

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

جامعة قاصدي مرباح ورقلة

كلية الرياضيات وعلوم المادة

قسم الفيزياء



مذكرة ماستر أكاديمي

مجال: علوم المادة

فرع : الفيزياء

تخصص: فيزياء إشعاعية

بعنوان:

دراسة dimethosuybenzaldehyde - 3.5 بواسطة الأشعة
السينية والأشعة تحت الحمراء ورامان.

من إعداد الطالبة :مهيري هبة الله

اللجنة المناقشة :

الاسم و اللقب	الرتبة	الجامعة	الصفة
بن طويلة عمر	MCA	جامعة قاصدي مرباح - ورقلة	رئيسا
بوراي حازم	MCA	جامعة قاصدي مرباح - ورقلة	مشرفا و مقررا
محجوبي برزخ جعفر	MAA	جامعة قاصدي مرباح - ورقلة	مناقشا

السنة الجامعية 2023/2022

شكر و عرفان

صلى الله على سيدنا وحبينا محمد وعلى آله وأصحابه وأتباعه وسلم تسليما كثيرا.
نشكر الله تعالى أن من على ومنحني القوة ويسر لي طريق النجاح
ووفقتي طيلة مشواري الدراسي، فالحمد لله على نعمه.
اتوجه بالشكر الي الوالدين الكريمين الذين شجعوني على الاستمرار في طلب العلم
ونيل العلى
كما أتقدم بجزيل بالشكر الجزيل والتقدير الكبير للأستاذ: بوراوي حازم
على قبوله طلب الإشراف على هذه الرسالة بصدر رحب
والذي لم يبخل علي بنصائحه القيمة وتوجيهاته السديدة.
كما يشرفني أن أتقدم بجزيل الشكر والعرفان إلى جميع الأساتذة الذين درسوني
وكانوا مصدر
دعم وعطاء لي طيلة السنوات الماضية واطم بالذكر أعضاء لجنة المناقشة
التي ستخصص من وقتها لدراسة هذا البحث وقبول مناقشته،
فجزأهم الله وسدد خطاهم وبارك الله في عملهم.

الإهداء

إهداء

أهدي هذا العمل إلى:

إلى القطعة التي سقطت سهوا من الجنة إلى ضياء قلبي الي التي
قدمت وأعطت وربت وسهرت إلى النور الذي يضيء عمتي
"أمي ثم أمي ثم أمي".

إلى الجسر الذي اتكأ عليه الي السند الذي لا أميل في وجوده "أبي الغالي".
إلى سندي "زوجي" ووالديه الكريمين وعائلته.
إلى صديقتي الداعمة والمشجعة "منال".

إلى اخواتي المؤنسات الغاليات "فايزة" و"يسام" كن الدعم الكبير لي وتقاسمن معي عبء الحياة.
إلى أخوتي الضلوع المتينة لي "سليم" و"ميلود" و"هشام".

إلى أستاذي الكريم "بوراوي حازم" الذي كان المرشد لي ومنبع العطاء.
وإلى كل من كان له الفضل ولو بالقليل في هذا الانجاز البسيط.

الفهرس:

5.....	الفهرس:
7.....	قائمة الأشكال:
1.....	مقدمة عامة
2.....	الفصل الأول.....
2.....	مفاهيم عامة حول الأشعة الكهرومغناطيسية والأشعة تحت الحمراء -رامان وانعراج الأشعة السينية(DRX) ونظرية الكثافة الوظيفية (DFT)
3.....	مقدمة:
3.....	1-I مفهوم الكهرومغناطيسية:
3.....	2-I الطيف الكهرومغناطيسي
4.....	الشكل(1-1): الطيف الكهرومغناطيسي
4.....	3-I المطيافية:
4.....	ما هو طول الموجة وذبذبتها:
5.....	أنواع الإشعاعات.....
5.....	3-I 1- مطيافية الأشعة تحت الحمراء Infrared Spectroscopy:
6.....	امتصاص الأشعة تحت الحمراء:
7.....	2- 3-I مطيافية رامان:
8.....	4-I طيف الاهتزاز:
8.....	أنواع الحركات الاهتزازية الجزيئية:
9.....	✓تمدد وانكماش اهتزازي بسيط أو معزول isolated stretching: هذا التمدد يشمل تمدد رابطة واحدة فقط.....
11.....	5-I انعراج الأشعة السينية DRX:
11.....	1- 5-I تعريف الأشعة السينية:
12.....	3- 5-I مفهوم الانعراج:
12.....	4- 5-I المستويات الشبكية:
13.....	n: يمثل عدد صحيح لرتبة الانعكاس.....
14.....	6-I نظرية الكثافة الوظيفية DFT:
15.....	الفصل الثاني.....
16.....	مقدمة.....
16.....	1-II الدراسة التجريبية والنظرية.....
16.....	الدراسة التجريبية:
16.....	الدراسة النظرية:

17	2-II - وصف ومناقشة التركيب البلوري لـ 3,5-dimethoxybenzaldehyde بواسطة حيود الأشعة السينية DFT وDRX
24	3-II - مناقشة النتائج:
24	الخاتمة
25	الفصل الثالث
25	دراسة مطيافية لـ 3,5-dimethoxybenzaldehyde
26	مقدمة
26	1-III المبحث الأول: الدراسة النظرية لـ 3,5-dimethoxybenzaldehyde
26	2-III المبحث الثاني: طيف الأشعة تحت الحمراء ورامان وطرق الاهتزاز محسوبة من DFT لـ 3,5-dimethoxybenzaldehyde
31	3-III المبحث الثالث: مناقشة النتائج:
32	4-dimethoxybenzaldehyde المبحث الرابع: الحركات الاهتزازية لـ III
35	خاتمة
36	الخلاصة العامة
37	الملخص:
38	قائمة المراجع:

قائمة الأشكال:

- الشكل (1-I): الطيف الكهرومغناطيسي..... 4
- الشكل (2-I): امتصاص الأشعة تحت الحمراء..... 6
- الشكل (3-I): الجهاز المستعمل في مطياف رامان بجامعة قسنطينة (1 constantine)..... 8
- الشكل (4-I): التمدد والانكماش المزدوج المتماثل وغير المتماثل..... 9
- الشكل (5-I): الاهتزاز..... 10
- الشكل (6-I): حركة المقص..... 10
- الشكل (7-I): التآرجح..... 10
- الشكل (8-I): التآرجح..... 11
- الشكل (9.I) رسم تخطيطي يوضح المستويات الشبكية..... 12
- الشكل (10.I): شكل توضيحي يمثل طريقة استنتاج قانون براغ [15]..... 13
- الشكل (11.I): شكل يوضح العلاقة بين اتجاه البلورة والمسافات الشبكية المحسوبة. [17]..... 14
- الشكل (1-II): التشكل الجزيئي (DRX)..... 17
- الشكل (2-II): التشكل الجزيئي (DFT)..... 17
- الشكل (1-III): طيف الأشعة رامان النظري..... 27
- الشكل (2-III): طيف الأشعة تحت الحمراء النظري..... 27
- الشكل (3-III): طيف الأشعة رامان التجريبي..... 28
- الشكل (4-III): طيف الأشعة تحت الحمراء التجريبي..... 28

قائمة الجداول

- الجدول (1-II): نقوم بحساب أطول الروابط بطريقة من DFT ومقارنتها مع النتائج التجريبية18
- الجدول (2-II): سنقوم بحساب الزوايا الروابط بطريقة DFT دالة (B3LYP) و مقارنتها مع النتائج التجريبية19
- الجدول (3-II): سنقوم بحساب أطوال الروابط بطريقة DFT بمقارنتها مع النتائج التجريبية21
- الجدول (4-II): سنقوم بحساب زوايا الروابط بطريقة DFT (MPW3-91) و مقارنتها مع النتائج التجريبية DRX22
- الجدول (1-III): مقارنة بين الترددات المحسوبة بين DFT و النتائج التجريبية المشاهدة في طيف رامان و طيف الأشعة تحت الحمراء ل dimethoxybenzaldehyd-3.528

مقدمة عامة

يعتبر علم الفيزياء من أقدم التخصصات الأكاديمية فقد بدأت بالبروز منذ العصور الوسطى، وتميزت كعلم حديث في القرن السابع. عشر وتهتم بدقة القياس وابتكار طرق جديدة له فهذا هو أساس التوصل إلى التفسير السليم للظواهر الطبيعية ولقد تجسدت اغلب التطورات التي أحدثتها بشكل علمي في عدة قطاعات من التقنية والطب والكيمياء والهندسة والأحياء وغيرها. وقد أدى التقدم في فهم الكهرومغناطيسي إلى انتشار الواسع في استخدام التطبيقات الديناميكية. الحرارية إلى التطور المذهل في ميكانيك الكم.

الفيزياء الجزيئية هي علم تجريبي ونظري ، يهتم بدراسة الخواص الفيزيائية للجزيئات والروابط الكيميائية التي تربط بين الذرات المختلفة مكونة الجزيئات ، وبالتالي يشكل هذا العلم فرعا أساسيا في فهم ساس الكيمياء ودراسة المطيافيات أطيف الأشعة تحت الحمراء وأطيف رامان والرنين المغناطيسي ويعتبر هذا العلم وثيق الصلة بالفيزياء الذرية ويتقاطع بشكل كبير مع الكيمياء النظرية والكيمياء والفيزيائية في عملنا وبحثنا هذا سنقوم بتقديم دراسة مقارنة للهندسة الجزيئية لـ dimethoxybenzaldehyde بواسطة DFT باستخدام برنامج GAUSSIAN03 لجزيء معزول مع تلك التي أنشأتها التجربة من حيود الأشعة السينية. DRX كما سيتم تقديم دراسة عن الأوضاع الداخلية dimethoxybenzaldehyde من خلال مقارنة النتائج التجريبية الطيفية للأشعة تحت الحمراء ورامان مع حسابات DFT مع جزيء معزول. وبغية تحقيق هدف الدراسة سيتم عرض هذا العمل في ثلاثة فصول:

- الفصل الأول: يتضمن عرض المفاهيم الأساسية بشأن مختلف عمليات التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء رامان، وحيود الأشعة السينية DRX، التي تم استخدامها في الدراسة وحتى الأساليب الحديثة من ميكانيك الكم مثل: نظرية الكثافة الوظيفية. DFT

- في الفصل الثاني: نقدم دراسة مقارنة بين النتائج النظرية المحسوبة بواسطة DFT

والنتائج التجريبية DRX.

- الفصل الثالث: نقدم دراسة مقارنة بين النتائج التجريبية الأشعة تحت الحمراء وحساب الترددات ب DFT
- وفي الأخير نختم بإعطاء خلاصة عامة حول هذا الموضوع.

الفصل الأول

مفاهيم عامة حول الأشعة الكهرومغناطيسية والأشعة تحت الحمراء -
رامان وانعراج الأشعة السينية (DRX) ونظرية الكثافة الوظيفية (DFT)

مقدمة:

نقدم في هذا الفصل المفاهيم الأساسية المتعلقة بالتحليل الطيفي باستخدام الأشعة تحت الحمراء و رامان ، و حيود الأشعة السينية DRX. ونعرف أسلوب آخر من أساليب ميكانيكا الكم الحديثة مثل: نظرية الكثافة الوظيفية DFT.

