

قياس نسبة الكيتون إلى الإينول باستخدام الأساليب المحوسبة

إشراف الأستاذ الدكتور رفیق قرمان

إعداد الطالب: أنس عمر يوسف النجار

الملخص

تعتبر عملية قياس نسبة الكيتون إلى الإينول لخليط متجانس لنفس المادة عملية صعبة الأمر الذي دعا بدوره إلى تطوير العديد من المنهجيات والتجارب على مر التاريخ بداية بالمعايرة الكيميائية بمساعدة البروم وانتهاءً بالأساليب المحوسبة بمساعدة برامج الكيمياء الكمية. لكن، وبالرغم من توفر عدد كبير من الخيارات المتاحة لقياس النسب بمساعدة الحاسوب، إلا أن تحديد الأسلوب الأمثل يشكل معضلة أمام الباحث.

تبحث هذه الدراسة إمكانية تطبيق الأساليب السبعة الأكثر إنتشاراً في حسابات الكيمياء الكمية في تحديد نسبة الكيتون إلى الإينول وذلك إستعانةً بـ 52 مركباً سبق وتم تحديد ونشر نسب مكوناتها مخبرياً ومقارنتها بنتائج الحساب الكمي لهذه الدراسة. كما وتبحث إمكانية تحديد "فجوة المحلول النظرية" الأمثل. لكن من الجدير ذكر أن العديد من المركبات التي تم نشر نسبها سابقاً كانت نقية وليست ضمن نظام محلول، مما دعا الباحث إلى الاكتفاء بمقارنة الحسابات الكمية للحالة الغازية للمركب مع النسب المنشورة.

توصل البحث إلى كون أسلوب الحساب الكمي (بي 3 لب B3LYP) هو الأمثل في تحديد نسبة الكيتون إلى الإينول وخاصة عند توظيف هذا الأسلوب في إطار مجموعة (6-31 جي - 6-31G). كما وتوصل البحث إلى كون (بوندي - Bondi) فجوة المحلول النظرية الأمثل.

تكمن بالرغم من هذه النتائج حاجة إلى مقارنة المزيد من الأساليب الكمية مع النتائج العملية والنظرية للتوصل إلى المنهجية المثلى في تحديد نسب الكيتون والإينول بصورة قابلة للتطبيق على نطاق أوسع.