**عنوان الرسالة** :**دراسة الثبات البنائي وتحليل الأطياف الاهتزازية لبعض الكيتينات بواسطة الطرق الحاسوبية.**

**التخصص** :**كيمياء فيزيائية.**

**التاريخ** : **صفر ١٤٢١ ــ مايو ٢٠٠٠.**


تم دراسة الثبات البنائي وحساب حاجز الطاقة لبعض الكيتينات بواسطة حسابات ab initio النظرية، واستخدمت المجموعة الأساسية المطورة 6-311++G** عند مستوى DFT-B3LYP من الحسابات، وأُجريت كذلك الحسابات المثالية للطاقة لتحديد طول الروابط وقيمة الزوايا الجزيئية في الأشكال البنائية عند الحالة الأرضية المستقرة وعند الحالة الانتقالية، لقد وُجد في المركبات الكيتينية التي تتضمن خصيصة التناوب في روابطها الجزيئية أن الشكل البنائي المستوي s-*cis* و s-*trans* هو الأفضل حرارياً مع حاجز عالٍ للطاقة اللازمة للانتقال من أحد الشكلين المستويين إلى الآخر، وحينما تُقارن حواجز الدوران لتلك المركبات الكيتينية المسطّحة بنظائرها الأيسوسياناتية تبيَّن أن هناك اختلافاً كبيراً يتمثل في انحدار ملموس في حاجز الدوران للمركبات الأيسوسياناتية، و أظهرت الحسابات النظرية كذلك أن الشكل البنائي *cis* هو الأكثر احتمالاً للمركبين ثلاثي فلورو ميثيل كيتين وثنائي فلورو ميثيل كيتين مع وجود الشكل البنائي الأقل احتمالاً *gauche* في مشتقة ثنائي الفلورو فقط، أما في حالة وجود ذرة فلور أو كلور واحدة في الهالوميثيل كيتين فقد وجد أن الشكل البنائي *gauche* فقط هو السائد، وفي هذه المجموعة من المركبات يُرجّح أنه يوجد أكثر من شكل من القوى تؤثر على ثباتها؛ كقوة التجاذب الكهروستاتيكية و الإعاقة الفراغية بين ذرات الجزيء الواحد، بالإضافة

إلى ما سبق فقد تم حساب الأطياف الاهتزازية لكل المركبات التي تحت الدراسة وتم تحديد جميع الصيغ الاهتزازية بناءً على القيم المحسوبة لتوزيع الطاقة الكامنة عبر إحداثيات التناظر في هذه المركبات ؛ والمقارنة مع النتائج العملية لمركبات مماثلة أو شبيهة، ومما يجدر ذكره أن النتائج النـــــظرية عند مـــستوى DFT-B3LYP مـــن الحسابات أعطت توافقاً جيداً مع النتائج التجريبية.