



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي



جامعة الشهيد حمه لخضر الوادي

كلية التكنولوجيا

مذكرة تخرج لنيل شهادة

ماستر أكاديمي

ميدان : العلوم والتكنولوجيا

شعبة: هندسة الطرائق

تخصص: هندسة كيميائية

من إعداد الطلبة:

1- عويطي مريم

2- باحدي بسمة

الموضوع

تصنيع أخضر وتشخيص للجسيمات النانوية المستمدة من نبات
الحاد للتطبيقات الهندسية الكيميائية: دراسة أكاديمية

نوقشت في: 2025/05/28

أمام لجنة المناقشة:

جامعة الوادي	رئيسا	أستاذ محاضر (أ)	يرة جميلة
جامعة الوادي	مناقش	أستاذ محاضر (أ)	رغوية عبد الله
جامعة الوادي	مشرفا	أستاذ محاضر (أ)	د. بن عمر محمد العربي
جامعة الوادي	مساعد المشرف	أستاذ متعاقد	د. بن عمر إلهام

الموسم الجامعي: 2025/2024

ملخص:

في هذه الوراسة تم تصنيع جسيمات نانوية من أكسيد الزنك (ZnO) وأكسيد المغنيسيوم (MgO) باستخدام مستخلص نبات الحاد (*Cornuca monacantha Del*) كعامل اختزال وتثبيت أخضر، و تم توصيف الجسيمات النانوية باستخدام تقنيات طيفية مثل الأشعة فوق البنفسجية المرئية (Uv-visible)، تحويل فورييه للأشعة تحت الحمراء (FTIR)، تقنية حيود الأشعة السينية (DRX)، و بلغت فجوة الطاقة لجسيمات MgO NPs، ZnO NPs حوالي 3.63، و 4 إلكترون فولت على التوالي، و أظهرت الجسيمات النانوية حجم 16.13 نانومتر لأكسيد الزنك و 5.2 نانومتر لأكسيد المغنيسيوم، حسنت حسابات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستخدام مجموعات الأساس B3LYP و LANL2DZ/6-31G(d,p) هندسة الجسيمات النانوية، مؤكدة أن أكسيد الزنك (ZnO) يتبنى بنية حلقة سداسية، بينما يظهر أكسيد المغنيسيوم (MgO) هندسة مكعبة، و أشار تحليل فجوة HOMO-LUMO إلى استتوار إلكتروني أعلى لأكسيد الزنك (ZnO) (4 إلكترون فولت) مقارنةً بأكسيد المغنيسيوم (MgO) (3.63 إلكترون فولت)، و أظهر تحليل شحنة موليكول استقطاباً إلكترونياً ملحوظاً في مجموعات أكسيد الزنك، مما يدل على خواص أيونية قوية، بينما أظهر أكسيد المغنيسيوم درجة استقطاب أقل، مما يعكس طبيعة رابطة أيونية-تساهمية مختلطة، تسهم هذه الرؤى التجريبية والنظرية المُجمعة في فهم الخصائص الفيزيائية والكيميائية لجسيمات أكسيد المعادن النانوية المُستخلصة من النباتات، مما يدعم تطبيقاتها في المجالات التحفيزية والطبية الحيوية.

الكلمات المفتاحية: التوليف الأخضر، نبات الحاد، جسيمات أكسيد المغنيسيوم النانوية، جسيمات أكسيد الزنك النانوية، نظرية الكثافة الوظيفية.

Abstract:

In this study, zinc oxide (ZnO) and magnesium oxide (MgO) nanoparticles were synthesized using (*Cornuca monacantha Del*) extract as a green reducing and stabilizing agent. The nanoparticles were characterized using spectroscopic techniques such as UV-visible, Fourier transform infrared (FTIR), and X-ray diffraction (DRX). The energy bandgap of MgO NPs and ZnO NPs was about 3.63 and 4 eV, respectively. The nanoparticles showed a size of 16.13 nm for ZnO and 5.2 nm for MgO. Density functional theory (DFT) calculations using B3LYP and LANL2DZ/6-31G(d,p) basis sets improved the geometry of the nanoparticles, confirming that ZnO adopts a hexagonal ring structure, while MgO exhibits a cubic geometry. Analysis indicated The HOMO-LUMO gap indicates higher electronic stability for zinc oxide (ZnO) (4 eV) compared to magnesium oxide (MgO) (3.63 eV). Mulliken charge analysis revealed a significant electron polarization in ZnO clusters, indicating strong ionic properties, while MgO showed a lower degree of polarization, reflecting a mixed ionic-covalent bond nature. These combined experimental and theoretical insights contribute to the understanding of the physicochemical properties of plant-derived metal oxide nanoparticles, supporting their applications in catalytic and biomedical fields.

Keywords: Green synthesis, *Cornuca monacantha Del*, ZnO NPs, MgO NPs, DFT.

اهداء

إلى من لا يطيب الليل إلا بشكره ولا يطيب النهار إلا بذكره... الله جل جلاله

إلى من بلغ الرسالة وأدى الأمانة ونصح الأمة.. نبي الرحمة ونور العالمين «سيدنا محمد صلى الله

عليه وسلم»

لم تكن الرحلة قصيرة ولا الطريق محفوفًا بالتسهيلات فالحمد لله الذي يسر البدايات وبلغنا النهايات

بفضله وكرمه

بكل حب أهدي ثمرة نجاحي وتخرجي

إلى من دعمني بلا حدود وأعطاني بلا مقابل إلى من علمني أن الدنيا كفاح وسلاحها العلم والمعرفة

" أبي "

إلى من جعل الجنة تحت أقدامها وإحتضني قلبها قبل يدها وسهلت لي الشدائد بدعائها " أمي "

إلى من هم سندي فالحياة ومرشدي فالطريق " أخواتي " وزوجاتهم

وإلى من أشد بهم أسري وأتكئ عليهم حين تعثري " أخواتي الغاليات "

لكل من كان عونًا وسندا في هذا الطريق " استاذتي ".... ولصديقاتي الاوفياء ورفقاء السنين لأصحاب

الشدائد والأزمات

وأخيرا من قال أنا لها نالها وأنا لها إن أبت رغما عنها أتيت بها بتوفيق من الله.

بسمه باحدي

اهداء

أشكر الله العلي القدير الذي أنعم على بنعمة العقل والدين القائل في محكم التنزيل

«فوق كل ذي علم عليم» _يوسف_ الآية ٧٦...»

لم يكن وصولي سهلا لولا توفيق الله أولا ثم عزمي وإصراري فالحمد لله الذي تتم بنعمته الصالحات

أهدي هذا التخرج إلى سكان قلبي

لمن أحمل إسمه بكل فخر، لمن أفنى زهرة شبابه في تربية أبنائه، أتمنى أن يطيل الله حياتك حتى ترى ثمارًا

حان وقت حصدها بعد إنتظار طويل "والدي العزيز"

وإلى ملاكي في الحياة، إلى رمز الحب والحنان والتضحية، إلى التي كان دعائها سر نجاحي حبيبي وجنة

دنياي " أمي الغالية "

وإلى الذي لديه ميزة كبيرة في تشجيعي وتحفيزي، والذي تعلمت مثابرتة وإجتهاده، والذي أعتد عليه

واكتسب بحضوره قوة وحياة لا حدود لها " عمي الغالي (الجيلاني) "حفظه الله من كل شر

إلى من وهبني الله نعمة وجودهم في حياتي الى العقد المتين " أخواتي "

وإلى اللواتي يشتركن فيهن حب الصديقات وسند الأخوات المتميزات عن الكل، اللواتي رافقاني في دروب

الحياة السعيدة والحزينة، لمن كانوا معي على طريق النجاح والخير "حبيباتي وصديقاتي كل واحدة بإسمها"

بحمد الله ودعاء أمي أكملت مسيرتي الجامعية شكرا لكل من ساعدني في هذا المشوار.

مريم عويطي

شكر وعرّفان

الحمد لله والصلاة والسلام على خير الخلق والبرايا نبينا محمد عبده ورسوله القائل "من لا يشكر الناس لا يشكر الله" من منطلق هذا التوجيه النبوي الشريف، نتقدم بخالص الشكر والتقدير إلى جامعة الشهيد حمه لخضر الوادي كلية التكنولوجيا وكل العاملين فيها من العميد إلى البواب على كل ما قدموه لنا من مجهودات وخاصة قسم هندسة طرائق الذي احتضننا علميا حتى تحصلنا على أعلى الدرجات من العلم والمعرفة.

ونتقدم بالشكر والاعتراف إلى الأستاذ الدكتور "محمد العربي بن عمر" لقبوله الاشراف على مذكرة تخرجنا وعلى ما قدمه لنا من نصائح وتوجيهات، والأستاذة "د. إلهام بن عمر" على توجيهاتها وملاحظاتها وبذلها جهد كبير في مختلف مراحل إنجاز هذا العمل نسأل الله أن يوفقهما ويمنحهما الصحة والعافية. دون أن يغيب عنا فضل الأستاذ "د. العائز الحفناوي" على استخدام مخبره الخاص بالكلية ونشكره على مساعدته لنا في إتمام جزء من هذا العمل نسأل الله أن يوفقه في حياته العلمية والعملية. كما نتقدم بجزيل الشكر إلى الطالبة "سيرين كباش" على مساعدتها لنا في إتمام عملنا التطبيقي ندعو الله أن ييسر لها ما تبقى من الخطوات.

نتقدم بأسمى عبارات الشكر والاعتراف إلى بقية لجنة المناقشة فشكرا لكم، وفي النهاية الشكر الوافر لمن شاركنا مقاعد الدراسة لجميع الزملاء وفقهم الله.

شكرا لكم....

جدول المحتويات

الصفحة	العنوان
	الإهداء
	شكر وتقدير
	جدول المحتويات
	قائمة الجداول
	قائمة الأشكال
	قائمة الاختصارات
2	المقدمة العامة
	الفصل الأول: تكنولوجيا النانو
6	1.1. المواد النانوية
6	1.1.1. تاريخها
7	2.1.1. تعريفها
8	2.1. الأشكال المواد النانوية
9	1.2.1. النقاط الكمية (Point quantiques)
9	2.2.1. الفولورين (Fullerene)
10	3.2. I الكرات النانوية (Nano balls)

جدول المحتويات

11	4.2.I. الجسيمات النانوية (Nano Particles)
11	5.2.I. الأنابيب النانوية (Nano Tubes)
12	6.2.I. الألياف النانوية (Nano Fibres)
13	7.2.I. المركبات النانوية (Nano Composites)
13	8.2.I. الأسلاك النانوية (Nano Fils)
14	3.I. تصنيف المواد النانوية
14	1.3.I. الجسيمات النانوية العضوية
14	1.1.3. I. الدهون
14	2.1.3. I. الجسيمات النانوية القائمة على البوليمر
14	3.1.3. I. الأنابيب النانوية الكربونية (CNTs)
14	2.3.I. الجسيمات النانوية غير العضوية
15	4.I. الخواص الفيزيائية للمواد النانوية
15	1.4.I. الخواص المغناطيسية
15	2.4.I. الخواص البصرية (الضوئية)
15	5.I. طرق توليف الجسيمات النانوية
16	1.5.I. الطرق الفيزيائية

جدول المحتويات

16	1.1.5.I. الاستئصال بالليزر
17	2.1.5.I. تخليق البلازما (Synthèse de plasma)
18	2.5.I. الطرق الكيميائية
18	1.2.5. I طريقة (Technique Sol-gel)
19	2.2.5.I. الطريقة الحرارية المائية
19	3.5.I. الطرق البيولوجية
19	1.3.5.I. طريقة التخليق الحيوي (باستخدام الكائنات الحية الدقيقة)
20	2.3.5.I. التخليق بالمستخلصات النباتية
21	3.3.5.I. تحضير الجزيئات الحيوية كقوالب
21	6.I. التقنيات المستخدمة في تشخيص المواد النانوية
22	7.I. تطبيقات المواد النانوية
22	1.7.I. مجال الكيمياء والبيئة
22	2.7.I. مجال الغذاء
22	3.7.I. مجال الإلكترونيات
23	4.7.I. مجال الصناعات النسيجية
23	5.7.I. مجال تنقية المياه
23	6.7.I. مجال الفضاء

جدول المحتويات

23	خاتمة الفصل
24	مراجع الفصل الأول
	الفصل الثاني: عموميات حول نبات الحاد
32	II. دراسة العائلة الرمامية (Chenopodiaceae)
32	1.II. تعريف العائلة الرمامية
33	2.II. الوصف النباتي للعائلة الرمامية (Chenopodiaceae)
34	3.II. الانتشار الجغرافي للعائلة الرمامية (Chenopodiaceae)
35	II. دراسة نبات الحاد <i>Cornulaca monacantha</i> Del
35	1.II. تعريف نبات الحاد <i>Cornulaca monacantha</i> Del
36	2.II. تسميات نبات الحاد <i>Cornulaca monacantha</i> Del
36	3.II. تصنيف نبات الحاد
37	4.II. دورة حياة نبات الحاد
38	5.II. الوصف النباتي للنبات الحاد
39	6.II. الانتشار الجغرافي للنبات الحاد
39	7.II. فوائد واستعمالات نبات الحاد
40	8.II. أهم الدراسات السابقة حول نبات الحاد

جدول المحتويات

42	خاتمة الفصل
43	مراجع الفصل الثاني
الفصل الثالث: الجزء العملي / النتائج والمناقشة	
48	1.III المواد والأدوات والأجهزة المستعملة
48	1.1. III المواد الكيميائية
49	2.1.III الأدوات و المواد
49	3.1.III الأجهزة
49	2.III المادة النباتية
49	1.2.III تجميع وتحضير النباتات
50	2.2.III الطحن
50	3.III خطوات العمل
50	1.3.III تحضير المستخلص المائي للنبتة
50	1.2.3.III تحضير جسيمات أكسيد الزنك النانوية
52	2.2.3.III تحضير جسيمات أكسيد المنغزيوم النانوية
55	4.III طرق التوصيف
55	1.4.III مطيافية الأشعة فوق بنفسجية (Ultraviolet visible spectrophotometer)
58	2.4.III مطيافية الأشعة تحت الحمراء (Fourier Transform infrared spectroscopy)

جدول المحتويات

59	3.4.III مطيافية الأشعة السينية (DRX)
60	III 4.4 نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)
61	III 5.4 النهج المنهجي
62	III 5. النتائج و المناقشة
62	III 1.5 مطيافية الأشعة المرئية و فوق البنفسجية (UV-Vis)
63	III 2.5 مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)
64	III 3.5 مطيافية الأشعة السينية (DRX)
66	III 4.5 مناقشة نتائج نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)
66	III 1.4.5 تحسين الهندسة واستقرارها
67	III 2.4.5 المدارات الجزيئية الحدودية (FMOs)
67	III 3.4.5 مواصفات التفاعلية الشاملة
69	III 4.4.5 تحليل الجهد الكهروستاتيكي (ESP) وتوزيع الشحنة
70	خاتمة الفصل
71	مراجع الفصل الثالث
75	الخاتمة العامة

الصفحة	العنوان
	الفصل الثاني: عموميات حول نبات الحاد
37	الجدول (1.II): التصنيف النباتي لنبات الحاد <i>Cornulaca monacantha Del</i>
	الفصل الثالث: الجزء العملي / النتائج والمناقشة
48	الجدول (1.III): يوضح المواد الكيميائية المستعملة في خطوات العمل
67	الجدول (2.III): طاقات HOMO و LUMO وفجوة الطاقة (ΔE) المحسوبة لمجموعات أكسيد المعادن باستخدام DFT (B3LYP/LANL2DZ/6-31G(d,p))
68	الجدول (3.III): أوصاف التفاعلية الكلية لمجموعات أكسيد المعادن المحسوبة من طاقات HOMO و LUMO
69	الجدول (4.III): شحنات موليكين الذرية لذرات المعدن والأكسجين في مجموعات الأكسيد بناءً على حسابات DFT

الصفحة	العنوان
	الفصل الأول: تكنولوجيا النانو
7	الشكل (1.I): استخدام المجهر النفقي الماسح في صنع أصغر إعلان في العالم باستخدام 35 ذرة من عنصر الزيتون في كتابته اسم شركة IBM العالمية
8	الشكل (2.I): تصنيف المواد النانوية
8	الشكل (3.I): أنواع المواد النانوية من حيث الأبعاد والشكل
9	الشكل (4.I): النقاط النانوية
10	الشكل (5.I): الفولورين
10	الشكل (6.I): الكرات النانوية
11	الشكل (7.I): الجسيمات النانوية
12	الشكل (8.I): الأنابيب النانوية
12	الشكل (9.I): الألياف النانوية
13	الشكل (10.I): الأسلاك النانوية
16	الشكل (11.I): مخطط يوضح طرق تصنيع الجسيمات النانوية
19	الشكل (12.I): رسم تخطيطي تمثيلي للعملية الحرارية المائية

الفصل الثاني: عموميات حول نبات الحاد	
34	الشكل (1.II): رسم تخطيطي للأجزاء المهمة للعائلة الرمامية
35	الشكل (2.II): خريطة الانتشار الجغرافي لنباتات العائلة الرمامية في العالم
36	الشكل (3.II): صور توضح نبات الحاد
38	الشكل (4.II): رسم تخطيطي لنبات الحاد
39	الشكل (5.II): صورة توضح انتشار نبات الحاد في الجزائر
الفصل الثالث: الجزء العملي / نتائج ومناقشة	
49	الشكل (1.III): صورة توضح نبات الحاد
50	الشكل (2.III): مسحوق نبات الحاد
51	الشكل (3.III): توضح مستخلص نبات الحاد
52	الشكل (4.III): تشكل جسيمات أكسيد الزنك النانوية: (a) قبل التشكل، (b) بعد التشكل
52	الشكل (5.III): صورة توضح جسيمات أكسيد الزنك النانوية بعد الحرق
53	الشكل (6.III): تشكل جسيمات أكسيد المنغزيوم النانوية: (a) قبل التشكل، (b) بعد التشكل
53	الشكل (7.III): صورة توضح جسيمات أكسيد المنغزيوم النانوية بعد الحرق

54	الشكل (8.III): يوضح مخطط طريقة العمل لتوليف أكسيد الزنك، والمغنيزيوم النانوية المصنع من نبات الحاد <i>Cornulaca monacantha Del</i>
57	الشكل (9.III): جهاز موجات فوق صوتية (UL TRASONS- H)
57	الشكل (10.III): جهاز مطيافية الأشعة المرئية فوق بنفسجية (UV-Vis)
58	الشكل (11.III): جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)
60	الشكل (12.III): جهاز مطيافية الأشعة السينية (DRX)
62	الشكل (13.III): منحنى الأطياف UV-Vis (a) وفجوة الطاقة الضوئية: ZnO NPs (b)، (c) MgO NPs
63	الشكل (14.III): منحنى أطياف FTIR لـ ZnO NPs و MgO NPs
65	الشكل (15.III): أنماط حيود الأشعة السينية لـ ZnO NPs (a) و MgO NPs (b)
66	الشكل (16.III): هندسة مُحسّنة لمجموعات جسيمات النانو ZnO و MgO التي تم الحصول عليها عبر حسابات DFT

الرمز	المعنى
A	الإمتصاص
Ag NPs	جسيمات نانوية من الفضة
Ag NPs	جسيمات نانوية من الفضة
Au NPs	جسيمات نانوية من الذهب
Au ⁺³	أيونات الذهب
AuCl	كلور الذهب
C	تركيز العينة
C60	جزئ مكون من 60 ذرة كربون
Cm ⁻¹	سنتيمتر
COD	بيانات البلورات المفتوحة
Cu NPs	جسيمات نانوية من النحاس
d	مسافة شبكية بين مستويين متتاليين
D	متوسط حجم البلورة
1D	أنابيب نانوية أحادية البعد

أنابيب نانوية ثنائية البعد	2D
أنابيب نانوية ثلاثية البعد	3D
نظرية الكثافة الوظيفية	DFT
الحمض النووي الريبوزي منقوص الأكسجين	DNA
انحراف الأشعة السينية	DRX
إلكترون	e
فجوة الطاقة	Eg
الجهد الكهرستاتيكي	ESP
إلكترون فولط	ev
معامل الإمتصاص المولي	ε
مطيافية الأشعة تحت الحمراء	FTIR
غرام	g
قرائن ميلر	l·k ،h
طاقة الفوتون	hv
شدة الضوء النافذ	I

شدة الضوء الساقط	I₀
ثابت	K
طول المسار الضوئي	L
اللوغريتم	Log
مليغرام	mg
معادن المغنسيوم	Mg
سلفات المغنسيوم	Mg O₄S
أكسيد المغنسيوم	MgO
جسيمات أكسيد المغنسيوم النانوية	MgO NPs
مليتر	ml
مول	Mol
ترتيب الانعراج	n
هيدروكسيد الصوديوم	NaOH
نانومتر	nm
الجسيمات النانوية	NPs

تيتا	Θ
اليونة الكلية	S
النفاذية	T
موجات فوق صوتية	UL TRASONS- H
مطيافية الأشعة المرئية وفوق البنفسجية	UV-Vis
معادن الزنك	Zn
أسيئات الزنك	Zn (CH ₃ CO ₂)
أكسيد الزنك	ZnO
جسيمات أكسيد الزنك النانوية	ZnO NPs
جسيمات نانوية من الزنك	Zu NPs
معامل الامتصاص	α
بيتا	β
الصلابة الكيميائية	η
الطول الموجي للأشعة السينية	λ
الجهد الكيميائي	μ

السالبية الكهربية	χ
مؤشر الإلكتروفيلية	ω
نسبة المئوية	%
درجة الزاوية	$^{\circ}$

المقابلة العامة
٢٢ ٢٢ ٢٢ ٢٢ ٢٢ ٢٢

المقدمة العامة

في عالم يشهد تقدماً تكنولوجياً مستمراً، يبرز مجال تكنولوجيا النانو كأحد أعظم إنجازات الإبداع البشري، حيث يقدم حلولاً مبتكرة للتحديات المعقدة في مختلف المجالات [1, 2]، حيث يلتقي العادي بالإستثنائي في نطاق ضيق للغاية، مما يتحدى تصوراتنا عن العالم المادي، نبدأ رحلة لإستكشاف أساسيات تكنولوجيا النانو، ونستعرض الوعد المذهل الذي تحمله، بالإضافة إلى الآثار بعيدة المدى التي أعادت تشكيل الصناعات والبحوث وحياتنا اليومية.

