



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne Démocratique et Populaire

وزارة التعليم العالي والبحث العلمي

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

المدرسة العليا لأساتذة التعليم التكنولوجي بسكيكدة

Ecole Normale Supérieure d'Enseignement Technologique

قسم الفيزياء والكيمياء

Département de Physique et Chimie

Mémoire de fin d'étude

مذكرة التخرج

لنيل شهادة: أستاذ تعليم متوسط

الموضوع:

مدخل الى الكيمياء الفلكية

من إعداد الطلبة:

- ♦ عروسي جواهر
- ♦ حولي نادين دينه
- ♦ بن جدو إيناس كاهينة

لجنة المناقشة:

ENSET de Skikda	(MCB)	رئيسي	♦ حساينية عمارة
ENSET de Skikda	(MCA)	مشرفا	♦ مسقالي سمير
ENSET de Skikda	(MCA)	ممتحنا	♦ بوجعدار جمال
ENSET de Skikda	(MAA)	ممتحنا	♦ بوعويينة بركات

وفعة جوان 2024 promotion juin 2024

الإهداء :

"وآخر دعوانهم أن الحمد لله رب العالمين"

الحمد لله حبا وشكرا وامتنانا على البدء والختام، الحمد لله الذي يسر البدايات وأكمل النهايات وبلغنا الغايات
الحمد لله الذي بنعمته تتم الصالحات

لم تكن الرحلة قصيرة ولا ينبغي لها ان تكون، لم يكن الحلم قريبا ولا الطريق كان محفوا بالتسهيلات، لكنني فعلتها، ها انا اليوم أتوج لحظاتي الأخيرة أفق على عتبة تخرجي ارفع قبعتي بكل فخر لأصبح أستاذة العائلة الاستاذية اعلى شيء وارقى امر يمكن ان يصل اليه الانسان لقد أختارك الله من بين كل الخلائق لتكون معلما أي فضل هذا واي كرامة هذه ، فاذا سئلت عن شبابك فيما افنيتته فان مئزرا أبيضاً سيشفع لك ، فاللهم لك الحمد حتى ترضى ولك الحمد اذا رضيت ولك الحمد بعد الرضا .

وبكل حب أهدي ثمرة نجاحي وتخرجي:

إلى نفسي العظيمة القوية التي تحملت كل العثرات واكملت رغم الصعاب التي صبرت واجتهدت الى أن حققت.

إلى سكان قلبي....

الى رجل الكفاح، الى من زين اسمي بأفضل الألقاب من دعمني بلا حدود وأعطاني بلامقابل الى من غمرني حبا ودلال، سندي وقوتي، ملاذي بعد الله فخري واعتزازي والذي الحبيب الحمد لله الذي مد في عمرك لأكون اول خريجة لك طاب بك العمر يا سيد الرجال

الى ملاكي الحارس الى من جعل الله الجنة تحت أقدامها واحتضنني قلبها قبل يدها وسهلت لي الشدائد

بدعائها سر قوتي ونجاحي جنتي امي، لم تكن امي يوما امرأة عادية، كانت ولا زالت في ذهني تتجسد كملاك

كبطله خارقة تجابه كل الصعاب، كطبية كمحاميه ككل نساء الكون في آن واحد، قدوتي الأولى والأخيرة واطهر من على الوجود، هذا نجاحك امي.

الى أميراتي الصغيرات ضلعي الثابت الذي لايميل وامان ايامي، الى من رزقت بهم سندا ملاذي الأول

والأخير الى من شددت عضدي بهم، أخواتي الجميلات: أمينة، روفيدة، تقوى ونعمة

الى من رزقني الله بهن لاعرف من خلالهن طعم الحياة الجميلة، الى تلك الملائكة التي غيرت مفاهيم

الحب والصدقة والسند في حياتي، الى من تقاسمت معهم مر الأيام وحلوها، ممتنة للطريق، للأيام، للحظات، لكل شيء كان سببا في تجمعنا ولتكونا رفيقتا دربي الاعز دينا، هند .

الى رمز الحنان والحب والتضحية، الى من كانت دعواتهما الصادقة سر نجاحي جدي وجدتي بيتي الثاني (عثمان-حمامة) الحمد لله الذي أطال عمركم لحضور فرحتي .

الى رفاق الخطوة الأولى والخطوة ما قبل الأخيرة، الى من كانوا خلال السنين العجاف سحابا ممطرا. قوتي

وملجئي خالاتي كل بإسمهن "فوزية، نفيسة، نبيلة، اسيا، امال، لبيبة، سلاف طبتم وطاب ممشاكم، وتبواتم من الجنة مقعدا

إلى روح جدي وجدتي رحمهما الله وأسكنهم فسيح جناته.

الى الدكتور "مسقالجي سمير" منك تعلمنا ان للنجاح قيمة ومعنى وان التواضع سر النجاح وفيك رأينا من

تواضع لله رفعه، وجهتنا برفق واحتويتنا بصبر الحمد لله الذي وفقنا لاختيارك مشرفا على مذكرة تخرجنا .

أهديكم جميعا مذكرتي

يناس كاهينة

الوهراء

من قال أنا لها... نالها

وأنا لها وإن أبت رغما عنها أتيت بها

نلتها وعانقت اليوم مجدا عظيما لم يكن الحلم قريبا ولا الطريق سهلا ولكن. وصلت.

الحمد لله حبا وشكرا وامتنانا، الحمد لله الذي بفضله أدركت أسمى الغايات.

الحمد لله على لذة الانجاز الحمد لله عند البدء وعند الختام.

اهدي هذا النجاح لنفسى الطموحة اولا التي لم تركز إلى أحلام عابرة بل جعلت من حلم الأستاذية واقعا،

ثم إلى من كلله الله بالهبة والوقار الى من علمني العطاء بدون مقابل إلى من احمل اسمه بكل افتخار يا من

كنت سندا لي ولازلت و الحمد لله الذي مد في عمرك لأكون أخر خريجة لك يا أبي الذي حصد الأشواك عن

دربي ليمهد لي طريق العلم طاب بك العمر يا سيد الرجال و طببت لي عمرا يا والدي الغالي "حولي عبد الكريم".

إلى ملاكي في الحياة وقوتي بعد الله داعمتي الأولى والأبدية إلى جنة قلبي أُمي "يوي ليلي" أهديك هذا الانجاز

الذي لولا تضحياتك لما كان له وجود ممتة لان الله اصطفاك من بين البشر أما لي يا خير سند وعون في هذه

الحياة.

إلى من ساندني بكل حب وازاح عن طريقي المتاعب ممهدا لي الطريق زارعا الثقة والإصرار بداخلي إلى من

شد الله به عضدي فكان خير معين لي أخي الأكبر " اسحاق ".

إلى بعيدة عن ناظري قريبة من قلبي أختي حبيبتي "مايا" التي لم تمنعها المسافات يوما أن تكون أكبر داعمة لي

دون كلل او ملل وقت ضعفي تلك التي علمتني معنى الحب والصداقة في هذه الحياة.

إلى ملائكة رزقني الله بهن لأعرف كيف أكون خالة و عمّة في آن واحد "راما" ، "لاين" ، "تالين" ، "تزار".

الى من الله علي بصحبتهن و تقاسمت معهن حلو الأيام و مرها " ايناس " هند " اشراق".

إلى الدكتور المشرف مسقالي سمير شكرا على كل ما قدمته لنا من توجيهات ومعلومات قيمة جزاك الله كل

خير .

ناوين وينه

الإهداء

"هي إرادة برأت عشرين عشرين وخرج في الرابع والعشرين"

بسم الله خالقي ميسر أموري وعصمت أمري لك الحمد والامتنان

الحمد لله الذي علم بالقلم علم الانسان ما لم يعلم له المحامد والمدائح كلها بجوارحي وخاطري ولساني
الحمد لله الذي ما تيقنت به خيرا إلا وأغرقتني سرورا وفرحاً، رجوت كريماً قد وثقت بصنعه و ما كان من يرجو
الكريم يخيب و الروح من فرط السرور توهجت، الحمد لله على التمام والكمال، ليس بجدي و لكن توفيقك و
لطفك ربي الحمد لله على لذة الانجاز و الحمد لله عند البدء وعند الختام

لكل بداية نهاية ونهايتي أجمل بداية

لم تكن الرحلة قصيرة ولا ينبغي لها أن تكون، لم يكن الحلم قريب ولا الطريق كان محفوفاً بالتسهيلات لكنني
فعلتها

الى من أدى الأمانة ونشر الرسالة قدوتي وشفيعي خير خلق الله نبي الهدى محمد صلى الله عليه و سلم
الى جميع شهداء فلسطين وثورة حماس... علمني وطني أن كل الحروف مزيفة إن لم تكتب بدماء الشهداء
في لحظة أكثر فخراً أهدي نجاحي وثمره جهدي وفرحتي التي انتظرتها طوال حياتي الى من وهبوني الحياة
والامل

الى ملاكي الطاهر في الحياة الى معنى الحب والحنان الى بسمه الحياة وسر الوجود الى من جنة الله تحت
قدميها الى من أفنت عمرها وظلت تضحي لتخيط لما الطريق المستقيم الى من أفرعها بكائي يوم قبولي في
المدرسة، لا أعلم ان كنت ما زلتني تذكرين يوم رسوبي لكنني أتذكر جيداً دموعك وانهيارك عند رؤيتك لنتائجي
كانت تلك بداية جديدة لي فلولاك ما أكملت الطريق، الى أعلى الحبايب اليك أمني هنيئاً لقلبك هذه فرحتك و
نجاحك شكراً لأنك لم تستسلمي ماما

الى سيد الرجال الى من أعطانا بلا مقابل الى أمان العائلة من شاب لنكون ما نحن عليه الى من مد يده
دون كلل أو ملل الى والدي الغالي

الى من قال فيهم سنشد عضدك بأخيك، الى الإخوة والأخوات الذين تحلوا بالإخاء والوفاء

الى المؤسسات الغاليات الى تلك النجوم التي تنير طريقي الى من رزقت بهم سنداً الى ملاذي الأول والأخير

الى ملجئي وصمام أمانى الى نور منزلنا الى أختي الكبرى "فتيحة" وإلى اختي البريئة "رجاء"

الى من شاركتني الطفولة الى ضلعي الثابت الى من تذكروني بقوتي وتقف خلفي " اختي روميضاء "

الى فرحتنا الأولى إسراء و قرّة عين خالتها "فرح" الى أميرات العائلة "رودينة لمار آيلا"

الى أبطال الصغار "محمد زيد، إسحاق، أيوب و لقمان" الى ابنة الخالة الى الداعم القوي الى صحفيتنا الأولى "بثينة"

الى الأستاذ المشرف "مسقالي سمير" محظوظة جداً أنى كنت إحدى طالباتك تعلمت منك الكثير وتركت فيني أثراً جميلاً لا ينسى شكراً على إرشاداتك و توجيهاتك

الى رفقاء الخطوة الأولى و ما قبل الأخيرة الى من سعدت معهم، و برفقتهم في درب الحياة الحلوة و المرة سرت "قدس و منى"

الى من استمر صديقاً حقيقياً كما عرفته أول مرة الى ينباع الصدق الصافي "تور و تقوى"

الى من لم يخب ظني يوم اخترتها صاحبة لي، من تقاسمت معهم مرارة الأربع سنوات " إيماني و ملاكي

"الى جميلات دفعتي صاحبات القلب الطيب كل بإسمه و مقامه "روميضة، أسماء، أميمة، ملاك، منال و الى كل من ساندني طوال رحلتي الى من ساهم في تعليمي حرفاً إلى كل من أحب العلم و حببني في الفيزياء الى أساتذتي و دكاترتي،

الى من ساهم قلبي فتذكرهم قلبي الى كل روح جميلة صادفتها يوماً تركت فيى جميل الأثر

أهدي نجاحي لي و لنفسي الطموحة لسهر الليالي و تعب السنين الى من زادني فوق الحب حبا.

سائلة المولى أن يجزي الجميع خير الجزاء في الدنيا و الآخرة، ثم الى كل طالب علم سعى بعلمه ليفيد الاسلام و المسلمين و الجزائر بكل ما أعطاه الله من علم و معرفة

"ربما ما يراه الناس منك فشلاً، هو في الحقيقة خطوة نحو نجاحك الأكبر"

وختامها مسك

Jawaher Arrouci

شكر و عرفان

"وكان فضل الله عليك عظيماً"

بعد أن منّ الله علينا بإنجاز هذا العمل المتواضع، فإننا نتوجه الى سبحانه وتعالى أولاً وأخراً بالشكر والحمد على فضله وكرمه الذي غمرنا به فوفقنا إلى ما نحن عليه راجين منه دوام نعمه وكرمه. وأزكى الصلاة والتسليم على خاتم الانبياء والمرسلين محمد صلوات ربي وسلامه عليه.

"من لا يشكر الناس لا يشكر الله" فإننا نتقدم بالشكر والتقديم والعرفان للاستاذ المشرف الدكتور مسقالي سمير على إشرافه على هذه المذكرة، وعلى الجهد الكبير الذي بذله معنا، وعلى نصائحه القيمة التي مهدت لنا الطريق لإتمام هذه الدراسة، فله منا فائق الحب والتقدير والاحترام .

نخص بالشكر ايضاً لجنة المناقشة الذين سنال شرف مناقشتهم لمذكرة تخرجنا الدكتور بوجعدار جمال، الدكتور حساينية عمار والدكتور بوعويينة بركات.

كما نتوجه في هذا المقام بالشكر الخاص لجميع أساتذة قسم الفيزياء الذين رافقونا طيلة مشوارنا الدراسي بالمدرسة العليا للأساتذة - سكيكدة - ولم يبخلوا في تقديم يد العون لنا، كل التبجيل والتقدير لكم .

كما ندين بالشكر أيضاً لمدير المدرسة الاستاذ بوجعدار جمال الذي حرص دوماً ان يضع مصلحة الطالب فوق كل اعتبار، وفي الختام نشكر كل من ساعدنا وساهم في إتمام هذا العمل سواء من قريب أو بعيد، حتى ولو بكلمة طيبة أو إبتسامة عطرة، وفي الختام نشكر كل من ساعدنا وساهم في إتمام هذا العمل سواء من قريب أو بعيد، حتى ولو بكلمة طيبة أو إبتسامة عطرة .

الفهرس :

أ.....	مقدمة عامة
	1. الفصل الأول: اساسيات علم الفلك
2.....	مقدمة جزئية 1.....
3.....	1. علم الفلك
3.....	1.1. تعريف علم الفلك.....
3.....	2.1 أسباب عدم اهتمام الناس بعلم الفلك.....
4.....	3.1 أهمية دراسة علم الفلك.....
6.....	4.1 علم الفلك وعلاقته بالعلوم الأخرى.....
6.....	1.4.1 علم الفلك والرياضيات.....
7.....	2.4.1 علم الفلك والفيزياء.....
7.....	3.4.1 علم الفلك والتقنيات الحديثة.....
8.....	5.1 بدايات علم الفلك (تاريخ علم الفلك في الحضارات القديمة).....
12.....	1.5.1 علم الفلك في الحضارة البابلية (بلاد الرافدين)
16.....	2.5.1 علم الفلك في الحضارة المصرية القديمة (بلاد نهر النيل).....
20.....	3.5.1 علم الفلك في الحضارة الهندية
21.....	4.5.1 علم الفلك في الحضارة الصينية.....
23.....	5.5.1 علم الفلك في الحضارة الاغريقية (اليونان و الرومان)
25.....	6.5.1 علم الفلك في حضارة المايا.....

25.....	7.5.1. علم الفلك في بلاد فارس.....
26.....	8.5.1. علم الفلك في الإسلام
27.....	9.5.1. علم الفلك عند العرب بعد الإسلام.....
30.....	10.5.1. علم الفلك في الحضارة الأوروبية.....
31.....	6.1. علم الفلك الحديث.....
31.....	1.6.1 تعريف علم الفلك الحديث.....
32.....	2.6.1 تاريخ علم الفلك الحديث.....
36.....	3.6.1 فروع علم الفلك.....
37.....	4.6.1 أصناف علم الفلك.....
37.....	أ. علم الفلك الرصدي.....
43.....	ب. علم الفلك النظري.....
43.....	7.1. نظرة على الكون.....
48.....	8.1. المجرات.....
49.....	1.8.1. أنواع المجرات.....
52.....	9.1. المجموعة الشمسية.....
53.....	1. خلاصة.....
.....	II. المحور الثاني: الكيمياء الفلكية
55.....	2. مقدمة جزئية.....
56.....	1. تعريف الكيمياء الفلكية.....

1.1	منظور تاريخي للكيمياء الفلكية.....	56
2.1	بدايات علم الكيمياء الفلكية ودراسة السحب المنتشرة والشفافة	57
1.2.1	بيانات Herschel-Hifi و تعزيز دراسة الوسط نجمي	57
3.1	التحديات المتبقية.....	58
4.1	التقنيات المستخدمة في الكيمياء الفلكية.....	59
5.1	أهداف الكيمياء الفلكية.....	59
6.1	كيمياء النجوم.....	59
1.6.1	دورة تكوين النجوم.....	59
7.1	التطورات الكبيرة في الكيمياء الفلكية خلال العقد الماضي.....	61
8.1	مرافق رصد حديثة لدراسة مناطق تكوين النجوم.....	62
9.1	المزايا الرئيسية لعرض النطاق الترددي الكبير في دراسة الوسط البين نجمي.....	63
10.1	التحديات المرتبطة بعمليات المسح الطيفي واسعة النطاق.....	64
11.1	الغلاف الجوي الأرضي.....	64
12.1	الغلاف الجوي في الفلك.....	70
2	خلاصة.....	72
III	المحور الثالث: دراسة حاسوبية للتفاعل الجوي للهيدرازين بواسطة جذر الهيدروكسيل.....	
مقدمة جزئية.....		74
1	الكيمياء الحاسوبية وطرائقها.....	75
1.1	طرائق الكيمياء الحاسوبية.....	76

81	2.1. المجموعات الأساسية.....
100	3.1. تفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي.....
104	4.1 الأساليب الحسابية.....
107	5.1. المراحل المتبعة لإيجاد الحالة الانتقالية بالاعتماد على برنامج Gaussian View06.....
109	6.1. مسارات دخول التفاعل.....
110	1.6.1. مسارات تكوين $N_2H_3 + H_2O$
115	2.6.1. مسارات تكوين $H_2NOH + NH_2$
116	3.6.1. مسارات تكوين $HNNHOH + H^+$ (تفاعلات SN2 الإضافة/الإزالة).....
117	7.1. طاقة كسر الرابطة.....
127	8.1. مصير الهيدرازين في الغلاف الجوي.....
131	خلاصة.....
	قائمة المراجع.....
	الملخص.....

قائمة الجداول :

- جدول 1 : أهم الأعمال و الاكتشافات في علم الفلك منذ أيام البابليين و حتى منتصف القرن التاسع عشر و اكتشاف كوكب نبتون ,حيث يشمل الفترة الزمنية نفسها التي يتناولها المحور الأول لتطور علم الفلك ...26
- جدول 2 : أسماء بعض النجوم و الكواكب بالعربية والانجليزية 45
- جدول 3 : أطوال الروابط (بالأنغستروم) ل TS2 و TS3 128
- جدول 4 : يمثل الطاقات الالكترونية و الطاقات النسبية و ارتفاعات الحواجز الامامية و كذلك ارتفاعات الحاجز العكسي بمسارات التفاعل N_2H_4+OH على مستوى CCSD (T)/CBS 130
- جدول 5: BDES المحسوبة للروابط N-N و N-H من خلال التفكك المتمثب في جزيئ N_2H_4 عند مستويات مختلفة. 134
- جدول 6 : المعاملات الديناميكية الحرارية (كيلو كالوري لكل مول) للمركبات المضافة P1-P3 من تفاعل N_2H_4 +OH على سطح طاقة العزم الزوجي عند المستوى CCSD(T)/CBS طاقة UMP2/ATZ 145
- جدول 7 : يمثل ثابت سرعة تفاعل $N_2H_4 + OH$ للمسار 1 + المسار 2، و تركيز جذور الهيدروكسيل في ارتفاعات مختلفة، وأعمار N_2H_4 في الغلاف الجوي في محيط من الجذور الهيدروكسيلة الجوية كدالة للارتفاع 146

قائمة الصور التوضيحية:

- 29 صورة توضيحية 1 : الزقورة التي استخدمها العراقيون القدماء لرصد السماء
- 30 صورة توضيحية 2 : تقويم فلكي بابلي
- 31 صورة توضيحية 3 : الأعداد عند البابليين
- 32 صورة توضيحية 4 : صورة السماء عند المصريين تمثلها بقرة عظيمة
- 32 صورة توضيحية 5 : صورة الاله شو يرفع السماء تحوت
- 33 صورة توضيحية 6 : استخدام المركب لقياس الساعات
- 33 صورة توضيحية 7 : المزولة الشمسية الفرعونية
- 35 صورة توضيحية 8 : مقترنة بين بناء موقع أهرامات الجيزة وموقع نجوم حزام الجبار
- صورة توضيحية 9 : مقارنة بين موقع الأهرامات و نهر النيل مع بعض النجوم المعروفة و حزام درب التبانة
- 35
- 36 صورة توضيحية 10 : الرسومات الهيغروغرافية المؤرخة للرزنامة المصرية القديمة
- 37 صورة توضيحية 11 : خارطة سماوية صينية قديمة
- 38 صورة توضيحية 12 : خارطة شوتسو
- 39 صورة توضيحية 13: مرصد بكين شاهد على اهتمام الصين القديمة بعلم الفلك
- 39 صورة توضيحية 14 : رسم لخريطة موقع مرصد بكين في الصين القديمة
- 40 صورة توضيحية 15 : نظرية ارسطو في توزيع الكواكب على كرات
- 40 صورة توضيحية 16 : نظرية مركزية الكون حسب بطليموس
- 41 صورة توضيحية 17 : شكل المرصد الفلكي للمايا قديما
- 41 صورة توضيحية 18 : نقوش لحضارة المايا تمثل عملية الرصد
- 43 صورة توضيحية 19 : مخطوطات اسلامية في علم الفلك
- 44 صورة توضيحية 20 : لوحة تمثل علماء الفلك المسلمين مع آلاتهم في العهد العباسي
- 46 صورة توضيحية 21: شروحات البروني لظاهرة الكسوف

- 46 [صورة توضيحية 22 : الاسطرلاب العربي](#)
- 48 [صورة توضيحية 23 : المدارات الإهليجية للكواكب.](#)
- 49 [صورة توضيحية 24 : قانون كبلر الثالث.](#)
- 49 [صورة توضيحية 25 : رسم توضيحي لقوانين كبلر.](#)
- 50 [صورة توضيحية 26 : منظار غاليليو.](#)
- 50 [صورة توضيحية 27 : ملاحظات غاليليو لتضاريس القمر و مقارنتها بالواقع.](#)
- 51 [صورة توضيحية 28 : التلسكوب العاكس لنيوتن.](#)
- 58 [صورة توضيحية 29 : مراحل نشوء الكون من الانفجار العظيم.](#)
- 59 [صورة توضيحية 30 : المجرات الحلزونية العادية.](#)
- 59 [صورة توضيحية 31 : شكل المجرات الحلزونية.](#)
- 60 [صورة توضيحية 32 : شكل المجرات الإهليجية.](#)
- 60 [صورة توضيحية 33 : شكل مجرة سحابة ماجلان.](#)
- 60 [صورة توضيحية 34 : شكل مجرة غير منتظمة.](#)
- 61 [صورة توضيحية 35 : شكل مجرة عدسية.](#)
- 62 [صورة توضيحية 36 : شكل مجرة درب التبانة.](#)
- 66 [صورة توضيحية 37 : العناصر المرتبطة بالمربعات التي تتناسب مساحتها مع توفرها في الكون.](#)
- 76 [صورة توضيحية 38 : نسبة الغازات في الغلاف الجوي الأرضي.](#)
- 77 [صورة توضيحية 39 : تموضع الأوزون بين طبقتي التروبوسفير و الستراتوسفير.](#)
- 80 [صورة توضيحية 40 : توزع طبقات الغلاف الجوي للأرض مع درجة الحرارة لكل طبقة.](#)
- 80 [صورة توضيحية 41 : زاويتي الشفق الفلكي و الفجر الفلكي.](#)
- 95 [صورة توضيحية 42 : تماكبات الأوزون.](#)
- 98 [صورة توضيحية 43 : رسم جزئيات الماء ببرنامج GAUSSIAN.](#)

الاختصارات:

- **DFT :Density Functional Theory** دالية الكثافة
- **TS : Transitional State** الحالة الانتقالية
- **PES : Potentail Energy Surface** سطح الطاقة الكامنة
- **BDE : Bond Dissociation Energy** طاقة كسر الرابطة
- **NBO : Natural Bond Orbital** مدارات الرابطة الطبيعية
- **AMBER: Assisted Model Building with Energy Refinement.** بناء النموذج المساعد مع تنقيح الطاقة
- **CHARMM: Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics.** الكيمياء في ميكانيكا الجزيئات الضخمة في هارفرد
- **OPLS: optimized potential for liquid simulations.** الامكانية المحسنة للمحاكاة السائلة
- **MMFF: Merck Molecular Force Field.** مجال القوى الجزيئية لميركت
- **UFF: Universal Force Field.** مجال القوى العالمي
- **Dreiding: The Dreiding force field.** مجال القوى دريدينغ
- **CC: COUPLED CLUSTER THEORY.** نظرية العنقود المشترك
- **GVB: THE GENERALIZED VALENCE BOND METHOD.** طريقة الصلة العامة للعدد
- **CI: CONFIGURATION INTERACTION.** التفاعل التكويني
- **MCSCF: MULTI-CONFIGURATIONAL SELF-CONSISTENT FIELD.** الحقل المتناسق متعدد التكوينات
- **MPN: MÜLLER-PLESSET PERTURBATION THEORY (MPN, N IS THE ORDER OF CORRECTION)** نظرية الاضطراب لمولر-بليست
- **CNDO: COMPLETE NEGLECT OF DIFFERENTIAL OVERLAP.** الالهال الكامل للتداخل الوظيفي
- **INDO: INTERMEDIATE NEGLECT OF DIFFERENTIAL OVERLAP.** الالهال الوسيط للتداخل الوظيفي
- **MNDO: MODIFIED NEGLECT OF DIFFERENTIAL OVERLAP.** الالهال المعدل للتداخل الوظيفي
- **AM1: AUSTIN MODEL 1.** نموذج أوستن 1
- **PM3: PARAMETRIC MODEL NUMBER 3** النموذج القياسي رقم 3
- **LDA: LOCAL DENSITY APPROXIMATION.** تقريب الكثافة المحلية
- **GCA: GRADIENT CORRECTED APPROXIMATION** تقريب مصحح للتدرج
- **B3LYP: (BECKE'S 3 PARAMETER EXCHANGE CORRELATION FUNCTION WHICH USES 3 PARAMETERS) AND LYP (THE LEE, YANG AND PARRCORRELATION FUNCTIONAL).** دالية تبادل و LYP (دالية التبادل التبادلي ليانغ و بار التبادل الثلاثية لبيك التي تستخدم 3 معلمات نظرية رايس - رامسبرجر - كاسل - ماركوس RRKM : RICE-RAMSPERGER-KASSEL-MARCUS

"انها خطوة صغيرة، لكنها قفزة جبارة للجنس البشري"؛ كانت هذه أول كلمات قيلت على سطح القمر عبر التاريخ البشري، عن طريق رائد الفضاء الأمريكي نيل ارمسترونغ عندما وطأ قدمه سطح القمر لأول مرة، في يوم الاثنين الموافق لـ 21 جويلية 1969م، و هي كلمات بسيطة لكن معانيها كبيرة جدا، لأنها اختصرت المستوى العلمي و التكنولوجي الذي وصلته البشرية نهاية القرن العشرين، و خاصة في علوم الفضاء و الفلك و الكون.

منذ فجر التاريخ سعى الانسان لفهم العالم من حوله تدفعه رغبته الفطرية في استكشاف المحيط الذي يعيش فيه وشمّل هذا السعي فهم الظواهر الطبيعية التي يواجهها يوميا سواء تلك التي تبدو بديهية مثل حركة الشمس والقمر أو تلك التي تحدث في فترات محددة من السنة مثل تعاقب الليل والنهار وتغير الفصول، كما شمل فهم الظواهر الاستثنائية مثل الكسوف والخسوف وظهور المذنبات، هذا الشغف بالاستكشاف والفهم هو ما أدى إلى نشأة علم الفلك والذي انبثقت منه عدة فروع ، وأهمها الكيمياء الفلكية، بداية مع ظهورها واجه العلماء عدة تحديات أعاقت دراساتهم، ولكن مع التطور التكنولوجي استطاعوا التوصل إلى بعض خبايا الكون، و لازالت الدراسات و الاكتشافات تتطور يوما بعد يوم.

مما أدى بنا إلى طرح موضوع هذه المذكرة المتواضعة والمختصرة تحت عنوان "مدخل الى الكيمياء الفلكية". وقد قسمنا بحثنا الى ثلاثة فصول:

الفصل الأول: الذي يتضمن نبذة تاريخية عن علم الفلك في مختلف العصور والحضارات وكذلك تطور الوسائل المستعملة في هذا المجال كما يتضمن نشأة الكون ونظرياته الحديثة " نظرية الانفجار العظيم".

الفصل الثاني: فقد تناولنا لمحة عن الكيمياء الفلكية واهم ما توصلت اليه في العصر الحالي وكذلك التحديات التي تواجهها.

الفصل الثالث: تضمن دراسة حاسوبية لأحد التفاعلات الكيميائية تحت تأثير كل من درجة الحرارة والضغط "أكسدة الهيدرازين بواسطة جذر الهيدروكسيل في الغلاف الجوي".

١. الفصل الأول:
أساسيات علم الفلك.

المقدمة الجزئية:

يعد علم الفلك من أقدم العلوم، حيث اهتم الإنسان به منذ القديم عبر حضارات مختلفة، فطالما فتنت السماء الناظر إليها ودفعته للبحث في أسرارها، ومثله مثل أي علم قد تطور مع تطور معرفة الانسان بالطبيعة، التي هو جزء منها اذ ان نكاء الانسان وعقله المفكر والمبدع الذي يتميز به عن سائر المخلوقات على الارض جعله يفكر في السماء وأجرامها المختلفة فأدرك مدى عظمتها وروعتها.

فعلم الفلك أول علم طبيعي في التاريخ يصل إلى مستوى عالٍ من التطور والقدرة التنبؤية، واستنتج هذا الأمر من نتائجه في الألفية الأولى قبل الميلاد، حيث يركز النجاح الكمي المبكر لعلم الفلك، مقارنةً بالعلوم الطبيعية الأخرى على عدة دوافع، تمتعه بميزة الاستقرار والبساطة، فالشمس والقمر والكواكب والنجوم تتحرك في أنماط معقدة ولكن بانتظام دقيق، إضافةً لعدّه علمًا من علوم الرياضيات عند إخضاعه للمعالجة الرياضية، وبسبب ارتباط علم الفلك بالدين والفلسفة مما ساعده اجتماعيًا دون العلوم الأخرى. [1]

1. علم الفلك:**1.1 تعريف علم الفلك:**

هو العلم الذي يدرس نشأة الأجرام الفلكية وحركتها ومواقعها، وهو أحد أقدم العلوم ويختلف عن:

أ. التنجيم (Astrologie): مصطلح أطلق على الموضوع الذي يحاول وضع علاقة بين الأجرام الفلكية والأحداث الإنسانية ولا يمكن اعتباره علم.

ب. علوم الكون (Cosmologie) الذي يدرس الكون (نشأة الكون ويضع تصور لنشوء الكون وهيئته ومستقبله).

ج. الفيزياء الفلكية (Astrophysiques) العلم الذي يدرس العلاقة بين القوى الطبيعية والأجرام الفلكية. [2] وفي تعريف آخر يعرف علم الفلك بأنه الدراسة العلمية للأجرام السماوية النجوم، الكواكب، المذنبات، المجرات، السدم والظواهر التي تحدث خارج نطاق الغلاف الجوي والغازات والغبار.

ويعتبر علم الفلك من أوائل العلوم التي نشأت في تاريخ البشرية وهو علم يهتم بمراقبة ودراسة الأحداث التي تقع خارج الكرة الأرضية وغلافها الجوي وعلم التنبؤ بالظواهر الفلكية، يدرس علم الفلك بدايات الاجسام التي يمكن مراقبتها في السماء (خارج الأرض) وتطورها وخصائصها الفيزيائية والكيميائية والاحداث المرافقة لها.

عرفت وكالة ناسا علم الفلك بأنه دراسة النجوم، الكواكب والفضاء، وقد ركز على ملاحظات الأجرام السماوية، وهو قريب بعض الشيء من الفيزياء الفلكية التي تتضمن دراسة فيزياء الفلك، التي تعتمد بدورها على سلوك وخصائص وحركة الأجسام الفلكية، ويتضمن علم الفلك الحديث العديد من عناصر، حركات وخصائص هذه الأجسام. [4]

2.1. أسباب عدم اهتمام الناس بعلم الفلك: [5]**➤ أسباب حقيقية:**

- تناوب الليل والنهار.
- بطء حركة الأجرام الفلكية بالنسبة لإدراك الإنسان.
- صغر عمر الإنسان مقارنة بالتحويلات والدورات الفلكية.

➤ أسباب ظرفية:

- ظهور وسائل توقيت أدق من الاعتماد على الأجرام.
- كثرة الأضواء الكهربائية التي تحجب عن عامة الناس جمال القبة السماوية.
- الاعتقاد بأن علم الفلك علم معقد يحتاج للكثير من الجهد لفهمه أو الاعتقاد أنه ضرب من ضروب التنجيم.

3.1. أهمية دراسة علم الفلك:

هناك العديد من المهام التي يقوم بها علم الفلك، والعديد من الفوائد التي تنشأ عنه [6] [8] [7] أهمها:

- ترويض البشرية بالمزيد من المعرفة عن الكون.
- يري المخلوق عظمة الخالق ودقة صنعه وكذلك يريه سعة هذا الكون ومقدار الحيز الزمني والمكاني الذي يشغله الإنسان في هذا الكون وهو أحد مصاديق التفكير في خلق السماوات والأرض.
- تعلم عدد السنين والحساب التي تقوم عليها أمور الناس المدنية والشرعية.
- الاستفادة العملية في تحديد الاتجاهات، مواعيد المد والجزر، فارق التوقيت وغيرها.
- الفائدة الأخلاقية السلوكية لتعلم علم الفلك ويرجع ذلك إلى الانتظام بين الجانب التكويني والجانب التشريعي والتربوي لهذا الكون والحياة بمختلف جوانبها.
- يساعد علم الفلك على التطورات التكنولوجية الحديثة المهمة في حياة الإنسان، كالتصوير الطبي والانترنت اللاسلكي فهو أساس التقدم التكنولوجي، ويمكك الكثير ليقدمه لمستقبل البشرية، عدا عن إعطائه لشعور لا مثيل له لدى الإنسان بهذا الكون الضخم والواسع.
- يركز علم الفلك على ثلاثة مجالات رئيسية وهي: التكنولوجيا والمهارات، العلم والبحث، الثقافة والمجتمع، حيث يُساهم هذا في تكنولوجيا واقتصاد المجتمع، من خلال الدفع المستمر للوسائل والعمليات والبرامج التي تتجاوز القدرة الحالية.
- يُنتج التطور العلمي والتكنولوجي في علم الفلك، وخاصةً في مجالين الإلكترونيات والبصريات اللذان يعدان من ضروريات الحياة البشرية، كالتطبيقات الحاسوبية الشخصية، وأقمار الاتصالات، والهواتف المفتوحة، وأنظمة تحديد المواقع العالمية، والألواح الشمسية وأجهزة التصوير بالرنين المغناطيسي.
- تم استخدام علم الفلك لتقدير الوقت، وتحديد الفصول، والتنقل في المحيطات ذات المساحات الشاسعة.
- يحافظ علم الفلك على الجنس البشري، فمن الضروري دراسة تأثير الشمس على مناخ الأرض، وكيفية تأثير الطقس ومستويات المياه وغيرها من الأمور الأساسية لاستمرار الجنس البشري.

- يساعد علم الفلك الذي يتضمن رسم خرائط لحركة جميع الكائنات في النظام الشمسي، في التنبؤ بالتهديدات المتوقعة من الفضاء على كوكب الأرض، فهذه الأمور تساهم في تغييرات كبيرة في هذا العالم.
- تُستخدم أرصاد النجوم ونماذج الغلاف الجوي النجمية للتمييز بين أعمدة الصواريخ والأجسام الكونية.
- تُستخدم أرصاد التوزيعات النجمية في السماء، والتي تُستخدم لتوجيه التلسكوبات ومعاينتها، في مجال هندسة الطيران.
- تعتمد أقمار نظام تحديد المواقع العالمي (GPS) على الأجسام الفلكية، مثل الكوازارات والمجرات البعيدة، لتحديد المواقع بدقة.
- تتم مراقبة اندماج البلازما والذي يوصف بحالته المقبولة عند اندماج نواتان ذريتان خفيفتان لتشكيل نواة أثقل، والذي يمكن السيطرة عليه للحصول على طاقة آمنة ونظيفة، من خلال وسائل التكنولوجيا المصممة لتصوير الأشعة السينية في تلسكوبات الأشعة السينية.
- يمكن أن تساهم الأساليب الفلكية في إيجاد أنواع جديدة من الوقود الأحفوري، ولتقدير إمكانية وجود مصادر جديدة للطاقة المتجددة.
- صور العلماء المختصين بعلم الفلك الراديوي طريقة تستعمل كوسيلة غير جراحية للكشف عن الأورام، والتي تنتج معدل اكتشاف إيجابي حقيقي بنسبة 96% في مرضى سرطان الثدي.
- طورت وكالة ناسا المختصة بعلم الفلك، الماسح الضوئي ذو الأشعة السينية المنخفضة، والذي يتم استخدامه في جراحة العيادات الخارجية، والإصابات الرياضية، وتم استخدامه للكشف عن تلوث بعض حبوب الأدوية.
- تساعد البرامج المُعالجة لصور الأقمار الصناعية المأخوذة من الفضاء، الباحثين الطبيين في إنشاء طريقة بسيطة لإجراء فحص واسع الحدود لمرض الزهايمر.
- تساعد التطورات الحاصلة في علم الفلك خبراء الفضاء في اكتشافاتٍ متغيرة باستمرار، إضافةً لاستكشاف الكواكب القريبة والنجوم البعيدة والمجرات المختلفة بالتعاون مع مجالات علمية أخرى.
- يعد علم الفلك أمرًا هامًا في حياتنا اليومية، فهناك العديد من الأمور التي يواجهها البشر يوميًا مشتقة من تقنيات فلكية، كالشبكة اللاسلكية، والأشعة السينية المستخدمة في المطارات، ومقياس طيف أشعة غاما في الأصل لتحليل التربة القمرية لاستكشاف الضعف الهيكلي للمباني التاريخية أو للبحث خلف الفسيفساء الهشة دون أن يتم خرابها، وتعد جميع المشاهد التكنولوجية الدقيقة في الحياة اليومية قد قُدمت من قبل علم الفلك.

- يساهم علم الفلك مساهمةً كبيرةً في مجال الطب، إذ يساهم البحث الفلكي في عالم الطب بتطوير مناطق معقمة تمنع الغبار أو أي عوالق تلصق وتعيق الرؤية في الأدوات الموجودة في التلسكوبات والتي تستخدم في علم الفلك، إضافةً لاستخدام البصريّات التكيفية المستخدمة في علم الفلك لتصوير الشبكية عند المرضى الأحياء لدراسة أمراض مثل الضمور البقعي والتهاب الشبكية الصباغي في مراحلها المبكر.

4.1. علم الفلك وعلاقته بالعلوم الأخرى:

لم يعتمد علم الفلك في مراحل تطوره على الرصد فقط، بل اتصل بالعديد من العلوم الأخرى وهي علوم مساعدة مثل الرياضيات والبصريّات، من خلال الاعتماد على مبادئها ونظرياتها، وهناك علوم اسفرت عن ارتباطها بعلم الفلك نشأة علوم جديدة ضمن إطار علوم الفضاء كالفيزياء الفلكية التي نتجت عن الفيزياء، والكيمياء الفلكية التي نتجت عن الكيمياء، والطب الفلكي وعلم الآثار الفلكي وغيرها من العلوم.

وهكذا ساهمت علوم عدة بشكل مباشر وغير مباشر في رصد الاجرام السماوية، اذ ان رصد النجوم والكواكب يتم بواسطة الآلات البصرية، يتم قياس سرعة دورانها وحساب المسافات التي تفصل بين النجوم بواسطة النظريات الرياضية والفيزيائية، كما يتم تحليل تركيبها بواسطة التقنيات الفيزيائية والكيميائية، وتعتمد صناعة المركبات الفضائية التي تخترق أعماق الفضاء على النظريات الفيزيائية والتقنيات المختلفة كالإلكترونيك وعلوم الاتصال والهندسة الميكانيكية والمعلوماتية... الخ. [9]

1.4.1. علم الفلك والرياضيات:

ارتبط علم الفلك بالرياضيات منذ الحضارة البابلية والاعريقية، فواكب تطور النظريات الرياضية تطور علوم الفضاء، خاصة عندما ظهرت الاكتشافات الثورية في علم الحساب والهندسة وعلم المثلاث وغيرها، حيث كانت تستعمل الرياضيات في تحديد حجم الاجرام السماوية، حركاتها، مداراتها ودوراتها، كما انها كانت تساهم في وضع القوانين وفي تحديد مدة السنة.

اعتمد البابليون في تقسيم السنة الى 365 يوما على النظام الستيني، ولا يزال هذا النظام يستعمل الى يومنا هذا في تقسيم الساعة الى ستون دقيقة والدقيقة الى ستون ثانية. كما وضع اودوكس نظاما هندسيا لشرح حركة الكواكب في عام 370 ق.م وهي نظرية مركزية الأرض.

وفي القرن الثاني ميلادي استخدم بطليموس في كتابه المجسطي عمليات هندسية وحسابية لعرض الظواهر الفلكية التي رصدها، وكذلك وصف الحركات الظاهرية للكواكب والنجوم.

تشير الدراسات الى ان اغلبية علماء الفلك المسلمين كانوا كذلك علماء رياضيات، وبذلك ساهموا في تطوير كلا العلمين على حد سواء، منهم الخوارزمي مؤسس علم الجبر، والبتاني واضع قانون جيب التمام في حساب المثلثات الكروية كمثال على ذلك، من ناحية أخرى يظهر ارتباط علم الفلك بالرياضيات في كتاب الشفاء لابن سينا، حيث انه يتناول علم الفلك في القسم الرابع من الجزء المخصص للرياضيات.

إذا فإن علم الرياضيات بصفة عامة، وعلم الحساب بصفة خاصة قد ساهم في التثبت من صحة النتائج التي تم التوصل اليها عبر الرصد وفي اكتشاف موقع نبتون، الكوكب الثامن في نظامنا الشمسي.

2.4.1. علم الفلك والفيزياء:

ظل علم الفلك متسما بالطابع الرياضي حتى مرحلة متقدمة من تاريخه، ولكنه كان في الوقت عينه يعتمد على علم اخر في تطوره، وهو علم الفيزياء، الذي سيأخذ شيئاً فشيئاً أهمية كبيرة خاصة في تطور النظريات الفلكية.

لقد ساهمت الفيزياء في فهم طبيعة الاجرام السماوية، والنجوم على وجه الخصوص، وفي دراسة الفضاء المحيط بالنجوم والمواد التي تكونه، كما ساهمت في اكتشاف تركيبية الكون وفهم الأسباب التي تكمن وراء الظواهر السماوية والفلكية، كالكسوف والخسوف وتلاؤم النجوم ودوران الأرض وسائر الاجرام السماوية، كما ساهمت في اكتشاف التركيبية النووية ودورة حياة النجوم والجاذبية الكونية وقانون النسبية، ونظريات واكتشافات أخرى اثرت في تطور علم الفلك.

واهم فرع من علم الفيزياء هو علم البصريات الذي ساهم في تطور علم الفلك بشكل ملحوظ خاصة علم الفلك الرصدي، فألات الرصد الفلكية، كالمنظار الفلكي والتلسكوبات على أنواعها، ليست سوى اقتباس من علم البصريات. كما ساعدت هذه الأخيرة على فهم بعض الظواهر الجوية وتفسيرها، كالهالة حول الشمس او القمر التي يسببها انكسار الضوء على بلورات الجليد الموجودة في الجو.

3.4.1. علم الفلك والتقنيات الحديثة:

شهد علم الفلك تطوراً ملحوظاً وسريعاً مع بداية القرن العشرين، وذلك بفضل التطور التكنولوجي الذي ساهم في بناء المركبات الفضائية، والتلسكوبات والأقمار الصناعية، مما أتيح للإنسان سبر أعماق الفضاء وتحقيق اكتشافات جديدة.

