

## حساب الخصائص الحرارية لجزيئة SeI باستخدام طريقة PM3 شبه التجريبية

م.م نغم محي التميمي  
جامعة كربلاء/ كلية العلوم  
قسم الفيزياء

### الخلاصة:

تم في هذا البحث دراسة بعض الخصائص الحرارية لجزيئة يوديد السيلينيوم (SeI) الخطية في منطقة الاشعة تحت الحمراء المتوسطة باستخدام طريقة PM3 شبه التجريبية تحت شرط الحصول على التركيب المستقر للجزيئة الذي تحصل فيه الجزيئة على اقل قيمة للطاقة الكلية . وقد تراوح المدى لدرجات الحرارة التي حسبت ضمنها الخصائص الحرارية من (100-1000 K°) والتي اشتملت على الطورين السائل والغازي .

### Abstract :

In the present work some thermodynamic properties for the linear (SeI) molecule , have been studied in the Mid IR-region using the semi-empirical PM3 method under equilibrium condition. Also using range temperature from 100K° to 1000K° to investigate for this thermal properties, which including liquid and gas phases .

### المقدمة :

الحرارة بدلالة تركيبها الذري والقوي هي التي تربط الذرات ببعضها البعض , ان هذه النظرة المبدئية والشمولية لمجال الترموديناميك تجعل منه موضوعا واسعا يغطي مجالات علم الترموديناميك , بما تتطوي عليه هذه التسمية من معنى في الوقت الحاضر مكرس لدراسة وتحليل خواص المادة التي تتأثر بتغير درجة الحرارة. فمثلا طبيعة قوى الترابط الذري في المركبات الكيميائية وان كانت تتأثر بالعوامل الحرارية الا ان معالجتها تتم باستخدام الميكانيك الكمي ولكن حالما يصبح الاهتمام منصبا على كيفية ومراحل تحلل هذه المركبات بتأثير الطاقة الحرارية يبرز دور الترموديناميك واضحا (1). حيث ان هذا الموضوع يشمل دراسة تأثير الحرارة التي تصاحب التفاعلات الكيميائية وتكوين المحاليل وتغيرات الحالة مثل الانصهار والتبخير (2) كما ان الهدف الاساسي من الترموديناميك هو ان التركيز يكون موجها الى داخل النظام وتهمل وجهة النظر العينية وتؤخذ بنظر الاعتبار الكميات التي لها تأثير في الحالات الداخلية للنظام دون غيرها وتستخدم في ايجاد الطاقة الداخلية للنظام وعدد من الخصائص الاخرى (3). يتناول الترموديناميك دراسة خواص الانظمة (systems) في ظروف التوازن (equilibrium) ولايعنى بتأثيرات عامل الوقت , وبوساطته نحصل على علاقات دقيقة بين القياسات المختلفة , كما يعطي الاسس لتنبؤات معول عليها لتأثيرات الحرارة والضغط والتركيز على التوازنات الكيميائية. تحت ظروف درجة الحرارة العالية والضغط الواطئ تأخذ الحركة الحرارية (الطاقة الحركية الانتقالية) الاسبقية على قوى فاندرفالز الضعيفة نسبيا التي تربط الجزيئات عندما تكون متجاورة, وبذلك ترجح انتقال النظام الى الحالة الغازية. ومن جهة اخرى فان ظروف الضغط العالي ودرجة الحرارة الواطئة ترجح الحالة المكثفة للنظام. وتحت الضغط الجوي, وجد ان كل المواد تظهر انتقالات في حالتها الفيزيائية (الغازية الى سائلة, والسائلة الى صلبة) مع انخفاض درجة الحرارة والعكس بالعكس (4). تركّز البحث على دراسة جزيئة خطية هي يوديد السيلينيوم (SeI) هو عبارة عن ملح يتكون عند تسخين نسبة من السيلينيوم مع نسبة من اليود بوجود الكحول للحصول على كتله رصاصية غامقة اللون ويذوب بسهولة في السائل . يرتبط السيلينيوم Se باليود I بقوى فاندرفالز وباصرة تساهمية مفردة مفصولة بمسافات معينه (5,6) وتبلغ نقطة غليان هذه الجزيئة (406.77K) , وكثافتها (25.28cm<sup>3</sup>/mol) .

