

حساب بعض الخصائص الفيزيائية لجزيئة الـ أكرل اميد (C_3H_5NO) باستخدام طريقة MNDO/PM3 شبه التجريبيه

م. نغم محي التميمي أ.د. عبد عون كاظم السعدي د. خولة جميل طاهر
جامعة كربلاء/ كلية العلوم / قسم الفيزياء

الخلاصة

تم في هذا البحث دراسة بعض الخواص الطيفية والفيزيائية لجزيئة الـ C_3H_5NO اللاخطية في منطقة الأشعة تحت الحمراء بواسطة طريقة MNDO/PM3 شبه التجريبية تحت شرط الحصول على التركيب المستقر للجزيئة عند مسافة التوازن (r_{eq}) والتي تحصل فيها الجزيئة على اقل قيمة للطاقة الكلية، حيث كانت قيمة الطاقة الكلية للجزيئة المدروسة $(-888.01159)eV$ ، عند مسافة التوازن (2.18Å) . كما تم دراسة الترددات الاساسيه الاهتزازيه لهذه الجزيئة وعدد الانماط الاهتزازية لها وتمثيل هذه الانماط على شكل رسومات، مع اعطاء شدة كل نمط من هذه الانماط، كذلك تمثيل الجهد الكهروستاتيكي وكثافة توزيع الشحنة الكليه برسوم المدارات ببعدين (2D) وبثلاثة ابعاد (3D).

Abstract

In this work some spectroscopic and physical properties for the nonlinear (C_3H_5NO) molecule, have been studied in Infra-red region (IR-region) using the semi-empirical MNDO/PM3 method under equilibrium condition, where the minimum total energy $(-888.01159eV)$ at equilibrium distance (2.18Å) .

Also, we study the fundamental vibrational frequencies, and given the number of mode for this molecule and we represented these modes graphically described intensity every mode, with other properties like electrostatic potential and charge density distribution in 2D, 3D.

1- المقدمة

أن الخواص الجزيئية مثل الطاقة والترتيب الجزيئي المتوازن.... الخ، يعد من أهم الامور الأساسية للفيزياء والكيمياء. تتكون المركبات عادة من ذرات أو جزيئات ذات أشكال احتمالية مختلفة وحسب تماثل أو وضعية الجزيئة. فلمناقشة شكل الجزيئة لابد من معرفة قيمتها الطاقية عند ابعاد مختلفة بين الذرات المكونة لها، ويعرف الشكل المستقر للجزيئة (Equilibrium Structure) والذي يمثل الحالة الارضية (ground state) بالشكل ذي أصغر محتوى طاقي بين جميع الاشكال الاخرى القريبة منه (1).

تعتبر معادلة شرودنكر 1925 ShrÖdinger equation الأساس في اعطاء وصف دقيق للدالة الموجية المرافقة للجسيم (2). بالرغم من استخدامها للانظمة الذرية البسيطة، كان لابد من اللجوء الى طرائق تقريبية للوصول الى حلول اكثر ملائمة لهذه الانظمة. لجأ علماء الكم الى سبيل التقريب لمعالجة حسابات الجزيئات البسيطة حيث اعتمد على اجراء تقريب على التكاملات الواردة ضمن معالجات روتهان-هال واطلق على هذه المعالجة بالطرائق شبه التجريبية. تمكن العالم هارترتي فوك من حساب الطاقة بأسلوب المجال المنسجم لذاته (Self Consistent Field - SCF) اذ ان الدوال الموجية للمدارات الجزيئية تعطى بحاصل الجمع الخطي للدوال الذرية للمدارات الذرية (LCAO) التي استخدمها هيكل وسميت بنظرية هيكل للمدارات الجزيئية (3).

ان البرامجيات النظرية تهتم بتطبيق الاسس النظرية والرياضية في حل المسائل الفيزيائية , وتعد برامجيات النمذجة الجزيئية (Molecular Modeling) احدى هذه التطبيقات فيمكن من خلالها معرفة , شكل الجزيئة , تعيين طاقة التنشيط او الحالة الانتقالية للمواد المتفاعلة , طاقة الاصرة , حرارة التكوين ΔH_f , توزيع الشحنة Charge Distribution في الجزيئة وتحديد الجانب الفعال , جهد التاين وترددات الاهتزاز .

لحساب ترددات الاهتزازات الجزيئية اهمية كبيرة في علوم الكيمياء والفيزياء, اذ انه يمكن من تعيين الانماط الاهتزازية المقاسة تجريبيا معرفة الاطوال الموجية المقابلة لها. وقد سبق استخدام اطياف الاهتزازات الجزيئية لاغراض التحليل وتعيين الشكل الجزيئي لمثيلاتها من القياسات الطيفية , حيث يمكن وصف الحركات الاهتزازية بدلالة حركات بسيطة تسمى انماط الاهتزاز Modes of Vibrations , يعتمد عدد الانماط الاهتزازية على عدد الذرات في الجزيئة . ان الترددات الاهتزازية الاساسية الناتجة عن طيف الاشعة تحت الحمراء (IR) تجهزنا بمعلومات عن القوى الداخلية الرابطة بين الذرات ولمختلف الجزيئات, حيث وجد ان الانواع المختلفة من الاواصر تظهر درجات مختلفة من مقاومة المط والانحناء غير معتمدة تقريبا على الجزيئة ولكنها معتمدة على الاواصر المتحركة (4). وقد كان للتطور السريع الحاصل في البرامجيات والسرعة الهائلة التي وصلت اليها الحاسبات الاثر الاكبر في تطوير المعالجة النظرية للاطياف الجزيئية , حيث طور كلا من ديوار (Dewar) ومجموعته (5), وبوبل (Pople) ومجموعته (6), برامجيات في حساب الصفات الترموديناميكية , الشكل الهندسي لحالة التوازن والطاقة لكل المستويات الجزيئية للمركبات بالاعتماد على معادلة شروندر واللول التقريبية لها الاساس في صياغة البرامج .

2- طيف الأشعة تحت الحمراء الاهتزازي للجزيئات متعددة الذرات

أن الحركة الاهتزازية للجزيئات الثنائية الذرة التي تتمثل بالاهتزاز الامتطائي (Stretching Vibration) للأصرة بين الذرتين يمكن أن تدرس باستعمال النموذج المتذبذب التوافقي والتصحيحات اللاتوافقية التي أدخلت عليه. غير أن الحركة الاهتزازية للجزيئات المتعددة الذرات تكون أكثر تعقيدا , وبالرغم من هذا التعقيد يمكن وصف الحركة الاهتزازية للجزيئة المتعددة الذرات بدلالة حركات بسيطة تسمى أنماط الاهتزاز (Normal-mode of vibration), وتتحرك النوى في أنماط الاهتزاز الاعتيادية في خطوط مستقيمة, ولكل نمط اهتزازي اعتيادي تردده المميز, ويعتمد عدد الأنماط الاعتيادية على عدد ذرات الجزيئة (5,6). فلو تأملنا جزيئة عدد ذراتها يساوي N بذلك يكون عدد الإحداثيات الفراغية اللازمة لوصف حالة النظام الديناميكية يساوي $3N$ وهذا العدد يسمى بدرجات الحرية للنظام (Degrees of- Freedom) , فأنا سنتمكن من أن نشير إلى موضع كل ذرة بتحديد ثلاثة إحداثيات (x,y,z) أو بمعنى آخر تحليل حركة إي ذرة في الجزيئة إلى ثلاثة مكونات باتجاه الإحداثيات الثلاثة (7). عند تثبيت الإحداثيات $3N$ للجزيئة عندئذ بالا مكان أن نحدد طول الأواصر والزوايا, وتستعمل ثلاث من درجات الحرية ($3N$) لوصف الموضع أو حركة الجزيئة كلها باتجاه الإحداثيات الثلاث (الحركة الانتقالية) كما تستعمل ثلاث درجات أخرى لوصف الحركة الدورانية للجزيئة, أما المتبقي من درجات الحرية فانه يشير إلى خزن طاقة الحركة الاهتزازية للجزيئة (8). يمكن تقسيم طيف الاشعة تحت الحمراء (I.R) الاهتزازي للجزيئات متعددة الذرات إلى :-

أ- الجزيئات الخطية :

أن هذه الجزيئات تعتبر فعالة في منطقة I.R حتى ولو لم تمتلك عزمًا مغناطيسيا كهربائيا دائما. فلو أخذنا بنظر الاعتبار جزيئة تحتوي على N من الذرات فأنا نشير الى موضع كل ذرة بتحديد ثلاث إحداثيات (x,y,z) فان العدد الكلي لقيم الاحداثيات هو $3N$, كما تستخدم درجتان اخريان لوصف الحركة الدورانية للجزيئة (بما ان الجزيئات الخطية لاتعاني من دوران حول الاصرة فان درجتين من درجات الحرية تلزم فقط لوصف الدوران) وبذلك يبقى $3N-5$ من درجات الحرية لوصف الحركة الاهتزازية وبذا تكون عدد درجات الحرية للجزيئة الخطية (ذات الذرتين) $3N-5=1$ اي ان عدد الاهتزازات واحد هو الاهتزاز الاساسي فقط (9).

