استكتاب أكاديمي جماعي

تكامل العلوم الأساسية والتطبيقية

دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية

تأليف مجموعة من الباحثين

الناشر

دار الرقيم السومري للنشر والتوزيع

إعداد واشراف الهيئة العلمية في

مؤسسة أجيال الرافدين لتطوير التعليم

ISBN: 978-9922-7965-74 | 2026

استكتاب أكاديمي جماعي

تكامل العلوم الأساسية و التطبيقية

دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية

استكتاب أكاديمي جماعي
تكامل العلوم الأساسية والتطبيقية
دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنيةالتصنيف : الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية
الطبعة: الاولى

رقم الايداع في دار الكتب والوثائق في بغداد (٥٣٨٤) لسنة (٢٠٢٦)

ISBN:978-9922-7965-74

DOI:10.62909/978.9922.7965.74

دار تركيب الرقيم السومري للطباعة والتوزيع والنشر الالكتروني
العراق – ديالى – بعقوبه – شارع الاوقاف
هاتف : ٠٧٧٧٥٢٦٢٨٩٢
manager@sss-publisher.com

جميع حقوق النشر محفوظة، ولا يحق لأي مؤسسة أو جهة إعادة إصدار هذا الكتاب، أو جزء منه، أو نقله، بأي شكل أو وساطة من وسائط نقل المعلومات، سواء أكانت إلكترونية أو ميكانيكية، بما في ذلك النسخ أو التسجيل أو التخزين والاسترجاع، دون إذن خطي من المؤلف.

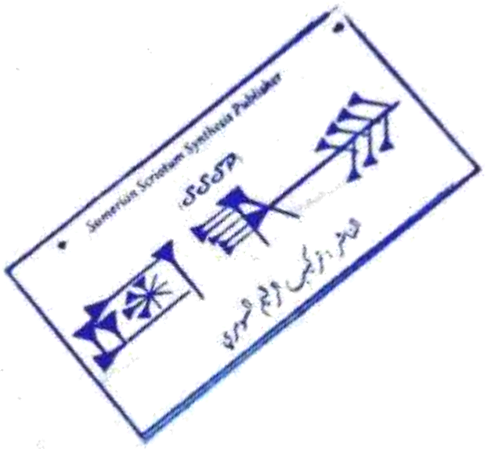
جميع الآراء الواردة في هذا الكتاب تعبر عن رأي كاتبها ولا تعبر بالضرورة عن رأي الناشر.

استكتاب أكاديمي جماعي

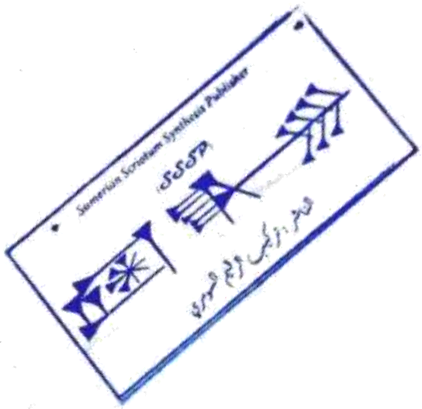
تكامل العلوم الأساسية والتطبيقية

دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية

نخبة من الباحثين



٢٠٢٦



تنضيد الكتاب

معهد الترجمة والكتاب

«ماليزيا»

إعداد وإشراف الهيئة العلمية في

مؤسسة أجيال الرافدين لتطوير التعليم

«العراق»

تصميم الغلاف

معهد التكنالوجيا

«الهند»

٥ / ٥٧٦

م ٣٨٤ جماعي ، استكتاب اكاديمي

تكامل العلوم الأساسية والتطبيقية - دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية/ استكتاب أكاديمي جماعي.

ط ١ — ديالى :رتكيب الرقيم السومري ، ٢٠٢٦.

٢٥٧ ص ؛ ١٧ × ٢٤ سم.

١ - الوراثة - ٢. علم — أ. العنوان

رقم الإيداع

٥٣٨٤ لسنة ٢٠٢٦

المكتبة الوطنية / الفهرسة اثناء النشر

التوزيـــع والنشـــر الإلكترونـــي ، تمـــت فهرســـة هـــذا الكتـــاب فـــي عـــدد مـــن الفهارس والمنصات الدولية، منها:

كروس ريف	(CrossRef)
أوبن ألكس	(OpenAlex)
مؤشر الاقتباس المفتوح الأوكراني	(OUCI)
سجل مستودعات الوصول المفتوح	(ROAR)
سيمنتك سكولار	(Semantic Scholar)
دايمنشنز	(Dimensions)
ريسرش غيت	(ResearchGate)
فات كات	(Fatcat)
المعيار الدولي للترقيم	(IAS)
مؤشر الاستشهاد العلمي	(SCI)
أوركيد	(ORCID)
سايليت	(Scilit)

الموقع الرسمي لدار النشر الرقيم السومري للنشر والتوزيع

يتوفر هذا الكتاب عبر الموقع الرسمي لدار النشر، مع تخصيص مُعرّف رقمي دائم (DOI) خاص به https://doi.org/10.62909/978.9922.7965.74

978-9922-7965-74

مقدمة الكتاب

يجمع كتاب «تكامل العلوم الأساسية والتطبيقية: دراسات في الرياضيات والإحصاء والفيزياء والكيمياء والعلوم الهندسية والتقنية» عشر مشاركات تلتقي عند دراسة البنى والعلاقات والخواص وطرائق قياسها وتوظيفها. وقد نُظمت المشاركات في فصول مستقلة تحفظ عنوان كل دراسة ونسبتها إلى مؤلفيها، وتتيح الانتقال بين التأصيل الرياضي والوصف الفيزيائي والتحليل الكيميائي والتطبيقات الصناعية. ولا يفترض هذا الجمع تطابق المناهج بين التخصصات، وإنما يبرز مواقع الاتصال بينها مع بقاء خصوصية السؤال والأداة والدليل في كل فصل.

يبدأ الكتاب بالإحصاء الوصفي والاستدلالي، بوصفه مدخلًا إلى تنظيم البيانات وتفسيرها وحدود الاستنتاج منها، ثم ينتقل إلى دراسة نصف القطر الطيفي وتقديرات المعيار للمؤثرات الخطية المحدودة في الفضاءات شبه الهلبرتية. ويعقب ذلك مدخل إلى مفاهيم الفيزياء الأساسية، ودراسة لعمليات تفاعل الفوتون مع الذرة، تتناول الامتصاص والتشتت وانتقالات الأغلفة الداخلية والعلاقات الكمية المرتبطة بها. ويكشف هذا المسار تنوع مستويات التحليل، من المفهوم والأداة الإحصائية إلى الصياغة الرياضية والتفسير الذري.

وتتناول الفصول الكيميائية المركبات العضوية وغير العضوية، والعناصر الانتقالية ومعقداتها وتطبيقاتها، ثم الكيمياء الحياتية مع العناية ببنية البروتينات ووظائفها ووسائل دراستها. ويلي ذلك فصل في الكيمياء الصناعية وتطوير المواد والمنتجات، يصل المعرفة بالتركيب والخواص باختيار المواد ومتطلبات الأداء والتصنيع. وتتيح هذه الموضوعات قراءة العلاقة بين المادة ووظيفتها في سياقات مختلفة، من الخلية إلى المختبر والمنتج الصناعي.

وتُختتم المجموعة بمشاركة مشتركة تضم دراستين مترابطتين في خصائص سوائل الحفر والوقاية من التصاق الأنابيب واستقرار المضافات البوليمرية حراريًا، ثم دراسة في التصنيع الإضافي والطرح في ضوء متطلبات الثورة الصناعية الرابعة. وتظهر هاتان المشاركتان انتقال الاهتمام من تفسير الخواص إلى اختيار الشروط والمواد والعمليات وتقويم المخرجات، مع إبقاء الجداول والمعادلات والرسوم وشروط المقارنة جزءًا من العرض العلمي.

يقدم فهرس الكتاب عناوين الفصول وأسماء الباحثين وصفحات البداية، وتتقدم كل مشاركة بيانات مؤلفيها وملخصاها وكلماتها المفتاحية. وتبقى الإحالات والمراجع والملاحق منسوبة إلى الفصل الذي وردت فيه، بحيث يمكن الرجوع إلى كل مساهمة مستقلة أو قراءتها ضمن المسار العام

للكتاب. وقد روعي في التنظيم وضوح التسلسل والمحافظة على النصوص بلغتها الأصلية، العربية أو الإنجليزية، وعلى الرموز والصيغ التي يتوقف عليها فهم المسائل العلمية. ويظل تنوع المعالجات مدخلًا للمقارنة بين طرائق بناء المعرفة، دون إذابة نتائج الدراسات أو أصوات مؤلفيها في صياغة موحدة.

المؤلفون

1	**م.م. حسن مهدي عباس** المديرية العامة لتربية الديوانية - العراق
2	م.م. أسيل أحمد شهاب جامعة ميسان - كلية التربية الأساسية - العراق
3	م.م. إسراء ابراهيم محمد المديرية العامة لتربية بابل - العراق
4	أ.م. مهند حاتم هاشم الركابي الجامعة المستنصرية - كلية العلوم - قسم الفيزياء - العراق
5	م.د. سرى علي عبد الحسن جامعة القادسية - كلية العلوم - العراق
6	أ.م. لمى عبد القادر حاتم جامعة تكريت - كلية التربية للعلوم الصرفة - قسم الكيمياء - العراق
7	م.م. لبنى عامر عبد الوهاب جامعة الكرخ للعلوم - العراق
8	م.م. مكارم علي عناد جامعة القادسية - العراق
9	م.م. سفيان سمير عبد القادر جامعة ديالى - كلية العلوم - قسم جيولوجيا النفط والمعادن - العراق
10	م.م. يوسف محمد دكتور مبارك الجامعة التكنولوجية - قسم الهندسة الكهروميكانيكية - العراق
11	الباحث إيفان داسي سلو جامعة تومسك البوليتيكنيكية - روسيا
12	م.م. وسام عزيز شخير الجامعة التقنية الوسطى - الكلية التقنية الكوت - قسم تقنيات هندسة الكهروميكانيك – العراق
13	م.د. بارق باقي سلمان المديرية العامة لتربية بغداد الرصافة الثالثة - العراق
14	م.م. ازهار مظهر هاشم المديرية العامة لتربية كربلاء - العراق

فهرس المحتويات

ت	الفصل والباحث	ص.
1	الإحصاء الوصفي والاستدلالي م.م. حسن مهدي عباس	7
2	نصف القطر الطيفي وتقديرات المعيار للمؤثرات الخطية المحدودة في الفضاءات شبه الهلبرتية م.م. أسيل أحمد شهاب	24
3	مفاهيم الفيزياء الأساسية م.م. إسراء ابراهيم محمد	46
4	عمليات تفاعل الفوتون مع الذرة أ.م. مهند حاتم هاشم الركابي	66
5	الكيمياء العضوية وغير العضوية م.د. سرى علي عبد الحسن	99
6	المركبات غير العضوية وتطبيقاتها أ.م. لمى عبد القادر حاتم	133
7	الكيمياء الحياتية وبنية العمليات الحيوية م.م. لبنى عامر عبد الوهاب	171
8	الكيمياء الصناعية وتطوير المواد والمنتجات م.م. مكارم علي عناد	201
9	تحسين خصائص سوائل الحفر للوقاية من التصاق أنابيب الحفر في الآبار العميقة: منظورات كيميائية وريولوجية وحرارية م.م. سفيان سمير عبد القادر؛ م.م. يوسف محمد دكتور مبارك؛ الباحث إيفان داسي سلو	225
10	تحسين عمليات التصنيع باستخدام تقنيات التصنيع الإضافي والطرح: دراسة تحليلية وتطبيقية في ضوء متطلبات الثورة الصناعية الرابعة م.م. وسام عزيز شخير	265

الفصل الأول

الإحصاء الوصفي والاستدلالي

Descriptive and Inferential Statistics

م.م. حسن مهدي عباس
المديرية العامة لتربية الديوانية - العراق

الملخص

يتناول الفصل الإحصاء الوصفي والاستدلالي من خلال المفاهيم والأدوات التي تساعد على تنظيم البيانات وتلخيصها وتفسيرها والانتقال منها إلى استنتاجات تتعلق بالمجتمع الإحصائي. ويبدأ بالتمييز بين المجتمع والعينة والمتغيرات وأنواع البيانات، ثم يعرض طرائق تنظيم المشاهدات في جداول وتوزيعات وتمثيلات تسهم في الكشف عن خصائصها الأساسية. ويؤكد أن اختيار الأسلوب الإحصائي يرتبط بطبيعة البيانات والسؤال الذي تسعى الدراسة إلى الإجابة عنه.

