

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

مذكرة الماستر أكاديمي



إعداد الطالب: محسن طيطي

قسم: الفيزياء

الفرع: علوم المادة

تخصص: فيزياء المواد

دراسة المادة 2.4.5- trimethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة السينية والأشعة تحت الحمراء وأشعة RAMAN و UV.visible ومقارنتها مع DFT

نوقش يوم: 2022/06/07

-لجنة المناقشة:

الصفة	الجامعة	الرتبة	الإسم واللقب
مشرف	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	MCA	بوروي حازم
رئيسا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	MCA	عطوي محمد
مناقشا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	MCB	بن طويلة عمر

السنة الدراسية: 2022/2021

إهداء

إلى صاحب السيرة العطرة، والفكر المُستنير؛
فلقد كان له الفضل الأوّل في بلوغي التعليم العالي
(والذي الحبيب)، أطال الله في عُمره.
إلى من وضعني على طريق الحياة، وجعلتني رابط الجأش،
وراعتني حتى صرت كبيرًا
(أمي الغالية)، طيّب الله ثراها.
إلى إخوتي؛ من كان لهم بالغ الأثر في كثير من العقبات والصعاب.
إلى زملائي وأصدقائي الذين ساعدوني من الكلمة الطيبة إلى مد يد العون إلي
إلى جميع أساتذتي الكرام؛ ممن لم يتوانوا في مساعدة
أُهدي إليكم بحثي في دراسة التركيب البنوي
للمادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde
بواسطة الأشعة السينية وتحت الحمراء وفوق البنفسجية ورامان ومقارنتها مع نتائج
النظرية لـ DFT

الشكر والعرفان

أولا الحمد لله الذي به تتم الصالحات بعد بسم الله الرحمن الرحيم

أتقدم بشكري إلى جميع من ساهموا في مساعدة و من

لا يشكر الناس لا يشكر الله، وأنتم جميعاً تستحقون الشكر والثناء، فلولاكم لم أكن

لأصل إلى ختام هذه المذكرة ، ولولا جهودكم لما كان للنجاح أي وصول، ولما تحققت

الأهداف، فأنتم أساس رفعة وأساس تقدمها، وأنتم من يحمل شعلة النجاح والتطور،

فشكراً لكم=

الفهرس

الصفحة	العناوين
I	الإهداء
II	شكر و عرفان
III	الفهرس
VIII	قائمة الجداول
VIII	قائمة الأشكال
VI	مقدمة عامة
الفصل الأول: مفاهيم DRX/IR/RAMON/UV/DFT	
1	1- الأشعة الكهرومغناطيسية
1	1-1- مقدمة
1	1-2- تعريف الأشعة الكهرومغناطيسية
2	1-3- أنواع الأشعة الكهرومغناطيسية
2	1-4- خصائص الأشعة الكهرومغناطيسية
2	2- مفاهيم الأشعة تحت الحمراء
2	2-1- اكتشاف الأشعة تحت الحمراء
2	2-2- مفهوم الأشعة تحت الحمراء
2	2-3- مبدأ عمل الأشعة تحت الحمراء
3	2-4- خصائص الأشعة تحت الحمراء
4	2-5- أشكال حركة الاهتزازات الجزيء
4	2-5-1- الاهتزاز بالتمدد والانكماش stretching vibration
4	2-5-1-1- أ- تمدد وانكماش اهتزازي بسيط أو معزول stretching isolated
4	2-5-1-2- ب- 1- التمدد والانكماش المزدوج المتماثل symmetrical stretching
4	2-5-1-2- ب- 2- التمدد والانكماش المزدوج الغير متماثل: asymmetrical stretching
5	2-6- الاهتزاز الزاوي: angulaire vibrations
5	2-6-1- الاهتزاز النواسي: (rocking)
5	2-6-2- الاهتزاز المقص: scission
5	2-6-3- الاهتزاز التارجي: wagging
6	2-6-4- اهتزاز الالتوائي: twisting
6	2-7- أنواع الأشعة تحت الحمراء
6	2-7-1- الأشعة القريبة

6	2-7-2-الأشعة المتوسطة
6	2-7-3-الأشعة البعيدة
6	2-8-استخدامات الأشعة تحت الحمراء
7	2-9-العوامل المؤثرة على الأشعة تحت الحمراء
7	2-9-1-تأثير لون المادة
8	2-9-2-تأثير الانعكاسية المادة
8	2-9-3-تأثير حرارة المادة
8	2-9-4-تأثير مساحة سطح المادة
9	2-10-مصادر الأشعة تحت الحمراء
9	3-الأشعة رامان RAMAN :
9	3-1-نبذة تاريخية على الأشعة RAMAN
9	3-2-تعريف الأشعة RAMAN :
10	3-3-مبدأ انتاج اشعة RAMAN
11	4-الأشعة السينية RX:
11	4-1-اكتشاف الأشعة السينية:
12	4-2-مفهوم انعراج الأشعة السينية DRX
12	4-3-انتاج الاشعة السينية
13	4-4-قانون براغ
14	4-5-خصائص الاشعة السينية
14	4-6-مبدأ انتاج الاشعة السينية
14	4-7-اليات انتاج الاشعة السينية
14	4-7-1-الطيف المستمر
15	4-7-2-الطيف المميز
16	4-8-استخدامات الاشعة السينية
16	5-الأشعة فوق البنفسجية UV
16	5-1-تعريف الاشعة فوق البنفسجية
17	5-2-أنواع الأشعة فوق البنفسجية
17	5-1-2-أشعة UVA
17	5-2-2-أشعة UVB:
17	5-3-2-أشعة UVC:
17	5-3-خصائص الأشعة فوق البنفسجية
17	5-3-1-التردد
17	5-3-2-الطول الموجي

18	6-نظرية الكثافة الوظيفية DFT
18	6-1-نبذة تاريخية لنظرية الكثافة الوظيفية (DFT)
18	6-2-تعريف بنظرية الكثافة الوظيفية DFT
18	6-3-علاقات الأساسية لنظرية الكثافة الوظيفية
18	6-3-1-نظرية شرود نغر
18	6-3-1-أ-معادلة شرود نغر المستقلة عن الزمن
19	6-3-2-تقريب تومس فيرمي
19	6-3-3-تقريب أوبرن هايمر
19	6-3-4-نظرية هونبارغ وكوهن
20	6-3-4-أ-النظرية الأولى
20	6-3-4-ب-النظرية الثانية
20	6-3-5-إيجابيات وسلبيات
الفصل الثاني دراسة الزوايا و الأطوال الروابط المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة السينية ومقارنتها مع النتائج النظرية ل DFT	
21	1-مقدمة
21	2-مدخل
21	3-الدراسة النظرية
22	4-الدراسة التجريبية
22	5-النسبة المئوية
23	6-جداول مقارنة بين طريقة نظرية DFT عبر برنامج GAUSSIAN03 وطريقة التجريبية بالأشعة السينية
23	6-1-نتائج أطوال الروابط حسب DRX و DFT (cc-pvqz)
24	6-2-نتائج حساب الزوايا الروابط بطريقة DRX و DFT (cc-pvqz)
26	6-3-نتائج أطوال الروابط حسب DRX و DFT (SDD)
27	6-4-نتائج حساب الزوايا الروابط بطريقة DRX و DFT (SDD)
29	7- مناقشة النتائج
الفصل الثالث دراسة الإهتزازات المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامان ومقارنتها مع النتائج النظرية ل DFT	
30	1-مقدمة
30	2-الدراسة النظرية
31	3-الدراسة التجريبية
40	6-مناقشة النتائج

41	7-دراسة المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة فوق البنفسجية
42	8-خاتمة
43	خلاصة عامة
44	ملخص
45	المراجع

الفهرس الجداول

الفصل الثاني دراسة الزوايا و الأطوال الروابط المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة السينية ومقارنتها مع النتائج النظرية لDFT	
23	أ-جدول رقم 1
24	ب-جدول رقم 2
26	ج-جدول رقم 3
28	ح-جدول رقم 4
الفصل الثالث دراسة الإهتزازات المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامن ومقارنتها مع النتائج النظرية لDFT	
32	أ-جدول 1

الفهرس الأشكال

الفصل الأول: مفاهيم DRX/IR/RAMON/UV/DFT	
1	صورة(1) لمخطط الأشعة الكهرومغناطيسية
3	صورة(2): يبين المخطط موضع الأشعة تحت الحمراء حسب طول الموجة
5	صورة (3): للتمدد والانكماش المتماثل والغير متماثل
6	صورة (4): تمثل أشكال الاهتزاز الزاوي
7	صورة (5): للمجرات ملتقطة عبر أقمار صناعية بواسطة الأشعة تحت الحمراء
10	صورة(6): توضيحية لشدة الضوء الليزر مع الطاقة المنتجة
11	صورة(7): توضيحية لتشنتات الضوء الليزر مع المادة
12	صورة(8): أنبوبة الإنتاج الأشعة السينية
13	صورة(9): للانعراج البناء على(اليسار) والهدام على(اليمين) للأشعة السينية
15	صورة(10): توضيحية للأشعة الإنكباحية (المستمرة)
15	صورة(11): توضيحية لمسار للأشعة المميزة

16	صورة(12):مخطط الأشعة السينية المميزة والمستمرة
17	صورة(13): توضيحية لخط الطيفي للأشعة
الفصل الثاني دراسة الزوايا و الأطوال الروابط المادة	
2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة السينية ومقارنتها مع النتائج النظرية لDFT	
21	صورة(14): التركيب الجزيئي بطريقة DFT في برنامج Gaussian03
22	صورة(15):مخطط لمركب الحلقي 2.4.5thrmiethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة السينية
الفصل الثالث دراسة الإهتزازات المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde	
عبر الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامن ومقارنتها مع النتائج النظرية لDFT	
30	صورة(16):طيف الإمتصاص بدلالة التردد المادة المدروسة بواسطة DFT
31	صورة(17): طيف الأشعة رامن
31	صورة(18):طيف الأشعة تحت الحمراء
35	أشكال الإهتزازات النتائج المتوافقة بين النظري والتجريبي
41	صورة(19): جهاز تحليل الطيفي بالأشعة فوق البنفسجية في جامعة ورقلة
42	صورة(20):مخططالإمتصاص الأشعة فوق البنفسجية

مقدمة العامة

استخدمت الفيزياء الكلاسيكية في كثير من المجالات لتفسير الظواهر علم المواد كما عممت على جميع الظواهر العلمية للمادة ومع تطور وتدقيق في هذه الظواهر أنتجت ما يسمى بفيزياء الكمومية التي تغير المفهوم الكلاسيكي للمواد والأشعة حيث تطورت إلى دراسة علوم الفضاء و الإشعاع وصياغة العلاقات الرياضية القادرة على التنبؤ بسلوكها كما توصلت هذه الدراسات إلى تشخيص هذه العلوم في دراسات المعقدة في المواد أستخرجت نظرية الكثافة الوظيفية DFT والتي تهدف إلى تفسير الظواهر الفيزيائية والكيميائية عن طريق التقريبات ودوال تسمح بالإقتراب من النتائج المثالية لهذه الظواهر.

نتطرق في بحثنا هذا عن دراسة الفوارق التي نستخرجها من النتائج الجانب التجريبي والجانب النظري في دراسة المواد.

-الفصل الأول:

نتطرق في الفصل الأول عن المفاهيم للأشعة الكهرومغناطيسية والأشعة تحت الحمراء وكذا أشعة المكمل لها هي أشعة رامان والأشعة السينية والأشعة فوق البنفسجية من الناحية الفيزيائية والكيميائية.

-الفصل الثاني:

نبين في هذا الفصل عن دراسة المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** عبر الأشعة السينية قصد دراسة الأطوال والزوايا العينة ومقارنتها مع النتائج النظرية ل DFT قصد مقارنة ومناقشة الاختلافات في النتائج.

-الفصل الثالث:

نبين في هذا الفصل الأخير عن دراسة المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** عبر الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامان قصد معرفة أنواع الإهتزازات ومقارنتها مع النتائج النظرية ل DFT ومناقشتها في اختلافات بين النتائج.

نستكمل في الأخير نتائج التجريبية للأشعة فوق البنفسجية لدراسة تشتت الجزيئات في المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** وتعليق على النتائج هذه المادة.

الفصل الأول

مفاهيم DRX/IR/RAMON/UV/DFT

-مقدمة:

نتطرق في بحثنا هذا إلى مفاهيم الفيزيائية للأشعة DRX/IR/RAMAN/UV ونظرية الكثافة الوظيفية DFT.

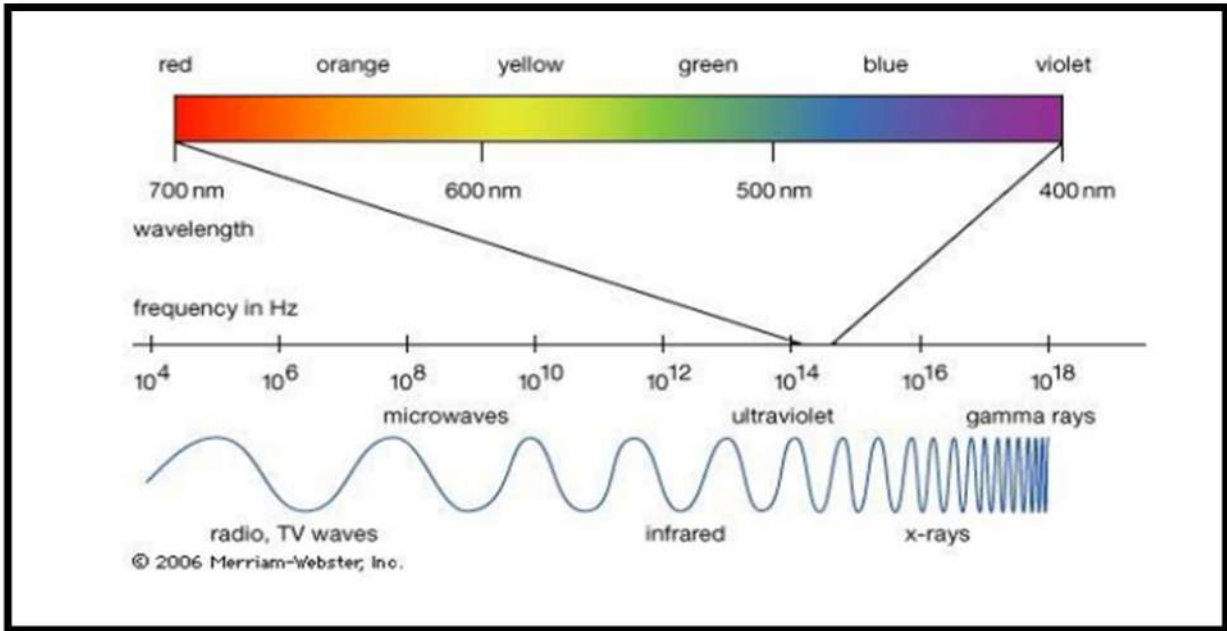
1-1- الأشعة الكهرومغناطيسية :

1-2- تعريف الأشعة الكهرومغناطيسية:

يعود أصل هذا العلم إلى تفاعل علم الكهرباء والمغناطيسية فهما علمان يكملان بعضهما ومن دراسة علم الكهرومغناطيسية فإنه لوحظ أن المجال الكهربائي والمجال المغناطيسي ممكن أن يولد أحدهما الآخر. ومن الأمثلة على هذا التفاعل ما يمكن ملاحظته عند تطبيق مجال مغناطيسي متغير بأنه يولد مجالاً كهربائياً، وهو ما يحدث أيضاً عند تطبيق مجال كهربائي متغير والذي يولد بدوره مجالاً مغناطيسياً.

