

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 الطالبتين: بن التاج مروة- زيغمي مريم

بعنوان:

دراسة نظرية حول تطبيقات مطيافية الأشعة تحت
الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير
العضوية

نوقشت علنا يوم: 2022/06/12

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيسا	أستاذ محاضر أ. جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	د. مصطفى بن علي
مناقشا	أستاذ محاضر أ. جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	د. نجيمي محمد السعيد
مقررا	أستاذ محاضر أ. جامعة قاصدي مرباح- ورقلة	د. علاوي عبد الفتاح

الموسم الجامعي: 2022/2021م

الإهداء

أهدي ثمرة جهدي هذا.....

إلى اعز ملاك على العين والقلب

إلى التي مسحت دمعتي عند العناء ورسمت فرحتي يوم الهناء

إلى من كان دعائها سر نجاحي وبلسم جراحي, إلى بسمه الحياة وسر الوجود نبع الحنان

أمي الحبيبة حفظها الله...

إلى الذي وهبني كل مايملك حتى أحقق له أماله إلى من كان يدفعني قدما نحو الأمام لنيل المبتغى, إلى

مصدر قوتي وإلهامي, إلى من احمل اسمه بكل افتخار

أبي العزيز حفظه الله وأطال في عمره...

إلى الذين تقاسموا معي عبء الحياة, وكانوا لي سندا خطوة خطوة في انجاز هذا العمل

إلى كافة إخوتي.

إلى من عشت معهم اسعد اللحظات, إلى من سأفتقدهم دوما

أصدقائي.

إلى منارة العلم والعلماء

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

إلى الذين حملو أقدس رسالة هذه الحياة

الأساتذة الأفاضل لهم كل الشكر والامتنان

إلى كل من يؤمن بأن بذور نجاح التغيير هي في ذواتنا وفي أنفسنا قبل أن تكون في أشياء أخرى

قال الله تعالى : " إن الله لا يغير ما بقوم حتى يغيروا ما بأنفسهم...."

"بن التاج مروة"

الإهداء

أهدي عملي هذا بعد تيسير من الله سبحانه وتعالى
إلى التي جعل الله الجنة تحت أقدامها، إلى ريحانة حياتي وبهجتها التي غمرتني بعطفها وأنارت درب
حياتي بحبها ، إلى من كان دعاءها سر ناجحي

أمي العزيزة.

إلى من زرع في نفسي حب العلم إلى من احمل اسمه بكل افتخار.. أرجو الله أن يمد في عمرك

والدي العزيز.

إلى شموع قلبي إخوتي الأعمام وأخص بذكر أخي الكبير محمد عبد الباسط حفظهم الله ورعاهم .
إلى الأمان والسند... إلى من وقف بجانبني وساندني في إتمام رسالتي على أكمل وجه

زوجي العزيز.

إلى عائلتي ثانياً عائلة زوجي حفظهم الله ورعاهم
إلى أساتذتي في جميع أطوار مسيرتي الدراسية... وأخص بالذكر
الأستاذ علاوي عبد الفتاح الذي كان مصباح أنار دربنا في هذا العمل ، وصبر على كل أخطائنا أسأل الله
أن يجعلها في ميزان حسناته

"مريم زيغمي"

الشكر والتقدير

"من لم يشكر الناس لم يشكر الله"

الشكر في الأول والأخير إلى الله رب العزة والجلال...ولمن بعث ليهدينا طريق الرشاد نبينا محمد صل
الله عليه وسلم

بعد شكر الله سبحانه وتعالى على توفيقه لنا لإتمام هذا البحث المتواضع

نتقدم بجزيل الشكر والعرفان إلى أستاذنا الفاضل **د. علاوي عبد الفتاح** على حرصه الكبير طيلة إشرافه لنا
على انجاز هذا العمل وعلى ما قدمه لنا من توجيهات ونصائح قيمة ساهمت في إطراء موضوع دراستنا
في جوانبها المختلفة فله منا أسمى معاني الشكر والتقدير وجزاك الله خير الجزاء وأبقاك منبع نور للعلم
وظلابه.

كما نتقدم بخالص الشكر والتقدير إلى أستاذتنا الكرام لجنة المناقشة الأستاذ الفاضل **د. مصطفى بن علي**
والأستاذ **د. نجيمي محمد السعيد** على قبولهما هذا العمل المتواضع.

كما نتقدم بالشكر والعرفان إلى طاقم كلية الرياضيات وعلوم المادة من أساتذة وعاملين وطلبة خاصة طلبة
سنة ثانية ماستر " كيمياء تحليلية " دفعة 2022 كما لا ننسى شكر كل من قدم لنا يد العون والمساعدة كل
من دعمنا ودعانا.

"مروة ، مريم"

قائمة المحتويات:

الترقيم	العنوان	الصفحة
	الإهداء	
	الشكر والتقدير	
I	قائمة المحتويات	
IV	قائمة الأشكال	
VI	قائمة الجداول	
VII	قائمة الاختصارات والرموز	
1	المقدمة العامة	
3	مراجع المقدمة	
الفصل الأول : مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)		
I.1	تمهيد	5
2.I	الشعاع الكهرومغناطيسي	5
1.2.I	الفوتون	6
2.2.I	خصائص الموجة الكهرومغناطيسية	6
3.2.I	امتصاص الضوء	8
3.I	طرق التحليل الطيفي	10
1.3.I	الأشعة تحت الحمراء	10
2.3.I	مطيافية الأشعة تحت الحمراء	11
3.3.I	جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء	12
4.3.I	مصادر الأشعة تحت الحمراء	13
5.3.I	مبدأ امتصاص الأشعة تحت الحمراء	14
4.I	نظرية الاهتزازات	14
1.4.I	أنواع الاهتزازات	15
2.4.I	بعض الأمثلة لمختلف الأوضاع الاهتزازية الجزيئية	17
5. I	مطيافية متحولة فورييه للأشعة تحت الحمراء (FTIR)	18

18	مطياف FTIR	1.5.I
19	مقياس التداخل ميكلسون	2.5.I
20	التعبير عن مخطط التداخل	3.5.I
22	عموميات حول الطيف	4.5.I
23	الدقة الطيفية	5.5.I
24	طرق قياس مطياف FTIR	6.5.I
26	خصائص مطيافية الأشعة تحت الحمراء	7.5.I
27	مجالات تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء بشكل عام	8.5.I
28	المراجع I	
الفصل الثاني : المركبات غير العضوية		
31	تمهيد	1.II
31	المركبات غير العضوية	2.II
32	مكونات المركبات غير العضوية	1.2.II
33	أمثلة على مركبات غير عضوية في حياتنا اليومية	2.2.II
34	أصناف المركبات غير العضوية	3.2.II
35	مركبات التناسق	4.2.II
37	الصيغ الهيكلية للمركبات غير العضوية	5.2.II
38	تسمية المركبات غير العضوية	6.2.II
44	المقارنة بين الخصائص الكيميائية للمركبات العضوية وغير العضوية	7.2.II
44	خصائص المركبات غير العضوية	8.2.II
45	استخدامات المركبات غير العضوية	9.2.II
45	مخاطر المركبات غير العضوية	10.2.II
47	المراجع II	
الفصل الثالث : تطبيقات مطيافية FTIR في تشخيص المركبات غير العضوية		
50	تمهيد	1.III
50	دراسات تطبيقات مطيافية FTIR في تشخيص المركبات غير العضوية	2.III
50	دراسة التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء للرواسب غير العضوية من المياه في المبادلات الحرارية المنزلية والتقنية	1.2.III

53	دراسة توليف وتوصيف أكسيد المغنزيوم (MgO) الجسيمات النانوية بطريقة الترسيب المشترك	2.2.III
54	دراسة هيكلية وتغيرات سطحية لمركب SiO ₂	3..2.III
56	دراسة هيكلية فسفور التيتانات الكالسيوم مع مادة PRASEODYMIUM	4.2.III
58	توصيف الهيكلية للألمنيوم السيليكون في نوعان من عينات الرماد المتطاير	5..2.III
59	دراسة توصيف معادن الهيماتيت والمغنثيت باستخدام طيف الأشعة تحت الحمراء	6.2.III
62	دراسة FTIR للالومينا الجسيمات النانوية باستخدام طريقة الترسيب المشترك	7..2.III
63	دراسة توصيف الهيكلية والبصري لمركب اكسيد الزنك (ZnO) الجسيمات النانوية	8.2.III
64	تحضير ودراسة الأغشية الرقيقة لكبريتيد الكاديوم (CdS) المرسبة بطريقة الحمام الكيميائي (CBD)	9.2.III
66	المراجع III	
67	خلاصة العامة	
الملخص		

قائمة الأشكال:

الصفحة	التسمية	الشكل
6	أنواع الأشعة الكهرومغناطيسية ومجالات تطبيقاتها	1 .I
6	الأمواج الكهرومغناطيسية	2.I
11	مناطق الأشعة تحت الحمراء	3.I
12	جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء	4.I
13	المصادر المختلفة للأشعة تحت الحمراء	5.I
14	مبدأ امتصاص الأشعة تحت الحمراء	6.I
14	نموذج بسيط لجزئ ثنائي الذرة : كتلتان m_1 و m_2 مرتبطتان بنايظ يتميز بثابت قوة K	7.I
16	تمدد والانكماش المزدوج المتماثل وغير المتماثل	8.I
17	الاهتزاز بالانحناء	9.I
17	مختلف الأوضاع الاهتزازية لجزئ الماء H_2O	10 .I
18	مختلف الأوضاع الاهتزازية لجزئ الميثيلين CH_2	11 .I
19	جهاز مطياف FTIR	12 .I
20	مقياس تداخل ميكليسون	13 .I
22	مخطط التداخل والطيف المرتبط به بواسطة مقياس طيف متحولة فورييه	14 .I
23	خطوات الحصول على طيف	15 .I
23	الدقة الطيفية للتحليل الطيفي	16 .I
25	طريقتي الأرسال والانعكاس لقياس العينات في التحليل الطيفي	17 .I
26	مبدأ الانعكاس الكلي الداخلي المخفف (ATR)	18 .I
32	جدول الدوري للعناصر	1.II
36	بعض الهياكل الأكثر شيوعاً لمركبات التناسق: (a) خطي ، (b) مستو ثلاثي الزوايا ، (c) رباعي الوجوه ، (d) مستوى مربع ، (e) مثلث ثنائي الهرم ، (f) ثماني السطوح ، (j) مكعب ، (h) خماسي ثنائي الهرم ، (i) موشور ، (g) موشور مثلثي ، (k) أرخميدس (مربع) ثنائي هرم ، (l) ثنائي الوجوه ، و (m) موشور ثلاثي الزوايا (l) ثنائي الوجوه ، و	2.II

	(m) مؤشر ثلاثي الزوايا	
37	هيكل ثلاثي أكسيد البورون (B_2O_3)	3.II
38	هيكل فلوريد الألومنيوم (AlF_3)	4.II
51	أطياف الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه FTIR لبعض المواد المرجعية النقية	1.III
53	أطياف FTIR للجسيمات النانوية MgO	2.III
54	أطياف FTIR لـ SiO_2-1 بعد التفاعل مع وجود وغياب الكالسيوم مقارنة بالإشارة قبل التفاعل	3.III
55	أطياف FTIR لوجود SiO_2 وغياب الكالسيوم مقارنة بالإشارة قبل التفاعل	4.III
57	أطياف الأشعة تحت الحمراء لتراكيز مختلفة لـ CaO و TiO_2 عند $C^\circ 1000$	5.III
59	أطياف FTIR للعينتين Fa-1 و Fa-2 يمثل (a) الشق الأصلي و (b) الشق الثاني	6.III
62	أطياف FTIR للألومينات Al_2O_3 الجسيمات النانوية	7.III
63	أطياف FTIR لجسيمات أكسيد الزنك ZnO النانوية	8.III
64	طيف FTIR لاغشية CdS المرسبة انطلاقاً من $CdSO_4$ وفق ازمدة مختلفة	9.III

قائمة الجداول:

الصفحة	عنوان الجدول	الرقم
7	المقادير المميزة للموجات الكهرومغناطيسي	1.I
39	تسميات المركبات الثنائية	1.II
40	تسمية بعض الأنيونات	2.II
40	تسمية بعض الكاتيونات	3.II
41	تسمية الأحماض	4.II
42	تسمية الأحماض الاكسجينية	5.II
42	تسمية تسمية المركبات القاعدية	6.II
43	تسميات بعض المركبات التناسقية	7.II
44	المقارنة بين الخصائص الكيميائية للمركبات العضوية وغير العضوية	8.II
52	مواضع الذروة المميزة في أطياف الأشعة تحت الحمراء لتحويل فورييه (FTIR) للمواد المرجعية بال- cm^{-1}	1.III
57	المجموعات الوظيفية لتيناتات الكالسيوم $CaTiO_3$ في أطياف FTIR	2.III
60	النتائج التي تم تحليلها من طيف الأشعة تحت الحمراء للمغنيتيت	3.III
61	النتائج التي تم تحليلها من طيف الأشعة تحت الحمراء للهيمانيت	4.III
67	القمم المختلفة التي يظهرها الجهاز للاغشية المحضرة	5.III

قائمة الرموز:

الرمز	دلالتة بالعربية	دلالتة بالانجليزية
FTIR	الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فوريه	Fourier Transform -infrared spectroscopy
UV-VIS	مطيافية الأشعة فوق البنفسجية- المرئية	Ultraviolet- visible spectrometry
MW	الأشعة الميكرونية	Microwave
NMR	الرنين النووي المغناطيسي	Nuclear magnetic resonance
AAS	الامتصاص الذري الطيفي	Spectral atomic absorption
DRX	حيود الأشعة السينية	X-ray diffraction
EPR	الرنين البارامغناطيسي الالكتروني	Electron paramagnetic resonance
SEM	المجهر الالكتروني الماسح	Scanning electron microscope
ATR	الانعكاس الكلي الداخلي	Reflexion Total Atténué
A/T	الإرسال / الامتصاص	Absorbance/Transmition
DTGS	كبريتات ثلاثي الجلايسين المذيب	Deuterated Tri-Glycine Sulfate

Mercury cadmium Telluride	زئبق الكادميوم تيلورايد	MCT
Medium infrared	الأشعة تحت الحمراء المتوسطة	MIR
NiR-infrared	الأشعة تحت الحمراء القريبة	NIR
FAR-infrared	الأشعة تحت الحمراء البعيدة	FAR

المقدمة

العامّة

المقدمة العامة :

تعد مطيافية متحولة فوربييه للأشعة تحت الحمراء (FTIR) تقنية سريعة واقتصادية وسهلة، لها استخدامات وتطبيقات واسعة في مختلف المجالات مثل تحديد بنية ونوع المركبات في مجال طب الشرعي وتحديد المعادن في مجال جيولوجيا وتوصيف الملوثات في مجال البيئة وتحليل الغذاء في مجال الأغذية الزراعية وتوصيف المواد في مجال الصيدلة[1].

تعتبر تقنية FTIR شكلاً من أشكال التحليل الطيفي الاهتزازي الذي يفيد في دراسة مجموعة متنوعة من العمليات الكيميائية للمواد كما يعتبر طيف الأشعة تحت الحمراء حساساً لتركيبه الكيميائي، أو الاستبدال المتماثل، أو التعديلات الهيكلية، هذا يجعل التحليل الطيفي FTIR أكثر التقنيات الفردية إفادة ليس فقط لتكوين المعادن وهيكلها ولكن أيضاً لتفاعلات مع المركبات غير العضوية[2].

المركبات غير العضوية تعتبر من المواد التي تتكون من مزيج من العناصر المعدنية وغير المعدنية، وبشكل عام وأدق فهي المركبات الكيميائية التي تخلو تركيبها من وجود ذرات الكربون وفي حالة تواجده، لا يعد أو يعتبر عنصراً رئيسياً، أي أن المادة غير العضوية هي مادة خاملة تأتي عادة من قشرة الأرض.

كما يمكن أن تتكون المركبات غير العضوية من العناصر المعدنية وغير المعدنية من خلال الروابط الأيونية، حيث يحدث هذا النوع من الروابط عن طريق انتقال الإلكترونات من المعادن إلى غير المعادن، ولكن لا بد من التنويه إلى أن الفرق بين المواد العضوية وغير العضوية يعتمد على طبيعة العلاقة بين المركب ومدى احتوائه على نسبة الكربون والهيدروجين بعد عرض موجز لمبادئ التقنية، تقدم المذكرة نظرة عامة على إمكانات FTIR في، دراسة التفاعلات مع الماء والجزئيات العضوية وغير العضوية[3].

وقد أبدت تقنية الأشعة تحت الحمراء سرعة وفعالية عالية في تشخيص المركبات غير العضوية من خلال معرفة نوع الارتباط والخصائص الهيكلية لهذه المركبات.

نظراً لأهمية هذا الموضوع اخترنا أن يكون موضوع دراسة نظرية تتضمن دراسة تطبيقات مطيافية (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية، حيث قسمنا موضوع مذكرتنا إلى ثلاثة فصول.

يندرج الفصل الأول تحت عنوان مطيافية الأشعة تحت الحمراء تم التطرق فيه إلى مفهوم الإشعاع الكهرومغناطيسي وامتصاص الضوء وتم التعرف على تعريف مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) مبدأها وفكره عمل جهازها.

الفصل الثاني تناولنا فيه موضوع المركبات غير العضوية التي تشمل تعريفها وأصنافها وخصائصها العديدة ومدى استخداماتها.

الفصل الثالث الذي يعتبر لب الموضوع وهو تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية قمنا فيه بمناقشة وتحليل لنتائج بعض الدراسات السابقة التي تناولت هذا الموضوع.

وفي الختام تم تجميع أهم النقاط التي وردت في المذكرة في خلاصة عامة.

المراجع :

- 1- Taleb, I. (2013). *Apport de la spectroscopie vibrationnelle, infrarouge et Raman, appliquée au sérum pour le diagnostic de carcinome hépatocellulaire chez les patients atteints de cirrhose* (Doctoral dissertation, Reims). Page (41_42) .
- 2-Dutta, A. (2017). *Fourier transform infrared spectroscopy. Spectroscopic methods for nanomaterials characterization*, 73-93.
- 3- Karima, N. K. B. H. D. (2021). *Elaboration et Caractérisation d'un Matériau Inorganique (destiné à la Préparation des Matériaux Composites)* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).

الفصل الأول

مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)

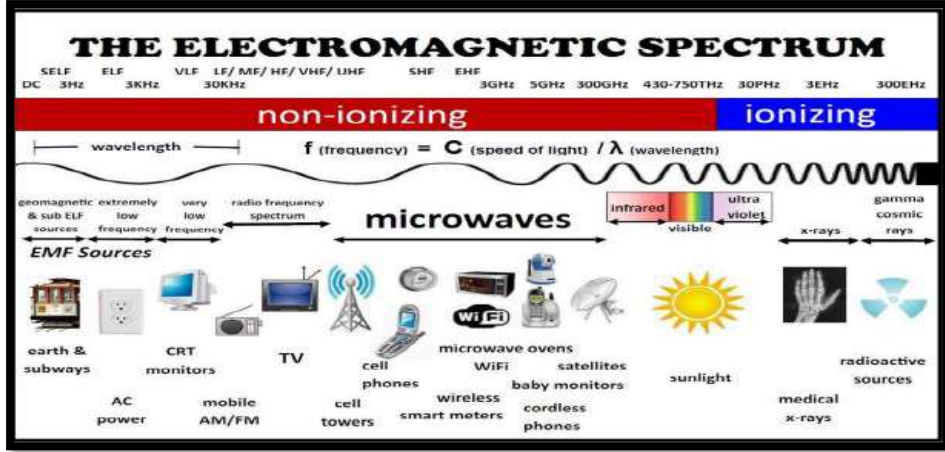
1.I. تمهيد :

يعد التحليل الطيفي بمطيافية الأشعة تحت الحمراء من أهم التقنيات التحليلية المتاحة لمحللين اليوم ومن الطرق ذات الأهمية البالغة في التحليل الطيفي والمستخدممة على نطاق واسع من قبل الكيميائيون, تعتبر هذه التقنية من أسهل الطرق المتبعة في المخابر الكيميائية للمواد حيث تسمح هذه التقنية بمعرفة الطبيعة الكيميائية للمواد ونوع الارتباط المركبات، لها استخدامات وتطبيقات واسعة في مختلف المجالات مثل تحديد بنية ونوع المركبات في طب الشرعي وتحديد المعادن في جيولوجيا وتوصيف الملوثات في البيئة وتحليل الغذاء في مجال الأغذية الزراعية [1].

