



جمهورية العراق  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
جامعة كربلاء - كلية العلوم  
قسم الكيمياء

# حسابات ميكانيك الكم لبعض

## مركبات الحديد الزرني

رسالة مقدمة الى

جامعة كربلاء - كلية العلوم

كجزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في علوم الكيمياء

قدمها

لؤي جابر عبد علي الطائي

بإشراف

أ.د. جعفر حسين علي

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

اللَّهُ نُورُ السَّمَاوَاتِ وَالْأَرْضِ ۗ مَثَلُ نُورِهِ كَمِشْكَاةٍ  
فِيهَا مِصْبَاحٌ ۖ الْمِصْبَاحُ فِي زُجَاجَةٍ ۖ الزُّجَاجَةُ  
كَأَنَّهَا كَوْكَبٌ دُرِّيٌّ يُوقَدُ مِنْ شَجَرَةٍ مُبَارَكَةٍ  
زَيْتُونَةٍ لَا شَرْقِيَّةٍ وَلَا غَرْبِيَّةٍ يَكَادُ زَيْتُهَا يُضِيءُ  
وَلَوْ لَمْ تَمْسَسْهُ نَارٌ ۗ نُورٌ عَلَى نُورٍ ۗ يَهْدِي اللَّهُ  
لِنُورِهِ مَن يَشَاءُ ۗ وَيَضْرِبُ اللَّهُ الْأَمْثَالَ لِلنَّاسِ ۗ

وَاللَّهُ بِكُلِّ شَيْءٍ عَلِيمٌ ﴿٣٥﴾

صدق الله العلي العظيم

## الإهداء

بسم الله الرحمن الرحيم

{ وَقُلِ اعْمَلُوا فَسَيَرَى اللَّهُ عَمَلَكُمْ وَرَسُولُهُ وَالْمُؤْمِنُونَ }

سورة التوبة اية 105

صدق الله العلي العظيم

الى مصباح الهدى وسفينة النجاة وجده وابييه وامه واخيه والتسعة  
المعصومين من ذريته وبنيه حبيبي وحبيب رب العالمين  
ابي عبد الله الحسين عليه السلام

إلى ملاكي في الحياة .. إلى معنى الحب وإلى معنى الحنان والتفاني .. إلى  
بسمة الحياة وسر الوجود  
إلى من كان دعائها سر نجاحي وحنانها بلسم جراحي إلى أغلى الحبايب  
أمي الحبيبة

إلى من بها أكبر وعليها أعتد .. إلى شمعة متقدة تنير ظلمة حياتي ..  
إلى من بوجودها أكتسب قوة ومحبة لا حدود لها ..  
إلى من عرفت معها معنى الحياة  
زوجتي

إلى من هم اقرب إليّ من روحي  
إلى من شاركني حزن الأم وبهم استمد عزتي وإصراري  
اخوتي

إلى من تذوقت معهم أجمل اللحظات  
إلى من أنسني في دراستي وشاركني همومي  
تذكراً وتقديراً إلى من جعلهم الله أخوتي بالله ..... و من أحببتهم بالله  
اصدقائي



## شكر

بسم الله الرحمن الرحيم

{ وَمَا تَوْفِيقِي إِلَّا بِاللَّهِ عَلَيْهِ تَوَكَّلْتُ وَإِلَيْهِ أُنِيبُ }

صدق الله العلي العظيم

سورة هود آية 88

أتوجه إلى الله العلي القدير بالحمد والتكبر الجزيل ، صاحب كل نعمة ومنتهى كل شكر ، (الذي هو معي في كل حين وينزل أمري قبل سؤالي وينبغي حاجتي قبل نظمي ، فله الحمد وله التكبر حتى برضى ، وصلى الله على حبيبنا المصطفى وآل بيته الطيبين الطاهرين أجمعين .

بترفي وانا اكمل رسالتي هذه لاهل التقدير بوافر الامتياز والاحترام والعرفان بحسن الجميل اهل الاستاذ العزيز والمرشد الغابر الاستاذ الدكتور جعفر حسين علي لما قدمه لي من دعم علمي ومعنوي وادبوي ومساندة صادقة ومعرفة غنية ولطف واحترام طيلة فترة انشرافي على هذه الرسالة فجزاه الله خير الجزاء ووفقه لما يحب ويرضى لانه سميع مجيب .

كما واتقدّم بحالص التكبر والتقدير اهل الدكتور زبير حسن الاحرجي لما قدمه ليعين التصحيح والارشاد والدرهم طيلة هذه الفترة ، فله التناء والعرفان بالفضل .

واتقدّم بتكبري وتقديري الاحصاء كلية العلوم / جامعة كربلاء ورئيسة قسم الكمبيوتر ما قدمه لي من التسهيلات والمساعدات خلال فترة الدراسة والبحث .

وبكلك اعتراز وتقدير اتقدّم بالتكبر اهل اصرفاني وزملائي الاستاذ همام فاضل والاستاذ احما مهيدي والاستاذ رسول فاضل والاستاذ مرضي الدعدي والاستاذ حمار عبد الحسين والاستاذ موسى جعفر وجميع زملاء الدراسة لما لقينهم منهم من تشجيع ومساعدة طول مدة البحث .

وللايقونتي الاله اتقدّم بتكبري وامتناني اهل الاستاذ مرضي جميل العكلة مدير التعليم الديني في مديرية الوفاء الشعبي وجميع زملائي من منسوبي ثانوية سررة المنهي واللائقي المجال لذكركم لثقتهم لما ابدوه لي من مساندة وتعاطف ودعم فلمم التكبر الجزيل .

واودوا الاحترام لك من تفضل علي وادعائي ولو بكلمة في انعام بحمتي هذا ، وفانتي اذكركه .

واخير اقدم شكري اذ كل من رفع يديه لي بالرحاء .

توي جابر الطائي



## إقرار المشرف

أقر بان إعداد هذه الرسالة جرى تحت إشرافي في قسم الكيمياء / كلية العلوم / جامعة كربلاء وهي جزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في علوم الكيمياء .

**التوقيع :**

**المشرف : د. جعفر حسين علي**

**المرتبة العلمية : أستاذ**

**التاريخ : / / 2014**

إقرار رئيس القسم / رئيس لجنة الدراسات العليا

بناءً على التوصيات المقدمة من قبل المشرف أشرح هذه الرسالة للمناقشة.

رئيس قسم الكيمياء

التوقيع

الاسم : د. باقر عبد الزهرة جودة

المرتبة العلمية : مدرس

التاريخ : / / 2014

## إقرار المقوم اللغوي

أقر بأني راجعت رسالة الماجستير الموسومة ((حسابات ميكانيك الكم لبعض مركبات الهيدرازون)) من الناحية اللغوية والتعبيرية وبذلك أصبحت الرسالة مؤهلة للمناقشة قدر تعلق الامر بسلامة الأسلوب وصحة التعبير .

التوقيع :

الاسم : د. حسن حبيب الكريطي

المرتبة العلمية : استاذ مساعد

التاريخ : / / 2014



## إقرار المقوم العلمي

أقر بأني راجعت رسالة الماجستير الموسومة ((حسابات ميكانيك الكم لبعض مركبات الهيدرازون)) من الناحية العلمية والتعبيرية وبذلك أصبحت الرسالة مؤهلة للمناقشة قدر تعلق الامر بسلامة المادة العلمية .

التوقيع :

الاسم : د. فلاح شريف عبد سهيل

المرتبة العلمية : استاذ مساعد

التاريخ : / / 2014

## إقرار لجنة المناقشة

نحن أعضاء لجنة المناقشة ، نقرّ بأننا اطلعنا على هذه الرسالة ، وقد ناقشنا الطالب (لؤي جابر عبد علي) في محتوياتها ، وفيما له علاقة بها بتاريخ / / 2014 ونرى بأنها جديرة بالقبول لنيل درجة الماجستير في علوم الكيمياء وبتقدير امتياز .

التوقيع :

الاسم : د. فلاح حسن حسين

المرتبة العلمية : أستاذ

العنوان : جامعة بابل / كلية العلوم

التاريخ : / / 2014

﴿ رئيس اللجنة ﴾

التوقيع :

الاسم : د. حميدة عيدان سلمان

المرتبة العلمية : أستاذ

العنوان : جامعة كربلاء / كلية التربية للعلوم الصرفة

التاريخ : / / 2014

﴿ عضو اللجنة ﴾

التوقيع :

الاسم : د. حسن عباس حبيب

المرتبة العلمية : أستاذ

العنوان : جامعة القادسية / كلية التربية للعلوم الصرفة

التاريخ : / / 2014

﴿ عضو اللجنة ﴾

التوقيع :

الاسم : د. جعفر حسين علي

المرتبة العلمية : أستاذ

العنوان : جامعة كربلاء / كلية العلوم

التاريخ : / / 2014

﴿ عضواً ومشرفاً ﴾

**مصادقة عمادة كلية العلوم / جامعة كربلاء**

التوقيع :

الاسم : د. أحمد محمود عبد اللطيف

المرتبة العلمية : أستاذ

العنوان : جامعة كربلاء / كلية العلوم

التاريخ : / / 2014

﴿ العميد ﴾

## الخلاصة

تضمنت الدراسة تطبيق احدى الطرق الشبه تجريبية وهو نموذج المندو/3- فورسيز MINDO/3-FORCES في حسابات ميكانيك الكم ، كما واجريت حسابات تامة وفقاً لنظرية دوال الكثافة DFT للأساس B3LYP وعناصر القاعدة 6-311G و CEP-121G بأستخدام برنامج كاوسين Gaussian 09 لغرض المقارنة ، ونظرا للأهمية الكبيرة والاستخدامات الواسعة الانتشار لقواعد شف منها الصناعية والطبية ، فقد تُرست خمس هيدرازونات مشتقة من حامض البنزويك هيدرازيد .

تم حساب الشكل الهندسي المتوازن (أطوال الأواصر والزوايا ) و الشحنات والكثافات الالكترونية و حرارة التكوين و عزم ثنائي القطب و طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO) و طاقة أوطاً مدار جزيئي غير مشغول (LUMO) و فجوة الطاقة و جهد التأين ، الالفة الالكترونية و الكهروسلبية و صلابة الجزيئة و الالكتروفيلية و الدوال الترموديناميكية القياسية (  $U^0$  و  $H^0$  و  $S^0$  و  $G^0$  و  $A^0$  ) و حساب 3N-6 من ترددات الاهتزاز لأشعة تحت الحمراء و شدد الامتصاص المقابلة لها ، كما تم تشخيص ترددات الاهتزاز الاساسية الناتجة لكل الجزيئات الستة المدروسة .

تم مقارنة النتائج مع القيم المقاسة تجريبياً من ناحية اطوال الاواصر باستخدام مطيافية حيود الاشعة السينية X-Ray ، ومن ناحية اخرى للأطياف الاهتزازية لاشعه تحت الحمراء . جاءت قيم النتائج المحسوبة جيدة وقريبة وبالخصوص المحسوبة وفق نظرية دوال الكثافة حيث اعطت نتائج افضل واكثر دقة واقرب من النتائج العملية ، مما عليه في نموذج المندو/3- فورسيز لأسباب عائدة الى طبيعة الحساب التقريبي لهذا النموذج فقد اظهرت النتائج لطرق الحساب مجتمعة ما يأتي :-

زيادة في طول الاواصر الواقعة على موقع التعويض للمجموعة الساحبة للالكترونات وقصر اطوالها عند الاواصر المجاورة لموقع التعويض ، وبالعكس مع المعوضات بالمجاميع الدافعة للالكترونات ، فقد لوحظ نقصان في اطوال الاواصر الواقعة على موقع التعويض وزيادة في اطوال الاواصر المجاورة لموقع التعويض .

تأثرت زوايا التآصر على الحلقة الاروماتية بالمعوض الساحب ، فقد ازدادت قيمها عن تلك المناظرة لها والمعوضة بمجاميع دافعة ، وحصل العكس مع الزوايا المجاورة لموقع التعويض فقد قلّت قيمها مع المعوض الدافع للالكترونات وزادت مع المعوض الساحب .



ارتفعت الكثافة الإلكترونية على ذرة النتروجين لمجموعة الازوميثين في المركبات المعوضة بمجاميع دافعة للإلكترونات ، بينما انخفضت في المركبات المقابلة لها والمعووضة بمجاميع ساحبة على الحلقة الأروماتية .

لوحظ ان قيم عزم ثنائي القطب وجهد التأين والألفة الإلكترونية والكهروسلبية والألكتروفيلية في المركب المعوض بمجموعة النايترو ( $-NO_2$ ) الساحبة للإلكترونات اعلى مما في المركبات المعوضة بالمجاميع الدافعة وذلك ماجاء معاكساً لنتائج الدوال الترموديناميكية القياسية ( $U^0$  و  $H^0$  و  $S^0$  و  $A^0$  و  $G^0$ ) اعطت نتائج كبيرة للمركبات المعوضة بمجاميع دافعة مقارنة مع نظيرتها المعوضة بمجموعة ساحبة.

اتفقت قيم الصلابة الكيميائية مع فجوة الطاقة ، في كونها لحامض البنزويك هيدرازيد اعلى قيمة لها اعلى استقرارية ، بينما المركب المعوض بمجموعة ثنائي مثيل امينو ذات الحجم الكبير، فهو الاقل قيمة للصلابة اقل استقرارا والتي تكسبه انخفاضاً في مستوى الإستقرارية .

## قائمة المحتويات

الصفحة	قائمة المحتويات	التسلسل
I	الفصل الاول المقدمة	1
II	الفصل الثاني طرق الحساب	2
II	الفصل الثالث النتائج والمناقشة	3
III	قائمة الجداول	4
IV	قائمة الاشكال	5
IV	قائمة الملاحق	6
VI	المختصرات والرموز	7
VI	معاملات التحويل	8

الصفحة	الفصل الأول المقدمة	التسلسل
1	قواعد شف	1-1
4	تطبيقات قواعد شف	2-1
4	اطوال الاواصر وزوايا التأصر	3-1
5	الشحنات والكثافات الالكترونية	4-1
6	أطياف الاهتزاز	5-1
6	حساب اطياف الاهتزاز الجزيئي	1-5-1
7	حساب شدة امتصاص الاشعة تحت الحمراء	2-5-1
8	حساب مشاركة الذرات في كل تردد اهتزازي (APP)	3-5-1
9	رسم الأنماط الاهتزازية	4-5-1
9	معاملات التقيس لترددات الأنماط الاهتزازية	5-5-1
9	حرارة التكوين القياسية ( $\Delta H_f^0$ )	6-1
10	عزم ثنائي القطب ( $\mu$ )	7-1
11	الطاقات المدارية	8-1
11	جهد التأين (IP)	1-8-1
12	الالفة الالكترونية (EA)	2-8-1
12	الكهروسلبية (EN)	3-8-1
13	الصلابة الكيميائية ( $\eta$ )	4-8-1
13	الالكتروفيلية (G)	5-8-1
14	الدوال الترموديناميكية	9-1
15	الكيمياء النظرية	10-1
16	الكيمياء الحاسوبية	11-1
18	الطرائق الرئيسية في كيمياء الكم الحاسوبية	12-1
18	الميكانيك الجزيئي MM	1-12-1
18	الداينمك الجزيئي MD	2-12-1

19	الطرق شبه التجريبية	3-12-1
20	الطرق التامة	4-12-1
21	نظرية دوال الكثافة DFT	5-12-1
22	ميكانيك الكم ومعادلة شرودنجر	13-1
23	طريقة التغيير	14-1
25	حساب طاقة الأنظمة متعددة الإلكترونات	15-1
25	نموذج هارترلي	1-15-1
27	نموذج هارترلي فوك	2-15-1
29	حلول معادلة شرودنجر للأنظمة الجزيئية	16-1
29	تقريب بورن اوينهايمر	1-16-1
30	معادلات روتهان - هال	2-16-1
33	دراسات سابقة في حسابات ميكانيك الكم لبعض قواعد شف	17-1
35	الهدف من الدراسة الحالية	

الصفحة	الفصل الثاني طرق الحساب	التسلسل
36	تقريب الاهمال المتوسط المعدل على التداخلات التفاضلية	1-2
39	نموذج الميندو/3- فورسيز	2-2
40	طريقة نظرية دوال الكثافة	3-2
43	برامجيات الحساب ومواصفات الحاسبة المستخدمة	4-2

الصفحة	الفصل الثالث النتائج والمناقشة	التسلسل
46	تمهيد	1-3
49	الشكل الهندسي المتوازن	2-3
49	أطوال الأواصر	1-2-3
51	زوايا التآصر	2-2-3
52	الشحنات والكثافات الإلكترونية	3-3
54	ترددات الاهتزاز وشد الامتصاص في منطقة الأشعة تحت الحمراء	4-3
76	حرارة التكوين القياسية ( $\Delta H_f^0$ )	5-3
76	عزم ثنائي القطب ( $\mu$ )	6-3
77	الطاقات المدارية	7-3
77	طاقة اعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO)	1-7-3
77	طاقة أوطاً مدار جزيئي فارغ (LUMO)	2-7-3
78	جهد التأين (IP)	3-7-3
78	اللفة الإلكترونية (EA)	4-7-3
78	الكهروسلبية ( $EN$ )	5-7-3
79	الإلكتروفيلية ( $G$ )	6-7-3
79	فجوة الطاقة ( $E_{(HOMO-LUMO)}$ )	7-7-3
79	الصلابة الكيميائية ( $\eta$ )	8-7-3



80	الدوال الترموديناميكية	8-3
81	دالة الطاقة الداخلية القياسية ( $U^0$ )	1-8-3
81	دالة الانتالبي القياسية ( $H^0$ )	2-8-3
81	دالة الانتروبي القياسية ( $S^0$ )	3-8-3
81	دالة طاقة كبس القياسية ( $G^0$ )	4-8-3
82	دالة طاقة هيلمهولتز القياسية ( $A^0$ )	5-8-3
83	الاستنتاجات	
84	التوصيات	

## فائمة المحتويات

الصفحة	عنوان الجدول	رقم الجدول
3	بعض الثوابت الفيزيائية للمركبات المدروسة	1-1
50	اطوال الاواصر (بالانكستروم) للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة وبالاستعانة بالنتائج المستحصلة من مطيافية حيود الاشعة السينية	1-3
52	زوايا التأصر (بالدرجة) للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	2-3
53	الشحنات والكثافات الالكترونية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	3-3
56	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	4-3
76	عزم ثنائي القطب وحرارة التكوين للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	5-3
77	طاقة اعلى مدار جزيئي ممتلئ بالالكترونات وأوطأ مدار غير مشغول للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	6-3
78	قيم جهد التأين والالفة الالكترونية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	7-3
79	الكهروسلبية والالكتروفيلية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	8-3
80	الصلابة الكيميائية وفجوة الطاقة للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	9-3
80	الثوابت الدورانية ( $RX, RY, RZ$ ) و عزم القصور الذاتي ( $IX, IY, IZ$ ) والمستحصلة من نتائج الحساب لبرنامج MOPAC 97 وبطريقة MINDO/3	10-3
81	الطاقة الداخلية وطاقة الانتالبي القياسيين للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	11-3
82	طاقة كبس و الانتروبي القياسي للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	12-3
82	طاقة هيلمهولتز القياسية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	13-3

## قائمة الأشكال

الصفحة	عنوان الشكل	رقم الشكل
2	التأصر الهيدروجيني الضمني والبيني للهيدرازونات	1-1
5	المفاهيم المستعملة لحساب زوايا التأصر	2-1
26	التنافر بين الإلكترون في الموقع $i$ والإلكترون في الموقع $j$	3-1
48	التركيب الفراغي للمركبات المدروسة مع ترقيم الذرات ونوعها	1-3
60	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	2-3
63	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ [حامض البنزويك(4-ثنائي مثيل امينو- بنزلدين)-هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	3-3
66	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ [(4- نايتروبنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	4-3
69	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ [(4- ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	5-3
72	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ [(2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	6-3
75	بعض الأشكال الوصفة للأنماط الاهتزازية لـ [(2,4- ثنائي ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	7-3

## قائمة الملاحق

الصفحة	عنوان الجدول	رقم الجدول
1	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	1
2	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [حامض البنزويك(4-ثنائي مثيل امينو- بنزلدين)-هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	2
4	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [(4- نايتروبنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	3
5	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [(4- ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	4
7	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [(2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	5
9	اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [(2,4- ثنائي ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	6
10	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	7
11	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ [حامض البنزويك(4-ثنائي مثيل امينو- بنزلدين)-هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	8
12	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ [(4- نايتروبنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	9

12	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ[(4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	10
13	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ[(2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	11
14	الشحنات والكثافات الالكترونية لـ[(4,2-ثنائي ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	12
15	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	13
16	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [حامض البنزويك (4-ثنائي مثيل امينو- بنزلدين)-هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	14
19	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ[(4-نايتروبنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	15
22	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ[(4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	16
25	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ[(2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	17
28	ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ[(4,2-ثنائي ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة	18
32	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة ( Benzoic Acid Hydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	19
33	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (4- Benzoic acid dimethylamino-benzylidene)-hydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	20
35	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (4-E)-N'-(nitrobenzylidene)benzohydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	21
37	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (4-E)-N'-(methoxybenzylidene)benzohydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	22
39	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (E)-N'-(2-hydroxy-(4-methoxybenzylidene)benzohydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	23
41	بعض قيم المشاركة الجزئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (E)-N'-(2,4-dimethoxybenzylidene)benzohydrazide) ففي الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mind/3-Forces)	24



HOMO	Highest Occupied Molecular Orbital	أعلى مدار جزيئي مشغول
LUMO	Lowest Unoccupied Molecular Orbital	أوطأ مدار جزيئي غير مشغول
NMR	Nuclear Magnetic Resonance	رنين نووي مغناطيسي
IR	Infrared Radiation	الأشعة تحت الحمراء
UV-Vis	Ultraviolet-visible	الأشعة فوق البنفسجية - المرئية
St.	Stretching	المط الانبساطي
Sym.	Symmetric	متماثل
Asym.	Asymmetric	غير متماثل
$\delta$	In-plane bending vibration	الاهتزاز الانحنائي عند مستوى الجزيئة
$\gamma$	Out of plane bending vibration	الاهتزاز الانحنائي خارج مستوى الجزيئة
$\rho$	Rocking	تأرجحية
sciss.	Scissoring	مقصية
$\tau$	Twisting	التوائية
$\omega$	Wagging	ارتجاجية
$\Gamma_i$	IR integrated intensity	شدة الامتصاص التكاملية لأشعة IR
$\nu_{st.}$	Stretching vibration frequency	تردد الاهتزاز المطي أو الانبساطي
Abs.	Absorbance	الامتصاص الخطي
APP	Atomic Partial Participation	المساهمة الجزيئة الذرية
$\alpha$	Molar absorption coefficient	معامل الامتصاص المولاري
$\Delta H_f^0$	Standard heat of formation	حرارة التكوين القياسية
SCF	Self-Consistent Field	المجال القائم لذاته
LACO	Linear Combination of Atomic Orbitals	الاتحاد الخطي للمدارات الذرية
MO	Molecular Orbital	المدار الجزيئي
IP	Ionization Potential	جهد التأين
Ea	Electron affinity	الالفة الالكترونية
$\chi$	Electronegativity	الكهروسلبية
$\eta$	Chemical hardness	الصلابة الكيميائية
$\sigma$	Electrophilicity	الالكتروفيلية
QSAR	Quantitative structure-activity relationships	العلاقة الكمية بين التركيب والفعالية
QSPR	Quantitative structure-property relationships	العلاقة بين التركيب والخاصية
DFT	Density Functional Theory	نظرية دوال الكثافة
MM	Molecular Mechanic	الميكانيك الجزيئي
MD	Molecular Dynamics	الداينمك الجزيئي

HF	Hartree-Fock	هارتري – فوك
PAHs	Poly Aromatic Hydrocarbons	الهيدروكربونات الاروماتية المتعددة
CSS	Close-Shell System	الأنظمة ذات المدارات المغلقة
OSS	Open-Shell System	الأنظمة ذات المدارات المفتوحة
RH	Roothaan-Hall	روتهان – هال
RHF	Spin Restricted Hartree-Fock	هارتري- فوك للبرم المقيد
UHF	Spin Un Restricted Hartree-Fock	هارتري- فوك للبرم غير المقيد
MINDO	Modified intermediate neglect of differential overlap	الإهمال المتوسط المعدل للتداخل التفاضلي
$U_{ii}$	One center electron attraction energy	طاقة انجذاب الإلكترون في الذرة نفسها
$g_{ik}$	One center electron repulsion energy	طاقة تنافر إلكترونين يعودان إلى الذرة نفسها
$h_{ik}$	One center exchange energy	طاقة التبادل الترابطية لإلكترونين يعودان إلى الذرة نفسها
$F_{ij}$	Element (i,j) in force constant matrix (F)	العنصر (i,j) في مصفوفة ثوابت القوى (F)
$H_{ij}^c$	core exchange resonance Integrals	طاقة الرنين الاتحادية
$S_{ij}$	Overlap Integral	تكامل التداخل
$E_c$	Inter core repulsion energy	طاقة تنافر الالباب
$E_x$	exchange energy	طاقة التبادل
$E_{xc}$	exchange-correlation energy	طاقة التبادل الترابطية
LDA	Local Density Approximation	تقريب الكثافة المكانية
LSDA	Local Spin Density Approximation	تقريب الكثافة المكانية في الانظمة عالية البرم
HEG	Homogenous Electron Gas	الالكترونون الغازي المتجانس
B3LYP	Beake 3-parameter Lee-Yang-Parr	دوال مدمجة هجينة

### Conversion Coefficients

### معاملات التحويل

$$\text{\AA} = 1 \times 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ Hartree or (1 a.u.)} = 627.5095 \text{ kcal/mol} = 2625.5 \text{ KJ/mol} = 27.212 \text{ ev}$$

$$1 \text{ Kcal/mol} = 4.184 \text{ KJ/mol}$$

الفصل الأول  
الاول

المقدمة  
المقدمة

## Introduction

## المقدمة

## 1-1 قواعد شف

*Schiff's bases*

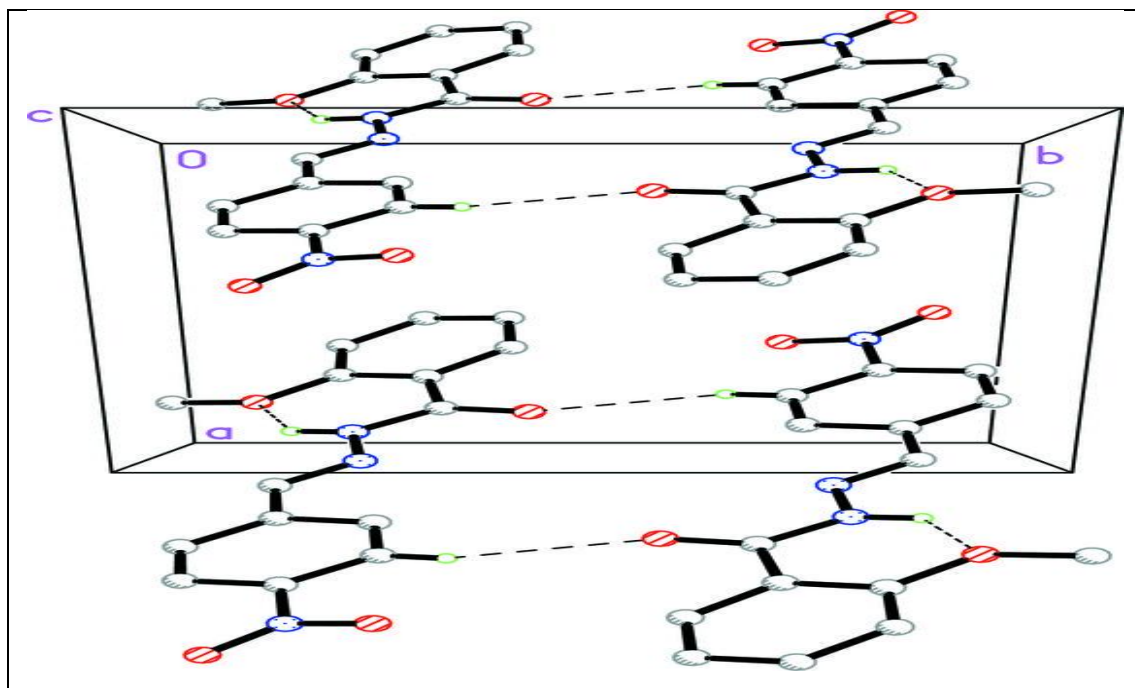
المركبات الحاوية على مجموعة (-C=N-) ازوميثين azomethine<sup>(1)</sup> والتي حضرت اول مرة من قبل العالم هوغو شف Hugo Schiff عام 1864<sup>(2)</sup>، وذلك من تكاثف بسيط بين الالديهيدات او الكيتونات مع الامينات الاولية الالفاتية او الاروماتية<sup>(3)</sup>، أخذت تنافس مجموعة الكربونيل (C=O) بوصفها مجموعة عاملة وفي بعض الاحيان تفوقها من حيث قابليتها على تكوين المعقدات<sup>(4)</sup>، وفي حال تكاثف هيدرازيدات الحوامض مع الديهيدات في مذيبات ملائمة فإن نواتج التكثيف تدعى الهيدرازونات Hydrazones<sup>(5)</sup> وتمتاز الهيدرازونات المشتقة من الديهيدات اروماتية باستقراريتها العالية نتيجة الرنين resonance مقارنة مع تلك المشتقة من الديهيدات اليفاتية<sup>(6)</sup>.

إن خواص و استقراريه قواعد شف لها صلة وثيقة جدا في الغالب بمركبات الكربونيل أو الأمينات سواء كانت اليفاتية أو اروماتية، فقد اتصفت قواعد شف المحضرة من تفاعل الأمينات أو الحوامض الامينية الالفاتية أو الاروماتية مع الالديهيدات أو الكيتونات الاروماتية بحالتها الصلبة، في حين تتميز القواعد المحضرة من مشتقات اليفاتية بحالتها السائلة<sup>(7,3)</sup>.  
تعتمد إستقرارية قواعد شف على نوع الأمين ونوع الالديهيد أو الكيتون المستعمل حيث تكون قواعد شف المحضرة من الالديهيد الأروماتي والأمين الاروماتي الأكثر إستقرارية بين قواعد شف ويعزى سبب ذلك إلى زيادة الإستقرارية بالرنين<sup>(6,8)</sup>.

وقد أشارت الدراسات النظرية والطيفية إلى أن كلاً من جزيئة قاعدة شف المشتقة من البنزالديهيد أو مشتقاته مع الانلين أو مشتقاته المعوضة على كل من حلقتي البنزالديهيد أو الانلين أو كلاهما هي جزيئة غير مستوية حيث أن حلقة البنزين المرتبطة بذرة النتروجين تكون خارج مستوى بقية الجزيئة<sup>(9)</sup>. وتبين أن المعوضات الموجودة على جزيئة البنزالديهيد هي أكثر تأثيراً على التوزيع الالكتروني من المعوضات الموجودة على حلقة الانلين، كما دلت الدراسات<sup>(10)</sup> على عدم استواء حلقتي قواعد شف المشتقة من السالسليديهيد Salisaldehyde والبنزايل أمين Benzyl amine.

إن قاعدة شف لها القدرة على تكوين أوامر هيدروجينية ضمنية Intramolecular Hydrogen Bonds تكون تلك الأوامر بين المزدوج الإلكتروني لمجموعة الأزوميثين و مجموعة الهيدروكسيل أو المجاميع التي لها القابلية على تكوين الأصرة الهيدروجينية الضمنية في الموقع أورثو على جزء حلقة البنزين داخل نفس الجزيئة وضمن هيئة حلقية (11) ، كما إن لقواعد شف القدرة على تكوين أوامر هيدروجينية بينية Intermolecular بين المزدوج الإلكتروني لمجموعة الأزوميثين والمركبات أو المذيبات الهيدروكسيلية (9) .

كما بينت الدراسات (12-16) ان قواعد شف المشتقة من 2 - هيدروكسي بنزلهيدريد تعاني نوعا من التحول الأيزومري Tautomerism من نوع Keto-enol tautomerism بسبب التآصر الهيدروجيني الضمني Intramolecular hydrogen bonding ؛ ومن ثم انتقال الهيدروجين من المجموعة الفينولية إلى ذرة نيتروجين مجموعة الأزوميثين proton transfer وقد شخصت من خلال مطيافية H-NMR و I.R و UV-Vis و  $C^{13}$ -NMR وتحاليل الأشعة السينية X-Rays لهذه القواعد ومعقداتها ، وقد لوحظ تأثر هذه الأطياف واطوال الأوامر والزوايا المحصورة بينها . إن الأصرة الضمنية الهيدروجينية أكثر استقراراً عندما توجد في هيئة حلقية سداسية تحتوي على أصرتين مزدوجتين وكذلك في هيئة حلقية خماسية تحتوي على أصرة مزدوجة واحدة ، وبصورة عامة تعد الأصرة الهيدروجينية الضمنية أقوى من الأصرة الهيدروجينية البينية كما في شكل 1-1 .

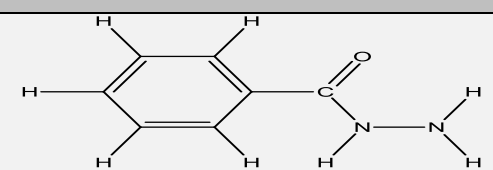
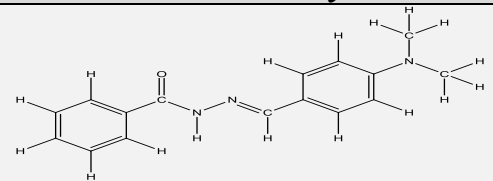
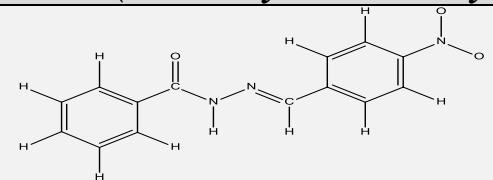
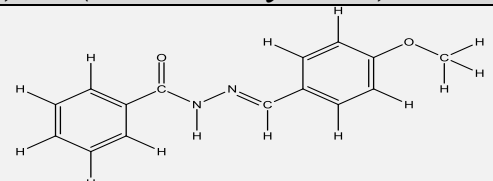
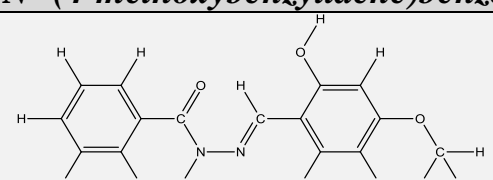
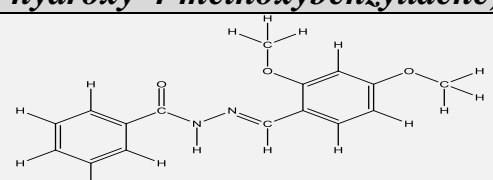


شكل 1-1 : التآصر الهيدروجيني الضمني والبيني للهيدرازونات



وقد بينت الدراسات (17) أن مجموعة الازوميثين  $C=N$  تسلك كمجموعة واهبة ومكتسبة للإلكترونات Donor – Acceptor حيث تعد مستقبلة عن طريق الأوربيتان  $\pi$  للأصرة مزدوجة ، وواهبة عن طريق مزدوج الإلكترونات غير الأصرية لذرة النتروجين لهذه المجموعة . ونستعرض فيما يأتي بعض الثوابت الفيزيائية لحامض البنزويك هيدرازيد و الهيدرازونات المشتقة منه (9,10,16,18,19,20,21) والتي تمت دراستها في هذا البحث جدول 1-1 .

جدول 1-1 : بعض الثوابت الفيزيائية للمركبات

No.	Molecules	Structure Molecules	M. P. °C	Colour	Ref.
I	$C_7H_8N_2O$ (136 g/mol)		112	Powder beige	(18)
<b>Benzohydrazide</b>					
II	$C_{16}H_{17}N_3O$ (267 g/mol)		150	Block red	(19)
<b>Benzoic acid(4-dimethylamino-benzylidene)-hydrazide</b>					
III	$C_{14}H_{11}N_3O_3$ (269 g/mol)		212	Block yellow	(16)
<b>(E)-N'-(4-nitrobenzylidene)benzohydrazide</b>					
IV	$C_{15}H_{14}N_2O_2$ (254 g/mol)		220	Block colourless	(20)
<b>(E)-N'-(4-methoxybenzylidene)benzohydrazide</b>					
V	$C_{15}H_{14}N_2O_3$ (270 g/mol)		246	Block white	(9)
<b>(E)-N'-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)benzohydrazide</b>					
VI	$C_{16}H_{16}N_2O_3$ (284 g/mol)		232	Block yellow	(10)
<b>(E)-N'-(2,4-dimethoxybenzylidene)benzohydrazide</b>					

## 1-2 تطبيقات قواعد شف

## Application of Schiff bases

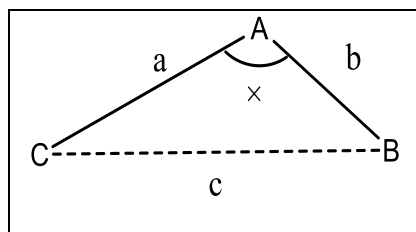
إن تكاثف الأمينات مع الالديهيدات أو الكيتونات لتحضير قواعد شف لها العديد من التطبيقات في مجال الكيمياء العضوية كطرق التحضير ، والتشخيص ، والكشف عن الالديهيدات و الكيتونات ، ومن ذرة النتروجين لمجموعة الازوميثين تتأصر كليكاندات أحادية أو ثنائية أو ثلاثية السن مهمة وترتبط مع الفلزات الانتقالية (22) ، وقد استخدم البعض منها كأصباغ وللبعض الآخر خاصية البلورات السائلة (23) ، وقواعد شف ذات الخاصية المضادة للفطريات Antifungal والمضادة للبكتريا Antibacterial (24) والمضادة للأورام الخبيثة Antitumour ، والأيمينات ذات فعالية قوية مضادة للسرطان Anticancer (25) . فضلاً عن الكثير من الأنشطة العلاجية والتطبيقات المتنوعة الأخرى (26-28) .

## 1-3 اطوال الاواصر وزوايا التأصر Bond lengths and bond angels

طول الاصرة هو البعد بين نواتين لذرتين مرتبطين معاً ، ويستعمل بشكل افتراضي لأنه لا توجد في الحقيقة جزيئات ساكنة ، وحتى في درجة الصفر المطلق تمتلك بعض الجزيئات مقدراً من الطاقة ، وهي طاقة نقطة الصفر zero point energy ضمن المستوى الاهتزازي الارضي ، لذا كل الذرات ضمن الجزيئة تمتلك بعض الحركة (29) ، وهذا يسبب تغيراً طفيفاً في اطوال الأواصر .

ولم يكن هنالك فهم حقيقي للأصرة الكيميائية في الفترة التي سبقت ميكانيك الكم ، اي ان المفهوم الحقيقي للأصرة الكيميائية اعتمد على ميكانيك الكم (30,31) ، حيث ان وصف الاصرة الكيميائية يجب ان يستند على فهم طبيعة حركة الالكترونات في الجزيئات (32) ، فمن خلال معادلة العالم الالمانى شرودنكر Erwin Schrödinger عام 1926 والمسماة "معادلة شرودنكر" وحينما تم ايجاد حلولها لذرة الهيدروجين تم التوصل لما يعرف اليوم بالاوربيتال orbital من حل المعادلة الموجية لإلكترون واحد (33) ، حيث وصف ميكانيك الكم الالكترون على انه يتموقع على شكل غيمة الكترونية electron cloud والتي تدل على احتمالية تواجد الالكترون ، وليس كمدار حول النواة بمسار ثابت (34) ، ومن الدالة الموجية التي تصف احتمالية توزيع الالكترونات حول انوية الذرات للأوربيتالات الذرية (35) امكن معرفة المستويات الطاقية (36) . ان التفاعلات الكيميائية والتي تتضمن كسر او تكوين اصرة تعتمد على توزيع الكثافة الالكترونية والتي تتوافق مع الأصرة الكيميائية (37) ، اي ان الجزيئات تتكون بفعل ارتباط الذرات بالقوى الداخلية للجزيئة وهذه الارتباطات تمتلك مقدارا كافيا من الإستقرارية (38-39)

زوايا التآصر وهي تقع بين ثلاث ذرات وأصرتين على الأقل ، وقد تم حسابها بالاعتماد على قانون الجيب تمام او مبرهنة الكاشي نسبة الى العالم غياث الدين الكاشي (40) ، ومبرهنته تربط الضلع الثالث لمثلث "بعدم اشتراط ان يكون قائم الزاوية " بالضلعين الاخرين وجيب تمام الزاوية المكونة لهما . نعتبر المثلث بالشكل (2-1)



$$c^2 = a^2 + b^2 - 2ab (\cos x) \dots\dots\dots 1-1$$

$$X = \cos^{-1} \left( \frac{a^2+b^2-c^2}{2ab} \right) \dots\dots\dots 1-2$$

شكل 2-1 : المفاهيم المستعملة

لحساب زوايا التآصر

### 4 - 1 الشحنت والكثافات الالكترونية Charge and Electron densities

الشحنة الذرية لا يمكن تقديرها عملياً لأنها لا تقابل اي صفة فيزيائية فريدة (41,39) ، والسبب هو استحالة فصل الكترولونات الذرات ضمن الجزيئة وتقديرها منفردة لكل ذرة (42) ، في حين ان الكثافة الالكترونية الكلية صفة فيزيائية حقيقية ويمكن حسابها او قياسها وذلك بواسطة الطرق العملية مثل X-ray (43) .

استعملنا في دراستنا هذه توزيع موليكان للشحنت الذرية Mullikan Population Analysis ، وهو واحد من اقدم تحاليل التوزيع ولايزال اوسعهم استخداماً والذي افترض مبدئه العالم موليكان (41) رياضياً ، يعد تحليل موليكان من ابسط ما يمكن ، وعلى الرغم من ذلك فهو الاوسع استعمالاً في البرمجيات الالكترونية (44) ، يعطى الرمز  $q_A$  للشحنة الذرية للذرة A اما الوصف الرياضي له فهو كالآتي (45) :

$$q_A = N_A - Z_A \dots\dots\dots 1-3$$

حيث  $Z_A$  الشحنة النووية للذرة A ،  $N_A$  التوزيع الالكتروني على الذرة A والذي يحسب من تكامل الكثافة الالكترونية فوق الذرة A .

ان قيمة الشحنة الذرية تعتمد على الطريقة المتبعة لتعريف الذرات والاوربيتالات المستعملة في الحساب (46) ، لهذه الاسباب فان القيم العددية الفعلية للشحنة الذرية يجب ان لا تؤخذ حرفياً وهناك بعض الفوائد من حسابها (47) مثل اعطاء معلومات حول ميل التوزيع الالكتروني داخل الجزيئة او تفيد في المقارنة النوعية (48) وفي بيان موقع الشحنة الالكترونية في الجزيئة وفي

حالاتها التاصرية او المضادة للتأصر<sup>(49)</sup>، كذلك استخدمت الشحنة الذرية كخاصية غالباً ما استخدمت للمناقشة او لتبرير البناء التركيبي للجزيئة وتباين الفعالية<sup>(50)</sup>.

## Vibration spectra

## 1- 5 أطياف الاهتزاز

### 1-5-1 حساب اطياف الاهتزاز الجزيئي Calculation of molecular vibration spectra

لحساب ترددات الاهتزاز الجزيئية اهمية كبيرة جدا في الكيمياء اذ انها تمكّن من تعيين الانماط الاهتزازية المقاسة تجريبيا وبشكل مطلق كما تساعد في تعيين الشكل الهندسي وانتشار الذرات فراغيا في الجزيئة عندما يقترن ذلك الانتشار مع الترددات المقاسة.

كانت للدراسة النظرية وما أستنبطته من اساليب منذ ثلاثينيات القرن الماضي الأثر المهم في مناقشة الحركة الاهتزازية ووصفها بشكل سهل ، وهناك طريقتان رئيستان لدراسة الاطياف الجزيئية لأي جزيئة مهما كانت معقدة هما : الأولى : أطياف رامان وتعتمد على مبدأ التشتت للأشعة الكهرومغناطيسية ، والثانية : ترددات الأشعة تحت الحمراء والتي تعتمد على تداخل الأشعة الكهرومغناطيسية مع جزيئات المادة حيث تمتص الجزيئة الأشعة تحت الحمراء وتحول طاقتها الى طاقة اهتزازية للذرات المكونة للجزيئة . وطبقا لقوانين الكم فإن هذه الطاقة تكون مكتمه ( تأخذ قيم محددة تبعا لمستويات الطاقة ) وعندها تنتقل الجزيئة من مستوى الى اخر اعلى<sup>(51)</sup>.

عندما تمتلك الجزيئة N من الذرات، إذن يكون لها 3N من درجات الحرية ، إن للجزيئة حرية الحركة باتجاه الإحداثيات الديكارتية الثلاث ، وتستخدم هذه الحركة الانتقالية ثلاث من درجات الحرية تاركة 3N-3 ، كما وللجزيئة حركة دورانية حول المحاور العمودية الثلاثة مستخدمة ثلاث من الدرجات الحرية تاركة 3N-6 من درجات الحرية للحركة الاهتزازية بالنسبة للجزيئة غير الخطية ، و 3N-5 للجزيئة الخطية لأنها تمتلك حركة دورانية حول محور الأصرة<sup>(52,53)</sup>.

إن ابط الجزيئات هي الجزيئات ثنائية الذرة حيث تتكون من ذرتين تربط بينهما أصرة كيميائية وتهتز ان على طول المحور البيني للنواتين ، وللتقريب يمكن ان نتخيل إن كتل النواتين هما  $m_1$  و  $m_2$  على التوالي والأصرة بينهما تمثل نابض حلزوني عديم الكتلة تهتز ان توافقا نسبة الى مركز الكتلة<sup>(54)</sup> ، ووفقاً لقانون هوك فإن القوة المعيدة فيها هي :

$$F = - kx \dots\dots\dots 1-4$$

حيث  $k$ : ثابت القوة ،  $x$ : الإزاحة عن مركز الكتلة (طول الأصرة المستقرة) .

إن كلا الكتلتين يمكن أن تنتقلان معا ككتلة واحدة فعالة effective mass ويرمز لها  $\mu$

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \rightarrow \mu = \frac{m_1.m_2}{m_1+m_2} \dots\dots\dots 1-5$$

أو تهتز توافقياً نسبة إلى مركز كتلتها بتردد يعطى بالمعادلة :

$$v = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} \dots\dots\dots 1-6$$

ومن المعادلة يمكن ان نلاحظ إن التردد يزداد مع قوة الاصرة  $k$  ويقل بزيادة الكتلة الفعالة  $\mu$  (49).

تكون الأواصر التساهمية في جزيئة متعددة الذرات غير وثيقة الترابط للذرات بعضها ببعض وبذلك تكون قادرة على الاهتزاز من مواقع راحتها ، زيادة على ذلك نجد إن زوايا الأصرة محاطة بمختلف الأواصر المستقلة لذرتين والتي تؤدي إلى طريقة نوعية فعالة لوصف الاهتزازات في الجزيئات متعددة الذرات . فكان عمل ولسون E.B.Wilson (55) في وصف المعادلة التجريدية للحركة الاهتزازية وعمل هيرزبيرك G.Herzberg (56) في استخدام نظرية المجموعة التماثلية Group theory له الاثر الكبير في مناقشة اطياف الاهتزاز الجزيئية ، وبما إن كل نوع من الأواصر الكيميائية له قيم مختلفة لثوابت القوة والكتل المختزلة ، لذلك يحدث امتصاص الإشعاع ضمن مدى من الترددات ، وإن الأشكال الأساسية الفعالة للاهتزاز يمكن تقسيمها على عدة اصناف (58,57) .

### 2-5-1 حساب شدة امتصاص الأشعة تحت الحمراء Calculation of IR absorption intensities

يعطي حساب شدة امتصاص الأشعة تحت الحمراء معلومات حول توزيع الشحنة والطبيعة القطبية للأواصر (59) ، كما وتعتبر شدة الامتصاص التوسع المنطقي للممتصية المولارية الظاهرة وهي قياس المساحة تحت الحزمة . استخدم ويلسون وويلز E.B. Wilson and A.J. Wells (60) المعادلة الآتية لحساب شدة الامتصاص التكاملية  $\Gamma_i$  :

$$\Gamma_i = \int \alpha dv = \frac{1}{c.L} \int \ln \left( \frac{I_0}{I} \right) dv \dots\dots\dots 1-7$$

حيث  $\alpha$  معامل الامتصاص absorption coefficient و  $c$  التركيز المولاري و  $L$  طول المسار البصري Optical length وتمثل  $I_0$  و  $I$  شدة الضوء الساقط والنافذ من الخلية على التوالي .

اما كراوفورد B.Crawford<sup>(61)</sup> فأعطى التعبير الآتي لشدة الامتصاص التكاملية :

$$\Gamma_i = \int_{\text{band}} \left( \frac{\alpha}{v} \right) dv = \frac{1}{c.L} \int_{\text{band}} \ln \left( \frac{I_0}{I} \right) d \ln v \dots\dots\dots 1-8$$

اما اوفريند J.Overend<sup>(62)</sup> فقد اعطى الصيغة الآتية لحساب الشدة التكاملية :

$$\Gamma_i = \frac{N_\pi}{3c^2 \omega_i (2.303)} \left( \frac{dP}{dQ_i} \right)^2 \dots\dots\dots 1-9$$

حيث  $N$  عدد افوكادرو،  $c$  سرعة الضوء ،  $p$  عامل عزم ذي القطبين ،  $Q$  الاحداثي الديكارتي ،  $i$  نوع النمط الاهتزازي ،  $\omega$  تردد الاهتزاز،  $\left( \frac{\partial P}{\partial Q_i} \right)$  التغير في عزم ثنائي القطبين وبثلاث محاور

$$\left( \frac{dP}{dQ_i} \right)^2 = \left( \frac{\partial P^x}{\partial Q_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial P^y}{\partial Q_i} \right)^2 + \left( \frac{\partial P^z}{\partial Q_i} \right)^2 \dots\dots\dots 1-10$$

ويمكن الحصول على قيمة الامتصاص الخطي بوحدة (km/mol) بالاعتماد على شدة الامتصاص التكاملية  $\Gamma_i$  بوحدة (cm<sup>2</sup>/mol) من خلال المعادلة الآتية :

$$A_i = \Gamma_i \bar{\nu}_o \times 10^{-10} \dots\dots\dots 1-11$$

حيث ( $\bar{\nu}_o$ ) هو تردد الامتصاص المقاس بوحدة (cm<sup>-1</sup>) .

### 3-5-1 حساب مشاركة الذرات في كل تردد اهتزازي (APP) Atomic

#### Partial Participation

تم حساب المشاركة الجزئية لكل ذرة في نمط الاهتزاز  $K$  التي يرمز لها بـ APP على وفق المعادلة الآتية<sup>(63)</sup> :

$$APP = \left( L_{ik}^A \right)_x^2 + \left( L_{ik}^A \right)_y^2 + \left( L_{ik}^A \right)_z^2 \dots\dots\dots 1-12$$

حيث يشير الرمز  $A$  إلى الذرة و الرمز  $L_{ik}$  إلى المتجهات الذاتية eigenvectors .

## 4-5-1 رسم الأنماط الاهتزازية

## The Modes of Vibration

تم رسم أنماط الاهتزاز للجزيئة وذلك عن طريق حساب مقدار متجه الإزاحة  $R_K^A$  للذرة A وثلاث اتجاهات X , Y , Z في نمط الاهتزاز k وكما يلي (63) :

$$R_k^A = \sqrt{(L_{ik}^A)_x^2 X_i^2 + (L_{ik}^A)_y^2 Y_i^2 + (L_{ik}^A)_z^2 Z_i^2} \dots\dots\dots 1-13$$

وبالاستعانة ببرنامج DRAWMOL تم رسم الأشكال الواصفة لكل تردد ولجميع الأنماط وتحديد كون النمط الاهتزازي يقع عند مستوى الجزيئة أو خارجها وذلك من خلال تغير قيم الزوايا  $\alpha$  ,  $\beta$  حيث استخدمت قيم الزوايا 90,0 لتحديد الأنماط العمودية والقيم 10,0 لتحديد الأنماط الاهتزازية عند مستوى الجزيئة وكان مقياس الرسم هو 0.4 .

## 5-5-1 معاملات التقييس لترددات الأنماط الاهتزازية

## Scaling Coefficients

إن الأنماط الاهتزازية ولاسيما التي تمثل مط الأواصر تكون قيمتها المحسوبة عادة اكبر من القيم العملية بسبب اللاتوافقية لهذا تم استخدام معاملات التقييس لغرض تقليل الخطأ في قيمة التردد المحسوبة (64) ، ومن معاملات التقييس التي تم اعتمادها هي 0.134 لـ CHst. و 0.16 لـ CH<sub>2</sub>s.st. و 0.056 لـ NHst. و 0.134 لـ CH<sub>2</sub>as.st. و 0.09 لـ CH<sub>bend</sub> وغيرها .

6-1 حرارة التكوين القياسية ( $\Delta H_f^0$ )

## Standard heat of formations

هي التغير في الحرارة المصاحب لتكوين 1مول من مركب من العناصر المكونة له، ويحسب من الفرق بين حرارة التكوين للمتفاعلات والنواتج (37,48,65)، حيث يكون التغير في حرارة التفاعل كما يأتي :

$$\Delta H_f^{\circ} \text{ Reaction} = \Delta H_f^{\circ} \text{ product} - \Delta H_f^{\circ} \text{ reactant} \dots\dots\dots 1-14$$

فإذا كان مجموع حرارة التكوين القياسية للنواتج أقل من مجموع حرارة التكوين القياسية للمواد الداخلة في التفاعل فستكون حرارة التكوين القياسية للتفاعل سالبة الإشارة ، وهذا يعني أن التفاعل يكون باعثاً للحرارة ، وبالعكس إذا كانت حرارة التكوين القياسية للتفاعل موجبة الإشارة فهذا معناه أن التفاعل يكون ممتصا للحرارة ، أي لا يسير مثل هذا التفاعل إلا بتسخينه من الخارج .



ومن جداول قيم حرارات التكوين القياسية للعناصر وبعض المركبات وبأستخدام دوال الديناميك الحرارية الإحصائية امكن حساب حرارة التكوين القياسية من خلال طرائق ميكانيك الكم ، والتي تبدي توافقاً جيداً مع المقاس عملياً<sup>(66)</sup> .

## 7-1 عزم ثنائي القطب ( $\mu$ ) Dipole moment

عزم ثنائي القطب هو خاصية للجزيئة<sup>(67)</sup>، ويعتبر كعامل لعدم التساوي في اقتسام الكثافة الالكترونية في الجزيئة<sup>(50,42)</sup> ، وهناك نوعان من عزم ثنائي القطب يجب التمييز بينهما هما عزم ثنائي القطب المغناطيسي وعزم ثنائي القطب الالكتروني ، والأخير هو ما تناولته بهذه الدراسة والذي هو محصلة كل عزوم ثنائي القطب الالكترونية في الجزيئة<sup>(68,67,65)</sup> ، ويمكن أن يُمثّل بسهم يُحدّد من المراكز السالبة الى المراكز الموجبة في الجزيئة<sup>(69,44)</sup> ، لعزم ثنائي القطب لجزيئة ما دور مركزي في وصف احتماليات الانتقال في المطيافية الالكترونية وتحت الحمراء<sup>(58)</sup> ، وهناك بعض البرمجيات تمكن من حساب عزم ثنائي القطب<sup>(48,43)</sup> ، والمستندة على طرائق ميكانيك الكم مثل DFT, Ab initio, Semiempirical والتي تكون حساباتها ذات موثوقية في حساب عزم ثنائي القطب<sup>(68,44)</sup> ، وبشكل عام يمكن حساب عزم ثنائي القطب من العلاقة الآتية :

$$\mu = q \times r \dots\dots\dots 1-15$$

حيث  $\mu$  = عزم ثنائي القطب ،  $q$  = الشحنة المفصولة ،  $r$  = المسافة الفاصلة للشحن .

وفي التالي تقريب وفق ميكانيك الكم يستعمل لحساب عزم ثنائي القطب<sup>(70,67)</sup> .

$$\mu = (n | \hat{\mu} | n) \dots\dots\dots 1-16$$

حيث  $\mu$  = معدل قيم عزم ثنائي القطب ،  $\hat{\mu}$  = عامل<sup>(71)</sup> وهو :

$$\hat{\mu} = \sum_i r_i + \sum_A Z_A R_A \dots\dots\dots 1-17$$

وفيه  $r_i$  = متجه يدل على الالكترونات و  $R_A$  النوية  $A$  و  $Z_A$  شحنة النوية  $A$

وحدة عزم ثنائي القطب هي الديباي Debye والمسماة من اسم العالم Peter Debye<sup>(72,67)</sup> .

$$\text{Debye} = \text{Coulomb} \times \text{Meter} \quad , \quad 1 \text{ Debye} = 3.33564 \times 10^{-30} \text{ C m}$$

## Orbital Energies

## 8-1 الطاقات المدارية

إن أغلب الطرق الحديثة المستخدمة في حساب طاقات مستويات المدارات الجزيئية تعتمد على نظرية المجال القائم لذاته (45) ، حيث تُمثل الدالة الموجية الكلية (المدارات الجزيئية) بحاصل جمع خطي للدوال الذرية (المدارات الذرية) ويسمى هذا اختصاراً SCF-LCAO-MO (73) .

ومن معرفة طاقات أعلى مدار جزيئي مشغول HOMO و طاقة اوطأ مدار جزيئي فارغ LUMO يمكن دراسة خواص مهمة جداً للجزيئات (42) ، فهي المسؤولة عن تحديد الفعالية الكيميائية ومدى استقرارية الجزيئات ، حيث ان الطاقة العالية لأعلى مدار جزيئي مشغول تدفع بالجزيئة الى جهد تأكسد عالي (قابلية اعلى لفقدان الإلكترونات) (74) ، أما الطاقة العالية لأوطأ مدار غير مشغول بالإلكترونات يعني انخفاض قابلية الجزيئة على اكتساب الإلكترونات (جهد اختزال واطئ) ، ومن فرق الطاقة بين أعلى مدار مشغول وأوطأ مدار فارغ نحصل على فجوة الطاقة (76,75) التي تفسر الخواص الطيفية من حيث طاقات الانتقال الالكترونية في مطيافية المنطقة المرئية وفوق البنفسجية UV/Vis. Spectroscopy ، اذا اعتبرنا ان الطاقة المسلطة على الجزيئة لأثارها هي فوتونات الضوء (طول موجي) فيمكن حساب (77) مقدار اقل قيمة للطول الموجي اللازم للإثارة من معرفة قيمة الفرق الطاقى للمدارين من المعادلة.

$$E = \frac{hc}{\lambda} \dots\dots\dots 1-18$$

وبحسب نظرية كوبمان وبالاعتماد على طاقات المدارات الجزيئية يمكن التوصل الى العديد من الخواص الفيزيائية المهمة في دراسة الجزيئة (41) : جهد التأين و الالفة الالكترونية و الكهروسلبية (78) و صلابة وليونة الجزيئة (79) و الالكتروفيلية .