ب- الجزيئات اللاخطية :

ان عدد درجات الحرية التي تصف الاهتزاز في الجزيئات اللاخطية هي $3N-6$ اذ ان ثلاثا منها تصف الحركة الانتقالية وثلاثا اخرى تصف الحركة الدورانية. وتنتج الاهتزازات ($3N-6$) التي تتضمن تغيرا في عزم ثنائي القطبين مجالا" كهرومغناطيسيا متغيرا يتحد مع الشعاع الكهرومغناطيسي الذي له نفس التردد وبذلك

تمتص الطاقة من قبل الجزيئة وتناسب شدة الامتصاص مع مربع معدل تغير عزم ثنائي القطبين. ان الاطياف الاهتزازية للجزيئات متعددة الذرات تعتبر مفيدة في تشخيص هذه الجزيئات وكذلك مقياس لنقاوتها (10).

3- الحسابات النظرية

تعتبر الطرائق شبه التجريبية اسرع بكثير من طريقة Ab-initio في تنفيذ العمليات وايجاد النواتج بشكل اوسع بالرغم من كونها اقل دقة منها وذلك لاعتمادها على نظرية المدار الجزيئي مع اهمالها لكثير من النواتج الصغيرة للتكاملات (7).

تم تصنيف الطرائق شبه التجريبية الى عدة طرق, منها الطريقة الحديثة PM3 (Parameterization model version 3 - طريقة تعيين قيم المعلمات) (8), وهي طريقة مطورة لطريقة MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap - الاهمال للتداخل المتوسط المحور) (9,10), تتميز طريقة PM3 بكفاءتها النسبية بالمقارنة مع الطرائق التجريبية الاخرى, اذ تتمكن من معالجة المواد عالية الطاقة والتي غالباً ما تمثل انظمة حاوية على مجاميع تمتلك ذراتها مزدوجات الكترونية (Ione Pairs) (11), وقد استخدمها ستوروات (J.J.P.Stewart) التي اعتمدت تقريب هارترى - فوك المقيد (Restricted Hartree-Fock Theory- RHF) التي اعتمدت في هذا البحث.

اشتملت الدالة الموجية الكلية في هذه الطريقة المقيدة (RHF) على جزء يمثل البرم الالكتروني لحالتي البرم الالكتروني الى الاعلى (α) والبرم الالكتروني الى الاسفل (β) في حساب الطاقة الالكترونية حسب المعادلة الاتية :

$$\delta_i = H_{ii} + \sum_i (2J_{ij} - K_{ij}) \quad \dots\dots\dots 1$$

$$H_{ii}^{core} = \int \phi_{i(1)}^* H \phi_{i(1)} d\tau \quad \dots\dots\dots 2$$

حيث تمثل H_{ii}^{core} القيمة المتوقعة expectation value لهاملتوني اللب الالكتروني الواحد, J تمثل التنافر الالكتروني (Electronic Repulsion) و K التبادل الالكتروني (Electronic Exchange). لذا فان معادلة شروونكر تأخذ الصيغة الاتية (12) :-

$$[H_{ii}^{core} + \sum_j (2J_{ij} - K_{ij})] \Psi = \delta_i \Psi \quad \dots\dots\dots 3$$

المعادلة (3) تدعى بهارترى - فوك او معادلة المجال المنسجم لذاته (SCF).

ومما هو جدير بالذكران نظرية المدارات الجزيئية (Molecular Orbitals Theory-OM) استطاعت ان تحل الكثير من التعقيدات حيث انها فصلت حركة الالكترونات عن حركة النواة في الجزيئة. ان كل الكترون في الجزيئة يوصف بدالة ذاتية ψ وبما ان هذه الدالة تصف الالكترون في الجزيئة لذلك سميت بالمدار الجزيئي. يمكن كتابة معادلة طاقة المتذبذب (المهتز) اللاتوافقي بأستخدام دالة (مورس) للحصول على مستويات الطاقة الاهتزازية بدلالة العدد الكمي الاهتزازي (V) (13) كالآتي :

$$E_v = (V + 1/2)\bar{v} - (V + 1/2)^2 \bar{v} x_e - (V + 1/2)^2 \bar{v} x_e^2 \dots\dots\dots 4$$

V هو عدد الكم الاهتزازي ويأخذ قيما صحيحة $V = 0, 1, 2, 3, \dots$, χ_e ثابت اللاتوافقية (صغير وذو قيمة موجبة) حيث تكمن اهميته الفيزيائية في حساب الترددات الفوقية وتزداد قيمته مع زيادة عدد الكم الاهتزازي (V) و \bar{v} هو التردد الاهتزازي.

4- حساب الترددات الاهتزازية الجزيئية: (10)

إنّ لحساب ترددات الاهتزاز الجزيئية من وجهة نظر ميكانيك الكم ذو أهمية كبيرة إذ يمكن تعيين الأنماط الاهتزازية المقاسة تجريبياً وبشكل مطلق وكما يساعد في تعيين الشكل الهندسي وانتشار الذرات فراغياً في الجزيئة.

ترتبط ترددات الاهتزاز بصفتين مهمتين الاولى الكتل الذرية والتوزيع الهندسي للنوى المهتزة والثانية مجال القوى (forces-field) الذي يميل الى ارجاع الجزيئة الى التوزيع الهندسي المتوازن وقد استطاع ولسون (Wilson) التوصل الى حساب الترددات الاهتزازية في وصف المعادلة التجريدية للحركة الاهتزازية (14).

$$\Sigma_j L_j (F_{ij} - \lambda M_{ij}) = 0 \quad \dots\dots\dots 5$$

حيث M_{ij} هي الكتل الذرية عند الشكل الهندسي المتوازن للجزيئة و F_{ij} هو ثابت القوة (force constant) للازاحة الصغيرة للذرات (i,j) . ويتم الحصول على حل هذه المعادلات من خلال جعل قيمة المحددة التجريدية (secular determinent) لويلسون مساوية للصفر (14).

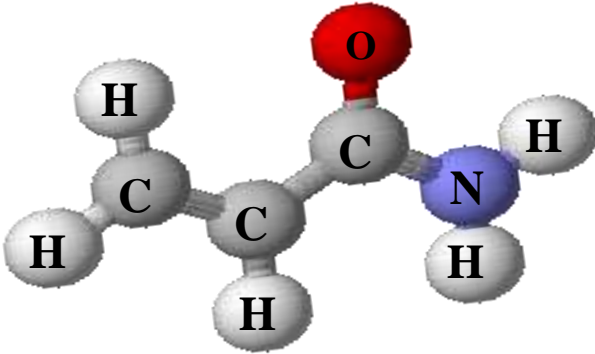
$$| F_{ij} - \lambda M_{ij} | = 0 \quad \dots\dots\dots 6$$

ويعطي حل هذه المحددة عدد n من الجذور (λ_k) يقدر المحددة التجريدية المربعة ويعطي ايضا معاملات الجمع (L_{ij}) وترددات الاهتزاز (ν_k). حيث تمثل (λ_k) دالة القيمة الذاتية (eigen value) لترددات الاهتزاز وتعرف حسب العلاقة الاتية :

$$\lambda = 4\pi^2 \nu^2 c^2 \quad \dots\dots\dots 7$$

حيث تمثل c سرعة الضوء و ν تردد الاهتزاز الاساسي (15).