ويشرح الفصل مقاييس النزعة المركزية، ومنها الوسط والوسيط والمنوال، ومقاييس التشتت التي تصف اختلاف القيم وانتشارها. وتُعرض الصيغ والأمثلة لتوضيح ما يقدمه كل مقياس وما قد يحجبه إذا استُخدم منفردًا. ثم ينتقل إلى الإحصاء الاستدلالي، فيتناول التقدير وفترات الثقة واختبار الفرضيات ومستوى الدلالة، مع بيان العلاقة بين العينة وعدم اليقين في الحكم على خصائص المجتمع.

وتربط المعالجة بين الحساب والتفسير، فتوضح أن النتيجة الرقمية تحتاج إلى قراءة في ضوء افتراضات الاختبار وحجم العينة وطريقة جمع البيانات. كما تتناول الفرق بين وصف البيانات المتاحة وتعميم النتائج، وأهمية تجنب الاستنتاجات التي تتجاوز ما تسمح به المعلومات. ويقدم الفصل أساسًا تعليميًا للباحثين والطلبة في استخدام الإحصاء وتنظيم التحليل الكمي، مدعومًا بالأمثلة والجداول والمعادلات. وتخلص المناقشة إلى تكامل الوصف والاستدلال في بناء فهم للظواهر، مع ضرورة التمييز بين الدلالة الإحصائية والتفسير العلمي، والمحافظة على وضوح الإجراءات وحدود النتائج المستخلصة منها.

الكلمات المفتاحية: الإحصاء الوصفي؛ الإحصاء الاستدلالي؛ النزعة المركزية؛ اختبار الفرضيات؛ تحليل البيانات

Abstract

This chapter introduces descriptive and inferential statistics through the concepts and tools used to organize, summarize, interpret, and draw conclusions from data. It distinguishes populations, samples, variables, and data types before presenting tables, distributions, and displays that reveal basic characteristics of observations. Selection of a statistical method is related to the nature of the data and the research question.

Measures of central tendency, including the mean, median, and mode, are examined alongside measures of dispersion. Formulas and examples clarify what each measure describes and what may be obscured when it is used alone. The chapter then addresses inferential procedures, including estimation, confidence intervals, hypothesis testing, and significance levels. These procedures connect sample information with uncertainty in judgments about a population.

Calculation is consistently linked to interpretation. A numerical result must be considered in relation to test assumptions, sample size, and data collection procedures. The discussion distinguishes description of available observations from generalization and cautions against conclusions exceeding the information supplied. Examples, tables, and equations provide an educational foundation for students and researchers organizing quantitative analysis. The chapter concludes that description and inference are complementary in understanding phenomena. It emphasizes the need to distinguish statistical significance from scientific interpretation, to make analytical procedures explicit, and to preserve the limitations attached to the conclusions. The contribution is an introduction to statistical reasoning rather than a report of a new empirical dataset.

Keywords: Descriptive statistics; Inferential statistics; Central tendency; Hypothesis testing; Data analysis

مقدمة

يُمثل الإحصاء ركيزةً منهجيةً أساسية في مجال البحث العلمي المعاصر، لما يوفره من مجموعة متكاملة من الأدوات والإجراءات وطرائق وأساليب تساعد الباحث على جمع البيانات وتنظيمها وتحليلها وتفسيرها بصورة موضوعية ودقيقة ، كونه إطاراً فكرياً يوجه الباحث في اختيار التصميم المناسب للدراسة، ، حيث يُمكن الباحثين من تنظيم البيانات وتحليلها واستخلاص استنتاجات ذات دلالة منها. ولا تقتصر وظيفة الإحصاء على إجراء العمليات الحسابية أو استخراج المؤشرات العددية، وإنما تمتد إلى اختيار الأسلوب المناسب لطبيعة البيانات والهدف من البحث، ثم تفسير النتائج بما ينسجم مع المشكلة البحثية وفرضياتها. وينقسم علم الإحصاء إلى فرعين رئيسين متكاملين: ويُعد التمييز بين فرعي الإحصاء الرئيسيين أساسياً لأي باحث يسعى إلى توظيف المنهج الكمي توظيفاً سليماً.

يهدف هذا المبحث إلى تقديم عرضٍ منهجيٍّ متكامل لمفهومي الإحصاء الوصفي والاستدلالي، مع توضيح فروقهما الجوهرية، والأدوات الإحصائية المرتبطة بكلٍ منهما، و والدور الذي يلعبه كل فرع في السياق البحثي، كما يسعى المبحث إلى بيان العلاقة التكاملية بين الفرعين وكيف أنهما لا يعملان في عزلة عن بعضهما بل يشكّلان معاً منظومة متكاملة في خدمة البحث العلمي. وذلك وفقاً لأحدث الممارسات الأكاديمية وأساليب التوثيق المعتمدة.

الفرع الأول: الإحصاء الوصفي (Descriptive Statistics)

يُعرف الإحصاء الوصفي بأنه مجموعة الأساليب والإجراءات التي تُستخدم لتنظيم البيانات وتلخيصها ووصفها بطريقةٍ منهجيةٍ واضحة بصورة تساعد الباحث على فهم خصائص مجموعة البيانات التي قام بجمعها. (de Winter & Dodou، 2017، pp.)42.

وتتمثل أهم أدوات الإحصاء الوصفي في الجداول التكرارية والرسوم البيانية، ومقاييس النزعة المركزية ومقاييس التشتت، إضافة إلى بعض المقاييس الأخرى التي تساعد في وصف شكل البيانات وتوزيعها. ويهدف هذا الفرع من الإحصاء إلى تقديم صورةٍ واضحةٍ وموجزةٍ عن خصائص عينةٍ معينة من البيانات، دون محاولة تعميم النتائج على مجتمعٍ أكبر. بعبارةٍ أخرى،

يقتصر دور الإحصاء الوصفي على "وصف ما هو كائن" في البيانات التي بين أيدينا. (Miah, 2016, pp. 29–58).

تتضمن الأدوات الأساسية المستخدمة في الإحصاء الوصفي ثلاثة محاور رئيسية:

أولا: مقاييس النزعة المركزية ((Measures of Central Tendency: وهي المقاييس التي تحاول تحديد القيمة النموذجية أو المركزية التي تمثل مجموعة البيانات، تستخدم مقاييس النزعة المركزية لتحديد قيمة تمثل مركز مجموعة البيانات، وتشمل:

1- المتوسط الحسابي (Mean): وهو مجموع القيم مقسوماً على عددها، ويُعد المقياس الأكثر شيوعاً واستخداماً، خاصةً مع البيانات المتناظرة. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 98–103).

ويحسب وفق الصيغة:

أ- لعينة (Sample Mean) ويرمز له بـ ((x̄:

$$\bar{x} = (\Sigma\, xi) / n$$

حيث أن:

x̄ = متوسط العينة.

Σ = مجموع ((Sigma.

xi = كل قيمة مفردة في العينة.

n = عدد المفردات في العينة.

ب- للمجتمع (Population Mean) ويرمز له بـ ((μ:

$$\mu = (\Sigma\, xi) / N$$

حيث أن:

μ = متوسط المجتمع.

N = عدد مفردات المجتمع.

ويتميز الوسط الحسابي بأنه يعتمد على جميع المشاهدات، إلا أنه قد يتأثر بالقيم المتطرفة. (Miah, 2016, pp. 11–27).

ج- ويحسب في حالة البيانات المبوبة وفق الصيغة :

الصيغة:

$$\bar{x} = (\Sigma f_i x_i) / (\Sigma f_i)$$

حيث تمثل f_i تكرار القيمة أو الفئة، وx_i القيمة أو مركز الفئة.

-2 الوسيط (Median)): وهو القيمة التي تقع في منتصف البيانات عند ترتيبها تصاعدياً أو تنازلياً، ولذلك يكون أقل تأثرًا بالقيم المتطرفة من الوسط الحسابي في كثير من الحالات. ويُفضل استخدامه عندما تكون البيانات منحرفة أو تحتوي على قيم متطرفة. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 98–103).

ويحسب إذا كان عدد القيم (n) فردياً:

الوسيط = القيمة التي تقع في الترتيب (n+1)/2 بعد ترتيب البيانات تصاعدياً.

وإذا كان عدد القيم (n) زوجياً:

الوسيط = متوسط القيمتين الواقعتين في الترتيب (n/2) و (n/2)+1

الوسيط = (قيمة الترتيب (n/2) + قيمة الترتيب ((n/2 + 1) / 2)

-3 المنوال (Mode)): وهو القيمة الأكثر تكراراً في مجموعة البيانات، ويمكن استخدامه في بعض الحالات مع البيانات النوعية، فضلًا عن البيانات الكمية.

المنوال = القيمة الأكثر تكراراً في مجموعة البيانات.

(لا توجد معادلة حسابية له، بل يتم تحديده بالعد والتكرار) (Diez et al., 2019, pp. 41–70).

ثانيا: مقاييس التشتت ((Measures of Variability:

تُخبرنا هذه المقاييس عن مدى تباعد أو تجانس القيم حول النزعة المركزية، لا يكفي وصف مركز البيانات، لأن مجموعتين من البيانات يمكن أن تمتلكا الوسط الحسابي نفسه، ولكنهما تختلفان بصورة كبيرة في مقدار انتشار القيم حول هذا الوسط. ولذلك تستخدم مقاييس التشتت لقياس درجة الاختلاف أو الانتشار في البيانات. ومن أهم مقاييس التشتت:

1- المدى (Range): وهو الفرق بين أكبر وأصغر قيمة في مجموعة البيانات. ويحسب وفق الصيغة:

$$Range = Xmax - Xmin$$

المدى = (أكبر قيمة) - (أصغر قيمة)

2- التباين ((Variance وهو مقياس يعتمد على متوسط مربعات انحرافات القيم عن الوسط الحسابي.

أ- تباين العينة (Sample Variance) ويرمز له بـ ((s^2:

$$s^2 = \Sigma (xi - \bar{x})^2 / (n - 1)$$

حيث أن:

s^2 = تباين العينة.

xi = كل قيمة مفردة.

$\bar{x}$ = متوسط العينة.

n - 1 = درجات الحرية.

ب- تباين المجتمع (Population Variance) ويرمز له بـ ((σ^2:

$$\sigma^2 = \Sigma (xi - \mu)^2 / N$$

حيث أن:

σ^2 = تباين المجتمع.

μ = متوسط المجتمع.

N = حجم المجتمع.

3- الانحراف المعياري ((Standard Deviation: وهو الجذر التربيعي للتباين، ويعد من أكثر مقاييس التشتت استخدامًا في التطبيقات الإحصائية كلما زاد الانحراف المعياري، زاد تشتت البيانات.