## Ionization Potential

## 1-8-1 جهد التأين (IP)

ويمثل اقل مقدار من الطاقة التي يحتاجها النظام ليتأين بنزع الكترون منه (80) ، فكلما كانت طاقة جهد التأين كبيرة كان تأين العنصر اصعب . وحسب نظرية كوبمان فإنه :

$$IP = - E_{(HOMO)} \dots\dots\dots 1-19$$

أي يمكن اعتبار طاقة جهد التأين هي نفسها طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول بالإلكترونات وبعكس الاشارة (81) . كما يمكن حساب جهد تأين النظام من الفرق بين طاقة النظام الفاقد

لإلكترون في الحالة الأرضية مع طاقة النظام المتعادل أيضا في الحالة الأرضية (82) كما في المعادلة :

$$IP (A^n) = U_{tot} (A^{n-1}) - U_{tot} (A^n) \dots\dots\dots 1-20$$

حيث :  $U_{tot}$  : تمثل طاقة النظام الكلية ،  $n$  : عدد الكترونات النظام .

### 2-8-1 الالفة الالكترونية (EA) *Electron Affinity*

هي كمية الطاقة المصاحبة لعملية اكتساب النظام لإلكترون اضافي أو اكثر لتكوين ايون سالب ، ولأي نظام بزيادة الالفة الالكترونية تزداد قابليته لاكتساب الالكترونات وتزداد قيمة طاقة الالفة الالكترونية له (83) ، ويعزى هذا التفسير الى اعتبار ان الالفة الالكترونية هي الفرق في الطاقة الكلية للنظام المتعادل A في الحالة الأرضية (84) والطاقة الكلية للنظام بحالته الايونية السالبة  $A^{-1}$  في الحالة الأرضية ايضا :

$$EA (A^n) = U_{tot} (A^n) - U_{tot} (A^{n+1}) \dots\dots\dots 1-21$$

حيث :  $U_{tot}$ : تمثل طاقة النظام الكلية ،  $n$ : عدد الكترونات النظام .

وحسب نظرية كوبمان فإنه يمكن حساب الالفة الالكترونية لنظام معين من معرفة قيمة طاقة اوطاً مدار جزيئي فارغ (LUMO) بعكس الاشارة (85) حيث :

$$EA = - E_{(LUMO)} \dots\dots\dots 1-22$$

### 3-8-1 الكهروسلبية (EN) *Electronegativity*

وصفت الكهروسلبية عام 1932 من قبل العالم لينوس باولنك Linus Pauling (86) على انها : " قابلية الذرة في الجزيئة على جذب الالكترونات نحوها " (87) ، وهناك الكثير من الطرق التجريبية لقياس الكهروسلبية بهذه الطريقة منها الكيمياء الحرارية . أما ما اعتمدناه في دراستنا النظرية للجزيئات هو ماجاء به العالم مولكان Mullikan عام 1934 وهو مانصه ان الكهروسلبية هي " المتوسط العددي لجهد التأين والالفة الالكترونية " (88) وكما في المعادلة :

$$EN = \frac{IP+Ea}{2} \dots\dots\dots 1-23$$

### Chemical hardness

### 4-8-1 الصلابة الكيميائية ( $\eta$ )

هي احدى الصفات الفيزيائية المهمة لدراسة الجزيئة التي من خلالها امكنا قياس المقاومة الميكانيكية للتشوه (74) والصلابة البنوية للجزيئة ، اي انها تقيس مقاومة التغير في التوزيع الالكتروني في مجموعة من النوى والالكترونات (89) كما في المعادلة :

$$\eta = \frac{IP-Ea}{2} \dots\dots\dots 1-24$$

يمكن الاشارة من خلال المعادلة اعلاه الى انه للصلابة الكيميائية علاقة وثيقة (90) مع قيمة فجوة الطاقة Energy Gab وبالتالي مع قيم الطاقات المدارية ، حيث بزيادة فجوة الطاقة تزداد الصلابة الكيميائية للجزيئة . مما يوحي الى اساليب جديدة في فهم وتفسير الحالة الصلبة (91) .

### Electrophilicity

### 5-8-1 الالكتروفيلية ( $G$ )

إن ماجاء به العالم بار وجماعته (78) Parr and co-workers عام 1999 من تعبير رياضي لوصف الالكتروفيلية الآتي :

$$G = \frac{\chi^2}{2\eta} = \frac{(IP+Ea)^2}{4(IP-Ea)} \dots\dots\dots 1-25$$

يدعم من اهمية معرفة الطاقات المدارية والتي تم التوصل من خلالها الى كم من المعلومات لدراسة الجزيئة (92) وخاصة ان الالكتروفيلية تعرف على انها : المقدره الاجمالية لجذب الالكترونات نحو الجزيئة (93) ، ويمكن معرفة المواقع الفعالة والتي تجذب الالكترونات نحوها هي تلك الذرات في المواقع الفعالة للجزيئة والتي تحمل كثافة الكترونية منخفضة .

## Thermodynamic Functions

## 9-1 الدوال الترموديناميكية

باعتبار النظام معزول وتحت ظروف قياسية من ضغط 1 جو ودرجة حرارة 298,15 كلفن ولمول واحد من غاز مثالي تم حساب الدوال الترموديناميكية القياسية  $U^0$  و  $H^0$  و  $S^0$  و  $A^0$  و  $G^0$  بواسطة المعادلات الاحصائية وبإهمال الطاقة الالكترونية ( المختزنة في الاواصر الكيميائية ) والطاقة النووية ( الموجودة في نوى الذرات ) لصغر قيمهما .

تمت الاستعانة بترددات الاهتزاز Vibrational Frequencies والثوابت الدورانية  $A, B, C$  Rotational Constant, لحساب عزم القصور الذاتي Moment of inertia وبتلاث محاور ولكل جزيئة  $I_a, I_b, I_c$  .

والمعادلات الاحصائية التي استخدمت لحساب الدوال الترموديناميكية القياسية (63,53,50,41) .

$$U^0_{total} = U^0_{trans} + U^0_{rot} + U^0_{vib} + U^0_{elec} + U^0_{nucl} \dots\dots\dots 1-26$$

$$U^0_{trans} = 1.5RT \dots\dots\dots 1-27$$

$$U^0_{rot} = 1.5RT \dots\dots\dots 1-28$$

$$U^0_{vib} = \sum_{i=1}^{3N-6} \frac{RTX_i}{e^{X_i} - 1} \dots\dots\dots 1-29$$

$$X_i = \frac{h\nu}{kT} = \frac{1.44\nu}{T} \dots\dots\dots 1-30$$

$$H^0 = U^0_{total} + RT \dots\dots\dots 1-31$$

$$S^0_{total} = S^0_{trans} + S^0_{rot} + S^0_{vib} + S^0_{elec} + S^0_{nucl} \dots\dots\dots 1-32$$

$$S^0_{trans} = R \left[ \frac{5}{2} + \ln \frac{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}} RT}{N_0 h^2} \right] \dots\dots\dots 1-33$$

$$S^0_{rot} = R \left[ \frac{3}{2} + \ln \frac{8\pi^2 (8\pi^2 I_X I_Y I_Z)^{\frac{1}{2}} (kT)^{\frac{3}{2}}}{\sigma h^3} \right] \dots\dots\dots 1-34$$

$$S_{vib}^0 = R \sum_{i=1}^{3N-6} \left[ \frac{X_i}{e^{X_i} - 1} - \ln(1 - e^{-X_i}) \right] \dots\dots\dots 1-35$$

$$G^0 = H^0 - TS^0 \dots\dots\dots 1-36$$

$$A^0 = U^0 - TS^0 \dots\dots\dots 1-37$$

إذ أن :

$U^0$ : الطاقة الداخلية القياسية و  $H^0$ : الإنثالبي القياسية و  $S^0$ : الانتروبي القياسية و  $G^0$ : دالة كسب القياسية و  $A^0$ : دالة هيلمهولتز القياسية و  $I$ : عزم القصور الذاتي و  $\sigma$ : عدد التماثل للجزيء و  $N_0$ : عدد أفوكادرو و  $k$ : ثابت بولتزمان و  $R$ : ثابت الغازات العام و  $T$ : درجة الحرارة بالكلفن.

### Theoretical Chemistry

### 10-1 الكيمياء النظرية

هي الوصف الرياضي للكيمياء<sup>(94)</sup> ، وتتعلق بالطرائق الرياضية مع القوانين الأساسية في الفيزياء لوصف ودراسة الأنظمة والمشاكل الكيميائية<sup>(50)</sup> ، وتعتمد الكيمياء النظرية في حساباتها على ميكانيك الكم<sup>(95)</sup> ، وتعتبر واحدة من أسرع الميادين تقدماً بين العلوم الطبيعية اليوم<sup>(96)</sup> ، منحت جائزة نوبل في الكيمياء لعام 2013 لكل من Michael Levitt و Martin Karplus و Arie Warshel لتطويرهم نماذج متعددة النطاقات لأنظمة كيميائية معقدة ، حيث نجحوا في اطار درسهم للتفاعلات الكيميائية، في الجمع بين الفيزياء الكلاسيكية النيوتنية والفيزياء الكمية التي تحكمها قواعد مختلفة تماماً .

كما وقد نال جائزة نوبل للكيمياء في عام 1998 كلاً من John A.Pople و Walter Kohn لتطوير الأول طرقة في كيمياء الكم ، والثاني لتطويره نظرية دوال الكثافة DFT<sup>(97,73)</sup> ، وهذا يبين أهمية هذا المجال في علم الكيمياء .<sup>(99)</sup>

## 11-1 الكيمياء الحاسوبية

## Computational Chemistry

هي أحد فروع الكيمياء النظرية والتي نقلت التجارب الكيميائية الى عالم الفضاء الالكتروني ، بالاعتماد على وصف ميكانيك الكم للجزيئات (100) ، وتستعمل لذلك ما يعرف التقريب approaches أو approximations (100,94) ، وهو وصف رياضي يستخدم في النظريات لوصف وحل الظواهر الكيميائية (33) . إن للحواسيب دوراً مهماً في الاستعمالات التطبيقية لعموم طرق الكيمياء النظرية (44) اذ عادلته اهمية انبوبة الاختبار عند الكيميائيين مع اهمية الكمبيوتر في التكهن بنتائج التجارب التقليدية ، ففي مطلع الستينيات من القرن الماضي اصبحت الحواسيب متيسرة للأغراض العلمية (101) ، وتعتمد الكيمياء الحاسوبية على تكنولوجيا الحاسوب ، ويعطي الكيميائيون اهتماماً لهذه التكنولوجيا ، وخصوصاً فيما يتعلق بوحدة الخزن data storage وسرعة المعالج processor speed و اجهزة العرض graphical display وكذلك البرمجيات programs software (102) . النتائج المهمة التي يتم التنبؤ بها تعتمد بشكل كبير على الامكانية والاستيعابية الحاسوبية (101) لحل المسائل الكيميائية بأسرع وقت و اقل كلفة ، حيث ازداد عدد الابحاث المنشورة في السنين الأخيرة والتي نتجت باستعمال الكيمياء الحاسوبية (102) .

اما استعمالات الكيمياء الحاسوبية فهي كثيرة ، فتستعمل لحساب بنية المركبات structures ، وكذلك التنبؤ بواحد او اكثر من الخواص الجزيئية (104,103) ، كذلك تستعمل للفهم والتنبؤ بسلوك الانظمة الجزيئية (95) ، ولتوضيح ظواهرها الملاحظة ، كذلك يمكن ان تطبق لدراسة حالات تتعلق بمجالات مثل الجزيئات الحيوية biomolecules (105) ، مثل تحديد الاصناف البروتينية وتفسير انطواء البروتين وغيرها (38) و البوليمرات polymers (105) و اكتشاف الأدوية (105,94,38) و في المواد اللاعضوية inorganic materials مثل الاغشية الرقيقة thin film والمواد الباعثة ضوئياً light emitting materials والموصلات الفائقة superconductor والعوامل الحفازة catalysts والمواد المقاومة للمغطة magneto resistances (108,105) ، البطاريات القابلة لإعادة الشحن (106) . كذلك تستخدم الكيمياء الحاسوبية في حل المشاكل الكيميائية الطبية (45) و تأثيرات الـ DNA (107) و التأثير بين الايونات والبروتينات (108) وفي دراسة والتنبؤ بفاعلية التطهير الجيني mutagenicity (38) والمواد النانوية nano scale (109) و التنبؤ بخواص زيوت التشحيم (110) وفي ايجاد الطاقة والبنية للجزيئات واستمثال البنية الفراغية لها geometry optimization وفي ايجاد تراكيب وطاقات الحالات الانتقالية و طاقات الاواصر و الشحنات الذرية و العزم متعدد الاقطاب multipole moment و ميكانيكيات

التفاعلات والخواص الطيفية<sup>(111)</sup> و الجهد الالكتروستاتيكي electrostatic potential و ترددات الاهتزاز<sup>(112)</sup> و طيف رامان و طيف الرنين النووي المغناطيسي NMR و الخواص المغناطيسية و الاستقطابية و مسالك التفاعلات و جهود التأين و الالفة الالكترونية و الكهروسلبية و الالكتروفيلية و صلابة وليونة الجزيئة<sup>(89,74)</sup> و الحالة الانتقالية و الخواص السطحية للجزيئات و molecular surface و الفعالية الكيميائية و التأثير بين المادة الاساس والانزيم<sup>(45)</sup> ، كذلك تستخدم لفهم العلاقة بين التركيب البنائي للجزيئات و بين الوظيفة في الانظمة البيولوجية<sup>(113)</sup> وغيرها .

الكيمياء الحاسوبية بينت ماهية الكيمياء<sup>(68)</sup> ، أسهمت بشكل كبير في الوصول الى فهم العلاقة بين التركيب والخواص للمركبات من خلال ما توفره حالياً من بيانات و مفاهيم مهمة ، تصنف الكيمياء الحاسوبية الى اكثر من صنف ، واحد من اهمها ما يعرف بـ الكيمومعلوماتية informatics Chemoinformatics والذي يمكن تعريفه على انه فرع من الكيمياء النظرية<sup>(114)</sup> ، والذي يطبق التقنيات الحاسوبية التي تعالج المعلومات الكيميائية بشكل الكتروني<sup>(115)</sup> ، بأستعمال الطرائق المعلوماتية لغرض حل المشاكل الكيميائية<sup>(116,117,118)</sup> ، وبتعبير آخر تطبيق تكنولوجيا المعلومات في الكيمياء<sup>(119)</sup> ، حيث يتم إكتشاف وترجمة ومعالجة المعلومات الكيميائية ، الكيمومعلوماتية تختلف عن مبدأ التجريب والملاحظة<sup>(116)</sup> ، حيث تتجنب كل الخطوات المتبعة فيه كونها تعتمد على قاعدة بيانات هائلة العدد للمركبات ، ففي الوقت الحاضر هنالك اكثر من 41 مليون مركب معروف ، وكل هذه المركبات لها خواص كيميائية و فيزيائية و بيولوجية ، هذه الخواص تستخدم و تطبق في حسابات الكيمومعلوماتية في ثلاث مجالات رئيسية<sup>(116)</sup> ، وكالاتي :

1. في العلاقة الكمية بين التركيب والفعالية (QSAR) Quantitative structure-activity relationships او العلاقة بين التركيب والخاصية (QSPR) Quantitative structure-property relationships والمستندة على وصف كيمياء الكم<sup>(120)</sup> ، وتستعمل لغرض التنبؤ بالتركيب الثلاثي 3D structure والفعالية البيولوجية<sup>(121,122)</sup> ، خصوصاً للتنبؤ بتصميم المركبات ذات الفعالية الصيدلانية<sup>(45,96)</sup> .
2. تصميم وتخطيط التفاعلات الكيميائية وتفاعلات التخليق الكيميائية<sup>(116)</sup> .
3. في بيان وتوضيح التراكيب ، ذلك انها ذات فائدة خاصة في توفير المعلومات في مجال الاطياف مثل IR , NMR and Mass spectra



**The Main Methods in****12-1 الطرائق الرئيسية في كيمياء****Computational Quantum Chemistry****الكم الحاسوبية**

إن أبرز الطرائق المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية هي :

Molecular Mechanic	1- الميكانيك الجزيئي MM
Molecular Dynamics	2- الديناميك الجزيئي MD
Semiempirical Methods	3- الطرق الشبه تجريبية
Ab Initio Methods	4- الطرق التامة
Density Functional Theory	5- نظرية دوال الكثافة DFT

**Molecular Mechanic****1-12-1 الميكانيك الجزيئي MM**

هي ليست من طرائق ميكانيك الكم حيث انها لا تستعمل عامل هاملتون او الدالة الموجية بدلاً عن ذلك فهي تصور الجزيئة على انها مجموعة من الكرات ترتبط ببعضها بنوابض springs والتي هي الاواصر ، ويعبر عن مقدار الطاقة للجزيئة من خلال مفهوم ثوابت القوى للتمدد والانحناء لتلك النوابض ، ويتكرر الحساب لحالات التمدد والانحناء لتلك النوابض لغاية الوصول الى اوطأ طاقة (123,73).

**Molecular Dynamics****2-12-1 الديناميك الجزيئي MD**

يستند الديناميك الجزيئي على فكرة محاكاة الظروف التجريبية للذرات او الجزيئات والمعتمدة على الزمن مثل الحركة والاهتزاز والداينمك ومسار التفاعل (124,95) ، وحسابات الداينمك الجزيئية والتي بدأت لأول مرة عام 1957 من قبل العالمين ونرايت والدير Alder و Wainwright (126,125) هذه الحسابات والتي هي تطبيق لقوانين الحركة على الجزيئات (126,112,73) ، مثل القانون الثاني لنيوتن (124) ، او معادلة شرودنكر المعتمدة على الزمن (127) ، وتطبق هذه القوانين في كل نقطة من نقاط التغاير الديناميكية (124) ، حيث يصف الداينمك الجزيئي العلاقة بين القوى المؤثرة على الدقائق ونتيجة تسارع تلك الدقائق (128) ، ومن تطبيقات الداينمك الجزيئي محاكاة حركة الانزيم ، كتغير شكله عند الارتباط بالمادة الاساس ، او حركة مجاميع جزيئات الماء حول الجزيئة المذابة ، وكذلك يستخدم في محاكاة الانظمة المتضمنة

DNA و البلورات السائلة liquid crystals و البوليمرات و الاغشية الدهنية lipid membranes<sup>(126)</sup> .

### Semiempirical Methods

### 1-12-3 الطرق شبه التجريبية

سميت كذلك لأنها تأخذ بعض القيم التجريبية مثل الطاقة وحرارة التكوين والاشكال البنوية وتربطها بالطرائق الرياضية للحصول على افضل القيم كنتاج من الحساب<sup>(73)</sup> ، كما وأهملت الالكترونات الداخلية للنظام أي إن عدد الالكترونات المحسوبة تمثل عدد الالكترونات التكافؤ فقط وهذا بدوره يختزل وقت الحساب بشكل كبير لكونه اختصر العديد من التكاملات .

الطرق الشبه تجريبية واحدة من طرق حساب ميكانيكا الكم المهمة لحل معادلة شرودنكر التي اعتمدت على معادلات هارترلي- فوك و روتهان- هال مع بعض التقريبات للتكاملات وإهمال بعض حدود عامل هاملتون لوصف خصائص الالكترون في الذرة أو الجزيئة<sup>(129)</sup> ، حيث كانت حسابات ميكانيك الكم محدودة الاستخدام بسبب التعقيدات التي تلازم حل معادلة شرودنكر لهذه الأنظمة حيث تتطلب الوقت الطويل جداً وكذلك وجود حاسبة ذات ذاكرة كبيرة ، لذا لجأ الباحثون في كيمياء الكم إلى سبل التقريب لمعالجة هذه المعضلة فعمدوا على إجراء تقريب على التكاملات الواردة ضمن معالجة روتهان - هال ، حيث استخدموا بعض القيم التجريبية وكانت أول محاولة للتقريب من قبل العالم الأمريكي موليكين R.S. Mulliken<sup>(130)</sup> على تكامل التناظر ضمن معالجة روتهان - هال .

ولكون هذه الطرق تمتاز بالبساطة والسهولة مقارنةً بطرق الحساب التام كما ذكر أعلاه فإنها تستخدم بشكل واسع جداً في دراسة التركيب الالكتروني والكثير من الخصائص للجزيئات والصفات الفيزيائية<sup>(112,96)</sup> كحساب الكثافة الالكترونية والشكل الهندسي<sup>(122,73)</sup> والألفة الالكترونية وحرارة التكوين والدوال الترموديناميكية كما وتستخدم هذه الطريقة بصورة أوسع من طرق الحساب التام لدراسة المركبات ذات الوزن الجزيئي العالي<sup>(100,71)</sup> .

وهناك العديد من الطرق الشبه التجريبية ومن هذه الطرق ما يلي : *Hückel, PPP, CNDO, INDO, ZINDO, SINDO1, PRDDO, AM1, PM3, TNDO, SAM1*<sup>(50,43,41)</sup> , *ZDO, NDDO, PCILO, MNDO, MINDO, [MINDO1, 2, 3(FORCES)]*<sup>(121,94,73)</sup>

## 4-12-1 الطرق التامة

## Ab Initio Methods

وتعني "ab initio" باللاتينية "منذ البداية" (131,123,43,41) ، وتدل الحسابات وفقها على اعتماديتها على المبادئ والقواعد الأساسية حيث اننا نبدأ من الثوابت الفيزيائية مثل (سرعة الضوء و ثابت بلانك و شحنة وكتلة الالكترون و موقع وكتلة النواة) لحساب الخصائص الجزيئية والحصول على البنية الالكترونية للذرات او الجزيئات المحسوبة بطرائق مختلفة (123) ، والتي تقوم على اساسيات ميكانيك الكم ، اي حل معادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن للجزيئة (132,43) ، وتستخدم معادلات هارترى - فوك و روتهان - هول دون اهمال او تقريب اي من التكاملات او اي حد من حدود عامل هاملتون (95) ، لهذا نجد ان طرق الحساب التام ab initio تفتقر دائما بالتعقيد وخصوصا للجزيئات الكبير . نشأت هذه الطريقة في خمسينيات القرن الماضي (133) ، وإن ابسط نموذج للـ ab initio هي طرق هارترى فوك HF (134) ، والتي تفترض ان الالكترون يتأثر بمعدل تأثر كل الالكترونات الاخرى (131) ، ومن نقاط الضعف فيها انها تعالج كل الكترون بشكل منفصل ، واخفاها المتعلق بإهمال طاقة الترابط الالكترونية electron correlation energy (136,135,112,103,96) ، فيما عدا المتطلب من تلك الطاقة لقاعدة باولي للاستبعاد فانه يتم حسابها وفق هذه الطرق (138,137) ، ولكنها تعتبر طريقة مهمة جداً ، ذلك انها فتحت الطريق للنظريات المتطورة والتي عُنيت بحل معادلة شرودنكر بحلول اكثر دقة (131) ، فضلاً عن اعطائها نتائج مفيدة في مجال المقارنة بالنتائج المستحصلة من التجريب ، او تفيد في اعطاء معلومات عن الجزيئات التي لم تحضر بعد (41) .

وقد دُرست طاقة الترابط الالكترونية وحدد هذا الخلل في حساب الطاقة حيث تم وصفه من قبل العالم لودن Löwdin (139) ، تحدث طاقة الترابط بسبب حركة الالكترون بأسلوب متناسق مع باقي الالكترونات ، لذا فإن الطاقة الفعلية تكون اقل من الطاقة المحسوبة وفق طريقة HF (135) ، حيث يمكن معرفة مقدار طاقة الترابط من خلال الفرق بين الطاقة التجريبية المضبوطة والطاقة وفق طريقة HF (141,140,139,132,131,96) .

$$E_{\text{corr}} = E_{\text{exact}} - E_{\text{HF}} \dots\dots\dots 1-38$$

تصنف طرق الحساب التام للتركيب الالكتروني في الغالب الى ثلاثة طرق : طرق هارترى- فوك Hartree- Fock methods وطرق ما بعد هارترى فوك Post- Hartree- Fock methods وطرق متعددة المصدر Multi- reference methods ، والنوع الابسط من بين

هذه الانواع الثلاثة هي طريقة هارتري فوك HF. ومثال للطرق ما بعد هارتري- فوك Post Hartree- Fock methods هو نظرية تشويش مولر بلسست Moller Plesset (50,41).

## 5-12-1 نظرية دوال الكثافة DFT Density Functional Theory

تشابه الـ ab initio والـ semiempirical باستعمالها لمعادلة شرودنكر في الحساب ، ولكن تختلف عنهم في اعتمادها الكثافة الالكترونية ( $\rho$ ) electron density لحساب الطاقة الالكترونية (43,41) ، والتراكيب للجزيئة بدقة عالية (142) ، وتُفضل حسابات DFT على حسابات HF لأنها تحسب طاقة الترابط الالكترونية (137) ، واصبحت بديلاً عنها حيث يمكن من خلالها حساب الجزيئات الكبيرة ، ولأنظمة الحالة الصلبة (46) ، حيث يمكنها حساب نظام عدد ذراته بحدود 1000 ذرة (143) ، لذا اصبحت الطريقة الشائعة لحساب الخواص للحالة الارضية للجزيئات الكبيرة ، وبسبب دقتها اصبحت البديل عن طرائق ab initio .

نظرية دوال الكثافة تعتبر نظاماً ناجحاً للتطبيق على الانظمة الالكترونية ، واصبح لها فاعلية متزايدة في كيمياء الكم (144,41) لمعالجتها مشاكل واسعة في الكيمياء ، حيث انها تعطي فهماً للفعالية الكيميائية (145) ، واصبحت الطريقة القياسية لدراسة التوزيع الالكتروني والطاقات للحالة الارضية للأنظمة متعددة الالكترونات (138) ، لذا تستعمل في الحساب في الكيمياء ، الفيزياء ، علم المواد ، وفي عدة فروع في الهندسة (146) . تستعمل هذه النظرية في حسابات الانظمة الجزيئية المعقدة ، ولاقت نجاحاً واسعاً في التنبؤ بمختلف خواص الجزيئات خاصة بما له علاقة بالمركبات ذات الصلة بالتقنيات الاحيائية والصناعات الدوائية (147,45) ، والادوية ، حيث استعملت لمعالجة المشاكل البيولوجية والكيميائية (148,147,113) و تستعمل لدراسة الموصلات الفائقة ، واشباه الموصلات ، العوازل الكهربائية ، المعادن ، التآصر القوي في الانظمة التساهمية والايونية ، التآصر الضعيف في قوى فاندر فالز van der Waals ، البوليمرات ، اكاسيد العناصر الانتقالية ، اكاسيد ونايتريدات العناصر الترابية (149) ، دراسة التأثيرات بين الجزيئات ، مثل التآصر الهيدروجيني (150,39,15) ، والشد السطحي ، واكاسيد المعادن ، وبشكل رائع لأكاسيد الحديد magnetite ، وفي المركبات التناسقية والعضوية الفلزية (151) ، وبشكل واسع جداً في دراسات المجال الصناعي (152) ، وفي دراسة الاسلاك والالواح السليكونية (153) ، وحساب طاقات المواد المتفجرة والتراكيب الناتجة منها في الصناعة العسكرية ، فضلاً عن الصفات المغناطيسية والعزم المغناطيسي (154) ، وطيف IR ، وطيف رامان بدقة و تطابقه مع النتائج العملية ، واطياف UV-Vis (136) و NMR ، كذلك لحساب الاناييب النانوية المتكونة من جزيئات كبيرة من

PAHs<sup>(110)</sup> ، والموائع غير المتجانسة ، وفي دراسات الفيزياء النووية<sup>(144)</sup> ، واثبتت DFT توافقية عالية مع النتائج التجريبية<sup>(149)</sup> .

تزايدت حسابات DFT بشكل هائل بعد ما اضيفت الى البرامجيات الشائعة مثل Gaussian<sup>(48)</sup> ، حيث ازداد عدد الابحاث المنشورة بصورة كبيرة خلال العقدين الاخيرين .

## 13-1 ميكانيك الكم ومعادلة شرودنكر Quantum Mechanics and Schrödinger Equation

ميكانيك الكم : هو وصف رياضي صحيح لسلوك الالكترونات ، ومن خلاله يمكن التنبؤ بصفات الذرة المنفردة او الجزيئة بدقة ، نشأ هذا العلم وتطور على يد كل من هايزنبرك Heisenberg<sup>(155)</sup> ويدعى تمثيله بميكانيك المصفوفات<sup>(156)</sup> ، وديراك Dirac<sup>(157)</sup> ويدعى وصفه بميكانيك الرموز<sup>(158)</sup> ، وشرودنكر Schrödinger<sup>(159)</sup> ويدعى تمثيله بميكانيك الموجة<sup>(33)</sup> ، والاخير الذي توصل الى معادلته معادلة شرودنكر عام 1926 ، ومنها انطلق كيمياء الكم .

معادلة شرودنكر : وتستند طرق الكيمياء الحاسوبية كلها على الحلول التقريبية لمعادلة شرودنكر غير المعتمدة على الزمن والتي صيغتها العامة<sup>(160)</sup> .

$$\underline{\underline{H}}\psi_{(x,y,z)} = E\psi_{(x,y,z)} \dots\dots\dots 1-39$$

ان هذه المعادلة تمثل معادلة القيمة الذاتية ، فالدالة الذاتية هي  $\psi$  الدالة الموجية والتي هي وصف لاحتمالية وجود الدقائق في الفراغ وتمثل المدارات الذرية والجزيئية في الكيمياء ، والقيمة الذاتية هي E التي تمثل الطاقة ، والعامل  $\underline{\underline{H}}$  هاملتون من معادلة هاملتون في الكم التقليدي (الكلاسيكي) وصيغتها<sup>(161)</sup> :

$$\underline{\underline{H}} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\underline{\underline{\nabla^2}} + \underline{\underline{V}} \dots\dots\dots 1-40$$

اذ ان  $\mu$  يمثل الكتلة المختزلة ، و  $\underline{\underline{V}}$  عامل الطاقة الكامنة ، وان  $\underline{\underline{\nabla^2}}$  هو مربع عامل لابلاس<sup>(162)</sup> :

$$\underline{\underline{\nabla^2}} = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \dots\dots\dots 1-41$$

تمثل معادلة شرودنكر معادلة تفاضلية من المرتبة الثانية ذات ثلاث متغيرات ، وقد حلت الكثير من الانظمة الصغيرة كنظام ذرة الهيدروجين والأيونات وحيدة الالكترون ( $He^+$  و  $Li^{2+}$  و  $Be^{3+}$ ) (163) وذلك باستخدام الشحنة النووية المناسبة ، حيث اشتملت على معالجة متكاملة للتركيب الالكتروني من خلال الحل الكامل والدقيق لمعادلة شرودنكر ، والحصول على دالات موجية واصفة لهذه الانظمة من حلها (164) .

اما عند تواجد اكثر من الكترون حول النواة يتسبب ذلك في ظهور قوى جديدة هي قوى التنافر بين الالكترونات بعضها مع بعض والتي ينتج عنها طاقة تتناسب عكسياً مع المسافة بين الالكترونين (165) ، كما ان الدالات الموجية العائدة لهذه الانظمة تحتوي على اكثر من ثلاث احداثيات وبذلك يتعذر حل المعادلة التفاضلية لها (123) ، وان المسافة بين الالكترونين تعتمد على ستة متغيرات هي احداثيات لكل الكترون ، فلو كانت الالكترونات مستقلة في الحركة عن بعض في النظام الواحد أي انها ذات احداثيات مستقلة عن بعض لأمكن وصف النظام الكلي بحاصل ضرب الدالات العائدة للألكترونات المنفردة (166) ، والواقع ان هذه الالكترونات تؤثر في بعضها البعض ، وعند اعتبارنا لهذا التأثير يجب حل المعادلة بالصورة الكاملة أي اعتبار الدالة الموجية الكلية الحاوية على الاحداثيات لكل الالكترونات  $\psi(x,y,z)$  وعامل هاملتون الكلي :

$$\underline{H}_{tot} \psi(x_i, y_i, z_i) = E \psi(x_i, y_i, z_i) \quad (i=1,2,3,\dots,n) \dots\dots\dots 1-42$$

ولتعذر الحصول على عامل الزخم الزاوي وعامل احدى مركبات هذا الزخم (122) ، اي انها ليست في حالة تبادل مع  $\underline{H}$  ، وتكون قيمها الذاتية ثابتة بالنسبة للوقت يتعذر حل هذه المعادلات بصورة مطلقة ويتوجب حلها بالطرق التقريبية ، وتوجد طريقتان جيدتان للحلول التقريبية لمعادلة شرودنكر معروفتان في علم ميكانيك الكم ، الاولى طريقة التغيير Variation treatment (41) والثانية طريقة التشويش Perturbation treatment (167) ، وبأستخدام التطور الحاصل في علم الحاسبات الالكترونية امكن اجراء حسابات مقبولة لهذه المعادلات بالطرق التقريبية (50) .

### Variation treatment

### 14-1 طريقة التغيير

لأجل حل معادلة القيمة الذاتية تتطلب نظرية التغيير ايجاد القيمة الصغرى لطاقة النظام بدلالة متغيرات موجودة في الدالة الذاتية له  $\psi$  ، فلو افترضنا ان المتغير هو  $a$  وان الدالة الذاتية

$\psi_{(a)}$  ، وبعد ضرب كل طرف في معادلة القيمة الذاتية 1-2 في  $\psi_{(a)}^*$  ، ثم التكامل على كل الفضاء نحصل على (168) :

$$\int \psi_{(a)}^* \underline{H} \psi_{(a)} d\nu = \int \psi_{(a)}^* E_0 \psi_{(a)} d\nu \dots\dots\dots 1-43$$

وحيث أن  $E_0$  قيمة ثابتة فيمكن إخراجها من التكامل حيث تصبح :

$$E_0 = \frac{\int \psi_{(a)}^* \underline{H} \psi_{(a)} d\nu}{\int \psi_{(a)}^* \psi_{(a)} d\nu} \dots\dots\dots 1-44$$

وإذا كانت الدالة  $\psi$  متناسقة فان مقدار المقام في المعادلة 2-6  $\int \psi_{(a)}^* \psi_{(a)} d\nu$  مساويا واحد فان  $E_0$  تعطى بالعلاقة (122) :

$$E_0 = \int \psi_{(a)}^* \underline{H} \psi_{(a)} d\nu \dots\dots\dots 1-45$$

عند ذلك يستوجب الحل ايجاد القيمة الصغرى للقيمة الذاتية (المؤلمة) هذه وان تكون قيمة مشتقتها الاولى على المتغير (a) مساوية للصفر (43) .

$$\frac{\partial E_1}{\partial a} = 0 \dots\dots\dots 1-46$$

وهكذا يمكن الحصول على اية دالة ذاتية وقيمتها الذاتية للنظام ، الا ان الطاقة الكلية الناتجة من حسابات نظرية التغيير لأي منظومة اعلى من القيمة التجريبية المقاسة او القيمة النظرية الناتجة من الحل الرياضي الصحيح لمعادلة القيمة الذاتية (169) .

وقد حُلت مسألة ذرة الهليوم بطريقة التغيير (170) ، حيث توصف الدالة الذاتية للنظام تقريباََ بحاصل ضرب دالتين شبيهتين بدالات ذرة الهيدروجين مع جعل اس كل دالة هو المتغير التفاضلي في عملية التغيير :

$$\psi = \psi_1 \cdot \psi_2 \quad (\psi_1 \text{ and } \psi_2 = e^{-a.r}) \dots\dots\dots 1-47$$

ويوصف عامل هاملتون بمجموع عملي الكترونيين في ذرة الهليوم مع عامل التنافر بين الالكترونين :

$$\underline{H} = \underline{H}_1 + \underline{H}_2 + \frac{e^2}{r_{1,2}} \dots\dots\dots 1-48$$

وبذلك تكون القيمة المؤملة لطاقة ذرة الهليوم مساوية (163) :

$$E = \frac{\int e^{-a_1 r_1} . e^{-a_2 r_2} (\underline{H}_1 + \underline{H}_2 + \frac{e^2}{r_{1,2}}) e^{-a_1 r_1} . e^{-a_2 r_2} dv}{\int e^{-a_1 r_1} . e^{-a_2 r_2} . e^{-a_1 r_1} . e^{-a_2 r_2} dv} \dots\dots\dots 1-49$$

ووفقاً لعملية التغير تجعل قيمتي المشتقة على  $a_1$  و  $a_2$  مساوية للصفر ،

$$\frac{\partial E}{\partial a_1} = \frac{\partial E}{\partial a_2} = 0 \dots\dots\dots 1-50$$

وتعتمد جودة النتائج في حسابات التغير على حسن اختيار الصيغة الابتدائية للدالة الذاتية واختيار المتغيرات فيها (171).

## 15-1 حساب طاقة الأنظمة متعددة الإلكترونات *Calculation the energy of poly-electrons system*

### 1-15-1 نموذج هارترى *Hartree model*

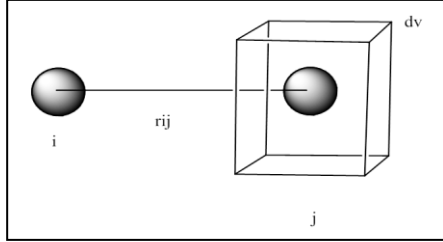
لقد طور العالم هارترى طريقته عام 1928 (172,165) بالاعتماد على نظرية التغير ، حيث وصف عامل الطاقة الكلية لنظام يحتوي على عدد من الإلكترونات (173,71) ، بجمع الطاقة الحركية والكامنة لجميع الإلكترونات في مجال النواة مع عامل كولومب الواصف لطاقات التنافر بين هذه الإلكترونات (174,71) :

$$\underline{H} = \underbrace{\sum_i \left[ \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right]}_{\text{Total energy operator}} + \underbrace{\sum_{i < j} \frac{e^2}{r_{ij}}}_{\text{Coulomb operator}} \dots\dots\dots 1-51$$

حيث يمثل الحد الاول عامل الطاقة الكلية للإلكترون الواحد  $i$  (الحد الاول الطاقة الحركية والحد الثاني الطاقة الكامنة للإلكترون حيث  $Z$  العدد الذري) ، كما ترمز  $i$  ,  $j$  الى الإلكترونات في النظام ، وبحكم تغير مواقع الإلكترونات مع تغير الزمن فأن عامل التنافر للإلكترونات لا يكون ثابتاً مع تغير الوقت (164) ، ولصعوبة الوصف الرياضي لهذه القيمة المتغيرة زمنياً اعتبر



هارتري الالكترون متواجدا في معدل مجال ، معتمدا في ذلك على حساب احتمالية تواجد الالكترون في وحدة الحجم والمساوية لمربع الدالة الموجية (175).



شكل 1-3 : التنافر بين الالكترون في الموقع

i والالكترون في الموقع j ، r\_ij البعد بينهما

وبذلك يساوي التنافر بين الالكترون في الموقع i المتواجد في الموقع i من الفراغ وجزء الالكترون j المتواجد في وحدة الحجم dv\_j القيمة الآتية (176) :

$$\frac{e^2}{r_{ij}} \varphi_i^* \cdot \varphi_j dv_j \dots\dots\dots 1-52$$

وبما ان لالكترون i بدوره احتمالية تواجد في وحدة الحجم dv\_i مساوية  $\varphi_i^* \cdot \varphi_i dv_i$  كان التنافر بين جزئي الالكترون في وحدة الحجم dv\_i و dv\_j مساوياً لنتاج ضرب دالتي الكثافة ، ولغرض حساب مجمل التنافر بين الالكترونين يؤخذ تكاملي الدالة ولجميع ابعاد المجال الهندسي (73,41) :

$$J_{ij} = \int_0^\infty \int_0^\infty \varphi_i^* \cdot \varphi_i \left( \frac{e^2}{r_{ij}} \right) \varphi_j^* \cdot \varphi_j dv_i dv_j \dots\dots\dots 1-53$$

حيث تمثل القيمة  $J_{ij}$  التنافر بين الالكترونين (i,j) الموجودين في المدارين  $\varphi_i$  و  $\varphi_j$  ، ولغرض الحصول على تنافر الالكترون i مع جميع الالكترونات في النظام نجمع تكاملات التنافر حيث تفيد اشارة اللامساواة  $i < j$  ضمان عدم تكرار احتساب طاقات التنافر مرتين فيكتب عامل هاملتون (177,165) :

$$\underline{H} = \sum_i - \left[ \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{r_i} \right] + \sum_{i < j} \sum \iint \varphi_i^* \cdot \varphi_i \left( \frac{e^2}{r_{ij}} \right) \varphi_j^* \cdot \varphi_j dv_i dv_j \dots\dots\dots 1-54$$

اما الدالة الموجية لمجموع الالكترونات فتوصف في نموذج هارترلي بحاصل ضرب دالات الالكترونات المنفردة (135) :

$$\psi = \varphi_1 \varphi_2 \varphi_3 \dots \varphi_n \dots\dots\dots 1-55$$

ثم يستمر حل المسألة بأسلوب التغيير عن طريق جعل التفاضل للقيمة المؤملة للطاقة على متغير ما تحتويه الدالة مساوياً للصفر ، ثم تحسب الصيغ الجديدة للدالة الموجية (178,164) :

$$\psi^2 = \phi_1^2 \phi_2^2 \phi_3^2 \dots \phi_n^2 \dots\dots\dots 1-56$$

والتي تُستخدم بدورها لحساب القيم الطاقية الجديدة والدالات الموجية الجديدة للنظام ، وهكذا يستمر في الحل حتى يقرب من تطابق دالتين موجيتين متتاليتين في الحساب  $\psi^n$  و  $\psi^{n-1}$  وكذلك قيمتيهما الذاتية  $E^n$  و  $E^{n-1}$  عند ذاك يكون الحل قد انتهى وتقبل الدالة الموجية  $\psi^n$  والقيمة الذاتية  $E^n$  كحل لمعادلة شرودنكر لهذا النظام (139) ، وقد اطلق هارترى على هذا الاسلوب المقرب في حل معادلة القيمة الذاتية تكراريا بأسلوب المجال القائم لذاته Self-consistent (SCF) field (41) .

### 1-15-2 نموذج هارترى فوك *The Hartree-Fock model*

ادخل العالم فوك عام 1930 بعض التعديلات على نظرية هارترى (179) ، حيث استخدم الدالات الموجية المغزلية وذات التماثل العكسي بدل الدالات التماثلية الممثلة بناتج ضرب الدوال الموجية للذرات فحسب ، وبمعنى آخر فإنه استخدم قاعدة باولي الاستثنائية ، اي انها تستخدم محددة سليتر لوصف دالة النظام الموجية وعامل هارترى لحساب الطاقة الكلية و الممثل بالمعادلة 2-13 للالكترون الواحد  $i$  ، اما العامل الكلي لجميع الالكترونات فينتج من جمع عوامل الالكترونات المنفردة معادلة 2-16 ، واتباعا لأسلوب التغيير تحسب القيمة المؤملة للعامل  $\underline{H}$  المشار اليه في المعادلة 2-16 كما يأتي (139,43) :

$$E = \frac{\iint \psi_{as}^* \underline{H} \psi_{as} d v d \sigma}{\iint \psi_{as}^* \psi_{as} d v d \sigma} \dots\dots\dots 1-57$$

حيث تمثل القيمة  $\psi_{as}$  محددة سليتر Slater determinant لهذا النظام ، فقد بين العالم الامريكي سليتر Slater بان متعدد الحدود  $\psi$  يمثل محددة ذات ابعاد  $n \times n$  تغيير الالكترونات في اسطرها والدالات الموجية ذات الالكترون الواحد في اعمدتها (165) :

$$\psi_{as} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} \psi_1^{(1)} \overline{\psi_1^{(1)}} & \psi_1^{(2)} \overline{\psi_1^{(2)}} & \psi_1^{(3)} \overline{\psi_1^{(3)}} & \dots & \psi_1^{(n)} \overline{\psi_1^{(n)}} \\ \psi_2^{(1)} \overline{\psi_2^{(1)}} & \psi_2^{(2)} \overline{\psi_2^{(2)}} & \psi_2^{(3)} \overline{\psi_2^{(3)}} & \dots & \psi_2^{(n)} \overline{\psi_2^{(n)}} \\ \psi_3^{(1)} \overline{\psi_3^{(1)}} & \psi_3^{(2)} \overline{\psi_3^{(2)}} & \psi_3^{(3)} \overline{\psi_3^{(3)}} & \dots & \psi_3^{(n)} \overline{\psi_3^{(n)}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \psi_n^{(1)} \overline{\psi_n^{(1)}} & \psi_n^{(2)} \overline{\psi_n^{(2)}} & \psi_n^{(3)} \overline{\psi_n^{(3)}} & \dots & \psi_n^{(n)} \overline{\psi_n^{(n)}} \end{vmatrix} \dots\dots\dots 1-58$$

تمثل القيمة  $\frac{1}{\sqrt{n!}}$  عامل التناسق normalization factor للدالة الموجية الكلية ، n عدد الالكترونات ، ويشير  $\psi_n$  الى ان الالكترون الموصوف فيها يكون له برم  $\alpha$  اي  $+\frac{1}{2}$  بينما يشير  $\overline{\psi_n}$  الى ان الالكترون الموصوف فيها يكون له برم  $\beta$  اي  $-\frac{1}{2}$  (50) .

في حالة كون الدالات  $\psi$  في المعادلة 2-19 متعامدة ومتناسقة ، تكون قيمة التكامل في المقام مساوية للقيمة العددية n! ، اما البسط فيأخذ الشكل الآتي عند حل تكامله (180) :

$$\iint \psi_{as}^* \underline{H} \psi_{as} d v d \sigma = n! \left( \sum_i H_{ii} + \sum_{i \langle j} \sum J_{ij} - \sum_{i \langle j} \sum^{\uparrow} K_{ij} \right) \dots\dots\dots 1-59$$

حيث تمثل  $H_{ii}$  القيمة المؤملة لمجموع الطاقتين الحركية والكامنة للالكترون في الحالة الموسومة بالدالة ذات الالكترون الواحد  $\psi_i$  (65) :

$$H_{ii} = \iint \psi_i^* (\underline{T}_i + \underline{V}_i) \psi_i d v d \sigma \dots\dots\dots 1-60$$

اما  $J_{ij}$  فتمثل طاقة التنافر Interaction للالكترون ذي الحالة  $\psi_i$  مع الالكترون آخر موسوم بالدالة  $\psi_j$  وهي القيمة المؤملة لعامل كولومب  $\frac{e^2}{r_{ij}}$  (181) :

$$J_{ij} = \iiint \psi_i^*(i) \psi_i(i) \frac{e^2}{r_{ij}} \psi_j^*(j) \psi_j(j) d v_i d v_j d \sigma_i d \sigma_j \dots\dots\dots 1-61$$

اما  $K_{ij}$  فهي طاقة التبادل Exchange بين الالكترونين متواجدين في الحالتين  $\psi_i$  و  $\psi_j$  بصورة التبادل وهي ذات إشارة معاكسة لطاقة التنافر أي أنها طاقة استقرار وتوصف بالتكامل الآتي :

$$K_{12}^{\uparrow\uparrow} = \iiint \psi_i^*(1) \psi_j(2) \frac{e^2}{r_{12}} \psi_i^*(2) \psi_j(1) d v_1 d v_2 d \sigma_1 d \sigma_2 \dots\dots\dots 1-62$$

وبسبب التعمد التناسقي للدالتين  $\sigma_1$  و  $\sigma_2$  تكون قيمة التكامل  $K_{12}$  صفراً في حالة اختلاف قيم الدالتين  $\sigma_1$  و  $\sigma_2$  ، أي ان لهذا التكامل قيمة مختلفة عن الصفر فقط في حالة تشابه حالتي الحركة المغزلية للإلكترونين 1 و 2 كما تشير الى ذلك اشارة السهمين المتوازيين ، وبذلك تكون القيمة المؤملة للطاقة الالكترونية للنظام حسب نموذج هارترى- فوك مساوية إلى (39) :

$$E = \sum_i H_{ii} + \sum_{i < j} J_{ij} - \sum_{i < j} K_{ij} \dots\dots\dots 1-63$$

حيث يرمز السهمان في الحد الاخير الى كون الإلكترونين متشابهين في الاتجاه المغزلي .

ولكون هذه الطريقة لا تختلف عن طريقة هارترى الا باستخدام محددة سليتر كدالة موجية ، لذلك فان كلتا الطريقتين تصلحان لحساب الذرات فقط .

## 16-1 حل معادلة شرودنكر للأنظمة الجزيئية

### 1-16-1 تقريب بورن اوپنهايمر *Born-Oppenheimer approximation*

لا يمكن تطبيق معادلة شرودنكر كما هي على الأنظمة الجزيئية ، حيث ان الذرات تختلف عن الجزيئات كونها تمتلك تماثلاً في المجال النووي ، لذلك وفي عام 1927 (134,42) توصل العالمان Max Born و J. Oppenheimer الى تقريبيهما والذي يعتبر مركزياً لكيمياء الكم (140) ، وهذا يعتبر القاعدة الأساسية الذي تستند عليه الكيمياء الحاسوبية كلها لأنه يعطي تصوراً عن شكل الجزيئة (182,73) ، حيث بين هذان العالمان بأن كتلة البروتونات اثقل من كتلة الإلكترونات (183,91,73,50,48,36) بحدود 1836 مرة (96,65,41) ، لذا حركة النويات ابطئ بكثير من حركة الإلكترونات (165,131,48,41) ، فقد وجد ان معدل سرعة الإلكترون في ايون جزيئة الهيدروجين بحدود 1000 مرة اسرع من سرعة البروتون (184) لذا وبسبب بطء النويات في حركتها يمكن اعتبارها ثابتة (185,165,140,132,73) ، وبما ان حركتي الإلكترونات والنويات غير معتمدتين الواحدة على الاخرى ، لذا يجب ان تكون الدالتان الموجيتان لهما غير معتمدتين على بعضهما (183,107,96) ، وبهذا فان جزء معادلة شرودنكر للإلكترونات يحل تكرارياً لمختلف احتماليات مواقع الإلكترون وبنبوت الانوية (187,186,112) ، لذا يطلق على هذا التقريب بعض الاحيان تقريب الانوية المثبتة *Clamped nuclei approximation* (185,131) ، ويسمى ايضاً بالتقريب الاديباتي *Adiabatic approximation* (188,134) ، اساس التقريب فصل معادلة

شروندكر العامة الى معادلتين واحدة للالكترونات والاخرى للنويات (112,96) ، بسبب اختلاف حركتيهما :

$$\psi_{tot.(nuclei,electron)} = \psi_{(nuclei)} \cdot \psi_{(electron)} \dots\dots\dots 1-64$$

$$\underline{H}_{tot.(nuclei,electron)} = \underline{H}_{(nuclei)} + \underline{H}_{(electron)} \dots\dots\dots 1-65$$

ان الطاقة الكلية تساوي مجموع الطاقة النووية (طاقة التنافر الكهربائي بين النوى موجبة الشحنة) والطاقة الالكترونية (189) (الطاقة الحركية والكامنة للالكترونات المتحركة في المجال الكهربائي للنوى مضافاً اليها طاقة التنافر بين الالكترونات) (187,140) :

$$E_{tot.(nuclei,electron)} = E_{(nuclei)} + E_{(electron)} \dots\dots\dots 1-66$$

$$\underline{H}_{tot.} \cdot \psi_{tot.} = E_{tot.} \cdot \psi_{tot.} \dots\dots\dots 1-67$$

$\underbrace{\hspace{10em}}_{\substack{\underline{H}_e \psi_e = \epsilon_e \psi_e \dots\dots\dots \underline{H}_n \psi_n = \epsilon_n \psi_n}}$

## Roothaan Hall equation 2-16-1 معادلات روتهان - هال

### Closed-shell systems (CSS) الأنظمة ذات المدارات المغلقة

عندما تكون الجزيئات في الحالة الارضية المستقرة تكون هيئتها او ترتيبها الإلكتروني بشكل أغلفة مغلقة ، وفي هذا النوع من الانظمة عندما يكون لدينا عدد n من الالكترونات يكون n/2 من المدارات المشغولة بالإلكترونات ، حيث إن أول من اقترح اشتقاق معادلات هارترى- فوك للأنظمة الجزيئية ذات المدارات المغلقة روتهان Roothaan عام 1951، كذلك وبصورة مستقلة في العام نفسه عمل هال Hall على اشتقاق هذه المعادلات ، نتائج الاشتقاق عرفت بمعادلات روتهان- هال Roothaan- Hall Equations حيث أعادوا صياغة معادلات هارترى- فوك ، واصبحت معادلة روتهان- هال للمدارات المغلقة بالشكل الاتي (94) :

$$\sum_{v=1}^k C_{v1} \int \underbrace{\varphi_{\mu}(1) f_{\underline{i}}(1) \varphi_{\nu}(1)}_{Fock .matrix} \partial v_1 = \epsilon_i \sum_{v=1}^K C_{v1} \int \underbrace{\varphi_{\mu}(1) \varphi_{\nu}(1)}_{Overlap .integral} \partial v_1 \dots\dots\dots 1-68$$

هناك تكاملان في المعادلة ، تكامل الطرف الأيمن يمثل تكامل التداخل Overlap integral :

$$S_{\mu\nu} = \int \varphi_{\mu}(1)\varphi_{\nu}(1)\partial v_1 \dots\dots\dots 1-69$$

حيث استطاع روتهان اعطاء وصفات بصيغة متسلسلات جبرية تعطي قيم لمصفوفة تكامل التداخل ، بدلالة مقلوب البعد بين مركزي المدارين ولأحتمالات تداخل المدارات جميعاً ، كما قام ببرمجتها (73) .

وتكامل الطرف الأيسر من المعادلة يدعى بمصفوفة فوك Fock matrix :

$$F_{\mu\nu} = \int \varphi_{\mu}(1)f_{\underline{i}}(1)\varphi_{\nu}(1)\partial v_1 \dots\dots\dots 1-70$$

حيث يمكن تقويم عناصر هذه المصفوفة بالمعادلة الآتية (41) :

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu}^{core} + \sum_{\lambda=1}^K \sum_{\sigma=1}^K P_{\lambda\sigma} \left[ \langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle - \frac{1}{2} \langle \mu\lambda | \nu\sigma \rangle \right] \dots\dots\dots 1-71$$

إذ أن :

$$H_{\mu\nu}^{core} = \int \varphi_{\mu}(1)\underline{H}^{core}(1)\varphi_{\nu}(1)\partial v_1 \dots\dots\dots 1-72$$

$$P_{\lambda\sigma} = 2 \sum_{j=1}^{n/2} C_{\lambda j} C_{\sigma j} \dots\dots\dots 1-73$$

$$\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle = \iint \varphi_{\mu}(1)\varphi_{\nu}(1) \frac{1}{r_{12}} \varphi_{\lambda}(2)\varphi_{\sigma}(2)\partial v_1\partial v_2 \dots\dots\dots 1-74$$

$$\langle \mu\lambda | \nu\sigma \rangle = \iint \varphi_{\mu}(1)\varphi_{\lambda}(1) \frac{1}{r_{12}} \varphi_{\nu}(2)\varphi_{\sigma}(2)\partial v_1\partial v_2 \dots\dots\dots 1-75$$

وتشير الرموز i و j الى المدارات الذرية ، بينما تشير  $\mu$  و  $\nu$  الى دوال القاعدة ، و  $\epsilon_i$  الى طاقة الالكترون الواحد للمدار الجزيئي  $\psi_i$  ، بينما الكمية  $\langle \mu\lambda | \nu\sigma \rangle$  و  $\langle \mu\nu | \lambda\sigma \rangle$  تمثلان تكاملات التنافر للإلكترونين ، المقدار  $P_{\lambda\sigma}$  يمثل مصفوفة الكثافة (197) .

Open-shell systems (OSS)

الأنظمة ذات المدارات المفتوحة

عالجت نظرية المدارات الجزيئية MOT مفهوم المدارات المفتوحة بطريقتين ، الاولى نظرية هارترى- فوك للبرم المقيد (RHF) Spin Restricted Hartree- Fock (188) وفي هذه الطريقة فإن مجموعة المدارات الجزيئية المفردة قد تكون محجوزة بزواج من الالكترونات او بالكترون مفرد من نوع  $\alpha$  ( كما في حالة الانظمة المكونة من خمسة الالكترونات مثلا ) ، وعليه يمكن كتابة الترتيب الالكتروني للمدارات بالشكل الاتي (189) :

$$(\psi_1\alpha)(\psi_1\beta)(\psi_2\alpha)(\psi_2\beta)(\psi_3\alpha)$$

$$\psi_i = \sum_{\mu=1}^n C_{\mu i} \varphi_{\mu} \dots\dots\dots 1-76$$

والطريقة الثانية للمعالجة هي نظرية هارترى-فوك للبرم غير المقيد Spin-Unrestricted Hartree-Fock Theory (UHF) (190) ، في هذه الطريقة تختلف المدارات المحجوزة بالالكترونات  $\alpha$  عن المدارات المحجوزة بالالكترونات  $\beta$  ، ولهذا توجد مجموعتان مميزتان من المدارات الجزيئية  $\Psi_i^\alpha$  و  $\Psi_i^\beta$  (  $i = 1,2,3,\dots, n$  ) ويمكن كتابة الترتيب الالكتروني لنظام مكون من خمسة الالكترونات مثلا بالشكل الاتي :

$$(\psi_1^\alpha\alpha)(\psi_1^\beta\beta)(\psi_2^\alpha\alpha)(\psi_2^\beta\beta)(\psi_3^\alpha\alpha)$$

اي يستبدل المدار المحجوز بالكترونين  $\Psi_1$  في الطريقة الاولى RHF بمدارين  $\Psi_i^\alpha$  و  $\Psi_i^\beta$  في طريقة UHF ، لذا فان الدالة عند RHF تعتبر حالة خاصة من الدالة UHF وعند اتباع قواعد التغيير نجد ان طاقة الاخيرة اقل من طاقة RHF ، في طريقة UHF يمكن تعريف مجموعتين من المدارات الجزيئية بمجموعتين من معاملات الجمع (191) :

$$\psi_i^\alpha = \sum_{\mu=1}^n C_{\mu i}^\alpha \varphi_{\mu} \dots\dots\dots 1-77$$

$$\psi_i^\beta = \sum_{\mu=1}^n C_{\mu i}^\beta \varphi_{\mu} \dots\dots\dots 1-78$$

*Pre-Studies on quantum  
mechanical calculation of  
some Schiff 's base*

1- 17 دراسات سابقة في حسابات  
ميكانيك الكم لبعض قواعد شف

قام الباحث حسن رشيد عبيس<sup>(192)</sup> عام 2007 بدراسة انشطار حزم امتصاص الأشعة تحت الحمراء IR ودرجات حرارة اندماجها وطاقات تحفيز انقلاب مركبات الازوميثين بأسلوب نظرية دوال الكثافة DFT/B3LYP/6-311G ، حيث توصل خلال دراسته على مركبات (N-بنزليدين مثل امين) ومشتقاتها الى تفسير انشطار حزم انحاء مجموعة الازوميثين في طيف الأشعة تحت الحمراء كنتيجة لزيادة الفرق الطاقى بين المستويات الاهتزازية لكل من الشكلين الفراغيين سيس وترانس cis و trans ، كما توصل الى ان عملية التحول الازوميري تحصل عند زيادة الفرق الطاقى بين المستويات الاهتزازية للشكلين الفراغيين سيس وترانس عند انخفاض درجة حرارة الجزيئة دون درجة حرارة اندماجها .

وقد درس الباحث سوريش وجماعته<sup>(193)</sup> عام 2013 الشكل الهندسي لجزيئة ((4,2-ثنائي هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزليدين) بنزو هيدرازيد) وتأثير انتقال الشحنة ضمناً Intramolecular على الطيف الاهتزازي بأستخدام نظرية دوال الكثافة DFT/B3LYP/6-31G(d) كما قام بدراسة طاقة اعلى مدار جزيئي ممتلئ بالإلكترونات وماقبله وأوطأ مدار فارغ وما بعده وأشكالهم المتمثلة ببرنامج كاوسين فيو ، ودراسة الكثافة الالكترونية للجزيئة واطيف اهتزاز الأشعة تحت الحمراء وطيف رامان ومقارنتها بالنتائج المستحصلة عملياً .