2.I. الإشعاع الكهرومغناطيسي:

الإشعاع الكهرومغناطيسي هو شكل من أشكال الطاقة له طبيعة موجية وطبيعة جسيمية: [2]

- عبارة عن جسيمات صغيرة تسمى الفوتونات تنتقل في خطوط مستقيمة على حسب نظرية نيوتن [3].
 - عبارة عن موجات لها طول موجي وتردد [3].
- يمكن تصنيف الأشعة الضوئية عموماً إلى الأقسام التالية كما هو موضح في الشكل (1.I):
- أشعة γ (0.005-0.025nm).
 - أشعة X (0.025-10nm).
 - الأشعة فوق البنفسجية UV (10-400nm).
 - الأشعة المرئية visible (400-800nm).
 - الأشعة تحت الحمراء IR (800-3000nm).
 - الأشعة الميكرووئية MW (3.10⁴-10⁹nm).
 - أشعة الرادار والراديو (m).



الشكل (1.I): أنواع الأشعة الكهرومغناطيسية ومجالات تطبيقاتها [4].

1.2.I الفوتون : هو عبارة عن كم من الطاقة بواسطة نستطيع تفسير الطبيعة الجسيمية

للضوء [3].

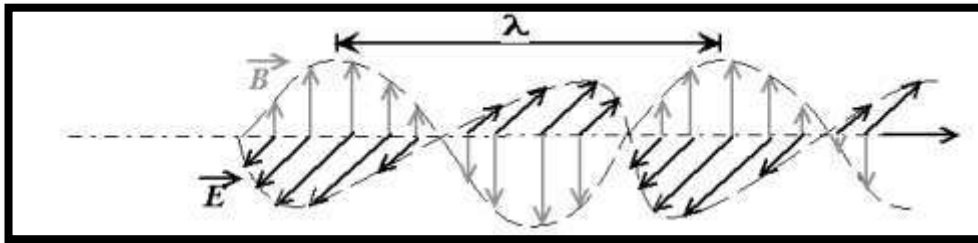
2.2.I خصائص الموجة الكهرومغناطيسية :

تتكون الموجات الكهرومغناطيسية من مجالات مغناطيسية وكهربائية تتأرجح بشكل تعامدي مع بعضها البعض تتوافق مع انتشار الطاقة بفضل تغيرات التردد الدورية، يمثل الشكل (2.I) حركة الموجة الجيبية للمجال الكهربائي والمغناطيسي حيث يمكن وصف

هذه الحركة أو وصف الموجة من خلال طول موجي والتردد [6,5].

λ , طول الموجي : المسافة الخطية بين الحد الأدنى والحد الأقصى.

ν , التردد : خاصية تتعلق بطول الموجة .



الشكل (2.I): الأمواج الكهرومغناطيسية [6].

بشكل عام تتميز الموجات الكهرومغناطيسية بأربعة مقادير: الدورة, التردد, الطول

الموجي, العدد الموجي كما موضح في الجدول (1.I) .

جدول (1.I) : المقادير المميزة للموجات الكهرومغناطيسي [7].

	Période	Fréquence	Longueur d'onde	Nombre d'onde
Symbole	T	ν	λ	ν'
Unité	Seconde(s)	Hertz(Hz)	Mètre(m) Nanomètre(nm) Angstrom(A)	Centimètre moins un (cm^{-1})
Définition	Temps nécessaire pour qu'une Vibration Sinusoïdale se retrouve dans la même position	Nombre de périodes par seconde	Distance parcourue par une onde pendant une période T	Nombre d'oscillatio ns l'onde par centimètres
Relation		$\nu=1/T$	$\lambda=C/\nu$	$\nu'=1/\lambda=\nu/C$

$E=h\nu$ (1) : الطاقة

$\nu= c/\lambda'$ (2) : التردد

$$E=hc/\lambda \quad (3) \quad \text{لنحصل على :}$$

3.2.I امتصاص الضوء:

امتصاص الشعاع الكهرومغناطيسي هي عملية يحدث فيها امتصاص طاقة الفوتون من قبل المادة ويكتسب أحد الإلكترونات الذرة طاقة من أحد الفوتونات، ينتقل إلى مستوى طاقة أعلى ثم بعدئذ يمكن للطاقة الممتصة أن تصدر على هيئة فوتون طاقته تساوي طاقة الفوتون الأصلي أو تتحرر على شكل طاقة حرارية أثناء عودة الإلكترون إلى مستواه الأساسي .
يوجد حالتان يكون فيها الجزيئ مثار كهرومغناطيسيا :

$$M=2S+1 \quad (4)$$

في الحالة الأحادية فإن الحالة المثارة التي تدور فيها الإلكترونات على شكل أزواج يكون مجموع اللف المغزلي لها يساوي الصفر $S=0$ وعليه $M=1$ هذه الحالة يرمز لها بالرمز Singlet (S) وتسمى الحالة الأحادية، أما في حالة ما إذا كان الإلكترونين بنفس السبين (اللف) فإن المجموع في هذه الحالة $S=1$ وعليه $M=3$ هذه الحالة تكون أكثر استقرار من الحالة الأحادية تسمى Triplet.

قيمة الطاقة التي يحملها الكم الإشعاعي (الفوتون) يعبر عنها من خلال علاقة بلانك
: PLANCK

$$E=hc/\lambda=h\nu(\text{photon}) \quad (5)$$

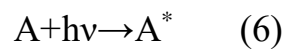
h : ثابت بلانك $h=6.62.10^{-34} \text{J.S. Photoun}$

C : سرعة الضوء في الفراغ $C=3.10^8 \text{m/s}$

λ : الطول الموجي (m)

ν : تردد الإشعاع (Hz)

لكي يصبح الجزيئ A مثارا يجب أن يمتص كما واحدا من الطاقة



فالطاقة إذا عبارة عن مول كمي من الفوتونات (Einstien) تعرف بالعلاقة التالية :

$$E=NhC/\lambda(j/mol) \quad (7)$$

N : عدد أفوقادرو ($6.023.10^{23}$)

فتصبح الطاقة من الشكل :

$$E=1.2*10^5/\lambda \quad (j/Einstein)(8)$$

خلال زمن التشبييع (t) تعرف شدة التدفق (P_0) لعدد الفوتونات الساقطة على وحدة السطح وفقا للمعادلة :

$$P_0=n/t \quad (Einstein) \quad (9)$$

يعرف معامل الانعكاس R والنفاذية T كالتالي $T=P_t/P_0$ و $R=P_r/P_0$,

يمكننا قانون Beer- Lambert من الحصول على النفاذية من خلال مانص عليه قانونه عن وجود ارتباط لوغاريتمي بين نفاذية الضوء T خلال المادة وحاصل ضرب معامل امتصاص المادة ϵ ($L/mol.cm$) والمسافة التي يقطعها الضوء خلال المادة L (cm) والتركيز C للمادة الماصة (mol/l) بحيث :

$$A=-\log_{10}(P/P_0)=-\log_{10}(T) \quad (10)$$

$$T=P/P_0=10^{-LC}=10^{\log^{-A}} \quad (11)$$

إذن الامتصاصية (Absorbance) هي :

$$A=\epsilon . L . C \quad (12)$$

من خلال العلاقات نجد أن الامتصاصية ترتبط بعلاقة خطية مع التركيز فإذا قيست الامتصاصية يمكن استنتاج تركيز المادة [8].

4.2.I طرق التحليل الطيفي :

تنقسم طرق التحليل الطيفي إلى قسمين :

1. طرق الامتصاص الطيفي

2. طرق الانبعاث الطيفي

1. طرق الامتصاص الطيفي : تعتمد طريقة الامتصاص الطيفي على امتصاص المادة في

الحالة الذرية أو الجزيئية لجزء من الأشعة الكهرومغناطيسية هذا الجزء الممتص من

الأشعة يسمى بالامتصاص حيث ينقسم إلى أربعة أقسام [9] :

• طريقة الامتصاص الجزيئي للطيف فوق البنفسجي والمرئي.

• طريقة الامتصاص الجزيئي للأشعة تحت الحمراء.

• طريقة الرنين النووي المغناطيسي (NMR).

• طريقة الامتصاص الذري للطيف (AAS).

2. طرق الانبعاث الذري : تعتمد طريقة الانبعاث الطيفي على إثارة الذرات أو جزيئات

المادة بواسطة الطاقة الإشعاعية أو الحرارية أو الطاقة الكهربائية ثم بعد رجوع الذرات أو

الجزيئات إلى حالة الاستقرار نقيس شدة الأشعة المنبعثة منها ينقسم الانبعاث الذري الطيفي

إلى خمسة أجزاء [9] :

• طريقة الانبعاث الذري للهبوط للطيف .

• طريقة الانبعاث الذري الكهربائي.

• طريقة التألق الجزيئي للطيف.

• طريقة التألق الذري للطيف.

• طريقة التألق الذري للأشعة السينية .

3.I الأشعة تحت الحمراء:

يعني اسم الأشعة تحت الحمراء (باللاتينية = " السفلى ") لأن الأشعة تحت الحمراء عبارة

عن موجة تردد كهرومغناطيسي أقل من تردد الضوء الأحمر المرئي تتواجد في جزء

من الطيف الكهرومغناطيسي بين المنطقة المرئية ومنطقة المايكروويف [10].

1.3.I. مطيافية الأشعة تحت الحمراء:

مطيافية الأشعة تحت الحمراء هي احد فروع علم الأطياف التي تتعامل مع المنطقة تحت الحمراء من الطيف الكهرومغناطيسي , وتستخدم هذه المطيافية في تحليل الطيف وتفسير بياناته من خلال تحديد المجاميع الفعالة في المركبات قيد الدراسة, حيث تعتبر مطيافية الأشعة تحت الحمراء من الطرق المهمة في دراسة المواد إذ تمكننا من التعرف على بنية المادة من دون التأثير على خصائصها حيث تنقسم الاهتزازات في الروابط إلى قسمين : الشد والثنائي [11] .

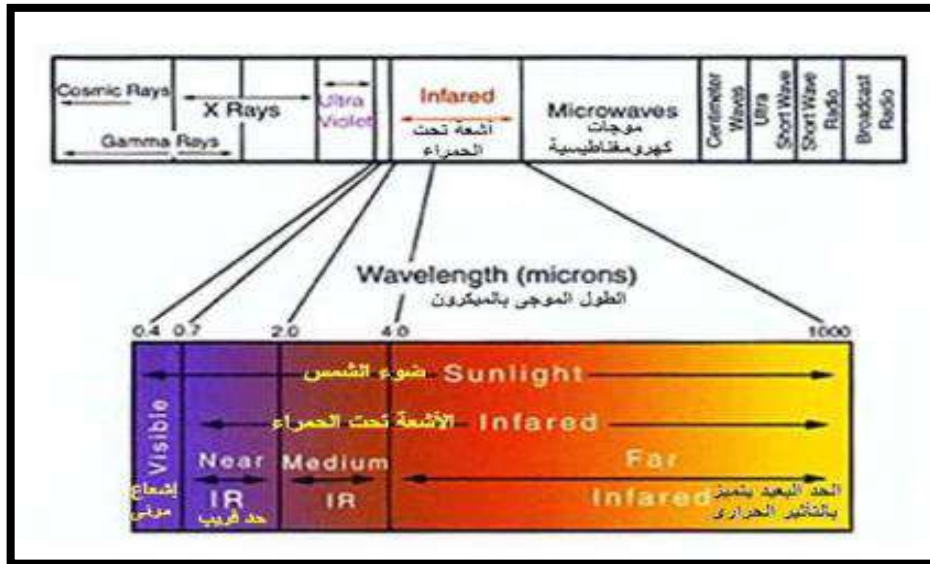
وجميع أنواع الروابط تستجيب بهذا المقدار من الطاقة لتحث فيها اهتزازات من هذا النوع لذا تمتص في المنطقة تحت الحمراء بشرط أن يؤدي الامتصاص إلى تغير في عزم ثنائي القطب الكهربائي وهذه الاهتزازات تكون مكماة, وحدوثها يعني أن المركب يمتص طاقة تحت الحمراء في جزء معين من الطيف , ينحصر مجال الأشعة تحت الحمراء بين (20-14000 cm^{-1}) حيث ينقسم مجالها إلى ثلاث مناطق كما موضح في شكل (3.I) : [11]

• الأشعة تحت الحمراء القريبة (4000-14000 cm^{-1}).

• الأشعة تحت الحمراء المتوسطة (650-4000 cm^{-1}).

• الأشعة تحت الحمراء البعيدة (20-650 cm^{-1}).

تعتبر المنطقة الوسطى المنطقة الأكثر استخداما للكيميائي لان الكيميائي يجد فيها كفايته من المعلومات الدالة على بنية معظم المركبات العضوية [12] .



شكل (3.I) : مناطق الأشعة تحت الحمراء [11].

2.3.I. جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء :

هو جهاز بسيط يستخدم لدراسة التركيب البنوي للمركبات والتعرف على التركيب الكيميائي للمركبات, يصنف من أهم أجهزة التحليل الطيفي نظرا لأهمية مكوناته الأساسية التي يحتوي عليها وهي كالتالي:

• المصدر الضوئي للأشعة تحت الحمراء

• موحد اللون monochromator

• حامل للعينة

• الكاشف

• وحدة التسجيل

ويتميز بذاكرة حاسوب ألي يقوم 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, مما يؤدي إلى تغير دوري في طول الروابط الكيميائية أو تغير في الزوايا بين الروابط الكيميائية في لجزيء , وقد تنتج كل حركة اهتزازية من حركة ذرتين أو قد تشمل مجموعة من الذرات ويتوقف عدد الانتقالات الاهتزازية في لجزيء على عدد الذرات المكونة له, يتوقف طول الموجة أو التردد الذي يحدث عنده هذا الامتصاص على عوامل عديدة منها كتلة الذرتين , قوة الروابط المكونة للجزيء والتموضع الفراغي للذرات في الجزيء [13] .



الشكل (4.I) : جهاز مطياف الأشعة تحت الحمراء [14] .

3.3.1. مصادر الأشعة تحت الحمراء :

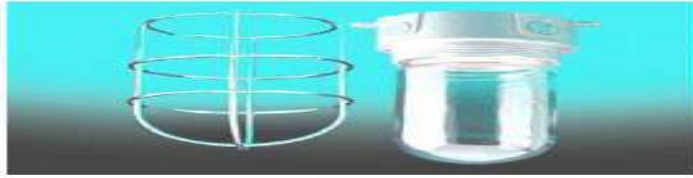
تنتج الأشعة تحت الحمراء من عملية تسخين لبعض المواد الصلبة درجة حرارتها من $(1500\text{C}^{\circ} - 2000)$ [15].

1. مصباح نرنست: تتكون من أكاسيد بعض العناصر النادرة المصنعة على شكل قضيب وتستخدم عنصر أكسيد الزركونيوم حيث يتصل القضيب ببلاطين الرصاص لمرور تيار كهربائي وعند مرور تيار كهربائي ترتفع حرارة اللبنة ومنه إنتاج الأشعة لتصدر لبنة نرنست المتوهجة طيفا يبلغ $(1000\text{cm}^{-1} - 7100)$ [15].

2. القضيب المتوهج: يتكون هذا المصدر من قضيب كربيد سيليكون حيث يتم تسخين القضيب كربيد سيليكون عند درجة حرارة 1200C° لينتج طيفا مستمرا بين $(600\text{cm}^{-1} - 5000)$ [15].

3. سلك المتوهج: يشبه هذا السلك القضيب المتوهج إلى حد كبير ينتج أيضا أشعة مستمرة في منطقة الأشعة تحت الحمراء المتوسطة MIR IR [15].

4. مصباح الزئبقي القوسي عالي الضغط: تستخدم هذه اللبنة لإنتاج الأشعة تحت الحمراء في المنطقة البعيدة FAR IR [15].



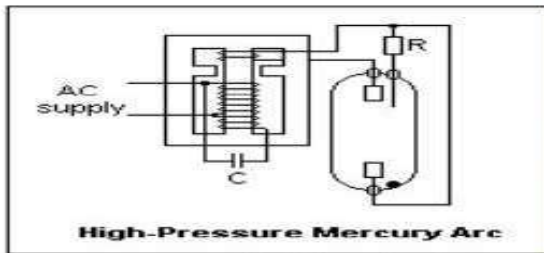
السلك المتوهج



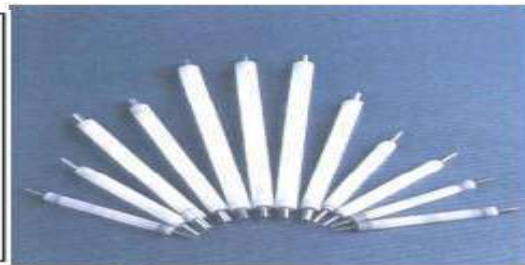
لبنة نرنست المتوهجة



القضيب المتوهج



High-Pressure Mercury Arc

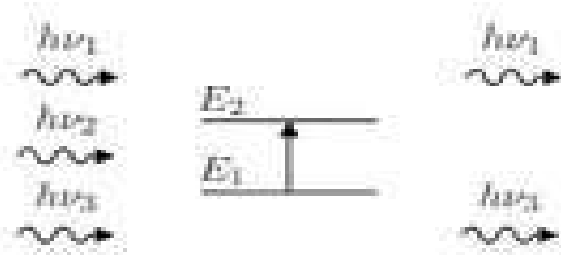


لمبة الزئبق القوسية ذات الضغط العالي

الشكل (5.1): المصادر المختلفة للأشعة تحت الحمراء [15].

4.3.I. مبدأ امتصاص الأشعة تحت الحمراء:

تباين في العزم ثنائي القطب الدائم للجزئ يسببه اهتزاز الروابط وهو مصدر طيف الأشعة تحت الحمراء، تهتز الجزيئات بشكل طبيعي وفقا لجميع أنماط اهتزازها ولكن ببيعات ضعيفة جدا ومع ذلك يحتوي الفوتون على مكون الكهرباء الجيبية إذا كان تردد الفوتون يتوافق مع تردد اهتزاز أحد الأنماط العادية للجزئ فان الجزيء سوف يهتز بسعة كبيرة جدا بعبارة أخرى، الفوتون التي تكون طاقته مساوية للطاقة الذي يحتاجها الجزيء للانتقال من حالة الطاقة المنخفضة إلى حالة الإثارة سيتم امتصاصها وتحويل طاقتها إلى طاقة اهتزاز كما هو موضح في الشكل (6.I) [16].



الشكل (6.I) : امتصاص الأشعة تحت الحمراء [16].

4.I. نظرية الاهتزازات:

يمكن تفسير هذه الظاهرة بنموذج المتذبذب المتناسق لجزيء ثنائي الذرة

- نموذج المتذبذب المتناسق :

لشرح مبدأ الأشعة تحت الحمراء تأتي بنموذج لجزيء ثنائي الذرة ونطبق عليه نموذج نظام فيزيائي مكون من كتلتين m_1 و m_2 متصلتين بنابض ثابت قوته k الشكل (7.I).



الشكل (7.I): نموذج بسيط لجزيء ثنائي الذرة: كتلتان m_1 و m_2 مرتبطتان بنابض يتميز

بثابت قوة K [17].

عندما نطبق هذا القانون على نظام كيميائي مكون من ذرتين مرتبطتين برابطة يصبح لدينا حركة هذا النظام الفيزيائي محكوم بقانون هوك الذي يعطي بالعلاقة التالية:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \quad (13)$$

ν : تردد اهتزاز الرابطة

k : ثابت قوة الرابطة

C : سرعة الضوء (cm/s)

تحسب الكتلة المختزلة بالشكل التالي :

$$\mu = \frac{m_1 * m_2}{m_1 + m_2} \quad (14)$$

تستخدم هذه العبارة لحساب الموضع التقريبي لامتصاص المركبات في مجال الأشعة تحت الحمراء [17] حيث تعتمد شدة موضع الامتصاص على التركيز وعلى طبيعة وقطبية الرابطة كما أن العديد من العوامل الخارجية والداخلية للجزيء لها تأثير على وضع الاهتزاز منها :

✓ الروابط الهيدروجينية

✓ التأثير الفراغي

✓ الحجم

هذا التأثير يسمح بقدر اكبر من الانتقائية وبالتالي تحديد الطيف بسهولة [18] .