أ- الانحراف المعياري للعينة (Sample Standard Deviation) ويرمز له بـ ((s:

s = الجذر التربيعي لـ (s^2) = الجذر التربيعي لـ [[$\Sigma (x_i - \bar{x})^2 / (n - 1)$]]

ب- الانحراف المعياري للمجتمع (Population Standard Deviation) ويرمز له بـ ((σ:

σ = الجذر التربيعي لـ (σ^2) = الجذر التربيعي لـ [[$\Sigma (x_i - \mu)^2 / N$]]

وتكتسب مقاييس التشتت أهمية كبيرة لأنها تكمل المعلومات التي توفرها مقاييس النزعة المركزية، وتساعد في إعطاء صورة أكثر شمولًا عن طبيعة البيانات (Miah, 2016, pp. 29–58)

ثالثا: مقاييس الشكل والتوزيع:

تكون البيانات عند جمعها في صورتها الأولية غير منظمة، وقد يكون من الصعب استخلاص معلومات مفيدة منها إذا كانت كبيرة الحجم. ولذلك يحتاج الباحث إلى تنظيمها وتبويبها في جداول أو توزيعات تكرارية. ويعد تنظيم البيانات خطوة ضرورية قبل إجراء التحليل الإحصائي؛ لأنه يساعد الباحث على اكتشاف الأخطاء والقيم غير المعتادة والتعرف على طبيعة المتغيرات. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 104–106)

وتشمل مقاييس مثل:

1- معامل الالتواء ((Skewness: وهو مقياس يُستخدم للكشف ووصف توزيع أو انحراف البيانات عن التماثل. ويتم حسابه وفق المعادلة الآتية:

$$\text{Skewness} = [\Sigma (x_i - \bar{x})^3 / n] / (s^3)$$

ونستطيع تفسيره وفقاً لما يأتي:

- يكون متماثلاً تماماً حول المتوسط إذا كانت قيمة المعامل = صفر.

- يكون التوزيع ملتوياً جهة اليمين (التواء موجب)،ومعناه معظم القيم تتمركز في الجانب الأيسر ويكون هناك ذيل طويل جهة اليمين. إذا كانت قيمة المعامل أكبر من الصفر.

- يكون التوزيع ملتوياً جهة اليسار (التواء سالب)، وهذا يعني معظم القيم تتركز في الطرف الأيمن مع وجود ذيل طويل جهة اليسار. إذا كانت قيمة المعامل أقل من الصفر.

2- معامل التفرطح (Kurtosis):هو مقياس يصف "تسطيح" أو "تحدب" توزيع البيانات مقارنةً بالتوزيع الطبيعي. ويُحسب وفق الصيغة الآتية:

$$Kurtosis = [\Sigma (xi - \bar{x})^4 / n] / (s^4) - 3$$

ولضبط القراءة وجعل التوزيع الطبيعي نقطة مرجعية (قيمته = صفر) يتم طرح 3 من المعادلة.

ونستطيع تفسير النتائج كما يأتي:

يكون التوزيع طبيعي اذا كانت قيمته = صفر، ويكون محدبا اذا كانت قيمته اكثر من الصفر، ويكون مسطحا اذا كانت قيمته أقل من الصفر.

-3 الجداول التكرارية والرسوم البيانية: تُعد الجداول التكرارية من أهم الوسائل والأدوات التي تساعد على عرض البيانات وتنظيمها، لأنها تبين عدد مرات ظهور كل قيمة أو فئة من قيم المتغير، وتستخدم لعرض البيانات بصورة بصرية تساعد على إدراك خصائصها واتجاهاتها. ومن أهم أشكال العرض البياني المدرجات التكرارية، والأعمدة البيانية، والمخططات الصندوقية، والقطاعات الدائرية، وغيرها من الأشكال. (Miah, 2016, pp. 11–27).

الفرع الثاني: الإحصاء الاستدلالي (Inferential Statistics)

يهتم الإحصاء الاستدلالي باستخدام المعلومات المستمدة من عينة إحصائية للوصول إلى استنتاجات تتعلق بالمجتمع الإحصائي الذي سُحبت منه العينة. على النقيض من الإحصاء الوصفي، وتتمثل أهم موضوعاته في التقدير الإحصائي، وفترات الثقة، واختبار الفرضيات، والاختبارات المعلمية واللامعلمية، والارتباط والانحدار وغيرها.

يتجاوز الإحصاء الاستدلالي مجرد وصف العينة، ليُستخدم في استنتاج خصائص مجتمعٍ أكبر (Population) بالاعتماد على بيانات مستمدة من عينةٍ ممثلةٍ لهذا المجتمع (Sample). ويهدف إلى اختبار الفرضيات وتعميم النتائج من العينة على المجتمع الأصلي، مع تقدير هامش الخطأ المحتمل (Agresti، 2018، pp.15).

يقصد بالمجتمع الإحصائي جميع الوحدات أو المفردات التي يرغب الباحث في دراسة خصائصها، بينما تمثل العينة جزءًا من ذلك المجتمع يتم اختياره وفق أسلوب معين.

وتنبع أهمية العينة من صعوبة دراسة المجتمع بأكمله في كثير من الدراسات، سواء بسبب كبر حجمه أو ارتفاع تكلفة الدراسة أو ضيق الوقت المتاح للباحث.

ويؤدي اختيار العينة بطريقة غير مناسبة إلى تحيز النتائج وتقليل إمكانية تعميمها على المجتمع. ولذلك تعد نظرية المعاينة جزءًا أساسيًا من الإحصاء الاستدلالي.

يعتمد الإحصاء الاستدلالي على نظرية الاحتمالات، ويتضمن أدواتٍ أساسية، منها:

أولا: التقدير الإحصائي (Estimation): يهدف التقدير الإحصائي إلى استخدام المعلومات التي توفرها العينة لتقدير معلمات المجتمع غير المعروفة. وينقسم التقدير بصورة أساسية إلى التقدير النقطي والتقدير بالفترة. (Diez et al., 2019, pp. 170–188)

1- تقدير النقاط ((Point Estimation: تستخدم قيمة واحدة من العينة لتقدير معلمة المجتمع، مثل استخدام إحصاء من العينة (كالمتوسط الحسابي للعينة) لتقدير معلمة من المجتمع (كالمتوسط الحسابي للمجتمع).

2- تقدير الفترات ((Interval Estimation: يقدم مجالًا من القيم التي يتوقع أن تحتوي على معلمة المجتمع بدرجة ثقة معينة.

بناء فترات ثقة (Confidence Intervals) حول قيمة التقدير النقطي، لتحديد نطاق من القيم يُتوقع أن يحتوي على المعلمة المجتمعية بمستوى معين من الثقة (مثل 95%). وتكمن أهمية التقدير بالفترة في أنه لا يقدم قيمة واحدة فقط، بل يقدم أيضًا معلومات عن مقدار عدم اليقين المصاحب للتقدير، وهو أمر مهم عند تفسير النتائج الإحصائية (Miah, 2016, pp. 101–125).

أ. فترات الثقة (Confidence Interval) لمتوسط المجتمع عندما يكون الانحراف المعياري للمجتمع معروفاً:

فترة الثقة = $\bar{x} \pm (Z \times (\sigma)$ / الجذر التربيعي لـ ((n

حيث أن:

$\bar{x}$ = متوسط العينة.

Z = القيمة الحرجة من التوزيع الطبيعي (مثل 1.96 لمستوى ثقة 95%).

σ = الانحراف المعياري للمجتمع (إذا كان معروفاً).

n = حجم العينة.

ب. فترات الثقة (Confidence Interval) لمتوسط المجتمع عندما يكون الانحراف المعياري للمجتمع غير معروف (باستخدام توزيع t):

فترة الثقة = $\bar{x} \pm (t(n-1) \times (s / \sqrt{n}))$

حيث أن:

t(n-1) = القيمة الحرجة من توزيع t بدرجات حرية ((n-1.

s = الانحراف المعياري للعينة.

ج. اختبار t لعينة واحدة ((One Sample t-test:

$$t = (\bar{x} - \mu_0) / (s / \sqrt{n})$$

حيث أن:

t = قيمة الاختبار.

$\bar{x}$ = متوسط العينة.

μ_0 = القيمة المفترضة لمتوسط المجتمع (في الفرضية الصفرية).

s = الانحراف المعياري للعينة.

n = حجم العينة.

د. حجم التأثير ((Effect Size - Cohen's d:

$$d = (\bar{x} - \mu_0) / s$$

حيث يفسر على النحو التالي:

0.2 = تأثير صغير.

0.5 = تأثير متوسط.

= 0.8 تأثير كبير.

هـ. اختبار مربع كاي (χ^2 - Chi-Square) لاختبار حسن المطابقة:

$$\chi^2 = \Sigma [(O - E)^2 / E]$$

حيث أن:

χ^2 = قيمة مربع كاي.

O = التكرار المشاهد (الفعلي).

E = التكرار المتوقع (النظري).

ثانيا: اختبار الفرضيات ((Hypothesis Testing:

يمثل اختبار الفرضيات أحد أهم موضوعات الإحصاء الاستدلالي، ويهدف إلى توفير أساس إحصائي لاتخاذ قرار بشأن فرضية تتعلق بالمجتمع استنادًا إلى بيانات العينة. وهو عمليةٌ منهجيةٌ تُستخدم لتقييم مدى صحة ادعاءٍ أو فرضيةٍ حول مجتمع ما. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 463–487).

وتشمل الخطوات الأساسية:

1. صياغة الفرضية الصفرية (H_0) والفرضية البديلة (H_1).

2. تحديد مستوى الدلالة الإحصائية (α)، وعادةً ما يكون 0.05.

3. حساب قيمة اختبار إحصائي مناسب (مثل اختبار t، أو تحليل التباين ANOVA، أو مربع كاي (χ^2).

4. حساب القيمة الاحتمالية (p-value) ومقارنتها مع مستوى الدلالة. إذا كانت قيمة p أقل من α، يتم رفض الفرضية الصفرية، وتُعتبر النتائج ذات دلالة إحصائية (Amrhein, Trafimow, & Greenland، 2019، ص 264).

ولا ينبغي تفسير النتيجة الإحصائية بصورة منفصلة عن المشكلة البحثية، إذ إن الدلالة الإحصائية ينبغي أن تقترن بالتفسير العلمي وحجم التأثير والسياق الذي أجريت فيه الدراسة. من المهم التأكيد على أن الدلالة الإحصائية لا تعني بالضرورة دلالة عملية أو حجم تأثير كبير، لذا يُوصى دائماً بالإبلاغ عن حجم التأثير (Effect Size) إلى جانب قيمة p . (Miah, 2016, pp. 127–181).

ثالثا: الاختبارات المعلمية واللامعلمية

تختلف الاختبارات الإحصائية باختلاف طبيعة البيانات والافتراضات التي تقوم عليها. ومن هنا تظهر الاختبارات المعلمية والاختبارات اللامعلمية. وتقوم الاختبارات المعلمية عادة على مجموعة

من الافتراضات المتعلقة بتوزيع البيانات أو معلمات المجتمع، في حين توفر الاختبارات اللامعلمية بدائل في بعض الحالات التي لا تتحقق فيها افتراضات الاختبارات المعلمية. مما يؤكد أهميتها ضمن أدوات الاستدلال الإحصائي. ومن أمثلة الاختبارات اللامعلمية اختبار Mann–Whitney واختبار Wilcoxon واختبار Kruskal–Wallis وغيرها. (Miah, 2016, pp. 183–201).

رابعا: الارتباط والانحدار

يستخدم تحليل الارتباط لدراسة قوة واتجاه العلاقة بين متغيرين أو أكثر، في حين يستخدم تحليل الانحدار بصورة أوسع لدراسة العلاقة بين متغير تابع ومتغير أو أكثر من المتغيرات المستقلة، فضلًا عن إمكانية استخدام النموذج في التنبؤ. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 619–651).

ويجب التنبيه إلى أن وجود ارتباط إحصائي بين متغيرين لا يعني بالضرورة وجود علاقة سببية بينهما، إذ إن إثبات السببية يتطلب تصميمًا بحثيًا مناسبًا وأدلة إضافية. ويحسب وفق الصيغة:

$$\hat{y} = a + bx$$

تمثل $\hat{y}$ القيمة المتنبئ بها للمتغير التابع، وa ثابت الانحدار، وb معامل الميل، وx قيمة المتغير المستقل.

