

# Study of Absorption Spectra, Fluorescence and Energy Levels of Fluorescein Dye

Afrah M. AL Hussainey<sup>a</sup> Salar Hussein Ibrahim<sup>b</sup> Talib M. Abbas ALShafie<sup>c</sup>

<sup>a</sup>Department of Physics, college of Science, University of Babylon, Babil, Iraq.

<sup>b,c</sup>Department of Physics, Education for pure sciences, University of Babylon, Babil, Iraq

afrahsherefy@yahoo.com Dr.Talib\_mohsen@yahoo.com

Submission date:- 22/1/2018

Acceptance date:- 29/1/2018

Publication date:- 20/9/2018

**Keywords:** Fluorescein dye, Absorbance, Fluorescence, Dye Laser.

## Abstract

The absorption and fluorine spectra of dissolved fluorescein solution in ethanol and different concentrations were studied. The optical properties (absorbance, permeability, linear absorption and refractive index, as well as time and fluoridation) were calculated. The results showed that a decrease in concentration leads to a decrease in absorption values and an increase in permeability values. This results in a decrease in the values of the absorption coefficient and refractive index. This is in accordance with Lambert's law. Also, the values of the fluorine are lower. The top of the emission spectrum is transferred to the longer wave lengths. The temporal age of fluoride decreases and the quantitative output increases, thus using this dye as an effective laser medium in liquid state lasers. The infrared spectroscopy of the dye was also studied using the (Gaussian 9) program.

## دراسة اطياف الامتصاص والفلورة ومستويات الطاقة لصبغة الفلورسين

أفراح محمد عبد الأمير<sup>١</sup> سalar حسين ابراهيم<sup>٢</sup> طالب محسن عباس

<sup>١</sup> قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة بابل، بابل، العراق.

<sup>٢,٣</sup> قسم الفيزياء، كلية التربية للعلوم الصرفة، جامعة بابل، بابل، العراق.

afrahsherefy@yahoo.com Dr.Talib\_mohsen@yahoo.com

## الخلاصة

درس في هذا البحث اطياف الامتصاص والفلورة لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتراكيز مختلفة، اذ تم حساب الخصائص البصرية (الامتصاصية، النفاذية، معامل الامتصاص والانكسار الخطيين وكذلك حساب العمر الزمني والنتاج الكمي للفلورة). تبين من النتائج ان نقصان التركيز يؤدي الى نقصان قيم الامتصاصية وزيادة قيم النفاذية مما يؤدي ذلك الى نقصان قيم معامل الامتصاص ومعامل الانكسار وهذا ما يتفق مع قانون لامبرت، كذلك تقل قيم شدة الفلورة وتزاح قمة طيف انبعاث الفلورة نحو الاطوال الموجية الاطول (red shift) وبالتالي يقل العمر الزمني للفلورة ويزداد النتاج الكمي، وبالتالي استخدام هذه الصبغة كوسط فعال ليزري في ليزرات الحالة السائلة. كذلك درس طيف الأشعة تحت الحمراء عملياً ونظرياً لهذه الصبغة باستخدام برنامج (Gaussian 9) للتعرف على أنماط الاهتزاز للصبغة المستخدمة.

الكلمات الدالة: صبغة الفلورسين، الامتصاصية، الفلورة، ليزر الصبغة.

## 1. المقدمة Introduction

ان الصبغة العضوية هي مركب هيدروكربوني غير مشبع ، ذات تركيب معقد نوعا ما وذلك لاحتوائها على سلسلة من ذرات الكربون التي ترتبط بأواصر مفردة ومزدوجة بشكل متعاقب و التي يطلق عليها نظام الكروموفور (Chromophore system) [1,2] ويتميز الكروموفور بامتصاصه للضوء في المنطقة فوق البنفسجية والمرئية (400-700 nm) مما يجعل الصبغة ملونة لكون انتقال الامتصاص ( $S_0 \rightarrow S_1$ ) يحدث في المنطقة المرئية [3]، فالكروموفورات هي المجموعة المسؤولة عن منح (Imparting) الصفة اللونية للجزيئة، لذلك تبدو جزيئة الصبغة لبعض الصبغات التي تمتص الطول الموجي (400 – 700 nm) (الضوء المرئي) بلون معين للعيان [4]، ولكل صبغة عضوية حزمة امتصاص وفلورة خاصة، و تثار بوساطة استعمال مصابيح ومضية أو باستعمال ليزر الحالة الصلبة مثل (ليزر الياقوت المضاعف التردد) او ليزر الحالة الغازية مثل ليزر ايون الاركون او ليزر التنتروجين [2,5].

## 2. الجزء النظري The Theoretical Part

### 2.1 الخصائص البصرية الخطية Linear optical properties

إن التفاعل الحاصل بين طبيعة وتوزيع الشحنات داخل المادة (الالكترونية الجزيئية والايونية) والأشعة الكهرومغناطيسية الساقطة على المادة تؤدي إلى ظهور الخصائص البصرية للمواد [6] .

إن عددا من العمليات يمكن أن يحدث عند سقوط شعاع كهرومغناطيسي على المادة وتفاعلها معاً ، حيث ان جزء من الاشعاع الضوئي يتحول إلى حرارة وذلك بامتصاصه (absorbed) من قبل المادة، أما الجزء الأخر يدعى بالإشعاع النافذ (transmitted) إذ يمر داخل المادة دون فقدها للطاقة، أما الجزء المتبقي من الإشعاع الضوئي ينعكس من سطح المادة (reflected) [7] .