1.4.I أنواع الاهتزازات :

تنقسم الاهتزازات الجزيئية إلى مجموعتين: اهتزاز بالتمدد واهتزاز بالانحناء

1. الاهتزاز بالتمدد والانكماش (Stretching vibration) :

ينشأ الاهتزاز بالتمدد والانكماش بين ذرتين مرتبطتين معا, ويكون هذا التمدد والانكماش على نفس محور الرابطة بين الذرتين أي تغيير المسافة بين الذرتين دون تغيير المحاور أو الزوايا بين الروابط .

وينقسم الاهتزاز بالتمدد والانكماش إلى قسمين :

(a) **تمدد وانكماش اهتزازي بسيط أو معزول (isolated stretching)** : يشمل هذا التمدد رابطة واحدة فقط كما موضح في شكل (8.I).

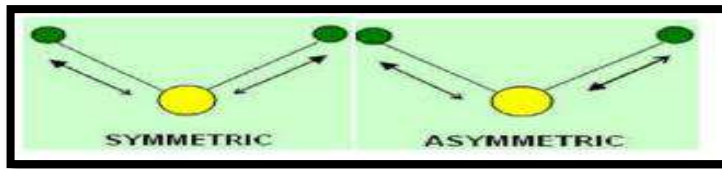
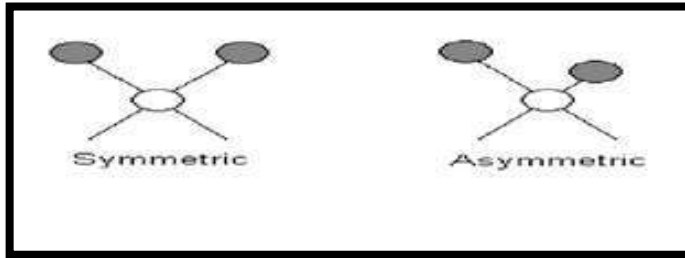
(b) **تمدد وانكماش اهتزازي مزدوج (coupled stretching)** : يشمل هذا النوع تمدد رابطتين أو أكثر في نفس الوقت كما موضح في الشكل (8.I).

ويحدث أيضا نوعين من التمدد والانكماش الاهتزازي المزدوج :

● **التمدد والانكماش المزدوج المتماثل (symmetrical stretching)** : وفيه يحدث تمدد وانكماش للرابطين في نفس الوقت كما موضح في الشكل (8.I).

● **التمدد والانكماش المزدوج غير المتماثل (asymétrique stretching)** :

وفيه تتمدد إحدى الروابط بينما تنكمش الأخرى في نفس اللحظة ويحدث بطريقة متزامنة كما يتضح في الشكل (8.I).

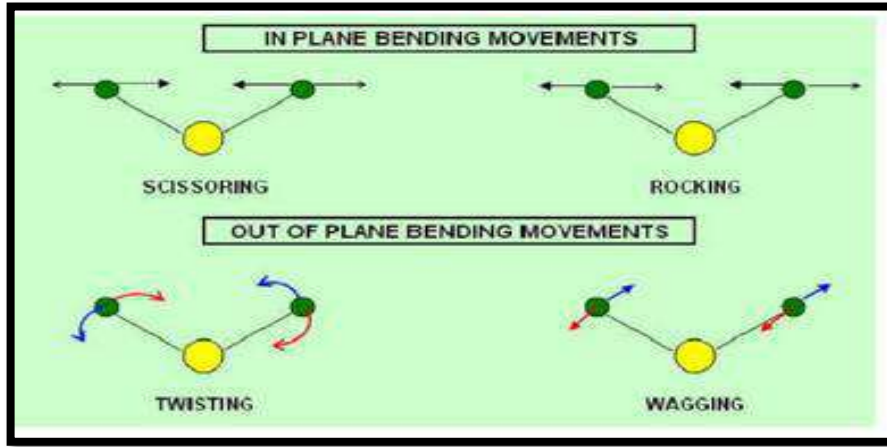


شكل (8.I) : التمدد والانكماش المزدوج المتماثل وغير المتماثل [19] .

2. **الاهتزاز بالانحناء (Bending vibration)** : هذه الترددات يتغير فيها زوايا الروابط (الزوايا بينالرابطين) .

وينقسم الاهتزاز بالانحناء إلى أربعة أنواع :

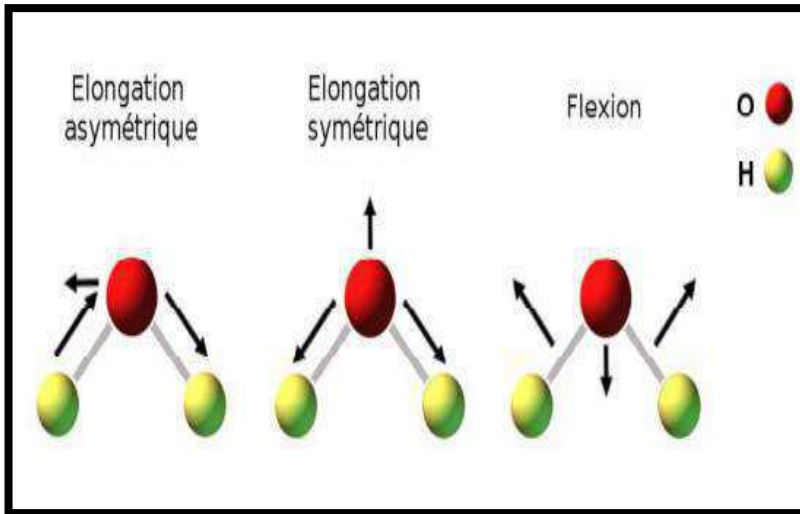
- (a) الاهتزاز (Rocking): حيث تتأرجح الوحدة التركيبية إلى الخلف وإلى الأمام في نفس المستوى الاتزان كما يتضح في الشكل (9.I).
- (b) حركة المقص (Scissoring): تقتارب وتتباعد الذرتان الغير مرتبطين سويًا بالنسبة لبعضهما بحركة تشبه حركة المقص في نفس مستوى الاتزان كما في شكل (9.I).
- (c) تأرجح (Wagging): حيث تتأرجح الوحدة التركيبية ثلاثية الذرة إلى الخلف وليس الأمام خارج مستوى الاتزان المشكل من الذرة وروابطهما كما في الشكل (9.I).
- (d) التواء (Twisting): تلف الذرات حول الرابطة بينها وبين باقي الجزئ خارج مستوى الاتزان كما في الشكل (9.I).



الشكل (9.I): أشكال الاهتزاز بالانحناء [19].

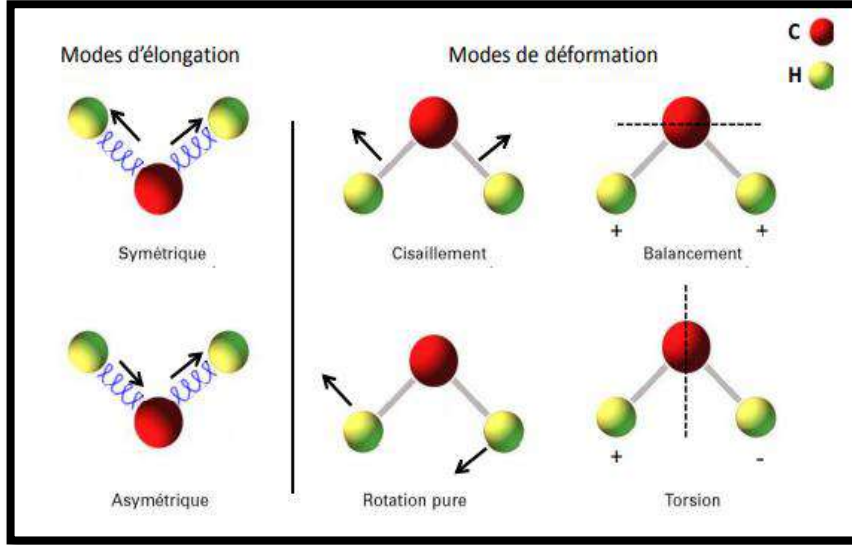
2.4.I. بعض الأمثلة لمختلف الأوضاع الاهتزازية الجزيئية:

1. مختلف الأوضاع لجزئ الماء H_2O :



شكل (10.I): الأوضاع الاهتزازية لجزئ الماء H_2O [1].

2. مختلف الأوضاع لجزئ المثلين CH_2 :



شكل (11.I) : الأوضاع الاهتزازية لجزئ المثلين CH_2 [1].

5.I. مطيافية متحولة فورييه للأشعة تحت الحمراء (FTIR) :

هي تقنية تستخدم للحصول على طيف بالأشعة تحت الحمراء لامتناص أو انبعاث مادة صلبة أو سائلة أو غازية، يقوم مطياف فورييه بجمع البيانات الطيفية عالية الدقة في نفس الوقت على مدى طيفي واسع هذا يوفر ميزة كبيرة على مقياس طيف التشتت الذي يقيس الشدة على مدى ضيق من الأطوال الموجية في وقت واحد، تقنية FTIR فتحت تطبيقات جديدة للتحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء حيث نشأ مصطلح التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء من حقيقة أن متحولة فورييه (عملية رياضية) تتطلب تحويل البيانات الأولية إلى بيانات فعلية النطاق (طيف فعلي) [20].

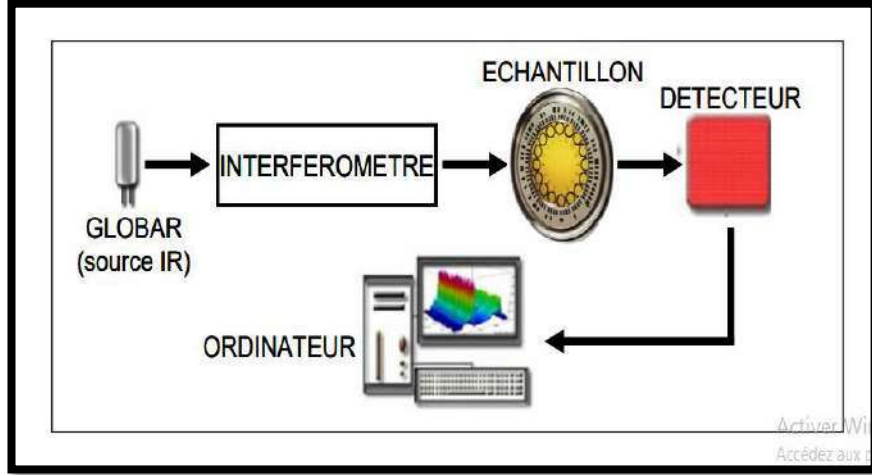
5.I.1. مطياف FTIR :

يتكون مطياف FTIR من خمسة أجزاء رئيسية هي :

✓ مصدر الضوء متعدد الألوان من نوع globar مصنوع من قضيب كربيد سيليكون (SiC) يعمل في درجات حرارة حوالي $1500\text{ }^\circ\text{C}$, يشع طيفا مستمرا بين 1000 و 250 cm^{-1} .

✓ مقياس التداخل جهاز لتعديل الإشارة وتوليد التداخل.

- ✓ حجرة العينة.
- ✓ كاشف أو مستشعر حساس للضوء، أكثر أجهزة الكشف شيوعا هي أجهزة الكشف من النوع الكهرو حراري (DTGS) و أجهزة الكشف من النوع الكهروضوئي (MCT).
- ✓ محول تناظري رقمي يقوم بتحويل الإشارة التناظرية إلى إشارة رقمية بواسطة نظام الكمبيوتر.



الشكل (12.I):جهاز مطياف الاشعة تحت الحمراء(FTIR)[21] .

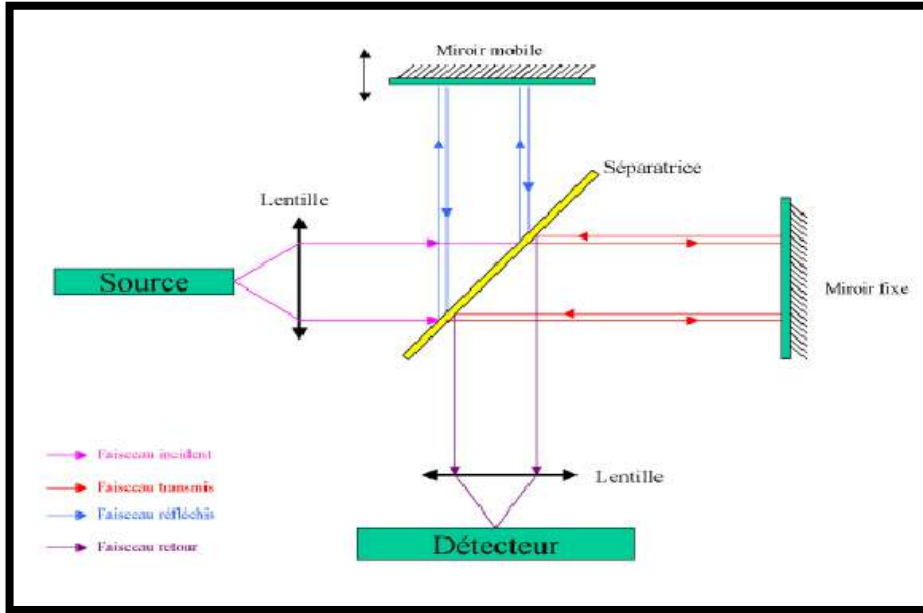
5.I.1.1 فكرة عمل جهاز FTIR :

حسب الشكل (12.I) يتم تمرير الإشعاع الخارج من المصدر عبر مقياس التداخل الذي يعدل كل طول موجي للشعاع عند تردد مختلف ثم تنعكس الحزمة المعدلة مرة أخرى على العينة ليحدث امتصاص ثم تصل الحزمة إلى الكاشف ليتم تحويلها إلى إشارة كهربائية تظهر على شكل مخطط تداخل الذي هو عبارة عن مجموع ترددات الشعاع ثم يتم تحويل مخطط التداخل هذا إلى طيف الأشعة تحت الحمراء بواسطة عملية رياضية تسمى متحولة فورييه [21] .

2.5.I مقياس التداخل ميكلسون:

مقياس تداخل ميكلسون هو العنصر الأساسي لمطياف الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه , يسمح بقياس جميع الترددات في وقت واحد حيث يعتمد على مبدأ التداخل، يتكون مقياس التداخل من مرأتين عموديتين إحداهما مرآة ثابتة وأخرى مرآة متحركة يمكن إزاحتها بشكل عمودي على المرآة الثابتة بسرعة ثابتة، بين هاتين المرأتين يوجد ما يسمى بالفاصل على زاوية تميل ب 45 ° C بالنسبة لاتجاه انتشار الإشعاع الساقط حيث يقسم الشعاع إلى جزئين متساوين، ينعكس النصف الأول من الحزمة تجاه المرآة الثابتة بينما يتم

توجيه النصف الآخر تجاه المرآة المتحركة بعدها يمر الشعاعان الناتجان عبر مقياس تداخل ثم ينتقلان عبر المسارات البصرية المختلفة مما ينتج عنه الفرق الذي نعبر عنه ب $\delta = 2x$ حيث x تمثل إزاحة المرآة المتحركة، الاختلاف في المسار البصري أو الاختلاف المسار الصفري (ZPD) ، (MOPD) الحد الأقصى لاختلاف المسار البصري يساوي $2L$ إذا كانت L هي أقصى إزاحة للمرآة المتحركة بعد ذلك يجمع الشعاعين ليظهر من خلالهما تداخل مدمر أو بناء ، تصل الحزمة الناتجة إلى العينة الممتصة للإشعاع ثم إلى الكاشف ثم يتم تحويلها إلى إشارة كهربائية تظهر إشارة الكاشف كمخطط التداخل الذي يمثل كتوزيع شدة دالة لإزاحة المرآة المتحركة. $I = f(x)$ بعدها يتم تحويل مخطط التداخل إلى طيف الأشعة تحت الحمراء بواسطة عملية رياضية تسمى متحولة فورييه .



الشكل (13.I): مقياس تداخل ميكلسون [22]

3.5.I. التعبير عن مخطط التداخل :

1. حالة مصدر أحادي اللون :

إذا كان مقياس التداخل مضيئاً بمصدر أحادي اللون يتم استقبال الإشارة بواسطة كاشف ممثلاً بتغيير جيبي يتبع بتغير حركة المرآة مع سرعة ثابتة حيث تظهر لنا القيم القصوى والصغرى بالتناوب في الشعاع الناتج نكتب شدة الحزمة المقاسة على الكاشف :

$$I(x) = \eta \frac{(1 + \cos(2\pi\sigma x))}{2} \quad (15)$$

η : هي الكفاءة البصرية للأداة المتحصل عليها بضرب كفاءة المطياف .

σ : رقم الموجة معبر عنه بـ cm^{-1} .

2. حالة مصدر متعدد الألوان :

في حالة إضاءة مقياس تداخل بواسطة مصدر توزيع متعدد الألوان طيفي $B(\sigma)$ يتم نقل

التدفق الأولي المار عبر مقياس تداخل بواسطة عنصر طيفي $d\sigma$ نكتب:

$$dI = B(\sigma) \cos^2(\pi\delta\sigma) d\sigma = \frac{1}{2} B(\sigma)(1 + \cos 2\pi\delta\sigma) d\sigma \quad (16)$$

يسجل مخطط التداخل الطيف عند اختلاف المسارات في كل نقطة حيث يحتوي على جميع

ترددات الأشعة تحت الحمراء الناتجة من المصدر من خلال دمج لجميع العناصر الطيفية

نكتب :

$$I(\delta) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\sigma)(1 + \cos 2\pi\delta\sigma) d\sigma \quad (17)$$

$$I(\delta) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\sigma) d\sigma + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} B(\sigma)(\cos 2\pi\delta\sigma) d\sigma \quad (18)$$

بعد اختلاف مسار مخطط التداخل جزءا مهما من تحول كثافة فورييه الطيفية، يتم استبدال

جيب تمام بالأس المركب لأن $B(\sigma)$ دالة حقيقية تساوي 0

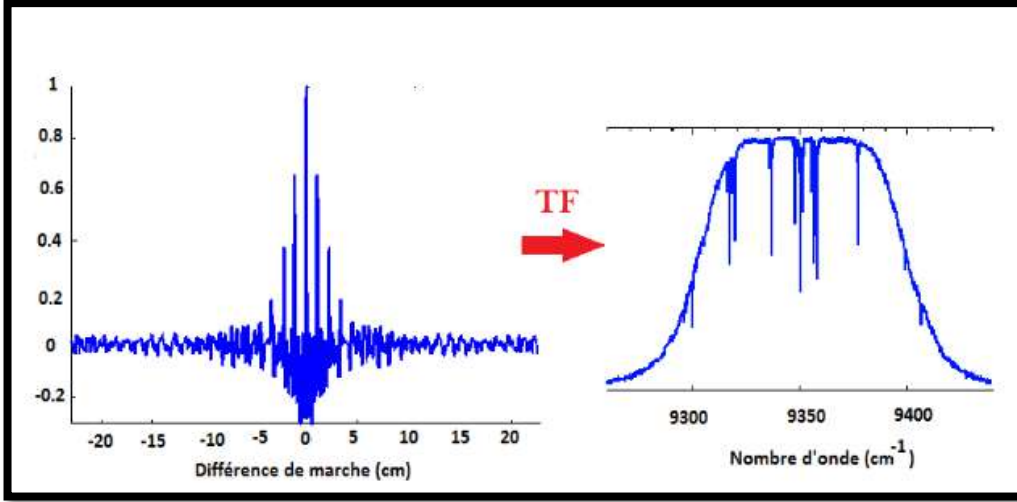
$$I(\delta) = \text{Re} \left\{ \int_0^{\infty} B(\sigma) e^{2i\pi\delta\sigma} d\sigma \right\} = \text{Re} \{ TF[B(\sigma)] \}$$

(19)

نستنتج الطيف من المصدر المستخدم من خلال متحولة فورييه العكسي لمخطط التداخل من

خلال الشكل (14.I)

$$B(\sigma) = TF^{-1} \{ I(\delta) \} = \int_0^{\infty} I(\delta) e^{-2i\pi\sigma\delta} d\delta \quad (20)$$



الشكل (14.I): مخطط التداخل والطيف المرتبط به بواسطة مقياس طيف متحولة فورييه [22].