لقد ساهم اكتشاف الأشعة تحت الحمراء، الأشعة السينية، الأشعة غاما والموجات الراديوية في زيادة معلومات الفلكيين عن تركيب الكون وتاريخه وتطوره.

تم تصميم تلسكوبات راديوية وأخرى بصرية لرصد الأشعة ما دون الحمراء، الأشعة السينية، والأشعة غاما، كلها أدت إلى اكتشافات فلكية جديدة كالكوازار والبلازار، الثقوب السوداء، والنجوم النيوترونية والأشعة الكونية التي تصدر من هذه الأجسام.

ولا يمكن أن نهمل علم الحاسوب وعلاقته بعلم الفلك في أيامنا هذه، حيث أصبح جزءاً مهماً من علم الفلك الحديث، فأجهزة الحاسوب تساعد على توجيه التلسكوبات الضخمة الأرضية أو الفضائية وعلى ضبط مرآياتها، وعلى التحكم بعمليات قياس الإشعاعات التي تجمعها التلسكوبات وعلى تحليل الأرصاد، كما أنها تستخدم في علم الفلك النظري.

5.1. بدايات علم الفلك (تاريخ علم الفلك في الحضارات القديمة):

إن تاريخ حضارة العلوم والمعرفة بشكل عام، وتاريخ علم الفلك بشكل خاص، من المواضيع التي أولتها البحوث والمناهج الحديثة اهتماماً بارزاً.

مما أصبح من البديهيات المتأصلة في الفكر الحديث أن أسس الحضارة الحديثة قد بنيت على تراث وإنجازات سابقة، وبفضلها تم الكشف عن الكثير منها لعلم الآثار، وما رافقه من تحقيقات وأبحاث. لذلك يمكن القول إن تقييم مختلف جوانب الحضارة الحالية والحكم على صحتها وسلامتها يتم من خلال دراسة الأسس التي قامت فوقها وهذا من خلال دراسة تطورها وتتبع المراحل التي مر بها هذا التطور من النمو والنضج إلى وضعه الحالي.

يعتبر علم الفلك من أقدم العلوم التي عرفت البشرية، فقد كان الإنسان مهتماً بالسماء والظواهر الفلكية منذ فجر البرزوخ عندما رفع رأسه نحو السماء لتأمل تلك الظواهر الفلكية، ولعل أول ما لاحظته هي الحركة المنتظمة للشمس والقمر و تغير أوجه هذا الأخير، لكن علم الفلك لم يكن حتى في بداياته نشاطاً تأملياً بحتاً و كان دون فائدة علمية، و إنما اهتم الإنسان برصد الأجرام و مكان تواجدها و حركاتها لأمر بسيطة تخص حياته اليومية، فقد دفعت حاجة الإنسان إلى تحديد الوجة الجغرافية للشعوب المسافرة خاصة البحارة و القوافل بواسطة تلك الاجرام، و إلى معرفة مواسم الحرث و الحصاد نحو ترقب السماء و الاستعانة بالظواهر الفلكية و كانت بعض الشعوب مثل الصابئة تعبد النجوم معتقدين انها تتحكم في حياتهم، فقد كان الانسان يقوم بالفعل برصد السماء

منذ عشرات الاف السنين، و كانت الظواهر مثل حركة الشمس و تغير أوجه القمر معتادة بالنسبة اليه و شيئاً فشيئاً بدأ في استخدام تلك الظواهر لصالحه، فسمحت مراقبة السماء بالعين المجردة للحضارات القديمة باستخلاص قدر كبير من المعلومات عن الاجرام السماوية، فقد كان البابليون على سبيل المثال مراقبين دقيقين لكنهم لم يسعوا الى استنتاج قوانين عامة من الظواهر الفلكية التي رصدها، من ناحية أخرى كان علم اليونانيين نظرياً اكثر منه تجريبياً، و كان الفلاسفة اليونانيين على دراية جيدة بالمناقشات التي يتم فيها دفع المنطق الى أقصى حد، بالإضافة للتعرف على حركة الاجرام وضع القدماء توصيفات للعالم و تفسيرات الأصل، كل تلك النظريات كانت مبنية على فكرة مشتركة و هي ان وضع الأرض في مركز الكون، و كذلك استطاعوا القدماء الربط بين حركات الكواكب و الظواهر السماوية من جهة و الفصول من جهة أخرى، سنتحدث بتفصيل عن انجازات كل حضارة في هذا الفصل.

كان ثمة فكر مشترك آخر و هو الاعتقاد في القوة التي يمكن للأجرام السماوية ممارستها على البشر، فقد اعتبروا الشمس و قمر ظواهر طبيعية مثلها مثل سقوط الامطار مثلاً، و اعتقدوا أن الاجرام لها تأثير كبير على حياة البشر و لها دلالات تتعلق بمصائرنا، و كان ذلك هو مولد التنجيم، فقد كان المنجمون يزعمون أن لهذه الكواكب روحانيات و ملوك يخدمونها ... فكل التصورات للعالم التي تخيلتها تلك الحضارات كانت تشترك في كونها مقصورة على توصيف الظواهر و لم تبحث عن اكتشاف قانون عميق او تقديم تفسير عقلائي للعالم. [10]

جدول 1: أهم الأعمال و الاكتشافات في علم الفلك منذ أيام البابليين و حتى منتصف القرن التاسع عشر و اكتشاف كوكب نبتون حيث يشمل الفترة الزمنية نفسها التي يتناولها المحور الأول لتطور علم الفلك.

القرن الثامن ق.م	وضع البابليون النظم الستيني وقسموا السنة الى 360 يوماً.
550 ق.م	اقترح فيثاغورس ان الأرض كروية الشكل.
500 ق.م	أكد برمنيدس ان الأرض كروية الشكل، وان القمر يستنبط نوره من الشمس.
400 ق.م	وضع اودوكس نظرية الكرات المشتركة المركز لتفسير حركة الكواكب ووضع الأرض في مركز الكون.
350 ق.م	اقترح هرقليدس نظرية دوران الأرض حول نفسها.

280 ق. م	حاول اريستارخوس تقدير شعاع الشمس وشعاع القمر ومسافة كل من هذين الجرمين الى الأرض.
250 ق. م	قام اراتوستينس بأول قياس لشعاع الأرض.
130 ق. م	حدد هيبارخوس موقع 1000 نجم ووضع جدول نجوم قسم فيها النجوم الى ستة اقسام وفقا لدرجة لمعانها، كما اكتشف مبادرة الاعتدالين وحدد المسافة التي تفصل بين الأرض والقمر وفسر ظاهرة الكسوف.
150 م	وضع بطليموس كتابه المجسطي، كما وضع النظام الأرضي المركز للكون الذي يفترض ان الأرض ثابتة في مركز الكون، وظل هذا النظام سائدا حتى القرن السادس عشر.
777 م	قام محمد الفزاري ويعقوب بن طارق بترجمة نص فلكي هندي الى العربية تحت عنوان زيج السند هند.
820 م	وضع الخوارزمي جداول فلكية كان لها تأثير كبير على الجداول الأخرى التي وضعها المسلمون فيما بعد.
829 م	بنى الخليفة العباسي المأمون في بغداد أول مرصد فلكي دائم حول العالم.
870 م	قام ثابت بن قرة الحراني بدراسة السرعات الظاهرة للنجوم وحساب ميل دائرة البروج، كما قام بحساب دقيق لطول السنة الشمسية ولم يخطئ بالنسبة للقيمة الحالية سوى بثانيتين فقط.
900 م	أسس البتاني علم الجبر وعلم حساب المثلثات واكتشف قانون المثلثات الكروية وهو من القوانين الأساسية في علم الفلك الموضوعي، كما قام بتصحيح نتائج بطلموس، كقيمة الانقلابين الصيفي والشتوي.
964 م	وضع عبد الرحمن الصوفي كتاب الكواكب الثابتة الذي يذكر فيه مجرة المرأة المسلسلة وسحابة ماجلان الكبرى.

990 م	قام البيروني بحساب قطر الأرض بدقة، وظلت القيمة التي توصل إليها مستخدمة في أوروبا حتى القرن السادس عشر، كما قال ان الأرض تدور حول محورها وافترض ان الأرض ربما تدو حول الشمس وأنكر انها مسطحة.
1020 م	وضع ابن الهيثم نظرية في حركة الكواكب، واكتشف ان كل الأجرام السماوية، بما فيها النجوم ثابتة، ترسل اشعتها الخاصة، ما عدا القمر الذي أخذ نوره من الشمس، كما اكتشف ان الغسق هو ظاهرة يسببها انكسار اشعة الشمس على الغلاف الأرضي الجوي.
1250 م	اقترح نصر الدين الطوسي نظاما جديدا للكون ابسط من نظام بطلموس.
1400 م	قام اولغ بيغ ببناء مرصد سمرقند ووضع جداول شمسية حدد فيها موقع ما يقارب ألف نجم.
1506 م	نقد كوبرنيكوس نظرية مركزية الأرض واقترح مركزية الشمس.
1600 م	وضع تيكو براهي نظاما للكون يجمع بين نظام بطليموس ونظام كوبرنيكوس وهو نظام تدور فيه الشمس حول الأرض في حين ان الكواكب الأخرى تدور حول الشمس.
1603 م	نشر جوهان باير كتابه Urunometria وهو اول جدول نجمي يغطي فيه كافة ارجاء القبة السماوية.
1609 م	اقترح غاليلي اول منظار فلكي ووضع يوهان كبلر اول قانونين من قوانينه الثلاثة التي تتعلق بحركات الكواكب.
1610 م	اكتشف غاليلي أقمار المشتري الأربعة وحلقات زحل وأوجه الزهرة.
1619 م	نشر كبلر قانونه الثالث في كتابه تناسق الكون.
1668 م	اقترح إسحاق نيوتن التلسكوب.
1687 م	نشر نيوتن قانون الجاذبية الكونية في كتابه المبادئ الرياضية للفلسفة الطبيعية.
1781 م	اكتشف ويليام هرغل كوكب اورانوس وقام بأبحاث حول السدم والنجوم الثنائية.

1846 م	قام لو فيرييه بحساب موقع نبتون الذي قام برصده عالم الفلك غال بعد شهر تقريبا، وقام جون كاوتش ادمز بحسابات اوصلته الى النتيجة نفسها التي توصل اليها لو فيرييه.
--------	--

من خلال الجدول نلاحظ أن علم الفلك الاسلامي واكتشافات علماء المسلمون بوضع القواعد والأسس الفلكية، قد مهد لنهضة علم الفلك في أوروبا في عهد كبلر وكوبرنيكوس ونيوتن. وهذا يعني ان المسلمين يشكلون حلقة الوصل بين علم الفلك القديم وأعمال بطليموس واليونانيون من جهة وعلم الفلك الحديث وعصر النهضة الأوروبية من جهة أخرى. و هكذا يكون المسلمون قد ساهموا في المحافظة على الإرث الفلكي الذي تركه اليونانيون و قاموا بتصحيحات وإضافات و اكتشافات أعطت علم الفلك الحديث أسسا ثابتة لينطلق منه، كما أثبتت الدراسات التاريخية لعلم الفلك القديم أن الطريقة التي اعتمدها الفلكيون المسلمون في إعادة صياغة ما جاء به بطليموس في هذا المجال على أسس رياضية جديدة قد أحدثت تغييرا هائلا في هذا العلم، لدرجة ان آثارها ظهرت جلية في النظرية الكوبرنيكية، فمثلا أن أول من اكتشف الجاذبية ليس نيوتن و إنما هم علماء المسلمين و أهمهم البيروني الذي ذكرها تحت مسمى قانون الطبيعة و الأرض قبل إسحاق نيوتن بحوالي سبعة قرون حيث أشار إليها في كتابه "القانون المسعودي".

1.5.1. علم الفلك في الحضارة البابلية (بلاد الرافدين): [11] [12]

لقد كشفت التنقيبات الأثرية وتراجم الألواح الطينية البابلية عن تراث ضخم في مجال الأرصاد الفلكية الدقيقة، واتضح بما لا يقبل الشك أن البابليين وخاصة في العصر السلوقي المتأخر (310 ق.م - 75م) أنهم قد اعتنوا بعلم الفلك عناية فائقة، وكانت لديهم مؤسسة حكومية ضخمة ممولة من قبل الدولة تعمل على تسجيل الأرصاد الفلكية لمواقع الكواكب والشمس والقمر والنجوم وباقي الأجرام السماوية التي تراها العين يوميا. وكان اللوح الطيني يحتوي على معلومات تتضمن تاريخ ومكان الرصد واسم الراصد، اسم مساعده، اسم الكاتب الذي يدون المعلومات على اللوح الطيني الأولي واسم الناسخ الذي ينقل المعلومات من اللوح الأولي إلى اللوح النهائي واسم المدقق الذي يتولى تدقيق النسخ والتأكد من صحته.



صورة توضيحية 1: الزقورة التي استخدمها العراقيون القدماء لرصد السماء

تمكن البابليون من تحقيق منجزات فلكية فاقت ما حققته باقي الحضارات القديمة، فقد حسنوا الرزنامة بالرصد الدقيق لكل من الشمس و القمر و حددوا أول يوم بعد كل قمر جديد كأول يوم من كل شهر، و بعد ما كان يتم تحديد ذلك بالرصد بحثوا عن طريقة لحساب ذلك مسبقاً، و بحلول العام 400 ق م اكتشفوا أن الحركة الظاهرية للشمس و القمر من الغرب الى حول دائرة فلك البروج لا تتبع سرعة ثابتة، بل على العكس من ذلك تبدو أنها تتبع سرعة متزايدة خلال النصف الاول من الدورة الكاملة حيث تصل الى ذروتها ثم تبدأ بالانخفاض الى الحد الأدنى السابق، فأوجدوا طريقة حسابية لتحديد أول يوم بعد القمر الجديد ومعه موقع القمر و الشمس لكل يوم من ايام السنة، ثم طبقوا هذه الطريقة على الكواكب. وهناك اليوم مئات من الألواح المحفورة باللغة المسمارية التي عثر عليها المنقبون وتتضمن هذه الحسابات، بعضها من هذه الألواح التي حفرت في بابل واوريك على ضفة الفرات تحمل اسمي " نابوريانو" و"كيدينو" وهما منجمان يفترض أنهما هما اللذان اكتشفا هذه الطرق الحسابية.

كانت الشمس تسقط أشعتها بصورة عمودية ومن دون ظل على الشارع المؤدي الى قصر الملك يوم الاحتفال برأس السنة في 23 حزيران "جوان" وهو اليوم الذي تصل فيه الشمس الى اقصى ارتفاع لها في شمال الكرة الأرضية.

درس البابليون حركات الشمس والقمر بهدف ضبط التقويم حيث كانوا قادرين على حساب بداية الشهر القمري وأطوار القمر. وتعود النشاطات الفلكية الأولى التي قام بها البابليون إلى القرن الثالث قبل الميلاد ومن المعروف أنهم استطاعوا حساب الأشهر وحركات الكواكب بدقة كبيرة.

و قد كان من مهام المؤسسة الفلكية البابلية إصدار التقاويم الفلكية لسنتين او اكثر مقدما، و التي تحتوي عادة على احداثيات الشمس و القمر و الكواكب السيارة، و بدايات الأشهر القمرية و خسوف القمر و كسوف الشمس المتوقعة خلال الفترة التي يغطيها التقويم، و هذا ما تحتويه التقاويم الفلكية المعاصرة و أهمها التقويم

الفلكي البريطاني الأمريكي المشترك و المسمى "المناخ"، و من الجدير بالذكر ان التنظيم المتبع في التقويم الفلكي العالمي الآن هو نفسه الذي كان متبعاً عند البابليين، إذ أنهم جعلوا جزءاً من التقويم يتضمن جداول تعين إحداثيات الأجرام السماوية و تسمى الجداول الأرصادية يلحق به جزء آخر يكون على ألواح أخرى و يسمى النص الإجرائي و هو الجزء الذي يتم فيه شرح العمليات الحسابية المعتمدة لاستخراج الأرقام التي تتضمنها الجداول الأرصادية.



صورة توضيحية 2: تقويم فلكي بابلي

كانت التقاويم الفلكية البابلية تؤدي وظيفتين في آن واحد:

الأولى هي وظيفة عملية تختص بتحديد أحوال الجو والفصول ومواسم الزراعة والأمطار وتحديد المواقيت الوطنية والدينية لجنابة الأموال وصرف الرواتب إلى الجند وموظفي الدولة والأحوال الشخصية وغير ذلك من الفعاليات التي تتأثر بالمواقيت.

أما الوظيفة الثانية للتقاويم فقد استخدمت في التنجيم للتنبؤ بمصير الرعاة (الملوك) والرعية، ويعتبر البابليون هم المؤسسون الحقيقيون لعلم التنجيم الغربي، وتوجد نصوص كتبت خلال عصر الآشوريين الجدد في القرن السابع قبل الميلاد، تحتوي على بعض التعاويذ المتعلقة ببعض الظواهر السماوية ومن ضمنها حركة الكواكب.

وقد برع البابليون في التعامل مع الأعداد وكانت نظرية العدد عندهم متطورة على ما يظهر من خلال الدراسات المعاصرة التي جرت على النصوص الرياضية، وأنواع التمارين المعطاة للطلبة والتي تؤكد اعتمادهم خوارزميات محددة لحل المسائل العددية وهذا ما تشير إليه الدراسات الجديدة بشأن علم الرياضيات البابلي.

لقد اعتمد البابليون على النظام الستيني في تمثيل الأعداد ولهذا النظام فائدة كبيرة في التعبير عن الكميات الهندسية نظراً لأنه يتوافق معها تماماً إذ أن الدائرة تقسم إلى 360 درجة والدرجة إلى 60 دقيقة والدقيقة إلى 60 ثانية وهكذا، أيضاً الرقم 60 يقبل القسمة على 1,2,3,4,5,6,10,12,15,20,30 وعلى نفسه بدون باقي، بينما

لا تقبل العشرة التي هي أساس النظام العشري القسمة الا على 2,5 ونفسها فقط، لذلك أتاح النظام الستيني مرونة أعلى للبابليين للتعامل مع الأرقام الناتجة عن الأرصاد الفلكية والحسابات الفلكية.



صورة توضيحية 3: الأعداد عند البابليين.

لقد حدد البابليين فترة الشهر القمري الاقتراني والشهر القمري النجمي، بدقة كبيرة تتفق مع التحديد المعاصر حتى المرتبة السادسة وهذه هي 29,530595 يوم والفترة المقبولة حالياً هي 29,530590 يوم، كما عرفوا السنة الشمسية ومدتها بوجوه عديدة، والسنة الفلكية ومدتها والسنة الاقترانية ومدتها والسنة النجومية ومدتها.

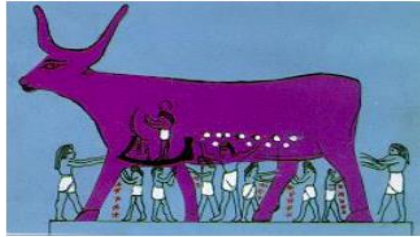
يعود أول رصد للكسوف أيضاً إلى البابليين، حيث سجلوا الكسوف الشمسي الذي حدث في 15 جوان من عام 763 ق م، وقد حسبوا دورة الكسوف واصفين دورة السيوس التي تستخدم في الوقت الحاضر، كما قاموا بوضع تقويم قمري وقسموا اليوم الى 24 ساعة.

في النهاية فإن البابليين تركوا لنا الكثير من أوصاف الكويكبات النجمية وأسمائها إن الحضارة البابلية هي أول حضارة معروفة تمكنت من التوصيل لنظرية عملية عن الكواكب. ويُعد لوح "أمسادوكا" البابلي لكوكب الزهرة أقدم نص فلكي باقٍ عن الكواكب وهو نسخة اكتشفت في القرن السابع قبل الميلاد وهي عبارة عن قائمة ببعض الملاحظات الخاصة بحركة كوكب الزهرة ربما يعود تاريخها إلى بداية الألفية الثانية قبل الميلاد.

رغم ما تذكره بعض المصادر بأن البابليين لم تكن لديهم نظرية كوكبية رياضية بحسب الرأي الذي طرحه نويجي باور والآخرين إلا أن وجود هذا الكم الهائل من الأرقام والحسابات الأرصادية لهو دليل على أن البابليين كانوا ولا بد أصحاب نظرية كوكبية متقدمة قد يمكن الاستدلال على معالمها من خلال دراسة أكثر عمقا ومتابعة لعلم الفلك الرياضي البابلي فضلا عن هذا فإن وجود جداول بابلية تحتوي على مدة دوران الكواكب (عدا الأرض) حول الشمس قضية محيرة حقا! فهل كان لدى البابليين نظرية حساب قائمة على مركزية الشمس أيضا؟

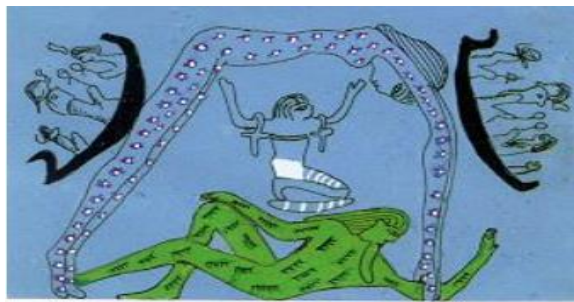
2.5.1. علم الفلك في الحضارة المصرية القديمة (بلاد نهر النيل) : [11] [12]

إن ما دفع بالمصريين القدماء للاهتمام بالظواهر الكونية كحركة النجوم والأجرام السماوية مرتبط أساساً بعباداتهم، وقد وجد الباحثون في المصريات القديمة آثاراً لرسومات دالة على تصورات المصريّين القدماء للسماء وما تحتويه، ففي أحد الرسومات يشبه المصريّين السماء ببقرة عظيمة حليت بطنها بالنجوم ويقف تحتها الإله "شو" (إله الفضاء) يرفعها بذراعيه.



صورة توضيحية 4: صورة السماء عند المصريّين تمثلها بقرة عظيمة.

كان قدماء المصريّين يعبدون الشمس و أطلقوا عليها اسم "رع" و قد تصوروها و هي محمولة على قارب و هي تسبح في الفضاء الذي أطلقوا عليه اسم "شو"، و قد اعتقدوا أن الشمس عندما تغيب في الأفق الغربي و يحل الظلام تنزل الى العالم السفلي و اسموه "دات" و يأتي نائبه القمر و أطلقوا عليه اسم الإله "تحوت" و قد كانت الحضارات القديمة تقدر الانثى و انها المحتوى للخلق لذلك جعلوا منها آلهة للكون و تجلت هذه النظرة عند القدماء المصريّين حيث مثلوا الأرض و هي على شكل رجل مستلقي على بطنه اسمه الإله "جب" و كل شيء في الأرض من أحياء و جماد على ظهره أما السماء فهي امرأة منحنية محيطة بالأرض ترتكز على أطراف أصابع يديها و قدميها و اسموها الآلهة "تحوت" حيث يحملها إله الفضاء "شو".



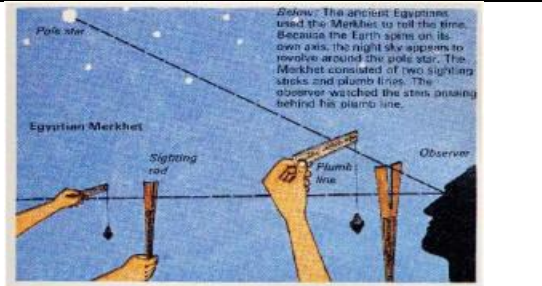
صورة توضيحية 5: صورة الإله شو يرفع السماء تحوت.

ابتكروا الفراعنة أدوات بسيطة للرصد الفلكي وتحديد مواقع الأجرام الفلكية، وكانت أهم آلة اعتمدوا عليها عبارة عن أداتين تستخدم من قبل راصدين اثنتين، فالأداة الأولى "المركت" عبارة عن غصن بلح قصير وسميك من أحد طرفيه حيث يوجد في الطرف السميك شق رفيع، أما الأداة الثانية فهي عبارة عن مسطرة ذات شاقول

وهو خيط رفيع مربوط في أسفله قطعة من الرصاص حتى يشد الخيط ليصبح عموديا، وتحمل بشكل افقي. و طريقة استخدام المركت تكون بحيث يقوم شخص بالجلوس بإجاه الشمال و الآخر بإتجاه الجنوب بالنسبة للراصد، وتحدد الساعات عندما يجتاز النجم الخيط العمودي في السطر الافقي بحيث تمر بالقلب أ بالعين اليسرى و اليمنى أو في أي جزء من جسم المشاهد فمثلا يقال (النجم ارى فوق العين اليسرى للمشاهد الساعة الثالث)، أما في النهار فقد استخدموا المزولة الشمسية "قياس طول الظل" لتحديد الوقت، كما استخدموا الساعات المائية و هي عبارة عن أحواض مثقبة يتسرب الماء منها إلى الخارج و يعرف منها ما مضى من ساعات الليل بقياس مستوى الماء الخارج.



صورة توضيحية 7: المزولة الشمسية الفرعونية

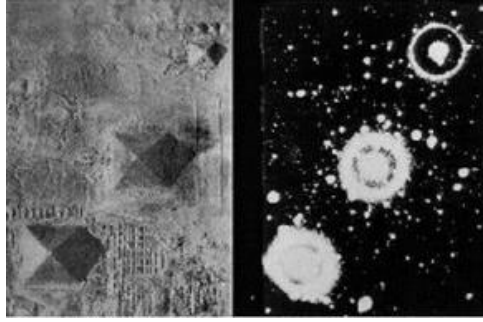


صورة توضيحية 6: استخدام المركت لقياس الساعات

أما فيما يخص معرفة المصريين القدماء بالنجوم وحركاتها فإنه من المؤكد أنهم استطاعوا تمييز الكويكبات النجمية التي يجعلونها ستة وثلاثين كوكبة، لكل منها حارس يحرسها ويهيمن على عشرة أيام من أيام السنة المصرية التي قرروها 360 يوما. لذلك صاروا يضيفون الأيام الخمسة إلى أعداد أيام السنة ويجعلونها عيدا. فقد كانت الحضارة الفرعونية أولى الحضارات التي قسمت السنة الى 360 يوما، و قسموا السنة الشمسية إلى ثلاث فصول كل فصل فيه أربعة أشهر، الفصل الأول أسموه الفيضان "القحط"، و الثاني هو "بيرث" أو فصل الشتاء و يعني انزياح المياه من الأراضي، و أطلقوا على الفصل الثالث الصيف أو "شومو" و يعني شح المياه، كما اطلقوا على السنين التي تمروا عليهم رموزا خاصة تدل على الحاكم في تلك السنين، و قد حسبوا السنة الشمسية عن طريق شروقين متتاليين لنجم "الشعري اليمانية" و هو ألمع نجم في كوكب "الكلب الاكبر"، و قدر المصريين بين شروق هذا النجم وموعد فيضانات نهر النيل و ذلك في 19 تموز (يوليو) من كل عام، حيث تتساقط الأمطار الموسمية على مرتفعات الحبشة فتندفق السيول نحو النيل فيرتفع منسوب المياه فيحدث الفيضان السنوي، فاتخذوا شروق نجم الشعري ساعة كونية و أحد أهم الأسس في التقويم المصري القديم لتحديد موعد قرب حدوث الفيضان، و الغريب في الأمر أن نجم الشعري اليمانية يرتفع عن الأفق الشرقي درجة واحدة فقط عند شروق الشمس خلال

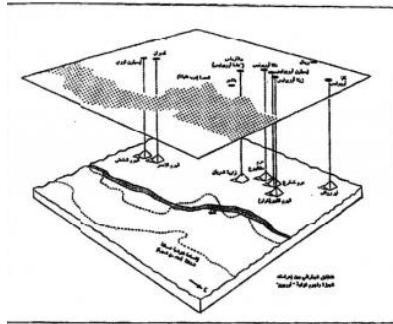
فترة الفيضان مما يجعل رصدها صعب بسبب الشمس و قد أثار ذلك استغراب العلماء، و قد اتخذوا من موقع الشعري اليمانية دليلا لهم في بناء الهرم وتوجيهه، فالشعري اليمانية التي تظهر في الجنوب يواجهها أحد وجوه الهرم الاكبر (هرم خوفو)، بينما جعل الوجه الآخر للهرم يواجه نجم القطب حيث إذا سقط الضوء القادم من نجم الشعري على وجه الهرم انتقت الأشعة القادمة منه مع الأشعة القادمة من نجم القطب (من الشمال) في الحجرة الملكية الموجودة داخل الهرم، وحين يلتقي الشعاعين يبدأ فيضان النيل في ذلك الأسبوع.

كما استخدموا المصريين أيضا السنة القمرية وعرفوا الشهر القمري من خلال شروطين متتاليين للهلال وقسموا السنة القمرية إلى اثنا عشر شهرا وقد اعتمدوا التقويم القمري ليحددوا موعد الطقوس والمناسبات الدينية؛ حيث في كل سنة قمرية ثلاثة عشر عيداً رسمياً ودينياً، اهتم المصريون بالنظر الى السماء ومراقبة النجوم ربما بسبب صفاء الجو معظم أيام السنة حيث رصدوا النجوم و المجموعات النجمية كالشعري اليمانية و أطلقوا تسميات و تصورات خاصة بهم على المجموعات النجمية حيث تصوروا "كوكبة الدب الأكبر" على شكل رجل ممدود الذراعين أو على شكل عربة يجرها حصان و شبهوا "كوكبة الدجاجة" و غيرها من المجموعات النجمية، كما اهتموا بالنجوم و أطلقوا على النجوم المحيطة بنجم الشمال صفة "النجوم الخالدة"، و من أحد أسباب اهتمامهم كذلك بها هو أن بعضها يمثل الفردوس لأرواح ملوك الفراعنة، و رصدوا أيضا الكواكب السيارة الخمسة التي تشاهد بالعين المجردة على شكل نجوم لامعة و أطلقوا عليها اسم "النجوم التي لا ترتاح أبدا" بسبب حركتها المستمرة بين النجوم فسموا كوكب المريخ "الحوري الأحمر" و أطلقوا أيضا على المشتري اسم "النجم الثاقب" وزحل "حورس الثور" و قد أطلقوا أيضا على الزهرة و عطارد اسم "نجمتي الصباح" عند ظهورهم في الصباح و "نجمتي المساء" عند ظهورهم بعد الغروب. ولقد كانت أرسادهم دقيقة للغاية، حيث يتجلى ذلك في تعامد أشعة الشمس على وجه رمسيس الثاني في معبد أبي سنبل بأسوان مرتين في السنة، التعامد الأول يحدث في يوم مولده وهو 22 فبراير والتعامد الثاني يحدث في 22 أكتوبر وهو يوم تتويجه للعرش، كما أن الدراسات الحديثة للأهرامات وخاصة أهرامات الجيزة لم تكن كما كان يعتقد على أنها عبارة عن مقابر لحفظ جثث الفراعنة وممتلكاتهم و قد تبين بعد ذلك أنها صممت لأهداف أخرى فهي نقل مثالي لصورة نجوم النطاق أو "حزام الجبار" و هي عبارة عن ثلاثة نجوم مصطفة في السماء.



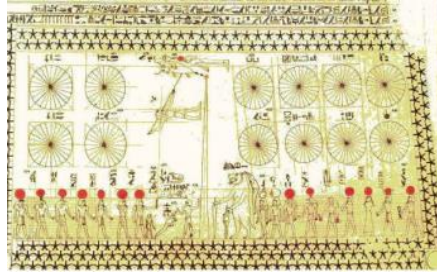
صورة توضيحية 8: مقترنة بين بناء موقع أهرامات الجيزة وموقع نجوم حزام الجبار

عند رصد هذه النجوم نجد أن لمعان نجم "دلتا الجبار" يقل لمعانه عن النجمين الآخرين و أيضا ينحرف عن مستواهما، وعندما أخذت صورة للأهرامات من الجو وجد ان "هرم مكاورع" يقل حجما عن الهرمين الآخرين إضافة لانحرافه عن مستواهما و بذلك بدت الصورة مطابقة بشكل مذهل لنجوم حزام الجبار مما يدل على أنهم نقلوا صورة النجوم الى الأهرامات، و يستدل على أن الموضوع ليس مصادفة من خلال أن الأهرامات تقع غرب نهر النيل و نجوم النطاق تقع غرب نهر المجرة "الحزام المجري" و هي الحزمة الضبابية التي تقطع السماء من الشمال إلى الجنوب تماما، و لا يتوقف الموضوع عند هذا الحد بل أكتشف أن الأهرامات بنيت بهندسة غاية في الدقة و موقع هذه الأهرامات بالنسبة إلى نهر النيل تتناسق تماما مع زاوية نجوم النطاق نسبة إلى نهر المجرة مما يدل على أن نهر النيل هو انعكاس لنهر المجرة، وقد حدث هذا التطابق قبل 10500 عام بحسب المحاكاة حيث كانت درب التبانة تشاهد وكأنها تقطع السماء من الشمال إلى الجنوب مثل نهر النيل مما دفع الفراعنة لبناء الأهرامات الجيزة بهذا الشكل.



صورة توضيحية 9: مقارنة بين موقع الأهرامات ونهر النيل مع بعض النجوم المعروفة وحزام درب التبانة

ولقد عثر الآثاريون على جداول فلكية في قبور الملوك يظهر فيها وقت عبور بعض النجوم لخط الزوال.



صورة توضيحية 10: الرسومات الهيغروغرافية المؤرخة للرزنامة المصرية القديمة.

وعموماً لم تكن إنجازات المصريين القدماء في علم الفلك بالقدر الذي اجتهد به البابليون، والذي يُعزى ربما إلى عدم شيوع التعامل بالتنجيم عند المصردين القدماء، فقد كانوا هم أكثر اهتماماً بالسحر والكيمياء وقد تفوقوا في هذا المضمار، على عكس ما كان عليه الحال عند البابليين وما كان من معرفتهم الواسعة بالتنجيم، فإن التنجيم كان عاملاً رئيساً في تطوير الأرصاد الفلكية، وأدواتها كما هو مثبت في تاريخ هذا العلم.

3.5.1. علم الفلك في الحضارة الهندية: [11] [12]

تكاد المصادر العلمية تجمع على أن الفلك في بلاد الهند والسند هو وليد فتوح الاسكندر المقدوني وما نقله إليهم من معلومات فلكية ذات أصول يونانية وبابلية، فلم يكن للهنود في الأزمنة المبكرة خبرة تذكر في مجال علم الفلك إذ أن كل معلوماتهم كانت محصورة في أدوار الشمس والقمر والمشتري والتي كانت تلزمهم لأغراض التوقيت الزمني، ولقد وجد أن هنالك عدد كبير من المصطلحات المستخدمة في الهندسة والفلك والتنجيم ذات أصول إغريقية، انتقلت إلى اللغة السنسكريتية.

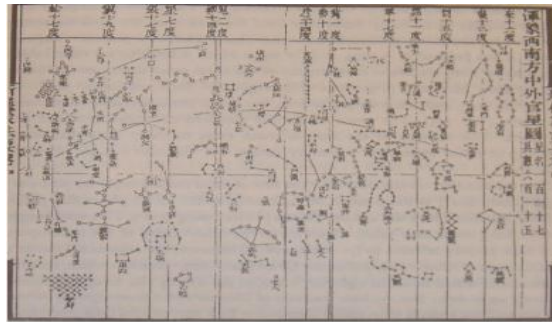
لقد تركت لنا هذه الشعوب تصورات تبدو لنا اليوم مضحكة أو عجيبة، حيث كان التخيل البدائي قد اخترع هذه الصورة وتصوروا الهنود القدماء الأرض قوقعة عظيمة تحملها أربعة أفيال عملاقة تقف على ظهر سلحفاة، وعلى الرغم من بدائي هذا التصور إلا أنه لا يخلو من معاني ومعارف قيمة أهمها الشعور بكروية الأرض وتحذب سطحها وإلا لما اختار الهنود القوقعة، ومعرفة أن اليابسة محاطة بالماء من جميع أطرافها، ولعل أن في اختيار السلحفاة فرضاً يقصد منه تفسير قلة حصول الهزات الأرضية.

إن عرف الهنود كروية الأرض وكونها قائمة في الفضاء دون استناد إلى شيء، لكنهم أيضاً كانوا يقولون بأن الهواء يدفع الكواكب للحركة. ويُذكر أن الهنود عرفوا حركة الترنج في محور دوران الأرض حول نفسها وهذا ما يسمى مبادرة الانقلابين إذ وجدوا أن مقدار الترنج يعدل 1.5 درجة في القرن الواحد وهذه النتيجة قريبة من

تلك التي وجدها بطليموس، وقد كان للهند في القرن الثامن الميلادي علم فلك متطور كما يظهر من القصص المروية عن زيارات الفلكيين الهنود لدواوين الخلفاء العباسيين وخاصة زيارة سيدهانا الشهيرة إلى ديوان المأمون وما أمر به الخليفة العباسي من ترجمة كتاب السندهند الكبير الذي إعتبره الفلكيون المسلمون (إلى جانب كتاب بطليموس المجسطي) أساساً رئيساً لعلم الفلك الإسلامي. لكن من الجدير بالذكر أن الهند استثمروا المعلومات الفلكية في التنجيم؛ فقد برعوا فيه وأبدعوا أيما إبداع ويذكر أبو الريحان البيروني في كتابه (التفهيم لأوائل صناعة التنجيم) وفي كتبه الأخرى الكثير من المعلومات عن أعمال الهند بهذا الصدد.

4.5.1. علم الفلك في الحضارة الصينية: [11] [12]

لقد كان علم الفلك في الصين متطوراً على ما يبدو أكثر بكثير مما كان في الهند، ربما يعزى ذلك إلى علاقة الفلك بالدين لدى الصينيين، فقد كانت مرادهم معابد مقدسة و كانت الأدوات و الأجهزة الفلكية أدوات مقدسة دينية امتازت بجمال فائق و دقة صنع راقية و قد تميزوا بذلك فضلاً عن تميزهم بتوثيق الحوادث الفلكية، هناك وثائق صينية تكاد أن الصينيين عرفوا علم الفلك منذ سنة (2500 ق.م). هذه الوثائق التي قادتهم إلى معرفة الزوايا المعروفة بزواوية ميل البروج ما يشهد لهم الإلمام بمبادئ عم الفلك، ولو بصورة غير منتظمة ولا متطورة، فلقد كانوا يتصورون الكون غير مكور تكويراً تاماً، له شكل البيضة، محها الأرض، وقبة السماء هي القوقعة. أما التنين الذي ما زالت صورته تملأ الأماكن العامة في الصين حتى اليوم فهو الذي بلع الشمس والقمر من الأرض التي صوروها ولها شكل العرابة العملاقة ذات الأعمدة المختلطة وفي وسطها وسط الأرض بلاد الصين العظيمة، وبين مجلات العرابة يسير النهر السماوي الذي هو مجرة درب التبانة، أو ما يعرف بالطريق اللبني، وهذا ما يدل أيضاً على خلط الخرافة والعبادة والدين بهذه المعرفة.



صورة توضيحية 11: خارطة سماوية صينية قديمة.

وقد ارتبط علم الفلك في الصين بالتنجيم، وكان كونفوشيوس (نبي صيني) الذي عاش للفترة (479.551 ق.م)، قد وضع كتاباً في التنجيم بعنوان (المتغيرات) وهو يحوي على أسرار ومعلومات فلكية فضلاً

عن المعلومات التنجيمية، وطرق الكشف عن المستقبل، و أهم ما يسجل للصين توثيقهم للأحداث الفلكية و تسجيل مشاهداتهم بصورة منتظمة.

اكتشاف الكواكب و توثيق حوادث الكسوف و الخسوف يدل على أن الصينيين أهتموا بعلم الفلك و رصد النجوم، يذكر أيضا أن الصينيين اكتشفوا مبكرا مجموعة أقمار المشتري قبل ألفي سنة من اكتشاف غاليلو لها عام 1610 م كما يذكر أنهم اكتشفوا البقع الشمسية حيث ورد ذكرها في حوليات أسرة هان (206 ق.م. 1900 م) كما يذكر أن الصين اهتمت بتوثيق حوادث الكسوف و الخسوف حيث أنهم سجلوا خلال الفترة (11 ق.م. 1900 م) ما يزيد على 1600 كسوف و 1100 خسوف و 200 حالة احتجاب الكواكب خلف القمر، و لعل من أهم توثيقاتهم الفلكية تسجيلهم لحادث المستعر الأعظم في برج الثور علم 1054 م كما أنهم سجلوا انفجارات نجمية مماثلة في السنوات 1006. 1572. 1604م على التوالي، و من التسجيلات الشهيرة توثيقهم لدورات مذنب هالي حيث ذكرت تلك الوثائق مرور المذنب في سماء الأرض 29 مرة منذ عام 240 ق م الى 1910م و هذا يعني أنهم لم يضيعوا فرصة واحدة لمشاهدة المذنب طوال تلك الفترة.

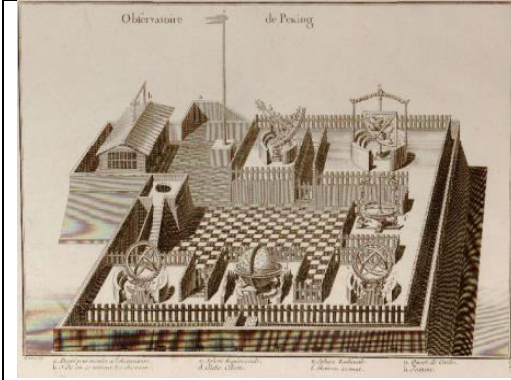
أما بالنسبة للتقاويم فقد توصلوا إلى وضع تقويم رسمي للإمبراطورية الصينية وكان على درجة عالية من الدقة فقد حسبوا أن طول السنة هو 365,25 يوما بالضبط ثم وجدوا أن طول السنة هو 365,2425 يوما، ولذلك قاموا بإصلاح التقويم وذلك قبل الإصلاح الغريغوري بمدة 383 سنة، وفي عام 1608 حددوا طول السنة الشمسية بمدة 365,242190 يوما.



صورة توضيحية 12 : خارطة شوتسو.

استخدم الصينيين القدماء السعة المائتية لتحديد الوقت ليلا، و المزاول الشمسية لتحديد الوقت نهارا، كما وضعوا خرائط دقيقة لنجوم السماء منها خارطة شوتسو للنجوم وهي منحوتة على الحجر عام 1257م وتصور هذه الخارطة مواقع 1434 نجما بدرجة عالية من الدقة كما تبين حدود المجرة، أما بالنسبة إلى المراصد الفلكية الصينية فإن أقدمها هو منصة قويبيا التي بنيت عام 1279 م، و قد استخدم الصينيين آلة ذات الحلق الضخمة

لتحديد إحداثيات الأجرام السماوية و مما يذكر أن الصين لازالت تحتفظ بمرصدها الرئيسي (مرصد بكين) الذي عمل لمدة 2000 سنة مع الكثير من أجهزته.



صورة توضيحية 14: رسم لخريطة موقع مرصد بكين في الصين القديمة



صورة توضيحية 13: مرصد بكين شاهد على اهتمام الصين القديمة بعلم الفلك.

5.5.1. علم الفلك في الحضارة الاغريقية (اليونان والرومان): [11] [12]

اهتم الإغريق منذ القرن السادس قبل الميلاد بالفلك واعتبروه علماً نظرياً بعيداً عن التجربة، بل يعتمد على النظم الهندسية وحساب المثلثات السطحية والكروية. وقد استعاد الإغريق من علوم البابليين وعلوم المصريين في الفلك والرياضيات كثيراً وإن لم يذكرها ولم يكونوا أمناء في نقلها بل انتحلوا كثيراً منها، لكنهم دون شك أضافوا الى هذه العلوم الكثير وكانوا حلقة جديدة في تطور المعرفة العلمية فوضعوا نظرية مركزية الأرض وفسروا بذلك الحركة اليومية للأجرام السماوية كالشمس والقمر والكواكب السيارة، كما قاموا بحساب محيط الأرض ومن الجدير بالذكر هنا أن أغلب التراث اليوناني هو عبارة عن قصاصات أو أخبار مجزئة وردت في الكتب.

ومن أوائل الفلاسفة الإغريق الذين اهتموا بالفلك الفيلسوف اليوناني طاليس والذي يعتبر من القدماء السبعة ومؤسسي علم الطبيعة، وقد نبغ طاليس في علوم متعددة منها الفلك وحركة النجوم والتنبؤ بكسوف الشمس.

في القرن السادس قبل الميلاد ظهرت المدرسة الفيثاغورية التي أسسها الفيلسوف الرياضي فيثاغورس حيث كان كثير الأسفار، تعلم في بابل ومصر واطلع على التراث العلمي للحضارتين وله مساهمة كبيرة في التنجيم وأحكام النجوم وبين أن القمر جسم صلب يشبه الأرض.