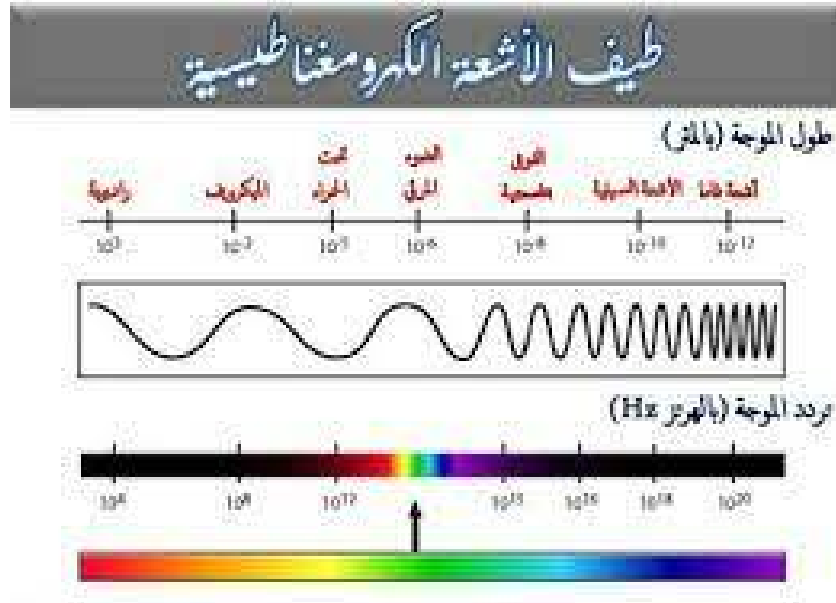
1-I مفهوم الكهرومغناطيسية:

تعرف الكهرومغناطيسية (بالإنجليزية: Electromagnetism) بأنها فرع من فروع الفيزياء، وهي فيزياء المجال المغناطيسي التي تتعامل مع القوة الكهرومغناطيسية التي تحدث بين الجسيمات المشحونة كهربائياً، والتي تؤثر بدورها على وجود تلك الجسيمات وحركتها، وتشير القوة الكهرومغناطيسية إلى أحد أنواع التفاعل الفيزيائي والذي يحدث بين الجسيمات المشحونة كهربائياً وهي عبارة عن اندماج جميع القوى المغناطيسية والكهربائية.

ولتوضيح مفهوم الكهرومغناطيسية يمكن ربطها بتوضيح مبدأ عمل مكبر الصوت، والذي تم تصميمه لتحويل الموجات الكهربائية إلى صوت مسموع، حيث يتم توصيل ملف معدني بمغناطيس ثابت، وعند مرور التيار عبر الملف فإنه يولد مجالاً مغناطيسياً، ويتم صد المجال المغناطيسي المتشكل من مرور التيار الكهربائي بواسطة المجال المغناطيسي المؤثر على الملف مما يؤدي إلى تكون الاهتزازات، ومن ثم يتم تضخيم هذه الاهتزازات بواسطة البنية المخروطية للمكبر والتي تُنتج الصوت المكبر. [01]

2-I الطيف الكهرومغناطيسي.

يُمثل الطيف الكهرومغناطيسي توزيع الطاقة الكهرومغناطيسية عند الأطوال الموجية المختلفة، ويمتد انطلاقاً من الأطوال الموجية الراديوية الطويلة جداً وصولاً إلى أشعة غاما القصيرة جداً. تستطيع العين البشرية كشف قسم صغير من هذا الطيف، وهو القسم المعروف بالضوء المرئي. باختصار إنه المجال الكامل للترددات انطلاقاً من الأمواج الراديوية وصولاً إلى الأشعة غاما [02]



الشكل (1-1): الطيف الكهرومغناطيسي

I-3 المطيافية:

هي مجال لدراسة التأثير المتبادل بين الإشعاع الكهرومغناطيسي أو إشعاع جسيمات (حزم إلكترونية، نيوترونية أو أيونية) مع مادة المدروسة والتي تشمل الذرات والجزيئات. تعتبر طرق التحليل الطيفي من أهم وأشمل طرق التحليل الآلي نظرا لسهولة ودقتها وحساسيتها العالية وتطبيقاتها المتعددة، تعتمد هذه الطرق على امتصاص وانبعثات الطاقة الإشعاعية. إذ بتفسير هذه المعلومات يمكن الحصول على معلومات كمية ونوعية.

فمن الناحية النوعية تستخدم مواقع الخطوط أو الحزم الامتصاصية و الانبعاثية التي تحدد في الطيف الكهرومغناطيسي دليلا على وجود عناصر خاصة، أما من الناحية الكمية فيمكن تقدير تركيز المكونات من قياس شدة الامتصاص والانبعثات. حيث تعطى المعلومات التي نحصل عليها من القياسات الطيفية على شكل رسم بياني بين الطاقة الممتصة أو المنبعثة بدلالة المواقع على الطيف الكهرومغناطيسي، ويدعى بالطيف ويقاس موقع الامتصاص أو الانبعثات بوحدات الطاقة أو وحدات طول الموجة. [03]

ما هو طول الموجة وذبذبتها:

الأمواج الكهرومغناطيسية قد تظهر أنها مختلفة إلا أن جميعها لها نفس النوع من الاهتزازات ولكن تختلف هذه الاهتزازات عن بعضها البعض من حيث:

- طول الموجة
- التردد

أنواع الإشعاعات

إن أنواع الإشعاع الكهرومغناطيسي مصنفة بشكل عام إلى:

- أمواج الراديو
- الموجات الدقيقة (الصغرية)
- الأشعة تحت الحمراء
- أشعة الضوء المرئي
- الأشعة فوق البنفسجية
- الأشعة السينية (X-Ray)
- أشعة قاما [04]

I-3-1 مطيافية الأشعة تحت الحمراء Infrared Spectroscopy:

الأشعة تحت الحمراء هي المنطقة التي تقع بين الأشعة الحمراء في الأشعة المرئية والموجات القصيرة (المايكروويف) في الطيف الكهرومغناطيسي وبذلك تكون 0 طاقة وتردد الأشعة تحت الحمراء أقل من طاقة وتردد الأشعة الحمراء وأعلى من أشعة المايكروويف، تساعد الأشعة تحت الحمراء على التعرف على المجاميع الوظيفية وكذلك على التركيب البنائي، فعند امتصاصها من طرف الجزيئات تؤثر على اهتزازا لرابطة من خلال تغير طول الرابطة أو الزاوية بين الروابط.

ينقسم نطاق الأشعة تحت الحمراء إلى ثلاثة مناطق:

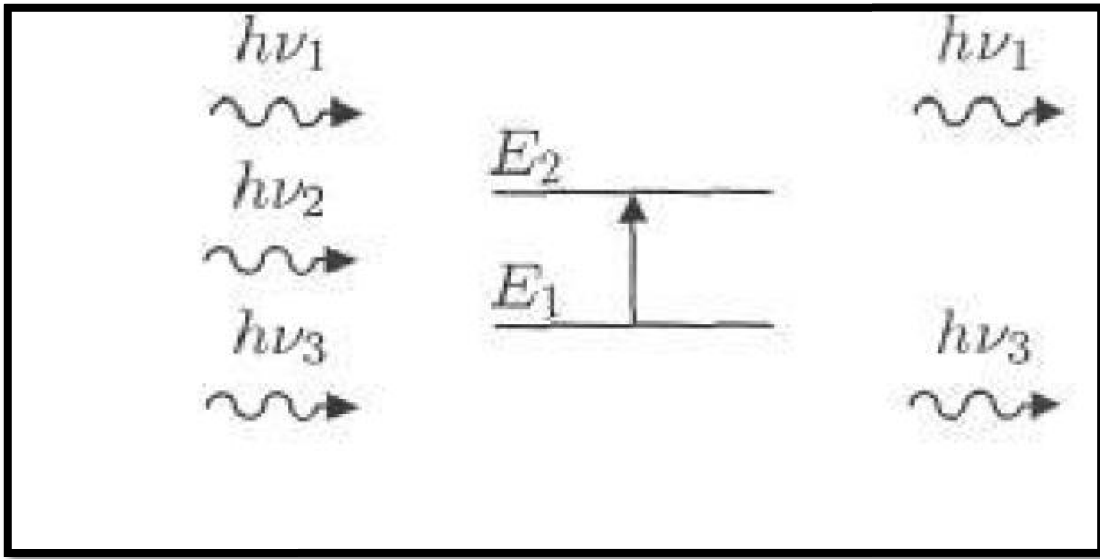
الأشعة تحت الحمراء القريبة: وهي الأقرب إلى الأشعة المرئية وبالتحديد الطيف الأحمر وتتميز بامتصاص منخفض وتعمل في المدى التالي 14000-4000

الأشعة تحت الحمراء البعيدة: وهي الأبعد عن الأشعة المرئية ولكنها الأقرب إلى أشعة المايكروويف تعمل في المدى التالي: 400-20

الأشعة تحت الحمراء الوسطى: تقع بين الأشعة تحت الحمراء القريبة والأشعة تحت الحمراء البعيدة وتعمل في المدى التالي: 4000-400 وتعتبر أكثر المناطق استخداما في أجهزة التحليل الطيفي للأشعة

تحت الحمراء كما تعرف بمنطقة البصمة. لأنها تحتوي على أغلب الاهتزازات الجزيئية في السوائل والغازات [5].

مبدأ مطيافية الأشعة تحت الحمراء تهتز الجزيئات تبعا لجميع أنماط اهتزازها، ولكن بسعات ضعيفة جدا وبما أن الفوتون يمل كمرحلة كهربائية جيبية، فإذا كان تواتر الفوتون يوافق تواتر اهتزاز الأنماط العادية للجزيء فسوف يدخل عندئذ في حالة رنين بسعات كبيرة. بعبارة أخرى الفوتون الذي تكون طاقته مساوية للطاقة الضرورية للجزيء حتى يمر من حالة طاقة منخفضة إلى حالة مثارة يمتص وتحول طاقته إلى طاقة اهتزاز حيث يمثل الشكل التالي مخطط لهذه الظاهرة:



الشكل (2-1): امتصاص الأشعة تحت الحمراء.

قيمة التردد في طيف الأشعة تحت الحمراء: تعتمد قيمة تردد الاهتزاز على عاملين

1- نوع الرابطة بين الذرات.

