بسم الله الرحمن الرحيم

مبادئ التحليل الطيفي الجزيئي

FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY

الجزء الأول

كولن ن. بانويل
Colin N. Banwell
تيزا فرنسا

أليان م. ماكاش
Elaine M. McCash
جامعة يورك – قسم الكيمياء

ترجمة
أ. د. عادل عباس الأزهري
قسم الكيمياء – كلية العلوم
جامعة الملك سعود

النشر العلمي والمطابع - جامعة الملك سعود
ص.ب ٦٨٩٥٣ - الرياض ١١٥٣٧ - المملكة العربية السعودية

ح جامعة الملك سعود، ١٤٣٠هـ (٢٠٠٩م)

هذه ترجمة عربية مصرح بها من مركز الترجمة بالجامعة لكتاب:

FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY
COLIN N. BANWELL AND ELAINE M. McCASH

© 1995 McGraw-Hill International (UK) Limited

فهرسة مكتبة الملك فهد الوطنية أثناء النشر

بانويل ، كولن ن

مبادئ التحليل الطيفي الجزيئي. /كولن ن بانويل ، اليان م ماكاش ؛ عادل عباس الأزهري – الرياض، ١٤٣٠هـ.

٢مج

٢١٦ص؛ ١٧سم × ٢٤سم

ردمك : ٦-٠٥٥٣-٥٥-٦٠٣-٩٧٨ (مجموعة)

٣-٠٥٥٤-٥٥-٦٠٣-٩٧٨(ج١)

١- التحليل الطيفي ٢- المركبات الكيميائية أ.ماكاش، اليان م (مؤلف مشارك) ب الازهري ، عادل عباس (مؤلف مشارك) ج. العنوان

ديوي ٥٤٧,٣٤٦ ١٤٣٠/٦٨٥٣

رقم الإيداع : ١٤٣٠/٦٨٥٣

ردمك : ٦-٠٥٥٣-٥٥-٦٠٣-٩٧٨ (مجموعة)

٣-٠٥٥٤-٥٥-٦٠٣-٩٧٨ (ج١)

حكمت هذا الكتاب لجنة متخصصة، شكلها المجلس العلمي بالجامعة، وقد وافق المجلس العلمي على نشره - بعد اطلاعه على تقارير المحكمين - في اجتماعه التاسع عشر للعام الدراسي ١٤٢٨/١٤٢٩هـ، الذي عقد بتاريخ ١٤٢٩/٦/١٨هـ، الموافق٢٠٠٨/٦/٢٢م.

النشر العلمي والمطابع ١٤٣٠هـ

مقدمة المترجم

الحمد لله نحمده ونستعينه ونستهديه ونستغفره ونعوذ به من شرور أنفسنا ومن سيئات أعمالنا من يهده الله فهو المهتدي ومن يضلل فلن تجد له ولياً مرشداً. والصلاة والسلام على خير عباده من خلقه سيدنا محمد صلى الله عليه وعلى آله وصحبه وسلم. وبعد ؛ فقد حثنا الإسلام على تعلم العلوم وتعليمه، حيث قال الله سبحانه وتعالى في كتابه العزيز((ٱقْرَأْ بِٱسْمِ رَبِّكَ ٱلَّذِى خَلَقَ ﴿١﴾ خَلَقَ ٱلْإِنسَـٰنَ مِنْ عَلَقٍ ﴿٢﴾ ٱقْرَأْ وَرَبُّكَ ٱلْأَكْرَمُ ﴿٣﴾ ٱلَّذِى عَلَّمَ بِٱلْقَلَمِ ﴿٤﴾ عَلَّمَ ٱلْإِنسَـٰنَ مَا لَمْ يَعْلَمْ ﴿٥﴾)) (سورة العلق الآية ١-٥). وفي الحديث " من سلك طريقاً يطلب فيه علماً سلك الله به طريقاً من طرق الجنة، وإن الملائكة لتضع أجنحتها لطالب العلم رضا بما يصنع، وإن العالم ليستغفر له من في السماوات ومن في الأرض، والحيتان في جوف الماء، وإن فضل العالم على العابد كفضل القمر ليلة البدر على سائر الكواكب، وإن العلماء ورثة الأنبياء، وإن الأنبياء لم يورثوا ديناراً ولا درهماً، إنما ورثوا العلم، فمن أخذه أخذ بحظ وافر".

