

دراسة تأثير الأصرة C-H والأصرة O-H على الخصائص الطيفية والحرارية للـ 1- البيوتانول

أحمد عزيز درويش

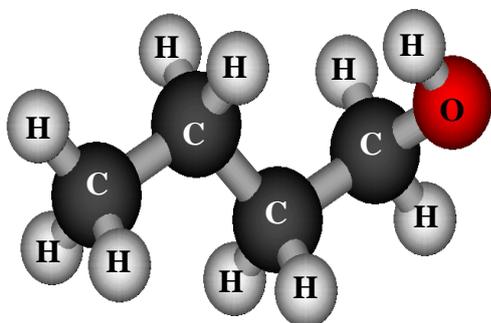
قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة النهريين.

الخلاصة

باستخدام برامج ال WinMopac7-2-1 و HyperChem تم دراسة الخواص الحرارية والطيفية لجزيئة البيوتانول $C_4H_{10}O$ ورسم منحني طاقة الجهد لكل من الأصرة O-H, C-H بتغيير طول الأصرة، ومنها حسبت طاقة التفكك الطيفي فكانت للأصرة C-H (1.68069 ev) وللأصرة O-H (8.69288ev). ودراسة انماط اهتزاز الجزيئة وتردداتها حيث كانت جميعها فعالة في طيف (IR, Raman) بسبب التغيرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة وبمدى تردد ما بين (64- 3884cm^{-1})، وكذلك حسبت قيمة عزم ثنائي القطب وكانت (1.613Debye) ،الإضافة الى حساب قيم المدارات الجزيئية Homo وكانت قيمتها (-11.09853ev) ،Lumo، وقيمتها (3.48501ev). اما الخواص الثيرموديناميكية (الحرارية) فقد تم حسابها عند درجة حرارة الغرفة 298 K فكانت بالنسبة لحرارة التكوين ($\Delta H^{\circ}f = -67.89371 \text{ kcal/mol}$) والمحتوى الحراري ($H = 2519.59008 \text{ cal/mol}$) وبسعة حرارية ($C_p = 25.0365 \text{ cal/mol}$) والانتروبي ($S = 85.0686 \text{ cal/mol}$) وقيم هذه الخواص حسبت عند درجات حرارية مختلفة (100 – 3000 K) ورسمت العلاقات البيانية لكل خاصية مع درجة الحرارة ، وكانت كافة النتائج قريبة من النتائج العملية.

المقدمة

(mL) من البيوتانول لكل (100 mL) من الماء في درجة حرارية (25°C)، اما درجة انصهاره وهو في طوره الصلب فهي (89.5°C)، ودرجة غليانه (117.73°C) وله معامل انكسار مقداره (1.3993) عند درجة حرارية (20°C) ولزوجته تساوي (3 cP) عند درجة حرارية (25°C)^[1] ويبين الشكل (1) الشكل الجزيئي لجزيئة البيوتانول والتي رسمت عن طريق البرنامج HyperChem.



الشكل (1) : يبين الشكل الجزيئي لجزيئة البيوتانول.

تتكون جزيئة البيوتانول من اربع ذرات من الكربون وعشر ذرات من الهيدروجين وذرة واحدة من الاوكسجين لذا فان صيغتها الجزيئية هي ($C_4H_{10}O$) والوزن الجزيئي لها هو (74.1216 g/mol) ولها انماط اهتزاز عددها 39 نمطاً ($3N-6=39$). توجد جزيئة البيوتانول في الطبيعة بصيغتين تركيبيتين حسب موقع جزيئة ال (O-H) فاما ان تكون بصيغة ($CH_3-CH_2-CH_2-CH_2-OH$) وتعرف بـ 1- Butanol او تكون بالصيغة ($CH_3-CH_2-CH(OH)-CH_3$) وتعرف بـ 2-

(Butanol) وفي هذا البحث سيتم التطرق الى البيوتانول من النوع (1-Butanol) فقط .

يمكن الحصول على البيوتانول في الحالات الثلاث الاتية وهي الغازية والسائلة والصلبة ولكنه في حالته الاعتيادية يكون في الطور السائل وعديم اللون. ان للبيوتانول وهو في طور السائل وفي درجة حرارية (20°C) كثافة نسبية مقدارها (0.8098 g/cm^3)، وله قابلية ذوبان في الماء بمقدار (9.1

يعتبر العدد الكلي لمستويات الطاقة لأي جزيئه كبير جداً وعليه فإن الطاقة تقسم الى طاقات مختلفه حسب المعادله الاتية [6]:

$$E_{total}=E_T+E_N+E_R+E_V+E_e \dots\dots\dots (1)$$

حيث ان E_T : يمثل الطاقه الانتقالية ، E_N : الطاقة النووية ، E_R : الطاقة الدورانية ، E_V : الطاقة الاهتزازية، E_e : الطاقة الالكترونية.