2- كتلة الذرات المرتبطة (فالذرة الأخف تهتز بترددات أعلى من الذرة الأثقل)

امتصاص الأشعة تحت الحمراء:

عندما تمتص جزيئات المادة الأشعة تحت الحمراء، فيحدث إثارة لذرات المادة نتيجة لهذه الطاقة الممتصة وهذه الإثارة تكون في صورة اهتزاز لذرات هذه المادة أي يحدث انتقال اهتزازي للذرات بالنسبة لبعضها البعض في الجزيء، مما يؤدي إلى تغير دوري في طول الروابط الكيميائية، أو تغير في

الزوايا بين الروابط الكيميائية في الجزيء، وقد تنتج كل حركة اهتزازية من حركة ذرتين أو قد تشمل مجموعة من الذرات. [06]

I-3-2 مطيافية رامان:

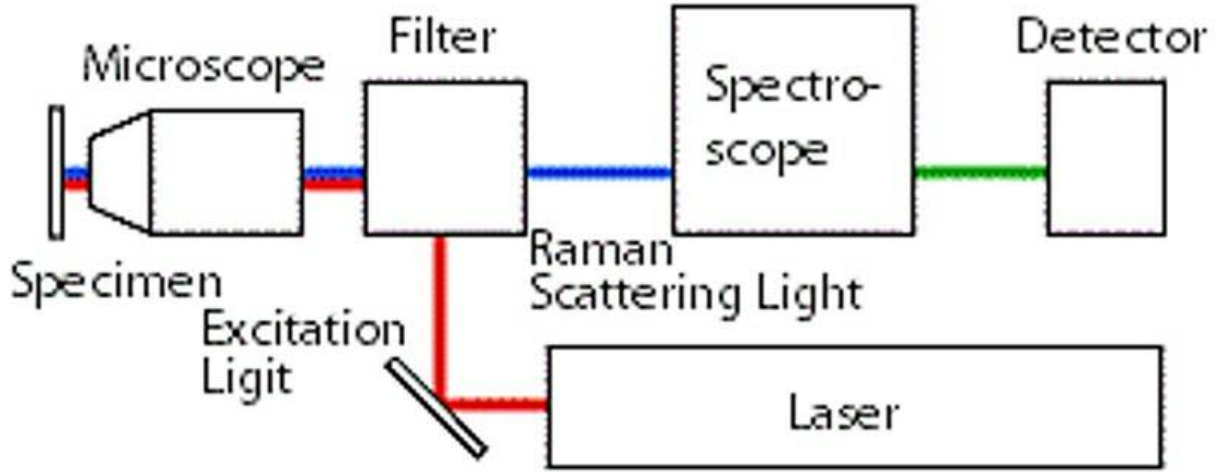
سميت هذه التقنية على شرف العالم تشاندراسيخار ارامان ، والذي اكتشف أحد ظواهر تبعثر الضوء. تستخدم هذه التقنية فيعلم دراسة خصائص المواد. وهي أحد أنواع المطيافيات التي تختص ب دراسة أنماط اهتزاز جزيئي. وتعتمد في ذلك على ظاهرة تبعثر) تصادم غير المرن (للضوء على الجزيئات والتي تعرف باسم تبعثر رامان. [7]. [8]

I-3-2-1 مبدأ عمل مطيافية رامان

تعتبر مطيافية رامان تقنية تحليلية تستخدم على نطاق واسع لدراسة أنماط اهتزاز الشبكة البلورية وهي تقنية غير مدمرة، تقوم على ظاهرة الانتشار غير المرن للفوتونات بعد تفاعل العينة مشعشعا عضوي (أحادي اللون) الليزر [9] (يعطي الفرق في التردد بين الفوتون المثار والفوتون المتشتت معلومات عن الطبيعة الكيميائية للمادة يصعب الحصول على هذا الطيف ذي الكثافة المنخفضة جدا مقارنة بالضوء المبعثر دون تغيير التردد) انتشار رايلي (يرتبط هذا التغير في التردد باهتزازات الهياكل الذرية لهذا السبب يسمحننا مطياف رامان بوصف عيناتنا ومن ثم إجراء تحليلات نوعية كمية. [10]

I-3-2-2 مخطط مطياف رامان:

مبدأ عمل هذه المطيافية هو تركيز حزمة من الضوء عبر عدسة (أحادي اللون) حزمة ليزر (على العينة لدراسة و تحليل الضوء المنتشر، هذا الضوء يتم جمعه باستخدام عدسة مختلفة و إرسالها من خلال . monochromator



▲ Components of Raman Microscope

الشكل (3-1): مخطط مطياف رامان

4-I طيف الاهتزاز:

تنشأ الحركة الاهتزازية لجملة فيزيائية نتيجة للإنزياحات الصغيرة عن أوضاع توازنها المستقرة مثل حركة النواس، وأبسط شكل للاهتزازات الدورية هو ما يسمى بالحركة الاهتزازية التوافقية وهي عبارة عن عملية دورية تتم فيها تغيرات مقدار فيزيائي. [6]

أنواع الحركات الاهتزازية الجزيئية:

يمكن تقسيم الاهتزازات إلى نوعين:

(1) الاهتزاز بالتمدد والانكماش Stretching vibration: ينشأ الاهتزاز بالتمدد والانكماش بين ذرتين مرتبطتين معاً، 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:

✓ تمدد وانكماش اهتزازي بسيط أو معزول isolated stretching: هذا التمدد يشمل تمدد رابطة واحدة فقط.

✓ تمدد وانكماش اهتزازي مزدوج coupledstretching: هذا النوع يشمل تمدد رابطتين أو أكثر في نفس الوقت.

وهنا يحدث نوعين من التمدد والانكماش الاهتزازي المزدوج:

- تمدد وانكماش مزدوج متماثل symmetrical stretching: وفيه يحدث تمدد أو انكماش للرابطين في نفس الوقت الشكل (3-1)
- تمدد وانكماش مزدوج غير متماثل asymmetrical stretching: وفيه تتمدد إحدى الروابط بينما تنكمش الأخرى في نفس اللحظة وبطريقة متزامنة

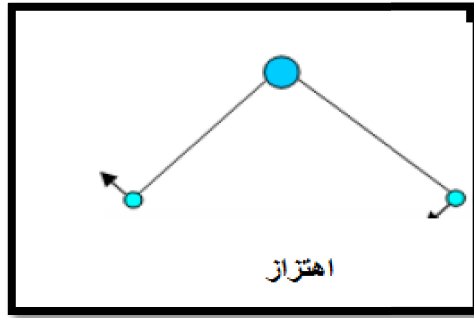


الشكل (4-1): التمدد والانكماش المزدوج المتماثل وغير المتماثل

(2) الاهتزاز بالانحناء Bendingvibration: هذه الترددات يتغير فيها زوايا الروابط (الزاوية بين الرابطتين).

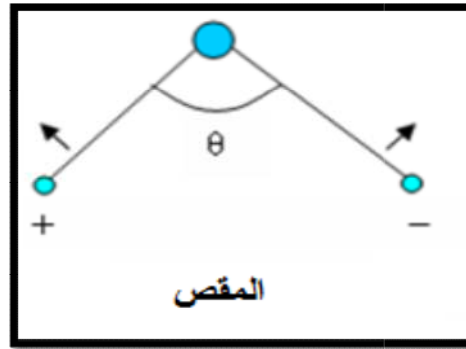
وينقسم الاهتزاز بالانحناء إلى أربعة أنواع:

✓ اهتزاز Rocking: حيث تتأرجح الوحدة التركيبية إلى الخلف وإلى الأمام في نفس مستوى الاتزان كما يتضح في شكل التالي.



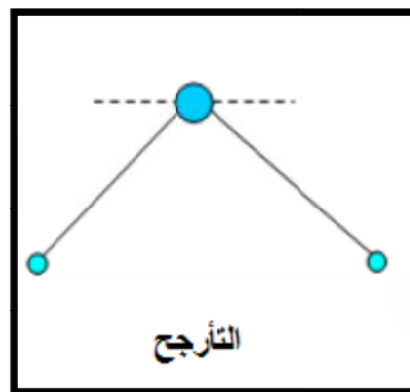
الشكل (5-I): الاهتزاز

✓ حركة المقص **Scissoring**: حيث تتقارب وتتباعد الذرتان الغير مرتبطين سوياً بالنسبة لبعضهما بحركة تشبه حركة المقص في نفس مستوى الاتزان كما في شكل التالي



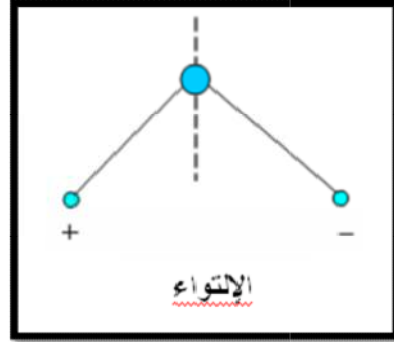
الشكل (6-I): حركة المقص

✓ تأرجح **Wagging**: حيث تتأرجح الوحدة التركيبية ثلاثية الذرة إلى الخلف وإلى الأمام خارج مستوى الاتزان المشكل من الذرة وروابطها كما في الشكل التالي



الشكل (7-I): التأرجح

✓ **التواء Twisting:** حيث تلف الذرات حول الرابطة بينها وبين باقي الجزيء خارج مستوى الاتزان كما في شكل التالي



الشكل (8-I): التآرجح

5-I انعراج الأشعة السينية DRX:

5-I-1 تعريف الأشعة السينية:

إن الأشعة هي عبارة عن موجات كهرومغناطيسية محصورة بين الأشعة غاما وفوق بنفسجية ترددها كبيرو طول موجتها صغير و يعبر عنه بالأنغشتروم في حدود 0.01 إلى 100 Å و تجدر الإشارة إلى أن كلما قيل حول ازدواجية الضوء (موجة - جسيم) تبقى صحيحة في الأشعة السينية .

[11]

5-I-2 انعراج الأشعة السينية:

من المعلوم أنه بإمكان أي شخص رؤية الأشياء عن طريق الضوء المرئي والعين المجردة، إذا ما دعت الحاجة إلى التعرف إلى كيفية ترتيب ذرات المادة، أو أيوناتها أو جزيئاتها في بلورتها، فذلك يحتاج إلى ضوء ذي طول موجي قصير جدا، عموما المادة البلورية عبارة عن جسم متعدد البلورات مكونة من عدد كبير من البلورات الأحادية، وهو عبارة عن تراص منتظم من الذرات، يمكن وصف هذا التراص بمجموعة من المستويات

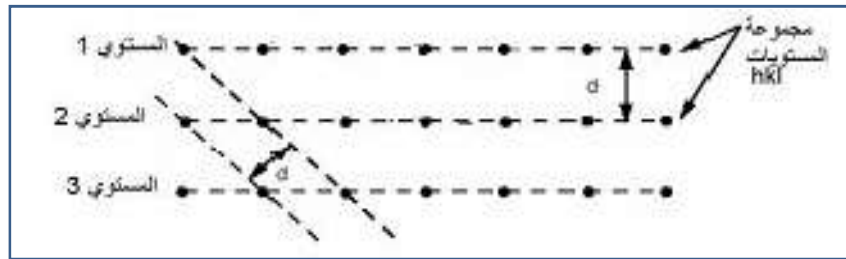
البلورية معرفة بمسافات شبكية dhkl، تقاس هذه المسافة عن طريق انعراج الأشعة السينية بواسطة قانون براغ. [12] [13]

3- 5-I مفهوم الانعراج:

الانعراج هو ظاهرة خاصة بتداخل الموجات حين تشتتها، أبسط طريقة للتداخل هي طريقة محززة الانعراج وهي عبارة عن زجاج أملس يضعون فيها خطوط من معدن النحاس حيث تنفذ منها الموجات الضوئية وتكون المسافات مقدارها d وهي عرض الفتحة التي ينفذ من خلالها الشعاع شرط أن يكون عرض الفتحة مساوي للطول الموجي، فإذا كانت الموجات المتداخلة منقطة في الطور أو كان الفرق في الطور يساوي مرة، مرتان ثلاث مرات من الطول الموجي فإن التداخل بناء ويعطي نقطة مضيئة، وإذا كان غير ذلك فالتداخل هدام ويعطي نقطة مظلمة. [14]

4- 5-I المستويات الشبكية:

إن الذرات تنظم في البلورة على ثلاث اتجاهات، يطلق على هذا التنظيم بالشبكة البلورية، يمكن وصف هذه الأخيرة على أنها التوزيع المنتظم للذرات أو الجزيئات أو الأيونات، وتتمثل على شكل مستويات متوازية ومتباعدة متساوية وتسمى بالمستويات الشكل (5-1) يوضح ذلك.