من المعروف أن المواد تصنف ضمن المقياس النانوي إذا كان أحد أبعادها لا يتجاوز 100 نانومتر، حيث تعتمد تقنية النانو على تصنيع جسيمات بأبعاد نانوية تمتلك خصائص مختلفة عن المواد الأصلية. تعود أهمية المواد النانوية بشكل رئيسي إلى ارتفاع نسبة سطحها إلى حجمها نتيجة صغر هذا الأخير مما يزيد من سطح تماسها مع المواد الأخرى [3].

تعود أصول تكنولوجيا النانو إلى المفهوم الخيالي الذي طرحه الفيزيائي ريتشارد فاينمان في محاضراته الشهيرة عام 1959 بعنوان "هناك مساحة كبيرة في القاع"، حيث تخيل فاينمان مستقبلاً يتمكن فيه العلماء والمهندسون من التعامل مع الذرات والجزيئات الفردية لإنشاء مواد جديدة لها خصائص محددة، مما يفتح آفاقاً واسعة من الإمكانيات وعلى مر السنين، تحولت هذه الرؤية إلى واقع ملموس مما أحدث ثورة في مجالات متنوعة مثل الطب والإلكترونيات والطاقة وعلوم المواد والزراعة والصناعة بمختلف أنواعها والبيئة وغيرها [4, 5].

لقد مكن علم النانو الباحثين من تصنيع مواد نانوية فعالة وذات أهمية كبيرة، مما أتاح لهم إقتحام مجالات كثيرة ولتصنيع هذه المواد، تم إتباع طرق متنوعة، من بينها إستخدام المستخلصات النباتية، وقد حظي هذا المجال بإهتمام واسع النطاق في العقد الحالي، حيث يعتبر أسلوباً صديقاً للبيئة وأقل تكلفة [6].

من خلال هذه الدراسة، نسعى إلى تحقيق تصنيع أخضر لبعض الأكاسيد النانوية المعدنية واستغلالها في مجالات كيميائية متعددة، من خلا دمج الأساليب الحسابية، باستخدام نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، لتحسين هندسة الجسيمات النانوية ودراسة خصائصها الإلكترونية، ولذلك تم تقسيم العمل في هذه الدراسة إلى ثلاثة فصول.

الفصل الأول: يتمحور حول الجسيمات النانوية حيث تعرفنا على مفهوم النانو، تاريخه، أبعاده، أشكاله، تصنيفه، طرق توصيفه وأهم تطبيقاته.

الفصل الثاني: عموميات حول نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*، حيث تم التعرف على هذا النبات وعائلته وتسمياته وتصنيفه وأماكن تواجده وإستعمالاته في مجالات مختلفة.

الفصل الثالث: يضم الجزء العملي ونتائجه ومناقشته حيث تم في هذا الفصل تحضير كل من جسيمات أكسيد الزنك وأكسيد المغنيزيوم النانوية وتأكيد بنيته بطرق التحليل الطيفية مع دراسة نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لجسيمات، وتم مناقشة النتائج المتحصل عليها.

في الختام وبالنظر إلى النتائج النهائية، يتضح مدى النجاح في تحقيق الأهداف المرجوة من هذه الدراسة.

مراجع المقدمة العامة

- [1] G. P. Chattopadhyay, *Technologies in the Era of Singularity*: Notion Press, 2018.
- [2] A. A. Alhamad, S. Zeghoud, I. B. Amor, A. Zaater, A. B. Amor, A. Aouadif, *et al.*, "AA short review of nanomaterials: synthesis methods, properties, and applications ",*Algerian Journal of Chemical Engineering AJCE*, vol. 1, pp. 01-07, 2023.
- [3] L. Lady Aqnes Kurniawati, M. Muhammad Ilham Aldika Akbar, B. Budi Utomo, and A. Aditiawarman, "Risk Factor of Preeclampsia in a Secondary Indonesian Hospital: A Case-Control Study," *Indian Journal of Forensic Medicine & Toxicology*, vol. 15, pp. 3474-3482, 2021.
- [4] F. Kreuchauff and N. Teichert, "Nanotechnology as general purpose technology," KIT Working Paper Series in Economics 2014.
- [5] S. Zeghoud, H. Hemmami, B. B. Seghir, I .B. Amor, I. Kouadri, A. Rebiai, *et al.*, "A review on biogenic green synthesis of ZnO nanoparticles by plant biomass and their applications," *Materials Today Communications*, vol. 33, p. 104747, 2022.
- [6] N. Prabhu, "Green synthesis of iron oxide nanoparticles (IONPs) and their nanotechnological applications," *J Bacteriol Mycol Open Access*, vol. 6, pp. 260-262, 2018.

الفصل الأول :
العلماء

نحو أولها :
العلماء

في ظل التطور التكنولوجي المتسارع، تبرز تكنولوجيا النانو كعلم واعد بفضل خصائصها الفريدة على المستوى الذري، حيث يركز هذا المجال على دراسة وتطوير المواد والأنظمة النانوية، مما يفتح آفاقاً واسعة لتطبيقات مبتكرة في مجالات حيوية كالطب والزراعة والبيئة، وذلك لاستغلال الخصائص الفيزيائية والكيميائية الجديدة للمواد عند هذا المقياس المتناهي الصغر^[1]، حيث من خلال هذا الفصل سنتعرف إلى ماهية هذه المواد، طرق تحضيرها، خصائصها، أشكالها وتصنيفها، إضافة إلى طرق التحليل والتوصيف المستخدمة في تحليل المركبات المحضرة في الجزء العملي الخاص بالفصل.

1.1. المواد النانوية

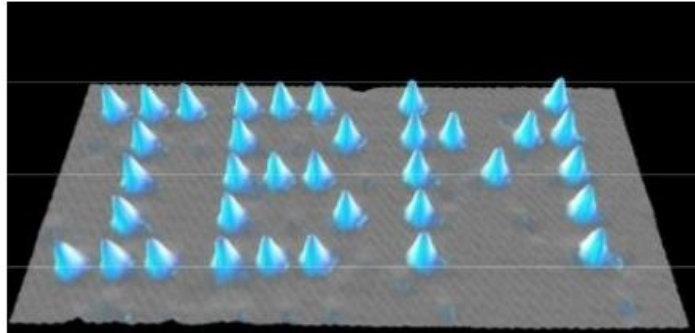
هي عبارة عن مواد تتألف من عنصر واحد أو أكثر لهم نفس البعد على الأقل يتراوح بين 1-100 نانومتر إذا تحتوي على جسيمات نانوية وألياف وأنانيب نانوية^[2].

1.1.1. تاريخها

لا يمكن تحديد بدايات دقيقة لتقنية النانو، ولكن من الواضح أن استخدامها سبق تسميتها فصنعوا الزجاج في العصور الوسطى، دون أن يدركوا ذلك، كانوا يستغلون خصائص الجسيمات لتلوين الزجاج وفي القرن العشرين ومع تطور الأبحاث العلمية ظهرت دراسات حول المواد على المستوى النانوي، ففي عام 1959م تحدث العالم ريتشارد فينمان عن إمكانية التحكم في المادة على المستوى الذري.

في عام 1974م تم استخدام مصطلح تقنية النانو لأول مرة وذلك ضمن بحث قدم لجامعة "طوكيو" وعرف البحث التقنية بأنها العملية المستخدمة في التجهيز وفصل ودمج المواد بواسطة ذرة واحدة أو جزيء واحد^[3]، ثم في سنة 1981م تم اختراع المجهر النفقي الماسح والذي تمكن من التعامل بشكل مباشر مع الذرات والجزيئات وتصويرها كما تم بواسطته كتابة اسم الشركة التكنولوجية (IBM) كما هو موضح في الشكل (1.1)، شهدت تقنية النانو تطوراً ملحوظاً منذ أواخر القرن العشرين ففي عام 1986م، أشار كتاب "محرقات التكوين" لعالم الرياضيات الشهير "Eric DEXLER" إلى امكانيات هذه التقنية الواعدة وفي

التسعينات تم اكتشاف أنابيب النانو الكربونية والتي فتحت آفاقا جديدة في هذا المجال مع بداية الألفية الجديدة، أصبحت تقنية النانو محور إهتمام دولي، حيث تبنت العديد من الدول استراتيجيات لتطويرها وشهدت السنوات التالية تسارعا في وتيرة البحث والتطوير في هذا المجال، مما أدى إلى تطبيقاتها واسعة النطاق في مختلف الصناعات [4].

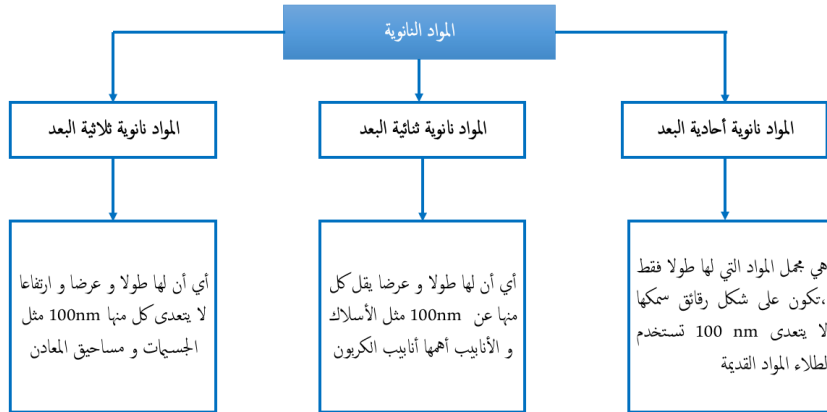


الشكل (1.I): استخدام المجهر النفقي الماسح في صنع أصغر إعلان في العالم باستخدام 35 ذرة من عنصر الزيتون في كتابة اسم شركة IBM العالمية [5].

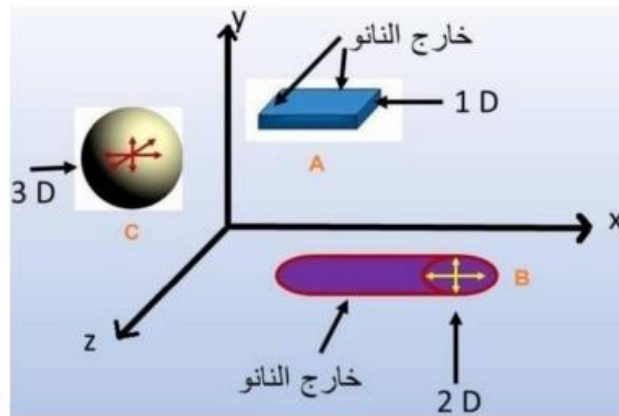
2.1.1. تعريفها

النانو هي العلم الذي يهتم بدراسة و معالجة المادة على المستوى الذري و الجزيئي و المجهري، كذلك تهتم بابتكار تقنيات ووسائل جديدة تقاس أبعادها بالنانومتر وهو جزء من الألف من الميكرومتر أي جزء من المليون من المليمتر [6]، المواد النانوية هي المواد المتقدمة التي يمكن إنتاجها بحيث تتراوح مقاييس أبعادها أو أبعاد حبيباتها الداخلية بين 1-100 نانومتر و قد أدى صغر هذه المواد الأكبر حجما (أكبر من 100 نانومتر) و تتنوع من حيث المصدر و تختلف باختلاف نسبها (مواد عضوية أو غير عضوية أو مصنعة) ولها أشكال عدة لكل منها تركيب و مقياس لقطرها و طولها كما هو موضح في **الشكل (2.I)** و لكل منها استخدامات مميزة و، ويمكن تصنيفها حسب الأبعاد النانوية كما هو موضح في

الشكل (3.I) [7].



الشكل (2.I): تصنيف المواد النانوية [8].



الشكل (3.I): أنواع المواد النانوية من حيث الأبعاد والشكل حيث: A: طبقات نانوية أحادية البعد (1D)،

B: أنابيب ثنائية البعد (2D)، C: جسيمات نانوية ثلاثية البعد (3D) [3].

2. I أشكال المواد النانوية

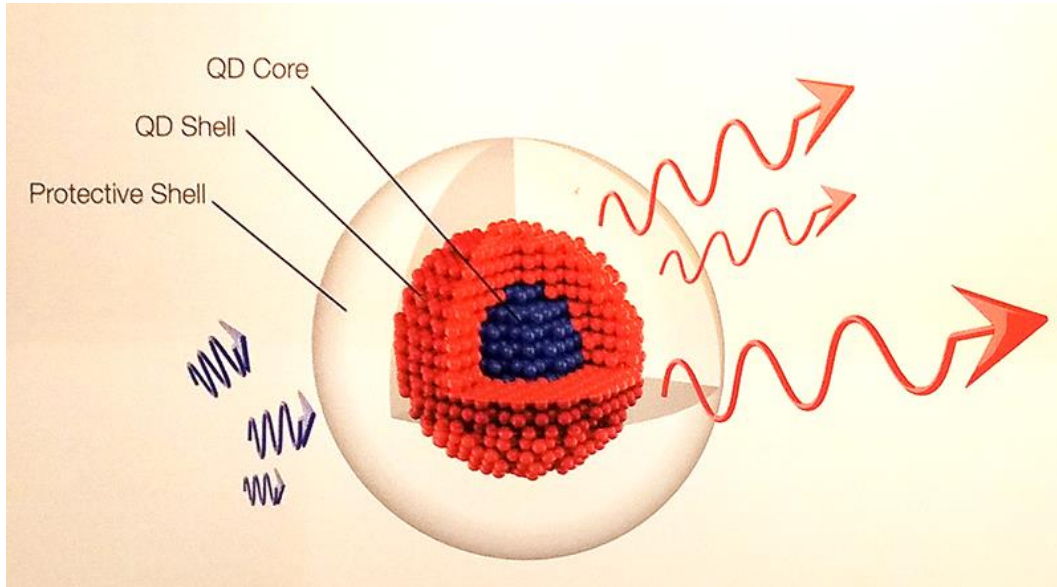
المواد النانوية لديها أشكال عدة لكل منها تركيبها وخصائصها ومقياس لقطرها وطولها وتختلف

بإختلاف طريقة تحضيرها فيمكن أن تكون على شكل أنابيب، ألياف، أسلاك، رقائق [9].

1.2.I. النقاط الكمية (Point quantiques)

هي مواد نانوية شبه موصلة ولها ثلاث أبعاد وتمتلك لب وقشرة [10] ، يكون قطر النقطة الكمية 10 نانومتر فإنه يمكن صف 3 ملايين نقطة بجانب بعضها بطول يساوي عرض أصبع الإبهام كما في

الشكل (4.I) [11] .



الشكل (4.I): النقاط النانوية [12] .

2.2.I. الفولورين (Fullerene)

هو عبارة عن مكون من 60 ذرة كربون يرمز له C60 ، إن جزيء الفولورين كروي يشبه كرة القدم

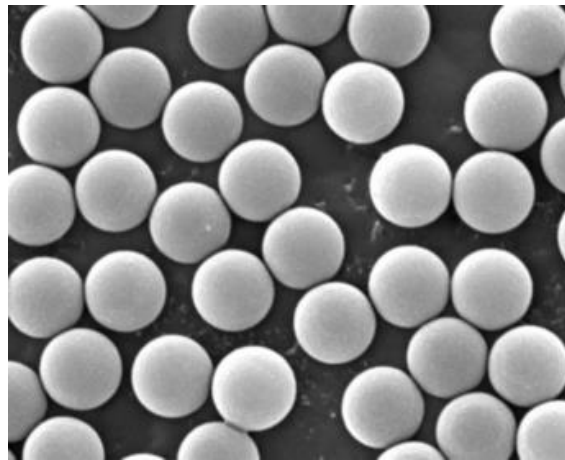
المنقطة كما يوضحه الشكل (5.I) [13] .



الشكل (5.I): الفولورين [13].

3.2. I الكرات النانوية (Nano balls)

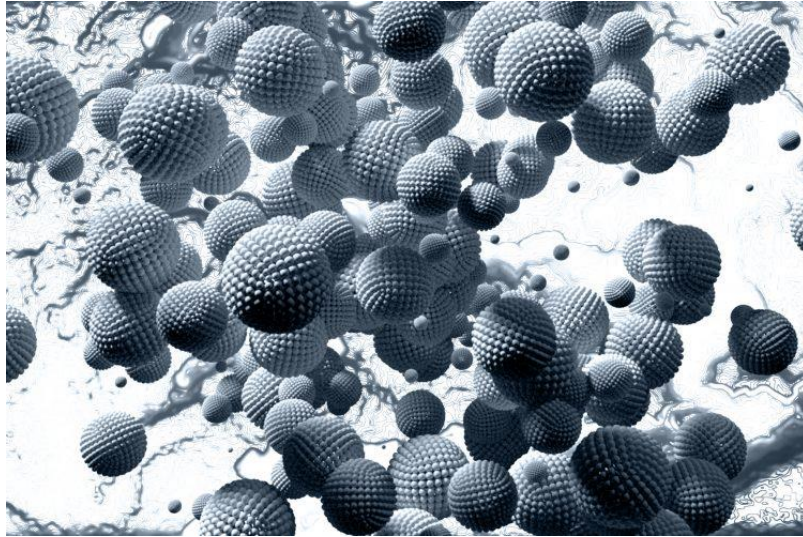
هي مواد نانوية كروية متعددة القشرة وخواوية المركز ولا توجد فجوات على سطحها [14] ، وقد يصل قطرها إلى 500 نانومتر أو أكثر [15] من أهمها كرات الكربون النانوية التي تنتمي إلى الفلورينات لكنها تختلف عنها قليلا في التركيب كما في الشكل (6.I) [16].



الشكل (6.I): الكرات النانوية [16].