### الحسابات النظرية

تعتبر الطرائق شبه التجريبية من الطرق السريعة في تنفيذ العمليات وايجاد النواتج بشكل اوسع بالرغم من كونها اقل دقة منها وذلك لاعتمادها على نظرية المدار الجزيئي مع اهمالها لكثير من النواتج الصغيرة للتكاملات (7). فلقد كان للتطور السريع الحاصل في البرمجيات والسرعة الهائلة التي وصلت اليها الحاسبات الاثر الاكبر في تطوير المعالجة النظرية لكثير من الخصائص ومنها الحرارية , حيث طور كلا من ديوار (Dewar) ومجموعته (8), وبوبل (Pople) ومجموعته (9) برامجيات في حساب الصفات الترموديناميكية , الشكل الهندسي لحالة التوازن والطاقة لكل المستويات الجزيئية للمركبات بالاعتماد على معادلة شرودنكر والحلول التقريبية لها الاساس في صياغة البرامج . تم تصنيف الطرائق شبه التجريبية الى عدة طرق, منها الطريقة الحديثة PM3 (Parameterization model version 3 – طريقة تعيين قيم المعلمات) (10), وهي طريقة مطورة لطريقة MNDO (Modified Neglect of Differential Overlap – الاهمال للتداخل المتوسط المحور), تتميز طريقة PM3 بكفاءتها النسبية

بالمقارنة مع الطرائق التجريبية الأخرى، إذ تتمكن من معالجة المواد عالية الطاقة والتي غالباً ما تمثل أنظمة حاوية على مجاميع تمتلك ذراتها مزدوجات الكترونية (Ione Pairs) (11)، وقد استخدمها ستيورات (J.J.P.Stewart) التي اعتمدت تقريب هارترتي – فوك المقيد (Restricted Hartree-Fock Theory- RHF) في هذا البحث، ويوضح الجدول (1) معدل الخطأ في قياس لبعض الخصائص الفيزيائية بالطرائق شبه التجريبية مقارنة بالقيمة العملية (12).

الكمية Quantity	MNDO	AM1	PM3
طول الاصرة Band Length(Å)	0.066	0.065	0.053
الزوايا Angles (Degrees)	6.289	5.708	5.467
عزم ثنائي القطب Dipole Moments (D)	0.713	0.572	0.485
جهد التأين Ionization potential (eV)	0.921	0.752	0.715

جدول (1) معدل الاخطاء لكميات مختلفة محسوبة بالطرائق شبه التجريبية

من الخصائص المهمة التي تم دراستها هي الخصائص الحرارية التي تحدد اهم الظروف والتي على اساسها تجري التفاعلات بين الجزيئات. والثرموداينميك علم تجريبي لا يضع فرضيات عن تركيب المادة ومدى صحة المعادلات القانونية التي استنتجت منهما بل يعطي الكثير من العلاقات بين خواص المادة ولا يعطي القيم الفعلية لهذه الخواص. تكمن أهمية ديناميك الحرارة في حقيقة كون قوانينها والتعاريف المعينة والملحقة بها قد أعطيت صيغة رياضية، وأدى هذا إلى إيجاد شبكة معادلات مترابطة يمكن بواسطتها الحصول على استنتاجات ونتائج عملية على نطاق واسع (13). ويمكن توضيح بعض الدوال الحرارية (الثرموديناميكية) المعروفة في علم الديناميكا الحرارية كالآتي:

1- السعة الحرارية (Heat Capacity): تعرف السعة الحرارية لأي نظام بأنها كمية الحرارة اللازمة لرفع درجة حرارة النظام درجة حرارة واحدة أي أن:

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta T} \quad \dots\dots\dots 1$$

وبما ان السعة الحرارية للنظام تتغير بتغير درجة حرارته فمن المستحسن ان نعرفها بصيغة تفاضلية، فإذا كانت الحرارة المنتقلة للنظام هي dQ والارتفاع في درجة حرارته نتيجة ذلك هي dT فان:

$$C = dQ/dT \quad \dots\dots\dots 2$$

يمكن رفع درجة حرارة جسم في ظروف متعددة منها تثبيت الحجم أو الضغط أو الاثنين معاً بأسلوب معين أي إن المادة لها حرارات نوعية متعددة حسب الظروف.