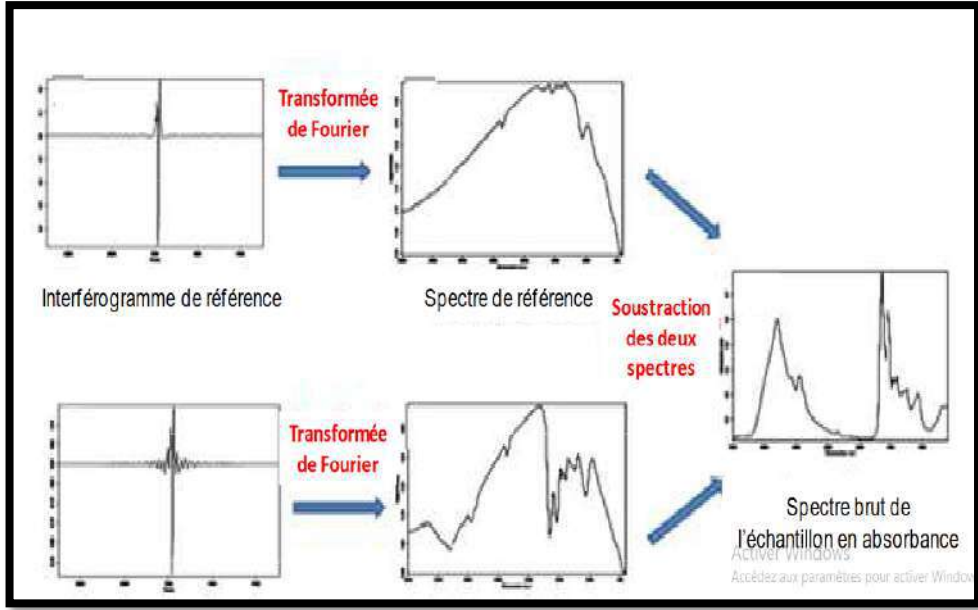
4.5.I. عموميات حول الطيف :

تتضمن عملية توليد الطيف للعينة أربعة مراحل:

1. تسجيل مخطط تداخل مرجعي حامل العينة (طيف المرجعي).
2. تسجيل مخطط التداخل ذو حزمة واحدة للعينة المراد تحليلها .
3. تطبيق معادلة متحولة فورييه الرياضية على عينة مخطط التداخل ذو حزمة واحدة والتداخل المرجعي.
4. ثم نحصل على طيف الامتصاصية أو النفاذية للأشعة تحت الحمراء الذي يعتبر من الأطياف بسيطة الحزم.

يتميز طيف FTIR بنوعين من المعلومات نوعية وكمية للعينة المراد تحليلها :

1. المعلومات النوعية: تمثل الأطوال الموجية التي تمتص العينة عندها خصائص المجموعات الكيميائية الموجودة في المادة التي تم تحليلها [1].
2. المعلومات الكمية: تتناسب كثافة الامتصاص عند طول موجي محدد مع تركيز المجموعة الكيميائية التي من خلالها نحصل على طيف الامتصاص [1].

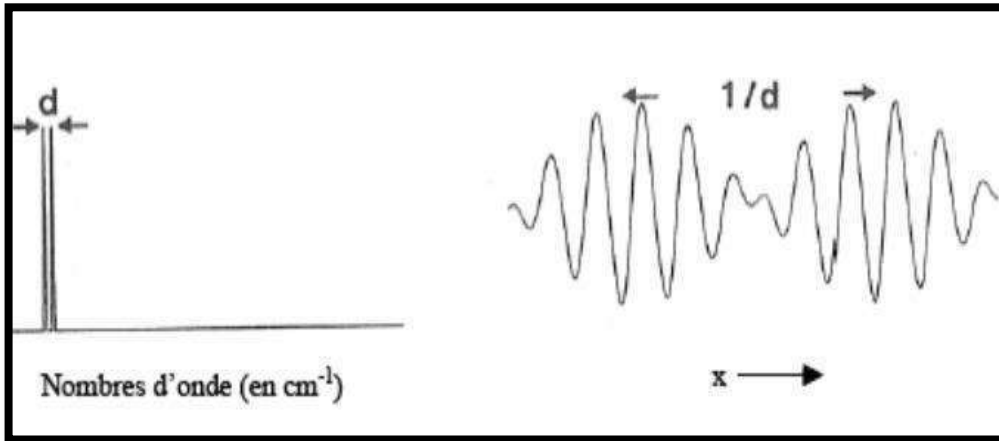


شكل (15.I) : خطوات الحصول على الطيف [1].

5.5.I. الدقة الطيفية :

يوضح الشكل (16.I) الفرق d بين نطاقين على مقياس مخطط التداخل حيث يمكن ملاحظة العدد الموجي عند ملاحظة تعديل دوري , $1/d$ يمكننا من الحصول على فصل صحيح d بين نطاقين في مجال العدد الموجي يجب على الأقل قياس مخطط التداخل عبر مسافة $1/d$.

على سبيل المثال : دقة طيفية تبلغ 4 cm^{-1} سيتطلب إزاحة x واحدة على الأقل لمرآة متحركة مقاسة بـ $0,25 \text{ cm}^{-1}$ أي انه كلما زدنا من حركة المرآة المتحركة زاد عدد القرار الطيفي أيضا كلما زادت الدقة كان تحديد الطيف أفضل.



شكل (16.I) : الدقة الطيفية لتحليل الطيفي [23].

6.5.I طرق قياس مطياف FTIR :

هناك ثلاث طرق قياسية للإرسال والانعكاس والانعكاس الكلي الداخلي المخفف (ATR) كما موضح في الشكلين: (17.I) , (18.I) .

1. الإرسال :

يعد الإرسال أقدم طريقة للأشعة تحت الحمراء وأكثرها استخداما في التحليل الطيفي [24] حيث تتطلب طريقة القياس بالإرسال استخدام وسائط شفافة تتميز بامتصاصية اقل في مجال الأشعة تحت الحمراء نذكر أمثلة عن هذه الوسائط , فلوريد الكالسيوم (CaF₂) , بروميد البوتاسيوم (KBr) , سيلينيور الزنك (ZnSe) , فلوريد الباريوم (BaF₂) , الجرمانيوم (Ge) والاهم أن تكون العينة رقيقة بما يكفي للسماح للأشعة تحت الحمراء بالمرور، تمر حزمة الأشعة تحت الحمراء عبر العينة ويتم قياس الامتصاص ثم يتم جمع الإشارة وإرسالها إلى الكاشف حيث نحصل على الإرسال الموضح بالعلاقة التالية [20] .

$$T=I/I_0 \quad (21)$$

I_0 : شدة الضوء قبل مرور العينة.

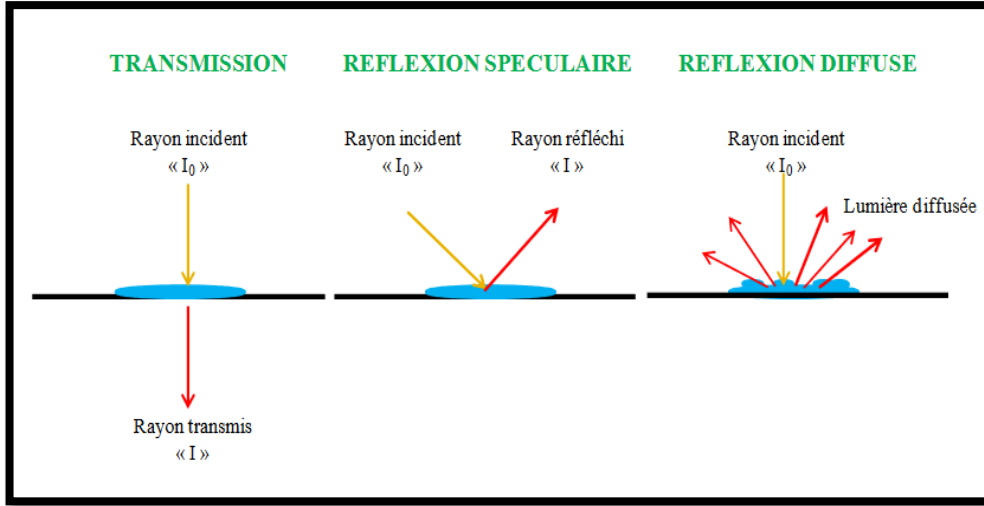
I : شدة الضوء بعد مرور العينة.

نحصل على عبارة الامتصاص بالعلاقة التالية :

$$A = -\log T = \log (I_0/I) \quad (22)$$

2. الانعكاس :

يتم تقسيم مطيافية الانعكاس بالأشعة تحت الحمراء إلى انعكاس انعكاسي (مرآوي) أو انعكاس منتشر حيث يتضمن الانعكاس الانعكاسي أو المرآوي تحليل العينات العاكسة أو الشبيهة بالمرآة والذي يحدث عند زاوية سقوط مساوية لزاوية الانعكاس بالنسبة لسطح العينة (أسطح ملساء) ، يتضمن الانعكاس المنتشر جمع ضوء الأشعة تحت الحمراء المنعكس في جميع الاتجاهات بواسطة الأسطح الخشنة للعينة [24] .



شكل (17.I) : طريقتي الإرسال والانعكاس لقياس العينات في التحليل الطيفي [1].

3. الانعكاس الكلي الداخلي (ATR) :

مطيافية الانعكاس الداخلي وكما موضحة في الشكل (18.I) هي طريقة شائعة الاستخدام في التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء حيث بدأ تطوير منهجية ATR في أوائل الستينيات مع أعمال Harrick حيث تم إجراء التحليل الطيفي للانعكاس الداخلي (الكلي) من خلال غمر عينة في مادة بلورية مثل ألماس، سيلينيد زنك، السيليكون أو الجرمانيوم، يمر ضوء الأشعة تحت الحمراء عبر البلورة سيخضع لانعكاس داخلي كلي نرمل له ب I Source(x) هو الشدة الكلية المنبعثة من المصدر و I(x) تمثل الشدة بعد انعكاس العينة تبعا لقانون ديكارت يمر شعاع IR عبر البلورة ويخضع لانعكاس كلي عند السطح ثم يتم توجيه العينة البلورية إلى الكاشف، من خصوصية البلورة مقاومة عالية بالإضافة إلى احتوائها على مؤشر ذات انكسار عالي يعبر عنه ب n2، ومؤشر انكسار اقل للعينة يعبر عنه ب n1 تؤدي هذه الظاهرة إلى تشكيل موجة سريعة الزوال قادرة على اختراق العينة وامتصاصها مع احتفاظ بجزء من الطاقة الضوئية يقال هنا إن الانعكاس الكلي تم تخفيفه [23].

(

$$dp = \frac{\lambda}{2\pi n_2 \sqrt{\sin^2 \alpha - \left(\frac{n_2}{n_1}\right)^2}} \quad (23)$$

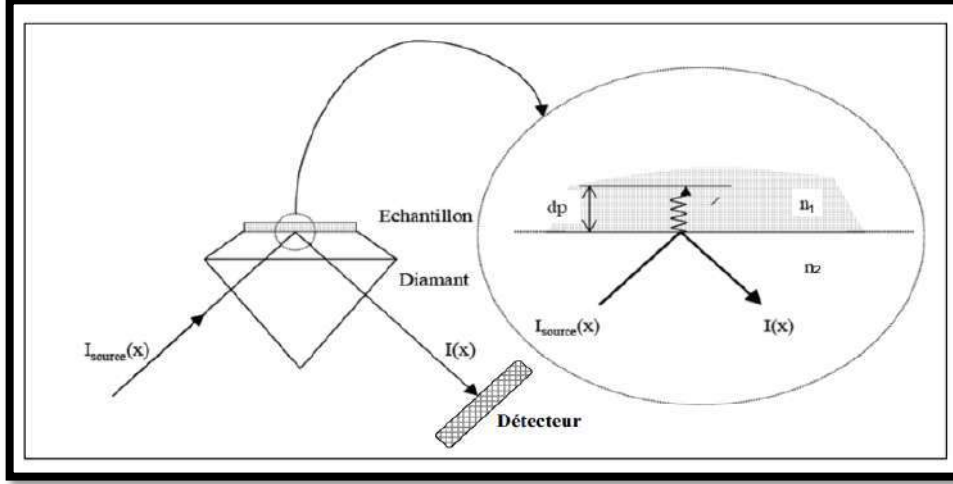
dp: عمق اختراق الموجة للعينة يطلق عليه معامل الاختراق.

λ : طول الموجي.

α : زاوية وقوع الحزمة داخل البلورة.

n_1 : مؤشر انكسار البلورة.

n_2 : مؤشر انكسار العينة.



شكل (18.I) : مبدأ الانعكاس الكلي الداخلي (ATR) [23].

7.5.I. خصائص مطيافية الأشعة تحت الحمراء :

- يوفر التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء العديد من المزايا التحليلية أهمها: [1]
- ميزة Jacquinet ينتج عن هذه الميزة انه في أداة التشتت يمر الضوء عبر فتحات أحادي اللون حيث تحد من مقدار كمية الضوء التي تدخل أو تغادر يتم تحديد مقياس تداخل من خلال قطر الحزمة الموازية القادمة من المصدر ينتج عن هذا نسبة إشارة إلى ضوضاء جيدة جدا.
 - ميزة Fellgett يتم جمع الأطوال الموجية في وقت واحد ينتج عن هذا نسبة إشارة إلى ضوضاء عالية.
 - ميزة Connes الدقة العالية لمقياس التردد هذا يسهل بعض العمليات الحسابية البسيطة مثل تصحيح خط القاعدة, حساب المتوسطات.
 - إنتاجية سريعة وعالية.
 - معايرة ذاتية داخلية أوتوماتيكية..
 - دقة طيفية جيدة .

8.5.I مجالات تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء بشكل عام :

- تستخدم في الطب الشرعي لتحديد بنية ونوع المركبات [1].
- صناعة الالكترونيات الدقيقة لتوصف المواد [1].
- البيئة لتوصيف الملوثات [1].
- صيدلة لتوصيف المركبات [1].
- جيولوجيا لتحديد المعادن بواسطة مقياس طيف الأشعة تحت الحمراء الدقيق [1].
- الأغذية الزراعية لتحليل الغذاء (الفطريات والبكتيريا)[1].

المراجع :

- [3] م.م. عبد الوهاب. 2016. محاضرات الكيمياء الضوئية المرحلة الثالثة, صفحة (2_1).
- [4] ع، عبد الفتاح. (2021-2022). مدخل إلى الكيمياء الضوئية الفصل الأول. مطبوعة جامعة قاصدي مرباح ورقلة، صفحة(5).
- [11] د. أنس مالك الراوي. (1992). ألف باء الأشعة تحت الحمراء. دار الحكمة للطباعة والنشر. صفحة(8_14).
- [13] د. عبدالعليم سليمان ابوالمجد. (2011). التحليل الطيفي باستخدام الأشعة تحت الحمراء. الأكاديمية الحديثة للكتاب الجامعي. صفحة(16).
- [1] Taleb, I. (2013). *Apport de la spectroscopie vibrationnelle, infrarouge et Raman, appliquée au sérum pour le diagnostic de carcinome hépatocellulaire chez les patients atteints de cirrhose* (Doctoral dissertation, Reims). Page (37_41).
- [2] Hofmann, A. (2010). *Spectroscopic techniques: I Spectrophotometric techniques. Principles and techniques of biochemistry and molecular biology*, 477-521.
- [5] Harris, D. C. (2010). *Quantitative chemical analysis. 8th ed. New York: W. H. Freeman and Company*. 719 pp.
- [6] Formation ABB. Analyseur FTIR – *Introduction à la spectrométrie infrarouge*. Réalisée le 14/02/2012.
- [7] Bertrand. D, Dufour. E. (2006). *La spectroscopie infrarouge et ses applications analytiques*. Lavoisier.
- [8] Aliouche, S. *Etude de l'élimination d'un colorant par différentes méthodes photochimiques en milieu aqueux*. constantine .
- [9] [https://shabab-ibb.yoo7.com/\(2022/03/10\)](https://shabab-ibb.yoo7.com/(2022/03/10)) .
- [10] LAIDI, L. (2017_2016). *Etude de la régénération d'un carbon actif par la spectroscopie infrarouge à transformée de Fourier (Ftir)*. Mémoire de Master en chimie. Université Abdelhamid ben Badis Mostaganem. page(17).
- [12] Rouessac, F., & Rouessac, A. (2004). *Analyse chimique «Méthodes et techniques instrumentales modernes»* Éditions DUNOD. *ChapI: Chromatographie, aspects généraux*, 7-33 .
- [14] Jones, R. N. (1956). *C. Sandorfy in Technique of Organic Chemistry*, Vol. IX .
- [15] [https://www.alfreed-ph.com\(2022/02/20\)](https://www.alfreed-ph.com(2022/02/20)) .

- [16] Mazet, V. (2005). *Développement de méthodes de traitement de signaux spectroscopiques: estimation de la ligne de base et du spectre de raies* (Doctoral dissertation, Université Henri Poincaré-Nancy 1).page(20).
- [17] Bertrand D.(2002). *La spectroscopie porche infrarouge et ses applications dans les industries de l'alimentation animale*. INRA Prod. Anim;15(3):209-219 .
- [18] Keirsse, J. (2003). *Spectroscopie infrarouge déportée: mise au point d'un biocapteur pour l'imagerie métabolique et la sécurité microbiologique* (Doctoral dissertation, Université Rennes 1).Page(21) .
- [19] Online edition for students of organic chemistry lab courses at the University of Colorado, Boulder, Dept of Chem and Biochem (2002).
- [20][https://stringfixer.com\(2022/02/28\)](https://stringfixer.com(2022/02/28)) .
- [21] Griffiths, P. R. Haseh, J. A. (1986). *Fourier transform infrared spectroscopy in chemical analysis: a series of monographs on analytical chemistry and its applications*. 38 .
- [22] Mattoussi, M. (2020). *Spectroscopie infrarouge de la molécule CF4* (Doctoral dissertation, Reims). Page(36-37) .
- [23] Essendoubi, M. (2007). *Identification et typage par (micro) spectroscopie IRTF des levures du genre Candida d'origine clinique* (Doctoral dissertation, Reims). Page (27_ 28) .
- [24] Damin, C. A. (2013). *Instrument Développement and Application for Qualitative and Quantitative Sample Analyses Using Infrared and Raman Spectroscopies* (Doctoral dissertation, Miami University).Page (6_7).

الفصل الثاني

المركبات غير العضوية

1.II. تمهيد :

إذا تم تعريف الكيمياء العضوية بأنها كيمياء الهيدروكربونات ومشتقاتها فإنه يمكن تعريف الكيمياء غير العضوية بأنها كيمياء تشمل العناصر الكيميائية جميعها بما في ذلك الكربون الذي يلعب دورا كبيرا في الكثير من المركبات اللاعضوية المعروفة [1] ، فهي تستخدم منذ العصور القديمة حيث كانت الطبيعة الكيميائية لهذه المواد غير معروفة حتى أواخر القرن التاسع عشر وأوائل القرن العشرين فقد إعتد الكثير مما نعرفه عن الكيمياء غير العضوية إلى حد كبير على أعمال ومناقشات العالم ألفريد ويرنر Alfred Werner (1866-1919) ولقد تحصل هذا الأخير على جائزة نوبل في الكيمياء عام 1913 بعد نجاحه في هذه المناقشات، تراجعت شعبية مجال الكيمياء غير العضوية حتى منتصف القرن العشرين عندما أثارت الحرب العالمية الثانية الاهتمام المتجدد. خلال مرحلة ما بعد الحرب ، تم تطوير العديد من الاكتشافات والنظريات الهامة [2] ، ومن هذا نقول في تعريف المركبات غير العضوية بأنها تدرس المركبات التي لا يكون الكربون من نواتج احتراقها [1] ، ولا تحتوي على روابط كربون-هيدروجين بما في ذلك المعادن والأملاح المعدنية ويتم النظر إلى المركبات غير العضوية بصفة تقليدية على أنها مركبات الأنظمة الجيولوجية، فمنها المواد الأولية التي تستخرج من المحاجر كمعدن الحديد ومعدن النحاس والفحم (كربون)، ومواد شبيهة يمكن تحضيرها معمليا مثل نترات البوتاسيوم وملح الطعام وكربيد الحديد [3]، وقد وصف عالم الكيمياء بيرزيليوس (Berzelius) في القرن التاسع عشر المركبات غير العضوية على أنها من أصل جمادي غير بيولوجي [4].

2.II. المركبات غير العضوية :

تعتبر المركبات غير العضوية (Inorganic compounds) من المواد التي تتكون من مزيج من العناصر المعدنية وغير المعدنية، و بشكل عام وأدق فهي المركبات الكيميائية التي تخلو تركيباتها من وجود ذرات الكربون كما موضح في الشكل (1.II)، وفي حالة تواجده لا يعد أو يعتبر عنصرا رئيسيا، أي أن المادة غير العضوية هي مادة خاملة تأتي عادة من قشرة الأرض.