ان محور اهتمامنا في هذا البحث هو الطاقة الاهتزازية التي تمثل طاقة الجهد والطاقة الحركية التي تمتلكها الجزيئات بسبب حركتها الاهتزازية حيث تكون هذه الطاقة مكممة. ان اهتزاز الجزيئة يكون تحت تأثير الأصرة من ناحية التمدد والنقلص والذي يشبه الى حد كبير سلوك نابض الذي يخضع لقانون هوك (Hook's law) ولذلك يدعى هذا النموذج بنموذج المتذبذب التوافقي البسيط Simple Harmonic Oscillator. ويعد نموذج المهتز التوافقي نموذجاً تقريبياً حيث يمكن رسم العلاقة بين طاقة الجهد للاهتزاز وبين المسافة البينية حسب المعادلة الاتية [6]:

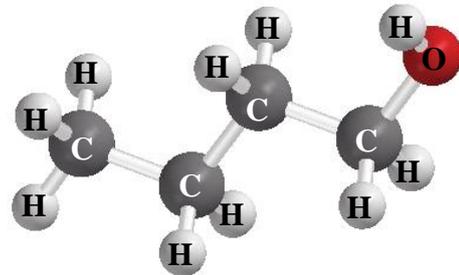
$$U=1/2K(r-re)^2 \dots\dots\dots (2)$$

حيث تمثل U : طاقة الجهد ، k : ثابت القوة ، r : المسافة بين الذرتين ، re : مسافة الاتزان بين الذرتين. ان اهتزاز الجزيئات في الحقيقه ليس اهتزازا توافقيا بسيطا فعند تقلص الأصره فإن الذرات تقترب من بعضها وتزداد الطاقه كي تتمكن الذرات من القيام بشغل مقابل قوى التنافر القويه والقصيرة المدى كما ان مط الأصرة يعني ابتعاد الذرات عن بعضها مما يتطلب طاقه أيضا (أقل من الطاقة عند النقلص) الى ان تصل الى نقطه تفقد عندها الأواصر مرونتها فتتفكك الى ذرات حيث تصبح الطاقة غير مكممة. ويمكن كتابة معادلة الطاقة للمتذبذب اللاتوافقي المهتز بأستخدام معادلة شرويدنكر Schrödinger ومعادلة الجهد اللاتوافقي لمورس للحصول على مستويات الطاقة الاهتزازية بدلالة العدد الكمي الاهتزازي (v) وكالاتي [7]:

$$E_v = (V+1/2)v + (V+1/2)^2 v \chi e - (V+1/2)^2 v \chi e^2 \dots (3)$$

حيث أن v : هو العدد الكمي الاهتزازي ويأخذ قيم صحيحة = 0,1,2,3 و χe : ثابت اللاتوافقية ويكون ذو قيمة موجبة

ان من المخاطر الرئيسية للبيوتانول هي انه مادة قابلة للاشتعال وان درجة اشتعاله هي $(37^\circ C)$. يُعرف البيوتانول بأنه وقود حيوي بديل للغازولين يسهل خزنه وله محتوى طاقة مشابه لطاقة الغازولين. وتسعى الشركات الانكليزية المصنعة له ان تطرحه الى الأسواق الإنكليزية لاستقراء وجهات نظر المستخدمين حول كفاءته. يُحصّر البيوتانول كما يُحصّر الكحول الايثيلي من تخمير السكر بوجود أنواع من البكتيريا أو الخمائر. ويشتق سكر البيوتانول عادة من الذرة أو الحنطة أو قصب السكر، والمعروف أن إنتاج البيوتانول ليس بسهولة إنتاج الكحول لأنه أكثر سُميّة للميكروبات المخمرة من رديفه الكحول الايثيلي. بالإضافة الى أن كمية إنتاجه تقل كثيراً عن الكحول الايثيلي. (من 1 الى 6) لذا، عملت الشرك ات المصنعة له على إنتاج ميكروبات مُخمرة مهندسة وراثياً لإنتاج كميات أكثر من البيوتانول ذات كفاءة احتراق عالية. يستعمل البيوتانول في الصناعات الكيماوية ومذيب للكثير من المواد والمركبات العضوية التي لا تذوب في الماء ويدخل الكحول البيوتيلي في تحضير العطور ومذيبات الأصباغ. وللبيوتانول خواص كيميائية أفضل من خواص الكحولات الأخرى لأنه لا يتسبب بتآكل خزانات الحفظ أو أنابيبها، ويمكن إضافته الى الغازولين لقله ضغط بخاره الذي يقلل تبخره ويختزل الأذخنة الناتجة عن احتراقه. ويعني محتواه العالي من الطاقة أنه يوفر وقوداً اقتصادياً أكثر من بقية أنواع الوقود الحيوي المتاح. ونتيجة لهذه المواصفات المثلى قررت شركة بوينغ للطائرات (الأميركية) استخدامه في تصنيع وقود بديل من الكيروسين للطائرات النفاثة [5].