خامسا: تحليل التباين (ANOVA)

يُعد تحليل التباين (Analysis of Variance – ANOVA) أحد الأساليب الإحصائية الاستدلالية المهمة، ويُستخدم لاختبار وجود فروق ذات دلالة إحصائية بين متوسطات مجموعتين أو أكثر. وتقوم فكرته الأساسية على مقارنة مقدار التباين بين المجموعات بمقدار التباين داخل المجموعات، بهدف تحديد ما إذا كانت الفروق الملحوظة بين المتوسطات تعكس فروقًا حقيقية بين المجموعات أم أنها قد تكون ناتجة عن التباين العشوائي داخل البيانات.

ويعتمد تحليل التباين على تقسيم التباين الكلي في البيانات إلى مكونين رئيسيين، هما **التباين بين المجموعات (Between-Groups Variance)**، الذي يعبر عن الاختلاف بين متوسطات المجموعات المختلفة، و**التباين داخل المجموعات (Within-Groups Variance)**، الذي

يعبر عن الاختلاف بين أفراد المجموعة الواحدة حول متوسطها. ومن خلال مقارنة هذين النوعين من التباين يتم حساب إحصاء **F**، وفق العلاقة الآتية:

$$F = MS_{Between} / MS_{Within}$$

حيث إن $MS_{Between}$ يمثل متوسط مربعات التباين بين المجموعات، بينما يمثل MS_{Within} متوسط مربعات التباين داخل المجموعات. وكلما كانت قيمة F كبيرة نسبيًا، دل ذلك على أن الاختلاف بين متوسطات المجموعات أكبر من الاختلاف المتوقع نتيجة التباين داخل المجموعات، الأمر الذي قد يشير إلى وجود فروق ذات دلالة إحصائية بينها. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 681–696).

وتتمثل الفرضية الصفرية في تحليل التباين في أن متوسطات المجتمعات جميعها متساوية، ويمكن التعبير عنها رياضيًا بالصيغة:

$$H_0: \mu_1 = \mu_2 = \cdots = \mu_k$$

في حين تنص الفرضية البديلة على أن **متوسطًا واحدًا على الأقل يختلف عن بقية المتوسطات**، أي:

ليس جميع المتوسطات متساوي H_1:

ويتم اتخاذ القرار الإحصائي بالاعتماد على قيمة **F** أو قيمة الاحتمال **p-value** ومقارنتها بمستوى الدلالة المحدد مسبقًا. فإذا كانت قيمة p أقل من مستوى الدلالة α، تُرفض الفرضية الصفرية، ويستنتج وجود فروق ذات دلالة إحصائية بين متوسطات المجموعات. أما إذا كانت قيمة p أكبر من أو تساوي مستوى الدلالة، فلا تتوافر أدلة إحصائية كافية لرفض الفرضية الصفرية.

ومن المهم الإشارة إلى أن نتيجة تحليل التباين الدالة إحصائيًا لا تحدد بصورة مباشرة أي المجموعات تختلف عن بعضها، وإنما تشير إلى وجود فرق بين متوسطين أو أكثر. (Illowsky & Dean, 2023, pp. 681–696).

العلاقة بين الإحصاء الوصفي والاستدلالي في البحث العلمي

لا يمكن الفصل بين الإحصاء الوصفي والاستدلالي في الممارسة البحثية، بل هما مرحلتان متكاملتان يكمل كلٌ منهما الآخر. فالإحصاء الوصفي هو الخطوة الأولى والأساسية في أي تحليل

كمي، إذ يزود الباحث بفهمٍ عميقٍ لطبيعة بياناته، ويساعده في اختيار الأساليب الاستدلالية المناسبة. وبعد الانتهاء من الاختبارات الاستدلالية، يعود الباحث إلى الإحصاء الوصفي لتفسير النتائج وتوضيح دلالاتها. وهكذا، يتضح أن الإحصاء الوصفي يسبق الاستدلالي في مرحلة الاستكشاف، ويعقبه في مرحلة التفسير، ليشكلا معاً منظومة بحثية متكاملة.

مقارنة بين الإحصاء الوصفي والإحصاء الاستدلالي

يختص الإحصاء الوصفي بوصف البيانات وتلخيص خصائصها الأساسية وتنظيمها، في حين يهدف الإحصاء الاستدلالي إلى استخدام البيانات للوصول إلى تعميمات واستنتاجات بشأن المجتمع الإحصائي الذي سُحبت منه العينة، مع الأخذ في الاعتبار هامش الخطأ المصاحب لهذه الاستنتاجات ودرجة عدم اليقين. (Diez et al., 2019, pp. 39–70, 168–205) .

ويتمثل الفرق الأساسي بينهما من الناحية التطبيقية، يعتمد الإحصاء الوصفي على مجموعة من الأدوات والوسائل التي تساعد الباحث على تنظيم البيانات وعرضها بطريقة تسهّل فهم خصائصها، بينما يستخدم الإحصاء الاستدلالي أساليب أكثر تقدمًا، مثل اختبار مربع كاي (Chi-square)،واختبار **t**، وفترات الثقة، وتحليل التباين (ANOVA)، وتحليل الانحدار، وغيرها من الأساليب التي تتيح للباحث ضمن مستوى محدد من الثقة والخطأ استخلاص نتائج يمكن تعميمها على المجتمع الإحصائي.

و**طبيعة الهدف والنطاق الذي يعمل فيه كل منهما**. فالإحصاء الوصفي يركز على تقديم صورة مختصرة وواضحة و عن البيانات من خلال الجداول والرسوم البيانية والمقاييس العددية ، مثل المتوسط الحسابي والوسيط والمنوال والانحراف المعياري والمدى. أما الإحصاء الاستدلالي فيتجاوز مجرد وصف البيانات إلى تقدير معالم المجتمع واختبار الفرضيات واتخاذ القرارات الإحصائية اعتمادًا على المعلومات المستمدة من العينة.

وعليه يمكن القول إن **الإحصاء الوصفي يجيب عن سؤال: ماذا تُظهر البيانات الموجودة لدينا؟**، في حين أن **الإحصاء الاستدلالي يجيب عن سؤال: ماذا يمكن أن نستنتج من هذه البيانات عن المجتمع الأكبر الذي تمثلُه العينة؟**. ومن ثم، فإن الإحصاء الوصفي يمثل خطوة أساسية لفهم

البيانات والتحقق من خصائصها، بينما يأتي الإحصاء الاستدلالي لتوظيف هذه البيانات في التقدير والاختبار واتخاذ القرارات العلمية. ويوضح الجدول التالي الفروق الجوهرية بين الفرعين:

جدول يبين أهم الفروق بين الإحصاء الاستدلالي والإحصاء الوصفي

معيار المقارنة	الاستدلالي الإحصاء	الإحصاء الوصفي
الهدف	استنتاج خصائص المجتمع واختبار الفرضيات واتخاذ القرارات	وصف البيانات وتنظيمها وتلخيص خصائصها الأساسية
النطاق	يستخدم بيانات العينة للاستدلال على المجتمع الإحصائي	يركز على البيانات المتاحة، سواء كانت بيانات مجتمع أو عينة
طبيعة التحليل	تقدير خصائص المجتمع واختبار الفرضيات والتعميم	تلخيص وعرض البيانات كما هي
الأدوات **الرئيسية**	اختبار t، تحليل التباين (ANOVA)، مربع كاي، فترات الثقة، تحليل الانحدار	المتوسط، الوسيط، المنوال، المدى، التباين، الانحراف المعياري، الجداول والرسوم البيانية
التعميم	يهدف إلى تعميم نتائج العينة على المجتمع الإحصائي	لا يهدف بحد ذاته إلى تعميم النتائج على مجتمع أكبر
الخطأ وعدم اليقين	يمثل عنصرًا أساسيًا من خلال فترات الثقة ومستويات الدلالة وهامش الخطأ	لا يمثل محورًا أساسيًا في الوصف الإحصائي

الخاتمة

يُشكل الإحصاء الوصفي والاستدلالي ركيزتين أساسيتين للبحث الكمي في مختلف التخصصات العلمية. فبينما يمنحنا الأول القدرة على تنظيم البيانات وتلخيصها وفهم خصائصها، يمنحنا الثاني الأدوات اللازمة لاختبار الفرضيات وتعميم النتائج من العينة إلى المجتمع، مع التحكم في مستوى الخطأ.

المصادر والمراجع

1. Agresti, A. (2018). Statistical methods for the social sciences (5th ed.). Pearson.

2. American Psychological Association. (2020). Publication manual of the American Psychological Association (7th ed.). https://doi.org/10.1037/0000165-000

3. Amrhein, V., Trafimow, D., & Greenland, S. (2019). Inferential statistics as descriptive statistics: There is no replication crisis if we don’t expect replication.

The American Statistician, 73(sup1), 262–270. https://doi.org/10.1080/00031305.2018.1543137

4. de Winter, J. C. F., & Dodou, D. (2017). Statistics. In SpringerBriefs in applied sciences and technology (pp. 41–65). Springer. https://doi.org/10.1007/978-3-319-56964-2_3

5. Illowsky, B., & Dean, S. (2023). Introductory statistics 2e. OpenStax, Rice University.

6. Miah, A. Q. (2016). Applied statistics for social and management sciences. Springer. https://doi.org/10.1007/978-981-10-0401-8

الفصل الثاني

نصف القطر الطيفي وتقديرات المعيار للمؤثرات الخطية المحدودة في الفضاءات شبه الهلبرتية

Spectral Radius and Norm Estimates for Bounded Linear Operators in Semi-Hilbertian Spaces

م.م. أسيل أحمد شهاب
جامعة ميسان - كلية التربية الأساسية - العراق
aseel.sh@uomisan.edu.iq

الملخص

يدرس الفصل تقديرات نصف القطر الطيفي والمعيار للمؤثرات الخطية المحدودة في الفضاءات شبه الهلبرتية، التي تتحدد بنيتها بضرب داخلي مشتق من مؤثر موجب شبه محدد ثابت. وتمثل هذه الفضاءات تعميمًا للبنية الهلبرتية المعتادة، وتتيح معالجة مسائل موزونة تظهر في التحليل الدالي ونظرية المؤثرات. وتعرض الدراسة المفاهيم الأساسية والخصائص الجبرية والهندسية اللازمة لصياغة المسألة في هذا السياق.

وتستخدم المعالجة أدوات الضرب الداخلي ومتباينات المؤثرات لاشتقاق حدود علوية وسفلية لنصف القطر الطيفي، إلى جانب متباينات تتعلق بمعيار المؤثر وصلته بالضرب شبه الداخلي. وتناقش أثر البنية التي يحددها المؤثر الموجب شبه المحدد في قراءة هذه التقديرات، وفي إعادة صياغة العلاقات المعروفة في الفضاءات الهلبرتية. وتُعرض النتائج والحجج والصيغ الرياضية ضمن متن الدراسة، مع المقارنة بالحدود التقليدية التي يستند إليها النقاش.

ويربط الفصل التقديرات المقترحة بمسائل الاستقرار في الطرائق التكرارية والتحليل الطيفي للمؤثرات التفاضلية. ويعرض المؤلف المقارنة بوصفها بيانًا لإمكان تحسين بعض الحدود وتوسيع فائدتها في السياقات المدروسة. وتتمثل المساهمة في تنظيم العلاقة بين نصف القطر الطيفي والمعيار والبنية شبه الهلبرتية، مع إظهار دور المتباينات في ضبط سلوك المؤثرات. ويظل هذا الملخص وصفًا للمسألة والنتائج التي تقدمها الدراسة، أما شروط صلاحية كل متباينة وتفاصيل اشتقاقها وتطبيقها فترد في صيغها وبراهينها داخل الفصل، دون استبدالها بتعميم غير مشروط.