1-3- مفهوم الطيف الكهرومغناطيسي:

إن الطيف الكهرومغناطيسي أو الأمواج الكهرومغناطيسية هي عبارة عن الأشعة ذات أطوال موجية مختلفة تشمل الأشعة المرئية وغير مرئية مع الإختلاف مع الأمواج الصوتية. [1]



صورة لمخطط الأشعة الكهرومغناطيسية.

1-4-أنواع الأشعة الكهرومغناطيسية:

حسب الميكانيك الحديثة أو المسماة ميكانيك الكم أن أنواع الأشعة هي الأشعة المتولدة من المجالات الكهرومغناطيسية:

الأشعة الدقيقة/ الأشعة الراديو /الأشعة المرئية

1-5-خصائص الأشعة الكهرومغناطيسية:

- أنها موجات مستعرضة لذلك تكون قابلة للاستقطاب.
- سرعتها (3×10^8 م / ث) في الفراغ أو الهواء.
- تتكون من مجالين كهربائي ، ومغناطيسي متعامدين مع بعضهما وكل منهما متعامد على اتجاه انتشار الموجة.
- أطوالها الموجية تتراوح من الترددات المنخفضة إلى الترددات المرتفعة.
- لا تتأثر بالمجالات الكهربائية أو المجالات المغناطيسية لكونها غير مشحونة.
- تنتشر في خطوط مستقيمة وتتعرض للانعكاس والانكسار والتداخل.

2- مفاهيم الأشعة تحت الحمراء:**2-1- اكتشاف الأشعة تحت الحمراء:**

يعود تاريخ اكتشاف هذه الأشعة للعالم البريطاني ويليام هيرشل سنة 1800م، حيث قام العالم بتجربة لقياس درجة الحرارة للأطيف الضوء المرئي فلاحظ عند الانتقال من الطيف الأزرق إلى الطيف اللون الأحمر زيادة في درجة الحرارة وكذا عند تجاوزها فستنتج وجود أشعة غير مرئية بعد الأشعة الضوء المرئي المسماة الأشعة تحت الحمراء.

2-2- مفهوم الأشعة تحت الحمراء:

إن الأشعة تحت الحمراء هي أشعة كهرومغناطيسية باللغة الإنجليزية: (infrared radiation) ، ويعود هذا إلى أن الأشعة تحت الحمراء محصورة بين الطول الموجي (0.7- 400) ميكرومتر تكون أسفل الأشعة الضوء المرئية (حدود الأشعة المرئية) (380 – 750) نانومتر وهي ذات طاقة ضعيفة وطول موجي كبير فهي أشعة غير مرئية ويمكن استشعارها عبر الحرارة المنتقلة عبر الأجسام المتولدة والمنعكسة عليها وكذا مثلا أشعة الشمس. [2]

2-3- مبدأ عمل الأشعة تحت الحمراء:

تنشأ الأشعة تحت الحمراء من مبدأ حركة الاهتزازات الإليكترونات في المدارات حيث ترسل هذه الإليكترونات أشعة تحت الحمراء مميزة لكل جزيء ويكون لهذه الاهتزازات شكل يميز الذرة حيث عند اهتزاز الإليكترونات في المدار يحدث تغير في الزوايا وطول الروابط الكيميائية.

2-4- خصائص الأشعة تحت الحمراء:

إن الأشعة تحت الحمراء هي من الأطياف الكهرومغناطيسية ذات طاقة ضعيفة وطول موجي كبير ولا يمكن للإنسان رآيتها بالعين المجردة ويمكن الشعور بها حسيا عن طريق انتقال الحرارة عبر المواد المنبعثة والمنعكسة عليها كما أيضا:

+ إن الطول الموجي الخاص بالأشعة تحت الحمراء يكون بين 0,7 و400 ميكرومتر، وبذلك يعد الطول الموجي الخاص بالأشعة تحت الحمراء أطول من الطول الموجي الخاص بالضوء المرئي.

+إن التردد الخاص بالأشعة تحت الحمراء يتراوح بين 3 جيجا هيرتز وبين 400 تيرا هيرتز، وبذلك نجد أن الأشعة تحت الحمراء هي منطقة متوسطة ما بين الموجات الصغيرة والضوء المرئي.

+تنبعث الأشعة تحت الحمراء من أي جسم تبلغ درجة حرارته سالب 268 درجة مئوية.

+تنبعث الأشعة تحت الحمراء، كذلك من الشمس حيث أن نصف الطاقة التي تصدر منها أساساً أشعة تحت حمراء، بالإضافة إلى أن الأشعة المرئية التي تنبعث من الشمس ويتم امتصاصها وبثها مرة أخرى تكون على هيئة أشعة تحت حمراء.

+أن الأشعة تحت الحمراء تنبعث من المصابيح وذلك بنسبة 90% وان الضوء المرئي الذي ينبعث من هذه المصابيح يقدر ب 10% فقط.

2-5- أشكال حركة الاهتزازات الجزيء:

تكون الحركة الاهتزازية على شكل نوعين: [3]

2-5-1- الاهتزاز بالتمدد والانكماش stretchingvibration:

ينشأ هذا الاهتزاز في حركة تباعد وتقارب بين الجزيء حيث تقوم هذه الاليكترونات بتمديد وتقليص الرابطة بين الجزيء دون تغير الزوايا (حركة على نفس المحور) وينقسم هذا الاهتزاز إلى نوعين:

2-5-1-أ-تمدد وانكماش اهتزازي بسيط أو معزول: stretching isolated:

يقصد به اهتزاز بسيط هو تغير في طول الرابطة واحدة بين جزيء (تمدد والتقلص).

2-5-1-ب-تمدد وانكماش اهتزازي مزدوج: stretching coupled :

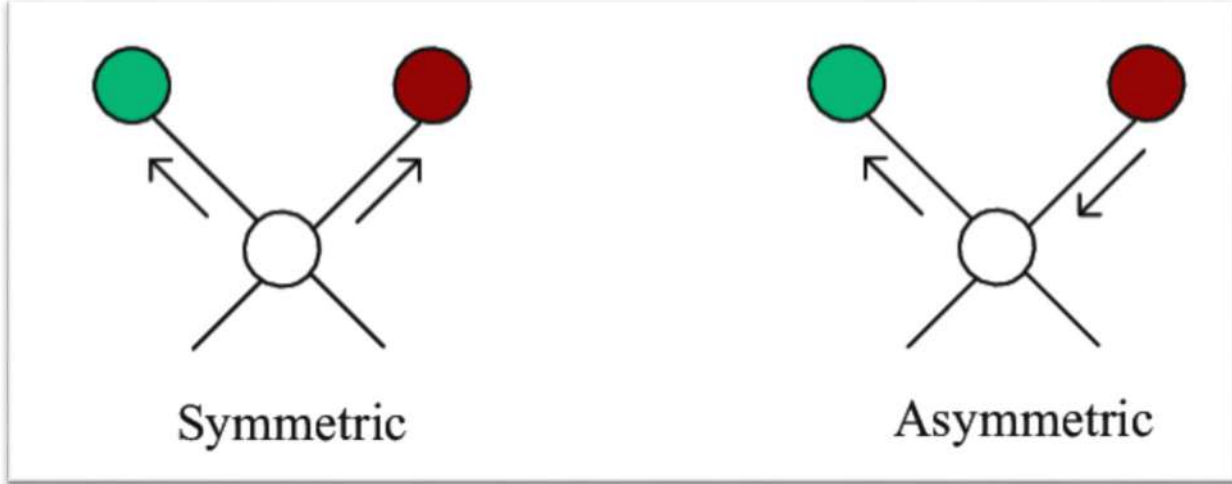
يقصد به الاهتزاز المزدوج أن تتغير طول رابطة أو عدة روابط في وقت واحد وتنقسم إلى قسمين:

2-5-1-ب-1- التمدد والانكماش المزدوج المتماثل symmetrical stretching:

يقوم هذا الاهتزاز على تماثل بين الروابط من حيث طول الرابطة (تمدد جزيء 1- تمدد جزيء 2) والعكس صحيح، الصورة (1).

2-5-1-ب-2- التمدد والانكماش المزدوج الغير متماثل: asymmetrical stretching :

وهو الاهتزاز العكسي الغير متماثل لطول الرابطة بعملية متناسقة (تمدد جزيء 1 -انكماش جزيء 2) في نفس الوقت، الصورة (1).



صورة (1): للتمدد والانكماش المتماثل والغير متماثل.

2-6-6-2 الاهتزاز الزاوي: :angulaire vibrations

وهو اهتزاز يتغير فيه الزوايا بين الروابط دون طول الرابطة وينقسم إلى أربعة أقسام:

2-6-6-2-1 الاهتزاز النواسي:(rocking):

وهو اهتزاز شبيه النواس في حركته فتكون حركة الذرتين في اتجاه واحد حول مركز (الذرة المركزية). كما الموضح في الصورة: (2).

2-6-6-2 الاهتزاز المقص: scission :

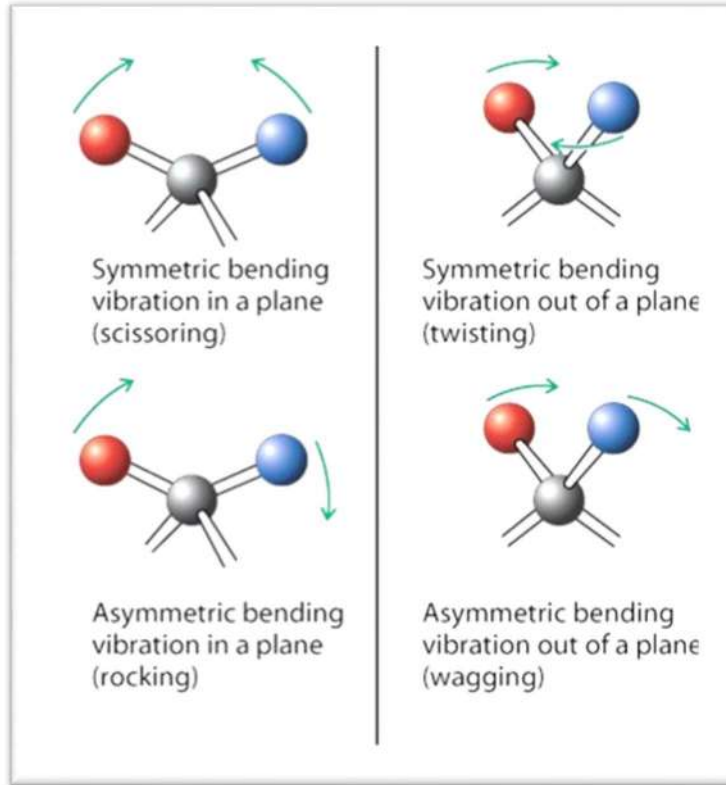
يتم هذا الاهتزاز عبر حركة مثل المقص حيث تتباعد وتتقارب الذرتان في نفس الوقت كما هو موضح فيالصورة: (2).

2-6-6-3 الاهتزاز التارجي: :wagging

هو عبارة عن اهتزاز للجزيء بحركة أمام خلف لكل الذرات في اتجاه واحد حيث يكون شكل الحركة الذرات تارجي متجانس، الصورة (2).

2-6-4 اهتزاز الالتوائي: twisting:

وهو اهتزاز شبه دوراني للذرات حول الذرة المركزية بحركة متماثلة في الاتجاه للذرات المبينة في الصورة (2).



الصورة (2): تمثل أشكال الاهتزاز الزاوي.

2-7-7 أنواع الأشعة تحت الحمراء:

تنقسم الأشعة تحت الحمراء إلى ثلاث أشعة:

2-7-7-1 الأشعة القريبة: وهي أشعة تنحصر بين الطول الموجي (2,5-0,7) ميكروميتر.

2-7-7-2 الأشعة المتوسطة: وهي أشعة تنحصر بين الطول الموجي (50-2,5) ميكروميتر.

2-7-7-3 الأشعة البعيدة: وهي أشعة تنحصر بين الطول الموجي (780-50) ميكروميتر.

2-8-استخدامات الأشعة تحت الحمراء:

إن استخدامات هذه الأشعة في كثير من المجالات من بينها:

-تعد من الأطياف التي تستعمل في تصوير الفضاء.

-تستعمل في المنازل، أجهزة التحكم والميكرويف.

-التصوير الحراري للنظارات الليلية منتجة صور يمكن رؤيتها بالعين المجردة.

-يمكن الكشف بها عن المواد المدروسة في العينات الاختبار.

-تستخدم في المصانع لتسخين وتجفيف المواد.

2-9-العوامل المؤثرة على الأشعة تحت الحمراء:

إذا كانت المادة تمتص وتنبعث منها الأشعة تحت الحمراء، فما هي العوامل التي تؤثر على امتصاص الأشعة تحت الحمراء وانبعاثها في المواد؟ من هاتين العمليتين (الامتصاص والانبعاث) نبين خصائص المواد في التأثير على الأشعة تحت الحمراء.

2-9-1-تأثير لون المادة:

نشرح بمثال إذا مشيت فوق أسفلة داكن في أحد أيام الصيف الحارة، فستشعر بدفء أكبر مما لو كنت تمشي على رصيف ذي لون فاتح. على الرغم من أن درجة الحرارة الفعلية للرصيف والأسفلة الداكن ربما تكون واحدة، فإن الأسفلة الداكن أكثر فعالية في امتصاص الأشعة تحت الحمراء ومن ثم انبعاثها. وهذا الانبعاث هو ما نشعر به في صورة حرارة. وهكذا يلعب لون المادة دورًا مهمًا في كيفية امتصاص المادة للأشعة تحت الحمراء ثم انبعاثها منها.

2-9-2-تأثير الانعكاسية المادة:

يوجد عامل آخر يؤثر على هاتين العمليتين يسمى الانعكاسية. يمكننا التفكير في الانعكاسية على هذا النحو، لنفترض أن هذه المادة ملساء ومصقولة جيدًا، كمرآة على سبيل المثال، في هذه الحالة يكون لها درجة انعكاسية عالية جدًا. ومعظم الأشعة تحت الحمراء التي تصل إليها سوف ترتد عنها، تمامًا مثل معظم الضوء الذي يصل إلى المرآة ويرتد عنها ولكن من ناحية أخرى، ماذا لو عوضنا عن هذا السطح

الأملس بسطح خشن للغاية، مثل ورق الصنفرة الخشن، في هذه الحالة، ستنخفض انعكاسية هذه المادة. وبالتالي، من المرجح أن تمتص الأشعة تحت الحمراء ثم تبعثها بدلاً من أن تعكسها.

2-9-3- تأثير حرارة المادة:

ننتقل الآن إلى العامل الثالث، وهو درجة حرارة الجسم، والتي لها علاقة بالانبعاث أكثر من علاقتها بالامتصاص. حيث درجة حرارة أي مادة ليس لها تأثير كبير على ما إذا كانت ستمتص الأشعة تحت الحمراء الساقطة عليها أم ستعكسها. ولكنها تلعب دورًا كبيرًا في تحديد كمية الأشعة تحت الحمراء المنبعثة من تلك المادة. في الواقع لا تعتمد هذه الظاهرة على ما إذا كانت الأشعة تحت الحمراء تسقط على هذه المادة أم لا. بل هي ببساطة إحدى خواص المادة؛ فكلما زادت درجة حرارتها، زاد انبعاث الأشعة منها. جدير بالذكر هنا أن أي مادة عند أي درجة حرارة أعلى من الصفر المطلق ستنبعث منها أشعة تحت حمراء، حتى وإن كانت بكمية صغيرة للغاية. وهذا سبب آخر يجعل الأشعة تحت الحمراء مثيرة للاهتمام إلى حد كبير.