وقد أتبع عملياً تثبيت الحجم أو الضغط عند إجراء عملية على المادة وهكذا فان هناك نوعين من السعة الحرارية مثل (C<sub>p</sub>) تحت ضغط ثابت و(C<sub>v</sub>) للحجم الثابت (14).

$$C_v = (\partial E / \partial T)_v \quad \dots\dots\dots 3$$

$$C_p = (\partial H / \partial T)_p \quad \dots\dots\dots 4$$

حيث تمثل E الطاقة الداخلية و H المحتوى الحراري (الانثاليبي) وهناك علاقة بسيطة ومهمة بين الحرارة النوعية لهاتين العمليتين:

$$C_p - C_v = R \quad \dots\dots\dots 5$$

حيث R يمثل الثابت العام للغازات ويساوي (1.987 cal K<sup>-1</sup> mol<sup>-1</sup>). وهذا يعني أن الحرارة النوعية للغاز المثالي عند ثبوت الضغط اكبر من حرارته النوعية عند ثبوت الحجم بمقدار (R) وهذه صحيحة للغازات الحقيقية في الضغوط المعتدلة. ان السعة الحرارية في الضغط الثابت C<sub>p</sub> تكون اكبر من السعة الحرارية في الحجم الثابت C<sub>v</sub>، لان المادة تقوم بشغل (ضغط - حجم) عندما تسخن تحت ضغط ثابت. وبصورة عامة، كلما تكون الجزيئة معقدة كلما تكون سعتها الحرارية المولارية كبيرة، ويكون تأثير درجة الحرارة كبيراً (15). اما بالنسبة للجوامد (solids) فان السعة الحرارية تقترب من الصفر عند انخفاض درجة الحرارة باتجاه الصفر المطلق (16).

2- الانثالبي (Enthalpy): هو مقياس المحتوى الحراري للنظام ويعتبر من الدوال الترموديناميكية (الحرارية) الشاملة الشائعة الاستعمال والمهمة (17)، ولكل مجموعة انثالبية خاصة بها ومميزة لها ويرمز لها بالرمز  $H$ ، و توصف بالمعادلة الآتية:

$$H = U + PV \quad \dots\dots\dots 6$$

حيث تمثل  $H$  المحتوى الحراري،  $U$  الطاقة الداخلية،  $P$  الضغط و  $V$  الحجم، من خلال المعادلة اعلاه يتضح ان وحدات قياس  $H$  هي وحدات طاقة، ويعبر عن التغير في المحتوى الحراري بالمعادلة الآتية:

$$\Delta H = \Delta U + \Delta(PV) \quad \dots\dots\dots 7$$

وهذه المعادلة يمكن استعمالها كلما حدث تغير ملموس في النظام (18) وان الصيغة التفاضلية لتغير الانثالبي هي:

$$dH = dU + d(PV) \quad \dots\dots\dots 8$$

ويعد المحتوى الحراري دالة للضغط ودرجة الحرارة والطاقة الداخلية بالنسبة لجميع المواد فيما عدا الغازات التي تسلك سلوكاً مثالياً أو قريباً من هذا السلوك (16).

3- الانتروبي (Entropy): الانتروبي هي لفظة يونانية تعني التغير، وهو مقياس لمدى فوضى أو عشوائية النظام، أو الاحتمال لترتيب معين لاجزاء من النظام، ولأحتمال عالي من حالة الفوضى يكون الانتروبي اعلى، ولترتيب اقل احتمالاً (ترتيب ذو نظام اكبر) يكون الانتروبي اقل (1). والانتروبي دالة حالة تستعمل مقياساً لجميع التغيرات الفيزيائية والكيميائية التي تحصل تلقائياً وتؤدي الى حصول تغير نسبي في انتظام وتوزيع الجزيئات او الذرات او الايونات في المجموعة وبذلك يصف الانتروبي التغير من حالة الانتظام الى حالة اللانظام (العشوائية) او بالعكس. يرمز للانتروبي بالرمز  $S$  وهو كالتاقة الداخلية له قيمة معينة عندما تكون المجموعة في حالة معينة، وان تفاضله  $ds$  يعرف بالتغير الانعكاسي المتلاشي  $ds$  intinfesimal reversible change:

$$\frac{dQ_R}{T} \quad ds = \quad \dots\dots\dots 9$$

حيث ان  $dQ_R$  كمية الحرارة التي يمتصها النظام اثناء عمليه معكوسة عندما تكون درجة الحرارة  $T$ ، والانتروبي خاصية ممتدة شأنها شأن الحجم  $V$  والطاقة  $U$ ، تعتمد على كتلة المجموعة (18). وفي حالة تغير النظام من حالة ابتدائية (i) إلى نهاية (f) يكون تغير الانتروبي هو  $\Delta S$ :