كما يمكن أن تتكون المركبات غير العضوية من العناصر المعدنية وغير المعدنية من خلال الروابط الأيونية، حيث يحدث هذا النوع من الروابط عن طريق انتقال الإلكترونات من

المعادن إلى غير المعادن ، ولكن لا بد من التئويه إلى أن الفرق بين المواد العضوية وغير العضوية يعتمد على طبيعة العلاقة بين المركب ومدى احتوائه على نسبة الكربون والهيدروجين [5].

The image shows a standard periodic table of elements. A callout box for Carbon (C) provides the following information: Atomic number 6, Chemical symbol C, Chemical name Carbon, and Atomic weight 12.011. The table is color-coded: Metals are in shades of blue and green, Nonmetals in shades of yellow and orange, and Noble gases in shades of purple. A key at the bottom left indicates physical states: Solid (blue square), Liquid (orange square), Gas (yellow square), Radioactive (red square), and Artificially made (green square).

الشكل (1.II): الجدول الدوري للعناصر [6].

1.2.II. مكونات المركبات غير العضوية :

قد تتكون المركبات غير العضوية من معادن ثقيلة وعناصر سامة (مثل الرصاص والزنك والكروم والزرنيخ وما إلى ذلك) في صورة نقية أو مجتمعة مع عناصر أخرى. توجد هذه المركبات بشكل أساسي في الطور الصلب، ولكن يمكن أن توجد أيضاً في درجة الحرارة العادية في الطور الغازي أو في حالة إتران بين الطور الغازي والطور السائل إذا كان لديها ضغط بخار مرتفع ويمكن أن تكون في حالة سائلة (على سبيل المثال: الزئبق) أو تكون على شكل محاليل مائية إذا كانت قابلة للذوبان في الماء.

بشكل عام، تتبع الطبيعة غير المرغوب فيها (على سبيل المثال، السامة أو الخطرة) لهذه المركبات من العناصر التي تحتوي عليها بدلاً من بنيتها لذلك يمكن التخلص من الخواص

غير المرغوب فيها في معظم المركبات غير العضوية عن طريق الأكسدة أو التحلل الحراري لتلك المركبات، تشمل الاستثناءات الملحوظة مركبات مثل كبريتيد الهيدروجين (H_2S) والأمونيا (NH_3) ، والتي تصبح أقل سمية عندما تتأكسد [7].

II.2.2. أمثلة على المركبات غير العضوية في حياتنا اليومية:

من أهم الأمثلة على المركبات الكيميائية غير العضوية والتي نستخدمها في الحياة اليومية:

● **الماء (H_2O):** يعد الماء جزء أساسي في الحياة، وهو مادة غير عضوية عديمة اللون والطعم والرائحة تتكون نتيجة اتحاد ذرتي هيدروجين مع ذرة أكسجين ويوجد في الطبيعة بالحالة الصلبة والسائلة والغازية، ويتميز بخاصية القدرة على إذابة العديد من المواد الأخر حيث يدخل في تكوين أجسامنا ويدخل في كل مجالات الحياة ، سواء في الغذاء أو الدواء أو الشرب أو الصناعة أو الزراعة [8].

● **حامض الكبريتيك (H_2SO_4):** يدخل حامض الكبريتيك في العديد من الاستخدامات، وهو يعد أحد أهم المنتجات في الصناعات الكيماوية، ويستخدم في معالجة خامات المعادن، ويدخل في تكرير النفط، كما يتم استخدامه في صناعة الأسمدة و معالجة مياه المجاري [8].

● **بكربونات الصوديوم ($NaHCO_3$):** وهو مركب كيميائي غير عضوي يُعرف كذلك باسم صودا الخبز، ويتميز بأنه مادة صلبة بيضاء بلورية غالبًا ما تكون على هيئة مسحوق ناعم، ويمتلك القدرة على التفاعل كيميائيًا إما كمادة حمضية أو قاعدية، وهو غير ضار نسبيًا، تتم إضافته إلى عمليات معالجة اللحوم، ويستخدم لمنع تسوس الأسنان [8].

● **كربونات الكالسيوم ($CaCO_3$):** يشكل نسبة 4% من قشرة الكرة الأرضية، ويوجد في الطبيعة بأشكال مختلفة وأكثرها شيوعًا الطباشير والرخام ، كما تستخدم في تحضير الاسمنت وفي التخلص من آثار الأمطار الحمضية [8].

● **كلوريد الصوديوم ($NaCl$):** المعروف بملح الطعام، ويتشكل نتيجة اتحاد عنصري الكلور والصوديوم، ويتناوله الإنسان لما له من فوائد عديدة كامتصاص المواد الغذائية ونقلها، والحفاظ على ضغط الدم والتوازن الصحيح للسوائل، وله دور في انقباض العضلات وانبساطها [8].

● **الأمونيا (NH_3):** تعد الأمونيا مصدر للنيتروجين في الأسمدة الزراعية، وتعد واحدة من المواد الكيميائية غير العضوية الأساسية في إنتاج النايلون والبلاستيك والمتفجرات، كما أن

صناعة الأسمدة الزراعيّة تعتمد وبشكل أساسي على استخدام الأمونيا، ويتم هذا باستخدام أملاح الأمونيوم بأنواعها [8].

II.3.2.أصناف المركبات غير العضوية :

الطريقة الأكثر شيوعًا لتصنيف أنواع المركبات غير العضوية هي حسب مجموعاتها الوظيفية وهذه الأنواع هي كالتالي :

• القواعد برونشتد- لوري :

هي كل فرد كيميائي ذرة او جزئ قادر على اكتساب بروتون H^+ او اكثر خلال التفاعل الكيميائي، عندما تذوب في الماء كليا يشار إلى المحلول على أنه "قلوي قوي" ويمكن استخدامه لتحديد الأحماض عند التفاعل مع الأحماض ، تكون النواتج هي ملح وماء، ينتج عن تفككها في الماء أيونان منفصلان بشكل عام كاتيون معدني مثل NH_4^+ أنيون مثل OH^- الناتجين عن التحلل المائي لهيدروكسيد الأمونيوم NH_4OH [9].

• الأحماض برونشتد- لوري :

هي كل فرد كيميائي ذرة او جزئ قادر على فقد بروتون H^+ او اكثر خلال التفاعل الكيميائي ، وهي مقسمة إلى:

• الهيدراكيديات :

تجمع بين الهيدروجين وعنصر غير معدني. تركيبته لا تحتوي أبدًا على الأكسجين. على سبيل المثال، حمض الهيدروكلوريك (HCl) [9].

• الأكسيديات :

تجمع الماء مع أكسيد الحمض، بحيث تحتوي صيغتها دائمًا على لأكسجين والهيدروجين. على سبيل المثال: حمض الكبريتيك (H_2SO_4) [9].

• الأملاح :

هي تلك التي تنتج عن الجمع بين حمض مع القاعدة وتنقسم إلى : [9]

1. أملاح الأكسجين:

تحتوي تركيبها دائمًا على الأكسجين وعنصر معدني وغير معدني على سبيل المثال، نترات الصوديوم $(NaNO_3)$.

2. أملاح الهاليد :

يتكون هيكلها من مادة غير فلزية مع معدن، وفي عملية تكوينها يتم إنتاج الماء على سبيل المثال :الملح الشائع واسمها الكيميائي كلوريد الصوديوم(NaCl).

• الأكاسيد :

تجمع المركبات المكونة من اتحاد الأكسجين مع عنصر آخر. تنقسم إلى أكاسيد قاعدية وأكاسيد حمضية[9].

1. الأكاسيد القاعدية :

تجمع بين الأكسجين والمعدن من خلال رابطة أيونية. على سبيل المثال ، أكسيد المغنيسيوم (MgO)، الذي يستخدم في تصنيع مضادات الحموضة في المعدة.

2. الأكاسيد الحمضية :

تجمع الأكسجين مع مادة غير معدنية من خلال الروابط التساهمية. على سبيل المثال، أول أكسيد الكربون(CO) .

• الهيدريدات :

هي المركبات المكونة من ذرات الهيدروجين مع عنصر معدني على سبيل المثال ، هيدريد الصوديوم(NaH) [9].

II.4.2.4. مركبات التناسق :

مركبات التناسق (coordination compounds) أو (Complexes) هي عبارة عن جزيئات لها مركز معدني، وهذا المركز المعدني مرتبط بروابط كيميائية سواء كانت مع ذرات أو أيونات أو جزيئات، حيث تشكل روابط تساندية مع المركز المعدني كما يمكن أن تكون هذه المركبات إما متعادلة أو مشحونة وتسمى المرتبطات (Ligand) [10] .

II.4.2.1. هياكل مركبات التناسق:

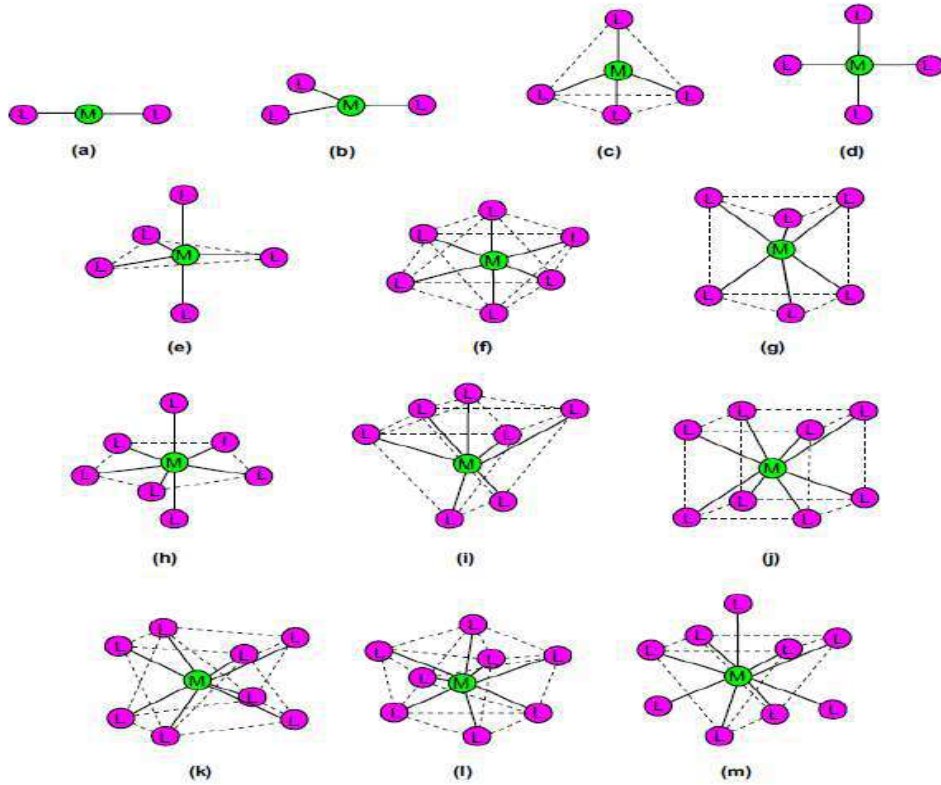
معظم المركبات تظهر أرقام تناسقاتين أو أربعة أو ست، وتوجد أيضا مركبات تكون فيها أرقام التناسقات ثلاثة أو خمسة أو سبعة أو ثمانية من بين هذه المركبات :

•مركبات لها رقم تناسق 2 (خطي) مثل : معقد $Ag(NH_3)_2^+$

• مركبات لها رقم تناسق 4 (معقدات رباعية السطوح) مثل $[\text{CoCl}_4]^{2-}$: أو مستو مربع مثل: معقد $[\text{Pt}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$.

• مركبات لها رقم تناسق 6 (ثمانية السطوح) مثل: معقد $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]^{3+}$.

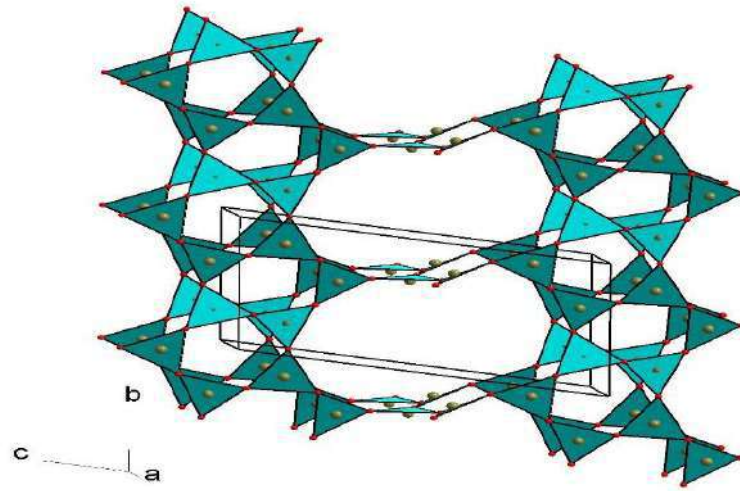
إلى حد كبير هناك عدد قليل من المعقدات التي تحتوي على أرقام تناسق 3 (مستو ثلاثي الزوايا)، و5 (مثلث ثنائي هرم)، أو 7 (خماسي ثنائي الهرم أو موشور ثلاثي الزوايا)، أو 8 (مكعب) كما هو موضح في الشكل (2.II) [11].



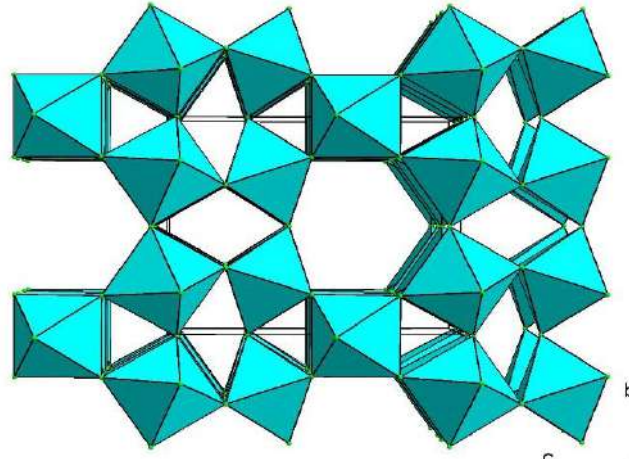
الشكل (2.II): بعض الهياكل الأكثر شيوعاً لمركبات التناسق: (a) خطي، (b) مستو ثلاثي الزوايا، (c) رباعي الوجوه، (d) مستو مربع، (e) مثلث ثنائي الهرم، (f) ثمانية السطوح، (g) موشور مثلثي، (h) خماسي ثنائي الهرم، (i) موشور، (j) مكعب، (k) موشور ثلاثي الزوايا، (l) ثنائي الهرم، و (m) موشور ثلاثي الزوايا [11].

5.2.II. الصيغ الهيكلية للمركبات غير العضوية :

ترتبط خصائص هذه المركبات المتميزة ارتباطاً وثيقاً بهيكلها وكذلك بعمليات التصنيع أو التشكيل، يشير مصطلح "هيكل" هنا إلى تنظيم ذرات المركب عند مستويات مختلفة ، اعتماداً على مقياس القياس المعتمد: التركيب الذري ، البنية النانوية ، البنية المجهرية ، البنية الكلية، حيث يمكن أن تكون المركبات في شكل بلوري ، والذرات مرتبة بشكل دوري ، أو غير متبلورة ، إذا لم تظهر الذرات ترتيباً منتظماً ومتكرراً. بالنسبة للمركبات البلورية ، يمكننا أيضاً التمييز بين الأشكال أحادية البلورات والأشكال متعددة البلورات المكونة من العديد من البلورات ومعرفة خصائص البلورات (الحجم ، الشكل ، ... الخ) وكمثال على ذلك الشكلان (3.II) و(4.II) يوضحان هيكل ثلاثي أكسيد البورون الذي يكون شكله الهندسي رباعي السطوح وهيكل فلوريد الألمنيوم الذي يكون شكله الهندسي ثماني وجوه على الترتيب.



الشكل (3.II) : هيكل ثلاثي أكسيد البورون (B₂O₃) [5].



الشكل (4.II): هيكل فلوريد الألمونيوم (AlF₃) [5].

6.2.II. تسمية المركبات غير العضوية :

a. المركبات الثنائية : وهي المركبات المكونة من عنصرين فقط ويسمى المركب بداية باسم الفلز (الأيون الموجب) ثم اللافلز (الأيون السالب) نضيف في نهايته اللاحقة **(ide)** [12].

● إذا كان العنصر فلزاً وله أكثر من تكافؤ مثل النحاس Cu^+, Cu^{2+} أو الحديد Fe^{2+} , Fe^{3+} نبدأ اسم المركب بهذا الفلز ولتكافؤه الأدنى نضيف في نهاية اسم الفلز اللاحقة **(ous)** أما لتكافؤه الأعلى نضيف بالنهاية اللاحقة **(ic)** وهذه التسمية هو نظام قديم جداً وقد وضعه العالم الألماني Alfred stock سمي باسم نظام ستوكوود بين حالة التأكسد للفلز وتشمل وضع رقم روماني مساو لعدد التأكسد للفلز في أقواس تلي الإسم المنتظم للعنصر .

● إذا كان المركب يحتوي على عنصرين لافلزين يفضل نظام ثالث تكون فيه أعداد كل ذرة في الجزئ محددة ببادئة ونستعمل الكلمات (1) – mono, (2) – di, (3) – tri, (4) – tetra, (5) – penta.... الخ، وأمثلة على ما سبق الموضحة في الجدول (2.II).

الجدول (1.II): تسميات المركبات الثنائية [12].

<i>Formula</i>	<i>English name</i>
CO	carbon monoxide
CO ₂	carbon dioxide
N ₂ O	dinitrogen monoxide, nitrous oxide
NO	nitrogen monoxide, nitric oxide
NO ₂	nitrogen dioxide
N ₂ O ₅	dinitrogen pentaoxide
SO ₂	sulfur dioxide, sulfurous oxide
SO ₃	sulfur trioxide, sulfuric oxide
CaO	calcium oxide (lime)
MgO	magnesium oxide
Al ₂ O ₃	aluminium oxide (alumina)
SiO ₂	silicon dioxide (silica)
ZnO	zinc oxide
Cu ₂ O	copper(I) oxide, cuprous oxide
CuO	copper(II) oxide, cupric oxide
FeO	iron(II) oxide, ferrous oxide
Fe ₂ O ₃	iron(III) oxide, ferric oxide
CrO ₃	chromium trioxide, chromium(VI) oxide
MnO ₂	manganese dioxide, manganese(IV) oxide
Mn ₂ O ₇	dimanganese heptoxide, manganese(VII) oxide

b. تسمية الأملاح :

الأيونات الموجبة ترتبط مع الأيونات السالبة أي ذرة من الكاتيونات تندمج مع الأنيونات فيتشكل لدينا ملح الجدول(2.II) يوضح تسمية بعض الأنيونات والجدول (3.II) يوضح تسمية بعض الكاتيونات .

الجدول (2.II) : تسمية بعض الأنيونات [12].

ANIONS		
<i>Formula</i>	<i>English name</i>	<i>Charge</i>
F ⁻	fluoride	-1
Cl ⁻	chloride	-1
Br ⁻	bromide	-1
I ⁻	iodide	-1
CN ⁻	cyanide	-1
S ²⁻	sulfide	-2
HS ⁻	hydrogen sulfide	-1
CO ₃ ²⁻	carbonate	-2
HCO ₃ ⁻	hydrogen carbonate	-1
OCN ⁻	cyanate	-1
SCN ⁻	thiocyanate (rhodanide)	-1

الجدول (3.II) : تسمية بعض الكاتيونات [12].

CATIONS		
<i>Formula</i>	<i>English name</i>	<i>Charge</i>
Li ⁺	lithium	+1
Na ⁺	sodium	+1
K ⁺	potassium	+1
Ca ²⁺	calcium	+2
Mg ²⁺	magnesium	+2
Ba ²⁺	barium	+2
Al ³⁺	aluminium	+3
Pb ²⁺	lead(II)	+2
Pb ⁴⁺	lead(IV)	+4
Bi ³⁺	bismuth	+3
Ag ⁺	silver	+1
Cr ³⁺	chromium(III)	+3
Co ²⁺	cobalt(II)	+2
Ni ²⁺	nickel(II)	+2
Zn ²⁺	zinc	+2
Mn ²⁺	manganese(II)	+2
Cu ⁺	copper(I), cuprous	+1
Cu ²⁺	copper(II), cupric	+2

عند دمج الكاتيون Na^+ مع الأنيون Cl^- نضيف اللاحقة *ide* مع ملاحظة الإبتداءا بالأنيون قبل الكاتيون لتسمية المركب NaCl فيصبح الاسم كالتالي : **Sodium Chloride** .