2-9-4- تأثير مساحة سطح المادة:

يوجد عامل أخير يؤثر على امتصاص الأشعة تحت الحمراء وانبعاثها. وهو مساحة السطح، أي مساحة سطح المادة. تخيل أننا ضاعفنا طول جانبي المادة، بحيث تزداد مساحتها الكلية بمقدار أربع مرات. حسناً، في هذه الحالة، يمكن لهذه المادة الأكبر أن تبعث أو تصدر قدرًا أكبر بكثير من الأشعة تحت الحمراء. وبسبب حجمها الأكبر، ستصبح هدفًا أكبر للأشعة تحت الحمراء الساقطة. وهذه الحقيقة، التي تنص على أنه كلما زادت مساحة سطح المادة، زادت قدرتها على بعث الأشعة تحت الحمراء، ومن ثم إطلاق الحرارة منها وتستخدم في تبريد الأنظمة الإلكترونية.

2-10- مصادر الأشعة تحت الحمراء:

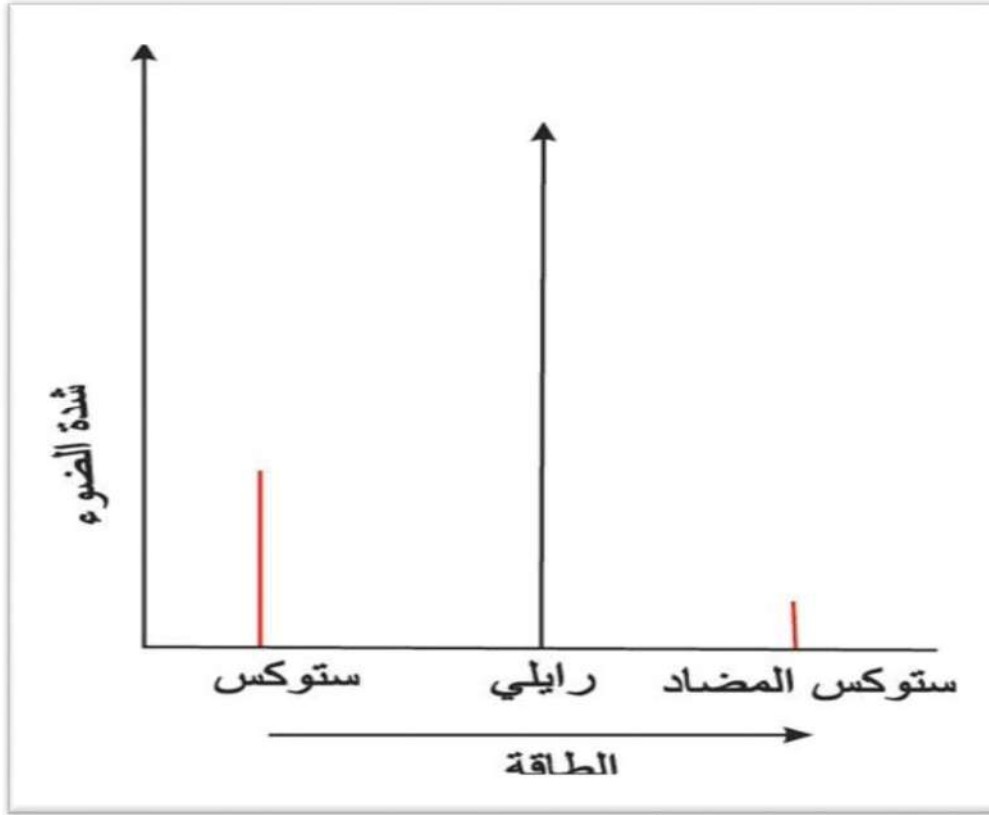
إن كل جسم نصادفه يمثل مصدرًا للأشعة تحت الحمراء، حتى وإن كانت هذه الأجسام باردة جدًا. وحتى عندما تكون درجة حرارتها أقل من درجة التجمد، فإنها لا تزال تصدر كمية من الأشعة تحت الحمراء. وبالتالي، فهي تمثل مصدرًا لهذه الأشعة.

3-الأشعة رامن RAMAN :**3-1-نبذة تاريخية على الاشعة RAMAN:**

تم رؤية ظاهرة انتشار رامن للضوء لأول مرة في عام 1923 م بواسطة العالم Smekal، وأول من لاحظها العالم الهندي Raman. V. C عام 1928 م، عندما قام بقياس التشتت الناتج عن ضوء أحادي اللون تم توجيهه بواسطة مرآيا وعدسات ليسقط بشكل مركز على العينة، معظم أشعة الليزر ترتد عن العينة وتشتت عند نفس الطول الموجي لضوء الليزر ولكن بعض أشعة الضوء تشتت عند أطوال موجية مختلفة وهذا بسبب بتفاعل أشعة الليزر بالحركة الاهتزازية للجزيئات المكونة للعينة (فوتون). هذه الجزيئات تجعل فوتونات الليزر تكتسب أو تفقد طاقة، وهذا الانزياح في الطاقة يعطي معلومات عن أنماط الاهتزاز في العينة.[4]

3-2-تعريف الأشعة RAMAN :

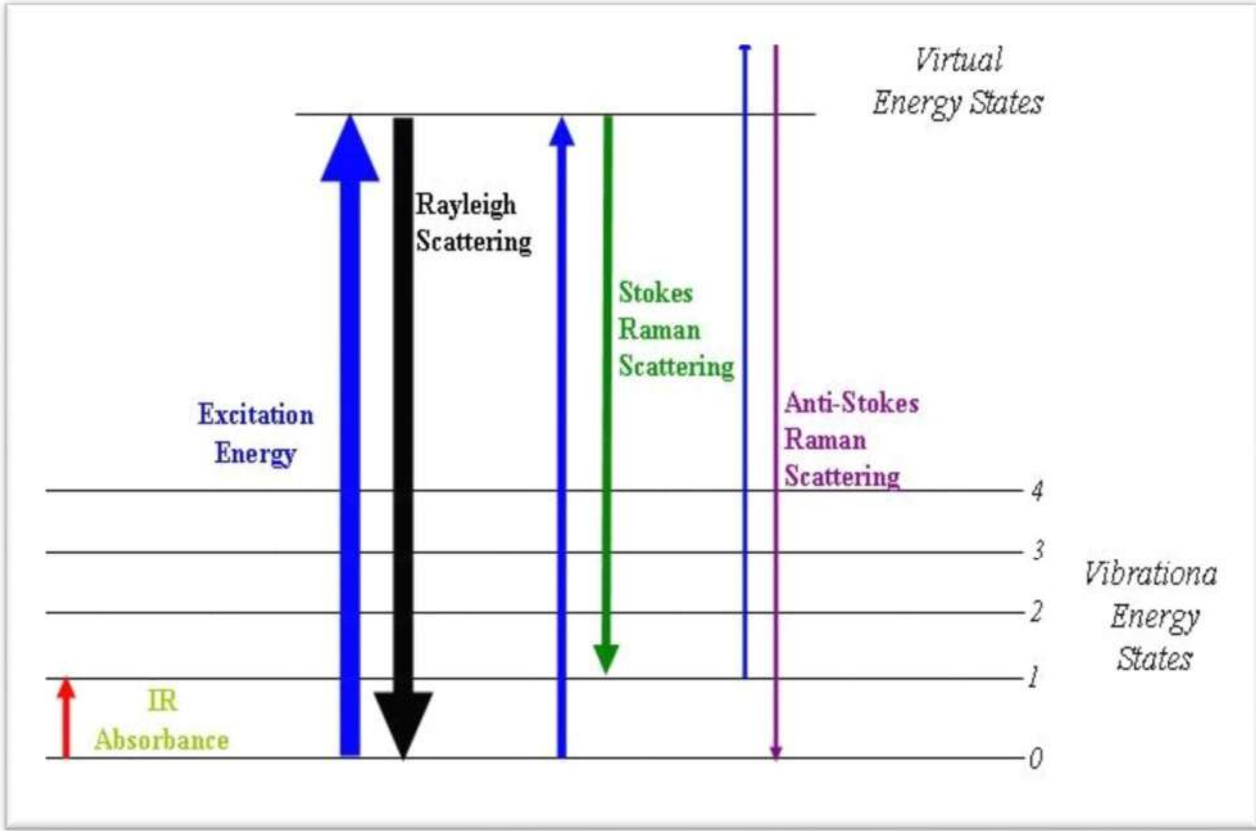
اشعة رامن هي عبارة عن تشتت غير مرن للضوء الليزر، حيث عند اصطدام الضوء بالمادة تنشأ أنواع اشعة، فالحزمة الاشعة الناشئة عبر التشتت 99% منعكسة منها تسمى اشعة رايلي و1% من الاشعة تمتص من المادة وتطلق اشعة مسمات اشعة رامن وهي الاشعة الضعيفة والدقيقة ومساعدة للأشعة تحت الحمراء في دراسة الاهتزازات العينة.



صورة: توضيحية لشدة الضوء الليزر مع الطاقة المنتجة. [5]

3-3- مبدأ إنتاج اشعة RAMAN:

عند اصطدام الفوتونات بالمادة الليزر تنقسم الأشعة الى اشعة رايلي واشعة رامان وبسبب نسبة الاشعة الضئيلة للأشعة رامان تستخدم فلتر لتقليل من تأثير اشعة رايلي وهذا عائد الى الحزمة الضوئية لأشعة رايلي التي لا تتفاعل مع المادة فقط تنعكس وأما أشعة رامان تكون نسبة قليلة متفاعلة مع المادة فالطاقة المتفاعلة مع المادة يتم قياس بها خصائص الاهتزازية للعينة فتسمى نسبة الضوء المتفاعل مع المادة بانزياح ستوكس والمادة مع الضوء تسمى اونتي ستوكس. [6]



صورة: توضيحية لتشتتات الضوء الليزر مع المادة. [7]

4- الأشعة السينية RX:

4-1- اكتشاف الأشعة السينية:

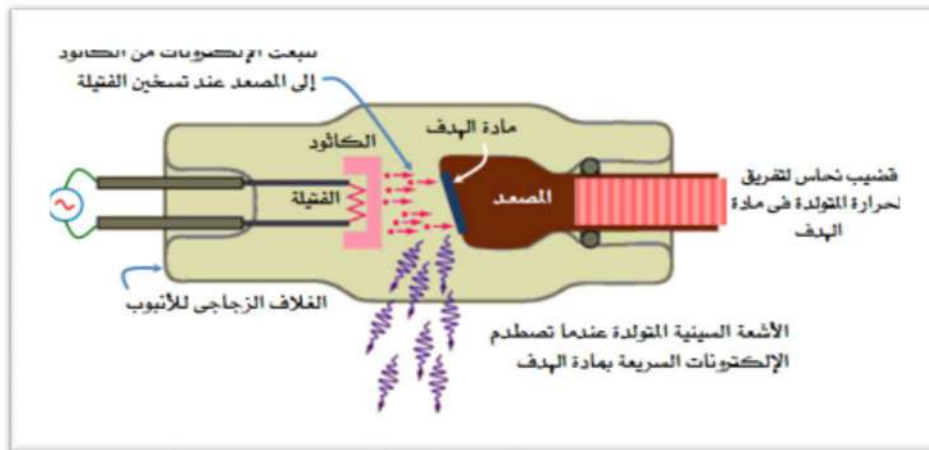
الأشعة السينية أو ما يسمى (x)ray هي عبارة عن أمواج كهرومغناطيسية في حدود 10 نانومتر، تم اكتشافها من قبل العالم الألماني وليام رونتجن سنة 1895 في جامعة فورتسبورغن طريق الصدفة، حيث قام العالم بتجربة تسليط شعاع إلكتروني داخل أنبوب زجاجي مطبق بين طرفيه توتر كهربائي عالي الجهد مفرغ من الهواء حيث تذهب الإلكترونات من القطب السالب إلى القطب الموجب وتم تغليف الأنبوب بورق ببلاتين سيانيد باريوم أسود لحماية المستخدم من الأشعة الكهرومغناطيسية، فلاحظ ظهور إشعاع ضوئي خارج الأنبوبة المعتمة مستنتجا وجود أشعة تملك طاقة عالية في اختراق الأجسام الصلبة، مسميا إياها بالأشعة x أو الأشعة السينية. [8]

4-2- مفهوم انعراج الأشعة السينية DRX:

الأشعة السينية المسماة بالإنجليزية (rays-x) وهي جزء من الأمواج الكهرومغناطيسية ذات ترددات عالية للطاقة فهي تقع في الطول الموجي (10-0,01) نانوميتر وتكون محصورة بين تردد الأمواج المرئية والأشعة غاما وتعد ذات تأثير كبير على الخلايا والعظام فيمكنها اختراق الأجسام ومنه يأتي مفهوم الانعراج في اختراق، فكل جسم لديه طبيعة انعراج خاصة به للأشعة السينية فالتراس البلورية المعرفة بالمستويات البلورية قرائن ميلر (hkl) المحددة لطول الروابط البلورات المحسوب حسب علاقة براغ [9].

4-3- إنتاج الأشعة السينية:

يتم إنتاج الأشعة السينية عبر انعراج الأشعة في أنبوبة مفرغة حيث يتم قذف إلكترونيات مسرعة على هدف معدني ذو شحنة موجبة تقوم بالدخول الى مدارات الداخلية للمعدن محدثنا تهيج للإلكترونات حيث عند رجوع الذرة الى حالة الاستقرار فتنشأ الأشعة السينية بنسبة ضعيفة مقارنة مع الطاقة المولدة للإلكترونات وتتبدد معظمها على شكل حرارة.



أنبوبة الإنتاج الأشعة السينية. [10]

4-4 قانون براغ:

إن انعراج الأشعة السينية مع المادة (العينة) مرتبط بقانون براغ، يبين القانون طريقة التداخل البناء للأشعة داخل البلورات العينة فعند اصطدام الأشعة السينية على العينة تحدث تداخلات للأشعة في المستويات البلورية (بنائه -هدامة)، حيث إن الأشعة البناءة تنشأ في المستويات المتوازية حسب علاقة التالية: [11]

$$2d_{hkl} \sin \theta = \lambda n$$

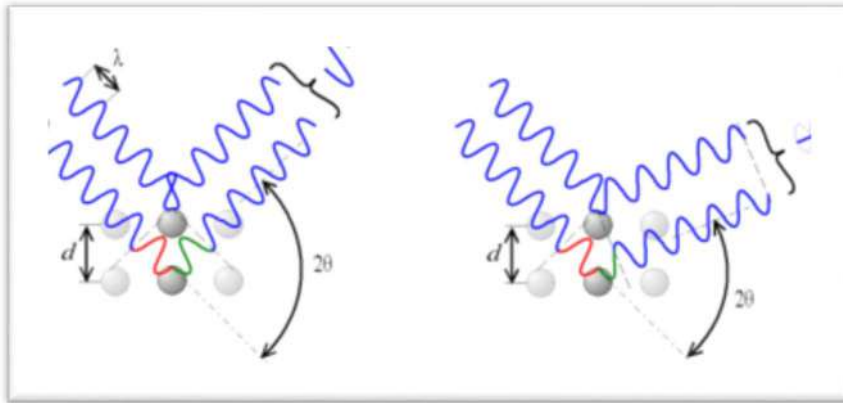
حيث:

n: عدد صحيح يحدد رتبة الانعكاس.