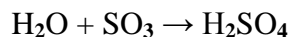
ان مفهوم الانتروبي يعتمد على الوصف المرئي للنظام بدلالة خواصه الإجمالية مثل درجة الحرارة، والضغط والتي هي انعكاس لسلوكية الجزيئات في النظام.

$$\Delta S = \int_{R_i}^{R_f} \frac{dQ_R}{T} \quad \dots\dots\dots 10$$

4- حرارة التكوين (Heat of formation): تعرف حرارة التكوين القياسية ( $\Delta H_f^\circ$ ) للمادة بأنها التغير في الانثالبي عند تكوين مول واحد من المادة من عناصرها الأساسية في الظروف القياسية. كما يعرف تفاعل التكوين بأنه التفاعل الذي يكون مركب واحد من عناصره المكونة له أي ان حرارة تكوين المركب هي انثالبية بالنسبة لانثالبية العناصر المكونة له تحت شروط الحالة القياسية للأنواع المشتركة في تكوينه. ويمكن حساب حرارة المركب من حرارة الاحتراق اذا علمنا قيم حرارات تكوين المواد الناتجة المحترقة (15).



هو تفاعل تكوين الكحول الميثيلي وهو مركب من العناصر الأولية، بينما التفاعل الآخر:



هو ليس تفاعل تكوين طالما أنه يمثل تكوين حامض الكبريتيك من مركبات أخرى وليس من العناصر الأساسية، وتقاس حرارة التكوين عادة (بالجول / مول) (J/mol) أو (بالسعة / مول) (cal/mol).

وتعد حرارة التكوين صفة مميزة ومهمة للمركب وتتعلق باستقراره، وإن المركب الذي له حرارة تكوين موجبة كبيرة يكون غير مستقر والمركب الذي له حرارة تكوين سالبة يكون مستقراً (20).

## النتائج والمناقشة

لقد تم الحصول على نتائج هذا البحث من معرفة المصفوفة النهائية من خلال برنامج (PCMODEL) الذي ترسم فيه الجزيئة بتحديد محاورها ومن ثم ادخال هذه المصفوفة في برنامج الـ WinMopac7.21 وباستخدام طريقة (MNDO-PM3)، ومن معرفة درجة الانصهار والغليان للجزيئة يتم دراسة اهم الحالات التي تمر بها الجزيئة خلال الاطوار الثلاثة. ولكون الجزيئة المدروسة تمتلك نقطة غليان فقط فكان دراستها خلال الطورين السائل والغازي ولقيم مختلفة من درجات الحرارة. وقد تم الحصول على المصفوفة النهائية للجزيئة المدروسة عند الوضع المستقر لها بواسطة برنامج PCMODEL ورسمها باستخدام المحاور الداخلية للجزيئة ( $r, \theta, \phi$ ) والحصول على الافضلية لاحسن وضع هندسي لها (Optimization) كما مبين في الجدول (2).

جدول (2) المصفوفة النهائية ليوديد السيلينيوم

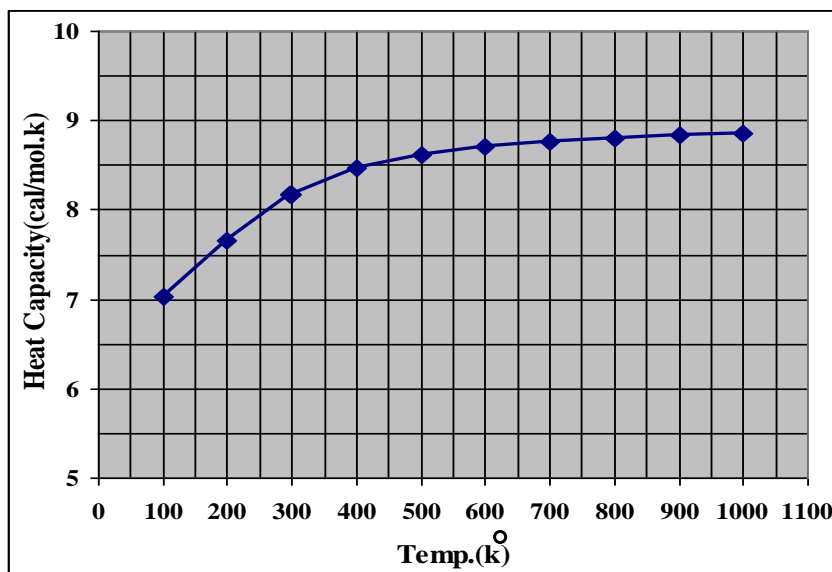
ATOM	DISTANCE	OPT.	ANGLE	OPT.	DIHEDRAL	OPT.	A	B	C	charge
Se	.0000000	0	.000000	0	.000000	0	0	0	0	-.3397
I	1.9431273	0	.000000	0	.000000	0	1	0	0	.3397