أما بيرمينيدس مؤسس المدرسة الأيلية، افترض أن الأرض كروية وأن الكون مرتب على شكل طبقات متحدة المركز حول الأرض، تنص نظرية ارسطو الفلكية الذي يعتبر أشهر علماء الفلك الاغريق على مركزية الأرض وكرويتها وأورد أدلة كثيرة على ذلك واعتمدت نظريته على ثلاث مسلمات.



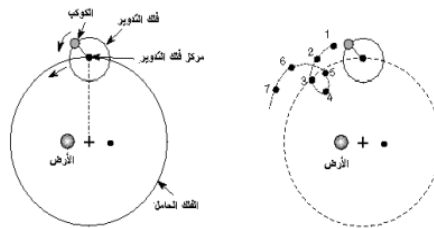
صورة توضيحية 15: نظرية ارسطو في توزيع الكواكب على كرات.

ومن أبرز علماء الفلك المميزين عند اليونان:

أ. اريسطارخوس: أول من اقترح دوران الأرض حول الشمس واعتبرها مركز الكون وافترض أيضا دوران الكواكب السيارة حول الأرض لكن أفكاره ضاعت في خضم هيمنة أفكار أرسطو وفلسفته.

ب. هيبارخوس: أشهر عالم بعد ارسطو اكتشف ترشح محور دوران الأرض من خلال ملاحظته حركة دائرة البروج.

ج. بطليموس: تمكن هذا العالم من تطوير علم الفلك من خلال نظرياته الفلكية الهندسية حيث استطاع التحقق من معطياتها عن طريق الرصد، أشهر كتبه كتاب المجسطي وقد ترجم الى العربية وكان مرجع العرب في علم الفلك كما اعتمد على الاسطرلاب لقياس ارتفاع النجوم والكواكب.



صورة توضيحية 16: نظرية مركزية الكون حسب بطليموس.

6.5.1. علم الفلك في حضارة مايا: [12]

بالرغم من نقص المعلومات عن حضارات الأمريكيتين، فإن الدراسات التي أجريت في العقود الأخيرة أظهرت أن تلك الحضارات كالمايا والأزتك وغيرهما، كان لهما اهتماما كبيرا بالظواهر الفلكية أغلبه مرتبط بعباداتهم، ولقد وثق فلكي مايا عددا من الظواهر الفلكية ككسوف القمر لسنة 3379 ق.م.

كان لدى المايا تقويم شمسي خاص بها كما عرفوا دورة الخسوف والكسوف، ولقد سجلت المايا على نصبهم الحجرية معادلات لتنبؤ بالكسوفات الشمسية وبالشروق الشمسي للزهرة، كما عرفت الدورة السينودية للكواكب، كان التقويم المعتمد لديهم يبدأ في يوم الصفر، والذي ربما كان يوافق اليوم الثامن من جوان لعام 8498 ق م حسب تقويم الجولياني المحلي، رغم أن ذلك ليس مؤكدا تماما، بالإضافة إلى ذلك فإن السنة الواحدة لديهم كانت تتألف من 365 يوم وكانت تتوزع على 18 شهرا يتألف كل منها من 20 يوم مع شهر إضافي مؤلف من 5 أيام.



صورة توضيحية 17: شكل المرصد الفلكي للمايا قديما.



صورة توضيحية 18: نقوش لحضارة المايا تمثل عملية الرصد.

7.5.1. علم الفلك في بلاد فارس: [12]

دلت العديد من الكتب على أن حكماء فارس وفلاسفتها كانوا ينظرون في الفلك والنجوم والكواكب، وكانوا يربطون كل ذلك بالتنجيم فينظرون في طالع المولود الجديد، فإن استأنسوا من هذا الطالع نجابة علموه الفلك والهيئة والحكمة وعلم التنجيم. ومن بين الكتب التي تم ترجمتها من الفارسية الوسيطية "زيج الشاه" وهو مجموعة

من الجداول الفلكية التي جمعت في بلاد فارس الساسانية على مدى قرنين، ونظرا لقرب الحضارتين من الناحية الجغرافية، يعتقد أن الحضارة الفارسية تأثرت كثيرا بالحضارة البابلية. ومن المرصد الفلكية التي تعود إلى الفارسيين مرصد مراغة بالفارسية: رصد خانة مراغه 657 هـ / 1259 م. تقع غرب مدينة مراغة الواقعة ضمن محافظة أذربيجان الشرقية في إيران.

8.5.1. علم الفلك في الإسلام: [11] [12]

إذا كان اليونان والرومان هم ورثة علوم البابليين والمصريين ومطوروها فإن العرب المسلمين أصبحوا دون شك ورثة علوم اليونان والهند. والفارق بين الحاليين كما يبدو ذلك واضحاً من خلال التاريخ المسجل أن اليونان كانوا كثيراً ما ينتحلون أعمال غيرهم و ينسبونها لأنفسهم على حين أن هذه الظاهرة لم تكن شائعة عند العرب المسلمين بل حفظ المسلمون لليونان ولغيرهم من الأمم حقوقهم التاريخية في الملكية الفكرية للأعمال الجليلة، بل لقد اعتبروهم أساتذة لهم ومعلمين، وتشهد على هذا القول أعمال ابن سينا والفارابي وابن رشد وغيرهم ممن نقلوا عن اليونان وشرحوا أعمالهم، فكثير من أعمال اليونان لم تعرف للأوروبيين أنفسهم إلا من خلال النص العربي الذي حفظه العرب وحفظوا اسم صاحبه بكل أمانة؛ بينما لم تحفظ لنا كتب اليونان إلا أشياء يسيرة جداً من إنجازات البابليين والمصريين القدماء وبدلاً عن ذلك نسبوها لأنفسهم وما عرفناه مؤخراً عن أعمال البابليين والمصريين القدماء كشفتها التنقيبات الأثرية.

عاش قدماء العرب في شبه جزيرة العرب؛ وكانت طبيعة الحياة في بيئتهم تتطلب الارتحال الدائم طلباً للماء والكأ فضلاً عن رحلاتهم التجارية من الجزيرة إلى الشام وإلى اليمن، و نظراً لشدة الحر في صحاريهم فقد كانت معظم تنقلاتهم تتم ليلاً، لذلك كانوا في حاجة لمعرفة النجوم الثابتة ومواقعها ليهتدوا بها في مسيرهم وكان من الضروري عندهم تمييز النجوم الثابت عن الكواكب السيارة المتحركة حركات ذاتية لكي تكون الثوابت سماوية تهديهم السبيل، كما كان العرب بحاجة إلى معرفة الفلك لعلاقته بالأنواء (الأحوال الجوية) الفصلية، من أمطار ورياح وبرد وحر، و التي كانت ضرورية لحياتهم أيضاً، و يمكن القول أن معظم المعارف الفلكية لعرب الجزيرة هي ما اكتسبوه من تراث البابليين وما انتقل إليهم من معارف اليونان والروم والفرس والهند، و ربما لم يضيف عرب الجزيرة قبل الإسلام شيئاً كثيراً إلى هذه المعارف بل حرصوا على توثيقهم سجعاً و شعراً لتتناقلها الألسن جيلاً بعد جيل.



صورة توضيحية 19: مخطوطات اسلامية في علم الفلك

9.5.1. علم الفلك عند العرب بعد الإسلام:

لم يكن للعرب المسلمين في العقود الأولى من عهد الإسلام متسع للبحث والدراسة خاصة وأنهم كانوا مشغولين بالجهاد والفتح؛ إلا أن قيام الدولة الأموية في الشام واستقرار الأمور أتاح فرصة للانفتاح على حضارة الرومان فضلاً عما أوجدته فتوح المشرق لخراسان والهند والصين من نوافذ جديدة على حضارات أخرى. ويذكر أن خالد بن يزيد بن معاوية بن أبي سفيان كان شغوفاً بالعلم والمعرفة؛ ويقال أنه رفض تولي الخلافة بعد أبيه لانشغاله بالعلم، و ربما كانت على عهده أول الترجمات العربية لكتب اليونان حيث تذكر المصادر أنه أمر بترجمة عدد من الكتب الفلكية والطبية، إلا أن النهضة العلمية الحقيقية بدأت في العصر العباسي ومن المؤكد أن أبو جعفر المنصور كان مهتماً بعلوم الفلك لشغفه بصناعة التنجيم، إذ عرف بتقريبه من المنجمين واستشارتهم في كثير من الأمور وكان لديه عدد من المنجمين منهم نويخت الفارسي وما شاء الله اليهودي وإبراهيم بن حبيب القزاري وعمر بن فرخان الطبري، ويذكر البيروني في كتاب (الآثار الباقية عن القرون الخالية) أن أبا جعفر المنصور أمر هؤلاء المنجمين باختيار طالع حسن للشرع في بناء مدينة بغداد فوضع هؤلاء خارطة تنجيمية أو ما (يسمى النصب الفلكية) واقترحوا بدء العمل يوم 15 ربيع الثاني سنة 145هـ، كما أمر المنصور أبو يحيى البطريق بترجمة كتاب "المقالات الأربع" لبطليموس وهي في أحكام النجوم، و في الوقت نفسه فإن المنصور أمر بترجمة الكتاب المعروف "السند هند" وهو كتاب العالم الرياضياتي الهندي برهمكيت الذي كتبه للملك فياك رمكة عام 628م، و كان لهذا الكتاب أثر كبير في تطور المعارف العربية في الفلك وحركات الكواكب والنجوم وقياس هذه الحركات وحسابها.

ويذكر أن محمد بن إبراهيم القزاري ألف عدة كتب في الفلك منها "كتاب العقيدة" في علوم النجوم وكتاب "المقياس للزوال" وكتاب "الريج على سني العرب" وكتب أخرى حول الإسطرلاب، كما قام يعقوب بن طارق بتصميم عدة جداول فلكية ويقال أنه استفاد كثيراً من معلومات الحكماء الهنود، فترجم كتاب "الأركند" وكتاب "تركيب الأفلاك" والأركند هو زيج (أي تقويم فلكي يتضمن جداول كثيرة تشتمل على بيان حركات الشمس والقمر والكواكب

السيارة يومياً)، و قد كان الحاسبون الذين يعملون في ضبط التقاويم والمنجمون والفلكيون على السواء بحاجة إلى هذه الأزياج الفلكية، و من الأزياج التي ألفت على مذهب السند هند " زيح السند هند الكبير " لابراهيم الفزاري، كما قام الخوارزمي في بداية القرن الثالث الهجري بوضع "زيح السند هند الصغير" حيث اعتمد فيه أوساط السند هند، وخالفه في التعادلات والميول، فجعل تعديلاته على مذهب الفرس وميل الشمس على مذهب بطليموس، وبقي زيح الخوارزمي مستعملاً لقرون عديدة. أخذت دراسات علم الفلك الاتجاه الصحيح على عهد المأمون بن هارون الرشيد حيث دعم هذا الخليفة العلم وأمد العلماء بالمال اللازم لإجراء دراساتهم وأبحاثهم كما شجع ترجمة الكتب من اللغات السريانية واليونانية والفارسية والهندية، وكان مولعاً بعلم الفلك وأمر ببناء المرصد المأمونية شرق بغداد وجهزه بما يحتاج من أدوات للرصد الفلكي، ويقال أن المأمون كان يحضر بعض مجالس العلم في هذا المرصد، وقد أصبح علم الفلك في ذلك العصر مثار اهتمام عليّة القوم، و من أشهر إنجازات عهد المأمون في الفلك قياس محيط الأرض.



صورة توضيحية 20: لوحة تمثل علماء الفلك المسلمين مع آلاتهم في العهد العباسي.

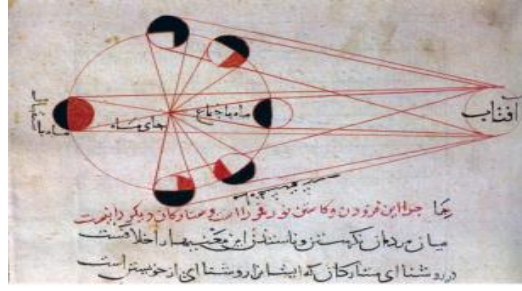
ومن أشهر الفلكيين على عهد المأمون أولاد موسى بن شاكر الثلاثة وسند بن علي الذي كان يرأس الهيئة العلمية لديوان الخلافة وأحمد بن عبد الله المروزي وخالد بن عبد الملك ويحي بن أبي منصور المنجم وعلي بن عيسى وأبو اسحق الكندي وعلي بن البحتري وعبد الملك المروزي، ومن المترجمين حسنين بن اسحاق وثابت بن قرة وله مساهمات جليلة في الفلك والرياضيات.

ولعل ما يلفت النظر العدد الكبير لأسماء النجوم والكويكبات العربية الأصل مما يؤكد دور المسلمين في علم الفلك، ولكي نبين ذلك أدرجنا في الجدول أدناه عدداً من النجوم والكويكبات والمنازل بأسمائها العربية الأصلية والاسم المقابل المعتمد حالياً في اللغة الإنجليزية.

جدول 2: أسماء بعض النجوم والكواكب بالعربية والانجليزية

الاسم العربي	الاسم الإنجليزي	الاسم العربي	الاسم الإنجليزي
الركبة	Ruckbah	الدبران	Al debaran
آخر النهار	Acarar	المرزم (مرزم الجبار)	Mirzam
الغول	Algol	سعد الذابح	Dabeh
الجنب	Algenib	ظهر الأسد	Duhr
الكف الخضيب	Caph	النصل	El Nasl
النسر الطائر	Atair	الناطح	El Nath
فم الحوت	Fomalhut	النصل	Alnasl
الذنب	Deneb	منكب الفرس	Markab
الرجل	Rigil	بيت القوس	Betelgause
آخر النهر	Achernar	رجل الأسد	Regulus
سيف الجبار	Seif	النهار	Nihal
اللطة	Alasha	صدر الدجاجة	Sadr
الشرطان	Sheratan	أنف الفرس	Enif
الصدر	Schedir	القائد	Al Kaid

إن من يطلع بعمق على مساهمات المسلمين في علم الفلك ليجد قدراً كبيراً من الأعمال الجليلة قام بها المسلمون من أمم أخرى عاشوا في كنف العربية وتربوا على أصولها وأن تحقيق هذه الإنجازات تاريخياً وعلمياً لازال حتى الآن في بدايته.



صورة توضيحية 21: شروحات البيروني لظاهرة الكسوف.

ومن أشهر علماء العرب المسلمين في علم الفلك والهيئة السماوية المشرقيين:

أبو معشر الفلكي، أبو الحسين عبد الرحم بن عمر الصوفي، محمد بن جابر بن سنان البتاني، أبو الوفا البوزجاني، ويجن بن رستم الكوهي، علي بن يونس المصري، الحسن ابن هيثم، أبو ریحان البيروني، عبد الرحمن الخازني، كمال الدين بن يونس الموصللي، البديع الاسطرلابي، نصير الدين الطوسي، أولغ بيك، غياث الدين الكاشي، ابن الشاطر، السهل الاسطرلابي النيسابوري، بهاء الدين العاملي.

ومن العلماء المسلمين في الاندلس والمغرب:

مسلمة المجاريطي، أحمد بن محمد النقاش، إبراهيم بن يحيى الزرقالي، جابر بن أفلح الاشيلي، أبو إسحاق البطروجي، ابن البناء المراكشي.

إن أهم ما يميز الفترة العربية الإسلامية في تاريخ علم الفلك أنها اعتمدت الأرصاد الفلكية لنقد النظرية الفلكية واختبارها، كما طورت خلال هذه الفترة الكثير من الأجهزة الفلكية اللازمة للرصد.



صورة توضيحية 22: الاسطرلاب العربي

10.5.1. علم الفلك في الحضارة الأوروبية: [11] [12]

في نهاية القرن الخامس عشر الميلادي انتقل مشعل الحضارة من يد العرب المسلمين إلى يد الأوروبيين، وذلك بعد أن تضاءلت المساهمات العلمية للعرب والمسلمين عموماً وضعف دورهم الحضاري واستبد ملوكهم

وسلاطينهم بالحكم، وبدأ زحف الخراب على العمران، ودخل العرب والمسلمون في نفق مظلم لازلوا فيه حتى هذا اليوم. وفيما يلي سنعرض بإيجاز لأهم المنجزات العلمية التي أدت إلى حصول تحول جديد في آفاق علم الفلك الذي كان بمثابة التوطئة التاريخية لحصول تحول نوعي في التعامل مع السماء وأجرامها، كما سنرى في ثنايا الموضوع فإن التحولات العظيمة التي حصلت في علم الفلك ارتكزت على عاملين أساسيين الأول: هو اعتماد التجريب والأرصاء الفعلية دليلاً لقيادة النظرية وهذه هي المنهجية العلمية الصحيحة التي كانت المرحلة العربية الإسلامية قد أسست لها وركزت دعائمها. والثاني هو مراجعة النظرية البطليمية والنقود التي وجهها إليها الفلكيون العرب والمسلمون، ومن أهمها نقد ابن الشاطر الدمشقي وكان الفلكيون العرب قد قاموا بإعداد الكثير من التقاويم الفلكية القائمة على حساب الأرصاء الذي يختلف عن الحساب النظري، فعندما بدأ الفلكيون الأوروبيون أمثال تايكو براهي ويوهان كبلر وغاليليو غاليلي في نهاية القرن السادس عشر وبداية القرن السابع عشر الميلاديين في سبر السماء كانت بين أيديهم كثير من أعمال وأرصاء وتقاويم الفلكيين المسلمين، ولا بد وأنهم اعتمدها دليلاً لتطوير أعمالهم.

6.1. علم الفلك الحديث:

1.6.1. تعريف علم الفلك الحديث:

يعد علم الفلك في الوقت الحالي من أكثر العلوم انتشاراً وأكثرها شعبية، حيث ما يفوق 70% من ممارسيه كما أن عدد من الاكتشافات ترجع إلى فلكيين هواة كالكشاف المذنبات والنيازك وبعض الانفجارات النجمية فمع التقدم العلمي والتكنولوجي أصبح بإمكان الفلكيين اقتناء أجهزة متطورة وفي أحيان كثيرة صناعتها بأنفسهم بالرغم من ذلك لا يزال العديد من الناس يربطون علم الفلك بالتحجيم بالرغم من الجهود الجبارة التي يبذلها العلماء والجمعيات الفلكية لنشر وتثقيف العامة.

وكما رأينا سابقاً فإن علم الفلك الحديث مر بعدة مراحل كانت أبرزها بدايتاً من القرن الثاني الهجري "القرن الثامن الميلادي" مع العلماء المسلمين الذين نقلوا معارف القدماء و ألبسوها ثوب العلم إلى علماء الغرب بدايتاً من القرن السادس عشر ميلادي واستفاد علم الفلك كباقي العلوم الفيزيائية و الطبيعية من التكنولوجيا و أخذت الاكتشافات تتوالى و معها النظريات الجديدة و التخصصات التي أصبحت ملحة.

من حيث تعريفه فإن علم الفلك هو فرع من فروع الفيزياء دهتم بدراسة الظواهر الكونية وينقسم إلى عدة فروع نذكر منها:

- علم فلك المواقع.

- علم الفلك الفيزيائي.
- علم القياسات الفلكية.
- علم الفلك الراديوية.
- ارتياد الفضاء.
- الكيمياء الفلكية.

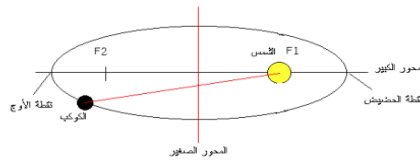
2.6.1. تاريخ علم الفلك الحديث: [13]

في أوروبا قام الكاهن البولندي نيكولاس كوبرنيكوس بخطوة جريئة اذ أعلن أن الشمس هي محور الكون وليست الأرض كما كان الناس يعتقدون في السابق، حيث تم رفض الرأي بشدة قبل أن يصبح من المسلمات التي يقوم عليها علم الفلك الحديث.

تمكن هذا العلم في عام 1572 من رصد احدى تفجيرات النوبا في مجموعة ذات الكرسي وبنى مرصدا ضخما عام 1584 في جزيرة هيفن، رصد من خلاله حركات الكواكب والنجوم فأعلن أن السيارات تدور حول الشمس لكن الشمس والقمر يدوران حول الأرض لكن تلميذه يوهانس كبلر (1571-1630) خالفه الرأي وقام بإثبات ان السيارات تدور حول الشمس لا في دوائر بل في اقطاع ناقصة بعد ذلك نشر قوانينه الثلاثة التي جاءت تشكل ثورة في علم الفلك والتي تسمى بقوانين كبلر.

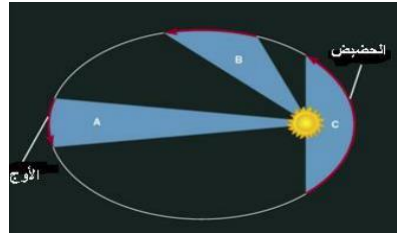
• قوانين كبلر

- أن مسار الكواكب قطع ناقص وهي إهليجية في دورانها حول الشمس وأن الشمس واقعة حتما في احدى بؤرها.



صورة توضيحية 23: المدارات الإهليجية للكواكب.

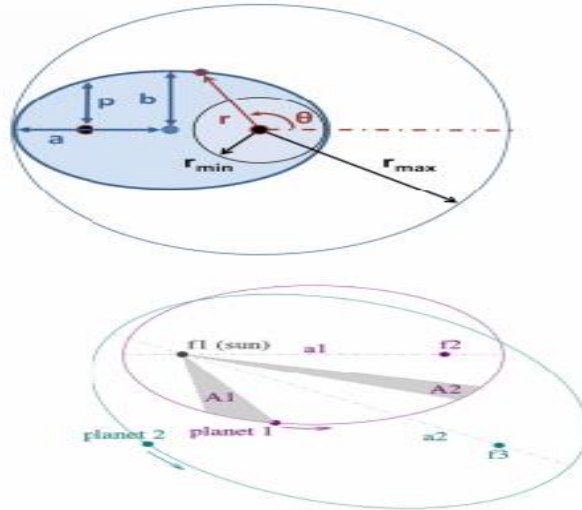
- أن الخط مستقيم الممتد من مركز الكواكب إلى مركز الشمس يرسم بالتأكيد مساحات فضائية متساوية في أزمنة متساوية.



صورة توضيحية 24: قانون كبلر الثالث

- أن مربع دورة الكوكب حول الشمس يتناسب طردياً مع مكعب بعده المتوسط عن الشمس.

واعتبر كبلر أن المسافة بين الأرض والشمس هي وحدة فلكية نموذجية وقد أرفق بهذه القوانين جداول فلكية يمكن بواسطتها الحصول على جميع المسافات الأخرى عن طريق القيام بعمليات حسابية.

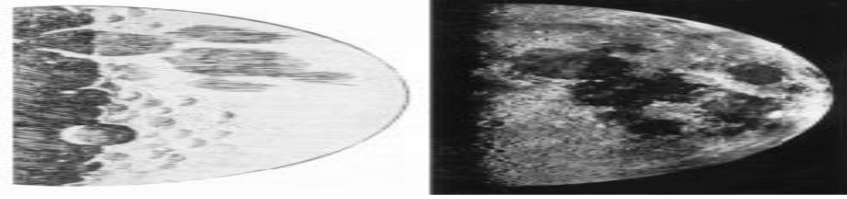


صورة توضيحية 25: رسم توضيحي لقوانين كبلر.

وفي سنة 1609 عند مجيء غاليليو أحدثت ثورة في مجال الرصد والاستكشاف إذ انه قام باكتشاف التليسكوب واستعماله للعدسة المكبرة، حيث قام بوضع الأساس للعلم التجريبي الحديث وتمكن من صنع أول منظار فلكي إذ تمكن بواسطته متابعة مختلف الظواهر الكونية فشاهد كلف الشمس وجبال القمر ووديانه وفوهاتة كما رصد أربعة من أقمار المشتري تدور حوله.



صورة توضيحية 26: منظار غاليليو.



صورة توضيحية 27: ملاحظات غاليليو لتضاريس القمر ومقارنتها بالواقع.

وبمجيء العالم الفلكي كريستيان هويكنز قام بصنع مرقبا كبيرا يبلغ طوله خمسة أمتار، تمكن بواسطته اكتشاف أشياء لم تكن قد اكتشفت بعد ومن بعض اكتشافاته:

- أول من قاس احجام الكواكب وأبعادها.
- ان الزهرة محاطة كليا بالغيوم.
- يوم المريخ مساو ليومنا.
- تيتان أكبر أقمار زحل وأكبر أقمار النظام الشمسي.

وعند قدوم إسحاق نيوتن كان أكبر نجاح وصل إليه علم الفلك، الذي قام باكتشاف قوانين الحركة والجاذبية التي اعتمدت عليها الدراسات الفلكية فيما بعد.

د. قوانين الحركة:

1. مبدأ القصور الذاتي: يبقى الجسم ساكنا او متحركا بسرعة ثابتة ما لم يتأثر بقوة ما.
2. التسارع يتناسب طردا مع القوة ويتناسب عكسا مع كتلة الجسم المتحرك.
3. مقابل كل قوة مؤثرة هناك ردة فعل مساوية لها في المقدار ومعاكسة لها في الاتجاه

كما ابتكر نيوتن منظار فلكي عاكس يستخدم مرآة مقعرة بدل عدسة لتكوين صورة أكثر وضوحاً للجرم السماوي المراد دراسته.



صورة توضيحية 28: التلسكوب العاكس لنيوتن.

وجاء بعد ذلك "وليم هرقل" (1738-1822) فأقام منظاره الكبير عام 1789 والذي يبلغ قطره 48 بوصة وبعده البؤري 40 قدماً.

ومن أهم اكتشافاته:

اكتشاف كوكب اورانوس وقمرى زحل وقمرى اورانوس، اكتشاف النجوم الثنائية وطبق عليها قوانين نيوتن وتوصل إلى أنه لقوة الجاذبية تأثير على هذه النجوم فتجمع بين أفراد النجوم المزدوجة لتدور حول مركز واحد، درس توزيع النجوم في المنظومة النجمية في الفضاء، رصد السدم بشكل دقيق فأشار إلى أن هناك ما يقارب على 2500 سديم بفضل مرصد بالومار الهائل الذي صممه جورج هيل 1948، تمكن العلماء من رصد النجوم والمجرات المنتشرة في أغوار الكون، ثم تحول العلماء فيما بعد إلى المناظير الاثيرية فطوروها، ويعتبر المنظار الاثيري المسمى (V-LA) (very Lary Array) أقوى هذه المناظير قاطبة فهو يتألف من 27 هوائياً، يزن كل منها حوالي 213 طن لالتقاط أصوات بثت قبل نحو 10 مليارات سنة وتتم عملية استبدال الهمسات الخافتة الآتية من الفضاء إلى السطح المقعر للهوائيات وتحليلها بشكل دقيق وهذا الناظور لا يتأثر بالنور أو الظلام والغيوم وتفوق فاعليته بمئة ضعف قوة أي منظار اثيري آخر.

إن الثورة الكبرى في علم الفلك حصلت عندما تمكن الإنسان من الانفلات من قبضة الأرض وجاذبيتها كما تمكن من اختراق جو الأرض ونفذ منه إلى الطبقات العليا فأصبح علماء الفلك على بيئة مما يحدث في الفضاء، وهذا بواسطة السفن الفضائية وتجهيزها بالآلات والمناظير الاثيرية الحديثة فتمكنت ان تقوم بأرصاد فلكية مذهلة كما تعرفوا إلى أصل النظام الشمسي وكيفية نشوئه وبالتالي تمكن الانسان من ان يتفهم الكون بشكل سليم.

3.6.1. فروع علم الفلك:

يختص علم الفلك بدراسة ظواهر الفضاء جميعها من نجوم وكواكب وأجرام سماوية، حيث يمكن تشرح مفاهيمه بواسطة الفيزياء وعلم الأحياء والجيولوجيا والكيمياء، وينقسم علم الفلك إلى عدة فروع يختص كل منها في مجال معين، لكنها ترتبط مع بعضها جوهرياً، وفيما يلي أبرز هذه الفروع:

علم قياس مواقع النجوم (astrometry):

هو الفرع الكلاسيكي الذي يختص بقياس مواقع وحركة النجوم والكواكب، بالإضافة للأمور المتعلقة بتنبؤ حركة النيازك ومواعيد خسوف الشمس وكسوف القمر.

علم الفيزياء الفلكية (astrophysics):

يشرح علم الفيزياء الفلكية حياة وحركة الأجرام السماوية من نجوم وكواكب ومجرات وأقمار من خلال تطبيق قوانين الفيزياء، ويهدف هذا العلم إلى فهم الكون من خلال النظريات الفيزيائية وتحديد متى بدأ وكيف نشأ وما هو موقع الأرض بالنسبة للكون، كما يهتم بالبحث بواسطة النظريات الفيزيائية عما إذا كان هناك حياة على الكواكب الأخرى.

علم الأحياء الفلكي (cosmology):

انبثقت دراسات هذا الفرع مؤخراً لدراسة إمكانية وجود حياة خارج الأرض، وما زالت أغلب الدراسات التابعة لهذا الفرع نظرية، لكن ما زالت البحوث التي تعتمد على دراسة التركيبات الكيميائية التي نشأ منها الكون تحاول اختبار ما إذا كانت بعض الكواكب صالحة للحياة، مثل الاختبارات التي تجرى على كوكب المريخ وبالإضافة إلى ذلك، يختص علم الأحياء الفلكي بالبحث عن كيف بدأت الحياة وتطورت على كوكب الأرض لأن هذا السؤال يفتح الأبواب على حقيقة السؤال الغامض عن السبب الذي جعل الأرض صالحة للحياة، مما يزيد من عدد الأدلة الداعمة للكشف عن الكواكب الشبيهة بالأرض، والتي يمكن أن تكون صالحة للسكن.

علم الكيمياء الفلكية (astrochemistry):

يختص هذا الفرع بدراسة التفاعلات الكيميائية للأيونات والذرات والجزيئات في الفضاء الخارجي، بالإضافة للدراسات المتعلقة بالخصائص الكيميائية للأجرام السماوية الخارجية من نجوم وكواكب ونيازك، وهو محور دراستنا في هذا البحث وسنتطرق له بالتفصيل في الفصل الثاني.

4.6.1. أصناف علم الفلك: [14]**أ. علم الفلك الرصدى:**

يختص بدراسة الضوء المرئي أو أي نوع من الإشعاع الكهرومغناطيسي وتحليله ضمن أطوال موجية مختلفة؛ للحصول على المعلومات المهمة والضرورية الخاصة بعلم الفلك، وذلك بواسطة تلسكوبات وأدوات خاصة.

• أجهزة الرصد الفلكي [15]:**❖ المزولة الشمسية: SUNDIAL**

وهي آلة هندسية يعرف بها الوقت نهارا تتألف من شاخص وقاعدة يكون الشاخص على شكل عصا صغيرة أو خيط يصل بين سطحين أو ثقب يمر منه شعاع الشمس، أما القاعدة فهي الصفيحة التي يرتكز عليها الشاخص وتكون مقسمة إلى دوائر وأرباع وخطوط تعين الوقت، ولكل مزولة علامات تحدد كيفية توجيهها من الشمس والجهات الأربع.

• أنواع المزاول:

أ. ثابتة: منها الافقية والعمودية الكروية والاستوائية.

ب. متحركة: تكون ذات أنواع وأحجام مختلفة ومنها ما يمكن طيه وحمله في الجيب.

ساهم العرب المسلمين في تطوير المزاول وتمكينها من تأشير الوقت الشمسي الظاهري بدقة كبيرة وهذا من خلال فهمهم للمثلثات الكروية التي وجدوا منها:

• **قانون المزولة:** زاوية خيال الشخص = زاوية الساعة + عرض المكان.

• **تسمية المزاول:** الحافر الحزون الأسطوانة والمخروط وساق الجراد.

• **صناعة المزاول:** تصنع من قبل مصانع وورش أوروبية وأمريكية وتباع بأسعار جيدة.

❖ الإسطرلاب:

ابتكرها البابليون لمعرفة ارتفاع الأجرام السماوية وعرض الكواكب، وقام اليونانيون بتطويرها وسموها بالإسطرلاب ومعناه مرآة النجوم، وصنعت في القرن الثاني قبل الميلاد.

قام الفلكيون العرب المسلمون بتطويره فأضافوا إليه أجزاء عديدة حتى أصبح جهازا معقدا ودقيقا ويحتاج إلى خبرة واسعة للتمكن من استعماله.

كان أول صناعه من المسلمين أبو عيسى الإسطرلابي وإبراهيم بن حبيب الفزاري الذي ألف كتاب العمل بالإسطرلاب ومن أدق الصناع المعروفين أحمد بن محمد النقاش.

❖ الحك:

كانت تسمى "الحقة" أو "بيت الابرّة" وتسمى حالياً، "البوصلة" وهي عبارة عن مغناطيس مستقيم يرتكز من وسطه على محور شاقولي بحيث يكون حر الحركة في المستوى الافقي ويرتكز المغناطيس فوق لوحة افقية مدرجة على مدى دائرة كاملة أي 360 درجة.

تؤشر الابرّة المغناطيسية الى اتجاه الشمال المغناطيسي دائماً ومنه يمكن معرفة الاتجاهات الأخرى.

استخداماته:

استخدم العرب "الحك" في الملاحة البحرية، وطورها باعتماد تقسيمات أكثر دقة سموها "الاخنان"، وقد قسموا دائرة الأفق الى 32 قسماً، كل قسم سموه خن وكل واحد منها يشير إلى ناحية من نواحي السفينة، وفي الوقت نفسه يشير الى موقع معين في الأفق.

كأن يكون مطلع او مغرب نجم معين من النجوم الالامعة في بروج معروفة، فاعتبروا نجم القطب الشمالي يشير الى الشمال وقطب سهيل يشير الى الجنوب ومطلع الفرقدين والنعش والناقاة تشير الى اتجاهات شرق الشمال والنسر الطائر الى الشرق ومطلع الجوزاء والتير والاكليل الى جنوب الشرق ومطلع القرب الى الجنوب الشرقي ومطلع الحمارين وسهيل والسلبار الى شرق الجنوب ويشير مغرب والحمارين الى غرب الجنوب كم تم تقسيم كل خن الى سبع أصابع وسموا الاصبع ترفا وكل أربعة أصابع تسمى "ذبان".

$$\text{الخن} = 360 \div 32 = 11.25 \text{ درجة.}$$

$$\text{الاصبع} = 11.25 \div 7 = 1.6 \text{ درجة.}$$

$$\text{الذبان} = \text{أربع أصابع} = 6.4 \text{ درجة.}$$

إن أصل نظام الأخنان غير معروف، لكن كتب عنه في كتب الملاحة العربية تؤكد أن نظام نشأ وتطور في منطقة البحر العربي والمحيط الهندي وذلك من خلال النجوم المعتمدة كمثابات في شروقها وغروبها.

• ذات الحلق:

وهي من أهم الآلات الفلكية، تتألف من سبع حلقات معدنية متداخلة قابلة للدوران حول محاور مختلفة لتمثل حركة الأجرام السماوية حول الأرض، إذ أنها تعتبر في هذا النموذج مركزاً للكون وبالإمكان بناء نموذج آخر لآلة ذات الحلق موافقاً لنموذج مركزية الشمس، وذلك باستبدال موقع الأرض مع الشمس ورفع حلقة القمر وجعلها حول الأرض.

• ذات السمات والارتفاع:

وهي عبارة عن نصف حلقة دائرية يتصل بها سطح من سطوح أسطوانة الأضلاع، قطرها يساوي قطر الحلق، يعرف بها السمت وزاوية ارتفاع الشمس عن ذلك الوقت.

• ذات الشعبتين:

وهي ثلاث مساطر مثبتة على كرسي يتم بها معرفة ارتفاع الجرم السماوي، تكون على شكل ربع دائرة مدرجة بمقياس للدرجات، مرسوم على طرف قوسها كما يرسم على القوس أرقام تدل على الوقت أثناء النهار، ويرسم على الجزء الوسطي من الربيعة خطوط تدل على حركة الشمس والقمر، تعلق الربيعة بشكل رأسي وذلك بواسطة ثقل رصاصي مربوط بخيط.

✓ استخداماته:

قياس زوايا الارتفاع والانخفاض للأجرام السماوية بدقة.

✓ أنواعها:

السداسية: آلة تستخدم لقياس الزوايا الفلكية ومنها يمكن حساب أحجام وزوايا الأجرام السماوية وبالتالي معرفة أبعادها عن طريق حساب اختلاف النظر.

التلسكوبات الفلكية: [13]

التلسكوبات الفلكية أو المراقب هي أجهزة بصرية تستخدم لرؤية الأشياء البعيدة، ويعتقد أن أول تلسكوب كان من صنع النظارات الهولندي (هانز ليبيرشي) عام 1608م، فقد لاحظ صدفة وهو يتفحص زوجين من العدسات واحدة تلو الأخرى.

إن الأجسام تبدو أقرب بالنظر عبر التلسكوبات، وفي عام 1610م صنع العالم الإيطالي الشهير (غاليليو) تلسكوبا أفضل عرف بتلسكوب غاليليو يكبر الأشياء 33ضعفا ثم توالت التحسينات تدريجيا على التلسكوب على أيدي مختلف العلماء والمفكرين.

حيث نميز 3 أنواع من التلسكوبات:

• تلسكوبات كاسرة:

وهي التي تستخدم العدسات بدلا من المرايا لان الضوء ينحني فيها بالانكسار عبر العدسات الزجاجية.

مبدأ عمله:

اخترعت عام 1609 بواسطة غاليليو وتعد أكثر الأنواع شيوعا وانتشارا وهي عبارة عن أنبوب رفيع وطويل حيث توجد عدسة في بداية هذا الأنبوب (العدسة الفعلية = الشبكية) تقوم هذه العدسة بتجميع الضوء الذي يعبر الأنبوب وارساله مباشرة الى العينية (مركز الرؤية) والذي يعتبر نقطة تجمع الضوء او نقطة البؤرة في نهاية الأنبوب، وسمي هذا التلسكوب كاسرا لأنه يكسر الاشعة الداخلة اليه ويجمعها في نقطة تسمى البؤرة.

تتقسم التلسكوبات الكاسرة بدورها الى ثلاثة أنواع:

- **NON achromatic** :

هذا النوع يستعمل واحدة او اثنتان من العدسات المحدبة لتركيز الضوء هذا الأخير له انحراف شديد اذ أنه لا يقوم بتركيز جميع الألوان الضوئية (ألوان الطيف) في نفس نقطة البؤرة نظرا لتباين طول موجات الطيف مما يؤدي لتكون صورة سيئة حيث نجده متوفر لدى المتاجر العادية وهو غير فعال بالنسبة للاستخدامات الفلكية الجادة.

- **Achromatic** :

يستعمل هذا النوع العدسات المحدبة والمقعرة لحنى الضوء ما يضمن ان معظم الألوان الضوئية سوف تركز في نفس نقطة البؤرة ويتميز هذا النوع كونه يعطي صورة دقيقة وواضحة ومن مساوئه انه مكلف نوعا ما بالإضافة انه يعطي لونا كاذبا حول النجم فيبدو كهالة زرقاء.

- **Panchromatic**

يستخدم هذا النوع وجهان من العدسات المحدبة حيث يتم صنعها من نوعان مختلفان من الزجاج ما يسمح لجميع ألوان الطيف بالتمركز حول نقطة واحدة هذا النوع يوفر أعلى نسبة وضوح للصورة ومن عيوبه أيضا انه مكلف.

• **تلسكوبات عاكسة:**

كانت التلسكوبات الكاسرة الأولى قاصرة عن إعطاء صورة واضحة ومحددة المعالم لان صنع العدسات الجيدة كان متعذرا وفي عام 1668 اخترع العلم إسحاق نيوتن تلسكوبا عاكسا لا يحتوي على عدسة شبيئية فالضوء يسري عبر أنبوب طويل مفتوح ليسقط على مرآة مقعرة في أسفل الأنبوب وتنعكس المرآة المقعرة اشعة الضوء نحو أعلى الأنبوب الى مرآة ثانية مسطحة مائلة الوضع فتعكس الاشعة بدورها الى عدسة محدبة مكبرة هي عينة التلسكوب وكانت الصور الناتجة بتلسكوب نيوتن واضحة وخالية من الحواف اللونية التي كانت تعاني منها التلسكوبات الكاسرة.

ومن أكبر التلسكوبات الفلكية في يومنا هذا هو من نفس مبدا هذا النوع بما فيها تلسكوب هابل الموجود في الفضاء وهي بسيطة الصنع وغير مكلفة مقارنة بالتلسكوبات الكاسرة.

مبدأ عمله:

تقوم على أساس وجود مرآة مقعرة مصقولة جيدا تسمى المرآة الأولية حيث تقوم بتجميع الضوء الصادر عن الاجرام السماوية وتركيزه في نقطة واحدة ثم بعد ذلك تقوم بعكسه الى مرآة أخرى تسمى المرآة الثانوية وهي عبارة عن مرآة مسطحة صغيرة جدا مثلثة الشكل والتي بدورها تقوم بعكس الصورة الى جانب العلوي من التليسكوب ومنها الى العينية (نقطة تجمع الضوء او نقطة البؤرة).

• **تلسكوب (catadioptric):**

يمزج هذا النوع بين استخدام العدسات والمرآة أي انه يجمع كلا من التركيبين وهناك نوعان هما الأكثر استعمالا تحت هذا الصنف:

○ Schmidt Cassegrain

○ Maksutov –Cassegrain

في حالة النوع الأول يدخل الضوء عبر مرآة نحيفة عاكسة تقع في نهاية الانبوب ويتم استقبال الضوء عن طريق مرآة ثانوية صغيرة والتي بدورها تعكس الضوء الى خارج فتحة تقع في اخر التلسكوب وأخيرا تظهر الصورة في العينية.

• التلسكوبات الراديوية: [13]

إن الكثير من الأجرام الفلكية يبعث أمواجا لا تتحسس بها أبصارنا، ولذلك ابتكر الفلكيون وسائل لرصد أمثال تلك الاجرام فالسحب الغازية الباردة في الفضاء لا تصدر الا القليل من الضوء المرئي في حين انها تبث قدرا هائلا من الأمواج الراديوية وهي الأمواج التي نستمتع بواسطتها الى المذيع ونرى الصور على شاشة التلفزيون. تمت معرفة هذه الأمواج في القرن التاسع عشر، و لما عرف الفلكيون ان هنالك اجراما سماوية تبعث مثل هذه الأمواج، اتجهوا الى تطوير ما يعرف الان بالتلسكوبات الراديوية واتسع مجال استخدامها نظرا لسعة النطاق الراديوي في الطيف الكهرومغناطيسي مقارنة مع النطاق المرئي من هذا الطيف توجد في العالم تلسكوبات راديوية ضخمة وشبكات عظيمة منها تستخدم لرصد الإشارات القادمة من المجرات البعيدة وعلى نطاق واسع من الاطوال الموجية.

• تلسكوبات الاشعة تحت الحمراء والسينية:

سحب الغبار في الفضاء باردة جدا تعجز عن اصدار ضوء مرئي الا أنها تشع طاقة على هيئة اشعة تحت حمراء يرصدها الفلكيون بتلسكوبات الاشعة السينية لرصد الغازات الحارة التي تتراكم حول الثقوب السوداء. إن الغاية من استخدام هذه التلسكوبات هو تجميع الاشعاعات، ويستعمل الفلكيون تقنية الألوان الزائفة على نطاق واسع لإظهار نتائج الرصد بالأطوال الموجية غير مرئية:

✓ اللون الأحمر للدلالة على المناطق الأشد اصدار الأمواج الراديوية.

✓ اللون الأصفر للدلالة على المناطق الأقل اشعاعا.

✓ اللون الأزرق للدلالة على المناطق خافتة الإصدار.

يمكن تطبيق تقنية مماثلة لإظهار الاجرام السماوية التي تبث اشعاعات عند اطوال موجية أخرى.

العوائق التي تواجهها هذه التلسكوبات:

معظم الاشعاع الذي تبث عنهم هذه التلسكوبات لا يتمكن من اختراق الغلاف الجوي الأرضي فالغازات في الغلاف الجوي الأرضي كالأوزون وثنائي أكسيد الكربون وبخار الماء تمتص الاشعة تحت الحمراء والاشعة

فوق البنفسجية والاطوال الموجية القصيرة ومع هذا فان بعض من الاشعاع تحت الأحمر يخترق الغلاف الجوي من مناطق ضيقة في الاطوال الموجية تعرف باسم " النوفذ الجوية " .

ب. علم الفلك النظري:

يستخدم القوانين الفيزيائية والعمليات الحسابية لشرح وتحليل ما يتم الحصول عليه من علم الفلك الرصدي، وكذلك لعمل دراسات تنبؤية حول ظواهر وأشياء كونية مختلفة.