4.2.I. الجسيمات النانوية (Nano Particules)

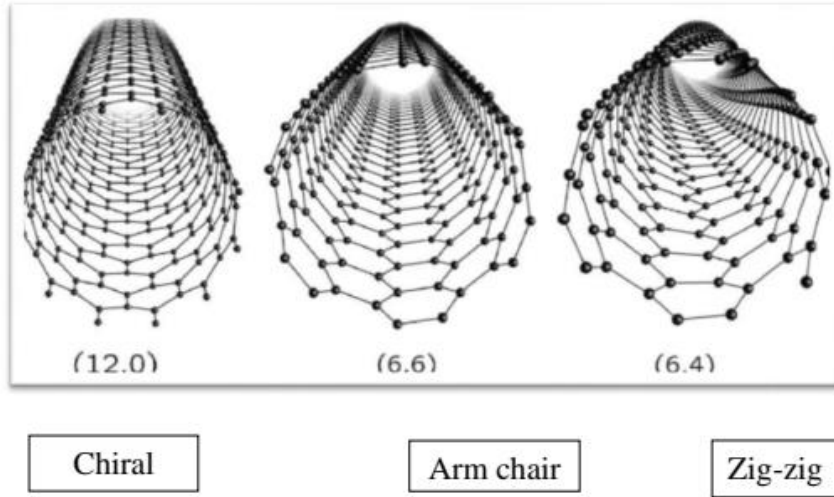
تعرف الجسيمات النانوية بأنها تجمع ذرات أو جزيئات يتراوح عددها من بضع ذرات إلى مليون ذرة، مرتبطة بعضها ببعض بشكل كروي تقريبا، ولها نصف قطر نانوي أقل من 100 نانومتر، و يحتوي جسيم بنصف قطر نانومتر واحد على 25 ذرة كما يوضحه الشكل (7.I) [17].



الشكل (7.I): الجسيمات النانوية [18].

5.2.I. الأنابيب النانوية (Nano Tubes)

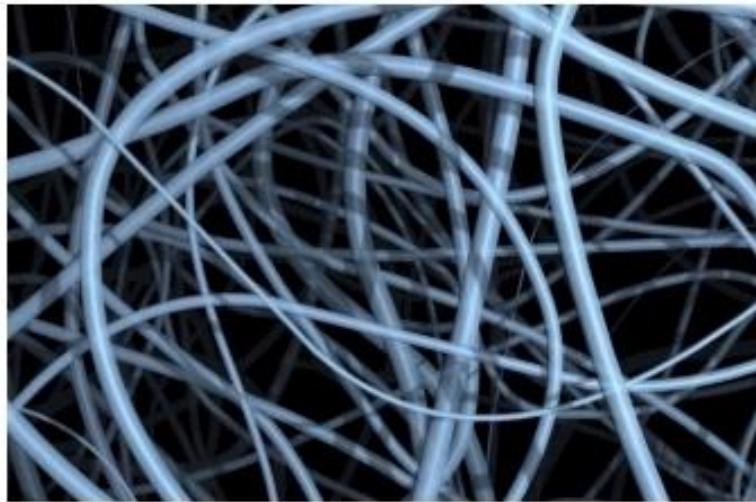
عبارة عن شرائح تطوى بشكل اسطواني و غالبا ما تكون نهاية الأنبوب مفتوحة و الأخرى مغلقة بشكل نصف دائرة ، و قد تكون مصنوعة من مواد عضوية مثل الكربون أو مواد غير عضوية مثل أكاسيد الفلزات ، كأكسيد الفناديوم ، يتراوح قطرها بين 1 و 100 نانومتر و طولها يصل إلى حوالي 100ميكرومتر ،تكون هذه الأنابيب مستقيمة ، لولبية متعرجة خيزرانية أو مخروطية و غيرها ، فمن خصائص و مميزات هذه الأنابيب امتلاكها القوة و الصلابة و الناقلية الكهربائية كما في الشكل (8.I) [19].



الشكل (8.I): الأنابيب النانوية [20].

6.2.I الألياف النانوية (Nano Fibres)

هي مواد نانوية بشكل ألياف تستخدم في الطب و تنقية السوائل و في مجالات أخرى كما في الشكل (9.I) [21] ، تتميز بمساحة سطح و حجم كبير، بحيث أن عدد ذرات السطح كبيرة بالنسبة للعدد الكلي و هذا ما يكسبها خواص ميكانيكية مميزة كالصلابة و قوة الشد و غيرها، و لكن لديها صعوبة التحكم باستمراريتها و استقامتها و تراصها [5].



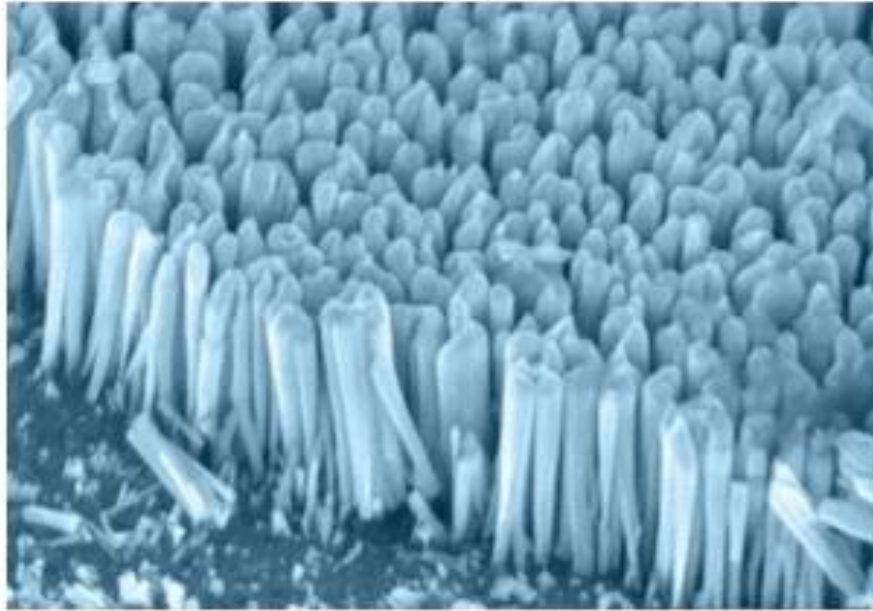
الشكل (9.I): الألياف النانوية [22].

7.2.I المركبات النانوية (Nano Composites)

تستهدف الأبحاث الحديثة تطوير مواد بخصائص متفوقة لتلبية المتطلبات المتزايدة للصناعات المختلفة، إحدى الطرق الفعالة لتحقيق ذلك هي إضافة الجسيمات النانوية للمواد الأساسية خلال عملية التصنيع، هذه التقنية تساهم في تحسين خواص المواد مثل القوة والصلابة والمقاومة للتآكل، مما يوسع نطاق تطبيقاتها^[23، 24].

8.2.I الأسلاك النانوية (Nano Fils)

هي أسلاك بقطر يقل عن 1 نانومتر و بأطوال مختلفة أي بنسبة طول إلى عرض تزيد عن 1000 مرة، و لذلك فهي تتبع بالمواد ذات البعد الواحد (1D)^[25]، و تتواجد بعدة أشكال منها الحلزوني أو متماثل خماسي الأشكال، تحضر من مواد فلزية أو شبه موصلة أو عازلة أو عضوية أو غير عضوية كما في الشكل (10.I)^[26].



الشكل (10.I): الأسلاك النانوية^[27].

3.I. تصنيف المواد النانوية

1.3.I. الجسيمات النانوية العضوية

1.1.3. I. الدهون

هذه الجسيمات مستوحاة من بنية أغشية الخلايا الحيوية، فهي تتكون من طبقة أحادية من جزيئات الفوسفوليبيد التي تلتصق ببعضها ذاتيا، تتميز هذه الجسيمات بخصائص مرنة وقابلة للتغيير، وذلك بفضل طبيعة الفوسفوليبيدات التي تحتوي على جزء قطبي (محب للماء) وجزء غير قطبي (كاره للماء) [28].

2.1.3. I. الجسيمات النانوية القائمة على البوليمر

يتم إنتاج العديد من البوليميرات العضوية بالمقياس النانوي مثل البولي فينيل كلوريد والبولسترين ويمكن تعديل هذه المركبات كيميائيا [29].

3.1.3. I. الأنابيب النانوية الكربونية (CNTs)

تتشكل من بنية ذات بعد واحد من الجرافين، إما طبقة واحدة أو عدة طبقات [30].

2.3.I. الجسيمات النانوية غير العضوية

تعد الجسيمات النانوية غير العضوية، مثل جسيمات الذهب والفضة وأكسيد المعادن ونقاط الكم، عناصر أساسية في التكنولوجيا الحيوية الحديثة حيث تتميز هذه الجسيمات بخصائص فيزيائية فريدة ناتجة عن حجمها النانوي، مما يجعلها ذات قيمة كبيرة في التطبيقات الحيوية، لا سيما في المجالات البصرية، المغناطيسية، الكهربائية، والتحفيزية [31].

4.I. الخواص الفيزيائية للمواد النانوية

1.4.I. الخواص المغناطيسية

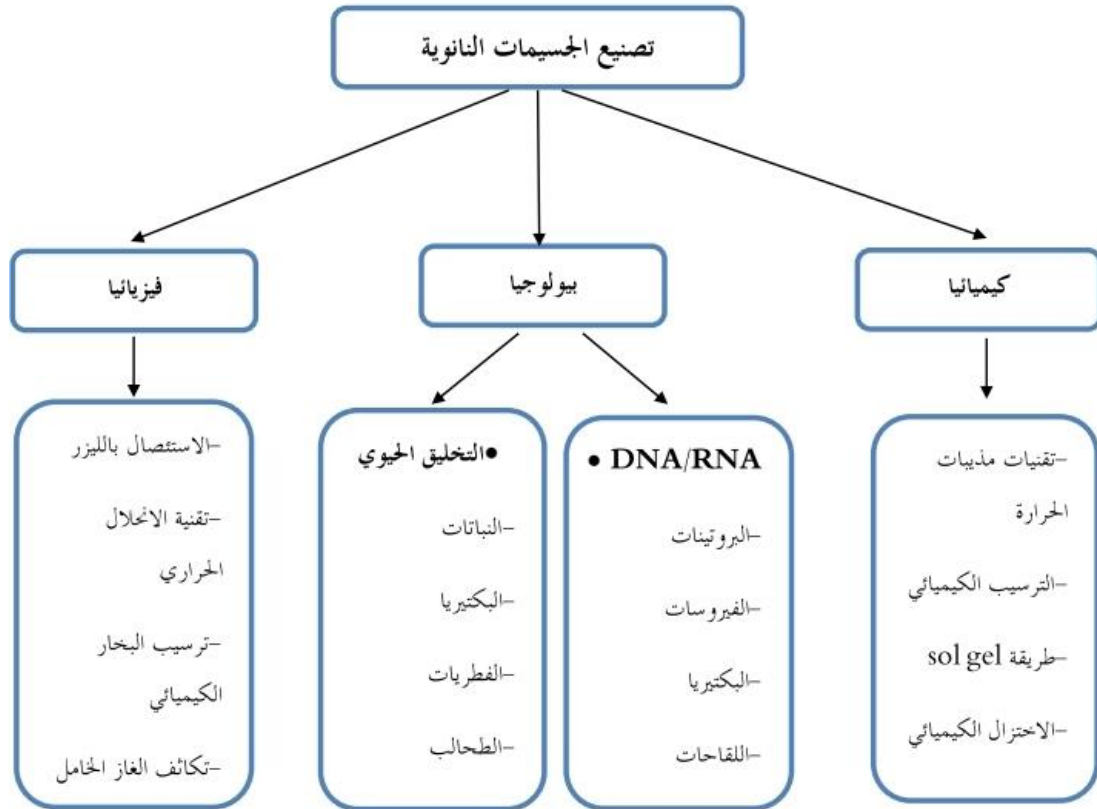
بفضل صغر حجم جسيماتها، تمتاز المواد النانوية المغناطيسية بقوة مغناطيسية هائلة [32] ، هذه الخاصية الفريدة تجعلها المادة المفضلة في صناعة محركات السفن والبواخر ومولدات الطاقة الكهربائية، حيث تساهم في زيادة كفاءة هذه الأجهزة [33] .

2.4.I. الخواص البصرية (الضوئية)

تعتبر الخواص البصرية من العوامل الحاسمة في دراسة هياكل النانوية، حيث يؤدي إلى تقليص حجم المادة إلى تغييرات جوهرية في سلوكها الضوئي (خواصها البصرية) بسبب الحبس الكمي ورنين بلازمون السطح، وعند تقليص حجم المادة يحدث الحبس الكمي للشحنات، مما يؤدي إلى تفاوت مستويات الطاقة وتغير في لون المادة، هذا التفاوت الواضح في التغيير اللوني يجعل من الممكن تصنيع مواد نانوية بشكل دقيق عبر اختيار طرق التركيب المناسبة [34] .

5.I. طرق توليف الجسيمات النانوية

عموما يتم توليف الجسيمات النانوية باستخدام نهجين رئيسيين هما، إما من الأعلى إلى الأسفل أو من الأسفل إلى الأعلى، هناك عدة طرق لتخليق الجسيمات النانوية، منها الطرق الفيزيائية والكيميائية والبيولوجية الخ كما يوضحه الشكل (11.I) [35] .



الشكل (11.1): مخطط يوضح طرق تصنيع الجسيمات النانوية [36].

1.5.I. الطرق الفيزيائية

1.1.5.I. الاستئصال بالليزر

يمكن تصنيع الجسيمات النانوية باستخدام مجموعة متنوعة من المذيبات وتخليق الاستئصال بالليزر في محلول، ويؤدي تشيع المعدن المغمور في محلول سائل بالليزر إلى تكوين جسيمات نانوية عن طريق تكتيف عمود البلازما [37].

يمكن تصنيع الجسيمات النانوية (NPs) بسهولة باستخدام الاستئصال بالليزر لأنها طريقة مباشرة وسريعة لإنتاج مجموعة واسعة من الجسيمات النانوية، بما في ذلك المعادن، أشباه الموصلات، البوليمر والجسيمات النانوية من المعادن المعقدة متعددة العناصر وسبائك أشباه الموصلات.

ليست هناك حاجة لاستخدام سلائف كيميائية خطيرة أو متفجرة، فزمن التفاعل الكيميائي قصير، ولا يتطلب الأمر درجات حرارة عالية أو ضغوطاً، و يتم إنتاج المحاليل الغروية فائقة النقاء الخالية من منتجات التفاعل الثانوية عندما يتم تصنيع الجسيمات النانوية في الماء، و تسهل خصائص الجسيمات النانوية [38] استخدامها البيولوجي والكيميائي الحيوي في الكائنات الحية، و من أجل تصنيع الجسيمات النانوية ذات الأساس المعدني، يعد هذا النهج من أعلى إلى أسفل بديلاً موثقاً للاختزال الكيميائي التقليدي للمعادن ونظراً لأنه يتيح التوليف المستقر للجسيمات النانوية في المذيبات العضوية والماء دون استخدام عوامل تثبيت أو مواد كيميائية، فإن تخليق الاستئصال بالليزر في محلول يعتبر طريقة بحث "خضراء"، ومع ذلك فإن هذه الطريقة لها بعض العيوب، حيث يؤدي استئصال بالليزر على المدى الطويل إلى نمو تركيز عالٍ من الجسيمات النانوية في المحلول الغروي، مما يحجب مسار الليزر ويمتص طاقة الليزر إلى الجسيمات النانوية نفسها بدلاً من السطح المستهدف ، بشكل عام هذا يقلل من معدل الاستئصال [39] .

2.1.5.I. تخليق البلازما (Synthèse de plasma)

في عملية تصنيع البلازما النانوية تسخن المادة المراد تحويلها إلى بلازما حتى تتبخّر، ثم تبرد الأبخرة بسرعة فائقة، تجمع المساحيق النانوية باستخدام مرشحات خاصة مع ضمان ابعادها تن منطقة التفاعل، ويتراوح حجم الجسيمات النانوية المنتجة بين 20 و1000 نانومتر وتتراوح الإنتاجية من بعض مئات الجرامات في الساعة إلى 3 كيلوغرامات في الساعة، وذلك حسب الخصائص الفيزيائية للمواد المختلفة [40] .

2.5.I. الطرق الكيميائية

1.2.5. I. طريقة (Technique Sol-gel)

تعد تقنية sol-gel عبارة عن عملية كيميائية ناعمة قابلة للتكيف بدرجة كبيرة ويتم استخدامها على نطاق واسع في تصنيع أكاسيد المعادن والسيراميك والزجاج، والمساحيق متناهية الصغر أو الكروية، وطلاءات الأغشية الرقيقة، والألياف الخزفية... الخ، ليست سوى بعض من الزجاج الإضافي الذي قد يكون متاحًا تجاريًا [41]

تشتمل المواد الأولية لعملية sol-gel عادةً على قلويدات معدنية أو أملاح عضوية فلزية غير عضوية وتتضمن هذه العملية تفاعلاً متسلسلاً للتحلل المائي، ويوفر نهج sol-gel العديد من الفوائد مقارنة بطرق درجات الحرارة العالية، بما في ذلك القدرة على إنشاء مواد شبه مستقرة، وزيادة نقاء المنتج والتجانس التركيبي، وانخفاض درجات حرارة عملية.

إحدى الفوائد العديدة لهذا الإجراء هو أنه يمكن استخدامه لإنشاء مواد معدنية وسيراميكية نانوية في درجات حرارة تتراوح بين 70 درجة مئوية و320 درجة مئوية، مما يوسع بشكل كبير نطاق المواد التي يمكن معالجتها [42] وتحقيق التجانس على المستوى الذري في المنتج النهائي، والتحكم التركيبي على المستوى الجزيئي، والمسامية للحصول على مواد ذات مساحة سطحية عالية، و تسمح الكواشف عالية النقاء أيضًا بتخليق مواد ذات تركيبات معقدة، مما يؤدي إلى منتجات نهائية أكثر نقاءً و من الصعب تحقيق سماكة تزيد عن ميكرون باستخدام تقنيات الترسيب الفيزيائي لكن عملية السول-جل تجعل ذلك ممكنًا [43].

2.2.5.I. الطريقة الحرارية المائية

تتم هذه الطريقة عادةً بآلية up-down والتي يتم فيها تقليص المادة إلى الحالة النانوية بآليات فيزيائية كالموجات الصوتية (ultra-sonication) ، الإشعاع بالموجات الصغرى (microwave irradiation) و الطريقة الإلكتروكيميائية (electrochemical method) ، في هذه الطريقة يمكن استخدام أنبوب التسخين عند وزن البارومتري لدمج الجسيمات النانوية بواسطة تكثيف التبخير، و يتم تبخير العنصر المصدر للمادة النانوية داخل عوامة و الحرارة تقوم بتبخيره إلى غاز محمول، وإن هذه الطريقة تستخدم في بناء الجسيمات النانوية للذهب ، الفضة ، الرصاص ، الكاديوم و كثير من الفلزات الأخرى كما يوضحه الشكل (12.I) [44].



الشكل (12.I): رسم تخطيطي تمثيلي للعملية الحرارية المائية [45].

3.5.I الطرق البيولوجية

1.3.5.I. طريقة التخليق الحيوي (باستخدام الكائنات الحية الدقيقة)

يمكن تصنيع الجسيمات النانوية الآمنة للبشر والبيئة باستخدام التصنيع الحيوي، ويعد تصنيع الجسيمات النانوية باستخدام الأنظمة البيولوجية سريعاً وعملياً ومفيداً بيئياً [46] ، ولقد بحثت العديد من

الدراسات في جدوى تصنيع الجسيمات النانوية عن طريق استخدام الكائنات الحية الدقيقة مثل البكتيريا، والفطريات، والخميرة، الطحالب الدقيقة والفيروسات.

تمتلك الكائنات الحية الدقيقة خلايا قابلة للتكيف بشكل طبيعي مع مجموعة واسعة من البيئات، وتتكاثر بسرعة، وتتطلب القليل من التكلفة، وتعد السكريات الخارجية والسليلوز النانوي والأسلاك النانوية مجرد أمثلة قليلة على المواد النانوية الفريدة التي تمتلك البكتيريا والطحالب الدقيقة القدرة على إنتاجها [47].

بالمقارنة مع استخدام المواد الكيميائية والعمليات الفيزيائية، فإن إنتاج الجسيمات النانوية باستخدام المصادر البيولوجية (مثل البكتيريا، الخميرة، الفطريات، الطحالب والفيروسات) يعد أكثر أماناً، وتُفضل البكتيريا لإنتاج الجسيمات النانوية لأنه يمكن زراعتها بسهولة في ظروف صناعية والحفاظ على معدل نمو ثابت على الرغم من انخفاض محتوى المغذيات في الجسيمات النانوية المصنعة وتتمتع الكائنات الحية الدقيقة بالقدرة على تحويل العناصر غير العضوية إلى الجسيمات النانوية عبر مساراتها خارج الخلية أو داخل الخلايا.