للحصول على معلومات عن التركيب الداخلي للمادة وطبيعتها او اصورها يجب معرفة النفاذية والامتصاصية والانعكاسية للشعاع الكهرومغناطيسي الساقط على المادة، فمثلا حزم الطاقة ونوعية الانتقالات داخل المادة ويكون التعرف عليها بدراسة الطيف فوق البنفسجي (Ultraviolet) ، أما لمعرفة مجال التطبيقات العملية التي تستخدم فيها المواد يجب دراسة الطيف المرئي (Visible) [8,9].

### 1.1.2 الامتصاصية Absorbance (A)

إن الكمية الرياضية التي تربط كثافة الجسيمات (التركيز) في العينة وسمك العينة (طول المسار البصري) هي الامتصاصية (A) أو الكثافة البصرية (Optical Density).

$$A = \log(I_0 / I) \dots \dots \dots (1)$$

حيث I : هي شدة الضوء عند طول الموجة  $\lambda$  الذي يمر خلال العينة ( شدة الضوء النافذ)، و  $I_0$  : هي شدة الضوء قبل دخوله إلى العينة أو شدة الضوء الساقط.

يسبب امتصاص المادة للأشعة الساقطة نشاطاً إلكترونياً قد يؤدي إلى تفكك جزيئاتها إذا كانت قيمة الطاقة الممتصة أكبر من قيمة تفكك إحدى الأواصر أو انتقالها إلى مستوى طاقة أعلى إذ إن احتمالية الامتصاص تزداد بزيادة تركيز المادة في مستوى الطاقة الواطئ وبزيادة عدد فوتونات الأشعة الساقطة [9]. إن احتمالية امتصاصية الفوتون تتناسب طردياً مع تركيز الجزيئات الممتصة في العينة وسمك النموذج (طول المسار البصري)، حسب قانون بير- لامبرت الذي هو علاقة تجريبية تربط امتصاص الضوء بخصائص المادة التي يعبر الضوء من خلالها . وينص القانون أن عدد الجزيئات الماصة في المادة تتناسب طردياً مع جزء الإشعاع الممتص المار من خلالها فاذا مرت الإشعة في محلول معين فإن كمية الضوء الممتص أو النافذ تكون دالة أسية لتركيز المذاب [8]. وكما في المعادلة:

$$I = I_0 e^{-\alpha_{op} C_m L} \dots \dots \dots (2)$$

إذ إن:  $\alpha_{op}$  : تمثل معامل الامتصاص البصري، و L : طول المسار البصري و  $C_m$ : التركيز المولاري.

ويمكن كتابة المعادلة بالشكل الآتي:

$$\ln I_0 / I = \alpha_{op} C_m L = A \dots \dots \dots (3)$$

إذ يمكن تطبيق قانون بير- لامبرت ( Lambert – Beer Law ) في مختلف المناطق الطيفية كالأشعة فوق البنفسجية والمرئية وغيرها بشرط ان يكون الإشعاع المستخدم أحادي اللون (Monochromatic Light) [10].

### 2.1.2 معامل الامتصاص ( $\alpha$ ) Absorption Coefficient

يمكن تعريف معامل الامتصاص على أنه نسبة التناقص في فيض طاقة الإشعاع الساقط بالنسبة لوحدة المسافة باتجاه انتشار الموجة داخل الوسط، ويعتمد معامل الامتصاص على طاقة الفوتون (hv) وعلى خواص المادة [11]. وبحسب قانون بير- لامبرت فإن معامل الامتصاص هو:

$$\text{Log} ( I_0 / I ) = 2.303 A = \alpha_0 d \quad \dots \dots \dots (4)$$

$$\alpha_0 = 2.303 A / d \quad \dots \dots \dots (5)$$

إذ تمثل d : السمك (سمك العينة) للعبوه التي توضع فيها المادة.

### ٣.١.٢ النفاذية Transmittance (T)

تعرف النفاذية للوسط (transmittance –T) على أنها "النسبة المئوية لشدة الضوء النافذ (I) إلى شدة الضوء الساقط (I<sub>0</sub>)"، أو أنها " طاقة الإشعاع النافذ من الوسط إلى طاقة الإشعاع الساقط عليه" [12, 13]:

$$T = ( I / I_0 ) \quad \dots \dots \dots (6)$$

واستنادا إلى قانون بير- لامبرت فإن النفاذية تتناقص كلما زاد التركيز المولاري C<sub>m</sub> وطول المسار البصري L الذي يمر خلاله الضوء [14].

أما نفاذية الوسط ترتبط بامتصاصية المحلول (Absorbance –A) بالعلاقة الآتية:

$$A = -\log (I / T) = -\log (I / I_0) = \log (I_0 / I) \dots \dots \dots (7)$$

ومن هذه العلاقة نلاحظ إن النفاذية T تزداد كلما قلت امتصاصية الوسط A.

### ٤.١.٢ معامل الانكسار Refractive Index (n)

ينتقل الضوء بجميع أطواله الموجية بأقصى سرعة له في الفراغ وهي كمية ثابتة وتقل هذه القيمة في أي وسط آخر , وإنها تتغير في الأوساط المادية باختلاف الأطوال الموجية.

وتعرف النسبة بين سرعة الضوء في الفراغ إلى سرعته في أي وسط معين لطول موجة معينة بمعامل الانكسار الوسط لتلك الموجة [12].

$$n = c / v \quad \dots \dots \dots (8)$$

حيث: c: سرعة الضوء في الفراغ و v : سرعة الضوء في الأوساط المادية .

