



وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

جامعة بابل

كلية العلوم قسم الفيزياء

دراسه امتزاز عقار الميتفورمين على شريط الكرافين النانوي  
بحث مقدم الى كلية العلوم – الجامعة بابل وهي جزء من متطلبات نيل شهادة  
البكالوريوس في علوم الفيزياء.

تقدم به الطالب

مصطفى سمير صبري

بإشراف الدكتور ه. أ.م. د. نضال محمد عبيد الشريفي

2024م

1445هـ



بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

﴿ وَهُوَ الَّذِي أَنْزَلَ مِنَ السَّمَاءِ مَاءً فَأَخْرَجْنَا بِهِ  
نَبَاتٍ كُلِّ شَيْءٍ فَأَخْرَجْنَا مِنْهُ خَضِرًا نُخْرِجُ مِنْهُ  
حَبًّا مُتَرَاكِبًا وَمِنَ النَّخْلِ مِنَ طَلْعِهَا قِنْوَانٌ دَانِيَةٌ  
وَجَنَّاتٍ مِنْ أَعْنَابٍ وَالزَّيْتُونَ وَالرُّمَّانَ مُشْتَبِهًا  
وَغَيْرَ مُتَسَابِهٍ انظُرُوا إِلَى ثَمَرِهِ إِذَا أَثْمَرَ وَيَنْعِهِ  
إِنَّ فِي ذَلِكَُمْ لآيَاتٍ لِقَوْمٍ يُؤْمِنُونَ ﴾

(الأنعام/٩٩)

## الإهداء

الحمد لله حبا وشكراً وامتناناً على البدء والختام ( واخر دعواهم ان الحمد لله رب العالمين)  
أرى مرحلة البكالوريوس قد شارفت على الانتهاء بالفعل بعد تعب ومشقة دامت اربع سنوات في  
سبيل الحلم والعلم حملت في طياتها امنيات الليالي وأصبح عنائي اليوم للعين قرّة ، ها أنا اليوم  
اقف على عتبة تخرجني اقطف ثمار تعبتي وارفع قبعتي بكل فخر ، فاللهم لك الحمد قبل أن ترضى  
ولك الحمد اذا رضيت ولك الحمد بعد الرضا لا نك وفقتني على إتمام هذا النجاح وتحقيق حلمي

.....

وبكل حب اهدي ثمرة نجاحي وتخرجي الى من احمل اسمه بكل عز وافتخار والذي زين  
اسمي بأجمل الألقاب ..... (ابي)

الى من جعل الجنة تحت اقدامها وكان دعائها سر نجاحي .....(امي)

الى طريق العلم والمعرفة ..... (أساتذتي الكرام )

وأخيراً من قال : أنا لها "نالها" وانا لها أن ابنت رغماً عنيا فمن فيها مثلي لم يبالي بمن فيها فلا  
يضيق دنياه ولا يوسعا .

اهديهم ثمرة جهدي هذا عرفانا بفضلهم ..

الصفحة	المحتويات
1	الفصل الاول
2	1-1 المقدمة
2	1-2 الميتفورمين واهمية وشكلة
3	1-3 دراسات على الميتفورمين
3	1-4 الجرافين
4	1-1-4 ابرز هذه الخصائص
4	1-2-4 شكلها
5	1-3-4 الدراسات على الكرافين
6	1-5 الامتزاز
6	1-1-5 اول الامتزاز الفيزيائي
7	1-1-1-5 خصائص الامتزاز الفيزيائي
7	1-2-5 ثانيا الامتزاز الكيميائي
7	1-2-1-5 خصائص الامتزاز الكيميائي
8	1-6 دراسات السابقة
9	1-7 الهدف من البحث
13	الفصل الثاني
14	2-1 تقريب بورن او بنهايمر
15	2-2 تقريب هار تري فوك
16	2-3 مدارات سيليتز
16	2-4 نظرية دالة الكثافة الوظيفية
17	2-5 معادلة شيرو دنجر
18	2-6 نظرية دالة الكثافة
18	2-7 مجموعات الأساس
19	2-8 مجموعات الأساس الدنيا
20	2-9 مجموعات أساس التكافؤ

	المقسم
21	2-10 الخواص الالكترونية
23	الفصل الثالث نتائج او المناقشه
24	1-3 المقدمه
24	2-3 الخواص التركيبية : Structural properties
25	3-3 الخواص الالكترونية : Electronic properties
26	4-3 الامثلية الهندسية
26	5-3 الطاقة (Eto Total Energy) الكليه
27	6-4 فجوه الطاقه Energy Gap Ega
28	7-3 الالفه الالكترونية وجهد التاين
30	8-3 النعومة الالكترونية والصلابة الالكترونية و Electrophilic Index
31	المصادر

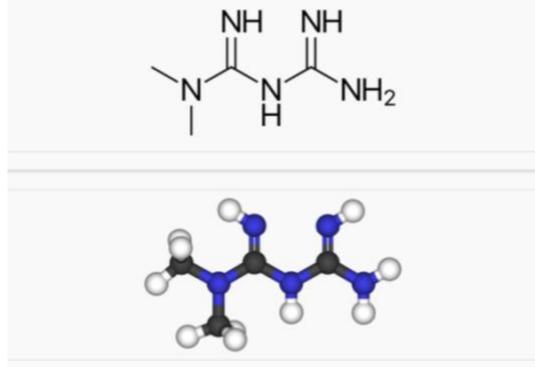
## الفصل الاول

## 1-1 المقدمة

الكيمياء الحسابية هي فرع من فروع الكيمياء والتي تستخدم الحواسيب الالكترونية لحساب التراكيب والخواص للجزيئات الكيميائية. تعود جذور الكيمياء الحسابية الى بداية عام ١٩٢٨ عندما قام العلماء بمحاولات لحل معادلة شرودينكر المشهورة. هذه الحلول انتجت نتائج مطابقة للنتائج العملية لجزيئات صغيرة الحجم مثل ذرة الهليوم وذرة الهيدروجين لكن بالنسبة للجزيئات الأكبر فان الحل الرياضي لها مستحيل لذلك تم اقتراح حلول تقريبية. هذه الحلول التقريبية سمحت للباحثين من فهم أطيف الجزيئات وتراكيبها وكذلك فعاليتها. خلال الحرب العالمية الثانية تم اختراع الحواسيب الالكترونية وبعد فترة من الزمن هذه الحواسيب أصبحت متوفرة للاستخدامات العامة حيث استخدمت في مجال الكيمياء خلال أواسط ١٩٥٠ وبذلك انبثق فرع جديد من الكيمياء. النجاح الحاصل في هذا المجال يعود الى الزيادة الكبيرة في سرع وانخفاض الكلف للحواسيب وكذلك التطور الكبير في البرمجيات وكذلك الحلول التقريبية لمعادلة شرودينكر. التطورات الحاصلة في البرمجيات وطرق الحساب خلال ١٩٦٠ جعلت الكيمياء الحسابية أداة جدا مفيدة. في بداية ١٩٧٠ تم طرح مجموعة من البرامج الحسابية وجعلت متوفرة لمعظم الكيميائيين الحسابين حيث قاموا بحساب وتفسير الكثير من النتائج العملية في ذلك الوقت. مع ذلك بقيت الحسابات محدودة على جزيئات صغيرة الحجم. تطور هذا الفرع من الكيمياء مع تطور الحاسبات الالكترونية وكذلك التقريبات الرياضية لحل معادلة شرودينكر حيث أصبح في العقدين الماضيين فرع مهم جدا حيث هنالك كثير من الباحثين حول العالم أصبحوا متخصصين في هذا المجال. لكن على المستوى المحلي هذا التخصص حديث جدا رغم التطور العالمي الحاصل في هذا المجال لذلك في هذا المقال القصير سنحاول ان نلقي نظرة عامة عن هذا الموضوع.

## 2-1 الميتفورمين واهميه وشكله

الميتفورمين (التجاري جلوكوفاج بالإنجليزية: Glucophage) (اسم معتمد بريطاني، اسم معتمد أمريكي، اسم دولي غير مسجل الملكية، يُسوّق بالأسماء جلوكوفاج، وجلوكومين، وميتفورال، وسيوفور، وديالون، وبروت، وكاربوفاج، وريوميت، وفورميت، وفورتاميت، وغلومتزا، وأوبيمت، وغلوفورمين، وديانبين، وديابيكس، وديافورمين، وميتفو غاما)، دواء خافض لسكر الدم يؤخذ عن طريق الفم من فئة البيغوانيد. وهو خط العلاج الأول لعلاج السكري النمط الثاني، خاصة في الأشخاص الذين يعانون من زيادة الوزن أو السمنة كما أنها تستخدم في



علاج متلازمة تكيس المبايض. [11] لا يرتبط بزيادة الوزن، [4] ويتم تناوله عن طريق الفم. [11] يستخدم أحياناً كإضافة خارج المصق لتقليل مخاطر زيادة الوزن لدى الأشخاص الذين يتناولون مضادات الذهان وكذلك فينيلزين

## 3-1 دراسات على الميتفورمين

تشير دراسات إلى أن دواء رخيصاً يستخدم لعلاج السكري ويساعد في تخفيض الوزن، يقلل الوفاة بين المرضى المصابين بفيروس كورونا المستجد "كوفيد-19"، فما هو، وكيف يعمل، وهل على الجميع أن يبدأ بأخذه؟

هذا العقار هو "الميتفورمين" (Metformin) هو عقار يؤخذ لعلاج ارتفاع مستويات السكر في الدم الناجم عن داء السكري من النوع الثاني، ويتوفر تحت أسماء تجارية مختلفة، مثل "غلوكوفاج" (Glucophage)، و"غلوكوفاج إكس آر" (Glucophage XR)، و"فورتاميت" (Fortamet)، و"غلومتزا" (Glumetza).

وأظهرت دراسة لباحثين في جامعة ألاباما في برمنغهام، أن تناول الميتفورمين قبل تشخيص الإصابة بكوفيد-19 كان مرتبطاً مع انخفاض بمقدار 3 أضعاف في معدل الوفيات (threefold decrease in mortality) بكوفيد-19 في المرضى المصابين بالسكري من النوع الثاني وقالت أنث شاليف -مديرة مركز السكري الشامل التابع لجامعة ألاباما في برمنغهام وقائدة الدراسة- "ظل هذا التأثير المفيد، حتى بعد الأخذ بالاعتبار العمر والجنس والعرق والسمنة وارتفاع ضغط الدم أو أمراض الكلى المزمنة وفشل القلب".