قد قمت بفضل الله سبحانه ومنه علي، وبغير حول مني ولا قوة وبمشاركة الزميل الفاضل سعادة الدكتور عبد الله بن علي القحطاني، بتأليف كتاب "أسس كيمياء الكم" الجزء الأول والثاني لتغطية منهجي كيمياء الكم ٢٢٠ كيم و ٣٢٠ كيم. وقد اخترنا تأليف هذا الكتاب نظراً للصعوبة، البالغة، لكتب كيمياء الكم. وقد حاولنا

بقدر الإمكان تبسيط هذا المنهج الصعب وأرجو من الله أن نكون وفقنا في هذا. ثم قمت بتأليف كتاب "مسائل وحلول في مبادئ كيمياء الكم" الجزء الأول والثاني وذلك لحل بعض المسائل المختارة من كتاب أسس كيمياء الكم. وقد حاولت في هذا الكتاب تغطية أكبر قدر ممكن من المسائل في مادة كيمياء الكم على مستوى الكتب المكتوبة باللغة الانجليزية حتى يتوفر للطالب في الدول العربية مستوى من التعليم على الأقل مساوي لذلك في الدول الأوربية والأمريكية. وقد حاولت في هذا الكتاب شرح كيفية حل العديد من المسائل المعقدة بحيث تبدو كأنها بسيطة وذلك في محاولة مني لتبسيط حل هذه المسائل ولمساعدة الطالب في فهم منهج كيمياء الكم بأفضل الطرق.

منهج الطيف من المواد الدراسية المهمة جداً. فهو من ناحية يعد تطبيقاً لمادة كيمياء الكم. فالطالب الدارس للمادة يتعرض لكمية غير عادية من المبادئ التي قد تعد غريبة مثل معادلة شرودينجر وفروض نظرية الكم وأيضاً يتعرض الطالب لكمية غير عادية من الرياضيات. وقد يتساءل الطالب ما هي فائدة منهج كيمياء الكم؟ والجواب يكون باختصار هو أننا لا نستطيع فهم الأطياف بدون فهمنا ودراستنا لكيمياء الكم. فمن الواضح أننا لا نستطيع أن نرى ما يحدث داخل الذرات والجزيئات ولكن الطيف هو أعيننا التي يمكن بها أن نرى ما يحدث داخل الذرات والجزيئات. لذلك فهم الأطياف هو من الأشياء الأساسية.

وبعكس منهج كيمياء الكم الذي كتبنا فيه الكتب التي ذكرت من قبل وذلك لصعوبة الكتب المتوفرة، ففي منهج الطيف اخترت على الأحرى هذا الكتاب، كتاب "مبادئ التحليل الطيفي الجزيئي FUNDAMENTALS OF MOLECULAR SPECTROSCOPY" تأليف كولن ن. بانويل Colin N. Banwell، وذلك لأن الكتاب له فائدة غير عادية ومهمة في أنه " **يقدم كمية كبيرة جداً من المعلومات بطريقة**

سهلة ومختصرة". وهذه ميزة مهمة جداً وغير عادية في هذا الكتاب. ولذلك قررت أنه من الأفضل ترجمة هذا الكتاب لكونه سيعود بفائدة عظيمة على طلاب مادة الطيف.

أود أن أضيف هنا أنه، على الرغم أن الكتاب يتعرض للكثير ولأهم أنوع الطيف، فإن هناك أيضاً العديد من أنواع الطيف التي لم تذكر في الكتاب . كذلك يجب علينا أن نشدد جيداً على تطبيقات الطيف التي لا يمكن حصرها بسهولة. فالطيف مهم جداً لجميع أنواع الكيمياء، العضوية، والتحليلية، والفيزيائية، وغير العضوية. وحتى يكون الطالب على دراية، فمثلاً علم الفمتوثانية الذي قد استحدث من حوالي عقدين من الزمان يمكن لنا لأول مرة دراسة ما يحدث فعلاً أثناء التفاعلات الكيميائية والتركيبات الجزيئية العابرة transient molecular structures وذلك باستخدام انحراف الإلكترون فائق السرعة ultrafast electron diffraction.

أود أن اتخذ هذه الفرصة لشكر مركز الترجمة بجامعة الملك سعود على ما يقوم به من جهد لنقل العلم للمتحدثين باللغة العربية– لغة القرآن وكذلك المراجعين لهذا الكتاب. وأود أن أوجه شكري البالغ لسعادة الدكتور جمال الشرقاوي الأستاذ المشارك في قسم الكيمياء بكلية العلوم بجامعة الملك سعود على المجهود الذي لولاه ما ظهر الكتاب بهذا المظهر المشرف وتصحيحاته المهمة لترجمتي المتواضعة.