7.1 نظرة على الكون: [13]

علم الكون هو العلم الذي يبحث في الكون كله أي كل ما في الوجود من مجرات ونجوم وكواكب ومذنبات وغيرها كما انه العلم الذي يسعى للإجابة على العديد من الأسئلة المثيرة التي طالما طرحها الانسان على نفسه منذ ان بدأت حيا ته على الأرض مثل كيف نشأ الكون؟ ومتى نشأ؟ ومن الذي اوجد الكون؟ وأين هي حدوده؟ وما هو شكله؟

كانت هذه الأسئلة مدار تفكير الانسان منذ ان بدأ حياته على الأرض ومع تقدمه عبر القرون والعصور اخذ يتعلم من الطبيعة وخاصة السماء في الليل لذلك بنى المعابد وشيدها لتكون عالية متأملا الوصول الى الشمس والقمر والنجوم والتقاطها.

في منتصف القرن العشرين الماضي أكد الفلكي الأمريكي "هارلو شابلي" ان الشمس تقع في أطراف المجرة بين حشد هائل من النجوم وان الفضاء الكوني يمتد الى ملايين السنين الضوئية حتى تم رصد أبعد مجرة معروفة حتى الان تقع على بعد 13 مليار سنة ضوئية ولا ندري ما الذي يوجد بعد ذلك حيث أن ابعاد مجرة هي اقصى حدود الكون المنظور، أي ان الكون الذي يمكن لمراصدنا الفلكية رؤيته بحسب قدرتها وكلما صنع الانسان مرصد فلكية اقوى على مدى العقود القادمة فانه سيرى مجرات ابعد وابعد في الكون وبالتالي لا ندري اين يمتد الكون.

1.7.1. نشأة الكون:

كانت نقطة الخلاف الرئيسية في نظريات نشوء الكون الأولى حول اذا ما كان الكون ازليًا ام كانت له بداية، وبحسب قوانين الفيزياء الحديثة فلو كان الكون ازليا لوصل إلى مرحلة التوازن ذلك يعني ان الكون سيكون كتلة واحدة لها نفس الخصائص والصفات غير مجزئة ولها درجة الحرارة نفسها، لان الحرارة تنتقل من الجسم الساخن إلى البارد حتى تصل إلى التوازن بين الجسمين والمادة تنتقل من المنطقة ذات الكثافة الأعلى إلى المنطقة ذات الكثافة الأقل إلى ان تصل إلى التوازن أيضا، وهذا يعني ان الكون غير ازلي فهو لم يصل إلى مرحلة التوازن

بعد. وخروجا من هذا المنطلق، تلخص النظريات الأربعة الوحيدة لكيفية وجود الكون ومن خلالها يمكننا اقضاء واستبعاد بعض النظريات الخارجية والبعيدة عن المغزى الأساسي لمفهوم بداية الكون وهي:

1. أن الكون قد اوجد نفسه.
2. أن كونا اخر قد وجد الكون.
3. أن الكون قد جاء من العدم.
4. أن الله هو من خلق الكون.

• بالنسبة للنظرية الأولى:

لا يمكن للكون ان يوجد نفسه بنفسه، لأنه لم يكن موجودا أصلا فكيف يوجد شيئا وهو غير موجود؟ وكيف تنشأ مادة الكون من لا شيء؟ ففعل الإيجاد لا يمكن ان يقع الا إذا كان هنالك أحد أو مادة موجودة اصلا ليفعله، وعليه فهذه النظرية مستبعدة.

• بالنسبة للنظرية الثانية:

يُطرح من خلال هذه النظرية السؤال ذاته الذي يقول: إذا كان كون آخر قد أوجد الكون الحالي، فمن أوجد الكون الأول؟ ومن هذا المنطلق نستنتج ان هذه النظرية غير معقولة وتخالف أبسط قوانين الطبيعة لذلك فهي مستبعدة

• بالنسبة للنظرية الثالثة:

أن أيجاد شيء من العدم امر لا يقبله العقل، فتخيل صنع كرسي وليس لديك اخشاب ولا مسامير ولا معدن ولا أي شيء، فهذا مستحيل، لذلك فهي أيضا مستبعدة. أما النظرية الاكثر قبولا في علم الفلك الحديث مع وجود ظواهر كونية تدعمها تسمى نظرية (الانفجار العظيم) Big Bang ووضعها أولا الفلكي البلجيكي (ادوارد لاميتير) Lemaitre Edward .

انطلاقا من نظرية أينشتاين العامة واستنتج بناء على تفهقر المجرات الحلزونية ان الكون قد بدا من انفجار "ذرة بدائية" أو "بيضة كونية" Cosmic Egg والتي تمتاز بالكثافة اللانهائية ودرجة حرارة هائلة تقدر بمليون مليون أعلى من درجة حرارة نواة الشمس ثم تابع دراسة هذه النظرية وطورها من بعده الفلكي الروسي

المولد والأمريكي الاصل الشهير "جورج جامو" George Gamow وأعلن عن النظرية الجديدة سنة 1932م، وسميت أيضا إضافة الانفجار العظيم (الضربة الكبرى) أو (الفرقة الكبرى)، جاء في نظرية الانفجار العظيم أن الكون قبل حوالي 2015 مليار سنة كان عبارة عن كتلة سديمية بدائية لا متناهية الكثافة والحرارة (حساء كوني) واطلق على هذه المادة البدائية البيضة الكونية مكونة من جسيمات أولية مثل الإلكترونات والبروتونات والنيوترونات أي من الجسيمات الأولية الرئيسية في الذرة لكنها كانت منفردة ولم تلتحم بعد لتشكيل الذرة، بسبب الكثافة الحرارة الهائلة للحساء الكوني التي منعت هذه الجسيمات الالتحام وتشكيل الذرة، بالإضافة للجسيم النيوتريينو الذي لا يحمل كتلة ولكنه يحمل طاقة فقط، والذي يخترق الأرض والنجوم من طرفها إلى التيوبترينو الذي لا يحمل كتلة ولكنه يحمل طاقة فقط، والذي يخترق الأرض والنجوم من طرفها إلى طرفها المقابل بكل سهولة، لم يتمكن هو الآخر من الحركة آنذاك.

تسمي الفيزياء النظرية هذه الحالة بالتفرد Singularity أي ان مادة الكون الأولى التي سبقت الانفجار العظيم كانت عبارة عن موقع في الزمكان يصبح فيه مجال جاذبية الأجرام الفلكية لأنتهائي بطريقة لا تعتمد على نظام الإحداثيات، وتعني وزن لا نهائي لحجم معين في ظروف هذا الموقع، عندما يكون الضغط على الذرات من جميع الجهات في جسم معين داخل ثقب أسود مثلا لا نهائي يؤدي إلى تقطت الذرات وانهيائها على نفسها مختصرة المسافات الشاسعة بين طرف الذرة الخارجي وأنويتها، ومن ثم يحدث تكسير لنوى الذرات وتحطمها مع مكوناتها الذرية (الكواركات) تحت ضغط هائل في قلب ثقب أسود والكميات المستخدمة لقياس شدة مجال الجاذبية هي كمية الانحناءات الثابتة للزمكان والذي يتضمن قياس كثافة المادة، وبما ان هذه الكميات تصبح لانتهائية في اطار التفرد فإن قوانين الزمكان الطبيعية لا يمكن أن توجد وقد شاءت قوة ما ان يحدث انفجار في البيضة الكونية، وحقيقة ان الفيزياء الحديثة لا يمكنها حتى الآن تفسير هذه القوة التي عملت على وقوع هذا التفجير، لكن معظم الشواهد عن الكون الحديث تشير إلى حدوث هذا الانفجار، و الذي أدى إلى حدوث تبريد في الحساء الكوني نتيجة التوسع في مادة الكون الأولى، والتقليل في كثافتها وحرارتها، ورافق الانفجار إشعاع على شكل فوتونات ملأ الكون كله.

إن العلم الحديث لا يعلم بالضبط ما الذي حصل عندما كان عمر الكون صفر، كما اننا لا نعرف أيضا عن الظروف التي كانت سائدة قبل وجود البيضة الكونية، كذلك فلا احد يعلم (فيزيائيا) من أين جاءت المادة الأولية للكون والتي خلقت منها الجسيمات الأولية، كما لا نعلم بالضبط السبب أو القوة التي عملت على وقوع الانفجار التي اعلنت عن بداية ولادة الكون، وهي اسئلة لا اعتقد ان الفيزياء يمكنها الاجابة عليها، وذلك وبكل

بساطة لأن قوانين الفيزياء تعتمد على دراسة اربعة عناصر رئيسية يتشكل منها الكون وهي المادة والطاقة والزمان والمكان، واذا لم توجد هذه العناصر يعني اننا نتحدث عن العدم وفي هذه الحالة تتوقف قوانين الفيزياء معها !! كما تؤكد هذه النظرية على ان الكون ليس ازليا وانما كانت له بداية، فلو أن الكون ازليا فلا بد حينئذ من ان نعرف فيزيائيا الأحداث التي سبقت الانفجار العظيم وكانت هذه النظرية العلمية تشكل تحديا كبيرا امام الملحددين والفلاسفة الذين كانوا يعتبرون ان المادة موجودة منذ الازل وأنه ليس لهذا الكون بداية أو نهاية.

لنعد الآن إلى الانفجار العظيم، فإن أول حدث وقع مع بداية الكون أي من بعد الزمن صفر من عمر الكون تعرف (حقبة بلانك) Planck epoch والتي تمتد من الزمن صفر الى 10 ثانية تقريبا أي اقل من الثانية الواحدة برقم واحد متبوعا ب 43 صفر، وبناء على الدراسات الفلكية فقد وقعت هذه الحالة قبل حوالي 13079 مليار عام بناء، ونظرا لصغر حجم الكون آنذاك والذي يقدر بحجم حبة الشوكولاتة، يظن العلماء ان التأثيرات الكمية للجاذبية هي التي كانت تسيطر في هذه الفترة وليست التفاعلات الفيزيائية، كما كانت قوى الطبيعة الأربعة الرئيسية المعروفة مجتمعه مع بعضها في قوة واحدة على الأرجح ، نظرا لحالة الكون غير المستقرة آنذاك، لكن اخذت هذه القوى تنفرد وتتغزل عن بعضها مع تطور نشوء الكون وتمدده.

كانت حرارة المادة الأولى وكثافتها في حقبة بلانك عالية جدا لا يمكن تخيلها أو وصفها بعقولنا، لكن رغم ذلك لا يمكننا القول إنها ،لانهاية فمثلا اشارت حسابات واضع نظرية الانفجار العظيم كما اسلفت جورج جامو أن حرارة الكون كانت 1032 أي واحد وامامه 32 صفرا، أما كثافتها فوصلت إلى حوالي 1089 اعلى من كثافة الحديد، كانت الكواركات واللبتونات هي الجسيمات الأولية السائدة في هذه المرحلة من عمر الكون، وكانت متقاربة جدا مع بعضها بحيث لم تكن هنالك قوى فاعلة بينها، ومع مرور الوقت وبعد مرور دقيقة واربعون ثانية من الانفجار العظيم، واصلت درجة حرارة الكون انخفاضها التدريجي حتى وصلت بليون درجة مئوية، وبوصول الكون إلى هذه الحرارة اتحدت البروتونات مع النيوترونات لينتج عنها أنوية ذرات الهيدروجين الثقيل (الدوتريوم) ، ثم واصلت انوية الهيدروجين الثقيل التحامها مع بروتونات ونيوترونات أخرى أو مع بعضها البعض حتى تشكلت نوى الهليوم، الذي يتكون من بروتونين ونيوترونين، وهو الغاز الرئيسي الذي تشكلت منه النجوم وكل المواد الأخرى في الكون من سدم وغازات واطربة وكواكب سيارة وحتى اجسادنا. وبعد حوالي مليون سنة من الانفجار العظيم انخفضت درجة الحرارة إلى عدة آلاف، وسمحت درجة الحرارة هذه إلى اضمحلال قوة الجاذبية الكهرومغناطيسية التي منعت اقتراب الإلكترونات من أنوية الذرات قبل هذه الفترة

بسبب الحرارة العالية التي كانت سائدة، ف اتخذت الإلكترونات مدارات لها حول الأنوية وتشكلت بعد ذلك الذرات ونشأت المادة الحالية للكون .

كانت مادة الكون في البداية عبارة عن فوتونات ذات طاقة عالية جدا وذات كثافة هائلة أيضا، وعليه يمكن القول بصورة ادق ان الطاقة في تلك الفترة كانت اشعاعية وليست مادية، أي كان الكون عبارة عن إشعاع فقط وليس مادة .

بعد الدقائق الأولى من عمر الكون وحتى آلاف السنين من عمره، نشأت المادة الأولى بسبب الهبوط في درجة الحرارة ووصولها إلى حدود آلاف ملايين الدرجات المئوية نتيجة الانفجار، فقد كان الكون مظلمًا تمامًا خلال فترة سيطرة الإشعاع وخلق المادة، بسبب التصادم الدائم بين الفوتونات والإلكترونات والجسيمات الأولية الأخرى، ومنع خروج الفوتون من المادة الأولى للكون نحو الفضاء .

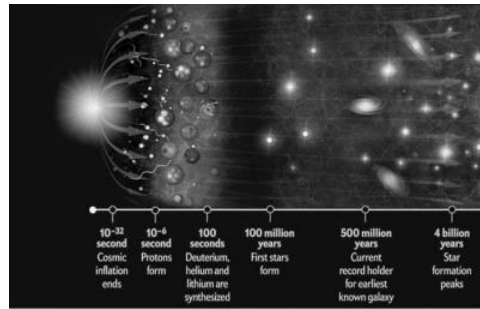
وبعد مرور آلاف السنين من الانفجار العظيم، زادت برودة المادة الأولى ونتج عن تصادم الفوتونات مع بعضها الجسيمات الأولية، أي تحول الإشعاع إلى جسيمات أولية، فقد كان لهبوط الحرارة عاملاً رئيسياً في نشوء مادة الكون.

ومع مرور الزمن، تابعت درجة الحرارة انخفاضها، فبعد مرور عشر ثانية فقط من الانفجار العظيم وصلت الحرارة إلى 30 مليار درجة مئوية، ثم وصلت إلى 10 مليارات درجة مئوية بعد ثانية واحدة فقط، وبعد 14 ثانية انخفضت درجة الحرارة إلى 3 مليارات درجة مئوية، وهذه ثانية واحدة فقط، وبعد 14 ثانية انخفضت درجة الحرارة إلى 3مليارات درجة مئوية، وهذه الحرارة سمحت للإلكترون والبروز يترون (مضاد الإلكترون) من التلاشي بسرعة أكبر .

ومع المتابعة في انخفاض درجة الحرارة، حيث وصلت بعد نهاية الدقائق الثلاث الأولى من عمر الكون إلى مليار درجة مئوية، وهي حرارة تسمح للبروتونات والنيوترونات لكي تلتحم مكونة نواة الذرة البدائية، حيث بدأت أولاً ذرات الهيدروجين الثقيل (الدوتريوم) المكون من بروتون واحد ونيوترون واحد وهي أبسط الذرات في كل مادة الكون، وكانت كثافة الكون كافية أيضاً اقل بنسبة بسيطة من كثافة الماء) بحيث يمكن لهذه الأنوية الخفيفة من الالتحام لتكوين نواة الهيليوم المكونة من بروتونين ونيوترونين.

بناء على هذا السيناريو الفيزيائي المنطقي المبني على الرصد والتجارب، انتشرت أنوية ذرات الهيدروجين في الكون في نهاية الدقائق الثلاث الأولى من الانفجار العظيم وشكلت حوالي ٧٣% من المادة الاجمالية، ثم تكونت أنوية ذرات الهيليوم وشكلت حوالي ٢٧% أي في المرتبة الثانية بعد الهيدروجين، بالإضافة للإشعاع وجسيمات أوليه هي النترونات والنترونات المضادة وبقايا بسيطة من الإلكترونات.

بعد آلاف السنين من الانفجار العظيم بردت مادة الكون بشكل كبير، بحيث تمكنت الأنوية من اسر الإلكترونات مكونة غازي الهيدروجين والهيليوم. ومع مرور الزمن التحمت ذرات الهيدروجين مع بعضها بواسطة الجاذبية مشكلة السحب الغازية التي تابعت تراكمها على بعضها وانهارها على نفسها حتى زادت كثافتها بشكل كبير لتولد الحرارة التي كانت كافية لحدوث الانشطار النووي الذي أطلق حرارة هائلة والتي كانت كافية لحدوث التفاعل النووي لتولد النجوم، وبالتالي نشأت المجرات ومادة الكون وعناصره التي خلقت منها اجسدا أيضا.



صورة توضيحية 29: مراحل نشوء الكون من الانفجار العظيم.

8.1. المجرات: [15]

يمكن تعريف المجرة بأنها عبارة عن تجمعات ضخمة تحتوي على مليارات النجوم والكواكب والاقمار والنيازك والكويكبات، كما تحتوي كذلك على الغبار الكوني والمادة المظلمة وبقايا النجوم يتخللها مجالات مغناطيسية قوية جدا جزر كونية هائلة تكون الوحدات الأساسية هذا الفضاء الممتد بلا نهاية تنتشر وتتوزع في جميع زوايا السماء فهي عبارة عن دوامات ملتهبة في السماء.

إن جميع النجوم التي نراها بأعيننا في السماء او التي نراها من خلال التلسكوب، تجمعها وحدة أساسية أكبر من النجوم تسمى المجرة وهي الوحدة الرئيسية الأكبر حجما في الكون والكون كله هو عبارة عن مجرات فلو نظرنا من خلال مرصد فلكية ضخمة نحو جميع انحاء الفضاء الكوني سنرى مجرات كثيرة جدا منتشرة في

الفضاء ولا يوجد في الكون نجم مفرد بل ينتمي الى مجرة ولا يعلم الفلك الحديث العدد الحقيقي لهذه المجرات لعدم وجود نهاية للفضاء الذي نرصده.

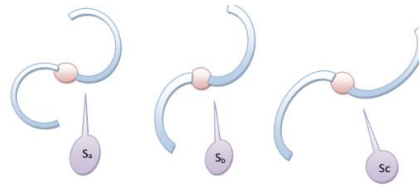
1.8.1. أنواع المجرات:

■ المجرات الحلزونية:

وهي المجرات الأكثر شيوعا في الكون لها قرص ساطع تمتد خلاله أذرع حلزونية وهذه الأذرع عبارة عن موجة حلزونية الكثافة تدور حول المجرة مرة كل بضعة عشرات الملايين من السنين وتكون أذرع الحلزون مضاءة بجيل جديد من النجوم الساطعة الساخنة وتعرف النجوم وهي نوعين:

■ المجرات الحلزونية العادية S:

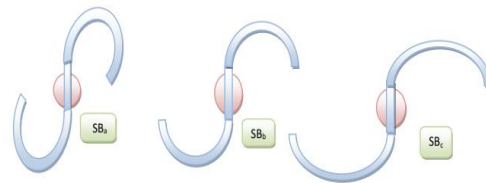
وهي مجرات لها أذرع حلزونية تمتد من نهاية النواة وتقسم الى ثلاثة انواع هي Sa, Sb, Sc حسب مقدار التفاف الأذرع حيث تكون Sa أكثر التفافا ونكون Sc اقل التفافا.



صورة توضيحية 30: المجرات الحلزونية العادية

■ المجرات الذراعية SB:

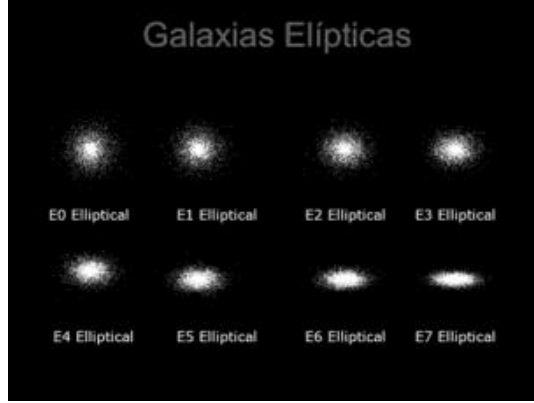
وفيهما تمتد الذراع من نهايتي القضيب الذي هو عبارة عن حزام مؤلف من نجوم مفردة على مسافات مختلفة من مركز المجرة ويدور حول المركز كأنه وحدة متماسكة، ويقسم هذا النوع الى ثلاثة اقسام ايضا حسب مقدار التفاف الذراع وهي Sb_a, Sb_b, Sb_c كما في الشكل:



صورة توضيحية 31: شكل المجرات الحلزونية

■ مجرات القطع الناقص (الإهليجية):

وهي مجرات ذات شكل إهليجي قطع ناقص تم تصنيفها الى سبعة اقسام حسب مقدار تكورها وهي (E1,E2,E3,,,,,,E7) حيث تكون E1 كروية الشكل و E7 مسطحة شديدة التفلطح لذلك فان الرقم المصاحب للحرف E يمثل مقدار التفلطح.



صورة توضيحية 32: شكل المجرات الإهليجية

■ مجرات غير منتظمة:

وهي مجرات ليس لها شكل معين وهي عبارة عن تجمع نجمي غير منتظم مثل سحابتي ماجلان



صورة توضيحية 33: شكل مجرة سحابة ماجلان.



صورة توضيحية 34: شكل مجرة غير منتظمة.

■ المجرات العدسية: (ثنائية التحدب):

وهو تصنيف أضيف لاحقا الى التصنيفات السابقة وهي مجرات مشابهة لحبة العدس.



صورة توضيحية 35 : شكل مجرة عدسية.

✓ قائمة بعض أسماء المجرات المعروفة:

- مجرة أندروميديا.
- مجرة هوع.
- مجرة درب التبانة.
- مجرة سحابتي ماجلان.
- مجرة عجلة العربية.
- مجرة المرأة المسلسلة.
- مجرة المروحة.
- مجرة العين السوداء.
- مجرة بودي.
- مجرة المذنب.
- مجرة الشرغوف
- مجرة زهرة الشمس.
- مجرة درب التبانة:

تسمى مجرتنا بدرب التبانة ويعتقد انها تنتمي الى المجرات الحلزونية الضلعية من الفئة Sb على شكل الشوكة الرنانة، عرض قرص المجرة يساوي 1000000 سنة ضوئية، ويحتوي على حوالي 300مليار نجم ويزن 600 مرة كتلة شمسنا، ولمجرة درب التبانة ذراعان رئيسيان تتفرعان من نهايتي الضلع، بالإضافة الى عدد صغير من أذرع أقصر طولاً تسمى "تنوعات" وهذا النمط الحلزوني يدور حول محور قرص مجرة درب التبانة مرة كل 50مليون سنة، وشمسنا هي أحد نجوم المكونة لهذه المجرة.

-تبلغ سمك مجرتنا حوالي 1000 سنة ضوئية.

-تدور حول نفسها بسرعة 600 كيلومترا في الثانية الواحدة.

- تكمل المجرة دورتها حول مركزها كل 240 مليون سنة من مكان وجود الشمس.

-قطرها حوالي 100 الى 120 ألف سنة ضوئية.



صورة توضيحية36: شكل مجرة درب التبانة.

9.1. المجموعة الشمسية: [17]

المجموعة الشمسية أو النظام الشمسي أو المنظومة الشمسية هي نظام كوكبي يتكون من الشمس وجميع ما يدور حولها من أجرام، بما في ذلك الأرض والكواكب الأخرى.

✓ أجرام المجموعة الشمسية:

- الشمس: هي نجم ضخم ومركز المجموعة الشمسية، تشكل 99.86% من كتلة النظام الشمسي
- الكواكب: ثمانية كواكب تدور حول الشمس في مدارات بيضاوية، وهي: عطارد، الزهرة، الأرض، المريخ، المشتري، زحل، أورانوس، نبتون.
- الكواكب القزمة: أجرام أصغر من الكواكب، تشبهها في بعض الصفات، لكن لا تفي بجميع شروط تعريف الكوكب، ومن أشهرها بلوتو.
- الكويكبات: أجرام صخرية صغيرة تدور حول الشمس، معظمها في حزام الكويكبات بين كوكب المريخ والمشتري.
- المذنبات: أجرام جليدية تدور حول الشمس، وتترك وراءها ذيلاً من الغبار والغاز عند اقترابها من الشمس.
- النيازك: قطع صخرية صغيرة من الفضاء، تسقط على الأرض أحياناً.
- الأقمار: أجرام تدور حول الكواكب، مثل قمر الأرض.

خلاصة

علم الفلك ليس علما حديثا، و انما هو نتيجة قرون طويلة من الدراسات و العمليات الرصدية التي واكب تطورها تطور الدراسات الفلكية، أدى الى ولوج في ما يسمى بعصر غزو الفضاء ويمكن القول إن علم الفلك هو العلم الذي يختص بدراسة أكثر من 99,9999% من هذا الكون، و لأن حجم الأرض لا يمثل سوى واحد من 10^{19} × 2.5 جزء من هذا الكون بحسب التقديرات الإحصائية الفلكية الحالية، ولو فرضنا أن حجم الأرض هو حجم نواة ذرة الهيدروجين فإن حجم الكون المقدر هو أكبر من حجم الكرة الأرضية، لذلك تبرز أهمية دراسة علم الفلك بمقدار ما يختص بدراسته من هذا الكون.

و ربما يتساءل البعض عن فائدة علم لا يستطيع الإنسان أن يؤثر في أجزائه، إذ إن الإنسان لا يستطيع أن يغير من شكل الأرض أو يؤثر في حركة الأجرام الفلكية أو دوران الفلك حتى لو علم ذلك، و يمكن الرد على هذا القول أن تعلم العلوم هو غاية في ذاتها، لابل إن معرفة الإنسان بالفلك والظواهر الفلكية، يجعله أكثر اتزانا و اطمئنانا في حياته عند حدوث تلك الظواهر، و هو كمن يركب طائرة لا دخل له في قيادتها ولكنه يعلم متى تقلع وتهبط وتتحرف وأنواع المشاكل التي تواجهها ، فهو أكثر اتزانا ممن يركب الطائرة دون أن يعي كل ذلك . هذا عدا إدراك الإنسان لهيئة هذا الكون وكيفية تطوره، مما يصنع تصورا صحيحا له، ولأن الكون تحكمه نظرية وسنة واحدة تنتظم فيها الأمور المادية والمعنوية لا بل تنتظم فيها حركة التاريخ وتغير الأحداث التاريخية، لذلك فإن إحدى الطرق غير المباشرة تفهم كل ذلك هو عبر دراسة علم الفلك.

١١. الفصل الثاني:
الكيمياء الفلكية

مقدمة جزئية :

أصبحت الكيمياء الفلكية الآن أحد المجالات الأساسية في العلوم عامة وعلم الفلك خاصة، ومع تطورها السريع، تزداد تعقيداتها وبالتالي، ليس من السهل حتى على الخبراء فهم نطاقها الكامل بالتفصيل وعند استخدام الكيمياء الفلكية لحل مشاكل فلكية عملية، قد يقتصر الباحثون أحياناً على جزء صغير ومحدد منها دون النظر بعناية في الافتراضات والقيود الكامنة ورائها وللاستفادة الكاملة من قوة الكيمياء الفلكية، فإن الفهم العميق لمفاهيمها الأساسية القائمة على الفيزياء والكيمياء أمر ضروري.

1. تعريف الكيمياء الفلكية:

كما تعرف أيضا بالفيزياء الفلكية الجزيئية تركز على دراسة دورة حياة الجزيئات في الفضاء يشمل هذا المجال فهم كيفية تتشكل الجزيئات و كيف تتفاعل و تتحلل و كيف تتأثر بالإشعاع المحيط تلعب الجزيئات دورا مهما في تشكيل و تطور الأجرام الفلكية مثل النجوم و الكويكبات و الغيوم بين النجوم بالإضافة إلى ذلك يمكن استخدام خصائص الجزيئات مثل مستويات طاقتها ووفرتها النسبية لاستنتاج الظروف الفيزيائية المحيطة مثل درجة الحرارة و الكثافة و الإشعاع , هذا يجعل الجزيئات أدوات تشخيص بالغة الأهمية لفهم العمليات الفيزيائية و الكيميائية التي تحدث في جميع أنحاء الكون. [16]

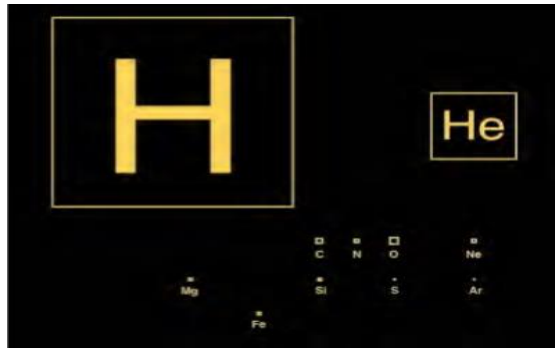
1.1. منظور تاريخي للكيمياء الفلكية: [20]

كان يُعتقد قبل منتصف القرن العشرين أن الفضاء بيئة معادية لتكوين الجزيئات وبقيائها، وأن التفاعلات الكيميائية لا يمكن أن تحدث بالإضافة إلى ان معظم المادة في الفضاء ستوجد إما كذرات أو كجزيئات غبار غير متبلورة بدلاً من جزيئات فردية.

كان هذا الاعتقاد قائماً على:

- قلة كثافة المادة في الفضاء .
- قلة تنوع العناصر الكيميائية الموجودة في الفضاء، حيث تقتصر بشكل كبير على الهيدروجين والهيليوم.
- الظروف الحرارية القاسية (عالية ومنخفضة).

ومع ذلك، أدت التطورات في علم الفلك، خاصةً في مجال التلسكوبات والكاشفات والمطيافية التي تعمل في أجزاء الراديو والأشعة تحت الحمراء (IR) والضوء فوق البنفسجي (UV) المرئي من الطيف الكهرومغناطيسي إلى إثبات أن هذا غير صحيح وأن الكيمياء تحدث بالفعل في الفضاء.



صورة توضيحية 37: العناصر المرتبطة بالمربعات التي تتناسب مساحتها مع توفرها في الكون.

2.1.1. بدايات علم الكيمياء الفلكية ودراسة السحب المنتشرة والشفافة: [14]

بدأ علم الكيمياء الفلكية منذ حوالي قرن بدراسة السحب المنتشرة حيث انطلق من دراسة امتصاص الضوء المرئي للذرات والجزيئات المتواجدة داخل السحب المنتشرة، وذلك على امتداد خطوط الرؤية باتجاه النجوم الساطعة حيث يحدث تحول معظم العناصر من الشكل الذري إلى الجزيئي (فان ديشوك وبلاك 1989 سنو ومك كول 2006).

بسبب قدرة الفوتونات فوق البنفسجية والأشعة الكونية على اختراق هذه السحب وتأيين ذراتها وتفكيك جزيئاتها، فإن الأطر الزمنية اللازمة للوصول إلى التوازن تكون قصيرة (بضعة آلاف السنين) وتهيمن تفاعلات أيون-جزيء على العمليات الكيميائية فيها.

تتميز هذه السحب بأن المعايير الفيزيائية مثل الكثافة ودرجة الحرارة وحقل الأشعة فوق البنفسجية معروفة ومقيدة بشكل جيد، كما يمكن حتى قياس كثافة H_2 مباشرة من خلال خطوط امتصاص الأشعة فوق البنفسجية. بناءً على ذلك، تشكل هذه السحب أفضل مجال اختبار لدراسة علم الكيمياء الفلكية بدقة عالية وفي الوقت نفسه، ونظرًا لأن العديد من المعايير محددة جيدًا فإن دراسة هذه السحب تساعد أيضًا في فهم البنية الفيزيائية والعمليات التي تجري داخل الوسط النجمي (الوسط بين النجوم) ISM.

1.2.1. بيانات Herschel-HIFI وتعزيز دراسة الوسط النجمي:

أعطت بيانات تلسكوب Herschel-HIFI نتائج جيدة لدراسة علم الكيمياء الفلكية فقد تم رصد خطوط دوران لبعض الجزيئات على امتداد مجرة درب التبانة، وذلك عبر امتصاص الإشعاع باتجاه مصادر بعيدة في مجال الأشعة تحت الحمراء وبما أن معظم الجزيئات تتواجد في أدنى مستويات طاقتها، فإن عملية تحويل الامتصاص إلى كثافة تعتبر دقيقة وواضحة.

لا يمكن رصد الهيدروجين الجزيئي (H_2) بشكل مباشر في أطوال موجات الأشعة تحت الحمراء البعيدة، لكن ثبت أن فلوريد الهيدروجين (HF) يعد مؤشرًا موثوقًا للكثافة بسبب كيميائيته البسيطة بشكل خاص.

اتضح أن وفرة الهيدريدات الصغيرة مثل الماء (H_2O) تبلغ 10^5 بالنسبة إلى الهيدروجين الجزيئي (H_2)، وهي قيم تفسرها بالفعل كيمياء أيون-جزيء منخفضة الحرارة.

كان أحد أهم الاكتشافات المفاجئة لتلسكوب Herschel هو رصد امتصاص قوي لأيونات الهيدروكسيل (OH^-) والماء (H_2O) على امتداد معظم خطوط الرؤية في المجرة وحتى في مجرات ذات انزياح أحمر كبير.

نتائج مهمة من بيانات: Herschel-HIFI

- كشف هذا التلسكوب عن خطوط امتصاص لجزيئات مختلفة في مجرة درب التبانة، بما في ذلك جزيئات الماء (H_2O) والهيدروكسيل (OH^-).
- تم لأول مرة اكتشاف جزيء $^{36}ArH^+$ وهو أول جزيء يضم غاز نبييل.
- أشارت هذه الاكتشافات إلى وجود طور غني بالجزيئات ولكنه يفتقر للهيدروجين الجزيئي (H_2) لم يكن معروفا من قبل.
- تساعد دراسة هذه الجزيئات على اختبار محاكاة الكمبيوتر للوسط النجمي وتحسين فهمنا لتأين الأشعة الكونية فيه.

3.1. التحديات المتبقية:

- على الرغم من بساطة السحب المنتشرة، لا تزال هناك تساؤلات تتطلب الإجابة عنها مثل:
- اكتشاف جزيئات معقدة بشكل مفاجئ بوفرة مشابهة لتلك الموجودة في السحب المظلمة.
- الحاجة إلى تفسير تكوين حبيبات الغبار في الوسط النجمي.
- هوية خطوط الامتصاص البينية المنتشرة (Diffuse Interstellar Bands) التي لم يتم تحديد معظمها بعد.
- تتطلب الوفرة العالية لأيونات CH^+ وكذلك أيونات الهيدروجين الكبريتي SH^+ إدخال معايير إضافية لرصد تأثيرات التسخين المضطرب عند كثافة منخفضة.
- يصعب تفسير اكتشاف جزيئات معقدة بشكل متزايد بوفرة مشابهة لتلك الموجودة في السحب المظلمة
- تلزم الحاجة إلى تكوين حبيبات الغبار في الوسط النجمي لحل مشكلة عمر الغبار، مما يعني وجود كيمياء نشطة للحبيبات.

4.1. التقنيات المستخدمة في الكيمياء الفلكية: [20]

إن التقنية الأساسية المستخدمة لكشف وتحديد المركبات الكيميائية في الفضاء هي التحليل الطيفي، ويمكن تحديد جزيئات في الطور الغازي عن طريق كشف انتقالاتها الدورانية عند أطوال الموجات الصغيرة والموجات الراديوية أو الأغلفة الدورانية لأنماط الاهتزاز الأساسية لها في الأشعة تحت الحمراء لا تصلح الجزيئات في الحال الصلبة عموماً، للكشف والتحديد عند أطوال الموجات الأطول لا تزال الأنماط الاهتزازية الأساسية للجزيئات في الحالة الصلبة قابلة للكشف في الأشعة تحت الحمراء على الرغم من أن تداخل الطيف يمكن أن يمثل مشكلة بسبب تداخل أنماط المجموعات الوظيفية المتشابهة في جزيئات مختلفة. أخيراً، يمكن أيضاً كشف الانتقالات الإلكترونية والنوية للعناصر الفردية عند طاقة فوق البنفسجية وطاقات أعلى.

5.1. أهداف الكيمياء الفلكية:

تهدف الكيمياء الفلكية بشكل عام إلى فهم العمليات الكيميائية التي تحدث في الفضاء، ومع ذلك قبل الخوض في التفاصيل دعونا نستعرض بعضاً من أهدافها الأكثر تحديداً:

- تأثير البيئة الفلكية على تكوين الجزيئات: يسعى علماء الكيمياء الفلكية إلى فهم تأثير عوامل مثل الإشعاع الكوني، الحقول المغناطيسية، الكثافة، الحرارة، على تفاعلات الجزيئات وبالتالي على تكوين جزيئات جديدة أكثر تعقيداً.
- مستوى تعقيد الجزيئات في الفضاء: يشكل فهم مستوى تعقيد الجزيئات الموجودة في الفضاء أهمية كبيرة، حيث يُعد التنوع الكيميائي شرطاً مسبقاً لتطور الحياة في الكون لذلك يسعى الباحثون للإجابة على أسئلة مختلفة مثل: ما هي أكثر الجزيئات تعقيداً التي يمكن تكوينها في الفضاء؟ وكيف تتشكل؟ وهل يمكن لهذه الجزيئات أن تصمد أمام عملية انهيار السحب البروتوستيلية التي تؤدي إلى تكون النجوم؟
- علاقة الجزيئات في المذنبات والبيئات الأخرى: يُحاول الكيمياء الفلكية فهم العلاقة بين أنواع الجزيئات الموجودة في المذنبات والغبار بين النجمي وسحب الغاز الجزيئي، والبيئات حول النجوم والكويكبات. تُساعد هذه المقارنة في تعزيز فهمنا للتوزيع ووفرة الجزيئات عبر الكون، والتغيرات التي يُمكن أن تطرأ عليها في ظروف مختلفة. [19]

6.1. كيمياء النجوم:**1.6.1. دورة تكوين النجوم:**

تبدأ دورة حياة النجوم بانهيار سحابة من الغبار والغاز في الوسط بين النجمي حيث تتكون هذه السحابة في الأصل من الهيدروجين والهيليوم والليثيوم، وهي العناصر التي نشأت بعد الانفجار العظيم يؤدي انهيار السحابة

إلى تكوين نجم أولي يبدأ بالسطوع وإشعاع الحرارة خلال هذه المرحلة يُحاط النجم الوليد بسديم نجمي، وهو عبارة عن غاز وغبار متبقي من انهيار السحابة بمرور الوقت، يتشكل نظام شمسي من الكواكب حول النجم، تتكون هذه الكواكب من الغبار والغاز المتبقي من تكوين النجم.

يطرأ تدفق الإشعاع من النجم على الكواكب، مما يؤدي إلى تسخينها وربما حتى دعم الحياة عليها.

يحرق النجم الموجود في وسط النظام الكوكبي ببطء كل الوقود النووي الموجود في النواة واعتمادًا على كتلته، إما أن يحترق ببطء وينتهي به الأمر كقزم أبيض، أو يخضع لانفجار هائل كمستعر أعظم يرسل هذا الأخير مادة من النجم والكواكب المحيطة به عائدًا إلى الوسط بين النجمي، مما يخلق دورة تكوين النجوم.

يقوم المستعر الأعظم بعدد من الوظائف نذكر منها:

- إدخال نوى أثقل إلى الوسط بين النجمي، مثل الأكسجين والسليكا.

تكوين عناصر أثقل مثل اليورانيوم في ضغط الانفجار الشديد. يصبح الوسط بين النجمي غنيًا بذررات مختلفة جاهزة للدخول في تفاعلات كيميائية، سواء في طور الغاز أو على سطح حبيبات الغبار ثم تتكون سحب جديدة من هذه المادة تحت تأثير الجاذبية المتبادلة، ويمكن أن تبقى في حالة مستقرة لملايين السنين كما يولد المستعر الأعظم موجة صدمة في الفضاء، ليس فقط من حطام جزيئي عالي السرعة من النظام الكوكبي ولكن ربما تموجات في نسيج الزمكان نفسه، تسبب موجة الصدمة تباينات محلية في الضغط ويمكن أن تؤدي إلى انهيار سحابة جزيئية لتكوين نجم جديد، بدءًا دورة جديدة من تكوين النجوم.

يمكن لبيئة المنطقة ذات التكوين النجمي أن تؤثر بشكل كبير على خصائصها الكيميائية. حيث تؤثر درجة الحرارة ومعدل التأين الناتج عن الأشعة الكونية وحقل الإشعاع والجدول الزمني للتطور جميعها على معدلات تكوين الجزيئات وتدميرها، وقد تؤدي إلى حدوث تباين كيميائي. بالمقابل، يمكن استخدام المحتوى الكيميائي للمصدر لاستنتاج خصائصه الفيزيائية وتاريخه.

ومن الأمثلة الجيدة على هذه العلاقات منطقتا "اللب الساخن" (hot-core) "المفضلتان"، وهما العنقود الأولي Sgr B2(N) في منطقة المركز المجري (Galactic Center) ومنطقة (Orion KL) التي تبعد عنها بحوالي

20 ضعف. استُهدفت كلتا المنطقتين بمساحات واسعة للخطوط الطيفية على مدى العقود الأربعة الماضية لدراسة محتوى الجزيئات العضوية المعقدة (COMs) فيها، ولكن خصائصهما الفيزيائية قد تكون مختلفة جدًا في الواقع. علاوة على ذلك، بدأت مناطق أخرى لتكوين النجوم ذات الكتلة المنخفضة والعالية تظهر أدلة على التباين الكيميائي وذلك بفضل التحسينات في الحساسية والتغطية الطيفية والقدرة الدقة الزاوية للمرافق الرصدية الحالية وبالتالي، نركز في هذا القسم على العلاقات الرصدية بين البنية الفيزيائية في بيئات تكوين النجوم والتنوع الكيميائي. [20]

7.1. التطورات الكبيرة في الكيمياء الفلكية خلال العقد الماضي: [24]

حقق مجال الكيمياء الفلكية خلال العقد الماضي تقدمًا ملحوظًا بفضل تلسكوبات جديدة وتحسينات في أجهزة المراقبة الموجودة في المراصد الحالية ومن أبرز الميزات الرئيسية التي توفرها هذه المراصد لدينا:

- الحساسية التي توفرها الفتحات الكبيرة ومواقع الرصد الممتازة: تتيح الفتحات الكبيرة للالتقاط المزيد من الإشعاع، مما يحسن من قدرة التلسكوب على اكتشاف جزيئات ضعيفة الإشارة أو تلك الموجودة بكميات قليلة بالإضافة إلى ذلك، توفر مواقع الرصد ذات السماء الصافية والاضطرابات الجوية المنخفضة بيانات أكثر دقة.
- تحسين الدقة المكانية: تسمح الدقة المكانية العالية للعلماء بدراسة التوزيع المكاني للجزيئات داخل الأجرام الفلكية، على سبيل المثال، يمكن تحديد مناطق التكوّن النجمي أو دراسة توزيع الجزيئات على قرص حوله نجم حديث الولادة.
- تغطية نوافذ التردد العالي في الأشعة تحت الحمراء البعيدة بدقة طيفية عالية باستخدام التلسكوبات الفضائية مثل هيرشيل وصوفيا (المرصد الستراتوسفيري لعلم الفلك بالأشعة تحت الحمراء): تسمح التلسكوبات الفضائية بدراسة الجزيئات في أطوال موجية لا يمكن الوصول إليها من الأرض بسبب امتصاص الغلاف الجوي. كما توفر الدقة الطيفية العالية القدرة على فصل خطوط طيفية متعددة قريبة من بعضها، مما يساعد على تحديد هوية الجزيئات بدقة أكبر.

قدم كل جانب من هذه الجوانب فرصًا جديدة وكذلك تحديات على سبيل المثال، تتطلب كمية البيانات الكبيرة التي يتم جمعها من هذه المراصد الجديدة تطوير أساليب تحليل بيانات قوية وفعالة.

8.1. مرافق رصد حديثة لدراسة مناطق تكوين النجوم:

خلال العقد الماضي، دخلت ثلاث منشآت رئيسية جديدة حيز التشغيل لدراسة مناطق تكوين النجوم، وهي:

▪ مصفوفة أتاكاما الكبيرة للمليمتر/تحت المليمتر (ALMA)

- تكون ALMA من مجموعة تتألف من 66 تلسكوب تعمل بأطوال موجية تحت المليمتر.
- أثبتت قدرتها على إجراء عمليات تصوير عالية الدقة وعالية الحساسية لتوزيع الجزيئات في مناطق تكوين النجوم القريبة والبعيدة (من عام 2011 حتى الوقت الحالي).
- توفر هذه المجموعة للعلماء القدرة على دراسة التركيب الدقيق لمناطق تكوين النجوم، بما في ذلك توزيع أنواع مختلفة من الجزيئات، مما يساعد على فهم العمليات الكيميائية التي تؤدي إلى تشكل النجوم والأنظمة الكوكبية.