وأضافت أنه نظراً لأنه تم الحصول على نتائج مماثلة في مجموعات سكانية مختلفة من جميع أنحاء العالم -بما في ذلك الصين وفرنسا- فإن هذا يشير إلى أن الانخفاض الملحوظ في مخاطر الوفيات المرتبطة باستخدام الميتفورمين في الأشخاص المصابين بداء السكري من النوع الثاني قد يكون أمراً يمكن تعميمه.

وتقول شاليف إن كيفية تحسين الميتفورمين لتطور مرض "كوفيد-19" غير معروف، وتشير النتائج إلى أن الآليات قد تتجاوز أي تحسن متوقع في التحكم بنسبة السكر في الدم أو السمنة، حيث لم يكن مؤشر كتلة الجسم أو الغلوكوز في الدم ولا الهيموغلوبين التراكمي (HbA1C أقل في مستخدمي الميتفورمين الذين نجوا مقارنةً بمن ماتوا.

وتابعت شاليف "قد تتضمن الآليات تأثيرات الميتفورمين المضادة للالتهابات والمضادة للتخثر الموصوفة سابقاً".

وشملت الدراسة التي نشرت في مجلة "فرونثيرز إن إندوكراينولوجي (Frontiers in Endocrinology)، 604 مرضى مصابين بكوفيد-19 بمستشفى جامعة ألاباما في برمنغهام.

ووجد الباحثون أن الميتفورمين ارتبط بانخفاض بمقدار 3 أضعاف في معدل الوفيات بكوفيد-19 في المرضى المصابين بالسكري من النوع الثاني

#### 4-1- الجرافين

تعتبر مادة الجرافين ((Graphene من أقوى المواد المعروفة على الإطلاق، وهي عبارة عن طبقة واحدة من الذرات الكربون المرتبة بشكل متساوٍ في شبكة مثلثات.

تستخدم مادة الجرافين في العديد من التطبيقات الصناعية، والتي من بينها صناعة المكيفات، حيث يتم استخدامها في تحسين كفاءة المكيفات وتقليل استهلاك الطاقة. فالجرافين يتميز بقدرته العالية على التوصيل الحراري، ويمكنه صنع مواد تساعد على تبادل الحرارة بين الهواء والمكثفات

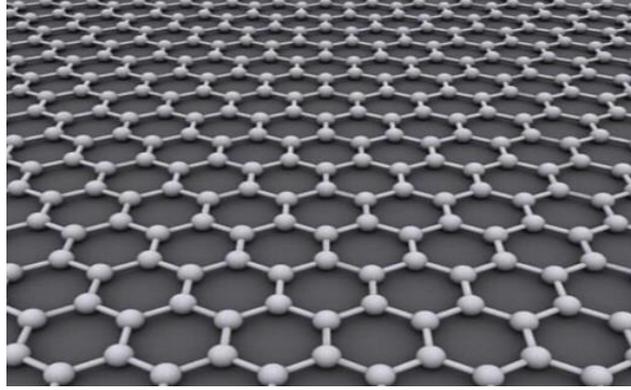
بشكل أفضل، مما يساعد على تحسين كفاءة المكيفات و لذلك نستعين في تصنيع مكيفات ميديا بـ تقنية الجرافين والتي تعطي المكيفات كفاءة طويلة الأمد مع مقاومة التآكل والصدأ لمدة تتراوح بين 20-50 عامًا، مما يجعلها استثمارًا مثاليًا للأفراد والشركات على حد سواء.

#### 1-1-4 أبرز هذه الخصائص:

- 1- قدرتها العالية على التوصيل الحراري: حيث تمتلك مادة الجرافين قدرة عالية على التوصيل الحراري، مما يجعلها مثالية للاستخدام في صناعة مواد تساعد على تحسين تبادل الحرارة في ا.
- 2- مقاومتها العالية للحرارة: حيث تتحمل مادة الجرافين درجات حرارة عالية بشكل جيد، مما يجعلها مثالية للاستخدام في مواد تستخدم.
- 3- قوتها العالية: حيث تعتبر الجرافين من أقوى المواد المعروفة على الإطلاق، مما يجعلها مثالية للاستخدام في صناعة أنابيب الضغط للمكيفات.
- 4- خفة وزنها: تعتبر الجرافين مادة خفيفة الوزن، مما يجعلها مثالية للاستخدام في صناعة مواد تساعد على تقليل وزن المكيفات وبالتالي تحسين كفاءتها.
- 5-قابليتها للتحكم: حيث يمكن تعديل خصائص مادة الجرافين بسهولة، مما يجعلها مثالية للاستخدام في صناعة مواد تتحكم في تدفق الهواء وتوزيعه بشكل مثالي في المكيفات.

#### 1-2-4 شكلها

يتخذ الجرافين شكل شبكة تشبه قرص العسل، الجرافين المثالي يكون على هيئة سداسية لكن عيوب التصنيع ربما تخلفه إلى هيئة خماسية أو سباعية. ويعد حجر أساس يمكن أن تشكل منه أي مادة كربونية حتى الغرافيت ذاته إضافة للفولرين و ألياف الكربون. على سبيل المثال 15 خماسي جرافين يشكلون فولرين. يعد تصنيع الجرافين على هيئة سداسية مستوية أمرا عسيرا وباهظا، حيث تكلف عينة بحجم شعرة الرأس 1000 دولار أمريكي لكن هذا لم يقف عائقا أمام إنتاج رقاقة جرافين بقطر 100 ملم في جامعة ولاية يتوقعون لها نظريا أن تفوق سرعة رقاقة السيليكون 100 مرة.



### 1-3-4 الدراسات على الكرافين

يقال إن الخيال ليس له حدود. يمكنك أن تتخيل أن أنحف مادة في الكون ممكن أن تكون صلدة أقوى من الفولاذ، وخفيفة أخف من وزن الريشة، وشفافة تسمح بمرور الوقت، بل تحمل أثقالاً بالأطنان دون أن تتلف، وموصلة عالية جداً للكهرباء. فكيف إذا ظهرت كل هذه الخصائص وغيرها في مادة واحدة. كيف سيكون انطباع العلماء والباحثين والمختصين والمتقنين على حدٍ سواء عن هذه المادة المدهشة؟ قد يقول القارئ بالغت في الخيال، وبالحقيقة هذه المادة موجودة في عالمنا الحقيقي، وتسمى GRAPHENE، وهي عبارة عن طبقة واحدة من ذرة كربون ببعدين فقط والتي تختلف بدورها عن الجرافيت GHRAPHITE المعروف أنه مسحوق كربون ثلاثي الأبعاد. ولا بد من المرور على مادة الكربون CARBON أحد العناصر الهامة في الطبيعة حيث يوجد نوعان من بلورات الكربون في العالم أحدهما الماس والآخر هو الجرافيت المستخدم في قلم الرصاص، والفرق بينهما في التراكيب الذرية لمادتي الماس والجرافيت. ففي الماس، كل ذرة كربون محاطة بأربع ذرات كربون أخرى، مشكلة شكل منتظم رباعي الوجوه. بينما الجرافيت له بنية ذات طبقات حيث تحاط كل ذرة كربون بثلاث ذرات كربون أخرى مشكلة شكل سداسي. وفي كل طبقة، تكون روابط الكربون قوية للغاية، ولكن تكون الروابط بين الطبقات ضعيفة.

أما لدى العلماء، فقد تم تسمية ورقة واحدة أو طبقة واحدة من ذرات الكربون باسم الجرافين GRAPHENE، وهنا لا بد من معرفة أصول المادة النانوية المبهرة للجميع. فقد قدمت دراسة علمية دقيقة نُشرت في مجلة Nature العالمية بالمجلد 444 بالصفحة 286 والسنة

2006 لمؤلفها رايبولد ومجموعته عن تشخيص سيف السلطان الناصر الخليفة صلاح الدين الأيوبي والمعروف غريبًا بـ"السيف دمشقي"، فقد أثبتت الدراسة الرائعة أن السيف المذكور مصنوع من مادة الفولاذ باحتوائه نسبة تصل إلى 2% كربون من وزنه الحقيقي، كما أنه خضع لآلاف درجات الحرارة المئوية تفوق 3500 درجة مئوية في أفران حرارية خاصة بصناعة الأسلحة الحربية قبل 800 سنة تقريبًا، أن ذلك السيف يحوي حبيبات نانوية بمنتهى الوضوح ولذا منحت هذه الجسيمات أو الحبيبات النانوية صلادة أقوى من الفولاذ وخفة أخف من وزن الريشة ما منحه سمات قتالية خارقة للعادة بأنه لم ينكسر أو يُثلم وما يزال محفوظ ليومنا هذا في العاصمة السورية دمشق. وبطبيعة الحال لم يكن علوم وتكنولوجيا النانو معروفة في ذلك الزمان. كذلك تم العثور قبل 500 عام مضت تقريبًا على رواسب كبيرة من الجرافيت النقي في منطقة بورودال بمنطقة ليك ديستريكت بإنجلترا (كمبريا ، المملكة المتحدة) ، حيث كان يُعتقد أن هذه المادة هي أحد أنواع الرصاص فسميت بالرصاص الأسود. حيث أعتقد الإنكليز أنهم اكتشفوا معدن جديد يشبه خامات الرصاص المتعارف عليها آنذاك، فأسماه الناس باسم plumbago وتعني باللاتينية خامات الرصاص. ومع نهاية القرن الثامن عشر، أوضح العالم السويسري ديليو شيلي أن "الرصاص الأسود: عبارة عن كربون. ولتحديد هوية المادة المكتشفة أطلق عالم المعادن الألماني أبراهام جوتلوب ويرنر في عام 1789 على هذه المادة اسم الجرافيت GRAPHITE والتي تعني الرسم أو الكتابة.

## 1-5 الامتزاز

تراكم ذرات أو جزيئات مائع (يسمى المُمْتَز) على سطح مادة صلبة (تسمى الماز وتخلق هذه العملية طبقة من الجزيئات أو الذرات التي تراكمت بكثافة على سطح المازات. ويختلف الإدمصاص عن الامتصاص حيث تنتشر المادة في السائل أو الصلب لتشكل محلولاً. يجمع مصطلح اشتراك كلا العمليتين: الامتصاص والامتزاز (أو الأدمصاص). العملية العكسية وهي لفظ المادة الممتزة من سطح الماز فتسمى تلك العملية بالعربية الانتزاز.

وبعبارات بسيطة، الامتزاز هو «تجمع مادة ما على أسطح حبيبات مادة ماز» (رينولدز وريتشاردز، 1996).