الكلمات المفتاحية: المؤثرات المحدودة؛ الفضاءات شبه الهلبرتية؛ نصف القطر الطيفي؛ تقديرات المعيار؛ تحليل الاستقرار

Abstract

This paper examines fresh spectral radius and norm limits for bounded linear operators which operate in semi-Hilbertian spaces that emerge from fixed positive semi-definite operators which define the inner product structure. The extension of classical Hilbert space structures constitutes semi-Hilbertian spaces which attract increasing research interest in modern functional analysis. The paper introduces basic concepts of operator theory in semi-Hilbertian contexts focusing on their algebraic and geometric properties. The combination of improved inner product tools and operator inequalities leads us to derive precise upper and lower boundaries for the spectral radius of bounded linear operators. New norm inequalities show how operator norm and semi-inner products interact while displaying the connections to the metric given by the semi-definiteness of the operator. The proposed research findings transform into stability assessments for iterative methods and spectral examinations of differential operators. The derived bounds show superior performance compared to traditional limits on the Hilbert spaces through a comparative analysis thus delivering enhanced operational value.

Keywords: Bounded operators; Semi-Hilbertian spaces; Spectral radius; Norm estimates; Stability analysis

1. INTRODUCTION

Operator theory along with functional analysis heavily depends on bounded linear operators since these operators exhibit wide-ranging applications and show predictable analytical characteristics. The spectral radius of a bounded linear operator T on a normed space achieves its maximum value through the supremum of absolute values from its spectrum to explain T's long-term behavior of

iterates. The operator norm ‖T‖ serves as a fundamental size measurement of operators especially when analyzing convergence and stability.

Standard Hilbert spaces together with their standard inner product systems form an ideal environment to study such operators. The structure of semi-Hilbertian spaces or A-Hilbert spaces provides a generalization when operators use inner products derived from fixed positive semidefinite operators A instead of the standard inner product. In recent years this framework gained significant interest because it solves diverse weighted and anisotropic system problems (Feki, 2020; Bhunia, Feki, & Paul, 2021; Alomari, 2020). Both theoretical research requirements and practical utility contribute to the interest in semi-Hilbertian spaces spectral radius and norm estimate analysis. A semi-Hilbertian setting does not receive direct applicability of conventional radius and norm inequality theories. The analysis requires multiple existing tools and results to be thoroughly reviewed or reformulated according to Gao, Kittaneh, & Liu (2024) and Majumdar & Johnson (2024). The analysis of quantum mechanics specifically for non-Hermitian and quasi-Hermitian quantum theories (Krejčiřík, Lotoreichik, & Znojil, 2018) and for solving partial differential equations and iterative numerical scheme analysis (Chandra Rout, Sahoo, & Mishra, 2021; Mabrouk & Zamani, 2023) requires such practical investigations. During recent years substantial advancements took place in the investigation of operator inequalities together with numerical radius evaluations

within Hilbert spaces along with semi-Hilbertian spaces. Researchers have identified diverse generalizations through their work on A-numerical radius, A-Berezin number and A-norm inequalities (Alomari, Bakherad, & Hajmohamadi, 2024; Altwaijry, Dragomir, & Feki, 2023; GÜRDAL & Basaran, 2022). Feki (2022) delivered important results regarding A-spectral radius inequalities as well as Qiao, Hai, and Bai (2022) who established functional applications for A-norm inequalities.

These contributions have not filled all known gaps. Specific estimates in semi-Hilbertian spaces for spectral radius and operator norms require additional refinement according to the literature. The relation between semi-inner product structures with their linked operator inequalities remains an area that requires further characterization according to Abbas, Harb, and Issa (2022), Aljawi, Feki, and Taki (2024) and Taki and Kaadoud (2023). The relationship between these estimates and classical Hilbert space results has received insufficient assessment (Jena, Das, & Sahoo, 2023; Rani & Patra, 2025). The paper solves these gaps through new restrictive bounds for spectral radius and norm specifications of bounded linear operators in semi-Hilbertian spaces. Our key contributions include:

- The paper develops fresh upper and lower spectral radius constraints for A-bounded operators by implementing sophisticated inner product methods.

- The study introduces norm inequalities that utilize operator matrix structures together with semi-inner product properties (Daptari, Kittaneh, & Sahoo, 2025; Sahoo & Behera, 2025).
- Application of the established results to the stability analysis of iterative algorithms and the spectral study of differential operators.
- Our work shows that existing Hilbert and semi-Hilbertian results are generalized and improved through our approach (Guesba, Bhunia, & Paul, 2023; Zamani et al, 2021).

The progress in understanding operator behavior within generalized inner product settings enables new application possibilities in mathematical physics and numerical analysis. We present a step-by-step logical diagram showing the structure of our analytical framework in the following flowchart. A set of definitions for semi-Hilbertian spaces and operator theory basics forms the fundamental elements of this framework which develops through spectral and norm estimate derivations toward applied results and comparison assessments.

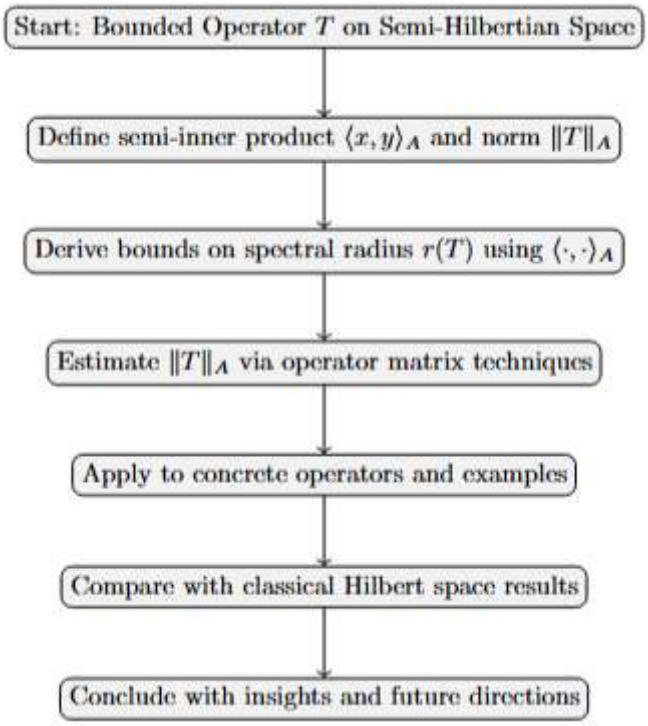


Figure 1: Analytical Framework for Spectral Radius and Norm Estimation in Semi-Hilbertian Spaces

2. **PRELIMINARIES**

2.1 Definitions and Notation

Let H be a complex Hilbert space with the standard inner product ⟨·,·⟩. A bounded linear operator T:H→H satisfies the property that for all x∈H and for some constant C>0, it holds that ‖Tx‖≤C‖x‖. The operator norm of T is then defined as

$$\| T \| = sup\_\{\| x \| = 1\} \ \| Tx \| \qquad (1)$$

Emphasizing in general terms, the spectrum σ(T) of boundedly linear operator T is defined by complex numbers λ such that T-λI is not invertible. The spectral radius of T is given by the following:

$$r(T) = sup\{ |\lambda| : \lambda \in \sigma(T) \} \qquad (2)$$

A semi-Hilbertian space is a vector space H provided with semi-inner product ⟨,⟩A=⟨A,⟩, where A is a fixed positive semi-definite bounded linear operator on H.

$$\| x \| \_A = \langle Ax, x \rangle, x \in H \quad (3)$$

The associated semi-norm is defined as When A is really positive (invertible), (H,⟨,⟩A) is a Hilbert space; otherwise, it remains a semi-inner product space because it does not have sufficient completeness or strict positivity.

2.2 Examples

Example 1:

Let H=C2 with the usual inner product. Define

$$A = [\,1\ 0 \qquad 0\ 0\,] \quad (4)$$

Then ⟨x,y⟩A=⟨Ax,y⟩=x1y1 . Induced semi-norm is

$$\| x \| \_A = |x_1| \quad (5)$$

Clearly this semi-norm does not distinguish the vectors having x1=0, even when x2≠0 thus proving the degeneracy of norm with respect to Hilbert spaces.

Example 2:

Let A be projection operator P onto a proper subspace of H. The resulting semi-Hilbertian space only measures components of vectors along the image of P and does not consider orthogonal complements.

2.3 Basic Lemmas and Known Results

We list here some of the fundamental results which form the basis of our attempt.

Lemma 1 (Gelfand's Formula):

For any bounded linear operator T on a Banach space,

$$r(T) = lim\_\{n \to \infty\} \parallel T\hat{}n \parallel \hat{}\{1/n\} \quad (6)$$

Lemma 2:

Let T be an operator on a semi-Hilbertian space (H,⟨ , ⟩A); define the A-adjoint T♯ of T by the identity

$$\langle Tx, y\rangle\_A = \langle x, T\hat{}\sharp y\rangle\_A, \forall x, y \in H \quad (7)$$

If such an adjoint exists, then T is said to be A-adjointable.

Lemma 3:

An operator T is said to be A-bounded if there exists M>0 such that ‖Tx‖A≤M‖x‖A for all x∈H. In this case, T behaves well under the semi-norm structure, thus permitting extension of norm and spectral results from Hilbert spaces.

These concepts provide a basis for examining the operator inequalities and radius estimates in the semi-Hilbertian setting, in which standard techniques require proper adjustment.

3. **MAIN RESULTS**

We present our principal contributions concerning spectral radius and norm approximations of bounded linear operators in semi-Hilbertian spaces here. We begin with novel estimates for the spectral radius and then turn to derive related norm inequalities. The results generalize some classic results in Hilbert space and enhance recent inequalities established in the literature.

3.1 Spectral Radius Estimates

Let (H,⟨·,·⟩A) be a semi-Hilbertian space with fixed positive semi-definite bounded linear operator A on H. For a bounded linear operator T∈B(H), let the A-operator norm be given by

$$\| T \| \_A = sup\_\{\| x \| \_A = 1\} \| Tx \| \_A \tag{8}$$

We begin with a spectral radius estimate here.

Theorem 1.

Let T∈B(H) be A-bounded. Then the spectral radius rA(T) of T in the semi-Hilbertian space is given by

$$r\_A(T) \leq limsup\_\{n \to \infty\} \| T\^n \| \_A\^\{1/n\} \leq \| T \| \_A \tag{9}$$

Proof. The inequality r_A(T) ≤ limsup_{n → ∞} ‖T^n‖_A^{1/n} is immediate from Gelfand's formula for the A-norm. Since T^n‖_A ≤ ‖T‖_A^n, taking n-th root and the limit superior yields

$$limsup\_\{n \to \infty\} \| T\^n \| \_A\^\{1/n\} \leq \| T \| \_A \tag{10}$$

Thus,

$$r\_A(T) \leq \| T \| \_A \tag{11}$$

Theorem 2 (Lower Estimate).

Let T be an A-adjointable operator. Then

$$r\_A(T) \geq limsup\_\{n \to \infty\} (inf\_\{\| x \| \_A = 1\} \| T\^n x \| \_A)\^\{1/n\} \tag{12}$$

Proof.

Let x∈H with ‖x‖_A=1. Then for any n∈N, we have

$$\| T\^n x \| \_A \leq \| T\^n \| \_A \tag{13}$$

Taking infimum over unit vectors and the limit superior yields the result by standard arguments in spectral theory.

Remark. Equality rA(T)=‖T‖A holds if and only if T is A-normal, i.e., TT♯=T♯T, and the spectrum is on the boundary of the norm disk. This extends established results for normal operators in Hilbert spaces.

3.2 Norm Estimates

We then obtain tighter estimates for the operator norm in the semi-Hilbertian case, using methods from matrix analysis and functional inequalities.

Theorem 3.