وقد قارن الباحث رامي مرجان وجماعته<sup>(194)</sup> عام 2013 بين نتائج حسابات نظرية دوال الكثافة (DFT/B3LYP/6-311<sup>+</sup> G(dp)) وطريقة هارترى فوك HF/6-311<sup>+</sup>G(dp) مع النتائج العملية لأشعة X لجزيئة ((1-بارا-توليل ثايلدين) فيوران-2-كاربو هيدرازيد) وذلك من حساب الشكل الهندسي المتوازن وحساب طاقات المدارات ، وكذلك تشخيص ترددات اهتزاز طيف الأشعة تحت الحمراء ، ودراسة طاقات الازومرات الناتجة من التأصر البيئي Intermolecular .

اما الباحث ديورا وجماعته<sup>(195)</sup> عام 2008 فقد تناول دراسة توتومية للازو هيدرازون في برتنة المركب امينو بنزين والمعتمد في عمله على نظرية دوال الكثافة DFT/B3LYP/6-311G(dp) ، حيث درس الشكل الهندسي المتوازن وعزم ثنائي القطب وطاقات المدارات



وعلاقتها بطيف UV ، وقد شُخص ترددات اهتزاز طيف الأشعة تحت الحمراء ومقارنتها مع النتائج العملية .

اما الدوال الترموديناميكية  $\Delta H, \Delta S, \Delta G$  ، فقد تناولها الباحث سنك وجماعته (196) عام 2013 في دراسة المركب (1,9-ثنائي((4-ايزونيكتينول)-هايدرازونوميثايل)-5-فنيل ثنائي بايروميثين) فقد استخدم نظرية دوال الكثافة DFT/B3LYP /6-31G(dp) ، فضلاً عن حساب الدوال الديناميكية فإنه قام بتشخيص ترددات الاهتزاز لطيف الأشعة تحت الحمراء ومقارنتها مع النتائج العملية .

الباحثة سعاد بن سيسي وجماعتها (197) عام 2011 قامت بدراسة التحول في التركيب بين شكل كيتو-اينول للهيدرازون ، الى شكل الاينول المقابل هيدرازين ، من خلال الشكل الهندسي المتوازن وحرارة التكوين وطاقات المدارات باستخدام برنامج موباك MOPAC والطريقة الشبه تجريبية MINDO/3 .

وقد قام الباحث فودا وجماعته (7) عام 2010 بدراسة بعض مشتقات الهيدرازون كمثبطات لتآكل الحديد في محلول 3.5% من حامض الفسفوريك المركز ، فبالاستعانة بطريقة MNDO حُسب الشكل الهندسي المتوازن وطاقات المدارات وعزم ثنائي القطب ومقارنتها مع النتائج التجريبية .

تمت دراسة جزيئة قاعدة شف البلورية السائلة (4-4-اوكتايلوكسي بنزويلوكسي)-2-هيدروكسي بنزلدين-4-ميثوكسي انلين) من قبل الباحثين وليد محسن سرحان وجماعته (198) عام 2008 باستخدام الطريقة الشبه تجريبية مندو/3-فورسيز MINDO/3-FORCES حيث تمت دراسة الشكل الهندسي المتوازن وثوابت القوى ، ودراسة انماط الاهتزازات الاساسية وحساب ترددات الاهتزاز في منطقة الأشعة تحت الحمراء وتشخيصها .

تهدف هذه الدراسة الى معالجة موضوعين ، تتجلى اهمية الاول في كيفية اختيار طريقة الحساب وما لذلك من علاقة في النتائج المطلوبة ، فإن لكل طريقة حساب مواطن ضعف وقوة ، حيث تم في هذا البحث استخدام ثلاث طرق ، اثنان منها تامة لنظرية دوال الكثافة ذات قاعدتين مختلفتين ، وطريقة ثالثة شبه تجريبية لنموذج المنود/3-فورسيز ، وقد استخدم برامج ومدخلات معينة ومختلفة لكل طريقة من هذه الطرق الثلاث المستخدمة ، وعند الاطلاع على الادبيات لم يجرى هكذا نوع من المقارنات في اية دراسة سابقة .

ونظراً للأهمية البالغة لقواعد شف في الحياة العلمية والعملية ، وبالخصوص في الجانب الطبي الصيدلاني والجانب الصناعي ، فقد تم اختيار خمس من قواعد شف مشتقة من حامض البنزويك هيدرازيد ذات مجاميع معوضه مختلفة من حيث كونها دافعة او ساحبة للالكترونات واختلاف حجم المعوض وموقع التعويض ، واجراء دراسة مفصلة عليها من حيث تأثير المعوض على خواصها الفيزيائية ؛ تضمنت دراسة الشكل الهندسي المتوازن في الحالة المستقرة ومقارنة نتائج الحساب مع التجريبية لمطيافية حيود الاشعة السينية ، والشحنات والكثافات الالكترونية ولكل ذرة وفي كل جزيئة . تم كذلك دراسة اطياف الاهتزاز وشدد الامتصاص لمنطقة الاشعة تحت الحمراء وتشخيصها بالاستعانة برسم حركات الذرات في الجزيئة عند كل نمط اهتزازي ومقارنة بعضها مع النتائج التجريبية . درست ايضا حرارة التكوين وعزم ثنائي القطب والدوال الترموديناميكية ، ومن دراسة الطاقات المدارية ومن قانون كوبمان و موليكان و بارسون وغيرهم امكننا حساب العديد من الخواص الفيزيائية المهمة للجزيئات من جهد تأين والفة الكترونية و كهروسلبية و الكتروفيلية والصلابة البنيوية للجزيئات .

الفصل الثاني

طريق الحساب

## طرق الحساب

## 1-2 تقريب الإهمال المتوسط المعدل على Modified intermediate

## التداخلات التفاضلية Neglect of Differential Overlap (MINDO)

وضع هذا الأسلوب العالم مايكل ديوار وبيرد M.J.S. Dewar and N.C. Baird عام 1969 تحت عنوان MINDO/1<sup>(199)</sup> حيث كانت القيم التجريبية المستخدمة ضمن هذه الطريقة هي في حساب حرارة التكوين ولقد وسعت هذه الطريقة لتشمل ذرات الأوكسجين والنتروجين على يد مثنى شنشل ومايكل ديوار M. J. S. Dewar and M. Shanshal<sup>(200)</sup> عام 1969 وعلى الرغم من كون هذه الطريقة تعطي نتائج مقبولة نوعاً ما لحرارة التكوين إلا إنها تعطي نتائج غير مقبولة للقياسات الهندسية ونتيجة لذلك وضع كل من ديوار و هاسليباخ<sup>(201)</sup> أسلوب MINDO/2 حيث سمحت القيم القياسية المستخدمة في حساب كل من حرارة التكوين والقياسات الهندسية بشكل أدق وأفضل ، ولتحسين الأسلوب الأخير بصورة أفضل في حساب عزم ثنائي القطب وأطوال الأواصر وضع ديوار ولو أسلوب MINDO/2<sup>(202)</sup> ، وقد اكتمل عمل ديوار في أسلوب MINDO/3 الذي وضعه مع بنكهام ولو<sup>(203)</sup> في عام 1975 ، إن هذه الطريقة هي نموذج شبه تجريبي استخدمه M.J.S.Dewar ومجموعته لإيجاد الطاقة الكلية للجزيئات متعددة الإلكترون بعد حل معادلة القيمة الذاتية لشروندر .

تتضمن طريقة ديوار هذه الكترونات التكافؤ فقط Valance Electron ، وقد تم في هذه الطريقة حساب كل من طاقة انجذاب الإلكترون إلى لب الذرة (U<sub>ii</sub>) one-center core- electron attraction energy وطاقة تنافر إلكترونين يعودان للذرة نفسها [g<sub>ik</sub>=(ii,kk)] one- center electron repulsion energy وطاقة التبادل الترابطية لإلكترونين يعودان للذرة نفسها [h<sub>ik</sub>=(ik,ik)] one-center exchange energy<sup>(204)</sup> .

يتم حساب طاقة تنافر إلكترونين يقعان على مدارين ذريين يعودان لذرتين مختلفتين من خلال العلاقة الآتية<sup>(205)</sup> :

$$\gamma_{mn} = \frac{e^2}{[R_{mn}^2 + 0.25(P_m + P_n)^2]^{1/2}} \dots\dots\dots 2-1$$

حيث أن  $P_m = e^2/g_m$  و  $P_n = e^2/g_n$  و  $R_{mn}$  يمثل البعد بين مركزي الذرتين .

ولقد قام ديوار (206) باعتماد تقريب موليكان R.S. Mulliken في حساب طاقة الرنين

الاتحادية  $(H_{ij}^c)$  core exchange resonance Integrals والتي تعطى بالمعادلة الآتية :

$$H_{ij}^c = \beta_{ij}^c = S_{ij} (I_i + I_j) \beta_{ij} \dots\dots\dots 2-2$$

حيث يمثل  $S_{ij}$  تكامل التداخل Overlap Integral بين المدارين  $i$  ،  $j$  ، إما  $I_i$  ،  $I_j$  فتمثلان طاقتي التأيّن الإلكترونية لكلا المدارين  $i$  ،  $j$  للذرة في حالتها التكافؤية في الجزيئة وبالنسبة إلى  $\beta_{ij}$  فإنه يمثل متغيراً وسطياً يعتمد على نوع الأصرة .

إما طاقة الانجذاب  $V_{i,m}$  للإلكترون  $i$  العائد للذرة  $m$  إلى لب الذرة المجاورة  $n$  فقد تم حسابها من خلال العلاقة التالية (204) :

$$V_{i,m} = -C_n \gamma_{mn} \dots\dots\dots 2-3$$

حيث أن  $C_n$  هي شحنة لب الذرة  $n$  و  $\gamma_{mn}$  تمثل طاقة تنافر الإلكترون مع شحنة لب الذرة المجاورة .

كذلك يتم حساب طاقة التنافر بين لبين الذرتين  $n$  ،  $m$  core- core repulsion حسب العلاقة الآتية (199) :

$$CR_{mn} = C_m C_n [\gamma_{mn} + (e^2 R_{mn}^{-1} - \gamma_{mn}) f(R_{mn})] \dots\dots\dots 2-4$$

وتحسب قيمة  $f(R_{mn})$  في أسلوب (MINDO/2) لجميع أنواع الأواصر كالاتي (201) :

$$f(R_{mn}) = e^{-(\alpha_{mn} R_{mn})} \dots\dots\dots 2-5$$

لكن في نموذج أـ MINDO/3 فتحسب قيمة  $f(R_{mn})$  بأسلوب MINDO/2 بنفسه ولجميع الأواصر ما عدا الاصرتين (H-O و N-H) فأنهما تحسبان من العلاقة أدناه (207) :

$$f(R_{mn}) = \alpha_{HX} e^{-(R_{mn})} \dots\dots\dots 2-6$$

حيث :  $X = N$  او  $O$

وهذا ما يختلف فيه أسلوب MINDO/2 عن MINDO/3 حيث يعتمد الأسلوب الأول على حل المعادلة 2-1 في تقييم تنافر (لب - لب) لجميع الأواصر وهذا ما يضاف كونهما يختلفان أيضاً في تقييم التكاملات الذرية ذات المركز الواحد أي إن الاختلاف الآخر بين نمطي الحساب هو كيفية اختيار الدالات الذرية عند حساب تكاملات التنافر (207). وهكذا بموجب هذه التقريبات تكون عناصر المصفوفة F (عامل هاملتون اللب ، عامل هارترزي ) تعطى حسب العلاقة الآتية (208,203) :

$$H_{ii} = U_{ii} + \sum_{n \neq m} C_n \gamma_{mn} \dots \dots \dots 2-7$$

$$F_{ij(mm)} = -0.5 P_{ij} h_{ij} \dots \dots \dots 2-8$$

$$F_{ij(mm)} = \beta_{ij}^c - 0.5 P_{ij} \gamma_{ij} \dots \dots \dots 2-9$$

$$F_{ii(mm)} = U_{ii} + 0.5 q_i g_{ii} + \sum_{j=i} (q_j g_{ij} - 0.5 p_{ij} h_{ij}) -$$

$$\sum_{n \neq m} \gamma_{mn} (C_n - \sum_k^m q_j) \dots \dots \dots 2-10$$

وتكون الطاقة الإلكترونية الكلية للجزيئة ناتجة عن حاصل جمع الطاقة الإلكترونية الكلية  $E_{el}$  وطاقة تنافر الألباب  $E_c$  Inter core repulsion energy وكما يلي (208,207) :

$$E_{tot} = E_{el} + E_c = E_{el} + \sum_{m>n} \sum CR_{mn} \dots \dots \dots 2-11$$

$$E_{tot} = \sum_v^{occ} \epsilon_\mu + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j P_{ij} H_{ij} + \sum_{n \neq m} C_m C_n \gamma_{mn} \dots \dots \dots 2-12$$

$$E_b = E_{tot.} - \sum_m E \dots (\text{isolated atom}) \dots \dots \dots 2-13$$

حيث تمثل  $\epsilon_\mu$  طاقة الإلكترون في المدار الجزيئي وتمثل  $E_b$  الطاقة الاتحادية (الرابطة) الكلية للجزيئة والتي يتم الاعتماد عليها في استخراج حرارة التكوين القياسية وذلك من المعادلة الآتية (199) :

$$\Delta H_f = E_b - \sum \Delta H_f \quad (\text{isolated atom}) \dots\dots\dots 2-14$$

### MINDO/3-FORCES

### 2-2 نموذج الميندو/3- فورسيز

وهو احد البرامج التي انجزت بعد منتصف القرن الماضي والمعتمدة على الطرائق شبه التجريبية في الحساب ، وذلك لمعالجة التعقيدات التي تلازم الحلول الرياضية المصاحبة لطريقة روتهان-هال من حيث بطئ سرعة الحساب ، ويتم ذلك عن طريق اجراء تقريب على التكاملات الواردة ضمن طريقة روتهان-هال وادخال بعض القيم الطيفية التجريبية في المعالجة .

أقترحت هذه الطريقة من قبل شنشل ومجموعته (207) ، حيث تم في هذا النموذج الدمج ما بين طريقة أُلـ MINDO/3 المقدمة من قبل ديوار مع بنكهام ولو في عام 1975 (203-205) لحل معادلة شرودنكر بصيغة روتهان-هال وهارترى- فوك مع طريقة القوى لبولاى لاشتقاق الطاقة الكلية بدلالة الإحداثيات لذراتها (209) وذلك باستخدام أسلوب مورتاك وسارجنت Murtgh-Sargent في عملية تخفيض الطاقة Minimization technique (210) ، واستعملت هذه الطريقة لدراسة العديد من المركبات الحاوية على عناصر الدورة الأولى والثانية (H, B, C, N, O, F) (207) ، وقد تم توسيع هذه الطريقة عام 1993 من قبل جعفر حسين علي عن طريق ادخال جمل برمجية تتضمن بيانات لتشتمل على دراسة المركبات الحاوية على عناصر الدورة الثالثة (Si, P, S, Cl) (211) ، كما أجريت الكثير من الدراسات لبعض المركبات العضوية باستخدام هذه الطريقة وقد تم التوصل إلى معرفة دقة هذه الطريقة من خلال المقارنة بين النتائج المحسوبة من هذه الطريقة وطرق الحساب الأخرى والذي أثبت من خلال الدراسات السابقة (212) بان هذه الطريقة هي الأفضل في الجزء المتعلق بحساب ترددات طيف الأشعة تحت الحمراء وبن نتائجها هي الأقرب للقيم التجريبية مقارنة بنتائج الحساب المعتمدة طرق الحساب الأخرى بما فيها طريقة الحل التام (Ab initio) غير التقريبي (213) ، كما وتستعمل هذه الطريقة لحساب العديد من الخصائص للجزيئات منها : الشكل

الهندسي المتوازن (212) ، حرارة تكوين (215) ، الشحنات والكثافات الإلكترونية (214) ، عزم ثنائي القطب (215) ، جهد التأين (214) ، طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO) وأوطأ مدار جزيئي غير مشغول (215) (LUMO) ، وكذلك ترددات الاهتزاز الأساس وشدد الامتصاص (213) ، وغيرها من الخصائص الأخرى .

### 3-2 طريقة نظرية دوال الكثافة DFT Density Functional Theory

نظرية دوال الكثافة والتي ابتدعت من قبل العلماء Hohenberg-Kohn-Sham وكانت على مرحلتين ، الأولى Hohenberg-Kohn عام 1964 ، والثانية Kohn-Sham عام 1965 (216,147,143,138,137)

يمكن وصف أي نظام في الحالة الأرضية باستعمال تعبيرين ؛ الكثافة الإلكترونية للحالة الأرضية  $\rho^0(r)$  والدالة الموجية للحالة الأرضية  $\psi^0$  . وهذا نص نظرية Hohenberg-Kohn اما وفق DFT فيتم حساب الكثافة الإلكترونية  $\rho^0(r)$  ، والتي هي عدد الإلكترونات لكل وحدة حجم (217) ، حيث يتم تطبيق تقريب Born-Oppenheimer فيها لإيجاد خواص الجزيئات في الحالة الأرضية (218) وهذا يؤدي الى اختزال عامل هاملتون ، وبهذا يكون الحل أكثر سهولة ، ويؤدي تقريب النويات الثابتة والإلكترونات المتحركة الى استعمال دوال بسيطة ذات ثلاث احداثيات متغايرة فقط (220,219) هي  $(x,y,z)$  اي  $\rho(x,y,z)$  (221, 94) خلال الفضاء الجزيئي بدلاً عن ما هو مستعمل خلال الدوال الموجية للأنظمة ذات الإلكترونات المتعددة (119,43) ، كما هو الحال في حسابات HF (143) ، والذي يقتضي بوجود  $4n$  من المتغيرات (حيث  $n$  عدد الإلكترونات) ثلاثة منها احداثيات مكانية لكل الكترون والرابع للبرم الإلكتروني لكل الكترون . وهذا يجعل من الحساب وفق DFT افضل منه للدالة الموجية من خلال اختزال العدد الهائل من الاحداثيات (خصوصاً للجزيئات المحتوية عدداً كبيراً من الإلكترونات) الى ثلاثة احداثيات فقط ، كذلك وطبقاً للـ DFT فإن الطاقة الكلية للأنظمة متعددة الدقائق (الإلكترونات) في الحالة الأرضية هي دالة فريدة للكثافة الإلكترونية لتلك الدقائق ، وهذا سبباً آخر يجعل استعمال DFT بدلاً عن نظريات الدوال الموجية (220) . هنالك معادلتان لحساب الطاقة وفق DFT الأولى تحسب الطاقة الإلكترونية وفق Hohenberg-Kohn (222) حسب المعادلة :



$$E = \underbrace{-\frac{1}{2} \sum_i \int \psi_i(r_1) \nabla^2 \psi_i(r_1) dr_1}_{\text{kinetic energy}} + \underbrace{\sum_A \int \frac{Z_A}{|r_1 - R_A|} \rho(r_1) dr_1}_{\text{potential energy}} + \underbrace{\frac{1}{2} \iint \frac{\rho(r_1)\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2}_{\text{coulomb energy}} + E_{xc} \quad \text{exchange correlation energy} \quad \dots 2-15$$

والثانية وفق Kohn-Sham <sup>(222)</sup> فتحسب من المعادلة :

$$\left[ \underbrace{-\frac{1}{2} \nabla^2 + \sum_A \frac{Z_A}{|r_1 - R_A|} + \int \frac{\rho(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_2}_{\text{effective one-electron Kohn-Sham Hamiltonian}} + V_{xc} \right] \psi_i(r_1) = \epsilon_i \psi_i(r_1) \dots\dots\dots 2-16$$

حيث يحسب جهد الترابط  $V_{xc}$  <sup>(222)</sup> من المعادلة :

$$V_{xc}[\rho] = \frac{\partial E_{xc}[\rho]}{\partial \rho} \dots\dots\dots 2-17$$

اما قيمة  $\partial E_{xc}[\rho]$  فيمكن ايجادها من احد التقاريب التي تستعمل لإيجاد طاقة التبادل الترابطية ، حيث تحسب معادلة Kohn-Sham الطاقات بشكل مضبوط ، وتترك فقط طاقة التبادل الترابطية  $(E_{xc})$  exchange-correlation energy للتقريب <sup>(114)</sup> ، حيث يستعمل لذلك تقاريب تعطي قيم  $E_{xc}$  جيدة تجعلها بديلاً عن طرق ab initio ، حيث يشتر  $E_{xc}$  الى مصطلحين <sup>(219)</sup> ، الاول يطابق طاقة التبادل exchange energy ( $E_x$ ) (التأثر بين الالكترونات المتشابهة البرم <sup>(102)</sup> والتي تعزى الى تأثيرات التأثر الذاتي self-interaction effects) <sup>(219)</sup> ، والثاني طاقة الترابط correlation energy ( $E_c$ ) (التأثرات بين كل الالكترونات <sup>(102)</sup> ، وهي طاقة بين الالكترونات في الجزيئة طبقاً لقانون كولومب Coulomb law <sup>(46)</sup> .

ان التقريبات المستخدمة لهذا الغرض كثيرة ، ونوع دوال التقريب هي المحددة لدقة هذه الطريقة <sup>(140)</sup> ، ابسطها تقريب الكثافة المكانية Local Density Approximation (LDA) ، والذي يسمى في الانظمة عالية البرم بـ Local Spin Density Approximation (LSDA) ، وهو من ابسط التقريبات <sup>(43)</sup> والذي طور اعتمادا على طريقة X $\alpha$  لسليتر Slater <sup>(179)</sup> ، ووصف العالم فيرمي Fermi لفجوة صغيرة يمكن ان تعامل لحساب التبادل الترابطي كتكامل لكل فضائها المكاني او الموضوعي <sup>(219)</sup> ، ووفقاً لـ LDA فإن  $E_{xc}$  تكون :

$$E_{xc}^{LDA}[\rho] = \int \rho(r) \varepsilon_{xc}(\rho(r)) dr \dots\dots\dots 2-18$$

حيث  $\rho(r)$  الكثافة الالكترونية من النظام غير المتجانس ،  $\varepsilon_{xc}$  : طاقة التبادل الترابطية لكل دقيقة من الالكتران الغازي المتجانس (Homogenous Electron Gas (HEG) <sup>(220)</sup> ، كما وبين العالمان Parr و Yang بأن  $\varepsilon_{xc}$  هي حاصل جمع طاقة التبادل  $\varepsilon_x(\rho)$  وطاقة الترابط  $\varepsilon_c(\rho)$  <sup>(221,146,71)</sup> كما في المعادلة :

$$\varepsilon_{xc}(\rho) = \varepsilon_x(\rho) + \varepsilon_c(\rho) \dots\dots\dots 2-19$$

اثبت LDA <sup>(95)</sup> نتائج جيدة باقترانه بـ HEG فاقت كل النظريات الاخرى <sup>(149)</sup> في حينها ، وعليه يعتبر تقريب الكثافة المكانية نظاماً حسابياً ناجحاً <sup>(223)</sup> ، حيث لاقت نظرية دوال الكثافة نجاحاً حين اقترانها به اي LDA لحساب  $E_{xc}$  <sup>(138,135)</sup> ، الا ان هذا التقريب غير كافي للكيمياء الحاسوبية ، وقد ادرك ذلك العالم Beake ، واوضح انه من الضروري اجراء تعديلات رياضية مهمة عليه فيما يتعلق بطاقة التبادل ، لذا ابتدع دوالاً ذات معاملات سميت باسمه ، وجمع LDA برموز Beake التبادلية بدقة <sup>(96)</sup> ، اما العلماء Lee-Yang-Parr وضعوا دوالاً سميت باسمهم LYP كتعديل على الطاقة الترابطية ، دمجت هذه الدوال في نموذج هجين HF/DFT والمتضمن الدوال المتنوعة (B3LYP) Beake 3-parameter Lee-Yang- Parr دوال بيك لتصحيح التبادل والمتكونة من ثلاث معاملات ، دوال لتصحيح الانحدار للترابط من قبل لي وجماعته والمتيسر في سلسلة برامج كاوسين Gaussian <sup>(216,70)</sup> ، ويستعمل بشكل واسع لأنه يوفر دقة عالية مقابل متطلبات حاسوبية اقل للتنبؤ بالتركيب الالكتروني ، ويعتبر اختياراً جيداً لتعيين التراكيب الجزيئية والقيم الترموديناميكية ، لان له نسبة خطأ نادرة او ضئيلة <sup>(126)</sup> ، وله توافقية جيدة مع النتائج العملية للتنبؤ بالعوامل الهندسية للجزيئة .

يبدو B3LYP كأنه طريقة مختارة للـ DFT ، حيث انه اختيار للحساب لمعظم الجزيئات <sup>(122)</sup> ، وهو الاكثر استعمالاً <sup>(126)</sup> ، لأن دالة مثل B3LYP تتضمن جزءاً مضبوطاً للتبادل والذي عموماً يعزى الى دوال الكثافة الهجينة <sup>(224)</sup> ، ويمكن ترتيب اداء الدوال التي من خلالها يتم حساب  $E_{xc}$  كالآتي : B3LYP>BLYP>LDA لذا في دراستنا هذه تم استعمال B3LYP في الحسابات كلها .

عناصر القاعدة

## Basis set

هنالك عاملان اساسيان لنجاح اي نظام حسابي ، الاول الطريقة المستخدمة للحساب (122) ، والثاني حجم ومناسبة عناصر القاعدة المستعملة (224) ، لأنها تساوي في الاهمية الطريقة الحسابية المستعملة (225) لأنها مصدرًا من مصادر الخطأ في الحساب ؛ اذا كانت غير مناسبة (219) ، ويؤدي استعمال عناصر قاعدة جيدة الى دالة موجية حقيقية ونتائج جيدة والعكس صحيح (143) ولكنها تواجه بمحددات الحاسبة (216) ، حيث ان زيادة حجم عناصر القاعدة يقابله زيادة في متطلبات الحاسبة hardware (141) ، لذا يفضل الموازنة بين الدقة في الحساب والمواصفات الحاسوبية المتوفرة .

عناصر القاعدة هي سلسلة من الدوال تستعمل في وصف شكل اوربيتالات الذرة ، والاوربيتالات الجزيئية والتي تنتج من الجمع الخطي لهذه الاوربيتالات الذرية (LCAO) Linear Combination of Atomic Orbitals (43) ، وهناك الكثير من عناصر القاعدة المختلفة ، حيث تتضمن برامجيات الكيمياء الحاسوبية وبشكل نمطي مجموعة من عناصر القاعدة ، او تدخل اليها من مصادر اخرى ، وفي هذه الدراسة تم استخدام عناصر القاعدة CEP-121G و القاعدة 6-311G في الحسابات كلها .

## 4-2 برامجيات الحساب ومواصفات Calculation Software Packages

## and hardware الحاسبة المستخدمة

ان تقنيات الكيمياء الحاسوبية تتضمن عدداً من البرامجيات الحسابية مثل (73,68,43) :

GAUSSIAN , MOPAC , HYPERCHEM , GAMESS , JAGUAR , MOE , AMPAC , ACESIII , SPARTAN , Q-CHEM , PC-MODEL , MOLPRO , MOLCAS , YAEHMOP , UNNICHEM , CRYSTAL , ADF , وغيرها .

وهناك عدد من البرامجيات المكملة التي تعتبر واجهة لبيان وعرض النتائج او لإدخال البيانات الى البرامج الحسابية اعلاه منها (43) : Chemoffice , Gauss View , DRAWMOL , MOLDEN , Web lab viewer , Chemcraft , وغيرها .

في هذه الدراسة تم استخدام ستة برامج للحساب :

- 1- برنامج Gaussian09W/version:7.0-2009<sup>(226)</sup> حيث استُخدمَ دوالاً ذرية تحتوي على دوال كاوسية Gaussian-Type Orbital (GTO) ظهرت لأول مرة في برنامج Gaussian70، ويستعمل Gaussian09W بشكل أساسي لكل أنواع حسابات , ab initio , DFT , Semiempirical .
- 2- برنامج Gauss View/version:5.0.8-2008 الذي صمم لتهيئة مدخلات برنامج Gaussian ولفحص المخرجات بشكل تخطيطي بصوري ، حيث يمكن من خلاله رسم اي جزيئة وإن كانت كبيرة بشكل سريع وتفحصها بالأبعاد الثلاثة وتدويرها وتقريبها وتبعيدها ، والفائدة الأهم انه يجنبنا كتابة Z-Matrix والتي قد تكون معقدة خاصة للجزيئات الكبيرة حيث يقوم البرنامج بكتابتها وادخالها ضمن مدخلات برنامج Gaussian تلقائياً .
- 3- برنامج C S ChemDraw Ultra/version:6.0-2000 وبواسطته يتم رسم الجزيئة .
- 4- برنامج C S Chem3D Pro/version:5.0-1999 يدخل في هذا البرنامج التركيب ذو البعدين للجزيئة ليتحول الى ثلاثي الأبعاد وبواسطة برنامج MOPAC وايغاز MINDO3 يتم حساب الاحداثيات الديكارتية بعد تخفيض الطاقة .
- 5- برنامج Fortran/PowerStation4.0-1995 بواسطة هذه اللغة تم كتابة برنامج الحساب MINDO/3-FORCES حيث يتم ادخال 3N من الاحداثيات الناتجة من برنامج Chem3D مع عدد الاواصر الكيميائية ونوعها للجزيئة المراد حسابها ليتم الحساب .
- 6- برنامج DRAWMOL هو برنامج مكتوب بلغة (MS-DOS) يستخدم لرسم متجهات الازاحة الذرية لجميع الانماط الاهتزازية بالاستعانة بالاحداثيات الديكارتية ومعاملات الجمع الناتجة من حسابات MINDO/3-FORCES .
- 7- برنامج Microsoft Office Excel 2010 تم بواسطته حساب جزء من الدوال الديناميكية الحرارية بواسطة المعادلات الاحصائية ، وكذلك حساب قيم زوايا التآصر للجزيئات .
- 8- برنامج Chemcraft/ version:1.5 تم بواسطته تشخيص انماط الاهتزاز لترددات طيف تحت الحمراء لطريقة (DFT/B3LYP(CEP-121G) .

تم استعمال البرامج المذكورة اعلاه في حساب الشكل الهندسي المتوازن الاقل طاقة للجزيئات:

1. حامض البنزويك هيدرازيد
  2. حامض البنزويك (4- ثنائي مثيل امينو- بنزدين)- هيدرازيد
  3. (4- نايتروبنزدين) بنزوهيدرازيد
  4. (4- ميثوكسي بنزدين) بنزوهيدرازيد
  5. (2- هيدروكسي -4- ميثوكسي بنزدين ) بنزوهيدرازيد
  6. (4,2- ثنائي ميثوكسي بنزدين) بنزوهيدرازيد
- كما وقد استخدم عدد من البرامج الداعمة الاخرى ذات التأثير المهم والكبير على انسيابية عمل هذه البرامج والوقت المستهلك في ذلك .

### مواصفات الحاسبة

1- حاسبة محمولة من نوع SONY/VAIO مواصفاتها :

Systems : Windows XP + Windows 7

Hard disk: 160 GB

Processor: Core 2 Duo CPU T7500 2.20GHz

RAM : 2GB

Display : 13

2- حاسبة محمولة من نوع SONY/VAIO مواصفاتها :

Systems : Windows XP + Windows 7

Hard disk: 200 GB

Processor: Core 2 Duo CPU T5250 1.50GHz

RAM : 2GB

Display : 15

الفصل الثالث  
الفصل الثالث

والمنافسة  
المنافسة

## النتائج والمناقشة

## Introduction

## 1-3 تمهيد

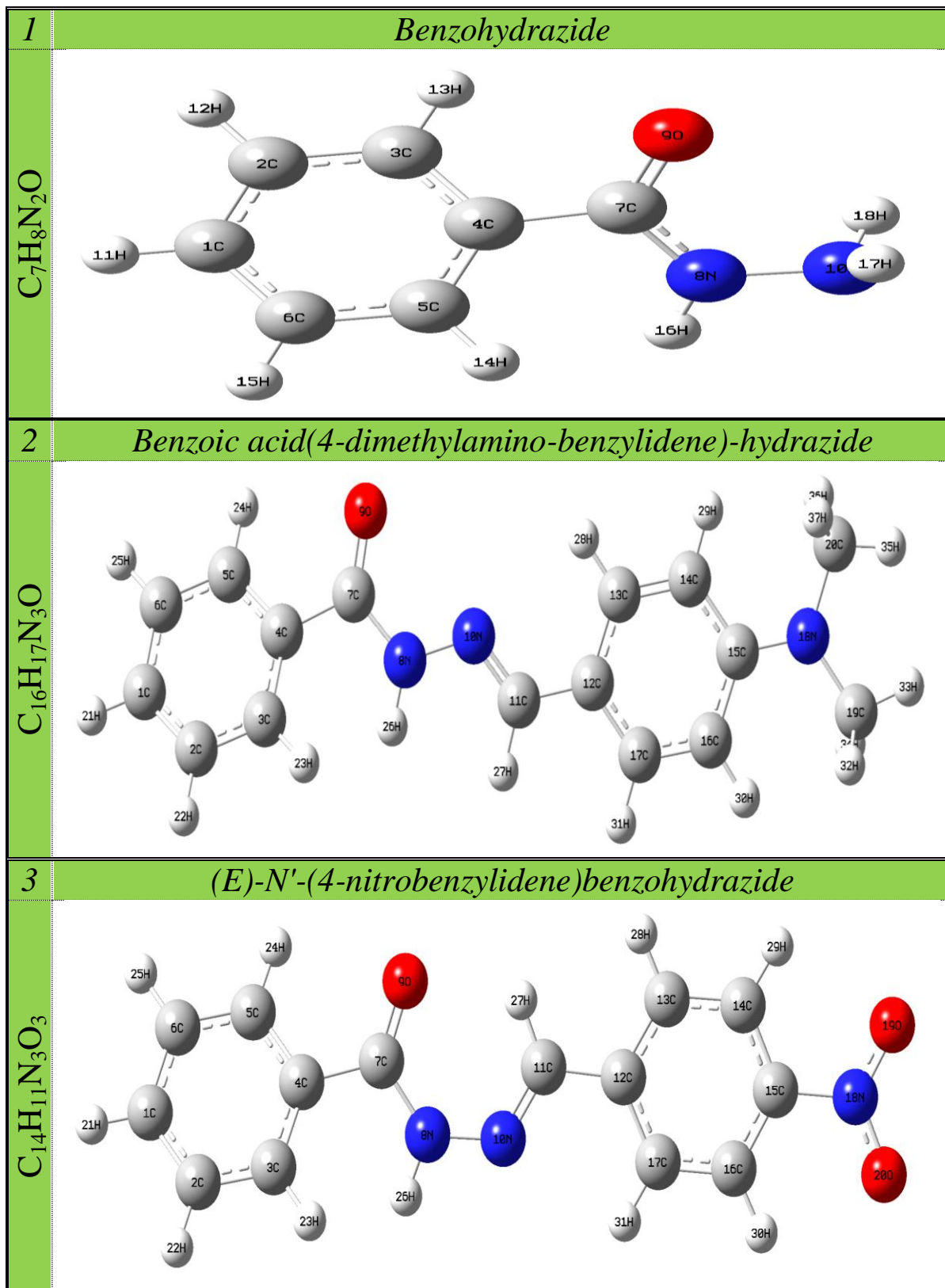
تم استخدام احدى الطرق الشبه تجريبية وهو نموذج المندو/3- فورسيز-MINDO/3 في حسابات ميكانيك الكم ، كما واجريت حسابات نظرية دوال الكثافة DFT للأساس B3LYP وفقاً للقاعدة 6-311G و CEP-121G باستخدام برنامج كاوسين Gaussian 09 لغرض المقارنة حيث تم حساب :

الشكل الهندسي المتوازن (أطوال الأواصر والزوايا ) ، حرارة التكوين ، الدوال الترموديناميكية القياسية ، عزم ثنائي القطب ، الشحنات والكثافات الالكترونية كذلك ترددات الاهتزاز وشدت الامتصاص لأشعة تحت الحمراء المقابلة لها كما تم حساب طاقة أعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO) ، طاقة أوطاً مدار جزيئي غير مشغول (LUMO) ومن طاقة المدارات وحسب نظرية كوبمان Koopmans Theorem<sup>(81,50)</sup> تم حساب جهد التأين و الالفة الالكترونية و الكهروسلبية<sup>(72)</sup> و صلابة وليونة الجزيئة و فجوة الطاقة و الالكتروفيلية وبالاعتماد على نظرية المجموعة Group Theory<sup>(53)</sup> وجد ان جميع الجزيئات المدروسة تنتمي الى مجموعة النقطة  $C_1$  .

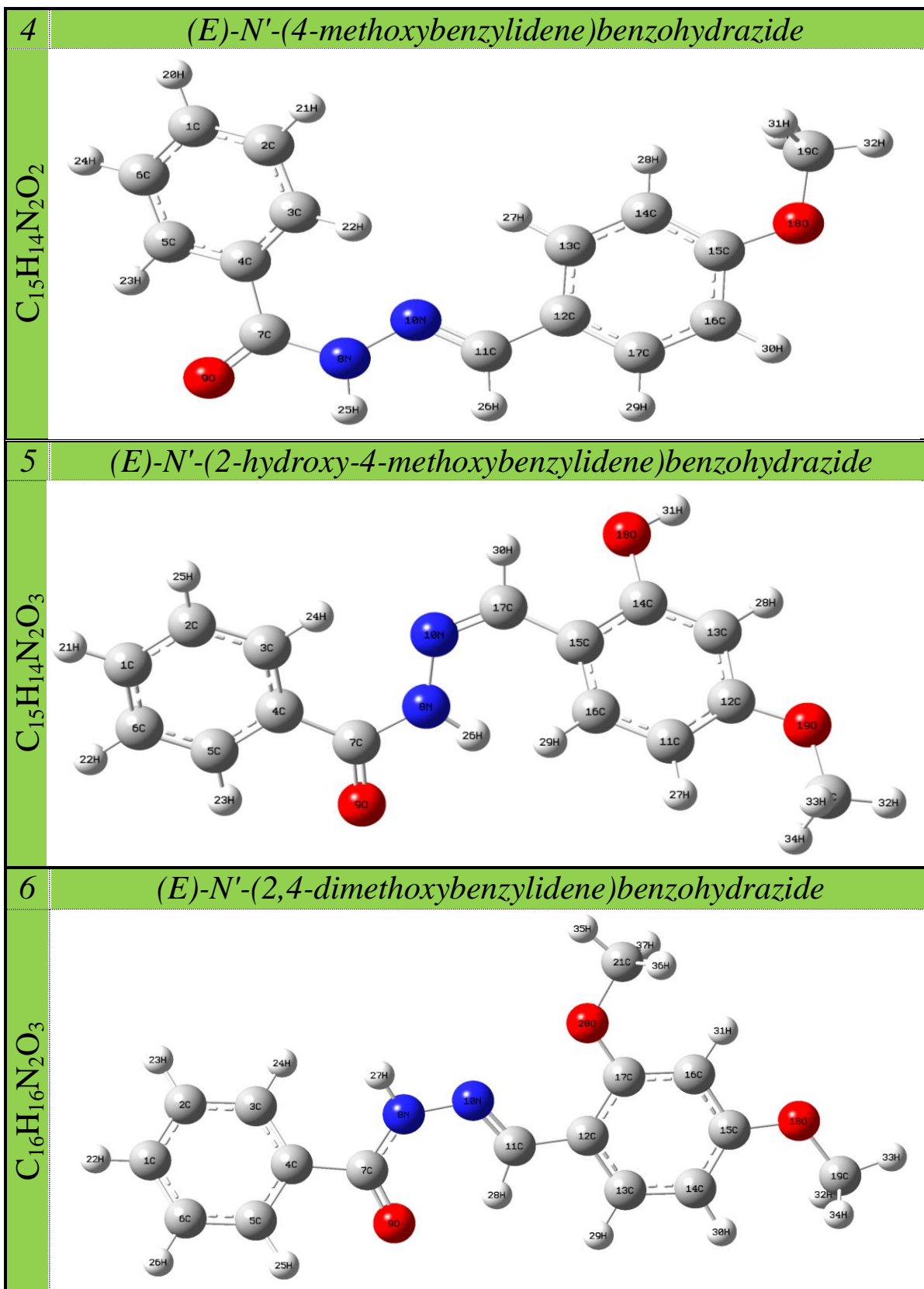
ولغرض تشخيص الترددات الناتجة من حسابات طريقة المندو/3- فورسيز-MINDO/3 تمت الاستعانة ببرنامج الرسم DRAW MOL فضلاً عن حساب المساهمة الجزيئية لكل ذرة في النمط الاهتزازي ، وبما ان الجزيئات لا تسلك سلوكا توافقيا في اهتزازاتها اي تعمل كمهتز لا توافقي anharmonic oscillator لذا تم اجراء تصحيح لهذه الترددات من خلال معالجتها بعوامل تقييس<sup>(64)</sup> محددة لكل صنف وحسب نوع النمط الاهتزازي .

وقد تم مقارنة النتائج مع القيم المقاسة تجريبيا<sup>(19-21,227)</sup> من ناحية اطوال الاواصر باستخدام مطيافية حيود الاشعة السينية X-Ray ومن ناحية اخرى للأطياف الاهتزازية لأشعة تحت الحمراء ، جاءت قيم النتائج المحسوبة جيدة وقريبة وبالخصوص المحسوبة وفق نظرية دوال الكثافة DFT حيث اعطت نتائج افضل واكثر دقة واقرب من النتائج العملية ، مما عليه في نموذج المندو/3- فورسيز MINDO/3-FORCES لأسباب عائدة الى طبيعة الحساب التقريبي لهذا النموذج .

ان ترقيم الذرات للجزيئات ادناه تم على وفق النتائج المستحصلة (المسافات بين الذرات) من برنامج الحساب MINDO/3-FORCES والتي اتفقت مع ترقيم ذرات الجزيئات نفسها بعد حسابها ببرنامج (Gaussian 09).







شكل 1-3 : التركيب الفراغي للمركبات المدروسة مع ترقيم الذرات ونوعها .

## 2-3 الشكل الهندسي المتوازن

## Equilibrium geometry

## 1-2-3 أطوال الاواصر

## Bond Length

من النتائج المستحصلة من دراسة الجزيئات المذكورة جدول 1-3 وتقارباها مع القيم التجريبية والتي تم الحصول عليها من حيود الاشعة السينية<sup>(228)</sup> لأطوال الاواصر بين الذرات ، وبالخصوص تلك النتائج عن طريقة (DFT/B3LYP(6-311G).

لجميع المركبات يلاحظ ان طول الاصرة (N-N) تراوح  $[1.428-1.287]A^\circ$  حيث تناقص طول الاصرة بوجود المعوض وانخفض طولها الى اقل ما يكون مع المعوض بمجموعة النايثرو الساحبة بالمركب 3 مع تفاوت بسيط مع المركب 4 المعوض بمجموعة ميثوكسي في الموقع بارا بالنسبة لموقع التعويض في الحلقة الاروماتية المعوضة بينما كانت اطول قيمة لها في حامض البنزويك هيدرازيد .

وجاء ترتيب طول الاصرة (N-N) متقارباً مع اصرة الازوميثين (C=N) لجميع المركبات المعوضة من حيث الترتيب ، فقد تراوحت اطوال الاخيرة بين  $[1.311-1.269]A^\circ$  ، وقد يعود السبب في هذا التدرج الى اختلاف المجموعة المعوضة على الحلقة الاروماتية كونها ساحبة او دافعة للإلكترونات وتدرجها بالقوة وكذلك لاختلاف موقع التعويض ان كان في الموقع بارا او اورثو وكذلك تتأثر بالشكل الفراغي للمركب ككل .

لوحظ ان اطوال اواصر (C-C) في الحلقة الاروماتية المعوضة والمجاورة لموقع التعويض في الموقع بارا وللمركبين 2,3 بحدود  $[1.432-1.381]A^\circ$  للأصرة (C<sub>14</sub>-C<sub>15</sub>)، و  $[1.436-1.377]A^\circ$  للأصرة (C<sub>15</sub>-C<sub>16</sub>) وتدرجت اطوالها كما يلي :

$$2 (C_{14}-C_{15}) > 3 (C_{14}-C_{15})$$

$$2 (C_{15}-C_{16}) > 3 (C_{15}-C_{16})$$

يعود السبب الى مجموعة النايثرو (-NO<sub>2</sub>) في المركب 3 حيث انها تعتبر مجموعة ساحبة قوية ، بينما مجموعة ثنائي مثيل امينو [-N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] في المركب 2 فهي مجموعة دافعة بالرنين ومنشطة ، مما يؤكد هذا التفسير هو طول اصرة (C-N) في المركبين 2,3 حيث يوجد فرق شاسع بينهما بحدود  $[1.479-1.388]A^\circ$  وكما في الترتيب التالي :

$$3 (C_{15}-N_{18}) > 2 (C_{15}-N_{18})$$

بالنسبة لأصرة (C-O) لمجموعة الميثوكسي المعوضة في الموقع بارا من المركبات 4,5,6 تراوحت اطوالها  $[1.328-1.389)A^\circ]$  لأصرة (C<sub>15</sub>-O<sub>18</sub>) 4 ، بينما للمركب 5 تراوحت بين  $[(1320-1386)A^\circ]$  للأصرة (C<sub>12</sub>-O<sub>19</sub>) 5 ، وطولها للأصرة (C<sub>15</sub>-O<sub>18</sub>) 6 بحدود  $[(1319-1.391)A^\circ]$  ، يعود السبب في ذلك الى انفراد التعويض في الموقع بارا وبالتالي قلة الشد في الحلقة للمركب 4 بينما في المركبين 5,6 يوجد هناك معوض اخر في الموقع اورثو في المركب 5 مجموعة هيدروكسي وفي المركب 6 مجموعة ميثوكسي .

من النتائج والمقارنة المذكورة اعلاه ومن ملاحظة الجدول 1-3 يتضح ان النتائج جميعها متقاربة وخاصة في تسلسل المركبات من ناحية اطوال الاواصر المتناظرة ، وان نتائج الحساب من نظرية دوال الكثافة للأساس B3LYP والقاعدة (6-311G) هي الاقرب لنتائج مطيافية حيود الاشعة السينية .

**جدول 1-3:** اطوال الاواصر (بالانكستروم) للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب

المستخدمة وبالاستعانة بالنتائج المستحصلة من مطيافية حيود الاشعة السينية (20,19,18,16,10,9)

<b>1</b>	<b>C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O</b>				<b>2</b>	<b>C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O</b>			
<b>Bond Length</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>	<b>DFT/B3LYP</b>		<b>X-Ray dif.</b>	<b>Bond Length</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>	<b>DFT/B3LYP</b>		<b>X-Ray dif.</b>
		<b>CEP-121G</b>	<b>6-311G</b>				<b>CEP-121G</b>	<b>6-311G</b>	
N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.322	1.428	1.413	1.413	N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.292	1.399	1.380	1.386
N <sub>8</sub> -H <sub>16</sub>	1.044	1.010	1.005	0.911	C <sub>11</sub> =N <sub>10</sub>	1.2719	1.311	1.297	1.283
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.359	1.393	1.374	1.314	C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	1.432	1.432	1.421	1.384
C <sub>7</sub> =O <sub>9</sub>	1.218	1.269	1.253	1.261	C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	1.431	1.436	1.417	1.379
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.425	1.419	1.404	1.385	C <sub>15</sub> -N <sub>18</sub>	1.399	1.403	1.388	1.388
C <sub>3</sub> -H <sub>13</sub>	1.107	1.086	1.080	0.930	C <sub>3</sub> -H <sub>23</sub>	1.108	1.088	1.082	0.930
C <sub>5</sub> -H <sub>14</sub>	1.088	1.107	1.082	0.930	C <sub>5</sub> -H <sub>24</sub>	1.086	1.107	1.080	0.930
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.419	1.425	1.404	1.377	N <sub>18</sub> -C <sub>19</sub>	1.473	1.427	1.462	1.433
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.418	1.425	1.403	1.385	C <sub>20</sub> -H <sub>35</sub>	1.093	1.118	1.087	0.960
<b>3</b>	<b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>				<b>4</b>	<b>C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub></b>			
<b>Bond Length</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>	<b>DFT/B3LYP</b>		<b>X-Ray dif.</b>	<b>Bond Length</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>	<b>DFT/B3LYP</b>		<b>X-Ray dif.</b>
		<b>CEP-121G</b>	<b>6-311G</b>				<b>CEP-121G</b>	<b>6-311G</b>	
N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.287	1.384	1.381	1.371	N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.291	1.374	1.377	1.388
C <sub>11</sub> =N <sub>10</sub>	1.267	1.308	1.299	1.272	C <sub>11</sub> =N <sub>10</sub>	1.2710	1.2960	1.296	1.269
C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub>	1.421	1.411	1.395	1.381	C <sub>15</sub> -O <sub>18</sub>	1.328	1.388	1.389	1.366
C <sub>15</sub> -C <sub>16</sub>	1.421	1.416	1.399	1.377	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.367	1.389	1.387	1.350
C <sub>15</sub> -N <sub>18</sub>	1.434	1.479	1.462	1.459	C <sub>7</sub> -O <sub>9</sub>	1.217	1.245	1.255	1.224
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.413	1.372	1.385	1.358	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.425	1.405	1.406	1.382
C <sub>3</sub> -H <sub>23</sub>	1.107	1.088	1.083	0.930	C <sub>3</sub> -H <sub>22</sub>	1.108	1.086	1.077	0.930
C <sub>5</sub> -H <sub>24</sub>	1.086	1.107	1.080	0.930	C <sub>5</sub> -H <sub>23</sub>	1.084	1.107	1.080	0.930
N <sub>18</sub> -O <sub>19</sub>	1.291	1.226	1.268	1.216	C <sub>11</sub> -H <sub>26</sub>	1.098	1.130	1.094	0.930

5	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>				6	C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>				
	Bond Length	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP			Bond Length	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		X-Ray dif.
			CEP-121G	6-311G				CEP-121G	6-311G	
N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.307	1.375	1.382	1.379	N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.293	1.397	1.398	1.387	
C <sub>17</sub> =N <sub>10</sub>	1.2724	1.301	1.300	1.286	C <sub>11</sub> =N <sub>10</sub>	1.2720	1.2964	1.301	1.282	
C <sub>12</sub> -O <sub>19</sub>	1.320	1.384	1.386	1.369	C <sub>15</sub> -O <sub>18</sub>	1.319	1.381	1.391	1.362	
C <sub>14</sub> -O <sub>18</sub>	1.320	1.389	1.392	1.357	C <sub>17</sub> -O <sub>20</sub>	1.318	1.390	1.381	1.370	
C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.367	1.393	1.389	1.349	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.366	1.450	1.376	1.348	
C <sub>7</sub> -O <sub>9</sub>	1.219	1.243	1.257	1.241	C <sub>7</sub> -O <sub>9</sub>	1.218	1.216	1.256	1.234	
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.424	1.407	1.406	1.395	C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.426	1.395	1.403	1.392	
C <sub>3</sub> -H <sub>23</sub>	1.107	1.084	1.076	0.950	C <sub>3</sub> -H <sub>24</sub>	1.108	1.099	1.083	0.930	
C <sub>5</sub> -H <sub>24</sub>	1.086	1.108	1.080	0.950	C <sub>5</sub> -H <sub>25</sub>	1.097	1.107	1.080	0.930	

### Bond Angles

### 2-2-3 زوايا التآصر

أظهرت نتائج الحساب في الجدول 2-3 الاختلاف في قيم الزوايا ، حيث لوحظ ان حدود الزوايا التي تمركزت عليها المجموعة المعوضة (114.8°-122.2°) فقد كانت اكبر الزوايا في المركب 3 (∠ C<sub>14</sub>C<sub>15</sub>C<sub>16</sub>) والمعوض بمجموع النايترو (-NO<sub>2</sub>) الساحبة ، بينما الزوايا على المعوض ذي الحث الدافع تناقصت وصولاً للمركب 2 ذي مجموعة ثنائي مثيل امينو [-N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] والتميزة بكبر حجمها وحثها الدافع ، ترتيبت قيم الزوايا في المركبات كما يلي :-

$$3(\angle C_{14}C_{15}C_{16}) > 6(\angle C_{14}C_{15}C_{16}) > 5(\angle C_{11}C_{12}C_{13}) > 4(\angle C_{14}C_{15}C_{16}) > 2(\angle C_{14}C_{15}C_{16})$$

أما الزوايا المجاورة لزوايا موقع التعويض فتدرجت عكس الترتيب اعلاه :

$$2(\angle C_{13}C_{14}C_{15}) > 4(\angle C_{13}C_{14}C_{15}) > 5(\angle C_{12}C_{11}C_{16}) > 6(\angle C_{13}C_{14}C_{15}) > 3(\angle C_{13}C_{14}C_{15})$$

وذلك متوقع ففي الحلقة الواحدة بالنسبة للزوايا المجاورة عندما تقل احدها بسبب المعوض عليها تكبر قيمة الزوايا المجاورة لها لتعويض الشد الحاصل على الحلقة .

اما بالنسبة للترتيب في اي من الحالتين اعلاه فيعود الى اختلاف تأثير المجموعة المعوضة من حيث الحث الساحب والدافع للإلكترونات بالإضافة الى حجمها وموقعها (بارا و اورثو ) ، فقد لوحظ ان الزوايا التي يتمركز عليها مجموعة ساحبة اكبر من تلك المعوضة بمجاميع دافعة .

ومن ذلك نستنتج ان الشكل الهندسي يتغير تبعا لموقع المجموعة المعوضة وحجمها وحثها (الساحب والدافع ) وصولاً الى الشكل الهندسي الاكثر استقرارا ذو الطاقة الاقل ، وهو الشكل الذي يحصل فيه اقل تنافر بين الاوربيبتالات بحيث يكون في حده الأدنى من الطاقة مما يؤدي الى تغيير في قيمة الزوايا واطوال الاواصر .

جدول 3- 2: زوايا التآصر (بالدرجة) للمركبات والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

1		C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O		2		C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	
Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.8	119.9	∠C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	114.8	117.6	117.4
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>11</sub>	120.3	120.1	120.1	∠C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	121.9	120.6	121.1
∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> C <sub>11</sub>	120.3	120.0	120.0	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.8	119.8
∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.0	120.1	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.0
∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>21</sub>	120.2	120.1	120.0	∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.4	120.1	120.1
∠C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>12</sub>	119.7	119.7	119.8	∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.0	120.1	120.1
3		C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>		4		C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	
Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
∠C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	120.7	122.2	121.8	∠C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	119.0	120.1	120.1
∠C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	117.7	118.4	118.7	∠C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	119.3	119.7	119.0
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.9	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.8	119.8
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	119.9	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>20</sub>	120.3	120.0	120.1
∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.0	∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>20</sub>	120.4	120.1	120.1
∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.1	120.1	∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.0	120.1	120.4
5		C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>		6		C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	
Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		Bond Angles	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
∠C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>13</sub>	119.4	120.5	120.2	∠C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	119.8	121.0	120.5
∠C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> C <sub>16</sub>	119.1	119.4	119.1	∠C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	118.3	119.2	118.8
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.7	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.8
∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.1	∠C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>22</sub>	120.3	119.9	120.0
∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.0	120.2	∠C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>22</sub>	120.4	120.1	120.1
∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.1	120.0	∠C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.0	120.1

### 3-3 الشحنات والكثافات الإلكترونية Charge and Electron densities

من خلال استقراء النتائج المحسوبة في الجدول 3-3 والخاص بالشحنات والكثافات الإلكترونية للذرات في المركبات المدروسة ، نلاحظ :

ارتفاع الكثافات الإلكترونية لذرة النتروجين (N<sub>10</sub>) في المركبات المعوضة بمجاميع دافعة للالكترونات وتراوح بين (4.75-5.15) بينما في المركب 3 المعوض بمجموعة ساحبة للالكترونات فقد كانت بحدود (4.67-4.97) ، يعود السبب في ذلك الى تأثير المجاميع الدافعة حيث تعتبر مجاميع منشطة للحلقة الاروماتية تزيد الكثافة الإلكترونية في الموقع بارا واورثو ومن ثم على اصرة قاعدة شف المزوجة مما يزيد من الكثافة على النتروجين وعلى العكس في

المجاميع الساحبة للإلكترونات تكون اقل كثافة لذرة النتروجين ( $N_{10}$ ) مما للمركبات الاخرى المعوضة .

اما بالنسبة للكثافة الإلكترونية لذرة الكربون ( $C_{15}$ ) في الموقع بارا من الحلقة الاروماتية المعوضة فمن ملاحظة الجدول 3-3 يتبين ان المركب المعوض بمجموعة ساحبة تكون فيه ذرة الكربون في موقع التعويض ( $C_{15}$ ) ذات كثافة الكترونية تتراوح بين (3.9-4.16) وبذلك تكون اعلى من كثافة ذرة الكربون المناظرة لها في المركبات المعوضة بالمجاميع الدافعة والتي ظهرت قيمها بحدود (3.21-4.0) .

نلاحظ انخفاض الكثافة الالكترونية لذرات الكربون المرتبطة بمجاميع دافعة للإلكترونات وتزداد كثافتها حينما ترتبط بمجاميع ساحبة يعود السبب في ذلك الى كون المجاميع الدافعة تعتبر منشطة للحلقة الاروماتية تزيد الكثافة الالكترونية في الموقع اورثو وبارا في حين تقل على ذرة الكربون المرتبطة بها ، بينما المجاميع الساحبة مثبتة ضعيفة للحلقة الاروماتية حيث تعتبر مجاميع غنية بالإلكترونات تمنح الحلقة الاروماتية الالكترونيات بواسطة عملية الرنين وتقلل من الكثافة الالكترونية في الموقع بارا وارثو بينما تزداد على ذرة الكربون المرتبطة بها مباشرة .