$\text{MgI}_2 = \text{Magnesiumiodide}$.

$\text{Al}_2\text{O}_3 = \text{AluminumOxide}$.

c. تسمية الأحماض :

الأحماض هي مواد تطلق أيونات H^+ ، عندما تذوب في الماء وتتكون من شقين شق سالب (المجموعات الذرية)والشق الموجب الهيدروجين، عند تفاعل حمض مع قاعدة يستبدل الهيدروجين بفلز القاعدة لتكوين الملح.

لدينا تسمية بعض الأحماض كما هو موضح في الجدولين (4.II)و(5.II).

الجدول(4.II): تسمية بعض الأحماض[12].

<i>Formula</i>	<i>English name</i>
HF	hydrofluoric acid, hydrogen fluoride
HCl	hydrochloric acid, hydrogen chloride
HBr	hydrobromic acid, hydrogen bromide
HI	hydroiodic acid, hydrogen iodide
HCN	hydrocyanic acid, hydrogen cyanide
H_2S	hydrosulfuric acid, hydrogen sulfide

وكذلك الأحماض الأكسجينية التي تحتوي على أقل عدد من ذرات الأكسجين نكتب في نهاية الاسم اللاحقة (**ous**)، بينما تنتهي أسماء المركبات الأكثر احتواء على ذرات الأكسجين بالنهاية (**ic**) كما هو موضح في الجدول(5.II) .

الجدول (5.II): تسمية الأحماض الأكسجينية [12].

<i>Formula</i>	<i>English name</i>
H ₃ BO ₃	boric acid
H ₂ CO ₃	carbonic acid
HOCN	cyanic acid
HClO	hypochlorous acid
HClO ₂	chlorous acid
HClO ₃	chloric acid
HClO ₄	perchloric acid
H ₂ CrO ₄	chromic acid
H ₂ Cr ₂ O ₇	dichromic acid
HMnO ₄	permanganic acid

d. تسمية القواعد :

القواعد هي مواد تطلق أيونات OH⁻ عندما تذوب في الماء وتتكون من شقين ، شق موجب (فلز) و شق سالب (أكسجين أو مجموعة الهيدروكسيد) حيث أن معظم المركبات هي أملاح ناتجة من تفاعل حمض أو قاعدة كما هو موضح في الجدول (6.II) .

الجدول (6.II): تسمية المركبات القاعدية [12].

<i>Formula</i>	<i>English name</i>
NaOH	sodium hydroxide
KOH	potassium hydroxide
Ca(OH) ₂	calcium hydroxide
Ba(OH) ₂	barium hydroxide
Al(OH) ₃	aluminium hydroxide
Fe(OH) ₂	iron(II) hydroxide, ferrous hydroxide
Fe(OH) ₃	iron(III) hydroxide, ferric hydroxide
Cu(OH) ₂	copper hydroxide
NH ₄ OH	ammonium hydroxide (aqueous ammonia)

e. المركبات التناسقية :

تخضع تسمية المركبات التناسقية للعديد من القواعد اختصرنا تسمية بعض المركبات التناسقية في الجدول (7.II) كأمثلة على تسمية هذا الصنف من المركبات .

الجدول (7.II) : تسميات بعض المركبات التناسقية [12].

<i>Formula</i>	<i>English name</i>
$K_4[Fe(CN)_6]$	potassium hexacyanoferrate(II), potassium ferrocyanide
$K_3[Fe(CN)_6]$	potassium hexacyanoferrate(III), potassium ferricyanide
$Na_2[Fe(CN)_5NO]$	sodium pentacyanonitrosylferrate(III), sodium nitroprusside
$[Ag(NH_3)_2]^+$	diamminesilver cation
$[Cu(NH_3)_4]^{2+}$	tetraamminecopper(II) cation

7.2.II. المقارنة بين الخصائص الكيميائية للمركبات العضوية والمركبات غير العضوية :

يمثل الجدول (8.II) : بعض خصائص المركبات العضوية وغير العضوية [13].

الخاصية	المركبات غير العضوية	المركبات العضوية
الترباط داخل الجزيء	معظمها أيوني	عادة تساهمية
القوى بين الجزيئات	قوي جدا	ضعيف بشكل عام
الحالة الفيزيائية غازات او سوائل أو انصهار منخفضة	مواد صلبة ذات درجة انصهار عالية	غاز أو سوائل أو مواد صلبة ذات درجة انصهار منخفضة
القابلية للاشتعال	غير قابل للاشتعال	في كثير من الأحيان قابلة للاشتعال
الذوبان في الماء	في كثير من الأحيان قابلة للذوبان	غالبا منخفضة
ناقلية المحاليل المائية	ناقل (موصل)	غير ناقل
معدل التفاعلات الكيميائية	عادة سريعة	عادة ماتكون بطيئة

8.2.II. خصائص المركبات غير العضوية :

تشير خصائص المركبات غير العضوية إلى سلوكها ضد عوامل معينة، من بين هذه الخصائص [14]:

- ✓ توصيل كهربائي وحراري جيد .
- ✓ لها نقاط انصهار عالية .

- ✓ لها بنى بلورية مثل الأملاح.
- ✓ بعضها قابل للذوبان في الماء والبعض الآخر غير قابل للذوبان.
- ✓ توازن الشحنات الكهربائية الموجبة والسالبة لتشكيل مركبات متعادلة كهربائياً .
- ✓ إمكانات الأكسدة والاختزال ذات الصلة من الناحية الفسيولوجية لعقاقير السرطان التي تشق الحمض النووي والأدوية التي تزيل جذور الأكسجين الضارة.
- ✓ الخصائص الفيزيائية الضوئية للأمراض التي تتراوح من الصدفية إلى السرطان.
- ✓ النشاط الإشعاعي لاستخدامه في عوامل التصوير.

9.2.II استخدامات المركبات غير العضوية :

غالبا ماتم التطرق لخصائص المركبات غير العضوية هذه الخصائص تجعلها ذات فائدة في مجموعة واسعة من التطبيقات منها ما يأتي : [15] .

- ✓ مصدر للنيتروجين في الأسمدة .
- ✓ كمحفزات في إنتاج البلاستيك والألياف.
- ✓ صنع وقود الطائرات والصواريخ والمتفجرات.
- ✓ صناعة الألوان والأصباغ والورق والبلاستيك.
- ✓ صناعة الأدوية.
- ✓ تستخدم ككواشف كيميائية في العديد من البوليميرات مثل البولي فينيل كلورايد والمواد الزراعية مثل : المبيدات .
- ✓ تستخدم في المواد المعالجة للتربة.
- ✓ مواد كيميائية لمعالجة المياه وتعقيمها.

10.2.II مخاطر المركبات غير العضوية :

ثبت أنّ المركبات غير العضوية مثل الباريوم والكاديوم والكروم لها آثار ضارة على صحة الإنسان ، كما أنّ الباريوم له تأثيرات في الدورة الدموية؛ أظهر الكاديوم آثاراً على الكلى؛ والكروم يمكن أن يؤدي إلى اضطرابات في الكبد والكلى والجهاز التنفسي والدورة الدموية.

وهذه بعض الأمثلة على المواد غير عضوية السامة :

- الرصاص: يمكن أن يؤدي الرصاص من الرواسب الطبيعية / الصناعية والسباكة وحنفيات اللحام إلى تلف الكلى والجهاز العصبي [15].
- النحاس يمكن أن يسبب النحاس من الرواسب الطبيعية / الصناعية والمواد الحافظة للأخشاب والسباكة إلى تهيج الجهاز الهضمي [15].
- الفلوريد: يمكن أن يؤدي الإفراط في تناوله إلى ازدهار الهيكل العظمي والأسنان (تلون الأسنان باللون البني) [15].

المراجع:

- [1] جاري ل. ميسلر , دونالد أ. تار. الكيمياء غير العضوية من سلسلة الكتب الجامعية المترجمة – العلوم الأساسية ، المملكة العربية السعودية & صفحة { 1 } .
- [13] عادل. شاكر الطائي – دايع عبد الحساوي الكيمياء العضوية الإليفاتية / الطبعة الأولى 2009/ عمان – الأردن.
- [2]Kauffman, G. B. (2013). *Alfred Werner: Founder of Coordination Chemistry*. Springer Science & Business Media.
- [3]Auvert, G. (2017). *Difference in Number of Electrons in Inner Shells of Charged or Uncharged Elements in Organic and Inorganic Chemistry: Compatibility with the Even-Odd Rule*. *Open Journal of Physical Chemistry*, 7(02), 72.
- [4]Adhamjonov, M. (2022). *IMPLEMENTATION OF EFFECTIVE ORAL CORRECTIVE FEEDBACK IN ENGLISH LANGUAGE CLASSES*. *American Journal of Interdisciplinary Research and Development*, 4, 30-33.
- [5] Karima, N. K. B. H. D. (2021). *Elaboration et Caractérisation d'un Matériau Inorganique (destiné à la Préparation des Matériaux Composites)* (Doctoral dissertation, UNIVERSITE MOHAMED BOUDIAF-M'SILA).
- [6] Speight, J. G. (2017). *Chapter Eight: Environmental Regulations*. *Environmental Inorganic Chemistry for Engineers*, 383-426.
- [7]Wilcox, J. B. (2005). *Electrical and thermal solutions*. In *Environmental Solutions* (pp. 203-211). Academic Press
- [8] Housecroft, C. E. (2018). *Integrating Chemistry: Crossing the Millennium Divide*. *CHIMIA International Journal for Chemistry*, 72(1-2), 36-42.
- [9]Sodiqovna, O. M., & Alisherovna, A. M. (2021). *Classification Of Inorganic Substances and Their Types*. *Texas Journal of Multidisciplinary Studies*, 2, 231-234.
- [10] Barnes, C. E. (2003). *Inorganic Chemistry (Catherine E. Housecroft and Alan G. Sharpe)*. *Journal of Chemical Education*, 80(7), 747
- [11] JAMES E. HOUSE. (2008..)*INORGANIC CHEMISTRY* Copyright _ Elsevier Inc. State University
- [12]<https://in.pinterest.com> (2022/05/10)

[14] Farrer, B. T., & Pecoraro, V. L. (2003). *Hg (II) binding to a weakly associated coiled coil nucleates an encoded metalloprotein fold: A kinetic analysis. Proceedings of the National Academy of Sciences, 100(7), 3760-3765*

[15] Hazeltine, B., & Bull, C. (Eds.). (2003). *Field guide to appropriate technology*. Elsevier

الفصل الثالث

تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)
في تشخيص المركبات غير العضوية

III. تمهيد:

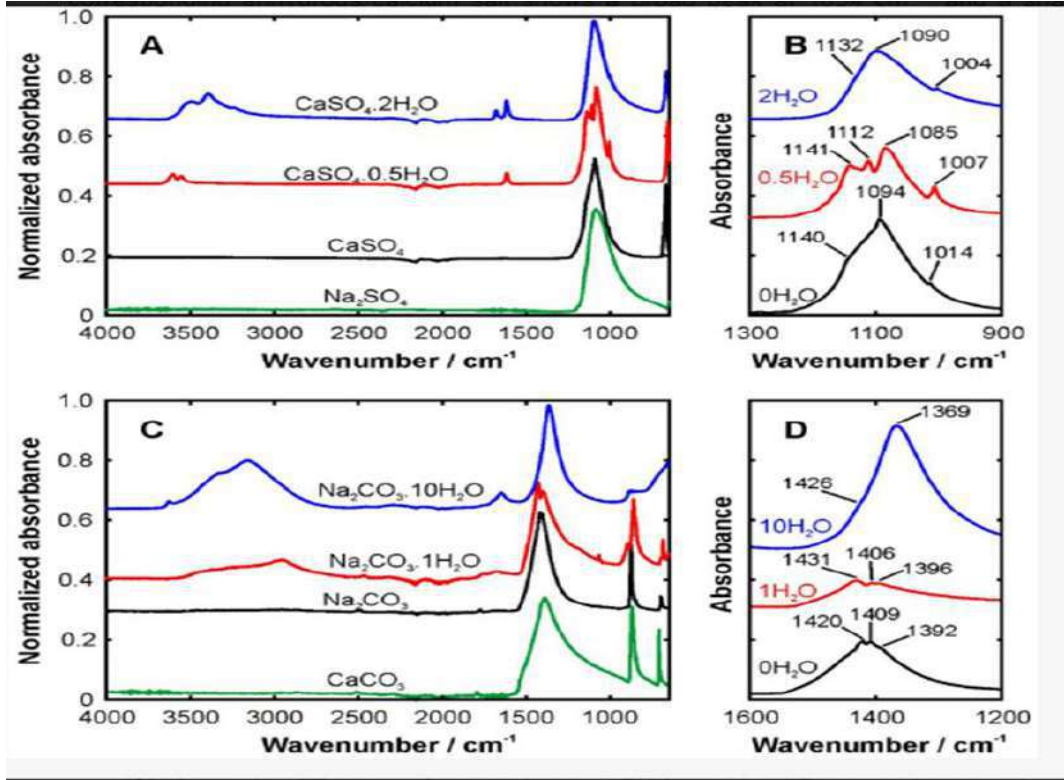
تعد تقنية FTIR من التقنيات ذات الأهمية الكبيرة في تشخيص المركبات غير العضوية، ولقد تم الاعتماد على هذه التقنية في العديد من الأبحاث والدراسات وذلك بهدف معرفة طبيعة الارتباط في هذه المركبات أي بمعنى آخر التعرف على أنواع الروابط والمجموعات الموجودة في المركبات غير العضوية إضافة إلى هذه التقنية هناك تقنيات أخرى متداولة يعتمد عليها في تشخيص المركبات غير العضوية نذكر منها حيود الأشعة السينية (DRX) والتحليل الطيفي المرئي وفوق البنفسجي (UV-VIS) والرنين النووي المغناطيسي (NMR) ومطيافية رامان وتقنية المجهر الإلكتروني الماسح (SEM) والرنين البارامغناطيسي الإلكتروني (EPR) أو (ESR).

III.1. تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية :

جل الأبحاث التي اهتمت بدراسة المركبات غير العضوية بجميع أصنافها وأشكالها تم الاعتماد فيها على تقنية مطيافية الأشعة تحت الحمراء في تشخيص هذه المركبات فعلى سبيل المثال:

III.1.2. دراسة التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء للرواسب غير العضوية من المياه في المبادلات الحرارية المنزلية والتقنية :

قام (Kiefer, J) وآخرون سنة (2018) ، ببحث تحت عنوان التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء للرواسب غير العضوية من المياه في المبادلات الحرارية المنزلية والتقنية والتي كانت تهدف إلى اختبار والتحقق من خصوصية طريقة التحليل الطيفي حيث تم تحليل بعض الأملاح المرجعية كما هو موضح في الشكل (1.III) الذي يعرض أطيف الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فوريه FTIR لبعض المواد المرجعية النقية [1]. فكانت نتائج FTIR كالتالي :



الشكل (1.III): أطياف الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فوريه FTIR لبعض المواد المرجعية النقية [1].

يظهر طيف كبريتات الصوديوم عصابة عريضة واحدة تكون ذروتها عند 1085cm^{-1} ، بينما يظهر طيف كبريتات الكالسيوم (CaSO_4) ذروة واسعة عند 1094cm^{-1} وأخرى عند 671cm^{-1} ، تظهر هذه المنطقة بشكل أوضح أكثر حول 1100cm^{-1} في الشكل B

أطياف كبريتات الكالسيوم التي تحتوي على الماء لها عصابات تحتوي قمة صغيرة في المنطقة التي تتجاوز 3000cm^{-1} وهذه العصابة تنسب إلى وجود رابطة OH إضافية بسبب اهتزازات أوضاع الانحناء ويمكن ملاحظة أوضاع تمدد في المنطقة ($1600\text{-}1700\text{cm}^{-1}$)

في الأطياف الموجودة في الشكل C يظهر FTIR طيف كربونات الكالسيوم نطاقا عريضا تبلغ ذروته 1390cm^{-1} ، بالإضافة إلى قمم حادة ما بين ($712\text{-}871\text{cm}^{-1}$) ويمكن العثور على ميزات طيفية مماثلة عند 1420cm^{-1} و 878cm^{-1} و 702cm^{-1} على التوالي لكربونات الصوديوم ويمكن رؤية المنطقة 1420cm^{-1} بصورة أكبر في شكل D ، يتم تقليل الامتصاص في $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 1\text{H}_2\text{O}$ في حين الامتصاص يكون قوي بشكل ملحوظ في $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10\text{H}_2\text{O}$

لا ينتج نطاق $\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$ عن اهتزازات الماء ومع ذلك يبدو أن وجود كميات أكبر من جزيئات الماء في الشبكة البلورية يعزز نشاط الأشعة تحت الحمراء والذي يتمشى مع التغيير في العزم ثنائي القطب لمجموعات الكربونات.

مرة أخرى يؤدي وجود جزيئات الماء إلى نطاقات إضافية ، كما تم تلخيص المواضع OH بسبب اهتزازات التمدد والانحناء الطيفية للقمة الرئيسية كما هو موضح في الجدول (III-1)

الجدول (III.1) : مواضع الذروة المميزة في أطياف الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فوريه (FTIR) للمواد المرجعية بال $[\text{cm}^{-1}]$.

Na_2SO_4	CaSO_4	$\text{CaSO}_4 \cdot 0.5 \text{H}_2\text{O}$	$\text{CaSO}_4 \cdot 2 \text{H}_2\text{O}$	Na_2CO_3	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 1 \text{H}_2\text{O}$	$\text{Na}_2\text{CO}_3 \cdot 10 \text{H}_2\text{O}$	CaCO_3
	671	658	668	702	686		712
		1007		878	862	866	871
1085	1094	1084	1098	1420	1431	1369	1390
		1619	1620		1681	1655	
			1682	1775	1763		1796
		3553	3393		2962	3164	
		3603	3494			3630	

III.1.1.2. خلاصة:

من التحليل الطيفي للمواد المرجعية بال FTIR يمكننا أن نستنتج أن التحليل الطيفي يسمح لنا من التمييز بين الأملاح المختلفة التي توجد عادة في الرواسب غير العضوية في المبادلات الحرارية.

لقد ثبت أن التحليل الطيفي FTIR قادر على تحليل الرواسب غير العضوية من المبادلات الحرارية وأنه أداة قوية، يسمح بالتحليل النوعي.

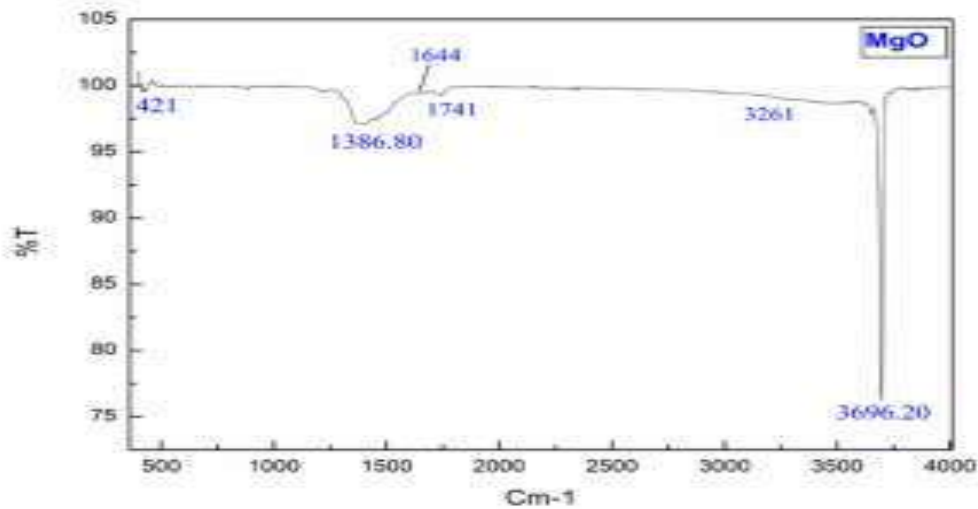
2.2.III- دراسة توليف وتوصيف أكسيد المغنيزيوم (MgO) الجسيمات النانوية بطريقة الترسيب المشترك :

في سنة 2021 قاما الباحثان (Mirza, F., & Makwana, H) بإجراء دراسة حول توصيف أكسيد المعدن (MgO) بطريقة الترسيب المشترك. المعادن قادرة على تكوين عدد كبير من الاكاسيد حيث تلعب الاكاسيد دورا مهما في العديد من المجالات الكيميائية، أكسيد المعدن مهم يعرف باسم أكسيد المغنيزيوم (MgO) ذو تفاعل جيد يستخدم على نطاق واسع في إنتاج الالكترونيايات , محفز, السيراميك , الزيت , الطلاء , وما إلى ذلك، تم تشخيص الجسيمات النانوية من أكسيد المغنيزيوم باستخدام طريقة الترسيب المشترك في درجة حرارة الغرفة، تم توصيف المركب باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه (FTIR)

فكانت النتائج التجريبية كما يلي :

عند استخدام FTIR أظهرت النتائج كما هو موضح في الشكل (2.III) أطياف FTIR لجسيمات النانوية MgO

لاحظنا ظهور نطاق قوي للأشعة تحت الحمراء بالقرب من العصابة 3696 cm^{-1} من اجل اهتزاز الرابطة O-H لمجموعة الهيدروكسي، العصابة عند 421 cm^{-1} تشير إلى وجود جزيئات أكسيد المغنيزيوم (MgO)، تعزى العصابة عند 1386 cm^{-1} لاهتزازات الانحناء للرابطة C-H، بينما تنسب العصابة عند 1741 cm^{-1} و 1644 cm^{-1} إلى وجود تمدد قوي للرابطة C=O والرابطة C=C، تشير العصابة عند 3261 cm^{-1} إلى وجود تمدد ضعيف للرابطة O-H .