▪ مرصد الفضاء هيرشيل (Herschel) :

- يعتبر هيرشيل مرصدًا فضائيًا بقطر 3.5 متر يعمل بأطوال موجية تحت الحمراء البعيدة (نطاق تردد تيرا هرتز).
- ساهمت بيانات هيرشيل بشكل رئيسي في الكشف عن وجود الماء والمواد العضوية المعقدة في مناطق تكوين النجوم (من عام 2009 إلى عام 2013).
- وفرت أطوال الموجات المستخدمة من قبل هيرشيل إمكانية دراسة جزيئات لم يكن من الممكن اكتشافها سابقًا باستخدام التلسكوبات الأرضية بسبب امتصاص الغلاف الجوي.
- ساعدت بيانات هيرشيل على تحسين فهمنا للدور الذي تلعبه الجزيئات المختلفة في تطور السحب الجزيئية العملاقة وتكوين النجوم.

• المرصد الستراتوسفيري لعلم الفلك بالأشعة تحت الحمراء (SOFIA)

- صوفيا عبارة عن تلسكوب محمول جواً بقطر 2.5 متر يتيح الوصول إلى نوافذ نطاق الأشعة تحت الحمراء البعيدة غير القابلة للرصد من الأرض.
- تتيح SOFIA بشكل خاص دراسة خطوط التبريد المهمة للوسط بين النجمي (ISM) ، والتي تقدم معلومات قيمة عن الظروف الفيزيائية والكيميائية للغاز بين النجمي.

- تساعد بيانات صوفيا على فهم العمليات التي تؤدي إلى فقدان الحرارة من الغاز بين النجمي، مما يساهم في انهيار السحب الجزيئية العملاقة وتكوين النجوم.

9.1. المزايا الرئيسية لعرض النطاق الترددي الكبير في دراسة الوسط بين النجمي:

يعتبر عرض النطاق الترددي الكبير خاصة مهمة في مجال دراسة الوسط بين النجمي (ISM) وذلك للأسباب التالية:

- ❖ تحديد أنواع جزيئية جديدة: يتيح عرض النطاق الترددي الكبير إمكانية اكتشاف خطوط طيفية جديدة قد لا تكون معروفة سابقاً. وبالتالي، يمكن من خلال تحليل هذه الخطوط ومقارنتها مع قواعد بيانات مطيافية متخصصة تحديد أنواع جزيئية جديدة لم يتم اكتشافها من قبل.
- ❖ نمذجة دقيقة لإصدار الخطوط الطيفية: يوفر عرض النطاق الترددي الكبير معلومات أكثر ثراءً حول خطوط الانبعاث الطيفية للجزيئات حيث يتيح رصد عدد أكبر من الخطوط الطيفية في نطاق ترددي واسع عملية نمذجة أكثر دقة لإصدار هذه الخطوط تساعد هذه النماذج على فهم توزيع مستويات الطاقة داخل الجزيئات، مما يسمح بتقدير درجات حرارة الإثارة والكثافة العمودية (Column Densities) للجزيئات بشكل أكثر دقة.
- ❖ تحديد دقيق لدرجة حرارة الإثارة والكثافة العمودية: تلعب معرفة درجة حرارة الإثارة والكثافة العمودية للجزيئات دوراً مهماً في فهم العمليات الفيزيائية والكيميائية التي تحدث في الوسط بين النجمي. يوفر العرض النطاق الترددي الكبير معلومات حول عدد أكبر من مستويات الطاقة للجزيئات، مما يؤدي إلى تحسين دقة تقدير درجة حرارة الإثارة. على سبيل المثال، مع تحديد 15 إلى 20 خط طيف مميز لجزيء معين، يمكن الوصول إلى عدم يقين (أقل من 10-20%) في تقدير درجة حرارة الإثارة والكثافة العمودية بافتراض توازن حراري محلي (LTE) على سبيل المثال (يورغنسن وآخرون، 2018).
- ❖ تطوير مجال الفيزياء الفلكية المختبرية: استفاد مجال الفيزياء الفلكية المختبرية أيضاً من هذه التطورات التقنية، حيث تتيح أجهزة قياس الطيف الجديدة ذات العرض النطاق الترددي الكبير إجراء دراسات أكثر شمولاً على خصائص الجزيئات ذات الصلة بالوسط بين النجمي في المختبر، كما تساعد بيانات هذه الدراسات على تحسين قواعد البيانات الطيفية وتطوير نماذج أكثر دقة للعمليات التي تحدث في الفضاء بين النجوم.

10.1. التحديات المرتبطة بعمليات المسح الطيفي واسعة النطاق:

على الرغم من المزايا العديدة لعمليات المسح الطيفي واسعة النطاق باستخدام أدوات مثل ALMA/PILS ، إلا أنها تواجه تحديات رئيسية:

- كميات البيانات الهائلة: تولد عمليات المسح هذه كميات هائلة من البيانات الطيفية. تتطلب معالجة وتحليل هذه البيانات قدرة حاسوبية كبيرة وبرامج متخصصة قادرة على التعامل مع مثل هذه المجموعات البيانات المعقدة.

- الحاجة إلى أدوات تحليل جديدة: لا تقتصر التحديات على كمية البيانات فحسب، بل تتطلب أيضًا تطوير أدوات تحليل جديدة ومحسنة لاستخراج المعلومات العلمية القيمة من هذه الأطياف. تختلف طبيعة البيانات الناتجة عن عمليات المسح واسعة النطاق مقارنة بالدراسات السابقة التي كانت أكثر تحديدًا وأقل حساسية.

على سبيل المثال، كانت الدراسات السابقة تركز في الغالب على اكتشاف عدد قليل من الخطوط الطيفية لكل نوع جزيئي (بضع خطوط على الأكثر)، في مثل هذه الحالات، كانت أساليب مخططات دوران الجزيء (rotation diagram methods) الكلاسيكية فعالة للغاية، حيث يمكن التعامل مع البيانات يدويًا إلى حد ما.

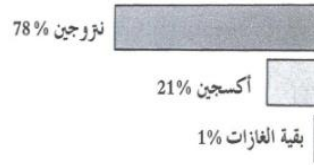
- تعقيد تحليل البيانات: أما بالنسبة لعمليات المسح واسعة النطاق، فإن وجود عدد أكبر بكثير من الخطوط الطيفية (مئات أو حتى آلاف الخطوط) يجعل من الصعب تطبيق الأساليب التقليدية تتداخل العديد من الخطوط الطيفية المختلفة من أنواع جزيئية متعددة، مما يتطلب تطوير خوارزميات و أدوات تحليل بيانات حاسوبية متقدمة لفك تشابك هذه البيانات واستخراج المعلومات المطلوبة حول التركيب الكيميائي للوسط بين النجمي يحيط بسطح الأرض غطاء من الهواء، فهو يحمي كل أنواع الحياة من الأشعة فوق البنفسجية القادمة من الشمس؛ ويساعد على تسوية درجات الحرارة إلى حد كبير وهو أيضا هام لتنفس كل الكائنات الحية.

11.1. الغلاف الجوي الأرضي: [24]

❖ تركيب الهواء:

الهواء مزيج من الغازات فهو يتركب من حيث الحجم من (78%) من النيتروجين، (21%) أكسجين؛ أقل من (1%) أرغون؛ ومقادير من غاز ثاني أكسيد الكربون CO₂ وبخار الماء H₂O والغازات أخرى. هذه النسب

تختلف في أعلى الهواء حيث يلعب الهيدروجين والهليوم دوراً هاماً في تركيب الهواء في الارتفاعات فوق (30 - 40 ميلا) .



صورة توضيحية 38: نسبة الغازات في الغلاف الجوي الأرضي

ليس للغلاف الجوي شكل معروف أو محدد لكن دراسة الشهب تشير إلى وجود الهواء على مستويات أكثر من (100 ميل) بينما تشير دراسة ظاهرة الشفق القطبي أن بعض أجزاء الغلاف الجوي تقع على ارتفاع (400 ميلا) فوق مستوى سطح البحر.

يمكن تقسم الغلاف الجوي إلى خمس طبقات نسميها هنا بحسب الارتفاع بقصد دراستها: التروتوسفير، الستراتوسفير، الميزوسفير، الترموسفير، أكزوسفير.

- **التروبوسفير**: هي الطبقة الأقرب إلى سطح الأرض، وتحتوي على معظم بخار الماء والغيوم.
 - **الستراتوسفير**: تحتوي على طبقة الأوزون التي تحمي الأرض من الأشعة فوق البنفسجية الضارة.
 - **الميزوسفير**: تتميز بانخفاض درجات الحرارة بشكل كبير.
 - **الترموسفير**: تتميز بارتفاع درجات الحرارة بسبب امتصاص الطاقة الشمسية.
 - **الإكزوسفير**: هي الطبقة الخارجية للغلاف الجوي، وتتكون من ذرات خفيفة تهرب إلى الفضاء.
 - **التروبوسفير**: يُعد التروبوسفير الطبقة الدنيا من الغلاف الجوي للأرض، وله دورٌ حيويٌّ في تنظيم الطقس على سطح الكوكب، تُعرف هذه الطبقة أيضًا باسم "طبقة الطقس".
- ❖ **من أهم وظائفه:**

➤ **تحديد درجات الحرارة**: تُساهم وظائف التروبوسفير في ضبط درجات الحرارة على سطح الأرض. حيث تتلقى المناطق ذات خطوط العرض المنخفضة طاقةً شمسيةً أكثر من المناطق ذات خطوط العرض العليا.

- حركة الهواء: يُسبب التغير في درجات الحرارة بين خطوط العرض حركة الهواء. تُساعد كتل الهواء الضخمة في نقل جزء من الحرارة الزائدة من المناطق الدافئة إلى المناطق الباردة، والعكس صحيح.
 - تكوين الجبهات: تُعرف الحدود بين كتل الهواء الضخمة باسم الجبهات. تُشكل الجبهات مواقع نشوء معظم الأجواء السيئة، مثل العواصف الرعدية والأمطار الغزيرة.
 - تكوين الغيوم والضباب: تُشكل الرطوبة في التروبوسفير الغيوم والضباب، وجميع أنواع الأمطار.
- تتميز هذه الطبقة ب:

- ✓ ارتفاعه: يتغير ارتفاع التروبوسفير مع درجات العرض. حيث يتناقص من 10 أميال (16Km) فوق مستوى سطح البحر عند خط الاستواء إلى 5 أميال (8 Km) أو أقل عند القطبين.
- ✓ درجة حرارته: تتراوح درجات الحرارة في التروبوسفير بين 56 F° (13.3 درجة مئوية) عند سطح البحر إلى 60 F° عند الحد الأعلى.

يُعرف الحد الفاصل بين التروبوسفير والطبقة التالية باسم التروبوباس.

الستراتوسفير: هي الطبقة الثانية من الغلاف الجوي للأرض، وتقع فوق. التروبوسفير (طبقة الطقس) وتحت الميزوسفير تُعرف هذه الطبقة بوجود طبقة الأوزون، وهي طبقة غنية بالأوزون تُساعد على حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية الضارة.

❖ أهم وظائفه:

- حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية: تُساهم طبقة الأوزون في حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية الضارة المنبعثة من الشمس.
- امتصاص الطاقة الشمسية: تمتص بعض جزيئات الغلاف الجوي في الستراتوسفير الطاقة الشمسية، مما يؤدي إلى تسخين هذه الطبقة.
- تكوين الرياح النفاثة: تُشكل تيارات الهواء القوية في الستراتوسفير، والتي تُعرف باسم الرياح النفاثة، دورًا هامًا في أنماط الطقس على سطح الأرض.

يتميز ب:

➤ ارتفاعه: يبدأ الستراتوسفير من 10 أميال (16Km) فوق مستوى سطح البحر ويستمر حتى (50 ميلاً) 80km .

➤ درجة حرارته: تتراوح درجات الحرارة في الستراتوسفير بين $60^{\circ}F$ - $(-51.1^{\circ}C)$ عند الحد الأدنى إلى $320^{\circ}C$ عند الحد الأعلى.

➤ طبقة الأوزون: تُشكل طبقة الأوزون جزءًا من الستراتوسفير، وتقع على ارتفاع يتراوح بين 10 و30 ميلاً (16 و48 Km) فوق سطح الأرض. تُساهم هذه الطبقة في حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية الضارة.

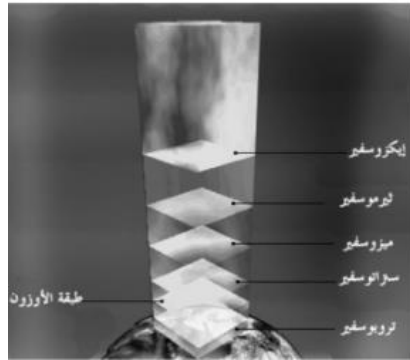
❖ التهديدات التي تواجه طبقة الأوزون:

➤ مركبات الكلوروفلوروكربون (CFCs): تُعدّ مركبات الكلوروفلوروكربون من أهم المواد الكيميائية التي تُؤدي إلى تآكل طبقة الأوزون.

➤ مركبات الهالون: تُساهم مركبات الهالون أيضًا في تآكل طبقة الأوزون.

❖ الجهود المبذولة لحماية طبقة الأوزون:

بروتوكول مونتريال: تمّ توقيع بروتوكول مونتريال عام 1987، ويُعدّ اتفاقية دولية تهدف إلى حماية طبقة الأوزون من خلال التخلص التدريجي من مركبات الكلوروفلوروكربون (CFCs).



صورة توضيحية 39 : تموضع الأوزون بين طبقتي التروبوسفير و الستراتوسفير

- الميزوسفير : هي الطبقة الثالثة من الغلاف الجوي للأرض، وتقع فوق الستراتوسفير (طبقة الأوزون) وتحت الترموسفير. تُعرف هذه الطبقة بانخفاض درجات الحرارة بشكلٍ كبير مع ازدياد الارتفاع.

❖ وظائف الميزوسفير:

- امتصاص الإشعاع الشمسي: تُساهم بعض جزيئات الغلاف الجوي في الميزوسفير في امتصاص الإشعاع الشمسي، مما يؤدي إلى تسخين هذه الطبقة.
- حماية الأرض من النيازك: تُساعد الميزوسفير على حماية الأرض من النيازك الصغيرة التي تُحترق عند دخولها هذه الطبقة.
- تكوين السحب الليلية المتوهجة: تُشكل بعض أنواع السحب في الميزوسفير، مثل سحب الغبار، ظاهرة السحب الليلية المتوهجة.

❖ خصائص الميزوسفير:

- ارتفاعه : يبدأ الميزوسفير من 80 km فوق مستوى سطح البحر ويستمر حتى 137 km.
- درجة حرارته: تتراوح درجات الحرارة في الميزوسفير بين 0 درجة مئوية عند الحد الأدنى إلى -140°C عند الحد الأعلى.

يُعرف الحد الفاصل بين الميزوسفير والطبقة التالية باسم الميزوباس.

• الترموسفير:

- هي الطبقة الرابعة من الغلاف الجوي للأرض، وتقع فوق الميزوسفير (الطبقة الباردة) وتحت الغلاف الخارجي. تُعرف هذه الطبقة بارتفاع درجات الحرارة بشكل كبير مع زيادة الارتفاع.

❖ وظائف الترموسفير:

- امتصاص الإشعاع الشمسي: تُساهم بعض جزيئات الغلاف الجوي في الترموسفير في امتصاص الإشعاع الشمسي، مما يؤدي إلى تسخين هذه الطبقة.
- حماية الأرض من الأشعة فوق البنفسجية: تُساعد الترموسفير على حماية الأرض من بعض أنواع الأشعة فوق البنفسجية الضارة.
- تكوين الشفق القطبي: تُشكل بعض أنواع الجزيئات في الترموسفير ظاهرة الشفق القطبي.

➤ خصائص الترموسفير:

➤ ارتفاعه: يبدأ الترموسفير من 85 ميلاً (137km) فوق مستوى سطح البحر ويستمر حتى 373 ميلاً (600 كيلومتراً).

درجة حرارته: تتراوح درجات الحرارة في الترموسفير بين $220\text{ F}^\circ - 140\text{ C}^\circ$ عند الحد الأدنى إلى 3600 درجة فهرنهايت (2000 درجة مئوية) عند الحد الأعلى.

يُعرف الحد الفصل بين الترموسفير والطبقة التالية باسم الترموباس.

▪ الأوزوسفير:

يُعدّ الغلاف الخارجي الطبقة الخارجية من الغلاف الجوي للأرض، ويقع فوق الترموسفير. تُعرف هذه الطبقة بانخفاض كثافتها بشكلٍ كبير مع ازدياد الارتفاع، حتى تصل إلى الفراغ.

▪ وظائف الغلاف الخارجي:

حماية الأرض من النيازك: تُساعد الطبقة الخارجية على حماية الأرض من النيازك الصغيرة التي تُحترق عند دخولها هذه الطبقة.

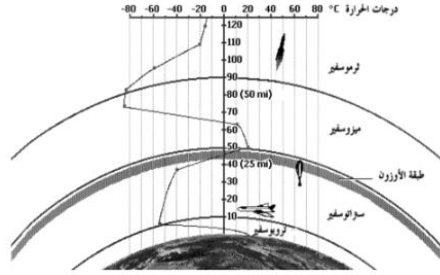
امتصاص الإشعاع الشمسي: تُساهم بعض جزيئات الغلاف الجوي في الطبقة الخارجية في امتصاص بعض أنواع الإشعاع الشمسي.

تكوين ذيول المذنبات: تُشكل بعض أنواع الجزيئات في الطبقة الخارجية ذيول المذنبات عندما تقترب من الشمس.

▪ خصائص الغلاف الخارجي:

ارتفاعه: يبدأ الغلاف الخارجي من 373 ميلاً (600Km) فوق مستوى سطح البحر ويستمر حتى 6200 ميلاً (10000km)

درجة حرارته: تتراوح درجات الحرارة في الغلاف الخارجي بين 3600 F° (2000 C°) عند الحد الأدنى إلى 18000 F° (1000 C°) عند الحد الأعلى.



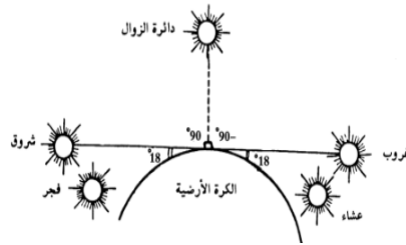
صورة توضيحية 40: توزع طبقات الغلاف الجوي للأرض مع درجة الحرارة لكل طبقة

12.1. الغلاف الجوي في الفلك:

يؤثر الغلاف الجوي في الإشعاعات القادمة بعدة طرائق: الانعكاس «الامتصاص؛ الانتثار» والانكسار.

■ الانعكاس:

ظاهرة الشفق هي نتيجة مباشرة للانعكاس بواسطة جسيمات صغيرة من الغبار والدخان في الغلاف الجوي، هذه الجسيمات تعكس الأشعة التي تتلقاها من شروق أو غروب الشمس؛ وهكذا نتزود بضوء نهار إضافي. الشفق الفلكي يتأخر حتى يصبح مركز الشمس (189) أسفل الأفق .



صورة توضيحية 41: زاويتي الشفق الفلكي والفجر الفلكي.

■ الامتصاص:

يعتبر الغلاف الجوي الأرضي ماصاً انتقائياً. فهو يمتص تقريباً (100%) بعض الأطوال الموجية من الضوء؛ ويمتص جزئياً بعضها الآخر؛ الأشعة فوق البنفسجية القصيرة يتم امتصاصها كلياً في الغلاف الجوي؛ بينما يمتص أمواج الضوء المرئي جزئياً. لذلك فإن ضوء النجوم الذي يصل إلى العين يختلف مادياً عن الضوء الذي انطلق من النجم، إن الامتصاص الانتقائي يعقد العمل على الفلكي، لأن دراسة الطيف النجمي تُخبر الفلكيين افتراضياً بكل شيء عن النجوم. لذلك يجب أن يؤخذ بعين الاعتبار.

▪ **الانتثار:**

هذا الأثر هو نتيجة لاستتارة الضوء بواسطة الجزيئات المفردة في الهواء. مع اعتماد مقدار الاستتارة على لون الضوء. فاللون الأزرق يستطير أو ينتشر أكثر من اللون الأحمر وهو ما يفسّر لنا زرقة السماء والحمرة البرتقالية عند الغروب. إن زرقة السماء نتيجة استتارة اللون الأزرق على جزيئات الهواء العليا وفي كل الاتجاهات. ويظهر اللون الأحمر للشمس عندما تنحدر في السماء لأن المزيد من الأشعة الزرقاء تستطير بواسطة الغلاف الجوي. وهكذا يصل للأرض المزيد من الأمواج الطويلة الحمراء؛ معطية اللون الأحمر للشمس.

▪ **الانكسار:**

عندما يمر الضوء في الفضاء بين النجوم فإنه ينكسر أو ينحني، يزداد مقدار الانكسار عندما يقترب الضوء من الطبقات القريبة من الأرض، مما يؤدي إلى ظهور جميع الأجرام السماوية أعلى مما هي عليه في الواقع، تبلغ القيمة العظمى للانكسار قرب الأفق ثم تتناقص بسرعة عندما تصل إلى السمات.

خلاصة:

الكيمياء الفلكية هي علم مثير للاهتمام يساعدنا على فهم الكون من حولنا من خلال دراسة العناصر والمركبات الكيميائية الموجودة في الفضاء الخارجي ومع التطور التكنولوجي نتوقع أن نتعرف على المزيد عن هذا الفضاء في السنوات القادمة ومن المتوقع أن تؤدي الاكتشافات الجديدة هذا المجال إلى فهم أفضل لأصل الكون وتكوين النجوم والكواكب ونشأة الحياة وإمكانية وجود حياة خارج كوكب الأرض.

١١١. الفصل الثالث:

الدراسة الحاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي

المقدمة:

تلعب تفاعلات الهيدرازين مع جذور الهيدروكسيل دورا هاما في كيمياء الغلاف الجوي , لذلك فإن فهم آلية تفاعل أكسدة الهيدرازين بواسطة هذا الجذر التي تعتبر عملية معقدة يمكن ان تتم وفق عدة مسارات مختلفة، إلى جانب حساب ثوابت السرعة لجميع المسارات الممكنة، يفسر مصير الهيدرازين في الغلاف الجوي.

في هذا الفصل سوف نسلط الضوء على آليات وحركية هذا التفاعل حيث تم التحقيق نظريا من هذا التفاعل باستخدام برنامج GAUSSIAN عند درجات حرارة وضغوط غير عادية، لتحقيق الأهداف الرئيسية اعتمدت دراستنا سلسلة متنوعة من الحسابات الكيمائية الكومومية عالية المستوى لدراسة أسطح الطاقة المحتملة لجميع مسارات التفاعل الممكنة. وقد وجد ان اهم التفاعلات كانت تفاعلات حذف (إزالة) H وتفاعل استبدال من الرتبة 2 (SN2) وأيضا تفاعلات الإضافة.

تم تمييز ملف تعريف الطاقة لجميع المسارات المصحوبة بالخصائص الجزيئية لنقاط ثابتة معنية، عند مستويات MP2 و M06-2X و CCSD(T)/CBS وهذا يعني أننا قمنا بحساب الطاقة الكامنة لتفاعل أكسدة الهيدرازين في جميع النقاط المهمة على طول مسار التفاعل، باستخدام ثلاث طرق مختلفة لكيمياء الكم عالية المستوى ، مما يسمح لنا بتحديد أهم مسارات التفاعل وحساب ثوابت معدل هذه التفاعلات عند درجات حرارة وضغوط مختلفة.

من اجل تقدير طاقات الحاجز الدقيقة لقنوات ازالة الهيدروجين تم تنفيذ سلسلة من حسابات CCSD(T) بمجموعات أساس معززة مختلفة. وأيضا إجراء الحسابات الديناميكا المباشرة باستخدام مستوى

(M06-2X/maug-cc-pVTZ) المثبت، الذي تم التحقق منه هو طريقة نظرية دالية الكثافة (DFT) التي ثبت أنها دقيقة لمجموعة واسعة من الأنظمة الكيمائية، وكذلك بواسطة مستوى CCSD (T) (الطاقات) + MP2 (وظائف التقسيم) الذي يعد طريقة هجينة تجمع بين دقة CCSD (T) لحسابات الطاقة مع كفاءة MP2 لحساب وظائف التقسيم.

تم التحقيق في ثوابت السرعة المعتمدة على الضغط للمسارات الخالية من الحواجز بواسطة نهج الاصطدام القوي لذلك، تم اكتشاف السلوكيات الرئيسية لتفاعل $N_2H_4 + OH$ وفقاً لتأثيرات درجة الحرارة والضغط على معاملات السرعة المحسوبة ضمن الأطر النظرية الجيدة لسلوكيات TST و VTST و RRKM.

ومن خلال الدراسة الحاسوبية توصلنا الى:

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

- تم التوصل الى أن آلية اضافة الهيدروجين لتكوين (N_2H_3) مهيمنة نسبياً على تفاعل SN_2 وإضافة OH إلى مركز N لـ N_2H_4 لتكوين ($H_2NOH + NH_2$).

يتفق معامل السرعة المرتبط بالضغط العالي المحسوب لمسار التفاعل الرئيسي.

$$k(298.15) = 7.31 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ مع القيمة } k(298.15) = (6.50 \pm 1.3 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1})$$

- تم إثبات أن العمر الافتراضي للهيدرازين في الغلاف الجوي يتراوح من 32.80 إلى 1161.1 ساعة على ارتفاعات (0-50 Km).

وأخيراً من خلال هذه الدراسة وجدنا انها تقدم مساهمة مهمة في فهم آلية أكسدة الهيدرازين بواسطة الجذور الهيدروكسيلية في ظل ظروف الغلاف الجوي. كما توفر النتائج حسابات دقيقة لمعاملات السرعة لجميع المسارات الممكنة، مما يسمح بفهم أفضل لمصير الهيدرازين في الغلاف الجوي. يمكن استخدام هذه النتائج أيضاً لتطوير نماذج كيميائية أكثر دقة تستوعب تفاعلات الهيدرازين الجوية. [26]

1.1. الكيمياء الحاسوبية وطرائقها: [27]

الكيمياء الحاسوبية هي عبارة عن مجموعة من التقنيات تستخدم للتحقق في المسائل الكيميائية عن طريق استخدام الحاسوب والاعتماد على عدة برامج مثل (Gaussian و Avogadro...) و تكون هذه الأخيرة مصممة وفق نظريات و قوانين فيزيائية اهمها معادلة شرودنجر.

يمكن من خلال الكيمياء الحاسوبية ايجاد أو توقع الطاقة الجزيئية و البنية الفراغية، الطاقة و البنية الفراغية للحالات الانتقالية، طاقة الرابطة و طاقة التفاعل، المدارات الجزيئية، عزوم ثنائية القطب (متعددة الاقطاب)، الشحنات الذرية، ترددات الاهتزازات، مطيافية IR, RAMAN و خصائص الـ NMR و الاستقطاب، و أيضاً خصائص الكيمياء الحرارية و طريقة التفاعل (آلية التفاعل) بالنسبة للمركبات الجديدة و المجهولة.

▪ البنية الجزيئية:

يمكن ايجاد البنية الجزيئية الفراغية عند نقاط الاتزان، ومن خلال معرفة الحالة الانتقالية وطاقة المواد المتفاعلة والناجمة، يمكن توقع سرعة تفاعل ما.

■ الفعالية الكيميائية:

من خلال معرفة أماكن تموضع الإلكترونات في الجزيء يمكن إيجاد المواقع المحبة للنوى والمواقع المحبة للإلكترونات، كما يمكن حساب شحنات الذرات منفردة العزم ثنائي القطب (أو العزم متعدد الأقطاب)، بالإضافة إلى الخصائص الحرارية مثل طاقة جيبس و الانتالبية.

■ المطيافية:

يمكن توقع وحساب مطيافيات مختلفة مثل IR، NMR، UV، RAMAN ، وخاصة للمركبات المجهولة والجديدة.

2.1. طرائق الكيمياء الحاسوبية:

هناك العديد من الطرائق المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية بعض هذه الطرائق يعتمد على حل النظريات والمعادلات بشكل تام والبعض الآخر يعتمد على الدمج بين الحسابات النظرية والقيم العملية، كما يعتمد البعض منها على نظريات ميكانيكا الكم بينما يعتمد الآخر على الميكانيكا الكلاسيكية.

وفيما يلي الأقسام أو الطرائق الأساسية المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية:

■ طرائق الميكانيكا الجزيئية:

تعتبر هذه الطرائق من أبسط الطرائق المستخدمة و أسرعها و لكنها في المقابل تعطي نتائج أقل دقة مقارنة مع طرائق ميكانيكا الكم، تكمن أهميتها في سرعتها و يتم استخدامها للمركبات ذات البنية الكبيرة نسبيا مثل البروتينات والستيريويديات وغيرها، في هذه الطرائق يتم النظر إلى الجزيئات على أنها مجموعة من الكرات المتصلة مع بعضها البعض بواسطة النوابض، و بالتالي عند معرفة الطول الطبيعي (المستقر) بين ذرتين و قيمة الزاوية و الطاقة اللازمة للشد أو الحني لهذه الرابطة (النابض) عندها يمكن حساب طاقة هذه المجموعة من النوابض و الكرات، أي بمعنى آخر، يتم تغيير البنية الفراغية للجزيء حتى الحصول على أقل طاقة ممكنة أي تهيئة البنية الفراغية و تحسينها.

سلبيات هذه الطريقة أنها لا تسلط الضوء أبدا على الإلكترونات (الجزيء عبارة عن كرات متصلة بالنوابض ولا وجود للإلكترونات) لذا لا يمكن من خلالها معرفة الخصائص الكيميائية المتعلقة بالإلكترونات مثل شحنة الذرات والعزم ثنائي القطب والأماكن الفعالة (المحبة والكارهة للإلكترونات).

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

طاقة الجزيء (في هذه الطرائق) عبارة عن مجموع طاقات الترابط واللاترابط، فطاقة الترابط هي الطاقة الناتجة عن التأثير المباشر عن طريق الترابط مثل طاقة الرابطة (طاقة الشد) وطاقة الزاوية (طاقة الحني) وطاقة الالتواء ناتجة عن دوران الذرات حول أحد الروابط، أما بالنسبة لطاقة اللاترابط فهي الطاقة الناتجة من التأثير عن طريق التجاور مثل الكهرباء الساكنة وقوى فاندر فالس، ويمكن التعبير عن طاقة الجزيء رياضياً:

$$E = E_{\text{Bond}} + E_{\text{NonBond}}$$
$$E = \sum_{\text{Bond}} E_{\text{Stretch}} + \sum_{\text{Angles}} E_{\text{Bend}} + \sum_{\text{Dihedrals}} E_{\text{Torsion}} + \sum_{\text{Pairs}} E_{\text{Nonbond}}$$

تختلف طرائق الميكانيكا الجزيئية باختلاف حقول القوة، فحقل القوة هو عبارة عن مجموعة من المعاملات والمعادلات التي تصف الذرات والعلاقة فيما بينها (تصف أنواع التأثير المتبادل بين الذرات)، وبالتالي تم تطوير الكثير من هذه الطرائق ومنها التالي:

- AMBER: Assisted Model Building with Energy Refinement.
- CHARMM: Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics.
- OPLS: optimized potential for liquid simulations.
- MMFF: Merck Molecular Force Field.
- UFF: Universal Force Field.
- Dreiding: The Dreiding force field.

الفرق بينها هو شكل الدالة المحددة للطاقة والمعاملات الأساسية المستخدمة، وتم تهيئة هذه الطرائق بحيث تكون ملائمة للاستخدام في مجموعة من المركبات أكثر من غيرها.

▪ الطرق الألفبائية Ab intio :

كلمة Ab intio هي كلمة لاتينية وتعني (من البداية) وهذا هو أساس هذه المجموعة من الطرائق فهي تعتمد على معادلة شرودينغر أي أنها تعتمد على نظريات ميكانيكا الكم بشكل كامل وحلولها من الصفر، حيث تقوم هذه المعادلة بوصف حركة الإلكترون ضمن الجزيء وعند حلها نحصل على طاقة وعلى دالة موجية، إن الدالة الموجية الناتجة هي عبارة عن معادلة رياضية تعبر عن التوزيع الإلكتروني للإلكترونات في الجزيء (النظام) و من خلال معرفة هذا التوزيع يمكن حساب قطبية المركب (الجزيء) أي معرفة النقاط الغنية بالإلكترونات (المحبة

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

للنوى) و النقاط الفقيرة بالإلكترونات (محببة للإلكترونات)، كما يمكن حساب البنية الفراغية الجزيئية، طاقة الاهتزازات ، طاقة التأين، طاقة الألفة الإلكترونية و العزم ثنائي القطب و غيرها من الخصائص.

تعتبر معادلة شرودينغر نواة أو لبنة البناء الأساسية للفيزياء الكوانتية وبالتالي للكيمياء النظرية والحسابية كتبها العالم أروين شرودينغر عام 1925 و تم نشرها عام 1926، من خلالها كان أول وصف للإلكترون على أنه حالة موجية.

$$H\Psi(r) = E\Psi(r)$$

حيث أن:

- H : المعامل الهاملتوني (The Hamiltonian operator)
- Ψ : الدالة الموجية (The wave function)
- E : الطاقة , قيمة خاصة للمعامل الهاملتوني

يمكن التعبير عن المعامل الهاملتوني على انه مجموع الطاقة الحركية والكامنة للنواة والالكترون كما في المعادلة التالية.

$$\hat{H} = \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{nn}$$

\hat{T}_n : معامل يمثل الطاقة الحركية للنواة

\hat{T}_e : معامل يمثل الطاقة الحركية للإلكترون

\hat{V}_{en} : معامل يمثل التأثير المتبادل بين الإلكترون والنواة.

\hat{V}_{ee} : معامل يمثل التأثير المتبادل بين الإلكترون والإلكترون.

\hat{V}_{nn} : معامل يمثل التأثير المتبادل بين النواة والنواة .

ويمكن التعبير عنه رياضيا على الشكل التالي:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} + \sum_i^{\text{electrons}} \nabla_i^2 - \frac{1}{2} \sum_A^{\text{nuclie}} \frac{1}{M_A} \nabla_A^2 - \sum_i^{\text{electrons}} \sum_A^{\text{nuclie}} \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i < j}^{\text{electrons}} \sum_j \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A < B}^{\text{nuclie}} \sum_B \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}}$$

Z : الشحنة.

M_A : نسبة كتلة النواة A و النواة B

R_{AB} : البعد بين النواة A و النواة B

R_{ij} : البعد بين الالكترون أو الالكترون j.

r_{iA} : البعد بين الالكترون أو النواة A.

من المعروف أن معادلة شرودينغر معادلة غير قابلة للحل إلا للأنظمة وحيدة الالكترون مثل الهيدروجين أو الشوارد الشبيهة به، لذا لا بد من تقديم بعض التقريبات الرياضية لحل هذه المعادلة ومن أبسط هذه التقريبات تقريب هارترتي وفوك Hartree-Fock حيث يعتمد هذا التقريب على مبدأ الحقل المركزي وذلك يعني أن كمون التناثر الالكتروني الالكتروني يتم حسابه على أساس تكامل جميع الالكترونات وبالتالي يتم الحصول على محصلة التناثر الالكتروني ولا يتم الأخذ بعين الاعتبار تأثير الالكترونات فيما بينها

أهم ميزات هذه الطريقة (النظرية) أنها تقوم بتقسيم معادلة شرودينغر متعددة الالكترونات إلى عدة معادلات بسيطة وحيدة الالكترون، وبالتالي عند حل المعادلة أحادية الالكترون ينتج دالة موجية تسمى مدارا وطاقة تسمى طاقة المدار

أهم سلبيات هذه الطريقة هو إهمال التأثير الالكتروني الالكتروني لذا تم تطوير عدد من النظريات والطرق التي تنطلق من طريقة هارترتي و فوك و من ثم تقوم بإضافة الترابط الالكتروني و من هذه الطرائق:

- CC: Coupled Cluster Theory.
- GVB: The Generalized Valence Bond method.
- CI: Configuration Interaction.
- MCSCF: Multi-Configurational Self-Consistent Field.
- MPn: Müller-Plesset Perturbation Theory (MPn, n is the order of correction)

عند إضافة الترابط الالكتروني (أي تأثير الالكترونات فيما بينها) فإن ذلك يزيد من دقة الحسابات إن كان ذلك في حساب الطاقة أو حساب الشكل الفراغي، بالإضافة إلى ذلك يعتبر هذا النوع من الطرق أبطأ من طرائق الميكانيكا الجزيئية بشكل كبير جدا ولكنها نسبيا تعتبر أدق.

▪ طرائق الشبه عملية (Semi-Empirical Methods):

يشبه هذا النوع من الحسابات المستخدمة في الكيمياء الحسابية إلى حد ما طرائق الالفبائية حيث يعتمد على معادلة شرودنغر، و لكن الفرق أن هذا النوع من الحسابات يقوم باستبدال تكاملات تجريبية المستخدمة في طرائق Ab Initio بمعاملات و تكاملات تجريبية حيث يتم سحب هذه التكاملات من مكتبة (قاعدة بيانات) من التكاملات ذات النتائج الجيدة و الدقة العالية و غالبا تؤخذ من حسابات نظريات عالية المستوى مثل (DFT) أي يتم حل معادلة شرود ينغر باستخدام معاملات تجريبية، و هذا هو الاختلاف بين أنواع هذه المجموعة من الحسابات حيث تختلف بقاعدة البيانات المستخدمة أي المعاملات و التكاملات التجريبية.

نسبيا هذا الطرائق أسرع من طرائق Ab Initio ولكنها أبطأ من طرائق الميكانيكا الجزيئية.

وفيما يلي عدد من هذه الطرائق:

- CNDO: Complete Neglect of Differential Overlap.
- INDO: Intermediate Neglect of Differential Overlap.
- MNDO: Modified Neglect of Differential Overlap.
- AM1: Austin Model 1.
- PM3: Parametric Model number 3

▪ نظرية دالية الكثافة (Density functional theory) DFT :

أيضا هذه الطريقة تشبه طرائق Ab Initio والطرائق الشبه تجريبية من حيث اعتمادها على معادلة شرودينغر ولكن الاختلاف يكمن في الدالة الموجية، أي بدلا من استخدام الدالة الموجية يتم الاستعاضة عنها بالتوزيع الإلكتروني مباشرة (أي دالة الكثافة الإلكترونية) و دالية الكثافة هي عبارة عن دالة ينتج عن حلها دالة أخرى أي دالة الدالة.

وبالتالي يتم اعتبار الطاقة تابع لدالة الكثافة. يمكن التعبير عن الطاقة الأرضية لنظام ما خلال المعادلة

التالية:

$$E[\rho(\vec{r})] = T[\rho(\vec{r})] + J[\rho(\vec{r})] + E_{XC}[\rho(\vec{r})] + E_{Ne}[\rho(\vec{r})]$$

- $T[\rho(\vec{r})]$: kinetic energy og non_interacting

- $J[\rho(\vec{r})]$: Electron–electron repulsion energy.
- $E_{XC}[\rho(\vec{r})]$: External potential.
- $E_{Ne}[\rho(\vec{r})]$: Exchange–Correlation energy functional.

دالية الكثافة لطاقة الترابط والتبادل $E_{XC}[\rho(\vec{r})]$ تتضمن جميع المعلومات والتي لا يمكن الحصول عليها وعادة يتم حسابها على اعتبار مجموع لتابعية الكثافة للتبادل $E_X[\rho(\vec{r})]$ ودالية الكثافة للترابط $E_C[\rho(\vec{r})]$.

$$E_{XC}[\rho(\vec{r})] = E_C[\rho(\vec{r})] + E_X[\rho(\vec{r})]$$

الاختلاف بين طرائق تابعة الكثافة هي طريقة اختيار شكل الدالة لحساب طاقة الترابط و التبادل و على اعتبار دالية الكثافة $E_{XC}[\rho(\vec{r})]$ فريدة فهي تناسب جميع الأنظمة و لكن الشكل المثالي و الصريح لهذه الدالية غير معروف، و فيما يلي عدد من التقريبات:

- LDA: Local Density Approximation.
- GGA: Gradient Corrected Approximation

■ دالية الكثافة الهجينة:

في هذه الطريقة يتم دمج نظرية دالية الكثافة DFT مع نظرية هارترتي فوك HF لوصف الدالة تابعة الكثافة لطاقة التبادل ومنها:

- B3LYP: (Becke's 3 parameter exchange correlation function which uses 3 parameters) and LYP (The Lee, Yang and Parr correlation functional).

بالإضافة إلى ذلك يوجد العشرات من هذه الدالية الكثافة الهجينة والغير الهجينة وكل واحدة منها لها حسنها وسيئاتها.

2.1. المجموعات الأساسية:

يتم تقريب الدالة الموجية الجزيئية على أنها تركيب خطي للمدارات الذرية LCAO يمكن اصطناع مدارات جزيئية عن طريق دمج دوال أبسط. هذه المجموعة من الدوال تسمى المجموعات الأساسية Basis Sets.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

نستطيع ايجاد التوزيع الإلكتروني حول النواة باستخدام عدة طرق كاستخدام دوال أشباه الهيدروجين والتي تعتمد على حلول معادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين، أو اضافة إلى ذلك لدينا أيضا دوال سلاتر ودوال غاوس (أو دوال غاوسيان).

• المدارات من نوع سلاتر.

• المدارات من نوع غاوسيان.

تعتبر كل من دوال غاوسن ودوال سلاتر من الدوال البسيطة رياضيا ويمكن القول أن المدارات من نوع سلاتر ذات نتائج جيدة مقارنة مع المدارات من نوع غاوس و لكن في المقابل المدارات من نوع غاوس تعتبر ذات حل أبسط و أسرع مقارنة مع مدارات من نوع سلاتر. وكحل لهذه المشكلة يمكن التعبير عن المدارات من نوع سلاتر ذات النتائج الجيدة من خلال تقريبها باستخدام مدارات من نوع غاوس ذات الحل الأسهل والأسرع فعلى سبيل المثال المجموعة الأساسية STO-3G فهي عبارة عن دالة من نوع سلاتر يتم تقريبها باستخدام ثلاثة مدارات من نوع غاوس.

وفي مايلي بعض التصنيفات لهذه المجموعات:

■ مجموعات أساس الحد الأدنى Minimal Basis Sets :

يتم استخدامها لأخذ نظرة أولية على خاصية أو عدة خاصيات للجزيء. الشكل العام لها هو STO-nG .
STO-3G هو مثال على هذه المجموعة و فيه يتم حل مدار من نوع سلاتر من خلال تقريبه بثلاث مدارات من نوع غاوسيان كما تم ذكره سابقا.

■ مجموعات أساس التكافؤ المقسم Split-Valence Basis Sets :

إحدى مشكلات مجموعات الحد الأدنى أنها تعتبر جميع الإلكترونات متساوية ولكن في الحقيقة إلكترونات الغلاف الداخلي وإلكترونات الغلاف الخارجي غير متساوية لذا نحن بحاجة إلى طريقة للتمييز بين إلكترونات المدارات الذرية. و حل هذه المشكلة يكمن من خلال إجراء حسابات سريعة و بسيطة على إلكترونات الغلاف الداخلي و بالمقابل إجراء حسابات دقيقة على إلكترونات الغلاف الخارجي و يتم ذلك من خلال مضاعفة عدد المدارات من نوع سلاتر STOs و تدعى DZ Double Zeta.

مثال :

3-21G هي عبارة عن مجموعة أساس ذات تكافؤ منقسم. هنا يتم استخدام مدارات من نوع غاوسيان لتقريب مدارات من نوع سلاتر ونجد فيها قسمين من الأرقام "FirstNumberG "SecondNumberG. القسم الأول فيه رقم 3 ويعني أن المدارات من نوع سلاتر سوف تستخدم عن طريق تقريب ثلاثة مدارات من نوع غاوسيان.

القسم الثاني 21 بالطبع هي لا تعني 21مرة. ولكن تعني Double Zeta أس ثنائي أي سيتم الحساب على مرحلتين. المرة الأولى سيتم التقريب فيها باستخدام مدارين من نوع غاوسيان وفي المرة الثانية سيتم الحل فيها عن طريق التقريب باستخدام مدار من نوع غاوسيان. أي كل إلكترون في الطبقة الخارجية يتم حسابه مرتين المرة الأولى باستخدام STO-2G وفي المرة الثانية يتم استخدام STO-1G لنفس الإلكترون.