الشكل (2): يبين الشكل الجزيئي لجزيئة البيوتانول [2].

dQ ومن المعروف ان السعة الحرارية يمكن كتابتها بالشكل الآتي :

$$R=C_p-C_v \dots \dots \dots (7)$$

حيث تمثل R : الثابت العام للغازات ، C_p : السعة الحرارية بثبوت الضغط ، C_v : السعة الحرارية بثبوت الحجم . ان السعة الحرارية بثبوت الضغط للجزيئات غير الخطية متعددة الذرات تعطى بالعلاقة [12]:

$$C_p=(3/2)R+(3N-5)R \dots \dots \dots (8)$$

كذلك المحتوى الحراري H هي من الدوال المهمة حيث يعطي العلاقة الآتية :

$$H=U+PV \dots \dots \dots (9)$$

حيث ان H : المحتوى الحراري ، U : الطاقة الداخلية ، P : الضغط ، V : الحجم

ويعد المحتوى الحراري دالة للضغط ودرجة الحرارة

والطاقة الداخلية لجميع المواد ما عدا الغازات التي تسلك

سلوكاً مثالياً او قريباً من هذا السلوك. اما حرارة التكوين او انثالبي التكوين (Heat of formation) فتعرف بأنها حرارة التكوين القياسية (ΔH^0_f) وهي التغير في المحتوى الحراري عند تكون مول واحد من المادة من عناصرها الاساسية في الظروف القياسية. وهي صفة مميزة تتعلق باستقرار المركب فاذا كانت موجبة كبيرة فالمركب غير مستقر واذا كانت سالبة فالمركب مستقر.

من الدوال الاخرى الانتروبي (S) Entropy والذي

يعتبر مقياس للعشوائية الناتجة للمركب بسبب التغير في درجات الحرارة حيث يعطى بالعلاقة :

$$dS=dQ_R/T \dots \dots \dots (10)$$

حيث ان dS : التغير في الانتروبي ، T : درجة الحرارة.

2. طرائق الحسابات

اجريت الحسابات الرياضية باستخدام ثلاثة برامج حسابية تنتمي الى برامجيات النمذجة الجزيئية ، وهي برامج PC Model وبرامج WinMopac 7.21 وبرامج Hyperchem

صغيرة جداً. أن طاقة التفكك تمثل الفرق مابين طاقة الجزيئة في حالة الأتزان الافتراضية وطاقة الذرات المنفصلة عن بعضها. أن أطيايف الحركة الاهتزازية للجزيئات متعددة الذرات تكون معقدة حيث يمكن وصف حركتها الاهتزازية بدلالة حركات بسيطة تسمى أنماط الاهتزاز الاعتيادية (Normal modes of Vibration) والتي تخضع للعلاقة الآتية [7,4]:

$$3N-6 \dots \dots \dots (4)$$

حيث تمثل N : تمثل عدد الذرات للجزيئات غير خطية.