ويوجد الامتزاز في كثير من النظم الفيزيائية والبيولوجية والكيميائية الطبيعية، ويستخدم استخداماً واسعاً في التطبيقات الصناعية مثل: تنقية الماء باستخدام الكربون النشط أو الراتنجات

الاصطناعية بغرض تنقية وسط ما، سائل أو غاز. وتعتبر كلا من عمليات الامتزاز، والتبادل الأيوني (إدمصاص (adsorption) والامتصاص (absorption) عملية اشتراك (sorption) فالاشتراك هو الاصطلاح الشامل الذي يشمل الامتصاص والادمصاص.

على غرار التوتر السطحي، فإن الامتزاز هو نتيجة لطاقة السطح. في المواد الصلبة، تتربط جميع الذرات مع بعضها (سواء كانت رابطة أيونية أو تساهمية أو معدنية) وتكون الذرات في قلب المادة محاطة بذرات أخرى من نفس نوعها. ولكن الذرات على سطح «حبيبات» المادة المازة لا تكون محاطة كلياً بذرات من المادة الممتازة، وبذلك يمكن أن تجذب مواد ممتازة أخرى، مثلما يحدث مع محفز حيث ينشط محفز تفاعل مواد على أسطح المادة المازة.

وتعتمد طبيعة الروابط المتشكلة على نوعية الجزيئات المرتبطة، ولكن عملية الامتزاز عموماً تصنف كامتزاز فيزيائي (physisorption) حيث تكون قوى فان دير فالس هي الفعالة) أو يوجد أيضاً امتزاز كيميائي (chemisorption)، وهو يتصف بروابط تساهمية.

تمت صياغة مصطلح الادمصاص (Adsorption) لأول مرة في عام ١٨٨١ من قبل العالم الألماني هاينريش كايزر

### 5-1-1 الأمتزاز الفيزيائي (الطبيعي) physical adsorption

- عندما تكون الطبقة الممتازة مرتبطة بسطح الماز بقوى معينة تشبه تلك المسئولة عن إسالة الغازات أو قوى التماسك في السائل (بين جزيئات السائل الواحد) تسمى هذه القوى بالقوى الفيزيائية أو قوى فاندرفال ويقال أنه إمتزاز فيزيائي.

أمثله على الامتزاز الفيزيائي: امتزاز غاز النيتروجين وغاز النشادر وغاز ثاني أكسيد الكربون على سطح الفحم النباتي.

#### 5-1-1-1 خصائص الأمتزاز الفيزيائي

(1) صغر حرارة الأمتزاز تصل إلى حوالي 5000 سعر/مول

(2) انعكاسي ويصل الاتزان بسرعة عندما تتغير الحرارة والضغط. فالغاز الممتز يمكن أن يترك سطح الماز وذلك بالتفريغ أو التسخين ولا تتغير جزيئات الغاز التي تركت سطح الماز (كيميائياً أو فيزيائياً).

(3) تزداد كمية الغاز الممتزة على السطح الماز كلما كان الغاز سهل الإزالة أي تسير في محاذاة درجة الحرارة الحرجة للغاز.

(4) الطبقات الممتزة فيزيائياً يمكن أن يكون سمكها أكثر من جزئ واحد وتكون الطبقة الأولى مثبتة بقوة أكثر من الطبقات التي تليها ، ولكن قوى فاندرفال تكون متواجدة خارج كل طبقة ممتزة كما هو الحال عند سطح السوائل.

### 5-2-1 الامتزاز الكيميائي Chemical adsorption

- يشتمل الامتزاز الكيميائي على تكوين مركب كيميائي على سطح الصلب يسمى مركب السطح.
- يشتمل على تبادل أو مشاركة إلكترونية بين السطح الماز والجزئ أو الذرة الممتزة.
- في بعض الأحيان يحدث انتقال كامل أي تفقد الذرة إلكتروناتها إلى السطح الماز ، وتتحول إلى أيون موجب ممتز على سطح الصلب). مثل امتزاز الصوديوم على سطح التنجستين
- وفي طريقة أخرى يمكن للسطح الماز أن يفقد إلكترونات إلى الذرة الممتزة وبالتالي تتحول إلى أيون سالب مثل امتزاز غاز الأكسجين على سطح معظم المعادن

### 5-2-2-1 خصائص الامتزاز الكيميائي

- (1) حرارة الأمتزاز تصل ما بين 10.000 - 100.000 سعر/مول.
- (2) غير انعكاسي بمعنى أن الطبقة الممتزة كيميائياً من الصعب إزالتها، وغالباً الغاز الذي يترك سطح الصلب مختلفاً في تركيبة الكيميائي عن الغاز الممتز.
- (3) لا توجد علاقة بين الأمتزاز الكيميائي وسهولة إزالة الغاز الممتز ، ولكنها لها علاقة بقابلية الغاز للإتحاد مع الصلب

(4) يتم الإمتزاز الكيميائي عندما يتغطى سطح الصلب بطبقة واحدة من الغاز الممتز، ولكن وجد أنه يتم امتزاز فيزيائي فوق هذه الطبقة.

(5) الغاز الممتز في الغالب يكون أكثر نشاطاً من الغاز الحر، ويكون هذا الغاز الممتز مسئولاً عن عمليات حفز مختلف

### 1-6 دراسات السابقة

1-قام (2006) Latha Venkataraman et al [33] بقياس توصيل الجزيئات المنتهية بالأمين عن طريق قطع نقاط التلامس في المحلول الجزيئي في درجة حرارة الغرفة. ووجدوا أن تنوع الموصلية المرصودة لتقاطعات جزيء الدينامين Au أقل بكثير من تقليب تقاطعات ثنائي النيتريل وثنائي ثيول.

3- قاموا [Allodi, M. A., Dunn, M. E., Livada, J., Kirschner, K. N., & Shields, G. C. (2006) بالتكهن بوجود مجموعات OH (H<sub>2</sub>O) في التروبوسفير يمكن أن يكون له تأثيرات كبيرة في توازن الامتصاص الشمسي وتفاعلية جذر الهيدروكسيل. لقد استخدموا كيميائي نموذجي G3 و G3B3 لنمذجة الهياكل والتنبؤ بترددات مجموعات الهيدروكسيل / مجموعات المياه التي تحتوي على واحد إلى خمسة جزيئات ماء. تم فحص التفاعل بين عناقيد جذر الهيدروكسيل والميثان كدالة لحجم كتلة الماء لاكتساب فهم لكيفية تأثير حجم الكتلة على تفاعل جذر الهيدروكسيل

3- قام كل من (2007) Chen, F., Hihath, J., Huang, Z., Li, X., & Tao, N. J. إلى قطبين بين الباحثين أن توصيل الجزيء لا يعتمد فقط على خصائصه الجوهرية ولكن أيضاً على مواد القطب علاوة على ذلك، فإنهم بينوا ان الموصلية حساسة لطبيعة الاتصال بين الجزيء والقطب و البيئة الموقعية للجزيئة. توفر هذه المراجعة نظرة عامة على التطورات التجريبية ومناقشة الفوائد من التقنيات المختلفة واستكشاف المشكلات المتبقية.

4- قام كل من (2009) Kamenetska et al [36]. بتحليل إحصائيات تكوين وتطور تقاطعات جزيء واحد مرتبطة بأقطاب الذهب باستخدام مجموعات رابط الأمين وكبريتيد الميثيل وميثيل ميثيل الفوسفين. باستخدام حسابات DFT أظهروا سلاسل من التغيرات على المستوى الذري في

بنية الوصلة، بما في ذلك التحولات في نقطة التعلق

5- قام كل من (2014). [38]. Tuan Anh Pham et al بدراسة سلوك الامتصاص الكيميائي وكذلك تأثير بدائل البروم في تكوين الهياكل ثنائية الأبعاد عالية الترتيب لمشتقات البيرين على Au (111). كذلك استخدموا نظرية DFT ودعموا الدراسة عن طريق مسح قياسات المجهر النفقي

6- قلوب [2015]. (Sangtarash, S., et al.) (الهيدروكربونات العطرية متعددة الحلقات PAHs) والتلاعب بها، عندها يمكن تحقيق خطوة مهمة نحو تحقيق إمكانات الإلكترونيات أحادية الجزيء هنا وضحا تجريبيا ونظريا أن نظرية تحليلية بسيطة وخالية من المعلمات لأنماط التداخل التي تم تقييمها في منتصف فجوة HOMO-LUMO يشار إليها باسم M (functions) تنتبأ بشكل صحيح بنسب توصيل الجزيئات مع البيرين، النفثالين، الأنتراسين.

7- قام (2016). [40]. Tuan An Pham et al بالتحقيق في البلورة على السطح لـ 1,3,6,8- تيترا برومبايرين (Br4Py) على أسطح C (111) و Au (111) تحت ظروف تفريغ عالية جداً باستخدام نظرية DFT ودعم Br4py ووجدوا أن ترسب x-ray photoelectron spectroscopy) XPS و STM الدراسة باستخدام على Cu (111) المحتفظ به عند K300 نتج عنه تفاعل إزالة البرومة التلقائي بالإضافة إلى ذلك، تمت ملاحظة أنماط ثنائية الأبعاد (D2) ذاتية التجميع مرتبة للغاية مثبتة بواسطة روابط هيدروجين BrCH و BrCBr عند ترسب Br4Py على Au (111) في K300 علاوة على ذلك، وجدوا أن الركيزة المختارة لا تلعب فقط دوراً مهماً كعامل حفاز لتفاعل أولمان، ولكنها تؤثر أيضاً في تكوين أنواع مختلفة من الروابط بين الجزيئات

8- قاموا [2016]. (Tobias Kaposi, et al.) بدراسة قابلية تجمع هذه الجزيئات على سطح املس من الفضة. كذلك عززوا عملهم من خلال استخدام المجهر النفقي الماسح ( Scanning tunneling microscope). كذلك اثبتوا التالى الانتقائي للمسام في تجمعات البيرين ثنائية الابعاد مع عدد من ذرات اليود

9- أشكال [2017]. (Ismael K. Grace, I., & Lambert, C. J.) (التداخل الكمي في الجزيئات الفردية. استناداً إلى الحجج العامة، يظهر أن رنين فانو غير حساس للتوصيلية، في حين أن ميزات التداخل تعتمد على الاتصال. تم العثور على هذا السلوك في الأسلاك الجزيئية التي تحتوي على وحدات الأنثراكينون، حيث تخلق مجموعات الكربونيل المعلقة صدى فانو، والتي تتعايش مع ميزات التداخل الكمي متعدد المسارات.