(الشكل 9.1) رسم تخطيطي يوضح المستويات الشبكية

5 - 5 - I قانون براغ:

تعتمد طريقة انعراج الأشعة السينية التي تسمح بتحديد بنية مادة ما و طرق تبلورها، على مبدأ أساسي يدعى قانون براغ ، الذي يمكن من خلاله تبيان موضع الحزم المنعرجة للأشعة السينية بواسطة البلورة بنموذج بسيط ، حيث يفترض أن الأشعة السينية تنعكس بانتظام من

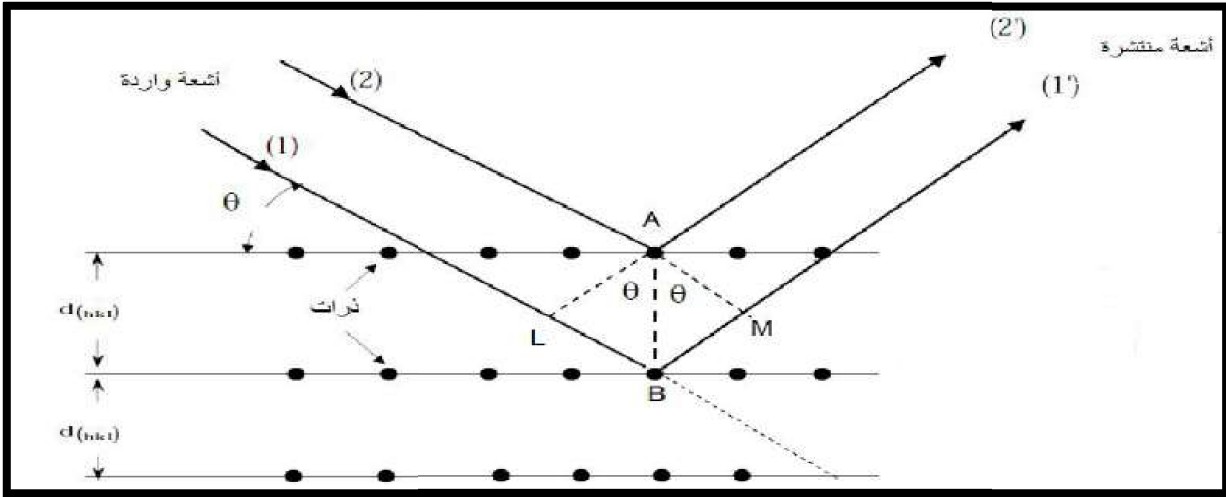
المستويات ووجد أن الأشعة السينية المنعرجة توجد فقط في مواضع تتداخل عندها الأشعة المنعكسة عند المستويات المتوازية تداخلا بناء و يعبر عنه بالعلاقة التالية

حيث:

n : يمثل عدد صحيح لرتبة الانعكاس.

λ : طول الموجة.

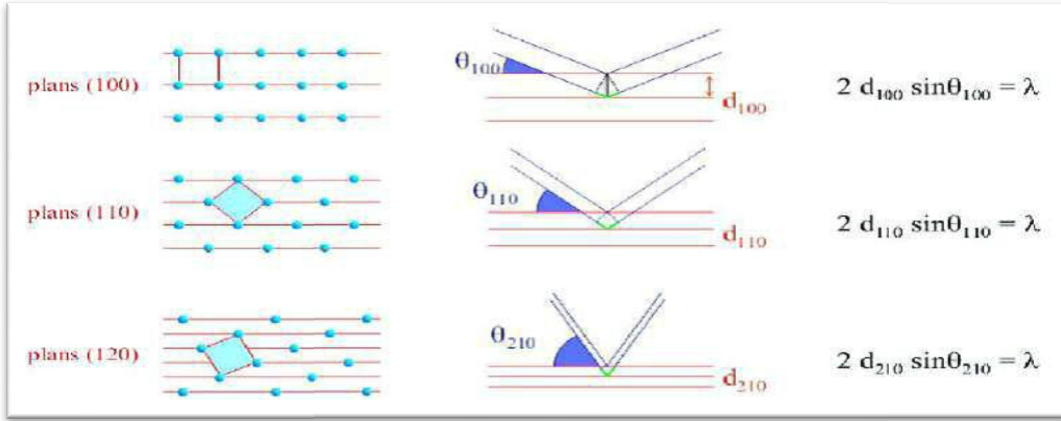
θ : زاوية سقوط الأشعة.



الشكل (10.1): شكل توضيحي يمثل طريقة استنتاج قانون براغ [15]

النتيجة المهمة لمعادلة براغ هي أن تكون المتباينة $d \leq 2\lambda$ شرطا أساسيا لحدوث انعكاسات براغ وهذا ما يوضح عدم ملائمة الضوء العادي لدراسة التركيب البلوري. [16]

من قانون براغ نستخرج المسافة الشبكية $d = \frac{a}{\sin(\theta)}$ لكل مستوي وبالتالي نحسب مختلف ثوابت الشبكة (a)، ومن ثم تحديد الزمر الفضائية. حيث أنه كلما قمنا بتغيير اتجاه البلورة بالنسبة لحزمة الأشعة السينية الساقطة (الواردة) كلما تمكنا من قياس المزيد من المسافات الشبكية $d = \frac{a}{\sin(\theta)}$ كما هو موضح في الشكل التالي



الشكل (11.1): شكل يوضح العلاقة بين اتجاه البلورة والمسافات الشبكية المحسوبة. [17]

6-I نظرية الكثافة الوظيفية DFT:

لغرض دراسة تركيبية وخصائص بعض المواد خاصة فيزيائيا (حسابيا) نستخدم مثلا معادلة شرود ينغر وحلولها لبعض ذرات أو الجزيئات المكونة لمادة معينة في حالة الأنظمة البسيطة. أما في حالة الأنظمة المعقدة نستخدم العديد التقريبات للحصول على أدق نتيجة ممكنة تتناسب مع العينة من بينها نستخدم نظرية الكثافة الوظيفية لغرض الحصول على الخصائص الفيزيائية والكيميائية للأنظمة من خلال معرفة البنية الإلكترونية لها.

نظرية **Density Functionel Theory (DFT)** هي التخلي عن استعمال الدوال الموجية واستبدالها بدالة الكثافة الإلكترونية التي يمكن قياسها معمليا والهدف من ذلك هو تقليل عدد المتغيرات التي تدخل في الحساب.

الفصل الثاني

دراسة التشكل الجزيئي للمركب- 3,5-dimethoxybenzaldehyde

ب DFT و مقارنتها مع DRX.

مقدمة

أثبتت التجارب العلمية المتعددة التي تمت في السنوات الأخيرة، أن الحسابات المعتمدة إلى نظرية الكثافة الوظيفية DFT تعطي نتائج جيدة لحالات الأنظمة المختلفة، وخاصة الأنظمة الجزيئية المعقدة الكبيرة في هذا الفصل سنقوم بتنفيذ سلسلة من العمليات الحسابية بطريقة DFT لتحديد التوافق الجزيئي للمركب-3.5 dimethoxybenzaldehyde باستخدام برنامج GAUSSIAN03 بطريقة DFT بالدوال B3LYP و MPW1PW91

ثم دراسة مقارنة للهندسة الجزيئية محسوبة بواسطة DFT مع تلك المحسوبة تجريبيا بواسطة حيود الأشعة السينية DRX.

1-II الدراسة التجريبية والنظرية

• الدراسة التجريبية:

في هذا الجانب من الدراسة سيتم قياس الهيكل التشكلي للمركب dimethoxybenzaldehyde باستعمال حيود الأشعة السينية لمعرفة أطوال وزوايا البنية الطيفية له في الحالة العادية $T=293K$ أين تكون حركة الجزيئي في ارتجاج حراري وكذلك تأثير الذرات على بعضها البعض مثل الروابط الهيدروجينية.

• الدراسة النظرية:

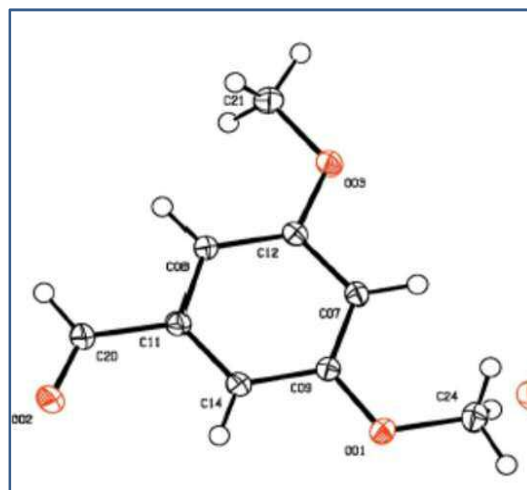
في هذا الجانب من الدراسة لدينا نظرية الكثافة الوظيفية التي تحسب الأطوال والزوايا للمركب في الحالة المثالية $T=0K$ والجزيء يكون معزولا باستخدام برنامج GAUSSIAN03 واختيار طريقة DFT من البرنامج.

2.II- وصف ومناقشة التركيب البلوري لـ 3,5-dimethoxybenzaldehyde

بواسطة حيود الأشعة السينية DRX وDFT

يتم تمثيل متوسط التشكل الجزيئي لـ dimethoxybenzaldehyde التي تم الحصول عليها من

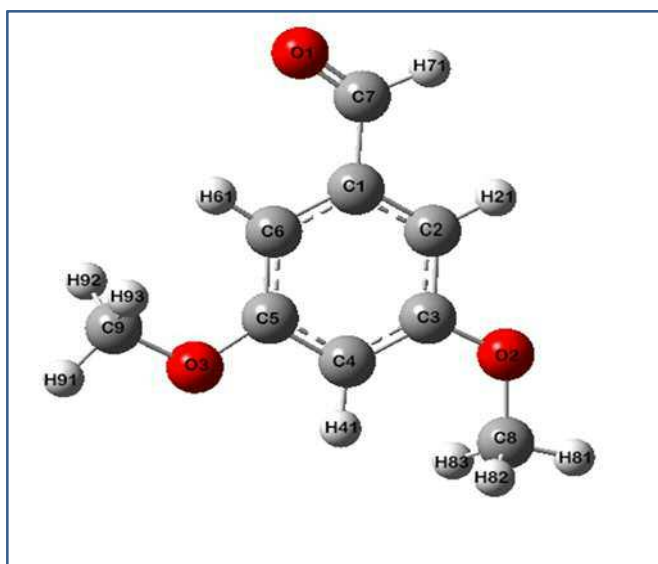
حيود الأشعة السينية DRX على الشكل (1)



الشكل (1-II): التشكل الجزيئي (DRX) [18]

وتم حساب التشكل الجزيئي لـ dimethoxybenzaldehyde ببرنامج GAUSSIAN03 ممثل

في الشكل (2)



الشكل (2-II): التشكل الجزيئي (DFT)

- سنقوم بحساب التوافق بين الطريقة التجريبية والطريقة النظرية من خلال العلاقة:

$$ACC = ((V_{exp} - v_{thé}) / v_{exp}) * 100$$

في الجدول (II-1): سنقوم بحساب أطوال الروابط بطريقة من DFT ومقارنتها مع النتائج التجريبية.