تضمنت المصفوفة النهائية ابعاد الاواصر بين الذرات والزوايا وزوايا السطوح وشحنة كل ذرة , وهذه المصفوفة هي المسؤولة عن حساب الخصائص الحرارية حيث درست الخصائص لقيم مختلفة من درجات الحرارة بدءا بدرجة (100K°) مروراً بدرجة غليان الجزيئة الى درجة (1000K°).

اي ان المدخلات الى البرنامج المسؤول عن حساب الخصائص هي المصفوفة الموضحة بالجدول اعلاه .

### 1- حساب السعة الحرارية لجزيئة SeI (Heat Capacity) :

السعة الحرارية من الخواص المهمة التي تم حسابها ودرجات حرارية مختلفة القيم ومنها درجة الحرارة القياسية ويمثل الشكل (1) العلاقة البيانية بين القيمتين .

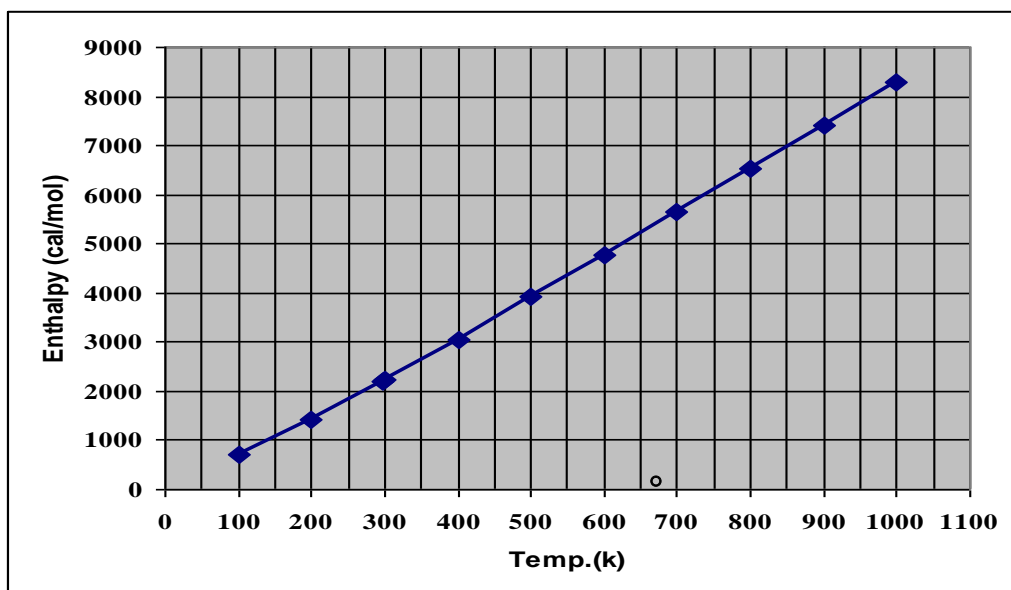


شكل (1) علاقة بيانية بين السعة الحرارية ودرجات الحرارة

يتضح من الشكل (1) ان السعة الحرارية دالة لدرجة الحرارة وتعتمد بصورة كبيرة على درجة الحرارة وتتناسب معها طردياً . حيث كلما ارتفعت درجة الحرارة ازداد عدد الجزيئات في مختلف مستويات الطاقة الاهتزازية العليا وبذلك تزداد السعة الحرارية لكل هيئة اهتزاز (19). كانت زيادة السعة الحرارية لجزيئة SeI في الطور السائل عند الدرجات الاقل من 400K° زيادة ملحوظة عند ارتفاع الحرارة , اما في الطور الغازي كانت الزيادة اقل والفرق بين القيم اقل فاخذ المنحني شكل شبه مستقيم بصورة افقية مما هو عليه في الطور السائل حيث كان مائل للشكل العمودي . وكانت قيمة السعة للجزيئة بدرجة حرارة الغرفة هي ( 8.174 cal/mol.K° ) .