وأخيراً أرجو من الله أن يعود هذا الكتاب بالفائدة الكبيرة على مدرسي ودارسي مادة كيمياء الكم. وأردت بهذا الكتاب وجه الله سبحانه وتعالى وإفادت المسلمين وكل من يمكنه أن يستفيد من هذا الكتاب.

واسأل الله العزيز القدير أن ينفعنا بما علمنا ويتقبل منا صالح أعمالنا والحمد لله رب العالمين.

المترجم

مقدمة
Introduction

بعد أن تقاعدت مؤخرًا وأقمت في الجنوب–الغربي من فرنسا الهادئة والآمنة، دهشت عندما ذكرني الناشر بأنه من الواضح أن ثمانية سنوات قانونية قد مرت منذ صدور الطبعة الأخيرة لهذا الكتاب. بل والأسوأ من ذلك، لعدة سنوات كان اتصالي الوحيد مع التحليل الطيفي هو أن فرنسا تستخدم التحليل الطيفي بالرنين المغناطيسي النووي بشكل روتيني لمراقبة جودة أنتاج النبيذ، صله واهية ضعيفة ولكن مع هذا مدعاه لسروري. مع بعض الرهبة قبلت اقتراح ماكجروهيلز McGraw بإيجاد مؤلف آخر ليشاركني القيام بالعمل اللازم. مخاوفي كانت عديمة الأساس، ليس لأن الخبرة للعمل مرة أخرى مع عقول ناشئة ومتوقدة ممتع فحسب، ولكن لشعوري وتأكدي بأننا أنتجنا كتاباً أفضل بكثير. وقد أضافت زوجة المؤلف الآخر، وهي عاملة في مجال فيزياء، كانت قادرة على المشاركة بوجهات نظر مختلفة لمناقشتنا (والتي لم تصبح لحد كبير أبداً جدليه) وقد ساعدتنا كثيراً بتوضيح كتاباتنا في مواضيع عديدة.

كان التغيير الواضح في هذه الطبعة، هو إضافة فصل جديد كامل عن التحليل الطيفي للسطوح والمواد الصلبة. هذه التقنيات تتطلب أجهزة حساسة جداً، وأنه في السنوات الأخيرة فقط قد أصبح بعضهم روتينياً، وقد ذكرناها هنا لأن الموضوع قد بلغ النضج، وسيكون أكثر أهمية في المستقبل. الكثيرون يعتمدون على استعمال مصادر

ذات كثافة عالية، مثل السينيكروترون، أو تطبيق مبادئ تحويل فوريير، ولقد قدم الأخير في الطبعة الأخيرة، ولكن بما أن استعمالهم أصبح أكثر شيوعا، فقد تمت معالجة الموضوع بشكل أحسن، كما أن بعض أقسام التقنية تم مراجعتها جيداً لأخذ الطرق الحديثة في الحسبان.

العديد من أمثلة الأطياف التي تم استعملت في الكتاب قد إعيد قياسها على الأجهزة الحديثة، وذلك لتشرح حساسيتها أو تحللهم الأفضل. ولذلك إعيد رسم العديد من الرسومات مستفيدين من الحجم الكبير للطبعة الجديدة، وذلك بإضافة تفاصيل أكثر توضيحاً، واقتراحات المؤلف الآخر، والتي ربما وجد الطلبة أنه من الأسهل توجيه نقد الكتاب له، بدلاً من توجيهه مباشرةً إليَّ. إن مبادئ التحليل الطيفي لم تتغير، على أية حال، والقليل، ما عدا بعض المواد التاريخية والقديمة، قد حذفت من الطبعة السابقة. ونقل بعض الأجزاء وإضافتها إلى الفصول الجديدة لكون ذلك أكثر منطقية، ولذلك كان هناك العديد من أعادة صياغة الكتابة.

لن يجد الذين استخدموا النسخة السابقة من الكتاب تغييرًا في الفلسفة العامة للكتاب، فقد كان هدفنا تقديم كتاب مع القليل من الرياضيات، سوف يمكن الطلبة من استيعاب مبادئ التحليل الطيفي وذلك لتكوين صورة عقلية واضحة للمبادئ والعمليات التي تشكل أساس الموضوع.

وقد دمجت الكثير من الأفكار والاقتراحات لكثير من الأشخاص في هذه الطبعة والتي من المستحيل أن نشكرهم عليها بشكل منفرد، ولكن مرة أخرى، وكالعادة، نخص بالذكر Professor Sheppard of the University of East Anglia الأستاذ شيبرد من جامعة إيست آنجليا، حيث كانت تعليقاته كثيرة ونوعية ودقيقة. ولولا مساعدته، عندما كنت طالباً، لم أكن لأتمكن من التفكير منذ سنوات طويلة مضت بكتابة الطبعة

الأولى من هذا الكتاب ، وأن أياديه البيضاء دائماً كانت معي منذ ذلك الحين، وأتمنى أن تستمر طويلاً.

