

# 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 (Nitrobenzene) والنيتروبنزين، (Phenol) الضوئية الأطياف لمحاكاة TD-DFT نوع من حسابية وطرق الجزيئية، النماذج لبناء Avogadro برنامج

## 2. المستخدمة الأدوات

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

## 3. العمل خطوات

- Avogadro (Benzene – Phenol – Nitrobenzene) في الجزيئات بناء.
- (Geometry Optimization) الهندسية البنية تحسين.
- (الضوء امتصاص عملية تناظر) TD-DFT لمحاكاة الإدخال ملفات إعداد.
- (f) الامتصاص وشدة nm بالـ  $\lambda$  الموجي الطول) النتائج استخراج.
- Python باستخدام الضوئية الطيف رسم.
- الثلاثة الجزيئات بين الضوء امتصاص سلوك ومقارنة النتائج تحليل.

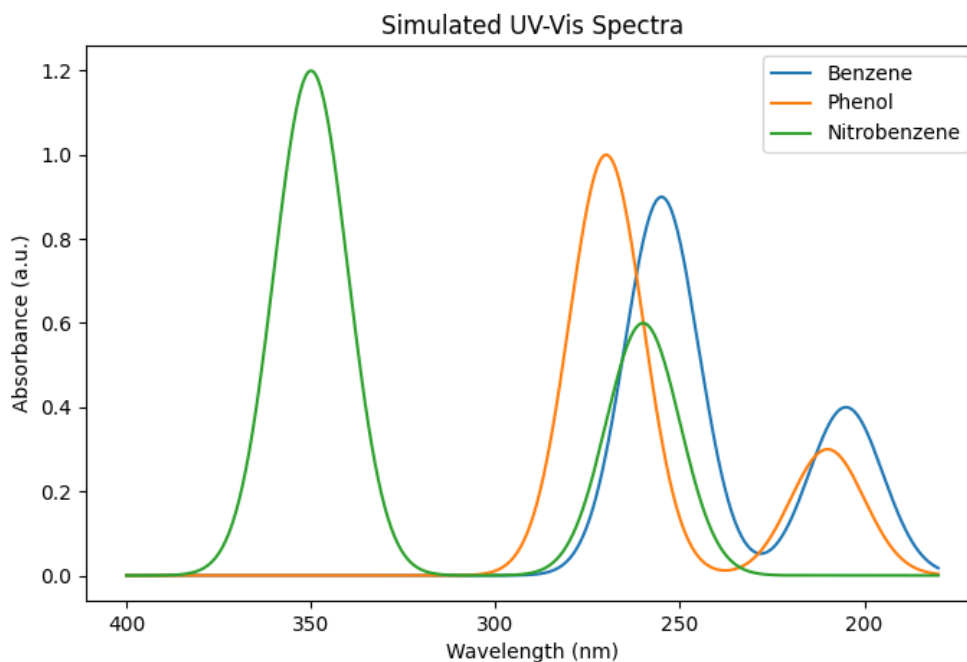
## 4. النتائج

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

## 5. البيانات الرسوم

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

- Benzene: 255 nm عند الامتصاص قمة
- Phenol: 270 nm عند الامتصاص قمة
- Nitrobenzene: 340 nm عند الامتصاص قمة



## 6. المناقشة

وجود الجزيء في الإلكترون النظام على المستبدلة المجموعات تأثير إلى تشير النيتروبنزين إلى البنزين من الموجة طول زيادة النيترو مجموعة وجود بينما الامتصاص، يقوي مما الإلكترون الكثافة زيادة إلى يؤدي الفينول في (OH) الهيدروكسيل مجموعة (red shift) أعلى موجية أطوال إلى الامتصاص ينقل مما الإلكترون، المستويات بين الفجوة من يقلل ( $\text{NO}_2$ ).

## 7. الاستنتاج

أن المحاكاة أظهرت

- قصير بنفسجي فوق نطاق في يمتص البنزين -
- قليلاً أقوى امتصاصاً أظهر الفينول -
- النيترو لمجموعة الساحب التأثير مع يتوافق ما وهو أطول، موجية أطوال نحو انتقالاً أظهر النيتروبنزين -

## 8. النهائية المخرجات

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