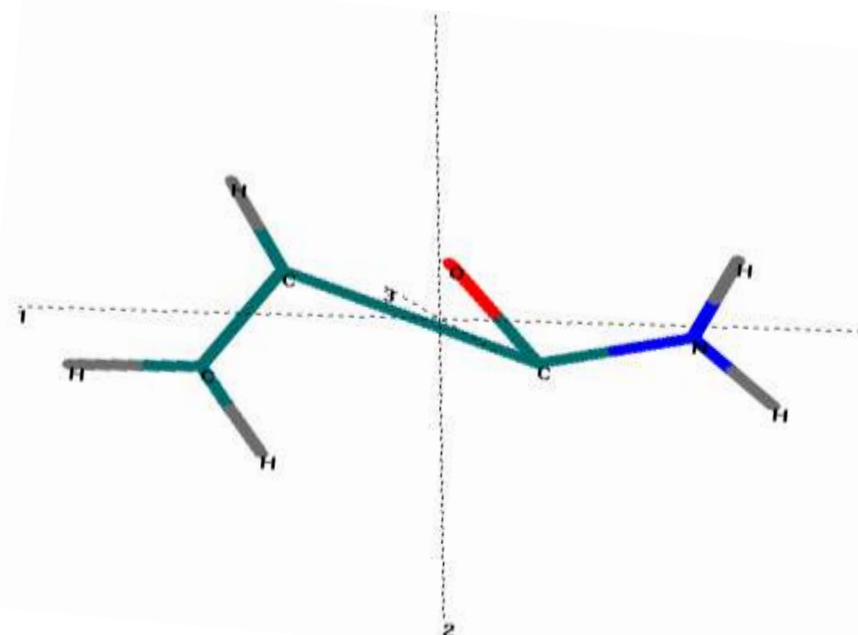
تكمن اهمية هذا البحث في استخدام جزيئة لاختية , ويعد الأكرل امايد (cryl amide) من المركبات العضويه التي لها القدرة على توليد جذور حرة فعالة وقادرة على الارتباط بجزيئات المونومير لتكوين مراكز فعالة بهيئة جذور حرة ويمكنها اضافة مزيد من جزيئات المونومير وتكوين سلاسل بوليمرية طويلة في فترة وجيزة من الزمن (16). يمتلك هذا المركب الصيغة الكيميائية C_3H_5NO وتمتاز بان بلوراتها صلبة ذات لون ابيض , عديمة الرائحة , مقاومة للتلف , تتحمل درجات الحرارة العالية أي لا ينحل بالحرارة (17), يذوب في الماء والايثانول والايثير والكوروفورم , ينصهر عند درجة 84.50 C ودرجه غليان منخفضة نسبيا" (اقل من 400°), على الأكثر له كثافة قريبة من الواحد, ويتكون المركب من اواصر تساهمية او على الاقل خاصيتها تساهمية والشكل (1) يوضح التركيب الجزيئي. كما تم استخدام هذا المركب لتصنيع محرز حيود هولوكرافي وذلك عن طريق تصنيع الركن الاساس وهو الفلم الحساس وكانت كفاءة حيود المحرز 80% وعدد خطوط المحرز 1000 line/mm ويعتبر هذه النتيجة افضل بكثير من بقية المركبات الكيميائية .



شكل (1) يوضح التركيب الجزيئي الخاص بجزيئة الاكريل امايد

5- النتائج والمناقشة

تم معرفة التركيب الجزيئي مع المحاور الداخلية (Internal Coordinat) لجزيئة C₃H₅NO وحسب برنامج الـ PCMODEL كما موضح في الشكل (2) .



شكل (2) يوضح المحاور الداخلية لـ C₃H₅NO

تم الحصول على المصفوفة البدائية بواسطة برنامج PCMODEL بعد رسم الجزيئة باستخدام المحاور الداخلية للجزيئة (r, θ, ϕ) والحصول على الافضل للاحسن وضع هندسي لها (Optimization) كما مبين في الجدول (1) .

جدول (1) المصفوفة البدائية لجزيئة الـ الأكرل امايد (C₃H₅NO)

ATOM	DISTANCE r(Å)	OPT.	ANGLE(θ°)	OPT.	DIHDRA(ϕ°)	OPT.	A	B	C
O	.000000	0	.000000	0	.000000	0	0	0	0
N	2.182553	0	.000000	0	.000000	0	1	0	0
C	2.303674	1	61.138260	1	.000000	0	2	1	0
C	1.356792	1	31.385850	1	.000000	1	3	2	1
C	1.341955	1	152.623400	1	.000000	1	3	2	1
H	.959053	1	151.139400	1	.000000	1	2	3	1
H	.957740	1	90.060520	1	180.000000	1	2	3	1
H	1.103710	1	88.801380	1	180.000000	1	3	2	1
H	1.102729	1	122.620100	1	.000000	1	5	3	2
H	1.102495	1	120.639500	1	180.000000	1	5	3	2

تضمن الجدول (1) مصفوفة (Matrix) خاصة بالجزيئة مشتملة على اطوال الاواصر (المسافة بين الذرتين r), وعلى الزاوية المحصورة بين الذرات (Θ) وعلى زاوية السطوح (ϕ). كما اعتمدت المصفوفة تصحيح الشكل الهندسي الفراغي للجزيئة الى افضل شكل مستقر طاقيا .

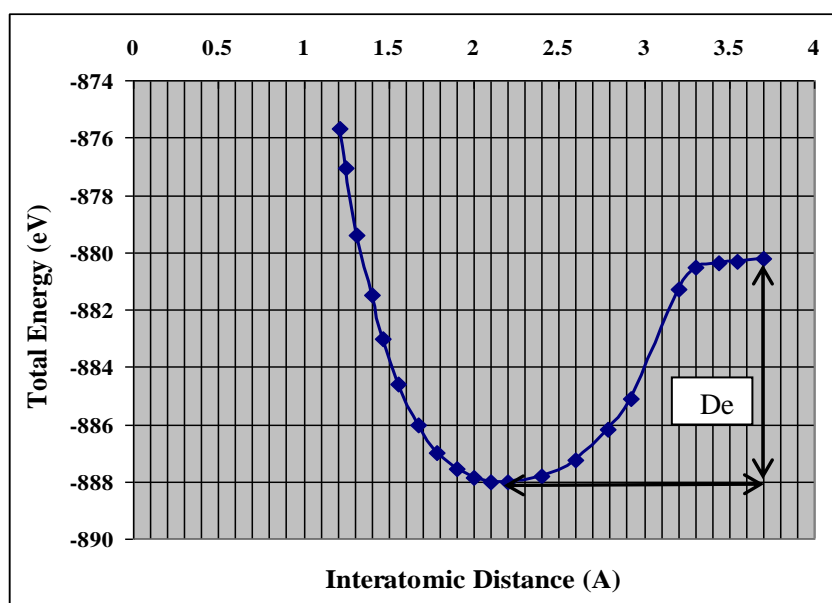
وقد تم الحصول على بعض الخصائص الفيزيائية بواسطة برنامج الـ (WinMopac7.21) والتي فيها تكون الجزيئة بالشكل الهندسي الفراغي المتوازن وتمتلك أقل طاقة ممكنة تكون فيها الجزيئة مستقرة وكما موضح في الجدول (2). اذ يتضح من الجدول اهم هذه الخواص والوحدات التي حسبت وهي: حرارة التكوين

القياسية , الطاقه الكلية , الطاقه الالكترونية , طاقة تنافر الالباب , طاقة التاين , عزم ثنائي القطب , عدد المستويات المشغولة بالالكترونات والوزن الجزيئي.

الجدول (2) بعض القيم والخواص الجزيئية الخاصة بجزيئة C3H5NO

وحدة القياس	القيمة المحسوبة	الكمية/Quantity
Kcal	-22.80572	Final Heat of Formation حرارة التكوين النهائية
eV	-888.0115	Total Energy الطاقة الكلية
eV	-2918.538	Electronic Energy الطاقة الالكترونية
eV	2030.5266	Core-Core Repulsion طاقة تنافر(اللب- اللب)
eV	9.67744	Ionization Potential جهد التاين
D	2.8	Dipole Moment عزم ثنائي القطب
Level	14	No. of Filled Levels عدد المستويات المشغولة
Amu	71.079	Molecular Weight الوزن الجزيئي

يوضح الشكل (3) تغير الطاقة الكلية مع المسافة البينية لجزيئة الاكريل امايد. يتضح من الشكل ان قيمة الطاقة الكلية عند موضع الاتزان (قعر منحنى طاقة الجهد) تساوي تقريبا (-888.0115eV) عند المسافة (O=C) تقريبا (2.18 Å) والتي تكون فيها الجزيئة مستقرة . وقد وجد عند المسافة (3.4 Å) تأثير مط الأصرة والابتعاد عن السلوك التوافقي , وهذا يعني كلما زادت المسافة (O=C) ازدادت الطاقة وصولا الى تفكك الجزيئة حيث كانت طاقة التفكك تساوي $Deq = 7.5 \text{ eV}$.