Mijbil, Z. Y [43]. (2018-10) قام بتطوير طريقة حسابية سهلة الاستخدام لحساب النفاذية الالكترونية. تتطلب هذه الطريقة الربط المحكم الهاملتوني كملف مدخل و تستخدم واجهة بسيطة وسهلة للمستخدم لاجراء الحسابات. كذلك تم تضمين تاثير المجال المغناطيسي على الوصلة الجزيئية. بالاضافة الى ذلك فإن معامل النفاذية ممكن أن يحسب بين أي نقطتين في النظام مما يتيح الفرصة لدراسة النظام. لذلك فان هذه الطريقة يمكن أن تستخدم لدراسة التوصيلية الالكترونية في الانظمة الجزيئية حيث انها توفر الكثير من الجهد والوقت. [44] تمكنوا من توليف بيرين ثنائي و بيرين متعدد على السطح من الذهب [Xinbang Liu et al. 2019] (من خلال الدمج بين ازالة الهلجنة من السطح و كذلك ازالة تجمعات ذرات الذهب. وأنهم درسوا النظام من خلال STM و XPS وأن النتائج تم مقارنتها بنتائج حسابات نظرية دالية الكثافة (DFT).

#### 7-1 الهدف من البحث

حساب الخصائص التركيبية والالكترونية لمادتي الميتفورمين والكرافين ودراسه امتزاز عقار الميتفورمين على شريط الكرافين النانوي

## الفصل الثاني

## 2-1 تقريب بورن اوبنهايمر Born-Oppenheimer Approximation)

تحتوي الذرة على كل من النوى والإلكترونات، ولكن يمكن النظر في حركات النوى والإلكترونات بشكل منفصل لأن النوى أثقل بكثير من الإلكترونات ومن ثم تكون حركتها أكثر تقييدا. أول تقريب يتم إجراؤه عموماً في ميكانيكي الكم هو تقريب بورن اوبنهايمر ، الذي يفصل حركة الإلكترونات في النظام الذري عن الحركات النووية. تمت صياغة الفصل بين حركات النوى والإلكترونات في عام 1927 من قبل بورن وأوبنهايمر عن طريق تحليل رياضي دقيق ولكنه معقد [54]. نتيجة لهذا التقريب الجيد، يمكن اعتبار نوى النظام ثابتة في الفضاء والإلكترونات في جزيء يتحرك في مجال هذه النوى الثابتة. ضمن هذا التقريب، يتم تعيين الطاقة الحركية للنوى مساوية للصفر، والطاقة الكامنة بسبب تناافر النواة، (Van) تصبح ثابتة تعتمد الدالة الموجة الآن فقط على الطاقة الحركية للإلكترونات (T) وشروط الطاقة المحتملة Vne and Dee التي تعمل على الإلكترونات، وبالتالي مؤثر الهاملتوني الإلكتروني يصبح

$$H - \sum_{i=1}^N \sum_{A} T_{iA}$$

## 2-2 تقريب هارترتي فوك (The Hartree-Fock Approximation)

( وفقا لمبدأ استبعاد باولي: يمكن أن يشغل إلكترونان كحد أقصى مدارًا واحداً ويكون برم الإلكترونين متعاكسا. مركبة الزخم الزاوي الدوراني s تكون مكممة ولها قيمتان محتملتان - في وحدة الزخم . يمكن تمثيل حالتي الدوران هاتين بدالتين موجيتين متعامدتين التي تنتمي لحالة + و 8 تنتمي لحالة 1 - [58]. 2 لذلك، فإن الدالة الموجية الكاملة للإلكترون واحد هي نتاج حاصل ضرب دالة مكانية ودالة برم 2 (14-2)  $\Psi(1)=\psi(1) \eta(1)$  حيث (1) مرتبطة بدالة برم او B . من ناحية أخرى ، الإلكترونات هي فيرميونات. الحد الأدنى لمتطلبات الدالة الموجية المتعددة فيرميون هو عدم التماثل فيما يتعلق بتبادل الإلكترونات وتمييز الإلكترونات [49,50] . لذا لا يمكن أن تتغير أي خاصية فيزيائية للنظام إذا قمنا ببساطة بإعادة تسمية أو إعادة ترقيم الإلكترونات من الناحية الرياضية، يجب أن يكون مضاداً للتناظر فيما يتعلق بتبادل إحدائيات إلكترونين على سبيل المثال بواسطة عامل التحويل

$$P_{12} P_{1,2} \Psi(1,2) = -\Psi$$

إن الدالة الموجية الكلية لإلكترونين كمنتج هارتري لا تفي بمبدأ عدم التناظر. نعتبر

$$\Psi(1,2)=\psi_1(1)\alpha(1)\psi_1(2)\beta(2) - \psi_1(2)\alpha(2)\psi_1(1)\beta(1) \quad (2-16)$$

الآن

$$P_{1,2} \Psi(1,2)= \psi_1(2)\alpha(2)\psi_1(1)\beta(1) - \psi_1(1)\alpha(1)\psi_1(2)\beta(2) \quad (2-17)$$

النتيجة  $P_{1,2} \Psi(1,2)$  يبدو انه  $-\Psi(1,2)$ .

لذلك،  $\Psi(1,2)$  دالة موجية مقبولة. نلاحظ ان  $\Psi(1,2)$  هو محدد مصفوفة بسيطة:

$$\psi(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \psi_1(1)\alpha(1) & \psi_1(1)\beta(1) \\ \psi_1(2)\alpha(2) & \psi_1(2)\beta(2) \end{vmatrix} \quad (2-18)$$

يمكن أن يكون تعميم المعادلة السابقة لإعطاء محددات نظام الإلكترونات  $2n$  على النحو التالي [59]:

$$\Psi(1,2,\dots,n) = \frac{1}{\sqrt{2n!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1)\alpha(1) & \psi_1(1)\beta(1) & \psi_2(1)\alpha(1) & \dots & \psi_n(1)\beta(1) \\ \psi_1(2)\alpha(2) & \psi_1(2)\beta(2) & \dots & \dots & \psi_n(2)\beta(2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi_1(2n)\alpha(2n) & \psi_1(2n)\beta(2n) & \dots & \dots & \psi_n(2n)\beta(2n) \end{vmatrix} \quad (2-19)$$

شكل هذه الدالة الموجية تسمى محددة سليتر (Slater) [60].

معادلة (2-19) يمكن كتابتها كمنتج للعناصر القطرية للمصفوفة

$$\Psi(1,2,\dots,n) = |\psi_1(1)\alpha(1)\psi_1(2)\beta(2)\dots\psi_n(2n)\beta(2n)| \quad (2-20)$$

بالنسبة للدالة الموجية للإلكترون،

$$\int \psi_i \psi_j d\tau = \delta_{ij} \quad (2-21)$$

في هذا التعبير  $d\tau$  عنصر الحجم،  $\delta_{ij}$  يرمز الى دلتا كرونكر (Kronecker)، هو 1 اذا  $i=j$  وخلاف ذلك

تساوي صفر. نلاحظ ان العامل  $\frac{1}{\sqrt{2n!}}$  في الجهة اليمنى من معادلة (2-19) هو ثابت المعايرة. هذا لأنه يتم

معايرة نواتج مركبات هارتري الى الواحد [60].

### 3-2 مدارات سليتر ومدارات كاوس

يبدو أنه الخيار الطبيعي لدالة الأساس STO. إنها أسية تحاكي الدوال الذاتية الدقيقة لذرة الهيدروجين. يتم التعبير عن (STO) النموذجي على أنه

$$XSTO = Nrn-1eYLM (\theta \Phi)$$

حيث n العدد الكمي الاساسي و ع ثابت يتعلق بالشحنة الفعالة للنواة. شحنة النوى المحاطة بالالكترونات. YLM دالة موجية تصف الجزء الزاوي من دالة الموجة. أحد عيوب (STO) هو أن العديد من التكاملات متعددة المركز مثل الكولوم وهارترى فوك من الصعب حسابها مع (STO). لذلك لا تلعب دورًا في الحسابات الميكانيكية الكمومية المتقدمة القائمة على دالة الموجة

المدارات من النوع الغوسي ((92)) GTO مدارات كاوس (يمكن كتابة مدارات كاوسيان (GTO) من حيث الاحداثيات الكارتيزية مثل

$$XGTO NXLYLyZ e-fr^2$$

عامل المعايرة الذي  $(X | ) = 1$  مجموع  $Lx$  و  $Ly$  و  $Lz$  يحدد نوع المدارات. ع يمثل الأس المداري الذي يوضح مدى الضغط الاعتماد على 12 في الاس هو نقص في مدارات كاوسيان (GTO) نسبة الى مدارات سليتر ((GTO)) (STO)

لديه مشكلتان رئيستان. أولاً وصف هذه الدوال للالكترونات بالقرب من النوى (r - o) غير دقيق بينما يظهر (STO) سلوكًا صحيحًا عند (0) (r - 0) GTO وهي دالة على شكل جرس لها منحنى صفر عند (r → o)

والمشكلة الأخرى هي أن (GTO) تسقط بسرعة كبيرة جدًا من النوى مقارنة بـ (STO). لذلك، يتم تمثيل ذيل الدالة الموجية في (GTO) بشكل ضعيف.

يشير التقدير التقريبي إلى أن ثلاث مرات (GTO) تقابل (STO) للوصول إلى نفس المستوى من الدقة إحدى مزايا مجموعة الأساس الكاوسي هي أن ناتج دالتين كوسيين هو دالة كوسية أخرى [70]. نتيجة لذلك، بالنسبة لحسابات كولوم و متغيرات هارترى فوك من خلال استبدال الدوال السليترية بالدوال الكاوسية للوصول الى 19 الحل التحليلي. لذلك، فإن دالة الأساس (GTO) في هارترى فوك والطرق ذات الصلة شائعة نظرا لوجود خوارزميات فعالة جدا لحساب التكاملات متعددة المراكز تحليليًا من أجل تحسين مجموعات الأساس (GTO)، عادة ما يستخدم المرء مجموعة أساس متحدة (GTO) يتم فيها خلط العديد من الدوال الكاوسية البدائية

لإعطاء دالة غوسية متحدة

$$. XCGF = \sum M CijXGTO (2-25)$$

هنا،  $M$  هو عدد الكاوسي البدائي المستخدم في تركيبة خطية. كما نوقش من قبل على الأقل مطلوب  $M3$  للوصول إلى دقة (STO). تصنف مجموعات الأساس المستخدمة في كاوسيان إلى الحد الأدنى من مجموعات الأساس ومجموعات الأساس التكافؤ المقسم ودوال الانتشار وغيرها .