أن أطيايف الاهتزاز تلاحظ عملياً بشكل أطيايف تحت

الحمراء IR أو أطيايف رامان Raman spectra إلا إن المنشأ الفيزيائي لهذين النوعين من الأطيايف يكون مختلفاً [8]. أن حساب تردد الاهتزاز Vibration Frequency و الإحداثيات الاعتيادية Normal Coordinates من ثوابت القوى هي الطريقة الأكثر شيوعاً من خلال المعادلة [13]:

$$\sum_{i,j}^{3N} L_j (F_{ij} - \lambda M_{ij}) \dots \dots \dots (5)$$

حيث ان $N=1,2,3,\dots$

حيث يتم حل هذه المعادلة التجريبية للحصول على

جذور المحددة λ وتقييم التردد الاهتزازي الأساسي والمتجهات (Eigenvector) تعين الأحداثيات الاعتيادية حيث أن :

F_{ij} : عنصر مصفوفة ثوابت القوى ، λ : دالة القيمة الذاتية Eigen Value ، M_{ij} : عنصر مصفوفة الكتل الذرية ، L_j : قيم معاملات الجمع. اما بالنسبة لمبادئ الديناميكية

الحرارية (الثرموداينمك) والتي تهتم بتحولات الطاقة للمادة في الفراغ الذي تحتله المادة وما يتبع ذلك من تحول في مستوى طاقته الداخلية التي هي نوع من انواع الطاقة الكامنة في النظام والتي تلعب دور في كثير من المفاهيم ومنها السعة الحرارية Heat Capacity وهي كمية الحرارة اللازمة لرفع حرارة كتلة غرام واحد من المادة درجة حرارة واحدة ووحدتها cal/k/mol ويمكن كتابة العلاقة بين الحرارة المنتقلة الى مادة ودرجة حرارتها بالشكل الآتي [10]:

$$dQ=ncdT \dots \dots \dots (6)$$

حيث تمثل dQ : كمية الحرارة ، n : عدد المولات ، c : السعة الحرارية الجزيئية ، dT : التغير في درجة الحرارة بسبب

الجهد الكهروستاتيكي وكثافة الشحنة الكلية وتوزيعها على الذرات.

3- النتائج والمناقشة

من خلال دراسة منحنى طاقة الجهد للجزيئة والذي يمثل العلاقة بين الطاقة الكلية (total energy) وبين طول الأصرة في الجزيئة. وجد إن الأصرة الفاعلة في الجزيئة هي الأصرة C - H وليس الأصرة O - H ويلاحظ ذلك من التركيب الجزيئي للجزيئة. كما حددت قيمة الطاقة في قعر المنحنى وتمثل نقطة الاتزان وقيمتها هي (- 922.75637 eV) عندما كانت طول الأصرة C - H (1.094118A°) وطول الأصرة O - H (0.943617A°) وكما موضح بالشكل (3) والذي يبدو أيضاً الأقتراب من السلوك التوافقي في مستويات الاهتزاز عند (1.6A°) للأصرة C - H و(1.8 A°) للأصرة O - H ويبدو واضحاً من خلال تأثير زيادة طول الأصرة والابتعاد عن السلوك التوافقي والاقتراب من مستويات الاهتزاز العليا بزيادة طول الأصرة C - H و O - H وتزداد الطاقة إلى أن تتفكك الجزيئة حيث كانت قيمة طاقة التفكك للأصرة C - H (1.68069 eV) و للأصرة O - H (8.69288eV) ان طاقة التفكك للجزيئة في حالة O - H هي اكبر بكثير من حالة C - H وهذا يعني ترابط اكثر واستقرار اعلى للجزيئة مع O - H. اما أنماط الاهتزاز للجزيئة والتي كان عددها تسعا وثلاثين نمطاً (3N-6=39) وباستخدام برنامج WinMopac قيست قيم الترددات معبر عنها بالعدد الموجي (cm⁻¹) وأظهرت النتائج تقارب القيم النظرية مع العملية^[9] إلى حد ما وكما موضح بالجدول (1) وبسبب التغيرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة فأن انماط اهتزاز الجزيئة وتردداتها كانت جميعها فعالة في طيف IR و Raman وكما في الشكل (4). وحسبت قيمة عزم ثنائي القطب للجزيئة وكانت (1.613 Debye) ومن خلال برنامج WinMopac 7.21 ، أضافة الى ذلك حسبت قيمة اعلى مدار جزيئي مشغول Homo وكانت قيمتها (- 11.09853eV) واقل مدار جزيئي غيرمشغول Lumo وكانت قيمتها (3-48501eV).

