O-C	O5	C9	1	Yes	1,35182
Bond 24	C-C	C13	C14	1	Yes	1,51669
Bond 25	N-C	N1	C13	1	No	1,45214
Bond 26	C-N	C14	N2	1	No	1,45219
Bond 27	O-C	O9	C1	1	No	1,34417
Bond 28	O-C	O10	C4	2	No	1,22043
Bond 29	C-O	C3	O11	1	No	1,39561
Bond 30	O-C	O12	C7	2	No	1,22
Bond 31	C-O	C8	O13	2	No	1,21993
Bond 32	C-O	C10	O14	2	No	1,21998
Bond 33	C-O	C11	O15	2	No	1,22
Bond 34	O-C	O16	C5	1	No	1,34558

Bond 35	O-C	O17	C12	1	No	1,34364
Bond 36	H-O	H1	O2	1	No	0,989307
Bond 37	H-O	H2	O2	1	No	0,988168
Bond 38	O-H	O4	H3	1	No	0,989921
Bond 39	O-H	O4	H4	1	No	0,98724
Bond 40	O-H	O8	H5	1	No	0,988573
Bond 41	O-H	O8	H6	1	No	0,989646

الملحق رقم 02: أطوال الروابط للجزيء بعد التحسين الهندسي (قيم نظرية)

	Type	Start Atom	Vertex	End Atom	Angle (°)
Angle 1	OYO	O1	Y	O2	68,9353
Angle 2	OYO	O1	Y	O3	119,6156
Angle 3	OYO	O1	Y	O4	139,4829
Angle 4	OYO	O1	Y	O5	67,1081
Angle 5	OYO	O1	Y	O6	75,5807
Angle 6	OYO	O1	Y	O7	71,4055
Angle 7	OYO	O1	Y	O8	139,3826
Angle 8	OYO	O2	Y	O3	84,6950
Angle 9	OYO	O2	Y	O4	83,8520
Angle 10	OYO	O2	Y	O5	133,2915
Angle 11	OYO	O2	Y	O6	114,8696
Angle 12	OYO	O2	Y	O7	75,1457
Angle 13	OYO	O2	Y	O8	150,5006
Angle 14	OYO	O3	Y	O4	85,4751
Angle 15	OYO	O3	Y	O5	131,2242
Angle 16	OYO	O3	Y	O6	68,0265
Angle 17	OYO	O3	Y	O7	151,7083
Angle 18	OYO	O3	Y	O8	73,3772
Angle 19	OYO	O4	Y	O5	121,7497
Angle 20	OYO	O4	Y	O6	144,7438
Angle 21	OYO	O4	Y	O7	72,9725
Angle 22	OYO	O4	Y	O8	75,1275

Angle 23	OYO	O5	Y	O6	67,9844
Angle 24	OYO	O5	Y	O7	76,6936
Angle 25	OYO	O5	Y	O8	76,0547
Angle 26	OYO	O6	Y	O7	138,7310
Angle 27	OYO	O6	Y	O8	75,2345
Angle 28	OYO	O7	Y	O8	116,6911
Angle 29	CCC	C2	C1	C4	91,1072
Angle 30	CCO	C2	C1	O9	134,8288
Angle 31	CCO	C4	C1	O9	134,0385
Angle 32	CCC	C1	C2	C3	96,7045
Angle 33	CCO	C1	C2	O3	133,8724
Angle 34	CCO	C3	C2	O3	129,4148
Angle 35	CCC	C2	C3	C4	78,5422
Angle 36	CCO	C2	C3	O11	110,5970
Angle 37	CCO	C4	C3	O11	110,8464
Angle 38	CCC	C1	C4	C3	93,6384
Angle 39	CCO	C3	C4	O10	133,3819
Angle 40	CCO	C1	C4	O10	132,7283
Angle 41	CCC	C6	C5	C7	92,2431
Angle 42	CCO	C6	C5	O16	133,0274
Angle 43	CCO	C7	C5	O16	134,7251
Angle 44	CCC	C5	C6	C8	92,0266
Angle 45	CCO	C5	C6	O1	133,8378
Angle 46	CCO	C8	C6	O1	134,1311
Angle 47	CCC	C5	C7	C8	87,8237
Angle 48	CCO	C5	C7	O12	136,0394
Angle 49	CCO	C8	C7	O12	136,0816
Angle 50	CCC	C6	C8	C7	87,9065
Angle 51	CCO	C7	C8	O13	135,9617
Angle 52	CCO	C6	C8	O13	136,0607
Angle 53	CCC	C10	C9	C12	91,8953
Angle 54	CCO	C10	C9	O5	133,0824
Angle 55	CCO	C12	C9	O5	135,0113
Angle 56	CCC	C9	C10	C11	87,9946
Angle 57	CCO	C9	C10	O14	135,9984
Angle 58	CCO	C11	C10	O14	135,9509
Angle 59	CCC	C10	C11	C12	87,8218
Angle 60	CCO	C10	C11	O15	136,0760
Angle 61	CCO	C12	C11	O15	136,0294
Angle 62	CCC	C9	C12	C11	92,2883
Angle 63	CCO	C11	C12	O17	134,2318
Angle 64	CCO	C9	C12	O17	133,4663