### 2- حساب الانثالبي لجزيئة SeI (Enthalpy) :

ان المحتوى الحراري للجزيئة دالة لدرجة الحرارة وللطاقة الداخلية لذا يمكن تعيين الانثالبي للجزيئة عند رفع درجة الحرارة من نقطة الى اخرى (21) , وقد تم حساب الانثالبي للجزيئة لدرجات مختلفة من الحرارة لدراسة تغييرات الانثالبي خلال الطورين , كما تم حساب الانثالبي ايضا عند درجة الحرارة القياسية 298K° والتي كانت عندها قيمة الانثالبي (2206.8 cal/mol) . يوضح الشكل (2) العلاقة بين الدالتين لبيان مدى اعتماد الانثالبي على درجة الحرارة.

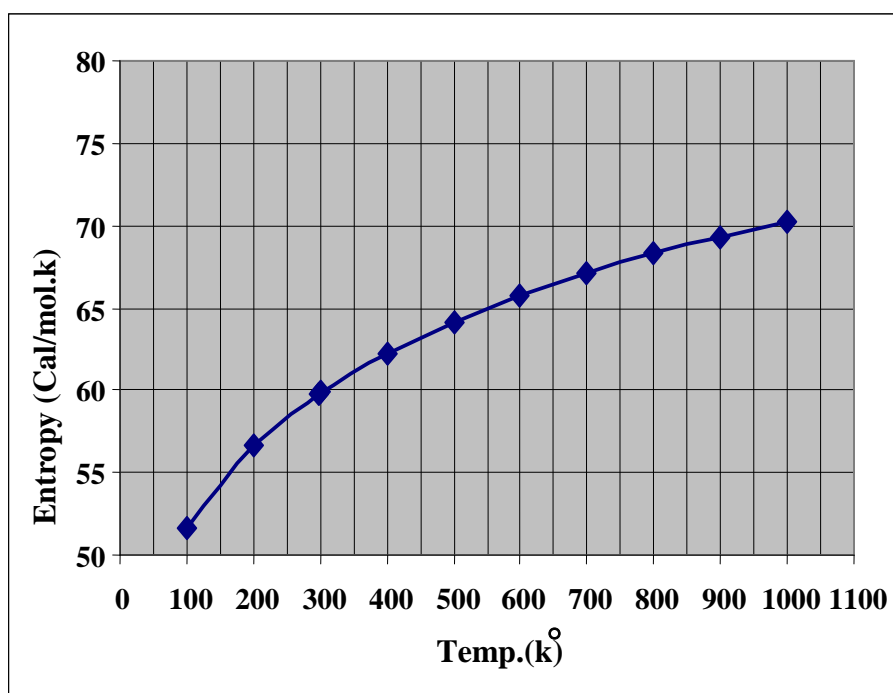


شكل(2) علاقة بيانية بين الانتالبي ودرجات الحرارة

تبين من العلاقة الطردية الواضحة من خلال الشكل اعلاه ان الانتالبي دالة لدرجة الحرارة ومدى اعتمادها على درجة الحرارة حيث تزداد بزيادة درجة الحرارة. كذلك يلاحظ ان الزيادة تكون على مراحل حسب اطوار الجزيئة , ففي الطور السائل الاقل من درجة  $400K^{\circ}$  كان الارتفاع في الانتالبي اقل مما هو عليه في الحالة الغازية , عموما الزيادة متناسبة تقريبا اشبه بخط مستقيم فيه تقعر قليل في الحالة السائلة.

### 3 - حساب انتروبي جزيئة Sel (Entropy) :

من الخصائص الاخرى التي تم حسابها انتروبي الجزيئة ولقيم مختلفة من درجات الحرارة المقابلة لكل قيمة ضمن الطورين السائل والغازي , وحسابها في الدرجة القياسية حيث كانت قيمتها  $(59.806 \text{ cal/mol.k})$  كما موضح في الشكل (3) .