**جدول 3-3 :** الشحنات والكثافات الالكترونية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

1		C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O						2		C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O					
Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP					
			CEP-121G		6-311G					CEP-121G		6-311G			
	Charge	density	Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density		
N <sub>10</sub>	.03	4.97	-.49	5.5	-.213	5.21	N <sub>10</sub>	.003	5.0	0.29	4.75	-.04	5.0		
C <sub>7</sub>	.62	3.38	-.25	4.3	-1.04	5.04	C <sub>15</sub>	.177	3.8	-.01	4.00	.806	3.2		
N <sub>8</sub>	-.12	5.12	-.25	5.2	-.514	5.51	C <sub>14</sub>	-.09	4.1	-.25	4.25	-.34	4.3		
O <sub>9</sub>	-.57	6.57	-.18	6.2	-.733	6.73	C <sub>17</sub>	.058	3.9	-.23	4.23	.265	3.7		
H <sub>11</sub>	-.01	1.01	.157	.84	.028	.98	N <sub>8</sub>	-.09	5.1	-.26	5.26	-.93	5.9		
H <sub>12</sub>	.02	.998	.159	.84	.026	.974	O <sub>9</sub>	-.56	6.6	-.15	6.15	-.73	6.7		
3		C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>						4		C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>					
Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP					
			CEP-121G		6-311G					CEP-121G		6-311G			
	Charge	density	Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density		
N <sub>10</sub>	.03	4.97	0.32	4.6	.278	4.72	N <sub>10</sub>	.01	4.99	-.15	5.15	.05	4.95		
C <sub>15</sub>	-.16	4.16	.147	3.9	-.34	4.34	C <sub>15</sub>	.39	3.61	.291	3.71	.73	3.27		
C <sub>14</sub>	.06	3.94	-.25	4.2	.087	3.91	C <sub>14</sub>	-.12	4.12	-.13	4.13	-.25	4.25		
C <sub>17</sub>	-.01	4.01	-.21	4.2	-.19	3.19	C <sub>17</sub>	.06	3.94	-.15	4.15	.12	3.88		
N <sub>8</sub>	-.10	5.10	-.28	5.3	-1.0	6.0	N <sub>8</sub>	-.10	5.10	-.56	5.56	-.87	5.87		
O <sub>9</sub>	-.55	6.55	-.12	6.1	-.68	6.68	O <sub>9</sub>	-.56	6.56	-.43	6.43	-.98	6.98		

5		$C_{15}H_{14}N_2O_3$						6		$C_{16}H_{16}N_2O_3$					
Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP					
	Charge	density	CEP-121G		6-311G			Charge	density	CEP-121G		6-311G			
			Charge	density	Charge	density				Charge	density	Charge	density		
N <sub>10</sub>	-.07	5.07	-.09	5.1	-.13	5.13	N <sub>10</sub>	-.01	5.00	-.072	5.07	.07	4.93		
C <sub>12</sub>	.47	3.53	.280	3.7	.789	3.21	C <sub>15</sub>	.47	3.53	.110	3.89	.82	3.18		
C <sub>14</sub>	.45	3.55	.191	3.8	.635	3.37	C <sub>14</sub>	-.20	4.20	-.154	4.15	-.39	4.39		
C <sub>17</sub>	.16	3.84	-.11	4.1	.297	3.70	C <sub>17</sub>	.46	3.54	.134	3.87	.60	3.4		
N <sub>8</sub>	-.11	5.11	-.57	5.5	-.77	5.77	N <sub>8</sub>	-.09	5.09	-.015	5.02	-.87	5.87		
O <sub>9</sub>	-.56	6.56	-.42	6.4	-.87	6.87	O <sub>9</sub>	-.57	6.57	-.308	6.31	-.67	6.67		

### 4-3 ترددات الاهتزاز وشد الامتصاص في منطقة الاشعة تحت الحمراء

#### Vibrational frequencies and IR absorption intensities

أجري التشخيص الطيفي الحسابي المتكامل لترددات الاهتزاز 3N-6 ولجميع المركبات المدروسة باستخدام الحسابات الشبه تجريبية بطريقة المندو/3- فورسيز -MINDO/3-FORCES ، وبالإضافة لقيم الترددات ومدى شدتها التي تم استحصالها من نتائج الحساب فقد تم الاستعانة بداول المشاركة الجزيئية لكل ذرة من الجزيئة في التردد الاهتزازي ومطابقتها مع الاشكال التي تم رسمها باستخدام برنامج DRAW MOL والممثل بالأشكال 2-3 الى 7-3 ، كما وقد سُخِصت الترددات بأستخدام برنامج كاوسين وبطريقتين هما DFT/B3LYP(6-311G) و DFT/B3LYP(CEP121G) ، وقورنت نتائجها مع طريقة MINDO/3-FORCES من حيث الترددات وشد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي وبلاستعانة بأشكال الانماط الاهتزازية وللطرق الثلاثة ؛ ومن ملاحظة النتائج المحسوبة وبعض النتائج التجريبية من الادبيات (227,21) جدول 4-3 مع التركيز على الترددات ذات الشدة العالية حيث لوحظ ما يأتي :

مقارنة حزم الامتصاص التي ظهرت في معظم مركبات الهيدرازون و حامض البنزويك هيدرازيد ، حيث لوحظ بعض الاختلاف في قيم ترددات الاهتزاز وشد الامتصاص بين المركبات ، ونوع الطريقة المستخدمة ، على الرغم من انها اتفقت في نوع النمط الاهتزازي ، وقد يعود الى طبيعة المجموعة المعوضة على الحلقة الاروماتية المعوضة وتأثير ذلك على الشكل الفراغي للجزيئة في الحالة المستقرة .

ان ترددات النمط الاهتزازي للأصرة (N-H St.) ظهرت بحدود  $(3644-3278)cm^{-1}$  بالنسبة لطرق الحساب المذكورة انفاً ، بينما النتائج التجريبية والمقاسة بجهاز مطيافية الاشعة



تحت الحمراء فقد تراوحت قيمها بين  $(3310-3045)\text{cm}^{-1}$  ، ويمكن ان يعود السبب في هذا التفاوت الى اللاتوافقية ، حيث ان الجزيئات لا تسلك سلوكا توافقيا في اهتزازاتها اي تعمل كمهتز لا توافقي .

ترددات المط الاهتزازي لمجموعة الكربونيل ( $\text{C}=\text{O}$  st.) شُخصت وبالطرق المستخدمة للحساب بحدود  $(1708-1643)\text{cm}^{-1}$  ، بينما تراوحت بين  $(1672-1650)\text{cm}^{-1}$  تجريبياً ، ونلاحظ أيضا ارتفاع ملحوظ في شدد الامتصاص لهذا الاهتزاز بحدود  $(334-35)\text{km/mole}$  .  
 أن جميع مركبات الهيدرازون تشترك بظهور حزمة امتصاص بحسب الطرق المستخدمة في الحساب بحدود  $(1831-1587)\text{cm}^{-1}$  ، بينما تراوحت تجريبياً  $(1650-1580)\text{cm}^{-1}$  ، والتي تدل على تردد اهتزاز مط الاصرة ( $\text{C}=\text{N}$  st.) والتي تميز هذه المركبات .  
 اما ما يميز المركبات المدروسة كل على حدة وتشخيصها يمكن تلخيصه كما يأتي :-

بالنسبة لجزيئة حامض البنزويك هيدرازيد 1 اتصفت بترددات اهتزاز مط متمائل وغير متمائل لمجموعة ( $\text{NH}_2$ ) بحدود  $(3551-3354)\text{cm}^{-1}$  محسوبة نظريا بطرق الحساب المذكورة انفا ، بينما تجريبيا ظهرت بحدود  $(3310-3190)\text{cm}^{-1}$  .

كما وقد لوحظ ان التردد الانحنائي المقصي Scissoring للمجموعة نفسها ( $\text{NH}_2$ ) اكبر من التردد الانحنائي الالتوائي Twisting وان الاخير اكبر من التردد الانحنائي الارتجاجي Wagging :

$$\text{NH}_2 \text{ sciss.} > \tau \text{ NH}_2 > \omega \text{ NH}_2$$

جزيئة 3 ((4-نايتروبنزلدين) بنزوهدرازيد) ظهر فيها حزمة امتصاص ذات شدة عالية بحدود  $(1652-1435)\text{cm}^{-1}$  وهي ما تميز تردد اهتزاز مط اصرة ( $\text{NO}_2$ ) . كما لوحظ ان التردد الانحنائي المقصي Scissoring ولنفس مجموعة النايترو يكون اكبر من بقية أنواع ترددات الانحناء ومن ثم يعقبه التردد الانحنائي الارتجاجي Wagging ومن ثم التاراجي Rocking وأخيراً الالتوائي Twisting أي إن :

$$\text{NO}_2 \text{ sciss.} > \omega \text{ NO}_2 > \rho \text{ NO}_2 > \tau \text{ NO}_2$$

جزيئة 5 ((2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزلدين) بنزوهدرازيد) لوحظ ظهور حزمة تردد اهتزاز مط اصرة ( $\text{O}-\text{H}$ ) في حدود  $(3607-3707)\text{cm}^{-1}$  ، وتجريبيا  $(3400)\text{cm}^{-1}$  وتردد اهتزاز مط اصرة ( $\text{C}-\text{O}$ ) لمجموعة الميثوكسي بحدود  $(1436-1507)\text{cm}^{-1}$  .  
 وعلى وفق النتائج الملاحظة للجزيئة 2 (حامض البنزويك (4-ثنائي مثيل امينو بنزلدين) هيدرازيد) ، فقد ظهرت حزم امتصاص بحدود  $(3131-2725)\text{cm}^{-1}$  وهي تعود لترددات اهتزاز مط اصرة ( $\text{C}-\text{H}$ ) لمجموعة المثل .



أما بالنسبة للجزيئين 4,6 ((4-ميثوكسي بنزولين) بنزوهيدرازيد) ، ((4,2-ثنائي ميثوكسي بنزولين) بنزوهيدرازيد) فقد ميزهما حزمتي امتصاص احدها لتردد اهتزاز مط اصرة (C-H) لمجموعة المثيل في حدود  $3152-2889\text{cm}^{-1}$  والآخر تردد اهتزاز مط اصرة (C-O) بحدود  $1583-1360\text{cm}^{-1}$  تميز مجموعة الميثوكسي .

**جدول 3-4 :** ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي للمركبات المدروسة

والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة وتجريبيا من الادبيات (227,21)

<b>1</b>								
<b>C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O</b>								
<b>No. of freq</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>		<b>DFT/B3LYP</b>				<b>Obsd</b>	<b>Assignments</b>
			<b>CEP-121G</b>		<b>6-311G</b>			
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>6</sub>	3400	108.35	3624	27.81	3644	31.33	3310	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>9</sub>	1694	272.05	1590	94.40	1649	117.6	1650	C=O st.
v <sub>7</sub>	3364	115.8	3432	0.073	3452	0.411	-----	(N <sub>10</sub> )H <sub>2</sub> s. st.
v <sub>8</sub>	3354	93.46	3544	0.514	3551	1.239	3190	(N <sub>10</sub> )H <sub>2</sub> as. st.
v <sub>13</sub>	1507	14.83	1743	33.47	1766	30.95	-----	NH <sub>2</sub> sciss.
v <sub>21</sub>	1141	3.17	1329	3.819	1351	2.924	-----	τ NH <sub>2</sub>
v <sub>26</sub>	1043	12.51	841	61.44	845	91.78	-----	ω NH <sub>2</sub>
v <sub>34</sub>	704	2.10	681	4.515	716	0.127	-----	δ N-H
v <sub>43</sub>	241	0.12	234	4.909	242	3.811	-----	ρNH <sub>2</sub>
<b>2</b>								
<b>C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O</b>								
<b>No. of freq</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>		<b>DFT/B3LYP</b>				<b>Obsd</b>	<b>Assignments</b>
			<b>CEP-121G</b>		<b>6-311G</b>			
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>16</sub>	3329	176.78	3478	22.41	3494	21.16	3251	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>18</sub>	1695	334.02	1643	271.7	1668	148.7	1672	C=O st.
v <sub>19</sub>	1785	10.16	1639	225.1	1659	215.9	1620	C=N st.
v <sub>10</sub>	2949	155.53	3114	73.57	3131	60.47	2984	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H st.
v <sub>11</sub>	2943	3.05	3099	5.178	3116	2.34	-----	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H st.
v <sub>12</sub>	2909	20.49	3020	76.48	3030	64.13	-----	(C <sub>20</sub> )H <sub>2</sub> as. st.
v <sub>13</sub>	2904	127.3	3014	42.68	3025	36.11	-----	(C <sub>19</sub> )H <sub>2</sub> as. st.
v <sub>14</sub>	2756	117.8	2963	130.7	2989	108.7	-----	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>2</sub> s.st.
v <sub>15</sub>	2725	55.07	2954	128.5	2981	108.6	-----	(C <sub>20</sub> ,C <sub>19</sub> )H <sub>2</sub> s.st.
<b>3</b>								
<b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>								
<b>No. of freq</b>	<b>MINDO/3-FORCES</b>		<b>DFT/B3LYP</b>				<b>Obsd</b>	<b>Assignments</b>
			<b>CEP-121G</b>		<b>6-311G</b>			
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>10</sub>	3347	168.35	3480	2.181	3653	30.89	3045	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>13</sub>	1701	264.80	1650	143.7	1670	35.27	1671	C=O st.
v <sub>14</sub>	1802	42.68	1594	45.38	1599	49.75	1600	C=N st.
v <sub>54</sub>	755	37.52	786	40.27	814	29.19	-----	NO <sub>2</sub> sciss.

v <sub>55</sub>	739	22.85	664	17.64	686	1.852	-----	$\omega$ NO <sub>2</sub>
v <sub>67</sub>	438	0.65	517	1.332	534	3.713	-----	$\rho$ NO <sub>2</sub>
v <sub>68</sub>	428	0.60	481	3.107	529	3.638	-----	$\tau$ NO <sub>2</sub>
v <sub>9</sub>	3007	16.51	3144	13.89	3164	9.287	2964	C-H st.
v <sub>12</sub>	1652	384.2	1458	129.4	1435	34.92	-----	N-O <sub>2</sub> st.

4



No. of freq	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Obsd	Assignments
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	CEP-121G		6-311G			
			Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>13</sub>	3335	177.24	3509	13.53	3462	2.617	3190	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>15</sub>	1694	307.59	1703	164.7	1650	427.3	1670	C=O st.
v <sub>16</sub>	1787	13.62	1678	38.29	1655	2.197	1630	C=N st.
v <sub>12</sub>	2889	121.13	3038	90.55	3009	55.71	3000	C <sub>19</sub> -H <sub>33</sub> st.
v <sub>21</sub>	1464	106.6	1567	238.2	1559	75.70	-----	C <sub>15</sub> -O st.
v <sub>1</sub>	3035	60.67	3225	5.306	3211	10.48	-----	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.
v <sub>24</sub>	1297	157.58	1293	263.4	1372	285.9	-----	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> st.
v <sub>27</sub>	1345	218.06	1500	10.70	1527	11.25	-----	CH <sub>3</sub> s. deform
v <sub>34</sub>	1094	41.13	1281	408.6	1355	203.9	-----	Ring $\delta$ (C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H

5

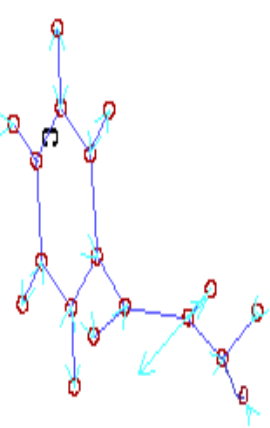
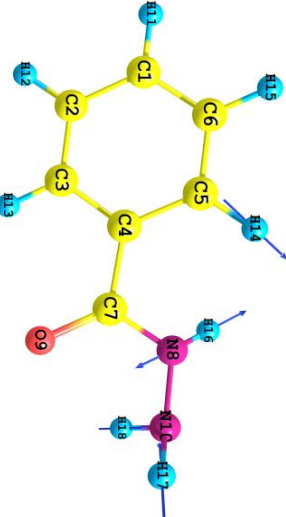
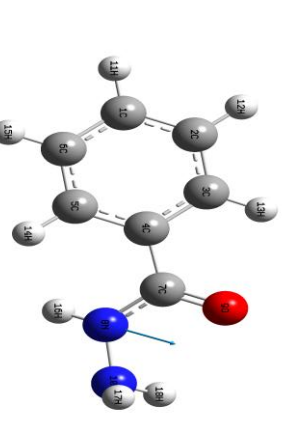
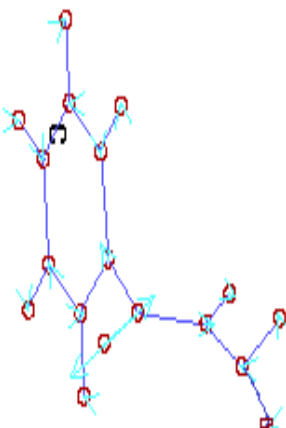
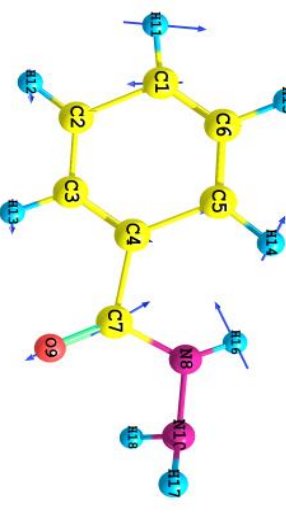
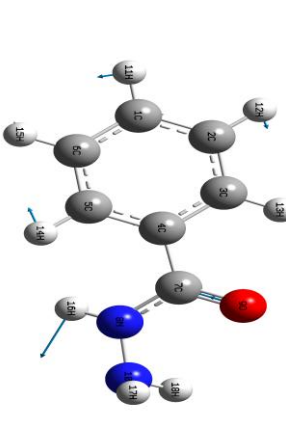

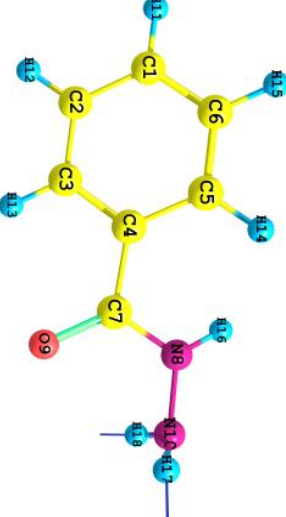
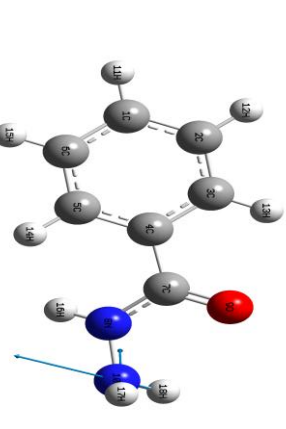


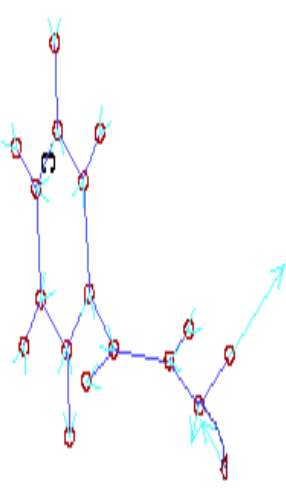
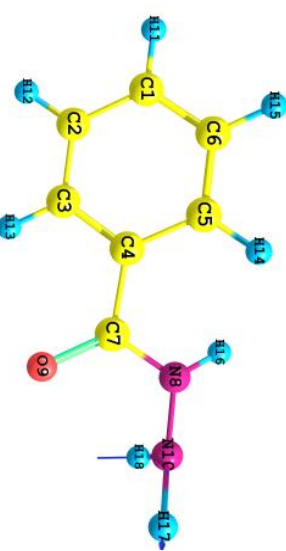
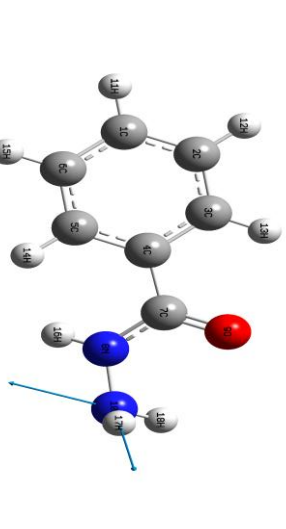
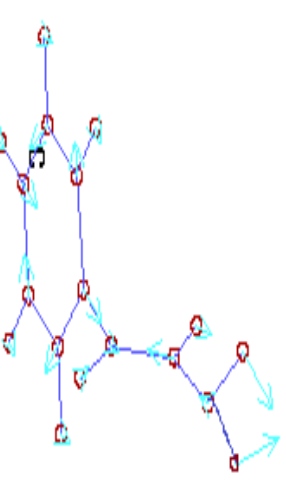
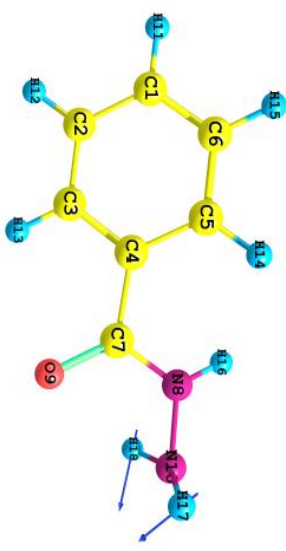
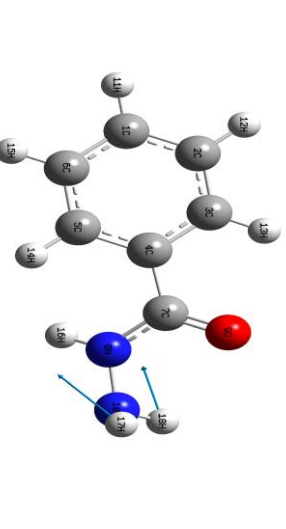
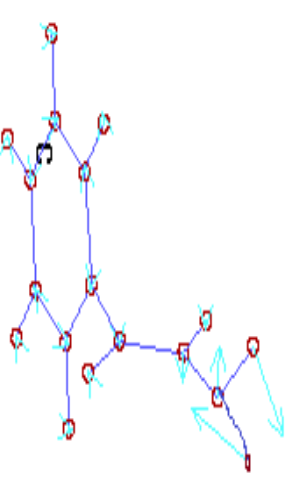
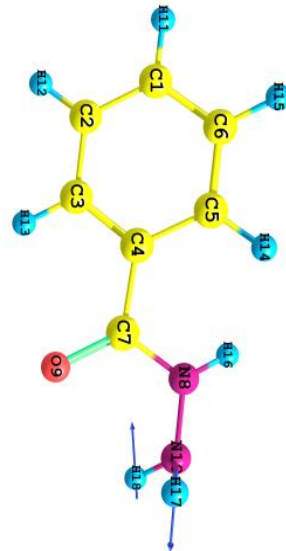
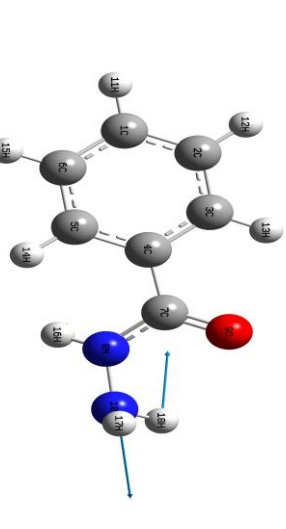
No. of freq	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Obsd	Assignments
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	CEP-121G		6-311G			
			Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>8</sub>	3470	35.99	3540	21.40	3487	12.92	3200	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>15</sub>	1681	234.83	1708	190.1	1647	174.7	1664	C=O st.
v <sub>16</sub>	1778	4.44	1642	8.399	1629	31.71	1580	C=N st.
v <sub>1</sub>	3607	3.28	3658	42.58	3707	49.61	3400	O <sub>18</sub> -H st.
v <sub>22</sub>	1436	76.00	1507	18.95	1496	7.88	-----	(C-O) st.
v <sub>2</sub>	3040	22.20	3246	2.371	3219	7.707	2968	C <sub>11</sub> -H st.
v <sub>27</sub>	1565	264.82	1533	10.49	1537	53.36	-----	CH <sub>3</sub> d. deform
v <sub>28</sub>	1232	9.89	1426	18.99	1426	43.25	-----	$\delta$ (C <sub>17</sub> -H)
v <sub>30</sub>	1309	25.10	1567	271.0	1483	89.27	-----	$\delta$ (N <sub>8</sub> -H)

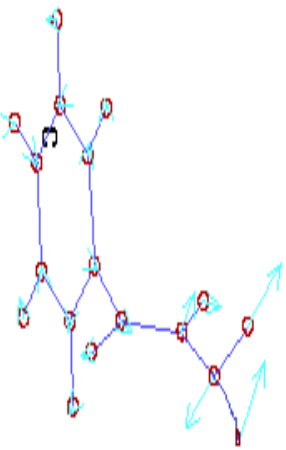
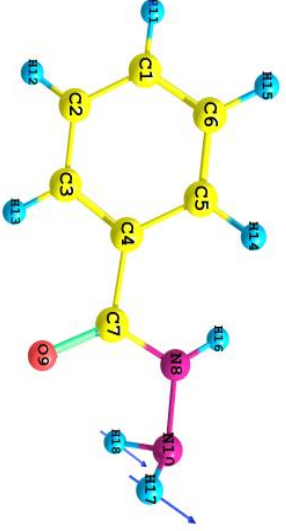
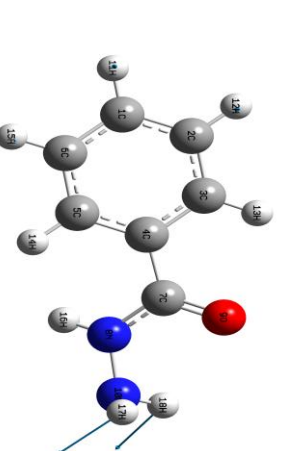
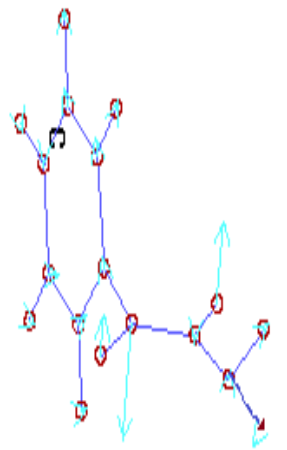
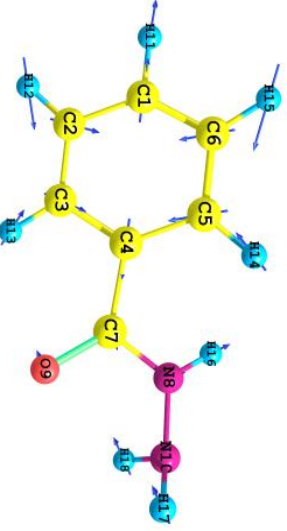
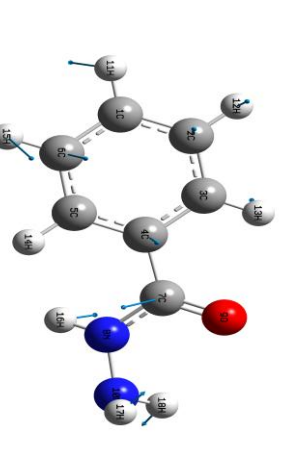
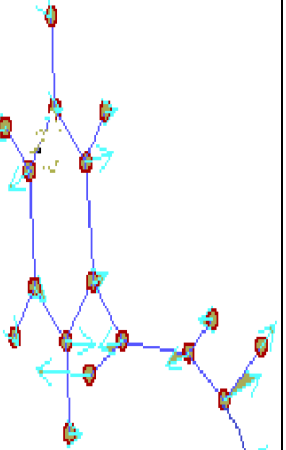
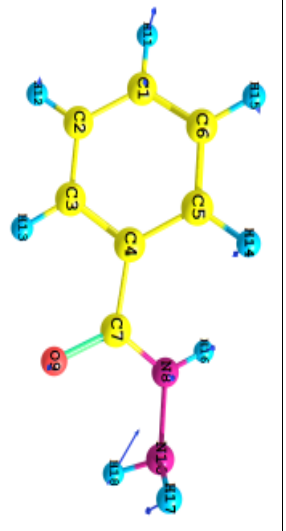
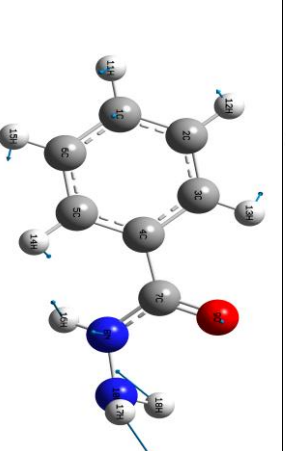
6



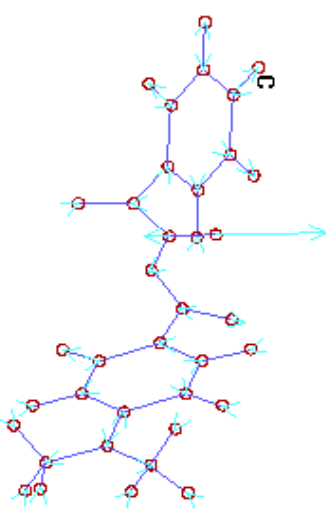
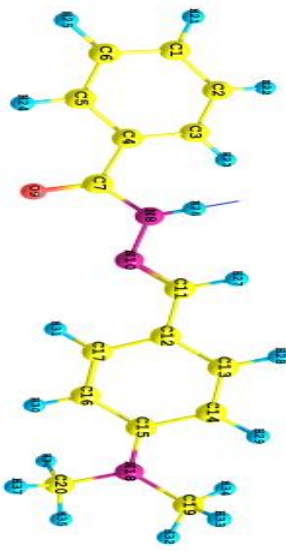
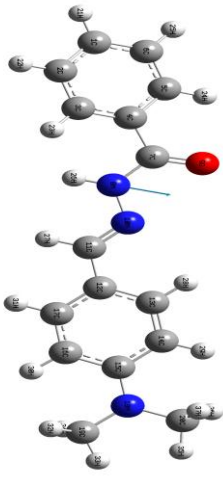
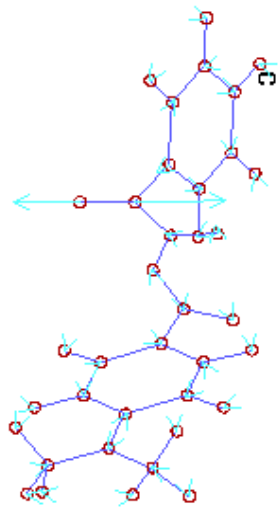
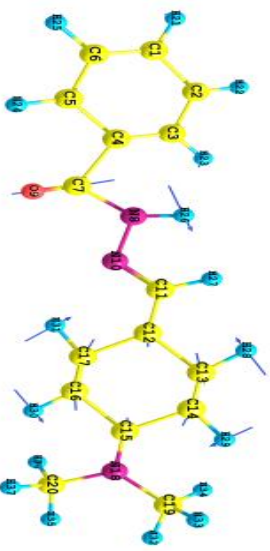
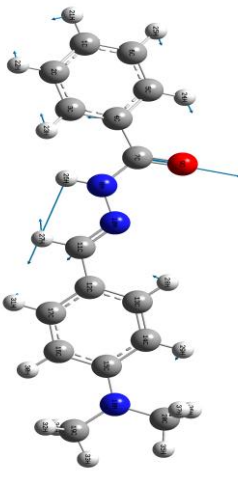
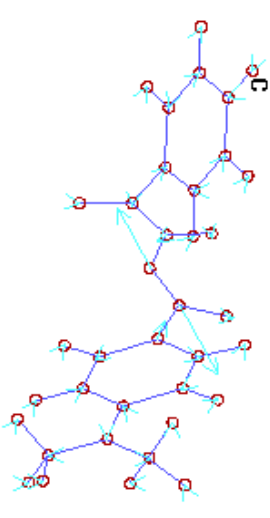
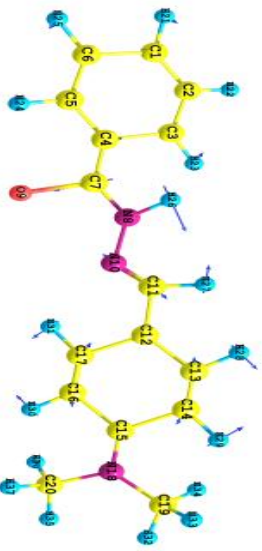
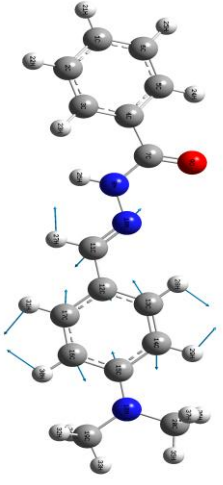
No. of freq	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Obsd	Assignments
	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	CEP-121G		6-311G			
			Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole	Freq. of 1/cm	Intensity of Km/mole		
v <sub>15</sub>	3325	202.12	3278	6.683	3659	25.32	3200	(N <sub>8</sub> )H st.
v <sub>17</sub>	1689	314.02	1645	274.7	1665	48.96	1664	C=O st.
v <sub>18</sub>	1784	2.75	1831	16.16	1587	185.2	1650	C=N st.
v <sub>9</sub>	2942	48.37	3143	0.809	3152	17.69	2968	C <sub>21</sub> -H <sub>35</sub> st.
v <sub>24</sub>	1452	218.9	1583	28.55	1360	0.885	-----	C <sub>17</sub> -O st.
v <sub>1</sub>	3044	20.06	3071	47.61	3216	15.88	-----	C <sub>14</sub> -H st.
v <sub>29</sub>	1356	173.31	1371	36.71	1532	80.75	-----	(C <sub>21</sub> )H <sub>3</sub> s. deform
v <sub>70</sub>	707	3.55	677	4.468	703	12.17	-----	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ (C <sub>7</sub> )-N
v <sub>104</sub>	22	0.31	17	0.021	22	1.280	-----	Deformations

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	1
			V <sub>6</sub>
			V <sub>9</sub>
			V <sub>7</sub>

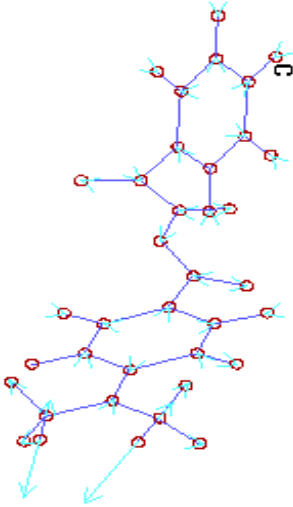
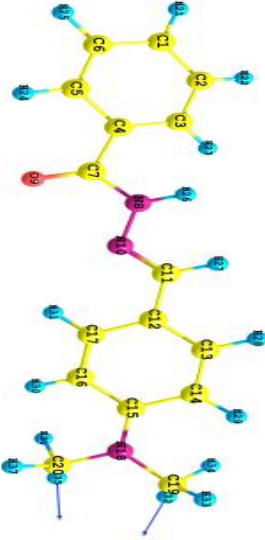
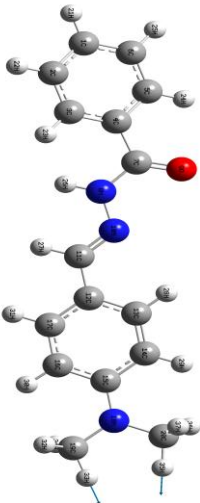
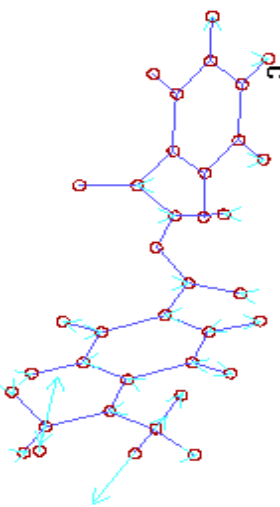
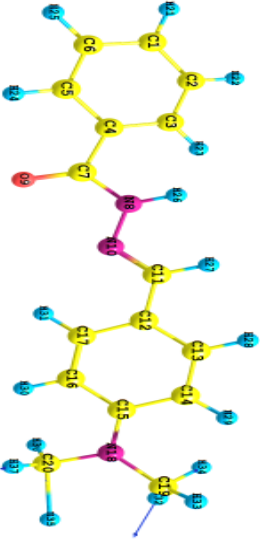
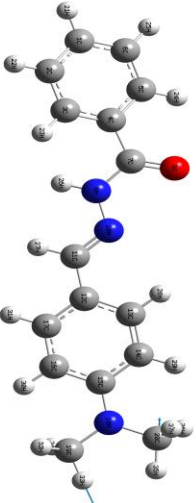
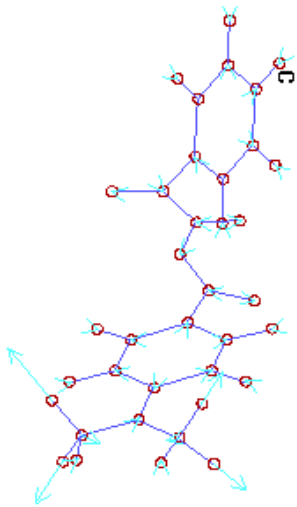
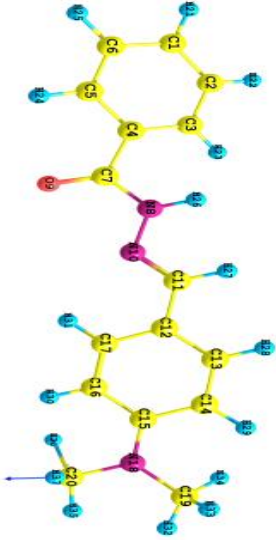
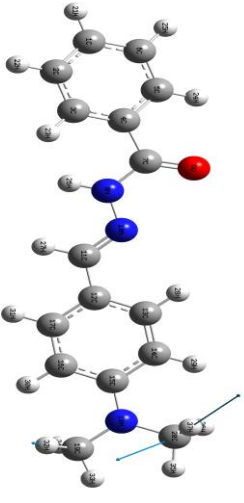
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	1
			V8
			V13
			V21

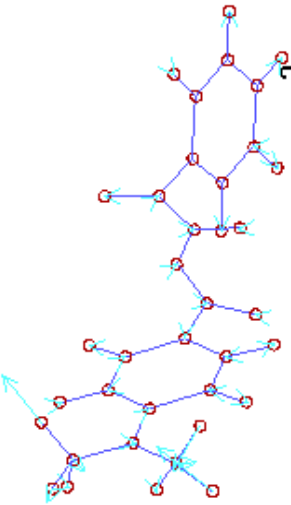
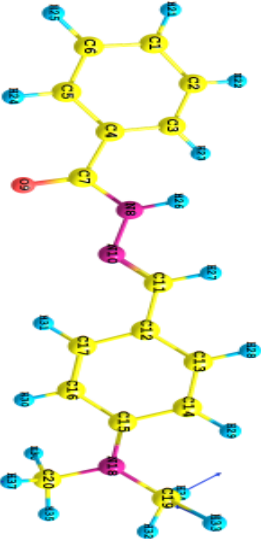
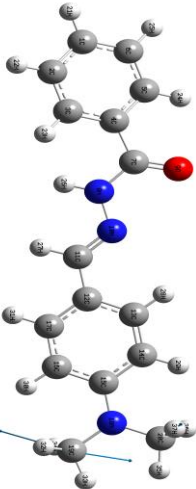
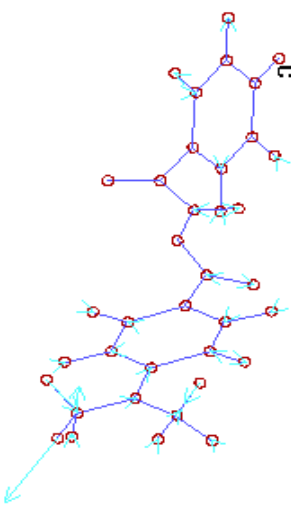
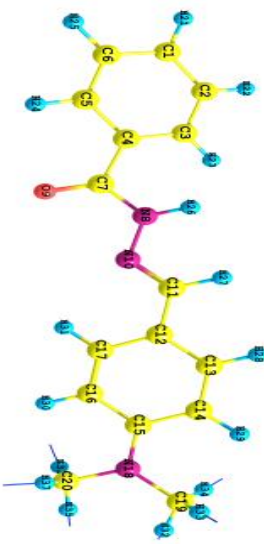
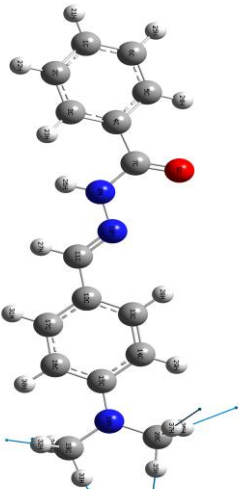
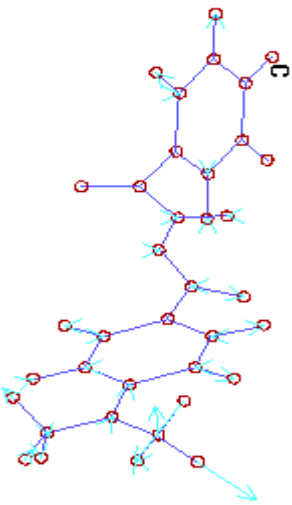
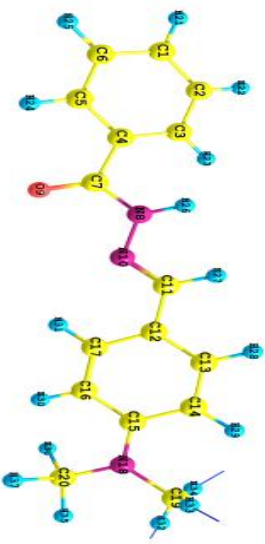
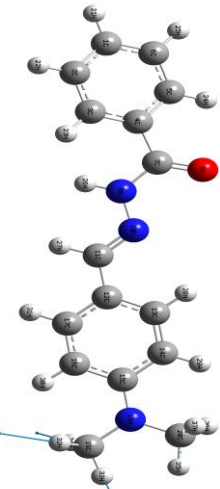
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	1
			V26
			V34
			V43

شكل 2-3 : بعض الأشكال الواسفة للأقطار الاهتزازية ل حامض البيزويك هيدرازيد و المحسوبة وفق طرق الحساب المستخدمة

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	2
			V16
			V18
			V19

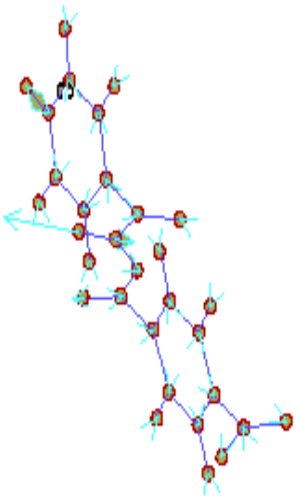
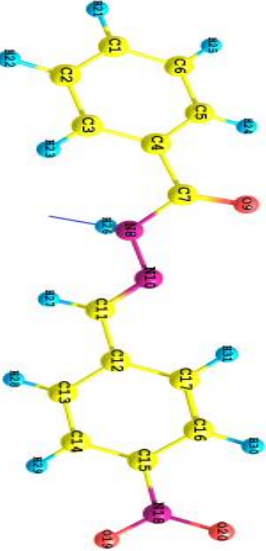
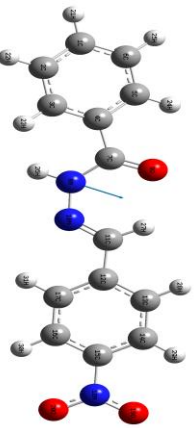
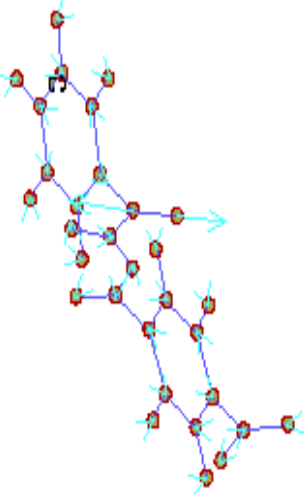
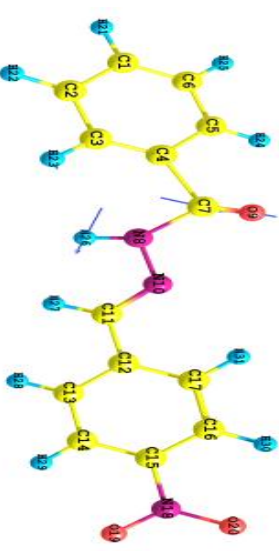
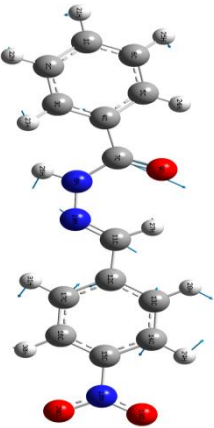
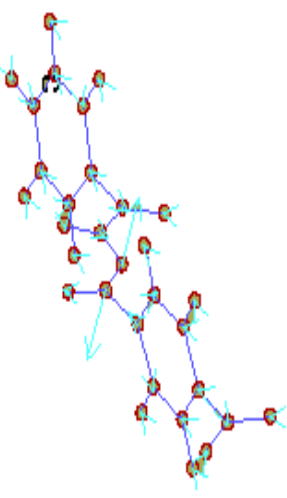
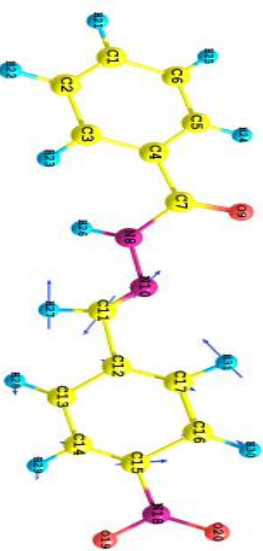
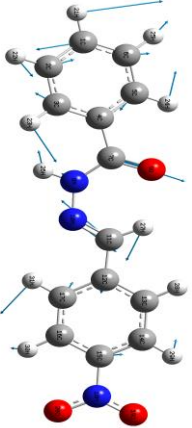


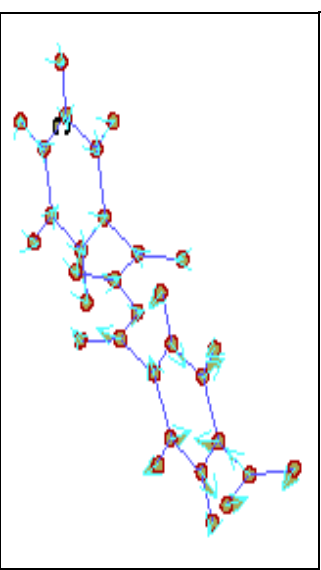
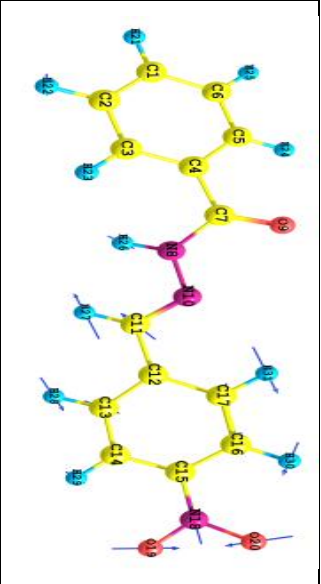
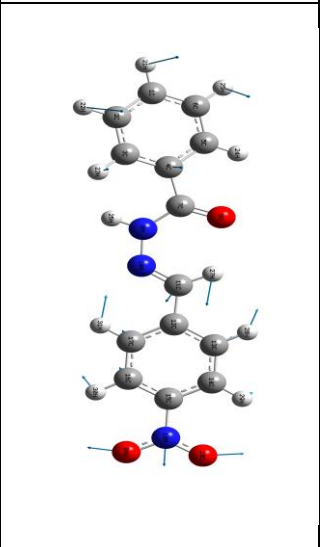
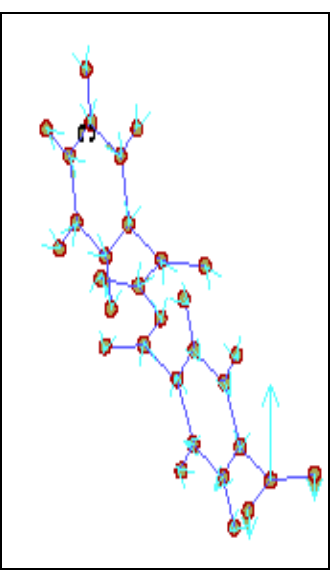
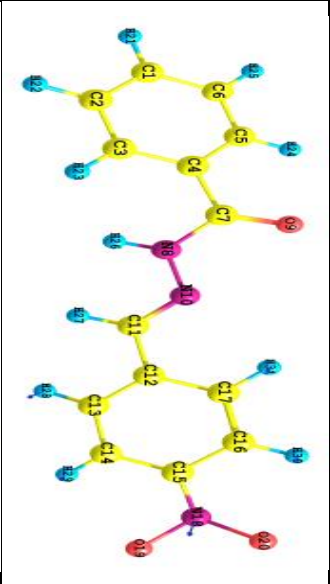
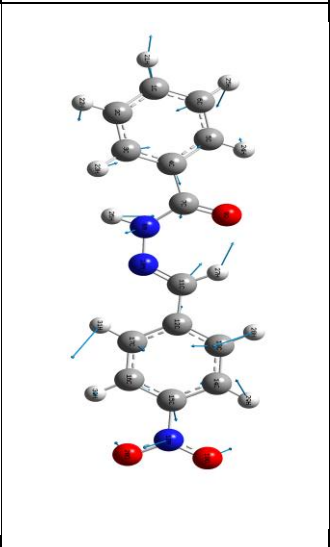
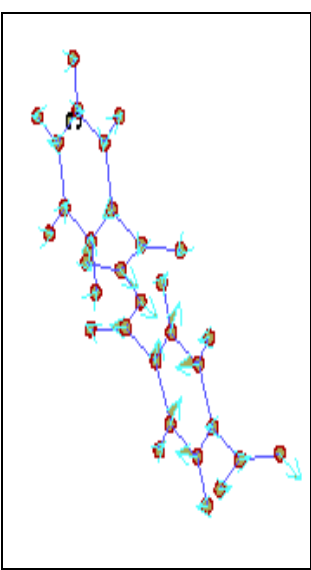
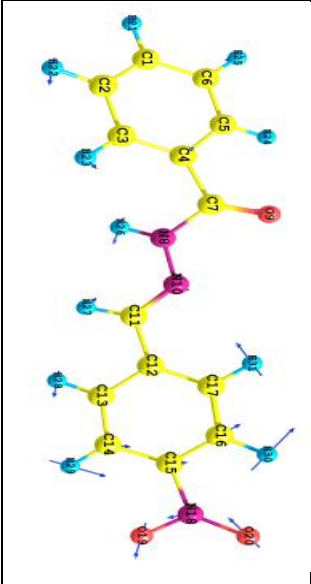
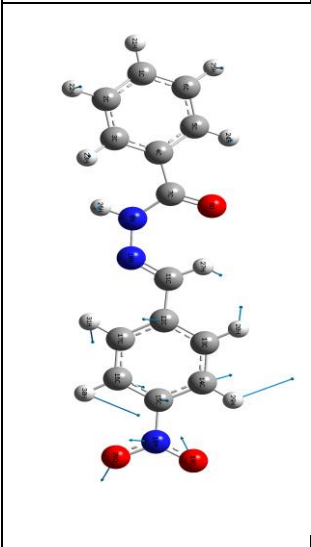
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	2
			V10
			V11
			V12

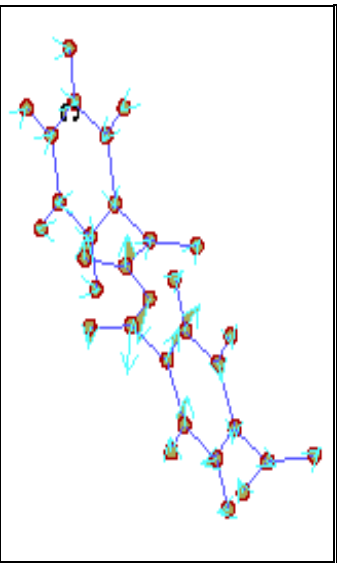
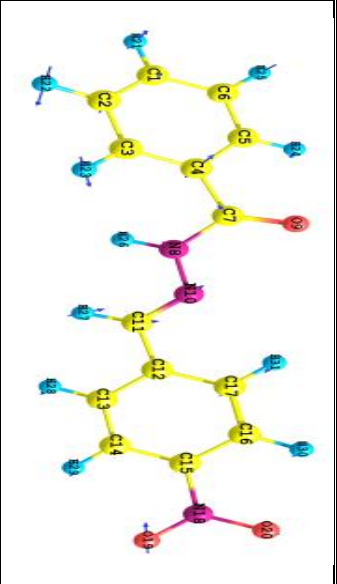
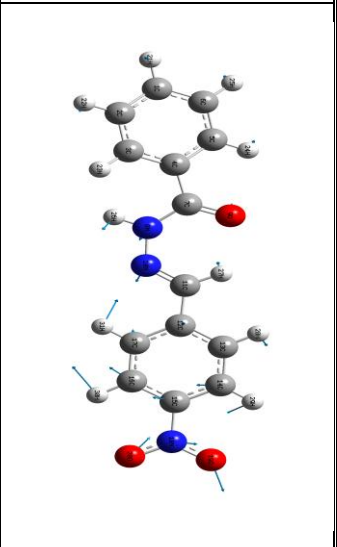
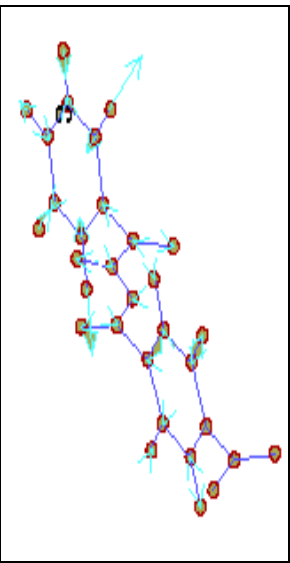
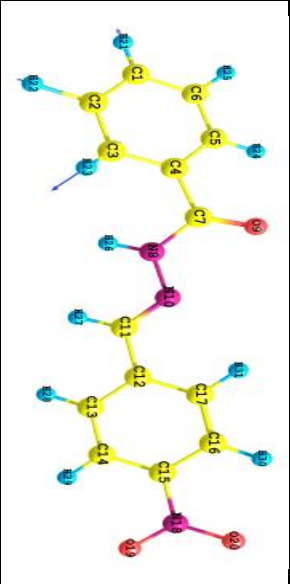
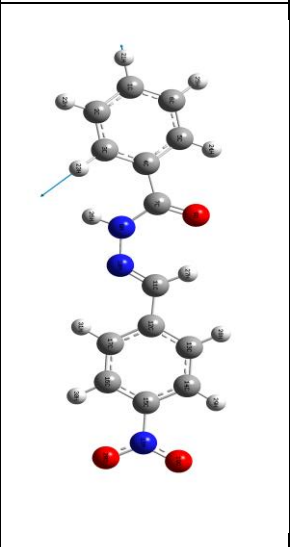
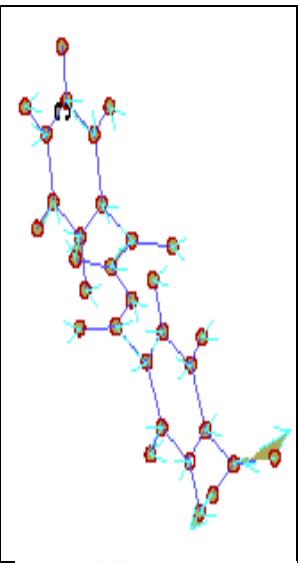
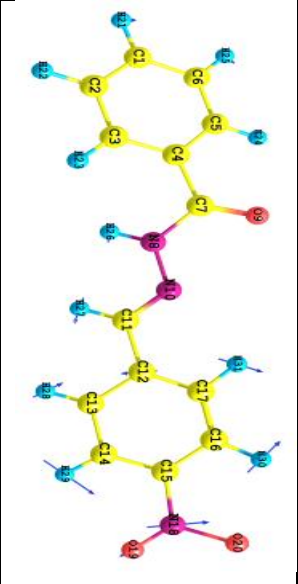
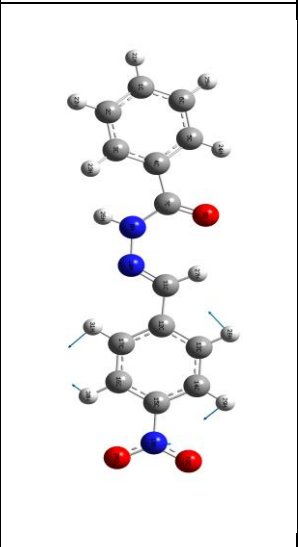
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	2
			V13
			V14
			V15

شكل 3-3 : بعض الأشكال الواسعة للأصاط الاهتزازية لـ [ حامض البنزويك (4-ثنائي ميثيل امينو - بنز لدين) - هيدرازيد ] والمحسوبة وفق طرق الحساب المستخدمة

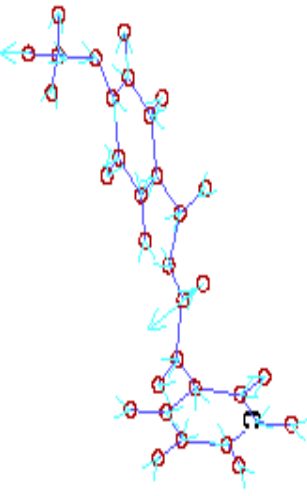
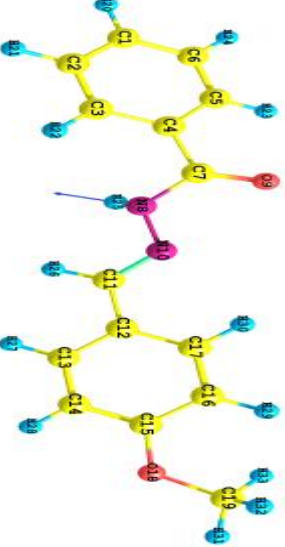
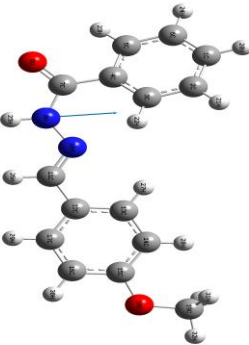
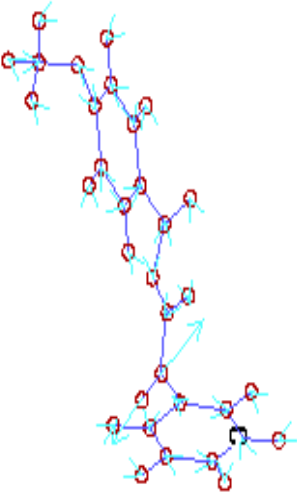
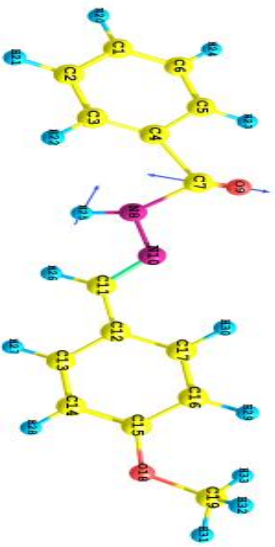
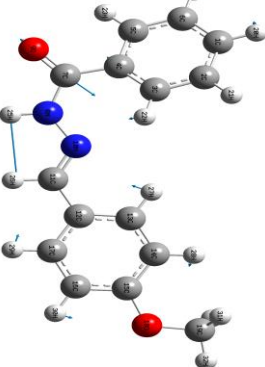
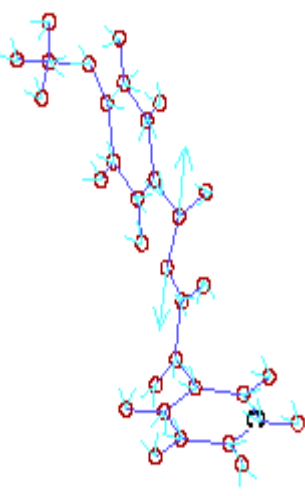
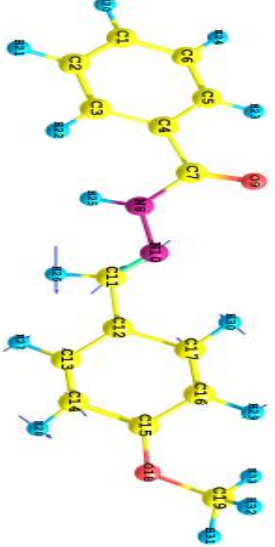
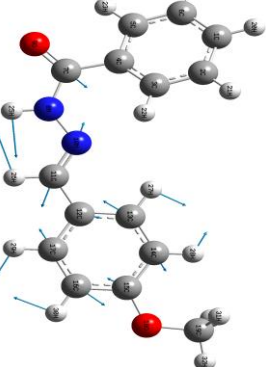