#### 2-4 نموذج توماس فيرمي

نظرية دالة الكثافة الوظيفية نشأت من نموذج توماس فيرمي، التي وضعتها لويلين توماس (1903-1992) وإنريكو فيرمي (1901-1954) في عام 1927. واعتمدت طريقة توماس فيرمي على نموذج إحصائي لتقريب التوزيع الإلكتروني حول الذرات. هذا النموذج أعطى صورة عن إمكانية الاعتماد على الكثافة الإلكترونية لحساب الطاقة الحركية رغم أن هذا النموذج أعطى نتائج ضعيفة لعدم دقته. ويمكن اعتباره

#### 2-5 معادلة شرودنجر (The Schrödinger Equation)

بناءً على وصف دبرولي الذي افترض موجات ترافق الإلكترونات، جمع شرودنجر بين الافتراضات الكمومية لبور ومعادلات الموجة من الميكانيكا الكلاسيكية لإعطاء وصف جديد للإلكترونات في الميكانيكا، يمكن وصف الطاقة الكلية لنظام من الجسيمات من حيث زخم الجسيمات والإحداثيات للأنظمة المستقلة عن الوقت في الحركة الكلاسيكية [49,50].

$$E=T+V T (1-2)$$

الطاقة الكامنة الحركية للإلكترون تعطى

$$KE = (3) mv^2=p^2/2m$$

حيث كتلة الإلكترون و سرعة الإلكترون و زخم الإلكترون

$$Ze PE=-Zer-1$$

$$(2-3)$$

حيث 1 مسافة الإلكترون من النواة و وحدة شحنة الإلكترون و العدد الذري. يمكن كتابة معادلة

$$(2-1) بالشكل التالي:$$

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{r} \right\} \Psi(r) = E\Psi(r) \quad (2-5)$$

حيث:

$\hbar$  ثابت بلانك (h) تقسيم  $2\pi$ .

$\Psi$  دالة موجة الالكترون.

$\nabla^2$  مؤثر لابلاس.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

الجانب الايسر من معادلة (2-5) له اسم خاص يطلق عليه عامل هاميلتون الذي يرمز له H .

$$E = P - Ze^2 - 1/2m \quad (4-2)$$

يمكن تحويل المعادلة إلى شكل مناسب للاستخدام في ميكانيكا الكم، [50]

بشكل عام يتم كتابة معادلة شرودنجر

$$H \Psi(r) = E \Psi(r) \quad (6-2)$$

يمكن التعبير عن العامل الهاملتوني على انه مجموع الطاقة الحركية والكامنة للنواة والالكترونات

$$H_T = T_N + T_e + V_{eN} + V_{NN} + V_{ee} + V_{en} \quad (2-7)$$

حيث  $H_T$  عامل الهاملتونين الكلي و  $T$  و  $T_e$  مؤثر الطاقة الحركية للنواة والالكترونات بالترتيب.  $V_{en}$  و  $V_{NN}$  الطاقة الكامنة بين الكترون - الكترون - نواة ونواة نواة بالترتيب العامل الهاملتوني الاجمالي سيكون

$$H_T = -\frac{1}{2} \sum_A^N \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 - \frac{1}{2} \sum_p^{2n} \nabla_p^2 + \sum_{p < d}^{2n} r_{pd}^{-1} - \sum_A^N \sum_p^{2n} Z_A r_{Ap}^{-1} + \sum_{A < B}^N Z_A Z_B R_{AB}^{-1} \quad (2-8)$$

حيث استخدمنا الوحدات الذرية :  $h = m_e = e, M_A = 1$  كتلة النواة،  $m_e$  كتلة الالكترون،  $Z_A Z_B$  شحنة النوى A,B بالترتيب ،  $r_{pa}$  المسافة بين الجسيمات p و d و  $R_{AB}$  المسافة بين النواة A والنواة [47,48]. وبشكل عام معادلة شرودنجر ستصبح [53]

$$H_T(1,2,\dots,N,1,2,\dots,n)(1,2,\dots,N,1,2,\dots,n) = E\Psi(1,2,\dots,N,1,2,\dots,n) \quad (2-9)$$

## 2-6 نظرية دالية الكثافة Density functional theory

تعتبر نظرية دالية الكثافة (DFT) اليوم واحدة من أهم الأدوات لحساب خصائص الحالة الأرضية للمعادن وأشباه الموصلات والعوازل (DFT) هي طريقة ميكانيكية كمية تستخدم في الفيزياء والكيمياء لدراسة البنية الإلكترونية للأنظمة متعددة الإلكترونات، DFT واحدة من بين الطرق الأكثر شعبية وتنوعاً المتاحة في الفيزياء الحاسوبية والكيمياء الحاسوبية كان مصطلح نظرية دالية الكثافة هو نموذج توماس فيرمي، الذي طوره توماس وفيرمي في عام 1927. وقد حسبوا طاقة الذرة من خلال تمثيل طاقتها الحركية كوظيفة لكثافة الإلكترون والجمع بين هذا التعابير الكلاسيكية لتفاعل الكترون - نواة والكترون - الكترون، والتي يمكن تمثيلها أيضاً من حيث كثافة الإلكترونات [45,63].

في DFT ، لا ينصب التركيز الرئيس على دالة موجة الكترون - نواة ...  $y = (1,22)$  ومعادلة شرودنجر المصاحبة لها، ولكنها بدلاً من ذلك تكون على كثافة إلكترون ( $r$ ) أبسط بكثير. كثافة الإلكترون هي عدد الإلكترونات لكل وحدة حجم لحالة معينة. يعتمد فقط على ثلاث إحداثيات بغض النظر عن عدد إلكترونات النظام

$$N = \int p(r) dr \quad (2-22)$$

تعتمد المفاهيم الأساسية لـ DFT على طاقة الحالة الأرضية وجميع الخصائص الإلكترونية للحالة الأرضية الأخرى يتم تحديدها بشكل فريد من خلال كثافة الإلكترون . علاوة على ذلك، تتطابق الحالة الأرضية الدقيقة للنظام مع الكثافة الإلكترونية للحد الأدنى من الطاقة الإجمالية.

## 2-7 مجموعات الأساس Basis Sets

مجموعة الأساس هي مجموعة من الدوال المستخدمة لوصف شكل المدارات في الذرة. يتم إنشاء المدارات الجزيئية والدوال الموجة من خلال أخذ مجموعات خطية من الدوال الأساسية والدوال الزاوية. تستخدم معظم الطرق مجموعة أساس المحددة مسبقاً. عند إجراء العمليات الحسابية لنظرية دالية الكثافة، يجب تحديد مجموعة أساس

رغم أنها من الممكن إنشاء مجموعة أساس من البداية، فإن معظم العمليات الحسابية تتم باستخدام مجموعات أساس موجودة . نوع الحساب الذي تم تنفيذه ومجموعة الأساس المختارة هما العاملان الأكبر في تحديد دقة النتائج

## 2-8 مجموعات الأساس الدنيا Minimal Basis Sets

الحد الأدنى من مجموعة الأساس هو الحد الأدنى من دوال الأساس (اللازمة لوصف الحالات الأرضية للذرات المكونة تمثل جميع الكترونات كل ذرة في الجزيء . الاسم الشائع لمجموعات الأساس الدنيا - STO n=2-6) يمثل عدد الدالات البدائية الكاوسية التي تشتمل على دالة أساس واحد في مجموعات الأساس هذه، يتألف نفس العدد من دوال كاوس الأولية من مدارات أساسية وتكافؤ عادةً ما تعطي مجموعات الأساس الدنيا نتائج تقريبية غير كافية ، ولكنها أرخص بكثير من نظيراتها الأكبر حجمًا. فيما يلي أمثلة على مجموعات الأساس الدنيا المستخدمة بشكل شائع

STO-2G, STO-3G, STO-6G (11-2) [75-73].

## 2-9 مجموعات اساس التكافؤ المقسم Split-Valence Basis Sets

يتم تمثيل المدارات الذرية ذات القشرة الداخلية بدالة أساس واحدة ويتم تمثيل مدارات التكافؤ باليتين أساسيتين أو أكثر (مجموعات اساس بوبل) إحدى الطرق السهلة لتمديد مجموعات الأساس هي زيادة عدد الدوال الأساسية المستخدمة لكل مدار مجموعات أساس التكافؤ المنفصل تستخدم أكثر من دالة أساس واحدة من الأسس المدارية المتغيرة لكل مدار تكافؤ ودالة أساس واحدة فقط لكل مدار أساسي. على سبيل المثال

مجموعة الأساس تكافؤ مزدوج - زيتا (VDZ) valence double-zeta تستخدم داليتين أساسيتين لكل مدار تكافؤ ، بينما مجموعة الأساس التكافؤ الثلاثي - زيتا (valence triple-zeta) VT يستخدم ثلاثة دوال، وهكذا. مثال آخر على ذلك هو مجموعات الأساس klmn G التي طورها بوبول (Pople) وزملاؤه. هنا، يمثل عدد الغوسيين البدائي المستخدم في كل مدار أساسي بينما تمثل | و m و n البدائية المستخدمة في مدارات التكافؤ.

على سبيل المثال مجموعة أساس 6-31 تستخدم مجموعة من 6 مجموعات اساس بدائية متحدة مع دالة أساس واحدة لكل مدار أساسي و تكافؤ مجزأ 3 و مجموعة اساس بدائية واحدة لمدارات التكافؤ. بينما توفر مجموعات أساس التكافؤ المنفصل وصفاً أفضل للمدارات الجزيئية لأنها تسمح بتغيير حجم الذرة ، فإنها لا تزال غير قادرة على توفير أساس متوازن يتم تعيينه بنفسها .