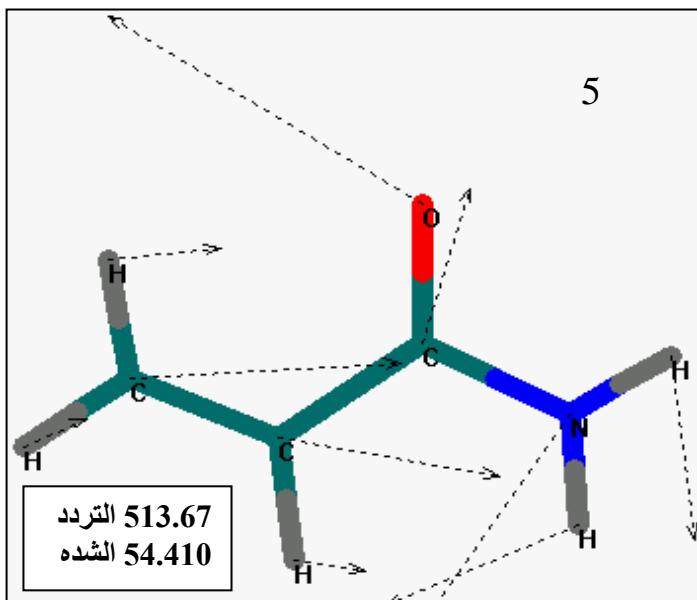
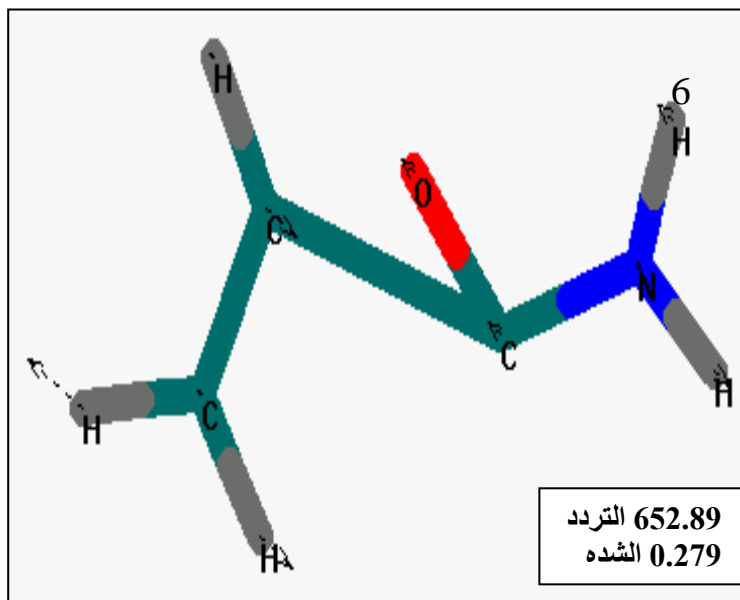
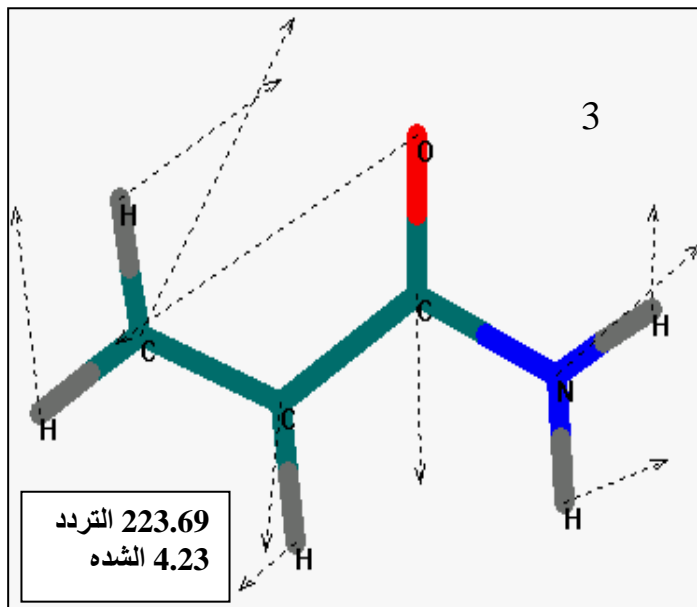
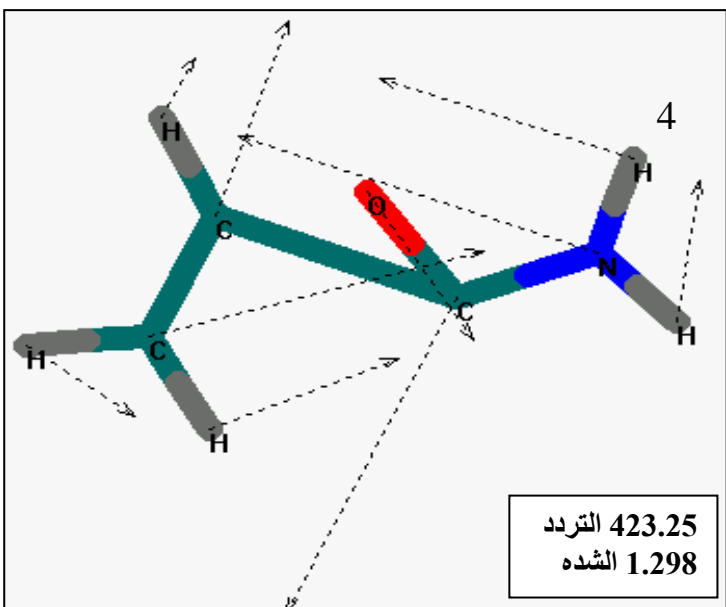
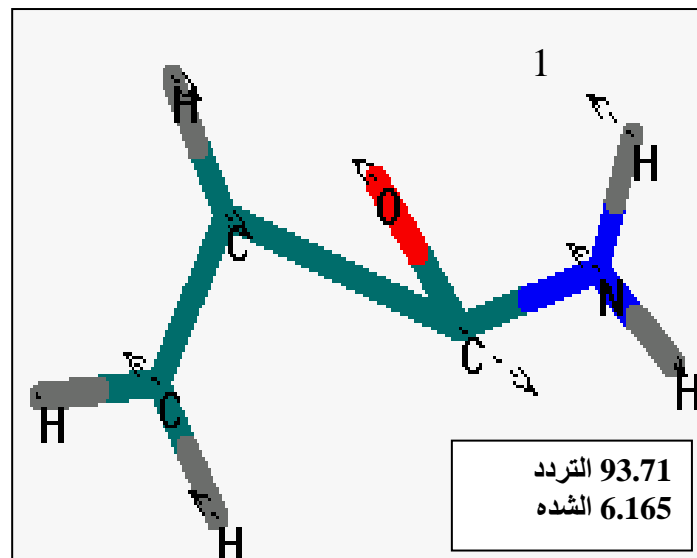
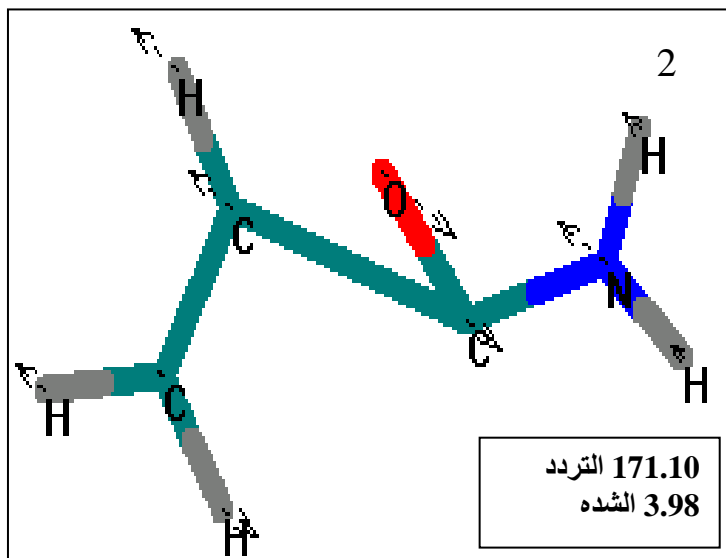
الشكل (3)تغير الطاقة الكلية مع المسافة البينية لجزيئة C3H5NO