الطريقة البيولوجية لتصنيع الجسيمات النانوية هي طريقة خضراء وخالية من السمية، ولكن المشكلة هي أن هناك العديد من المركبات الأخرى في المستخلصات النباتية وتستغرق الكثير من الوقت لإزالة كل الشوائب مع وجود احتمال تواجد الجزيئات غير المرغوب فيها في المنتج النهائي [48].

2.3.5.I. التخليق بالمستخلصات النباتية

يعتبر التخليق الحيوي لجسيمات النانو باستخدام مستخلصات أو كتلة النباتات الحوية طريقة فعالة وسريعة وآمنة بيئياً، وقد تم استخدامها بكثرة لتصنيع جسيمات النانو من المعادن الثمينة وأكاسيدها وسبائكها الثنائية، وتتمثل ميزة هذه الطريقة في قدرة المركبات النباتية الحوية على العمل كعوامل اختزال ومثبتة، مما يساهم في إنتاج جسيمات نانوية ذات خصائص محددة [49].

إن حركية التحضير النباتي لل NPs أعلى بكثير نسبياً من طرق التخليق الحيوي الآخر وفي بعض الأحيان ما يعادل معدل الطرق الكيميائية، حيث تحضير تشابكات الذهب النانوية عن طريق معالجة مستخلص أوراق الليمون بالمائية أيونات AuCl، كما تم تخليق العديد من المواد النانوية بواسطة مستخلصات النباتات وأوراقها ونذكر منها (ZuNPs، CuNPs، AgNPs)....^[50].

3.3.5.I تحضير الجزيئات الحيوية كقوالب

تُستخدم في هذه الطريقة جزيئات حيوية متنوعة، كالأحماض النووية والأغشية والفيروسات، كركائز لتصنيع الجسيمات النانوية، يُعتبر الحمض النووي (DNA) نموذجاً حيوياً ممتازاً لقدرته الفائقة على جذب أيونات المعادن الانتقالية، وقد أظهرت الأبحاث أن الهيدروجيلات المتشابكة قبل دمجها مع أيونات الذهب (Au^3+) تتفاعل مع جزيئات الحمض النووي الضخمة لتكوين جسيمات نانوية من الذهب (Au) NPs^{[49]، [51]}.

6.I التقنيات المستخدمة في تشخيص المواد النانوية

يتم توصيف النانوية ودراسة خصائصها والتأكد من تركيبها من قبل تقنيات القياس العلمية التالية^[52]:

- ❖ مجهر القوة الذرية (Atomic Force Microscope).
- ❖ مطياف رامان (Raman Spectrometer).
- ❖ المجهر النفقي الماسح (Scanning Tunneling Microscope).
- ❖ مطياف التآلق الضوئي (Photoluminescence Spectrometer).
- ❖ المجهر الإلكتروني النافذ (Transmission Electron Microscope).
- ❖ المجهر الإلكتروني الماسح (Scanning Electron Microscopy).
- ❖ العراج الأشعة السينية (X-Ray Diffraction).

7.I تطبيقات المواد النانوية

1.7.I.1. مجال الكيمياء والبيئة

تلعب الجسيمات النانوية دوراً متزايد الأهمية في مجال البيئة، وذلك بفضل حجمها الصغير وخصائصها الفيزيائية والكيميائية الفريدة، فهي تستخدم في التقنيات البيولوجية لإزالة و تحليل الملوثات البيئية [53] مثل الأصباغ العضوية و المعادن الثقيلة، كما تستخدم في المستشعرات البيئية لمراقبة الملوثات و اكتشاف مسببات الميكروبية بالإضافة إلى ذلك تستخدم الجسيمات النانوية كمحفزات في التفاعلات الكيميائية و عمليات التنقية و تساهم في إنتاج الوقود الحيوي من الكتلة الحيوية و تقسيم الماء، مما يقلل من الاعتماد على الوقود الأحفوري و يساهم في تطوير مصادر طاقة نظيفة و مستدامة، كما تستخدم في تطوير أجهزة تخزين الطاقة و تحسين كفاءة الألواح الشمسية، مما يساهم في جعل الطاقة الشمسية أرخص و أكثر انتشاراً و تساهم الجسيمات النانوية أيضاً في تحسين كفاءة إنتاج الوقود من المواد البترولية الخام و تقليل الاحتكاك في المركبات و محطات الطاقة [54].

2.7.I.2. مجال الغذاء

بفضل تقنية النانو، شهدت الصناعات الغذائية تحسناً ملحوظاً في جودة المنتجات وقيمتها الغذائية، مما ساهم في الحد من الأمراض و يتحقق ذلك باكتشاف العوامل المرضية في المواد الغذائية القضاء عليها [55].

3.7.I.3. مجال الإلكترونيات

بفضل تقنية النانو، سيصبح من الممكن تصنيع أجهزة إلكترونية أصغر حجماً وأكثر كفاءة، مثل تصنيع أقراص صلبة صغيرة ذات سعات تخزينية كبيرة [56].

4.7.I. مجال الصناعات النسيجية

شهد مجال صناعة الملابس تطوراً ملحوظاً بفضل استخدام تقنية النانو، وقد ساهمت هذه التقنية في تحسين جودة الملابس بشكل كبير، حيث أصبحت الملابس أكثر خفة في الوزن ومقاومة لامتصاص السوائل والبقع والأوساخ [57].

5.7.I. مجال تنقية المياه

في عملية تحلية ومعالجة مياه البحار تم استبدال تقنية التناضح العكسي بأغشية من أنابيب كربونية نانوية، فلوحظ أن تكلفة هذه العملية قد انخفضت إلى 75%، [56] فتقل المخاطر ويتحسن المنتج الزراعي وتتحقق الجودة المطلوبة لمنتجات الطعام [58].

6.7.I. مجال الفضاء

في هذا المجال تم صنع صواريخ من البلاستيك المحتوي على جسيمات نانوية أسهل وأرخص من الهياكل المعدنية تتحمل برودة الفضاء وحرارة الاحتكاك بالغللاف الجوي للأرض [59].

خاتمة الفصل

لقد قدمنا في هذا الفصل لمحة عن عالم النانو، الذي يفتح لنا المجال في فهم المواد النانوية وتطبيقاتها وأشكالها وخصائصها، وتعرفنا عن مفهوم النانو وابعادها، كما استعرضنا تاريخ هذا العلم وتطوره وتطرقنا إلى أهميته في مختلف المجالات: من الغذاء والالكترونيات والصناعات النسيجية والفضاء وتنقية المياه.

المراجع الفصل الأول

- [1] A. Rozhin, S. Batasheva, M. Kruchkova, Y. Cherednichenko, E. Rozhina, and R. Fakhrullin, "Biogenic silver nanoparticles: Synthesis and application as antibacterial and antifungal agents," *Micromachines*, vol. 12, no. 12, p. 1480, 2021.
- [2] A. Lukež, V. Katić, I. Lauš, M. Grbeša, and S. Špalj, "Frequency, context and characteristics of smile used in advertising," *Acta Stomatologica Croatica*, vol. 51, no. 1, p. 41, 2017.
- [3] M. Sheikholeslami, "Nanotechnology applications for solar energy systems," 2023.
- [4] S. Sanggin and N. Mersat, "International Journal of Sustainable Development," 2012.
- [5] C. J. Chen, *Introduction to Scanning Tunneling Microscopy Third Edition*. Oxford university press, 2021.
- [6] M. Nasrollahzadeh, S. M. Sajadi, M. Sajjadi, and Z. Issaabadi, "An introduction to nanotechnology," in *Interface science and technology*, vol. 28: Elsevier, 2019, pp. 1-27.
- [7] M. H. Ahmeda, N. Ahmida, and A. Ahmeida, "Introduction to nanotechnology: definition, terms, occurrence and applications in environment," *Libyan International Medical University Journal*, vol. 2, no. 01, pp. 12-26, 2017.
- [8] M. Rizwan, A. Shoukat, A. Ayub, B. Razzaq, and M. B. Tahir, "Types and classification of nanomaterials," in *Nanomaterials: synthesis, characterization, hazards and safety*: Elsevier, 2021, pp. 31-54.
- [9] A. M. Sabry, "Materials developed by nanotechnology and their industrial applications in the field of product design," *International Design Journal*, vol. 10, no. 3, pp. 447-456, 2020.
- [10] A. HASSAN II, "FIRST MOROCCAN DAYS ON NANOSCIENCE & NANOTECHNOLOGY (MDNN1)," 2007.

- [11] E. A. E. Osman, "Department of Social Science," *EISENHOWER COLLEGE, Seneca*, 2018.
- [12] M. Bacon, S. J. Bradley, and T. Nann, "Graphene quantum dots," *Particle & Particle Systems Characterization*, vol. 31, no. 4, pp. 415-428, 2014.
- [13] P. Bhakta and B. Barthunia, "Fullerene and its applications: A review," *Journal of Indian Academy of Oral Medicine and Radiology*, vol. 32, no. 2, pp. 159-163, 2020.
- [14] H. Ead, R. Elsherif, and H. Hassan, "Egyptian perception, awareness, and knowledge of nanotechnology: A study based on an Egyptian University approach," 2022.
- [15] A. A. Mohamud, "FACULTY OF SCIENCE DEPARTMENT OF GEOLOGY THESIS," NATIONAL UNIVERSITY, 2024.
- [16] J. Alam, A. K. Shukla, F. A. A. Ali ,and O. Daoud, "and Mansour Alhoshan aKing Abdullah Institute for Nanotechnology, King Saud University, Riyadh, Saudi Arabia, bChemical Engineering Department, College of Engineering, King Saud University, Riyadh, Saudi Arabia, cK. A. CARE Energy Research and Innovation Center, Riyadh, Saudi Arabia," *The Treatment of Pharmaceutical Wastewater*, p. 347, 2023.
- [17] A. A. Alhamad *et al.*, "AA short review of nanomaterials: synthesis methods, properties, and applications," *Algerian Journal of Chemical Engineering AJCE*, vol. 1, no. 01, pp. 01-07, 2023.
- [18] P. N. Dave, L. V. Chopda, and L. Sahu, "Applications of nanomaterials in corrosion protection inhibitors and coatings," in *Functionalized nanomaterials for corrosion mitigation: synthesis, characterization ,and applications*: ACS Publications, 2022, pp. 189-212.
- [19] W. M. E. G. Barakat and R. Sokar, "Prof/Abed El Monem Moawad Professor of Design, Decoration Department-Faculty of Applied Arts, Helwan University".
- [20] V. N. Popov, "Carbon nanotubes: properties and application," *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 43, no. 3, pp. 61-102, 2004.

- [21] B. Jiang, J. Li, G. Yue, and H. Song, "Differential privacy for industrial internet of things: Opportunities, applications, and challenges," *IEEE Internet of Things Journal*, vol. 8, no. 13, pp. 10430-10451, 2021.
- [22] R. Rasouli, A. Barhoum, M. Bechelany, and A. Dufresne, "Nanofibers for biomedical and healthcare applications," *Macromolecular bioscience*, vol. 19, no. 2, p. 1800256, 2019.
- [23] J.-V. Lim, S.-T. Bee, L. Tin Sin, C. T. Ratnam, and Z. A. Abdul Hamid, "A review on the synthesis, properties, and utilities of functionalized carbon nanoparticles for polymer nanocomposites," *Polymers*, vol. 13, no. 20, p. 3547, 2021.
- [24] A. H. Gharbi *et al.*, "Novel CuO–SiO₂ nanocomposites: synthesis, kinetics, recyclability, high stability and photocatalytic efficiency for Rose Bengal dye removal," *Transition Metal Chemistry*, vol. 49, no. 3, pp. 195-213, 2024.
- [25] B. Foster, D. Fazarro, W. Trybula, J. Tate, and C. Hanks, "The world of nanotechnology," *Nano-safety: what we need to know to protect workers*. Boston: De Gruyter, pp. 1-40, 2017.
- [26] K. P. Chandrika, A. Singh, M. K. Tumma, and P. Yadav, "Nanotechnology prospects and constraints in agriculture," *Environmental Nanotechnology: Volume 1*, pp. 159-186, 2018.
- [27] C.-Y. Hsu *et al.*, "Nanowires properties and applications: a review study," *South African Journal of Chemical Engineering*, vol. 46, pp. 286-311, 2023.
- [28] J. Y. B. Tan, B. K. Yoon, N.-J. Cho, J. Lovrić, M. Jug, and J. A. Jackman, "Lipid nanoparticle technology for delivering biologically active fatty acids and monoglycerides," *International journal of molecular sciences*, vol. 22, no. 18, p. 9664, 2021.
- [29] H. Idrees, S. Z. J. Zaidi, A. Sabir, R. U. Khan, X. Zhang, and S.-u. Hassan, "A review of biodegradable natural polymer-based nanoparticles for drug delivery applications," *Nanomaterials*, vol. 10, no. 10, p. 1970, 2020.

- [30] L. S. Salah, N. Ouslimani, D. Bousba, I. Huynen, Y. Danlée, and H. Aksas, "Carbon nanotubes (CNTs) from synthesis to functionalized (CNTs) using conventional and new chemical approaches," *Journal of Nanomaterials*, vol. 2021, no. 1, p. 4972770, 2021.
- [31] R. Bhatti *et al.*, "Inorganic nanoparticles: toxic effects, mechanisms of cytotoxicity and phytochemical interactions," *Advanced Pharmaceutical Bulletin*, vol. 12, no. 4, p. 757, 2021.
- [32] S. M. Abbas and Z. M. Kadam, "A New Method Preparation and Spectroscopic Characterization of the Nano Organic Reagent Derivatives From Pyrogallol and Its Complex with Iron (III)," *International journal of health sciences*, vol. 6, no. S4, pp. 5890-5899.
- [33] S. Mobasser and A. A. Firoozi, "Review of nanotechnology applications in science and engineering," *J Civil Eng Urban*, vol. 6, no. 4 ,pp. 84-93, 2016.
- [34] J. Z. Zhang, *Optical properties and spectroscopy of nanomaterials*. World Scientific, 2009.
- [35] P. G. Jamkhande, N. W. Ghule, A. H. Bamer, and M. G. Kalaskar, "Metal nanoparticles synthesis: An overview on methods of preparation, advantages and disadvantages, and applications," *Journal of drug delivery science and technology*, vol. 53, p. 101174, 2019.
- [36] A. H. Hashem, M. E. El-Naggar, A. M. Abdelaziz, S. Abdelbary, Y. R. Hassan, and M. S. Hasanin, "Bio-based antimicrobial food packaging films based on hydroxypropyl starch/polyvinyl alcohol loaded with the biosynthesized zinc oxide nanoparticles," *International Journal of Biological Macromolecules*, vol. 249, p. 126011, 2023.
- [37] V. Amendola and M. Meneghetti, "Laser ablation synthesis in solution and size manipulation of noble metal nanoparticles," *Physical chemistry chemical physics*, vol. 11, no. 20, pp. 3805-3821, 2009.
- [38] G. N. Makarov, "Laser applications in nanotechnology: nanofabrication using laser ablation and laser nanolithography," *Physics-Uspekhi*, vol. 56, no. 7, p. 643, 2013.

- [39] H. R. Ghorbani, "A review of methods for synthesis of Al nanoparticles," *Orient. J. chem*, vol. 30, no. 4, pp. 1941-1949, 2014.
- [40] P. C. Kong and A. W. Kawczak, "Plasma synthesis of nanoparticles for nanocomposite energy applications," Idaho National Lab.(INL), Idaho Falls, ID (United States)2008.
- [41] V. Arole and S. Munde, "Fabrication of nanomaterials by top-down and bottom-up approaches-an overview," *J. Mater. Sci*, vol. 1, pp. 89-93, 20.14
- [42] R. Verma, B. Mantri, and A. K. Srivastava, "Shape control synthesis, characterizations, mechanisms and optical properties of larg scaled metal oxide nanostructures of ZnO and TiO₂," *Adv. Mater. Lett*, vol. 6, no. 4, pp. 324-333, 2015.
- [43] H. Cui ,M. Zayat, and D. Levy, "Sol-gel synthesis of nanoscaled spinels using propylene oxide as a gelation agent," *Journal of Sol-Gel Science and Technology*, vol. 35, pp. 175-181, 2005.
- [44] Y. X. Gan, A. H. Jayatissa, Z. Yu, X. Chen, and M. Li, "Hydrothermal synthesis of nanomaterials," *Journal of Nanomaterials*, vol. 2020, 2020.
- [45] S. K. Singh, A. Dhar, and M. C. Paul, "Hydrothermal synthesis, characterization, and the influence of Bi³⁺ doping over nanocomposite thin films," *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 32, pp. 5504-5519, 2021.
- [46] P. Kuppusamy, M. M. Yusoff, G. P. Maniam, and N. Govindan, "Biosynthesis of metallic nanoparticles using plant derivatives and their new avenues in pharmacological applications–An updated report ",*Saudi Pharmaceutical Journal*, vol. 24, no. 4, pp. 473-484, 2016.
- [47] P. Singh, Y.-J. Kim, D. Zhang, and D.-C. Yang, "Biological synthesis of nanoparticles from plants and microorganisms," *Trends in biotechnology*, vol. 34, no. 7, pp. 588-599, 2016.
- [48] P. K. Dikshit *et al.*, "Green synthesis of metallic nanoparticles: Applications and limitations," *Catalysts*, vol. 11, no. 8, p. 902, 2021.

- [49] C. Dhand *et al.*, "Methods and strategies for the synthesis of diverse nanoparticles and their applications: a comprehensive overview," *Rsc Advances*, vol. 5, no. 127, pp. 105003-105037, 2015.
- [50] A. Zinchenko, Y. Miwa, L. I. Lopatina, V. G. Sergeyev, and S. Murata, "DNA hydrogel as a template for synthesis of ultrasmall gold nanoparticles for catalytic applications ",*ACS applied materials & interfaces*, vol. 6, no. 5, pp. 3226-3232, 2014.
- [51] S. Iravani, "Green synthesis of metal nanoparticles using plants," *Green chemistry*, vol. 13, no. 10, pp. 2638-2650, 2011.
- [52] S. Mourdikoudis, R. M. Pallares, and N. T. Thanh" ,Characterization techniques for nanoparticles: comparison and complementarity upon studying nanoparticle properties," *Nanoscale*, vol. 10, no. 27, pp. 12871-12934, 2018.
- [53] C. S. Santos *et al.*, "Industrial applications of nanoparticles—a prospective overview," *Materials Today: Proceedings*, vol. 2, no. 1, pp. 456-465, 2015.
- [54] B. Mughal, S. Z. J. Zaidi, X. Zhang, and S. U. Hassan, "Biogenic nanoparticles: Synthesis, characterisation and applications," *Applied Sciences*, vol. 11, no. 6, p. 2598, 2021.
- [55] Z. Xiao, C. Zhou, Z. Li, and M. Zheng, "Thermo-mechanical characteristics of high-speed and heavy-load modified gears with elasto-hydrodynamic contacts," *Tribol. Int*, vol. 131, pp. 406–414, 2019 2019.
- [56] T. B. Taha, A. A. Barzinjy, F. H. S. Hussain ,and T. Nurtayeva, "Nanotechnology and computer science: Trends and advances," *Memories-Materials, Devices, Circuits and Systems*, vol. 2, p. 100011, 2022.
- [57] M. A. Shah, B. M. Pirzada, G. Price, A. L. Shibiru, and A. Qurashi, "Applications of nanotechnology in smart textile industry: A critical review," *Journal of Advanced Research*, vol. 38, pp. 55-75, 2022.
- [58] G. Sangeetha, N. Usha, R. Nandhini, P. Kaviya, G. Vidhya, and B. Chaithanya, "A review on properties, applications and toxicities of metal

- nanoparticles," *International Journal of Applied Pharmaceutics*, vol. 12, no. 5, pp. 58-63, 2020.
- [59] N. V. Rao, M. Rajasekhar, K. Vijayalakshmi, and M. Vamshykrishna, "The future of civil engineering with the influence and impact of nanotechnology on properties of materials," *Procedia Materials Science*, vol. 10, pp. 111-115, 2015.