## Structure properties (2-10) الخواص الإلكترونية

الطاقة الكلية الطاقه Total Energy Etot

الإجمالية لنظام ما هي مجموع الطاقات الحركية والطاقات الكامنة في البنية المثلى التي يجب أن تكون الطاقة الإجمالية للجزيء عند أدنى قيمة لأن الجزيء في نقطة التوازن . هذا يعني أن ناتج القوى الفعالة هو صفر

$$Etot=KE+PE \quad EK (49-2) \text{ : الطاقة الحركية PE الطاقة الكامنة}$$

### 2- فجوة الطاقة

يتم تعريف فجوة الطاقة على أنها فرق الطاقة بين الجزء السفلي من نطاق التوصيل وأعلى نطاق التكافؤ للإلكترونات في مادة صلبة بلورية يتم حساب فجوة الطاقة المحظورة لجميع الجزيئات حسب نظرية كوبمان :

فجوة الطاقة المحظورة. E gap حيث E gap-ELUMO-EHOMO (2-50) Koopman) هي طاقة EHOMO هي طاقة المدار الجزيئي الأدنى غير المشغول بالالكترونات. ELUMO

### 3- جهد التأين Ionization Potential Ip المدار الجزيئي الأعلى المشغول ( )

جهد التأين (IP) للجزيء هو كمية الطاقة اللازمة لإزالة إلكترون من ذرة أو جزيء معزول ويتم التعبير عنه كفرق الطاقة بين الطاقة المشحونة الموجبة (+) و E (n) المحايدة وفقاً للعلاقة التالية

$$IP = E(+) - E(n) \quad (51-2)$$

$$IP = - E \text{ HOMO}$$

### 4- الألفة الإلكترونية

ألفة الإلكترون (EA) لجزيء أو ذرة هي تغير الطاقة عندما يضاف إلكترون إلى الذرة المحايدة لتشكيل أيون سالب ويتم التعبير عنه كفرق الطاقة بين الطاقة المحايدة (n) والطاقة المشحونة السالبة E (-) وفقاً للعلاقة التالية

$$EA = E(n) - E \quad (53-2)$$

في نظرية المدار الجزيئي (MO) molecular orbital theory مع الحد من نظرية كوبمان ، تُعطى الطاقات المدارية للمدارات الحدودية:

$$EA = - ELUMO \quad (2-54)$$

## 5-الصلابة الكيميائية

هي مقاومة المواد لفقدان الإلكترونات بالنسبة للعازل وأشباه الموصلات، تعد الصلابة نصف فجوة الطاقة . يمكن حساب الصلابة الكيميائية

$$H = (IP-EA) \text{ حيث } H \text{ الصلابة الكيميائية (الصلادة).}$$

IP جهد التأين.

EA الألفة الإلكترونية.

قدم التعريف النظري للصلابة الكيميائية من خلال نظرية دالية الكثافة (DFT) كمشتق ثان للطاقة الإلكترونية فيما يتعلق بعدد الإلكترونات

## 6 النعومة الكيميائية Chemical Softnes

يمكن تعريف النعومة بأنها معكوس الصلابة]

$$( S=1/(IP-EA)$$

## 7- الكهروسالبية (EN Electronegativity

عرفت بأنها قوة الذرة في الجزيء لجذب الإلكترونات إلى نفسها بواسطة بولنج (Pauling), حدد موليكين (R. Mulliken) الكهروسالبية كمتوسط تقارب الكتلون طاقة التأين على النحو الآتي

$$EN = (IP + EA)/2$$

وفقا لنظرية كوبمان (Koopman) يمكن تعريفها بانها القيمة السالبة لمعدل مستويات من HOMO و

$$LOMO EN = -(E_{HOMO} + E_{LOMO})/2$$

## 8- التالف مع الوسط

يمكن تعريفه بأنه مقياس لخفض الطاقة بسبب تدفق الإلكترون الأقصى بين الواهب والمستقبل

$$\omega = k^2/(2H) \text{ (2-60)}$$

حيث يرتبط الجهد الكيميائي بسالبية الكهروسالبية.

الفصل الثالث  
النتائج والمناقشه

### 1-3 المقدمة

تم استخدام الـ DFT والـ B3LYP والـ 6-31G باستخدام برنامج الـ Gaussianview في حساب الخصائص الإلكترونية للتراكيب المدروسة (الميتفورمين، الكرافين والمتفورمين الممتز بالكرافين بوجود الماء وبعدهم وجوده) حيث تم عمل امثلية هندسية لكل من الميتفورمين والكرافين وعمل امتزاز للمادتين.

### 2-3 الخواص التركيبية : Structural properties

#### جدول(1-3)

اطوال الاواصر وقيم الزوايا لمادتي الميتفورمين (Metformin (M) والكرافين (Graphene(GR))

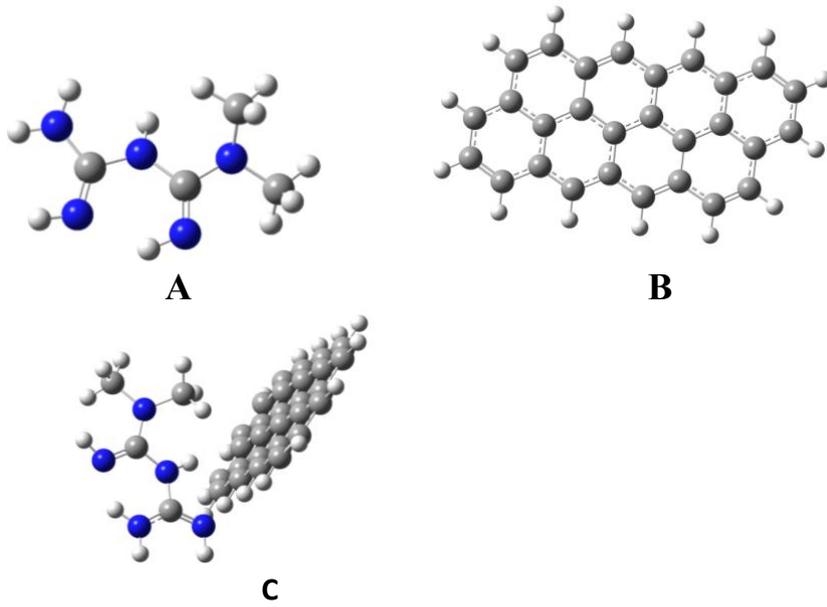
compound	Bond Length	Value/ A <sup>0</sup>	Bond Angle	Degrr
Metformin	C-H	1.091-1.103	H-C-H	107.608.110.046
	C-N	1.392-1.469	H-C-N	110.249
	C=N		N-C=N	125.649
	N-H	1.027-1.006	C-N-N	119.49-129.60
			H-N=C	113.757
			H-N-H	117.657
Graphene	C-C	1.42	C-C-C	120
	C-H	1.20	H-C-C	116

### 3-3 الخواص الإلكترونية : Electronic properties

تم حساب بعض الخصائص الإلكترونية في هذا العمل وكذلك الطاقة الكلية وطاقة HOMO (اعلى مدار مشغول بالالكترونات) وطاقة LUOM (اقل مدار غير مشغول بالالكترونات) وفجوة الطاقة وجهد التاين والالفة الإلكترونية والصلابة الكيميائية والنعومة الكيميائية والتالف مع الوسط والكهروسالبية للتراكيب المدروسة . تم التحقيق في هذه الخصائص باستخدام نظرية كوبمان .

### 4-3 Geometrical Optimization : الامتلية الهندسية :

تم حساب الامتلية الهندسية لجزيئة الميتفورمين (M) وشريط الكرافين (GR) قبل و بعد عملية امتزاز لمادة الميتفورمين مع الكرافين (GR-M) ( انظر الشكل (1-3) ) ثم تم حساب الخصائص الالكترونية لكل من الميتفورمين والكرافين والميتفورمين الممتز بالكرافين بوجود الماء وعدم وجود المادة عند الامتزاز والجدول (1-3) و (2-3) توضح قيم الخصائص المحسوبة



شكل (1-3) يوضح الامتلية الهندسية لـ (a) الميتفورمين (b) شريط الكرافين (c)

الجدول (3-2) بعض الخصائص الالكترونية للتراكيب المدروسة (( الميثفورمين والكرافين ( و الميثفورمين الممتز مع الكرافين بوجود الماء وبعدم وجوده) .

Compound	Symbol	HOMO/eV	LUMO/eV	Egap/eV	Etota/ a.u.
Graphene	GR	-4.5932	-2.4163	2.1768	-1075.268
Metformin	M	-5.4476	0.8925	6.3401	-432.661
Metformin-GR	GR+M	-4.4680	-2.2938	2.1741	-1507.940
Metformin-GR /with Water	GR+M(w)	-4.6993	-2.5224	2.1768	-1507.957

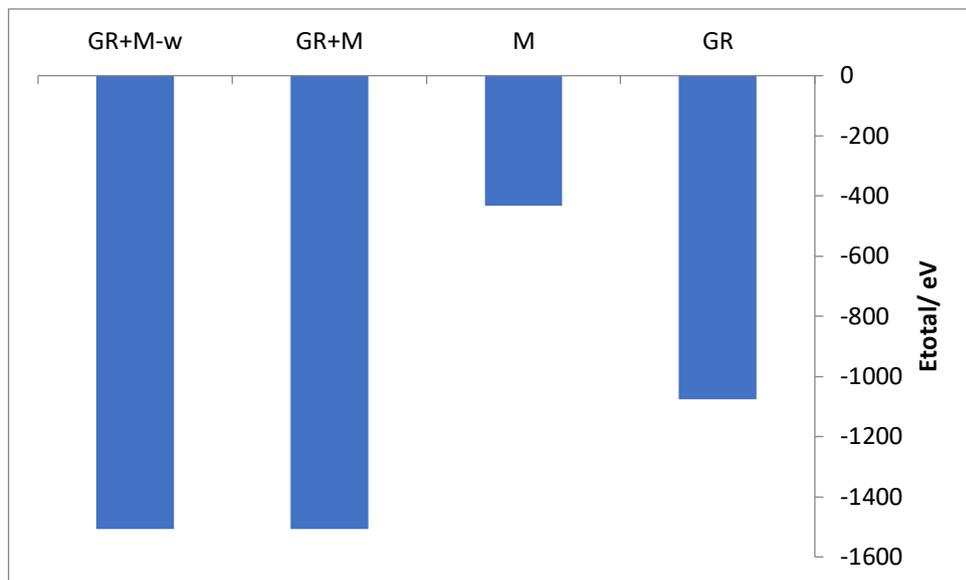
الجدول (3-3) بعض الخصائص الالكترونية للتراكيب المدروسة (( الميثفورمين و الكرافين ) و الميثفورمين الممتز مع الكرافين بوجود الماء وبعدم وجوده) .