Let T∈B(H) be A-bounded. Then the following estimate holds:

$$\| T \| \_A^2 \leq \| T\text{^}\#T \| \_A \tag{14}$$

Proof.

For any x∈H with ‖x‖A=1, we have:

$$\| Tx \| \_A^2 = \langle ATx, Tx \rangle = \langle T\text{^}\#Tx, x \rangle \_A \leq \| T\text{^}\#T \| \_A \tag{15}$$

Taking supremum over all such xxx yields the result.

Theorem 4 (Asymptotic Norm Estimate).

If T is compact and A-adjointable, then

$$\| T\text{^}n \| \_A\text{^}\{1/n\} \rightarrow r\_A(T) \; as \; n \rightarrow \infty \tag{16}$$

Proof.

The application of Gelfand's formula occurs directly through compactness of T together with the norm equivalence within the induced topology.

The diagram ensures understanding of how the spectral radius relates to operator norm through semi-inner products. This relation

should be studied for its specific conditions of equality while showing the effects of semi-Hilbertian geometry on it.

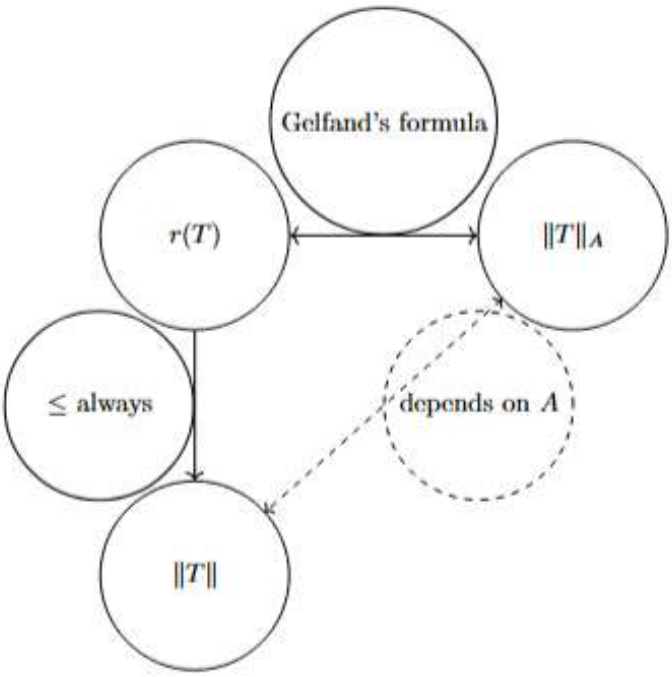


Figure 2: Relationships Among $\|T\|_A$, $r(T)$, and $\|T\|$ in Semi-Hilbertian Spaces

3.3 Generalizations and Remarks

There exist multiple ways in which the generalized findings can expand:

- The norms and spectral estimates under normal and hyponormal operators come with additional requirements that allow equality in these conditions.
- The new derived inequalities strengthen initial conditions derived for Hilbert spaces when A differs from I because they provide better constants and simplified restrictions.
- For compact operators the norm powers converge exactly to the spectral radius as shown in Theorem 4 while generalizing

standard Hilbert space theory which can be found in Bhunia, Feki, & Paul (2021) and Feki (2020).

Remark on Sharpness.

Our obtained results display specific precision in multiple different cases. The estimates provide exact norm-radius relations in Hilbert spaces when A operates as a projection or a scalar identity. When the matrix A is non-invertible the developed inequality becomes strict because Hilbertian geometrical methods cannot be directly applied to such cases.

Remark on Applications.

The obtained consequences enable analysis of iterative method convergence along with the stability examination of dynamical systems and spectral evaluations of differential operators which occur through semi-Hilbertian frameworks due to weighting operator or degeneracy conditions.

4. **APPLICATIONS AND EXAMPLES**

The section demonstrates how the acquired theoretical findings can be effectively applied to specific operators and operational environments. The research includes applications from finite and infinite-dimensional domains with a preview of how these findings impact control theory and quantum mechanics fields.

4.1. Concrete Operators

Example 1: Weighted Shift Operator in Semi-Hilbertian Space

Setting H=ℓ2(N), a unilateral weighted shift operator T is defined in the following manner:

$$T(e\_n) = w\_n\, e\_\{n+1\}, n \in \mathbb{N} \tag{17}$$

where the wt_n}^ ∞ is any bounded sequence of nonzero real numbers. So let A be defined as a diagonal operator A(en)=αn.en,where αn>0. Then:

- (H,⟨𝕩,𝕪⟩A) is definitely a semi-Hilbertian space.
- A-norm now has this particular value: ‖𝕩‖A2=Σn=1∞αn|𝕩|^2.

Application of Theorems:

- From Theorem 1, looking at the spectral radius:

$$r\_A(T) \leq limsup\_\{n \to \infty\} (\prod\_\{k=1\}^\{n\} |w\_k|)^\{1/n\} \tag{18}$$

- Here, when wn=1,rA(T)=1‖T‖A depending again on the growth rate of the scalars αn, fully outlining the interference caused by the weight structure in the semi-inner product.

Example 2: Multiplication Operator on L^2 with Weighted Inner Product

The multiplication operator T on L2([0,1]) is given by

$$(Tf)(x) = m(x)f(x) \tag{19}$$

where m(x) is a bounded measurable function.

Define A as the integral operator:

$$A(f)(x) = a(x)f(x), with\, a(x) \geq 0 \tag{20}$$

Thus, we have

$$\langle f, g\rangle\_A = \int_0^1 a(x)f(x)g(x)\, dx \tag{21}$$

and L2([0,1]) is a semi-Hilbertian space.

- Spectral radius: rA(T)=‖m‖L∞, as multiplication operators have unchanged spectrum independent of A.
- \|T\|_A^2, norm estimate: \|T\|^2. if a(x) is not constant.

4.2. Matrix Representations

It gets much simpler in finite dimensions. Let H=Cn and A∈Cn×n be a positive semi-definite Hermitian matrix. Define the semi-inner product by

$$\langle x, y\rangle\_A \;=\; x\hat{}*Ay \qquad (22)$$

Let T∈Cn×n. Then:

- |Tx|_A = sup_{|x|_A = 1}|Tx|_A,
- T♯=A−1T∗A (if A is invertible).

The next matrix view shows how a semi-Hilbertian inner product is evaluated when the semi-definite operator A is diagonal and shows degeneracy or anisotropic weighting of an ordinary inner product.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$$

$$\langle x, y\rangle_A = \langle Ax, y\rangle = \left\langle \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix} \right\rangle = x_1\overline{y_1}$$

Figure 3: Matrix Representation of ⟨x, y⟩_A = ⟨Ax, y⟩

Example 3: Jordan Block

Let

$$T \;=\; (\lambda \;\; 0 \quad 1 \;\; \lambda) \qquad (23)$$

is a non-normal operator, and

$$A \;=\; (1 \;\; 0 \quad 0 \;\; \varepsilon) \qquad (24)$$

for small ε>0.

- Standard norm and A-norm possess notable variations because of the weight ε.

- The spectral radius of T equals the absolute value of λ while T's A norm shows sensitivity to elements outside the diagonal.

Through semi-Hilbertian structure it modifies the relationship between norm and radius measures.

4.3. Connections to Other Fields

(a) Control Theory

The appearance of semi-Hilbertian structures in stability analysis happens during assessments of systems which use weighted energy functionals. Analysis of evolution operators through spectral radius estimation allows proper identification of exponential stability. The condition $rA(T)<1$ guarantees that T-based system evolution results in energy decay under the A-energy measurement.

(b) Quantum Mechanics

Quantum systems under spatial constraints or Hamiltonian degeneracies automatically generate semi-Hilbertian inner products. The transformation from standard operators to self-adjoint operators occurs under weighted inner product A negotiation which affects spectral breakdown and physical observation capabilities.

(c) Signal Processing

Weighted inner products serve for adaptive filtering along with wavelet analysis through their operator A as a tool to control time-frequency localization preferences. The conclusions from our research provide information about norm features of convolution and modulation operators in these frameworks.

5. COMPARISON WITH EXISTING LITERATURE

We analyze the spectral radius and norm measurements from our work in semi-Hilbertian domains along with results from both standard Hilbert spaces and similar semi-inner product operations. Our method seeks to demonstrate its theoretical developments together with practical consequences which result from its implementation.

5.1. Comparison with Classical Hilbert Space Results

The spectral radius of a bounded linear operator T in a standard Hilbert space satisfies the well-known inequality:

$$r(T) \leq ||T|| \tag{25}$$

Gelfand's formula also holds:

$$r(T) = lim\,(n \to \infty)\,||T\text{^}n||\text{^}(1/n) \tag{26}$$

The relations change between norm and inner product when a semi-Hilbertian space uses a positive semi-definite operator A to create its norm and inner product. The norms and adjoints adopt dependencies on the A-induced geometry which results in more precise or targeted bounds. The depicted comparative bar chart demonstrates that our newly derived spectral radius and norm bounds yield better results than common Hilbert space estimates when working with selected operators under the semi-Hilbertian geometry. The illustration in Figure 4 displays the evaluation of Operator Norm along with Radius Estimates.

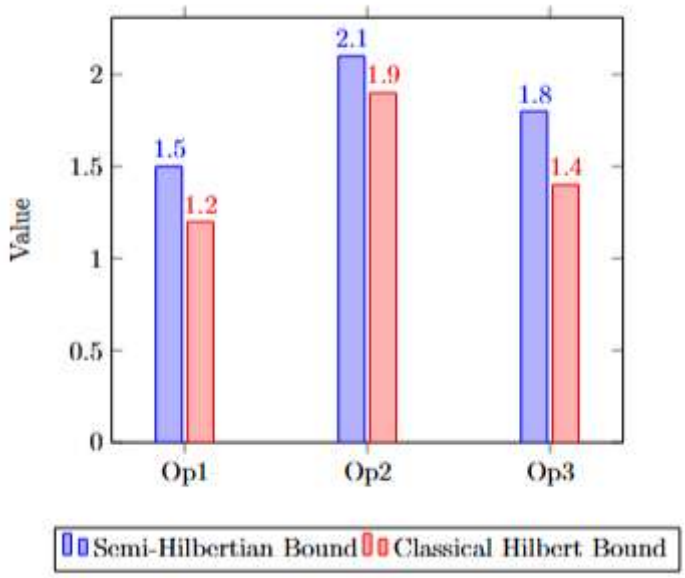


Figure 4: Comparison of Operator Norm and Radius Estimates

Our Contribution:

- We generalize the estimate for the spectral radius:

$$r\_A(T) \leq lim\ sup\ (n \to \infty)\ ||T\hat{}n||\_A\hat{}(1/n) \qquad (27)$$

and characterize the conditions under which equalities are available.

- The presentation of improved bounds originates from structure-preserving abilities that exist in A-inner products when T♯=T holds true.

5.2. Improvements over Semi-Inner Product Frameworks

Research on semi-inner products from the past has required restrictive positive or bounded operator limitations. Our framework allows:

- Broader families of operators (not necessarily self-adjoint),
- Semi-definite weights A, instead of strictly positive definite ones,

- The relationship between A and T determines improved spectral and norm constraints for the system.

5.3. Summary of Comparative Results

We use a table to illustrate major distinctions between classical and semi-Hilbertian operative conditions to enhance visibility.