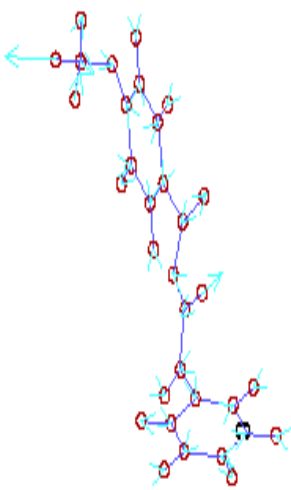
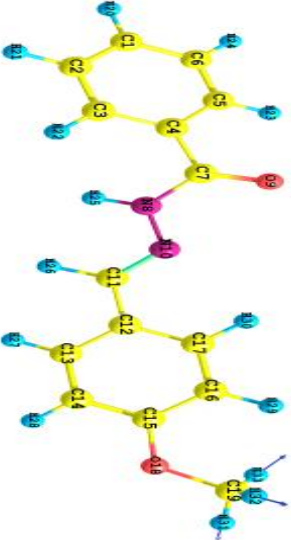
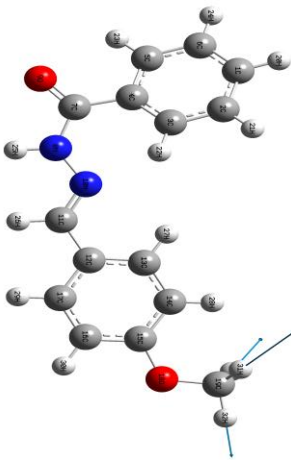
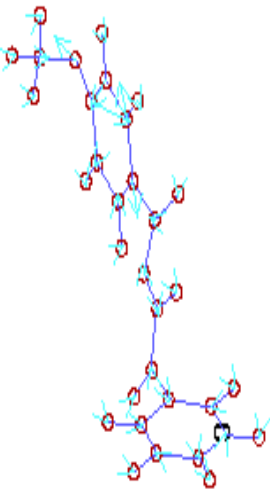
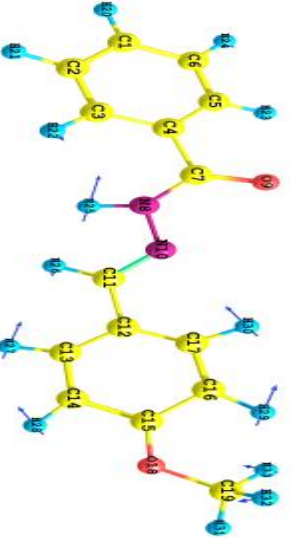
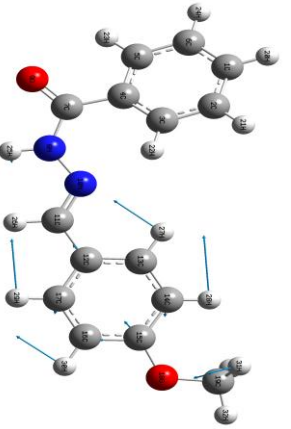
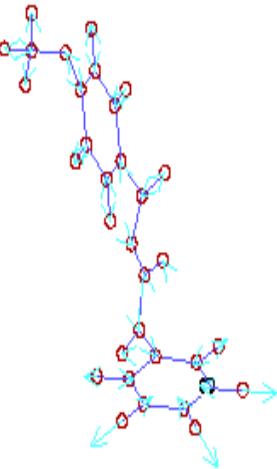
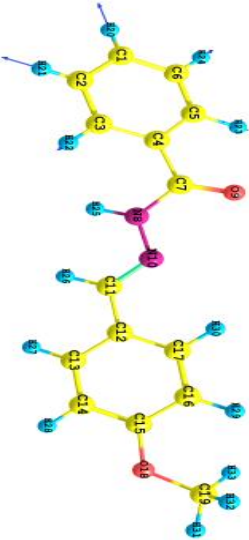
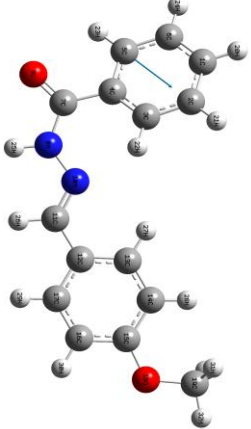
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	3
			V10
			V13
			V14

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	3
			V54
			V55
			V67

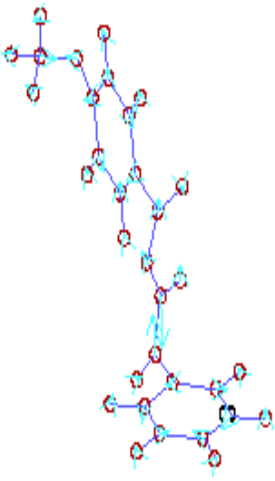
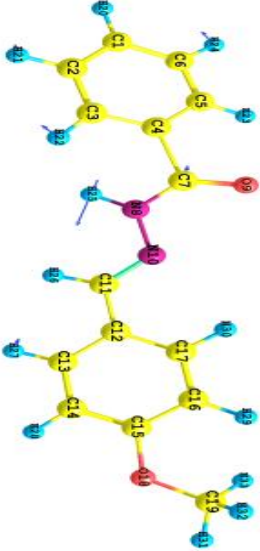
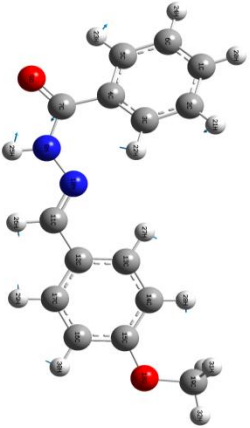
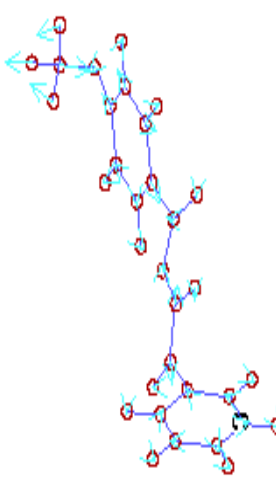
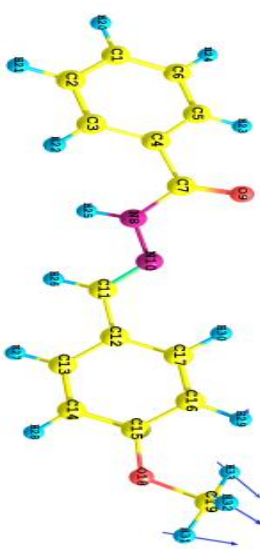
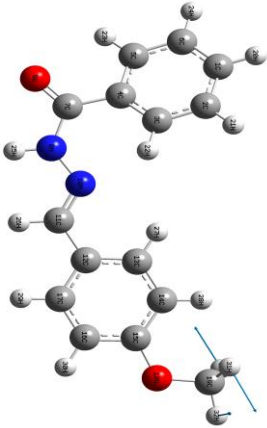
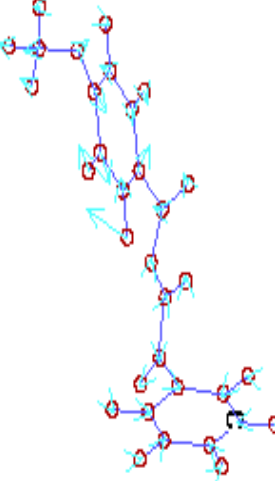

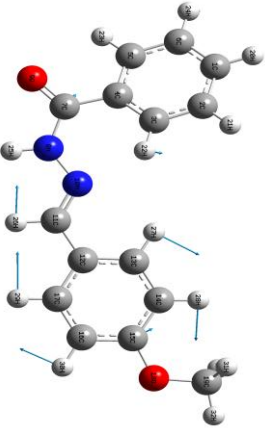
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	3
			V <sub>68</sub>
			V <sub>9</sub>
			V <sub>12</sub>

شكل 4-3 : بعض الأشكال الواصفة للأصناف الاهتزازية لـ [4-نايتر وبنزولين] و المحسوبة وفق طرق الحساب المستخدمة

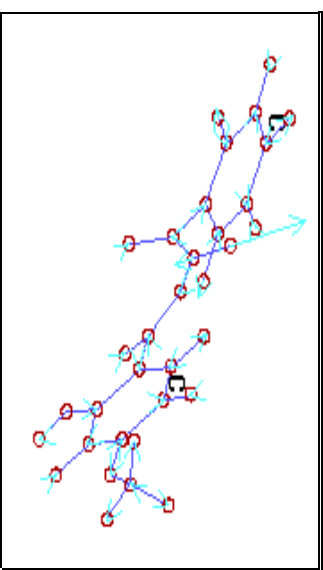
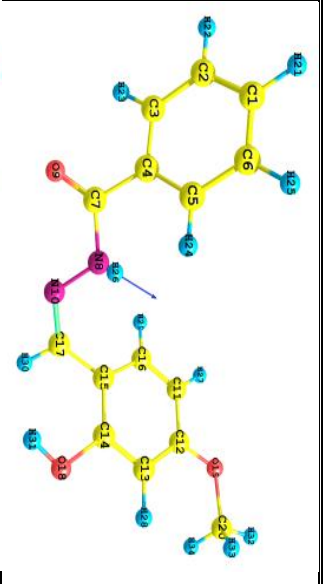
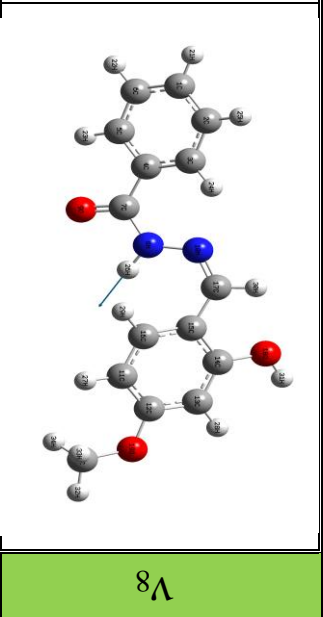
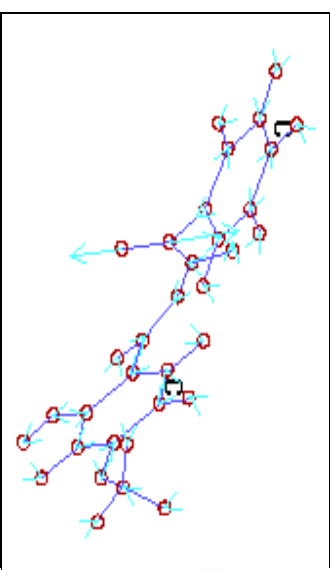
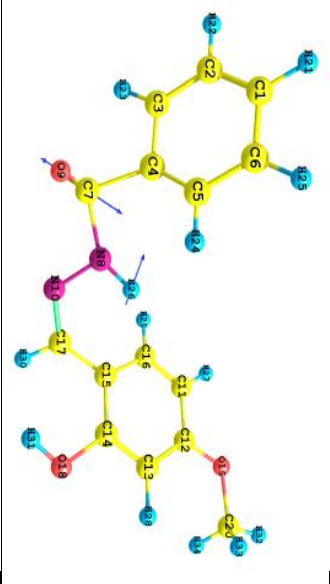
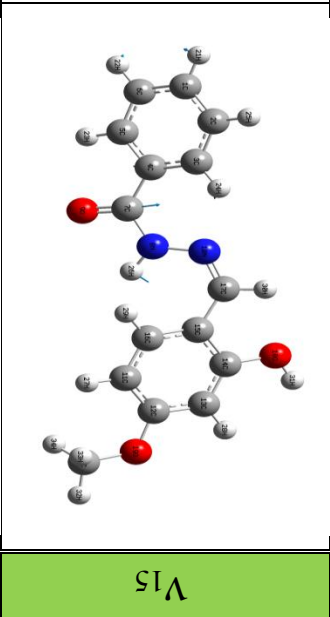
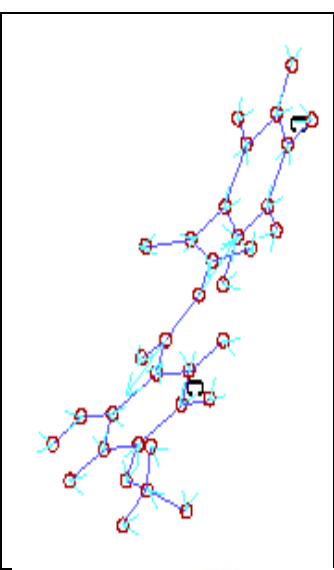
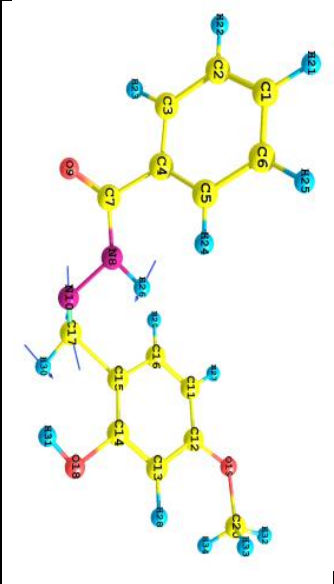
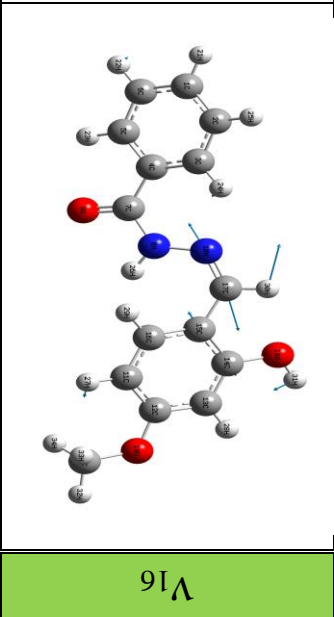
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	4
			V13
			V15
			V16

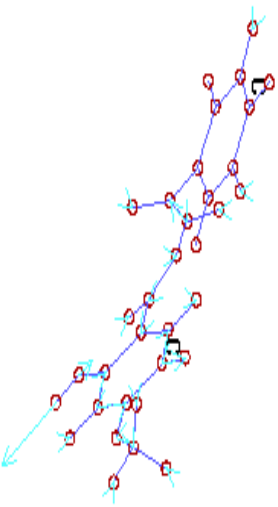

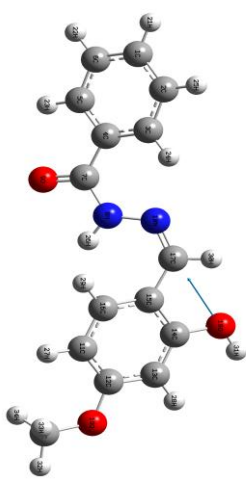
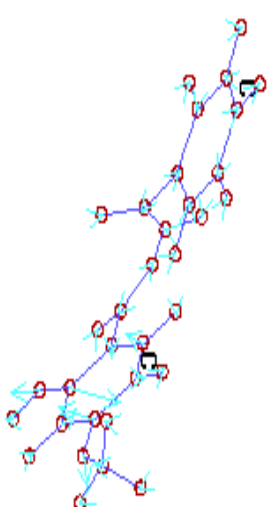
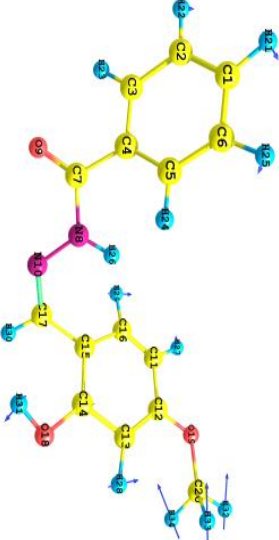
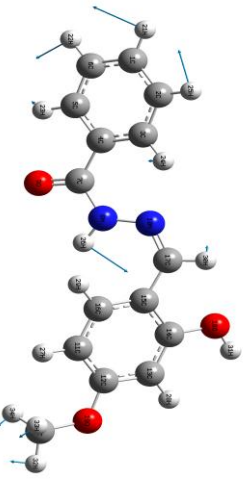
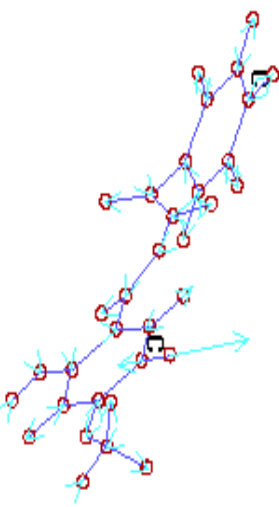
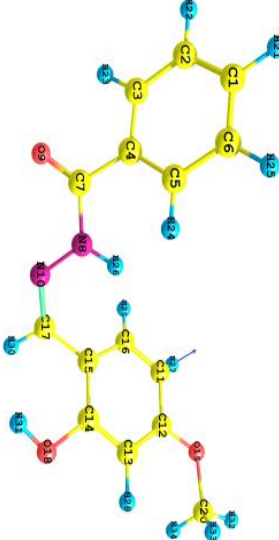
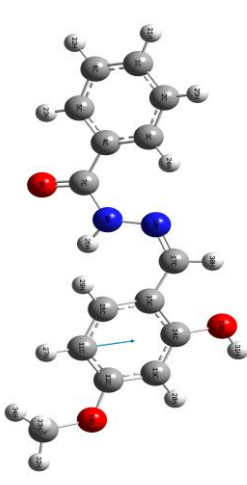
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	4
			V <sub>12</sub>
			V <sub>21</sub>
			V <sub>1</sub>



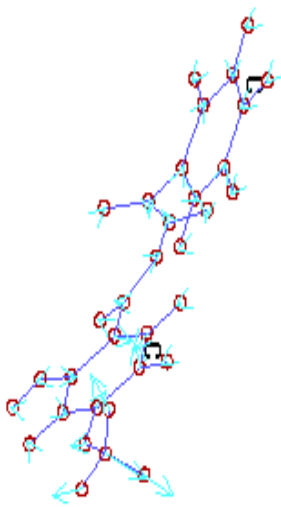
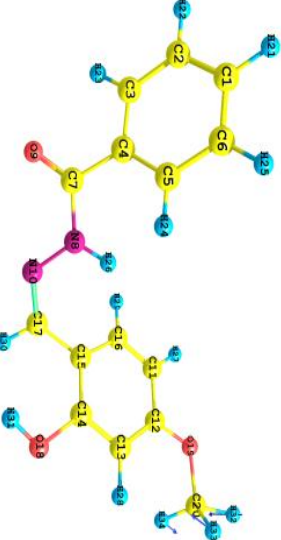
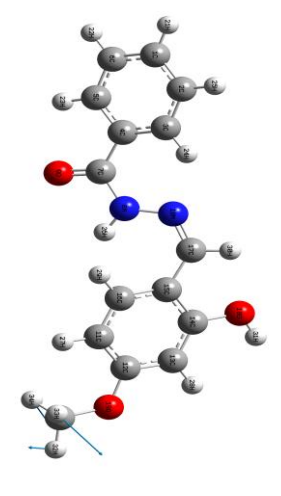
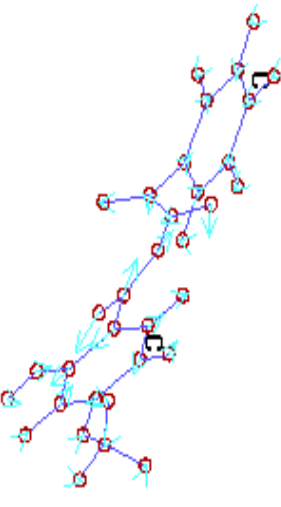
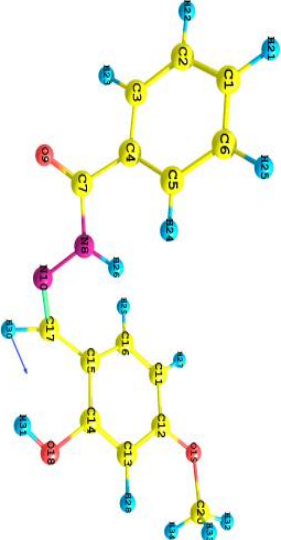
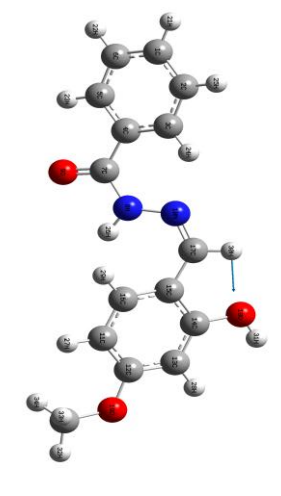
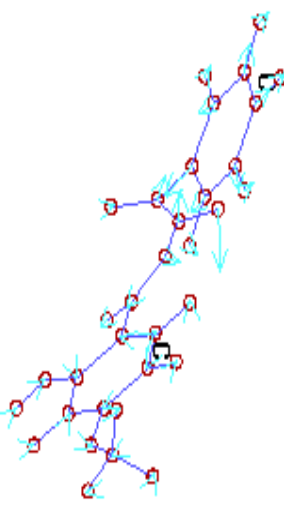
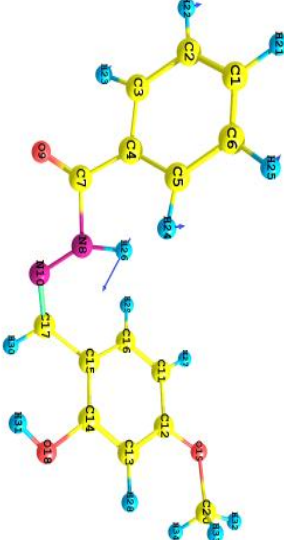
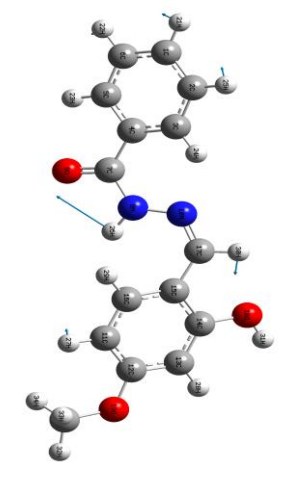
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	4
			V24
			V27
			V34

شكل 5-3 : بعض الأشكال الواصفة للأصفاة للاهتزازية لـ [4-ميثوكسي بنزولين] بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

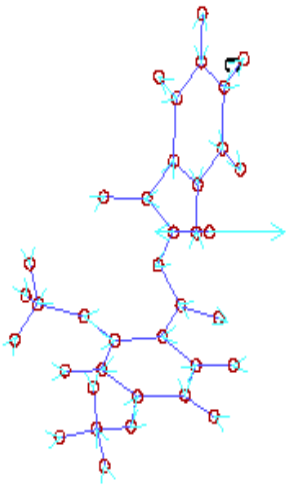
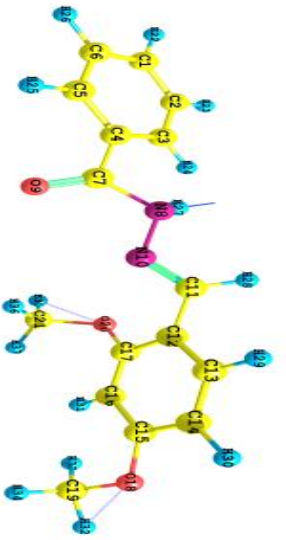
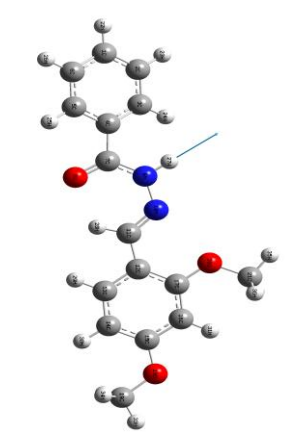
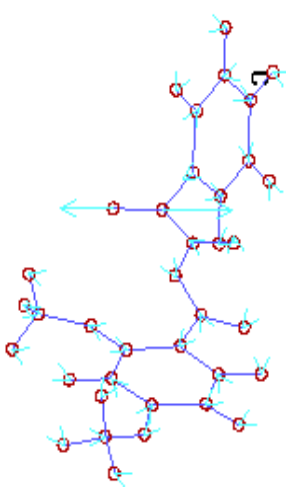
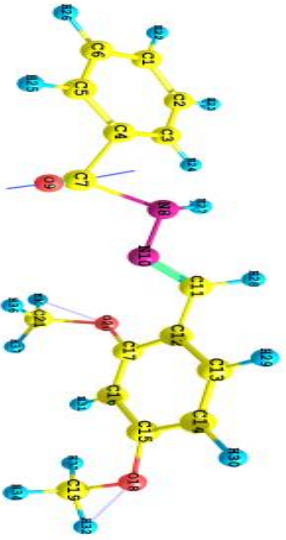
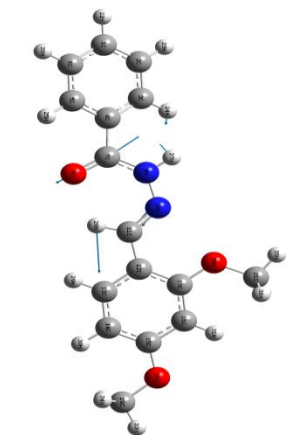
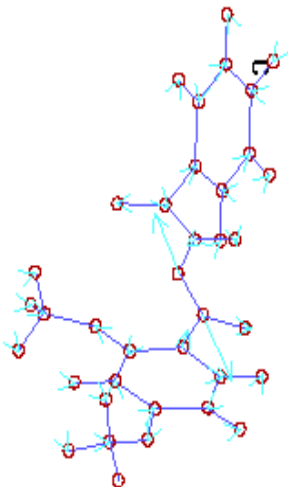
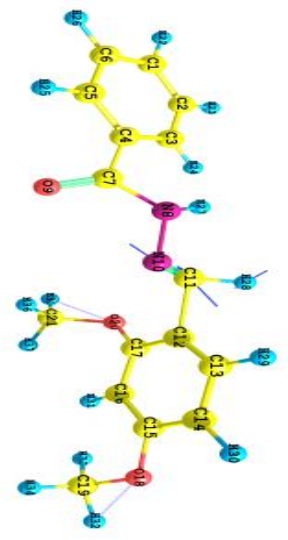
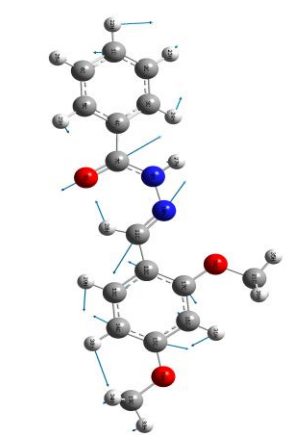
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	5
			V <sub>8</sub>
			V <sub>15</sub>
			V <sub>16</sub>

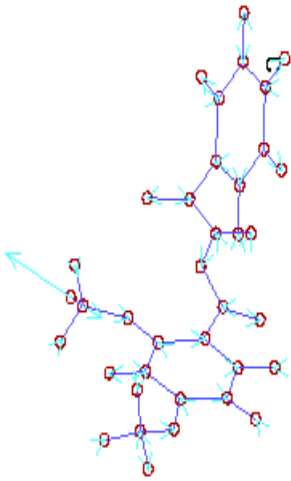
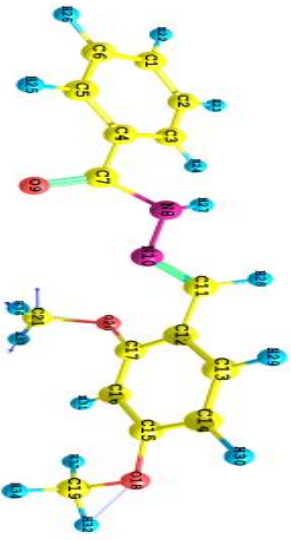
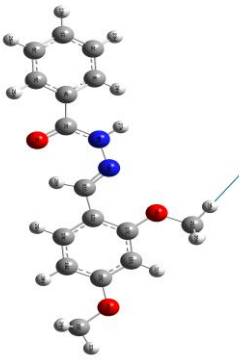
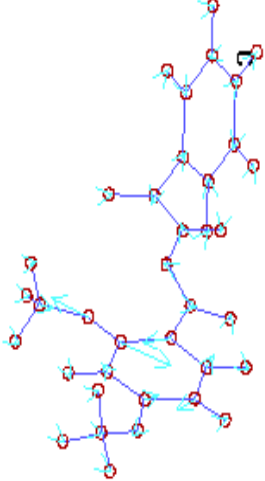

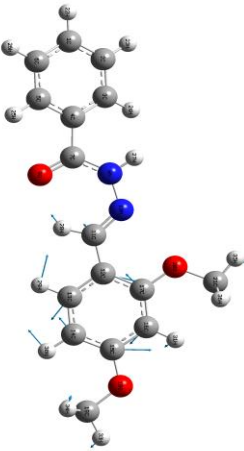
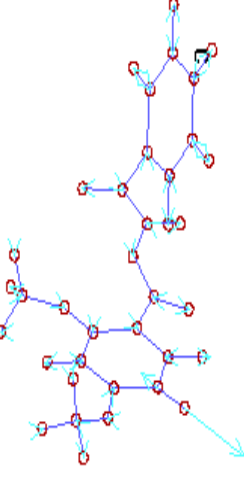
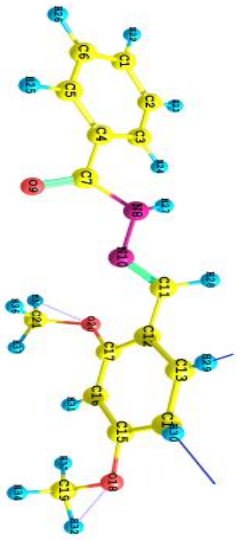
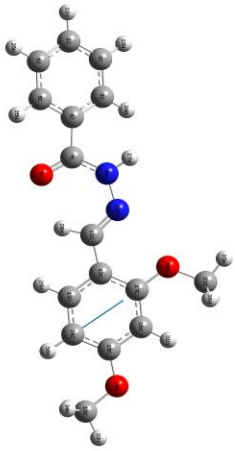
MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	5
			V <sub>1</sub>
			V <sub>22</sub>
			V <sub>2</sub>

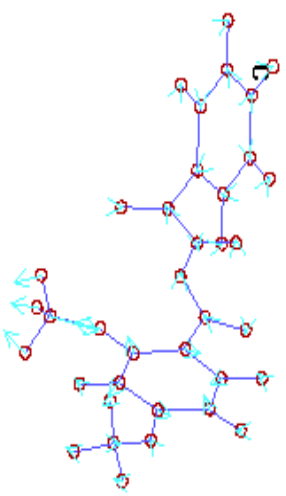
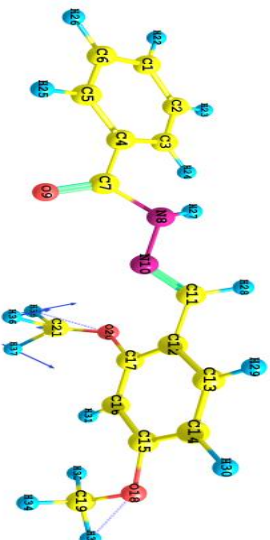
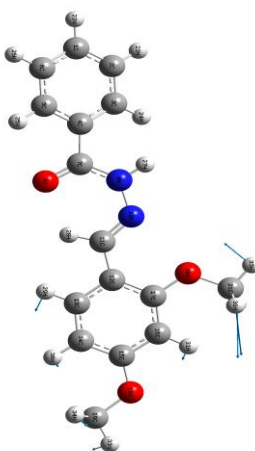

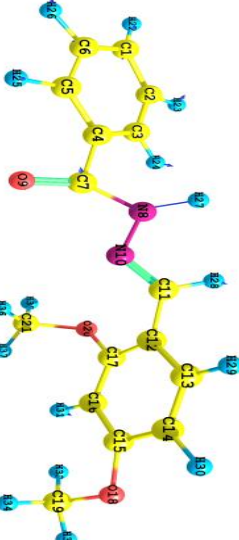
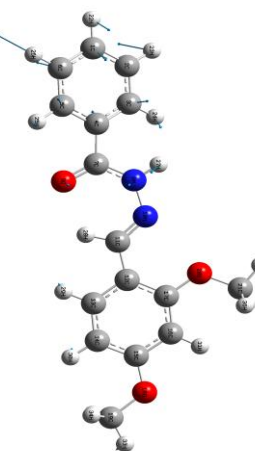
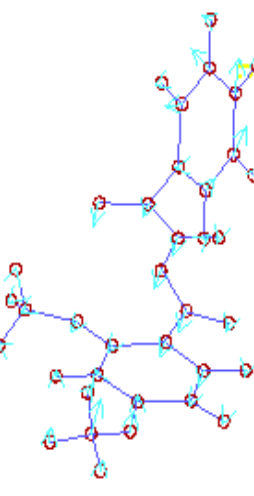
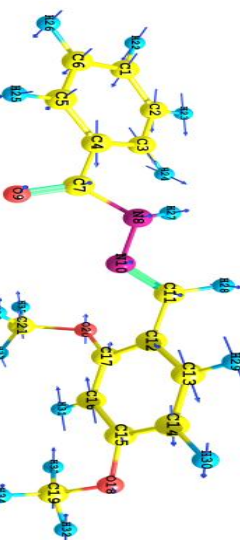
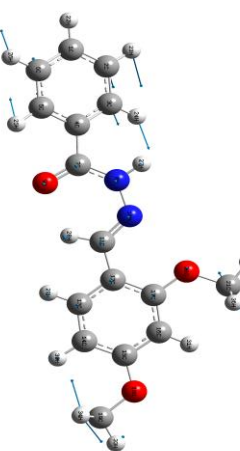


MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	5
			V27
			V28
			V30

شكل 6-3 : بعض الأشكال الواصفة للأصناف الاهتزازية لـ [2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	6
			V15
			V17
			V18

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	6
			V <sub>9</sub>
			V <sub>24</sub>
			V <sub>1</sub>

MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP (CEP-121G)	DFT/B3LYP (6-311G)	6
			V29
			V70
			V104

شكل 3-7 : بعض الأشكال الواصفة للاضطراب الاهتزازية لـ [2,4-ثنائي ميثوكسي بنزين] والمحصوبة وفق طرق الحساب المستخدمة

### 5-3 حرارة التكوين القياسية ( $\Delta H_f^0$ ) Standard heat of formations

إن ملاحظة النتائج المستحصلة من الحساب الجدول 5-3 تشير الى وجود اختلاف في قيم حرارة التكوين ، من ناحية نوع التعويض على المركب ان كان مجموعة دافعة او ساحبة للالكترونات وكذلك حجم المعوضات على المركب ، حيث تبين ان المركب 5 والمعوض بحلقة بنزين عليها مجموعة ميثوكسي في الموقع بارا ومجموعة هيدروكسي في الموقع اورثو هو الاكثر استقرارا حيث كلما كانت حرارة التكوين اقل كان المركب اكثر استقرارا (66) ، وكذلك نلاحظ ان تأثير عامل الاعاقة الفراغية في المركب 2 جعله الاقل استقرارا واعلى بكثير بقيم حرارة التكوين من باقي المركبات المدروسة .

### 6-3 عزم ثنائي القطب ( $\mu$ ) Dipole moment

تشير القيم المحسوبة جدول 5-3 إلى التغير الملحوظ في قيم عزم ثنائي القطب حيث تراوحت بحدود Debye (9.383-1.676) وكما تظهر في التدرج التالي :  $3 > 5 > 2 > 4 > 1 > 6$  يعود السبب في ذلك إلى تأثير نوع المعوض وموقعه الذي ينتج عنه حصول اختلاف في شحنات المركبات والمسافات بين الذرات لها وذلك على أساس إن عزم ثنائي القطب يعتمد بصورة رئيسة على كل من الشحنات والبعد بين الذرات (73) .

$$\mu = \sum_1^n qi \times ri \dots\dots\dots 1-3$$

حيث إن :- q يمثل الشحنة بينما الرمز r يشير إلى المسافة بين الذرات .

جدول 5-3 : عزم ثنائي القطب وحرارة التكوين للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

Molecules	$\Delta H_f^0$ (kJ/mol)	Dipole moment ( $\mu$ in Debye)			
		MINDO/3-FORCES	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
				CEP-121G	6-311G
1 C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	-79.8445		4.3977	2.9974	2.8287
2 C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	168.655		3.780	5.7588	5.5351
3 C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	-15.1001		7.555	9.8380	8.6906
4 C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	-122.888		3.263	3.1951	4.8932
5 C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-341.0663		3.766	5.8925	5.2011
6 C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-329.2252		2.748	2.9499	1.6756

## Orbital Energies

## 7-3 الطاقات المدارية

### 1-7-3 طاقة اعلى مدار جزيئي مشغول (HOMO)

#### Highest Occupied Molecular Orbital

أظهرت نتائج الحساب في الجدول 3-6 ان طاقات اعلى مدار ممتلئ بالإلكترونات تراوح بحدود (-5.1765,-9.4028)ev وحيث اخذت المركبات الترتيب التالي :

$$2 > 6 > 5 > 4 > 3 > 1$$

ومن الترتيب اعلاه نلاحظ ان المركب 2 له اعلى قابلية لفقد الإلكترونات (عملية اكسدة) لكونه يمتلك اعلى قيمة لطاقة اعلى مدار جزيئي مشغول (229) ، يعود السبب في ذلك لتعويض مجموعة دافعة للإلكترونات قوية عليه ، بينما المركب الاساسي الغير معوض اي حامض البنزويك هيدرازيد هو الاقل قيمة لطاقة اعلى مدار جزيئي مشغول وذلك يدل على ضعف ميله لفقد الإلكترونات .

### 2-7-3 طاقة أوطأ مدار جزيئي فارغ (LUMO)

#### Lowest Unoccupied Molecular Orbital

من ملاحظة الجدول 3-6 يكون المدى في قيم طاقات اوطأ مدار غير مشغول للمركبات المدروسة بحدود (-3.1987,0.6817)ev ، حيث يتضح ان المركب 3 له اكبر قابلية لاكتساب الإلكترونات (عملية اختزال) لأنه يمتلك اقل طاقة لأوطأ مدار جزيئي غير مشغول (229) ، يكون للمجموعة الساحبة للإلكترونات الاثر في ذلك ، ثم تتدرج المركبات تباعا بانخفاض قابليتها على اكتساب الإلكترونات وذلك بارتفاع طاقة اوطأ مدار جزيئي غير مشغول بالإلكترونات .

**جدول 3-6 :** طاقة اعلى مدار جزيئي ممتلئ بالإلكترونات وأوطأ مدار غير مشغول للمركبات

المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

<i>Molecules</i>	<i>HOMO (ev)</i>			<i>LUMO (ev)</i>		
	<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
<b>1</b> C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	-9.4028	-7.1596	-7.0835	0.5776	-1.4795	-1.3660
<b>2</b> C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	-7.5905	-5.2154	-5.1765	0.6316	-1.5674	-1.4917
<b>3</b> C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	-8.9579	-6.9817	-6.9463	-0.0933	-3.4085	-3.1987
<b>4</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	-8.0452	-5.6369	-5.9787	0.5725	-1.5124	-1.7916
<b>5</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-7.7413	-6.0766	-6.1381	0.6817	-1.5899	-1.6444
<b>6</b> C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	-7.6979	-8.9793	-5.6508	0.6464	-0.4395	-1.5557



### *Ionization Potential*

### 3-7-3 جهد التأين (IP)

من ملاحظة الجدول 7-3 تكون قابلية المركبات على التأين كما يلي :

$$1 > 3 > 4 > 5 > 6 > 2$$

كما ونلاحظ من الجدول ان قيم طاقات جهد التأين تراوحت (9.4028,5.1765)ev ، ومن ترتيب الجزيئات في قابليتها على فقدان الالكترونات نجد ان اصعب جزيئة في التأين 1 لان لها اكبر جهد تأين وعلى العكس في الجزيئة 2 فهي الاسهل في الفقدان لان لها اقل قيمة لجهد التأين ، وقد يفسر ذلك امتلاك الاخيرة مجموعة دافعة للإلكترونات قوية حيث تؤثر في زيادة الكثافة الالكترونية ومن جانب اخر التأثير الناجم عن كبر حجم المجموعة المعوضة .

### *Electron Affinity*

### 4-7-3 الالفة الالكترونية (EA)

من ملاحظة الجدول 7-3 في ادناه يتبين ان المركبات المعوضة بمجاميع ساحبة للإلكترونات تكون ذات الافة الكترونية عالية اي لها القابلية على اكتساب الالكترونات وتحرير الطاقة ، حيث تراوحت طاقات الالفة ولجميع المركبات بحدود (3.4085,-0.6817)ev .

**جدول 7-3 :** قيم جهد التأين والالفة الالكترونية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق

الحساب المستخدمة

<i>Molecules</i>	<i>IP (ev)</i>			<i>EA (ev)</i>		
	<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
<b>1</b> C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	9.4028	7.1596	7.0835	-0.5776	1.4795	1.3660
<b>2</b> C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	7.5905	5.2154	5.1765	-0.6316	1.5674	1.4917
<b>3</b> C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.9579	6.9817	6.9463	0.0933	3.4085	3.1987
<b>4</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	8.0452	5.6369	5.9787	-0.5725	1.5124	1.7916
<b>5</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.7413	6.0766	6.1381	-0.6817	1.5899	1.6444
<b>6</b> C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.6979	8.9793	5.6508	-0.6464	0.4395	1.5557

### *Electronegativity*

### 5-7-3 الكهروسلبية (EN)

من ملاحظة الجدول 8-3 تدرجت الجزيئات في كهروسليبيتها من اعلى قيمة لها في الجزيئة 3 بحدود (5.1951-4.5256)ev ثم حامض البنزويك هيدرازيد ثم باقي الجزيئات ذات المعوضات الدافعة للإلكترونات ، وصولا للجزيئة 2 بأقل قيمة للكهروسلبية ، وقد يعود ذلك لقوة المجموعة الدافعة للإلكترونات [-N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>] وكبر حجمها .

### 6-7-3 الالكتروفيلية ( $G$ ) Electrophilicity

من الجدول 3-8 يتبين ان اكثر الجزيئات الكتروفيلية هو الهيدرازون المعوض بمجموعة النايترو الساحة للإلكترونات ( $-NO_2$ ) مركب 3 حيث تراوحت الكتروفيليته بحدود (7.5532-2.3104)ev ويأتي بعده الهيدرازونات المعوضة بمجاميع دافعة تباعا حسب قوة الدفع وصولا للمركب 2 باقل قيمة للالكتروفيلية .

جدول 3-8 : الكهروسلبية والالكتروفيلية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب

المستخدمة

<i>Molecules</i>	<i>EN (ev)</i>			<i>G (ev)</i>		
	<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>MINDO/3 -FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
<b>1</b> $C_7H_8N_2O$	4.4126	4.3196	4.2248	1.9509	3.2849	3.1217
<b>2</b> $C_{16}H_{17}N_3O$	3.4794	3.3914	3.3341	1.4724	3.1528	3.0168
<b>3</b> $C_{14}H_{11}N_3O_3$	4.5256	5.1951	5.0725	2.3104	7.5532	6.8658
<b>4</b> $C_{15}H_{14}N_2O_2$	3.7364	3.5747	3.8852	1.6199	3.0981	3.6049
<b>5</b> $C_{15}H_{14}N_2O_3$	3.5475	3.8333	3.8912	1.4941	3.2749	3.3696
<b>6</b> $C_{16}H_{16}N_2O_3$	3.5258	4.7094	3.6033	1.4898	2.5971	3.1705

### 7-7-3 فجوة الطاقة ( $E_{(HOMO-LUMO)}$ ) Energy Gab

من ملاحظة الجدول 3-9 يتضح وللطرق الثلاث المستخدمة في الحساب فرق طاقي عالي بين المدارين HOMO و LUMO لحمض البنزويك هيدرازيد بحدود (8.8252-5.6801) ev اي استقرارية عالية ، بينما انخفض هذا الفرق في المركب 2 قياساً بباقي الهيدرازونات ، حيث لمجموعة ثنائي مثيل امينو الاثر في عدم استقرارية المركب لكبر حجمها وقوة دفعها للإلكترونات .

### 8-7-3 الصلابة الكيميائية ( $\eta$ ) Chemical hardness

تبين نتائج الجدول 3-9 ترتبت الجزيئات في مدى صلابتها متفقة مع الفقرة السابقة 3-6-7 فجوة الطاقة وذلك يعود لصيغة قانون الصلابة والذي ينص على انها المعدل الحسابي للفرق بين جهد التأين والافعة الالكترونية .

ان لقوة الاواصر وتجاذبها والترتيب الفراغي في الحالة المستقرة ايضا سببا في مدى صلابة الجزيئة مضافا اليه طبيعة المجاميع المعوضة من حيث قوة حثها بالسحب والدفع الالكتروني .



جدول 3-9 : الصلابة الكيميائية وفجوة الطاقة للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق

الحساب المستخدمة

<i>Molecules</i>	$E_{HOMO-LUMO} (ev)$			$\eta (ev)$		
	MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G		CEP-121G	6-311G
<b>1</b> C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	8.8252	5.6801	5.7174	4.9902	2.8401	2.8588
<b>2</b> C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	6.9259	3.6480	3.6847	4.1111	1.8240	1.8424
<b>3</b> C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	8.8646	3.5732	3.7476	4.4323	1.7866	1.8738
<b>4</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	7.4727	4.1245	4.1870	4.3089	2.0623	2.0936
<b>5</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.0596	4.4866	4.4937	4.2115	2.2434	2.2469
<b>6</b> C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	7.0515	8.5398	4.0951	4.1722	4.2699	2.0476

### Thermodynamic functions

### 8-3 الدوال الترموديناميكية

تم الاستعانة بترددات الاهتزاز Vibrational Frequencies ، والثوابت الدورانية Moment of inertia Rotational Constant X,Y,Z لحساب عزم القصور الذاتي وبنثلاث محاور ولكل جزيئة  $I_x, I_y, I_z$  ، جدول 3-10 والمستحصلة من نتائج الحساب لبرنامج MOPAC 97 وبطريقة MINDO/3 تم استخدام المعادلة (53) .

$$R_x = \frac{\hbar}{4\pi c I_x} \dots\dots\dots 2-3$$

حيث :  $R_x$  = ثابت الدوران باتجاه المحور X ،  $h$  = ثابت بلانك ،  $h/2\pi = \hbar$  ،  $c$  = سرعة الضوء ،  $I_x$  = عزم القصور الذاتي .

جدول 3-10 : قيم الثوابت الدورانية  $R_x, R_y, R_z$  وعزم القصور الذاتي  $I_x, I_y, I_z$

والمستحصلة من نتائج الحساب لبرنامج MOPAC 97 وبطريقة MINDO/3

<i>Molecules</i>	Moment of inertia ( $10^{-47} \text{kg.m}$ )			Rotational Constant ( $\text{m}^{-1}$ )		
	$I_x$	$I_y$	$I_z$	$R_x$	$R_y$	$R_z$
<b>1</b> C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O	251.6799	1128.105	1178.303	11.1224	2.4814	2.3757
<b>2</b> C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O	571.74613	9362.359	9394.805	4.8960	0.2990	0.2980
<b>3</b> C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>	544.57957	9290.483	9341.103	5.1403	0.3013	0.2997
<b>4</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	499.74855	8205.635	8337.054	5.6014	0.3411	0.3358
<b>5</b> C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	665.84163	8417.842	8666.708	4.2041	0.3325	0.3230
<b>6</b> C <sub>16</sub> H <sub>16</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	908.68439	8475.325	8985.388	3.0806	0.3303	0.3115

### 1-8-3 دالة الطاقة الداخلية القياسية ( $U^0$ ) Standard Internal energy functions

بعد الاطلاع على الجدول 11-3 لوحظ ان الطاقة الداخلية للمركبات المعوضة بمجاميع دافعة 2,4,5,6 تكون اكبر من نظيراتها المعوضة بمجموعة ساحبة 3 ، وان الاخيرة ذات طاقة داخلية اعلى من حامض البنزويك هيدرازيد .

### 2-8-3 دالة الانثالبي القياسية ( $H^0$ ) Standard Enthalpy functions

أظهرت نتائج الحساب في الجدول 11-3 ان طاقة الانثالبي القياسي ايضاً اتفقت مع الطاقة الداخلية للنظام من حيث الترتيب اي ان المركبات ذات المعوضات الدافعة اكبر من تلك المعوضة بمجاميع ساحبة والاخيرة اعلى في طاقة الانثالبي من حامض البنزويك هيدرازيد .

**جدول 11-3 :** الطاقة الداخلية وطاقة الانثالبي القياسيتين للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق

طرائق الحساب المستخدمة

Molecules		$U^0$ (kJ/mol)			$H^0$ (kJ/mol)		
		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G		CEP-121G	6-311G
1	$C_7H_8N_2O$	25.1871	401.0949	404.6974	27.6658	403.5719	407.1762
2	$C_{16}H_{17}N_3O$	52.6432	837.8752	845.2726	55.1220	840.3522	847.7514
3	$C_{14}H_{11}N_3O_3$	47.6454	647.2564	655.3608	50.1242	649.7333	657.839
4	$C_{15}H_{14}N_2O_2$	48.9034	738.6308	733.6226	51.3822	741.1077	736.102
5	$C_{15}H_{14}N_2O_3$	52.4242	752.4129	747.9444	54.9030	754.8898	750.423
6	$C_{16}H_{16}N_2O_3$	56.9242	813.8131	826.3609	59.4030	816.2900	828.839

### 3-8-3 دالة الانتروبي القياسية ( $S^0$ ) Standard Entropy functions

من الحسابات في الجدول 12-3 وعلى الرغم من وجود بعض التفاوت في القيم الناتجة من اختلاف الطرق المستخدمة في الحساب ، الا ان عشوائية المركبات متفقة في تدرجها مع طاقتها الداخلية القياسية و الانثالبي القياسي .

### 4-8-3 دالة طاقة كبس القياسية ( $G^0$ ) Standard Gibbs energy functions

من الاطلاع على الجدول 12-3 نلاحظ اختلافاً بسيطاً في تدرج المركبات في قيم طاقة كبس القياسية عن الدوال المذكورة اعلاه ، وحيث يوجد تفاوت كبير في قيم النتائج بين طريقتي الحساب التامة والطريقة الشبه تجريبية ، ولكنها اتفقت في تدرجها حيث ظهرت المركبات المعوضة بمجاميع دافعة 2,4,5,6 وبالخصوص المركب 6 والمعوض بمجموعتي ميثوكسي

على الحلقة الاروماتية المعوضة في الموقع بارا واورثو ; بطاقة كبس قياسية عالية ، بينما المركب 3 والمعوض بمجموعة نايترو ساحبة نو طاقة كبس اقل ، واخيرا حامض البنزويك هيدرازيد بأقل قيمة لطاقة كبس ، حيث تدل قيمة طاقة كبس القياسية على طبيعة سير التفاعل بثبوت الضغط (53) .

جدول 3-12 : طاقة كبس و الانتروبي القياسيتين للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

<i>Molecules</i>		$S^0$ ( $kJ mol^{-1} deg^{-1}$ )			$G^0$ (kJ/mol)		
		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G		CEP-121G	6-311G
1	$C_7H_8N_2O$	1.1827	0.3907	0.3880	-324.9506	287.0854	291.4880
2	$C_{16}H_{17}N_3O$	1.3990	0.6027	0.5985	-361.9938	660.6594	669.3087
3	$C_{14}H_{11}N_3O_3$	1.3534	0.5705	0.5646	-353.4053	479.6248	489.5035
4	$C_{15}H_{14}N_2O_2$	1.3760	0.5608	0.5649	-358.8617	567.4352	567.6771
5	$C_{15}H_{14}N_2O_3$	1.3989	0.5825	0.5872	-362.1676	581.2173	575.3493
6	$C_{16}H_{16}N_2O_3$	1.4226	0.6627	0.6169	-364.7533	618.6999	644.9103

### 3-8-5 دالة طاقة هيلمهولتز القياسية ( $A^0$ ) Standard Helmholtz energy functions

من جدول 3-13 فإن طاقة هيلمهولتز تتفق في تدرج المركبات مع طاقة كبس وأيضا ذات قيم متفاوتة ، بالنسبة لطبيعة الطرق المستخدمة في الحساب ، ولكن ولجميع الطرق نلاحظ اتفاقاً في تدرج المركبات كما جاء بالفقرة اعلاه ، وتدل قيم طاقة هيلمهولتز القياسية على طبيعة القوة الدافعة لسير التفاعل تلقائيا ولكن بثبوت الحجم .

جدول 3-13 : طاقة هيلمهولتز القياسية للمركبات المدروسة والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

<i>Molecules</i>		$A^0$ (kJ/mol)		
		MINDO/3 -FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G
1	$C_7H_8N_2O$	-327.4294	284.6084	289.0092
2	$C_{16}H_{17}N_3O$	-364.4726	658.1825	666.8298
3	$C_{14}H_{11}N_3O_3$	-355.8841	477.1479	487.0253
4	$C_{15}H_{14}N_2O_2$	-361.3405	571.4662	565.1977
5	$C_{15}H_{14}N_2O_3$	-364.6464	578.7403	572.8707
6	$C_{16}H_{16}N_2O_3$	-367.2321	616.2229	642.4322

بينت نتائج الطرق الثلاثة للحساب انها متفقة في تدرجها لمعظم الخواص الفيزيائية للجزيئات وعلى الرغم من وجود بعض التفاوت في قيم النتائج لبعض الخواص الا انها اقتربت كثيرا من القيم التجريبية وبالخصوص تلك المحسوبة وفق نظرية دوال الكثافة للأساس B3LYP والقاعدة 6-311G ، وبشكل عام ولجميع المركبات فقد اظهرت النتائج لطرق الحساب مجتمعة ما يأتي :

1. تميز الهيدرازون المعوض بمجموعة نايتر (NO<sub>2</sub>-) ساحبة للإلكترونات بزيادة في قيم عزم ثنائي القطب وجهد التأين واللفة الالكترونية والكهروسلبية ، بينما انخفضت قيمها ولجميع الدوال الترموديناميكية ، عن نظيراتها من باقي الهيدرازونات المعوضة بمجاميع دافعة للإلكترونات
2. ان اطوال الاواصر وقيم الزوايا المقابلة في موقع التعويض تكون اكبر في حال الهيدرازونات ذات المعوض الساحب عن نظيراتها ، بينما اطوال الاواصر وقيم الزوايا المجاورة لموقع التعويض تكون اكبر في حال الهيدرازونات ذات المعوضات الدافعة للإلكترونات .
3. الكثافة الالكترونية لذرة الكربون المتصلة بالمعوض الساحب للإلكترونات في الموقع بارا من الحلقة الاروماتية تكون ذات كثافة اعلى من نظيراتها المتصلة بالمعوض الدافع ، بينما العكس في كثافة ذرة النتروجين (N<sub>10</sub>) ، اذ تكون كثافتها اعلى في حال الهيدرازونات المعوضة بمجاميع دافعة عن نظيراتها .
4. لحمض البنزويك هيدرازيد اعلى قيمة للصلابة البنوية ولفجوة الطاقة (اعلى استقرارية ) ، بينما المركب (2) والحاوي على مجموعة ثنائي مثيل امينو ذات الحجم الكبير معوضه فهو الاقل قيمة للصلابة (اقل استقرارا) .
5. ارتفاع قيم الانتروبي لجميع الجزيئات والمحسوبة وفقاً للطريقة الشبه تجريبية -MINDO/3 FORCES عند مقارنتها مع النتائج المستحصلة من نظرية دوال الكثافة ، ويعود ذلك الى عدة اسباب منها طبيعة الحساب للطرق الشبه تجريبية والذي يتمثل بحساب الكثرونات التكافؤ فقط والذي ادى الى الاختلاف في قيم ترددات الاهتزاز للأشعة تحت الحمراء وعزم القصور الذاتي لكل جزيئة وبثلاث اتجاهات ، وكذلك فأنها لا تأخذ بنظر الاعتبار التآصر البيني للجزيئة والذي يضيف مزيدا من الإستقرارية مما يسبب زيادة في عشوائيتها . وان الزيادة هذه في قيم الانتروبي ادت الى تفاوت كبير في قيم دالتي كبس وهيلمهولتز القياسيتين ، بحسب قوانين الحساب لهما والمتمثلة  $G^0=H^0-TS^0$  و  $A^0=U^0-TS^0$  ، ولكن وعلى الرغم من هذا التفاوت في قيم النتائج بين الطرق التجريبية والتامة الا انها اتفقت في تدرجها من حيث الزيادة والنقصان .

### Recommendations

### التوصيات

نظراً لما تم دراسته من تنوع في طرق الحساب وبرامجها ومدخلاتها ، وكون الدراسة النظرية تعتمد بالأساس على امكانية كل من البرامج المستخدمة وما تحتويه من طرق رياضية متطورة وخبرة وقدرة الباحث على امكانية استخدام هذه الطرق وتفهمها وتوضيح نتائجها وبشكل علمي ؛ لذا يمكن اقتراح الدراسات النظرية الأتية :

1. دراسة مركبات محضرة ولها قيم معروفة من مطيافية حيود الاشعة السينية ، لإدخال الاحداثيات الديكارتية للذرات في برنامج الحساب كاوسين 09 للحصول على نتائج اقرب للقيمة العملية ، وخاصة تلك المتعلقة بالشكل الهندسي المتوازن الاكثر استقرارا ، وكذلك حساب قيم الطاقات المدارية وما ينتج عنها من حساب جهد التأين والالفة الالكترونية و كهروسلبية وصلابة و الكتروفيلية ومقارنتها مع نتائج حساب البرنامج و الجزينات نفسها فيما لو افترضت الاحداثيات من قبل البرنامج نفسه ، وان امكن مقارنتها مع النتائج التجريبية المتوفرة لاستخراج معاملات التصحيح .
2. دراسة مركبات محتوية على الحلقة السباعية (اوكسازيبينات) مشتقة من الهيدرازونات التي تم دراستها ، وايجاد قيم حرارات التكوين لها من خلال الفرق بين الاثنيتين .
3. دراسة حرارة التكوين للمركبات المدروسة من خلال التغير في درجة الحرارة .
4. اقتراح مركبات اوكسازيبين جديدة غير محضرة ودراسة امكانية تحضيرها من الهيدرازونات المدروسة .

المطبخ

REFERENCES

1. Z. Li, L. Du, X. Zhang, L. Li, J. Yang and Q. Zhao, *Inorganic Chemistry Communications*, 45, 20-24; (2014).
2. H. Schiff, *European Journal of Organic Chemistry*, 131, 118-119; (1864) .
3. X. Wang, J. Yin, L. Shi, G. Zhang and B. Song, *European Journal of Medicinal Chemistry* , 77, 65-74; (2014) .
4. M. Alias, H. Kassum and C. Shakir, *Journal of the Association of Arab Universities for Basic and Applied Sciences*, 15, 28-34; (2014).
5. V. K. Gupta, A. K. Singh and S. Bhardwaj, *Sensors and Actuators B* , 197, 264–273; (2014) .
6. N. Guskos, V. Likodimos, S. Glenis, J. Typek, H. Fuks, M. Wabia, D. G. Paschalidis, D. Tossidis, and C. L. Lin, *The European Physical Journal B* , 28, 277-282; (2002) .
7. A. S. Fouda, M. Abdallah and Z. El-Badrawy, *African Journal of Pure and Applied Chemistry*, 5, 224-236; (2011).
8. T. L. HO, *Chemical Reviews*, 75, 1-20; (1975).
9. N. M. Lair, H. M. Ali and s. W. Weng, *Acta Crystollographica* , E64; (2009). doi: 10.1107/S160053680804289X .
10. S. Hashemian ,V. Ghaeinee and B. Notash, *Acta Crystollographica* , E67; (2011). doi: 10.1107/S1600536810052128.
11. T. Ho, T. Lee, J. Ho and S. Wang, *Tamkang Journal of Science and Engineering*, 6, 37-42; (2003).
12. Tamer, D. Avcı and Y. Atalay, *Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 117, 78–86; (2014).
13. T.Hihara ,Y.Okada and Z.Morita, *Dyes and Pigments*,69,151-176;(2006).
14. S. Grabowsky, M.Weber, D. Jayatilaka, Y. Chen, M. T. Grabowski, R. Brehme, M. Hesse, T. Schirmeister and P. Luger, *Journal of Physical Chemistry A.*, 115, 12715–12732; (2011).