Compound	EA/eV	IE/eV	X/eV	W/eV	S/eV <sup>-1</sup>	H/eV
Graphene	2.416	4.593	-3.504	5.642	0.4593	1.0884
Metformin	-0.892	5.447	-2.277	0.818	0.1577	3.1700
Metformin-GR	2.293	4.468	-3.380	5.257	0.4599	1.0870
Metformin-GR /with Water	2.522	4.699	-3.610	5.989	0.4593	1.0884

### 5-3 الطاقة الكلية (Etota) (Total Energy)

تزداد الطاقة الكلية بزيادة سلسلة الميثفورمين أي عند اضافة أي عناصر او جذور حرة كما موضح في الشكل (3-4). الطاقة الكلية تعتمد على عدد الالكترونات بشكل مباشر، ولكنها تعتمد على الموضع قليلا في الجزيئات، وهذا يدل ان الطاقة الكلية هي انعكاس لطاقة الربط لكل جزيء تتناسب الطاقة الكلية بشكل عكسي مع عدد الالكترونات في الجزيئات تظهر الدراسة ان الجزيئات لديها طاقة اقل لان عدد الذرات اكثر. ومع ذلك أن الاختلاف في الطاقة يؤدي إلى وجود ارتباط بين هذه الذرات مما يجعل المستوى الأرضي أكثر استقرارا وهذه النتيجة مطابقة لما ورد في في مصدر [104]. ونلاحظ أن جزيئة ميثفورمين نقية بدون اضافات طاقتها قليلة

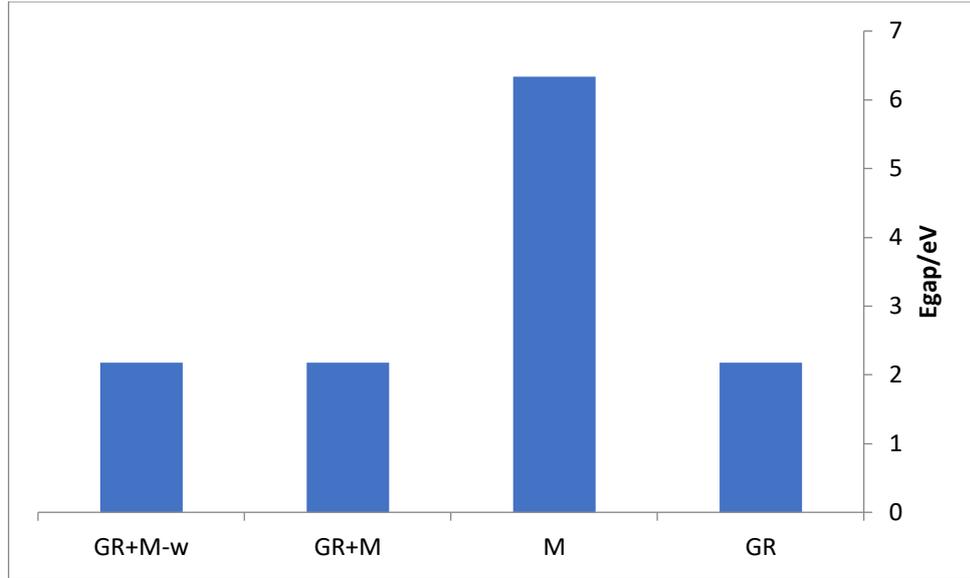
وعند زيادة عدد الذرات وزيادة عدد الالكترونات سوف تقل الطاقة تزداد سالبيتها.



شكل (1-3) يوضح الطاقة الكلية للتراكيب المدروسة.

### 6-3 HOMO, LUMO وفجوة الطاقة Energy Gap Ega

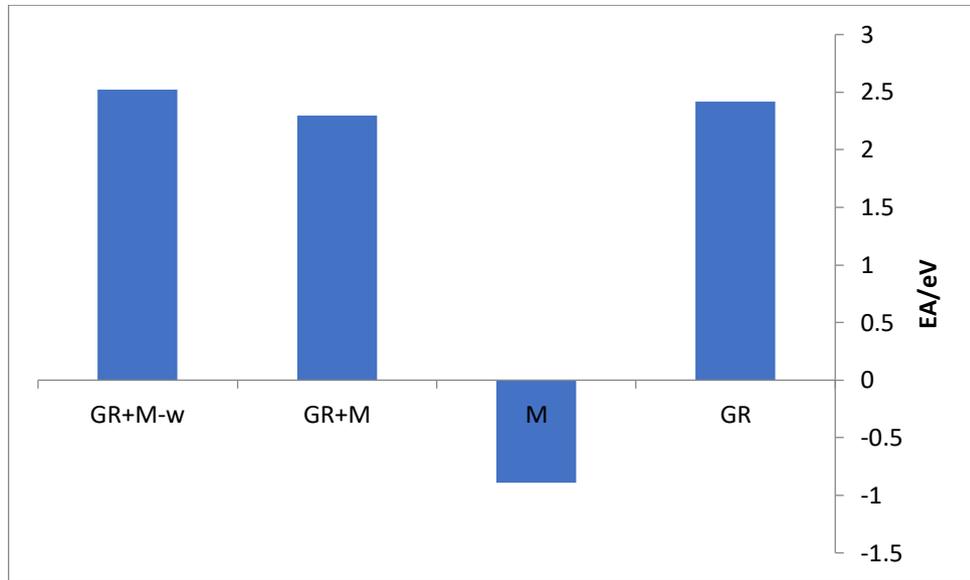
تمثل المدارات الجزيئية المعروفة HOMO و LUMO القدرة على ايهاب وقبول الالكترون في اي جزيء ولها أثر مهم في خصائصه الالكترونية والكيميائية. يمكن تفسير الامكانات الكيميائية والصلابة والنعومة وما الى ذلك لاي جزيء بمساعدة HOMO و [86] LUMO وفجوة الطاقة . وان قيمة فجوة الطاقة المحسوبة في هذا البحث متوافقة بشكل جيد جدا مع نتائج فجوة الطاقة المينفورمين [Ghaleb, A., et al.] التي تم حسابها من قبل , من الشكل (3-6) نلاحظ تغير قيم طاقة ال **HOMO تقلل** وان اعلى قيم HOMO تكون عند (-4.4680) اما فجوة الطاقة مع زيادة عدد الجزيئات تقل فجوة الطاقة نتيجة لتقارب الذرات ومع الزيادة بالكثافة العددية تتقارب مستويات الطاقة فتقل فجوة الطاقة.



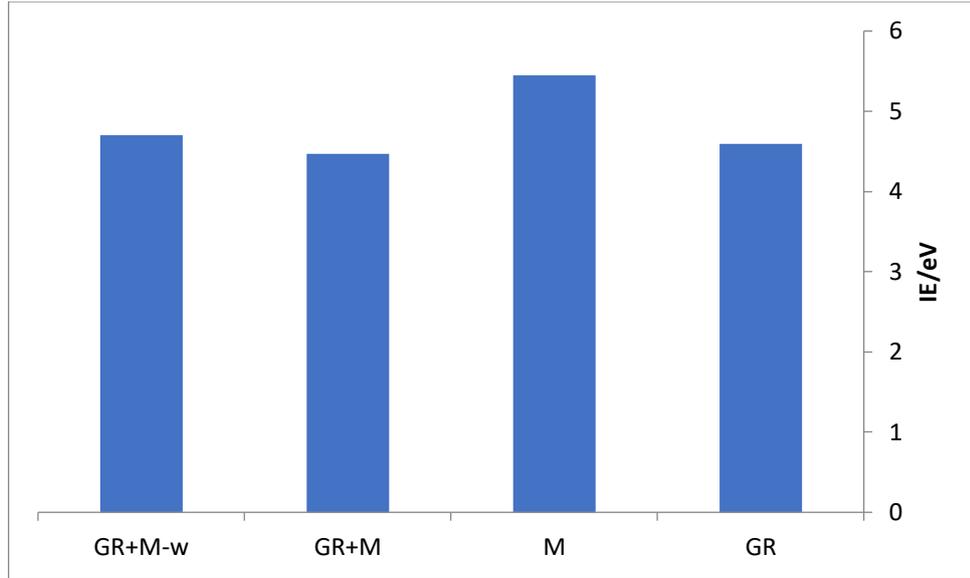
شكل (3\_2) يوضح فجوة الطاقة للتراكيب المدروسة

### 7-3 الالفة الالكترونية وجهد التاين :

تم حساب الالفة الالكترونية وجهد التاين للتراكيب المدروسة (انظر الاشكال (33)). نلاحظ تغير في قيمها وان اعلى قيمة للالفة الالكترونية عند (2.522) اما بالنسبة لجهد التاين فان اعلى قيمة عند (5.447) كما موضح في الاشكال.



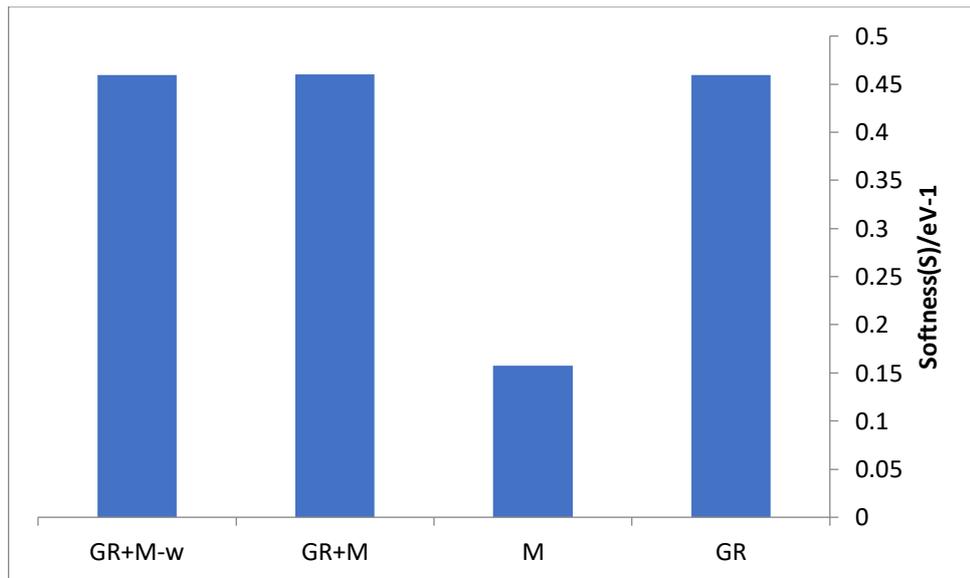
شكل (3-3) يوضح قيم الالفة الالكترونية للتراكيب المدروسة