إن معامل الانكسار غير ثابت ويعتمد على طول الموجة الكهرومغناطيسية. فضلا عن بعض المواد التي يختلف فيها معامل الانكسار على وفق اتجاه تقدم الموجة الكهرومغناطيسية في المادة، وتستعمل هذه المواد لتغيير اتجاه استقطاب تلك الأمواج [15]. إن معامل الانكسار يبين مدى تأثر المادة بالأمواج الكهرومغناطيسية. عند سقوط الأشعة الكهرومغناطيسية على مادة ما فإنها تعمل على ازاحة الشحنات في المادة عن مواقعها الأصلية مولدة بذلك ثنائي قطب فاذا كان (v) هو تردد المجال الكهربائي المتناوب والتابع للموجة الكهرومغناطيسية الساقطة فإن الاستقطاب الكهربائي للجزيئة سوف يتذبذب بنفس التردد (v), وإن جزء من طاقة الموجة الساقطة سوف يتحول إلى طاقة اهتزازية لثنائي القطب الكهربائي المتولد, وبذلك تنقص سعة الموجة الساقطة, وعلى فرض أن الفقدان في الطاقة يسبب تذبذب الثنائيات بشكل قليل, إلا أن فعل التأخير الحاصل في إعادة الإشعاع سيقلل من سرعة الضوء, ومن ثم يقال إن المادة تمتلك معامل الانكسار.

ومن هنا يتضح إن الاستقطاب في المادة بفعل سقوط الأشعة الكهرومغناطيسية عليها مقياس لمعامل الانكسار لهذه المادة , فكما كان الاستقطاب كبيرا كان فعل التأخير أكبر وكلما كانت سرعة الضوء في المادة أصغر كان معامل الانكسار أكبر , والمواد التي لا تمتلك استقطاباً لا تمتلك أي تأخير في إعادة الضوء, وبالتالي فإن معامل انكسارها (n=1) . كلما ازدادت كثافة الوسط زاد معامل الانكسار للمادة . وايضا ليس لمعامل الانكسار وحده تميزه . ويمكن الحصول على معامل الانكسار من المعادلة الآتية: [16]

$$n_o = \frac{1}{T} \left[ \left( \frac{1}{T^2} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad \dots \dots \dots (9)$$

### ٥.١.٢ الكفاءة الكمية Quantum Efficiency

إن المنافسة بين الفلوره وعمليات التحول الأخرى للحالة الأحادية المتهيجة S<sub>1</sub> تعود لما يسمى بالكفاءة الكمية للفلورة (q<sub>FM</sub>)، والتي تمثل النسبة بين عدد فوتونات الفلوره المنبعثة إلى عدد فوتونات الضخ الممتصة من قبل جزيئة الصبغة. وتكون (q<sub>FM</sub>) للصبغات الليزرية بين (0.5-1) اعتماداً على المذيب، درجة الحرارة أو غيرها من الظروف المحيطة [17, 18]، وتعطى بالعلاقة الآتية:

$$q_{FM} = \int_0^{\infty} F(v) dv \quad \dots \dots \dots (10)$$

حيث يمثل v العدد الموجي.

## Florescence ٦.١.٢ الفلورة

عندما تمتص المادة الاشعاع الكهرومغناطيسي فإنها تثار وتزداد طاقتها، ويمكن لهذه المادة المثارة ان تبتث فوتونات مختلفة الطاقة حتى تصل الى الحالة المستقرة، أي انه عند عودة تلك الجسيمات الى مستويات الطاقة الاقل تشع فوتونات ذات طاقة محددة وطول موجي موحد، ولكن في بعض الاحيان يمتص النظام المشع كماً عالياً من الطاقة والذي يثير بعضاً من الالكترونات الى مستويات الطاقة الاعلى بكثير من مستوى استقرار الجزيء، وفي هذه الحالة يمكن للنظام العودة الى مستوى الاستقرار مباشرة بإطلاق فوتونات لها طاقة الفوتونات الممتصة نفسها او يمكن للالكترونات العودة الى الحالة المستقرة على مراحل متسلسلة بإطلاق فوتونات ذات طاقة مقابلة لفرق الطاقة بين مختلف المراحل أي ذات طاقة اقل وطول موجة اطول من الممتصة اصلا وهذا ما يعرف بالاستواء fluorescence [19,20].

## ٢.٢ برنامج (Gaussian 09)

برنامج (Gaussian 09) هو من بين سلسلة من البرامج حملت الاسم نفسة لموديلات مختلفة. وهو أحد برامج التركيب الإلكتروني، يستخدم من قبل المهندسين والكيميائيين والفيزيائيين، يعدّ هذا البرنامج من أفضل البرامج المعروفة لإجراء الحساب التام وحساب دوال الكثافة DFT لإيجاد الطاقة الكلية للذرات أو الجزيئات مختلفة الأحجام والهيئات وإيجاد الشكل الهندسي المتوازن لها وإيجاد الصفات الجزيئية والخواص الفيزيائية الأخرى [21]. يقوم برنامج (Gaussian 09) بتخمين الطاقات والتركييب الجزيئية والترددات الاهتزازية للأنظمة الجزيئية مبتدأ من القوانين الأساسية لميكانيك الكمي طالما أن الخصائص الجزيئية الأساسية مشتقة من هذه الأنواع من الحسابات، ويمكن أن تستخدم لدراسة الجزيئات والتفاعلات تحت مدى واسع من الظروف، مشتمل على المكونات المستقرة والمركبات التي من الصعب أو المستحيل ملاحظتها تجريبياً مثل وسطيات التفاعل وتراكب الحالة الانتقالية.