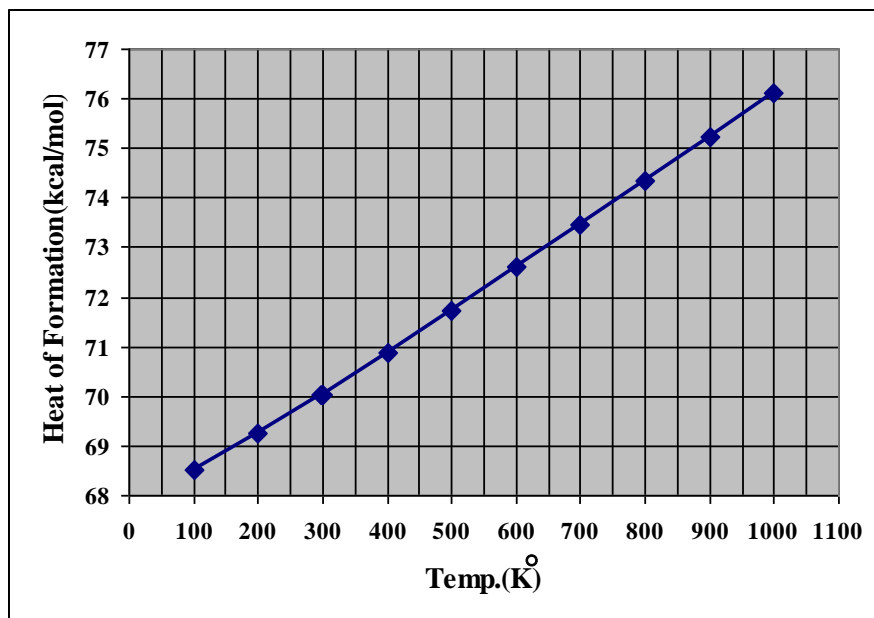


شكل(3) علاقة بيانية بين الانتروبي الجزيئة ودرجات الحرارة المقابلة لها

يتضح من الشكل اعلاه ان العلاقة بين القيمتين طردية اتخذت شكل منحنى تبين اعتماد انتروبي الجزيئة على درجات الحرارة التي تزداد بزيادة درجات الحرارة . في الطور السائل كانت الزيادة كبيرة في الانتروبي عند زيادة درجة الحرارة , في حين الزيادة كانت اقل في الطور الغازي وزيادة متناسبة لذا اتخذ الشكل منحنى في الطور السائل وخط شبه مستقيم في الطور الغازي .

#### 4- حرارة تكوين جزيئة SeI (Heat Of Formation):

تم حساب حرارة تكوين الجزيئة لقيم مختلفة من الدرجات الحرارية وحسابها عند درجة الحرارة القياسية اي عند درجة (298K°) و كانت قيمتها (70.024 kcal/mol), ويوضح الشكل (4) العلاقة البيانية بين المتغيرين.



شكل (4) علاقة بيانية بين حرارة تكوين الجزيئة ودرجات الحرارة

يتضح من الشكل (4) ان العلاقة بين المتغيرين خطية دلالة على اعتماد حرارة تكوين الجزيئة على درجات الحرارة , فعند زيادة درجة الحرارة تزداد حرارة التكوين خلال الطورين . فمن خلال مرحلة الحالة السائلة للجزيئة وهي المرحلة الاقل من درجة الغليان اي دون درجة (406.77 K°) ان الزيادة مستقيمة ومستقرة تقريبا حيث كانت قيمة حرارة تكوين الجزيئة مستقرة عند القيمة (70 Kcal/mol) اي ان تاثر الحرارة يكون قليل في الحالة السائلة . اما في الحالة الغازية ترتفع قيمة حرارة التكوين بزيادة درجة الحرارة زيادة متناسبة .