الشكل (2.III) : أطياف FTIR للجسيمات النانوية MgO [2].

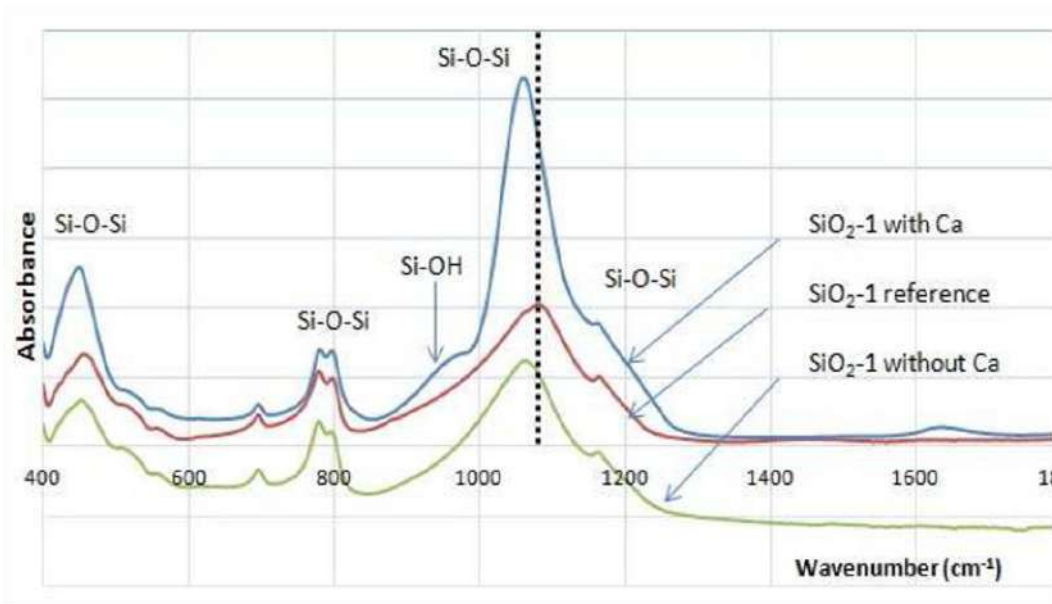
1.2.2.III. خلاصة :

تم تشخيص الجسيمات النانوية MgO بنجاح بواسطة طريقة الترسيب المشترك كما تم الكشف عن خصائص أكسيد المغنيزيوم النانوية والمجموعات الوظيفية المميزة لهذا المركب.

3.2.III. دراسة هيكلية وتغيرات سطحية لمركب SiO₂ :

في دراسة قام بها (A.Oufaki) وآخرون سنة (2018) ، تحت عنوان الدراسة الهيكلية والتغيرات السطحية لمركب SiO₂ والتي تهدف إلى دراسة الفرق بين التركيب والحالة السطحية التفاعلية لمركبات السيليكا (SiO₂) غير المتجانسة مع وبدون وجود الكالسيوم أثناء التفاعل.

فكانت نتائج التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء موضحة في الشكلين (3-III)، (4.III) كالتالي : تظهر أطياف الأشعة تحت الحمراء عصابات عريضة لجميع العينات نلاحظ فيها ذروات قوية في المنطقة التي تتراوح بين (1000-1300cm⁻¹) ويعود ظهور هذه القمم إلى اهتزاز التمديد لرابطة Si-O-Si ، بالإضافة إلى ذلك توجد اهتزازات الانحناء في المنطقة ما بين (555-950cm⁻¹) وذلك راجع لعدم وجود الرابطة Si-OH وتظهر أيضا اهتزازات التمديد في الرابطة Si بعد التفاعل مع وبدون وجود الكالسيوم.

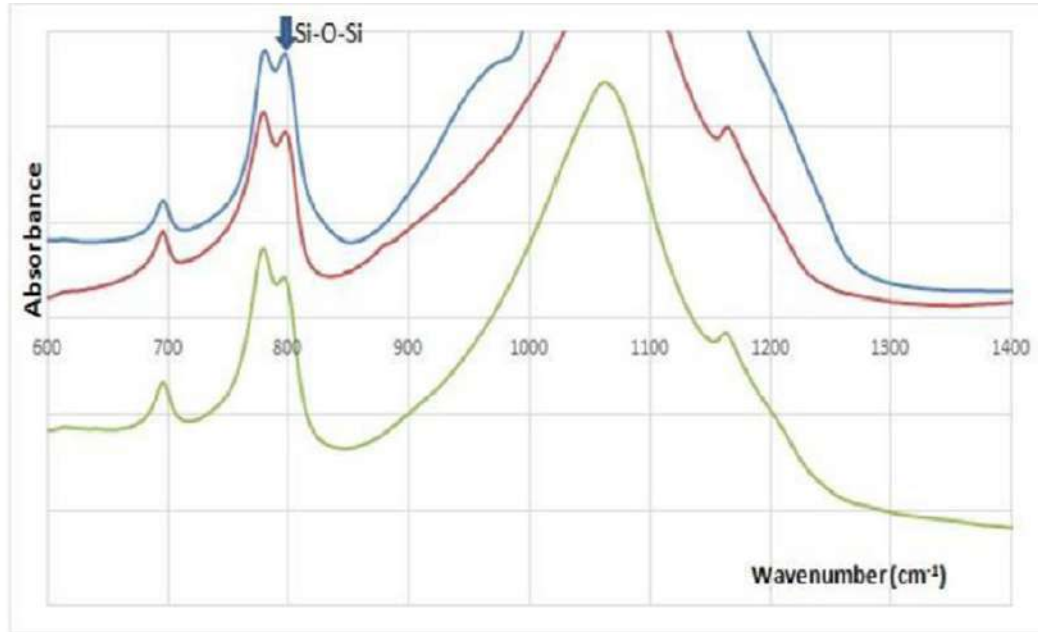


الشكل (3.III) : أطياف FTIR لـ SiO₂-1 بعد التفاعل مع وجود وغياب الكالسيوم مقارنة بالإشارة قبل التفاعل [3].

تتم التغيرات الهيكلية لرابطة Si-O-Si عند المنطقة 800cm⁻¹ كما في الشكل (4.III)

علاوة على ذلك يمكن ملاحظة وجود ذروة ل SiO_2 في وجود الكالسيوم في المنطقة 950cm^{-1} في الشكل (4.III) وتعود هذه الذروة إلى الارتباط بمجموعات Si-OH مقارنة ب SiO_2-1 قبل التفاعل كمرجع وبعد التفاعل بدون كالسيوم.

يزداد ارتفاع الذروة من مجموعة السيلافول ($-\text{Si-OH}$) في SiO_2-1 مع وجود الكالسيوم ، تختلف نتيجة SiO_2-1 مع وجود الكالسيوم ومرجع SiO_2-1 [3].



الشكل (4.III) أطياف FTIR لوجود SiO_2 وغياب الكالسيوم مقارنة بالإشارة قبل التفاعل [3].

1.3.2.III خلاصة:

تمت ملاحظة ومناقشة تحويل التردد من اهتزاز التمدد للأكسجين في الرابطة Si-O-Si وتحويل طاقة الارتباط لقمم الإلكترون الضوئية. تظهر النتائج تأثير وجود الكالسيوم على التغيير الهيكلي والسطح والتفاعلية لمركب SiO_2 بعد التفاعل ويحدث ترتيب هيكلي وتغيرات سطح SiO_2 كما وضحت أطياف FTIR السابقة.

4.2.III. دراسة هيكلية فسفور التيتانات الكالسيوم مع مادة :PRASEODYMIUM

في هذا العمل تم دراسة هيكلية لفسفور التيتانات الكالسيوم CaTiO_3 مع مادة PRASEODYMIUM من طرف (Siti, A. M. F., & Hussin, R.) سنة (2015)، تم دراسة تأثير تركيز الكالسيوم على الخواص التركيبية للفسفور القائم على تيتانات الكالسيوم CaTiO_3 بطريقة تفاعل الحالة الصلبة عند 1000°C في وجود الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه (FTIR) في درجة حرارة الغرفة .

فكانت نتائج FTIR ملخصة في جدول (2.III) والشكل (5.III):

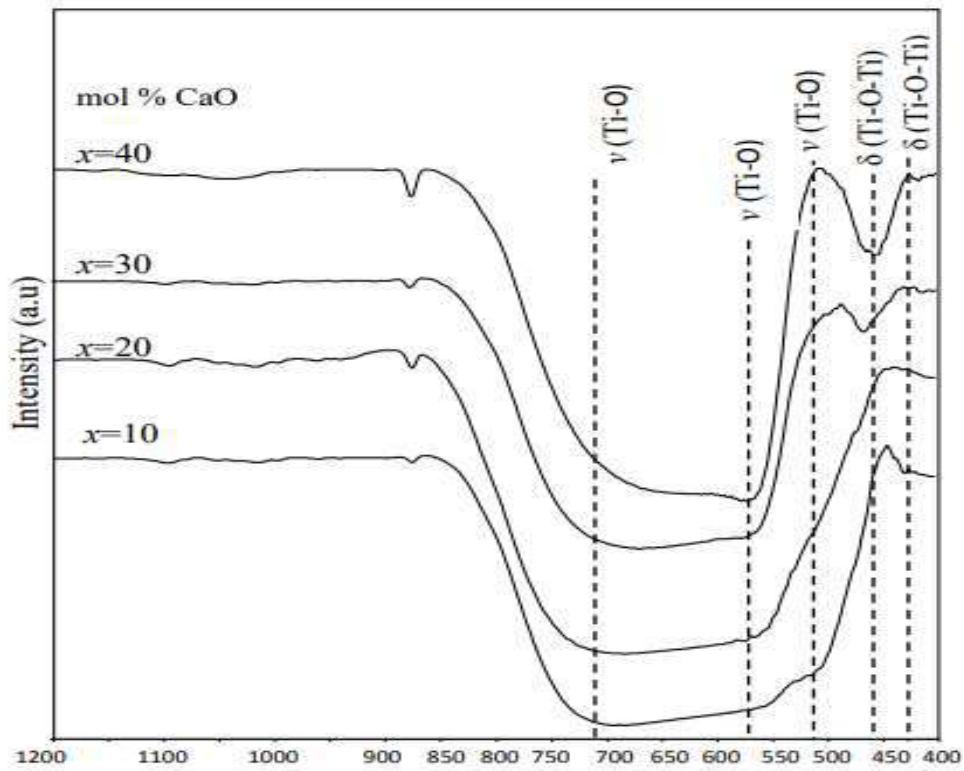
ظهور عصابات رئيسية حول 710 و 570 و 527 و 460 و 415 cm^{-1} بحيث تم تخصيص العصابات العريضة في النطاق 710 cm^{-1} و 570 cm^{-1} إلى اهتزازات التمدد للرابطة O-Ti-Ti للمجموعة TiO_6 كذلك تنسب عصابة الامتصاص عند 527 cm^{-1} إلى اهتزاز التمدد للرابطة Ti-O-Ti بينما ينسب الاهتزاز عند 460 cm^{-1} و 415 cm^{-1} إلى اهتزاز الانحناء للرابطة Ti-O-Ti كما موضح في الجدول (2.III) الذي يبين المجموعات الوظيفية لتيتانات الكالسيوم CaTiO_3 في أطياف FTIR.

في الشكل (5.III) يتناسب العدد الموجي لقمم النفاذية للروابط Ti-O مع الاهتزاز عند إزاحة 710 cm^{-1} إلى قمة اصغر عند زيادة التركيز ca حيث يبلغ عدد موجات النفاذية ذروتها في $10\text{ca}-90\text{TiO}$ كانت قريبة من 710 cm^{-1} بينما في التركيز $40\text{mol}\%$ تم إزاحتها بالقرب من 675 cm^{-1} ووفقا للدراسة يزداد تركيز الكالسيوم في العينة ويتحول إلى أعداد موجية اصغر، اظهر العدد الموجي أن هناك حاجة اقل للطاقة بواسطة ذرات التيتانيوم (Ti) والأوكسجين (O) لرابطة TiO في الجزئ، يتم تحديد الوضع النشط للأشعة تحت الحمراء Ti-O-Ti اهتزازات الانحناء $\delta(\text{Ti-O-Ti})$ عند 460 cm^{-1} بوضوح في أطياف الأشعة تحت الحمراء حيث يتم تحويل الطيف إلى أعداد موجية اقل، تتمتع القمم في هذه المنطقة بطاقة أعلى لكسر الرابطة وتحديدها بسهولة عند $X=30\text{CaO mol}\%$ و $X=40\text{CaO mol}\%$ كانت جميع العصابات تهتز في TiO_6 ثماني السطوح [4] .

الجدول (2.III): المجموعات الوظيفية لتيتانات الكالسيوم CaTiO_3 في أطياف FTIR

[4].

Wavenumber (cm^{-1})	Modes of vibration
710	Ti-O stretching vibration of TiO_6
570	Ti-O stretching vibration of TiO_6
527	Ti-O stretching vibration
460	Ti-O-Ti bending
415	Ti-O-Ti bending



الشكل (5.III): أطياف الأشعة تحت الحمراء لتراكيز مختلفة ل CaO و TiO_2 عند

1000C° [4].

III.1.4.2. خلاصة :

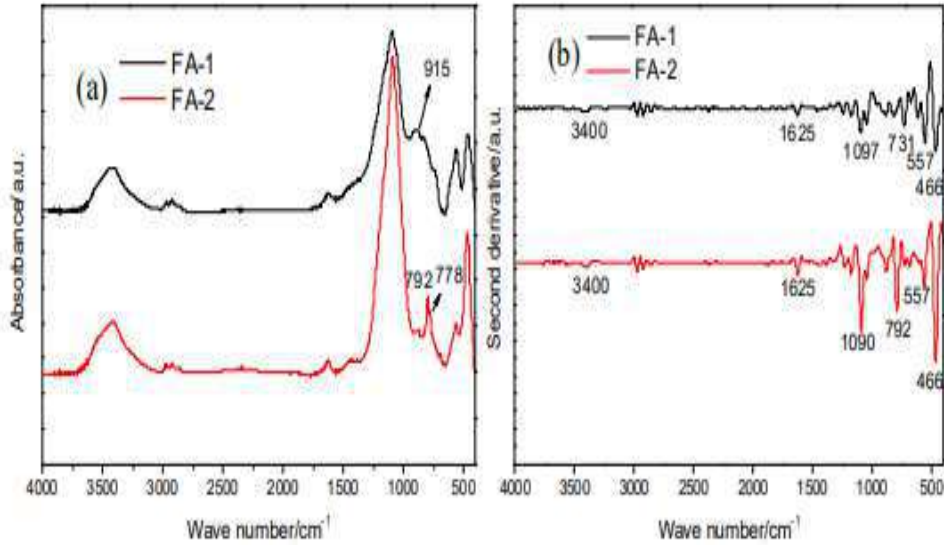
من خلال هذه الدراسة تم التعرف على الخصائص الهيكلية لتيتانات الكالسيوم CaTiO_3 وتحديد المجموعات الوظيفية ل CaTiO_3 وذلك بتحليل عصابات الأشعة تحت الحمراء.

III.5.2. توصيف الهيكلية للألمنيوم السيليكون في نوعان من عينات الرماد المتطاير :

في سنة 2019 قام الباحث (Liu, Y) وآخرون بإجراء بحث حول توصيف الهيكلية للألمنيوم السيليكون في نوعان من عينات الرماد المتطاير، تم اختيار عينتين من مقاطعة شانسي شمال الصين للدراسة حيث كان احدهما من مرجل الفحم المسحوق (Fa-1) والآخر من غلاية الاحتراق ذات الطبقة المميعة (Fa-2)، تم توصيف المركب باستخدام تقنية الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه (FTIR) فكانت النتائج التجريبية موضحة في الشكل (III.6) :

تم تحليل نطاقات الاهتزاز الموجودة في العينتين كما موضح في الشكل (III.6)، لاحظنا ظهور عصابات حوالي 3400 cm^{-1} و 1625 cm^{-1} التي تنسب الى اهتزاز التمدد والانحناء على التوالي للرابطة OH الموجودة في جزيئات الماء، لوحظ نطاق قوي في Fa-1 و Fa-2 عند حوالي 1100 cm^{-1} يعزى ذلك الى اهتزازات التمدد غير المتماثلة للرابطة Si-O(Si) كما يشير الوضع عند 1100 cm^{-1} الى بنية السيليكون النقية، تزداد نسبة Al/Si مع تناقص قيم الموجات بسبب استبدال ذرات Al ل Si في موقع رباعي السطوح، العصابات اكثر حدة عند 1000 cm^{-1} و 1250 cm^{-1} هذا يشير الى ان بنية السيليكون ل Fa-2 كانت مرتبة اكثر من بنية السيليكون ل Fa-1 .

تنسب العصابة عند 557 cm^{-1} الى اهتزازات رابطة Si-O-Al الموجودة في عينات رماد الفحم والتي تكونت من اعادة الترتيب الهيكلية لاهتزازات Si-O-Al في الفحم، العصابة عند 557 cm^{-1} الموجودة في Fa-1 تشير الى استبدال Al ل Si في بنية الموليت، العصابة الموجودة حول 466 cm^{-1} ل Fa-1 و Fa-2 تنسب الى اهتزاز الانحناء للرابطة Si-O-Si الموجودة في سيليكون رباعي السطوح، العصابة عند حوالي 915 cm^{-1} المتمركزة في Fa-2 مرتبطة بوجود الالمنيوم في ثماني السطوح، العصابات المزدوجة عند 778 cm^{-1} و 792 cm^{-1} الموجودة في هيكل Fa-2 ترتبط مع اهتزازات التمدد المتناظرة للرابطة Si-O-Si [5] .



الشكل (6.III): اطياف FTIR للعينتين Fa-1 و Fa-2 يمثل (a) الطيف الاصلي و (b) الشق الثاني [5].

1.5.2.III. الخلاصة :

من خلال الدراسة التالية اظهرت نتائج FTIR استبدال متزايد لـ Al^{3+} لـ Si_4 كذلك حدة العصابات في المنطقة $1250-1000\text{ cm}^{-1}$ يشير الى ان بنية السيليكون لـ Fa-1 مرتبة اكثر من بنية السيليكون لـ Fa-1.

6.2.III. دراسة توصيف معادن الهيماتيت والمغنتيت باستخدام طيف الأشعة تحت الحمراء :

تم توصيف معادن المغنتيت والهيماتيت باستخدام طيف الأشعة تحت الحمراء سنة 2018 من طرف (Mohammed, S. Mohamed. H) أي دراسة خصائص كل من عينة الهيماتيت والمغنتيت حيث تم تشيع هذه العينات باستخدام مطيافية فورير الانتقالية في مدى طول الموجي $4000-400\text{ cm}^{-1}$.