15. Deepak and Chopra, *Journal of Physical Chemistry A.*, 116, 9791-9801; (2012).
16. H. Ban and C. Li, *Acta Crystallographica* , E65; (2009).  
doi:10.1107/S160053680905079X .
17. A.K. Abdul-Hussain and L.A. Jubur, *Journal of university of Anbar for Pure science*, 3, 38-44; (2009).
18. E. I. Thiam, A. H. Barry, A. Navaza, P. Retailleau, M. Gaye and A. S. Sall, *Journal of Molecular Structure* , E65; (2009) .  
doi:10.1107/S1600536809029936 .
19. C. Cui, Q. Meng and Y. Wang, *Acta Crystallographica* , E65; (2009).  
doi:10.1107/S1600536809036460 .
20. J. Gou, M. Song, C. Fana and Z. Yanga, *Acta Crystallographica* , 65; (2009). doi:10.1107/S1600536809049988 .
21. A.M.D. Al-Joubory, Ph.D. thesis, University of Tikrit, "*Synthesis and Comparative Study of some Heterocyclic Compounds Containing five and Seven Membered Rings By Conventional and Microwave Method (MAOS) and Evaluate the Biological activity of some of them*";(2010).
22. P.A. Vigato and S. Tamburini, *Coordination Chemist. Rev.*, 252, 1871-1995; (2008).
23. T. Tao, F. Xu, X. Chen, Q. Liu, W. Huang and X. You, *Dyes and Pigments*, 92, 916-922, (2012).
24. A. Zamfir and S. Tsogoeva, *Organic Letters*, 12, 188-191; (2010).
25. I. Anis, M. Aslam, N. Afza, L. Iqbal, Z. Noreen, A. Hussain, M. Safder, *International Journal of Current Pharmaceutical Research* , 5, 48-57; (2013).
26. W. B. Júnior, M. S. Alexandre-Moreira, M. A. Alves, A. Perez-Rebolledo, G. L. Parrilha, E. E. Castellano, O. E. Piro, E. J. Barreiro, L. M. Lima and H. Beraldo, *Molecules*, 16, 6902-6915; (2011).



27. A. N. Siyal, S. Q. Memon, S. Parveen, A. Soomro, M. I. Khaskheli and M. Y. Khuhawar, *Journal of Chemistry*, 2013, 1-8; (2012).
28. A. Prakash and D. Adhikari, *International Journal of Chem Tech Research*, 3, 1891-1896; (2011).
29. R. J. Gillespie and P. L. A. Popelier, *Journal of Chemical Education*, 8, 31-38; (2003).
30. M. Hopffgarten and G. Frenking, *Computational Molecular Science*, 2, 43-62; (2012).
31. H. Jacobsen, *Journal of Computational Chemistry*, 30, 1093-1102; (2009).
32. S. D. Darling, "*A Guide to Framework Molecular Modeling*", Molecular Vision, United States of America; (2001).
33. E. Schrodinger, "*Collected Papers on Wave Mechanics*", Blackie & Son limited, London;(1928).
34. G. Patterson, *Endeavour*, 3, 50-54; (2007).
35. P. A. Cox, "*Inorganic Chemistry*", 2<sup>nd</sup> Ed., Garland Science/BIOS, London and New York; (2004).
36. L. Pauling and E. B. Wilson, "*Quantum Mechanics with Application to Chemistry*", McGraw-Hill Companies, Inc., London and New York; (1935).
37. M. P. Fewell, *American Journal of Physics*, 63, 653-658; (1995).
38. R. R. Crichton, "*Biological Inorganic Chemistry An Introduction*", Elsevier, Netherlands ; (2008).
39. S. Flisza' r, "*Atomic Charges, Bond Properties, and Molecular Energies*", John Wiley & Sons, Inc., Canada; (2009).
40. G. E. Andrews, "*Encyclopedia of Mathematics and its Applications, The theory of partitions* ", Addison-Wesley, London; (1975).
41. C. J. Cramer, "*Essentials of Computational Chemistry:Theories and Models*", 2<sup>nd</sup> Ed., John Wiley & Sons Ltd, England; (2004).

42. W.J.Heher and A.J.Shusterman, "*Molecular Modeling in Undergraduate Chemistry Education*", Wave function, Inc., USA; (2000).
43. D. C. Young, "*Computational Chemistry :A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems*", John Wiley & Sons, Inc., New York; (2001).
44. C.Trindle and D. Shillady, "*Electronic Structure Modeling:Connections Between Theory and Software*", CRC press, Taylor & Francise Group, LLC, USA; (2008) .
45. P. Bultinck, H. D. Winter, W. Langenaeker and J. P. Tollenaere, "*Computational Medicinal Chemistry for Drug Discovery*", Taylor & Francise Group, LLC, USA; (2008) .
46. R. A. Evarestov, "*Quantum Chemistry of Solids: The LCAO First Principles Treatment of Crystals*", Springer, New York; (2007).
47. F. A. Carey and R. J. Sundberg, "*Advanced Organic Chemistry Part A. Structure and Mechanisms*", 5<sup>th</sup> Ed.,Part:A, Springer, New York;(2007).
48. J. B. Foresman and A. Frisch, "*Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods*", 2<sup>nd</sup> Ed., Gaussian, Inc., USA; (1996) .
49. J. P. Lowe and K. Peterson, "*Quantum Chemistry*", 3<sup>rd</sup> Ed., Elsevier, USA; (2006) .
50. F. Jensen, "*Introduction to Computational Chemistry*", 2<sup>nd</sup> Ed., John Wiley & Sons Ltd., England; (2007) .
51. B. Stuart, "*Infrared Spectroscopy: Fundamentals and Applications*", John Wiley & Sons Ltd.; (2004) .
52. S. Wartewig, "*IR and Raman Spectroscopy: Fundamental Processing*", Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Germany; (2003) .
53. P. W. Atkins and J. D. Paula, "*Physical Chemistry*", 9<sup>th</sup> ed., Oxford University Press; (2010) .

54. J. M. Hollas, *"Modern Spectroscopy"*, 4<sup>th</sup> Ed., John Wiley & Sons Ltd., England; (2004) .
55. E.B. Wilson, Ir., J.C. Decius and P.C. Cross , *" Molecular Vibration"*, Mc Graw- Hill, New York; (1955) .
56. G. Herzberg, *" Molecular Spectra and Molecular Structure "*, 2<sup>nd</sup> Ed., Krieger Publishing Co. Malabar, Florida; (1991) .
57. A. D. Avoird, *" Molecular vibrations and rotations"*, Springer, Netherlands; (2010) .
58. D. H. Williams, and L. Fleming, *"Spectroscopic Methods Organic Chemistry"*, McGraw-Hill, Book Co., London, New York, (1973) .
59. L. A. Matheson, *Physical Review*, 40, 813-828; (1932) .
60. E. B. Wilson and A. J. Wells, *The Journal of Chemical Physics*, 14, 578-580; (1946) .
61. B. Crawford , *The Journal of Chemical Physics*, 29, 1042-1045; (1958) .
62. J. Overend, D. L. Powell and R. O. Kagel, *Applied Optics*, 7, 2075-2080; (1968) .
63. J. H. Ali, Ph.D. thesis, University of Saddam, *"Quantum Mechanical Calculations of The Vibrational Frequencies and IR Absorption Intensities of Monosubstituted Phenyl Derivatives by MINDO/3-FORCES Method"* ; (1995) .
64. M. J. S. Dewar and G. P. Ford , *Journal of the American Chemical Society* , 99, 1685-1691; (1977) .
65. K. K. Irikura and D. J. Frurip, *"Computational Thermochemistry Prediction and Estimation of Molecular Thermodynamics"*, ACS Symposium, United State; (1998) .
66. X. W. Li, E. Shibata and T. Nakamura, *Materials Transactions*, 44, 1004-1013; (2003) .
67. J. E. House, *"Inorganic Chemistry"*, Elsevier, USA ; (2008).

68. W. K. Li, G. Zhou and T. C. Mak, "*Advanced Structural Inorganic Chemistry*", Oxford University Press Inc., UK; (2008) .
69. J. E. Huheey, E. A. Keiter and R. L. Keiter, "*Inorganic Chemistry: Principles of Structure and Reactivity*", 4<sup>th</sup> Ed., HarperCollins College Publishers, USA; (1993) .
70. A. Rauk, "*Orbital Interaction Theory of Organic Chemistry*", 2<sup>nd</sup> Ed., John Wiley & Sons, Inc., USA; (2001) .
71. L. Piela, "*Ideas of Quantum Chemistry*" , Elsevier, Netherlands; (2007).
72. C. E. Housecroft and A. G. Sharpe, "*Inorganic Chemistry*", 2<sup>nd</sup> Ed., Pearson Prentice Hall, England; (2005) .
73. E. G. Lewars, "*Computational Chemistry: Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics*", Kluwer Academic Publishers, USA; (2004) .
74. R. G. Pearson, "*Chemical Hardness*", wiley-VCH, Germany; (1997) .
75. L. Humberto M. Huizar and C. H. Rios-Reyes, *Journal of México Chemistry Society*, 55, 142-147; (2011) .
76. R. J. Xavier and P. Dinesh, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 128, 54–68; (2014) .
77. J. S. Wilson, N. Chawdhury, M. R. A. Al-Mandhary, M. Younus, M. S. Khan, P. R. Raithby, A. Kolhler and R. H. Friend, *Journal of the American Chemical Society*, 123, 9412-9417; (2001) .
78. R. G. Parr, L. V. Szentpály and S. Liu, *Journal of the American Chemical Society*, 121, 1922-1924; (1999) .
79. S. Rajeev, D. Kumar, S. Bhoop, V.K. Singh and S. Ranjana, *Research Journal of Chemical Sciences*, 3, 79-84; (2013) .
80. C. E. Moore, "*Ionization Potentials and Ionization Limits Derived from The Analyses of Optical Spectra*" , NSRDS-NBS, USA; (1970) .
81. T. Koopmans, *Physica*, 1, 104-113; (1934).

82. P. K. Chattaraj and S. Duley, *J.Chem. Eng. Data*, 55, 1882-1886; (2010).
83. D. Vanfleteren, D. V. Neck, P. W. Ayers, R. C. Morrison and P. Bultinck, *The Journal of Chemical Physics*, 130, 194104(1)-194104(10); (2009) .
84. H. Hotop and W. C. Lineberger, *Journal of Physical Chemistry*, 4, 539-576; (1975) .
85. C. G. Zhan, J. A. Nichols and D. A. Dixon, *Journal of Physical Chemistry A* , 107, 4184-4195; (2003).
86. M. R. Leach, *Found Chem*, 15, 13–29; (2013) .
87. L. Pauling, *Journal of the American Chemical Society.*, 54, 3570-3582; (1932) .
88. R. S. Mulliken , *The Journal of Chemical Physics*, 2, 782-793; (1934) .
89. R. G. Pearson, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 83, 8440-8441; (1986) .
90. M. V. Putz, *Communications in Mathematical and in Computer Chemistry*, 64, 391-418; (2010) .
91. R. G. Pearson, *Journal of the Chemical Society*, 117, 369-377; (2005) .
92. E. Chamorro, J.C. Santos, C.A. Escobar and P. Pe´rez, *Chemical Physics Letters*, 431, 210–215; (2006) .
93. A. H. Pandith, S. Giri and P. K. Chattaraj, *Organic Chemistry International*, 2010, 1-17; (2010) .
94. K. I. Ramachandran, G. Deepa and K. Namboori, " *Computational Chemistry and Molecular Modeling :Principles and Applications*" , Springer-Verlag Berlin Heidelberg; (2008) .
95. A. R. Leach, "*Molecular Modeling: Principles and Applications*", 2<sup>nd</sup> Ed., Pearson Education Ltd., UK; (2001) .
96. A. Hinchliffe, "*Modeling molecular structures*", 2<sup>nd</sup> Ed., John Wiley & Sons Ltd., England; (2000) .
97. J. A.Pople, *Angewandte Chem.*, 111, 2014-2023; (1999) .

98. W. Kohn, *Journal of Computational Chemistry*, 20, 1-1; (1999) .
99. J. M. Wills, M. Alouani, P. Andersson, A. Delin, O. Eriksson and O. Grechneyev, " *Full-Potential Electronic Structure Method: Energy and Force Calculations with Density Functional and Dynamical Mean Field Theory*", Springer-Verlag Berlin Heidelberg; (2010) .
100. S. M. Bachrach, "*Computational Organic Chemistry*", John Wiley & Sons, Inc., USA; (2007) .
101. P. Schuster and P. Wolschann, *Monatsh Chem*, 139, III–IV; (2008) .
102. C. E. Dykstra, G. Frenking, K.S. Kim and G. E. Scuseria, "*Theory and Applications of Computational Chemistry :The First Forty Years*", Elsevier; (2005) .
103. J. Leszczynski, *Structural Chemistry*, 14, 429; (2003) .
104. P. Comba, T. W. Hambley and B. Martin, "*Molecular Modeling of Inorganic Compounds*", 3<sup>rd</sup> Ed., WILEY-VCH, Germany; (2009) .
105. D. C. Young, *Computational Drug Design A Guide for Computational and Medicinal Chemists*, Wiley, USA; (2009) .
106. B. G. Dixon and R. S. Morris, *Journal of Power Sources* ,119, 856–858; (2003) .
107. J. Leszczynski, *Parallel Computing*, 26, 817-818; (2000) .
108. G. Eisenman and O. Alvarez, *Journal of Membrane Biology*, 119, 109-132; (1991) .
109. E. Zahedi and A. Pangh, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 61, 1-8; (2014) .
110. J. Leszczynski and M. K. Shukla, "*Practical Aspects of Computational Chemistry Methods: Concepts and Applications*", Springer Heidelberg, UK; (2009) .
111. E. F. Silva and H. F. Svendsen, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 1, 151-157; (2007) .

112. M. Springborg, I. Warnke, A. Kohn, R. Skodje, L. Guilherme de C. Rego, J. Joswig, M. Rapacioli, H. A. Duarte and Y. Rapacioli, "**Chemical Modelling: Applications and Theory**", Volume 10, Royal Society of Chemistry, Germany; (2014) .
113. C. F. Matta, "**Quantum Biochemistry**", WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Germany;(2010) .
114. A. Varnek and A. Tropsha, "**Chemoinformatics\_ An Approach to Virtual Screening**", Royal Society of Chemistry, UK; (2008) .
115. J. Faulon and A. Bender, "**Handbook of Chemoinformatics algorithms**" Champan & Hall/CRC, UK; (2010).
116. J. Gasteiger and T. Engel, "**Chemoinformatics**", Wiley-VCH, Germany ; (2003) .
117. J. Casteiger, "**Handbook of Chemoinformatics**", Wiley-VCH Verlag GmbH & Co., Germany; (2003) .
118. R. Todeschini and V. Consonni, "**Molecular Descriptors for Chemoinformatics**", Vol. I & II, Wiley-VCH, Germany; (2009) .
119. B. A. Bunin, B. Siesel, G. A. Morales and J. Bajorath, "**Chemoinformatics : Theory, Practice & Products**", Springer, Netherlands; (2007) .
120. N. M. Geneste and A. J. M. Carpy, "**SAR and QSAR in Environmental Research**", 15, 43-54; (2004) .
121. A. R. Leach and V. J. Gillet, "**An Introduction to Chemoinformatics**" , Springer, Netherlands; (2007) .
122. D. B. Boyd, K. b. Lipkowitz and T. R. Cundari, "**Reviews in Computational Chemistry**", Vol. 26, wiley-VCH, USA; (2008) .
123. I. N. Levine, "**Quantum Chemistry**", 5<sup>th</sup> Ed., Prentice-Hall, Inc., USA; (2000) .
124. P. B. Balbuena and J. M. Seminario, "**Molecular Dynamics : From Classical to Quantum Methods**", Elsevier, Netherlands; (1999) .



125. G. Ciccotti and G. Hoover, "*Molecular-Dynamics Simulation of Statistical-Mechanical Systems*", North-Holland Physics Publishing, Italy; (1986) .
126. P. Deuffhard, J. Hermans, B. Leimkuhler, A. E. Mark, S. R. Mark and D. Skeel, "*Computational Molecular Dynamics : Challenges, Methods, Ideas*" , Springer- Verlag Berlin Heidelberg, USA; (1999) .
127. C. Lubich, "*From Quantum to Classical Molecular Dynamics : Reduced Models and Numerical Analysis*", European Mathematical Society, Switzerland; (2008) .
128. K. G. Dyall, K. Faegri and Jr., "*Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*", Oxford University Press, Inc., USA; (2007) .
129. J. J. P. Stewart, *Journal of Computational Chemistry*, 10, 209-220 ; (1989) .
130. R. S. Mulliken, *The Journal of Chemical Physics*, 23, 1833-1840; (1955) .
131. R. J. Gillespie and P. L. A. Popelier, "*Chemical Bonding and Molecular Geometry : From Lewis to Electron Densities*", Oxford University Press, Inc., USA; (2001) .
132. J. Leszczynski, "*Computational Chemistry: Reviews of Current Trends*", Vol. 8, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., UK;(2004).
133. H. F. Schaefer, *Tetrahedron Computer Methodology*, 1, 97-102; (1988).
134. P. Jensen and P. Bunker, "*Computational Molecular Spectroscopy*", John Wiley & Sons, Ltd., UK; (2000) .
135. J. E. House, "*Fundamentals of Quantum Chemistry*", 2<sup>nd</sup> Ed., Elsevier, USA; (2004) .
136. C. E. Dykstra, "*AB Initio Calculation of the Structures and Properties of Molecules*", Elsevier, Netherlands; (1988) .



137. P. E. Hoggan, E. J. Brandas, J. Maruani, P. Piecuch and G. D. Barrio, "*Advances in the Theory of Quantum Systems in Chemistry*", Springer Dordrecht Heidelberg, London New York; (2012) .
138. R. M. Martin, "*Electronic Structure\_ Basic Theory and Practical Methods*", Cambridge University Press, UK; (2004) .
139. J. Kobus, "*A Finite Difference Hartree-Fock Program for Atoms and Diatomic Molecules*", Computer Physics Communications, Poland; (2012).
140. A. Szabo and N. S. Ostlund, "*Modern Quantum Chemistry Introduction to Advanced Electronic Structure Theory*", Dover Publications, USA; (1996) .
141. J. H. Jensen, "*Molecular Modeling Basics*", CRC Press, Taylor & Francis Group ; (2010) .
142. H. Chermette, *Journal of Computational Chemistry*, 20, 129-154; (1999) .
143. R. F. Nalewajskir, "*Density Functional Theory I : Functionals and Effective Potentials*", Springer, Germany; (1996) .
144. H. Eschrig, "*The Fundamentals of Density Functional Theory*", Edition am Gutenbergplatz, Germany; (2003) .
145. P. Fuentealba, *Journal of Molecular Structure (Theochem)* ,433, 113–118, (1998).
146. D. S. Sholl and J. A. Steckel, "*Density Functional Theory: A Practical Introduction* ", John Wiley & Sons, Inc., USA; (2009) .
147. V. Magnasco, "*Methods of Molecular Quantum Mechanics: An Introduction to Electronic Molecular Structure*", John Wiley & Sons, Ltd., UK; (2010) .
148. R. M. Stroud and J. F. Moore, "*Computational and Structural Approaches to Drug Discovery :Ligand-Protein Interactions*", The Royal Society of Chemistry ,UK; (2008) .

149. F.R. Manby, *"Accurate Condensed-Phase Quantum Chemistry"*, CRC Press, Taylor and Francis Group, LLC, USA; (2011) .
150. P. Guadarrama, D. Soto-Castro and J. Sodriguez-Otero, *International Journal of Quantum Chemistry*, 108, 229-237; (2008) .
151. H.Chermette,*Coordination Chemistry Reviews*,178-180, 699-721;(1998).
152. J. Grotendorst, *"Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry Proceeding"* , 2<sup>nd</sup> Ed., John von Neumann Institute for Computing, Germany; (2000) .
153. M. Seminario and P. Politzer, *"Modern Density Functional Theory: A Tool for Chemistry"*, Elsevier, Netherlands; (1995) .
154. P. Fulde, *"Electron Correlation in Molecules and Solids"*, 3<sup>rd</sup> Ed., Springer, Germany; (2002) .
155. W. Heisenberg, *Annalen der Physik* , 379, 577-627; (1924) .
156. A. Plotnitsky, *"Epistemology and Probability :Bohr, Heisenberg, Schrodinger and the Nature of Quantum-Theoretical Thinking"* , Springer, UK; (2010) .
157. P. A. M. Dirac, *Process Royal Society* , A 117, 610-624; (1928) .
158. K. Habermann, L. Habermann, *" Introduction to Symplectic Dirac Operators"*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Netherland; (2006) .
159. E. Schrodinger, *Physical Review*, 28, 1049-1070; (1926) .
160. D. J. Griffiths, *"Introduction to quantum mechanics"*, Prentice Hall, USA ; (1994).
161. W. Greiner, *" Classical mechanics : Systems of particles and Hamiltonian dynamics"*, 2<sup>nd</sup> Ed., Springer, USA; (2010) .
162. D. Burghelea and S. Haller, *Journal of Topology* ,1, 115–151; (2008) .
163. R. L. Brooks, *"The Fundamentals of Atomic and Molecular Physics"*, Springer, USA; (2013) .

164. W. Demtroder, "*Molecular Physics : Theoretical Principles and Experimental Methods*", Wiley-VCH, Germany ; (2006) .
165. M. P. Mueller, "*Fundamentals of Quantum Chemistry: Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations*", Kluwer Academic Publishers ; (2002) .
166. G. Cuniberti, G. Fagas and K. Richter, "*Introducing Molecular Electronics*", Springer, Netherlands; (2005) .
167. N. Zettili, "*Quantum Mechanics: Concepts and Applications*" , 2<sup>nd</sup> Ed., A John Wiley & Sons, Ltd., UK; (2009) .
168. J. Basdevant and J. Dalibard, "*The quantum mechanics solver how to apply quantum theory to modern physics*" , 2<sup>nd</sup> Ed., Springer, Netherland ; (2006) .
169. J. Leszczynski, "*Computational Materials Science*" , 15, Elsevier, USA; (2004) .
170. W. Demtroder, "*Atoms, Molecules and Photons: An Introduction to Atomic , Molecular and Quantum Physics*, Springer , Germany;(2006) .
171. G. Ogurtsov and D. Dowek, "*Dynamical Processes in Atomic and Molecular Physics*" , Bentham Science Publishers; (2012) .
172. D. R. Hartree, "*Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* , 24, 111-132; (1928) .
173. A. L. Tchougreeff, "*Hybrid Methods of Molecular Modeling*" , Springer, Russia; (2008) .
174. S. Wilson, J. Maruani, P. Piecuch and G. D. Barrio, "*Advances in the Theory of Atomic and Molecular Systems: Dynamics, Spectroscopy, Clusters, and Nanostructures*" , Vol. 20, Springer; (2009) .
175. G. W.F. Drake, "*Handbook of Atomic, Molecular, and Optical Physics*" , Springer, Germany; (2006) .

176. H. Grosse and A. Martin, "*Particle Physics and the Schrödinger Equation*", Cambridge University Press, USA; (2005) .
177. R. G. Mortimer, "*Physical Chemistry*", 3<sup>rd</sup> Ed., Elsevier, UK ;(2008).
178. M. Hotokka, E. J. Brändas, J. Maruani and G. D. Barrio, "*Advances in Quantum Methods and Application in Chemistry , Physics and Biology*", Vol. 27, Springer, Switzerland; (2013) .
179. H. Adachi, T. Mukoyama and J. Kawai, "*Hartree-Fock-Slater Method for Materials Science*", Springer, Germany; (2006) .
180. P. Atkins, J. de Paula and R. Friedman, "*Quanta, Matter and Change A Molecular Approach to Physical Chemistry*" ,Freeman; (2009) .
181. R. J. Silbey, R. A. Alberty and M. G. Bawendi, "*Physical Chemistry*" ,4<sup>th</sup> Ed., John Wiley & Sons, Inc.; (2005) .
182. A. C. Tsipis, *Coordination Chemistry Reviews*, 272, 1–29; (2014) .
183. P. Souvatzis, *Computer Physics Communications*, 185, 415–421;(2014).
184. T. M. Penning, "*Chemical Carcinogenesis*", Humana Press ; (2011) .
185. M. Reiher and A. Wolf, "*Relativistic Quantum Chemistry: The Fundamental Theory of Molecular Science* ", Wiley-VCH; (2009) .
186. K. P. Lawley, "*Ab Initio Methods in Quantum Chemistry*", Part 1, John Wiley & Sons Inc., UK; (1987) .
187. D. B. Cook, "*Handbook of Computational Quantum Chemistry*" , Oxford University Press Inc., UK; (1998) .
188. S. Ivanov, "*Theoretical and Quantum Mechanics: Fundamentals for Chemists*" ,Springer, Netherlands; (2006) .
189. D. Hayward, "*Quantum mechanics for chemists*" ,RSC ,UK ; (2002) .
190. P. Atkins and J. de Paula, "*Elements of Physical Chemistry*", 5<sup>th</sup> Ed., Oxford University Press, UK; (2009) .
191. C. N. Hinshelwood, "*The Structure of Physical Chemistry*" , Oxford University Press, USA; (2005) .

192. H. R. A. Altaie, Ph.D. thesis, University of Baghdad, "*Study of Infra-Red Absorption Bands Splitting and Their Coalesce Temperature and Inversion Activation Energies for Azomethine Compounds Using DFT Method*"; (2007) .
193. D.M. Suresh, D. Sajan, Y. Diao, I. Nemeč, I. H. Joe and V. B. Jothy, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* , 110, 157–168; (2013) .
194. R. Y. Morjan, A. M. Mkadmh, F. M. Abu-Awad, M. Helliwell, A. M. Awadallah and J. M. Gardiner, *Journal of Molecular Structure*, 1051, 345–353; (2013) .
195. D. R. C. Matazo, R. A. Ando, A. C. Borin and P. S. Santos, *Journal of the Chemical Society (A)* , 112, 4437-4443; (2008) .
196. R.N. Singh, A. Kumar, P. Rawat, R.K. Tiwari and A. K. Singh, *Journal of Molecular Structure*, 1052, 67–75; (2013) .
197. S. A. A. Bin-Sasi, M. S. Attia and M.S.A. Abdel-Mottaleb, *Egyptian Journal of Pure and Applied Science*, 023-027; (2011) .
198. W. M. Srhan, A. H. Rahem and S. H. Trer, *journal of al-qadisiyah for pure science*, 13, 1-16; (2008) .
199. N. C. Baird and M. J. S. Dewar, *The Journal of Chemical Physics* , 50, 1262-1274; (1969) .
200. M. J. S. Dewar and M. Shanshal, *Journal of the American Chemical Society*, 91, 3654-3655; (1969) .
201. M. J. S. Dewar and E. Haselbach, *Journal of the American Chemical Society*, 92, 590-598; (1970) .
202. N. Bodor and M. J. S. Dewar, *Journal of the American Chemical Society*, 92, 4270-4274; (1970).
203. M. J. S. Dewar , R. C. Bingham and D. H. Lo ; *Journal of the American Chemical Society*, 97, 1285-1293; (1975) .

204. M. J. S. Dewar , R. C. Bingham and D. H. Lo ; *Journal of the American Chemical Society*, 97, 1294-1301; (1975) .
205. M. J. S. Dewar , R. C. Bingham and D. H. Lo ; *Journal of the American Chemical Society*, 97, 1302-1306; (1975) .
206. R. S. Mulliken, *Physics* , 12, 144-151; (1926) .
207. S.M.Khalil and M.Shanshal, *Theoretica Chimica Acta*,46, 23-37;(1977) .
208. M. J. S. Dewar and R.C. Dougherty, " *The PMO Theory of Organic Chemistry*" , Springer, USA; (1975) .
209. P. Pulay, *Theoretica Chimica Acta*, 37, 67-75; (1975) .
210. R. W. H. Sargent and B. A. Murtagh, *Mathematical Programming* , 4, 245-268; (1973) .
211. J. H. Ali and M. Shanshal, *Zeitschrift fuer Naturforschung*, 58a, 162-166; (2003) .
212. R. M. Kubba, M. U. Al-Dilemy and M. Shanshal, *National Journal of Chemistry*, 38, 293-310; (2010) .
213. R. M. Kubba, S. H. Rida and A. H. Hanoon, *National Journal of Chemistry* , 18, 235- 260; (2005) .
214. J. H. Ali, *National Journal of Chemistry* , 40, 674-679; (2010) .
215. J. H. Ali, S.M. Haddawi , A. M. Bashi, and R. T. Haiwal, *National Journal of Chemistry* , 31, 439-446; (2008) .
216. J.M. Seminario, "*Recent Developments and Applications of Modern Density Functional Theory*" , Elsevier, Netherlands; (1996) .
217. R. G Parr and W. Yang, "*Density-functional theory of atoms and molecules*" ,Oxford University Press, Inc., USA; (1989) .
218. W. A. Sokalski, "*Molecular Materials with Specific Interaction :Modeling and Design*" , Springer, Netherlands; (2007) .

219. N. Kaltsonyannis and J. E. McGrady, "*Principles and Applications of Density Functional Theory in Inorganic Chemistry II*", Springer, Germany; (2004) .
220. C. Fiolhais, F. Nogueira and M. Marques, " *A Primer in Density Functional Theory* " , Springer, Germany; (2003) .
221. W. Koch and M. C. Holthausen, "*A Chemist's Guide to Density Functional Theory*" ,2<sup>nd</sup> Ed., Wiley-VCH, Germany; (2001) .
222. J. P. Doucet and J. Weber, "*Computer-Aided Molecular Design: Theory and Applications*" , Academic Press Ltd., UK; (1996) .
223. E.Engel, R.M.Dreizler, "*Density Functional Theory*", Springer; (2011).
224. M. Jeziorska, W. Cencek, K. Patkowski, B. Jeziorski and K. Szalewicz, "*International Journal of Quantum Chemistry*, 108, 2053–2075; (2008).
225. J. Cioslowski, "*Quantum-mechanical prediction of thermochemical data*" , Kluwer Academic Publishers, USA; (2001) .
226. M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H. P. Hratchian, A. F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J. L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. Bearpark, J. J. Heyd, E. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J. M. Millam, M. Klene, J. E. Knox, J. B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, Ö. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, and D. J. Fox, *Gaussian*, Inc., Wallingford CT; (2009) .



- 
227. A.M.D. Al-Joubory, *Tikrit Journal of Pure Science*,17, 147-158; (2012).
228. F. H. Allen, D. G. Watson, L. Brammer, A. G. Orben and R. Taylor, *International Tables for Crystallography* , C, 790-811; (2006) .
229. V. Balachandran, S. Lalitha, S. Rajeswari, V. K. Rastogi, *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 121, 575–585; (2014) .



الملاحق  
العلمية

جدول 1 : اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

<i>Geometric parameter</i>	<b>C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O</b>						
	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>			<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	1.405	1.415	1.399	C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub>	1.405	1.412	1.396
C <sub>1</sub> -C <sub>6</sub>	1.405	1.414	1.397	C <sub>5</sub> -H <sub>14</sub>	1.107	1.088	1.082
C <sub>1</sub> -H <sub>11</sub>	1.105	1.087	1.082	C <sub>6</sub> -H <sub>15</sub>	1.105	1.087	1.088
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	1.405	1.410	1.394	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub>	1.359	1.393	1.374
C <sub>2</sub> -H <sub>12</sub>	1.105	1.087	1.082	C <sub>7</sub> -O <sub>9</sub>	1.218	1.269	1.253
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	1.425	1.418	1.403	N <sub>8</sub> -N <sub>10</sub>	1.322	1.428	1.413
C <sub>3</sub> -H <sub>13</sub>	1.107	1.086	1.080	N <sub>8</sub> -H <sub>16</sub>	1.044	1.010	1.005
C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub>	1.425	1.419	1.404	N <sub>10</sub> -H <sub>17</sub>	1.053	1.021	1.015
C <sub>4</sub> -C <sub>7</sub>	1.507	1.510	1.493	N <sub>10</sub> -H <sub>18</sub>	1.052	1.021	1.016

<i>Geometric parameter</i>	<b>C<sub>7</sub>H<sub>8</sub>N<sub>2</sub>O</b>						
	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>			<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.8	119.9	<C <sub>6</sub> C <sub>5</sub> H <sub>14</sub>	118.1	119.1	119.2
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>11</sub>	120.3	120.1	120.1	<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> C <sub>5</sub>	120.1	120.0	120.1
<C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>11</sub>	120.3	120.0	120.0	<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> H <sub>15</sub>	120.3	120.1	120.1
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.0	120.1	<C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> H <sub>15</sub>	119.7	119.7	119.8
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>12</sub>	120.2	120.1	120.1	<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> N <sub>8</sub>	114.5	116.7	116.7
<C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>12</sub>	119.7	119.7	119.8	<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.7	122.5	122.4
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	122.2	120.2	120.4	<N <sub>8</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.7	120.7	120.8
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>13</sub>	118.1	121.3	121.3	<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> N <sub>10</sub>	123.8	121.8	121.9
<C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>13</sub>	119.7	118.4	118.3	<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	116.3	122.1	122.1
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	116.0	119.5	119.3	<N <sub>10</sub> N <sub>8</sub> H <sub>16</sub>	119.8	115.0	115.0
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	121.9	117.5	117.7	<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> H <sub>17</sub>	111.6	109.9	110.2
<C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	122.0	122.9	122.9	<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> H <sub>18</sub>	111.5	109.9	110.1
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	122.2	120.1	120.3	<H <sub>17</sub> N <sub>10</sub> H <sub>18</sub>	99.5	109.8	109.8
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> H <sub>14</sub>	119.7	120.6	120.5				

جدول 2 : اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ [ حامض البنزويك(4-ثنائي

مثيل امينو- بنزلدِين)-هيدرازيد]والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

2	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O							
	Geometric parameter	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		Geometric parameter	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
C <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	1.405	1.414	1.397	C <sub>12</sub> – C <sub>13</sub>	1.427	1.420	1.410	
C <sub>1</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.415	1.399	C <sub>12</sub> – C <sub>17</sub>	1.423	1.424	1.406	
C <sub>1</sub> – H <sub>21</sub>	1.105	1.088	1.082	C <sub>13</sub> – C <sub>14</sub>	1.398	1.406	1.385	
C <sub>2</sub> – C <sub>3</sub>	1.405	1.413	1.397	C <sub>13</sub> – H <sub>28</sub>	1.109	1.090	1.081	
C <sub>2</sub> – H <sub>22</sub>	1.105	1.087	1.082	C <sub>14</sub> – C <sub>15</sub>	1.432	1.432	1.421	
C <sub>3</sub> – C <sub>4</sub>	1.425	1.419	1.405	C <sub>14</sub> – H <sub>29</sub>	1.106	1.084	1.079	
C <sub>3</sub> – H <sub>23</sub>	1.108	1.088	1.082	C <sub>15</sub> – C <sub>16</sub>	1.431	1.436	1.417	
C <sub>4</sub> – C <sub>5</sub>	1.425	1.418	1.403	C <sub>15</sub> – N <sub>18</sub>	1.399	1.403	1.388	
C <sub>4</sub> – C <sub>7</sub>	1.509	1.515	1.497	C <sub>16</sub> – C <sub>17</sub>	1.403	1.401	1.390	
C <sub>5</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.410	1.394	C <sub>16</sub> – H <sub>30</sub>	1.106	1.084	1.079	
C <sub>5</sub> – H <sub>24</sub>	1.107	1.086	1.080	C <sub>17</sub> – H <sub>31</sub>	1.108	1.086	1.084	
C <sub>6</sub> – H <sub>25</sub>	1.105	1.087	1.082	N <sub>18</sub> – C <sub>19</sub>	1.427	1.473	1.462	
C <sub>7</sub> – N <sub>8</sub>	1.367	1.400	1.386	N <sub>18</sub> – C <sub>20</sub>	1.427	1.474	1.463	
C <sub>7</sub> – O <sub>9</sub>	1.217	1.260	1.244	C <sub>19</sub> – H <sub>32</sub>	1.118	1.093	1.095	
N <sub>8</sub> – N <sub>10</sub>	1.292	1.399	1.3804	C <sub>19</sub> – H <sub>33</sub>	1.122	1.101	1.087	
N <sub>8</sub> – H <sub>26</sub>	1.051	1.020	1.014	C <sub>19</sub> – H <sub>34</sub>	1.122	1.101	1.095	
N <sub>10</sub> – C <sub>11</sub>	1.271	1.311	1.296	C <sub>20</sub> – H <sub>35</sub>	1.118	1.093	1.087	
C <sub>11</sub> – C <sub>12</sub>	1.480	1.470	1.454	C <sub>20</sub> – H <sub>36</sub>	1.122	1.101	1.094	
C <sub>11</sub> – H <sub>27</sub>	1.131	1.103	1.096	C <sub>20</sub> – H <sub>37</sub>	1.121	1.101	1.094	

2

**C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O**

<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.8	119.8	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> C <sub>14</sub>	123.8	121.6	121.3
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.0	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	119.3	119.5	118.6
<C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.4	120.1	120.1	<C <sub>14</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	116.9	118.8	120.2
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.0	120.1	120.1	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	121.9	120.6	121.2
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	120.3	120.2	120.1	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	116.5	118.8	118.7
<C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	119.7	119.7	119.8	<C <sub>15</sub> C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	121.6	120.5	120.2
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	122.4	120.3	120.3	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	114.8	117.6	117.4
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	117.9	118.9	119.1	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> N <sub>18</sub>	122.2	121.2	121.2
<C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	119.8	120.7	120.6	<C <sub>16</sub> C <sub>15</sub> N <sub>18</sub>	123.0	121.1	121.4
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	115.9	119.3	119.1	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> C <sub>17</sub>	122.3	121.1	120.7
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	122.9	123.5	123.4	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> H <sub>30</sub>	121.3	120.3	120.4
<C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	121.3	117.2	117.5	<C <sub>17</sub> C <sub>16</sub> H <sub>30</sub>	116.3	118.6	118.9
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	122.2	120.4	120.4	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> C <sub>16</sub>	123.3	121.2	121.7
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	119.8	118.3	118.3	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> H <sub>31</sub>	120.3	118.6	119.5
<C <sub>6</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	118.0	121.3	121.3	<C <sub>16</sub> C <sub>17</sub> H <sub>31</sub>	116.4	120.2	118.8
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> C <sub>5</sub>	120.2	120.1	119.8	<C <sub>15</sub> N <sub>18</sub> C <sub>19</sub>	122.0	120.0	120.2
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	120.1	120.1	120.0	<C <sub>15</sub> N <sub>18</sub> C <sub>20</sub>	122.3	120.2	120.3
<C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	119.7	119.7	119.8	<C <sub>19</sub> N <sub>18</sub> C <sub>20</sub>	115.7	119.7	119.5
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> N <sub>8</sub>	114.3	114.8	114.7	<N <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>32</sub>	113.9	109.2	111.8
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	123.3	121.9	122.1	<N <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>33</sub>	114.2	111.8	118.8
<N <sub>8</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.4	123.3	123.2	<N <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	114.1	111.8	120.2
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> N <sub>10</sub>	126.4	120.7	121.2	<H <sub>32</sub> C <sub>19</sub> H <sub>33</sub>	104.3	107.9	120.3
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	113.5	119.6	119.5	<H <sub>32</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	104.3	107.9	119.5
<N <sub>10</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	120.0	119.5	119.2	<H <sub>33</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	104.9	107.9	111.8
<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> C <sub>11</sub>	126.7	116.7	117.6	<N <sub>18</sub> C <sub>20</sub> H <sub>35</sub>	113.8	109.1	109.1
<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> C <sub>12</sub>	123.5	121.8	122.2	<N <sub>18</sub> C <sub>20</sub> H <sub>36</sub>	114.2	111.8	111.8
<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	124.7	121.4	121.1	<N <sub>18</sub> C <sub>20</sub> H <sub>37</sub>	114.1	111.8	107.9
<C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	111.6	116.7	116.7	<H <sub>35</sub> C <sub>20</sub> H <sub>36</sub>	104.3	107.9	108.0
<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>13</sub>	119.3	120.1	122.0	<H <sub>35</sub> C <sub>20</sub> H <sub>37</sub>	104.3	107.9	107.9
<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	126.8	121.9	120.3	<H <sub>36</sub> C <sub>20</sub> H <sub>37</sub>	105.0	108.0	109.1
<C <sub>13</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	113.8	117.8	117.7				

3

جدول 3 : اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ[4- نايتروبنزلدين]

بنزو هيديرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

3

<b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>							
<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
C <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	1.405	1.414	1.397	N <sub>10</sub> – C <sub>11</sub>	1.267	1.308	1.299
C <sub>1</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.415	1.399	C <sub>11</sub> – C <sub>12</sub>	1.487	1.478	1.465
C <sub>1</sub> – H <sub>21</sub>	1.105	1.088	1.082	C <sub>11</sub> – H <sub>27</sub>	1.128	1.100	1.081
C <sub>2</sub> – C <sub>3</sub>	1.405	1.412	1.396	C <sub>12</sub> – C <sub>13</sub>	1.424	1.423	1.408
C <sub>2</sub> – H <sub>22</sub>	1.105	1.087	1.081	C <sub>12</sub> – C <sub>17</sub>	1.423	1.426	1.410
C <sub>3</sub> – C <sub>4</sub>	1.425	1.420	1.405	C <sub>13</sub> – C <sub>14</sub>	1.403	1.407	1.391
C <sub>3</sub> – H <sub>23</sub>	1.107	1.088	1.083	C <sub>13</sub> – H <sub>28</sub>	1.106	1.088	1.082
C <sub>4</sub> – C <sub>5</sub>	1.425	1.418	1.404	C <sub>14</sub> – C <sub>15</sub>	1.421	1.411	1.395
C <sub>4</sub> – C <sub>7</sub>	1.506	1.510	1.491	C <sub>14</sub> – H <sub>29</sub>	1.106	1.084	1.078
C <sub>5</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.410	1.393	C <sub>15</sub> – C <sub>16</sub>	1.421	1.416	1.399
C <sub>5</sub> – H <sub>24</sub>	1.107	1.086	1.080	C <sub>15</sub> – N <sub>18</sub>	1.434	1.479	1.462
C <sub>6</sub> – H <sub>25</sub>	1.105	1.087	1.081	C <sub>16</sub> – C <sub>17</sub>	1.404	1.404	1.388
C <sub>7</sub> – N <sub>8</sub>	1.372	1.413	1.385	C <sub>16</sub> – H <sub>30</sub>	1.106	1.084	1.078
C <sub>7</sub> – O <sub>9</sub>	1.215	1.256	1.252	C <sub>17</sub> – H <sub>31</sub>	1.106	1.085	1.079
N <sub>8</sub> – N <sub>10</sub>	1.287	1.384	1.381	N <sub>18</sub> – O <sub>19</sub>	1.226	1.291	1.268
N <sub>8</sub> – H <sub>26</sub>	1.049	1.021	1.005	N <sub>18</sub> – O <sub>20</sub>	1.227	1.289	1.268

3

<b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>							
<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.9	<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> C <sub>12</sub>	119.9	120.4	119.0
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.0	<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	127.9	122.2	122.6
<C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.1	<C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	112.1	117.4	118.3
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.1	120.1	<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>13</sub>	121.7	119.3	118.7
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	120.2	120.2	120.1	<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	122.7	121.3	122.3
<C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	119.7	119.7	119.7	<C <sub>13</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	115.6	119.5	119.0
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	122.1	120.2	120.2	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> C <sub>14</sub>	122.7	120.7	120.9
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	118.2	118.8	118.9	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	119.8	119.9	119.6
<C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	119.7	120.9	120.8	<C <sub>14</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	117.0	119.4	119.6
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	113.8	119.4	119.3	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	117.7	118.4	118.7

<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	121.9	123.4	123.2	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	118.2	121.8	121.7
<C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	121.9	117.2	117.4	<C <sub>15</sub> C <sub>14</sub> H <sub>29</sub>	121.2	119.8	119.6
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	122.1	120.3	120.3	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	120.7	122.2	121.8
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	119.7	118.5	118.5	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> N <sub>18</sub>	121.1	118.8	119.1
<C <sub>6</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	118.2	121.2	121.2	<C <sub>16</sub> C <sub>15</sub> N <sub>18</sub>	121.2	119.0	119.1
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> C <sub>5</sub>	120.1	120.1	120.1	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> C <sub>17</sub>	120.7	118.8	119.0
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	120.3	120.1	120.1	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> H <sub>30</sub>	121.2	119.6	119.3
<C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	119.6	119.7	119.8	<C <sub>17</sub> C <sub>16</sub> H <sub>30</sub>	118.1	121.5	121.7
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> N <sub>8</sub>	115.0	114.8	115.7	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> C <sub>16</sub>	122.7	120.3	120.6
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	123.2	122.7	122.2	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> H <sub>31</sub>	119.9	118.9	118.8
<N <sub>8</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	121.8	122.4	122.1	<C <sub>16</sub> C <sub>17</sub> H <sub>31</sub>	117.4	120.8	120.6
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> N <sub>10</sub>	123.9	120.2	129.9	<C <sub>15</sub> N <sub>18</sub> O <sub>19</sub>	114.1	118.3	118.3
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	114.8	119.6	119.0	<C <sub>15</sub> N <sub>18</sub> O <sub>20</sub>	113.8	118.3	118.2
<N <sub>10</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	121.3	119.9	111.0	<O <sub>19</sub> N <sub>18</sub> O <sub>20</sub>	132.2	118.3	123.5
<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> C <sub>11</sub>	130.2	118.1	122.3				

جدول 4 : اطوال الاواصر بـ (الانكستروم) والزوايا بـ (الدرجة) لـ [(4- ميثوكسي بنزلادين)

بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

4	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>							
	Geometric parameter	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		Geometric parameter	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
C <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	1.405	1.399	1.397	C <sub>11</sub> – C <sub>12</sub>	1.482	1.459	1.458	
C <sub>1</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.401	1.399	C <sub>11</sub> – H <sub>26</sub>	1.130	1.098	1.094	
C <sub>1</sub> – H <sub>20</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>12</sub> – C <sub>13</sub>	1.428	1.411	1.406	
C <sub>2</sub> – C <sub>3</sub>	1.405	1.399	1.397	C <sub>12</sub> – C <sub>17</sub>	1.423	1.408	1.410	
C <sub>2</sub> – H <sub>21</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>13</sub> – C <sub>14</sub>	1.399	1.390	1.393	
C <sub>3</sub> – C <sub>4</sub>	1.425	1.407	1.405	C <sub>13</sub> – H <sub>27</sub>	1.108	1.087	1.081	
C <sub>3</sub> – H <sub>22</sub>	1.108	1.086	1.077	C <sub>14</sub> – C <sub>15</sub>	1.423	1.404	1.402	
C <sub>4</sub> – C <sub>5</sub>	1.425	1.405	1.406	C <sub>14</sub> – H <sub>28</sub>	1.104	1.083	1.079	
C <sub>4</sub> – C <sub>7</sub>	1.508	1.497	1.488	C <sub>15</sub> – C <sub>16</sub>	1.418	1.405	1.401	
C <sub>5</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.396	1.395	C <sub>15</sub> – O <sub>18</sub>	1.328	1.388	1.389	
C <sub>5</sub> – H <sub>23</sub>	1.107	1.084	1.080	C <sub>16</sub> – C <sub>17</sub>	1.406	1.394	1.388	
C <sub>6</sub> – H <sub>24</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>16</sub> – H <sub>29</sub>	1.104	1.083	1.080	
C <sub>7</sub> – N <sub>8</sub>	1.367	1.389	1.387	C <sub>17</sub> – H <sub>30</sub>	1.107	1.084	1.083	
C <sub>7</sub> – O <sub>9</sub>	1.217	1.245	1.255	O <sub>18</sub> – C <sub>19</sub>	1.339	1.453	1.454	
N <sub>8</sub> – N <sub>10</sub>	1.291	1.374	1.377	C <sub>19</sub> – H <sub>31</sub>	1.120	1.089	1.092	

$N_8 - H_{25}$	1.051	1.017	1.018	$C_{19} - H_{32}$	1.123	1.096	1.085
$N_{10} - C_{11}$	1.271	1.296	1.296	$C_{19} - H_{33}$	1.124	1.096	1.092

4

$C_{15}H_{14}N_2O_2$

<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
		CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
$\langle C_2C_1C_6 \rangle$	119.4	119.8	119.8	$\langle C_{12}C_{11}H_{26} \rangle$	112.2	116.7	116.7
$\langle C_2C_1H_{20} \rangle$	120.3	120.0	120.1	$\langle C_{11}C_{12}C_{13} \rangle$	119.2	119.8	122.3
$\langle C_6C_1H_{20} \rangle$	120.4	120.1	120.1	$\langle C_{11}C_{12}C_{17} \rangle$	125.9	121.7	119.5
$\langle C_1C_2C_3 \rangle$	120.0	120.1	120.4	$\langle C_{13}C_{12}C_{17} \rangle$	114.8	118.5	118.3
$\langle C_1C_2H_{21} \rangle$	120.3	120.1	120.06	$\langle C_{12}C_{13}C_{14} \rangle$	123.7	120.9	121.1
$\langle C_3C_2H_{21} \rangle$	119.7	119.8	119.5	$\langle C_{12}C_{13}H_{27} \rangle$	119.1	119.5	118.9
$\langle C_2C_3C_4 \rangle$	122.4	120.3	120.0	$\langle C_{14}C_{13}H_{27} \rangle$	117.1	119.5	119.9
$\langle C_2C_3H_{22} \rangle$	117.9	119.0	120.1	$\langle C_{13}C_{14}C_{15} \rangle$	119.3	119.7	119.7
$\langle C_4C_3H_{22} \rangle$	119.8	120.6	119.9	$\langle C_{13}C_{14}H_{28} \rangle$	118.8	121.7	119.4
$\langle C_3C_4C_5 \rangle$	115.9	119.2	119.1	$\langle C_{15}C_{14}H_{28} \rangle$	121.9	118.6	120.9
$\langle C_3C_4C_7 \rangle$	123.1	123.5	124.8	$\langle C_{14}C_{15}C_{16} \rangle$	119.0	120.1	120.1
$\langle C_5C_4C_7 \rangle$	121.0	117.2	116.0	$\langle C_{14}C_{15}O_{18} \rangle$	115.6	115.6	124.4
$\langle C_4C_5C_6 \rangle$	122.2	120.4	120.6	$\langle C_{16}C_{15}O_{18} \rangle$	125.1	124.3	115.5
$\langle C_4C_5H_{23} \rangle$	119.8	118.3	118.3	$\langle C_{15}C_{16}C_{17} \rangle$	119.8	119.7	119.8
$\langle C_6C_5H_{23} \rangle$	117.9	121.3	121.1	$\langle C_{15}C_{16}H_{29} \rangle$	121.8	120.9	118.5
$\langle C_1C_6C_5 \rangle$	120.1	120.1	120.0	$\langle C_{17}C_{16}H_{29} \rangle$	118.4	119.3	121.7
$\langle C_1C_6H_{24} \rangle$	120.2	120.1	120.2	$\langle C_{12}C_{17}C_{16} \rangle$	123.2	120.9	121.1
$\langle C_5C_6H_{24} \rangle$	119.7	119.9	119.8	$\langle C_{12}C_{17}H_{30} \rangle$	120.1	118.7	119.6
$\langle C_4C_7N_8 \rangle$	114.6	114.8	121.9	$\langle C_{16}C_{17}H_{30} \rangle$	116.7	120.2	119.3
$\langle C_4C_7O_9 \rangle$	123.2	122.2	121.5	$\langle C_{15}O_{18}C_{19} \rangle$	131.1	118.9	119.3
$\langle N_8C_7O_9 \rangle$	122.2	122.9	116.5	$\langle O_{18}C_{19}H_{31} \rangle$	106.8	105.1	111.2
$\langle C_7N_8N_{10} \rangle$	125.8	120.9	126.1	$\langle O_{18}C_{19}H_{32} \rangle$	116.1	111.2	105.0
$\langle C_7N_8H_{25} \rangle$	113.9	119.5	113.6	$\langle O_{18}C_{19}H_{33} \rangle$	114.3	111.2	111.2
$\langle N_{10}N_8H_{25} \rangle$	120.2	119.3	119.9	$\langle H_{31}C_{19}H_{32} \rangle$	106.9	109.8	109.7
$\langle N_8N_{10}C_{11} \rangle$	127.8	117.8	117.8	$\langle H_{31}C_{19}H_{33} \rangle$	107.0	109.8	109.9
$\langle N_{10}C_{11}C_{12} \rangle$	122.1	121.9	122.5	$\langle H_{32}C_{19}H_{33} \rangle$	105.1	109.6	109.7
$\langle N_{10}C_{11}H_{26} \rangle$	125.4	121.4	120.8				

جدول 5 : اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ[2-هيدروكسي-4-ميثوكسي

بنزولين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

5

$C_{15}H_{14}N_2O_3$							
<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>			<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
C <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	1.405	1.401	1.396	C <sub>11</sub> – C <sub>16</sub>	1.403	1.389	1.396
C <sub>1</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.399	1.398	C <sub>11</sub> – H <sub>27</sub>	1.103	1.083	1.079
C <sub>1</sub> – H <sub>21</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>12</sub> – C <sub>13</sub>	1.421	1.397	1.400
C <sub>2</sub> – C <sub>3</sub>	1.405	1.395	1.397	C <sub>12</sub> – O <sub>19</sub>	1.320	1.384	1.386
C <sub>2</sub> – H <sub>22</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>13</sub> – C <sub>14</sub>	1.417	1.398	1.388
C <sub>3</sub> – C <sub>4</sub>	1.426	1.406	1.406	C <sub>13</sub> – H <sub>28</sub>	1.104	1.081	1.082
C <sub>3</sub> – H <sub>23</sub>	1.107	1.084	1.076	C <sub>14</sub> – C <sub>15</sub>	1.450	1.410	1.415
C <sub>4</sub> – C <sub>5</sub>	1.424	1.407	1.408	C <sub>14</sub> – O <sub>18</sub>	1.320	1.389	1.392
C <sub>4</sub> – C <sub>7</sub>	1.509	1.497	1.491	C <sub>15</sub> – C <sub>16</sub>	1.424	1.416	1.406
C <sub>5</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.399	1.392	C <sub>15</sub> – C <sub>17</sub>	1.484	1.477	1.471
C <sub>5</sub> – H <sub>24</sub>	1.108	1.086	1.080	C <sub>16</sub> – H <sub>29</sub>	1.109	1.086	1.081
C <sub>6</sub> – H <sub>25</sub>	1.105	1.085	1.082	C <sub>17</sub> – H <sub>30</sub>	1.124	1.089	1.081
C <sub>7</sub> – N <sub>8</sub>	1.367	1.393	1.389	O <sub>18</sub> – H <sub>31</sub>	0.951	0.977	0.972
C <sub>7</sub> – O <sub>9</sub>	1.219	1.243	1.257	O <sub>19</sub> – C <sub>20</sub>	1.341	1.454	1.456
N <sub>8</sub> – N <sub>10</sub>	1.307	1.375	1.382	C <sub>20</sub> – H <sub>32</sub>	1.120	1.089	1.084
N <sub>8</sub> – H <sub>26</sub>	1.040	1.015	1.016	C <sub>20</sub> – H <sub>33</sub>	1.123	1.096	1.092
N <sub>10</sub> – C <sub>17</sub>	1.272	1.301	1.300	C <sub>20</sub> – H <sub>34</sub>	1.123	1.096	1.092
C <sub>11</sub> – C <sub>12</sub>	1.419	1.407	1.400				

5

$C_{15}H_{14}N_2O_3$							
<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>		<i>Geometric parameter</i>	<i>MINDO/3-FORCES</i>	<i>DFT/B3LYP</i>	
		<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>			<i>CEP-121G</i>	<i>6-311G</i>
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.7	<C <sub>16</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	118.8	121.7	119.5
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.1	120.2	<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>13</sub>	119.4	120.5	120.2
<C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>21</sub>	120.3	120.0	120.2	<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	127.4	115.6	124.6
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.1	120.6	<C <sub>13</sub> C <sub>12</sub> O <sub>19</sub>	113.2	123.9	115.1
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	120.1	120.1	120.0	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> C <sub>14</sub>	119.4	119.2	119.7
<C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>22</sub>	119.7	119.8	119.4	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	120.9	122.8	118.5



<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	122.3	120.4	120.1	<C <sub>14</sub> C <sub>13</sub> H <sub>28</sub>	119.7	117.9	121.8
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	117.9	121.3	120.3	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	123.5	121.8	121.7
<C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>23</sub>	119.8	118.3	119.6	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> O <sub>18</sub>	121.5	115.7	121.9
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	115.8	119.2	118.9	<C <sub>15</sub> C <sub>14</sub> O <sub>18</sub>	115.0	122.4	116.3
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	120.7	117.1	125.7	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	113.3	117.3	116.9
<C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	123.5	123.7	115.4	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>17</sub>	121.9	119.8	118.9
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	122.4	120.2	120.8	<C <sub>16</sub> C <sub>15</sub> C <sub>17</sub>	124.8	122.8	123.9
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	119.7	120.8	118.1	<C <sub>11</sub> C <sub>16</sub> C <sub>15</sub>	125.3	121.7	122.2
<C <sub>6</sub> C <sub>5</sub> H <sub>24</sub>	117.9	118.9	121.1	<C <sub>11</sub> C <sub>16</sub> H <sub>29</sub>	115.3	119.2	118.4
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> C <sub>5</sub>	120.1	120.1	120.0	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> H <sub>29</sub>	119.5	119.0	119.3
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	120.3	120.1	120.2	<N <sub>10</sub> C <sub>17</sub> C <sub>15</sub>	120.6	129.3	129.8
<C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> H <sub>25</sub>	119.7	119.7	119.8	<N <sub>10</sub> C <sub>17</sub> H <sub>30</sub>	125.8	112.9	113.5
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> N <sub>8</sub>	116.3	114.8	123.2	<C <sub>15</sub> C <sub>17</sub> H <sub>30</sub>	113.5	117.7	116.7
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	121.6	122.2	121.1	<C <sub>14</sub> O <sub>18</sub> H <sub>31</sub>	115.0	112.0	112.3
<N <sub>8</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.1	122.9	115.7	<C <sub>12</sub> O <sub>19</sub> C <sub>20</sub>	132.8	119.0	119.2
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> N <sub>10</sub>	136.6	120.4	125.9	<O <sub>19</sub> C <sub>20</sub> H <sub>32</sub>	106.7	105.1	105.0
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	114.8	119.8	112.7	<O <sub>19</sub> C <sub>20</sub> H <sub>33</sub>	115.1	111.1	111.1
<N <sub>10</sub> N <sub>8</sub> H <sub>26</sub>	108.6	119.8	120.2	<O <sub>19</sub> C <sub>20</sub> H <sub>34</sub>	115.1	111.1	111.1
<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> C <sub>17</sub>	129.3	118.9	119.8	<H <sub>32</sub> C <sub>20</sub> H <sub>33</sub>	107.0	109.8	109.8
<C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> C <sub>16</sub>	119.1	119.4	119.1	<H <sub>32</sub> C <sub>20</sub> H <sub>34</sub>	106.9	109.9	109.8
<C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> H <sub>27</sub>	122.1	118.8	121.4	<H <sub>33</sub> C <sub>20</sub> H <sub>34</sub>	105.6	109.7	110.0