Angle 65	YOC	Y	O1	C6	123,9103
Angle 66	YOH	Y	O2	H1	106,3740
Angle 67	YOH	Y	O2	H2	107,2045
Angle 68	HOH	H1	O2	H2	105,5814
Angle 69	YOC	Y	O3	C2	130,9312
Angle 70	YOH	Y	O4	H3	106,5635
Angle 71	YOH	Y	O4	H4	107,4129
Angle 72	HOH	H3	O4	H4	104,4572
Angle 73	YOC	Y	O5	C9	126,8983
Angle 74	YOH	Y	O8	H5	106,7242
Angle 75	YOH	Y	O8	H6	107,4362
Angle 76	HOH	H5	O8	H6	104,4998
Angle 77	CCN	C14	C13	N1	110,0326
Angle 78	CCN	C13	C14	N2	109,9500

ملحق رقم 03: قيم الزوايا النظرية

المراجع:

- [1]. L. Zenkhri، N.Audebrand، T.Bataille، (Yttrium Ethylene Diammonium Squarate Tetrahydrate)، (2011)، «Actacryst. M529-M530»
- [2]. A. Zawia، «Iupac de finition of complex، (18-february-2017)»
- [3]. L. Zenkhri، Coers Nano moteriaux et materiouxspeifique، Master 2^{ème} Chimie Analitique، Département chimie université Kasdimarbah Ouargla، (2018-2019).
- [4]. ن. علاء جليل كلية العلوم (قسم الكيمياء)، جامعة القاديسية (17:10).
- [5]. س. حداد (الفيزياء النووية) جامعة دمشق (2015) من موقع www.radiation physics.com
- [6]. Arab.ency.com.sytechdetail (165761)، العربية الموسوعة
- [7]. Ryandebe.whatisnfrared.dans le cite www.Lifewire.com (cité: 20 décembre 2018).
- [8]. كتاب. ألف باء. الأشعة تحت الحمراء أ. مالك الراوي – دار الحكمة للطباعة والنشر 1992م.
- [9]. كتاب التحليل الطيفي باستخدام الأشعة – ع. سليمان أبو المجد الأكاديمية الحديثة للكتاب الجامعي (2011م)
- [10]. خ. جواد كادم المعموري، جامعة بابل كلية العلوم (قسم الكيمياء)، (18 مارس 2016)، (20:42:06).
- [11]. إ. الحيارى، كيمياء (تعريف المركب)، (29 ديسمبر 2015).
- [12]. ح. الشافعي، كيمياء (تعريف المركب)، (23 ماي 2019).
- [13]. L. Zenkhri «Synthèse et caractérisations physico-chimique de Nouveaux matériaux hybride»، Mémoire Magister، département Science de la matière، Université KasdiMarbah Ouargla، (2010)، Résultat et discussion، (P:54).
- [14]. ع. الشهامة، دراسة تحليل طيفي، محاضرة التحليل الألي، كلية الصيدلة، جامعة حماة سوريا.
- [15]. من موقع WWW.ChemistreyScience.com أطلع عليه في (26-04-2021)، (11:15).
- [16]. م. عبد المجد، مكتبة الفيزياء العربية (فيزياء كوم)، من موقع Physics.Pdf.com أطلع عليه في (20-04-2011)، (10:35).
- [17]. B. REIGF، VG. ADELANTADOJ. and Moreno M.C.N. Talanta 58: 811-821، (2002).
- [18]. م. باسة، ع. سدراتي (تحضير المواد المهجنة توصيفها ودراسة فعاليتها)، صفحة (36). كلية الرياضيات وعلوم المادة، قسم الكيمياء جامعة قاصدي مرباح ورقلة (2017-2018).
- [19]. M. Roza، K. Cherifa، (complexe de Cu(II)·Ni(II)·et Co(II) avec de bases de schiff dérivées d'acides aminés: Synthèse caractérisation et propriétés biologiques، Mémoire de master chimie de matriaux، Université de Bejaia (2015-2016)، Expérimentale. (P:20.21.22).

