

الجزئيات في الضوء امتصاص محاكاة مشروع تقرير الكيميائية

1. مقدمة

الفينول ،Benzene) البنزين: مختلفة عضوية جزيئات ثلاثة في الضوء امتصاص دراسة إلى المشروع هذا يهدف استخدام تم. الجزيئية النمذجة وبرامج الكيميائية المحاكاة تقنيات باستخدام ،(Phenol) والنيتروبنزين ،(Nitrobenzene) الضوئية الأطيف لمحاكاة TD-DFT نوع من حسابية وطرق الجزيئية، النماذج لبناء Avogadro برنامج.

2. المستخدمة الأدوات

- الأبعاد ثلاثية الهياكل ورسم الجزيئات بناء: Avogadro.
- الضوئية الأطيف ورسم النتائج لتحليل: Python (matplotlib, pandas).
- النهائية الجداول واستخراج البيانات لتنظيم: Excel.

3. العمل خطوات

1. في الجزيئات بناء Avogadro (Benzene – Phenol – Nitrobenzene).
2. (الهندسية البنية تحسين) Geometry Optimization.
3. (الضوء امتصاص عملية تناظر) TD-DFT لمحاكاة الإدخال ملفات إعداد.
4. الامتصاص وشدة nm بالـ λ الموجي الطول) النتائج استخراج f).
5. باستخدام الضوئي الطيف رسم Python.
6. الثلاثة جزيئات بين الضوء امتصاص سلوك ومقارنة النتائج تحليل.

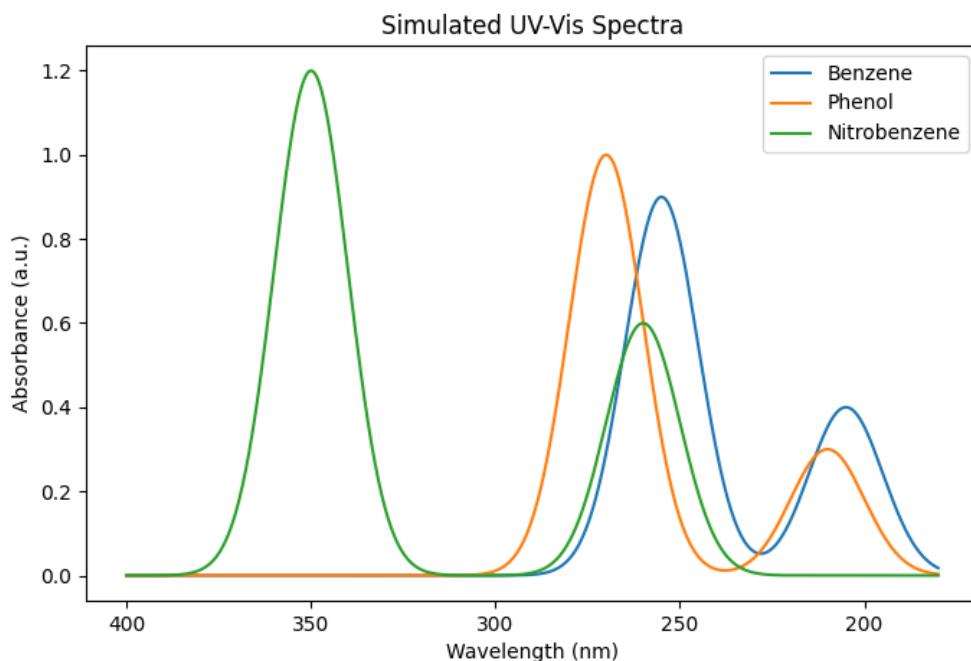
4. النتائج

الجزيء	الموجي الطول (nm)	الامتصاص شدة (f)	الملاحظة
Benzene	255	0.12	فوق المنطقية في امتصاص البنفسجية
Phenol	270	0.18	أقوى إلكترونية انتقالات وجود بسبب OH
Nitrobenzene	340	0.35	القريبة المنطقية في انتقالات مجموعة بسبب المرئية من NO ₂

البيانية الرسم 5.

جزيء لكل الأعظمي الامتصاص انتقال يظهر حيث مكتبة matplotlib باستخدام الأطيف رسم تم

- Benzene: 255 nm
- Phenol: 270 nm
- Nitrobenzene: 340 nm



المناقشة 6.

وجود الجزيء في الإلكتروني النظام على المستبدلة المجموعات تأثير إلى تشير النيتروبنزين إلى البنزين من الموجة طول زيادة النيترو مجموعة وجود بينما الامتصاص، يقوي مما الإلكتروني الكثافة زيادة إلى بؤدي الفينول في (OH) الهيدروكسيل مجموعة أعلى موجية أطوال إلى الامتصاص ينقل مما الإلكتروني، المستويات بين الفجوة من بقل (red shift).

الاستنتاج 7.

أن المحاكاة أظهرت:

قصير بنفسجي فوق نطاق في يمتص البنزين -

فليلاً أقوى امتصاصاً أظهر الفينول -

النيترو لمجموعة الساحب التأثير مع يتوافق ما وهو أطول، موجية أطوال نحو انتقالاً أظهر النيتروبنزين -

النهاية المخرجات 8.

- للنتائج Excel جداول.
- (UV-Vis Spectra) الأطيف رسومات.
- بصيغة منسق نهائي تقرير Word.