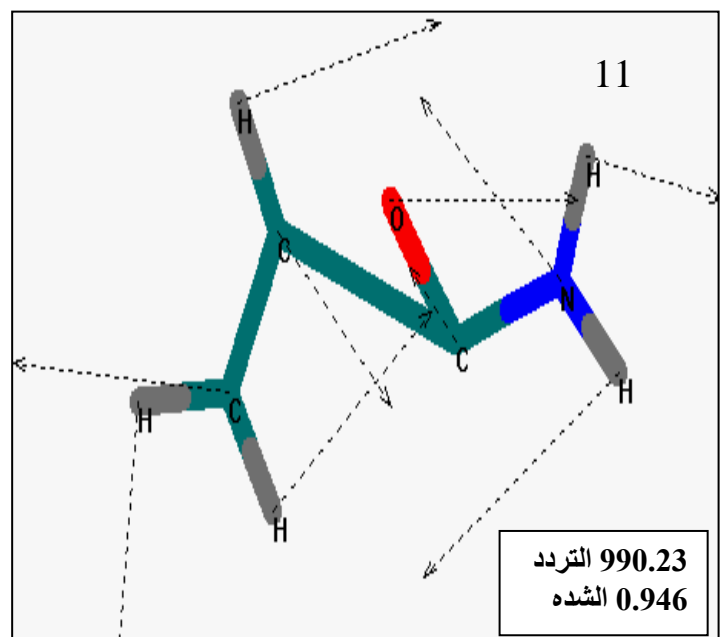
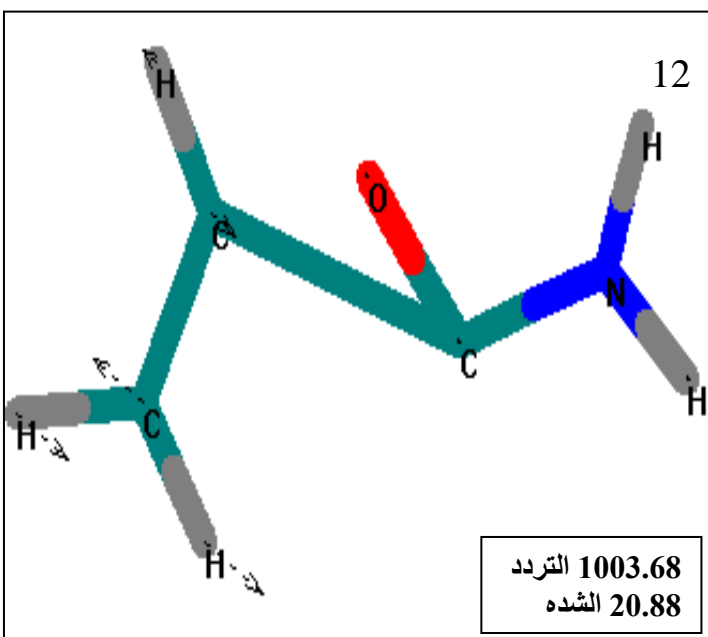
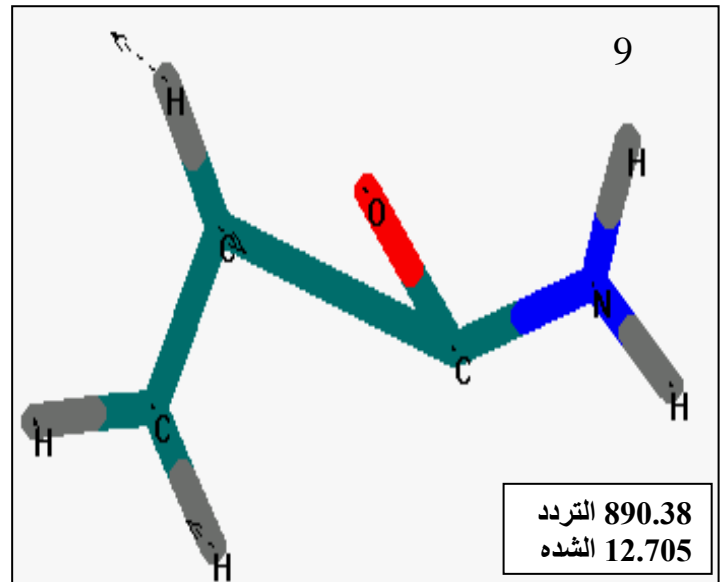
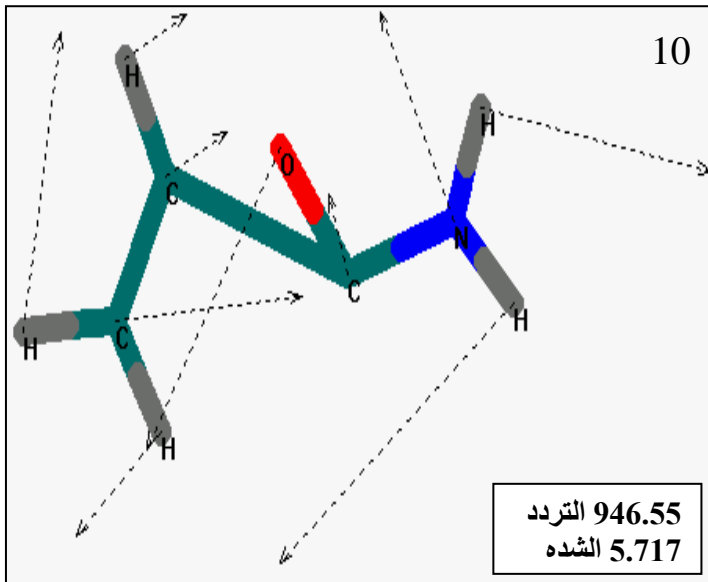
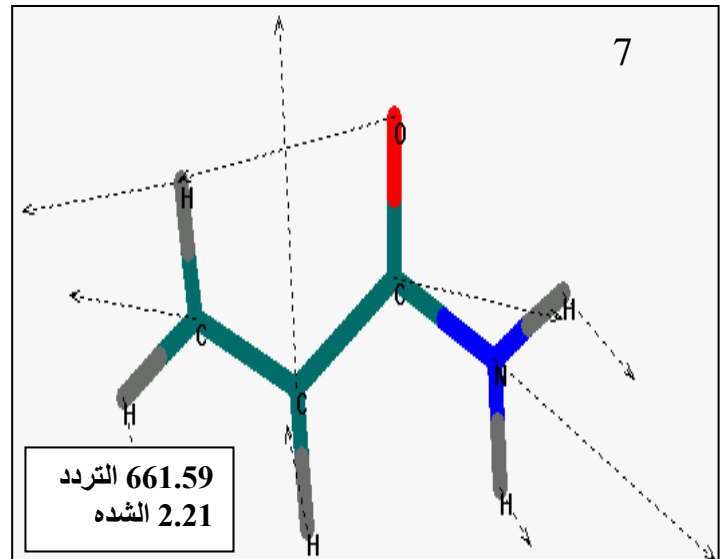
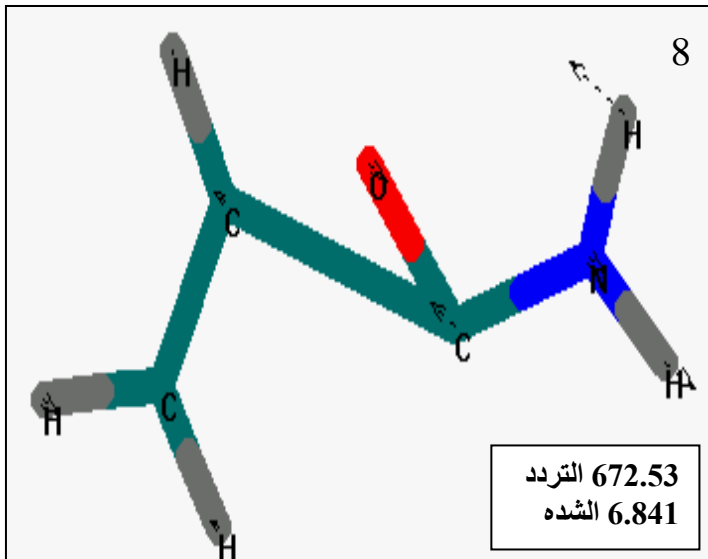
والجدول (3) يوضح قيمة التردد الاهتزازي والطول الموجي لجزيئة الاكريل امايد, حيث نلاحظ اعتماد تردد اهتزازا المط والانحناء بصورة كبيرة على كتل الذرات المهتزة وكذلك على رتبة الاصرة (bond order) الكيميائية الرابطة بين الذرات , فكلما كانت الذرات اخف وزنا كان ترددها اعلى حسب العلاقة $v=1/2\sqrt{\kappa / \mu}$ (18) .