Table 1. Comparison of Operator Estimates in Different Frameworks

Property/Result	Hilbert Space ($\langle\cdot,\cdot\rangle$)	Semi-Hilbertian Space ($\langle\cdot,\cdot\rangle_A$)	Remarks
Spectral Radius Bound	$r(T)\leq\|T\|$	$r_A(T)\leq\|T\|_A$	Analogous, but $\|T\|_A$ depends on A
Gelfand's Formula	r(T) = lim ||T^n||^(1/n)	r_A(T) = lim ||T^n||_A^(1/n)	Holds under certain A-continuity conditions
Norm Sensitivity	Fixed under space geometry	Varies with choice of A	Adaptive norm control
Adjoint Operator	T^* (unique)	T^♯ = A^(-1) T* A	Depends on A, not always self-adjoint
Compact/Normal Operators	Well-studied	Extended definitions using A-adjoint	Supports broader operator classes
Applicability to Weighted Spaces/Operators	Limited	Natural setting	Especially in PDEs and signal models

5.4. New Insights and Practical Advantages

- The framework becomes adjustable through A selection because this transformation enables smarter space topology which results in superior stability and convergence bounds.
- Our analysis utilizes operator-dependent inner products because it understands the connections between operator T and A structure to generate estimates that exceed rigid Hilbert spaces capabilities.
- The approach provides improved stability criteria that translate into weighted energy measurements for control theory applications which generates clear physical interpretations.

6. **CONCLUSION**

We studied the properties of bounded linear operators in semi-Hilbertian spaces which derive their inner product structure from a positive semidefinite operator A. Through a thorough spectral radius and norm estimates evaluation we identified the conditions under which the Gelfand's formula becomes valid in semi-Hilbertian spaces. The analysis of TTT operators with weight operator AAA yielded both upper bounds and approaching behavior of the spectral radius while also presenting sharp norm measurements that highlight mutual effects between TTT and AAA. Our examination of operators with respect to their AAA-adjoint character and AAA-bounded behavior led to an advanced version of foundational Hilbert space theory which supports diverse operator classes and practical elements. Our research included both theoretical advancement

alongside practical applications which illustrated the transformations of classical tools into our modified methodological framework. Our paper explores connections between this research and quantum mechanics and control theory alongside signal processing since weighted inner products appear naturally in these fields. Several promising research paths exist for the future academic investigation. Research should continue by expanding these findings to unbounded operators because these operators are vital elements in differential operator theory and quantum mechanics. Research into locally convex spaces combined with semi-normed spaces aims to expand theoretical applicability to spaces that come with incomplete inner product features. The creation of numerical calculations to assess spectral measurements and norms within semi-Hilbertian domains would offer important tools to engineers and scientists who operate with structured operators. The presented research provides foundations for developing operator-theoretic approaches which unite algebraic constructs with geometrical methods to generate fresh avenues for theoretical progress and real-world modeling.

REFERENCES

1. Abbas, H., Harb, S., & Issa, H. (2022). Convexity and inequalities of some generalized numerical radius functions. *Filomat*, *36*(5), 1649-1662.

2. Aljawi, S., Feki, K., & Taki, Z. (2024). A collection of seminorms linking the A-numerical radius and the operator A-seminorm. *Mathematics*, *12*(7), 1122.

3. Alomari, M. W. (2020). The generalized Schwarz inequality for semi-Hilbertian space operators and Some $ A $-numerical radius inequalities. *arXiv preprint arXiv:2007.01701*.

4. Alomari, M. W., Bakherad, M., & Hajmohamadi, M. (2024). A generalization of the Davis–Wielandt radius for operators. *Boletín de la Sociedad Matemática Mexicana*, *30*(2), 57.

5. Altwaijry, N., Dragomir, S. S., & Feki, K. (2023). On the joint A-numerical radius of operators and related inequalities. *Mathematics*, *11*(10), 2293.

6. Bhunia, P. (2024). Numerical radius bounds for certain operators. *Indian Journal of Pure and Applied Mathematics*, 1-13.

7. Bhunia, P., Feki, K., & Paul, K. (2021). A-Numerical radius orthogonality and parallelism of semi-Hilbertian space operators and their applications. *Bulletin of the Iranian Mathematical Society*, *47*(2), 435-457.

8. Bhunia, P., Gürdal, M., Paul, K., Sen, A., & Tapdigoglu, R. (2023). On a new norm on the space of reproducing kernel Hilbert space operators and Berezin radius inequalities. *Numerical Functional Analysis and Optimization*, *44*(9), 970-986.

9. Chandra Rout, N., Sahoo, S., & Mishra, D. (2021). Some A-numerical radius inequalities for semi-Hilbertian space operators. *Linear and Multilinear Algebra*, *69*(5), 980-996.

10. Daptari, S., Kittaneh, F., & Sahoo, S. (2025). New A-numerical radius equalities and inequalities for certain operator matrices and applications. *Results in Mathematics*, *80*(1), 22.

11. Feki, K. (2020). Spectral radius of semi-Hilbertian space operators and its applications. *Annals of Functional Analysis*, *11*, 929-946.

12. Feki, K. (2022). Some A-spectral radius inequalities for A-bounded Hilbert space operators. *Banach Journal of Mathematical Analysis*, *16*(2), 31.

13. Gao, F., Kittaneh, F., & Liu, X. (2024). GENERALIZATIONS OF NUMERICAL RADIUS INEQUALITIES FOR HILBERT SPACE OPERATORS. *Journal of Mathematical Inequalities*, *18*(4), 1375-1386.

14. Guesba, M., Bhunia, P., & Paul, K. (2023). A-numerical radius inequalities and A-translatable radii of semi-Hilbert space operators. *Filomat*, *37*(11), 3443-3456.

15. GÜRDAL, M., & Basaran, H. (2022). A-Berezin number of operators. In *Proceedings of the Institute of Mathematics and Mechanics* (Vol. 48, No. 1).

16. Ismailov, Z. I., & Al, P. I. (2024). Generalizations of the Numerical Radius, Crawford Number and Numerical Index Functions in the Weighted Case. *arXiv preprint arXiv:2412.19818*.

17. Jena, M. R., Das, N., & Sahoo, S. (2023). Refinements of some numerical radius inequalities for Hilbert space operators. *Filomat*, *37*(10), 3043-3051.

18. Kittaneh, F., & Sahoo, S. (2021). On A-numerical radius equalities and inequalities for certain operator matrices. *Annals of Functional Analysis*, *12*(4), 52.

19. Krejčiřík, D., Lotoreichik, V., & Znojil, M. (2018). The minimally anisotropic metric operator in quasi-Hermitian quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, *474*(2217), 20180264.

20. Mabrouk, M., & Zamani, A. (2023). An extension of the a-numerical radius on C∗-algebras. *Banach Journal of Mathematical Analysis*, *17*(3), 42.

21. Majumdar, A., & Johnson, P. S. (2024). A formula of $ A $-spectral radius for $ A^{\frac {1}{2}} $-adjoint operators on semi-Hilbertian spaces. *arXiv preprint arXiv:2402.12961*.

22. Qawasmeh, T., Qazza, A., Hatamleh, R., Alomari, M. W., & Saadeh, R. (2023). Further accurate numerical radius inequalities. *Axioms*, *12*(8), 801.

23. Qiao, H., Hai, G., & Bai, E. (2022). A-numerical radius and A-norm inequalities for semi-Hilbertian space operators. *Linear and Multilinear Algebra*, *70*(21), 6891-6907.

24. Rani, J., & Patra, A. (2025). $ q $-Numerical Range of Operators in Semi-Hilbertian space. *arXiv preprint arXiv:2502.19855*.

25. Sahoo, S., & Behera, N. (2025). Generalized numerical radius inequalities for certain operator matrices. *arXiv preprint arXiv:2501.06995*.

26. Sain, D., Bhunia, P., Bhanja, A., & Paul, K. (2021). On a new norm on B (H) and its applications to numerical radius inequalities. *Annals of Functional Analysis*, *12*(4), 51.

27. Taki, Z., & Kaadoud, M. C. (2023). Some new refinements of numerical radius inequalities for Hilbert and semi-Hilbert space operators. *Filomat*, *37*(20), 6925-6947.

28. Zamani, A., Moslehian, M. S., Xu, Q., & Fu, C. (2021). Numerical radius inequalities concerning with algebra norms. *Mediterranean Journal of Mathematics*, *18*, 1-13.

الفصل الثالث

مفاهيم الفيزياء الأساسية

Basic Physics Concepts

م.م. إسراء ابراهيم محمد
المديرية العامة لتربية بابل - العراق

الملخص

يقدم الفصل مدخلًا إلى مفاهيم الفيزياء الأساسية وموقعها في العلوم الطبيعية والتطبيقات التقنية. ويعرض الفيزياء بوصفها دراسة للمادة والطاقة والتفاعلات، مع تتبع تطورها من التفسيرات المبكرة للظواهر إلى بناء القوانين الكلاسيكية ثم الفيزياء الحديثة. وتوضح المعالجة دور الملاحظة والتجربة والرياضيات والاستدلال في الانتقال من وصف الحدث إلى تفسير العلاقات التي تحكمه.

ويستعرض الفصل الفروع الأساسية، ومنها الميكانيكا والكهرومغناطيسية والديناميكا الحرارية والفيزياء الكمية والفيزياء الفلكية، مميزًا بين مجالات الظواهر والمقاييس التي تعالجها. كما يناقش ارتباط الفيزياء بالكيمياء والأحياء والفلك والعلوم التطبيقية، مستخدمًا جداول وأمثلة لتوضيح انتقال المفاهيم بين التخصصات. ويبرز هذا العرض أن التكامل العلمي يحتاج إلى فهم طبيعة النموذج وحدود استعماله، لا إلى إلغاء الاختلاف بين مجالات البحث.

وينتقل الفصل إلى التطبيقات في الطاقة والاتصال والطب والنقل والتقنيات المستقبلية، موضحًا الصلة بين المفاهيم الفيزيائية والأجهزة والعمليات التي تقوم عليها. ويعرض توصيات تعليمية وبحثية تتعلق بتطوير التعلم التجريبي والتكامل بين التخصصات ونشر الثقافة العلمية ودعم البحث. وتخلص المناقشة إلى أن فهم الفيزياء يسهم في تنمية التفكير التحليلي وربط المعرفة النظرية بالتطبيق. وتتمثل مساهمة الفصل في تقديم عرض تعليمي وتاريخي منظم لأهمية الفيزياء وفروعها وعلاقاتها، وليس في إعلان تجربة جديدة أو قياس أداء تقنية محددة؛ وتبقى الأمثلة وسائل لتوضيح الفكرة العلمية ومجالات الإفادة منها.

الكلمات المفتاحية: مفاهيم الفيزياء؛ الفيزياء الكلاسيكية؛ الفيزياء الحديثة؛ التكامل العلمي؛ التطبيقات التقنية

Abstract

This chapter introduces fundamental physics and its place in the natural sciences and technological applications. Physics is presented as the study of matter, energy, and their interactions. Historical discussion follows movement from early explanations of phenomena to classical laws and modern physics. Observation, experiment, mathematics, and reasoning are considered as complementary means of moving from description toward explanation.

The chapter reviews major branches, including mechanics, electromagnetism, thermodynamics, quantum physics, and astrophysics, distinguishing the phenomena and scales addressed by each. Relationships with chemistry, biology, astronomy, and applied sciences are illustrated through tables and examples. This account presents scientific integration as requiring attention to the nature and limits of models rather than eliminating differences among research fields.

Applications in energy, communication, medicine, transport, and prospective technologies connect physical concepts with devices and processes. The chapter also presents educational and research recommendations concerning experimental learning, interdisciplinary education, scientific communication, and research support. Its concluding discussion emphasizes the contribution of physics to analytical thinking and to connecting theoretical knowledge with practical applications. The contribution is an organized historical and educational account of the importance, branches, and relationships of physics. It does not report a new experiment or measure the performance of a particular technology. Examples serve to clarify scientific ideas and their possible uses,

while the discussion maintains the relationship between conceptual understanding and informed practical interpretation.

Keywords: Physics concepts; Classical physics; Modern physics; Scientific integration; Technological applications

Introduction

The natural sciences describe humanity's historical reliance on the natural order of the physical universe and its interaction with the cosmos. Out of natural sciences, none are as important as the fundamental laws of physics, which describe the behavior of matter and energy and how they interact. These fundamental laws of physics describe the laws of nature and have defined the greatest discoveries and applications in civilization The importance of the topic and its reasons: The scope of this project is to redefine the place of physics within the modern technological revolution. Referring to physics, reading the world allows the researcher and the reader to understand the degree to which the theoretical and the practical are intertwined, from the division of the world of the atomic and subatomic, to the world of the movement of the galaxies. The objective of this report is to propose a simpler method without detracting from the academic dimension of the theme "Physics and Its Significance".