θ : زاوية سقوط الأشعة على العينة.

λ : طول الموجة.

d_{hkl} : المسافة بين المستويات.



صورة لانعراج البناء على (اليسار) والهدام على (اليمن) للأشعة السينية.

عند الأشعة الساقطة على العينة لحدوث انعراج للأشعة وشرط براغ يجب: $d_{hkl} = \lambda/2$.

4-5- خصائص الأشعة السينية:

+سرعتها مقاربة لسرعة الضوء.

+لا تتأثر بالحقول الكهربائية والمغناطيسية.

+تغير طول الموجة حسب طبيعة المادة.

4-6- مبدأ إنتاج الأشعة السينية:

إن مبدأ إنتاج الأشعة السينية عبر تصادمات تنشأ عن الاليكترونات المسرعة مع المصعد حسب تجربة الأنوب كوليديج المسمى نسبة للعالم كوليديج حيث: [12]

-**المهبط:** هو عبارة عن مصدر الاليكترونات ويستخدم معدن التنغستات لخاصيته في تحمل درجة الحرارة العالية وثقل ذراته.

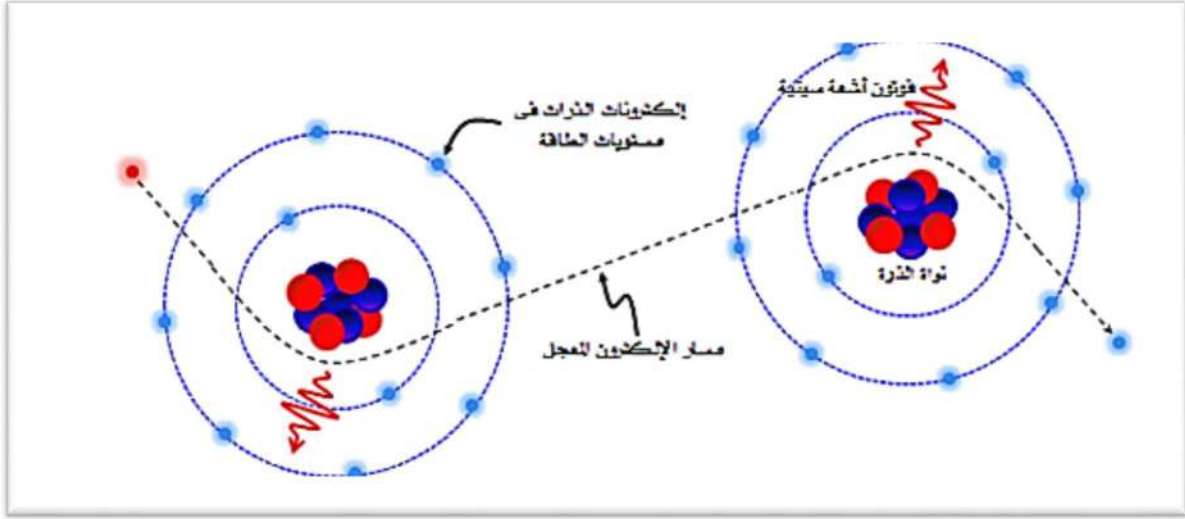
-**المصعد:** وهو المادة الهدف التي تنشأ عن طريقها الأشعة السينية، حيث تقوم الاليكترونات مسرعة بالاصطدام به منشأة حرارة كبيرة لذا تستخدم في الأنبوبة تدوير للمصعد مع مبردات لتجنب تلف العينة.
-**المرشحات:** وهي عبارة عن نوافذ لتصفية الأطوال الأخرى داخل الأنبوبة لمنع والسماح مرور الأشعة السينية متحكممة فيها كما تقوم بتركيز الاليكترونات للاصطدام بالمصعد.

4-7- اليات انتاج الاشعة السينية:

عند اصطدام الاليكترونات مع الهدف (العينة) تنشأ أطياف بين المصعد والمهبط في الأنبوبة: [13]

4-7-1- الطيف المستمر:

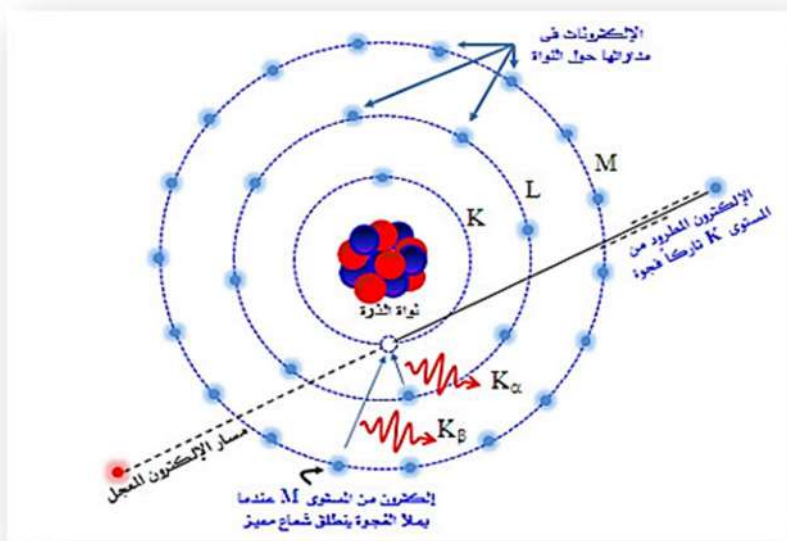
وهو طيف ينشأ عن طريق إنكباح الاليكترونات ذو نسبة كبيرة 80% من الأشعة السينية الكلية عند قذف الاليكترونات مسرعة على المادة الهدف تقوم الاليكترونات العينة بالتناثر مع الاليكترونات القادمة من المصعد مما ينشأ تباطأ في حركة الاليكترونات.



صورة توضيحية للأشعة الإنكباحية (المستمرة). [14]

4-7-2- الطيف المميز:

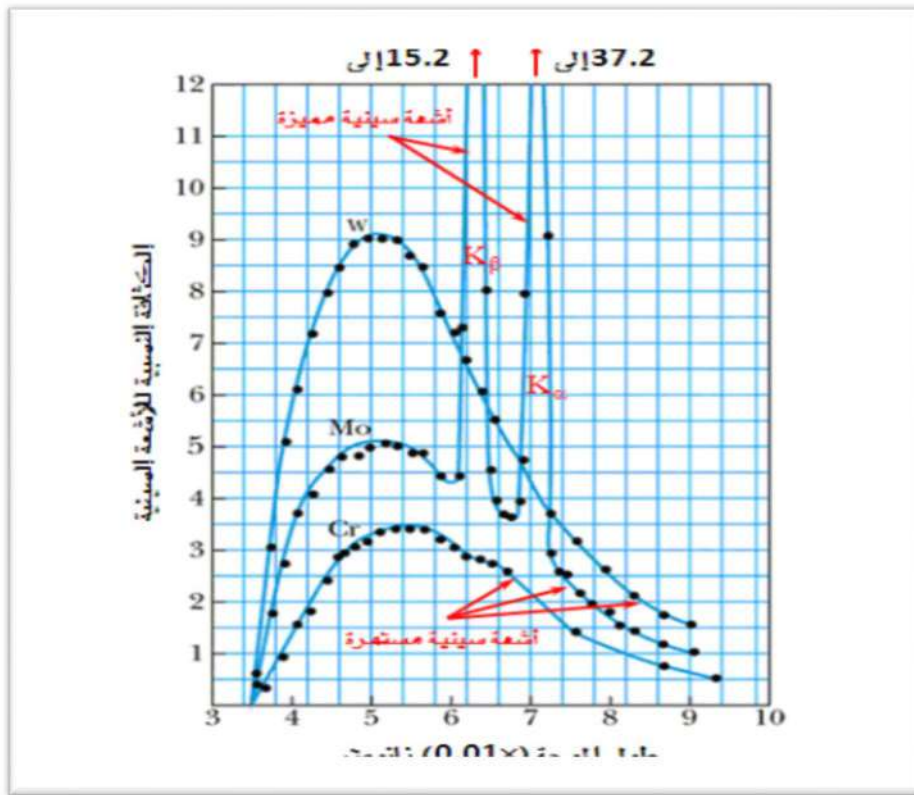
ينشأ هذا الطيف في المدارات الداخلية للعينة مميز بنسبة صغيرة من الأشعة الكلية 20%، حيث عند قذف الاليكترونات ذات طاقة عالية على عينة تقوم الاليكترونات بشحن الاليكترونات في المدارات الداخلية لتتصعد إلى مدارات أعلى وعند نزول الاليكترونات إلى مستوى الداخلي (حالة الاستقرار) تنشأ طيف المميز لكل عنصر.



صورة توضيحية لمسار للأشعة المميزة.

8-2- استخدامات الأشعة السينية:

تستخدم الأشعة السينية في عدة ميادين من بينها دراسة العينات في المخابر وحتى الفحوصات الطبية وكما يتم عبرها معرفة الخواص الأساسية للمادة المدروسة والتي تتمثل في الخواص الفيزيائية طول الرابطة وزوايا بين الذرات.



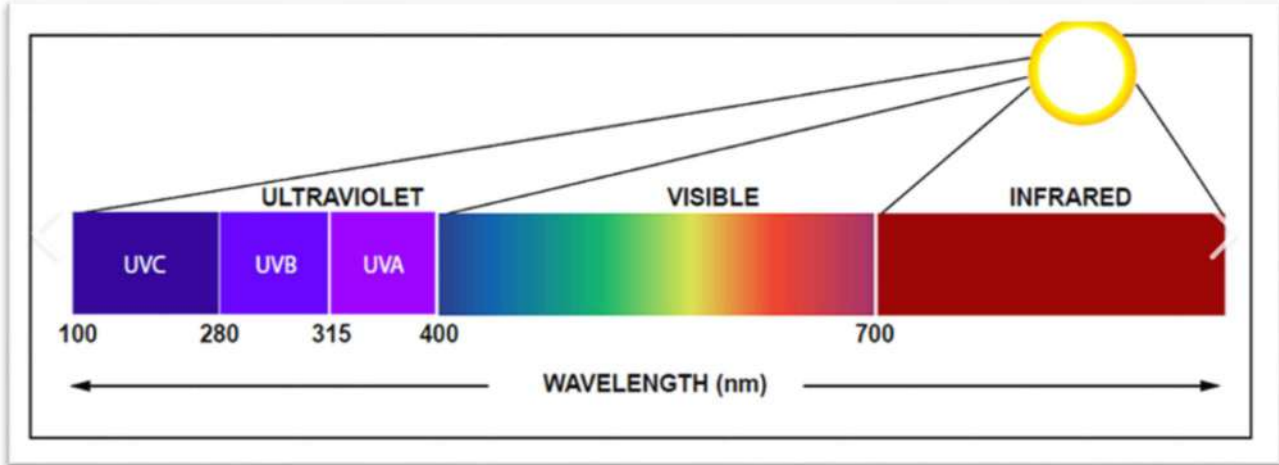
مخطط الأشعة السينية المميزة والمستمرة. [15]

5- الأشعة فوق البنفسجية UV:

1-5- تعريف الأشعة فوق البنفسجية:

هي موجات كهرومغناطيسية، ذات طول موجي أقصر من الضوء المرئي لكنها أطول من الأشعة السينية سميت فوق البنفسجية لأن طول موجة اللون البنفسجي هو الأقصر بين ألوان الطيف وطول موجاتها يبدأ

من 400 نانومتر إلى 100 نانومتر، وطاقتها تبدأ من 3 إلى 124 إلكترون فولت. [16]



صورة توضيحية لخط الطيفي للأشعة.

2-5- أنواع الأشعة فوق البنفسجية:

يوجد 3 أنواع رئيسة للأشعة فوق البنفسجية وهي:

1-2-5 أشعة UVA: وهي الأشعة الضعيفة من حيث الطاقة الأشعة فتكون في المجال الطول الموجي (320-400) نانومتر.

2-2-5 أشعة UVB: وهي أشعة ذات شدة متوسطة من حيث الطاقة في المجال الطول الموجي (280 - 320) نانومتر.

3-2-5 أشعة UVC: تمتلك هذه الأشعة طاقة أكثر من الأنواع الأخرى، حيث شدة الطاقة هذه الأخيرة في المجال الموجي (100-280) نانومتر.

3-5 خصائص الأشعة فوق البنفسجية:

أنها عبارة عن موجات تقع ضمن الطيف الكهرومغناطيسي، بالتالي فإنها -كما الموجات- تمتلك خصائص موحية فريدة تعطئها العديد من المميزات، والتي أيضًا في المقابل هي السبب في كون الأشعة فوق البنفسجية خطيرة من عدة نواحٍ، وهذه الخصائص كالآتي: [17]

1-3-5 التردد: تمتلك الأشعة فوق البنفسجية ترددات أعلى من الضوء المرئي، حيث تتراوح تردداتها ما

بين 10^{15} و 10^{17} هيرتز].

5-3-2-الطول الموجي : تتراوح الأطوال الموجية لأنواع الأشعة فوق البنفسجية في حدود 100 نانومتر إلى 400 نانومتر.

6-نظرية الكثافة الوظيفية DFT:

6-1-نبذة تاريخية لنظرية الكثافة الوظيفية (DFT):

تم طرح نظرية الكثافة الوظيفية سنة 1927م من قبل العالمين توماس لويين وأنريكو فيرمي ومع ذلك فإنه لم يكن بالإمكان استعمالها حتى منتصف 1960. وهذا عبر اعتماد على نموذج الإحصائي النسبي حول تحديد الذرات ومنذ ذلك الوقت وهي في تطور متصاعد ومع تطور وقوة البرامج المعلوماتية وسرعة تطبيق العمليات الحسابية. جاءت نتائج (DFT) بنتائج قريبة من البيانات التجريبية وبتكاليف منخفضة نسبياً مع الطرق التقليدية التي تستهلك المال والوقت معاً، ولكن على الرغم من التحسن الكبير الذي طرأ مؤخراً والتحسين المستمر للبرامج، لا تزال هناك بعض الصعوبات في استخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لوصف التفاعلات بين الجزيئات وخاصة القوى الضعيفة (فان دير والز)، الحالات الانتقالية للإلكترونات، حساب الفجوات (band Gap) في أشباه الموصلات.

6-2-تعريف بنظرية الكثافة الوظيفية DFT:

هي أحد أهم الطرق المستعملة في الفيزياء والكيمياء من الناحية النظرية وبواسطتها نستطيع أن نحدد خصائص نظام متعدد الجسيمات التي كانت تعتمد في علاقتها على نظرية شرود نغر وحسنت عبر طرق كوهن وهونبارغ، وهي واحدة من أكثر الطرق استخداماً في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة.

6-3-علاقات الأساسية لنظرية الكثافة الوظيفية:

6-3-1-نظرية شرود نغر: [18]

ان نظرية شرود نغر هي النظرية الأساسية لدراسة البلورات والأطياف، فاستخدمت في DFT بسبب علاقات التي تتعدى ميكانيك الكلاسيكية (ميكانيك الكم) ، فمن العلاقة التالية نبدأ مع DFT:

6-3-1-أ-معادلة شرود نغر المستقلة عن الزمن:

$$H\Psi = E\Psi$$

حيث:

H: دالة الهاملتون.

E: الطاقة الكلية.

ψ: دالة الموجية.