➤ **أحد الأمثلة المهمة على مجموعات الأساس ذات الأس الثلاثي triple zeta**

6-311G Basis set

6-311G++ Basis set

• **مجموعات أساس دالة الانتشار: Diffuse Functions Basis Sets**

بشكل عام احتمالية وجود الإلكترون بالقرب من النواة تكون عالية جدا وتتناقص هذه الاحتمالية عند الابتعاد عن النواة وعند المسافات البعيدة قد لا نجد الإلكترونات فيها، ولكن في بعض الأنظمة وخاصة الشوارد والذرات في الحالة المثارة يجب استخدام دالة الانتشار لضمان زيادة المسافة التي نحسب فيها وجود الإلكترون.

يرمز عادة عند اضافة دالة الانتشار بالرموز التالية:

+ للذرات الثقيلة عدا الهيدروجين.

++ للذرات الثقيلة والهيدروجين.

مثال:

$6-31G+$ دالة ذات تكافؤ منقسم للذرات الثقيلة $6-31G++$ دالة ذات تكافؤ منقسم للذرات الثقيلة و الهيدروجين.

• **مجموعات أساس دالة الاستقطاب: Polarization Functions Basis Sets**

في بعض الحالات قد يستقطب الإلكترون من مداره إلى مدار آخر فدالة الاستقطاب تعطي تفسيراً أدق على مكان وجود الإلكترون، يتم إضافة الرموز التالية للتعريف على الاستقطاب:
لجميع الذرات عدا الهيدروجين.

لجميع الذرات إضافة إلى ذرة الهيدروجين.

أو يمكن بكل بساطة إضافة اسم المدار d أو d,p .

مثال:

$6-31G$ أو $Gd\ 31-6$ هي عبارة عن مجموعة أساس ذات تكافؤ منقسم و استقطاب لجميع الذرات عدا ذرة الهيدروجين.

$6-31G$ أو $G(d,p31-6)$ هي عبارة عن مجموعة أساس ذات تكافؤ منقسم استقطاب لجميع الذرات مع ذرة الهيدروجين.

$6-311G++(d,p)$ Basis set

• **إمكانية كمنون أو جهد الأساس الفعال Effective Core Potentials:**

في الذرات الكبيرة لا يمكن استخدام مجموعات الأساس العادية لذا تم تطوير هذا الطريقة حيث تقوم باستبدال الإلكترونات في الطبقات الداخلية بتقريبات شبه مهمة. وبالمقابل الاهتمام بالإلكترونات الطبقات الخارجية حيث أنها تعبر عن جميع الخصائص الكيميائية مثل قوة الرابطة وطاقة التأين وما إلى ذلك.

• **دمج مجموعات الأساس:**

عند القيام بعملية حسابية ما. تستطيع أن تستخدم أكثر من مجموعة أساسية. شرط أن تقوم بتحديد المجموعة المستخدمة لكل نوع من الذرات ضمن البرنامج الذي تستخدمه.

• مفهوم سطح الطاقة الكامنة:

يُعتبر سطح الطاقة الكامنة (المخطط السطحي للطاقة الكامنة) **POTENTIAL ENERGY SURFACE** اختصاراً **PES** المفهوم الأساسي في الكيمياء الحسابية وهو عبارة عن العلاقة بين طاقة الجزيء (النظام) و البنية الفراغية لهذا الجزيء.

• النقاط الحدية:

النقاط الحدية على سطح الطاقة الكامنة هي عبارة عن نقاط يكون فيها السطح مستويا أي موازيا للخط الأفقي المسؤول عن البنية الفراغية، رياضياً عند هذه النقاط يكون الاشتقاق الأول للطاقة بالنسبة لكل معاملات البنية الفراغية مساوياً للصفر.

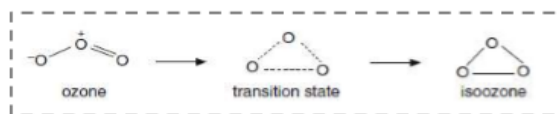
توجد ثلاث أنواع للنقاط الحدية المهمة والمميزة على سطح الطاقة الكامنة:

• الحد الأدنى:

هي عبارة عن النقاط الصغرى على سطح الطاقة الكامنة وتعتبر هذه النقاط عن الاستقرار أي تحدد الطاقة الدنيا للمركبات المتفاعلة والناجمة من التفاعل بالإضافة إلى المركبات الوسيطة.

• الحالة الإنتقالية:

هي عبارة عن نقطة حدية أيضاً على سطح الطاقة الكامنة وتكون ذات الحد الأعلى على الخط الواصل بين نقطتين من الحد الأدنى وبالتالي تكون على شكل سرج لذا تسمى بنقطة السرج.



صورة توضيحية 42: تماكبات الأوزون.

على سبيل المثال مركب الأوزون و مماكبه (الإيزو أوزون) كلاهما يقع على نقطة حد أدنى و لكن الأكثر استقراراً و هو الأوزون يقع على نقطة حد أدنى تسمى نقطة الحد الأدنى الشاملة بينما الإيزو أوزون يقع على نقطة حد أدنى تسمى نقطة الحد النسبية و الخط أو المسار الواصل بين هاتين النقطتين هو مسار التفاعل و أعلى نقطة على هذا المسار هي نقطة السرج و تعبر عن الحالة الانتقالية.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

ومن هنا يمكن أن نميز بين الحالة الانتقالية والمركب الوسيط بأن الحالة الانتقالية هي حالة أنية (مركب أني) وعندها تكون الطاقة عن الحد الأعلى وتصل بين نقطتي حد أدنى قد يكون أحدهما أو كلاهما مركبا وسطيا أو قد لا يكون أما المركب الوسيط فتكون الطاقة عند إحدى نقاط الحد الأدنى.

• نقاط سرج متعددة الرتب:

يجب الأخذ بعين الاعتبار أن نقطة السرج ليست نقطة وحيدة فهناك نقاط سرج متعددة الرتب وهي النقاط ذات الحد الأعلى الواصلة بين مسارين يربطان حالات انتقالية.

• تهيئة البنية الفراغية:

كما ذكرنا سابقا أن النقاط الحدية المهمة على سطح الطاقة الكامنة قد تكون الحد الأدنى أو الحالة الانتقالية أو نقطة السرج ذات رتبة عالية، لذا يمكن القول عن عملية البحث عن هذه النقاط بأنها عملية تقليل الطاقة. يمكن القيام بتهيئة البنية الفراغية بتغيير معاملات البنية الفراغية للمدخلة (كلما كانت البنية قريبة كانت النتيجة أسرع) حيث يتم تغيير كل من أطوال الروابط وقيم الزوايا وحساب الطاقة المقابلة لكل مجموعة من المعاملات إلى أن يتم الحصول على إحدى النقاط الأقرب أي الأقل طاقة.

• النقاط الحدية و الاهتزازات :

يمكن التمييز بين النقاط الحدية) حد أدنى، حالة انتقالية، نقاط السرج) من خلال إجراء حساب تردد الاهتزازات، عند إجراء عملية تهيئة للبنية الفراغية يفضل أن يرافقها عملية حساب لترددات الاهتزازات حيث يمكن الاستفادة منها لتحديد نوع النقطة الحدية (إضافة إلى أهمية الاهتزازات للحصول على بعض الخصائص الحرارية) كالتالي:

- ✓ نقاط الحد الأدنى يكون فيها جميع الترددات الاهتزازية ذات قيمة موجبة نقاط الحد الأدنى.
- ✓ عند وجود قيمة سالبة واحدة فقط واحدة للترددات الاهتزازية فهذا يعني أن هذه النقطة هي نقطة الحالة الانتقالية.
- ✓ أما عند وجود أكثر من نقطة سالبة واحدة للترددات الاهتزازية فهذا يعني أن هذه النقطة هي نقطة سرج ذي رتبة عالية.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

عمليا لا يوجد شيء اسمه تردد سالب وبالتالي هذا التردد هو عبارة عن تردد وهمي وذلك لأن عملية حساب الترددات تتضمن إجراء جذر تربيعي لثابت القوة والجذر التربيعي لعدد سالب هو رقم وهمي) لا يوجد جذر تربيعي لعدد سالب (

قيمة سالبة واحدة للترددات الاهتزازية لا تعني بشكل مطلق أن يكون المركب في الحالة الانتقالية، يجب الانتباه جيدا عند البحث عن الحالة الانتقالية إلى عدة نقاط مهمة جدا هي:

- يجب على الحالة الانتقالية أن تكون صحيحة وتكون في نقطة ما بين المواد المتفاعلة والمواد الناتجة من التفاعل.

- يجب أن يكون هناك قيمة سالبة واحدة فقط و فقط واحدة للترددات الاهتزازية.

- دائما ودائما طاقة الحالة الانتقالية أعلى من طاقة المواد المتفاعلة والناتجة.

• طاقة الصفر المطلق:

هي طاقة الجزيء عند درجة الصفر المطلق وذلك على اعتبار أن الذرات تبقى في حالة اهتزاز دائمة حتى عند الوصول إلى درجة الصفر المطلق ويتم إضافة هذه الطاقة إلى الطاقة الكلية لزيادة الدقة.

3.1. الحسابات باستخدام برنامج Gaussian 09W :

برنامج **Gaussian 09W**: أحد البرامج الشهيرة المستخدمة في الكيمياء الحاسوبية يوجد أكثر من خمسين برنامج ومنها:

GAMESS, ORCA, Spartan يمكنه العمل في نظام التشغيل ويندوز و لينوكس.

بالإمكان ادخال التعليمات والأوامر الحاسوبية يدويا أو يمكن الاستعانة ببرامج أخرى مخصصة للإدخال وللإخراج منها ChemDraw، Avogadro

ويوجد برنامج GaussView التابع لبرنامج غاوسيان من خلال هذه البرنامج نستطيع ادخال بيانات الحسابات من معلومات عن الشكل الفراغي والشحنة وطريقة العمل المتبعة ونوع العمل المراد تنفيذه، بالإضافة إلى ذلك مهمة هذه البرامج إظهار النتائج والرسوم البيانية والفراغية وحتى الحركية في حالة الاهتزازات وآليات التفاعلات.

يستطيع برنامج **Gaussian 09W** التعرف على ملفات الإدخال ذات اللواحق التالية:

.Gaussian Input File: **.gjf**

.Batch Control File: **.bcf**

Avogadro Input File: **.com**

.Text File: **.txt**

الإدخالات يمكن أن تتم يدويا أو عن طريق برنامج محدد.

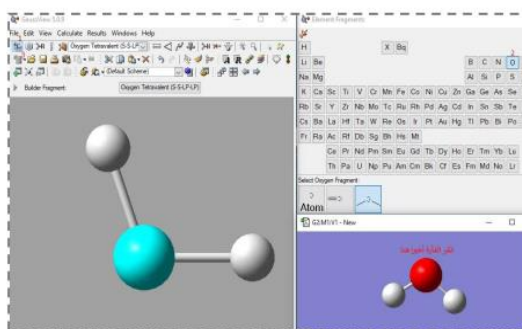
• حساب طاقة النقطة المفردة Single Point Energy Calculation :

المعلومات التي نحصل عليها من خلال إجراء هذه الحسابات ما يلي: طاقة النقطة صفر، شحنة الذرات، المدارات الجزيئية وطاقتها بالإضافة إلى العزم ثنائي القطب.

• إعداد حسابات الطاقة:

مثال: سنقوم بحساب الطاقة لجزيئة الماء.

نبدأ برسم جزيئة الماء عن طريق برنامج GaussView بفتح الجدول الدوري الرقم واحد ونختار ذرة الأوكسجين الرقم اثنين، ثم فتح نافذة عمل جديدة الرقم ثلاثة، ومن ثم النقر داخل النافذة الجديدة ليظهر جزيء الماء.



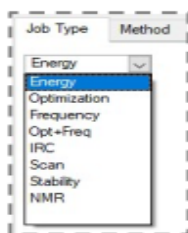
صورة توضيحية 43: رسم جزيئات الماء ببرنامج Gaussian

ولإدخال طريقة الحساب ونوعها نتبع الآتي: من خلال برنامج GaussView نضغط على

Calculation >>> Gaussian Calculation Setup ...

نحدد نوع العمل المراد (طاقة، بنية فراغية، اهتزازات وغيرها...)

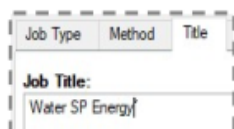
الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل



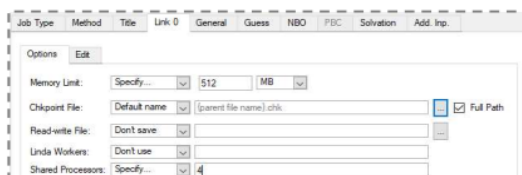
نقوم باختيار الطريقة المتبعة ومجموعة الأساس المستخدمة، اللف، الشحنة وغيرها هنا.



اسم العمل نكتبه في هذا القسم:



في هذا القسم يتم اختيار حجم الذاكرة العشوائية المستخدمة واختيار حفظ ملف CheckPoint من عدم حفظه واختيار مكان الحفظ، كما يمكن تحديد عدد المعالجات المستخدمة في الحسابات للمعالجات متعددة النوى.



عند الانتهاء نضغط على زر Submit عندها يطلب اختيار حفظ ملف الإدخال، بعد الحفظ يسألك إن كنت تريد بدأ برنامج غاوسيان بالعمل، عند الضغط على زر موافق يبدأ غاوسيان بالحسابات.



ملف الإدخال .gjf . Gaussian Input File:

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

بعد الانتهاء من رسم المركب وتحضير الإعدادات الحسابية والحفظ بالإمكان فتح ملف الإدخال عن طريق فتحه ببرنامج نصوص مثل Notepad أو Word.

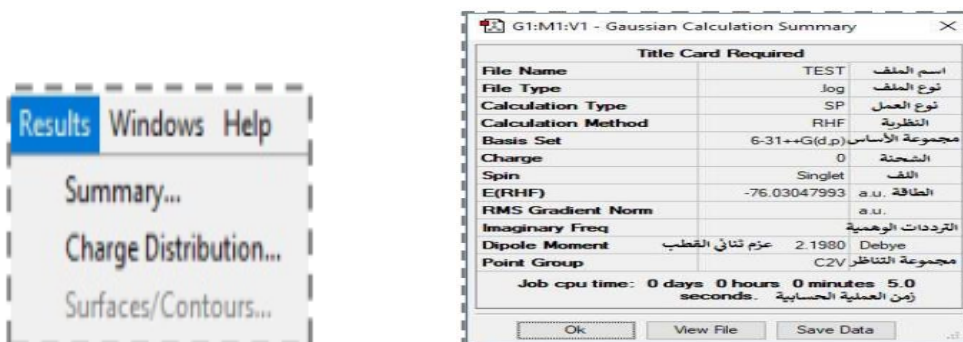
• إظهار نتائج الحسابات:

بالإمكان إظهار نتائج الحسابات إما عن طريق فتح ملف Log باستخدام محرر النصوص Notepad أو باستخدام برنامج Gaussveiw أو برنامج آخر، و بالنسبة لملف Checkpoint يمكن فتحه باستخدام برنامج (Gaussveiw للحصول على المدارات الجزيئية).

• نتائج الحسابات باستخدام برنامج Gaussveiw:

نفتح ملف LOG. باستخدام برنامج، Gaussveiw ثم نتبع التالي لإظهار النتائج

Results >>> Summary...



إن أردت الاطلاع على شحنات الذرات وكمياتها اتبع التالي

Results >>> Charge Distribution...

• نتائج الحسابات باستخدام محرر النصوص Notepad:

بعد فتح ملف LOG. باستخدام محرر النصوص Notepad نبحث عن SCF Done عندها نجد الطاقة المحسوبة واحدة الطاقة هي وحدة ذرية أو هارثري كما يبين لنا هذا السطر عدد الدورات المستخدمة.

SCF Done: E(RHF) = -76.0304799262 A.U. after 10 cycles

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

للحصول على التوزيع الإلكتروني والمدارات الجزيئية نبحث عن Population analysis هنا نستطيع

الحصول على طاقة المدارات الجزيئية وأهم هذه المدارات مداري HOMO ، LUMO

```
*****
Population analysis using the SCF density.
*****
Orbital symmetries:
Occupied (A1) (A1) (B2) (A1) (B1)
Virtual (A1) (B2) (A1) (B1) (A1) (B2) (B2) (A1) (B2) (A1)
(A1) (B1) (B2) (A1) (A2) (A1) (B1) (B2) (A1) (B2)
(B1) (A2) (A1) (A1) (B2) (A1)
The electronic state is 1-A1.
Alpha occ. eigenvalues -- -20.58074 -1.35158 -0.72788 -0.57338 HOMO -0.50759
Alpha virt. eigenvalues -- LUMO 0.04245 0.07149 0.24106 0.25256 0.28157
Alpha virt. eigenvalues -- 0.31364 0.36213 0.39613 1.18996 1.25899
Alpha virt. eigenvalues -- 1.39249 1.40562 1.42833 1.59637 1.77833
Alpha virt. eigenvalues -- 1.85201 1.93018 2.53279 2.57663 2.87711
Alpha virt. eigenvalues -- 2.94944 2.99462 3.37490 3.74999 3.93997
Alpha virt. eigenvalues -- 4.44517
```

HOMO : Highest Occupied Molecular Orbital أعلى مدار جزيئي مشغول

LUMO : Lowest Unoccupied Molecular Orbital أدنى مدار جزيئي شاغر

ملاحظة:

لايجاد الشحنة نبحث عن Mulliken atomic charges.

```
Mulliken atomic charges:
1
1 O -0.725840
2 H 0.362920
3 H 0.362920
Sum of Mulliken atomic charges = 0.00000
```

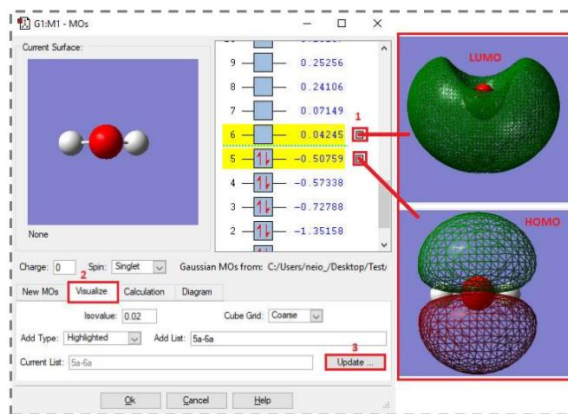
لايجاد عزم ثنائي القطب نبحث عن Dip.

```
Dipole moment (field-independent basis, Debye):
X= 0.0000 Y= 0.0000 Z= -2.1980 Tot= 2.1980
```

• نتائج الحسابات عند فتح ملف Checkpoint :

يتم الحصول على نفس المعلومات كالتالي نحصل عليها من فتح ملف Log. باستخدام برنامج Gaussview ولكن الشيء الإضافي هنا هو إمكانية إظهار شكل المدارات الجزيئية كلها (بما فيها مداري HOMO, LUMO).

نستطيع الدخول إلى نافذة المدارات الجزيئية بالضغط على أيقونة أو باتباع التالي... MOs >>> Edit :



عند فتح النافذة نحدد المدارات المطلوب إظهارها ثم نختار Visualize ونضغط على Update عندها يقوم البرنامج باستدعاء المدارات المطلوبة من ملف، Checkpoint بالإمكان إظهار أي مدار ولكن يجب تحديده قبل النقر على تحديث.

• إجراء تهيئة للبنية الفراغية Optimization Geometry :

في هذا الجزء سوف نقوم بإجراء حسابات لتهيئة البنية الفراغية (البحث عن النقطة الحدية) أو إيجاد الحالة الانتقالية.

وبالتالي نتحصل على مجموعة من المعلومات والمتمثلة في:

- البنية الفراغية المهيئة (المحسنة).
- الحالة الانتقالية.
- إحداثيات الذرات.
- أطوال الروابط وقيم الزوايا.
- طاقة النقطة صفر.
- شحنة الذرات.
- المدارات الجزيئية وطاقتها.
- العزم ثنائي القطب.

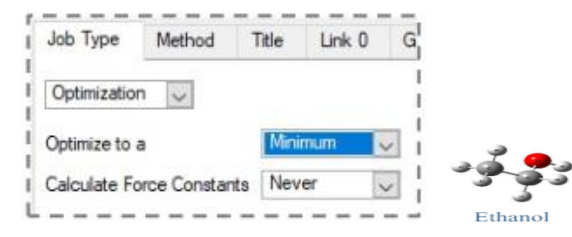
إن إجراء إجراء تهيئة للبنية الفراغية (للحصول نقطة حدية) له نوعان الأول تهيئة للبنية الفراغية من دون حساب الترددات Opt، و الثاني تهيئة للبنية الفراغية مع حساب الترددات Opt+Freq نستخدم الطريقة الثانية

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

للتأكد من النتائج (عدم وجود ترددات سالبة يعني نقطة حدية، وجود قيمة سالبة واحدة فقط تعني حالة انتقالية، وجود أكثر من قيمة سالبة تعني تهئية للبنية الفراغية مع حساب الترددات Opt+Freq).

• حسابات تهئية البنية الفراغية:

تأخذ كمثال إجراء تهئية البنية الفراغية لمركب الإيثانول. الكلمة المفتاحية لحسابات الطاقة هي Opt نبدأ برسم جزيئة الإيثانول عن طريق برنامج GaussView كما في المثال السابق، ولإدخال طريقة الحساب ومجموعة الأساس نتبع نفس الطريقة سابقا ونحدد نوع العمل المراد باختبار Optimization وعندما نختار minimum to optimize فإن ذلك يعني البحث عن نقطة حدية local minimum .



الآن سوف نقوم باستخدام نظرية دالية الكثافة (نظرية تابعة دالة الكثافة) دالية الكثافة الهجينة B3LYP

و مجموعة الأساس المستخدمة هي G++(d,p)-311-6.

الشكل التالي يوضح الإدخالات المستخدمة:

```
%chk=C:\Users\.....\Test\Test 2.chk
# pt b3lyp/6-31++g(d,p)

Ethanol

1 0
C -2.58225757 0.15108914 1.16680246
H -2.29656038 -0.87920913 1.12481936
H -3.06111950 0.42605958 0.25029686
H -3.25928538 0.30055360 1.98178327
C -1.32983093 1.02307943 1.37334650
H -0.65280313 0.87361497 0.55836569
H -0.85096900 0.74810899 2.28985210
O -1.71165055 2.40002011 1.42945475
H -0.93091706 2.94359847 1.55820948
```

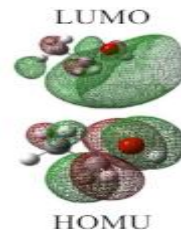
نتائج حسابات تهئية البنية الفراغية:

أثناء العملية الحسابية وبعد نهاية كل دورة تظهر العبارات التالية والتي تعني أن البنية النصوص الفراغية

لم تصل إلى نقطة حدية بعد هذه النتائج من ملف Log. بعد فتحه باستخدام محرر Notepad

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.020122	0.000450	NO
RMS Force	0.007536	0.000300	NO
Maximum Displacement	0.053592	0.001800	NO
RMS Displacement	0.025898	0.001200	NO



وعند ظهور العبارات التالية ذلك يعني أن البنية الفراغية وصلت إلى نقطة حدية (أي تم إيجاد نقطة حدية) لا يشترط أن تكون هذه النقطة هي أدنى نقطة حدية على سطح الطاقة الكامنة.

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000140	0.000450	YES
RMS Force	0.000054	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000901	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000321	0.001200	YES

Predicted change in Energy--1.658896D-07

Optimization completed.
-- Stationary point found.

بعد إيجاد النقطة الحدية يتم إظهار قيم الروابط والزوايا كما يلي:

Name	Definition	Value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.0955	-DE/DX = -0.0001
R2	R(1,3)	1.0946	-DE/DX = -0.0001
R3	R(1,4)	1.0946	-DE/DX = -0.0001
R4	R(1,5)	1.5187	-DE/DX = 0.0001
R5	R(5,6)	1.1006	-DE/DX = -0.0001
R6	R(5,7)	1.1006	-DE/DX = -0.0001
R7	R(5,8)	1.4318	-DE/DX = 0.0
R8	R(8,9)	0.9654	-DE/DX = 0.0
A1	A(2,1,3)	108.5275	-DE/DX = 0.0
A2	A(2,1,4)	108.5275	-DE/DX = 0.0
A3	A(2,1,5)	110.3949	-DE/DX = 0.0
A4	A(3,1,4)	108.2573	-DE/DX = 0.0
A5	A(3,1,5)	110.5271	-DE/DX = 0.0
A6	A(4,1,5)	110.5271	-DE/DX = 0.0
A7	A(1,5,6)	110.1767	-DE/DX = 0.0
A8	A(1,5,7)	110.1767	-DE/DX = 0.0
A9	A(1,5,8)	107.912	-DE/DX = 0.0001
A10	A(6,5,7)	107.8268	-DE/DX = 0.0
A11	A(6,5,8)	110.3781	-DE/DX = 0.0
A12	A(7,5,8)	110.3781	-DE/DX = 0.0
A13	A(5,8,9)	109.1773	-DE/DX = 0.0001
D1	D(2,1,5,6)	59.426	-DE/DX = 0.0
D2	D(2,1,5,7)	-59.426	-DE/DX = 0.0
D3	D(2,1,5,8)	100.0	-DE/DX = 0.0
D4	D(3,1,5,6)	-60.6537	-DE/DX = 0.0
D5	D(3,1,5,7)	-179.5957	-DE/DX = 0.0
D6	D(3,1,5,8)	59.9263	-DE/DX = 0.0
D7	D(4,1,5,6)	179.5957	-DE/DX = 0.0
D8	D(4,1,5,7)	60.6537	-DE/DX = 0.0
D9	D(4,1,5,8)	-59.9263	-DE/DX = 0.0
D10	D(1,5,8,9)	100.0	-DE/DX = 0.0
D11	D(6,5,8,9)	-59.5523	-DE/DX = 0.0
D12	D(7,5,8,9)	59.5523	-DE/DX = 0.0

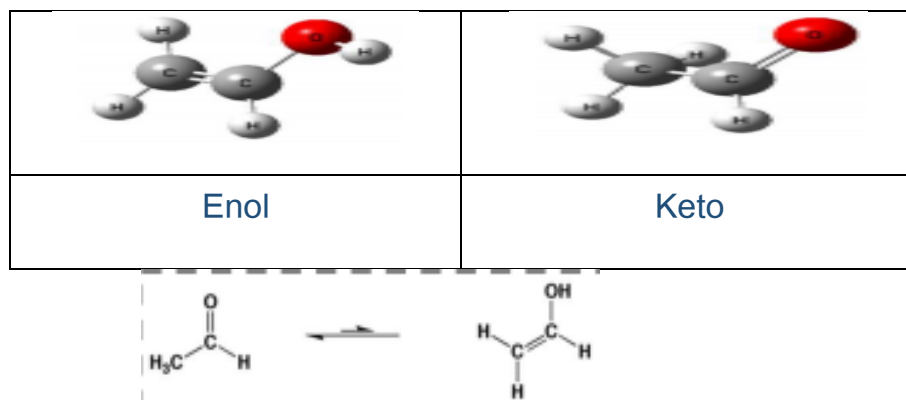
بالإضافة إلى هذه النتائج نحصل على نفس نتائج حسابات الطاقة. من طاقة النقطة صفر، شحنة الذرات، المدارات الجزيئية وطاقتها، بالإضافة إلى العزم ثنائي القطب.

• **إيجاد الحالة الانتقالية:**

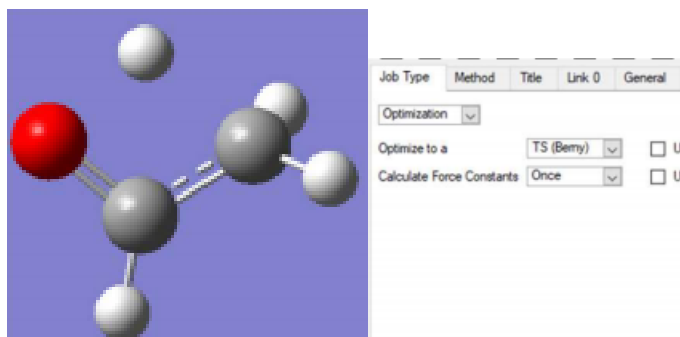
بالإمكان الحصول على الحالة الانتقالية بأكثر من طريقة :

- إن كانت البنية الفراغية للحالة الانتقالية معروفة (بشكل تقريبي) وتريد الحصول على النقطة الحدية لهذه البنية (Saddle Point) نستخدم الكلمة المفتاحية Opt=Ts.
- أما في حال عدم معرفة البنية الفراغية فبرنامج غاوسيان يمكنه توقع الحالة الانتقالية وذلك عن طريق إدخال المركبات الابتدائية والنهائية في نفس الحسابات (يجب أن يكون ترتيب الذرات نفسه كما سنرى) واستخدام الكلمة المفتاحية (Op=QTS2)
- **إيجاد الحالة الانتقالية باستخدام OPT=TS:**

سنقوم بإيجاد الحالة الانتقالية للتماكب الحركي (النزوحى) الكيتو-ينول Tautomerism Keto-Enol حيث يتم فيه هجرة لذرة الهيدروجين من ذرة الأكسجين (ينول) إلى ذرة الكربون المجاورة لذرة الأوكسجين عن طريق الرابطة الثنائية (كيتو).



الشكل الفراغي المتوقع للحالة الانتقالية هو كالتالي:



ذرة الهيدروجين المسؤولة عن التماكب هي في مكان ما بين ذرتي الكربون و الأكسجين، أما بالنسبة لاختيار عملية الحالة الانتقالية فهو عن طريق اختيار Optimize to TS ، واختيار حساب ثوابت القوة لمرة واحد

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

(بالإمكان اختيار ثوابت القوة دائما و لكنها مكلفة للوقت) كما هو واضح من الشكل السابق، الكلمة المفتاحية .Opt=Ts

يمكنك أن تختار النظرية و مجموعة الأساس التي تريد، استخدمنا هذه المرة نظرية HF و مجموعة الأساس المستخدمة هي **3-21G** فيما يلي ملف الإدخال لحسابات الحالة الانتقالية للتماكب الحركي (النزوح) الكيتو-اينول Keto- Enol automerism

```
%chk=C:\Users\.....\Test\Ts.chk
# opt=(calcfc,ts) hf/3-21g

Keto- Enol Tautomerism

0 1
C      -0.72309601  -0.14875683  0.01082558
H      -0.42577126  -0.54277773  0.97744037
H       0.10695286   0.21050654  -0.56864256
C      -1.93386718   0.58936590  0.10567138
O      -2.90520263  -0.19304501  -0.19288712
H      -1.87118225  -1.12418758  -0.25249779
H      -2.11985730   1.61945724   0.33692857
```

نتائج حسابات الحالة الانتقالية باستخدام **:Opt=Ts**

الشكل التالي يوضح أطوال الروابط وقيم الزوايا وقيم Dihedrals بين ذرات المركب المتفاعل وذلك قبل إجراء الحسابات (هذه النتائج من ملف Log بعد فتحه باستخدام محرر النصوص).

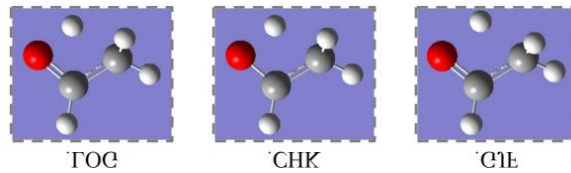
Initial Parameters (Angstroms and Degrees)			
Name	Definition	Value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.0854	calculate D2E/DX2 analytically
R2	R(1,3)	1.0742	calculate D2E/DX2 analytically
R3	R(1,4)	1.4212	calculate D2E/DX2 analytically
R4	R(1,6)	1.5293	calculate D2E/DX2 analytically
R5	R(4,5)	1.2825	calculate D2E/DX2 analytically
R6	R(4,6)	1.7517	calculate D2E/DX2 analytically
R7	R(4,7)	1.072	calculate D2E/DX2 analytically
R8	R(5,6)	1.3928	calculate D2E/DX2 analytically
A1	A(2,1,3)	112.9653	calculate D2E/DX2 analytically
A2	A(2,1,4)	111.2535	calculate D2E/DX2 analytically
A3	A(2,1,6)	97.322	calculate D2E/DX2 analytically
A4	A(3,1,4)	121.3739	calculate D2E/DX2 analytically
A5	A(3,1,6)	134.4697	calculate D2E/DX2 analytically
A6	A(1,4,5)	108.2314	calculate D2E/DX2 analytically
A7	A(1,4,7)	131.3974	calculate D2E/DX2 analytically
A8	A(5,4,7)	120.334	calculate D2E/DX2 analytically
A9	A(6,4,7)	172.0149	calculate D2E/DX2 analytically
A10	A(1,6,5)	97.0976	calculate D2E/DX2 analytically
D1	D(2,1,4,5)	-95.18	calculate D2E/DX2 analytically
D2	D(2,1,4,7)	87.0925	calculate D2E/DX2 analytically
D3	D(3,1,4,5)	128.1416	calculate D2E/DX2 analytically
D4	D(3,1,4,7)	-49.5859	calculate D2E/DX2 analytically
D5	D(2,1,6,5)	113.4847	calculate D2E/DX2 analytically
D6	D(3,1,6,5)	-113.8757	calculate D2E/DX2 analytically
D7	D(5,4,6,1)	175.2881	calculate D2E/DX2 analytically

والشكل التالي يوضح أطوال الروابط وقيم الزوايا وقيم Dihedrals بين ذرات المركب التفاعل بعد انتهاء الحسابات.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

Optimized Parameters (Angstroms and Degrees)			
Name	Definition	Value	Derivative Info.
R1	R(1,2)	1.0853	-DE/DX = 0.0
R2	R(1,3)	1.0742	-DE/DX = 0.0
R3	R(1,4)	1.4213	-DE/DX = 0.0002
R4	R(1,6)	1.5498	-DE/DX = -0.0001
R5	R(4,5)	1.2822	-DE/DX = -0.0001
R6	R(4,6)	1.6667	-DE/DX = -0.0001
R7	R(4,7)	1.072	-DE/DX = 0.0
R8	R(5,6)	1.2731	-DE/DX = 0.0002
A1	A(2,1,3)	112.9799	-DE/DX = 0.0
A2	A(2,1,4)	111.2525	-DE/DX = 0.0
A3	A(2,1,6)	88.7957	-DE/DX = 0.0001
A4	A(3,1,4)	121.3601	-DE/DX = 0.0
A5	A(3,1,6)	146.399	-DE/DX = 0.0
A6	A(1,4,5)	108.2535	-DE/DX = 0.0001
A7	A(1,4,7)	131.3388	-DE/DX = 0.0001
A8	A(5,4,7)	120.3732	-DE/DX = -0.0001
A9	A(6,4,7)	166.9344	-DE/DX = 0.0
A10	A(1,6,5)	101.4472	-DE/DX = 0.0001
D1	D(2,1,4,5)	-72.9534	-DE/DX = 0.0
D2	D(2,1,4,7)	109.2332	-DE/DX = 0.0
D3	D(3,1,4,5)	150.3617	-DE/DX = 0.0
D4	D(3,1,4,7)	-27.4517	-DE/DX = 0.0
D5	D(2,1,6,5)	107.0579	-DE/DX = -0.0001
D6	D(3,1,6,5)	-120.567	-DE/DX = 0.0
D7	D(5,4,6,1)	-171.6484	-DE/DX = 0.0001

أيضا هنا نحصل على نفس نتائج حسابات الطاقة ونتائج حسابات تهيئة البنية الفراغية من طاقة النقطة صفر، شحنة الذرات، المدارات الجزيئية وطاقاتها، بالإضافة إلى العزم ثنائي القطب (بالإضافة إلى أطوال الروابط وقيم الزوايا وقيم Dihedrals).



الأشكال الثلاثة السابقة توضح الفرق بين البنية المتفاعلة والبنية الناتجة.

■ إيجاد الحالة الانتقالية باستخدام Opt=Qst2 :

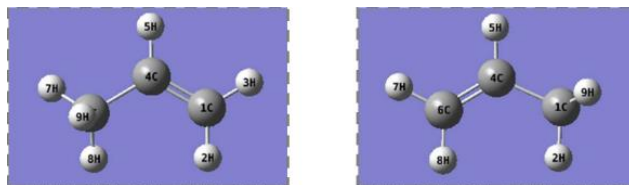
كما قلنا، في حال عدم معرفة البنية الفراغية فبرنامج غاوسيان يمكنه توقع الحالة الانتقالية وذلك عن طريق إدخال المركبات المتفاعلة و الناتجة في نفس الحسابات، و الشيء المهم هو ترتيب الذرات (ضمن برنامج غاوسيان لكل ذرة رقم محدد)، الكلمة المفتاحية Opt=Qst2 .

سنقوم هذ المرة بحساب الحالة الانتقالية لمركب الأليل حيث يتم فيه تبديل للرابطة الثنائية عن طريق هجرة ذرة هيدروجين من الموقع 1 إلى الموقع 3 .



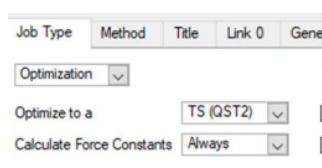
الشكل الفراغي المتوقع للحالة الانتقالية غير معروف (افتراض أنه مجهول)، ولكن مركب الأليل في حالة توازن بين الشكلين التاليين:

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل



كما نلاحظ جميع الذرات ثابتة في كلا الشكلين ما عدا ذرة الهيدروجين رقم 9 المسؤولة عن الهجرة وتبديل الرابطة.

بعد رسم البنية الفراغية (المركبين في نفس الملف) نقوم بإعداد حسابات الحالة الانتقالية باختيار (Qst2)Optimize to TS



استخدمنا هذه المرة أيضا نظرية HF ومجموعة الأساس المستخدمة هي 3-21G وملف الإدخال الناتج (GJF.) سيكون كالتالي.

```
%chk=C:\Users\... \Test\QST2.chk
#opt=(calc,qst2) hf3-21g

Title Card Required

I O
C 0.43243243 0.81081084 0.00000000
H 0.37510226 -0.27095490 -0.00032186
H 0.99323193 1.12483429 -0.87531431
C -0.94469469 1.42912051 -0.00000960
H -0.97112217 2.20404200 0.00003040
C -2.07167767 0.74987727 0.00000281
H -3.02694227 1.23919715 -0.00000887
H -2.08629064 -0.32459359 0.00000985
H 0.99904156 1.12432167 0.87562448

TS QST2

I O
C 0.32916354 0.79535596 -0.27292073
C 0.35070560 -0.26988614 -0.17445651
H 1.23652412 1.33497684 -0.44729414
H -0.84733106 1.46107712 -0.17678102
H -0.86887307 2.52631925 -0.27524491
C -2.15325234 0.68442620 0.07418304
H -2.97121362 1.20713143 -0.37594871
H -2.07512556 -0.329274876 -0.35468210
H -2.32077873 0.59927485 1.12755104
```

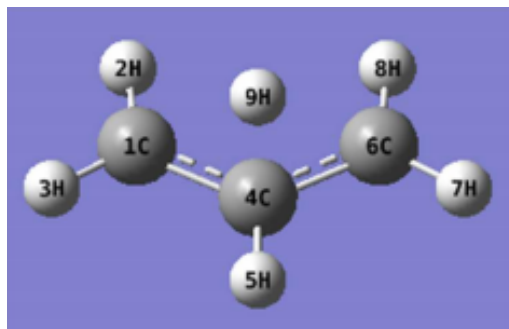
نتائج حسابات الحالة الانتقالية باستخدام Opt=Qst2 :

تنتهي الحسابات عند الوصول إلى النقطة الحدية (Saddle Point) وعند اختيار Optimize to TS (Qst2) يقوم برنامج غاوسيان بحساب الترددات وبما أننا نبحث عن حالة انتقالية فيجب وجود قيمة سالبة واحدة فقط للترددات (تردد وهمي) .

Item	Value	Threshold	Converged?
Maximum Force	0.000043	0.000450	YES
RMS Force	0.000013	0.000300	YES
Maximum Displacement	0.000611	0.001800	YES
RMS Displacement	0.000233	0.001200	YES
Predicted change in Energy=-2.505611D-08			
Optimization completed.			
-- Stationary point found.			

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

الشكل الفراغي للحالة الانتقالية يكون كالبنية التالية :



كما نلاحظ ذرة الهيدروجين رقم تسعة المسؤولة عن تبادل الرابطة الثنائية تقع في المنتصف بين ذرتي الكربون، أيضا هنا نحصل على نفس نتائج حسابات الطاقة و نتائج حسابات تهيئة البنية الفراغية وحسابات الحالة الانتقالية عن طريق اختيار **Optimize to TS** من طاقة النقطة صفر، شحنة الذرات، المدارات الجزيئية وطاقتها، بالإضافة إلى العزم ثنائي القطب (بالإضافة إلى أطوال الروابط و قيم الزوايا وقيم **Dihedrals**) ولكن بالإضافة إلى ذلك نحصل على الترددات كما في الشكل التالي ونلاحظ وجود تردد وهمي واحد فقط.

		1			2			3		
		A			A			A		
Frequencies	--	-2095.3900			430.7123			489.0438		
Red. masses	--	1.1162			2.4620			1.7638		
Frc consts	--	2.8876			0.2691			0.2485		
IR Inten	--	769.5577			56.2343			6.0016		
Atom	AN	X	Y	Z	X	Y	Z	X	Y	Z
1	6	0.00	0.02	0.04	0.11	0.03	0.14	0.10	0.06	-0.05
2	1	0.00	0.00	-0.05	0.25	0.00	-0.34	-0.46	0.11	0.13
3	1	0.01	0.00	0.04	0.02	0.17	0.22	-0.00	0.33	-0.18
4	6	0.08	0.00	0.00	0.00	-0.12	-0.24	0.00	-0.15	0.11
5	1	0.02	0.00	0.00	0.00	-0.11	0.07	0.00	-0.15	-0.08
6	6	0.00	-0.02	-0.04	-0.11	0.03	0.14	-0.10	0.06	-0.05
7	1	0.01	0.00	-0.04	-0.02	0.17	0.22	0.09	0.33	-0.19
8	1	0.00	0.00	0.05	-0.25	0.00	-0.35	-0.46	0.11	0.13
9	1	-0.99	0.00	0.00	0.00	0.52	-0.25	0.00	-0.33	0.12

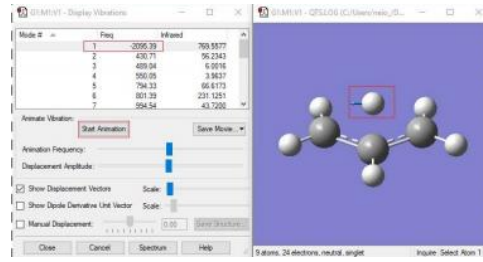
كما نحصل على معلومات عن الكيمياء الحرارية (ابحث عن **Thermochemistry**) منها طاقة نقطة الصفر المطلق.

```
| Zero-point vibrational energy 205176.5 (Joules/Mol)
|                               49.03835 (Kcal/Mol)
```

بالإضافة إلى طاقة جيبس و الانتالبية و غيرها، ويمكن الحصول على حركية الإهتزازات (تتقل ذرة الهيدروجين) وذلك للتأكد من أن الحالة الانتقالية صحيحة، ويكون بفتح النتائج عن طريق برنامج **Gaussveiw** باتباع التالي.

Results >>> Vibrations ... >>> Yes

تظهر مطيافية IR و الترددات.



يمكن مشاهدة الحركة عن طريق الضغط على Start Animation و تبدأ ذرة الهيدروجين بالتأرجح بين ذرتي الكربون.

4.1. تفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي : [26]

يعتبر الهيدرازين مركب كيميائي يحتوي على ثلاث عناصر بنيوية:

- S-CIS(C2h)
- Anti(C2v)
- Gauche(C2)

حيث أن المطابق gauche(C2) للهيدرازين (N_2H_4) هو الأكثر استقرارًا، يليه المطابق المضاد ثم المطابق المقرون.

وفي مجال الصناعة، توجد للهيدرازين ومشتقاته تطبيقات كثيرة مثل:

- بادئات البلمرة.
- معالجة مياه الغلايات وتغذيتها مما يساعد على منع التآكل وتكوين القشور في الغلايات.
- يستخدم كذلك الهيدرازين لصناعة أنواع مختلفة من الاصباغ.
- يمكن استخدام الهيدرازين ومشتقاته كمثبطات لتآكل الفولاذ عند ملامسته للماء الساخن.
- يستخدم الهيدرازين في إنتاج مجموعة متنوعة من المركبات العضوية.