جدول 6 : اطوال الاواصر بـ(الانكستروم) والزوايا بـ(الدرجة) لـ[4,2-ثنائي ميثوكسي

بنزليدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

6	$C_{16}H_{16}N_2O_3$							
	<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
C <sub>1</sub> – C <sub>2</sub>	1.405	1.392	1.397	C <sub>12</sub> – C <sub>13</sub>	1.429	1.399	1.406	
C <sub>1</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.390	1.399	C <sub>12</sub> – C <sub>17</sub>	1.445	1.403	1.424	
C <sub>1</sub> – H <sub>22</sub>	1.105	1.095	1.082	C <sub>13</sub> – C <sub>14</sub>	1.396	1.386	1.394	
C <sub>2</sub> – C <sub>3</sub>	1.405	1.389	1.396	C <sub>13</sub> – H <sub>29</sub>	1.110	1.096	1.082	
C <sub>2</sub> – H <sub>23</sub>	1.105	1.095	1.082	C <sub>14</sub> – C <sub>15</sub>	1.426	1.404	1.396	
C <sub>3</sub> – C <sub>4</sub>	1.425	1.397	1.405	C <sub>14</sub> – H <sub>30</sub>	1.103	1.096	1.079	
C <sub>3</sub> – H <sub>24</sub>	1.108	1.099	1.083	C <sub>15</sub> – C <sub>16</sub>	1.415	1.396	1.399	
C <sub>4</sub> – C <sub>5</sub>	1.426	1.395	1.403	C <sub>15</sub> – O <sub>18</sub>	1.319	1.381	1.391	
C <sub>4</sub> – C <sub>7</sub>	1.509	1.495	1.497	C <sub>16</sub> – C <sub>17</sub>	1.423	1.399	1.393	
C <sub>5</sub> – C <sub>6</sub>	1.405	1.391	1.394	C <sub>16</sub> – H <sub>31</sub>	1.103	1.101	1.078	
C <sub>5</sub> – H <sub>25</sub>	1.107	1.097	1.080	C <sub>17</sub> – O <sub>20</sub>	1.318	1.390	1.381	
C <sub>6</sub> – H <sub>26</sub>	1.105	1.095	1.082	O <sub>18</sub> – C <sub>19</sub>	1.340	1.408	1.453	
C <sub>7</sub> – N <sub>8</sub>	1.366	1.450	1.376	C <sub>19</sub> – H <sub>32</sub>	1.120	1.092	1.092	
C <sub>7</sub> – O <sub>9</sub>	1.218	1.216	1.256	C <sub>19</sub> – H <sub>33</sub>	1.122	1.100	1.085	
N <sub>8</sub> – N <sub>10</sub>	1.293	1.397	1.398	C <sub>19</sub> – H <sub>34</sub>	1.123	1.095	1.092	
N <sub>8</sub> – H <sub>27</sub>	1.052	1.005	1.004	O <sub>20</sub> – C <sub>21</sub>	1.343	1.411	1.453	
N <sub>10</sub> – C <sub>11</sub>	1.272	1.296	1.301	C <sub>21</sub> – H <sub>35</sub>	1.119	1.093	1.085	
C <sub>11</sub> – C <sub>12</sub>	1.480	1.471	1.459	C <sub>21</sub> – H <sub>36</sub>	1.123	1.096	1.092	
C <sub>11</sub> – H <sub>28</sub>	1.132	1.103	1.082	C <sub>21</sub> – H <sub>37</sub>	1.123	1.096	1.092	

6	$C_{16}H_{16}N_2O_3$							
	<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP		<i>Geometric parameter</i>	MINDO/3-FORCES	DFT/B3LYP	
			CEP-121G	6-311G			CEP-121G	6-311G
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> C <sub>6</sub>	119.4	119.9	119.8	<C <sub>13</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	113.8	119.1	116.8	
<C <sub>2</sub> C <sub>1</sub> H <sub>22</sub>	120.3	119.9	120.0	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> C <sub>14</sub>	125.7	121.0	123.2	
<C <sub>6</sub> C <sub>1</sub> H <sub>22</sub>	120.4	120.1	120.1	<C <sub>12</sub> C <sub>13</sub> H <sub>29</sub>	117.9	119.4	117.9	
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub>	120.1	120.0	120.1	<C <sub>14</sub> C <sub>13</sub> H <sub>29</sub>	116.4	119.6	118.8	
<C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> H <sub>23</sub>	120.3	120.0	120.1	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> C <sub>15</sub>	118.3	119.2	118.3	
<C <sub>3</sub> C <sub>2</sub> H <sub>23</sub>	119.7	119.9	119.7	<C <sub>13</sub> C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	119.3	120.4	119.9	
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> C <sub>4</sub>	122.4	120.2	120.3	<C <sub>15</sub> C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	122.5	120.4	121.8	
<C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> H <sub>24</sub>	117.9	119.9	119.0	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> C <sub>16</sub>	119.8	121.0	120.5	

<C <sub>4</sub> C <sub>3</sub> H <sub>24</sub>	119.8	119.9	120.7	<C <sub>14</sub> C <sub>15</sub> O <sub>18</sub>	113.4	114.9	124.6
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>5</sub>	115.8	119.6	119.2	<C <sub>16</sub> C <sub>15</sub> O <sub>18</sub>	126.8	124.1	114.9
<C <sub>3</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	123.2	121.1	123.3	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> C <sub>17</sub>	119.9	118.9	120.5
<C <sub>5</sub> C <sub>4</sub> C <sub>7</sub>	121.0	119.2	117.5	<C <sub>15</sub> C <sub>16</sub> H <sub>31</sub>	120.2	119.9	117.4
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> C <sub>6</sub>	122.3	119.9	120.4	<C <sub>17</sub> C <sub>16</sub> H <sub>31</sub>	119.9	121.2	122.0
<C <sub>4</sub> C <sub>5</sub> H <sub>25</sub>	119.8	119.9	118.3	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> C <sub>16</sub>	122.5	120.7	120.5
<C <sub>6</sub> C <sub>5</sub> H <sub>25</sub>	117.9	120.1	121.3	<C <sub>12</sub> C <sub>17</sub> O <sub>20</sub>	113.2	118.8	117.2
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> C <sub>5</sub>	120.1	120.2	120.1	<C <sub>16</sub> C <sub>17</sub> O <sub>20</sub>	124.3	120.2	122.2
<C <sub>1</sub> C <sub>6</sub> H <sub>26</sub>	120.2	120.0	120.1	<C <sub>15</sub> O <sub>18</sub> C <sub>19</sub>	133.8	116.5	119.0
<C <sub>5</sub> C <sub>6</sub> H <sub>26</sub>	119.7	119.8	119.8	<O <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>32</sub>	106.8	103.1	111.2
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> N <sub>8</sub>	114.8	115.4	115.5	<O <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>33</sub>	116.3	113.1	105.1
<C <sub>4</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.5	123.7	121.4	<O <sub>18</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	113.9	110.5	111.2
<N <sub>8</sub> C <sub>7</sub> O <sub>9</sub>	122.6	120.7	123.1	<H <sub>32</sub> C <sub>19</sub> H <sub>33</sub>	106.8	110.6	109.7
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> N <sub>10</sub>	126.0	117.3	131.3	<H <sub>32</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	107.1	110.3	109.9
<C <sub>7</sub> N <sub>8</sub> H <sub>27</sub>	113.6	112.3	118.7	<H <sub>33</sub> C <sub>19</sub> H <sub>34</sub>	105.5	109.1	109.7
<N <sub>10</sub> N <sub>8</sub> H <sub>27</sub>	120.3	113.8	109.9	<C <sub>17</sub> O <sub>20</sub> H <sub>21</sub>	134.0	114.2	119.5
<N <sub>8</sub> N <sub>10</sub> C <sub>11</sub>	126.9	120.3	120.1	<O <sub>20</sub> C <sub>21</sub> H <sub>35</sub>	107.1	102.6	104.7
<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> C <sub>12</sub>	124.1	119.3	123.7	<O <sub>20</sub> C <sub>21</sub> H <sub>36</sub>	113.5	111.9	111.3
<N <sub>10</sub> C <sub>11</sub> H <sub>28</sub>	124.5	124.6	121.1	<O <sub>20</sub> C <sub>21</sub> H <sub>37</sub>	116.3	112.1	111.3
<C <sub>12</sub> C <sub>11</sub> H <sub>28</sub>	111.2	116.1	115.2	<H <sub>35</sub> C <sub>21</sub> H <sub>36</sub>	107.7	110.3	109.8
<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>13</sub>	118.2	117.9	116.2	<H <sub>35</sub> C <sub>21</sub> H <sub>37</sub>	106.5	110.0	109.8
<C <sub>11</sub> C <sub>12</sub> C <sub>17</sub>	128.0	122.9	126.9	<H <sub>36</sub> C <sub>21</sub> H <sub>37</sub>	105.3	109.6	109.8

جدول 7 : الشحنات والكثافات الإلكترونية لـ حامض البنزويك هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق

الحساب المستخدمة

I													
C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O													
Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP			
	Charge	density	CEP-121G		6-311G			Charge	density	CEP-121G		6-311G	
			Charge	Density	Charge	density				Charge	density	Charge	density
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-.15	4.2	-.117	4.11	N <sub>10</sub>	.030	4.9	-.49	5.49	-.54	5.5
C <sub>2</sub>	.00	4.00	-.15	4.2	-.164	4.16	H <sub>11</sub>	-.00	1.0	.157	.842	.158	.84
C <sub>3</sub>	.04	3.96	-.25	4.3	-.098	4.09	H <sub>12</sub>	.002	.99	.159	.841	.158	.84
C <sub>4</sub>	-.09	4.09	.295	3.7	-.144	4.14	H <sub>13</sub>	-.01	1.0	.219	.780	.187	.81
C <sub>5</sub>	.04	3.96	-.22	4.2	-.087	4.08	H <sub>14</sub>	-.01	1.0	.189	.810	.163	.84
C <sub>6</sub>	-.00	4.00	-.17	4.2	-.179	4.18	H <sub>15</sub>	.002	.99	.156	.843	.155	.85
C <sub>7</sub>	.62	3.38	-.25	4.3	.487	3.51	H <sub>16</sub>	.008	.99	.327	.672	.345	.66
N <sub>8</sub>	-.12	5.12	-.25	5.5	-.541	5.54	H <sub>17</sub>	.020	.98	.297	.702	.319	.68
O <sub>9</sub>	-.56	6.57	-.18	6.2	-.417	6.42	H <sub>18</sub>	.021	.97	.297	.703	.317	.68

جدول 8 : الشحنات والكثافات الالكترونية لـ [ حامض البنزويك (4-ثنائي مثيل امينو- بنزلايين)-

هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

**2**

<b>C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O</b>													
<b>Atom Sym.</b>	<b>MINDO/3- FORCES</b>		<b>DFT/B3LYP</b>				<b>Atom Sym.</b>	<b>MINDO/3- FORCES</b>		<b>DFT/B3LYP</b>			
	Charge	density	<b>CEP-121G</b>		<b>6-311G</b>			Charge	density	<b>CEP-121G</b>		<b>6-311G</b>	
			Charge	density	Charge	density			Charge	density	Charge	density	
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-.15	4.1	-.119	4.11	C <sub>20</sub>	.181	3.8	-.44	4.44	-.35	4.3
C <sub>2</sub>	-.00	4.00	-.16	4.1	-.17	4.18	H <sub>21</sub>	-.00	1.0	.155	.845	.156	.84
C <sub>3</sub>	.03	3.96	-.22	4.2	-.099	4.09	H <sub>22</sub>	.000	1.0	.154	.846	.153	.85
C <sub>4</sub>	-.09	4.09	0.25	3.7	-.169	4.17	H <sub>23</sub>	-.01	1.0	.183	.816	.161	.84
C <sub>5</sub>	.04	3.96	-.26	4.3	-.098	4.09	H <sub>24</sub>	-.01	1.0	.219	.781	.188	.81
C <sub>6</sub>	-.01	4.01	-.14	4.1	-.163	4.16	H <sub>25</sub>	.001	.99	.15	.843	.157	.84
C <sub>7</sub>	.61	3.39	-.19	4.2	.541	3.46	H <sub>26</sub>	-.00	1.0	.28	.72	.311	.68
N <sub>8</sub>	-.09	5.09	-.26	5.3	-.572	5.57	H <sub>27</sub>	-.07	1.0	.097	.903	.128	.87
O <sub>9</sub>	-.56	6.56	-.14	6.1	-.379	6.38	H <sub>28</sub>	-.01	1.0	.166	.833	.183	.82
N <sub>10</sub>	.00	4.99	.298	4.8	-.111	5.11	H <sub>29</sub>	.004	.99	.169	.830	.172	.83
C <sub>11</sub>	.09	3.91	-.78	4.8	-.005	4.00	H <sub>30</sub>	.006	.99	.174	.826	.166	.83
C <sub>12</sub>	-.03	4.03	.60	3.4	-.059	4.05	H <sub>31</sub>	-.00	1.0	.217	.783	.144	.86
C <sub>13</sub>	.06	3.94	-.26	4.2	-.084	4.08	H <sub>32</sub>	-.03	1.0	.145	.855	.195	.81
C <sub>14</sub>	-.09	4.09	-.24	4.2	-.199	4.19	H <sub>33</sub>	-.04	1.0	.172	.828	.177	.82
C <sub>15</sub>	.17	3.82	-.00	4.0	.377	3.62	H <sub>34</sub>	-.04	1.0	.171	.829	.195	.81
C <sub>16</sub>	-.09	4.09	-.24	4.2	-.209	4.21	H <sub>35</sub>	-.03	1.0	.145	.855	.177	.82
C <sub>17</sub>	.05	3.94	-.23	4.2	-.154	4.15	H <sub>36</sub>	-.04	1.0	.174	0.83	.198	.80
N <sub>18</sub>	-.11	5.11	.100	4.9	-.666	5.67	H <sub>37</sub>	-.04	1.0	.175	.825	.197	.80
C <sub>19</sub>	.18	3.82	-.44	4.4	-.355	4.35							

جدول 9 : الشحنات والكثافات الإلكترونية لـ [4- نايتروبنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

3

C <sub>14</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> O <sub>3</sub>													
Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP			
			CEP-121G		6-311G					CEP-121G		6-311G	
	Charge	density	Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-.14	4.1	-.113	4.11	C <sub>17</sub>	-.00	4.0	-.21	4.21	-.08	4.1
C <sub>2</sub>	-.00	4.00	-.16	4.1	-.183	4.18	N <sub>18</sub>	1.11	3.9	.135	4.87	.008	4.9
C <sub>3</sub>	.04	3.96	.214	4.2	-.082	4.08	O <sub>19</sub>	-.57	6.6	-.19	6.19	-.27	6.3
C <sub>4</sub>	-.09	4.09	.26	3.7	-.155	4.15	O <sub>20</sub>	-.58	6.6	-.18	6.18	-.27	6.3
C <sub>5</sub>	.04	3.96	-.26	4.2	-.092	4.09	H <sub>21</sub>	-.00	1.0	.162	.838	.163	.83
C <sub>6</sub>	-.00	4.00	-.14	4.1	-.162	4.16	H <sub>22</sub>	.004	.99	.161	.839	.160	.84
C <sub>7</sub>	.61	3.38	-.19	4.2	.547	3.45	H <sub>23</sub>	-.01	1.0	.186	.814	.167	.83
N <sub>8</sub>	-.10	5.10	-.27	5.3	-.582	5.58	H <sub>24</sub>	-.00	1.0	.224	.776	.192	.81
O <sub>9</sub>	-.55	6.55	-.12	6.1	-.415	6.42	H <sub>25</sub>	.004	.99	.165	.835	.164	.84
N <sub>10</sub>	.02	4.97	.323	4.7	-.160	5.16	H <sub>26</sub>	.000	1.0	.293	.707	.352	.65
C <sub>11</sub>	.04	3.95	-.76	4.7	-.016	4.02	H <sub>27</sub>	-.05	1.1	.119	.880	.236	.76
C <sub>12</sub>	.07	3.92	.601	3.3	-.035	4.03	H <sub>28</sub>	.008	.99	.19	.81	.178	.82
C <sub>13</sub>	-.00	4.00	-.25	4.3	-.163	4.16	H <sub>29</sub>	.008	.99	.21	.79	.206	.79
C <sub>14</sub>	.06	3.94	-.24	4.2	-.129	4.13	H <sub>30</sub>	.009	.99	.21	.788	.206	.79
C <sub>15</sub>	-.16	4.16	.15	3.9	.284	3.72	H <sub>31</sub>	.009	.99	.237	.763	.179	.82
C <sub>16</sub>	.06	3.94	.255	4.3	-.134	4.1							

جدول 10 : الشحنات والكثافات الإلكترونية لـ [4- ميثوكسي بنزلدين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

4

C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>													
Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP			
			CEP-121G		6-311G					CEP-121G		6-311G	
	Charge	density	Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-.11	4.1	-.117	4.11	O <sub>18</sub>	-.42	4.4	.559	4.55	-.52	6.
C <sub>2</sub>	-.00	4.00	-.14	4.1	-.195	4.19	C <sub>19</sub>	.440	3.6	-.17	4.17	-.29	4.4
C <sub>3</sub>	.04	3.96	-.14	4.1	-.015	4.02	H <sub>20</sub>	-.00	1.0	.134	.866	.154	.85
C <sub>4</sub>	-.09	4.09	.02	4.0	-.138	4.14	H <sub>21</sub>	.001	1.0	.132	.867	.149	.85
C <sub>5</sub>	.05	3.95	-.12	4.2	-.112	4.11	H <sub>22</sub>	-.01	1.0	.129	.871	.193	.81

C <sub>6</sub>	-0.00	4.00	-0.13	4.1	-0.161	4.16	H <sub>23</sub>	-0.00	1.0	.170	.829	.186	.81
C <sub>7</sub>	.61	3.39	.505	3.4	.505	3.49	H <sub>24</sub>	.001	.99	.136	.864	.154	.84
N <sub>8</sub>	-0.09	5.09	-0.56	5.5	-0.579	5.58	H <sub>25</sub>	-0.00	1.0	.313	.687	.313	.69
O <sub>9</sub>	-0.56	6.56	-0.43	6.4	-0.411	6.41	H <sub>26</sub>	-0.07	1.0	.108	.891	.146	.85
N <sub>10</sub>	.00	4.99	-0.15	5.1	-0.142	5.14	H <sub>27</sub>	-0.01	1.0	.127	.873	.185	.81
C <sub>11</sub>	.09	3.91	-0.00	4.0	-0.002	4.00	H <sub>28</sub>	.028	.97	.143	.857	.175	.83
C <sub>12</sub>	-0.03	4.03	.092	3.9	-0.076	4.07	H <sub>29</sub>	.026	.97	.136	.864	.159	.84
C <sub>13</sub>	.06	3.94	-0.17	4.2	-0.068	4.06	H <sub>30</sub>	-0.00	1.0	.178	.822	.173	.82
C <sub>14</sub>	-0.12	4.12	-0.13	4.1	-0.182	4.18	H <sub>31</sub>	-0.05	1.0	.172	.828	.186	.81
C <sub>15</sub>	.39	3.61	.291	3.7	.264	3.74	H <sub>32</sub>	-0.09	1.1	.153	.847	.204	.79
C <sub>16</sub>	-0.14	4.14	-0.14	4.1	-0.182	4.18	H <sub>33</sub>	-0.09	1.1	.153	.847	.186	.81
C <sub>17</sub>	.06	3.94	-0.15	4.1	-0.136	4.14							

جدول 11 : الشحنات والكثافات الالكترونية لـ[[2-هيدروكسي-4-ميثوكسي بنزولين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

5

Atom Sym.	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>												
	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3-FORCES		DFT/B3LYP			
	Charge	density	CEP-121G		6-311G			Charge	density	CEP-121G		6-311G	
		Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density	
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-0.11	4.1	-0.11	4.1	O <sub>18</sub>	-0.44	6.4	-0.61	6.61	-0.62	6.6
C <sub>2</sub>	-0.01	4.01	-0.14	4.1	-0.19	4.1	O <sub>19</sub>	-0.42	6.4	-0.56	6.56	-0.52	6.5
C <sub>3</sub>	.04	3.96	-0.13	4.1	-0.003	4.00	C <sub>20</sub>	.432	3.5	-0.17	4.17	-0.29	4.3
C <sub>4</sub>	-0.09	4.09	.029	3.9	-0.164	4.16	H <sub>21</sub>	-0.00	1.0	.135	.865	.15	.85
C <sub>5</sub>	.03	3.97	-0.14	4.1	-0.125	4.13	H <sub>22</sub>	-0.00	1.0	.137	.863	.15	.85
C <sub>6</sub>	-0.00	4.00	-0.14	4.1	-0.160	4.16	H <sub>23</sub>	-0.01	1.0	.171	.829	.19	.81
C <sub>7</sub>	.59	3.42	.504	3.5	.531	3.47	H <sub>24</sub>	-0.01	1.0	.133	.867	.20	.80
N <sub>8</sub>	-0.11	5.11	-0.57	5.5	-0.603	5.60	H <sub>25</sub>	-0.00	1.0	0.13	.866	.15	.85
O <sub>9</sub>	-0.56	6.56	-0.42	6.4	-0.422	6.42	H <sub>26</sub>	.047	.95	.329	.670	.33	.67
N <sub>10</sub>	-0.07	5.07	-0.09	5.0	-0.134	5.13	H <sub>27</sub>	.033	.97	.148	.852	.16	.84
C <sub>11</sub>	-0.24	4.24	-0.12	4.1	-0.161	4.16	H <sub>28</sub>	.050	.95	.153	.847	.18	.82
C <sub>12</sub>	.47	3.53	.280	3.7	.255	3.75	H <sub>29</sub>	-0.01	1.0	.157	.843	.18	.82
C <sub>13</sub>	-0.30	4.30	-0.12	4.1	-0.176	4.18	H <sub>30</sub>	-0.04	1.0	.163	.837	.19	.81
C <sub>14</sub>	.45	3.55	.191	3.8	.252	3.75	H <sub>31</sub>	.254	.75	.383	.617	.38	.62
C <sub>15</sub>	-0.16	4.17	.068	3.9	-0.133	4.13	H <sub>32</sub>	-0.05	1.0	.175	.825	.21	.79
C <sub>16</sub>	.15	3.87	-0.18	4.1	-0.131	4.13	H <sub>33</sub>	-0.09	1.1	.155	.845	.19	.81
C <sub>17</sub>	.16	3.84	-0.11	4.1	.038	3.96	H <sub>34</sub>	-0.09	1.1	.157	.843	.19	.81

جدول 12 : الشحنات والكثافات الالكترونية ل-[4,2- ثنائي ميثوكسي بنزلايين) بنزو هيدرازيد

[والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

6 $C_{16}H_{16}N_2O_3$													
Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP				Atom Sym.	MINDO/3- FORCES		DFT/B3LYP			
			CEP-121G		6-311G					CEP-121G		6-311G	
	Charge	density	Charge	density	Charge	density		Charge	density	Charge	density	Charge	density
C <sub>1</sub>	.03	3.97	-.08	4.1	-.114	4.11	O <sub>20</sub>	-.42	6.4	-.21	6.21	-.45	6.4
C <sub>2</sub>	-.00	4.00	-.11	4.1	-.172	4.17	C <sub>21</sub>	.430	3.6	.056	3.94	-.32	4.3
C <sub>3</sub>	.04	3.96	-.08	4.1	-.082	4.08	H <sub>22</sub>	-.01	1.0	.105	.895	.161	.84
C <sub>4</sub>	-.09	4.09	-.15	4.1	-.086	4.08	H <sub>23</sub>	.000	1.0	.108	.892	.159	.84
C <sub>5</sub>	.05	3.96	-.04	4.0	-.091	4.09	H <sub>24</sub>	-.01	1.0	.102	.898	.182	.81
C <sub>6</sub>	-.01	4.01	-.11	4.1	-.171	4.17	H <sub>25</sub>	-.01	1.0	.123	.877	.186	.81
C <sub>7</sub>	.61	3.39	.301	3.7	.344	3.65	H <sub>26</sub>	.000	1.0	.109	.891	.161	.84
N <sub>8</sub>	-.09	5.09	-.02	5.0	-.529	5.52	H <sub>27</sub>	-.01	1.0	.063	.937	.337	.66
O <sub>9</sub>	-.57	6.57	-.31	6.3	-.352	6.35	H <sub>28</sub>	-.08	1.0	.100	.899	.179	.82
N <sub>10</sub>	-.00	5.00	-.07	5.1	-.095	5.09	H <sub>29</sub>	-.01	1.0	.105	.895	.165	.83
C <sub>11</sub>	.13	3.87	-.05	4.1	-.017	4.01	H <sub>30</sub>	.042	.96	.123	.877	.158	.84
C <sub>12</sub>	-.16	4.16	-.11	4.1	-.007	4.00	H <sub>31</sub>	.049	.95	.132	.868	.174	.82
C <sub>13</sub>	.12	3.88	-.03	4.0	-.134	4.13	H <sub>32</sub>	-.04	1.0	.051	.949	.174	.82
C <sub>14</sub>	-.20	4.20	-.15	4.2	-.166	4.16	H <sub>33</sub>	-.08	1.0	.033	.966	.190	.80
C <sub>15</sub>	.47	3.53	.110	3.9	.235	3.76	H <sub>34</sub>	-.08	1.1	.028	.972	.177	.82
C <sub>16</sub>	-.33	4.33	-.22	4.2	-.167	4.16	H <sub>35</sub>	-.03	1.0	.044	.956	.192	.81
C <sub>17</sub>	.46	3.54	.134	3.9	.244	3.75	H <sub>36</sub>	-.08	1.1	.044	.956	.181	.82
O <sub>18</sub>	-.42	6.42	-.19	6.1	-.515	6.51	H <sub>37</sub>	-.09	1.1	.019	.981	.188	.81
C <sub>19</sub>	.43	3.57	.045	3.9	-.304	4.30							

جدول 13 : ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ حامض البنزويك

هيدرازيد والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

No. of freq.	C <sub>7</sub> H <sub>8</sub> N <sub>2</sub> O				Assignments	Intensity Of km/mole		
	Frequency Of 1/cm			Mind0/3 -Forces		CEP-121	6-311G	
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G					
v <sub>1</sub>	3506	3050	3145	3208	Ring(C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	46.50	1.741	9.531
v <sub>2</sub>	3496	3027	3180	3172	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	80.75	28.95	6.203
v <sub>3</sub>	3485	3018	3155	3196	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	14.80	7.883	23.16
v <sub>4</sub>	3472	3006	3193	3164	Ring (C <sub>3</sub> )H St.	29.95	11.88	2.051
v <sub>5</sub>	3470	3005	3167	3183	Ring (C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	23.80	40.38	33.34
v <sub>6</sub>	3400	3209	3624	3644	(N <sub>8</sub> )H st.	108.35	27.81	31.33
v <sub>7</sub>	3364	-----	3432	3452	(N <sub>10</sub> )H <sub>2</sub> s. st.	115.80	0.073	0.411
v <sub>8</sub>	3354	-----	3544	3551	(N <sub>10</sub> )H <sub>2</sub> as. st.	93.46	0.514	1.239
v <sub>9</sub>	1872	1694	1590	1649	C=O st.	272.05	94.40	117.6
v <sub>10</sub>	1701	1491	1518	1644	Ring (C-C) st.	10.32	32.13	5.669
v <sub>11</sub>	1657	1453	1630	1544	Ring (C-C) st.	.97	32.202	24.19
v <sub>12</sub>	1552	1412	1484	1610	δ Ring	48.59	181.34	58.22
v <sub>13</sub>	1507	-----	1743	1766	NH <sub>2</sub> sciss.	14.83	33.466	30.95
v <sub>14</sub>	1460	1300	1626	1513	C-N st.	113.48	64.719	181.8
v <sub>15</sub>	1449	1318	1460	1489	Ring (δCH)	.76	17.850	19.56
v <sub>16</sub>	1315	1196	1357	1379	Ring (δCH)	13.84	1.8744	0.447
v <sub>17</sub>	1286	1201	1311	1329	δ N-H	15.02	135.86	124.2
v <sub>18</sub>	1196	1088	1214	1217	Ring (δCH)	.02	1.193	2.019
v <sub>19</sub>	1171	1004	1340	1229	Ring (δCH)	28.07	1.936	2.125
v <sub>20</sub>	1171	1065	1074	1341	Ring (CCC st.)	4.44	1.746	10.75
v <sub>21</sub>	1141	-----	1329	1351	τNH <sub>2</sub>	3.17	3.819	2.924
v <sub>22</sub>	1137	1034	1205	1213	Ring (δCH)	.42	4.049	0.387
v <sub>23</sub>	1094	995	1193	1119	Ring (δCH)	1.08	0.219	9.934
v <sub>24</sub>	1093	994	1102	1055	δ Ring	7.92	9.058	6.356
v <sub>25</sub>	1081	983	1034	1092	Ring (δCH)	.92	6.689	1.175
v <sub>26</sub>	1043	-----	841	845	ω NH <sub>2</sub>	12.51	61.44	91.78
v <sub>27</sub>	937	1070	1002	1027	Ring (CCC st.)	1.10	0.514	0.404
v <sub>28</sub>	876	954	1040	1039	Ring (γ CH )	.06	0.849	0.627
v <sub>29</sub>	867	945	972	1015	Ring (γ CH )	.02	3.775	0.831
v <sub>30</sub>	855	931	894	969	Ring (γ CH )	.13	0.663	1.911
v <sub>31</sub>	817	890	1014	885	Ring (γ CH )	.06	0.700	0.376



v <sub>32</sub>	779	849	887	821	Ring ( $\delta$ CCC)	6.66	81.27	35.31
v <sub>33</sub>	726	791	817	905	$\gamma$ Ring	.72	49.55	53.77
v <sub>34</sub>	661	704	681	716	$\delta$ N-H	2.10	4.515	0.127
v <sub>35</sub>	629	685	727	732	Ring ( $\gamma$ CH )	4.34	68.643	87.52
v <sub>36</sub>	619	660	549	579	$\gamma$ N-H	15.24	176.58	176.3
v <sub>37</sub>	592	546	502	650	Ring ( $\delta$ CCC)	9.98	1.265	1.187
v <sub>38</sub>	564	520	628	703	Ring ( $\delta$ CCC)	.51	0.989	5.007
v <sub>39</sub>	507	552	697	515	Ring ( $\gamma$ CH )	1.67	0.705	1.366
v <sub>40</sub>	383	417	420	429	Ring ( $\gamma$ CH )	.01	0.217	9.033
v <sub>41</sub>	345	371	348	357	Ring (CCC deform)	1.69	2.77	2.35
v <sub>42</sub>	317	364	423	424	$\gamma$ Ring	4.20	10.57	0.085
v <sub>43</sub>	241	-----	234	242	$\rho$ NH <sub>2</sub>	.12	4.909	3.811
v <sub>44</sub>	231	288	295	303	$\delta$ Ring	1.18	31.23	32.21
v <sub>45</sub>	148	-----	176	172	$\tau$ NH <sub>2</sub>	6.32	18.06	22.43
v <sub>46</sub>	115	-----	149	149	$\omega$ NH <sub>2</sub>	1.97	0.411	0.458
v <sub>47</sub>	97	105	114	115	Ring ( $\gamma$ CH )	1.24	0.063	0.067
v <sub>48</sub>	46	50	56	60	$\gamma$ Ring	2.01	2.523	2.357

جدول 14 : ترددات الاهتزاز وشدت الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [ حامض البنزويك (4-ثنائي مثيل امينو - بنزلدن) - هيدرازيد ] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

2

**C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O**

No. of freq.	Frequency Of 1/cm			Assignments	Intensity Of km/mole			
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G		Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G	
v <sub>1</sub>	3505	3035	3178	3195	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H a. st.	65.36	37.35	30.90
v <sub>2</sub>	3495	3026	3164	3182	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H a. st.	82.73	44.59	36.59
v <sub>3</sub>	3485	3018	3198	3215	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H a. st.	13.07	19.21	17.09
v <sub>4</sub>	3484	3017	3141	3170	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H a. st.	12.77	9.729	6.708
v <sub>5</sub>	3480	3013	3193	3211	Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H a. st.	83.39	30.99	24.28
v <sub>6</sub>	3474	3008	3192	3208	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H s. st.	22.34	18.03	13.06
v <sub>7</sub>	3467	3002	3176	3193	Ring (C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H a. st.	21.19	4.208	2.96
v <sub>8</sub>	3467	3002	3151	3161	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> )H a. st.	31.04	8.557	8.516
v <sub>9</sub>	3458	2994	3134	3151	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>13</sub> )H a. st.	35.71	24.09	21.18

v <sub>10</sub>	3405	2949	3114	3131	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H st.	155.53	73.57	60.47
v <sub>11</sub>	3398	2943	3099	3116	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H st.	3.05	5.178	2.34
v <sub>12</sub>	3359	2909	3020	3030	(C <sub>20</sub> )H <sub>2</sub> as. st.	20.49	76.48	64.13
v <sub>13</sub>	3353	2904	3014	3025	(C <sub>19</sub> )H <sub>2</sub> as. st.	127.35	42.68	36.11
v <sub>14</sub>	3350	2756	2963	2989	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>2</sub> s. st.	117.88	130.74	108.7
v <sub>15</sub>	3348	2725	2954	2981	(C <sub>20</sub> ,C <sub>19</sub> )H <sub>2</sub> s. st.	55.07	128.5	108.6
v <sub>16</sub>	3329	-----	3478	3494	N-H st.	176.78	22.41	21.16
v <sub>17</sub>	3223	2791	2986	3005	(C <sub>11</sub> )H st.	90.20	81.04	72.6
v <sub>18</sub>	1873	1695	1643	1668	C=O st.	334.02	271.7	148.7
v <sub>19</sub>	1785	-----	1639	1659	C=N st.	10.16	225.1	215.9
v <sub>20</sub>	1702	1492	1629	1644	Ring (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> ) st.	12.17	26.19	107.7
v <sub>21</sub>	1700	1491	1617	1638	Ring (C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> ) st.	154.52	144.44	207.6
v <sub>22</sub>	1656	1452	1597	1615	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	1.24	64.59	31.6
v <sub>23</sub>	1606	1408	1570	1584	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	8.57	14.49	25.33
v <sub>24</sub>	1561	1374	1557	1578	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	24.65	59.27	19.58
v <sub>25</sub>	1534	1345	1511	1539	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	177.92	45.44	47.28
v <sub>26</sub>	1463	1304	1263	1354	C-N st.	474.85	55.43	23.26
v <sub>27</sub>	1449	1269	1463	1493	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	2.97	3.01	3.299
v <sub>28</sub>	1445	1267	1451	1473	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	4.58	30.84	24.41
v <sub>29</sub>	1429	1253	1375	1393	Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	70.16	339.8	341.1
v <sub>30</sub>	1410	1549	1544	1568	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	178.13	178.83	179.9
v <sub>31</sub>	1400	1538	1530	1557	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	76.79	7.518	11.53
v <sub>32</sub>	1330	1461	1499	1518	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	1.04	67.94	33.09
v <sub>33</sub>	1316	1229	1536	1561	δ (N <sub>8</sub> )-H	89.49	390.5	410.9
v <sub>34</sub>	1315	1445	1472	1489	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	8.64	1.356	2.389
v <sub>35</sub>	1316	1446	1516	1535	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	2.86	14.55	16.67
v <sub>36</sub>	1304	1433	1508	1525	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	16.15	0.268	0.068
v <sub>37</sub>	1301	1430	1451	1382	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	0.27	30.84	7.742
v <sub>38</sub>	1292	1420	1375	1277	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	3.22	339.8	43.24
v <sub>39</sub>	1276	1162	1270	1379	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	38.33	53.28	3.858
v <sub>40</sub>	1241	1129	1386	1406	δ (C <sub>11</sub> )H	25.27	12.72	24.33
v <sub>41</sub>	1206	1097	1366	1288	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.01	11.69	177.3
v <sub>42</sub>	1197	1089	1356	1339	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.32	4.329	1.480
v <sub>43</sub>	1182	1076	1345	1233	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	7.61	24.50	162.9
v <sub>44</sub>	1171	1066	1338	1227	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.70	4.076	32.53
v <sub>45</sub>	1169	1063	1216	1032	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	20.53	152.9	0.49
v <sub>46</sub>	1157	1080	1268	1283	δ (N <sub>8</sub> )-H	16.55	418.08	288.3

V <sub>47</sub>	1147	1043	963	1019	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>17</sub> )H	2.77	5.738	3.656
V <sub>48</sub>	1139	1033	1211	1212	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.63	36.00	1.293
V <sub>49</sub>	1106	1006	1152	1171	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	5.38	40.86	41.33
V <sub>50</sub>	1094	995	1192	1114	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.48	0.363	42.67
V <sub>51</sub>	1093	994	1097	1157	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	9.20	47.28	99.51
V <sub>52</sub>	1081	984	1045	1058	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.84	27.83	31.64
V <sub>53</sub>	1030	1088	1189	1206	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> s.deform	0.04	71.12	51.82
V <sub>54</sub>	1018	1071	1142	1155	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> s.deform	0.00	0.101	0.254
V <sub>55</sub>	1007	1060	1141	1154	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> s.deform	21.16	0.016	0.001
V <sub>56</sub>	1005	1028	1188	1089	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> s.deform	0.22	71.12	30.58
V <sub>57</sub>	997	907	1012	1001	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	2.26	0.261	10.83
V <sub>58</sub>	951	1036	1036	1049	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	6.95	16.37	8.444
V <sub>59</sub>	896	977	1001	961	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.03	12.59	44.62
V <sub>60</sub>	876	955	1011	1037	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.10	0.773	6.673
V <sub>61</sub>	867	945	1031	1026	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.10	4.89	6.953
V <sub>62</sub>	860	937	841	929	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.17	17.64	26.25
V <sub>63</sub>	855	932	967	1013	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.39	3.447	2.109
V <sub>64</sub>	850	926	1039	857	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.66	6.402	6.536
V <sub>65</sub>	820	894	906	964	$\delta$ (C <sub>11</sub> )H	4.18	28.59	4.465
V <sub>66</sub>	816	889	891	965	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.20	1.097	3.834
V <sub>67</sub>	794	865	1138	882	$\delta$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	25.35	110.3	1.796
V <sub>68</sub>	782	860	865	859	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.11	51.44	59.89
V <sub>69</sub>	739	805	949	833	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	5.08	44.72	10.08
V <sub>70</sub>	729	795	1002	816	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.50	8.864	10.86
V <sub>71</sub>	718	783	647	754	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.87	0.708	2.741
V <sub>72</sub>	664	708	569	600	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H	3.79	89.43	68.32
V <sub>73</sub>	650	693	836	748	$\gamma$ C-N	23.05	8.377	7.191
V <sub>74</sub>	632	688	751	668	$\gamma$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	6.67	3.512	0.648
V <sub>75</sub>	624	680	814	728	$\gamma$ Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> )	8.51	28.59	81.22
V <sub>76</sub>	602	555	683	710	Ring(C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) deform	14.02	31.73	8.574
V <sub>77</sub>	588	542	550	612	Ring(C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) deform	2.13	0.853	22.74
V <sub>78</sub>	564	520	628	651	Ring(C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) deform	0.41	1.374	1.271
V <sub>79</sub>	536	584	497	549	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.78	3.913	7.625
V <sub>80</sub>	513	473	730	704	Ring(C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> , C <sub>15</sub> ,C <sub>17</sub> ) deform	1.55	6.034	35.25
V <sub>81</sub>	496	541	722	527	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.68	71.84	8.435
V <sub>82</sub>	453	418	594	511	Ring(C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	0.47	5.874	4.843

					deform			
V83	415	452	511	472	$\gamma$ Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	0.77	7.701	2.257
V84	513	417	690	432	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.03	2.258	7.682
V85	496	413	426	446	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.01	8.626	0.743
V86	374	418	461	426	Deformations	0.22	2.764	0.272
V87	356	384	440	419	Deformations	1.62	0.565	0.478
V88	336	419	397	404	$\gamma$ C-O torsion	5.61	1.672	3.274
V89	315	352	225	358	Deformations	2.79	14.95	2.681
V90	278	310	412	302	Deformations	0.22	1.408	12.65
V91	245	274	296	281	Deformations	0.30	11.083	2.291
V92	226	252	348	253	Deformations	1.34	2.787	4.368
V93	201	219	421	226	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	1.36	0.329	13.24
V94	174	194	186	204	Deformations	1.35	7.258	0.095
V95	165	184	273	189	$\gamma$ C-O torsion	0.98	2.230	1.48
V96	115	131	250	183	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d.deform	0.04	3.439	9.18
V97	105	117	183	160	Deformations	0.14	2.481	0.057
V98	98	107	209	112	(C <sub>19</sub> ,C <sub>20</sub> )H <sub>3</sub> d.deform	0.18	0.373	0.726
V99	79	88	162	105	Deformations	1.14	0.220	3.403
V100	70	78	110	88	Deformations	0.34	1.933	6.605
V101	35	39	101	75	Deformations	0.39	1.413	0.403
V102	29	32	83	55	Deformations	0.34	4.277	0.857
V103	20	22	53	35	Deformations	0.30	0.889	2.168
V104	11	12	31	31	Deformations	0.03	0.123	0.213
V105	8	9	24	24	Deformations	0.01	1.893	1.879

جدول 15 : ترددات الاهتزاز وشدت الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [(4- نايثروبنزولدين)

بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

3 <b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>								
No. of freq.	Frequency Of 1/cm				Assignments	Intensity Of km/mole		
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G	Mindo/3-Forces		CEP-121	6-311G	
V <sub>1</sub>	3507	3037	3182	3210	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	58.98	29.92	13.74
V <sub>2</sub>	3498	3029	3194	3199	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	76.95	16.53	24.30
V <sub>3</sub>	3494	3062	3220	3233	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H st.	2.69	0.416	0.011
V <sub>4</sub>	3490	3058	3218	3182	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H st.	81.04	0.514	4.691
V <sub>5</sub>	3487	3019	3168	3187	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	11.88	35.16	25.88

v <sub>6</sub>	3479	3013	3195	3213	Ring (C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H st.	3.54	0.537	1.156
v <sub>7</sub>	3477	3011	3159	3234	Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H st.	26.55	0.537	0.646
v <sub>8</sub>	3472	3008	3155	3175	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	34.37	6.736	3.086
v <sub>9</sub>	3472	3007	3144	3164	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	16.51	13.89	9.287
v <sub>10</sub>	3347	-----	3480	3653	N-H st.	168.35	2.181	30.89
v <sub>11</sub>	3251	2815	3017	3186	(C <sub>11</sub> )-H st.	96.94	68.515	2.598
v <sub>12</sub>	1908	-----	1458	1435	N-O <sub>2</sub> st.	384.21	129.4	34.92
v <sub>13</sub>	1880	1701	1650	1670	C=O st.	264.80	143.7	35.27
v <sub>14</sub>	1802	-----	1594	1599	(C <sub>11</sub> )=(N <sub>10</sub> )	42.68	45.38	49.75
v <sub>15</sub>	1705	1495	1631	1642	(C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	12.07	14.1	42.20
v <sub>16</sub>	1700	1491	1629	1643	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	19.42	1.198	3.404
v <sub>17</sub>	1657	1453	1600	1544	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	1.08	22.83	126.5
v <sub>18</sub>	1618	1419	1619	1627	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	1.76	45.32	24.13
v <sub>19</sub>	1572	1431	1419	1619	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ) st.	141.36	17.28	4.909
v <sub>20</sub>	1535	1397	1464	1540	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	107.18	2.747	1.823
v <sub>21</sub>	1519	1353	1273	1280	(C <sub>15</sub> )-N st.	98.33	75.63	867.9
v <sub>22</sub>	1449	1319	1516	1493	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.08	5.542	1.839
v <sub>23</sub>	1449	1291	1256	1265	(C <sub>7</sub> )-N st.	305.47	1024.9	17.09
v <sub>24</sub>	1433	1304	1354	1471	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.82	6.712	127.5
v <sub>25</sub>	1391	1266	1511	1532	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	21.01	68.64	247.5
v <sub>26</sub>	1306	1214	1387	1380	δ N-H	2.60	45.95	2.576
v <sub>27</sub>	1294	1208	1537	1302	δ N-H	109.32	459.03	208.2
v <sub>28</sub>	1231	1120	1248	1407	δ (C <sub>11</sub> )-H	10.22	40.25	194.5
v <sub>29</sub>	1200	1092	1334	1365	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.11	1.94	17.23
v <sub>30</sub>	1196	1088	1357	1341	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> )H	0.04	1.127	3.789
v <sub>31</sub>	1176	1070	1340	1350	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H+δ(C <sub>11</sub> )H	22.05	0.911	20.49
v <sub>32</sub>	1171	1065	1212	1229	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> )H	0.66	36.154	33.58
v <sub>33</sub>	1163	1058	1146	1216	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.93	293.4	63.89
v <sub>34</sub>	1153	1949	1204	1215	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.82	94.41	9.742
v <sub>35</sub>	1149	1046	1052	1046	δ (C <sub>11</sub> )-H	18.46	2.481	17.39
v <sub>36</sub>	1137	1035	1100	1117	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> )H	0.87	89.63	38.76
v <sub>37</sub>	1094	996	1194	1057	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.96	0.705	19.04
v <sub>38</sub>	1092	994	1041	1042	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	10.75	3.28	2.166
v <sub>39</sub>	1090	992	1129	1165	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.07	114.8	175.9
v <sub>40</sub>	1081	984	1032	1033	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> )H	0.67	13.01	1.541
v <sub>41</sub>	1010	1120	1107	1129	(C <sub>15</sub> )-N st.	5.81	57.07	41.95
v <sub>42</sub>	954	868	1002	1033	Ring γ (C <sub>1</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )breath	14.50	3.676	1.514
v <sub>43</sub>	937	1021	838	1039	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	29.41	0.732	4.104
v <sub>44</sub>	876	954	1015	1016	Ring γ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )H	0.07	1.634	1.856
v <sub>45</sub>	867	945	970	966	Ring γ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.02	1.776	2.835



V <sub>46</sub>	863	941	1023	1043	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.01	1.421	5.86
V <sub>47</sub>	861	938	1062	1144	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.19	0.4334	37.30
V <sub>48</sub>	856	933	906	1009	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.44	35.155	2.309
V <sub>49</sub>	817	890	891	882	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.05	1.254	1.975
V <sub>50</sub>	811	884	912	898	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.01	24.09	39.29
V <sub>51</sub>	800	872	986	1023	$\gamma$ (C <sub>11</sub> )-H	1.85	54.56	13.64
V <sub>52</sub>	798	869	685	681	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	5.82	24.93	12.43
V <sub>53</sub>	786	856	1031	946	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	12.34	0.182	4.188
V <sub>54</sub>	755	-----	786	814	NO <sub>2</sub> sciss.	37.52	40.27	29.19
V <sub>55</sub>	739.	-----	664	686	$\omega$ NO <sub>2</sub>	22.85	17.64	1.852
V <sub>56</sub>	727	792	816	813	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	2.75	26.70	28.31
V <sub>57</sub>	671	731	740	886	$\gamma$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	4.81	3.592	0.096
V <sub>58</sub>	667	711	595	756	$\gamma$ N-H	0.33	80.29	3.345
V <sub>59</sub>	647	718	675	692	$\delta$ (C <sub>7</sub> )-N	21.21	18.28	113.4
V <sub>60</sub>	632	688	723	731	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	17.89	78.17	0.304
V <sub>61</sub>	608	663	545	708	$\delta$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	30.94	1.102	7.09
V <sub>62</sub>	597	651	884	880	$\gamma$ Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	1.36	15.52	4.211
V <sub>63</sub>	578	630	531	552	$\gamma$ Ring (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	0.31	5.316	0.214
V <sub>64</sub>	564	615	628	727	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.36	2.247	95.44
V <sub>65</sub>	556	606	640	662	$\gamma$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	2.74	0.619	0.179
V <sub>66</sub>	509	555	692	649	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	2.23	1.783	2.074
V <sub>67</sub>	438	-----	517	534	$\rho$ NO <sub>2</sub>	0.65	1.332	3.713
V <sub>68</sub>	393	-----	481	529	$\tau$ NO <sub>2</sub> + $\delta$ (C <sub>11</sub> )-H	0.60	3.107	3.638
V <sub>69</sub>	384	409	431	496	$\rho$ NO <sub>2</sub> + $\delta$ N-H	1.71	5.289	2.138
V <sub>70</sub>	383	417	420	436	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.14	0.077	3.803
V <sub>71</sub>	377	411	425	431	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	0.01	1.142	0.203
V <sub>72</sub>	343	458	409	426	$\delta$ (C <sub>7</sub> )-O	1.90	5.44	22.25
V <sub>73</sub>	315	449	360	422	$\gamma$ N-H	9.75	1.841	2.541
V <sub>74</sub>	291	345	350	371	$\delta$ (C <sub>7</sub> )-O + $\omega$ NO <sub>2</sub>	0.17	1.09	4.791
V <sub>75</sub>	258	281	284	364	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.64	4.93	1.513
V <sub>76</sub>	205	223	267	314	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.25	12.43	14.53
V <sub>77</sub>	199	-----	199	243	$\gamma$ N-H + $\omega$ NO <sub>2</sub>	5.60	3.119	3.638
V <sub>78</sub>	177	221	229	201	$\gamma$ (C <sub>7</sub> )-O + $\omega$ NO <sub>2</sub>	1.68	17.35	1.618
V <sub>79</sub>	170	181	185	291	$\delta$ (C <sub>11</sub> )-H + $\omega$ NO <sub>2</sub>	0.28	3.437	13.01
V <sub>80</sub>	97	121	169	168	$\gamma$ (C <sub>7</sub> )-O + $\tau$ NO <sub>2</sub>	1.07	2.896	1.099
V <sub>81</sub>	93	116	110	152	$\gamma$ (C <sub>7</sub> )-O + $\rho$ NO <sub>2</sub>	0.50	2.811	1.789
V <sub>82</sub>	62	77	95	128	$\gamma$ (C <sub>7</sub> )-O + $\omega$ NO <sub>2</sub>	0.54	1.132	1.058
V <sub>83</sub>	43	47	68	79	$\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H+ $\tau$ NO <sub>2</sub>	0.03	0.745	0.363

v <sub>84</sub>	38	41	54	65	γ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.90	5.450	4.896
v <sub>85</sub>	26	29	36	45	Deformations	0.20	0.999	0.461
v <sub>86</sub>	22	25	23	23	Deformations	0.03	0.028	0.093
v <sub>87</sub>	11	12	33	29	Deformations	0.81	0.257	0.511

جدول 16 : ترددات الاهتزاز وشدت الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [4- ميثوكسي

بنزلدين) بنزوهيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

4



No. of freq.	Frequency Of 1/cm				Assignments	Intensity Of km/mole		
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G	Mindo/3-Forces		CEP-121	6-311G	
v <sub>1</sub>	3505	3035	3225	3211	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	60.76	5.306	10.48
v <sub>2</sub>	3501	3032	3237	3212	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H st.	16.57	9.592	9.157
v <sub>3</sub>	3499	3030	3242	3209	Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H st.	46.77	9.575	12.23
v <sub>4</sub>	3496	3028	3212	3178	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	81.31	29.471	23.51
v <sub>5</sub>	3485	3018	3200	3192	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	14.31	4.880	34.62
v <sub>6</sub>	3474	3008	3239	3238	C <sub>5</sub> -H st.	21.61	9.289	2.29
v <sub>7</sub>	3471	3005	3226	3166	C <sub>17</sub> -H st.	27.73	5.307	16.35
v <sub>8</sub>	3467	3002	3191	3163	C <sub>3</sub> -H st.	29.09	10.00	0.802
v <sub>9</sub>	3460	2996	3192	3193	C <sub>13</sub> -H st.	40.54	15.37	5.484
v <sub>10</sub>	3381	2928	3184	3077	C <sub>19</sub> -H <sub>31</sub> st.	97.63	23.57	42.03
v <sub>11</sub>	3345	2897	3111	3153	C <sub>19</sub> -H <sub>32</sub> st.	99.99	40.42	25.08
v <sub>12</sub>	3336	2889	3038	3009	C <sub>19</sub> -H <sub>33</sub> st.	121.13	90.55	55.71
v <sub>13</sub>	3335	-----	3509	3462	N <sub>8</sub> -H st.	177.24	13.53	2.617
v <sub>14</sub>	3230	2797	3039	3034	C <sub>11</sub> -H st.	95.97	32.51	58.41
v <sub>15</sub>	1872	1694	1703	1650	C=O st.	307.59	164.7	427.3
v <sub>16</sub>	1787	-----	1678	1655	C=N st.	13.62	38.29	2.197
v <sub>17</sub>	1702	1492	1663	1643	Ring (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> ) st.	12.99	128.9	22.79
v <sub>18</sub>	1700	1491	1660	1636	Ring (C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> ) st.	147.87	58.46	15.46
v <sub>19</sub>	1656	1452	1635	1609	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	1.21	15.97	67.78
v <sub>20</sub>	1642	1440	1621	1602	Ring(C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )st.	73.26	2.783	3.963
v <sub>21</sub>	1598	1464	1567	1559	C <sub>15</sub> -O st.	106.57	238.2	75.70
v <sub>22</sub>	1535	1346	1550	1541	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	170.19	36.41	5.633
v <sub>23</sub>	1502	1287	1473	1341	C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> st.	222.80	10.13	67.84
v <sub>24</sub>	1456	1297	1293	1372	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> st.	157.58	263.4	285.9

v <sub>25</sub>	1449	1242	1505	1385	Ring (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> ) st.	3.13	3.235	30.69
v <sub>26</sub>	1441	1264	1371	1456	Ring (C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> -C <sub>17</sub> ) st.	23.95	23.41	1.869
v <sub>27</sub>	1420	1345	1500	1527	CH <sub>3</sub> s. deform	218.06	10.70	11.25
v <sub>28</sub>	1342	1221	1372	1406	δ (C <sub>11</sub> -H)	9.17	8.271	150.9
v <sub>29</sub>	1311	1224	1585	1510	δ (N <sub>8</sub> -H)	70.85	145.1	30.36
v <sub>30</sub>	1307	1436	1542	1537	CH <sub>3</sub> d. deform	41.74	96.92	70.09
v <sub>31</sub>	1289	1204	1368	1339	δ (N <sub>8</sub> -H)	10.04	4.815	80.09
v <sub>32</sub>	1282	1409	1533	1492	CH <sub>3</sub> d. deform	17.07	9.699	1.823
v <sub>33</sub>	1244	1132	1417	1273	δ (C <sub>11</sub> -H)	1.85	25.05	76.34
v <sub>34</sub>	1202	1094	1281	1355	Ring δ (C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	41.13	408.6	203.9
v <sub>35</sub>	1197	1089	1388	1212	Ring δ (C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )H	.15	2.312	0.523
v <sub>36</sub>	1181	1075	1284	1211	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> )H	31.62	91.28	162.7
v <sub>37</sub>	1171	1066	1238	1229	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> ) st.	.88	20.03	19.49
v <sub>38</sub>	1165	1060	1169	1266	δ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	21.75	110.8	251.6
v <sub>39</sub>	1154	1028	1057	1170	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> st.	5.30	41.48	78.17
v <sub>40</sub>	1141	1038	1222	1149	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	3.28	173.5	14.97
v <sub>41</sub>	1139	1036	1126	1115	Ring δ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> ) st.	.44	51.57	42.67
v <sub>42</sub>	1095	996	1205	1199	CH <sub>3</sub> d. deform + Ring γ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	3.26	0.224	0.526
v <sub>43</sub>	1094	995	1070	1109	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.06	28.58	13.81
v <sub>44</sub>	1093	994	1224	1058	Ring δ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	7.88	0.151	9.947
v <sub>45</sub>	1088	946	1156	1159	CH <sub>3</sub> d. deform + Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	7.06	41.48	0.539
v <sub>46</sub>	1082	985	1042	1037	Ring γ (C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> -C <sub>6</sub> )H	.82	5.125	0.309
v <sub>47</sub>	1066	1171	1165	1016	CH <sub>3</sub> d. deform	14.71	0.671	67.42
v <sub>48</sub>	1004	914	1046	1037	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.62	0.987	0.187
v <sub>49</sub>	952	866	1035	1028	Ring(C <sub>1</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ) breath	6.33	6.616	0.021
v <sub>50</sub>	931	1014	1023	897	Ring δ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.77	90.33	14.93
v <sub>51</sub>	876	955	1012	1018	Ring γ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	.10	1.602	6.743
v <sub>52</sub>	867	945	967	978	Ring γ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	.11	1.633	6.786
v <sub>53</sub>	865	943	1016	1000	Ring γ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	.24	6.930	6.134
v <sub>54</sub>	856	933	885	883	Ring γ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	.37	1.772	3.369
v <sub>55</sub>	855	932	1001	973	Ring γ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	1.35	6.557	8.868
v <sub>56</sub>	818	892	939	1005	γ (C <sub>11</sub> -H)	8.00	26.38	0.847
v <sub>57</sub>	816	889	731	824	Ring γ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	.17	77.17	5.428
v <sub>58</sub>	796	868	854	864	Ring γ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )H	.42	1.701	59.34
v <sub>59</sub>	794	858	714	751	Ring(C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )bre ath	20.69	6.506	0.592
v <sub>60</sub>	751	819	977	849	Ring γ (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	8.12	12.95	0.113
v <sub>61</sub>	730	796	823	746	Ring γ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	.54	6.512	149.1