1-2 برامج PC Model

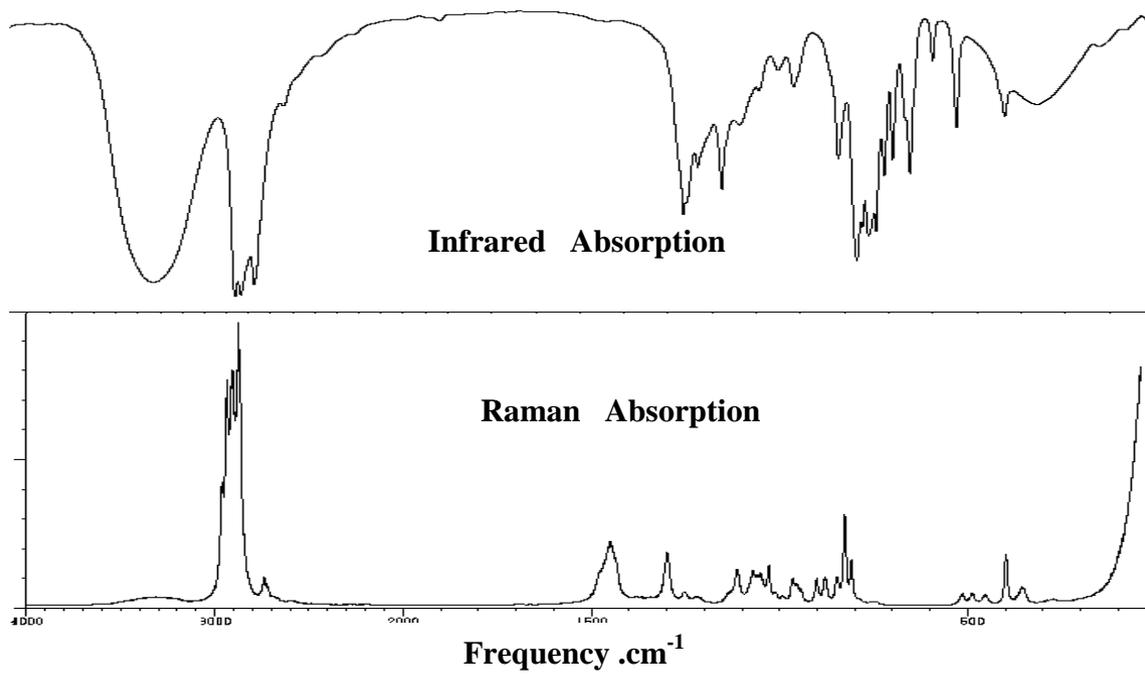
يعتمد هذا البرنامج على طرائق النمذجة الجزيئية التي تعتمد مبادئ الميكانيك الجزيئي (Molecular Mechanics) ، حيث تستخدم دوال تحليلية بسيطة $f(\mathbf{r}, \theta, \Phi)$ حيث، \mathbf{r} تمثل طول الأصرة و θ زاوية محصورة بين ثلاث ذرات في الجزيئة و Φ زاوية السطوح (زاوية محصورة بين مستويين) للحصول على افضل وضعية هندسية متوازنة للجزيئة لتكوين ملف يحتوي الاحداثيات الداخلية للوضعية التي تتم بموجبها تكوين الجزيئة هندسيا . ويتعامل هذا البرنامج مع كل انواع الجزيئات الصغيرة والكبيرة والعضوية واللاعضوية ويعتمد على اقل مقدار للطاقة الجزيئية عند اجراء الحسابات^[3].

2-2 برنامج WinMopac7.21

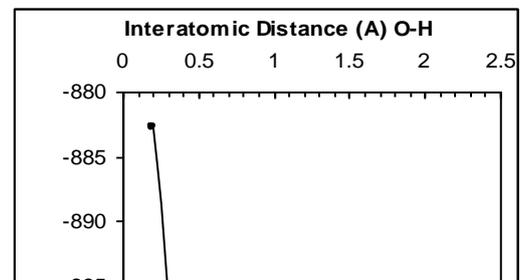
يعتبر احد تحسينات برنامج Mopac وهذا مختصر للصيغة (Empirical Molecular Orbital Program) ويعني برنامج الاوربتال الجزيئي شبه التجريبي. ويقوم هذا البرنامج بقراءة القيم الناتجة من برنامج PC Model ، وبعدها تحسب الكثير من الخصائص الجزيئية مثل الاطياف الجزيئية والكميات الترموديناميكية وثوابت القوى، ومن خلالها يرسم منحنى طاقة الجهد للجزيئة^[11].