تعد معادلة شرودنغر غير مفسرة بالتدقيق لظواهر الفيزيائية في ميكانيك الكم فتستخدم تقريبات لحصر المعادلة وتبسيطها.

6-3-2-تقريب تومس فيرمي:

نشأة نظرية الكثافة الوظيفية حسب تقريب تومس فيرمي حيث قام هذا التقريب بالاعتماد على التقريب الإحصائي لفيرمي مكن هذا التقريب في معرفة قيمة الطاقة الحركية للذرات في مجال هذا التقريب فكانت النتائج غير دقيقة فاستخدمت تقريبات لتدقيق النتائج. [19]

6-3-3-تقريب أوبرن هايمر:

هذا التقريب يعتمد على فصل حركة الإلكترونات عن الأنوية، والذي يأخذ بعين الاعتبار الاختلاف الكبير بين كتل الإلكترونات وكتل الأنوية، بحيث أن كتلة الإلكترون أقل بكثير من كتلة النواة في حين أن سرعة الإلكترونات أكبر بكثير من سرعة النواة. فمن الناحية تعتبر النواة هي الجزء الساكن مقارنة مع الاليكترونات التي تتحرك مع اعتبار التفاعلات فيما بينها ثابتة فيكون شكل المعادلة من الشكل التالي:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \sum_i \nabla_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{ij} \frac{e^2}{|r_i - r_j|} - \sum_{ia} \frac{e^2 Z_a}{|r_i - R_a|} \right] \psi = E \psi$$

يكون حل هذه المعادلة في طريقة هارتر فوك والتي تعتمد على التفاعلات بين النواة والاليكترونات الحرة ولكن المعادلة لم تحل مشاكل البلورات الصلبة حيث النتائج كانت ذات دقة ضئيلة فاستعملت نظرية - هونبارغ وكوهن لحل مشكلة في نظرية الكثافة الوظيفية DFT. [20]

4-3-6- نظرية هونبارغ وكوهن:

قام العالمان بتعديل نظرية DFT حسب تقريب أوبن هايمر إلى نظرية يمكنها حل مشاكل الجسيمات في جميع حالاتها (السائلة-الصلبة.....)، حيث تقوم هذه النظرية على نظريتان. [21]

4-3-6-أ- النظرية الأولى:

تقوم النظرية الأولى على في جميع الحالات عند تعرض نظام جسيمي إلى جهد خارجي يحدد هذا الجهد نسبة الحالة الدنيا أو الأكثر استقرارا للإلكترونات فتعرف الطاقة الكلية للنظام بمعرفة نسبة كثافة الاليكترونية للنظام.

$$E(r) = \rho(r)$$



4-3-6-ب- النظرية الثانية:

تقوم هذه النظرية على تشخيص النظرية الأولى حيث في حالة الأولى توافق الطاقة الكلية مع كثافة الاليكترونية، إلى أن الطاقة الدنيا للنظام تكون موافقة للكثافة الاليكترونية الدنيا حيث:

$$E(r)_{min} = \rho(r)_{min}$$



4-3-6-5- إيجابيات وسلبيات:

نظرا لما قدمته نظرية الدالة الكثافة الوظيفية (DFT) من العديد الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمواد، أين تغلبت على الكثير من الصعوبات التي واجهتها النظريات الكمومية وعلى الرغم من هذه الإيجابيات، فما زالت تحتوي العديد من العيوب ومن أهمها استعمال التقريبات من أجل تقريب النتائج فليست هناك قواعد دقيقة أو معايير للاختيار دوال لهذه التقريبات.

على الرغم من هذه العيوب إلى أنها لاتزال هي أساس الأحسن والأقرب للنتائج النظرية من بين التقريبات المعروفة وهي لاتزال في التطور والتحسين لمعالجة هذه العيوب.

الفصل الثاني دراسة الأطوال والزوايا المادة
2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة السينية ومقارنتها
مع نتائج نظرية ل DFT

1- مقدمة:

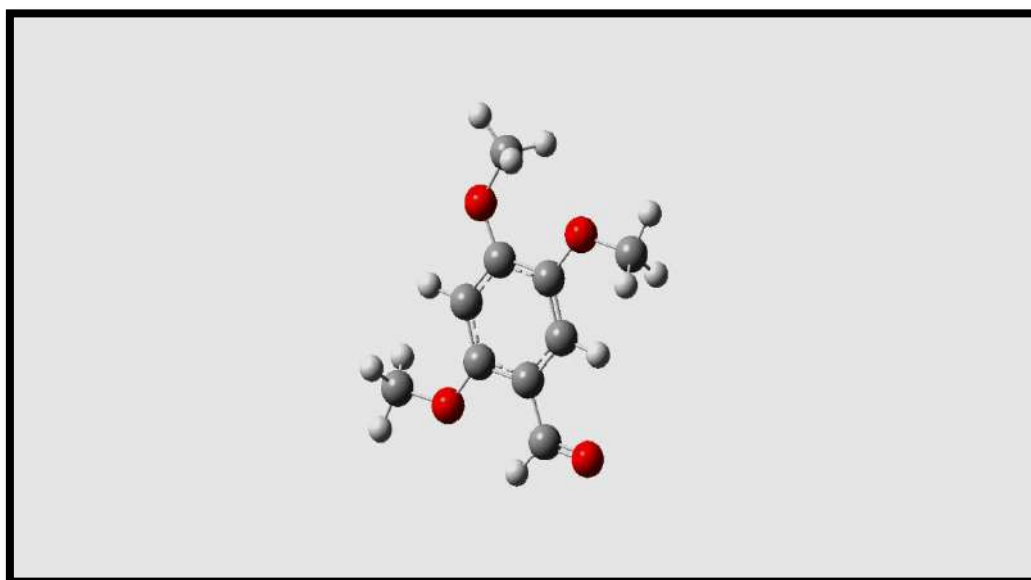
تعد الدراسات الحديثة في مجال علوم المواد من السبل الأساسية في معرفة خصائص وتطبيقات واستعمالات المواد ويشترط في هذه الدراسات استبيان واستنتاج والتحليل من الناحية الدراسة النظرية مع التجريبية قصد مقارنة و اختلاف للحصول على تنبؤات دقيقة.

2- مدخل:

نقوم بدراسة المادة المركبة من جزيئات حلقيه معقدة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde من ناحية النظرية عبر نظرية الكثافة الوظيفية DFT ببرنامج gaussian03 باستخدام دوال والقواعد قصد التدقيق في قيم النتائج النظرية ومقارنتها مع النتائج التجريبية لحساب الزوايا والطوال الروابط باستخدام الأشعة السينية.

3-الدراسة النظرية:

-نقوم في هذه الدراسة بإستعمال النظرية الكثافة الوظيفية DFT باستخدام البرنامج gaussian03 عبر الدوال أو القواعد و الوظائف قصد معرفة أطوال والزوايا الروابط. [22]

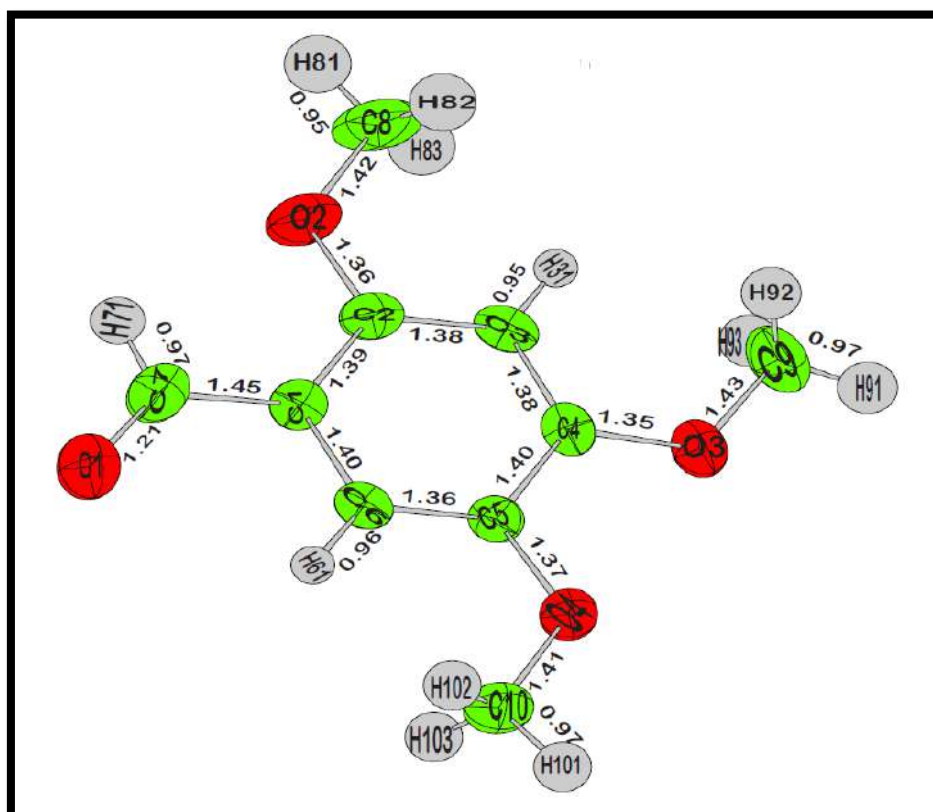


صورة(14): التركيب الجزيئي بطريقة DFT في برنامج Gaussian03

4- الدراسة التجريبية:

- في الدراسة التجريبية نقوم بحساب الأطوال والزوايا عبر حيود الأشعة السينية.

تم إجراء قياسات حيود الأشعة السينية أحادية البلورة عند $K=293T$ في مختبر علم البلورات بجامعة قسنطينة. [23]



الصورة (15): مخطط لمركب الحلقي 2.4.5thrmiethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة السينية

5- النسبة المئوية:

تتم المقارنة بين النتائج النظرية لنظرية الكثافة الوظيفية والتجريبية للحيود الأشعة السينية عبر العلاقة:

$$ACC = \frac{(val_{exp} - val_{thè}) \cdot 100}{val_{exp}}$$

6- جداول مقارنة بين طريقة نظرية DFT عبر برنامج GAUSSIAN03 وطريقة التجريبية بالأشعة السينية:

1-6- نتائج أطوال الروابط حسب DRX ونظرية DFT وقاعدة (cc-pvqz) الوظيفة B3LYP [24]

أ-جدول رقم 1:

نوع الرابطة	طول الرابطة (Å)		ACC%
	DRX	DFT (cc-Pvqz)	
C1-C2	1.396	1.405	0.64057
C2-C3	1.385	1.391	0.43134
C3-C4	1.381	1.399	1.28663
C4-C5	1.402	1.419	1.19803
C5-C6	1.363	1.382	1.37482
C6-C1	1.403	1.399	0.285919
C1-C7	1.451	1.463	0.82023
C7-O1	1.216	1.242	2.0934
C7-H71	0.97	1.099	11.7379
C2-O2	1.366	1.381	1.08617
O2-C8	1.426	1.460	2.32877
C8-H81	0.95	1.089	12.764
C8-H82	0.98	1.096	10.5839
C8-H83	0.98	1.096	10.5839
C3-H31	0.95	1.079	11.9555
C4-O3	1.351	1.374	1.67394
O3-C9	1.430	1.471	2.78722

C9-H91	0.97	1.090	11.0092
C9-H92	0.96	1.091	12.0073
C9-H93	0.96	1.089	11.8457
C5-O4	1.374	1.395	1.50538
O4-C10	1.418	1.458	2.74348
C10-H101	0.98	1.090	10.0917
C10-H102	0.98	1.096	10.5839
C10-H103	0.98	1.096	10.5839
C6-H61	0.96	1.082	11.2754
ACC T			
			5.95026%

-من الجدول رقم 1 نلاحظ نسب الأطوال الروابط بين النتائج النظرية الكثافة الوظيفية DFT حسب الوظيفة B3LYP والقاعدة cc-pvqz ونتائج التجريبية بالأشعة السينية النسبة توافق جيدة حوالي 6%.

6-2-نتائج حساب الزوايا الروابط بطريقة DRX ونظرية DFT حسب القاعدة (cc-pvqz) الوظيفية

:B3LYP

ب-جدول رقم 2:

نوع الزاوية (°)	زوايا الروابط (°)		ACC%
	DRX	DFT (cc-pvqz)	
C1-C2-C3	120.32	118.75	1.304854
C2-C3-C4	119.88	121.95	1.72673
C3-C4-C5	120.64	119.14	1.243369
C4-C5-C6	118.99	118.47	0.437012
C5-C6-C1	121.59	122.36	0.63328
C6-C1-C2	118.58	119.27	0.58189

C6-C1-C7	119.7	118.36	1.119465
C2-C1-C7	121.66	122.52	0.70689
C1-C7-O1	124.9	123.60	1.040833
C1-C7-H71	116.7	114.14	2.193659
O1-C7-H71	118.4	122.25	3.25169
C1-C2-O2	116.68	118.85	1.85979
C3-C2-O2	123.00	124.38	1.12195
O2-C8-H81	108.6	104.88	3.425414
O2-C8-H82	109.1	111.40	2.10816
O2-C8-H83	109.5	111.40	1.73516
C2-C3-H31	120.2	122.14	1.61398
C4-C3-H31	120.0	115.90	3.416667
C3-C4-O3	123.87	114.00	7.968031
C2-O2-C8	118.0	118.38	0.32203
C4-O3-C9	117.97	122.93	4.20446
O3-C9-H91	105.7	103.61	1.977294
O3-C9-H92	109.2	111.38	1.99634
O3-C9-H93	110.8	111.42	0.55957
C4-C5-O4	115.30	117.35	1.77797
C6-C5-O4	125.71	124.16	1.232997
C5-O4-C10	116.83	117.23	0.34238
C4-C5-O4	115.49	117.35	1.61053
H101-C10-H103	109.8	109.81	0.00911
H83-C8-H82	110.3	109.36	0.852221
O4-C10-H101	107.8	109.44	1.52134
O4-C10-H102	110.8	111.54	0.66787

O4-C10-H103	109.9	111.50	1.45587
C5-C6-H61	120.8	122.04	1.02649
C1-C6-H61	117.6	115.58	1.717687
H81-C8-H82	110.0	108.84	1.054545
H81-C8-H83	109.5	109.85	0.31963
H91-C9-H92	110.4	110.48	0.07246
H91-C9-H93	111.0	110.79	0.189189
H93-C9-H92	109.6	109.06	0.492701
H101-C10-H102	109.5	109.83	0.30137
H103-C10-H102	109.0	109.08	0.07339
ACCT			
0.02162%			

من الجدول رقم 2 نسب الزوايا الروابط بين النتائج النظرية الكثافة الوظيفية DFT حسب الوظيفية B3LYP والقاعدة cc-pvqz ونتائج التجريبية بالأشعة السينية النسبة توافق جيدة جدا حوالي 0.02%.