## ٣. الجزء العملي

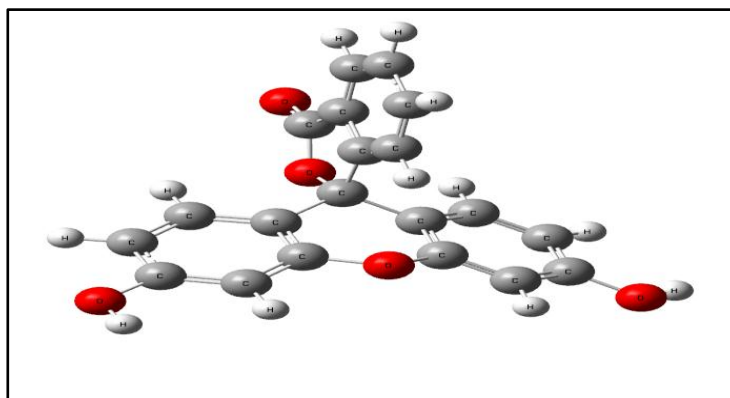
## ١.٣ الأجهزة المستخدمة

سجل طيف الامتصاص باستخدام مطياف ثنائي الحزمة (UV-Visible- Spectrophotometer) ويغطي هذا المطياف منطقة واسعة من الطيف الكهرومغناطيسي من المنطقة فوق البنفسجية حتى منطقة تحت الحمراء القريبة ، ويشتمل الجهاز على مصدرين للتهييج هما مصباح الديوتيريوم (Deuterium Lamp) ويغطي المنطقة الواقعة ضمن الأطوال الموجية (190-360) nm ومصباح التنكستن (Tungsten Lamp) ويغطي توزيعاً طيفياً ضمن المنطقة الواقعة للأطوال الموجية (360-1100nm). كذلك أستخدم جهاز مطياف الفلورة من نوع F96PRO ، لقياس أطراف الفلورة لمحلول صبغة الفلورسين . ويتكون من مصدر ضوء (150 Wat Xenon arc lamp) ومعدل طيف الانبعاث والتهييج (200 -700 nm) ونسبة المسح (200, 400,600 nm/min) وكاشف (High sensitivity- photomultiplier tube (PMT)

## ٢.٣ المواد المستخدمة Material Used

## أ- صبغة الفلورسين Fluorescein Dye

تكون هذه الصبغة بشكل مسحوق بلوري Orange وتبدو هذه الصبغة بشكل محلول مصفر Yellow عند إذابتها في المحاليل القاعدية المخففة جداً، وتذوب في الحوامض المخففة جداً. والصبغة الكيميائية لصبغة الفلورسين هي (C<sub>20</sub>H<sub>12</sub>O<sub>5</sub>) والوزن الجزيئي (332.311g/mol) والشكل (١) يوضح التركيب الجزيئي للفلورسين.



الشكل (١) التركيب الجزيئي لصبغة الفلورسين

## ب - الايثانول

مذيب كيميائي عضوي كحولي والصيغة الجزيئية له:  $C_2H_5OH$ . وهو مركب قطبي يمتاز بخاصية تكوين الرابطة الهيدروجينية بين جزيئاته إذ إنه يحتوي على مجموعة الهيدروكسيل التي تعمل على تزايد تماسك الروابط. وهو سائل عديم اللون قابل للتطاير والوزن الجزيئي له (46.07 gm/ mol) وكثافته ( $0.789 \text{ gm/cm}^3$ ).

## ٣.٣ تحضير المحاليل

لتحضير محلول صبغة الفلورسين بتركيز ( $1 \times 10^{-3}$  ML)، تمت إذابة (0.0033gm) من مسحوق الصبغة في حجم ( $10 \text{ cm}^3$ ) من مذيب الايثانول (Ethanol) الذي أستخدم في البحث وفقاً للعلاقة:

$$Wm = \frac{C \times V \times M.W}{1000} \dots \dots \dots (11)$$

حيث:

$w_m$ : وزن الصبغة اللازم للحصول على التركيز المطلوب بوحدة gm

C: التركيز المراد تحضيره بوحدة ML

V: حجم المذيب  $\text{cm}^3$  اللازم اضافته إلى المادة.

M.W: الوزن الجزيئي للصبغة المستخدمة gm/ mol.

ولتحضير تراكيز أخف ( $1 \times 10^{-5}$ ) ( $1 \times 10^{-4}$ ) من التركيز الذي تم تحضيره يتم استخدام العلاقة الآتية والتي تسمى بعلاقة التخفيف:

$$C_1V_1 = C_2V_2 \dots \dots \dots (12)$$

حيث:

$C_1$ : التركيز الاول (العالي).

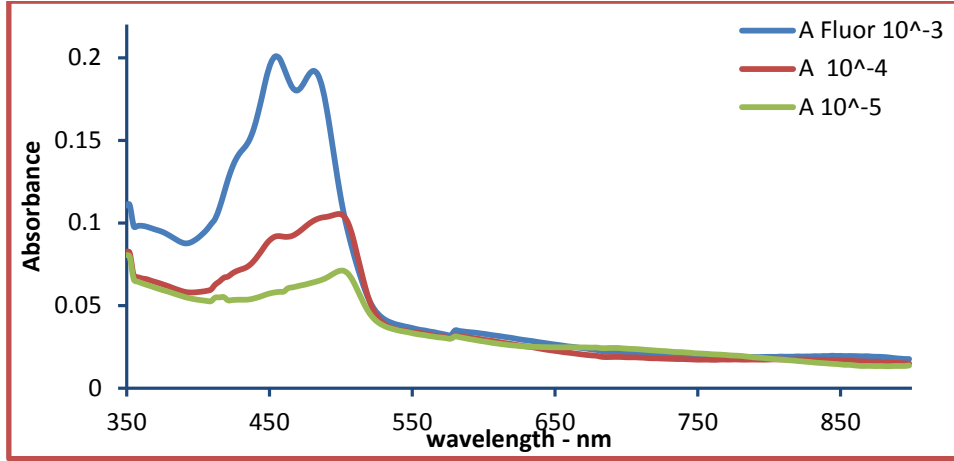
$C_2$ : التركيز الثاني (الأخف).