3-2 برنامج Hyperchem

احد البرامج المتقدمة في مجال النمذجة الجزيئية وذو قدرات حسابية عالية تتعلق بالانظمة الجزيئية البسيطة والمعقدة وقادر على رسم الجزيئة ببعدين او ثلاثة ابعاد وباحداثيات خطية وكروية واسطوانية وصولاً الى افضل شكل مستقر للجزيئة. ويعمل البرنامج على حساب عزم القصور الذاتي الكلي للجزيئة والطاقة النووية الخاصة بالجزيئة وطاقة الربط الخاصة بالجزيئة وعزم ثنائي القطبية والوزن الجزيئي ووصف انماط الاهتزاز الاساسية من حيث التردد والشدة ومستوى التماثل لكل نمط واعطاء القيم الذاتية الطاقية للمدارات الجزيئية وتوضيح اعلى مدار جزيئي مشغول Homo واوطاً مدار جزيئي غير مشغول Lumo ، وكذلك استخراج اشكال الخصائص الجزيئية سواء كانت ثنائية الابعاد ام ثلاثية مثل



الشكل (4) : يوضح اطياف الامتصاص لجزيئة البيوتانول $C_4H_{10}O$ [9].



-913
-914
-915
-916

4-الخواص الحرارية (الثيرموديناميكية)

حسب بعض الخصائص الحرارية المتعلقة بجزيئية

البيوتانول كحرارة التكوين (Heat of Formation)

والانتروبي (Entropy) والسعة الحرارية (Heat

Capacity) والمحتوى الحراري (Enthalpy) باستخدام

جدول (1)

البيوتانول $C_4H_{10}O$ العملية مع القيم المحسوبة.

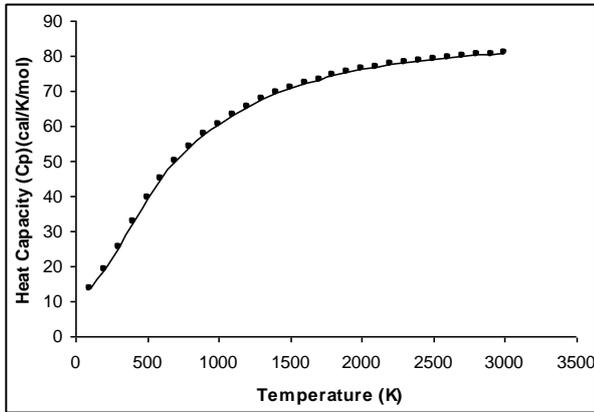
Normal Modes	Wave No: $\nu(cm^{-1})$ calculation	Wavelength (nm) calculation	Wave N $\nu(cm^{-1})$ Exp[9]
1	64.00	156250	399
2	115.05	86918.7	665
3	201.30	49677.1	670
4	271.99	36766.1	738
5	357.05	28007.3	847

برنامج WinMopac 7.21 وبطريقة MNDO-PM3 رسمت العلاقات البيانية بين هذه الخصائص الحرارية ودرجة الحرارة وكما يأتي :

الشكل (6) : يبين العلاقة بين المحتوى الحراري (H) ودرجة الحرارة (K).

3-4- السعة الحرارية (Cp)

وهي دالة لدرجة الحرارة تتناسب طردياً معها فعندما تزداد درجة الحرارة يزداد عدد الجزيئات في مستوى الطاقة الاهتزازية العليا وتزداد السعة الحرارية لكل هيئة اهتزاز . وكانت قيمة السعة الحرارية بثبوت الضغط وعند درجة حرارة 298K وضغط 1atm (25.0365 cal/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (25.86 cal/mol) [8]. كما حسبت السعة الحرارية ولقيم مختلفة من درجات الحرارة (100-3000K) والشكل (7) يوضح التناسب الطردي بينهما في الدرجات الحرارة وينسب مختلفة ، حيث يلاحظ ان المنحني يميل نحو الاستقرار عند درجات الحرارة العالية.



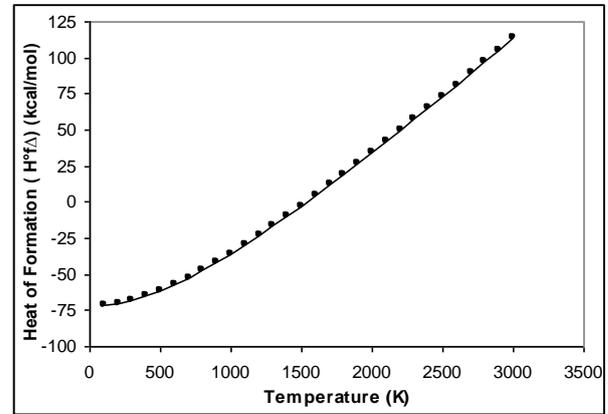
الشكل (7) : يبين العلاقة بين السعة الحرارية (Cp) ودرجة الحرارة (K).