3-6- نتائج أطوال الروابط حسب DRX ونظرية DFT وقاعدة (SDD) والوظيفة B3LYP:

ج-جدول رقم 3:

نوع الرابطة (Å)	طول الرابطة (Å)		ACC%
	DRX	DFT (SDD)	
C1-C2	1.396	1.419	1.64756
C2-C3	1.385	1.405	1.44404
C3-C4	1.381	1.407	1.88269
C4-C5	1.402	1.425	1.64051
C5-C6	1.363	1.397	2.4945
C6-C1	1.403	1.413	0.71276

C1-C7	1.451	1.474	1.58511
C7-O1	1.216	1.256	3.28947
C7-H71	0.97	1.100	13.4021
C2-O2	1.366	1.393	1.97657
O2-C8	1.426	1.458	2.24404
C8-H81	0.95	1.091	14.8421
C8-H82	0.98	1.098	12.0408
C8-H83	0.98	1.098	12.0408
C3-H31	0.95	1.083	14
C4-O3	1.351	1.386	2.59067
O3-C9	1.430	1.470	2.7972
C9-H91	0.97	1.092	12.5773
C9-H92	0.96	1.090	13.5417
C9-H93	0.96	1.090	13.5417
C5-O4	1.374	1.401	1.96507
O4-C10	1.418	1.458	2.82087
C10-H101	0.98	1.091	11.3265
C10-H102	0.98	1.098	12.0408
C10-H103	0.98	1.098	12.0408
C6-H61	0.96	1.085	13.0208
ACC T			
			7.05794%

-من الجدول رقم 3 نسب الأطوال الروابط بين النتائج النظرية الكثافة الوظيفية DFT حسب الوظيفة B3LYP والقاعدة SDD ونتائج التجريبية بالأشعة السينية النسبة توافق جيدة حوالي 7%.

4-6- نتائج حساب الزوايا الروابط بطريقة DRX و DFT (SDD) [25]

ح-جدول رقم 4:

نوع الزاوية (°)	زوايا الروابط (°)		ACC%
	DRX	DFT (SDD)	
C1-C2-C3	120.32	119.74	0.25859193
C2-C3-C4	119.88	120.19	0.721153846
C3-C4-C5	120.64	119.77	0.210101689
C4-C5-C6	118.99	118.74	0.28785262
C5-C6-C1	121.59	121.94	0.21926126
C6-C1-C2	118.58	118.84	0.125313283
C6-C1-C7	119.7	119.55	0.871280618
C2-C1-C7	121.66	120.60	1.120896717
C1-C7-O1	124.9	123.50	0.762639246
C1-C7-H71	116.7	115.81	1.92567568
O1-C7-H71	118.4	120.68	0.05999314
C1-C2-O2	116.68	116.75	0.39837398
C3-C2-O2	123.00	123.49	3.130755064
O2-C8-H81	108.6	105.20	1.79651696
O2-C8-H82	109.1	111.06	1.43378995
O2-C8-H83	109.5	111.07	1.83028286
C2-C3-H31	120.2	122.40	2.775
C4-C3-H31	120.0	116.67	7.427141358
C3-C4-O3	123.87	114.67	0.83050847
C2-O2-C8	118.0	118.98	3.35678562
C4-O3-C9	117.97	121.93	1.315042573

O3-C9-H91	105.7	104.31	1.25457875
O3-C9-H92	109.2	110.57	0.09025271
O3-C9-H93	110.8	110.90	1.60450997
C4-C5-O4	115.30	117.15	1.296635113
C6-C5-O4	125.71	124.08	0.95865788
C5-O4-C10	116.83	117.95	1.43735388
C4-C5-O4	115.49	117.15	0
H101-C10-H103	109.8	109.80	0.444242974
H83-C8-H82	110.3	109.81	2.309833024
O4-C10-H101	107.8	105.31	0.35198556
O4-C10-H102	110.8	111.19	1.02820746
O4-C10-H103	109.9	111.03	0.75331126
C5-C6-H61	120.8	121.71	1.096938776
C1-C6-H61	117.6	116.31	0.209090909
H81-C8-H82	110.0	109.77	0.28310502
H81-C8-H83	109.5	109.81	0.235507246
H91-C9-H92	110.4	110.14	0.14414414
H91-C9-H93	111.0	111.16	0.03649635
H93-C9-H92	109.6	109.64	0.25570776
H101-C10-H102	109.5	109.78	0.25859193
H103-C10-H102	109.0	109.62	0.56880734
ACC T			
			1.082736%

-من الجدول رقم 4 نسب الزوايا الروابط بين النتائج النظرية الكثافة الوظيفية DFT حسب الوظيفة B3LYP والقاعدة SDD ونتائج التجريبية بالأشعة السينية للنسبة توافق جيدة جدا حوالي 1%.

7- مناقشة النتائج:

نلاحظ من الجداول نسبة التوافق كبيرة بين النتائج النظرية الكثافة الوظيفية DFT ونتائج التجريبية للأشعة السينية مع وجود نسبة اختلاف ضئيلة تعود إلى أسباب وعوامل تساهم في هذه النتائج، كما ناقش في بحثنا هذا عن هذه أسباب [26]

7-1- دراسة المادة من ناحية النظرية DFT تكون في حالة المثالية لدراسة من حيث أن تتم دراسة العينة منفردة حيث تكون التصادمات بين الذرات مهملة مثل الروابط الضعيفة على خلاف دراسة التجريبية بالأشعة السينية التي تدرس العينة في حالة الطبيعية مما يسمح بضغط الذرات على بعضها البعض بسبب الروابط الضعيفة مثل الروابط الهيدروجينية وفاندروالز.

7-2- عامل درجة الحرارة من ناحية النظرية أن تأخذ في درجة الصفر كالفن أي في حالة توقف الجسيمات والذرات عن الاهتزاز والتحرك على نظير أن الناحية التجريبية التي تدرس في درجة حرارة الطبيعية التي تكون فيها الاهتزاز الذرات.

الفصل الثالث دراسة الإهتزازات المادة
2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة تحت الحمراء
وأشعة رامان ومقارنتها مع النتائج النظرية لـ DFT

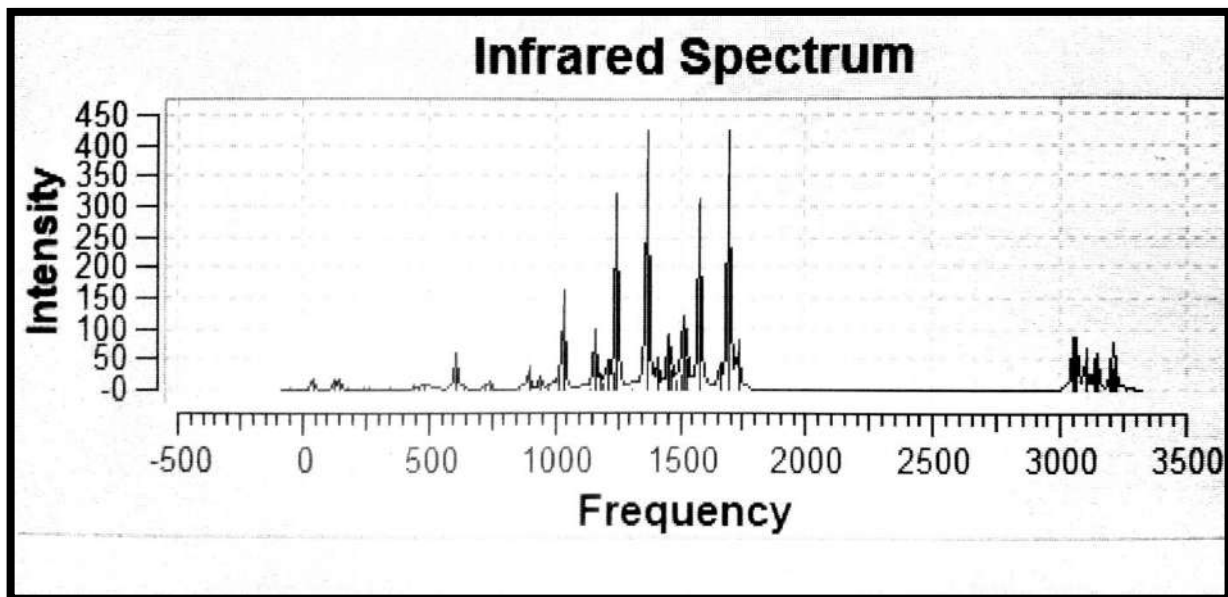
1-مقدمة:

تعتبر طرق التحليل الطيفي الجزيئي والذري من أهم الطرق التحليل نظرا لسهولة استخدامها ودقتها في النتائج كما تعتمد هذه الطرق على انبعاث أو امتصاص جزء من أنواع الأشعة الكهرومغناطيسية من قبل الجزيئات أو ذرات المادة المدروسة.

نقدم في هذا الفصل دراسة خاصة الاهتزاز والتي تدرس عبر الأشعة تحت الحمراء ووارمان مقارنتها مع نتائج النظرية لـ DFT بواسطة برنامج Gaussian03 باستخدام وظائف وقواعد من أجل حساب التقريبي الدقيق في النتائج.

2-الدراسة النظرية:

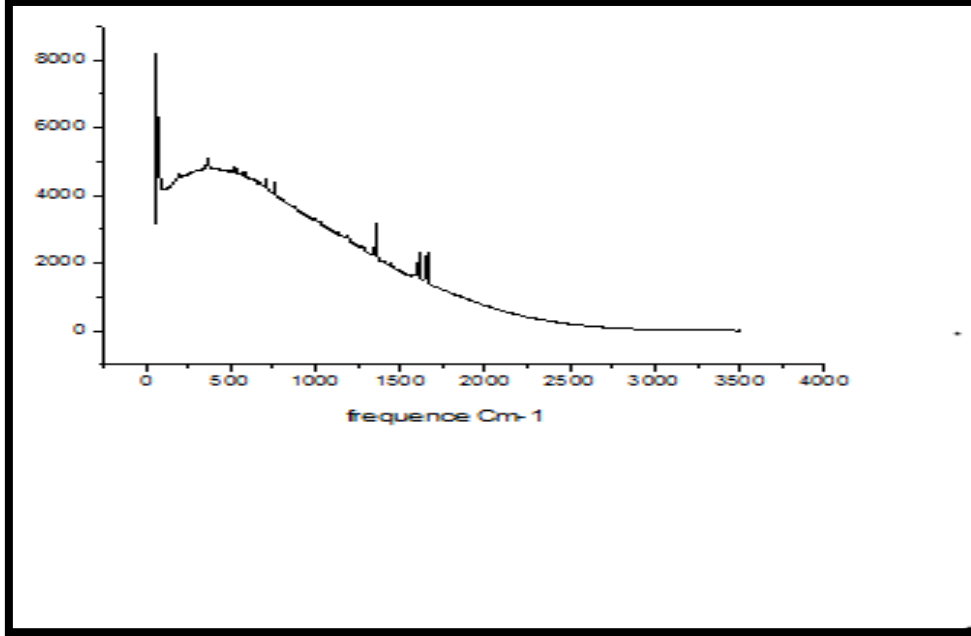
تتم الدراسة النظرية عبر برنامج Gaussian03 يسمح بدراسة المواد وفي دراستنا نستعمل نظرية الكثافة الوظيفية DFT لدراسة طبيعة العينة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde والاهتزاز الذرات.



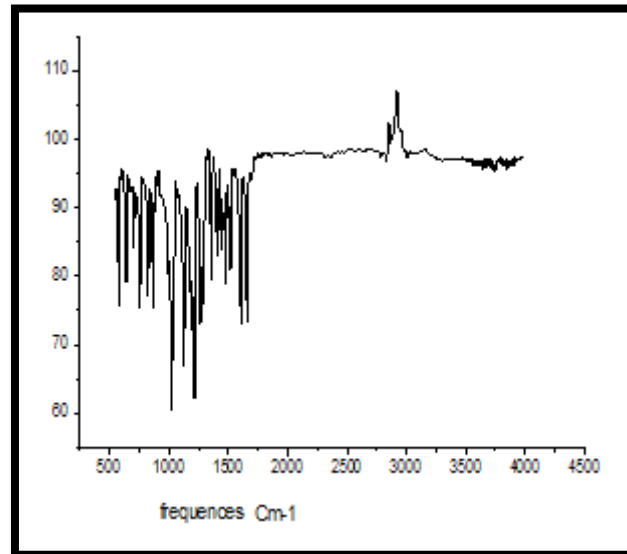
صورة(16): طيف الإمتصاص بدلالة التردد المادة المدروسة بواسطة DFT [27]

3-الدراسة التجريبية:

تتم الدراسة التجريبية عبر الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامان بتحديد خصائص اهتزازات المادة المدروسة. [28]



صورة(17): طيف الأشعة رامان [29]



صورة(18): طيف الأشعة تحت الحمراء [30]

4-جدول نتائج التجريبية عبر لأشعة IR وRAMAN والنظرية لـ DFT: [31]
أ-جدول 1:

Vibrations	Result DFT	result IR	result RAMAN
1	7.7382		
2	56.5677		51
3	88.6464		
4	105.793		
5	160.021		
6	174.996		
7	181.133		
8	195.035		
9	218.526		
10	223.691		
11	231.547		
12	266.484		
13	296.907		
14	300.261		
15	349.027		370
16	392.153		
17	447.97		
18	471.966		
19	490.875		
20	522.482		
21	619.83	573	
22	641.618	640	

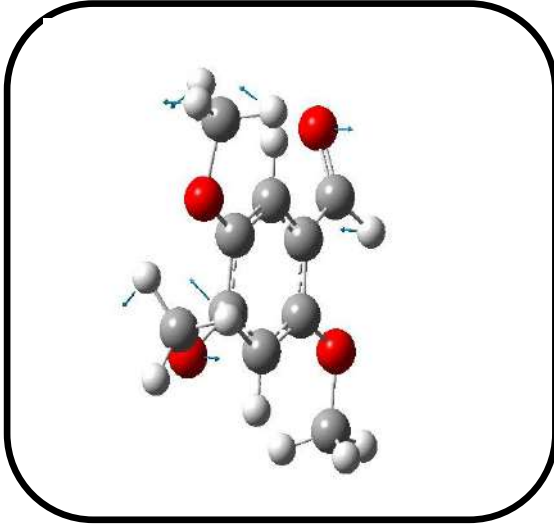
23	727.077	707	703
24	741.265		
25	746.701	751	
26	794.521	817	
27	862.479	861	
28	962.966		
29	982.983		
30	990.679		
31	1018.66	1027	
32	1038.53		
33	1080.39		
34	1149.72	1126	
35	1153.07		
36	1161.02		
37	1163.69		
38	1182.31		
39	1196.77		
40	1203.26	1215	
41	1228.24		
42	1241.47	1270	
43	1314.94	1292	
44	1328.77		
45	1357.19	1358	1353
46	1426.68		
47	1435.08		

48	1495.13	1480	
49	1506.4		
50	1520.66	1523	
51	1550.52		
52	1554.45		
53	1555.91		
54	1555.99		
55	1558.94		
56	1570.51		
57	1576.47		
58	1593.92	1612	1613
59	1691.79	1656	1657
60	1691.79	2847	
61	3008.18	3013	
62	3031.63		
63	3035.11		
64	3081.53		
65	3086.36		
66	3091.91		
67	3155.79		
68	3157.91		
69	3161.96		
70	3170.79		
71	3231.37		
72	3257.08		

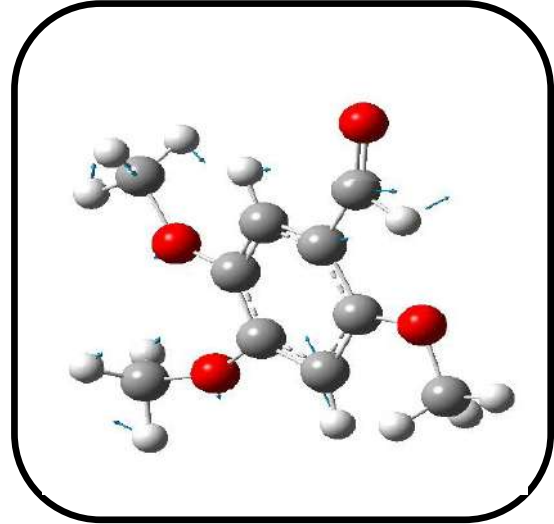
نقارن بين النتائج التجريبية للأشعة مع نظرية DFT أن نسبة الاهتزاز من الناحية النظرية قريبة من الناحية التجريبية.