وبرغم من ان هذه المادة مهمة جدا في مجال الصناعة وتعتبر كاشف قوي متعدد الاستخدامات، إلا أنه مثل أي مادة أخرى لها إيجابيات وسلبيات، وتكمن خطورته في أنه مادة مسببة للسرطان ذات خطورة عالية، فقد صنفت الوكالة الدولية لأبحاث السرطان (IARC) الهيدرازين على أنه مادة مسرطنة، مما يعني أنه مادة مسرطنة للحيوانات ولا توجد بيانات كافية أو معدومة حول قدرته على الإصابة بالسرطان لدى الإنسان.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

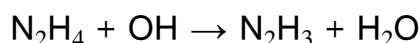
في الهياكل غير المتناظرة من مشتقات الهيدرازين مكونة من هيدرازين وميثيل هيدرازين ومركبات ثنائي ميثيل هيدرازين، تكون عبارة عن وقود عالية الطاقة له تطبيقات خاصة مثل وقود الصواريخ والوقود مركبات فضائية، كل هذه المواد تتصف بخاصية السمية. في بعض الأوقات يتم دمج وقود الهيدرازين مع المؤكسدات لتحقيق الأداء العالي، من أهم المؤكسدات الأكثر شيوعاً هي رابع أكسيد النيتروجين أو الدينيتروجين التيرتوكسيد (NTO) وحامض النتريك الدخان الأحمر المثبط (IRFNA).

ونظراً لأن تحلل (NTO) وحامض النتريك (IRFNA) يمكن أن ينتج جذور الهيدروكسيل وثنائي أكسيد النيتروجين، فإن تفاعلات الهيدرازين مع هذين النوعين مهمة في تصميم الصواريخ.

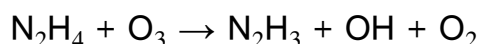
وللعلم لتفاعلات الأكسدة في هيدرازين بعض المزايا، وأهم ميزة في هذا المجال هي تطوير الوقود الدفعي الزائد عن الحد (GHP). وفي الغلاف الجوي، من المحتمل أن يكون التحلل الكامل لهيدرازين مع الأنواع المتفاعلة.

عدد قليل من الدراسات التجريبية وتحقيق نظري واحد فقط تم إجراؤه سابقاً على آليات وحركية تفاعل N_2H_4 مع OH في نموذج من الدرجة الثانية.

وقد أظهرت النتائج التي تم الحصول عليها أن نزع الهيدروجين من الهيدرازين بواسطة الهيدروكسيل هو مسار التفاعل الرئيسي عند درجات حرارة أقل من 700K.



كما أن تفاعل الهيدرازين مع O_3 كأنواع أخرى من تفاعلات الغلاف الجوي مهمة جداً وهو كما يلي:



قام Vaghjiani بعمل تجريبي حول ثابت معدل الطور الغازي للتفاعل بين جذر OH و الهيدرازين حيث قام بقياس ثابت معدل في نطاق درجة الحرارة 374-232 K و قد وجدوا ان هذا الثابت هو

$$k = (1.25 \pm 0.19) \times 10^{-11} \exp[(315 \pm 55)/T] \text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

هذه القيمة لها اعتماد ضعيف على درجة الحرارة. ففي دراسة أخرى وجد Arinuess قيمة أخرى للثابت عند نطاق درجة الحرارة 637-232 K.

$$k = (2.17 \pm 0.39) \times 10^{-11} \exp[(160 \pm 30)/T] \text{cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

كما توصل العلماء الى أنه لا يمكن إضافة جذور OH إلى مركز واحد من الديامين في درجات حرارة منخفضة، وذلك لأن جذر OH هو نوع شديد التفاعل وبالتالي لا يتقدم التفاعل عن طريق التفكك السريع للوسيط إلى نواتج.

كما قام Harris وعلماء آخرون بقياس ثوابت معدل التفاعل باستخدام ومضان التحلل الضوئي والرنين في نطاق درجة الحرارة 298-424 k، و قد وجدوا قيمة الثابت هي:

$$k = 4.40 \times 10^{-11} \exp[(116 \pm 176)/T] \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

قام Hack ومساعديه أيضا بعمل تجريبي بشأن معدل التفاعل بين جذر OH والهيدرازين في مفاعل تدفق متساوي الحرارة مع تدفق الهيليوم كغاز حامل ولقد تحصلوا على قيمة المعدل الإجمالي التالي:

$$k(298.15) = 2.20 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

عند درجة حرارة الغرفة وضغط حوالي 2Torr .

تمت دراسة تفاعل $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH}$ بواسطة العالم Tang ومساعديه نظريا. كانت قيمة المعدل المحسوبة على نطاق درجة حرارة $200-3000 \text{ }^\circ \text{K}$ هي

$$k_1 = 7.79 \times 10^{-18} T^{1.93} \exp(-1258.5/T)$$

$$k_2 = 1.28 \times 10^{-18} T^{2.37} \exp(-1049.3/T) \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

حيث استخدموا مجموعة متنوعة من الأساليب الحسابية لحساب المعدل الثابت لهذا التفاعل عند درجة حرارة الغرفة وضغط يبلغ حوالي 2Tor.

و هذه النتائج هي لتفاعل تجريد (H) لتوليد منتجات (N_2H_3 بالإضافة إلى H_2O) وتفاعل (SN2) لإنتاج (NH_2 بالإضافة إلى H_2NOH)، على التوالي.

بالنسبة لتفاعل جذر الهيدروكسيل مع N_2H_4 ، تظهر النتائج التالية أن هناك عدم تناسق بين الهندسة المُحسّنة التي تم ايجادها من طرف Tang والهندسة الأصلية لهذا المتفاعل عند مستوى B3lyp/6-311g(d,p). من ناحية أخرى تعد المستويات:

$$(B3LYP/6-311G(d,p)) \text{ و } (CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p))$$

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

مستويات حسابية ضعيفة لوصف سطح طاقة محتمل خاصة في التفاعلات التي تتضمن مركبات صغيرة مثل تفاعل $\text{OH} + \text{N}_2\text{H}_4$.

ومن ناحية أخرى تم تصحيح الطاقات النسبية المحسوبة عند هذا المستوى وتبين أن هذه المستويات ليس لها هياكل وطاقات انتقالية دقيقة.

بالإضافة إلى ذلك، وعلى أساس النتائج التي توصلنا إليها، هناك اختلافات كبيرة بين معدلات الثوابت المحسوبة على مستوى $(\text{CCSD(T)/6-311+} + \text{G(d,p)}/\text{B3LYP/6-311G(d,p)})$ و النتائج الحسابية المذكورة أعلاه، لذلك هناك حاجة إلى مزيد من الحسابات لحل المشكلة.

ومن هنا تم الاستنتاج أن الحسابات ذات المستوى الأعلى ضرورية لحساب هياكل نقاط السرج و سطح الطاقة المحتملة للتفاعل.

نحن نعلم، انه لا توجد دراسات تجريبية عند درجات حرارة أعلى من 650 K ولا بيانات نظرية موثوقة تم الحصول عليها من خلال حسابات عالية المستوى.

في العمل الحالي، تم فحص مسارات التفاعل للهيدرازين والهيدروكسيل باستخدام كل من الطرق المرجعية الفردية والمرجعية المتعددة للحصول على سطح طاقة محتمل أكثر دقة.

و لحساب ثابت المعدل بدقة لكل قناة عند درجات حرارة مختلفة، والتنبؤ بمعلومات ديناميكية حرارية أكثر دقة، يتم حساب سطح الطاقة المحتملة باستخدام طرق عالية المستوى مثل طريقة (CASSCF-MP2) (نظرية اضطراب مولر-بليسيت متعددة المراجع من الدرجة الثانية)، وطريقة (CCSD(T)) (نظرية المجموعة المزدوجة)، و طريقة (MP2) (نظرية الاضطراب من الدرجة الثانية المرجعية الفردية فيما يتعلق بمجموعات أساس مختلفة للحصول على معالجة أكثر دقة واكتمالاً لمسارات تفاعل $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH}$).

علاوة على ذلك، فإن الأهداف الرئيسية الأخرى لهذه الدراسة هي وصف آليات تفاعل $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH}$ بشكل شامل، والحصول على رؤية نظرية أكثر دقة للنقاط الثابتة لـ PES المحسوبة باستخدام النظرية الطوبولوجية للذرات في الجزيئات (AIM) و NBO للتحليلات.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

يتم إجراء حسابات معدل ثابت جميع مسارات التفاعل عند حدود الضغط العالي باستخدام نظريات الحالة الانتقالية (TST) وحالة الانتقال المتغيرة VTST، وعند حد الضغط المنخفض ونظام الهبوط بواسطة معادلة الاصطدام الرئيسية القوية (Rice–Ramsperger–Kassel–Marcus) (RRKM).

5.1. الأساليب الحسابية :

تعتبر الطرق الحسابية مهمة جدا في التفاعلات الكيميائية، فهي تستخدم في تحسين هندسة الجزيئات، التي تعتبر عملية إيجاد الترتيب المكاني الأكثر استقرارًا للذرات داخل الجزيء حيث تختلف هذه طرق المتنوعة عن بعضها البعض، فهناك طرق تمتاز بالدقة و الأخرى لها خاصية السرعة، و أكثر الطرق شيوعًا المستخدمة في تحسين هندسة الجزيء هي طرق تابعة الكثافة ((DFT، بما في ذلك UMP2 و UB3LYP و UM06-2X، يتم تطبيق هذه الطرق الحسابية إلى جانب قواعد الأساس المختلفة، مثل:

(aug-cc-pVQZ و aug-cc-pVTZ و maug-cc-pVTZ و 311-6 ++ G(3df,3pd)

بالإضافة الى تطبيق مجموعات أساس أخرى على تحسين البنية الهندسية لجميع النقاط الثابتة في الحالة المزدوجة.

حيث تم اختيار طريقة UM06-2X تحديداً لأنها توفر نتائج أكثر دقة لحركية التفاعل، خاصة تلك التي تتضمن انتقالات الهيدروجين وهي طريقة وظيفية ذات كثافة هجينة عالية المعلومات ولها نتائج معقولة لتحديد حركية التفاعل، يرجع ذلك إلى أن طريقة B3LYP، وهي واحدة من أكثر طرق التابعة الكثافة شيوعاً، تعاني من قصور في تحديد ارتفاع الحاجز وحركية التفاعل.

تم حساب الترددات التوافقية الاهتزازية باستخدام الطرق و مجموعات الأساس المذكورة أعلاه لتحديد طبيعة جميع النقاط الثابتة، بما في ذلك معقدات الاصطدام ما قبل التفاعل (MCP)، ومعقدات النواتج (MCp)، وحالات الانتقال (TS). تم استخدام الرموز aTZ و aQZ و maTZ اختصاراً لمجموعات الأساس maug-cc-pVTZ34 و aug-cc-pVTZ و aug-cc-pVQZ35 على التوالي، تحتوي جميع التراكيب المتعلقة بنقاط الطاقة الدنيا على PES المعتبرة على ترددات حقيقية فقط، تحتوي جميع تراكيب نقاط السرج على تردد تخيلي واحد.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

تم حساب طاقات اهتزاز نقطة الصفر وأضيفت إلى الطاقات النسبية المحسوبة. علاوة على ذلك، لتقييم ارتباط جميع النقاط الثابتة وكذلك لحساب مسارات الطاقة الدنيا، قمنا بإجراء حسابات (MEP) لإحداثيات التفاعل الداخلية (IRC) لجميع تراكيب نقاط السرج باستخدام طريقتي MP2 و M06-2X.

لتقدير ارتفاعات حواجز التفاعل بشكل أكثر دقة، تم استخدام منهجية ذات مستوى مزدوج مشابهة للتفاعلات السابقة للهيدرازين مع ذرة الأكسجين المحاكاة في الظروف الجوية.

تم اختيار المستوى الإلكتروني الحسابي $CCS(T)/CBS//MP2/aTZ$ لأن الدراسات السابقة أظهرت أن مستوى $CCS(T)/CBS$ يعطي نتائج ممتازة في توقع الطاقة، و أيضا عند التعامل مع الروابط الهيدروجينية، مثل تفاعل N_2H_4+OH ، فإن طريقة MP2 مع مجموعة أساس كبيرة تعطي نتائج تحسين هندسي أفضل من مجموعات الأساس الصغيرة، وعليه فقد تم استخدام الهياكل الهندسية التي تم الحصول عليها عند مستوى $CCSD(T)/CBS$ لإجراء حسابات $MP2/aTZ$.

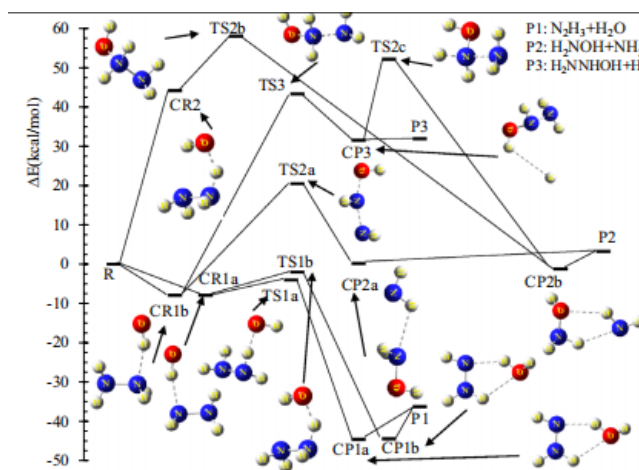
الخطوات اللازمة لبناء مستوى $CCSD(T)/CBS$ تتضمن استخدام مستويات $CCSD(T)/aQZ//UMP2/aTZ$ و $CCSD(T)/aTZ//UMP2/aTZ$ لتقدير الحد النهائي للمجموعة الأساسية الكاملة المعروفة باسم CBS، باستخدام الطريقة المقترحة من قبل Harck وآخرون.

تم تنفيذ طريقة الاضطراب من النظام الثاني لمولر-بلسيت متعدد المراجع، MR-MP2، بالاقتران مع مجموعة أساسية محسنة للتمايز بالتراكيب المحصل عليها على مستويات $UMP2/aTZ$ و $UM06-2X/aTZ$ بتنفيذ مجموعة الأساس المستقطبة المتوافقة مع الارتباط المعزز لزيئا الرباعي، aug-cc-pVQZ، لتقييم تأثير الحالات المثارة على سطح الطاقة المحتملة. تم أيضا حساب قيم التشخيص T1 عند مستوى $CCSD(T)/Y$ (حيث Y هو عدة مجموعات أساس من أنواع Dunning و Pople) بهدف تأكيد أهمية الحسابات على مستوى أعلى للهياكل الإلكترونية لجميع الأنواع. حيث إذا كانت قيم التشخيص T1 أكبر من 0.045 لكل من الأنظمة ذات القشرة المغلقة والمفتوحة، فإنه من الضروري إجراء حسابات على مستوى أعلى لاستكشاف هذه الأنظمة، و تكون القيمة نفسها لأكثر الأمبيرات هي 0.2، ولكن نتائجا أقل من 0.2 (0.045) باستثناء TS1b (انظر الجدول التكميلي S36)، وهذا واضح بالنسبة لـ TS1b لأننا وجدنا بنية TS1b من خلال خيار المسح كما ذكر في قسم "مسارات تكوين $H_2NOH+NH_2$. أيضًا، وفقًا للسطح PES المقترح، فإن المسار الذي يحتوي على TS1b له مساهمة ضئيلة جدًا في تحلل الهيدرازين بسبب وجود حالة انتقال ذات حاجز طاقة عالية، وهذا المسار لا يلاحظ في الدراسات التجريبية، لأنه مسار نظري فقط ولا يؤثر على معدل الكلي لتحلل الهيدرازين.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

للاستكشاف بصورة أعمق فيما يتعلق بآليات التفاعل، تم تحليل الروابط المشاركة في التفاعلات استنادًا إلى التحليل الطبيعي للمدارات الكيميائية (NBO) وتحليل الذرات في الجزيء (AIM) على مستوى UMP2/aTZ، كما تم حساب المعاملات الحرارية للإضافات المتوقعة في نطاق درجات الحرارة من (200 إلى 1200) K على مستويات CCSD(T)/CBS (الطاقة) + UMP2/aTZ (التصحيحات)، و CCSD(T)/CBS (الطاقة) + M06-2X/aQZ (التصحيحات)، و M06-2X/aQZ و MP2/aTZ.

تم تنفيذ تحليلات القيم للوظائف الموجية بواسطة برنامج AIM2000. والاعتماد على برنامج Gaussian 09 لتحسين وحسابات الهيكل الإلكتروني لجميع النقاط الثابتة. ومن ثم إنشاء جميع الصور للهياكل الجزيئية باستخدام برنامج GaussView 5.0.8.



ملف الطاقة المحتمل لتفاعل N2H4 + OH للمسارات الموثوقة على مستوى CCSD(T)/CBS//MP2/aTZ

■ حسابات ثوابت السرعة:

تم حساب جميع ثوابت السرعة عند الحد العالي للضغط باستخدام نظرية الحالة الانتقالية (TST)، أيضًا تم تنفيذ تأثيرات التباين على سرعة التفاعل بواسطة نظرية الحالة الانتقالية التباينية (المتغيرة) (VTST)، لجميع التفاعلات ثنائية الجزيئات الأساسية، وقد تم حساب ثوابت السرعة عند الحد العالي للضغط باستخدام برنامج Gpop. و أيضا حساب ثوابت السرعة عند الحد السفلي للضغط ونظام السقوط باستخدام معادلة أساسية للاصطدامات القوية (نظرية رايس - رامسبرجر - كاسل - ماركوس) (RRKM) بواسطة برنامج Ssumes .

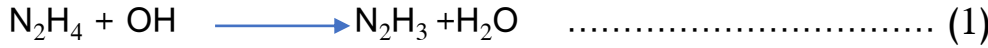
في التفاعل الجوي للهيدرازين في هذا العمل وجد أن المسارات الرئيسية هي التحولات الهيدروجينية. وبالتالي، فإن عامل تصحيح الانحراف الكمي الدقيق ضروري. وقد تم حساب هذا الأخير على مستويات UMP2/aTZ و M06-2X/maTZ. بالاعتماد على التصحيح من الدرجة الثانية لـ Shavitt:

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

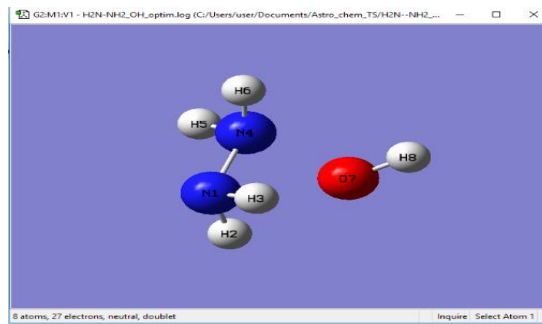
بما أنّ مؤلّفِي الأسلوب UM06-2X36,37 قد أوصوا بأن هذا الأسلوب لديه أداء ممتاز لثرموديناميكا المجموعة الرئيسية، والتفاعلات غير التساهمية، والسيناتيكا. فقد، تم حساب ثوابت السرعة لتفاعل N_2H_4+OH على مستوى M06-2X/matZ.

5.1. المراحل المتبعة لإيجاد الحالة الانتقالية بالاعتماد على برنامج GAUSSIAN VIEW 06 :

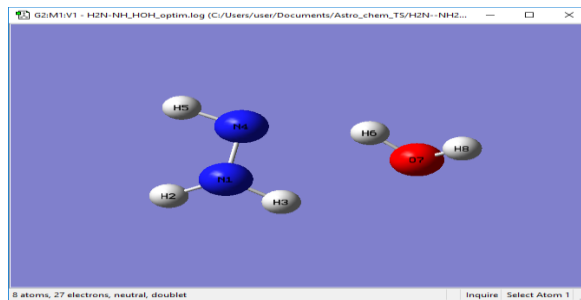
تهيئة البنية الفراغية :



➤ في البداية نقوم بإدخال المتفاعلات في النافذة الأولى مع تحديد ترميز و ترقيم الذرات حسب ما تبينه الوثيقة التالية :



➤ نقوم بفتح نافذة أخرى و ندخل النواتج لهذا التفاعل و يكون هنا ترقيم و ترميز النواتج نفسه في المتفاعلات.



➤ إيجاد تهيئة البنية يتم حسب الخطوات التالية :

```
Calculate>>Gaussian calculation step...>>job type >>Optimization>> Method>>DFT B3LYP 6-311G++(d,p)>>submit
```

▪ إيجاد الحالة الانتقالية:

- ✓ نفتح ملفات كل من النواتج والمتفاعلات التي تم انجاز تهيئة بنيتها الفراغية بملف .log
- ✓ نجمع كل من المتفاعلات والنواتج في نافذة واحدة
- ✓ نحصل على الحالة الانتقالية حسب:

Calculate>>Gaussian calculation steup..>>job type>>Opt+fre>> Method>>DFT B3LYP 6-311G++(d,p)>>submit

✓ بعد القيام بهذه الخطوات تتم عملة الحساب بواسطة برنامج Gaussian 09.

✓ تكون النتائج المتحصل عليها كالتالي:

Title Card Required		
C:/Users/user/Documents/Astro_chem_TS/H2N...		
File Type		.log
Calculation Type		FREQ
Calculation Method		UB3LYP
Basis Set		6-311++G(d,p)
Charge		0
Spin		Doublet
Solvation		None
E(UB3LYP)	-187.682092	Hartree
RMS Gradient Norm	0.000002	Hartree/Bohr
Imaginary Freq		1
Dipole Moment	2.640596	Debye
Polarizability (α)	54.147667	a.u.
Point Group		C1
Job cpu time: 0 days 0 hours 2 minutes 47.3 se...		

➤ النتائج والمناقشة:

في الأقسام التالية، يتم مناقشة سطح الطاقة المحتمل لتفاعل $N_2H_4 + OH$ ، وثابت السرعة لجميع المسارات الموثوقة عند الضغط المنخفض، متوسط ومرتفع، وكذلك البيانات الحرارية باستخدام طرق حسابية مختلفة. وأخيراً، يتم دراسة مصير الهيدرازين في مستويات مختلفة من الغلاف الجوي. حيث نستخدم نفس التعبير للنقاط الثابتة كما في الدراسة التي أجراها Tang، من أجل تبسيط سطح الطاقة المحتمل في كلتا الدراستين.

▪ سطح الطاقة المحتمل (PES): Potential energy surface

يُوضح الرسم البياني سطح الطاقة المحتمل لتفاعل N_2H_4+OH في الشكل رقم 1.

حيث تم حساب الطاقات النسبية في هذا الشكل على مستوى CCSD(T)/CBS حيث تُظهر المعلومات الهندسية المُختارة لجميع الأنواع في المسارات المقترحة في الشكل رقم 2 كما يتم سرد أطوال الروابط المُختارة لنقاط السرج الرئيسية في الجدول رقم 3.

يتم حساب المتغيرات الحرارية لجميع الإضافات المتوقعة في نطاق درجات الحرارة من (200K إلى K 1200) على كل من مستوى UM06-2X/aQZ وUMP2/aTZ وتُجمع في الجدول رقم 4 يتم الحساب بالاعتماد على درجة الحرارة لثوابت السرعة لجميع التفاعلات الأولية، وباستخدام نظريتي TST و VTST، تُدرج النتائج

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

المحصل عليها في الجداول التكميلية في المعلومات الإضافية، و تدرج ثوابت السرعة المعتمدة على الضغط لجميع قنوات الاختزال.

6.1. مسارات دخول التفاعل:

مثل العديد من تفاعلات الغازات في المرحلة الغازية، تبدأ تفاعلات الهيدرازين مع جذر الهيدروكسيل بمجموعات متحدة قبل التفاعل.

في هذا العمل، يتم التنبؤ بثلاث مجموعات متحدة قبل التفاعل وتسميتها بـ MCr1a، MCr1b، و MCr2. تعتبر المجموعة المتحددة MCr1a صورة معكوسة لـ MCr1b لذا، الهيكل الإلكتروني لـ MCr1a هو نفسه لـ MCr1b. أيضًا، يرتبط هيكل MCr1a (أو MCr1b) بمكونات N_2H_4 و OH بتكوين رابطة هيدروجينية لذا، فهي أكثر استقرارًا من MCr2.

في MCr2، يتشكل تفاعل التكافؤ بين جذر الهيدروكسيل والإلكترونات الفردية للنيتروجين في جزيء N_2H_4 ، هذا هو السبب في زيادة طول رابطة H1-N2 في MCr2 مقارنة بالرابطة المقابلة في الهيدرازين المعزول. يتسبب التفاعل التكافؤي في MCr2 في رفع طاقة مدارات α HOMO و β orbitals (في النموذج غير المقيد) مقارنةً بمدارات HOMO في MCr1a و MCr1b.

في المجموعة MCr2، يكون الفرق بين الطاقات المطلقة لمدارات α LUMO و β كبيرًا لذا، فهي مجموعة غير مستقرة في الحالة المزدوجة في MCr2، يتم تأكيد طبيعة التفاعل التكافؤي للرابطة الجديدة المتشكلة (O1-N2) بطول قدره 1.389 Å من خلال تحليل AIM:

$$[\rho(r_{bcp})=0.3454 \text{ e bohr}^{-3} \text{ and } \nabla^2\rho(r_{bcp})= - 3.8432 \text{ e bohr}^{-5}]$$

أيضًا، يؤكد تحليل NBO أن رابطة (O1-N2) في MCr2 هي نوع (σ) بطبيعة تكافؤية، كما تُظهر المساهمات للمدارات المعنية في رابطة $(O1-N2)\sigma$ كما يلي:

$$(BD(N2 - O6)) = 0.6883 (sp^{3.51})N2 + 0.7254 (sp^{4.44})O6$$

في MCr1a و MCr1b، يكون مقطع الهيدرازين مستقبل رابطة هيدروجينية ومقطع ال OH مانحًا لرابطة هيدروجينية، حيث معاملات AIM لتفاعل $N2...OH$ في MCr1a هي $\rho(r_{bcp})=0.0366 \text{ e bohr}^{-3}$ و $\nabla^2\rho(bcp)=0.0732 \text{ e bohr}^{-5}$ ، مما يؤكد وجود رابطة هيدروجينية.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

في هذه المجموعة، كميات الانتالبية القياسية والطاقة الحرة جيبس عند مستوى CCSD(T)/CBS+MP2/aTZ تكون (-6.36 و 1.31) kcal/Mol على التوالي، بالمقارنة مع التفاعلات الأصلية عند درجة الحرارة الغرفة. أما بالنسبة لـ MCr2، فإن المعاملات الحرارية المذكورة هي (43.65 و 53.44) kcal/Mol على التوالي.

أولاً في الأقسام التالية، سيتم مناقشة قنوات تفاعل الاختزال (بدون حاجز). ثانياً، سيتم التحقيق في إضافة جذر الهيدروكسيل إلى الموقع N للهيدرازين. وأخيراً، سيتم مناقشة تفاعل S_N2 (استبدال OH بذراع الهيدروجين في الهيدرازين).

1.6.1. مسارات تكوين $N_2H_3 + H_2O$

تبدأ قنوات اختزال الهيدروجين بالمجموعات المتحدة MCr1a و MCr1b، حيث تبلغ الطاقة النسبية لـ MCr1a (-7.88 kcal/Mol) عند مستوى CCSD(T)/CBS.

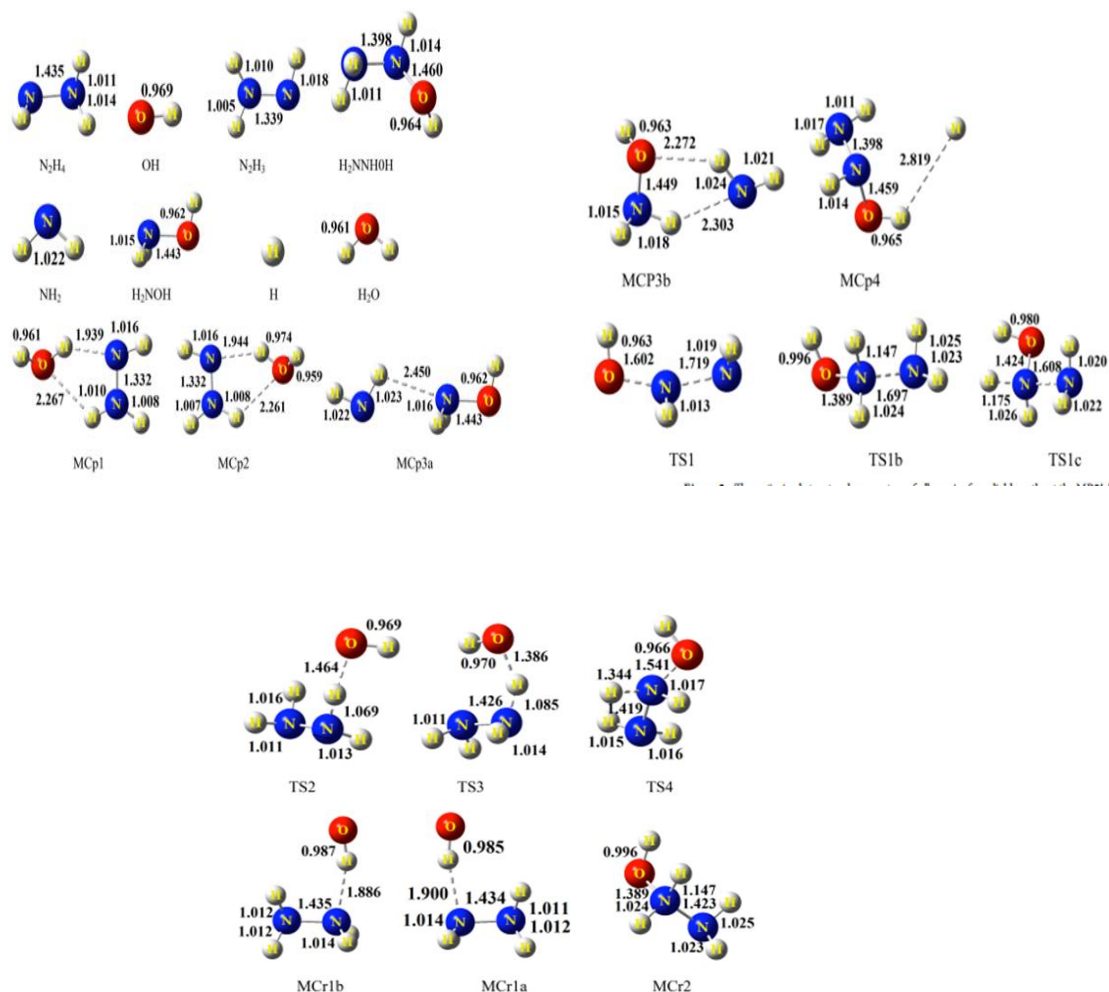
يُلخّص تفاعلات اختزال الهيدروجين كما يلي:

1. $N_2H_4 + OH \rightarrow MCr1a \rightarrow TS2 \rightarrow MCp1 \rightarrow P1(H_2NNH + H_2O)$ (م 1)
2. $N_2H^4 + OH \rightarrow MCr1b \rightarrow TS3 \rightarrow MCp2 \rightarrow P1(H_2NNH + H_2O)$ (م 2)

تم دراسة هذه المسارات من قبل Tang على مستوى B3LYP/6- CCSD(T)/6311++G(d,p)// 311G(d,p)+ZPE، وكانت الطاقات النسبية المُبلّغة لـ TS2 و TS3 (0.41 و -1.67) Cal/Mol على التوالي.

لقد قمنا باعادة حساب المسارات المقترحة على نفس المستوى والهيكل الهندسية، حيث تُظهر نتائجنا أن الطاقات النسبية بمراعاة الطاقة الصفرية (وبدون مراعاة الطاقة الصفرية) لـ TS2 و TS3 هي 0.38 و (-0.12) و 2.65 و (1.58) kcal/mol بالمقارنة مع (1.67 و 0.43) Kcal/mol على التوالي.

يمكن أن يكون الاختلاف و التباين بين نتائجنا ونتائج Tang مرتبطاً بالهندسة المثلى لجزيء الهيدرازين في مستوى B3LYP/6-311G(d,p)، حيث في دراسة Tang، كانت المعاملات الهندسية لجزيء الهيدرازين 1.487 \AA لرابطة N-N و 1.020 \AA لرابطة N-H ولكن طول الروابط المحسوبة لدينا هو 1.435 \AA و 1.018 \AA على التوالي.



الشكل رقم 2: المعلومات الهيكلية المثلى لجميع الأنواع المسارات الموثوقة على مستوى MP2/aTZ.

بالنسبة للأنواع الأخرى، فإن المعلومات الهيكلية المعاد حسابها على المستوى المذكور مطابقة لتلك التي قام بها Tang و مساعديه، حيث قيم تشخيص T1 لبعض الأنواع المحسوبة باستخدام طريقة CCSD(T) مع مجموعات أساس مختلفة تتراوح بين 0.025 و 0.038 ، تُظهر هذه القيم أن الحسابات على مستوى أعلى مثل CCSD(T)/CBS//MP2/aTZ مهمة للحصول على تنبؤات و نتائج أكثر دقة للطاقات والهيكل لجميع النقاط الثابتة . لذلك، فإن المستوى CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p) غير كافٍ بسبب وجود مجموعة أساس صغيرة لوصف آلية وسطح الطاقة للتفاعل الجوي للهيدرازين.

جدول 3: أطوال الروابط (بالأنغستروم) لـ TS2 و TS3.

الطريقة	TS2		TS3	
	N-H(Å)	H-O(Å)	N-H (Å)	H-O (Å)
MP2/aTZ	1.069	1.464	1.087	1.386
MP2/maTZ	1.068	1.463	1.085	1.386
M06-2X/aTZ	1.031	1.742	1.047	1.580
M06-2X/maTZ	1.031	1.751	1.040	1.626
M06-HF/aTZ	1.045	1.562	1.064	1.466
M06-HF/maTZ	1.046	1.563	1.064	1.466
B3LYP/aTZ	1.034	1.700	1.023	1.809
B3LYP/maTZ	1.035	1.693	1.023	1.808
B3LYP/6311++G(d,p) هذا عملنا	1.01366	1.89606		

إن استخدام مجموعة أساس أكبر أمر بالغ الأهمية لتحقيق تنبؤات أكثر دقة لطاقات و هندسة جميع النقاط الثابتة ولذلك، يُعد المستوى الحسابي $CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p)$ غير كافٍ وذلك بسبب امتلاكه لمجموعة أساس صغيرة لا تكفي لوصف آلية التفاعل و سطح الطاقة الكامنة (PES).

بناءً على النتائج الموضحة في الجدول تظهر نقاط السرج الخاصة باستخلاص الهيدروجين هيكل مختلفة عند استخدام صيغتين مختلفتين بالنسبة لطرق دالية الكثافة مثل B3LYP و M06-2X باستخدام مجموعات أساس متعددة، فإن الهياكل التي تم الحصول عليها تكون متشابهة مع المواد الابتدائية ويُطلق عليها حالات انتقال مبكرة.

طرق الوضع الابتدائي (ab initio) مثل CASSCF و MP2 تُظهر أن هياكل كل من TS2 و TS3 لا تشبه لا المتفاعلات ولا النواتج.

تُسمى هذه الحالات الانتقالية حالات انتقال خاصة ولهذه الأسباب، نقوم بدراسة ارتفاعات الحواجز وثابت السرعة باستخدام كلتا الصيغتين الحسابيتين باستخدام الطرق الالفبائية (ab initio). تُظهر حسابات مسار الطاقة الدنيا (MEP) أن كل من TS2 و TS3 ترتبط مع MCr1a تحدث تفاعلات نزع الهيدروجين في المسارين 1 و 2 عبر TS2 و TS3 على التوالي كما تؤكد حسابات مسار رد الفعل العكسي (IRC) إمكانية تكوين

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

المركبات النهائية MCp1 و MCp2 في طور الغاز حيث تبلغ الطاقات النسبية للمركبات النهائية MCp1 - 44.45 kcal/mol و MCp2 -44.26 kcal/mol على التوالي، عند مستوى الحساب CCSD(T)/CBS .

طاقات الحاجز للحالتين الانتقالتين (TS2 و TS3) على مستوى CCSD(T)/CBS تبلغ (-4.80 kcal/mol) 3.08 و 5.49 (-2.39) kcal/mol على التوالي، كما تم إدراج طاقات الحاجز المحسوبة لهاته الحالات الانتقالية باستخدام طرق و مجموعات اساس مختلفة و هذا ما يوضحه الجدول اعلاه حيث تظهر النتائج ان تركيبات وطاقات الحالات الانتقالية تعتمد على بشكل كبير على الطريقة الكيميائية ومجموعة الأساس المستخدمة في الحسابات ويُعد طول الرابطة وخصائص كل من جذر الهيدروكسيل (OH) و ذرة الهيدروجين المتحررة من الهيدرازين عاملاً هاماً للغاية في تحديد بنية الحالتين الانتقالتين TS2 و TS3 فعلى سبيل المثال عندما يكون المركب في الحالة MCr1a، لا يوجد أي تفاعل بين ذرتي الهيدروجين H7 والأكسجين O6، حيث يبلغ طول الرابطة بينهما 2.76Å بينما يشير طول الرابطة المقابل (H7-O6=1.464 Å) إلى وجود تفاعل قوي بينهما. التحويلات التي تم استخدامها:

$$1 \text{ hartree} = 627.5 \text{ k cal /mol}$$

result >> summary E_{ele} : نتحصل عليها من ملف النتائج

$$\Delta E = E_{Ts} + E_{orea} \quad \Delta E : \text{ نتحصل عليها من خلال العلاقة}$$

في الحالة الانتقالية TS2 ، نلاحظ أن طول الرابطة أقصر مما هو عليه عندما يكون المركب في الحالة MCr1a كما تظهر نتائج تحليل NBO أن الرابطة في الحالتين MCp1 و MCp2 هي عبارة عن رابطة تساهمية.

$$MCp1 = (\sigma \text{ BD (H7-O6)}) = 0.8712 (sp^{2.72}) O6 + 0.4909 (s^{0.99}) H7$$

نلاحظ نقصان في طول الرابطة N-N عندما يكون المركب في الحالة MCp1، مقارنةً بالرابطة المماثلة في الحالة ب. MCr1a يؤدي هذا التغير إلى تكوين رابطة ذات طبيعة π ، وهو ما يتوافق مع التهجين الذري التالي:

$$MCp1 (\text{BD (N1-N2)}) = 0.6702 (sp^{2.50}) N + 0.7422 (sp^{1.83}) N2$$

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

جدول 4: يمثل الطاقات الإلكترونية و الطاقات النسبية و ارتفاعات الحواجز الامامية و كذلك ارتفاعات الحاجز العكسي

بمسارات التفاعل N_2H_4+OH على مستوى $CCSD. (T)/CBS$

المراحل	E_{elec} (hartree)	ΔE (kcal/mol)	ΔE_r^\ddagger (kcal/mol)	ΔE_r^\ddagger (kcal/mol)
R ($N_2H_4 + OH$)	-187.44049	0.00		
MCr1a	-187.45305	-7.88		
MCr2	-187.37037	44.00		
TS1	-187.40797	20.41	28.29	20.20
TS1b	-187.34829	57.86	13.86	59.08
TS1C	-187.35757	52.03	59.91	20.61
TS2	-187.44540	-3.08	4.80	41.37
TS3	-187.44430	-2.39	5.49	41.87
TS4	-187.37169	43.17	51.05	11.75
MCp1	-187.51133	-44.45		
MCp2	-187.51103	-44.26		
MCp3a	-187.44016	0.21		
MCp3b	-187.44244	-1.22		
MCp4	-187.39042	31.42		
P1($N_2H_3 + H_2O$)	-187.49810	36.15		
P2($NH_2 + H_2NOH$)	-187.43537	3.21		
P3($H_2NNHOH+OH$)	-187.38978	31.82		
R($N_2H_4 + OH$) هذا عملنا	-187.685977	0.00		
TS2 هذا عملنا	-187.682092	2.44		
P($N_2H_3+H_2O$) هذا عملنا	-187.743695	-36.21		

وهو ما يتوافق مع التهجين الذري sp^3 للذرة N1 و sp^2 للذرة N2 تشغل N1 نسبة 44.91% من المدارات، منها 28.45% مدارات S و 70.98% مدارات P أما N2 فتحتل 55.09% من المدارات، منها 35.19% مدارات S و 64.44% مدارات P.

2.6.1. مسارات تكوين $\text{H}_2\text{NOH} + \text{NH}_2$ (تفاعلات $\text{S}_{\text{N}}2$ والإضافة/الإزالة):

وتتلخص هذه التفاعلات في المعادلات التالية:

- $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{MCr1b} \rightarrow \text{TS1} \rightarrow \text{MCp3a} \rightarrow \text{P2}(\text{H}_2\text{NOH} + \text{NH}_2)_3$ م
- $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{MCr2} \rightarrow \text{TS1b} \rightarrow \text{MCp3b} \rightarrow \text{P2}(\text{H}_2\text{NOH} + \text{NH}_2)_4$ م

بالإضافة إلى ذلك، سوف نستعرض في القسم التالي مسارًا آخر لإنتاج نواتج P2 يبدأ المسار الثالث بالمعقد ما قبل التفاعلي MCr1b، بينما يبدأ المسار الرابع بالمعقد MCr2 يُعد تفاعل الاستبدال بين و NH_2 تفاعل $\text{S}_{\text{N}}2$ مشابه لتفاعلات الإحلال النووي الحلقية في الكيمياء العضوية، ويحدث بشكل متزامن وتؤكد حسابات MEP و NBO على حدوث تفاعل استبدال $\text{S}_{\text{N}}2$ خلال هذه العملية، يقترب جذر الهيدروكسيل من جزيء الهيدرازين من الخلف، بينما تنفصل المجموعة الوظيفية NH_2 من الأمام.

$$\text{TS1}(\text{BD}(\text{O6-N2})) = 0.6721(\text{sp}^{2.35}) \text{O6} + 0.7903(\text{sp}^{2.81}) \text{N2}$$

يوضح تحليل NBO هذا أن ذرة الأكسجين في جذر الهيدروكسيل، والتي تمتلك مدارًا تهجينًا $\text{sp}^{12.35}$ في الحالة الانتقالية TS1، تشكل رابطة تساهمية ضعيفة مع المدار اللرابط $\text{sp}^{2.81}$ لذرة النيتروجين في جزيء الهيدرازين. وفي الوقت نفسه، تصبح الرابطة N-N أضعف مقارنة بالرابطة المماثلة الموجودة في جزيء الهيدرازين الحر.

$$\text{TS1}(\text{BD}(\text{N1-N2})) = 0.4925(\text{sp}^{3.32}) \text{N1} + 0.8703(\text{s}^{2.27}) \text{N2}$$

قام Tang وآخرون أيضًا بدراسة تفاعل الاستبدال بين OH و NH_2 قاموا بحساب البنية الإلكترونية لهذا المسار باستخدام المستوى الحسابي CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p) + ZPE وأظهروا أن جذر الهيدروكسيل OH يتغلب على حاجز طاقة يبلغ 17.02 Kcal/mol ليحل محل مجموعة NH_2 حيث أظهرت هذه الحسابات قيمتين: الأولى مع تصحيح طاقة النقطة الصفرية (ZPE) وهي 21.51 kcal/mol والثانية بدون تصحيح طاقة النقطة الصفرية وهي 20.38 kcal/mol.

كما قاموا بحساب حاجز الطاقة (والطاقة النسبية) للتفاعل باستخدام المستوى الحسابي الأعلى CCSD(T)/CBS، وأظهرت النتائج قيمتين: قيمة حاجز الطاقة وهي 28.28 kcal/mol وقيمة الطاقة النسبية للتفاعل وهي 20.41 kcal/mol.

MCr2 هو معقد طاقة عالية، مما يعني أنه قابل للتحلل إلى نواتج مختلفة تركز هذه الدراسة على مسار واحد يؤدي إلى تكوين $\text{NH}_2\text{OH} + \text{NH}_2$.

3.6.1. مسارات تكوين $\text{H}_2\text{NNHOH} + \text{H}^+$ (تفاعلات SN2 والإضافة/الإزالة):

يتضح هذا من خلال المعادلات الكيميائية التالية:

- م 5 $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{MCr1b} \rightarrow \text{TS4} \rightarrow \text{MCp4} \rightarrow \text{P3}(\text{H}_2\text{NNHOH} + \text{H})$
- م 6 $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{OH} \rightarrow \text{MCr1b} \rightarrow \text{TS4} \rightarrow \text{MCp4} \rightarrow \text{TS1c} \rightarrow \text{MCp3c} \rightarrow \text{P2}(\text{H}_2\text{NOH} + \text{NH}_2)$

تبدأ هذه المسارات بالمعقد ما قبل التفاعلي MCr1b يُعد تفاعل الاستبدال بين H و OH أيضًا من نوع SN2 يحدث استبدال جذر الهيدروكسيل بذرة هيدروجين واحدة من جزيء الهيدرازين عبر الحالة الانتقالية TS4 عن طريق التغلب على حاجز طاقة يبلغ 51.05 kcal/mol على مستوى CCSD(T)/CBS يؤكد حساب مسار تفاعل الإحداثيات (IRC) على إنتاج MCp4 عبر TS4 من خلال عملية SN2 كما يظهر ثابت معدل التفاعل المحسوب عند ضغط عالٍ أن تفاعل الاستبدال يحدث في زمن قدره 700 cm^{-1} .