4-4- الانتروبي (S)

يصف الانتروبي التوزيع العشوائي واللانظام النسبي للجزيئات المكونة للنظام .حسبت قيمة الانتروبي عند درجة الحرارة القياسية 298K وكانت قيمتها (85.0686 cal/mol) وهي قريبة من القيمة العملية (86.4696 cal/mol) [8] وحسبت الانتروبي لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100-

1-4- حساب حرارة التكوين القياسية (ΔH_f°)

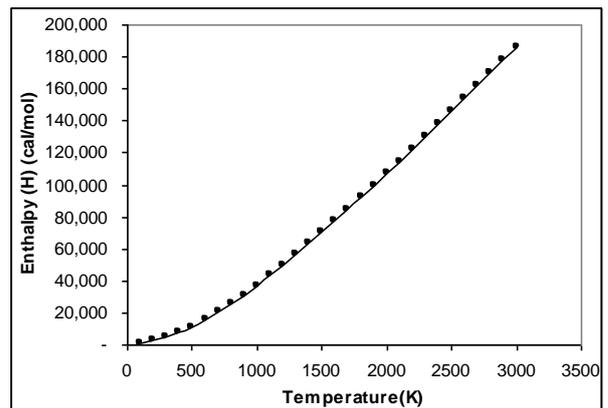
حسبت حرارة التكوين القياسية عند درجة حرارة 298K وضغط 1 atm وكانت تساوي (-67.89371kcal/mol) وهي قريبة من القيمة العملية وكانت (-65.65 kcal/mol) [8] وكذلك حسبت حرارة التكوين لقيم مختلفة من درجات الحرارة (100-3000 K) ورسمت العلاقة بين حرارة التكوين ودرجة الحرارة كما في الشكل (5) الذي يبين التناسب الطردي بينهما .



الشكل (5) : يبين العلاقة بين حرارة التكوين (ΔH_f°) ودرجة الحرارة (K).

2-4- حساب المحتوى الحراري (H)

وهي دالة للضغط ودرجة الحرارة وللطاقة الداخلية وهي ناتجة من حاصل جمع الطاقة الداخلية للنظام U مع الطاقة الخارجية له PV ويمثل المحتوى الحراري للنظام، ولا يمكن إيجاد القيم التجريبية لانتالبية المواد ، ولكن يمكن ايجاد قيم التغير في هذه الانتالبيات ، وحسب المحتوى الحراري لدرجات حرارة مختلفة (100-3000K) والشكل (6) يبين ان التغير بالمحتوى الحراري يزداد كلما زادت درجة الحرارة .



الطاقات العالية انتقالات الكترونية. كذلك فان الزيادة في قيم الانتروبي بزيادة درجة الحرارة يعود الى الزيادة في الانتشار الطاقى المرتبط بالطاقات الدورانية والاهتزازية. اما بالنسبة لحرارة التكوين فان القيم السالبة تدل على استقرارية الجزيئة . ان انماط اهتزاز الجزيئة وتردداتها كانت جميعها فعالة في طيف (IR, Raman) بسبب التغيرات في الاستقطابية وعزم ثنائي القطب للجزيئة وبمدى تردد ما بين (64-3884) cm^{-1} .