الفصل الثاني :

عموميات حول نبات

الزيتون

التنوع النباتي الشاسع الذي يزين كوكبنا، تبرز عائلات نباتية بعينها بخصائصها المميزة، من بين هذه العائلات نجد العائلة الرمامية *Chenopodiaceae* التي تضم مجموعة واسعة من النباتات القادرة على التكيف مع الظروف البيئية القاسية، بما في ذلك التربة المالحة والجافة بالتوازي مع هذه العائلة المتنوعة، يبرز نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del* الذي يتميز بأوراقه الخشنة و المتينة التي تتكيف مع نقص المياه وارتفاع درجات الحرارة، إذا يكون كثير الانتشار والنمو في فصل الصيف [1] ، يعد الحاد مكونا أساسيا في الغطاء النباتي للعديد من المناطق الجافة وشبه الجافة في شمال أفريقيا وجنوب أوروبا، وله دور في تثبيت التربة ومنع التعرية ،حيث من خلال هذا الفصل النباتي سندرس العائلة الرمامية و دراسة نوع من أنواع هذه العائلة و هو نبات الحاد حيث سنتطرق إلى تعريفه ،تسميته ،تصنيفه ، وصفه و إنتشاره الجغرافي و فوائده وإستعمالاته و كذلك إلى دراسات سابقة حول هذا النبات .

II. دراسة العائلة الرمامية (Chenopodiaceae)

1.II. تعريف العائلة الرمامية

هي فصيلة نباتية تابعة للرتبة القرنفلية Caryophyllales، وتسمى أيضا بعائلة قدم الوزرة [2] ، أو العائلة السرمقية [3] أو العائلة العجرمية [4] ،هي عائلة كبيرة نسبيا من الأعشاب المعمرة و تضم حوالي 106جنس 1400 نوع [5] معظمها تواجد في المناطق الجافة و المالحة حول العالم ،وتتضمن بعضها من الأعشاب الضارة في المناطق المزروعة تتمثل في 32جنس و 66 نوع في المملكة العربية السعودية معظم ما تضمه هذه العائلة من النباتات هي أعشاب و شجيرات لكن تضم أيضا بعض الشجيرات الطويلة و أشباه أشجار ، وقد يكون (الذرع) الساق عشبيا أو خشبيا و غالبا عصيري في العديد من الحالات ،الأوراق ربما تكون متبادلة أو متقابلة مسطحة أو اسطوانية أو بيضاوية عصيرية أو مختزلة إلى حراشف صغيرة أحيانا تكون شوكية إلى شوكية من الطرف الأعلى ، الأزهار صغيرة ثنائية الجنس أو أحيانا أحادية الجنس

،المبيض ضخم ذو حجرة واحدة و يكون ثمرة وحيدة البذور ، ربما تبدو الثمرة محمية في بعض الأجناس بسبب فصوص الغلاف الزهري المستديم التي تكون أجنحة^[6]

يوجد بالجزائر حوالي 75 جنسا من العائلة الرمرامية ومن أهم الأنواع النباتية التابعة لها: الحاد، القيطان، الحارة إلخ^[7] .

2.II. الوصف النباتي للعائلة الرمرامية (Chenopodiaceae)

تكون نباتات هذه العائلة عشبية كثيفة، أوراقها مسطحة واسعة النصل، ذات لون أخضر داكن ملحومة ببعضها البعض في كل زوج^[8] ، كما يوضحه الشكل (1.II) .

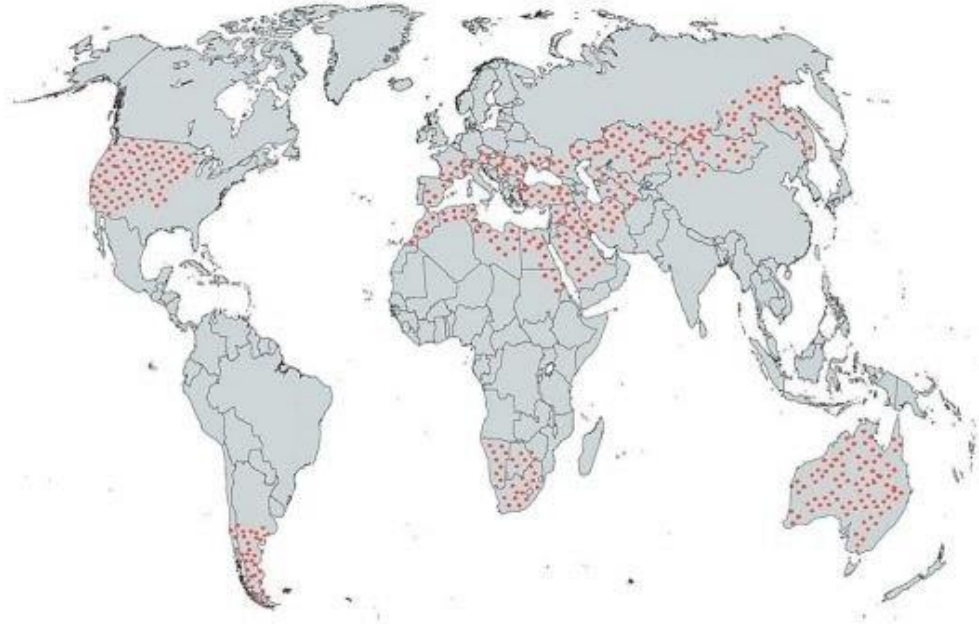
- ❖ الجذور: وتدية ذات إمتدادات عميقة في التربة
- ❖ الأوراق: بسيطة متبادلة أو شبه متبادلة، غالبا ما تكون عسارية او غضة عديمة الأذينات
- ❖ الأزهار: تكون صغيرة الحجم، منتظمة وعديدة التناظر، غالبا ما تكون ثنائية الجنس، وقد تكون أحادية الجنس كما في السبانخ (spinacia) وتتجمع في نورات غير واضحة تشبه السنبله، أو في نورات محدودة
- ❖ الطلع: خماسي الأسدية التي تتوضع عادة بشكل حر مقابل البتلات
- ❖ المدقة: مكونة من كربلتين أو ثلاث كرابل ذات مبيض علوي أو محيطي أحيانا كما في جنس Beta، وهو وحيد المسكن ذو وضع مشيمي قاعدي أو جداري
- ❖ الثمرة: بندقة او فقيرة، كروية أو بيضوية أو جرابية
- ❖ البذرة: اندوسبارمية ذات جنين معكوف وحلزوني^[9]



الشكل (1.11): رسم تخطيطي للأجزاء المهمة للعائلة الرمرامية [10].

3.11. الانتشار الجغرافي للعائلة الرمرامية (Chenopodiaceae)

تضم هذه العائلة حوالي 100 جنس و1000 نوع، وتتوزع العائلة على نطاق واسع في البيئات المالحة المعتدلة وشبه الاستوائية من جميع أنحاء العالم كما هو موضح في **الشكل (2.11)** ولا سيما حول البحر الأبيض المتوسط وبحر قزوين والبحر الأحمر، وفي مناطق السهوب آسيا الوسطى والشرقية، وعلى هوامش الصحراء، وفي سهول الولايات المتحدة فهي تظهر على شكل أعشاب في الأراضي المالحة خاصة عند وجود الفيضانات وفي الأراضي الوعرة [11].



الشكل (2.II): توضح الخريطة الانتشار الجغرافي لنباتات العائلة الرمرامية في العالم ^[12] .

II. دراسة نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*

1.II. تعريف نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*

يسمى في منطقة سوف نبات الحاد (*Cornulaca monacantha Del*) ^[13] ويعرف عند دول

الخليج بالحاذا أو تلح يعد من نباتات البرية الصحراوية الذي يزهر في بداية الصيف حتى فصل الخريف،

ينتشر بشكل واسع في معظم المناطق كما يمكن أن نجده قرب التربة المالحة، يعتبر غذاء أساسيا لعدة

حيوانات صحراوية خاصة الجمال ^[14] كما موضح في **الشكل (3.II)** .



الشكل (3.II): صور توضح نبات الحاد.

2.II. تسميات نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*

يرجع إختلاف أسماء النبات إلى الإختلاف أماكن تواجده حول العالم وإختلاف اللغات، يأخذ هذا

النبات عدة أسماء: الحاد، الحاذ والسليج [15].

3.II. تصنيف نبات الحاد

ينتمي نبات الحاد إلى العائلة Chenopodiaceae حيث التصنيف الكامل لهذا النبات موضح

في الجدول (1.II) [16].

الجدول (1.II): التصنيف النباتي لنبات الحاد *Cornulaca monacantha Del.*

المملكة	نباتية
الشعبة	نباتات وعائية
القسم	مغطاة البذور (زهريّة)
الطائفة	ثنائية الفلقة
تحت الطائفة	الكاربوفيلديات
الرتبة	القرنفليات
العائلة	الرمرامية
الجنس	<i>Cornulaca</i>
النوع	<i>Cornulaca monacantha Del</i>

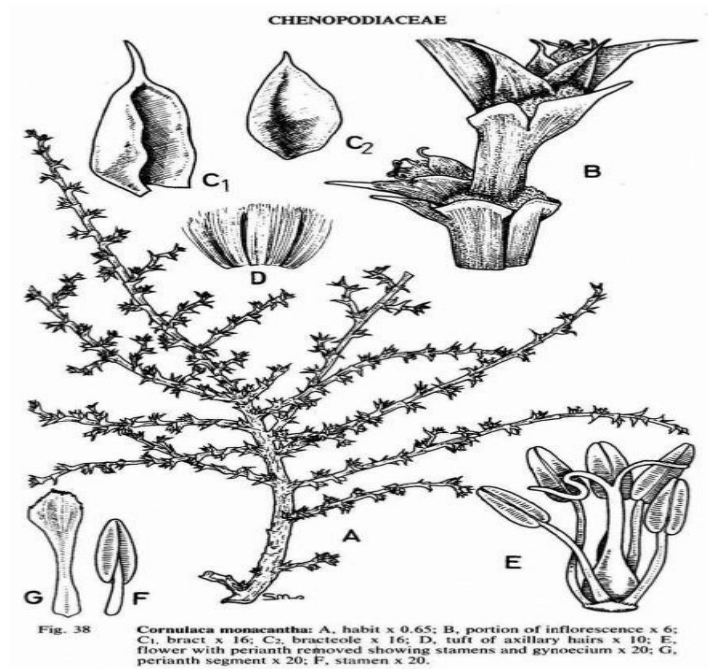
4.II. دورة حياة نبات الحاد

تتميز دورة حياة نبات الحاد بعدة مراحل أساسية ، تبدأ هذه الدورة بإنبات البذور خلال أشهر الشتاء الرطبة، حيث تكون الظروف المناخية ملائمة لنمو البادرات، بعد ذلك يمر النبات بمرحلة النمو الخضري خلال الربيع، حيث يزداد حجمه وتتطور أوراقه وجذوره ، في الصيف الحار والجاف يدخل النبات في مرحلة الإزهار والإثمار، حيث ينتج الأزهار والثمار التي تحتوي على البذور ، وأخيراً في الخريف تجف الأجزاء الهوائية من النبات وتموت، بينما تبقى البذور كامنة في التربة حتى الشتاء التالي لتبدأ دورة حياة جديدة [17] .

5.II. الوصف النباتي للنبات الحاد

هذا النبات عبارة عن شجيرات معمرة تتسم بتفرعاتها الكثيفة وسيقانها الخشبية، أوراقها متبادلة الوضع، جلدية الملمس، لاطئة، وقواعدها عريضة تحيط بالساق، مثلثة الشكل، وتنتهي قمته بشوكة حادة [18]، أزهارها صغيرة جدًا، خنثى، تتجمع في نورات إبطية تضم من 3 إلى 5 أزهار مغطاة بخصلات شعرية كثيفة بيضاء اللون.

تحتوي كل زهرة على 5 بتلات، وتتميز بوجود سبلة أو سبيلتين ذات قمة طويلة وحادة. أما الأسدية، فعددها 10، نصفها يحمل شعيرات الثمار صغيرة، ملساء، وفقيرة، ولونها أصفر فاتح، وغير خصبة [19].



الشكل (4.II): رسم تخطيطي يوضح لنبات الحاد.

6.II. الانتشار الجغرافي للنبات الحاد

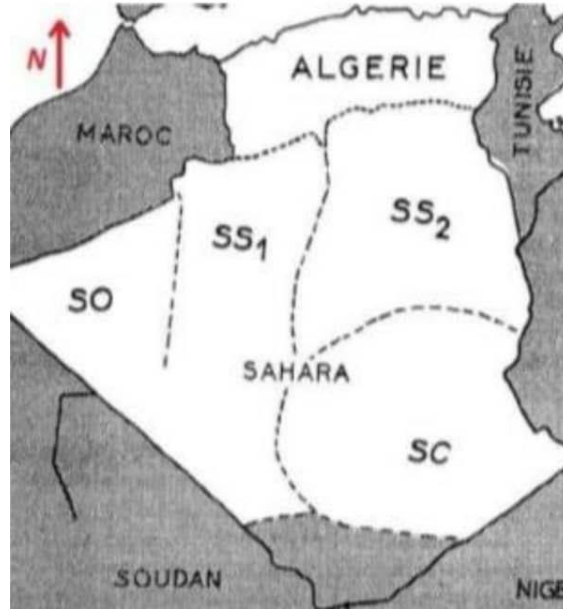
ينتشر نبات الحاد في الجزائر بشكل أساسي في المناطق الصحراوية الشمالية، سواء في جزئها الغربي أو الشرقي (كما هو موضح في المنطقتين SS1 و SS2)، كما يتواجد أيضًا في الصحراء الوسطى

(الصورة SC)، ولكنه أقل انتشارًا في الصحراء الغربية (المنطقة SO) ^[19] كما هو مبين في الخريطة

الشكل (5.II) .

كما يعتبر نبات الحاد نوعا صحراويا رمليا يتواجد في شمال افريقيا و غرب اسيا في شبه الجزيرة

العربية و بعض الدول الأخرى كإيران و باكستان ^[20] .



الشكل (5.II): صورة توضح انتشار نبات الحاد في الجزائر ^[21] .

7.II. فوائد واستعمالات نبات الحاد

يُستخدم نبات الحاد بشكل حصري كعلف للجمال، حيث يساعد على زيادة إنتاج حليبها ^[18] بالإضافة

إلى ذلك، يمتلك النبات فوائد علاجية إذا تُستخدم أوراقه وأغصانه في تحضير منقوع أو شاي عشبي

كمستحلب (Tisane)، أو في علاج اليرقان والجرب وبعض أمراض الكبد، كما يُستخدم في عدة مجالات:

في مجال الطب

يُعد نبات *Cornulaca monacantha Del* جزءاً من الموروث الشعبي العلاجي، حيث يتم غلي أجزائه العلوية لاستخدامه في علاج أمراض الكبد واليرقان، كما أن أوراقه ذات الأشواك تستخدم لمكافحة الجرب عند الإبل [22].

في مجال الصيدلة

لا يوجد دليل علمي يدعم استخدامه المحتمل في هذا المجال كما تم التأكد من عدم سميته [23].

في مجال التغذية

يعتبر نبات الحاد مرعى ممتازا لكثير من الحيوانات الصحراوية خصوصا الجمال، وذلك لتأثيره على زيادة إدرار الحليب [24].

في مجال البيئة

من الناحية البيئية، يُعد نبات الحاد من النباتات المقاومة لدرجات الحرارة المرتفعة والجفاف، كما يلعب دوراً هاماً في تثبيت التربة الرملية ومنع التآكل، ويُستخدم أحياناً كعلف للحيوانات الصحراوية مثل الإبل [25].

8.II. أهم الدراسات السابقة حول نبات الحاد

تم إجراء دراسة بيولوجية على أجزاء مختلفة من نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*، حيث تم فصل المستخلص الكحولي الكلي للنبات إلى أربعة أجزاء (إيثر، أسيتات الإيثيل، صابونين، وأسيتون) ثم تم تقييم أنشطتها البيولوجية المختلفة مثل مضادات الالتهاب، ومضادات السكر، ومضادات الأكسدة، ومضادات الميكروبات، وسمية الخلايا. أظهرت النتائج أن جزء أسيتات الإيثيل كان الأكثر فعالية،

بينما أظهر جزء الصابونين أقل تأثير في جميع الاختبارات البيولوجية. وكشفت الدراسة الكيميائية عن وجود 13 مركبًا من صابونينات ثلاثية التربين، و6 مركبات من مشتقات الفلافونويد، و4 مركبات من التانينات الغاليلية [26].

تم إجراء دراسة أخرى لتحليل التركيب الكيميائي والنشاط البيولوجي للأجزاء الهوائية والجذرية لنبات *Cornulaca monacantha Del* الذي تم جمعه من منطقة الشرق الجزائري الكبير كشف الفحص الكيميائي النباتي عن وجود الفلافونويدات، والتانينات، والصابونين، والكومارين، والغليكوزيدات، والستيرويدات، والتربينات الثلاثية أما بالنسبة للنشاط المضاد للبكتيريا، فقد أظهر اختبار الانتشار على الأقراص باستخدام 21 سلالة بكتيرية استجابات متنوعة [27].

كشفت دراسة تحليلية للمجموع الخضري لنبات الحاد، جُمع من موقعين مصريين (رمانة وخميسة) خلال موسم الجفاف، عن انخفاض ملحوظ في محتوى العصارة، الكلوروفيل (أ وب)، الكاروتينويدات، السكريات والبروتينات الذائبة، الفينولات الكلية، بالإضافة إلى عنصري الكالسيوم والمغنيزيوم. بالمقابل، لوحظ ارتفاع في مستويات الكربوهيدرات (الكلية وغير الذائبة)، البرولين، الجلایسين بيتاين، والصوديوم والبوتاسيوم. كما بينت الدراسة اختلافات في تركيز هذه المركبات بين نباتات الموقعين [28].

تشير الأبحاث المنجزة حول نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del* إلى احتوائه على بعض مركبات الأيض الثانوي مثل:

❖ الأحماض التربينية: مثل Acide manevqalique، Acide azizique [29]

الصابونوزيدات [30]

❖ الفلافونويدات: مثل Luteolin-8-O-glucoside-3-O-rutinoside، ومركب Quercetin-

3-O-rutinoside ومركب Quercctin-3-O-Galactoside [31]

❖ التانينات الغاليلية galloyltannin: تم اكتشاف نوعين جديدين هما Monacanthin A

[32] Monacanthin B

❖ مركبات أخرى مثل Luteolin-7-O-rhamnoside [33]، Luteolin-7-O-glucoside

تلخص هذا الدراسات وجود مجموعة متنوعة من المركبات الكيميائية في نبات الحاد، والتي قد تكون مسؤولة عن استخداماته التقليدية وفوائده المحتملة.

خاتمة الفصل

في هذا الفصل، تم تناول معلومات عامة حول نباتات الفصيلة الرمامية، بما في ذلك نبات الحاد (*Cornulaca monacantha Del*) وقد شمل ذلك تعريف النبات وتصنيفه وانتشاره الجغرافي، بالإضافة إلى استعراض استخداماته العلاجية في معالجة بعض الأمراض: مثل أمراض الكبد واليرقان.

- [1] J. M. Svoboda, "Diary Series Vocabulary," ed: Newbook Digital Texts, 2016.
- [2] O. B. Andersland and H. M. Al-Moussawi, "Crack formation in soil landfill covers due to thermal contraction," *Waste management & research*, vol. 5, pp. 445-452, 1987.
- [3] S .M. Al-Khatib, A. Arshad, E. M. Balk, S. R. Das, J. C. Hsu, J. A. Joglar, *et al.*, "Risk stratification for arrhythmic events in patients with asymptomatic pre-excitation: a systematic review for the 2015 ACC/AHA/HRS guideline for the management of adult patients with supraventricular tachycardia: a report of the American College of Cardiology/American Heart Association Task Force on Clinical Practice Guidelines and the Heart Rhythm Society," *Circulation*, vol. 133, pp. e575-e586, 2016.
- [4] S. Kasap, J. B .Frey, G. Belev, O. Tousignant, H. Mani, J. Greenspan, *et al.*, "Amorphous and polycrystalline photoconductors for direct conversion flat panel X-ray image sensors," *Sensors*, vol. 11, pp. 5112-5157, 2011.
- [5] A. S. M. Shukri, "Islamic feminist discourse: Origins and development in the Muslim world," in *International Conference on Humanities, Universiti Sains Malaysia*, 2011, pp. 14-16.
- [6] V. A. Pavlov, W. R. Parrish, M. Rosas-Ballina, M. Ochani, M. Puerta, K. Ochani, *et al.*, "Brain acetylcholinesterase activity controls systemic cytokine levels through the cholinergic anti-inflammatory pathway," *Brain, behavior, and immunity*, vol. 23, pp. 41-45, 2009.
- [7] M. Spencer Chapman, A. M. Ranzoni, B. Myers, N. Williams, T. H. Coorens, E. Mitchell, *et al.*, "Lineage tracing of human development through somatic mutations," *Nature*, vol. 595, pp. 85-90, 2021.
- [8] I. Bouzghaia, "The feminist movement, equality and qiwama in Morocco: Perspectives and prospects," *PROMOTING*, p. 71, 2014.