$V_1$ : الحجم اللازم من التركيز الاول.

$V_2$ : الحجم اللازم اضافته للتركيز الاول للحصول على التركيز الثاني.

## ٤. الحسابات والنتائج Calculation and Results

درست أطيف الامتصاص لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في مذيب الايثانول وبتراكيز مختلفة ( $10^{-3}, 1 \times 10^{-4}, 1 \times 10^{-5}$  ML) باستخدام مطياف الأشعة المرئية وال فوق البنفسجية (UV -Visible Spectrophotometer) كما هو موضح في الشكل (2) والجدول (١).



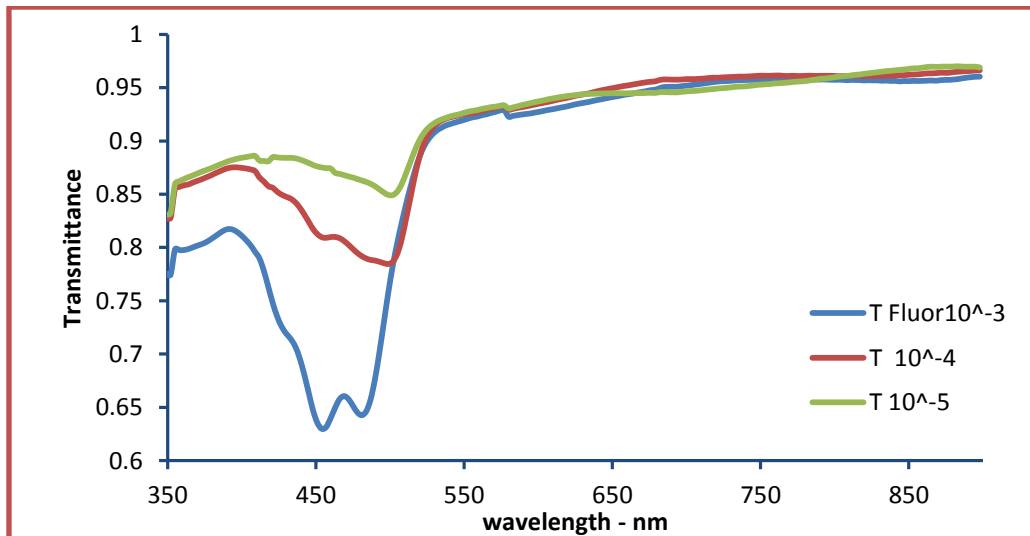
الشكل (2) منحنيات طيف الامتصاصية لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتركيز مختلفة.

جدول (1) الامتصاصية عند الأطوال الموجية العظمى للصبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتركيز مختلفة

C (ML)	$\lambda_{max}$ (nm)	A
$1 \times 10^{-3}$	451	0.1968
$1 \times 10^{-4}$	493	0.1042
$1 \times 10^{-5}$	496	0.0698

نلاحظ من الجدول ان شدة الامتصاص تزداد بزيادة التركيز وهذا ينطبق مع معادلة بير لامبرت للامتصاص والزيادة في التركيز المولاري للصبغة يؤدي الى تشكيل الدايمر التي تنتج من التقابل المعكوس لجزيئتي مونمر وهي المسؤولة عن التغير في شكل طيف الامتصاص لمعظم محاليل الصبغات.

ومن نتائج أطياف الامتصاص أمكن الحصول على أطياف النفاذية (Transmission) وكما هو موضح بالشكل (3) والجدول (2).



الشكل (3) منحنيات طيف النفاذية لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتركيز مختلفة.

جدول (2) النفاذية عند الأطوال الموجية العظمى للصبغة الفلورسين المذابة في الإيثانول وبتراكيز مختلفة

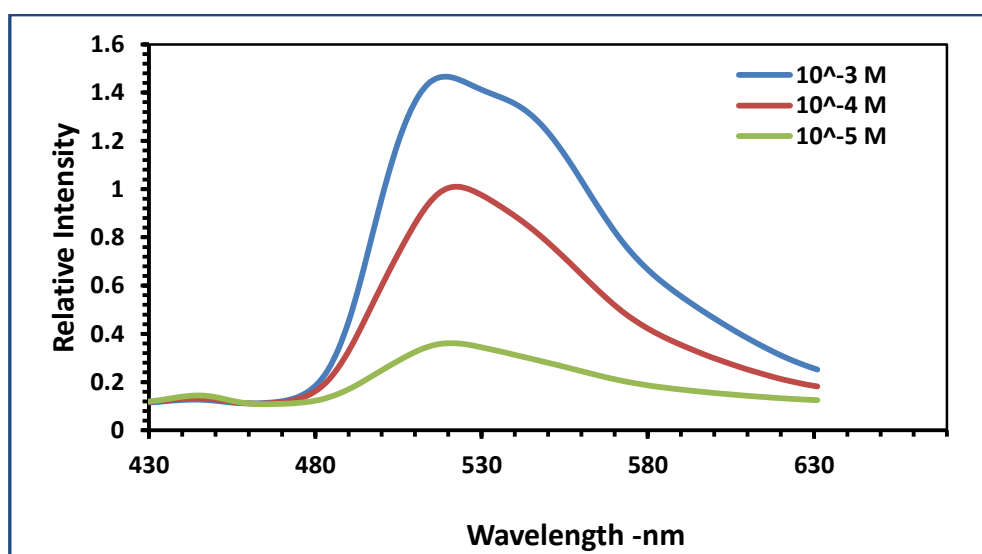
C (ML)	$\lambda_{max}$ (nm)	T
$1 \times 10^{-3}$	451	0.6355
$1 \times 10^{-4}$	493	0.7865
$1 \times 10^{-5}$	496	0.8514

وبعد الحصول على نتائج الامتصاصية والنفاذية حسب معامل الامتصاص ( $\alpha_0$ ) ومعامل الانكسار ( $n_0$ ) الخطيين للنماذج المحضرة المعادلتين (5) و (9) وكما هو موضح في الجدول (3).