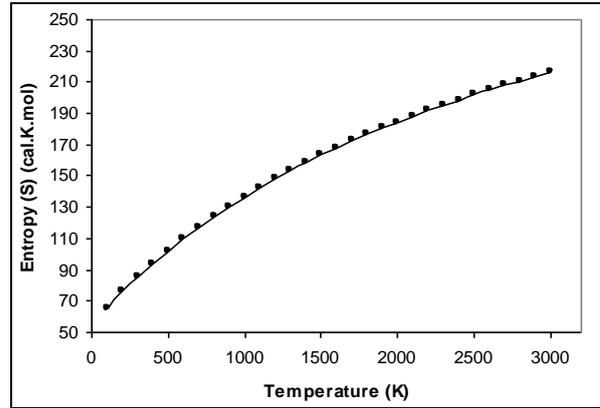
References

- [1] <http://www.answers.com/topic/butanol?cat=technology>
- [2] <http://ehs.fullerton.edu/Safety4Students/MSDS/1butanol/c4h10o>
- [3] Ami Lakdawala, Minmin Wang, Neysa Nevins, Dennis C. Liotta, Danuta Rusinska Roszak, Marek Lozynski and James P. Snyder, BMC Chem. Biol. 1:2 (2001).
- [4] A. R. Mckellar "Molecular Spectroscopy", National Research Council NRC, Canada (1999).
- [5] <http://www.almustaqbal.com.lb/nawafez.aspx?StoryID=275503>
- [6] Banwell C. N., "fundamental of Molecular Spectroscopy", Mc Graw-Hill Company (1983).
- [7] B. Schradem, "Infrared and Raman Spectroscopy", VCH Publishers Inc. New York (1995).
- [8] <http://garfield.chem.elte.hu/burcat/hf.doc>
- [9] http://riodb01.ibase.aist.go.jp/sdbs/cgi-bin/cre_index.cgi?lang=eng
- [10] J. M. Smith and H. C. Van Ness, "Introduction to Engineering Thermodynamic", Mc Graw-Hill kogausha, Ltd. (1975).

Abstract

By using the programs WinMopac and HyperChem we have studied the spectroscopy and thermodynamic properties of 1-Butanol molecule $\text{C}_4\text{H}_{10}\text{O}$, Also, the study included the plot of molecule potential energy curve for C-H bond and O-H bond by changing the bond length C-H and O-H, then the calculation of the spectral dissociation energy which was ($\text{De}=1.68069 \text{ ev}$) for C-H and ($\text{De}=8.69288$

3000K) والشكل (8) يبين العلاقة الطردية بين الانتروبي ودرجة الحرارة .



الشكل (8) : يبين العلاقة بين الانتروبي (s) ودرجة الحرارة (K).

الاستنتاجات

ان تردد اهتزازات المط والانحناء يعتمد بصورة كبيرة على كتل الذرات المهتزة حيث كلما كانت الذرات خفيفة الوزن كلما كانت اهتزازاتها كبيرة حسب العلاقة :

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

حيث ν التردد، k ثابت القوة، μ كتلة الذرات المهتزة اما بالنسبة للخواص الحرارية فقد تم حسابها عند درجة حرارة الغرفة 298K فكانت بالنسبة لحرارة التكوين

$\Delta H^{\circ}_f = -67.89371 \text{ kcal/mol}$ والمحتوى الحراري ($H = 2519.59008 \text{ cal/mol}$) ويسعه حرارية ($C_p = 25.0365 \text{ cal/mol}$) والانتروبي ($S = 85.0686 \text{ cal/mol}$) وقيم هذه الخواص حسبت عند درجات حرارية مختلفة (100 - 3000K) ورسمت العلاقات البيانية لكل خاصية مع درجة الحرارة، وكانت كافة النتائج قريبة الى حد ما من النتائج

العملية. ولاحظنا التناسب الطردى لكل من ΔH°_f ، C_p ، H ، S ، مع درجة الحرارة وتفسير ذلك حسب ميكانيك الكم، حيث ان الطاقات الحرارية الناشئة عن كل من الحركة الانتقالية والحركة الدورانية والحركة الاهتزازية للجزيئة هي طاقات مكتمة وتتناسب جميعها طرديا مع درجة الحرارة ، ففي درجة حرارة الغرفة واعلى بقليل يساهم كل من الحركة الدورانية والانتقالية في قيم الخواص اعلاه، اما في درجات الحرارية العالية فان الحركة الالكترونية تلعب دورا مهما اذ تحدث

ev) for O-H, studied the vibration modes of $C_4H_{10}O$ and frequency were active in (Raman & IR) spectra due to variable in polarization and dipole moment of molecule with frequency range between $(64-3884)cm^{-1}$. The Value of dipole moment of molecule (1.613 Debye), Orbital energy Homo (-11.09853 ev), and for Lumo (3.48501 ev).

Thermodynamic properties has been calculated at room temperature 298K for heat of formation ($\Delta H^{\circ}f=-67.89371$ kcal/mol), enthalpy ($H=2519.59008$ cal/mol), heat capacity ($C_p=25.0365$ cal/mol) and entropy ($S=85.0686$ cal/mol), The values of these function have been calculated at thermal range (100, 3000)K . Data relation for each property has been drawn with temperature and all results were in a good agreement with experimental results.