- [9] S. Shankara, *Shankara on the Absolute: Shankara Source Book Volume One*: eBook Partnership, 2022.
- [10] K. A. Gano-Cohen, C. E. Wendlandt, K. Al Moussawi, P. J. Stokes, K. W. Quides, A. J. Weisberg, *et al.*, "Recurrent mutualism breakdown events in a legume rhizobia metapopulation," *Proceedings of the Royal Society B*, vol. 287, p. 20192549, 2020.
- [11] N. Bouarroudj, B. Benkhellaf, D. Boukezoula, A. Bourtel, A. Boukhalifa, B. Boudriou, *et al.*, "Prise en charge odontostomatologique de la maladie de Crohn: patients sous anti-TNF alpha," 2022.
- [12] N. Cherrada, A. E. Chemsas, N. Gheraissa, I. Laib, Z. Gueboudji, M. EL-Shazly, *et al.*, "Gastroprotective Efficacy of North African Medicinal Plants: A Review on Their Therapeutic Potential for Peptic Ulcers," *Food Science & Nutrition*, vol. 12, pp. 879-2024, 8824-3
- [13] M. Halis, I. H. Ozsabuncuoglu, and A. Ozsagir, "The values of entrepreneurship and factors that effect entrepreneurship: Findings from Anatolia," *Serbian Journal of Management*, vol. 2, pp. 21-34, 2007.
- [14] M. A. Al-Khatib, "The concept of justice in Islam," *Journal of Ethnic and Cultural Studies*, vol. 10, pp. 45-66, 2023.
- [15] W. Zahnit, O. Smara, L. Bechki, C. Bensouici, M. Messaoudi, N. Benchikha, *et al.*, "Phytochemical profiling, mineral elements, and biological activities of *Artemisia campestris* L. grown in Algeria," *Horticulturae*, vol. 8, p. 914, 2022.
- [16] F. F. Mohammed, C. J. Pennington, Z. Kassiri, J. S. Rubin, P. D. Soloway, U. Ruther, *et al.*, "Metalloproteinase inhibitor TIMP-1 affects hepatocyte cell cycle via HGF activation in murine liver regeneration," *Hepatology*, vol. 41, pp. 857-867, 2005.
- [17] R. O. Shittu, B. A. Issa, G. T. Olanrewaju, A. O. Mahmoud, S. A. Aderibigbe, and L. O. Odeigah, "A Comparison of Clinical Features of Depressed and Non-Depressed People Living with HIV/AIDS, in Nigeria, West Africa," *Open Journal of Medical Psychology*, vol. 2014, 2013.

- [18] D. de Castro Halis, "Teoria do direito e" fabricação de decisões": a contribuição de Benjamin N. Cardozo," *Revista Brasileira de Direito Constitucional*, vol ,6 .pp. 358-374, 2005.
- [19] F. Médail, "Pierre Quézel (1926-2015), une vie et une oeuvre scientifique entre Méditerranée et Sahara/Pierre Quézel (1926-2015), his life and scientific work between the Mediterranean Basin and the Sahara," *Ecologia mediterranea*, vol. 44, pp. 5-22, 2018.
- [20] F. Fernandez, "L'engagement émotionnel durant l'enquête sociologique: retour sur une observation «anonyme» auprès d'ex-usagers de drogues," *Carnets de bord de la recherche en sciences humaines*, pp. pp. 78-87, 2005.
- [21] F .Médail, "Pierre Quézel (1926-2015) et ses recherches sur les forêts méditerranéennes," *Forêt Méditerranéenne*, vol. 37, pp. 3-16, 2016.
- [22] M. Liu, G. Jiang, Y. Li, S. Niu, L. Gao, L. Ding, *et al.*, "Leaf osmotic potentials of 104 plant species in relation to habitats and plant functional types in Hunshandak Sandland, Inner Mongolia, China," *Trees*, vol. 17, pp. 554-560, 2003.
- [23] N. Yahi, E. Vela, S. Benhouhou, G. De Belair, and R. Gharzouli, "Identifying important plants areas (key biodiversity areas for plants) in northern Algeria," *Journal of threatened taxa*, pp. 2753-2765, 2012.
- [24] A. A. EL-KHOULY, "INFLUENCE OF WATER STRESS AND SALINITY ON GERMINATION AND SEEDLING GROWTH OF THREE MEDICINAL DESERT PLANT SPECIES," *Al-Azhar Bulletin of Science*, vol ,17 .pp. 103-129, 2006.
- [25] M. Halis, O. Akowa, and H. Tagraf, "The relationship between ethics and quality: Conflicts and common grounds," *Serbian Journal of Management*, vol. 2, pp. 127-145, 2007.
- [26] M. Ashour and B. Alsuwayt, "Biological evaluation of *Cornulaca monacantha* Del," *International Journal of Pharmaceutical and Phytopharmacological Research*, vol. 9, pp. 71-75, 2019.

- [27] M. A. Abdaoui Meryem Zahra Ayed Djamila, "Etude phytochimique et activités biologiques d'une plante médicinale saharienne» *Cornulaca monacantha Delil*», 2018.
- [28] M. M. Abd El-Maboud, "Mechanisms of drought tolerance in *Cornulaca monacantha*," *Del. Journal of Environmental Sciences*, vol. 45, pp. 175-186, 2016.
- [29] A. DAWIDAR, E. ABUMUSTAFA, G. RUCKER, E. ELKHRISY, and R. ABBAS, "Marmaricin, a new sesquiterpenoid coumarin from *Ferula marmarica* L.," *Chemical and Pharmaceutical Bulletin*, vol. 27, pp. 3153-3155, 1979.
- [30] F. Kamel, S. M. Goldman, D. M. Umbach, H. Chen, G. Richardson, M. R. Barber, *et al.*, "Dietary fat intake, pesticide use, and Parkinson's disease," *Parkinsonism & related disorders*, vol. 20, pp. 82-87, 2014.
- [31] A. Allam, G. El-Husseiny, Y. Khafaga, A. Kandil, A. Gray, A. Ezzat, *et al.*, "Ewing' s Sarcoma of the Head and Neck: A Retrospective Analysis of 24 Cases," *Sarcoma*, vol. 3, pp. 11-15, 1999.
- [32] E. Kandil, E. Melikman, and B. Adinoff, "Lidocaine infusion: a promising therapeutic approach for chronic pain," *Journal of anesthesia & clinical research*, vol. 8, p. 697, 2017.
- [33] R. D. Baird, J. Kitzen, P. A .Clarke, A. Planting, S. Reade, A. Reid, *et al.*, "Phase I safety, pharmacokinetic, and pharmacogenomic trial of ES-285, a novel marine cytotoxic agent, administered to adult patients with advanced solid tumors," *Molecular cancer therapeutics*, vol. 8, pp.2009 ,1437-1430 .

الفصل الثالث:

الجزء الأول العملية

النشأة والمناقشة

في هذا الفصل سيتم التركيز بشكل أساسي على الجانب التطبيقي للدراسة والنتائج التي تم الحصول عليها ومناقشتها، وقد حظيت الجسيمات النانوية المعدنية بإهتمام كبير في السنوات الأخيرة، حيث تستخدم مواد أولية واعدة في تطبيقات متنوعة، في هذا العمل تم تحضير كل من جسيمات الزنك والمغنيزيوم النانوية باستخدام مستخلص نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del* وسيتم توصيف هذه الجسيمات النانوية باستخدام تقنيات الطيف المختلفة، مثل جهاز الأشعة المرئية وفوق البنفسجية (UV-Vis) وجهاز الأشعة تحت الحمراء (FTIR)، وجهاز حيود الأشعة السينية (DRX)، مع دراسة نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لجسيمات النانوية المحضرة، وتم إجراء هذا العمل في مخبر Valorisation et Technologie des Ressources Saharienes بجامعة الوادي _ بالجزائر.

1.III المواد والأدوات والأجهزة المستعملة

III 1.1 المواد الكيميائية

المواد الكيميائية المستعملة يوضحها الجدول (1.III):

الجدول (1.III): يوضح المواد الكيميائية المستعملة في خطوات العمل.

المواد	الصيغة الكيميائية	النقاوة (%)	الكتلة المولية (g/mol)
هيدروكسيد الصوديوم	NaOH	97	40
أسيتات الزنك	ZnC ₄ H ₆ O ₄	99	183.48
سلفات المغنيسيوم	Mg O ₄ S	97	120.37

2.1.III الأدوات و المواد

ماء مقطر، نبات الحاد، ملعقة، بيشر، قمع، ورق ترشيح، حوجلة، دورق، أنابيب الاختبار

3.1.III الأجهزة

مخلاط مغناطيسي، ميزان حساس، جهاز قياس الحرارة، جهاز الطرد المركزي، فرن تجفيف، فرن حرق، جهاز موجات فوق صوتية (UL TRASONS- H)، جهاز مطيافية الأشعة المرئية وفوق البنفسجية (UV-Vis)، جهاز انعراج الأشعة السينية (DRX)، جهاز مطيافية الأشعة تحت حمراء (FTIR).

2.III المادة النباتية

1.2.III تجميع وتحضير النباتات

تم الحصول على نبات الحاد من سوق الشعبي لولاية الوادي-الجزائر، كما هو موضح في **الشكل**

(1.III):



الشكل (1.III): صورة توضح نبات الحاد.

2.2.III الطحن

تم تحضير مسحوق النبات بطحنه كما هو موضح في الشكل (2.III):



الشكل (2.III): مسحوق نبات الحاد.

3.III خطوات العمل

1.3.III تحضير المستخلص المائي للنبتة

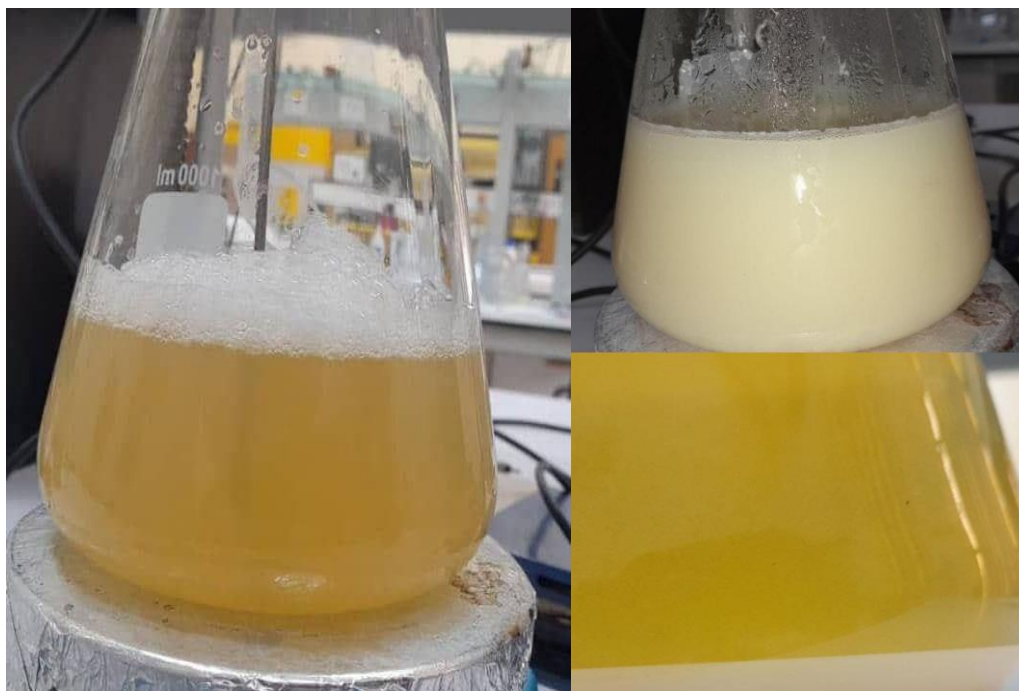
تم غسل مسحوق النبات جيدا بالماء المقطر لإزالة أي شوائب أو غبار أو مواد أخرى عالقة على النبات ثم تم تجفيف بالهواء في الظل عند درجة حرارة الغرفة وذلك للحفاظ على المكونات النشطة في النبات وعدم تلفها بفعل أشعة الشمس المباشرة، وتم بعد ذلك غلي 100 غرام من مسحوق النبات المجفف و 1500 مل من الماء المقطر عند درجة حرارة 65 درجة مئوية، يتم تسخين الخليط وتحريكه باستمرار لمدة ساعتين، تم ترشيح المستخلص البني الناتج باستخدام ورق الترشيح، يتم حفظ المستخلص الناتج في الثلاجة لإستخدامه لاحقا كما هو موضح في الشكل (3.III):



الشكل (3.III): توضيح مستخلص نبات الحاد.

1.2.3.III تحضير جسيمات أكسيد الزنك النانوية

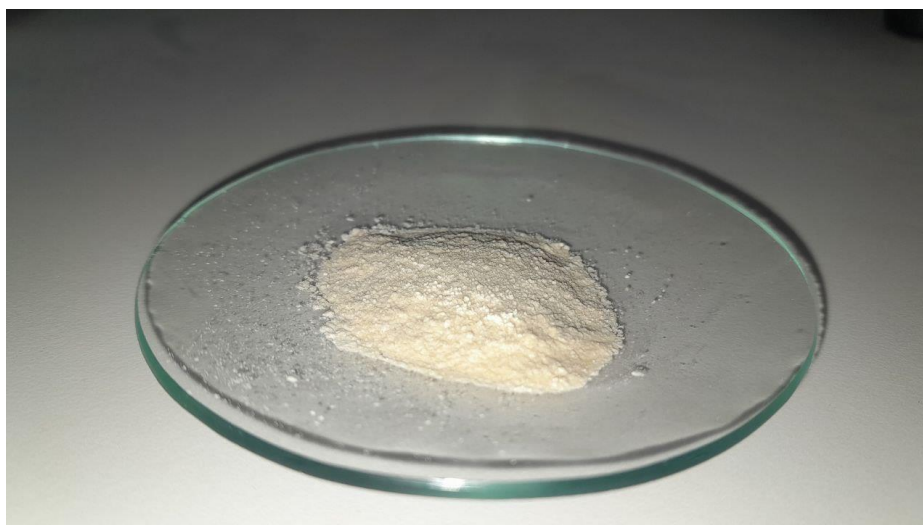
لتحضير جسيمات أكسيد الزنك النانوية ZnO NPs باستخدام مستخلص النبتة، حيث تم خلط 50 مل من مستخلص النبتة و100 مل من 0.1 مولاري أسيتات الزنك ($Zn(CH_3CO_2)_2$) وتحريك الخليط باستخدام محرك مغناطيسي عند 70 درجة مئوية، بعد ذلك نظيف قطرات من محلول NaOH بتركيز 2 مولاري ببطء للخليط مع استمرار التحريك لمد ساعتين حيث يتغير لون المحلول وذلك دليل على تشكل (ZnO NPs) كما في الشكل (4.III) وتم فصل الراسب عن المحلول باستخدام الطرد المركزي عند 3000 دورة في الدقيقة لمدة 10 دقائق وغسل عدة مرات باستخدام الماء المقطر لإزالة أيونات أو شوائب متبقية من التفاعل ثم بعد ذلك تجفيف الراسب في فرن عند 80 درجة مئوية لمدة 24 ساعة ثم حرقه عند 600 درجة مئوية لمدة 5 ساعات للحصول على (ZnO NPs) كما هو موضح في الشكل (5.III):



(a)

(b)

الشكل (4.III): تشكل جسيمات أكسيد الزنك النانوية: (a) قبل التشكل، (b) بعد التشكل.

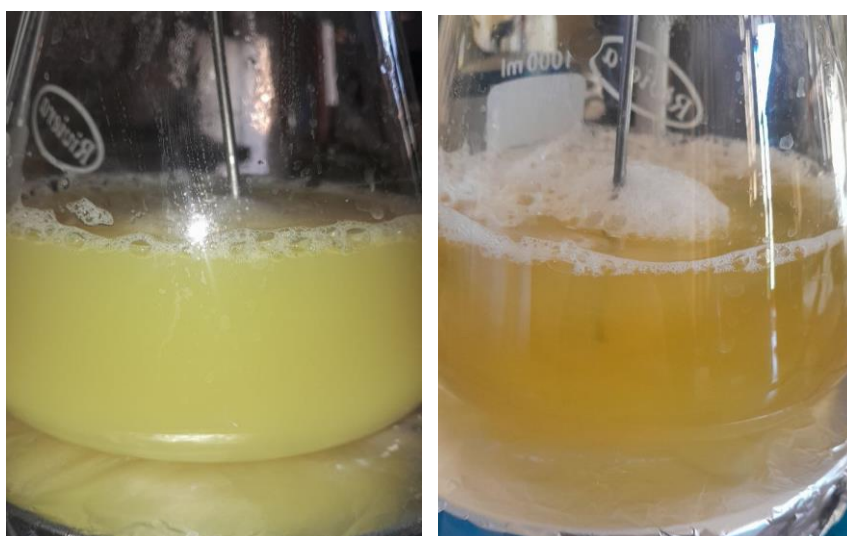


الشكل (5.III): صورة توضح جسيمات أكسيد الزنك النانوية بعد الحرق.

2.2.3.III تحضير جسيمات أكسيد المغنيسيوم النانوية

لتخليق جسيمات أكسيد المغنيسيوم النانوية (MgO NPs) باستخدام مستخلص نبات الحاد حيث تم خلط 200 مل من مستخلص النبات و 400 مل من 0.1 مولاري سولفات المغنيسيوم ($Mg\ O_4S$) وتحريك

الخليط باستخدام محرك مغناطيسي عند 70 درجة مئوية بعد ذلك إضافة 2 مولاري من (NaOH) للخليط ببطء لمدة ساعتين وتغيير لون الخليط دليل على تشكل جسيمات أكسيد المغنسيوم النانوية (MgONPs) كما في الشكل (6.III) وتم فصل الراسب عن المحلول باستخدام جهاز الطرد المركزي عند 3000 دورة في الدقيقة لمدة 10 دقائق وغسل عدة مرات باستخدام الماء المقطر لإزالة أي أيونات أو شوائب بعد ذلك تجفيف الراسب في فرن عند 80 درجة مئوية لمدة 24 ساعة ثم حرقه عند 600 درجة مئوية لمدة 5 ساعات للحصول على (MgO NPs) كما هو موضح في الشكل (7.III):



(b)

(a)

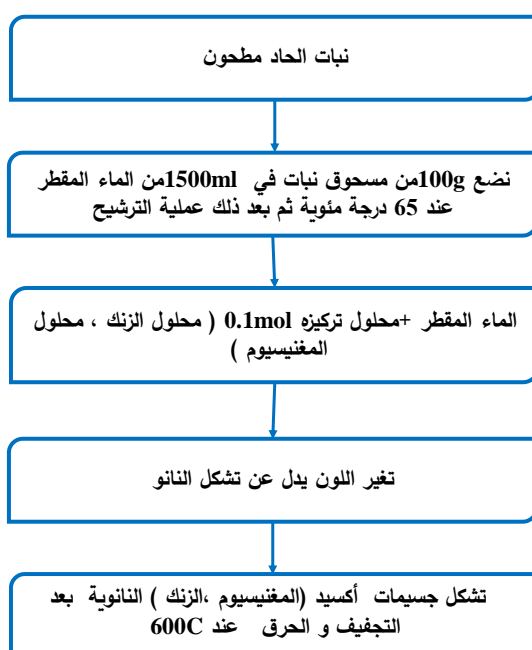
الشكل (6.III): تشكل جسيمات أكسيد المغنسيوم النانوية: (a) قبل التشكل، (b) بعد التشكل.