DISTANCE (Å)	experience (DRX)[18]	B3LYP	ACC %
C1-C2	1.396	1.391	0.35
C2-C3	1.385	1.404	0.56
C3-C4	1.381	1.393	0.86
C4-C5	1.402	1.409	0.49
C5-C6	1.363	1.391	2.01
C6-C1	1.403	1.406	0.21
C1-C7	1.451	1.481	2.02
C7-O1	1.216	1.216	0
C7-H71	0.97	1.11	12.61
O2-C8	1.426	1.419	0.49
C8-H81	0.95	1.091	12.92
C8-H82	0.98	1.097	10.66
C8-H83	0.98	1.097	10.66

C4-O3	1.351	1.421	0.62
C9-H91	0.97	1.097	13.09
C9-H92	0.96	1.097	14.27
C9-H93	0.96	1.082	14.27
C6-H61	0.96	1.11	12.70
moyen			6,2

نلاحظ توافق مقبول بين الDRX و DFT(B3LYP) بالنسبة لأطوال بتوافق يقدر بـ6.2%

في الجدول (2.11): سنقوم بحساب زوايا الروابط بطريقة DFTدالة(B3LYP) ومقارنتها مع النتائج التجريبية.

ANGLE(°)	Experience(DRX) [18]	B3LYP	ACC%
C1-C2-C3	120.32	119.40	0.76
C2-C3-C4	119.88	119.83	0.04
C3-C4-C5	120.64	120.08	0.46
C4-C5-C6	118.99	120.58	1.33
C5-C6-C1	121.59	118.57	2.48
C6-C1-C2	118.58	121.50	2.46
C6-C1-C7	119.7	119.46	0.20

C2-C1-C7	121.66	119.03	2.16
C1-C7-01	124.9	124.72	0.14
C1-C7-H71	116.7	114.56	1.83
O1-C7-H71	118.4	120.71	1.95
C3-C2-O2	123.00	115.71	5.9
O2-C8-H81	108.6	105.85	2.53
O2-C8-H82	109.1	111.50	2.19
O2-C8-H83	109.5	111.50	1.82
C5-C4-O3	115.49	114.62	0.75
C9-O3-H91	105.7	105.82	0.11
O3-C9-H92	109.2	111.42	2.03
O3-C9-H93	110.8	111.42	0.5
C5-C6-H61	120.8	123.09	189
C1-C6-H61	117.6	118.32	0.6
H81-C8-H82	110.0	109.34	0.6
H81-C8-H83	109.5	109.34	0.14
H83-C8-H82	110.3	109.20	0.99
H91-C9-H92	110.4	109.45	0.86
H91-C9-H93	111.0	109.45	1.39
H93-C9-H92	109.6	109.17	0.39
MOYEN			3.5

هنالك توافق كبير بين الDRX وDFT (B3LYP) بالنسبة لزوايا الروابط بتوافق يقدر 3.5%.

في الجدول (II-3): سنقوم بحساب اطوال الروابط بطريقة DFT بمقارنتها مع النتائج التجريبية.

DISTANCE (Å)	expérience (DRX)[18]	MPW1PW91	ACC %
C1-C2	1.396	1.395	2
C2-C3	1.385	1.394	0.72
C3-C4	1.381	1.395	0.94
C4-C5	1.402	1.395	0.49
C5-C6	1.363	1.395	3.1
C6-C1	1.403	1.394	0.49
C1-C7	1.451	1.540	6.1
C7-O1	1.216	1.258	3.4
C7-H71	0.97	1.07	10.30
C8-H81	0.95	1.07	12.63
C8-H82	0.98	1.07	9.18
C8-H83	0.98	1.07	9.18
C9-H91	0.97	1.07	10.30
C9-H92	0.96	1.07	11.34
C9-H93	0.96	1.07	13.54
moyen			6,2

هنالك توافق كبير بين DRX و DFT بالنسبة لأطوال الروابط بتوافق يقدر ب 6.2 %.

في الجدول (II-4): سنقوم بحساب زوايا الروابط بطريقة DFT(MPW3-91) ومقارنتها مع النتائج التجريبية DRX.

ANGLE(°)	Expérience(DRX) [18]	MPW1PW91	ACC%
C1-C2-C3	120.32	120.00	0.26
C2-C3-C4	119.88	119.99	0.09
C3-C4-C5	120.64	120.00	0.53
C4-C5-C6	118.99	119.99	0.84
C5-C6-C1	121.59	119.99	1.31
C6-C1-C2	118.58	120.00	1.19
C6-C1-C7	119.7	120.01	0.25
C2-C1-C7	121.66	119.98	1.38
C1-C7-O1	124.9	120.22	3.74
C1-C7-H71	116.7	119.88	2.65
O1-C7-H71	118.4	119.88	1.25
C1-C2-O2	116.68	145.64	24.82
C3-C2-O2	123.00	120.00	2.43
C2-O2-C8	101.8	145.65	23.43
O2-C8-H81	108.6	109.4	0.73
O2-C8-H82	109.1	109.4	0.27
O2-C8-H83	109.5	109.4	0.09

C3-C4-03	123.87	145.65	17.58
C5-C4-03	115.49	120.01	3.91
O3-C9-H91	105.7	109.47	3.56
O3-C9-H92	109.2	109.47	0.24
O3-C9-H93	110.8	109.47	1.20
C5-C6-H61	120.8	119.98	0.67
C1-C6-H61	117.6	120.02	2.05
H81-C8-H82	110.0	109.4	0.01
H81-C8-H83	109.5	109.4	0.09
H83-C8-H82	110.3	109.4	0.81
H91-C9-H92	110.4	109.4	0.90
H91-C9-H93	111.0	109.4	1.44
H93-C9-H92	109.6	109.4	0.18
MOYEN			3.5

- هنالك توافق كبير ال DRX و DFT (MPW3-91) بالنسبة زوايا الروابط بتوافق يقدر ب 3.5%.

3-II - مناقشة النتائج:

وقد قمنا بمقارنة النتائج النظرية DFT والنتائج التجريبية DRX ولاحظنا هناك اختلاف طفيف في النتائج ويعود ذلك إلى:

- -الدراسة التجريبية للجزيء تمت في درجة حرارة الغرفة وتحت ضغط معين، أما الطريقة النظرية المعتمدة في دراستنا فالجزيء يكون معزولاً.
- - كل مادة ذراتها تهتز في الحرارة وهذه الحركة تؤدي الى تغير طفيف في الأبعاد.
- - التفاعل بين الجزيئات (الروابط الهيدروجينية تسمى التفاعلات الضعيفة)

الخاتمة

أوصلت الحسابات في ميكانيك الكم التي أجرتها طريقة نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) بالدوال (B3LYP) و(MPW-91) ببرنامج GAUSSIAN03 إلى نتائج مماثلة في زوايا و أطوال روابط المركب بمقارنتها مع التجربة DRX.

الفصل الثالث

دراسة مطيافية لـ 3.5-dimethoxybenzaldehyde

مقدمة

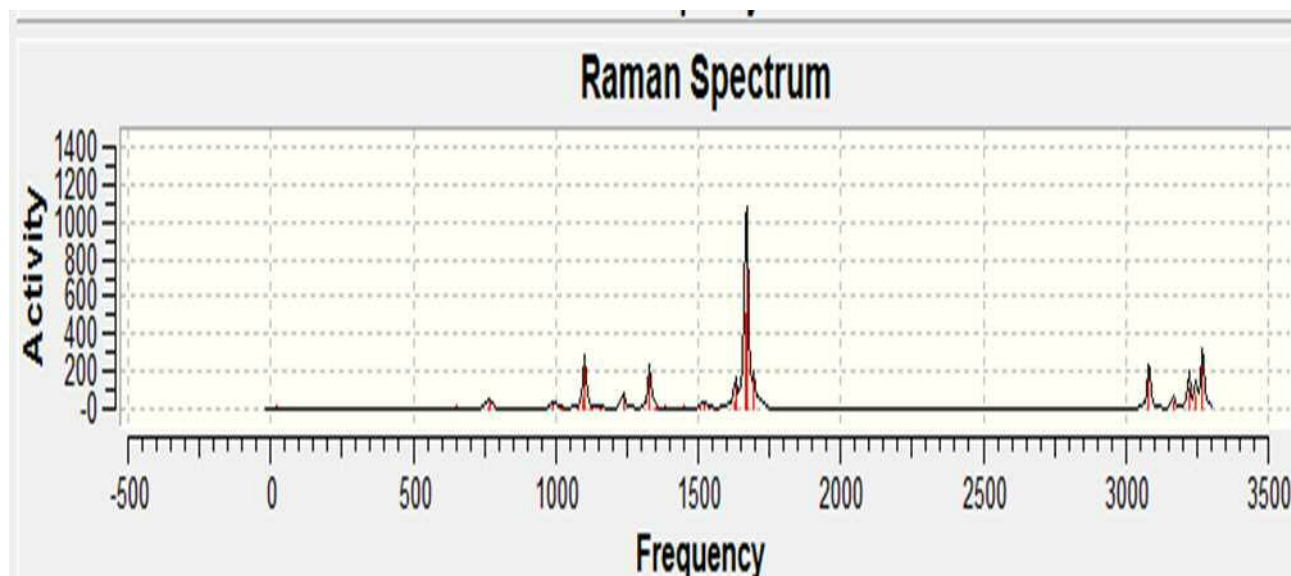
في هذا الفصل سنقوم بتقديم دراسة اهتزازية ل (3.5-dimethoxybenzaldehyde) حيث استعملنا خلال دراستنا التحليل الطيفي للأشعة تحت الحمراء ومطيافية رامان لغرض تحديد أنواع الاهتزازات لمختلف الأنماط من الاهتزاز ولقد تم إجراؤها بعد تحسين الجزيء من ميكانيك الكم بواسطة نظرية الكثافة الوظيفية DFT.