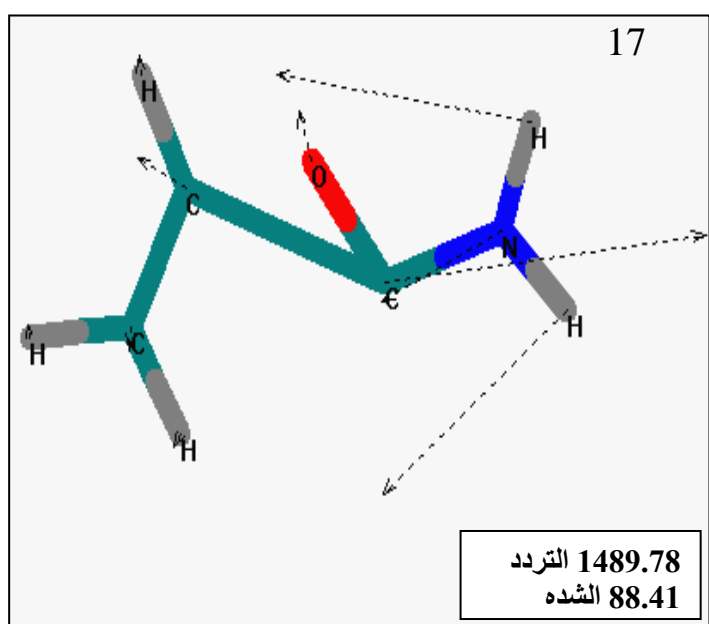
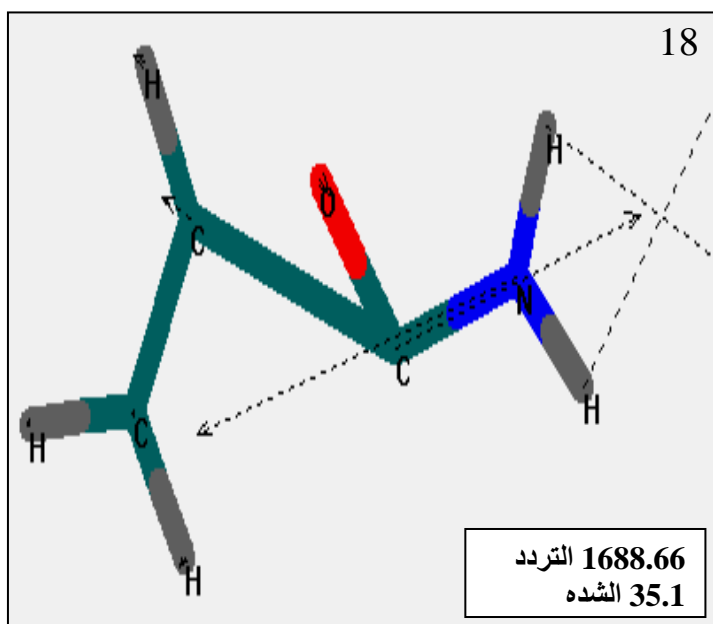
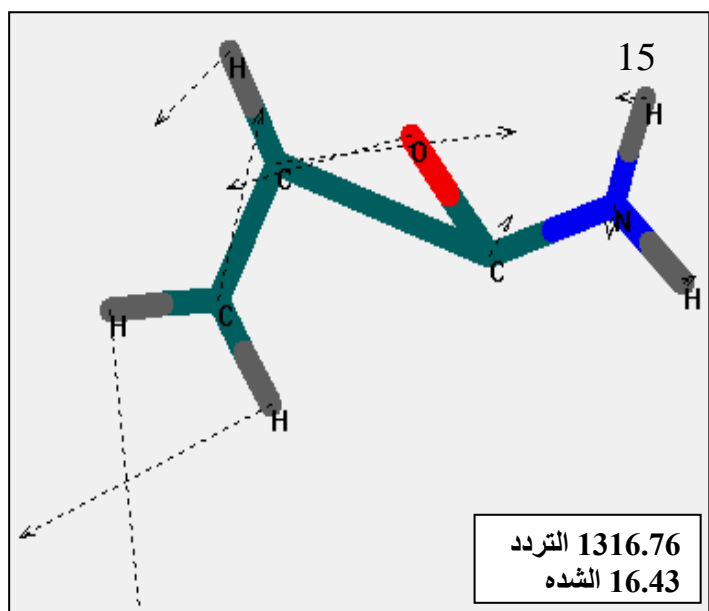
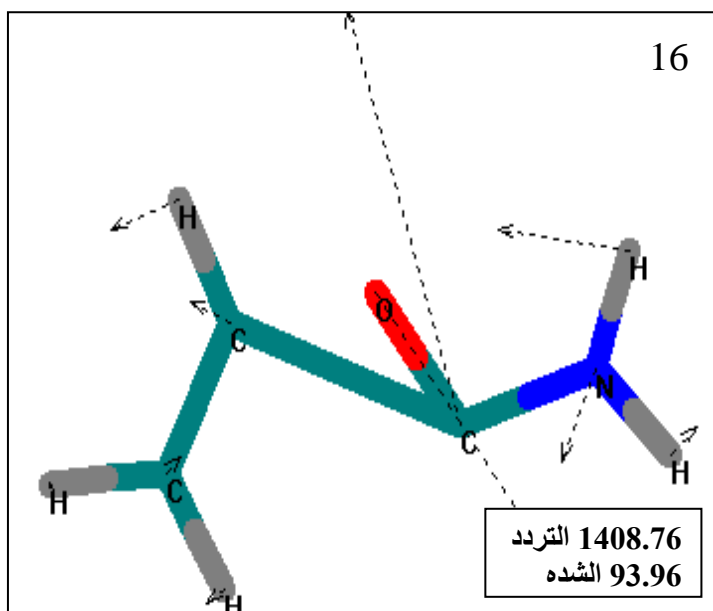
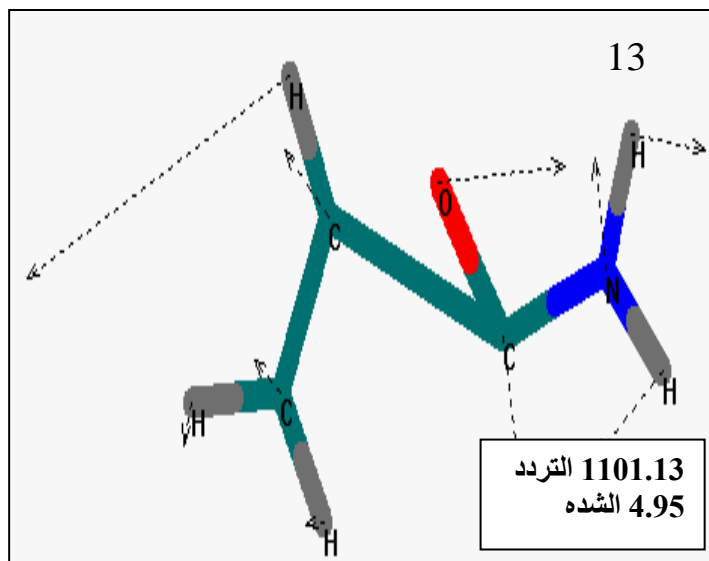
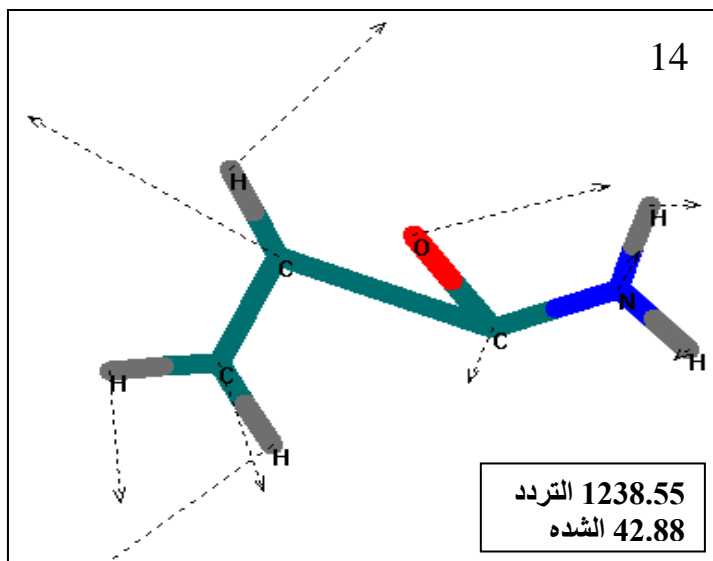
الجدول (3) يبين قيم التردد الاهتزازي والطول الموجي لاهتزاز جزيئة الاكريل امايد(C3H5NO)