جدول (3) قيم معامل الانكسار الخطي والامتصاص الخطي لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الإيثانول وبتراكيز مختلفة

C(ML)	$\alpha_0(\text{cm})^{-1}$	$n_0$
$1 \times 10^{-3}$	0.17	1.85
$1 \times 10^{-4}$	0.16	1.80
$1 \times 10^{-5}$	0.15	1.76

قيست أطياف الفلورة للنماذج المحضرة لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الإيثانول وبتراكيز مختلفة باستخدام مطياف الفلورة (Spectrofluorometer) وكانت نتائج القياسات كما موضح في الشكل (4) والجدول (4).



الشكل (4) منحنيات طيف الفلورة لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الإيثانول وبتراكيز مختلفة.

جدول (4) قيم شدة الفلورة عند الأطوال الموجية العظمى لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتراكيز مختلفة.

C (ML)	$\lambda_{\max}$ (nm)	Relative Intensity
$1 \times 10^{-3}$	523	1.4655
$1 \times 10^{-4}$	517	0.9815
$1 \times 10^{-5}$	514	0.3465

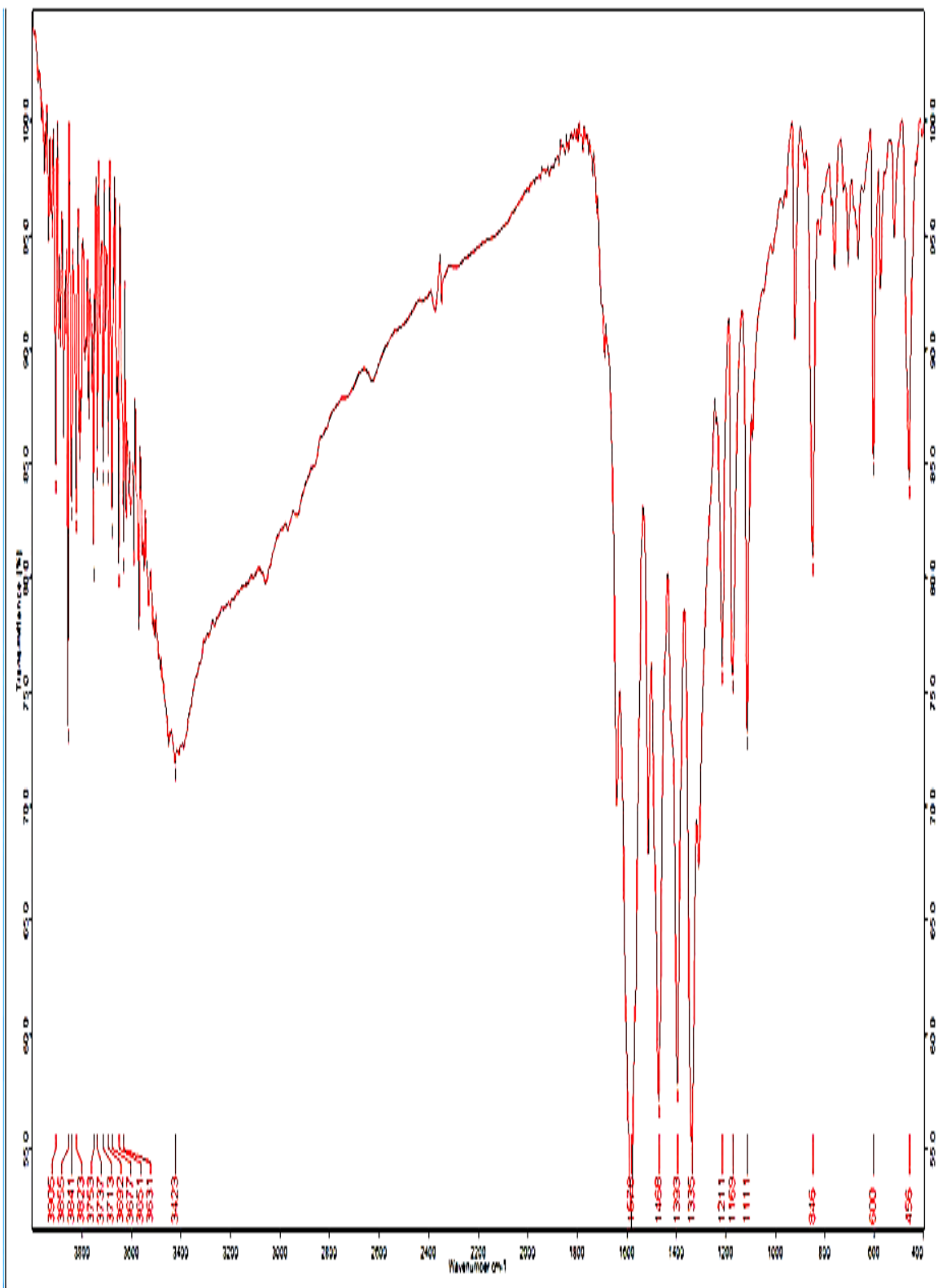
ومن نتائج أطياف الفلورة أمكن حساب العمر الزمني للفلورة ( $\tau_f$ ) (fluorescence lifetime) وكذلك الناتج الكمي للفلورة ( $Q_f$ ) (fluorescence Quantum Yield) وكانت النتائج كما موضح في الجدول (4).