III-1 المبحث الأول: الدراسة النظرية ل 3.5-dimethoxybenzaldehyde

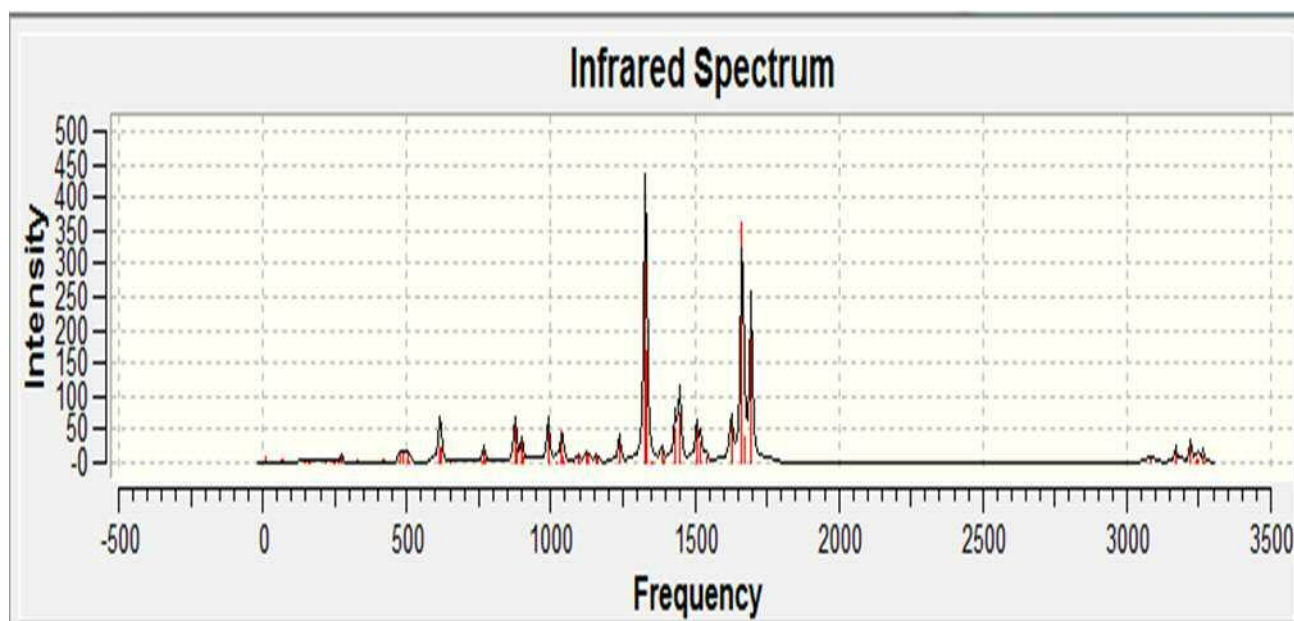
لقيام بجميع الحسابات النظرية للتشكل الجزيئي قمنا بالاستخدام سلسلة برامج Gaussian03 التي من خلالها ممكن الحصول على نتائج دقيقة. بعد ما حصلنا على رسم للجزيء بواسطة Gaussian03 [19] قمنا بالاختيار نظرية الدالة الوظيفية للكثافة DFT .

III-2 المبحث الثاني: طيف الأشعة تحت الحمراء ورامان وطرق الاهتزاز محسوبة من DFT ل 3.5-dimethoxybenzaldehyde

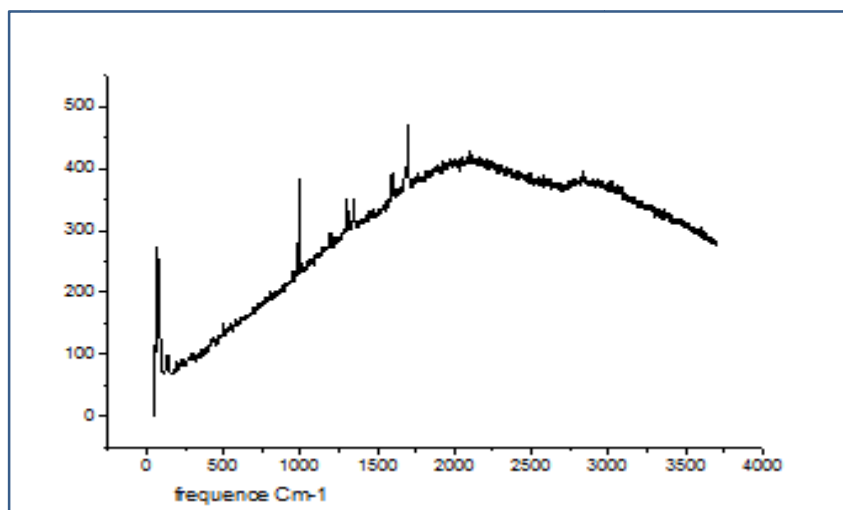
في دراسة اوضاع اهتزاز $C_9H_{10}O_3$ () يتم تقديم حسابات التردد مع سلسلة برنامج GAUSSIAN03 كما لاحظنا في الفصل السابق ومقارنتها مع النتائج التجريبية (طيف الأشعة تحت الحمراء ورامان).



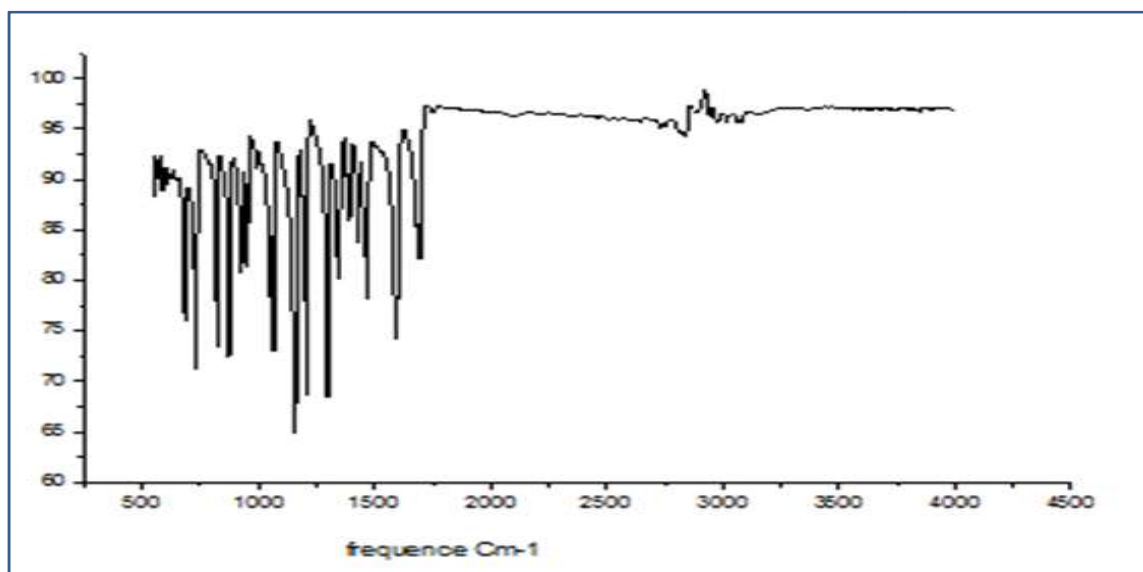
الشكل (III-1): طيف الأشعة رامان النظري



الشكل (III-2): طيف الأشعة تحت الحمراء النظري



الشكل (3-III): طيف الأشعة رامان التجريبي



الشكل (4-III): طيف الأشعة تحت الحمراء التجريبي

الجدول (1-III): مقارنة بين الترددات المحسوبة من DFT والنتائج التجريبية المشاهدة في طيف رامان وطيف الأشعة تحت الحمراء لـ dimethoxybenzaldehyd-3.5

الرقم	التردد	تحت الحمراء	رامان
01	71.6933		67
02	88.2529		
03	121.623		139
04	152.644		
05	184.939		
06	187.493		
07	203.317		
08	244.721		
09	268.448		
10	283.109		
11	301.681		
12	370.291		
13	447.889		
14	484.328		
15	540.572		500
16	545.818	558	
17	621.732	590	
18	631.528		
19	676.022	680	
20	719.279	730	
21	847.321	830	
22	855.989		
23	871.153	875	

24	938.138	930	
25	982.152		991
26	1002.98	995	
27	1021.83		
28	1076.87	1073	
29	1086.02		
30	1154.89		
31	1167.81	1163	
32	1169.12		
33	1178.13		1194
34	1208.51	1200	
35	1228.99		
36	1275.37	1295	1295
37	1324.27	1350	1353
38	1382.79	1385	
39	1410.71	1434	
40	1464.77		
41	1472.74		
42	1490.03		
43	1492.72		
44	1492.72		
45	1498.54		
46	1506.76		
47	1507.82		

