

"ARABIC SUMMARY"



سبحانك يا علم لنا الا ما علمتنا انك انت العليم الحكيم
صلى الله العظيم

بسم الله الرحمن الرحيم

ملخص الرسالة

تشتمل هذه الرسالة على دراسة نظرية عن تأثير الأنواع المختلفة من المجموعات الاستبدالية في الخواص الطاقية للشقوق الحرة المركزة بكل من ذرة كربون أو ذرة سليكون . ولاستيضاح الصورة فقد استخدمت أنواعاً مختلفة من المجموعات الاستبدالية تشتمل على :

(١) مجموعات مانحة للإلكترونات مثل : مجموعة الأمين ومجموعة الهيدروكسيل وذرة الفلورين .

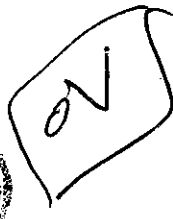
(٢) مجموعات ساحبة للإلكترونات مثل : مجموعة السيانيد .

(٣) مجموعات تشتمل على كل من النوعين السابقين معاً .

وقد قدمت الرسالة هذه الخواص في عدة خطوط :

(١) دراسة تأثير المجموعات الاستبدالية المختلفة في درجة ثبات الشقوق الحرة المدروسة، وذلك عن طريق حساب طاقة التثبيت اللازمة لكل شق (RSE).

(٢) دراسة الأشكال الهندسية المثالية لكل شق، ومدى تغير هذا الشكل الهندسي وتأثره بإدخال المجموعات الاستبدالية المختلفة. وقد استخدمت عدة طرق لتحديد هذا الشكل الهندسي، وذلك عن طريق حساب معامل الانعكاس، وهو المعامل الناتج من الفرق في الطاقة الكلية للشق في وضعه الأمثل وطاقته الكلية، عندما يكون هذا الشق مستوياً. أما الطريقة الأخرى



المرتب



جامعة الزقازيق - فرع بنها
كلية العلوم
قسم الكيمياء

دراسة عن طاقات

التكوين والتشكل في الفراغ لبعض

الشقوق الحرة مركزه بنوة كربون أو بنوة سيلكون

رسالة مقدمة من

مرقت محمود أحمد عاصم

بكالوريوس علوم - ماجستير علوم كيمياء

إلى قسم الكيمياء

كلية العلوم - جامعة الزقازيق - بنها

للحصول على درجة دكتوراه الفلسفة

في الكيمياء الفيزيائية

تحت إشراف

أ.د. ربيع حسن البرجيني

أستاذ الكيمياء الفيزيائية بكلية العلوم

جامعة القاهرة

د. إيمان طاهر جاد الكريم

مدرس الكيمياء العضوية

بكلية العلوم - جامعة بنها

د. أحمد سيد طلي

أستاذ مساعد الكيمياء الفيزيائية

بكلية العلوم - جامعة بنها