5- أشكال الإهتزازات النتائج المتوافقة بين النظري والتجريبي:

1-5- توضيح الأرقام الإهتزاز المدروس:

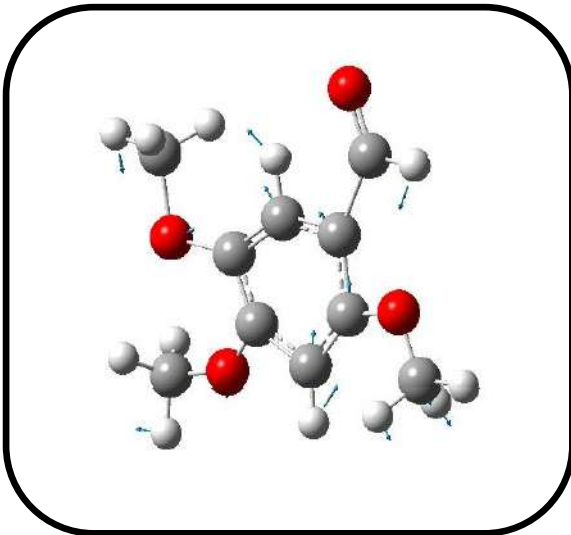


حركة الرابطة CH_3 اهتزاز تأرجحي رقم (2)



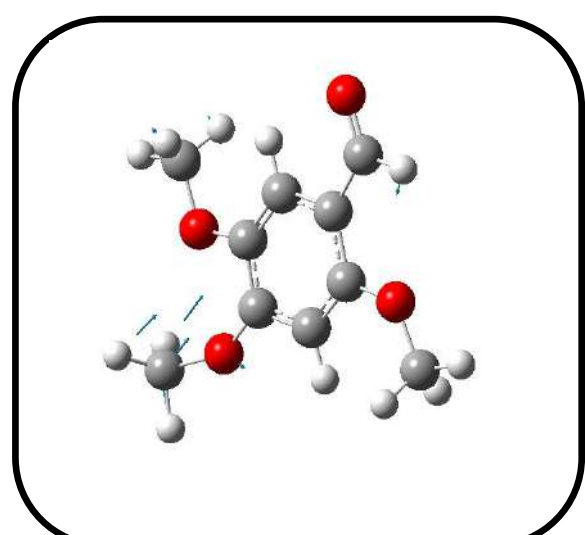
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز التوائي

رقم (15)



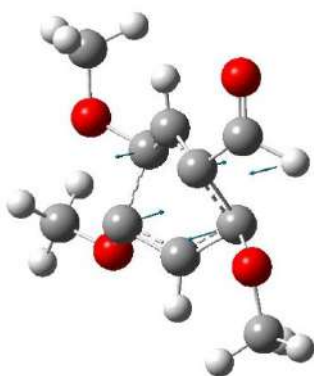
حركة الرابطة C-H اهتزاز تأرجحي و

الرابطة CH_3 اهتزازا نواسي رقم (21)



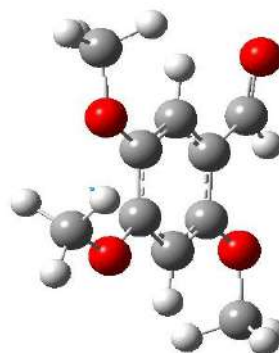
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز تأرجحي

رقم (22)



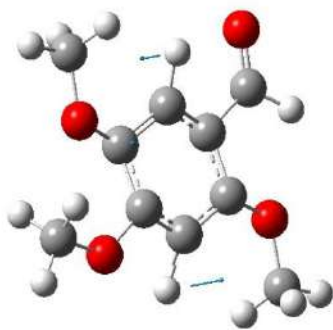
حركة مركب حلقي اهتزاز نواسي

رقم (23)



حركة الرابطة C-H اهتزاز نواسي

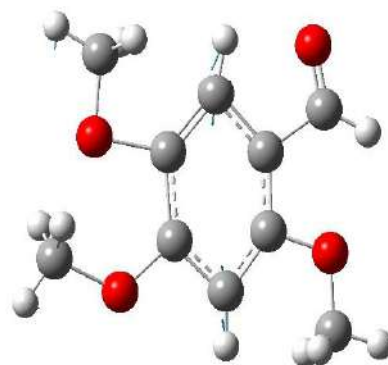
رقم (26)



حركة الرابطين في المركب الحلقي

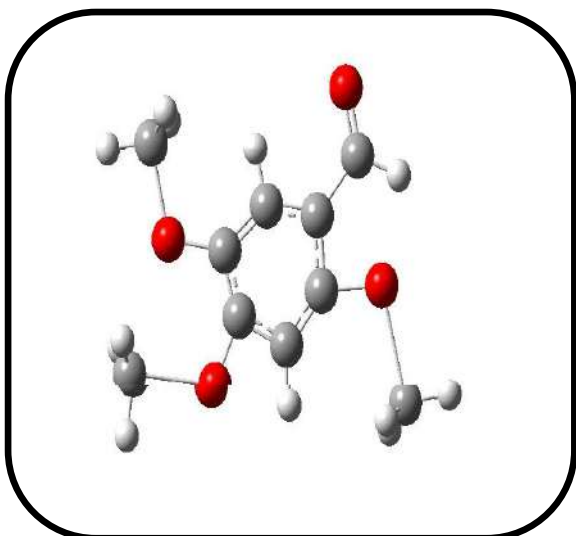
C-H و C-H اهتزاز نواسي متعاكسين

الإتجاه رقم (26)

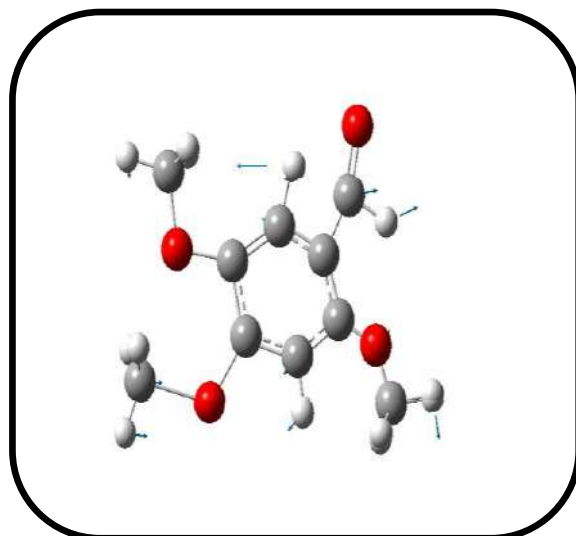


حركة مركب الحلقي اهتزاز تمدد والتقلص

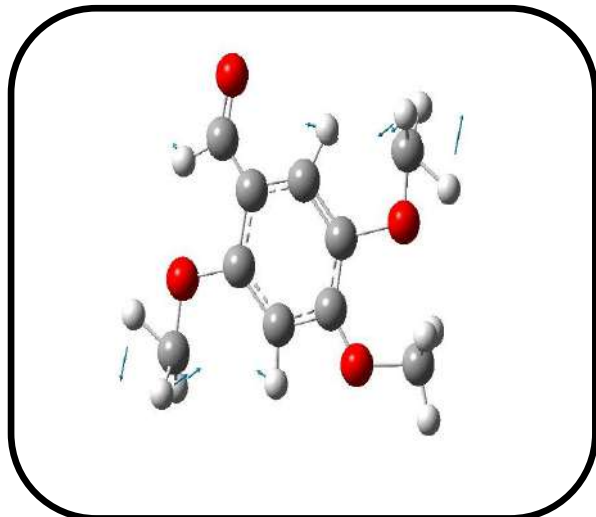
رقم (25)



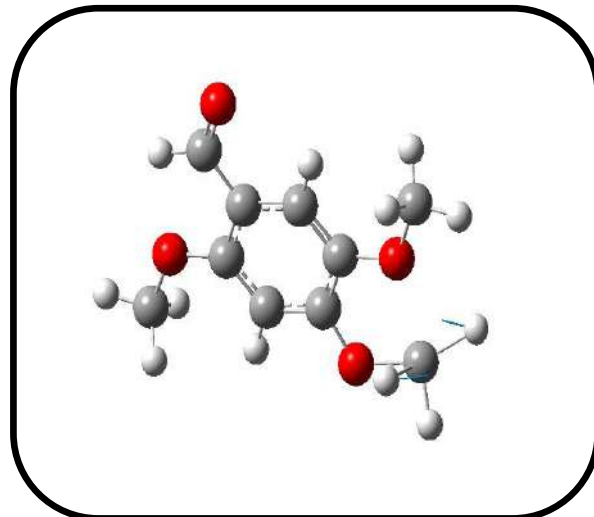
حركة الرابطة $CH_3 - O$ تمدد وتقلص
رقم (31)



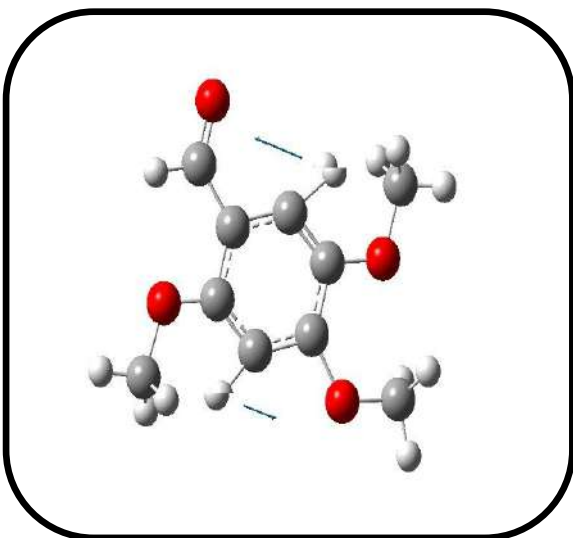
حركة الروابط C-H اهتزاز نواسي
والرابطة $CO_2 - H$ اهتزاز مقصي
رقم (27)



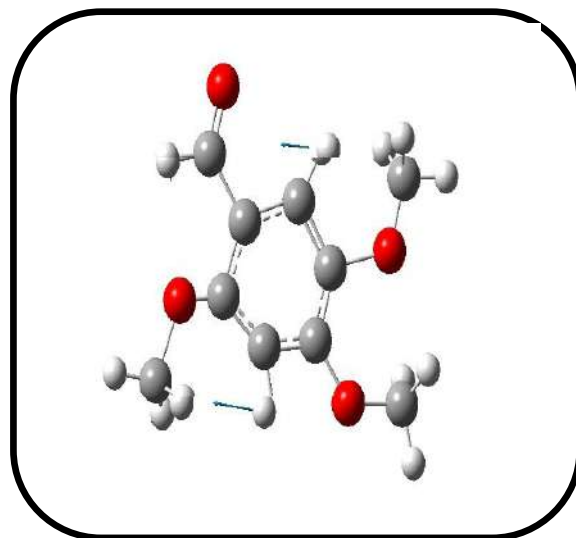
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز التوائي
رقم (40)



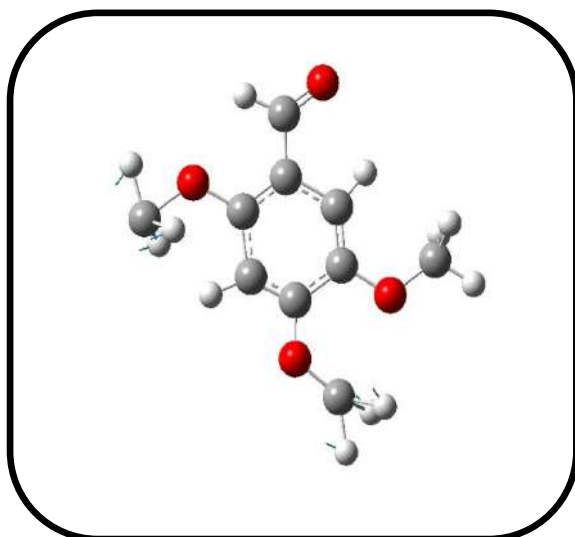
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز التوائي رقم (32)



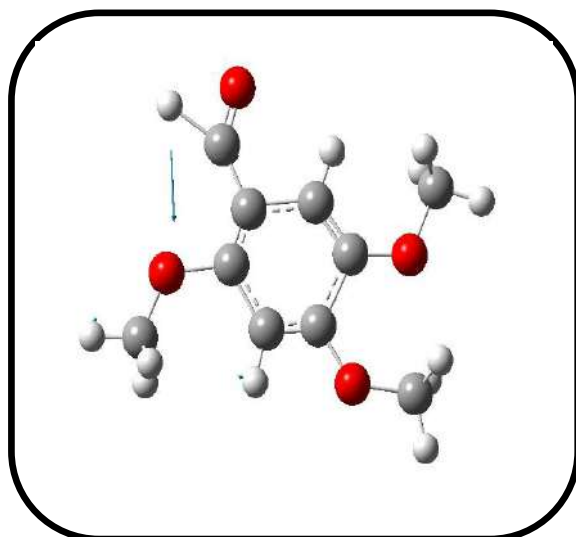
حركة الرابطين C-H وC-H متعاكستين في اتجاه اهتزازا نواسيا رقم (43)



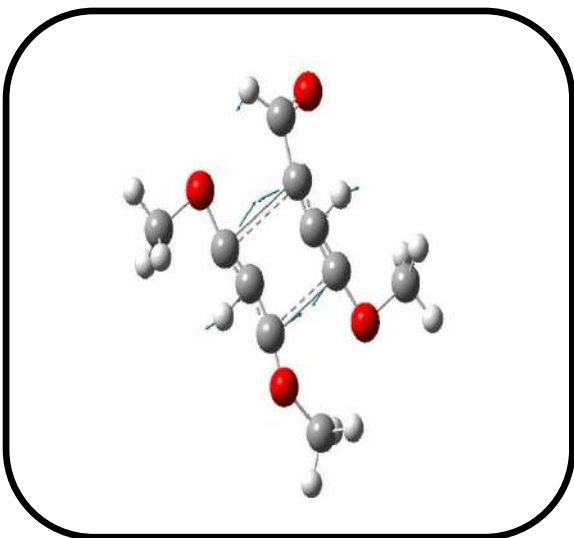
حركة الرابطين C-H وC-H متماثلتين في اتجاه اهتزاز نواسي رقم (42)



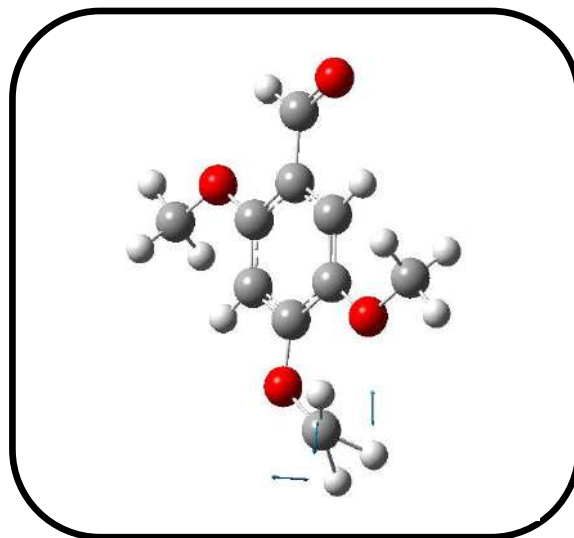
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز مقصي رقم (48)