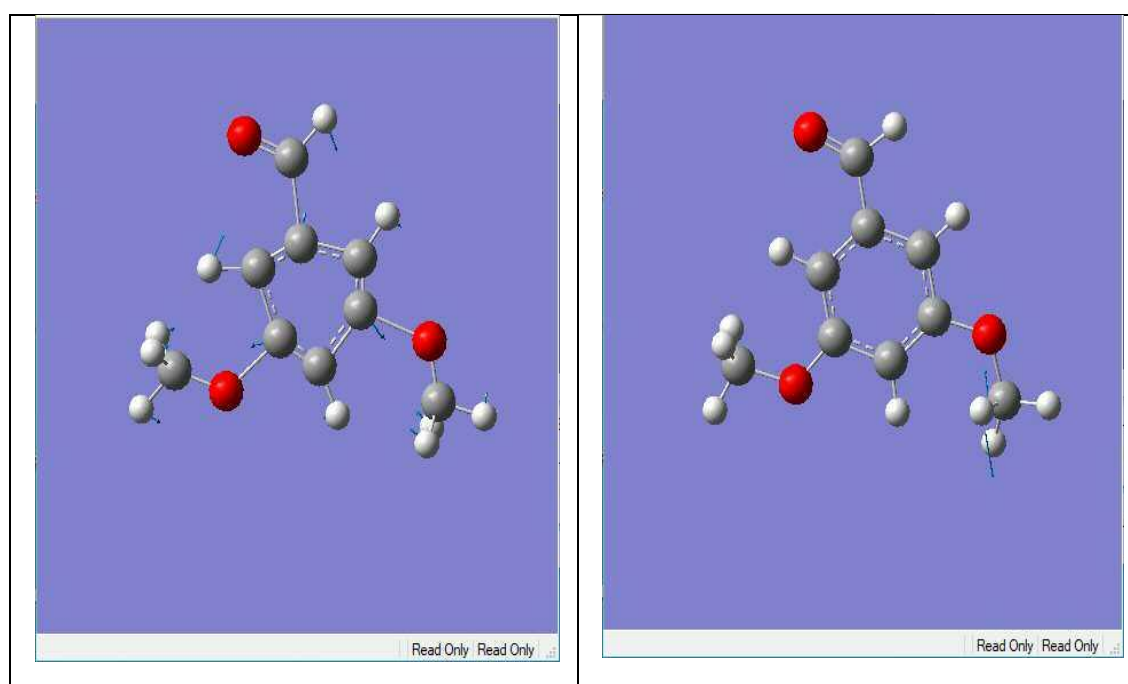
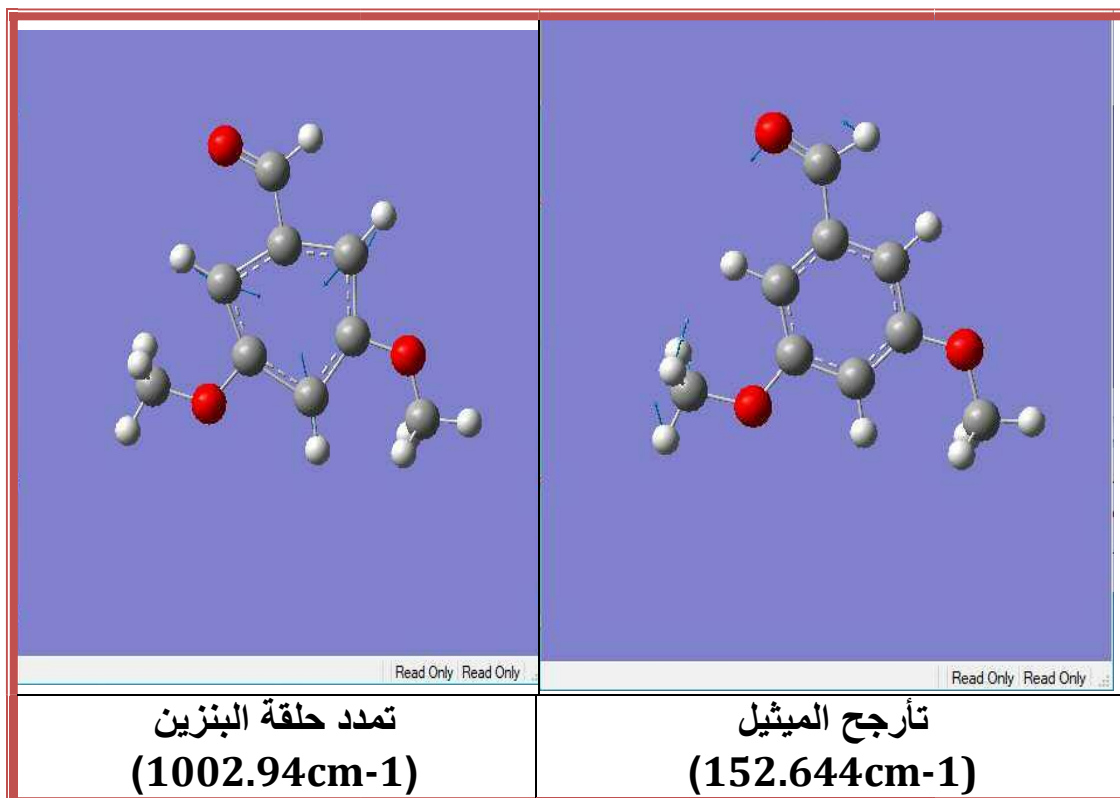
48	1626.75		
49	1640.39	1697	
50	1764.35		1700
51	2895.99	2850	2842
52	3008.43	2885	2842
53	3013.77	3018	
54	3068.87		
55	3075.57	2946	
56	3138.57	2981	
57	3138.71	3018	
58	3186.46		
59	32.15.75		
60	3321.45		

3-III المبحث الثالث: مناقشة النتائج:

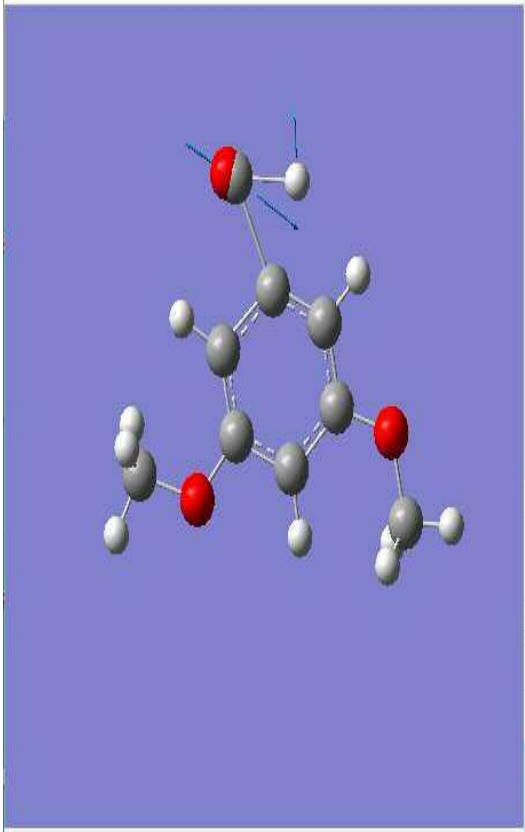
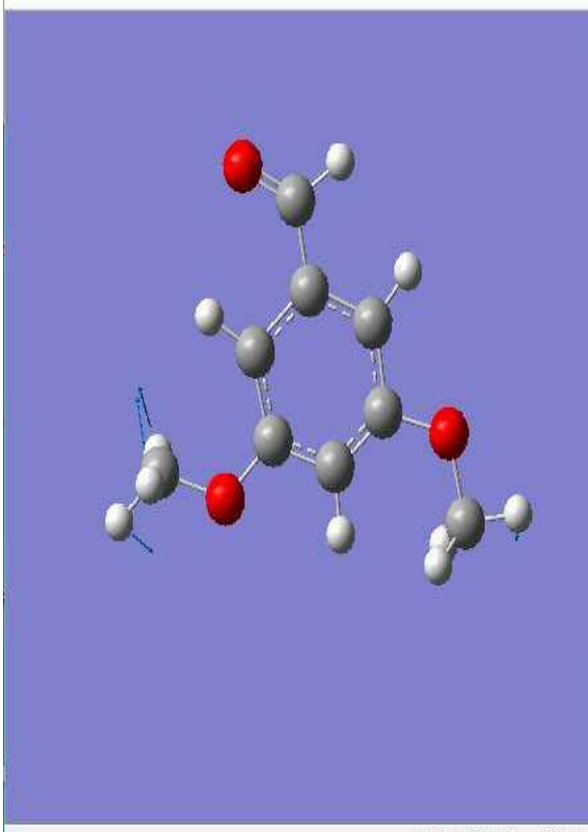
لاحظنا ان كل قيم التردد المحسوبة التي تحصلنا عليها من DFT ايجابية لذلك لا توجد ترددات متداخلة. مما يفسر الاختيار الجيد للطاقت الوظيفية المستخدمة في الدراسة.

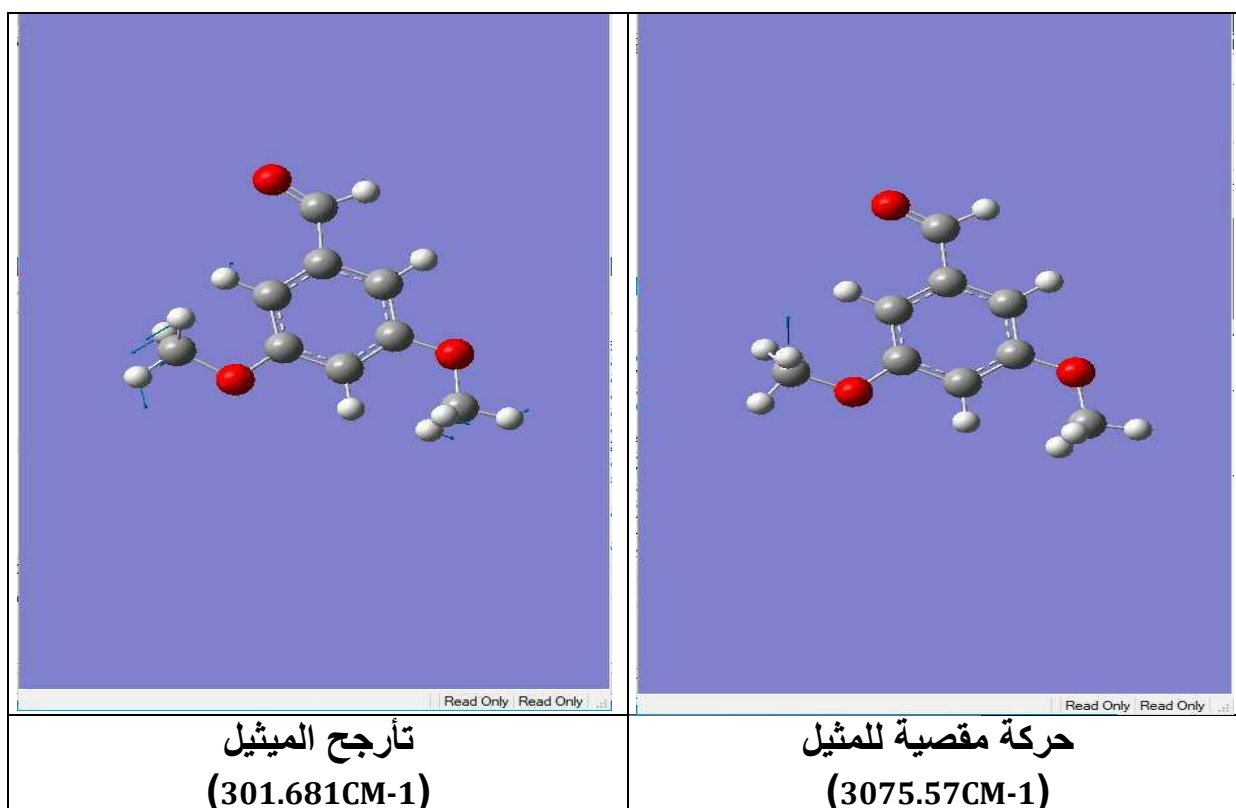
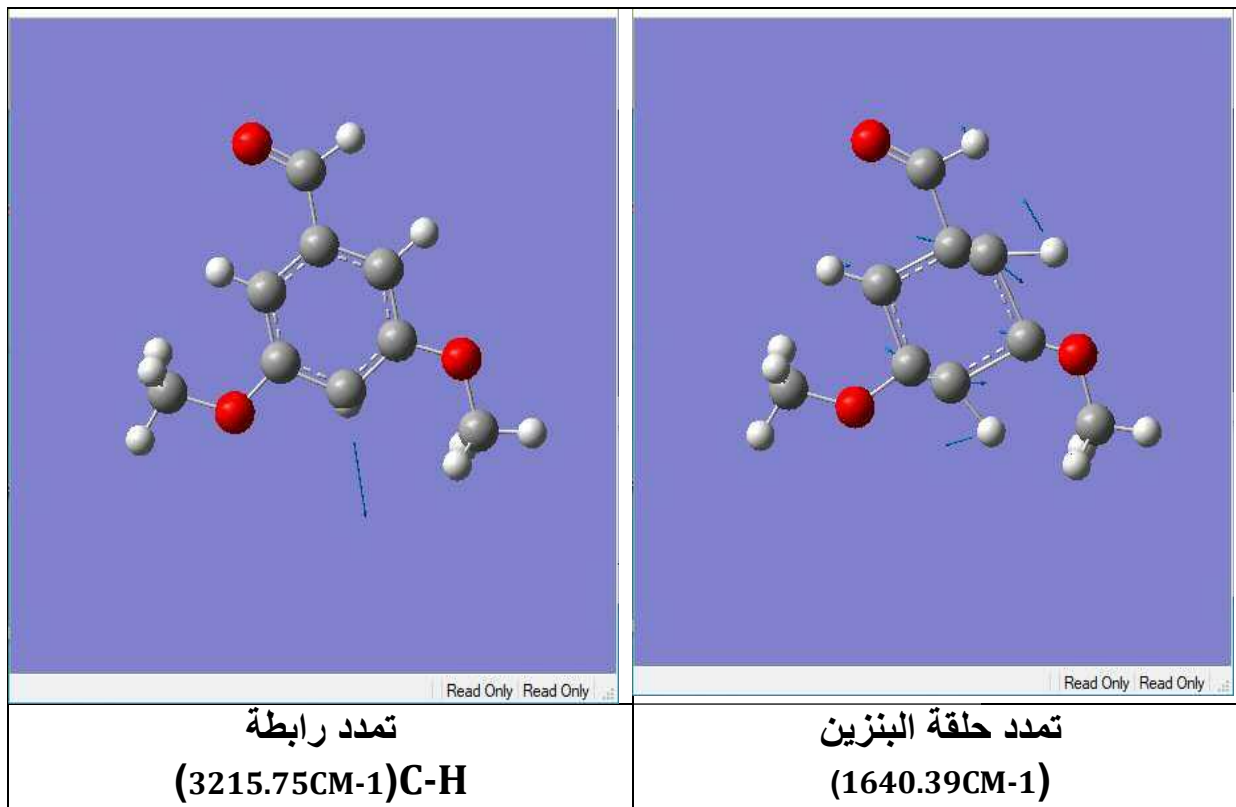
- كل مادة ذراتها تهتز في الحرارة وهذه الحركة تؤدي الى تغير طفيف الاهتزاز.
- التفاعل بين الجزيئات (الروابط الهيدروجينية تسمى التفاعلات الضعيفة)