تردد التخيلي (imaginary frequency) للحالة الانتقالية TS4 يبلغ 2169 cm^{-1} على المستوى UMP2x/aTZ طاقة ارتباط رابطة N-H في جزيء هيدرازين منفصل تبلغ $89.82 \text{ Kcal mol}^{-1}$ على مستوى CCSD(T)/CBS و 88.41 kcal/mol على مستوى UM06-2X/QZ وبالتالي، فإن طاقة حاجز الحالة الانتقالية TS4 أقل من طاقة الرابطة N-H في الهيدرازين.

طاقة الرابطة N-H في الهيدرازين هي الفرق في الطاقة بين جزيئين غير مستقرين، وهما N_2H_3 و H ، وجزيء هيدرازين مستقر. من ناحية أخرى، عندما تتحرر ذرة الهيدروجين في الحالة الانتقالية TS4 من ذرة النيتروجين في الهيدرازين، فإن طول رابطة N-H يزداد بالمقارنة بالرابطة المقابلة في جزيء الهيدرازين المعزول. من ناحية أخرى، في بنية الحالة الانتقالية TS4، يقترب جذر الهيدروكسيل من ذرة النيتروجين من الخلف ويشكل رابطة تساهمية ضعيفة. وبالتالي، مما يؤدي إلى حدوث تفاعل تساهمي ضعيف. هذه التفاعلات هي مصدر استقرار أجزاء الحالة الانتقالية TS4 مقارنة بجذور N_2H_3 و H الحرة.

حيث تم ملاحظة التفاعل نفسه بين ذرتي (H3 و N2 في) TS4 مشابهًا لتفاعل الاستبدال SN2

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

- $TS4 (BD (N2 - H3)) = 0.9142 (sp^{2.60}) N2 + 0.4054 (s^{0.99}) H3$
- $TS4 (BD (N2 - O6)) = 0.7428 (sp^{3.00}) N2 + 0.6695 (sp^{8.59}) O6$

يوضح تحليل NBO للحالة الانتقالية TS4 أن المدار الهجين $sp^{3.00}$ لذرة النيتروجين N2 له تفاعل تساهمي ضعيف مع المدار الهجين $sp^{8.59}$ لذرة الأكسجين O6 .

عند تغيير المدار الهجين $sp^{3.00}$ لذرة النيتروجين N2 إلى $sp^{2.60}$ ، يُلاحظ انخفاض مساهمة المدار P في رابطة N-H خلال عملية الاستبدال S_{N2} ويرتبط عدم استقرار المركب MCp4 بذرة الهيدروجين المنفصلة.

المسار الأخير هو طريق آخر لتكوين نواتج $NH_2OH + NH_2$ بعد تكوين MCp4 ، يتم تكوين معقد ما بعد التفاعل MCP3b من خلال الحالة الانتقالية TS1c بتجاوز حاجز طاقة يبلغ $59.91 \text{ kcal mol}^{-1}$ هذا المسار طويل، لذلك له أهمية حركية أقل مقارنة بالمسارات الأخرى التي تمت مناقشتها أعلاه.

بشكل عام، تجدر الإشارة إلى أن المسارات 4-6 لها مساهمة ضئيلة في تحلل الهيدرازين بسبب وجود حواجز طاقة عالية مقارنة بتفاعلات نزع الهيدروجين.

7.1. طاقة كسر الرابطة (Bond dissociation energy) :

يمكن أن يساعد حساب طاقة انفصال الرابطة (BDE) للرابطة التي يتم كسرها، وكذلك أنتالبي تكوين الرابطة الجديدة، بالإضافة إلى مسافات هذه الروابط، على فهم أصل القيمة المنخفضة أو المرتفعة لحاجز طاقة الحالة الانتقالية (أو الطاقة النسبية) لها. تم تحديد قيم مختلفة لطاقة انفصال الرابطة (BDE) لكل من روابط N-H و N-N في الهيدرازين في الجدول 5 .

يبلغ طاقة انفصال الرابطة (BDE) لرابطة N-H في الهيدرازين المعزول $82.64 \text{ kcal mol}^{-1}$ عند المستوى الحسابي CCSD(T)/CBS + MP2/aTZ كما توجد قيمتان مختلفتان لطاقة انفصال رابطة N-H في المراجع العلمية. القيمة الأولى تقدر بحوالي $(\pm 2) 76$ ، بينما القيمة الثانية تبلغ $87.5 \text{ kcal mol}^{-1}$ ، قيمة طاقة انفصال الرابطة التي حسبناها أعلى بمقدار $6.64 \text{ kcal mol}^{-1}$ من القيمة الأولى وأقل بمقدار $4.86 - \text{kcal mol}^{-1}$ من القيمة الثانية، قد ترجع هذه الاختلافات إلى وجود ذرة الهيدروجين الحرة والتي تعتبر غير مستقرة للغاية، كما يصعب التحكم بها تجريبيا في عملية انشطار الرابطة المتماثل.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

جدول 5: BDEs المحسوبة للروابط N-N و N-H من خلال التفكك المتمثب في جزيئ N2H4 عند مستويات مختلفة.

Bond	BDE
N-H	76±5.00
	76.00
	76.00±20
	87.50
	82.64 (CCSD(T)CBS//I)
	82.45 (CCSD(T)CBS//II)
	81.04 (M06-2X/aQZ)
	83.26 (MP2/ATZ)
	85.30 (B3LYP 6-311++G(d,p))
N-N	57.10
	58.00±3.00
	60.00±300
	57.10
	58.00±9.00
	59.00±3.00
	60.00±300
	62.00
	51.62 – 64.29
	54.60±5.30
	62.77
	65.96±1.9
	66.92
	65.93 (CCSD(T)CBS//I)
	65.64 (CCSD(T)CBS//II)
	67.97 (M06-2X/aQZ)
70.21 (MP2/ATZ)	
62.46(B3LYP 6-311++G(d,p))	

$$BDE = E_P - E_R$$

$$E = (E_{M-H} - E_H) - (E_M)$$

الهيدرازين، تتراوح قيم طاقة انفصال الرابطة التجريبية بين $57.1 - 65.96 \text{ kcal mol}^{-1}$ (انظر الجدول) وكذلك، تتوقع الأساليب النظرية المختلفة قيما مختلفة لطاقة انفصال رابطة N-N. تتراوح القيم المحسوبة بين $51.62 - 66.92 \text{ kcal mol}^{-1}$. استخدمنا مستوى حسابي أعلى من جميع الدراسات السابقة، وهو المستوى CCSD(T)/CBS + MP2/aTZ. نتقارب النتيجة التي حصلنا عليها ($65.93 \text{ kcal mol}^{-1}$) الحد الأعلى للنتائج التجريبية، ولكنها أقل بمقدار $1.29 \text{ kcal mol}^{-1}$ من الحد الأعلى للنتائج النظرية. يبلغ لأنتالبي تكوين رابطة N-O في H_2NOH قيمة سالبة $-64.03 \text{ kcal mol}^{-1}$.

تتضمن الانتقالية TS1b فقط انشطار رابطة N-N، ولما تشكل أي رابطة جديدة. بالتالي، فهي تقتصر إلى أنتالبي التكوين ولديها مركز واحد فقط للتفاعل. لذلك، تمتلك TS1b الحالة قيمة طاقة أعلى من الحالات الانتقالية الأخرى في الحالة الانتقالية TS1c، يحدث انشطار رابطة N-N وتكوين رابطة N-H، ولكن القيمة المطلقة لأنتالبي تكوين رابطة N-H أعلى من طاقة انفصال رابطة N-N وبالتالي، فإن المساهمة الإجمالية لتكوين الرابطة N-H في خفض حاجز طاقة الحالة الانتقالية TS1c تكون أقل مقارنة بالحال TS1.

أما في الحالة الانتقالية TS1c، يحدث انشطار رابطة N-N أيضاً، ولكن يترافق ذلك مع تكوين رابطة N-H جديدة. ومع ذلك، فإن القيمة المطلقة لأنتالبي تكوين رابطة N-H أعلى من طاقة انفصال رابطة N-N هذا الاختلاف في أنتالبي التكوين يفسر قيمة الطاقة الأعلى لحالة الانتقالية TS1c بالمقارنة مع TS1.

➤ يمثل الجدول قيم BDEs المحسوبة للروابط N-N و N-H من خلال تفكك جزيء N_2H_4

في حالة الانتقالية TS1c، يحدث انشطار رابطة N-N وتكوين رابطة N-H جديدة. من المتوقع أن تكون طاقة حاجز هذه الحالة الانتقالية أقل بسبب إصدار طاقة نتيجة تكوين الرابطة الجديدة. ومع ذلك، يجب الإشارة إلى وجود ذرة هيدروجين حرة في هذه الحالة الانتقالية، والتي تتفاعل مع ذرات النيتروجين عبر تفاعل VANDer Waals الضعيف. بالتالي، فإن عدم استقرار ذرة الهيدروجين الحرة هو العامل المسيطر في هذه الحالة.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

في حالة الانتقالية TS4 ، ينطبق نفس المنطق، ولكن ذرة الهيدروجين المغادرة تقترب بمقدار 0.08Å من ذرة النيتروجين مقارنة بذرة الهيدروجين المتصلة في TS1c هذا القرب يؤدي إلى تفاعل أقوى بين ذرة الهيدروجين المغادرة وذرة النيتروجين. لذلك، تمتلك حالة الانتقالية TS4 طاقة كلية أقل نسبيًا مقارنة بحالة الانتقالية TS1c .

حول النقاط السرجية للتفاعلات التي لا تحوي حاجز طاقة، TS2 و TS3 ، تجدر الإشارة إلى أنه كما ذكرنا سابقًا، فإن طاقة انفصال رابطة N-H تبلغ 64.82 kcal/mol وأنثالي التكوين القياسي (ΔH_f°) لرابطة H-O تساوي $-119.14 \text{ kcal mol}^{-1}$ بناءً على ذلك، تحدث حركة ذرة الهيدروجين عبر TS2 و TS3 كعمليات خالية من الحاجز. يرتبط الفرق بين طاقات TS2 و TS3 باتجاه مجموعة OH وبمسافات روابط N-H في هذه النقاط السرجية، يكون لذرة الهيدروجين المتحركة تفاعل قوي مع ذرة النيتروجين وتفاعل ضعيف للرابطة الهيدروجينية مع ذرة أكسجين في جذر الهيدروكسيل.

بشكل عام، يمكن استنتاج العلاقة بين طاقة انفصال الرابطة (BDE) ، والأنثالي القياسي للتكوين (ΔH_f°) ، ووجود أو عدم وجود حاجز طاقة في التفاعل الكيميائي على النحو التالي:

عندما تكون قيمة BDE أعلى من القيمة المطلقة لـ ΔH_f° من المتوقع وجود حاجز طاقة مرتفع للتفاعل. وكلما زاد الفرق بين BDE والقيمة المطلقة لـ ΔH_f° ، كلما ارتفع حاجز الطاقة. كما يساهم وجود ذرة هيدروجين حرة (غير مرتبطة برابطة) مع تفاعلات ضعيفة في زيادة حاجز الطاقة .

للتفاعلات الخالية من الحاجز: يلزم أن تكون القيمة المطلقة لـ ΔH_f° أكبر من BDE. بالإضافة إلى ذلك، يجب أن تكون هناك تفاعلات قوية بين ذرات أو جزيئات المتفاعلة خلال حالة الانتقال.

يتم الحصول على الاعتماد الحراري لثوابت السرعة لجميع التفاعلات الأولية (الأساسية) من خلال كل من نظرية الحالة الانتقالية المتغيرة (VTST) ونظرية الحالة الانتقالية (TST) للتفاعلات ثنائية الجزيئات. وبعد ذلك، يتم تحسين ثوابت السرعة باستخدام تصحيح نفاذية Shavit .

لحساب ثوابت السرعة بدقة أعلى، يتم إجراء حسابات ذات مستوى أعلى مثل:

• .CCSD(T)/CBS//MP2/aTZ

• .CCSD(T)/aQZ//MP2/aTZ

• .CCSD(T)/aTZ//MP2/aTZ

• مستويات DFT-M06-2X/maTZ المُصادق عليها.

➤ ثوابت السرعة في حد الضغط العالي:

• تم جمع ثوابت السرعة التي حسبناها في ظروف ضغط مرتفع باستخدام مستويات حسابية مختلفة ضمن مجال درجات الحرارة من k 230 إلى k 3000 .

➤ أهمية التفاعلات الأولية أحادية الخطوة:

لدراسة سرعة التفاعلات (حركية التفاعل)، تعتبر ثوابت السرعة للتفاعلات التي تحدث في خطوة واحدة ذات أهمية أكبر. بناءً على ذلك، يركز هذا القسم على مسارات تكوين منتجات $N_2H_3 + OH$ و $NH_2OH + NH_2$ و $H_2N_2HOH + H$ ، حيث تتطلب هذه التفاعلات اجتياز حالة انتقالية واحدة فقط.

➤ إعادة حساب ثوابت السرعة بسبب تناقض البيانات:

كما ذكر سابقاً، البيانات التي استخدمها Tang و al لحساب ثوابت السرعة غير متوافقة مع النتائج التي تم الحصول عليها باستخدام الأساليب المطبقة، لذلك تم حساب ثوابت السرعة لمسارات قنوات التحلل الرئيسية (main) باستخدام الطاقات المصححة. بناءً على ذلك، أُعيد حساب ثوابت السرعة لمسارات تكوين P1 و P2 على المستوى الحسابي CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p) حيث يتم الحصول على الطاقات على المستوى الحسابي:

CCSD(T)/6-311++G(d,p)//B3LYP/6-311G(d,p) ويتم أخذ دوال التقسيم على مستوى B3LYP/6-311G(d,p)

➤ مقارنة ثوابت السرعة النظرية مع القيم التجريبية:

تُظهر ثوابت السرعة النظرية التي تم الحصول عليها باستخدام نظريتي TST و VTST على المستوى الحسابي المذكور سابقاً اختلافات كبيرة مقارنةً بثوابت السرعة التي قيست تجريبياً من قبل مجموعات بحثية مختلفة حيث تم جمع ثوابت السرعة التي تم الحصول عليها على هذا المستوى في الجداول التكميلية.

➤ تصحيح حد الضغط العالي باستخدام عامل نفوذ: Shavit

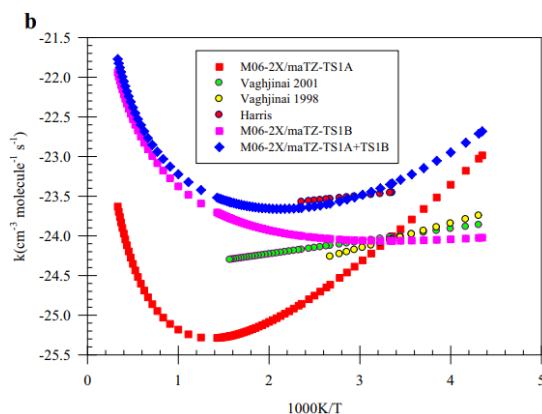
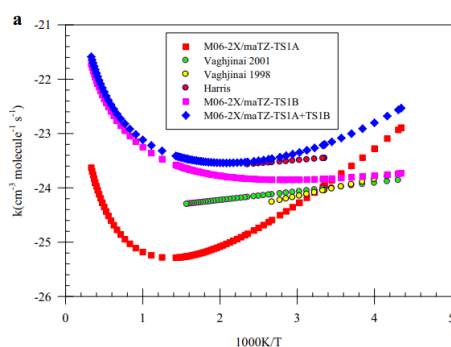
لإجراء تصحيح على ثوابت السرعة في حد الضغط العالي، تم أخذ عامل نفوذ Shavit بعين الاعتبار.

➤ ثوابت سرعة مسارات تكوين P1 باستخدام نظرية: TST

تبلغ قيم ثوابت السرعة للمركبات المتأثرة P1 الناتجة عن المسارين 1 و 2، والتي تم حسابها باستخدام نظرية TST على المستوى الحسابي UM06-2X/maTZ، ما يلي:

8.38×10^{-11} عند درجة حرارة 298.15 كلفن و 6.21×10^{-11} عند درجة حرارة 400 K و

6.27×10^{-11} عند درجة الحرارة 600K .



الشكل 3: تمثيل منحنى ARRHINOS لمسارات إنتاج P1 المحسوبة على مستوى M06-2X/maTZ

.a TST.

.b VTST.

المعدلات المذكورة باستخدام نظرية VTST هي:

$$\bullet 7.31 \times 10^{-11} \text{ cm}^3$$

$$\bullet 5.49 \times 10^{-11} \text{ cm}^3$$

$$\bullet 5.62 \times 10^{-11} \text{ cm}^3$$

تُظهر ثوابت المعدلات المحسوبة لدينا باستخدام نظريتي TST و VTST على مستوى

UM06-2X / maTZ تطابقاً جيداً مع ثابت المعدل الذي تم حسابه تجريبياً بواسطة Vaghjani وهو

نتائج HARRES حيث كانت ثوابت المعدل التي أبلغوا عنها باستخدام تقنية التألق الرنيني بالتحليل الضوئي عند درجات حرارة 298.15 و 400 كلفن هي على التوالي :

$$5.84 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ و } 6.69 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$$

توافق ثوابت المعدل المحسوبة لدينا في درجة حرارة الغرفة باستخدام نظريتي TST و VTST على

مستوى CCSD(T)/aTZ//MP2/maTZ بشكل ممتاز مع القيمة التجريبية التي وجدها العالم vighjani

كما هو موضح في الشكل 3 أ و ب على التوالي، تُظهر الرسوم البيانية للثوابت المعدل التي تم الحصول عليها تجريبياً وحسابياً توافقاً ممتازاً لمرافقات P1 .

تم رسم الرسوم البيانية لثوابت المعدل التي تم الحصول عليها بالتجربة والنظرية في الشكل 3 أ، ب على التوالي، للمركبات المتوسطة P1. ثوابت معدلات المركبات المتوسطة P2 من خلال المسارات 3 و 4 و 6 باستخدام نظرية TST على مستوى UM06-2X / maTZ في درجات حرارة 298.15 و 400 و 600 و 1000 و 3000 K هي 1.48×10^{-29} و 2.30×10^{-25} و 3.77×10^{-21} و 1.45×10^{-17} و 2.60×10^{-13} على التوالي.

ثوابت المعدلات للمركبات المتوسطة P3 عند درجات الحرارة المذكورة هي

$$1.96 \times 10^{-43} \text{ و } 8.72 \times 10^{-36} \text{ و } 3.27 \times 10^{-28} \text{ و } 6.57 \times 10^{-22} \text{ و } 8.38 \times 10^{-15} \text{ على التوالي.}$$

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

يتم حساب ثوابت المعدلات لهذه المركبات عند عدة مستويات ويتم سردها في جداول الملحق عند مقارنة ثوابت المعدل المبلغ عنها هنا بنتائج التجارب المختلفة، يُظهر ذلك أن الطرق المستخدمة لدينا دقيقة بشكل كافٍ في وصف حركية التفاعل المذكور.

▪ ثابت السرعة في الحد الأدنى للضغط:

يتم استخدام نظرية Rice-Ramsperger-Kassel-Marcus (RRKM).

يتم التأكد من ثابت سرعة التفاعل المحدد في الحد الأدنى للضغط وسلوكه في نطاق الانخفاض في نطاق درجة الحرارة 200K-800.

يتم تنفيذ آلية التنشيط الكيميائي في ثابت السرعة المعتمد على الضغط على النحو التالي:



حيث M هو المتفاعل الثالث.

إذا طبقنا تقريب حالة الاتزان على تركيز Cr^* ، فإن معدل التحول من Cr إلى المتفاعل النهائي هو :

$$K_i(T,P) = \frac{K_1 K_2}{K-1[M]+k_2} \dots\dots\dots (8)$$

- في الحد الأقصى للضغط ($[M] \rightarrow \infty$) ، يكون $k(T,p)$ من الدرجة الأولى.
- وفي الحد الأدنى للضغط حيث $[M] \rightarrow 0$ يكون $k(T,p)$ من الدرجة الثانية.

لذلك، في الضغط العالي والمنخفض، يمكن كتابة تعبيرات $k(T,p)$ في المعادلة (8) على النحو التالي:

$$k_\infty = \frac{k_1 k_2}{k-1} \quad ([M] \longrightarrow \infty) \dots\dots\dots (9)$$

$$k_0 = \frac{k_1 k_2}{k-1} \quad ([M] \longrightarrow 0) \quad \dots\dots\dots(10)$$

إذا قسمنا البسط والمقام من المعادلة (8) على $k-1[M]$ واستبدلنا معادلتنا (9) و(10) بها، نحصل على :

$$K_i(T,P) = \frac{K_\infty}{1 + \frac{K_\infty}{K_0}} \quad \dots\dots\dots (11)$$

أخيرا لحساب اعتماد الضغط على ثابت المعدل يتم استخدام العلاقة التالية :

$$K(T,P) = k_k(T) k_i(T,P) \quad \dots\dots\dots (12)$$

K : هو تصحيح النفق، و $K(T)$ هو ثابت التوازن المعتمد على درجة الحرارة.

باستعمال ثوابت المعدل المعتمدة على درجة الحرارة، تم استخدام معامل انتقال Shavitt لتصحيح ثوابت المعدل المعتمدة على الضغط.

نظرًا لأن جزيء النيتروجين هو أكثر الأنواع وفرة مقارنة بالجزيئات الأخرى في الغلاف الجوي، فإنه يستخدم كجسم ثالث في حساب $k(T,p)$ في دراسة تأثير الضغط على ثابت المعدل المعتمد على درجة الحرارة باستعمال معطيات lenard jones و σ (Å) و $\epsilon / k_B (K)$ ، كذلك متوسط كمية الطاقة المنقولة لكل تصادم

ان معطيات lenard jones للمفاعلات هي 4.230 \AA و 250.000 K بالنسبة الى N_2H_4 و 2.750 \AA و 80.000 K و OH و 3.798 \AA و 71.400 K ل N_2 .

○ $k_0(T)$: في حد الضغط الصفري، $P \rightarrow 0$ ، يسمى $k(T,p)/[N_2]$ ثابت معدل الضغط المنخفض.

ثوابت المعدل المحسوبة لدينا عند حد الضغط المنخفض في نطاق درجة حرارة 200 k – 800 في

الجدول التكميلي S31

تظهر النتائج أن $k_0(T)$ هو:

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

$$1.09 \times 10^{-32} \text{ و } 2.8 \times 10^{-32} \text{ و } 7.87 \times 10^{-32}$$

عند 298.15 K و 400 K و 600 K على التوالي.

لم يتم تحديد ثابت المعدل تجريبياً عند حد الضغط المنخفض لتكوين نواتج التفاعل الرئيسية.

ثوابت المعدل المحسوبة لدينا عند ضغوط مختلفة في نطاق درجة حرارة 800-200K

باستخدام المعادلة (11)، استنتجنا أن نسبة k_{∞}/k_0 مهمة في حساب $k(T,p)$.

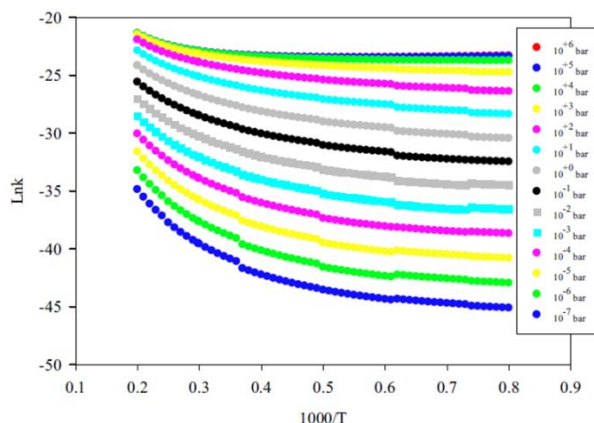
توضح النتائج المتعلقة بتأثير الضغط على مسارات التفاعل الرئيسية عند زيادة الضغط في نطاق درجة الحرارة

800-200 K في 298.15، 400، و 600 ، تبلغ هذه النسبة k_{∞}/k_0 مايقارب 38.8 ، 196.0 ، و 513.

على التوالي، مما يُظهر أن هذه النسبة تزداد مع نطاق درجة الحرارة المعتمدة.

من خلال تقليل ثوابت السرعة المحسوبة عند 298.15k وعند 1 bar ، يمكننا الحصول على نتيجة أدق

على تأثير الضغط على معدل التفاعل عند درجة حرارة الغرفة.



الشكل 4: هو رسم بياني يوضح ثابت السرعة المعتمد على درجة الحرارة والضغط لمسار إنتاج P1 لتفاعل



يوضح الرسم البياني أن ثابت السرعة يزداد مع زيادة درجة الحرارة، كما أنه يزداد مع زيادة الضغط. هذا يعني

أن معدل إنتاج P1 يزداد مع زيادة درجة الحرارة والضغط.

▪ التفسيرات الديناميكية الحرارية والحركية:

تم حساب انتالبي وطاقة جيبس لكل النواتج عند مستويات M06-2X/aQZ و MP2/aTZ في نطاق درجات الحرارة من 200 إلى 1200 k في الجدول 6.

تظهر النتائج أن مركبات P1 هي الأكثر استقرارًا من بين جميع نواتج تفاعل $N_2H_4 + OH$.

وهذا يعني أن مركبات P1 لديها أقل طاقة داخلية، وبالتالي فهي أقل عرضة للتحويل إلى نواتج أخرى

فإن مركبات P2 أكثر استقرارًا من مركبات P3.

➤ بناءً على النتائج التي تم الحصول عليها:

تزداد كمية استقرار منتجات P1 مع درجة الحرارة التي تتراوح من $-37.36 \text{ Kcal mol}^{-1}$ عند 200 k إلى

$-41.45 \text{ k Kcal mol}^{-1}$ عند 1200.

وفقًا لأصل طاقة جيبس الحرة ومعلومات الجدول 4، فإن استقرار P1 مرتبط بأنثروبيا التفاعل التي تزداد مع درجة الحرارة.

يساوي تغير $T\Delta S$ في نطاق درجة الحرارة 200-1200 k $4.51-0.78 \text{ kcal mol}^{-1}$

يلاحظ نفس السلوك لاستقرار مركبات P2، لكنه يتغير عكسيًا لمركبات P3 المرتبطة بأنثروبيتها الإلكترونية.

باختصار، مع زيادة درجة الحرارة، تكون P1 و P2 أكثر ملاءمة ليس فقط من الناحية الديناميكية الحرارية ولكن أيضًا من الناحية الحركية.

إنتاج مركبات P3 ملائم فقط حركيًا عند درجة حرارة أعلى من 1000 K.

8.1. مصير الهيدرازين في الغلاف الجوي:

تم حساب أعمار الهيدرازين في الغلاف الجوي على ارتفاعات من 0 إلى 50 تظهر النتائج أن:

- عملية نزع الهيدروجين هي خطوة رئيسية لتفكك الهيدرازين في الغلاف الجوي.

ينخفض ثابت المعدل المحسوب مع زيادة الارتفاع من $2.83 \times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1}\text{s}^{-1}$ و 3.52×10^{-14} .

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

لذلك، يتراوح العمر الافتراضي للغلاف الجوي المحسوب لتفكك الهيدرازين في بيئة الجذور الهيدروكسيلية من 32.80 إلى 1161.11 ساعة.

نصف عمر الهيدرازين التروبوسفيري في التفاعل مع الجذور الهيدروكسيلية حوالي 3 ساعات بافتراض وجود تركيز OH تقريبي يبلغ $106 \times 1.1 \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

قدر Vaghjani أن مصير N_2H_4 هو 6.6 ساعة عند درجة حرارة متوسطة تبلغ 279 K لوحظ اختلاف بين العمر الافتراضي المحسوب لدينا والنتائج التي حصل عليها Vaghjani تجريبياً.

لقد استخدموا ثابت المعدل الحد الأعلى للضغط بدلاً من ثابت المعدل المعتمد على الضغط لحساب العمر النصفى المذكور.

وبالتالي، إذا استخدمنا ثابت المعدل الحد الأعلى للضغط الذي حصل عليه بوا سطة Hack

($2 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$) عند 298 كلفن مع تركيز OH المبلغ عنه بواسطة Vaghjani ، فإن عمر N_2H_4 سيكون 12.6 ساعة.

ثابت المعدل الحد الأعلى للضغط الكلي المحسوب لدينا لمسارات حذف الهيدروجين هو

$8.39 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$ عند درجة حرارة الغرفة و إذا استخدمنا هذه القيمة مع التركيز المذكور OH، فإن عمر الهيدرازين هو 3.01 ساعة.

قدم Tuazon و AL حداً أعلى لنصف العمر المقابل في تفاعل $\text{N}_2\text{H}_4 + \text{O}_3$.

معامل المعدل المبلغ عنه عند 298 K هو $1.4 \times 10^{-16} \text{ cm}^3 \text{ molecule}^{-1} \text{ s}^{-1}$.

كان تركيز O_3 الذي استخدمه Tuazon حوالي $5 \times 10^{-11} \text{ molecule/cm}^3$ أقل لذلك، كان العمر الافتراضي المحصل لتفكك N_2H_4 حوالي 2.6 ساعة أو أكثر.

كما نعلم، فإن تركيز الأوزون في طبقة الأوزون أكبر من الأجزاء الأخرى من الغلاف الجوي، كما انه يتغير بتغير الارتفاع.

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

جدول 6: المعاملات الديناميكية الحرارية (كيلو كالوري لكل مول) للمركبات المضافة P1-P3 من تفاعل $N_2H_4 + OH$ على

سطح طاقة العزم الزوجي عند المستوى UMP2/aTZ/CCSD(T)/CBS

T/K	ΔE^0_T	ΔH	ΔG^0_T	$T\Delta S^0_T$	T/K	ΔE^0_T	ΔH^0_T	ΔG^0_T	$T\Delta S^0_T$
R \longrightarrow P1 ($N_2H_3 + H_2O$)									
200	-36.58	-36.58	-37.36	0.78	500	-36.48	-36.48	-38.62	2.14
250	-36.54	-36.54	-37.56	1.02	550	-36.49	36.49	-38.83	2.35
300	-36.49	-36.51	-37.77	1.26	600	-36.50	-36.50	-39.05	2.55
350	-36.49	-36.49	-37.98	1.49	700	-36.55	-36.55	-39.47	2.92
400	-36.48	-36.48	-38.19	1.71	900	-36.68	-36.68	-40.29	3.61
450	-36.47	-36.47	-38.40	1.93	1200	-36.94	-36.94	-41.45	4.51
R \longrightarrow P2 ($NH_2OH + NH_2$)									
200	1.82	1.82	0.90	0.92	500	1.91	1.91	-0.57	2.48
250	1.86	1.86	0.67	1.20	550	1.90	1.90	-0.81	2.72
300	1.89	1.89	0.42	1.47	600	1.89	1.89	-1.06	2.95
350	1.91	1.91	0.18	1.73	700	1.68	1.69	-1.61	3.29
400	1.92	1.92	-0.07	1.99	900	1.74	1.74	-2.51	4.25
450	1.92	1.92	-0.32	2.24	1200	1.37	1.39	-3.89	5.28
R \longrightarrow P3 ($NH_2NHOH + H$)									
200	28.85	28.85	30.86	-1.83	500	29.35	29.35	33.24	-3.89
250	28.88	28.88	31.13	-2.26	550	29.49	29.49	33.63	-4.14
300	28.93	28.93	31.58	-2.65	600	29.63	29.63	34.00	-4.36
350	27.97	27.01	32.01	-3.00	700	29.71	29.71	34.63	-4.93
400	29.11	29.11	32.43	-3.32	900	30.37	30.37	35.96	-5.59
450	29.22	29.22	32.85	-3.62	1200	31.37	31.37	37.66	-6.29

الفصل الثالث: دراسة حاسوبية لتفاعلات الهيدرازين في الغلاف الجوي مع جذر الهيدروكسيل

جدول 7: يمثل ثابت سرعة تفاعل $N_2H_4 + OH$ للمسار 1 + المسار 2، و تركيز جذور الهيدروكسيل في ارتفاعات مختلفة،

وأعمار N_2H_4 في الغلاف الجوي في محيط من الجذور الهيدروكسيلية الجوية كدالة للارتفاع

H/KM	T/K	P/Mbar	K^a	[OH]/ molecule cm ⁻³	T^b/s	k_{∞}/k
0	290.2	1013	2.83E -12	3.00E+06	1.18 E+05	4.14 E+01
5	250.2	495.9	4.03E-12	1.00 E+06	2.48E +05	4.46 E +01
10	215.6	242.8	7.17 E -12	5.70 E+05	2.45 E+05	3.70 E+01
15	198.0	118.8	9.12 E-12	4.20 E +05	2.61 E+05	7.28 E+01
20	208.0	58.18	3.80 E -12	3.70 E+05	7.11 E+05	1.27 E+02
25	216.1	28.48	1.73 E-12	6.60 E+05	8.78 E +05	1.91 E+02
30	221.5	13.94	8.66 E-13	1.60 E+06	7.22 E+05	3.42 E+02
35	228.1	6.826	4.13 E-13	3.70 E+06	6.54 E+05	6.28 E+03
40	240.5	3.341	1.60 E-13	6.80 E+06	9.21 E+05	1.31 E+03
45	251.9	1.636	6.34 E-14	8.50 E+06	1.86 E+06	2.78 E+03
50	253.7	0.801	3.52 E-14	6.80 E+06	4.18 E +06	4.90 E +03

الارتفاع (H) ، الضغط (P) ، درجة الحرارة (T) ، وتركيز (OH)

k^a هو ثابت السرعة الجزيئية عند درجة الحرارة والضغط المذكورين.

$\tau^b = 1 / k[OH]$ هو عمر N_2H_4 في التركيز الجوي لـ OH.

الخلاصة:

تمت دراسة حركية وآليات تفاعل $N_2H_4 + OH$ ، بما في ذلك المسارات باستخدام طرق الكم الكيميائي الدقيقة. تُظهر النتائج التي تم الحصول عليها بواسطة طرق مرجعية واحدة مثل B3LYP و M06-2X و MP2 و CCSD (T) بالاشتراك مع مجموعات الأساس ثلاثية الزيادات المضخمة (6-311++ 3df, g) و pd3 و aTZ أن هناك اختلافات صغيرة بين الطاقات النسبية المحسوبة لجميع النقاط الثابتة في الطرق المذكورة. تختلف الطاقات النسبية للطريقة متعددة المرجع (MR-MP2) مقارنة بالطرق المرجعية الواحدة، والتي تتوافق مع اختيار مساحة نشطة صغيرة لحالة $N_2H_4 + OH$ لذلك، فإن حساسية PES المضاعفة لتفاعل العنوان للطرق ومجموعات الأساس المطبقة ضئيلة. تُظهر حسابات ثابت السرعة أن مجموع ثابتات سرعة المسار الأول والثاني له سلوك اعتماد درجة حرارة سلبية عند درجات حرارة منخفضة حتى 540 K عند M06-2X/matZ. تعتمد هذه سلوكيات اعتمادًا إيجابيًا على درجة الحرارة في نطاق 560 k - 3000. تُظهر ثوابت معدل حد الضغط المحسوبة باستخدام نظريتين رسميتين، TST و VTST، أن نتائج مستوى M06-2X / matZD عند درجات حرارة منخفضة مستقلة تقريبًا عن درجة الحرارة، والتي تتفق تمامًا مع النتائج التجريبية أيضًا، تعتمد نفس النتائج المحسوبة بواسطة طريقة CCSD (T) مع العديد من مجموعات الأساس على الهياكل المحسنة لمستوى MP2 / aTZ عند درجات حرارة منخفضة على درجة الحرارة. من خلال تطبيق الضغط على مسارات P1، أثبتنا أن معدل التفاعل له سلوك يعتمد إيجابيًا على الضغط. بالإضافة على ذلك، فإن تغير ثابت المعدل مع الضغط يتناسب عكسيًا مع درجة الحرارة. يتم الإبلاغ عن المعلمات الديناميكية الحرارية لجميع المتفاعلات المقترحة ومناقشتها في مستويات .MP2/aTZ و CCSD(T)/CBS+UMP2/aTZ و CCSD(T)/CBS+M06-2X/aQZ, M06-2X/aQZ. يمكن إنتاج بعض المتفاعلات المتوقعة في الغلاف الجوي برقم موجة يزيد عن 700 cm^{-1} .

قائمة المراجع

- [1] «history of astronomy,» *britannica*, p. 01, 15 2021.
- [2] «أساسيات علم الفلك بالمقطيف» ,دكتور أنور آل محمد ,جامعى الفلك بالمقطيف «أساسيات علم الفلك المستوى الأول» p. 4. 1438هـ شوال
- [3] « "what is astronomy ? definition and hisory",» SPACE, 25 july 2023. [En ligne]. Available: <https://www.space.com/16014-astronomy.html>. [Accès le 25 july 2023].
- [4] 1438 هـ ,جامعة الفلك بالمقطيف ,أساسيات علم الفلك المستو الأول ,محمد .أ .د.
- [5] 1438هـ شوال ,جامعة الفلك بالمقطيف ,أساسيات علم الفلك p. 4.
- [6] «NAOJ,» 27 mars 2018. [En ligne]. Available: <https://www.nao.ac.jp/en/research/project/theory.html>. [Accès le 27 mars 2018].
- [7] N. English, «under lucky stars,» 17 fevrier 2020. [En ligne]. Available: <https://www.underluckystars.com/blog/astronomy-versus-astrology/>. [Accès le 17 fevrier 2020].
- [8] ج. ب. فردي، تاريخ علم الفلك القديم و الكلاسيكي، د. س. اللقيس، المحرر، دكتورة ريماء بركة ، pp. 20-23.
- [9] طارق كامل :الهيئة المصرية العامة للكتاب ،القاهرة ،Éd., عطا ،ا. 1, vol. 1, مقدمة في علم الفلك ،أسلانجيه .أ pp. 29-31, 2018,
- [10] «لمحة تاريخية عن تطور علم الفلك» chez *علم الفلك* , yarmouk university, 2019, pp. 70-73.
- [11] 2023, تاريخ علم الفلك ,سمير .م.
- [12] 2011, موسوعة علم الفلك ,سمور .ا. ع.
- [13] الكيمياء الفلكية.
- [14] 2020, مدخل الى علم الفلك ,محمد باسل الطائي
- [15] 2015, مقدمة في علم الفلك ,مجاهد .ا. ع. ع.
- [16] التميمي و عماد عبد العزيز مجاهد، الموسوعة الكونية الحديثة (قصة نشأة الكون)، 2019 /12/6546.
- [17] «فيزياء الفلك والفضاء» ,الاستاذ المساعد فريد مصعب مهدي
- [18] E. Dishoeck, «FARADAY DISCUSSIONS,» 2014. [En ligne]. Available: <http://dx.doi.org/10.1039/C4FD00140K>.
- [19] s. A. sandford et p. P. ... T. Michel Nuevo, «prebiotic Astrochemistry and the formation of molecules of astrobiolo,» *chemical Reviews*, p. 4617, 16 JUIN 2020.
- [20] M. Cunningham, et T.J. Millar & Y. Aikawa, eds, «ASTROCHEMISTRY:OVERIEW AND CHALLENGES,» 2017.

- [21] M. D. BECKER, «ASTROCHEMISTRY :THE ISSUE OF MOLECULAR COMPLEXITY IN ASTROPHYSICAL ENVIRONMENTS,» p. 2, 27 MAY 2013.
- [22] John wiley , Sons Ltd , The atrium, Southm Gate et Chichester, «Astrochemistry from astronomy to astrobiology,» 2006.
- [23] j. k. jorgensen, ARNNAUD BELLOCHE et ROBIN T .GARROD, «ASTROCHEMISTRY DURING THE FORMATION OF STARS,» pp. 5-6, 12 JUN 2020.
- [24] 2017, دوائر الكتب العلمية , علم الفلك للجميع , جي .ب .س .ا .
- [25] m. V. k. Hamed Douroudgari, «Atmospheric reaction of hydrazine plus hydroxyl radical». *scientific reports*.
- [26] Gaussian 09, 2017. مقدمة في الكيمياء الحاسوبية تمارين في استخدام برنامج , عساف .ج .غ .
- [27] «History Of Astronomy,» *britannica*, 1 2021.
- [28]
- [29] هـ .1438 د - أنور محمد :جمعية الفلك بالقطيف , أساسيات علم الفلك المستوى الأول
- [30] .دكتور أو :جمعية الفلك بالقطيف , أساسيات علم الفلك المستوى الأول
- [31] هـ .1438 شوال , دكتور أور آل محمد , جمعية الفلك بالقطيف «, أساسيات علم الفلك المستوى الأول» p. 4.
- [32] U. albrecht et B. ... bodo, «classical astronomy and the solar system,» chez *the new cosmos introduction an astronomy and astrophysics*, springer, 2001, p. 1.
- [33] «FARADAY DISCUSSION,» *ROYAL SOCIETY OF CHEMISTRY*, 2014.
- [34] jes k.jorgensen.

المخلص :

منذ فجر التاريخ، سحر الانسان بجمال الكون وسعى إلى فهم اسراره، وفي حين أتاحت التلسكوبات والمراسد مراقبة الظواهر الفلكية بدقة متزايدة، فإن فهم بنية الكون وتفاعلاته الكيميائية المعقدة في الوسط البين النجمي ظل تحديًا هائلًا، إلا أن الغريزة الطبيعية للإنسان في البحث والاكتشاف ساعدته على تفسير هذه التفاعلات الكيميائية وتركيب الأجرام السماوية واصل الكون، وقد أدى هذا إلى ظهور مجال الكيمياء الفلكية الذي يعتبر أحد أهم فروع علم الفلك وهو علم حديث النشأة، اعتمد علمائه على أدوات جديدة مثل الحاسوب، لنمذجة الكون واختبار نظرياتهم، وأيضاً بمساعدة نظريات علوم كيميائية أخرى مثل الفيزياء النووية، الكيمياء التحليلية والكيمياء، الحيوية وعلى الرغم من الظروف الصعبة والتحديات التي واجهت العلماء إلا أنهم استطاعوا التوصل الى نتائج حققت نجاحاً كبيراً.

في هذه المذكرة، نستكشف رحلة رائعة في عالم الكيمياء الفلكية، حيث تتضمن دراسة حاسوبية باستخدام طريقة الكيمياء الكمية (DFT(6-311G++(d,p))، لتفاعل أكسدة الهيدرازين N_2H_4 في الغلاف الجوي بواسطة جذر الهيدروكسيل OH، نبدأ بدراسة نظرية احتوت على بيبيولوجيا لبعض مفاهيم ونظريات علم الفلك مثل نظرية الانفجار العظيم والتطور البين النجمي، بالإضافة الى التعرف على المنظور التاريخي لكيمياء الفلك وكذلك وسائلها، بعد ذلك سنناقش كيفية استخدام الحاسوب بواسطة برنامج Gaussian 09 لنمذجة هذا التفاعل في ظل تغير كل من درجة الحرارة و الضغط.

وخلال دراستنا الحاسوبية، وجدنا أن طريقة DFT تمكنت من تحقيق نتائج دقيقة وسريعة، مما يساعد في فهم الظواهر الفلكية وتفسير النظريات بشكل أفضل في وقت قصير، وقد وجدنا أن قيمنا المتحصل عليها جد مقاربة مع قيم المقال المدروس.

الكلمات المفتاحية: الكيمياء الفلكية، علم الفلك، أكسدة الهيدرازين بواسطة جذر الهيدروكسيل في الغلاف الجوي، نظرية دالية الكثافة DFT، برنامج Gaussian09.

Summary:

Since the dawn of civilization, humans have been fascinated by the beauty of the universe and have strived to understand its secrets. With the advancement of technology, we have been able to observe astronomical phenomena with precision, yet understanding the complex chemical structure of the cosmos remained a significant challenge. However, humans' natural curiosity has driven them to explore these chemical reactions and the composition of celestial bodies, leading to the emergence of the field of astrochemistry.

In this memorandum, we will embark on an exciting journey into the world of astrochemistry, where we will study the oxidation reaction of hydrazine (N_2H_4) in the atmosphere by the hydroxyl radical (OH) using the quantum method DFT (6-311G++(d,p)). We will begin with a theoretical study that includes a review of some concepts and theories in astronomy, such as the Big Bang theory and stellar evolution. Then, we will delve into the historical perspective of astrochemistry and its tools.

Subsequently, we will discuss how to use the computer and the Gaussian 09 program to model this reaction under varying temperature and pressure conditions. Through our study, we found that the DFT method has enabled us to achieve accurate and rapid results, aiding in the understanding of astronomical phenomena and the interpretation of theories more effectively.

Keywords: astrochemistry, astronomy, oxidation of hydrazine by hydroxyl radical in the atmosphere, DFT method, Gaussian 09 program.