<b>v62</b>	726	791	868	798	$\gamma(C_{11}-H)+\text{Ring } \gamma$ $(C_{13},C_{14},C_{16},C_{17})H$	3.85	32.34	23.92
<b>v63</b>	662	706	607	655	$\gamma (N_8-H,C_7-N_8)$	3.89	16.67	9.399
<b>v64</b>	647	690	625	680	$\gamma (N_8-H,C_7-N_8)$	25.71	93.19	0.832
<b>v65</b>	632	689	783	665	$\gamma$ Ring $(C_{12},C_{13},C_{14},C_{15},C_{16},C_{17})$	6.80	4.359	5.887
<b>v66</b>	622	722	707	739	$\gamma$ Ring $(C_1,C_2,C_3,C_4,C_5,C_6)$	7.80	34.976	39.83
<b>v67</b>	600	654	507	719	Ring $\gamma (C_1,C_2,C_5,C_6)H$	13.55	4.016	15.69
<b>v68</b>	578	630	867	632	Ring $\gamma (C_{13},C_{14},C_{16},C_{17})H$	1.90	40.6	21.24
<b>v69</b>	564	615	651	649	Ring $\gamma (C_1,C_2,C_3,C_5,C_6)H$	.43	2.485	2.091
<b>v70</b>	544	593	750	546	$\gamma$ Ring $(C_{12},C_{13},C_{14},C_{15},C_{16},C_{17})$	.12	6.843	15.47
<b>v71</b>	509	555	441	460	$\gamma$ Ring $(C_1,C_2,C_3,C_4,C_5,C_6)$	3.61	3.015	1.183
<b>v72</b>	478	521	550	504	$\delta$ Ring $(C_{12},C_{13},C_{14},C_{15},C_{16},C_{17})$	.07	5.347	24.39
<b>v73</b>	431	537	531	538	$\delta C_{15}$ - O+Ring $\gamma(C_{13},C_{14},C_{16},C_{17})H$	2.91	18.78	80.47
<b>v74</b>	385	420	665	437	Ring $\gamma (C_{13},C_{14},C_{16},C_{17})H$	.02	2.085	0.241
<b>v75</b>	383	417	426	424	Ring $\gamma (C_2,C_3,C_5,C_6)H$	.04	0.564	0.659
<b>v76</b>	373	465	430	412	$\delta C_{15}$ - O+Ring $\gamma(C_{13},C_{14},C_{16})H$	.24	0.127	4.925
<b>v77</b>	358	400	435	407	Deformations	1.23	10.57	1.174
<b>v78</b>	340	380	409	370	Deformations	7.98	3.350	14.12
<b>v79</b>	323	403	380	281	C-O torsion	.75	4.201	3.974
<b>v80</b>	266	284	298	271	$\gamma (N_8-H,C_7=O)$	.45	13.59	16.07
<b>v81</b>	220	246	274	243	Deformations	.53	8.763	1.414
<b>v82</b>	212	237	239	235	Deformations	3.81	1.574	1.178
<b>v83</b>	190	207	227	222	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma (N_8-$ H,C <sub>11</sub> =N)	.18	7.289	4.347
<b>v84</b>	166	181	210	216	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma (C_{11}-H)$	1.46	0.196	1.032
<b>v85</b>	115	125	202	204	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma (C_{11}=N)$	.45	3.524	1.745
<b>v86</b>	94	102	178	171	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma (N_8-$ H,C <sub>11</sub> =N)	.61	6.849	1.556
<b>v87</b>	79	88	125	134	Deformations	.88	0.567	1.139
<b>v88</b>	71	79	109	118	Deformations	.35	5.328	4.879
<b>v89</b>	36	39	61	59	Ring $\gamma (C_1,C_2,C_3,C_5,C_6)H$	.59	2.082	0.334
<b>v90</b>	30	34	85	89	Deformations	.34	9.643	8.574
<b>v91</b>	21	23	40	36	Deformations	.13	1.846	0.275
<b>v92</b>	13	15	35	29	Deformations	.12	0.584	0.038
<b>v93</b>	8	9	24	19	Deformations	.00	1.854	0.079

جدول 17 : ترددات الاهتزاز وشدت الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [(2-هيدروكسي-4-

ميثوكسي بنزلاين) بنزو هيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

5



No. of freq.	Frequency Of 1/cm			Assignments	Intensity Of km/mole			
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G		Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G	
v <sub>1</sub>	3955	3607	3658	3707	O <sub>18</sub> -H st.	3.28	42.58	49.61
v <sub>2</sub>	3510	3040	3246	3219	C <sub>11</sub> -H st.	22.20	2.371	7.707
v <sub>3</sub>	3503	3034	3225	3247	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	71.72	18.91	9.767
v <sub>4</sub>	3496	3028	3261	3189	C <sub>13</sub> -H st.	18.31	25.11	3.799
v <sub>5</sub>	3493	3025	3213	3176	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	86.11	28.74	28.01
v <sub>6</sub>	3483	3016	3201	3213	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	12.29	4.665	9.529
v <sub>7</sub>	3471	3006	3192	3162	C <sub>5</sub> -H st.	28.20	8.204	0.697
v <sub>8</sub>	3470	-----	3540	3487	N <sub>8</sub> -H st.	35.99	21.40	12.92
v <sub>9</sub>	3465	3001	3239	3187	C <sub>3</sub> -H st.	32.99	8.484	11.66
v <sub>10</sub>	3456	2993	3206	3188	C <sub>16</sub> -H st.	31.60	4.691	11.66
v <sub>11</sub>	3384	2931	3188	3157	C <sub>20</sub> -H <sub>32</sub> st.	86.52	17.75	22.41
v <sub>12</sub>	3350	2901	3116	3013	C <sub>20</sub> -H <sub>33</sub> st.	113.98	36.31	49.06
v <sub>13</sub>	3348	2899	3041	3085	C <sub>20</sub> -H <sub>34</sub> st.	117.34	48.64	37.43
v <sub>14</sub>	3295	2853	3156	3188	C <sub>17</sub> -H <sub>30</sub> st.	71.83	17.31	3.172
v <sub>15</sub>	1858	1681	1708	1647	C <sub>7</sub> =O st.	234.83	190.1	174.7
v <sub>16</sub>	1778	-----	1642	1629	C <sub>17</sub> =N <sub>10</sub> st.	4.44	8.399	31.71
v <sub>17</sub>	1702	1493	1662	1643	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	4.37	7.42	19.88
v <sub>18</sub>	1695	1487	1680	1652	Ring (C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> ,C <sub>11</sub> -C <sub>16</sub> ) st.	333.90	240.2	235.6
v <sub>19</sub>	1656	1452	1636	1605	Ring (C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub> ,C <sub>4</sub> -C <sub>5</sub> ) st.	0.99	15.83	51.22
v <sub>20</sub>	1651	1448	1619	1611	Ring (C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> ,C <sub>14</sub> -C <sub>15</sub> ) st.	239.52	88.21	51.64
v <sub>21</sub>	1592	1396	1553	1555	Ring (C <sub>12</sub> -C <sub>13</sub> -C <sub>14</sub> ) st.	107.41	40.06	36.18
v <sub>22</sub>	1568	1436	1507	1496	(C <sub>12</sub> -O <sub>19</sub> ,C <sub>14</sub> -O <sub>18</sub> ) st.	76.00	18.95	7.88
v <sub>23</sub>	1536	1407	1505	1539	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	142.26	11.55	3.414
v <sub>24</sub>	1487	1274	1380	1373	C <sub>15</sub> -C <sub>17</sub> st.	207.16	49.15	375.9
v <sub>25</sub>	1450	1292	1546	1385	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> st.+ Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>6</sub> )st.	41.61	103.4	102.9
v <sub>26</sub>	1447	1269	1369	1340	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	41.64	1.444	6.517
v <sub>27</sub>	1424	1565	1533	1537	CH <sub>3</sub> d. deform	264.82	10.49	53.36
v <sub>28</sub>	1354	1232	1426	1426	δ (C <sub>17</sub> -H)	9.89	18.99	43.25
v <sub>29</sub>	1339	1410	1488	1527	CH <sub>3</sub> s. deform	14.17	4.013	11.92
v <sub>30</sub>	1309	1223	1567	1483	δ (N <sub>8</sub> -H)	25.10	271.04	89.27
v <sub>31</sub>	1306	1435	1540	1493	CH <sub>3</sub> d. deform	25.67	149.9	1.612

V <sub>32</sub>	1284	1272	1204	1307	CH <sub>3</sub> s. deform	20.46	10.69	427.1
V <sub>33</sub>	1249	1167	1304	1365	$\delta$ (N <sub>8</sub> -H)	21.29	91.02	140.8
V <sub>34</sub>	1248	1166	1288	1234	$\delta$ (N <sub>8</sub> -H,C <sub>17</sub> -H)	14.44	402.3	11.87
V <sub>35</sub>	1208	1099	1355	1463	$\delta$ (C <sub>13</sub> -H,C <sub>16</sub> -H)	1.15	34.11	36.57
V <sub>36</sub>	1199	1091	1260	1220	$\delta$ (C <sub>13</sub> -H)	56.79	170.5	135.6
V <sub>37</sub>	1197	1089	1389	1229	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.52	0.721	58.31
V <sub>38</sub>	1173	1067	1227	1338	Ring $\delta$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	56.23	56.65	21.74
V <sub>39</sub>	1170	1065	1224	1212	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H	2.26	5.867	0.986
V <sub>40</sub>	1139	1036	1240	1160	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.62	34.79	32.65
V <sub>41</sub>	1132	1030	1026	1126	$\delta$ (C <sub>11</sub> -H)	4.84	126.6	209.8
V <sub>42</sub>	1107	1007	1032	1036	Ring $\delta$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	7.20	22.74	44.35
V <sub>43</sub>	1094	995	1164	1114	$\delta$ (C <sub>1</sub> -H)	1.14	113.5	17.36
V <sub>44</sub>	1092	1200	1132	1159	CH <sub>3</sub> d. deform	10.40	35.05	0.475
V <sub>45</sub>	1083	986	1045	1058	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> )H	2.52	2.295	11.36
V <sub>46</sub>	1080	983	1126	1043	Ring $\delta$ (C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H	4.46	49.66	0.66
V <sub>47</sub>	1079	1118	1186	1198	$\delta$ O <sub>18</sub> -H	27.20	197.7	77.78
V <sub>48</sub>	1070	1176	1165	1186	CH <sub>3</sub> d. deform	17.31	4.989	46.85
V <sub>49</sub>	1005	915	998	939	CH <sub>3</sub> d. deform + Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	1.22	0.579	6.187
V <sub>50</sub>	939	1023	1068	1082	Ring $\delta$ (C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )H	2.69	10.89	63.93
V <sub>51</sub>	891	971	964	919	$\gamma$ Ring (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )	3.96	68.13	15.29
V <sub>52</sub>	875	954	968	1072	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.06	3.101	1.116
V <sub>53</sub>	867	945	1013	1031	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.08	1.319	8.179
V <sub>54</sub>	857	934	946	998	Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>16</sub> )H	2.16	27.25	3.551
V <sub>55</sub>	853	930	1038	989	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.29	4.014	3.503
V <sub>56</sub>	816	889	885	891	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.17	1.125	2.877
V <sub>57</sub>	806	879	915	874	$\gamma$ (C <sub>17</sub> -H)	0.52	36.51	96.45
V <sub>58</sub>	788	859	728	825	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	12.43	27.33	3.911
V <sub>59</sub>	759	827	888	854	$\gamma$ (C <sub>13</sub> -H)	9.51	35.81	60.09
V <sub>60</sub>	731	797	854	842	Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	21.15	36.06	3.561
V <sub>61</sub>	727	792	718	754	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	1.80	2.335	78.47
V <sub>62</sub>	693	755	832	781	Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>15</sub> )H	2.12	15.709	56.79
V <sub>63</sub>	664	500	667	681	$\gamma$ C <sub>7</sub> =O	3.53	31.036	0.441
V <sub>64</sub>	645	703	590	730	$\gamma$ Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> )	25.34	17.71	5.04
V <sub>65</sub>	635	692	822	743	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.90	5.863	32.88
V <sub>66</sub>	623	679	734	720	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	6.19	59.201	25.42
V <sub>67</sub>	586	639	646	645	$\gamma$ Ring (C <sub>11</sub> ,C <sub>12</sub> ,C <sub>14</sub> )+O <sub>18</sub> -H	3.85	13.94	8.967
V <sub>68</sub>	565	616	432	651	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.31	36.40	1.922
V <sub>69</sub>	531	468	708	599	Deformations	18.06	35.59	51.22
V <sub>70</sub>	510	556	749	698	$\gamma$ Ring (C <sub>11</sub> ,C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> )	0.74	14.86	28.53

V71	507	540	689	588	$\gamma$ (N <sub>8</sub> -H)	13.90	28.98	80.58
V72	499	432	425	558	$\gamma$ (N <sub>8</sub> -H)	7.12	12.63	9.078
V73	494	436	546	530	Deformations	3.30	14.32	16.18
V74	445	485	479	472	$\gamma$ Ring (C <sub>11</sub> ,C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> )	0.92	3.31	7.860
V75	396	429	521	575	$\gamma$ (C <sub>17</sub> - H)+Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	10.08	3.059	4.035
V76	383	417	651	454	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.03	1.636	4.954
V77	356	369	423	424	$\gamma$ O <sub>18</sub> -H	34.65	91.103	0.085
V78	352	365	466	419	$\gamma$ O <sub>18</sub> - H+Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	14.83	10.705	6.094
V79	347	381	389	366	CH <sub>3</sub> d.deform	0.81	7.927	3.407
V80	335	418	508	387	$\gamma$ C <sub>7</sub> =O	10.48	5.858	133.8
V81	302	377	355	392	$\delta$ O <sub>18</sub> -C <sub>14</sub> + $\delta$ N <sub>10</sub> -C <sub>17</sub>	1.12	8.508	3.249
V82	262	279	275	259	Deformations	2.81	8.815	8.34
V83	221	276	314	316	$\gamma$ C <sub>7</sub> =O+ Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.24	1.222	19.46
V84	187	211	256	242	CH <sub>3</sub> d. deform + Ring $\gamma$ (C <sub>11</sub> ,C <sub>13</sub> )H	0.92	0.756	0.698
V85	182	206	238	241	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma$ O <sub>18</sub> -H+ $\gamma$ C <sub>13</sub> -H	4.28	9.140	0.946
V86	177	198	216	203	Deformations	1.76	3.852	2.16
V87	126	157	204	220	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma$ C <sub>7</sub> =O	1.14	0.667	0.849
V88	116	128	182	180	CH <sub>3</sub> s. deform+ $\gamma$ C <sub>12</sub> =O	0.90	1.174	0.107
V89	99	111	167	148	Deformations	0.35	1.231	1.436
V90	84	94	124	136	Deformations	2.19	4.970	1.251
V91	63	72	112	106	CH <sub>3</sub> d. deform + $\gamma$ C <sub>12</sub> =O	1.36	5.877	3.391
V92	46	57	62	87	$\gamma$ C <sub>7</sub> =O+ Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.32	2.957	1.487
V93	36	39	72	55	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.17	1.977	1.650
V94	22	25	34	33	Deformations	0.09	0.553	0.723
V95	7	8	22	22	Deformations	0.09	0.085	1.444
V96	6	7	27	16	Deformations	0.05	0.597	0.082

جدول 18 : ترددات الاهتزاز وشدد الامتصاص ونوع النمط الاهتزازي لـ [4,2]- ثنائي

ميثوكسي بنزلايدن) بنزوهيدرازيد] والمحسوبة وفق طرائق الحساب المستخدمة

6



No. of freq.	Frequency Of 1/cm			Assignments	Intensity Of km/mole			
	Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G		Mindo/3-Forces	CEP-121	6-311G	
v <sub>1</sub>	3515	3044	3071	3216	C <sub>14</sub> -H st.	20.06	47.61	15.88
v <sub>2</sub>	3505	3034	3077	3182	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	58.17	31.12	31.27
v <sub>3</sub>	3504	3035	3028	3229	C <sub>16</sub> -H st.	23.44	20.36	3.666
v <sub>4</sub>	3494	3026	3066	3161	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	83.91	50.63	7.649
v <sub>5</sub>	3484	3017	3057	3196	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	14.30	6.306	31.39
v <sub>6</sub>	3473	3008	3046	3208	Ring (C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H st.	23.08	17.903	13.77
v <sub>7</sub>	3467	3003	3020	3170	C <sub>3</sub> -H st.	28.37	12.74	3.564
v <sub>8</sub>	3453	2990	3052	3175	C <sub>13</sub> -H st.	42.12	10.94	8.88
v <sub>9</sub>	3397	2942	3143	3152	C <sub>21</sub> -H <sub>35</sub> st.	48.37	0.809	17.69
v <sub>10</sub>	3381	2928	3139	3078	C <sub>19</sub> -H <sub>32</sub> st.	92.25	2.238	45.18
v <sub>11</sub>	3352	2903	3005	3009	C <sub>19</sub> -H <sub>33</sub> st.	143.22	17.50	66.53
v <sub>12</sub>	3350	2901	3081	3006	C <sub>21</sub> -H <sub>36</sub> st.	87.62	0.905	57.04
v <sub>13</sub>	3345	2897	3047	3150	(C <sub>21</sub> -H <sub>37</sub> +C <sub>19</sub> -H <sub>34</sub> ) st.	132.27	2.141	26.96
v <sub>14</sub>	3344	2896	3077	3075	(C <sub>21</sub> -H <sub>36</sub> +C <sub>19</sub> -H <sub>33</sub> ) st.	48.55	0.852	38.36
v <sub>15</sub>	3325	----	3278	3659	N <sub>8</sub> -H st.	202.12	6.683	25.32
v <sub>16</sub>	3211	2781	2961	3162	C <sub>11</sub> -H st.	95.34	7.848	1.471
v <sub>17</sub>	1867	1689	1645	1665	C <sub>7</sub> =O <sub>9</sub> st.	314.02	274.7	48.96
v <sub>18</sub>	1784	-----	1831	1587	C <sub>11</sub> =N <sub>10</sub> st.	2.75	16.16	185.2
v <sub>19</sub>	1702	1493	1796	1642	Ring (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	5.92	4.757	4.53
v <sub>20</sub>	1695	1487	1794	1647	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> ) st.	443.93	143.4	251.3
v <sub>21</sub>	1656	1452	1779	1624	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	1.11	3.709	17.17
v <sub>22</sub>	1642	1440	1773	1604	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )st.	59.36	33.53	70.49
v <sub>23</sub>	1592	1396	1635	1551	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )st.	93.85	72.36	30.18
v <sub>24</sub>	1585	1452	1583	1360	C <sub>17</sub> -O st.	218.97	28.55	0.885
v <sub>25</sub>	1536	1347	1590	1536	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	182.33	21.89	97.75
v <sub>26</sub>	1487	1670	1479	1449	Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )st.	317.32	93.28	17.73
v <sub>27</sub>	1454	1296	1346	1547	C <sub>7</sub> -N <sub>8</sub> st.	56.43	60.868	
v <sub>28</sub>	1448	1626	1540	1491	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	2.05	20.19	2.432

V <sub>29</sub>	1432	1356	1371	1532	(C <sub>21</sub> )H <sub>3</sub> s. deform	173.31	36.71	80.75
V <sub>30</sub>	1419	1559	1393	1539	(C <sub>19</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	188.61	17.40	29.97
V <sub>31</sub>	1372	1445	1360	1527	(C <sub>21</sub> )H <sub>3</sub> s. deform	42.69	0.375	10.35
V <sub>32</sub>	1335	1215	1318	1323	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	10.08	27.79	41.81
V <sub>33</sub>	1313	1226	1430	1426	$\delta$ N <sub>8</sub> -H	77.29	147.3	149.5
V <sub>34</sub>	1307	1436	1351	1526	(C <sub>19</sub> ,C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	17.14	0.535	10.29
V <sub>35</sub>	1305	1434	1367	1499	(C <sub>19</sub> ,C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform.	35.21	9.571	3.898
V <sub>36</sub>	1288	1203	1332	1378	$\delta$ N <sub>8</sub> -H	19.32	24.71	0.848
V <sub>37</sub>	1284	1411	1355	1490	(C <sub>19</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	22.18	10.77	11.75
V <sub>38</sub>	1282	1409	1133	1223	(C <sub>21</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	11.74	11.38	127.6
V <sub>39</sub>	1263	1149	1208	1305	$\delta$ C <sub>11</sub> -H	14.59	137.1	322.9
V <sub>40</sub>	1212	1103	1184	1339	$\delta$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	75.12	181.1	2.714
V <sub>41</sub>	1197	1089	1229	1287	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>16</sub> )H	0.13	0.402	282.1
V <sub>42</sub>	1188	1081	1251	1227	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	22.83	31.89	25.97
V <sub>43</sub>	1178	1072	1234	1262	$\delta$ C <sub>11</sub> -H+ $\delta$ C <sub>13</sub> -H	4.42	19.45	5.772
V <sub>44</sub>	1171	1004	1316	1213	Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> ) st.	0.76	13.11	1.241
V <sub>45</sub>	1153	1099	1119	1185	$\delta$ C <sub>16</sub> -H+ $\delta$ C <sub>13</sub> -H	10.65	3.88	15.49
V <sub>46</sub>	1146	1043	1106	1154	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	33.70	84.04	70.10
V <sub>47</sub>	1139	1036	1166	1114	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.07	2.061	21.17
V <sub>48</sub>	1107	1007	1148	1171	Ring $\delta$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> )H	0.79	0.949	214.4
V <sub>49</sub>	1098	1156	1162	1159	(C <sub>19</sub> )H <sub>3</sub> s. deform	3.12	9.761	0.611
V <sub>50</sub>	1094	996	1153	1056	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.71	4.417	13.28
V <sub>51</sub>	1093	995	1107	1039	Ring $\delta$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	11.28	12.60	0.795
V <sub>52</sub>	1087	1194	1087	1156	(C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	2.45	1.801	0.486
V <sub>53</sub>	1082	985	1078	1029	Ring $\delta$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.96	29.06	1.191
V <sub>54</sub>	1068	1174	1006	1201	(C <sub>19</sub> ,C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	30.98	3.486	11.85
V <sub>55</sub>	1067	1173	1009	1048	(C <sub>19</sub> ,C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	1.55	1.603	93.88
V <sub>56</sub>	1001	1100	1014	1016	(C <sub>19</sub> )H <sub>3</sub> d. deform	0.87	9.002	36.14
V <sub>57</sub>	952	1037	1025	1013	Ring $\delta$ (C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	6.96	6.328	2.701
V <sub>58</sub>	875	954	1021	993	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.11	2.429	6.616
V <sub>59</sub>	867	945	982	961	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.11	0.319	2.152
V <sub>60</sub>	860	937	986	973	$\gamma$ (C <sub>11</sub> )-H+ Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	1.99	6.366	0.075
V <sub>61</sub>	858	935	860	948	$\gamma$ (C <sub>11</sub> )-H+ Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	2.90	31.78	10.66
V <sub>62</sub>	855	932	949	881	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )H	0.24	0.310	1.665
V <sub>63</sub>	821	895	935	1057	$\gamma$ (C <sub>11</sub> )-H	3.74	39.73	23.58
V <sub>64</sub>	816	889	851	811	Ring $\gamma$ (C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.17	0.607	15.63
V <sub>65</sub>	790	861	846	738	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	23.01	6.915	0.748
V <sub>66</sub>	756	824	932	870	Ring $\gamma$ (C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	4.20	23.04	52.87



V <sub>67</sub>	734	800	921	911	Ring $\gamma$ (C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>16</sub> )H	29.40	10.64	5.280
V <sub>68</sub>	729	745	802	726	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	0.69	4.264	73.96
V <sub>69</sub>	675	736	600	834	$\gamma$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> )	3.10	2.191	20.73
V <sub>70</sub>	663	707	677	703	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ (C <sub>7</sub> )-N	3.55	4.468	12.17
V <sub>71</sub>	648	691	726	830	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ (C <sub>7</sub> )-N	9.32	122.9	3.453
V <sub>72</sub>	639	723	779	684	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+(C <sub>12</sub> -C <sub>17</sub> )torsion	33.18	4.781	99.98
V <sub>73</sub>	623	679	644	649	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>5</sub> )H+ $\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H	8.20	9.947	2.865
V <sub>74</sub>	602	642	735	711	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	15.23	122.9	2.672
V <sub>75</sub>	584	637	628	740	$\gamma$ (C <sub>14</sub> )-H+ $\gamma$ Ring (C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> )	2.22	4.965	14.56
V <sub>76</sub>	564	615	630	619	$\delta$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.44	0.975	24.75
V <sub>77</sub>	528	466	477	529	Deformations	4.42	6.670	2.01
V <sub>78</sub>	507	382	511	646	$\gamma$ (C <sub>15</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	1.68	2.456	1.781
V <sub>79</sub>	491	535	474	520	Ring $\gamma$ (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>6</sub> )H	1.63	7.698	9.048
V <sub>80</sub>	475	358	541	585	$\gamma$ (C <sub>15</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	0.17	0.675	6.216
V <sub>81</sub>	446	486	396	498	$\gamma$ Ring (C <sub>12</sub> ,C <sub>13</sub> ,C <sub>14</sub> ,C <sub>15</sub> ,C <sub>16</sub> ,C <sub>17</sub> )	0.30	0.271	3.352
V <sub>82</sub>	409	308	351	457	$\gamma$ (C <sub>15</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	1.07	0.367	27.73
V <sub>83</sub>	383	417	388	424	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.03	8.442	0.245
V <sub>84</sub>	363	391	363	416	(C <sub>1</sub> C <sub>2</sub> C <sub>3</sub> ) deform	0.23	0.349	4.329
V <sub>85</sub>	349	372	565	398	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ (N-N)	1.35	18.94	21.27
V <sub>86</sub>	337	420	569	440	$\gamma$ (C <sub>7</sub> =O)+ $\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	7.95	35.64	0.202
V <sub>87</sub>	323	403	260	310	$\gamma$ (C <sub>7</sub> =O)+ $\gamma$ (N-N)+ $\gamma$ (N <sub>10</sub> =C)	0.31	1.516	16.06
V <sub>88</sub>	255	278	355	360	$\gamma$ (N <sub>8</sub> )-H+ $\gamma$ (N-N)+ $\gamma$ (C <sub>11</sub> -C <sub>12</sub> )	0.05	0.045	5.927
V <sub>89</sub>	231	288	123	141	$\gamma$ (C <sub>19</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>21</sub> -O)	2.21	1.871	2.297
V <sub>90</sub>	204	222	179	125	$\delta$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.50	1.119	0.318
V <sub>91</sub>	183	228	328	291	$\gamma$ (C <sub>19</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	4.35	0.041	8.869
V <sub>92</sub>	179	223	276	251	$\gamma$ (C <sub>15</sub> -O)+ $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	0.29	2.255	1.037
V <sub>93</sub>	163	178	242	106	$\delta$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.73	9.625	3.118
V <sub>94</sub>	143	157	138	271	(C <sub>19</sub> ,C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	0.13	1.358	1.374
V <sub>95</sub>	117	128	194	234	(C <sub>19</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	0.47	3.964	0.535
V <sub>96</sub>	97	107	62	206	(C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform + $\gamma$ (C <sub>17</sub> -O)	1.58	2.584	4.035
V <sub>97</sub>	93	102	157	196	(C <sub>19</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform + $\gamma$ (C <sub>7</sub> =O)	0.33	8.101	2.417
V <sub>98</sub>	74	81	130	88	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )	0.77	2.034	12.77

<b>V<sub>99</sub></b>	71	78	74	191	(C <sub>19</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform + $\gamma(C_7=O)$	0.55	3.320	1.407
<b>V<sub>100</sub></b>	59	67	45	178	(C <sub>21</sub> ) H <sub>3</sub> d. deform	0.37	0.486	0.605
<b>V<sub>101</sub></b>	43	47	97	70	Deformations	0.68	2.064	0.962
<b>V<sub>102</sub></b>	33	36	35	61	$\gamma$ Ring (C <sub>1</sub> ,C <sub>2</sub> ,C <sub>3</sub> ,C <sub>4</sub> ,C <sub>5</sub> ,C <sub>6</sub> )+ $\gamma(C_7=O)$	0.25	3.440	0.014 6
<b>V<sub>103</sub></b>	31	35	27	43	Deformations	0.34	1.129	0.891
<b>V<sub>104</sub></b>	20	22	17	22	Deformations	0.31	0.021	1.280
<b>V<sub>105</sub></b>	9	10	8	19	Deformations	0.00	2.763	0.487



جدول 19 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئية (Benzoic Acid Hydrazide) في الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة  
ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	$C_7H_8N_2O$																	
	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$	$C_6$	$C_7$	$N_8$	$O_9$	$N_{10}$	$H_{11}$	$H_{12}$	$H_{13}$	$H_{14}$	$H_{15}$	$H_{16}$	$H_{17}$	$H_{18}$
V <sub>1</sub>	.0280	.0226	.0025	.0000	.0024	.0253	.0000	.0000	.0000	.0000	.3136	.2606	.0263	.0249	.2937	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0359	.0028	.0000	.0022	.0346	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004	.4426	.0293	.0226	.4295	.0000	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0447	.0084	.0054	.0000	.0038	.0083	.0000	.0000	.0000	.0000	.5924	.1163	.0619	.0434	.1155	.0000	.0000	.0000
V <sub>4</sub>	.0005	.0056	.0598	.0000	.0048	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0077	.0869	.7750	.0596	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0007	.0013	.0025	.0001	.0597	.0056	.0000	.0000	.0000	.0000	.0120	.0198	.0344	.7765	.0874	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004	.0527	.0000	.0009	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9321	.0049	.0089
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0009	.0417	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0133	.1763	.7677
V <sub>8</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0683	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0006	.7631	.1678
V <sub>9</sub>	.0000	.0001	.0007	.0161	.0007	.0000	.6298	.0061	.3401	.0001	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000	.0043	.0010	.0009
V <sub>10</sub>	.0359	.1959	.2221	.0991	.2248	.1949	.0085	.0009	.0032	.0000	.0024	.0023	.0037	.0037	.0024	.0000	.0001	.0001
V <sub>11</sub>	.3752	.1137	.0946	.1881	.0928	.1155	.0003	.0000	.0000	.0000	.0063	.0037	.0029	.0029	.0037	.0000	.0000	.0000
V <sub>12</sub>	.0379	.0832	.0281	.1996	.0281	.0825	.2061	.1582	.0001	.0001	.0031	.0077	.0096	.0097	.0077	.0156	.0614	.0614
V <sub>13</sub>	.0388	.0620	.0430	.0844	.0428	.0620	.0087	.0873	.0133	.0120	.0033	.0102	.0129	.0129	.0103	.0288	.2334	.2340
V <sub>14</sub>	.0172	.0208	.0242	.0027	.0226	.0219	.1420	.2649	.0078	.1400	.0015	.0058	.0071	.0065	.0064	.0003	.1540	.1544
V <sub>15</sub>	.0940	.1539	.1255	.2100	.1267	.1531	.0025	.0002	.0001	.0002	.0502	.0210	.0205	.0212	.0204	.0000	.0001	.0003
V <sub>16</sub>	.0280	.0226	.0025	.0000	.0024	.0253	.0000	.0000	.0000	.0000	.3136	.2606	.0263	.0249	.2937	.0000	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0024	.0183	.0125	.0927	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.8216	.0270	.0254
V <sub>18</sub>	.0090	.0538	.0028	.0911	.0028	.0536	.0010	.0001	.0001	.0004	.0672	.0763	.2798	.2830	.0762	.0000	.0015	.0012
V <sub>19</sub>	.0704	.0667	.0676	.0582	.0735	.0557	.1890	.1288	.0229	.1367	.0046	.0080	.0045	.0052	.0233	.0261	.0409	.0178
V <sub>20</sub>	.1533	.0842	.1740	.1075	.1669	.0949	.0254	.0171	.0030	.0192	.0008	.0755	.0007	.0006	.0605	.0032	.0002	.0130
V <sub>21</sub>	.0008	.0007	.0015	.0017	.0021	.0007	.0026	.0375	.0000	.1005	.0001	.0004	.0021	.0044	.0020	.0026	.4125	.4277
V <sub>22</sub>	.0175	.0019	.0102	.0011	.0097	.0016	.0001	.0001	.0000	.0001	.0014	.1121	.3664	.3647	.1128	.0000	.0003	.0001
V <sub>23</sub>	.0020	.0023	.0313	.0006	.0339	.0055	.0005	.0003	.0001	.0002	.8014	.0275	.0095	.0185	.0658	.0001	.0002	.0001

جدول 20 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئية (4-dimethylamino-benzylidene)-hydrazide) في الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	$C_{16}H_{17}N_3O$																		
	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$	$C_6$	$C_7$	$N_8$	$O_9$	$N_{10}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{14}$	$C_{15}$	$C_{16}$	$C_{17}$	$N_{18}$	
V1	.0276	.0228	.0021	.0000	.0032	.0252	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V2	.0001	.0362	.0021	.0000	.0033	.0339	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V3	.0003	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0039	.0149	.0001	.0375	.0198	.0000
V4	.0440	.0095	.0032	.0000	.0076	.0060	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0002	.0001	.0000	.0000
V5	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0069	.0496	.0000	.0147	.0042	.0000
V6	.0015	.0004	.0010	.0001	.0589	.0082	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V7	.0000	.0001	.0014	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0003	.0001	.0000	.0198	.0479	.0000	.0000
V8	.0004	.0047	.0630	.0001	.0001	.0005	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004	.0011	.0000	.0000
V9	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0615	.0081	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000
V10	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002
V11	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V12	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001
V13	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0005
V14	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001
V15	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0005	.0507	.0000	.0010	.0010	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V17	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0009	.0000	.0004	.0639	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V18	.0000	.0000	.0006	.0164	.0007	.0001	.6289	.0031	.3441	.0001	.0001	.0000	.0000	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001
V19	.0000	.0000	.0000	.0003	.0000	.0000	.0012	.0100	.0000	.4165	.5264	.0344	.0008	.0000	.0000	.0000	.0024	.0000	.0000
V20	.0246	.1312	.1565	.0676	.1481	.1351	.0049	.0002	.0018	.0023	.0014	.0371	.0803	.0582	.0100	.0491	.0767	.0000	.0000
V21	.0121	.0633	.0736	.0279	.0691	.0659	.0020	.0006	.0016	.0076	.0041	.0765	.1711	.1238	.0199	.1035	.1622	.0000	.0000
V22	.3768	.1206	.0894	.1860	.0977	.1090	.0003	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V23	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0004	.0000	.0009	.0035	.2628	.0889	.0661	.2945	.1437	.1185	.0019	.0019

**C<sub>16</sub>H<sub>17</sub>N<sub>3</sub>O**

No. of freq	C <sub>16</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> O																		
	C <sub>19</sub>	C <sub>20</sub>	H <sub>21</sub>	H <sub>22</sub>	H <sub>23</sub>	H <sub>24</sub>	H <sub>25</sub>	H <sub>26</sub>	H <sub>27</sub>	H <sub>28</sub>	H <sub>29</sub>	H <sub>30</sub>	H <sub>31</sub>	H <sub>32</sub>	H <sub>33</sub>	H <sub>34</sub>	H <sub>35</sub>	H <sub>36</sub>	
V <sub>1</sub>	.0000	.0000	.3089	.2639	.0212	.0333	.2917	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0012	.4476	.0210	.0352	.4194	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.0039	.0005	.0002	.0005	.0003	.0000	.0000	.0000	.0433	.1838	.4597	.2310	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001
V <sub>4</sub>	.0000	.0000	.5828	.1322	.0352	.0897	.0840	.0000	.0000	.0002	.0010	.0027	.0013	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0760	.6186	.1807	.0488	.0000	.0002	.0001	.0000	.0001
V <sub>6</sub>	.0000	.0000	.0226	.0057	.0120	.7662	.1235	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0002	.0015	.0177	.0001	.0001	.0000	.0000	.0029	.0016	.2744	.6317	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0000	.0000	.0065	.0748	.8197	.0019	.0072	.0000	.0000	.0001	.0000	.0057	.0139	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.8045	.1216	.0037	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0396	.0259	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.5626	.0013	.0011	.3673	.0009
V <sub>11</sub>	.0257	.0394	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.3682	.0006	.0006	.5636	.0010
V <sub>12</sub>	.0153	.0350	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.0000	.0001	.0000	.0001	.0000	.0000	.1321	.1555	.0007	.2269	.0007
V <sub>13</sub>	.0325	.0194	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0003	.0001	.0000	.0004	.2232	.4072	.0002	.0176	.0002
V <sub>14</sub>	.0044	.0763	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0626	.0010	.0007	.6701	.0007
V <sub>15</sub>	.0812	.0028	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0007	.5139	.3683	.0000	.0173	.0000
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9314	.0148	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0002	.0000	.0001	.0001
V <sub>17</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0150	.9194	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>18</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0053	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>19</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0025	.0048	.0003	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>20</sub>	.0001	.0001	.0016	.0016	.0026	.0025	.0016	.0000	.0001	.0019	.0005	.0004	.0016	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>21</sub>	.0002	.0002	.0008	.0008	.0011	.0011	.0008	.0000	.0002	.0040	.0011	.0008	.0034	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001
V <sub>22</sub>	.0000	.0000	.0065	.0038	.0030	.0029	.0037	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>23</sub>	.0001	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0026	.0018	.0024	.0050	.0060	.0001	.0000	.0000	.0004	.0000	.0000

جدول 21 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئية (E)-N'-(4-nitrobenzylidene)benzohydrazide  
الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	$C_{14}H_{11}N_3O_3$																		
	$C_1$	$C_2$	$C_3$	$C_4$	$C_5$	$C_6$	$C_7$	$N_8$	$O_9$	$C_{10}$	$C_{11}$	$C_{12}$	$C_{13}$	$C_{14}$	$C_{15}$	$C_{16}$	$C_{17}$	$N_{18}$	
V <sub>1</sub>	.0281	.0228	.0022	.0000	.0024	.0254	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0362	.0024	.0000	.0022	.0347	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0138	.0194	.0001	.0269	.0176	.0000	.0000
V <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0158	.0284	.0000	.0219	.0109	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0449	.0092	.0042	.0000	.0039	.0083	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0180	.0090	.0000	.0289	.0289	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0256	.0172	.0001	.0105	.0158	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0000	.0017	.0354	.0000	.0331	.0014	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0009	.0041	.0287	.0001	.0314	.0041	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004	.0509	.0000	.0009	.0013	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>11</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0011	.0000	.0003	.0645	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>12</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0010	.0000	.0006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.6550
V <sub>13</sub>	.0000	.0000	.0007	.0173	.0007	.0000	.6225	.0026	.3469	.0014	.0017	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0011
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0001	.0007	.0001	.0000	.0037	.0133	.0010	.4511	.4914	.0266	.0012	.0000	.0000	.0000	.0015	.0000	.0000
V <sub>15</sub>	.0001	.0007	.0008	.0005	.0008	.0007	.0002	.0019	.0000	.0108	.0055	.1067	.2130	.1837	.0655	.1802	.2117	.0042	.0042
V <sub>16</sub>	.0363	.1969	.2229	.0949	.2227	.1971	.0066	.0002	.0039	.0000	.0002	.0006	.0009	.0007	.0002	.0006	.0009	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.3750	.1148	.0936	.1884	.0937	.1143	.0004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>18</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.2470	.1038	.1006	.3094	.1127	.1113	.0016	.0016
V <sub>19</sub>	.0000	.0001	.0000	.0002	.0000	.0001	.0079	.0000	.0253	.0249	.1932	.0580	.0769	.2359	.0675	.0489	.1339	.1339	.1339
V <sub>20</sub>	.0670	.1304	.0594	.2824	.0596	.1309	.1162	.0397	.0066	.0035	.0015	.0033	.0005	.0020	.0000	.0019	.0005	.0073	.0073
V <sub>21</sub>	.0040	.0070	.0042	.0122	.0042	.0070	.0000	.0148	.0012	.0183	.0260	.0969	.0147	.0479	.0001	.0462	.0143	.2496	.2496
V <sub>22</sub>	.0941	.1540	.1258	.2099	.1268	.1528	.0026	.0001	.0001	.0000	.0000	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0000	.0000
V <sub>23</sub>	.0199	.0234	.0276	.0006	.0263	.0243	.1997	.3831	.0046	.0355	.0381	.0021	.0202	.0118	.0313	.0102	.0157	.0053	.0053

<b>C<sub>14</sub>H<sub>11</sub>N<sub>3</sub>O<sub>3</sub></b>													
No. of freq	O <sub>19</sub>	O <sub>20</sub>	H <sub>21</sub>	H <sub>22</sub>	H <sub>23</sub>	H <sub>24</sub>	H <sub>25</sub>	H <sub>26</sub>	H <sub>27</sub>	H <sub>28</sub>	H <sub>29</sub>	H <sub>30</sub>	H <sub>31</sub>
V <sub>1</sub>	.0000	.0000	.3146	.2627	.0232	.0245	.2939	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0005	.4462	.0247	.0226	.4303	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1628	.2303	.3215	.2071
V <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.1866	.3424	.2655	.1283
V <sub>5</sub>	.0000	.0000	.5950	.1269	.0477	.0441	.1158	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0002	.0000	.0000	.0000	.2349	.1201	.1957	.3783
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.3420	.2331	.1432	.2125
V <sub>8</sub>	.0000	.0000	.0000	.0267	.4550	.4239	.0222	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.0003
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0157	.0635	.3761	.4116	.0638	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9288	.0176	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>11</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0178	.9161	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>12</sub>	.1732	.1700	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>13</sub>	.0002	.0004	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000	.0040	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0037	.0053	.0001	.0000	.0000	.0001
V <sub>15</sub>	.0003	.0004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.0034	.0027	.0026	.0032
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0025	.0024	.0037	.0036	.0024	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0000	.0000	.0063	.0037	.0029	.0029	.0037	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>18</sub>	.0001	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0027	.0033	.0037	.0033
V <sub>19</sub>	.0405	.0413	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0009	.0102	.0125	.0122	.0093
V <sub>20</sub>	.0054	.0056	.0056	.0150	.0193	.0193	.0150	.0018	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001
V <sub>21</sub>	.2015	.2040	.0003	.0010	.0013	.0013	.0010	.0000	.0016	.0055	.0042	.0042	.0053
V <sub>22</sub>	.0000	.0000	.0499	.0208	.0206	.0213	.0203	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>23</sub>	.0204	.0202	.0018	.0070	.0083	.0076	.0076	.0269	.0050	.0036	.0042	.0049	.0028

جدول 22 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئية (E)-N<sup>1</sup>-(4-methoxybenzylidene)benzohydrazide) في الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>2</sub>																		
	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>	N <sub>8</sub>	O <sub>9</sub>	N <sub>10</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>14</sub>	C <sub>15</sub>	C <sub>16</sub>	C <sub>17</sub>	O <sub>18</sub>	
V <sub>1</sub>	.0275	.0232	.0020	.0000	.0031	.0249	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0001	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0026	.0436	.0001	.0261	.0033	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0006	.0285	.0000	.0438	.0025	.0000	.0000
V <sub>4</sub>	.0001	.0361	.0020	.0020	.0000	.0033	.0341	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0445	.0095	.0030	.0000	.0076	.0061	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0015	.0004	.0009	.0001	.0590	.0082	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0002	.0000	.0038	.0672	.0000
V <sub>8</sub>	.0003	.0046	.0648	.0001	.0001	.0004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0693	.0017	.0000	.0001	.0002	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002
V <sub>11</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0005
V <sub>12</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0086	.0000	.0002	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001
V <sub>13</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004	.0421	.0000	.0008	.0009	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0010	.0000	.0004	.0641	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>15</sub>	.0000	.0000	.0006	.0163	.0007	.0001	.6281	.0029	.3453	.0001	.0003	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0001	.0004	.0000	.0000	.0014	.0115	.0001	.4308	.5148	.0296	.0007	.0000	.0000	.0001	.0021	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0247	.1304	.1578	.0674	.1476	.1369	.0048	.0002	.0019	.0018	.0012	.0321	.0761	.0573	.0249	.0541	.0640	.0022	.0000
V <sub>18</sub>	.0120	.0623	.0735	.0280	.0684	.0659	.0019	.0006	.0015	.0066	.0036	.0671	.1638	.1236	.0499	.1148	.1378	.0038	.0000
V <sub>19</sub>	.3766	.1231	.0885	.1860	.0986	.1066	.0003	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>20</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0013	.0001	.0036	.0050	.1804	.0189	.0300	.3625	.1313	.1509	.0829	.0000
V <sub>21</sub>	.0000	.0001	.0000	.0002	.0000	.0001	.0010	.0051	.0001	.0091	.0045	.1321	.1374	.1244	.3763	.0016	.0036	.1523	.0000
V <sub>22</sub>	.0689	.1282	.0598	.2857	.0614	.1378	.1233	.0440	.0052	.0018	.0005	.0002	.0003	.0002	.0017	.0001	.0002	.0009	.0000
V <sub>23</sub>	.0020	.0030	.0030	.0024	.0025	.0029	.0075	.0666	.0011	.0568	.0677	.2496	.0178	.0689	.0227	.0979	.0431	.1611	.0000

**C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>2</sub>**

No. of freq	C <sub>19</sub>	H <sub>20</sub>	H <sub>21</sub>	H <sub>22</sub>	H <sub>23</sub>	H <sub>24</sub>	H <sub>25</sub>	H <sub>26</sub>	H <sub>27</sub>	H <sub>28</sub>	H <sub>29</sub>	H <sub>30</sub>	H <sub>31</sub>	H <sub>32</sub>	H <sub>33</sub>
V <sub>1</sub>	.0000	.3073	.2681	.0208	.0327	.2878	.0000	.0000	.0001	.0013	.0009	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0009	.0007	.0000	.0001	.0007	.0000	.0000	.0254	.5390	.3228	.0343	.0000	.0001	.0000
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0058	.3520	.5417	.0249	.0000	.0001	.0000
V <sub>4</sub>	.0000	.0009	.4462	.0200	.0352	.4222	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0000	.5884	.1324	.0333	.0897	.0855	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0000	.0227	.0060	.0104	.7676	.1233	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0010	.0031	.0031	.0595	.8649	.0000	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0000	.0060	.0728	.8424	.0015	.0067	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.8947	.0304	.0009	.0024	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0742	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9091	.0090	.0073
V <sub>11</sub>	.0465	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0015	.0001	.0000	.0000	.0001	.0000	.0195	.8407	.0909
V <sub>12</sub>	.0627	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.1569	.0029	.0000	.0000	.0000	.0000	.0033	.0778	.6871
V <sub>13</sub>	.0120	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.7724	.0127	.0000	.0000	.0000	.0000	.0015	.0073	.1496
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9184	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>15</sub>	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0050	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0029	.0052	.0002	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0000	.0017	.0016	.0026	.0025	.0016	.0000	.0001	.0016	.0008	.0005	.0011	.0001	.0002	.0002
V <sub>18</sub>	.0000	.0008	.0008	.0011	.0011	.0008	.0000	.0002	.0035	.0018	.0011	.0024	.0003	.0004	.0005
V <sub>19</sub>	.0000	.0065	.0038	.0031	.0029	.0037	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>20</sub>	.0114	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0010	.0005	.0015	.0084	.0082	.0004	.0008	.0006
V <sub>21</sub>	.0205	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0017	.0100	.0129	.0028	.0013	.0002	.0006	.0019
V <sub>22</sub>	.0000	.0057	.0153	.0196	.0203	.0154	.0028	.0001	.0000	.0001	.0000	.0000	.0001	.0001	.0002
V <sub>23</sub>	.0867	.0002	.0006	.0008	.0008	.0006	.0005	.0026	.0099	.0023	.0070	.0076	.0014	.0017	.0012

جدول 23 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (E)-N<sup>1</sup>-(2-hydroxy-4-methoxybenzylidene)benzohydrazide) في الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>																		
	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>	N <sub>8</sub>	O <sub>9</sub>	N <sub>10</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>14</sub>	C <sub>15</sub>	C <sub>16</sub>	C <sub>17</sub>	O <sub>18</sub>	
V <sub>1</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0555
V <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0728	.0001	.0001	.0000	.0000	.0019	.0000	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0293	.0204	.0027	.0000	.0022	.0262	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0735	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	.0735	.0001	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0001	.0360	.0037	.0000	.0018	.0338	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0427	.0080	.0081	.0000	.0029	.0089	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0012	.0083	.0564	.0000	.0012	.0003	.0000	.0019	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0001	.0005	.0020	.0000	.0005	.0003	.0004	.0511	.0000	.0003	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0003	.0005	.0001	.0001	.0639	.0043	.0000	.0008	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0009	.0000	.0000	.0001	.0000	.0001	.0705	.0000	.0000
V <sub>11</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>12</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>13</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0686	.0000	.0000
V <sub>15</sub>	.0000	.0002	.0008	.0150	.0007	.0000	.6190	.0024	.3461	.0036	.0002	.0003	.0000	.0004	.0004	.0002	.0040	.0001	.0001
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.0050	.0233	.0044	.4589	.0001	.0002	.0007	.0020	.0143	.0002	.4808	.0002	.0002
V <sub>17</sub>	.0360	.2021	.2135	.0980	.2307	.1868	.0071	.0003	.0035	.0000	.0012	.0006	.0013	.0016	.0008	.0018	.0000	.0000	.0000
V <sub>18</sub>	.0003	.0017	.0016	.0003	.0016	.0017	.0003	.0000	.0002	.0011	.1283	.0429	.1849	.2284	.1174	.2579	.0047	.0106	.0000
V <sub>19</sub>	.3762	.1028	.0992	.1854	.0887	.1271	.0004	.0000	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>20</sub>	.0000	.0001	.0000	.0001	.0000	.0001	.0006	.0007	.0002	.0008	.1474	.4512	.0181	.0309	.0973	.0756	.0025	.0002	.0002
V <sub>21</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0039	.0000	.0133	.0091	.2008	.1025	.3163	.1749	.0133	.0065	.0329	.0329
V <sub>22</sub>	.0004	.0010	.0003	.0022	.0003	.0009	.0022	.0002	.0001	.0028	.0158	.2178	.0484	.4100	.0148	.0471	.0009	.1232	.1232
V <sub>23</sub>	.0707	.1422	.0630	.2885	.0591	.1292	.1164	.0341	.0057	.0008	.0000	.0031	.0004	.0021	.0006	.0001	.0015	.0006	.0006



**C<sub>15</sub>H<sub>14</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

No. of freq	C <sub>15</sub> H <sub>14</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub>															
	O <sub>19</sub>	C <sub>20</sub>	H <sub>21</sub>	H <sub>22</sub>	H <sub>23</sub>	H <sub>24</sub>	H <sub>25</sub>	H <sub>26</sub>	H <sub>27</sub>	H <sub>28</sub>	H <sub>29</sub>	H <sub>30</sub>	H <sub>31</sub>	H <sub>32</sub>	H <sub>33</sub>	H <sub>34</sub>
V <sub>1</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9444	.0000	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000	.0000	.0001	.0000	.9065	.0012	.0169	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0000	.0000	.3301	.2339	.0285	.0226	.3034	.0001	.0004	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0014	.9236	.0008	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0000	.0000	.0015	.4432	.0394	.0184	.4219	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0000	.0000	.5683	.1100	.0946	.0323	.1237	.0004	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0000	.0000	.0186	.1243	.7362	.0145	.0037	.0332	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0000	.0000	.0021	.0076	.0265	.0069	.0039	.8952	.0002	.0000	.0021	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0054	.0073	.0016	.8324	.0695	.0138	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0024	.0175	.0011	.9072	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>11</sub>	.0002	.0752	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9040	.0114	.0092
V <sub>12</sub>	.0006	.0417	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0001	.0001	.0000	.0260	.7653	.1662
V <sub>13</sub>	.0001	.0791	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0034	.1581	.7593
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9309	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>15</sub>	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000	.0062	.0000	.0000	.0000	.0003	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0024	.0000	.0001	.0000	.0073	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0001	.0000	.0024	.0024	.0036	.0036	.0023	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>18</sub>	.0003	.0011	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0015	.0023	.0070	.0002	.0018	.0005	.0006	.0006
V <sub>19</sub>	.0000	.0000	.0065	.0037	.0028	.0032	.0038	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>20</sub>	.1351	.0147	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0073	.0042	.0057	.0007	.0008	.0012	.0020	.0020
V <sub>21</sub>	.0725	.0089	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0012	.0147	.0024	.0022	.0232	.0001	.0005	.0005
V <sub>22</sub>	.0786	.0119	.0000	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0019	.0060	.0031	.0001	.0088	.0000	.0004	.0004
V <sub>23</sub>	.0013	.0000	.0059	.0155	.0213	.0193	.0158	.0024	.0001	.0000	.0000	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001

جدول 24 : بعض قيم المشاركة الجزيئية لكل ذرة من ذرات الجزيئة (E)-N<sup>1</sup>-(2,4-dimethoxybenzylidene)benzohydrazide) في الترددات الاهتزازية الأساسية المحسوبة ببرنامج (Mindo/3-Forces)

No. of freq	<b>C<sub>16</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub></b>																		
	C <sub>1</sub>	C <sub>2</sub>	C <sub>3</sub>	C <sub>4</sub>	C <sub>5</sub>	C <sub>6</sub>	C <sub>7</sub>	N <sub>8</sub>	O <sub>9</sub>	N <sub>10</sub>	C <sub>11</sub>	C <sub>12</sub>	C <sub>13</sub>	C <sub>14</sub>	C <sub>15</sub>	C <sub>16</sub>	C <sub>17</sub>	O <sub>18</sub>	
V <sub>1</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0015	.0735	.0001	.0001	.0000	.0000
V <sub>2</sub>	.0272	.0228	.0021	.0000	.0029	.0237	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0018	.0000	.0000
V <sub>3</sub>	.0007	.0006	.0001	.0000	.0001	.0006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	.0718	.0001	.0000
V <sub>4</sub>	.0000	.0357	.0021	.0000	.0033	.0344	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>5</sub>	.0442	.0093	.0034	.0000	.0072	.0066	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>6</sub>	.0012	.0003	.0013	.0000	.0594	.0078	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>7</sub>	.0004	.0050	.0638	.0001	.0002	.0006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>8</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0710	.0006	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>9</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>10</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002
V <sub>11</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0004
V <sub>12</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000
V <sub>13</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002
V <sub>14</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001
V <sub>15</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0005	.0504	.0000	.0010	.0010	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>16</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0504	.0000	.0000	.0010	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>17</sub>	.0000	.0000	.0006	.0157	.0008	.0001	.6273	.0033	.3439	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0001	.0002	.0000	.0008	.0001
V <sub>18</sub>	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0010	.0120	.0002	.4232	.5253	.0280	.0004	.0002	.0002	.0000	.0001	.0014	.0000
V <sub>19</sub>	.0361	.1902	.2287	.0970	.2154	.1999	.0071	.0004	.0033	.0000	.0001	.0007	.0021	.0011	.0011	.0013	.0008	.0002	.0002
V <sub>20</sub>	.0003	.0016	.0016	.0003	.0015	.0017	.0001	.0003	.0001	.0049	.0020	.0771	.2632	.1382	.1117	.1921	.1569	.0107	.0000
V <sub>21</sub>	.3766	.1228	.0894	.1859	.0979	.1069	.0003	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V <sub>22</sub>	.0000	.0001	.0000	.0001	.0000	.0001	.0004	.0017	.0001	.0037	.0033	.0885	.0098	.0361	.3671	.0806	.1799	.1451	.0000
V <sub>23</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.0030	.0000	.0072	.0037	.1092	.1402	.1233	.3676	.0145	.0286	.1208	.0000

**C<sub>16</sub>H<sub>16</sub>N<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**

No. of freq	C <sub>19</sub>	O <sub>20</sub>	C <sub>21</sub>	H <sub>22</sub>	H <sub>23</sub>	H <sub>24</sub>	H <sub>25</sub>	H <sub>26</sub>	H <sub>27</sub>	H <sub>28</sub>	H <sub>29</sub>	H <sub>30</sub>	H <sub>31</sub>	H <sub>32</sub>	H <sub>33</sub>	H <sub>34</sub>	H <sub>35</sub>	H <sub>36</sub>
V1	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0118	.9116	.0013	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V2	.0000	.0000	.0000	.3054	.2642	.0218	.0308	.2740	.0000	.0000	.0000	.0003	.0229	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V3	.0000	.0000	.0000	.0079	.0068	.0006	.0007	.0069	.0000	.0000	.0005	.0014	.9010	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000
V4	.0000	.0000	.0000	.0004	.4417	.0215	.0346	.4262	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V5	.0000	.0000	.0000	.5856	.1294	.0378	.0844	.0920	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V6	.0000	.0000	.0000	.0192	.0044	.0148	.7731	.1184	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V7	.0000	.0000	.0000	.0076	.0798	.8307	.0032	.0087	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.9147	.0125	.0007	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V9	.0000	.0002	.0744	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0002	.0000	.0000	.9093	.0130
V10	.0753	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9025	.0116	.0101	.0002	.0000
V11	.0462	.0000	.0036	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0005	.0000	.0001	.0000	.0001	.0192	.8066	.0333	.0019	.0467
V12	.0067	.0005	.0430	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0007	.0001	.0000	.0000	.0000	.0010	.0795	.0059	.0199	.7745
V13	.0324	.0001	.0335	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0001	.0073	.0005	.4836	.0012	.0134
V14	.0353	.0000	.0418	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0009	.0001	.0000	.0000	.0000	.0030	.0365	.4016	.0004	.0866
V15	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.9298	.0147	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001	.0004	.0000	.0004
V16	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0149	.9197	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V17	.0000	.0006	.0002	.0000	.0000	.0001	.0001	.0000	.0055	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0001	.0001
V18	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0025	.0051	.0002	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V19	.0000	.0000	.0000	.0024	.0024	.0037	.0036	.0024	.0000	.0000	.0001	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V20	.0000	.0163	.0006	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.0003	.0068	.0031	.0023	.0011	.0011	.0014	.0008	.0010
V21	.0000	.0000	.0000	.0065	.0038	.0031	.0029	.0037	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
V22	.0232	.0387	.0097	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0003	.0006	.0015	.0064	.0005	.0008	.0013	.0001	.0002
V23	.0130	.0307	.0056	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0015	.0098	.0112	.0068	.0002	.0008	.0017	.0001	.0002

## **Abstract**

Quantum mechanical calculations by the one of semiempirical method MINDO/3-FORCES were applied, It also was held calculations according to the Density Functional Theory (DFT) with hybrid function B3LYP and 6-311G , CEP-121G basis set by use Gaussian09 program for the purpose of comparison , and because of the great importance and extensively for Schiff bases that medical and industrial uses , has studied five Hydrazones derivative from benzoic acid hydrazide .

The equilibrium geometries (lengths of bonds and angles), charge , electron densities , heats of formation , dipole moments , energies of HOMO and LUMO orbital , energy gap , ionization potential , electron affinity , electronegativity , chemical hardness , electrophilicity , standard thermodynamics functions ( $U^0$  ,  $H^0$  ,  $S^0$  ,  $G^0$  and  $A^0$ ) and fundamental vibration frequencies with corresponding IR absorption intensities were calculated. The assignment for each one of the fundamental frequencies were also estimated.

The results were compared with experimental bond length values which measured by X-Ray diffraction and on the other hand to infrared vibrational spectra , identified Density Functional Theory was found nearest from experimental values compared with MINDO/3-FORCES model, because of semiempirical method nature for it. And generally for all molecules is calculations appeared the following results :

Increasing in bond length which lie in the position that substituted with group, and decreasing at bond length at adjacent bonds and versa with substituted by donating groups , showed of decreasing in bond length which lies on substituted position and increasing of bond length at adjacent bonds .

We also showed the bond angles on the aromatic rings affected by withdrawal substitute, since increase in its value than analogous which

substituted with donating group, while with the adjacent angles, we show the decreasing in its values, at substituted with donating substituent and increase in case of substitute withdrawal group.

The electronic density increased at nitrogen atom to azomethine group, in compounds substituted with electron donating groups while the corresponding compound which substituted with electron withdrawing groups in the aromatic ring.

The values of the dipole moment, ionization potential, electron affinity, electronegativity and electrophilicity in op compound which substituted with electron withdrawal nitro group ( $-\text{NO}_2$ ) higher than with substituted by donating groups. This is the opposite to the results the standard thermodynamics functions ( $U^0, H^0, S^0, G^0$  and  $A^0$ ), gives great results for compounds substitutes with electron donating groups the compounds in comparison with the compound substituted with electron withdrawing groups.

The chemical hardness is complement with energy gap: benzoic hydrazide has highest value more stable, while in compound substituted dimethyl amino group it large sized has a lowest value of hardness less stable.

*Republic of Iraq*  
*Ministry of Higher Education and Scientific Research*  
*University of Kerbala – College of Science*  
*Department of Chemistry*



# *Quantum mechanical calculations of some hydrazones*

A Thesis  
Submitted to the College of Science  
University of Karbala  
In Partial Fulfillment of the Requirements  
for the Degree of Master of Science in Chemistry

By  
*Loay Gabr Abd Ali Al Taie*

Supervised by  
*Prof. Dr. Jaafar Hussaen Ali*

2014 A. D.

1435 A.H.