جدول (4) العمر الزمني والناتج الكمي للفلورة لمحلول صبغة الفلورسين المذابة في الايثانول وبتراكيز مختلفة.

C (ML)	$\tau_f$ (ns)	$Q_f$
$1 \times 10^{-3}$	0.31	0.60
$1 \times 10^{-4}$	0.30	0.93
$1 \times 10^{-5}$	0.19	0.97

قيس طيف الأشعة تحت الحمراء لصبغة الفلورسين وبمدى  $(200 - 4000) \text{ cm}^{-1}$  والذي يمثل المنطقة المتوسطة للأشعة تحت الحمراء (Mid - IR Spectrum) وذلك باستخدام مطياف الأشعة تحت الحمراء (F.T.I.R Spectroscopy) وبه أمكن حساب معظم أنماط الاهتزاز الجزيئية وشداتها لصبغة الفلورسين وكما في الشكل (5) و الجدول (5).



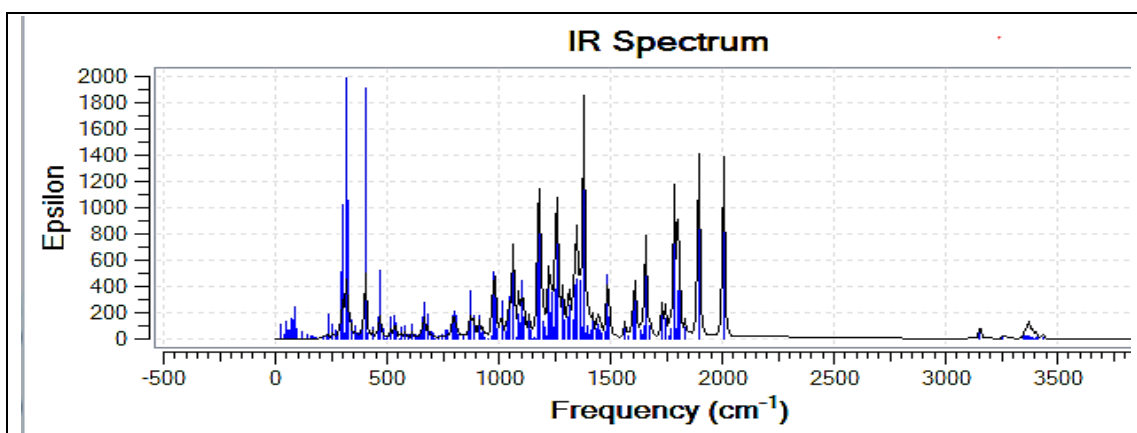


الشكل (5) طيف الاشعة تحت الحمراء لصبغة الفلورسين والمقاس عملياً

جدول (5) أنماط الاهتزاز لجزيئة الفلورسين وشداتها المقاسة عملياً .

Mode	Wave No. (cm <sup>-1</sup> ) Exp.	Intensity Exp.
C – H <sub>str</sub>	3823	0.07
C – O <sub>ben</sub>	3423	0.15
C – H <sub>o-o-p.def</sub>	1570	0.30
C – C <sub>str</sub>	1468	0.24
C – H <sub>i-o-p.def</sub>	1393	0.23
C = C <sub>str.</sub>	1335	0.25
O – H <sub>ben</sub>	1211	0.11
C – H <sub>o-o-p.def</sub>	1169	0.04
C – C <sub>str</sub>	1111	0.13
C – H <sub>ben</sub>	846	0.09
C – O <sub>ben.</sub>	600	0.07
C – H <sub>ben.</sub>	456	0.075

نظرياً يمكن الحصول على أنماط الاهتزاز وشداتها باستخدام برنامج (Gaussian 09) والذي يقيس لأنماط الاهتزاز بالحالة الغازية الاحادية للجزيئة كما في الشكل (6) والجدول (6) .



الشكل (6) طيف الاشعة تحت الحمراء لصبغة الفلورسين والمقاس نظرياً.

جدول (6) انماط الاهتزاز لجزيئة الفلورسين وشداتها المقاسة نظرياً

Mode	Wave No. (cm <sup>-1</sup> ) Theo.	Intensity Theo.
C – H <sub>str</sub>	3438	0.07
C – O <sub>ben</sub>	3408	0.14
C – H <sub>o-o-p.def</sub>	1564	0.37
C – C <sub>str</sub>	1479	0.19
C – H <sub>i-o-p.def</sub>	1396	0.21
C = C <sub>str.</sub>	1345	0.30
O – H <sub>ben</sub>	1218	0.11
C – H <sub>o-o-p.def</sub>	1170	0.08
C – C <sub>str</sub>	1139	0.17
C – H <sub>ben</sub>	866	0.10
C – O <sub>ben.</sub>	630	0.05
C – H <sub>ben.</sub>	491	0.07

لقد قيست الشدة (Intensity) لهذه الأنماط الاهتزازية نظرياً، باستخدام برنامج (Gaussian 09)، فالانتقال الذي يشمل تغيراً كبيراً في قطبية الجزيئة، يعطي امتصاصاً ذا شدة عالية، والعكس صحيح. ويعزى الاختلاف الناتج، إلى أن هذا البرنامج يأخذ بالحسبان الحالة الأحادية (Monomer)، فيما تكون القياسات العملية للحالات المتعددة الجزيئات، وبالتالي يتجاوز البرنامج تأثير الجزيئات الأخرى على الجزيئة الخاضعة للدراسة فنلاحظ المنطقة cm<sup>-1</sup> (3900 – 3800) هي المنطقة الخاصة بتمدد مط (Stretch) الأصرة، والتمدد (المط) بصورة عامة، يحتاج إلى طاقة أعلى، ولهذا تحدث اهتزازات المط عند أعداد موجية أعلى (طول موجي أقصر) من اهتزازات الانحناء للمجموعة نفسها، ويعتمد تردد اهتزازات المط والانحناء بصورة كبيرة على كتل الذرات المهتزة، فكلما كانت الذرات أخف وزناً، كان تردد اهتزازها أعلى.