الشكل (7.III): صورة توضح جسيمات أكسيد المغنسيوم النانوية بعد الحرق.

بعد تحضير جسيمات أكسيد المغنيسيوم النانوية (MgO NPs)، وجسيمات أكسيد الزنك النانوية (ZnO) يتم التحقق من نجاح المنتج النهائي من خلال تحليل العينة باستخدام التقنيات الطيفية: جهاز الأشعة المرئية وفوق البنفسجية (UV-Vis) وجهاز إنعراج الأشعة السينية (DRX) وجهاز الأشعة تحت حمراء (FTIR).

المخطط يوضح طريقة العمل **الشكل (8.III):**



الشكل (8.III): يوضح مخطط طريقة العمل لتوليف أكسيد الزنك، والمغنيسيوم النانوية المصنع من نبات

الحاد *Cornulaca monacantha Del*.

4.III طرق التوصيف

1.4.III مطيافية الأشعة فوق بنفسجية (Ultraviolet visible spectrophotometer)

هي عبارة عن موجات كهرومغناطيسية، ذات طول موجي أقصر من الضوء المرئي سميت فوق البنفسجية لأن طول موجة اللون البنفسجي هو الأقصر بين ألوان الطيف وطول موجاتها يبدأ من 400 نانومتر إلى 100 نانومتر، وطاقتها تبدأ من 3 إلى 124 إلكترون فولط^[1]

حيث تعتبر مطيافية الأشعة فوق بنفسجية المرئية (UV-Vis) أسلوب تحليليا أساسيا يعتمد على قياس تفاعل المادة مع الضوء في منطقتي الأشعة فوق بنفسجية والمرئية من الطيف الكهرومغناطيسي، وتقوم هذه التقنية بتحديد كمية الضوء التي تمتصها أو تنقلها العينة عند أطوال موجية محددة، مما يوفر معلومات قيمة حول التركيب الإلكتروني للمادة وتركيزها^[2]

عندما تتعرض الإلكترونات لموجة ضوئية بتردد يتوافق مع تردد اهتزازها، فإنها تمتص طاقة الموجة الضوئية وتبدأ في الاهتزاز يتحول هذا الإهتزاز إلى حرارة عندما يتفاعل الألكترون المهتز مع الإلكترونات الأخرى، يقوم تحليل الطيف الضوئي بقياس امتصاص المادة للضوء كدالة لطول الموجة يزداد امتصاص الضوء بزيادة عدد الجزيئات التي تمتص الضوء عند طول موجة معين^[2]

تعتمد تقنية مطياف الإمتصاص على مبدأ Beer Lambert الذي يربط بين إمتصاص المادة وتركيزها وطول مسارها الضوئي. وينص القانون على أن الإمتصاص يتناسب طرديا مع التركيز وطول المسار الضوئي وتعطى العلاقة رياضيا بالصيغة:

$$A = \epsilon CL \quad (1)$$

A : هو الإمتصاص

ϵ : هو معامل الإمتصاص المولي

C : هو تركيز العينة

L : هو طول المسار الضوئي (طول مسار العينة)

تعرف الإمتصاصية A ب لوغاريتم النسبة العكسية (I₀/I) وتعرف النفاذية T بالنسبة (I/I₀)

نتيجة لذلك:

$$A = -\log (I/I_0) = -\log T = \epsilon CL \quad (2)$$

$$A = -\log T \quad (3)$$

$$A = \log (1/T) \quad (4)$$

حيث:

I₀ : شدة الضوء الساقط

I : شدة الضوء النافذ

لدراسة الجسيمات النانوية، يتم استخدام مطيافية الإمتصاص المرئي للأشعة فوق البنفسجية وذلك

لتحديد فجوة النطاق (فجوة الطاقة) المباشرة [2].

يمكن تحديد فجوة الطاقة (E_g) للجسيمات النانوية من خلال حافة الإمتصاص باستخدام علاقة Tauc:

$$(\alpha hv) = A (hv - E_g^{opt}) \quad (5)$$

يمكن تحديد قيمة فجوة الطاقة (E_g) للجسيمات النانوية بواسطة مطيافية الإمتصاص المرئي ل

(UV) بناء على معامل الإمتصاص (α)، وطاقة الفوتون (hv)، والثابت A، والأس n الذي يعتمد على

نوعية الانتقال الإلكتروني [3, 4] ، ويتم حساب قيمة فجوة الطاقة من خلال تقاطع جزء خطي من منحنى

الإمتصاص مع محور الطاقة.

في دراسة لجسيمات أكسيد المغنسيوم النانوية، عند دراسة خصائصها الضوئية، تم تعريض 0.1mg من جسيمات أكسيد المغنسيوم في 2ml من الماء المنزوع الأيونات للموجات فوق الصوتية (UL TRASONS-H) كما هو موضح في الشكل (9.III) لمدة 15 دقيقة، وتم تحليل المحلول بواسطة جهاز مطيافية الأشعة فوق البنفسجية المرئية (UV-Vis) كما هو موضح في الشكل (10.III)، كما هو الحال في جسيمات أكسيد الزنك النانوية. حيث تم رصد الفحص البصري والإمتصاصية لتقدير قيمة فجوة النطاق (Eg) بإستخدام علاقة Tauc.



الشكل (9.III): جهاز موجات فوق صوتية (UL TRASONS- H).



الشكل (10.III): جهاز مطيافية الأشعة المرئية فوق بنفسجية (UV-Vis).

2.4.III مطيافية الأشعة تحت الحمراء (Fourier Transform infrared spectroscopy)

تعتبر تقنية التحليل الطيفي بالأشعة تحت الحمراء وسيلة فعالة لتحليل العينات وتقديم معلومات حول الخصائص الوظيفية والهيكلية للمركبات، ويمكن لجهاز (FTIR) الشكل (11.III) التمييز بين مكونات نبات الحاد من خلال مقارنة الطيف المميز، مما يشير إلى وجود أو عدم وجود مجموعات وظيفية محددة، يتم تحضير أقراص من العينات المركبة باستخدام نبات الحاد، ثم تجرى قياسات (FTIR) في نطاق الترددات بين 4000 و 400 cm^{-1} [6,5].



الشكل (11.III): جهاز مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR).

3.4.III مطيافية الأشعة السينية (DRX)

حيود الأشعة السينية كما موضح الشكل (12.III) هي تقنية تستخدم إشعاعاً كهرومغناطيسياً قصير الموجه بين (10^{-9} و 10^{-11})، تتميز الأشعة بخصائص مشابهة للضوء حيث تنتقل في خطوط مستقيمة صادرة من مصدرها، و تمر من خلال المجالات المغناطيسية و الكهربائية [7] ، تعد هذه التقنية طريقة لتحديد طبيعة و هيكل المواد البلورية، كما تسمح بتأكيد الحالة غير المتبلورة للمواد غير البلورية، بالنسبة للمواد التي تعرض خصائص الحالة البلورية أي الترتيب المنظم و الدوري للذرات المكونة للعينه، و

يمكن وصف هذا الترتيب أو التراص بمجموعة من ينتج حيود موجات موجزة تعكس بعضها البعض لتتكون من قمم مميزة لمستويات شبكية الانعراج ، يعتمد موضع كل قمة أي زاوية الانعراج (θ) و المسافة الشبكية للمستويات العاكسة (d_{hkl}) ، على الطول الموجي للأشعة السينية (λ) يمكن قياس هذه الزوايا باستخدام قانون براغ [8]

$$n\lambda = 2d_{hkl} \sin \theta \quad (6)$$

h, k, l : قرائن ميلر

d : مسافة شبكية بين مستويين متتاليين

λ : الطول الموجي للأشعة السينية

θ : زاوية الانعراج

n : ترتيب الانعراج

يمكن تحديد متوسط حجم البلورات لهذه الجسيمات النانوية باستخدام معادلة Debye-Scherrer:

$$D = K\lambda / \beta \cos \theta$$

D : متوسط حجم البلورة، و K هو ثابت (0.89) scherrer، تمثل λ الطول الموجي للأشعة السينية، وتعبير θ عن زاوية براغ (2θ)، بينما β تمثل العرض الكامل عند نصف الحد الأقصى (FWHM) وتقاس بوحدة الراديان [9, 10].



الشكل (12.III): جهاز مطيافية الأشعة السينية (DRX).

III. 4.4. نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)

طُوِّرت نماذج الأكاسيد النانوية التي تُمثل أكسيد المغنيسيوم (MgO) وأكسيد الزنك (ZnO) لمحاكاة الأشكال الهندسية المجزأة لجسيمات أكسيد المعدن النانوية المعنية، و بُنيت كل مجموعة بناءً على معلمات بلورية مُستقاة من قاعدة بيانات البلورات المفتوحة (COD)، و حُسِّنت للحفاظ على الاتساق الهيكلي مع الأشكال النانوية المُبلَّغ عنها^[11].

استُخدمت أدوات البرمجيات والمنصات الحسابية التالية:

برنامج Avogadro (الإصدار 1.2.0): لبناء وتصور الأشكال الهندسية للعناقيد النانوية^[12].

❖ برنامج Gaussian 16: لإجراء حسابات كيميائية كمية، بما في ذلك تحسين الهندسة، وتحليل

التردد، وتقييم الخصائص الإلكترونية^[13].

❖ برنامج GaussView لمعالجة ملفات المخرجات الغوسية لاحقًا، بما في ذلك تصور المدارات الجزيئية،

وأسطح الجهد الكهروستاتيكي (ESP)، وتوزيعات شحنة موليكين (Mulliken)^[14].

❖ برنامج Microsoft Excel: لتبويب البيانات وتنسيقها.

III. 5.4. النهج المنهجي

تم إجراء جميع حسابات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لهياكل النانوية باستخدام الوظيفة الهجينة B3LYP، والتي أظهرت أداءً موثوقاً في نمذجة البنية الإلكترونية لأكاسيد المعادن الانتقالية، وتم تعيين مجموعة الأساس LANL2DZ لذرات المعادن (Mg، و Zn)، مع دمج احتمالات النواة الفعالة لمراعاة التأثيرات النسبية، بينما تم تطبيق مجموعة الأساس G(d,p)31-6 على ذرات الأكسجين لضمان معالجة دقيقة للاستقطاب.

تم تنفيذ عمليات تحسين الهندسة الكاملة في الطور الغازي تحت معايير تقارب المجال الذاتي المتناسق (SCF) الافتراضية، بعد ذلك أُجريت حسابات الترددات الاهتزازية لتأكيد طبيعة كل نقطة ثابتة كحد أدنى حقيقي للطاقة، و تم استخراج طاقات المدارات الجزيئية الأمامية (HOMO و LUMO) من ملفات المخرجات، واستُخدمت لحساب واصفات التفاعلية الشاملة، بما في ذلك: السالبية الكهربائية (χ)، الصلابة الكيميائية (η)، الجهد الكيميائي (μ) و مؤشر الإلكتروفيلية (ω) (electrophilicity) و ليونة الكلية (S) وذلك من خلال العلاقات النظرية المعتمدة.

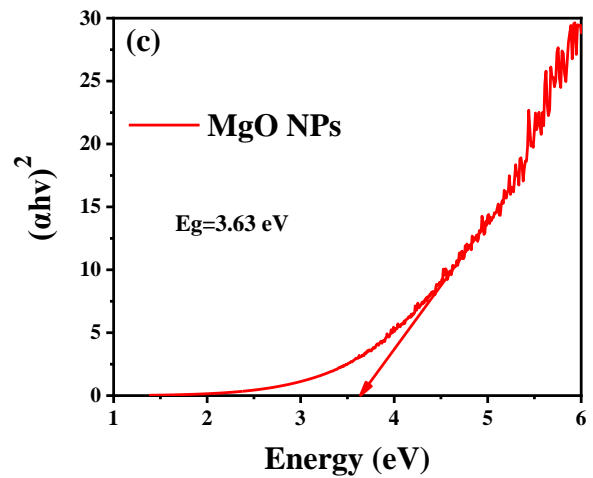
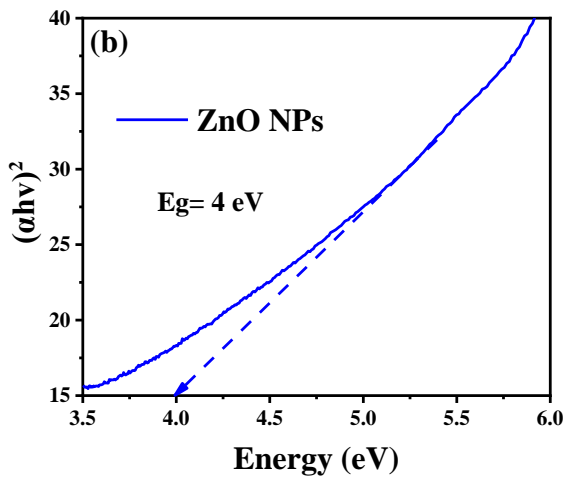
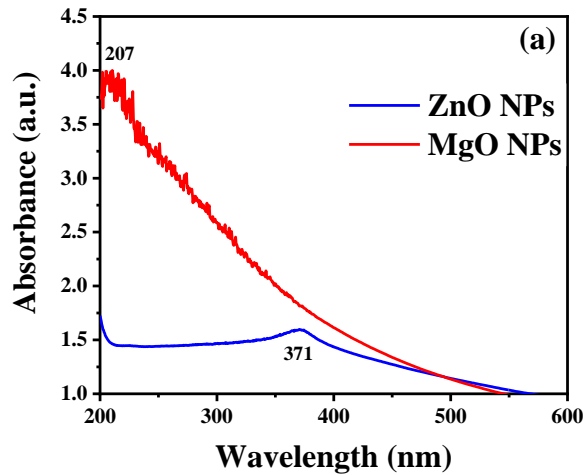
استُخدم تحليل موليكين (Mulliken) لدراسة توزيع الشحنة الإلكترونية عبر الذرات في كل مجموعة، مما أتاح فهماً أعمق لطبيعة الرابطة الأيونية مقابل التساهمية، بالإضافة إلى ذلك رُسمت خرائط لأسطح الجهد الكهروستاتيكي (ESP) لتوضيح المناطق الغنية بالإلكترونات والمناطق التي تفتقر إليها، مما يساعد في تفسير المواقع المحتملة للتفاعل الكيميائي.

III. 5. النتائج والمناقشة

III. 1.5. مطيافية الأشعة المرئية وفوق البنفسجية (UV-Vis)

يوضح الشكل (13.III) نتائج تحليل أطياف UV-Vis لـ MgO NPs و ZnO NPs المصنع من نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del*، حيث يظهر امتصاص مميز عند 207 نانومتر لـ

MgO NPs، وعند 371 نانومتر لـ ZnO NPs وتم حساب فجوة الطاقة لجسيمات MgO NPs، ZnO NPs من الرسم البياني $(\alpha h\nu)^2$ بدلالة (eV)، حيث بلغت فجوة الطاقة حوالي 3.63، 4 إلكترون فولت على التوالي.

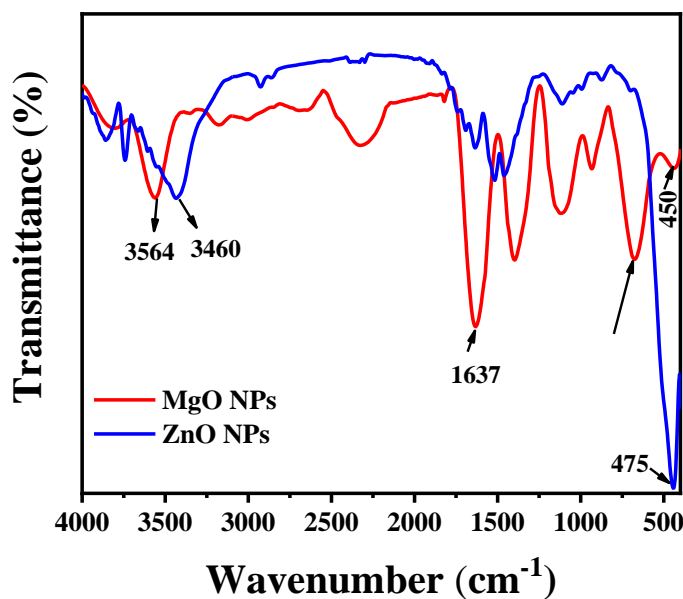


الشكل (13.III): منحني الأطياف UV-Vis (a) وفجوة الطاقة الضوئية: ZnO NPs (b)، MgO

.NPs (c)

2.5.III مطيافية الأشعة تحت الحمراء (FTIR)

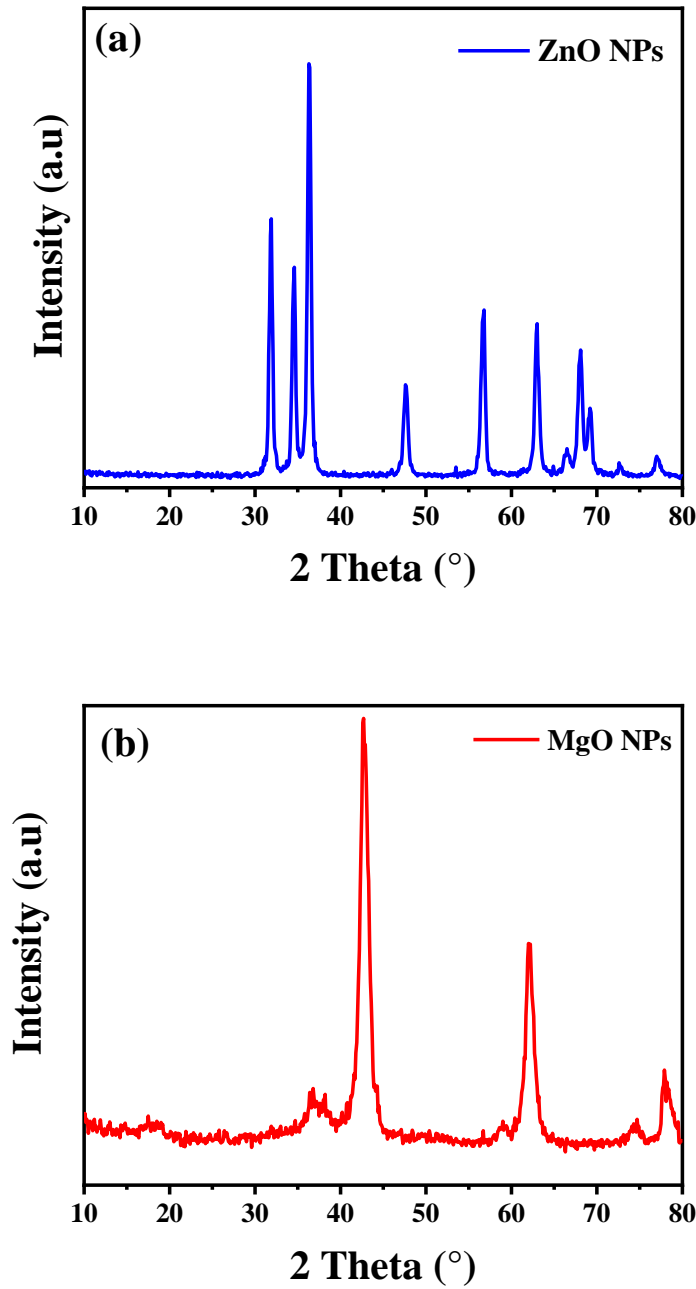
الشكل (14.III) يبين أطياف FTIR لكل من أكاسيد الزنك والمغنيسيوم النانوية ، تم تشخيص كل من الزنك والمغنيسيوم النانوية بتقنية FTIR، حيث أظهرت النتائج شريطين (شريط بالنسبة ل ZnO NPs يظهر قمة عند 3460 وشريط بالنسبة ل MgO NPs يظهر قمة عند 3564cm^{-1}) حيث تشير هذه القمم إلى إهتزاز تمدد O-H والروابط الهيدروجينية لمجموعات الهيدروكسيل ، تعتبر إهتزازات التمدد في كلا الشريطين لروابط ZnO و Mg عند 475cm^{-1} و 450cm^{-1} على التوالي دليلا على تكوين جسيمات كل من أكسيد الزنك والمغنيسيوم النانوية ، كما تعود القمة الموجودة عند 1637cm^{-1} في شريط MgO NPs إلى تشكل الرابطة O-H ومجموعات Amide.