[20]. ر. الزواري أحمد (دراسة البرامترات المحبة للماء والكارهة للماء على سطح مشترك لمضادات الحيوية المكروبيدية ذات 16 لذرة)، مذكرة ماجستير في الكيمياء التحليلية ومراقبة البيئة، قسم هندسة الطرائق، جامعة ورقلة (2004-2005).

[21]. M. Mahjoub, A. Ahwedi, B. Hosouna (Molecular modelling of the jarlic compound with the deta- cyclodextrin at the best computer simulation, journal of Nature life and Applied sciences, volume (3), Issue (3): 30sep sebha university libyap: 24, (2019).

[22]. dans le cite [WWW.link.springer.com,article\(10.1007/s10971-020-05312\).17Mai2020](http://WWW.link.springer.com/article(10.1007/s10971-020-05312).17Mai2020).

[23] dans le cite www.e3arbi.com,out.محمد العتوم. (2020).

[24].أ. الحمدان (تحضير وتوصيف ودراسة حركية وترموديناميكية لبعض المعقدات المجموعتين IB)، رسالة ماجستير في الكيمياء جامعة دمشق(2018).

[25].D. K. Singh and T. Gupta, (2015), Phosphorus Inorganic Chemistry In Encyclopedia Of InorganicChemistry, Garmany, (P: 205).

[26].ع. زامل شلال، (دراسة أنماط الاهتزاز والخواص الكيميائية لجزيئة 2-كلوروتلوين نظريا باستخدام طريقة شبه تجريبية PM3)، رسالة ماجستير قسم الكيمياء، جامعة القاديسية (2019).

المخلص:

خلال هذا العمل، تطرقنا إلى دراسة المركب ذي الصيغة المجملة $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$. تم تحضير هذا المركب من طرف باحثين سنة 2011 انطلاقا من متفاعلات منحلّة في الماء عند درجة حرارة الغرفة، كما تم تحديد البنية البلورية ووصف الشبكة البلورية لهذا المركب وتصنيفه ضمن قواعد المعطيات COD. باستخدام برنامج ((Logiciel Avogadro)، واعتمادا على نتائج الباحثين قمنا بإجراء التحليل الطيفي بتقنية الأشعة تحت الحمراء تجريبيا لنفس المركب مع تحديد المعلومات النوعية والكمية له، حيث تمكنا من تعيين أهم عصابات المجموعات الوظيفية، ثم استدرجنا بعد ذلك دراسة النمذجة الجزيئية للحصول على شكل هندسي أكثر استقرارا، ثم مقارنة وتفسير نتائج الروابط والزوايا النظرية والتجريبية لهذا المركب.

الكلمات المفتاحية : النمذجة الجزيئية، مطيافية تحت الحمراء، برنامج أفونادرو، البنية البلورية.

Résumé:

Ce travail présente l'étude du composé de formule globale $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$. Ce composé a été préparé par des chercheurs en 2011 à partir de réactifs solubles dans l'eau à température ambiante. La structure cristalline a été déterminée, le réseau cristallin de ce composé a été décrit et la structure cristalline est classée parmi les bases de données COD. En utilisant le programme (Logiciel Avogadro), et sur la base des résultats des chercheurs, nous avons mené une étude de spectroscopie infrarouge expérimentale du même composé avec des informations qualitatives et quantitatives, où nous avons pu identifier les bandes les plus importants des groupements fonctionnels, puis nous avons induit l'étude de la modélisation moléculaire pour obtenir une forme géométrique plus stable. Enfin comparer et interpréter les résultats des liaisons et des angles théoriques et expérimentaux pour ce composé.

Mots clés : modélisation moléculaire, spectroscopie infrarouge, programme Avothadro, structure

Abstract:

This work presents the study of the compound of the global formula $[Y(C_4O_4)_3(C_2H_{10}N_2)_{1.5} \times 4H_2O]$. This compound was prepared by researchers in 2011 from reagents soluble in water at room temperature. The crystal structure has been determined, the crystal lattice of this compound has been described, and the crystal structure is listed in COD databases. Using the program (Avogadro Software), and based on the results of the researchers, we conducted an experimental infrared spectroscopy study of the same compound with qualitative and quantitative information, where we were able to identify the most important bands of functional groupings, then we induced the study of molecular modeling to obtain a more stable geometric shape. Finally compare and interpret the results of the theoretical and experimental bonds and angles for this compound.

Keywords: molecular modeling, infrared spectroscopy, Avothadro program, crystal structure.