#### ٥. الاستنتاجات

نلاحظ من دراسة الخصائص الطيفية لصبغة الفلورسين المذابة في الإيثانول ان نقصان التركيز يؤدي الى ظهور اطياف ذات قمم نقل شدتها وتتجه نحو الأطوال الموجية الأطول (red shift) وقد أظهرت هذه الصبغة بأن اعلى شدة نسبية في قمة طيف الامتصاص كانت عند الطول الموجي (484 nm) عند التركيز

بينما أقل شدة نسبية للامتصاص كانت للتركيز الأقل للصبغة في المحلول وتحديدًا عند التركيز ML (1x10<sup>-5</sup>) وعند الطول الموجي (496 nm)، ويعزى ذلك الى زيادة عدد الجزيئات الذي يؤدي الى زيادة احتمالية الامتصاص وهذا يؤكد الامتصاص الحقيقي للصبغات ويتفق مع قانون بير – لامبرت. تبين النتائج أيضاً ان نقصان التركيز يؤدي الى نقصان شدة اطياف الفلورة واتجاهها نحو الأطوال الموجية الاقصر (blue shift)، كذلك لوحظ ان نقصان التركيز يؤدي الى تقليل زمن عمر الفلورة مما يؤدي ذلك الى زيادة الناتج الكمي للفلورة وبالتالي يمكن استخدام هذه الصبغة كوسط فعال في ليزرات الصبغة.

كذلك درست المستويات الطاقية التذبذبية نظرياً وعملياً فقد تم الحصول على (12) نمط من انماط الاهتزاز نظرياً وكانت ابرز هذه الانماط والتي تعد من المجاميع الاساسية وهي النمط الاهتزازي (C-H)<sub>str.</sub> عند العدد الموجي (3823 cm<sup>-1</sup>) و (C-C)<sub>str.</sub> عند العدد الموجي (1468) cm<sup>-1</sup> و (O-H)<sub>ben.</sub> عند العدد الموجي (1211 cm<sup>-1</sup>) و (C-O)<sub>ben.</sub> عند العدد الموجي (600 cm<sup>-1</sup>) ومن نتائج دراسة المستويات الطاقية الجزيئية الاهتزازية لاحظنا تطابقاً ملحوظاً في نتائج انماط الاهتزاز المقاسة عملياً ونظرياً مع بعض الاختلاف النسبي في قيم شداتها.

## CONFLICT OF INTERESTS

**There are no conflicts of interest.**

## ٦- المصادر

- [1] W.Demtroder, "Laserspectroscopy", Springer-Verlag New York, pp. 336-350, 1981.
- [2] M.D.Lumb, "Lumiescence Spectroscopy", Academic Press London, 1978.
- [3] Ethan Sahar and David Treve, IEEE J. QE 13(12), pp. 692- 967 , 1977.
- [4] Joseph T. Verdeyen "Laser Electronics", Printice-Hall, 1986.
- [٥] سهام عفيف قندلا، "فيزياء الليزر و بعض التطبيقات العملية"، 1987.
- [6] J. Klinowski, "High-Resolution Molecular Spectroscopy Electronic Spectroscopy", University of Cambridge , 2005.
- [7] حسن الشربيني , بتول الخياط , صبحي كمال حسون , " البصريات الفيزيائية " , جامعة بغداد \ كلية التربية , ١٩٨٢ .
- [8] Grant, R. Fowels, " Introduction to modern optics" , holt Rinehart and Winston , 1975.
- [9] J. Klinowski, "High-Resolution Molecular Spectroscopy Electronic Spectroscopy", University of Cambridge , 2005.
- [10] M.Wang, Z. Lin and G. Zhai, "Optical linearity and nonlinearity of ZnSe nanocrystals embedded in epoxy resin matrix investigated by z-Scan technique" , Ceramics International , 34, 1073–1076, 2008.
- [11] Hollas, J.M. , "Modern Spectroscopy" John Wiley and sons Ltd, The Atrium, Southern Cate Chionester, west Sussex PO19 8SQ, England , 2004.
- [12] M . Parikh, "Absorption Spectroscopy of Organic Molecules", Adison-Wesleg, 1974.
- [13] W. Demtröder, "Atoms ,Molecules and Photons", Springer Berlin Heidelberg New York, 2010.
- [14] B. P. Straughan et al. , "Spectroscopy", Chapman and Hall, London, 1976.
- [15] ليلي محمد نجيب سليم. "الطيف" . جامعة الموصل ، ١٩٨٥ .
- [16] Y. Gun ,and H Chong , "Simple Optical Methods for Measuring Optical Nonlinearities and Rotational Viscosity In Nematic Liquid Crystals " , ISBN 978-953-307-015-5, pp.111-126 , Vienna , Austria , 2009.
- [17] J.B. Birks: Photophysics of Aromatic Molecular, John Wiley & Sons, Ltd, 1970.
- [18] A. Skoog Douglas: Principles of Instrument Analysis, Third ed, 1985.
- [19] S. Mohamed, "The calculation of Potential energy level of semiconductor PBS using Quantum Mechanics Semiempirical method" M.Sc Thesis, Al-Mustansiriyah University, 2009.
- [20] S.Hayashi " , Theoretical Study of Electronic Structure and Spectroscopy of Molecules Containing Metallic Atoms, Ph. D. Thesis , University of Paris, 2008.
- [21] O.Svelte, " Principles of Lasers", Plenum press, New York, 1989.