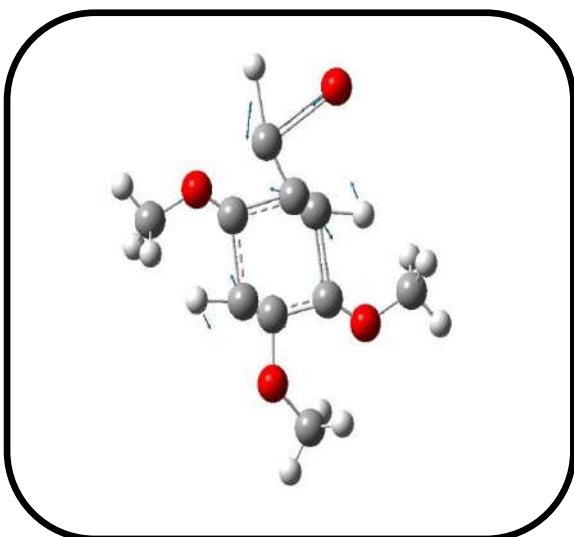
حركة الرابطة $CO_2 - H$ اهتزاز نواسي رقم (45)



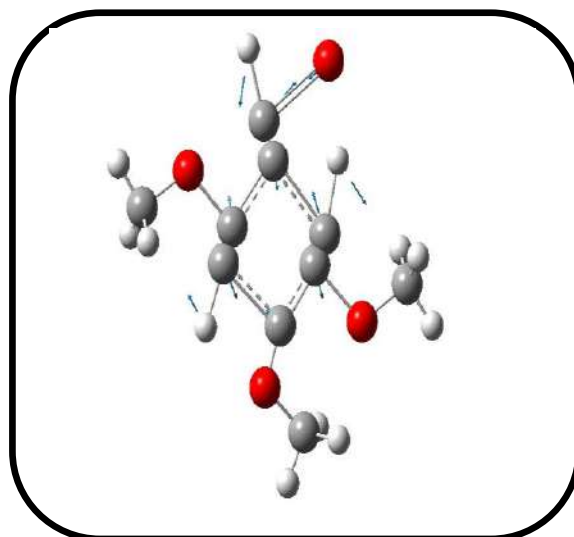
حركة مركب الحلقي حركة تمدد وتقلص
الرابطين C=C رقم (58)



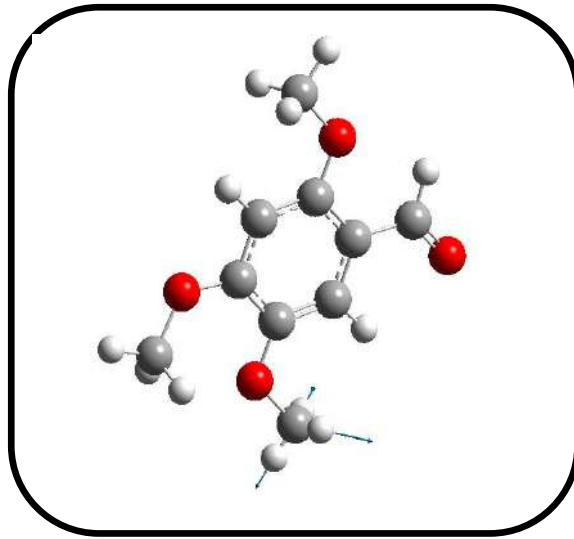
حركة الرابطة CH_3 اهتزاز مقصي
والتوائي رقم (50)



حركة مركب الحلقي اهتزاز تمدد وتقلص
مع الرابطة $CO_2 - H$ رقم (60)



حركة مركب الحلقي اهتزاز تمدد وتقلص
مع الرابطة $CO_2 - H$ رقم (59)



حركة الرابطة CH_3 اهتزاز تمدد وتقلص
رقم(61)

6-مناقشة النتائج:

- 1- دراسة المادة من ناحية النظرية DFT تكون في حالة المثالية لدراسة من حيث أن تتم دراسة العينة منفردة حيث تكون التصادمات بين الذرات مهمة مثل الروابط الضعيفة على خلاف دراسة التجريبية بالأشعة تحت الحمراء ورامان التي تدرس العينة في حالة الطبيعية مما يسمح بضغط الذرات على بعضها البعض بسبب الروابط الضعيفة مثل الروابط الهيدروجينية وفاندروالز. [32]
- 2- عامل درجة الحرارة من ناحية النظرية أن تأخذ في درجة الصفر كالفن أي في حالة توقف الجسيمات والذرات عن الاهتزاز وتحرك على نظير أن الناحية التجريبية التي تدرس في درجة حرارة الطبيعية التي تكون فيها الاهتزاز الذرات.

7-دراسة المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة فوق البنفسجية:

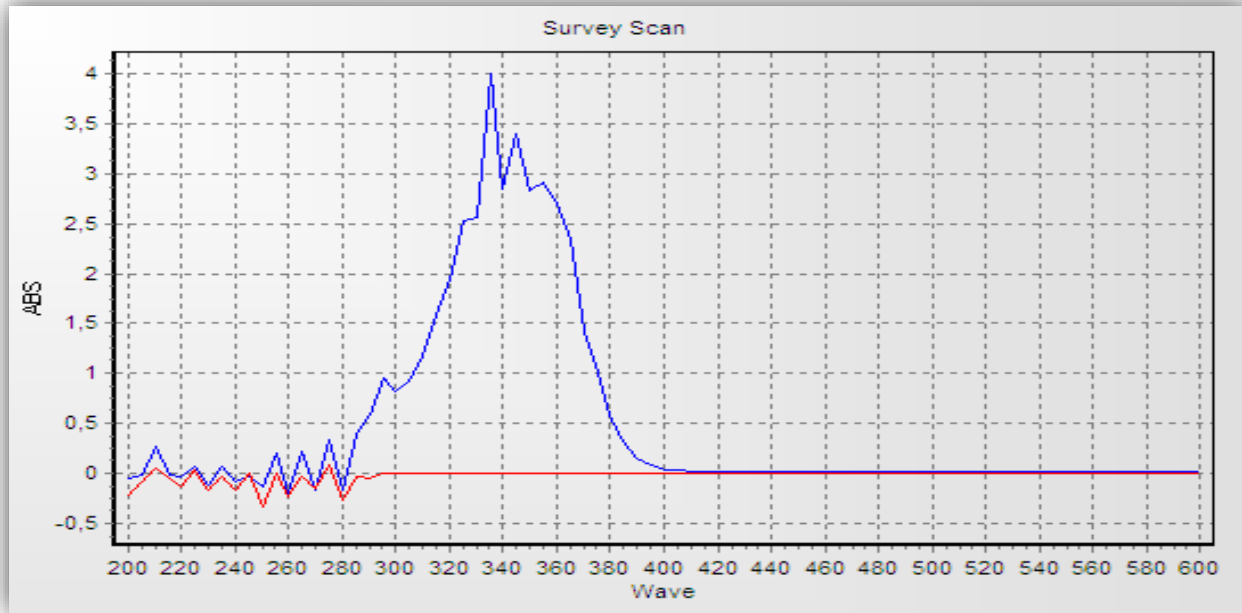
يسلك الضوء فوق البنفسجي في كثير من مظاهره حيث أن ينتج عن امتصاصه إثارة إلكترونية في الجزيئات، كما أن أغلب أجهزة التي تستخدم في طرق التحليل الطيفي في مجال الأشعة المرئية هي نفسها التي تستخدم في طرق التحليل الطيفي في مجال أشعة فوق البنفسجية.

نقدم في هذا جزء من الفصل عن دراسة العينة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde عبر الأشعة فوق البنفسجية UV لإستبيان الخصائص الإليكترونية للمادة فيتم الدراسة الطيفية في تحليل تشتت ذرات العينة للمادة.

تتم هذه الدراسة التجريبية للعينة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde في جامعة قاصدي مرباح ورقلة في مخبر تحليلي للكيمياء عبر جهاز تحليل الطيفي للأشعة فوق البنفسجية. [33]



صورة(19): جهاز تحليل الطيفي بالأشعة فوق البنفسجية في جامعة ورقلة



صورة (20): مخطط امتصاص الأشعة فوق البنفسجية

-نلاحظ من المخطط أن شدة امتصاص كبيرة عند الطول الموجي فوق البنفسجي خارج الطيف المرئي.

8-خاتمة:

ختاماً في هذا الفصل تطرقنا إلى دراسة المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde من ناحية خاصية الإهتزاز الذرات عبر تجربة التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء وأشعة رامن ومقارنتها مع النتائج النظرية لـ DFT وكذا خاصية التشرّد التي تدرس عبر الأشعة فوق البنفسجية فنستنتج من هذه الدراسة إمكانية استخدام نظرية الكثافة الوظيفية في الوصول إلى نتائج جيدة باستخدام تقريبات والدوال غير متداخلة مع النتائج التجريبية.

الخلاصة العامة

في بحثنا هذا تطرقنا إلى مقارنة في النتائج التجريبية مع النتائج النظرية حيث نستبين في الفصلين الثاني والثالث مايلي:

-تتم دراسة أطوال وزوايا عبر الأشعة السينية للمادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** تجريبيا.

-دراسة المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** عبر نظرية ل **DFT** باستخدام القواعد **B3LYP** والوظائف **(cc-pvqz)** و **(SDD)** بواسطة برنامج **GAUSSIAN03** مكن من استخراج نتائج قريبة من نتائج الأطوال والزوايا للأشعة السينية.

-دراسة الإهتزاز المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** عبر الأشعة تحت الحمراء و أشعة رامن تجريبيا.

- دراسة المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** عبر نظرية ل **DFT** باستخدام القواعد **B3LYP** والوظائف **(cc-pvqz)** و **(SDD)** بواسطة برنامج **GAUSSIAN03** أوضح بعض الفوارق في النتائج الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامن من ناحية نسبة الإهتزازات الناتجة.

-مناقشة النتائج الإختلاف بين التجريبي للأشعة و النظري ل **DFT**.

- تم دراسة المادة **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** تجريبيا عبر أشعة فوق البنفسجية وتعليق على النتائج.

-ملخص:

*العربية:

تتم دراسة المادة 2.4.5trmiethoxybenzaldehyde من أجل الحصول على البنية البلورية للمركب باستخدام الطرق التجريبية الأشعة السينية والأشعة تحت الحمراء وأشعة رامان وأشعة فوق البنفسجية واستخدام طريقة نظرية طريقة DFT باستخدام برنامج GAUSSIAN03 والوظيفة B3YLP والقواعد cc-pvqz و sdd من أجل نفس النتائج ومقارنة النتائج النظرية مع التجريبية، فنستخلص من هذه المقارنة أن استخدام الوظائف في نظرية DFT أدى إلى نتائج قريبة من تجريبي.

-تمت دراسة هذه العينة لاستخداماتها في جانب الطبي والصيدلة.

*الإنجليزية:

- The material **2.4.5trmiethoxybenzaldehyde** is studied in order to obtain the crystal structure of the compound using experimental methods X-ray, infrared, Raman ray and UV rays and using **DFT** method theoretical method using **GAUSSIAN03** program, function **B3YLP** and bases **cc-pvqz** and **sdd** for the same results and comparison of theoretical and experimental results , we conclude from this comparison that the use of functions in the **DFT** theory led to results close to empirical.

- This sample was studied for its uses in the field of medicine and pharmacology.

*الكلمات المفتاحية:

-العربية:

الأشعة السينية -الأشعة تحت الحمراء -الأشعة فوق البنفسجية -أشعة رامان -نظرية الكثافة الوظيفية.

-الإنجليزية:

X ray –Infrared ray –Uv ray –Raman ray –Functional density thoery

-المراجع:

- *1-مذكرة تخرج ماستر من طرف الطالبة قلاعي إيمان تحضير وتوصيف أغشية أكسيد الزنك الرقيقة النقية والمطعمة بالحديد بتقنية الرش النحالي الحراري وأغشية أكسيد الزنك النانوية بالطريقة الكيميائية
- *2-مذكرة تخرج ماستر من طرف الطالبة قلاعي إيمان تحضير وتوصيف أغشية أكسيد الزنك الرقيقة النقية والمطعمة بالحديد بتقنية الرش النحالي الحراري وأغشية أكسيد الزنك النانوية بالطريقة الكيميائية.
- *3-مذكرة تخرج ماستر من طرف الطالبة قلاعي إيمان تحضير وتوصيف أغشية أكسيد الزنك الرقيقة النقية والمطعمة بالحديد بتقنية الرش النحالي الحراري وأغشية أكسيد الزنك النانوية بالطريقة الكيميائية.
- *4-مذكرة تخرج ماستر من طرف الطالبتان سماحي فايزة، شيحاني مريم دراسة اهتزاز وتركيب الجزيء $2.4.5\text{Trimethoxybenzaldehyde}$ باستعمال أشعة ارمان والأشعة تحت الحمراء وانعارج الأشعة السينية DRX ومقارنتها مع النتائج النظرية DFT
- *5-مذكرة إثارة مركب cc14 بواسطة الليزر وتحليل الاطياف رامان الناتجة باستخدام برنامج peakfit
- *6- مذكرة إثارة مركب cc14 بواسطة الليزر وتحليل الاطياف رامان الناتجة باستخدام برنامج peakfit
- *7- مذكرة إثارة مركب cc14 بواسطة الليزر وتحليل الاطياف رامان الناتجة باستخدام برنامج peakfit
- *8- مذكرة إثارة مركب cc14 بواسطة الليزر وتحليل الاطياف رامان الناتجة باستخدام برنامج peakfit
- *9-الأشعة السينية وتطبيقاتها من تأليف د.محمود نصر الدين.
- *10- مذكرة بوراس شهرزاد
- *11- الإنتاج والخصائص الأشعة السينية pdf.
- *12- مذكرة بوراس شهرزاد
- *13- مذكرة لزهري بن عمر
- *14- مذكرة لزهري بن عمر

15* الأشعة السينية الإنتاج والخصائص.pdf

16* الأشعة السينية الإنتاج والخصائص.pdf

17* أطروحة نيل شهادة الدكتوراه من طرف الطالبة رنا حنا نصور دراسة آلية تأثير الأشعة فوق البنفسجية في عملية التركيب الضوئي عند جنسي الأوغلينا *Euglena* والكالميدوموناس *Chlamydomonas*

18* أطروحة نيل شهادة الدكتوراه من طرف الطالبة رنا حنا نصور دراسة آلية تأثير الأشعة فوق البنفسجية في عملية التركيب الضوئي عند جنسي الأوغلينا *Euglena* والكالميدوموناس *Chlamydomonas*

19* مذكرة تخرج ماستر أكاديمي من طرف الطالبة زينات حليلة دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية لمركب ذو أهمية في البصريات غير الخطية

20* مذكرة تخرج ماستر أكاديمي من طرف الطالبة زينات حليلة دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية لمركب ذو أهمية في البصريات غير الخطية

21* مذكرة تخرج ماستر أكاديمي من طرف الطالبة زينات حليلة دراسة الخصائص البنيوية والإلكترونية لمركب ذو أهمية في البصريات غير الخطية

22* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

23* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

29* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

30* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

31* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

32* HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques

***HAZEM BOURAOUI, Conformation moléculaire, structure -33*
cristalline, Spectroscopie, des produits polycycliques benzéniques***