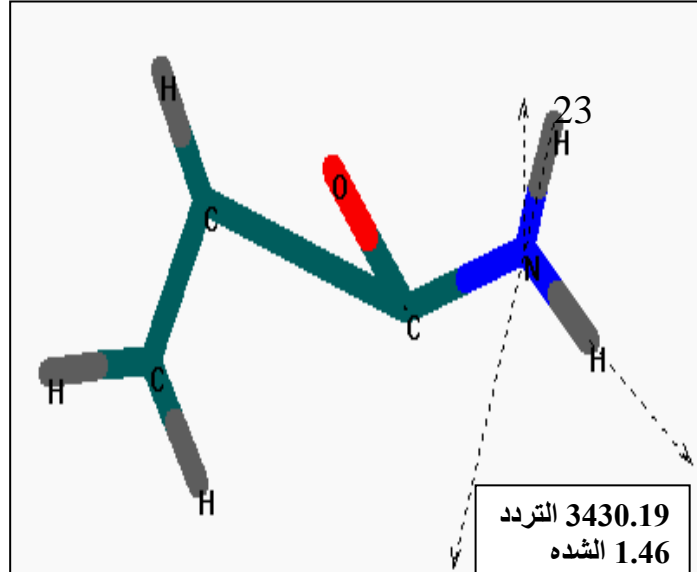
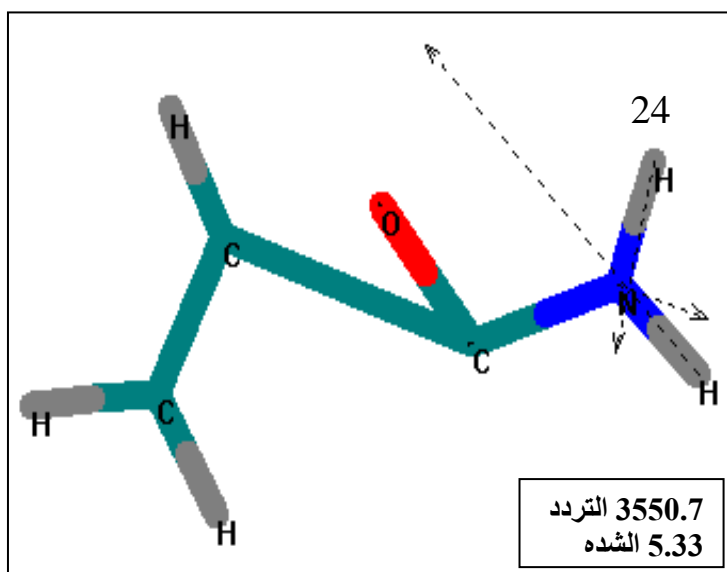
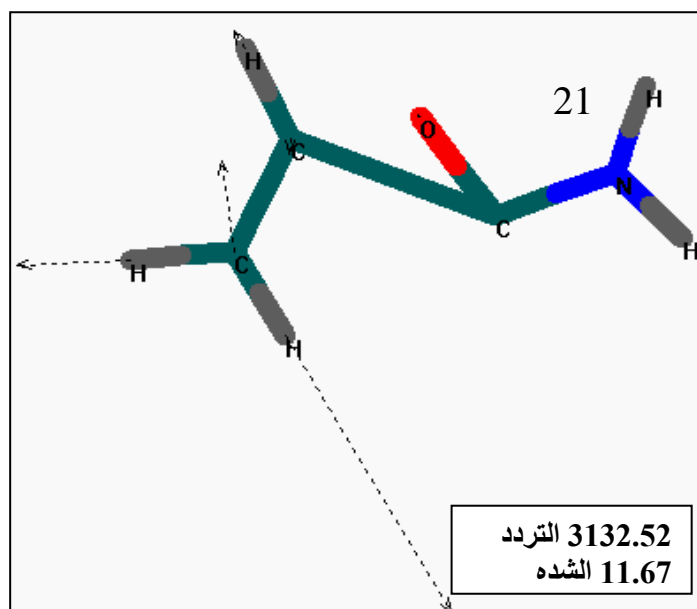
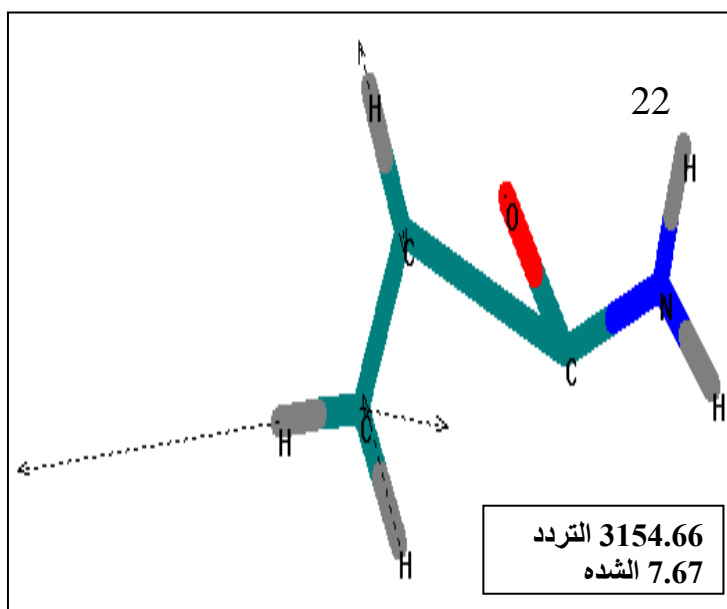
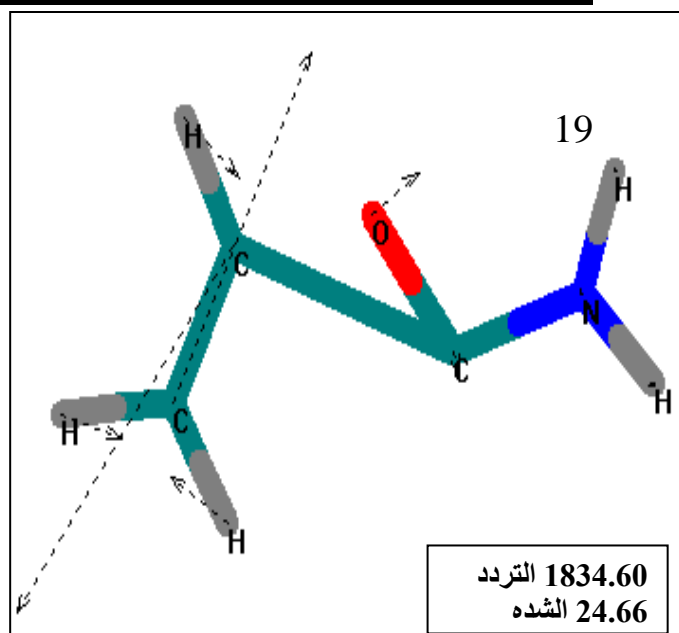
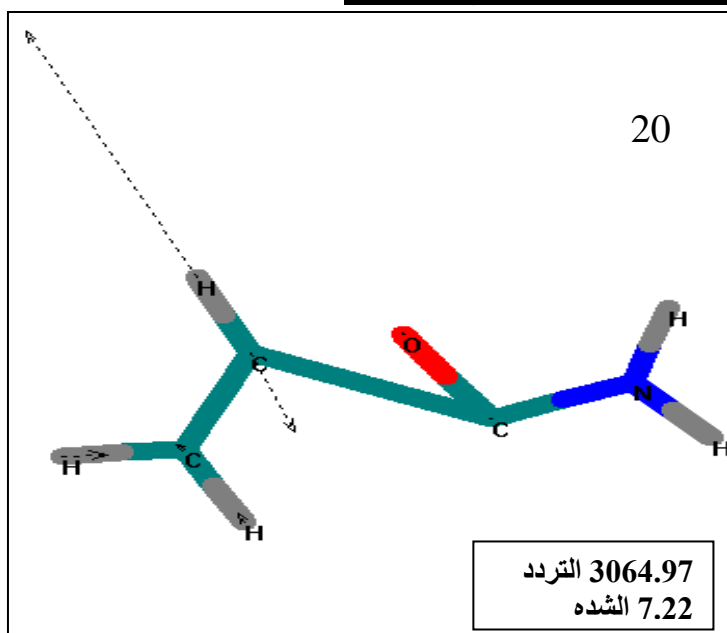
الاهتزاز Vibrational.no	Wave Number / العدد الموجي $\nu^{-1}(\text{cm}^{-1})$	الطول الموجي Wave Length (λ)/ μm
1	93.71	106.7
2	171.10	58.44
3	223.69	44.70
4	423.25	23.62
5	513.67	19.46
6	652.89	15.31
7	661.59	15.11
8	672.53	14.86
9	890.38	11.23
10	946.55	10.56
11	990.23	10.09
12	1003.68	9.96
13	1101.13	9.08
14	1238.55	8.07
15	1316.76	7.59
16	1408.76	7.09
17	1489.78	6.71
18	1688.66	5.92
19	1834.60	5.45
20	3064.97	3.26
21	3132.52	3.19
22	3154.66	3.16
23	3430.19	2.91
24	3550.7	2.81

بالنظر لكون الجزيئة لاخطية فلقد تم وصف 24 نمطا " اهتزازيا" حسب القاعدة $(3N-6=24)$ مع تبيان اتجاهات الحركة الموضحة بالاسهم ونوع النمط فيما اذا كان التواء او مط او ارتجاج او انحناء...الخ من الانماط , والشكل (4) يوضح الانماط الاهتزازية الجزيئية مع الشدة لكل نمط .