C. N. Banwell
Tessé

إن أحد أول الكتب التي اقتنيتها عندما كنت طالباً جامعياً، كانت الطبعة الثانية لكتاب *مبادئ التحليل الطيفي الجزيئي* لمؤلفه (كولين بانويل Colin Banwell)، إنه الكتاب الذي استخدمته بشكل دائم منذ ذلك الحين والذي اعتبره أهم مرجع عند تدريس التحليل الطيفي. وطبعاً تستطيعون تصور الدهشة، لهذا، عندما اتصل بي البروفسور شيبرد Professor Sheppard تليفونياً ليسألني إذا كنت فكرت من قبل بتأليف كتاب، والمشاركة في تأليف النسخة الرابعة. وقد أخذته السعادة بعد معرفته أن ذلك كان لأول مرة في حياتي، وقد اصبت بالوجوم التام.

من الصعب تغيير كتاب ينظر إليه المرء بأنه صديق قديم، ولكن بعد أسبوع من الاسترخاء في ربوع الريف الفرنسي، Coline وأنا كنا قيد التغيير. وقد ادت فلسفتنا المشتركة، و طريقة العمل، وشهامة المؤلف الآخر، إلى تقوية عرى علاقة عمل متميزة- وكانت فعالة عندما كنا نعمل سوياً على مكتب واحد وبنفس القدرة من القوة عندما كنا بعيدين على مسافة 600 ميل.

اعبر عن شكري وامتناني لكل الأصدقاء والزملاء الذين زودونا بالقياسات الطيفية (والأفكار والدعم المعنوي) أثناء إنتاج الطبعة الرابعة من الكتاب. وأنا مدين خاصة للبروفسور مايكل تشيستر Professor Michael Chesters من جامعة نوتنغهام Nottingham، والدكتورة الين سيدون Dr. Elaine Seddon (SERC Daresbury Laboratory) للعديد من الإيضاءات التي قدموها، وإلى طلبتي الباحثين الذين أخذوا على عاتقهم العبء الكبير وغير المتوقع منهم في هذه المرحلة من مزاولة مهنتهم. وأنا

ممتن كذلك لكل الطلبة الدارسين في جامعتي يورك وكيمبريدج والذين علموني الكثير عن التحليل الطيفي الجزئي. وأخيرا أقدم شكري لزوجة المؤلف المشارك التي كانت تزودني بالمساعدة الدمثة عند الحاجة.

E. M. McCash
York
June, 1993

المحتويات

الجزء الأول

مقدمة المترجم ..... هـ

المقدمة ..... ط

الفصل الأول: المقدمة ١

(١,١) تمثيل الإشعاع الكهرومغناطيسي ١

(١,٢) تكميم الطاقة ٥

(١,٣) مناطق الطيف ٨

(١,٤) تمثيل الأطياف ١٤

(١,٥) العناصر الأساسية للتحليل الطيفي العملي ٢١

(١,٦) إشارة- إلى- شوشرة: قوة التحلل ٢٤

(١,٧) عرض وكثافة الخطوط الطيفية ٢٧

(١,٨)التحليل الطيفي بتحويل فوريير ٣٢

(١,٩) تحسين الأطياف: حساب المتوسط بالحاسوب ٤٢

(١,١٠) الإشعاع المستحث: الليزر ٤٤

(١,١١) إشعاع السينيكروترون ٤٩

(١,١٢) المراجع ٥١

(١,١٣) المسائل ٥١
الفصل الثاني : طيف الميكروويف ٥٣
(٢,١) دوران الجزيئات ٥٣
(٢,٢) الأطياف الدورانية ٥٦
(٢,٣) الجزيئات ثنائية الذرة ٥٧
(٢,٤) الجزيئات متعددة الذرة ٧٨
(٢,٥) التقنيات وتطوير الآلات وصنعها ٨٥
(٢,٦) التحليل الكيميائي باستخدام التحليل الطيفي بالميكروويف ٨٧
(٢,٧) فرن الميكروويف ٨٨
(٢,٨) المراجع ٨٩
(٢,٩) المسائل ٩٠
الفصل الثالث: طيف الأشعة تحت-الحمراء ٩٣
(٣,١) الجزيء ثنائي الذرة المهتز ٩٣
(٣,٢) الدوار المهتز ثنائي الذرة ١٠٦
(٣,٣) الطيف الاهتزازي-الدوراني لأول أكسيد الكربون ١١٢
(٣,٤) انهيار تقريب بورن-أوبنهايمر: تفاعل الدورانات والاهتزازات ١١٦
(٣,٥) الاهتزاز للجزيئات متعددة الذرة ١١٩
(٣,٦) تأثير الدوران على أطياف الجزيئات متعددة الذرة ١٢٧
(٣,٧) التحليل بتقنية تحت-الحمراء ١٣٨
(٣,٨) التقنيات وتطوير الآلات وصنعها ١٤٧
(٣,٩) المراجع ١٦٦