#### الاستنتاجات

نستنتج ان استخدام طريقة PM<sub>3</sub> التي اعتمدت في هذا البحث تعد من الطرائق الحديثة والسريعة التي تعطي قيم فيزيائية اقرب الى العملي منها بالنسبة لبقية الطرائق الاخرى بوقت قصير جدا قد لا يتراوح البضع ثواني . فضلا عن سلوك السعة الحرارية حيث وجد ان زيادة السعة الحرارية للجزيئة في الطور السائل ( في الدرجات الاقل من 400 K° ) كانت زيادة ملحوظة عند ارتفاع الحرارة , اما في الطور الغازي كانت الزيادة اقل والفرق بين القيم اقل لذا اخذ المنحنى شكل شبه مستقيم مما هو عليه في الطور السائل . وبالنسبة لخاصية الانثالبي لوحظ ان الزيادة كانت متناسبة تقريبا اشبه بخط مستقيم فيه تقع قليل في الحالة السائلة . بينما وجد ان الزيادة في الانتروبي في الطور السائل كانت كبيرة مقارنة مع الانتروبي في الحالة الغازية لذا اتخذ الشكل منحنى في الطور السائل وخط شبه مستقيم في الطور الغازي . وكذلك بالنسبة لخاصية الاخيرة حرارة التكوين لوحظ ان الزيادة مستقيمة ومستقرة تقريبا لذا اتخذ الشكل منحنى في الطور السائل وخط شبه مستقيم في الطور الغازي .

#### المصادر REFERENCES

- 1- الحرارة والثرمودايناميك, تأليف: د. رمزي حنّـا ميشور, د. هاشم عبود قاسم (جامعة البصرة) 1984
- 2- الكيمياء الفيزيائية , تأليف: د. فلاح حسن حسين, د. علي عبد الحسين سعيد, تحديث د. فلاح حسن حسين , 2000 .
- 3- Mark.W.Zemansky, Heat and Thermodynamics, McGraw-Hill L.t.d .
- 4- أسس الثرمودايناميك الكيميائي, تأليف: أم.أل. لاخانبال(رئيس قسم الكيمياء) جامعة البنجاب, شانديغار, ترجمة : فلاح حسن حسين, هادي كاظم عوض, فهد علي حسين. 1989.
- 5- Journal of Organometallic Chemistry Volume 623, Issues 1-2 , 30 March 2001, page 14-28 .

- 6- J.W. Mellor , D. Sc., F. R. S. "Acomprehnsive Treatise on InOrganic and Theoretical Chemistry ", VolumeX , London.NewYork. Toronto , 1952.
- 7-H.Dorsett and A.White,“Overview of Molecular Modeling and Ab-initio Molecular Orbital Methods Suitable for use with Energetic Materials”, DSTO Aeronautical and Maritime Research Laboratory Commonwealth of Australia 2000 .
- 8-M.J.S. Dewar "The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry ", McGraw-Hill, New York 1969 .
- 9-J.A.Pople and D.L.Beveridge "Approximate Molecular Orbital Theory", McGraw-Hill, New York, 1970 .
- 10-J.P.Stewart, J.Comput. Chem., 10, 209, 220, 1989 .
- 11-M.J.S.Dewar and W.Thiel, J. Am.Chem. Soc: 99,4899-4907, 1977 .
- 12- J.J.P. Stewart Fujisultd.2001.Mopac2002.Manual.
- 13- J.M.Smith , and H.C.Van Ness , "Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics ", McGraw-Hill KoGAUSHA, LTD. (1975).
- 14- Irving M. Klotz & Robert-M-Rosenberg, "Chemical Thermodyn - amics Basic Theory and Methods ", The Bonjamin /cummings Publishing Company. Inc. (1986) .4<sup>th</sup> edition .
- 15- الكيمياء الفيزيائية, تأليف: ف. دانيال, ر. أ. البرتي, ترجمة: غازي عبد الوهاب درويش وسلمان رشيد سلمان وفؤاد ابراهيم قنبر وسعد خليل اسماعيل/جامعة بغداد 1986 .
- 16- P.A.Rock , "Chemical Thermodynamics ", The Macmillan Co., London, 1969.
- 17- I. N. Levine " Molecular Spectroscopy " , Wiley – Interscience (1975) . أساسيات الديناميكا الحرارية
- 18- الكيمياء والميتالورجية, تأليف: د. فوزي احمد ابو العز, د. علي حسون الطيار, د. جواد سلمان البدري, د. نوري خليفة المشهداني, 1987 .
- 19- Journal of Organometallic Chemistry Volume 623, Issues 1-2, 30 March 2001, page 14-28 .
- 20- P.Gans, "Vibrating Molecules :An Introduction to the Interpretation of Infrared and Raman Spectra ", Chapman and Hall, London, 1971 .
- 21- M.Clyde Day, J.R. and Joel Selbin, " Theoretical In Organic Chemistry" , Translated by Dr.Issam J.Sallomi, Second Edition, 1984.