لخصت نتائج المتحصل عليها في الجدول (3.III) والجدول (4.III) :
 من خلال النتائج التي تم تحليلها من طيف الأشعة تحت الحمراء للمغنتيت (3.III)، تم ظهور وضعان من الاهتزاز للرابطة $Fe^{III}-O$ عند العصابتان 570.89 cm^{-1} و 414.76 cm^{-1} التي تنسب إلى المغنتيت و ظهر وضع الاهتزاز لـ $Fe^{II}-O$ عند 613.32 cm^{-1} و 509.17 cm^{-1} يتم تعيينها إلى maghemite لوحظ وضع الاهتزاز لـ

FeIII-O عند 486.3 cm^{-1} و 451.13 cm^{-1} و 441.76 cm^{-1} يتم تخصيصها للمغنتيت كما ظهرت أوضاع اهتزاز المواد الأخرى في 3741.65 cm^{-1} ، 2360.71 cm^{-1} ، العصابة عند 3220.90 cm^{-1} ، 1652.88 cm^{-1} يتم تعيينها لاهتزازات الانحناء لرابطة الهيدروجين وجزئيات الماء الممتصة على السطح وعصابة الامتصاص عند 1053.01 cm^{-1} و 1004.84 cm^{-1} تنسب إلى مجموعة الكبريتات الممتصة S=O كما ظهر وضع الاهتزاز للرابطة Si O-Si عند 852.48 cm^{-1} الذي يعزى لسيليكات بالإضافة إلى ذلك ، أظهرت أوضاع اهتزاز C-O عند 1323.72 cm^{-1} ، 1465.16 cm^{-1} و $1537.1672 \text{ cm}^{-1}$ إلى الكربونات [6].

الجدول (3.III) : النتائج التي تم تحليلها من طيف الأشعة تحت الحمراء للمغنتيت [6].

Compounds	Wane number/ cm^{-1}	Functional groups
Magnetite	414.76	Fe111-O
	441.76	Fe111-O
	451.13	Fe111-O
	486.3	Fe111-O
	509.17	Fe11-O
	570.89	Fe111-O
	613.32	Fe11-O
	852.48	O-H
	1004.84	S=O
	1053.0	S=O
	1323.72	C-O
	1465.16	C-O
	1537.16	C-O
	1652.88	O-H
	2360.71	O-H
	3220.90	O-H
	3741.65	O-H

من خلال النتائج التي تم تحليلها من طيف الهيماتيت الجدول (4.III)، ظهور ثلاث أوضاع اهتزازية للمجموعة الوظيفية FeII-O عند العصابات 561.25 cm^{-1} ، 472.53 cm^{-1} و

447.45 cm^{-1} التي تنسب للهيماتيت كما تم ظهور أوضاع اهتزازية للمواد الأخرى في الطيف عند 3419.56 cm^{-1} التي تعزى إلى امتصاص الماء واهتزاز التمدد للمجموعة O-H، الوضع عند 2785.2 cm^{-1} و 2736.80 cm^{-1} الذي ينسب للمجموعة C-H شوائب الهيدروكربونات كما ظهر وضع الاهتزاز بالانحناء للمجموعة C-O في الطيف عند 1764.75 cm^{-1} و 1380.94 cm^{-1} [6].

الجدول (4.III) : النتائج التي تم تحليلها من طيف الأشعة تحت الحمراء للهيماتيت [6].

Compounds	Wane number/ cm^{-1}	Functional groups
hematite	447.45	FeII-O
	472.53	FeII-O
	561.25	FeII-O
	784.97	Si-O - Si
	825.48	O-H stretching
	1380.94	C-O stretching
	1683.74	H-O-H bending
	1764.75	C-O stretching
	2069.48	O-H stretching
	2395.42	O-H stretching
	2736.80	C-H
	2785.2	C-H
	3419.56	O-H stretching

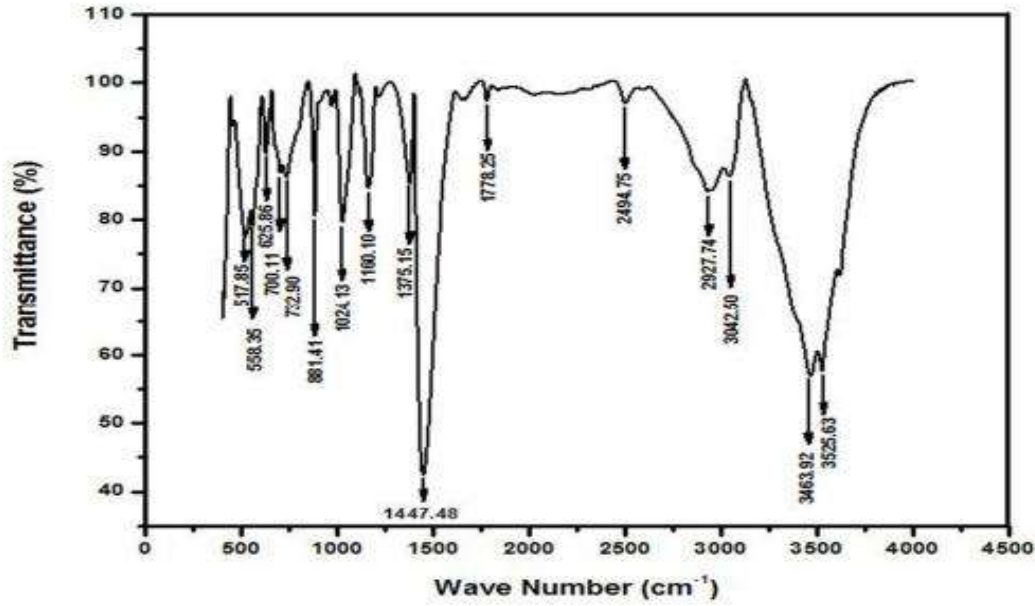
1.6.2.III. الخلاصة :

تم تشخيص جسيمات النانوية للمغنيتيت والهيماتيت بنجاح عن طريق تقنية الأشعة تحت الحمراء حيث أظهرت النتائج المقدمة أن تقنية الأشعة تحت الحمراء هي طريقة جد فعالة وسريعة لتحديد التراكيب في الهيماتيت والمغنيتيت أي دراسة الخصائص و المكونات في كل من عينة الهيماتيت والمغنيتيت ويمكن استخدامها في معرفة المركبات في المواد الأخرى.

7.2.III دراسة FTIR للألومينا الجسيمات النانوية باستخدام طريقة الترسيب

المشترك :

قاما الباحثان (A. S. S. Nila , K. P. Radha) سنة 2018 بإجراء دراسة FTIR للألومينا الجسيمات النانوية بواسطة الترسيب المشترك باستخدام كبريتات الألومنيوم وكربونات الصوديوم مع الماء كمذيب عند درجة حرارة 500 °C .
والنتائج موضحة في شكل (7.III) :



الشكل (7.III) : أطياف FTIR للألومينات Al_2O_3 الجسيمات النانوية [7].

لاحظنا ظهور قمم اهتزازية عند 517 ، 558 ، 625 ، 700 ، 732 ، و 881 cm^{-1} التي تنسب إلى اهتزاز التمديد للرابطة Al-O-Al كذلك لاحظنا اهتزاز في المنطقة 1075-1190 cm^{-1} عند القمم 1024 و 1160 cm^{-1} الذي يعزى إلى اهتزاز التمديد للرابطة C-O (كربونات الصوديوم)، الاهتزازات عند القمم 1447 و 1778 cm^{-1} تخصص إلى اهتزاز بالانحناء للرابطة O-H في المذيب، الاهتزازات عند القمم 3042 ، 3463 و 3525 cm^{-1} تنسب إلى اهتزاز بالتمديد للرابطة O-H العصابة عند 1375 cm^{-1} تنسب لاهتزاز التمديد للرابطة O-H [7].

1.7.2.II. الخلاصة :

تم تحضير جزيئات أكسيد الألمونيوم بنجاح بطريقة الترسيب المشترك حيث أكد تحليل FTIR تشكيل روابط أكسيد الألمونيوم وجميع الروابط الأخرى بواسطة الماء المذيب والمتفاعل، مكننا التحليل الطيفي FTIR من دراسة خصائص والمكونات العينة الذي هي عبارة عن جسيمات النانوية.

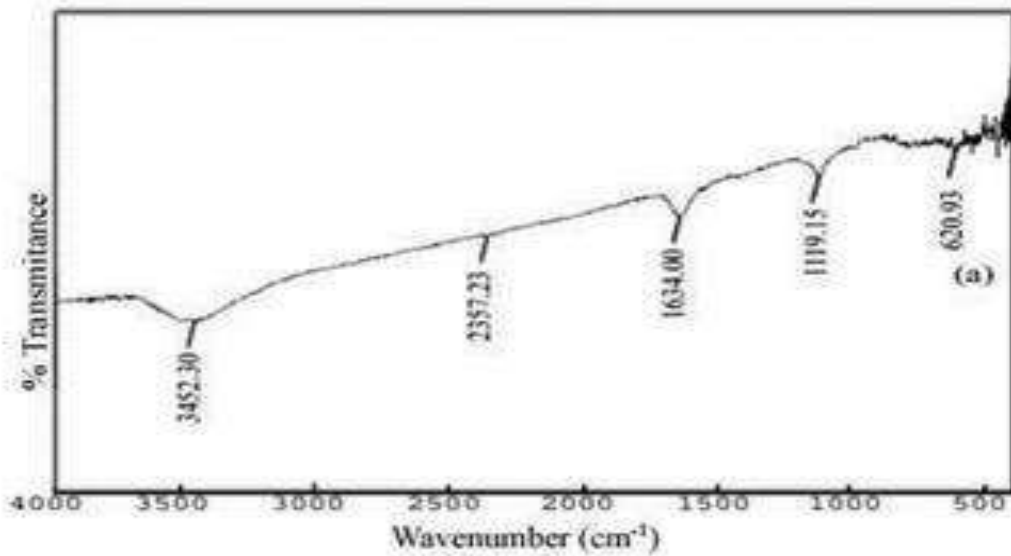
8.2.III. دراسة توصيف الهيكلي والبصري لمركب اكسيد الزنك (ZnO)

الجسيمات النانوية :

في هذا العمل البحثي قام (Jurablu, S) وآخرون بإجراء دراسة حول توصيف الهيكلي والبصري لمركب ZnO الجسيمات النانوية بواسطة مستحلب دقيق سنة 2015 بهدف التأكد من نقاء وطبيعة الجسيمات النانوية المعدنية.

فكانت نتائج التجربة ملخصة في الشكل (8.III) :

لاحظنا عصابات الامتصاص في منطقة بصمات الإصبع أي المنطقة الأقل من 1000 cm^{-1} ناشئة عن اهتزاز الذرات، العصابة عند 3452.30 cm^{-1} و 1119.15 cm^{-1} ناتجة عن اهتزاز التمدد والتشوه على التوالي للرابطة O-H لامتصاص المعدن على السطح، العصابة عند 1634.00 cm^{-1} و 620.93 cm^{-1} تعزى الى اهتزاز التمدد والتشوه على التوالي للرابطة Zn-O .



الشكل (8.III) : أطياف FTIR لجسيمات أكسيد الزنك ZnO النانوية [8].

1.8.2.III. الخلاصة :

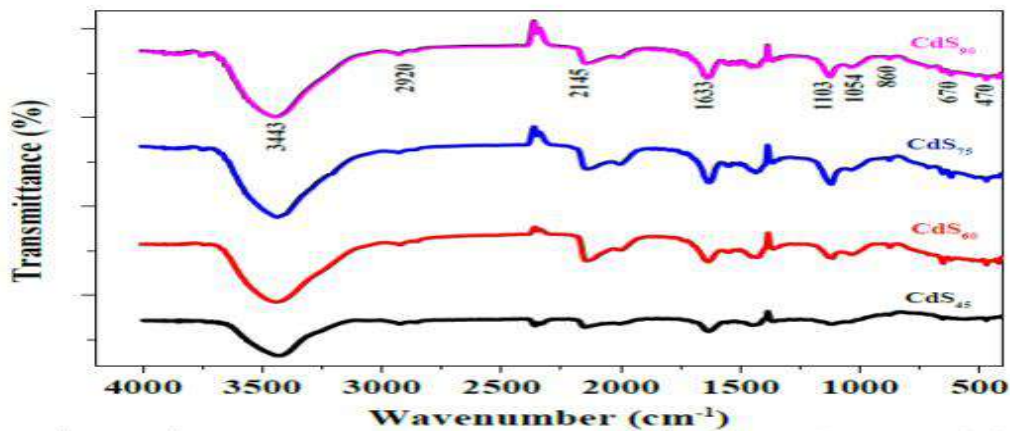
تم دراسة خصائص المركب ZnO بنجاح باستخدام طيف الأشعة تحت الحمراء حيث أكدت دراسة FTIR عن وجود خصائص هيكلية للجسيمات النانوية لأكسيد الزنك ZnO عند عصابة الرابطة Zn-O .

9.2.III. تحضير ودراسة الأغشية الرقيقة لكبريتيد الكاديوم (CdS) المرسبة

بطريقة الحمام الكيميائي (CBD) :

قامتا الطالبتين (بن. ع. و. بوشول. ص) سنة 2017 بإجراء بحث حول تحضير ودراسة الأغشية الرقيقة لكبريتيد الكاديوم (CdS) المرسبة بطريقة الحمام الكيميائي (CBD) حيث تم تحضير هذه الأغشية الرقيقة على ركائز زجاجية تحت درجة حرارة 55 °C، تم تحضير الأغشية انطلاقاً من كبريتات الكاديوم CdSO₄ كمصدر لـ Cd وفقاً لأزمنة مختلفة، تم معاينة هذه الأغشية بالاستعانة بجهاز التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه (FTIR)، لخصت نتائج التجريبية للأشعة تحت الحمراء (FTIR) في الشكل (9.III) والجدول (5.III) :

تم مسح جميع الترددات (4000-400)cm⁻¹ من خلال جهاز SHIMADZU Model IRAffinity1 المتواجد في مخبر VTRS بجامعة الشهيد حمه لخضر بالوادي، حيث أن أي تردد ممتص يميز نوع اهتزاز رابطة معينة وعليه يتم استخدام هذه الخاصية لتتبع ودراسة خصائص الروابط الكيميائية لأغشية المرسبة. والشكل (9.III) يمثل أطياف FTIR لأغشية CdS المحضرة [10].



الشكل (9.III) : طيف FTIR لأغشية CdS المرسبة انطلاقاً من CdSO₄ وفق أزمنة مختلفة [10].

يتم تحديد الروابط الكيميائية من خلال مواقع اهتزازها في طيف الأشعة تحت الحمراء، وبالتالي استنتاج الرابطة الكيميائية، حيث يوضح الجدول (5.III) نوع الرابطة والتردد الموافق لها:

الجدول (5.III) القيم المختلفة التي يظهرها الجهاز للأغشية المحضرة [10].

التردد (cm^{-1})	نوع الرابطة
470	Cd-S
670	SO_4^{2-}
860	C=O
1054	SO_4^{2-}
1103	SO_4^{2-}
1633	O-H
2145	C-N
2920	C-H
3443	O-H

1.9.2.III. الخلاصة :

تم تحضير الأغشية الرقيقة لكبريتيد الكاديوم (CdS) بنجاح بطريقة الحمام الكيميائي (CBD) كما تم تحديد خصائص الروابط الكيميائية للأغشية المرسبة أي بروز الرابطة Cd-S في نطاق التردد 470 cm^{-1} .

المراجع :

- [10] بن علي, و., & بوشول, ص. (2018). تحضير ودراسة الأغشية الرقيقة لكبريتيد الكادميوم (CdS) المرسبة بطريقة الحَمَام الكيمياء (CBD).
- [1] [http://chemlab.truman.edu/inorganic/inorgcmpds\(2022/05/22\)](http://chemlab.truman.edu/inorganic/inorgcmpds(2022/05/22)).
- [2] Kiefer, J., Stärk, A., Kiefer, A. L. & Glade, H. (2018). *Infrared spectroscopic analysis of the inorganic deposits from water in domestic and technical heat exchangers*. Energies, 11(4), 798.
- [3] Mirza, F., & Makwana, H. (2021). *Synthesis and Characterization of Magnesium Oxide (MgO) Nanoparticles by Co-precipitation Method*.
- [4] «Oufakir, A., Khouchaf, L., Elaamni, M., Zegzouti, A., Louarn, G., & Fraj, A. B. (2018). *Study of structural short order and surface changes of SiO₂ compounds*. In *MATEC Web of Conferences* (Vol. 149, p. 01041). EDP Sciences.
- [5] Siti, A. M. F., & Hussin, R. *Structural Studies of Calcium Titanate Phosphor Doped with Praseodymium Using Fourier Transform Infrared (FTIR) Spectroscopy and Fourier Transform Raman Spectroscopy*.
- [6] Liu, Y., Zeng, F., Sun, B., Jia, P., & Graham, I. T. (2019). *Structural characterizations of aluminosilicates in two types of fly ash samples from Shanxi Province, North China*. Minerals, 9(6), 358.
- [7] Mohammed, S. M. H. (2018). *Characterization of magnetite and hematite using infrared spectroscopy*, magazine of engineering sciences and information technology.
- [8] Nila, A. S. S., & Radha, K. P. (2018). *Synthesis and XRD, FTIR studies of alumina nanoparticle using co-precipitation method*. *International Journal for Research in Applied Science and Engineering Technology*, 6, 2493-2496.
- [9] Jurablu, S., Farahmandjou, M., & Firoozabadi, T. P. (2015). *Sol-gel synthesis of zinc oxide (ZnO) nanoparticles: study of structural and optical properties*. *Journal of Science Islamic Republic of Iran*, 26(3), 281-28.

خلاصة عامة :

في هذا البحث قمنا بدراسة تطبيقات التي تقدمها تقنية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية حيث تصنف هذه التقنية على أنها من أفضل التقنيات لما لها من خصائص عديدة، يعتمد تشخيص المركبات غير العضوية على معرفة أنواع الروابط وطبيعة المجموعات حيث يظهر ذلك بوضوح من خلال تحليل ومناقشة بعض الدراسات السابقة فكانت النتائج كما يلي :

- سرعة وفعالية عالية في تشخيص الجسيمات النانوية.
- طريقة الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية مهمة جدا لمعرفة الخصائص الهيكلية لهذه المركبات وذلك للحصول على أفضل النتائج.
- أهمية هذه الطريقة في معرفة نوع الارتباط وتركيبه المواد كما تظهر طريقة FTIR جميع العصابات المميزة للمركب غير العضوي.
- يعتبر التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء أداة قوية قادرة على تحليل الرواسب غير العضوية.
- تسمح تقنية FTIR بالتحليل النوعي للمركبات غير العضوية.
- يمكننا التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء بالتمييز بين الأملاح المختلفة.
- في نهاية هذا العمل يبقى الأمل قائما في استمرار عملية البحث العلمي الفعال في ميدان تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية لما لها من خصائص عديدة وتطبيقات مغرية أهلتها لإعتلاء مرتبة مهمة لدى الباحثين، وذلك بغية تحسين خواصها من أجل استغلالها الأمثل في مختلف التطبيقات العلمية .

ملخص :

هذا العمل هو دراسة نظرية حول تطبيقات مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR) في تشخيص المركبات غير العضوية، من خلال دراسة البحوث السابقة تبين أن تقنية الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه هي تقنية جد فعالة وسريعة لتحديد الخصائص الهيكلية للمركبات غير العضوية مثل الجسيمات النانوية من خلال معرفة خصائصها، ويمكن استخدامها لمعرفة المركبات في المواد الأخرى، أثبتت تقنية الأشعة تحت الحمراء لمتحولة فورييه نجاعتها في تشخيص المركبات غير العضوية من خلال معرفة طبيعة ونوع الارتباط لهذه المركبات .

الكلمات المفتاحية : FTIR ، تشخيص المركبات غير العضوية، المركبات غير العضوية، الجسيمات النانوية.

Résumé :

Ce travail est une étude théorique sur des applications de spectrométrie infrarouge (FTIR) dans la caractérisation des composés inorganiques, grâce à l'étude de recherche précédente a montré que la technologie infrarouge de mutant instantané est une technique très efficace et rapide pour déterminer les caractéristiques structurales des composés inorganiques tels que les nanoparticules en connaissant leurs propriétés, Et il peut être utilisé pour connaître les composés dans d'autres matériaux, la technologie infrarouge de mutant instantané a prouvé son efficacité dans la caractérisation des composés inorganiques en connaissant la nature et le type de liaison dans ces composés.

Mots clés: FTIR, caractérisation de composés inorganiques, composés inorganiques, nanoparticules.

Abstract:

This work is a theoretical study of infrared spectrometry applications (FTIR) in the characterization of inorganic compounds, through the previous research study showed that the infrared technology of instant mutant is a very effective and fast technique for determining the structural characteristics of inorganic compounds such as nanoparticles by knowing their properties, It can be used to know compounds in other materials, the IR technology of an instant mutant has proven its effectiveness in characterization inorganic compounds by knowing the nature and types of binding in these compounds.

Key words: FTIR, characterization of inorganic compounds , inorganic compounds, nanoparticles.