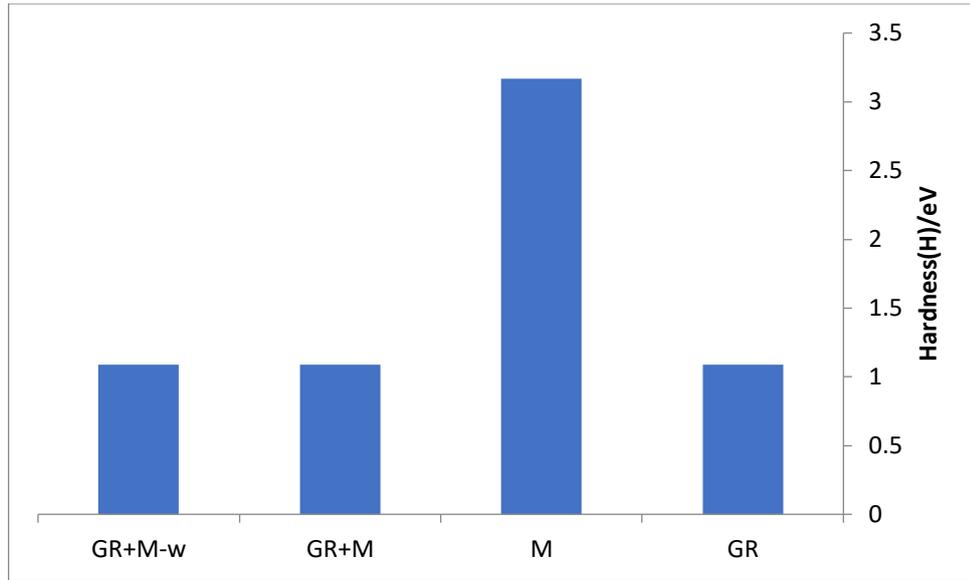
شكل (4-3) يوضح قيم جهد التاين للتراكيب المدروسة

### 8-3 النعومة الالكترونية والصلابة الالكترونية وElectrophilic Index

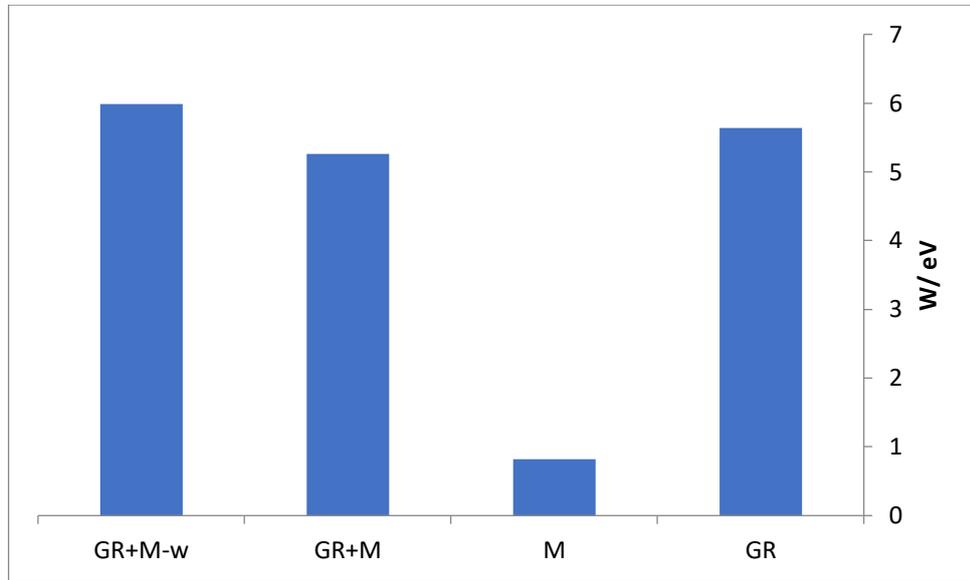
تم حساب النعومة الالكترونية والصلابة الالكترونية و معامل التآلف مع الوسط للتراكيب المدروسة انظر الاشكال (3-5 و 3-6 و 3-7) . نلاحظ تغير قي قيمها وان اعلى قيمة للنعومة الالكترونية عند (0.1577) اما بالنسبة للصلابة الالكترونية فان اعلى قيمة عند (3.1700) اما معامل التآلف مع الوسط فان اعلى قيمة عند (5.989) كما موضح في الاشكال.



شكل (5-3) يوضح النعومة الالكترونية للتراكيب المدروسة



شكل (6-3) يوضح الصلابة الالكترونية للتراكيب المدروسة



شكل (7-3) يوضح معامل التألف مع الوسط للتراكيب المدروسة

[1]Liu, X., Du, Y., Timmer, A., Mönig, H., Wan, X., Huang, X., ... & Fuchs, H. (2019). Quinone-Facilitated Coordinated Bipyrene and Polypyrene on Au (111) by Capture of Gold Adatoms. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(26), 16281- 16287.

[2]Oliveira, M., Gravato, C., & Guilhermino, L. (2012). Acute toxic effects of pyrene on *Pomatoschistus microps* (Teleostei, Gobiidae): Mortality, biomarkers and swimming performance. *Ecological Indicators*, 206-214, 19

[3]Van Dyke, D. A., Pryor, B. A., Smith, P. G., & Topp, M. R. (1998). Nanosecond time-resolved fluorescence spectroscopy in the physical chemistry laboratory: formation of the pyrene excimer in solution. *Journal of chemical education*, 75(5), 615.

[4]Senkan, S., & Castaldi, M. (2003). Combustion in *ullmann's encyclopedia of industrial chemistry*. Wiley-VCH, Weinheim. Polycyclic aromatic hydrocarbons in urine from two psoriatic patients, *Acta Dermato Venereologica*, 73, 188-190.

[5]Kurihara, R., Ikegami, R., Asahi, W., & Tanabe, K. (2018). Phosphorescent ruthenium complexes with bromopyrene unit that enhance oxygen sensitivity. *Bioorganic & medicinal chemistry*, 26(16), 4595-4601. [6] Canton-Vitoria, R., Sayed-Ahmad-Baraza, Y., Pelaez-Fernandez, M., Arenal, R., Bittencourt, C., Ewels, C. P., & Tagmatarchis, N. (2017). Functionalization of MoS<sub>2</sub> with 1, 2-dithiolanes: toward donor-acceptor nanohybrids for energy conversion. *npj 2D Materials and Applications*, 1(1), 1-9.

[7]Li, X., & Patterson, H. H. (2013). A review of luminescent anionic nano system: d10 metallocyanide excimers and exciplexes in alkali halide hosts. *Materials*, 6(7), 2595-2611

,[8]Keimig S. D., Kirby, K. W., Morgan, D. P., Keiser, J. E& ,

Hubert, T. D. (1983). Identification of 1-hydroxypyrene as a major metabolite of pyrene in pig urine. *Xenobiotica*, 13(7), 415-420.

[9]Guo, H. (2019). Isatin derivatives and their anti-bacterial activities. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 164, 678-688.

[10]Meyer, V. (1883). Ueber den begleiter des benzols im steinkohlentheer. *Berichte der deutschen chemischen Gesellschaft*, 16(1), .1465-1478

[11]Gamov, G. A., Khodov, I. A., Belov, K. V., Zavalishin, M. N., Kiselev, A. N., Usacheva, T. R., & Sharnin, V. A. (2019). Spatial structure, thermodynamics and kinetics of formation of hydrazones derived from pyridoxal 5'-phosphate and 2- furoic, thiophene-2-carboxylic hydrazides in solution. *Journal of Molecular Liquids*, 283, .825-833

[OBJ]

[12] Groom, C. R., Bruno, I. J., Lightfoot, M. P., & Ward, S. C. (2016). The Cambridge structural database. *Acta Crystallographica Section B: Structural Science, Crystal Engineering and Materials*, 72(2), 171-179.

[13] Treiber, A., Dansette, P. M., El Amri, H., Girault, J. P., Ginderow, D., Mornon, J. P., & Mansuy, D. (1997). Chemical and biological oxidation of thiophene: preparation and complete characterization of thiophene S-oxide dimers and evidence for thiophene S-oxide as an intermediate in thiophene metabolism in vivo and in vitro. *Journal of the American Chemical Society*, 119(7), 1565-1571.

[14]Daniel Lednicer (1999). *The Organic Chemistry of Drug Synthesis*. 6. New York: Wiley Interscience.

[15]Mijbil, Z. Y., OLIFE: Tight Binding Code for Transmission Coefficient Calculation. *Journal of Physics: Conference Series* 2018, 1003 (1), 012114.

[16]Papadopoulos, T. A., Grace, I. M., & Lambert, C. J. (2006). Control of electron transport through Fano resonances in molecular wires. *Physical review b*, 74(19), 193306.

[17]Datta, S. (1997). *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press. 76

[18]Fisher, D. S., Lee, P. A., Relation between conductivity and transmission matrix. *Physical Review B* 1981, 23 (12), 6851-6854.

[19]Lambert, C. J., Basic concepts of quantum interference and electron transport in single-molecule electronics. *Chemical Society Reviews* 2015, 44 (4), 875-888.

[20]Pacher, P., Beckman, J. S., & Liaudet, L. (2007). Nitric oxide and peroxynitrite in health and disease. *Physiological reviews*, 87(1), 315-424.

[21]Mir, L. M., Bureau, M. F., Gehl, J., Rangara, R., Rouy, D., Caillaud, J. M., & Scherman, D. (1999). High-efficiency gene transfer into skeletal muscle mediated by electric pulses. *Proceedings of the National Academy .of Sciences*, 96(8), 4262-4267

## Summary

In this work, the structural and electronic properties of the substances metformin and graphene were studied in their pure state without additives, as well as the effect of adding some radicals such as OH, NH, COOH, and 3OCH on the structural properties of these materials. The electronic properties of these two materials were studied, which included total energy, energy gap, ionization energy, electronic affinity, electronegativity, affinity with the medium, and chemical hardness and softness. Density function theory was used and the compatibility between the two theories was shown for the value of the energy gap. This material is very well known, as metformin is used in the medical field to treat type 2 diabetes, meaning that it works through the body's insulin response. As for graphene, it is used in many industrial applications, in electronic cell processors, and other technologies such as communications, photography, wave detection, and weapons detection. One of the strongest materials known, graphene is a single layer of carbon atoms evenly arranged in a triangular lattice. Graphene is used in many industrial applications, including the air conditioner industry, where it is used to improve the efficiency of air conditioners and reduce energy consumption. Metformin, sold under the brand name Glucophage, is an oral hypoglycemic drug in the biguanide class. It is the first line of treatment for treating type 2 diabetes, especially in people who are overweight or obese. It is also used in the treatment of polycystic ovary syndrome. It is not associated with weight gain, and is taken orally

Ministry of Higher Education and Scientific Research  
University of Babylon  
College of Science, Department of Physics



Study of metformin adsorption on cellular graphene tape  
A research submitted to the College of Science - Babylon University,  
which is part of the requirements for obtaining a Bachelor's degree in  
Science, Department of Physics

Submitted by a student

Mustafa Samir Sabry

Research Supervisor / A. M. Dr.. Nidal Obaid Sharifi