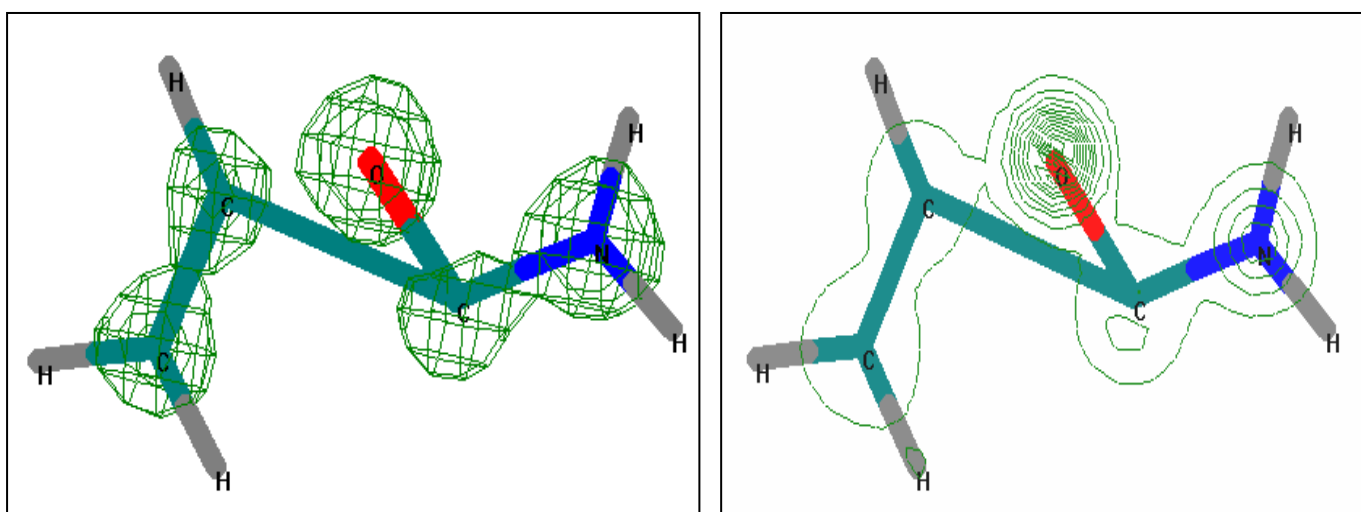




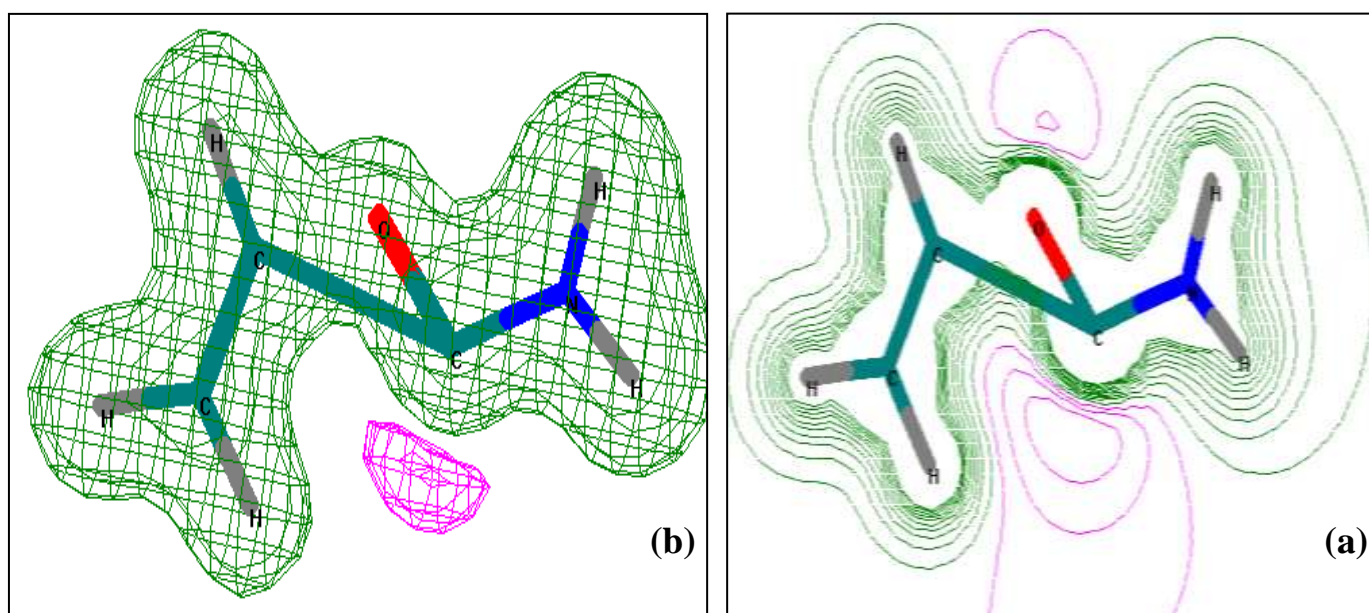
شكل (4) يوضح الانماط الاهتزازية الأساسية مع الشده والتردد لجزيئة C₃H₅NO

كما تم توضيح توزيع كثافة الشحنة الكلية (Total Charge Density) لجزيئة C_3H_5NO في بعدين (2DContours), وثلاثة ابعاد (3DIsosurface) على التوالي . اذ يلاحظ من الشكل نفسه ان كثافة الشحنة الالكترونية تتمركز حول ذرة الاوكسجين حيث تمتلك ذرة الاوكسجين كهروسلبية اكبر من ذرة الكربون ومن الجزيئة باجمعها حيث تزداد الكهروسلبية للذرات بزيادة العدد الذري. والشكل (5) يوضح هذا التوزيع ببعدين وبثلاثة ابعاد .

وقد تم معرفة حساب جهد هذه الجزيئة في بعدين وثلاثة ابعاد ايضا وكما مبين في الشكل (6). اذ يتضح من الشكل ان الجهد يتركز حول الجزيئة لتداخل الاوربتالات الذرية وتكوين الاوربيتال الجزيئي وان توزيع الالكترونات على الجزيئة هو المتحكم بالجهد الكهروستاتيكي (Electrostatic Potential). وقد ظهرت الكثافة على شكل خطوط وكل خط يمثل كثافة الكترونية ثابتة (الالكترون لكل انكستروم مكعب), كما يظهر ايضا ان كثافة الشحنة تمتد من ذرة الى اخرى باستمرار. ويتضح من الشكل ذي البعدين ان كثافة الشحنة تنخفض الى مقدار 0.2 الكترون تقريبا لكل انكستروم/مكعب في الخارج (عند الحافات) وهي اوطا في المناطق بين النواتين (19).



شكل (5) توزيع كثافة الشحنة الكلية (a) ببعدين, (b) وبثلاثة ابعاد .



شكل (6) جهد الكهروستاتيكية الساكنة (a) ببعدين, (b) وبثلاثة ابعاد

ان دراسة الخواص الفيزيائية لجزيئة الاكريل امايد (C_3H_5NO) لا يكون الا تحت شرط الحصول على الشكل المستقر لها وبأقل طاقة ممكنة للحصول على الافضلية لاحسن وضع هندسي للجزيئة عند مسافة التوازن. وقد تبين ان استخدام طريقة PM_3 التي اعتمدت في هذا البحث تعد من الطرائق الحديثة والسريعة التي تعطي قيم فيزيائية اقرب الى العملي منها بالنسبة لبقيية الطرائق الاخرى بوقت قصير جدا قد لا يتراوح البضع ثواني . كما تبين من الدراسات ان اغلب الدراسات الماخوذه للجزيئة المدروسة عمليا, لذا تعد هذه الدراسة وبهذه الطريقة هي دراسة نظرية حديثة لهذه الجزيئة .
لقد اظهرت النتائج ان لكتل الذرات المهتزة بين الذرات الاكبر لتردد اهتزازات المط والانحناء. حيث كلما كانت الذرات اخف وزنا كان ترددها اعلى ,

المصادر REFERENCES

- 1- د. مثنى شنشل " ميكانيك الكم" , بغداد ذي القعدة 1399 هـ - 1979 م .
- 2- A-Fock "fundamentals of quantum mechanics" , Moscow ,1986 .
- 3-D.Park , " Introduction to Quantum Theory " Second Edition. Mc Graw-Hill Kogakusha , Ltd , 1974.
- 4-E.B. Wilson , J.C.Decius and P.C.Cross " Molecular Vibration " , McGraw-Hill , Book Company , New York , 1955.
- 5-M.J.S. Dewar "The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry " , McGraw-Hill, New York 1969 .
- 6-J.A.Pople and D.L.Beveridge "Approximate Molecular Orbital Theory", McGraw-Hill, New York, 1970 .
- 7-H.Dorsett and A.White, "Overview of Molecular Modeling and Ab-initio Molecular Orbital Methods Suitable for use with Energetic Materials", DSTO Aeronautical and Maritime Research Laboratory Commonwealth of Australia 2000 .
- 8-J.P.Stewart, J.Comput. Chem., 10, 209, 220, 1989 .
- 9-M.J.S.Dewar and W.Thiel, J. Am.Chem. Soc: 99,4899-4907, 1977 .
- 10-M.J.S.Dewar and W.Thiel, J. Am.Chem. Soc: 99,4907-4917, 1977 .
- 11-J.L.G.depazy.J.Ciller. Prop. Explos. Pyrot., P-33-40 , 1993 .
- 12-E.F Valeeu and C.Sherrill,"The diayonol Born-Oppenheimer correction beyond the Hartree-Fock approximation", Journal of Cheamical Physics, Vol. 118,no.9.2003.
- 13-P.W Athine,"Molecular quantum mechanics An Introduction to quantum Chemistry" ,Vol I,II and III,Oxford University press, London , 1970.
- 14-E.B.Wilson, J.C.Decius and P.C.Cross "Molecular Vibration" , McGraw-Hill , Book Company , New York , 1955.
- 15-D.Steel, " Theory of Vibrational Spectroscopy " ,Sunders Philadelphia ,1971.
- 16- S. Gallege , A. Belendez , "Hologram multiplexing in acryl amide hydrophilic photo polymers" , opt . com . , 281 , 1354 , 2008 .
- 17- Linear poly acryl amide as a commercially sold DNA carrier .
(<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pumbmed/14436634>)
- 18-P.Gans, "Vibrating Molecules:An Introduction to the Interpretation of Infrared and Raman Spectra" , Chapman and Hall, London, 1971 .
- 19-M.Clyde Day, J.R.Joel Selbin , "Theoretical InOrganic Chemistry" ,Translated by Dr.Issam J.Sallomi,Second Edition,1984.