4-III المبحث الرابع: الحركات الاهتزازية لـ dimethoxybenzaldehyde:



<p>حركة مظلوية للمثيل وتشوه للبنزين (1324.27cm-1)</p>	<p>تأرجح المثيل (1167.81cm-1)</p>
---	-----------------------------------

 <p>Read Only Read Only</p>	 <p>Read Only Read Only</p>
<p>اهتزاز الرابطة C=O (1764.35CM-1)</p>	<p>حركة مقصية للمثيل (1507.82cm-1)</p>



خاتمة

من خلال ما قمنا به في الدراسة الطيفية للجزيء dimethoxybenzaldehyde بواسطة الأشعة تحت الحمراء وأشعة رامان وبالاعتماد على الطرق الحسابية و نظرية الكثافة الوظيفية DFT من سلسلة برنامج Gaussian03 والتي أجرينا بواسطتها حسابا نظريا و تشكل الجزيء والتي أعطت نتائج قريبة من تلك التجريبية. ومن جهة أخرى أكدت الحسابات النظرية وجود بعض التشوهات للجزيء وأيضا مكنت من الحصول على ترددات مختلفة للاهتزاز.

الخلاصة العامة

في هذا العمل اخترنا المركب dimethoxybenzaldehyde الذي تحصلنا عليه من اجل دراسته نظريا DFT وتجريبا ب IR و RAMAN و DRX والمقارنة بينهما. حيث استعملنا نظرية الكثافة الوظيفية DFT وهي أحد الطرق الرياضية لحل مشاكل الأنظمة المتعددة الجسيمات، ومن اجل معرفة الغرض من تركيبه وخصائص بعض المواد فيزيائيا قمنا بدراسة المركب بواسطة هاته النظرية.

أن حسابات ميكانيك الكم التي نفذتها بطريقة نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) مع الوظائف B3LYP و MPW-91 إلى نتائج مماثلة في أطوال وزوايا الروابط مقارنة مع DRX كما أنه يتوافق التشكل الخاص ب 3,5-dimethoxybenzaldehyde بالقرب من التماثل الذي تم الحصول عليه من ال DFT مع أدنى طاقة تشكل للتشكل الأكثر استقرارا.

و من ثم تطرقنا إلى دراسة طيفية، بالأشعة تحت الحمراء و رامان وتسلط الضوء على مختلف اهتزازات الجزيء تم إجراء الحسابات النظرية لهذه الأنماط من الاهتزاز بمساعدة DFT واستخدمنا الدوال B3LYP و MPW1PW91 وصولا إلى أننا لاحظنا أن جميع قيم التردد المحسوبة التي تم الحصول عليها من DFT إيجابية لذلك لا توجد ترددا متداخلة مما يفسر الاختيار الجيد للطاقات الوظيفية المستخدمة في الدراسة.

كلمات مفتاحية: dimethoxybenzaldehyde، الأشعة السينية، الأشعة

تحت الحمراء، ورامان

ABSTRACT:

The FT-IR and FT-Raman spectra of 3,5-dimethoxybenzaldehyde C₉H₁₀O₃ molecule have been recorded in the range of 4000–400 cm⁻¹ and 3500–50 cm⁻¹ respectively. The molecular geometry and vibrational frequencies in the ground state are calculated using the DFT/B3LYP method with 6-311G++(d,p) basis sets and assuming CS symmetry. The computed values of frequencies are scaled using a suitable scale factor to yield good coherence with the observed.

Résumé:

Les spectres FT-IR et FT-Raman de la molécule de 3,5 diméthoxybenzaldéhyde C₉H₁₀O₃ ont été enregistrés dans la plage de 4000-400 cm⁻¹ et 3500-50 cm⁻¹ respectivement. La géométrie moléculaire et les fréquences vibratoires à l'état du sol sont calculées à l'aide de la méthode DFT/B3LYP avec des ensembles de base 6-311G+ (d,p) et en supposant une symétrie CS. Les valeurs calculées des fréquences sont mises à l'échelle à l'aide d'un facteur d'échelle approprié pour obtenir une bonne cohérence avec l'observation.

الملخص:

تم تسجيل أطياف IR-FT و Raman-FT من جزيء 3,5 dimethoxybenzaldehyde في نطاق 400-4000 سم-1 و 3500-50 سم-1 على التوالي. يتم حساب الهندسة الجزيئية والترددات الاهتزازية في الحالة الأرضية باستخدام منهجية LYP3B/DFT مع مجموعات الأساس 6-311-G+(p, d) وباقتراض تناظر CS. يتم قياس القيم المحسوبة للترددات باستخدام عامل مقياس مناسب لتحقيق اتساق جيد مع ما لوحظ.

قائمة المراجع :

[01] <https://ktabpdf.com/watch/%D8%AA%D8%AD%D9%85%D9%8A%D9%84-%D8%A7%D9%84%D8%B7%D9%8A%D9%81-%D8%A7%D9%84%D9%85%D8%BA%D9%86%D8%A7%D8%B7%D9%8A%D8%B3%D9%8A-pdf#downloads>

[03] سميحة بوضياف، دراسة التركيب الجزيئي لرملة كثنان منطقة ورقلة باستخدام الامتصاص ما تحت الحمراء وحيود الأشعة السينية، مذكرة ماستر أكاديمي علوم المادة، جامعة قاصديمرباح- ورقلة، الجزائر، 2012.

[04] بوراس شهرزاد، دراسة مطيافية و نظرية للجزيء dimethoxybenzaldehyde ، مذكرة ماستر أكاديمي ، علوم المادة ، قسم الفيزياء ، جامعة قاصدي مباح – ورقلة - ، الجزائر.

[06] عبد المنعم السيد الأعسر، التحليل الطيفي للأنظمة الكيميائية و البيو كيميائية، الدار العربية للنشر والتوزيع، مصر، (ص 59-67، 1997).

[11] د . نعيم عبد القادر أحمد، أدمحمد أمين سليمان، علم البلورات والأشعة السينية دار الفكر العرب.

[15] س.تامة، تحضير وتحديد البنية البلورية بواسطة انعراج الأشعة السينية على المسحوق المركب

Ca0.3Sr0.7FeO2.5 مذكرة الماستر، جامعة الوادي، 2013.

[17] م.سليمان، أباشا، ش.خيري، سلسلة الفكر العربي لمراجع العلوم الأساسية فيزياء الجوامد ، دار الفكر العربي ، القاهرة مصر 2005.

[05] méthode ،ANNICK ROUESSAC-ROUESSAC.FRANCIS ،Masson pari ،techniques instrumentales modernes 1992.

[07] Raman Spectroscopy / February 15, 2006 / Advanced Physics Laboratory.

[08] M. Schmitt & J. Popp, Raman spectroscopy at the beginning of the 21 st century, Journal of Raman Spectroscopy 2006.

[09] M.SHMITT and J.POPP, Raman spectroscopy at the beginning of the 21scentery, Journal of raman spectroscopy 2006.

[10] Jacques Barbillat, Daniel Bougeard, Guy Buntinx, Michel Delhaye, Paul Dhamelin court et François fillaux, spectrométrie Raman, publications CNRS, LASIR-UPR 2631.

- [13]G. Cascarano, A. Altomare, C. Giacovazzo, A. Guagliardi, A. G.G.Moliterni , D. Siliqi, M.C. Burla, G. Polidori et M. Camalli, *Acta Cryst.* A52, C-79 (1996) .
- [14]M. Katih, "Condition de diffraction des rayon X par cristal"; Tétouan, (2009).
- [15]Boudraa, "Synthèse et étude structurale par diffraction des rayons X des phosphates mixtes des métaux à valences II, III et V"; mémoire magister en chimie, université mentouri Constantine, Algérie(2010) ,
- [16]LounisCHEKOUR , Elément de diffraction de rayons X, Université Mentouri de Constantine p8-11.
- [18]Sander J. T. Brugman, Anthonius H. J. Engwerda, Emma Kalkman, Erik de Ronde,Paul Tinnemans* and Elias Vlieg, *Acta Cryst.* (2019). E75, 38–42
- [19]Gaussian 03 (Revision A.5), M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, V.G. Zakrzewski, J.A. Montgomery, R.E. Stratmann, J.C. Burant, S. Dapprich, J.M. Millam, A.D. Daniels, K.N. Kudin, M.C. Strain, O.Farkas, J. Tomasi, V. Barone, M. Cossi, R. Cammi, B. Menucci, C. Pomelli, C. Adamo, S. Clifford, J. Ochterski, G.A. Petersson, P.Y. Ayala, Q. Cui, K. Morokuma, D.K. Malick, A.D. Rabuck, K. Raghavachari, J.B. Foresman, J. Cioslowski, J.V. Ortiz, B.B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Pikorz, I. Komaromi, R. Gomperts, R.L. Martin, D.J. Fox, T. Keith, M.A. Al-Laham, C.Y. Peng, A. Nanayakkara, C. Gonzales, M. Challacombe, P.M.W. Gill, B.G. Johnson, W. Chen, M.W. Wong, J.L. Andres, M.Head-Gordon, E. S. Replogle, and J.A. Pople, Gaussian, Inc., Pittsburgh PA (2003).