(٣,١٠) المسائل ١٦٦
الفصل الرابع: طيف الرامان ١٦٩
(٤,١) المقدمة ١٦٩
(٤,٢) أطياف رامان الدورانية النقية ١٧٨
(٤,٣) أطياف رامان الاهتزازية ١٨٤
(٤,٤) استقطاب الضوء وتأثير رامان ١٩٧
(٤,٥) تعين التركيب من التحليل الطيفي بالرامان وتحت-الحمراء ٢٠٣
(٤,٦) التقنية وآلات القياس ٢٠٧
(٤,٧) التحليل الطيفي بالرمان في قريب تحت الحمراء – FT ٢١٢
(٤,٨) المراجع ٢١٤
(٤,٩) المسائل ٢١٤

الجزء الثاني

الفصل الخامس: الطيف الإلكتروني للذرات ٢١٧
(٥,١) تركيب الذرات ٢١٧
(٥,٢) العزم الزاوي الإلكتروني ٢٢٨
(٥,٣) الذرات عديدة-الإلكترون ٢٣٨
(٥,٤) العزم الزاوي للذرات عديدة-الإلكترونات ٢٤٣
(٥,٥) التحليل الطيفي بالفوتوإلكترون ٢٦٢
(٥,٦) تأثير زيمن ٢٧٠
(٥,٧) تأثير المغزل النووي ٢٧٦
(٥,٨) الخاتمة ٢٧٧
(٥,٩) المراجع ٢٧٧

(٥,١٠) المسائل ٢٧٧
الفصل السادس: طيف التحليل الإلكتروني للجزيئات ٢٧٩
(٦,١) الطيف الإلكتروني للجزيئات ثنائية الذرة ٢٧٩
(٦,٢) التركيب الإلكتروني للجزيئات ثنائية الذرة ٣٠٥
(٦,٣) الطيف الإلكتروني للجزيئات متعددة الذرة ٣٢٣
(٦,٤) التقنيات وتطوير الآلات وصنعها ٣٣٧
(٦,٥) التحليل الضوئي بالفوتوإلكترون الجزئي ٣٣٩
(٦,٦)المراجع ٣٤٥
(٦,٧) المسائل ٣٤٥
الفصل السابع: طيف التحليل بالرنين المغزلي ٣٤٩
(٧,١) المغزل والمجال المطبق ٣٥٠
(٧,٢) التحليل الطيفي بالرنين المغناطيسي النووي: نوى الهيدروجين ٣٧٦
(٧,٣) التحليل الطيفي بالرنين المغناطيسي النووي: النوى عدا الهيدروجين ٤١١
(٧,٤) التقنيات وتطوير الآلات وصنعها ٤٢٤
(٧,٥) التحليل الطيفي بالرنين المغزلي الإلكتروني ٤٢٨
(٧,٦) المراجع ٤٤٩
(٧,٧) المسائل ٤٤٩
الفصل الثامن: التحليلات الطيفية للحالات الصلبة والسطوح ٤٥٣
(٨,١) الدراسات الاهتزازية للسطوح ٤٥٤
(٨,٢) التحاليل الطيفية الإلكترونية للسطوح ٤٧٢
(٨,٣) الرنين المغناطيسي النووي ٤٨٠
(٨,٤) الطرق التركيبية: EXAFS و SEXAFS ٤٩٢

(٨,٥) المراجع ٤٩٦
(٨,٦) المسائل ٤٩٦
الفصل التاسع: التحليل الطيفي بالموسبور ٤٩٩
(٩,١) مبادئ تحليل موسبور الطيفي..... ٤٩٩
(٩,٢) تطبيقات التحليل الطيفي بالموسبور ٥٠٥
(٩,٣) المراجع ٥١٢
(٩,٤) المسائل ٥١٢
المراجع العامة ٥١٣
حلول المسائل ٥١٥
كشاف الموضوعات..... ٥٢٩