الشكل (14.III): منحنى أطياف FTIR ل MgO NPs و ZnO NPs.

3.5.III. مطيافية الأشعة السينية (DRX)

يوضح الشكل (15.III) أنماط حيود الأشعة السينية لجسيمات الزنك النانوية (ZnO NPs) و جسيمات المغنيسيوم النانوية (MgO NPs) المصنعة من نبات الحاد *Cornulaca monacantha* ، حيث كان نمط حيود الأشعة السينية (الشكل 15.III a) لجسيمات الزنك النانوية (ZnO NPs) كانت قمم عند 2θ درجة 32 ، 34.5° ، 36° ، 47.6° ، 56.5° ، 63° ، 68° ، 69.5° ، 72.5° مرتبطة بالمستويات البلورية 100 ، 002 ، 101 ، 102 ، 110 ، 103 ، 112 ، 201 ، 004 على التوالي و يوضح (الشكل 15.III b) نمط حيود الأشعة السينية DRX لجسيمات المغنيسيوم النانوية (MgO NPs) ، حيث كانت قمم عند 2θ تساوي 37.8° ، 42.5° ، 62.25° المرتبطة بالمستويات البلورية 101 ، 100 ، 110 ، وتم حساب الحجم البلوري لـ ZnO NPs و MgO NPs باستخدام معادلة Debye-Scherer حيث وجد حجم 16.13 و 5.2 نانومتر على التوالي.



الشكل (15.III): أنماط حيود الأشعة السينية لـ (a) ZnO NPs و (b) MgO NPs.

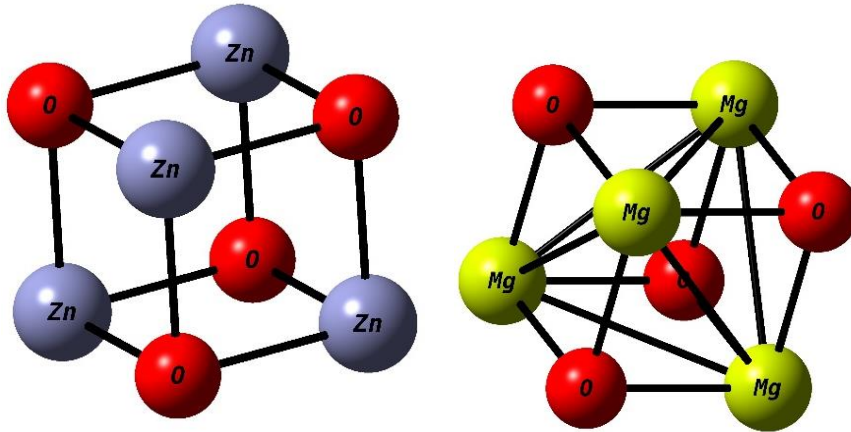
III 4.5 مناقشة نتائج نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)

III 1.4.5 تحسين الهندسة واستقرارها

خضعت جميع مجموعات الجسيمات النانوية المختارة (ZnO، MgO) لتحسين الهندسة باستخدام

مجموعتي الأساس الوظيفية B3LYP و LANL2DZ/6-31G(d,p) (أنظر إلى الشكل (16.III))^[15]،

و لم تُظهر الهندسة المُحسَّنة أي ترددات وهمية، مما يشير إلى أن الهياكل الناتجة تتوافق مع القيم الدنيا الحقيقية على سطح الطاقة الكامنة، و اتخذ ZnO بنية حلقية سداسية مشوهة قليلاً، بينما احتفظ MgO بهندسة مكعبة، و تتفق هذه النتائج مع اتجاهات التنسيق المتوقعة لأنواع أكاسيد المجموعة IIA و IIB و IB^[16] و شكّل أكسيد الزنك حلقة سداسية مشوهة، بينما اتخذ أكسيد المغنيسيوم شكل هندسي مكعب ومستوي، و كانت أطوال الروابط متوافقة مع الدراسات السابقة^[17]: 1.98\AA ~ لرابطة أكسيد المغنيسيوم-الأكسيد، و 2.00\AA ~ لرابطة أكسيد الزنك-الأكسيد.



الشكل (16.III): هندسة مُحسَّنة لمجموعات جسيمات النانو ZnO و MgO التي تم الحصول عليها عبر

حسابات DFT.

2.4.5.III المدارات الجزيئية الحدودية (FMOs)

قُيِّمت الخصائص الإلكترونية لمجموعات MgO و ZnO من خلال تقييم مداراتها الجزيئية الحدودية، و يلخص **الجدول (2.III)** المدار الجزيئي الأعلى شغلاً (HOMO) والمدار الجزيئي الأدنى غير المشغول (LUMO) وفجوة الطاقة المقابلة (ΔE).

الجدول (2.III): طاقات HOMO و LUMO وفجوة الطاقة (ΔE) المحسوبة لمجموعات أكسيد

المعادن باستخدام (DFT (B3LYP/LANL2DZ/6-31G(d,p)).

Cluster	HOMO Energy (eV)	LUMO Energy (eV)	Energy Gap (eV)
ZnO	-6.28	-1.71	4
MgO	-6.12	-2.1	3.63

توفر فجوة HOMO-LUMO رؤية قيمة حول التفاعل الكيميائي والاستقرار الإلكتروني للتجمعات^[18]، و تشير فجوة الطاقة الأصغر عادةً إلى تفاعلية أعلى وقدرة أفضل على نقل الشحنة واستقرار حركي أقل، و من بين التجمعات المدروسة، أظهر ZnO أعلى فجوة HOMO-LUMO (4 إلكترون فولت)، مما يدل على استقراره الإلكتروني الأكبر وتفاعليته المنخفضة، بما يتماشى مع توافقه الحيوي المعروف وخصائصه الخاملة، و أظهر MgO سلوكًا متوسطًا (3.63 إلكترون فولت)، مما يدل على التوازن بين الاستقرار والتفاعلية، وهو ما يتوافق مع أدواره المتعددة في الأنظمة البيولوجية والضوئية^[19].

3.4.5.III مواصفات التفاعلية الشاملة

لتفسير السلوك الإلكتروني والتفاعلية البيولوجية المحتملة لمجموعات أكاسيد المعادن المدروسة بشكل أعمق، استُنبطت موصِّفات التفاعلية الشاملة من طاقات المدارات الجزيئية الحدودية (FMO)، و تُوفِّر هذه الموصِّفات فهماً أعمق لميول الجسيمات النانوية للمشاركة في تفاعلات نقل الإلكترونات، واستقرارها، وتفاعلها مع البيئات المحبة للإلكترونات أو المحبة للنواة^[20].

تشمل الموصِّفات السالبة الكهربائية (χ)، التي تعكس ميل الجزيء لجذب الإلكترونات؛ والصلابة الكيميائية (η)، التي تقيس مقاومة التغير في كثافة الإلكترونات؛ والجهد الكيميائي (μ)، الذي يُشير إلى ميل الإلكترونات للهروب، بالإضافة إلى ذلك يُحدِّد مؤشِّر المحبة للإلكترونات (ω) قدرة النوع على قبول

الإلكترونات، وتُعدُّ الليونة الكلية (S) معكوس الصلابة، وتصف مرونة التفاعل [21]، وتُعرض القيم المحسوبة لمجموعات MgO و ZnO في الجدول (3.III) .

الجدول (3.III): أوصاف التفاعلية الكلية لمجموعات أكسيد المعادن المحسوبة من طاقات HOMO و LUMO

Cluster	Electronegativity	Chemical Hardness	Chemical Potential	Electrophilicity Index	Global Softness
ZnO	3.995	2.285	-3.995	3.492	0.219
MgO	4.11	2.01	-4.11	4.202	0.249

تشير النتائج إلى اختلافات واضحة في أنماط التفاعل الإلكتروني لعناقيد أكاسيد المعادن، و يتميز MgO بقيم متوسطة ($\omega = 4.202$, $\eta = 2.010$, $\chi = 4.110$)، بنمط إلكتروني متوازن وهذا يتوافق مع سلوكه المتنوع في كل من السياقات التحفيزية والطبية الحيوية، حيث يُفضل عادةً التفاعل المعتدل لتجنب السمية مع الحفاظ على الفعالية [22]، و على العكس من ذلك أظهر ZnO أعلى صلابة كيميائية ($\eta = 2.285$) وأقل درجة محبة للإلكترون ($\omega = 3.492$)، مما يؤكد استقراره الإلكتروني وانخفاض تفاعليته. تتوافق هذه الخصائص تمامًا مع سمعته كمادة متوافقة حيويًا وخاملة تُستخدم في أنظمة التخزين المؤقت وكناقل لتوصيل الأدوية [23].

4.4.5.III تحليل الجهد الكهروستاتيكي (ESP) وتوزيع الشحنة

يُقدم رسم خرائط الجهد الكهروستاتيكي (ESP) وتحليل توزيع الشحنة بطريقة موليكول رؤية قيمة حول الفصل المكاني للشحنة داخل الأنظمة الجزيئية، وهو أمر بالغ الأهمية لفهم تفاعلها وإمكانية تفاعلها مع الجزيئات البيولوجية، و تُساعد تصورات الجهد الكهروستاتيكي (ESP) في تحديد المناطق المُحبة

للإلكترونات (الموجبة) والمُحبة للنواة (السالبة) في الجسيمات النانوية، مما يُرشد التنبؤات المتعلقة بربط البروتينات، أو تثبيط الإنزيمات، أو نفاذية الغشاء^[24].

يُوفر تحليل الشحنة بطريقة موليكين تمثيلاً كمياً لتوزيع الشحنة الذرية، والذي يعكس درجة عدم تمركز الإلكترونات في المجموعة^[24]، و في الجسيمات النانوية الأكسيدية، تُظهر ذرات المعدن عادةً شحنات موجبة جزئية، بينما تحمل ذرات الأكسجين شحنات سالبة مُقابلة، و تُساهم هذه المواقع القطبية في عزم ثنائي القطب، ويمكن أن تُعزز تفاعلات بيولوجية مُحددة^[25].

يتم عرض شحنات موليكين المحسوبة لذرات المعدن والأكسجين في مجموعات MgO و ZnO في

الجدول (4.III).

الجدول (4.III): شحنات موليكين الذرية لذرات المعدن والأكسجين في مجموعات الأكسيد بناءً على

حسابات DFT.

Cluster	Metal Atom Charge (e)	Oxygen Atom Charge (e)
ZnO	1.76	-1.46
MgO	1.52	-1.24

يكشف توزيع شحنة موليكين عن استقطاب إلكتروني متميز بين العناقيد المدروسة، في ZnO أظهرت ذرات المغنيسيوم أعلى شحنة موجبة (+1.76 e)، مصحوبة بذرات أكسجين سالبة بشدة (-1.46 e)، مما يشير إلى طابع أيوني عالي، و يدعم هذا الرابط الأيوني القوي الخمول الكيميائي والصلابة الهيكلية للأنظمة القائمة على ZnO، و أظهر MgO استقطاباً أقل قليلاً، حيث تحمل ذرات الزنك شحنة 1.52 e

+وذرات الأكسجين عند $1.24 e^-$ و يشير فصل الشحنة المنخفض مقارنةً بـ ZnO إلى طابع رابطة أيونية تساهمية معتدل، مما يساهم في تنوع MgO الكيميائي وتفاعله المتوازن^[26].

خاتمة الفصل

تضمن هذا الفصل شرح مفصل لكيفية تحضير جسيمات أكسيد المغنيسيوم والزنك النانوية من مستخلص نبات الحاد *Cornulaca monacantha Del* وقد تم التحقق نجاح عملية التحضير من خلال تحليلها بواسطة تقنيات التحليل الطيفية والتي تطرقنا إليها في الفصل وأخيرا قمنا بدراسة نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) لجسيمات النانوية المحضرة.

مراجع الفصل الثالث

- [1] A. A. Bunaciu, E. G. UdriŞTioiu, and H. Y. Aboul-Enein, "X-ray diffraction: instrumentation and applications," *Critical reviews in analytical chemistry*, vol. 45, no. 4, pp. 289-299, 2015.
- [2] Z. Chen and T. F. Jaramillo, "The use of UV-visible spectroscopy to measure the band gap of a semiconductor," *Department of Chemical Engineering, Stanford University Edited by Bruce Brunschwig*, vol. 9, p. 19, 2017.
- [3] S. Singh, J. V. Gade, D. K. Verma, B. Elyor, and B. Jain, "Exploring ZnO nanoparticles: UV-visible analysis and different size estimation methods," *Optical Materials*, vol. 152, p. 115422, 2024.
- [4] S. M. Nilapwar, M. Nardelli, H. V. Westerhoff, and M. Verma, "Absorption spectroscopy," in *Methods in enzymology*, vol. 500: Elsevier, 2011, pp. 59-75.
- [5] A. Dutta, "Fourier transform infrared spectroscopy," *Spectroscopic methods for nanomaterials characterization*, pp. 73-93, 2017.
- [6] B. C. Smith, *Fundamentals of Fourier transform infrared spectroscopy*. CRC press, 2011.
- [7] M. J. Al-Musawi, *The Arabian Nights in Contemporary World Cultures*. Cambridge University Press, 2021.
- [8] A. A. Islahi, "Ibn Abd al-Wahhab and his economic ideas," 2008.
- [9] D. K. Unruh and T. Z. Forbes, "X-ray diffraction techniques," *Analytical geomicrobiology: A handbook of instrumental techniques*, pp. 215-237, 2019.
- [10] I. B. Amor *et al.*, "Enhancing oxidant and dye scavenging through MgO-based chitosan nanoparticles for potential antioxidant coatings and efficient photocatalysts," *Biomass Conversion and Biorefinery*, vol. 14, no. 24, pp. 32343-32357, 2024.

- [11] S. Gražulis *et al.*, "Crystallography Open Database—an open-access collection of crystal structures," vol. 42, no. 4, pp. 726-729, 2009.
- [12] M. D. Hanwell, D. E. Curtis, D. C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, and G. R. J. J. o. c. Hutchison, "Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform," vol. 4, pp. 1-17, 2012.
- [13] A. J. W. Frisch, Usa, 25p, "gaussian 09W Reference," vol. 470, 2009.
- [14] U. M. Osman, A. S. N. Farizal, M. A. Kadir ,M. H. Razali, M. Z. H. Rozaini, and S. J. D. i. b. Arshad, "Correlation data of (Z)-1-[4-(trifluoromethyl) benzylidene] thiosemicarbazide via spectroscopic methods and Density Functional Theory studies," vol. 27, p. 104673, 2019.
- [15] B. Pergolese, D. Marchesan, M. Muniz–Miranda, and A. J. I. E. J. o. M. D. Bigotto, "The influence of the basis set size on DFT calculations of surface complexes for the assignment of SERS spectra," vol. 5, no. 5, pp. 287-295, 2006.
- [16] W. Huang, G. Sun, and T. J. C. S. R. Cao, "Surface chemistry of group IB metals and related oxides," vol. 46, no. 7, pp. 1977-2000, 2017.
- [17] N. Brese, M. O'keeffe, B. Ramakrishna, and R. J. J. o. S. S. C. Von Dreele, "Low-temperature structures of CuO and AgO and their relationships to those of MgO and PdO," vol. 89, no. 1, pp. 184-190, 1990.
- [18] D. Chen and H. J. T. J. o. P. C. C. Wang, "HOMO–LUMO gaps of homogeneous polycyclic aromatic hydrocarbon clusters," vol. 123, no. 45, pp. 27785-27793, 2019.
- [19] Y. Huang, C. Rong, R. Zhang, and S. J. J. o. m. m. Liu, "Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory," vol. 23, pp. 1-12, 2017.
- [20] R. Vijayaraj, V. Subramanian, P. J. J. o. c. t. Chattaraj, and computation, "Comparison of global reactivity descriptors calculated using various density functionals: a QSAR perspective," vol. 5, no. 10, pp. 2744-2753, 2009.

- [21] P. Chattaraj, S. Nath, and B. J. C. m. c. f. d. d. Maiti, "Reactivity descriptors," vol. 11, p. 295, 2003.
- [22] R. J. J. o. M. S. Meenakshi, "Spectral investigations, DFT based global reactivity descriptors, Inhibition efficiency and analysis of 5-chloro-2-nitroanisole as π -spacer with donor-acceptor variations effect for DSSCs performance," vol. 1127, pp. 694-707.2017 ,
- [23] J. Oller, P. Pérez, P. W. Ayers, and E. J. I. J. o. Q. C. Vöhringer-Martinez, "Global and local reactivity descriptors based on quadratic and linear energy models for α , β -unsaturated organic compounds," vol. 118, no. 20, p. e25706, 2018.
- [24] Q.-S. Du, C.-H. Wang, Y.-T. Wang, and R.-B. J. T. J. o. P. C. B. Huang, "Empirical and accurate method for the three-dimensional electrostatic potential (EM-ESP) of biomolecules," vol. 114, no. 12, pp. 4351-4357, 2010.
- [25] C. H. Suresh, G. S. Remya, and P. K. J. W. I. R. C. M. S. Anjalikrishna, "Molecular electrostatic potential analysis: A powerful tool to interpret and predict chemical reactivity," vol. 12, no. 5, p. e1601, 2022.
- [26] A. Ibrahim, H. A. Ezzat, M. A. E. J. O. Aal, and Q. Electronics" ,Electronic properties and molecular electrostatic potential mapping of edge functionalized GQDs with ZnO, CuO, and TiO₂," vol. 55, no. 12, p. 1097, 2023.

الحائمه العامه
٢٠٢٤

الخاتمة العامة

يُظهر التوليف الأخضر الناجح لجسيمات أكسيد المغنيسيوم وأكسيد الزنك النانوية باستخدام مستخلص نبات الحاد نهجًا مستدامًا لإنتاج المواد النانوية، بما يتماشى مع الطلب المتزايد على حلول الهندسة الكيميائية الصديقة للبيئة. يوفر التوصيف الشامل باستخدام الأشعة فوق البنفسجية المرئية (UV-visible)، وتحويل فورييه للأشعة تحت الحمراء (FTIR)، وتقنية حيود الأشعة السينية (DRX)، بالإضافة إلى التحليل الحسابي القائم على نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)، رؤى متعمقة في الخصائص البنوية والإلكترونية للجسيمات النانوية و أظهرت نتائج الدراسة فجوة الطاقة لجسيمات MgO NPs، ZnO NPs بلغت حوالي 3.63، و 4 إلكترون فولت على التوالي، و أظهرت الجسيمات النانوية حجم 16.13 نانومتر لأكسيد الزنك و 5.2 نانومتر لأكسيد المغنيسيوم، و حسّنت حسابات نظرية الكثافة الوظيفية (DFT) باستخدام مجموعات الأساس B3LYP و LANL2DZ/6-31G(d,p) هندسة الجسيمات النانوية، مؤكدةً أن أكسيد الزنك (ZnO) يتبنى بنية حلقيّة سداسية، بينما يُظهر أكسيد المغنيسيوم (MgO) هندسة مكعبة، و أشار تحليل فجوة HOMO-LUMO إلى استقرار إلكتروني أعلى لأكسيد الزنك (ZnO) (4 إلكترون فولت) مقارنةً بأكسيد المغنيسيوم (MgO) (3.63 إلكترون فولت)، و أظهر تحليل شحنة موليكن استقطابًا إلكترونيًا ملحوظًا في مجموعات أكسيد الزنك، مما يدل على خواص أيونية قوية، بينما أظهر أكسيد المغنيسيوم درجة استقطاب أقل، مما يعكس طبيعة رابطة أيونية-تساهمية مختلطة، و يؤكد تكامل الأساليب التجريبية والحسابية على متانة هذه الدراسة، مما يُقدم نموذجًا لأبحاث مستقبلية في مجال تكنولوجيا النانو الخضراء.

تساهم هذه النتائج في تقدم المواد النانوية المستدامة، مع تأثيرات محتملة في الهندسة الكيميائية، والعلوم البيئية، والتطبيقات الطبية الحيوية، مما يمهد الطريق لمزيد من الاستكشاف للجسيمات النانوية المشتقة من النباتات في السياقات الصناعية والعلاجية.