One of the key issues to consider is to reconcile the appreciation of theoretical physics and the understanding of the significance of its practical importance in contemporary science and technology. We will attempt to answer the following questions:

What is the terminological and historical definition of physics, and how has it evolved throughout history? How do basic physical concepts form the foundation upon which other natural sciences, such as chemistry, biology, and astronomy, are based?

What is the direct impact of physical applications in the fields of energy, communications, medicine, and transportation?

What role does physics play in formulating solutions to future challenges and advanced technological innovations?

Objectives

Academic and Practical Objectives

The objectives we are pursuing in the following:

To build the foundation for understanding the notion of physics, i.e., to define physics and its main branches, and to distinguish classical physics from modern physics.

Scientific Integration: To show how physics relates organically to other natural and applied sciences.

As an example of practical significance of this work: to reveal the application of physical laws in technology, medicine and industry.

Analytical Thinking: To demonstrate the importance of physics for developing one’s problem-solving and scientific interpretation skills.

Methods and Structure

This part of the paper will apply descriptive-analytical method to introduce the scientific material. It will analyze basic notions and show their applications, illustrating them with examples. This work

will be comprised of four main parts, after which a conclusion and list of references will follow.

Section I: Nature of Physics and Its History.

Section 2: Physics as a Cornerstone of the Natural Sciences.

Section 3: Practical Applications and Technological Importance of Physics.

Section 1: What is physics and where did it come from?

1. What is physics? Scope of physics. Physics is a word which is derived from the Greek (Physikos) meaning “natural” or “the study of nature”. Physics is the natural science which studies matter, energy, motion and behavior throughout space and time (Halliday et al., 2018; Serway & Jewett, 2019), and related entities such as force, mass, and charge (technically). (Halliday et al., 2018; Serway & Jewett, 2019), along with related entities such as force, mass, and charge. This science aims to satisfy human intellectual curiosity by explaining the fundamental principles that govern nature. The scope of physical research extends to include vastly different scales: the microscopic scale, which studies atoms, nuclei, and subatomic particles (such as quartz and leptons); the macroscopic scale, which studies the tangible objects around us, habitats, and mechanical interactions we observe daily; and the cosmological scale, which studies the movement of planets, galaxies, the observable universe, and theories related to the beginning and expansion of the universe.

Secondly, the historical development of physics: Physics has passed through three historical stages:

1.Ancient Physics (Natural Philosophy): The first attempts to explain natural phenomena began among the civilizations of Mesopotamia and ancient Egypt, and were later systematically developed by Greek philosophers like Aristotle, who relied on intellectual reflection and sound reasoning without following observation and systematic experimentation. Science made a qualitative leap with the introduction of an experimental method in the golden age of Islamic civilization. Ibn al-Haytham is considered a pioneer of optics (Ahmed, 2018; Al-Haithami, 2021) and the father of rigorous scientific experimentation. Al-Biruni and Ibn Sina were also pioneers for the mechanics of motion and gravity.

2. The Revolution of Classical Physics (17th to 19th Century): This period witnessed the birth of modern physics based on observation and mathematics:

Galileo Galilei: He introduced the modern scientific method and integrated mathematics with experimentation to study the motion of objects and their free fall.

Isaac Newton: In the celebrated book, Mathematical Principles of Natural Philosophy, he propounded the three laws of motion and the law of universal gravitation, by means of which humanity was enabled to predict the motion of terrestrial and celestial bodies with a high degree of accuracy. nics of motion and gravitation.

James Clerk Maxwell: In the 19th century, he formulated the equations of electromagnetism **(**Serway & Jewett, 2019)., delivering a decisive blow to the separate theories of electricity, magnetism, and light, and proving that light is simply an electromagnetic wave.

1- The birth of modern physics (Early 20th century): By the close of the 19th century, the academic world believed it had discovered all the laws of the universe. But some phenomena could not be explained by classical physics (like blackbody radiation and the photoelectric effect) . However, some phenomena could not be explained by classical physics (such as blackbody radiation and the photoelectric effect). This led to the emergence of two theories that changed human understanding of the universe: Relativity (Albert Einstein): He formulated special relativity (1905) and general relativity (1915) (Tipler & Llewellyn, 2012), explaining that spacetime is a continuous fabric, and that gravity is merely a curvature of this fabric caused by mass. He also developed the famous mass-energy equivalence equation ($E=mc^2$). Quantum Mechanics (Max Planck, Bohr, Heisenberg, Schrödinger): This explained how matter and energy behaved at subatomic and atomic scales, revealing that energy consists of indivisible packets (quanta) and that atoms have a dual nature (both wave and particle).

Third: Comparison between Classical and Modern Physics: To facilitate understanding the distinction between the two main branches, the following table outlines the most fundamental differences:

Table 1

shows a comparison between classical physics and physics.

Comparison Point	Classical Physics	Modern Physics
Scope of Application	Large-scale objects moving at speeds much slower than the speed of light.	Microscopic objects (atoms/subatomic particles) or objects moving at speeds close to the speed of light.
Core Theories	Newtonian Mechanics, Maxwell's Electromagnetism, Classical Thermodynamics.	Quantum Mechanics, Theory of Relativity (Special and General).
Determinism	Deterministic: absolute predictability of outcomes if initial conditions are known.	Probabilistic: relies on wave functions and Heisenberg's Uncertainty Principle.
Nature of Space and Time	Absolute and independent entities from the observer.	Relative entities integrated into a single spacetime continuum (Spacetime).

Fourth: The Philosophy of Science and the Construction of the Physical Methodology. Physics is not limited to collecting facts and numerical data, but rather relies on a sound scientific philosophy that seeks to explain physical reality through several basic pillars:

*Mathematical Modeling: Mathematics is considered the "language of physics"; Researchers translate natural phenomena into mathematical equations and formulas that enable them to predict outcomes before they occur (such as predicting planetary trajectories or the behavior of electromagnetic waves).

*The inductive and deductive methods: Induction: Starting with direct observation and experimentation to deduce general laws (as Galileo did in his free-fall experiments).

*Deduction: Starting from general hypotheses and theories and testing their results through laboratory experiments (as happened in proving the existence of gravitational waves a century after their prediction in general relativity).

The principle of falsifiability: According to modern philosophy of science (such as Karl Popper's thesis), a physical theory is scientific and correct only if it is testable and can be proven (Ahmed, 2018) wrong when new experimental data emerges that contradict it. Fifth: The main branches of physics. Physics branches into several specializations that ensure coverage of all cosmic phenomena:

Classical mechanics: Studies the motion of objects, the forces acting on them, and the laws of equilibrium and velocity.

Electromagnetism: Studies electric charges and fields. Magnetism and the interactions between them.

Thermodynamics: deals with heat, forms of energy, and the laws governing the transformation of energy from one form to another.

Quantum Physics: studies the behavior of subatomic particles and phenomena that do not occur in the macroscopic world.

Astrophysics and Cosmology: studies the motion of celestial bodies, the origin of the universe, and its evolution over time.

Section Two: Physics as the foundation of natural sciences. Physics is the intellectual and methodological foundation on which natural sciences rest; it is the source of fundamental principles and laws that explain the phenomena in chemistry, biology, geology, and astronomy.

First: The Integration of Physics and Chemistry (Physical Chemistry): Chemical reactions cannot be separated from their physical origins, as physical laws govern the behavior of atoms and molecules.

Atomic Structure and Chemical Bonding: Chemistry relies on quantum mechanics to explain how electrons are distributed in atomic energy levels and how valence, ionic, and metallic bonds are formed through the interaction between the electric fields of nuclei and electrons.

Chemical Thermodynamics: The laws of thermodynamics (such as the law of conservation of energy and the concept of entropy) determine the spontaneity of chemical reactions, the amount of heat absorbed or released, and chemical equilibrium (Young & Freedman, 2020).

Chemical Kinetics and Absorption Spectrum: The interaction between light and matter (the electromagnetic spectrum) explains the molecular structure of compounds and is the basis of modern chemical analysis instruments such as mass spectrometry and spectroscopy.

Second: Physics and Life Sciences (Biophysics): The life and medical sciences utilize physics. To explain the functional mechanisms within living organisms:

Biomechanics: Applying Newton's laws to calculate the forces acting on bones, joints, and muscles during movement, and understanding how the heart functions as a blood pump.

Fluid Dynamics and Pressure: The movement of blood in arteries and veins is governed by the laws of fluid dynamics and Bernoulli's principle, which helps in understanding blood pressure and vascular occlusion (Al-Zahar, 2020).

Bioelectricity: The transmission of nerve signals and the contraction of the heart muscle depend on the displacement of ions across the cell membrane, a direct application of electrical potential and electromagnetic fields (as in electrocardiograms, electroencephalograms, and electroencephalograms).

Third: Physics, Earth Sciences, and Astronomy (Geophysics and Astrophysics): Physics expands its scope to include the planet Earth and the entire universe: Geophysics: Using seismic waves to map the Earth's internal layers and locate earthquake epicenters. Studying the Earth's magnetic field and its role in protecting the atmosphere from winds. Solar physics. Astrophysics: Applying the laws of gravity, thermodynamics, and nuclear physics to explain the life cycle of stars, the formation of black holes, and the Big Bang. Using spectroscopy to determine the chemical composition and

temperatures of distant celestial objects (Halliday et al., 2018; Tipler & Llewellyn, 2012).

Table 2

illustrates the integration of physics with natural and applied sciences.

Scientific Field	Interdisciplinary Physics Branch	Practical Application / Phenomenon
Chemistry	Quantum Mechanics & Thermodynamics	Understanding chemical bonds and predicting reaction spontaneity
Biology & Medicine	Bioelectricity & Fluid Dynamics	Electrocardiogram (ECG) and analyzing blood flow dynamics in vessels
Earth Sciences	Wave Physics & Geophysics	Earthquake forecasting, oil exploration, and groundwater detection
Astronomy	Nuclear Physics & General Relativity	Explaining stellar nucleosynthesis and calculating gravitational light bending

Section Three: Practical applications and technological importance of physics. The importance of physics goes beyond theoretical boundaries to form the main engine for technological and industrial applications upon which contemporary civilization is based. The transformation of physical principles into practical technologies has contributed to raising the efficiency of multiple vital sectors.

First: Applications of physics in the energy and electricity sector. The infrastructure for generating and transmitting energy depends entirely on the laws of electromagnetism and thermodynamics:

Electromagnetic induction and electricity generation: Power plants (whether gas, water, or wind-powered) rely on Faraday's law of electromagnetic induction to convert the motion of turbines into electrical energy via generators. Renewable energies and photovoltaic physics: Solar cells (photovoltaic cells) rely on the photoelectric effect to harness the energy of photons and release electrons in semiconductor materials to generate electricity. Peaceful nuclear energy: Nuclear reactors utilize Einstein's equation of mass-energy equivalence $(E = mc^2)$ to generate enormous amounts of heat through controlled nuclear fission and produce electricity with low carbon emissions (Serway & Jewett, 2019).

Second: Physics in communications and computing technology. Physics represents the true foundation of the digital revolution and modern communications: Semiconductor physics Physics: Controlling the electronic properties of silicon and semiconductor materials led to the invention of the transistor and integrated circuits, the building blocks of processors in smartphones and computers.

Fiber optics and communications: Global internet networks rely on the phenomenon of total internal reflection of light within glass cables to transmit data at high speeds via fiber optics.

Electromagnetic waves and wireless communications: Radio and microwave waves, governed by Maxwell's equations, are used in wireless networks (Wi-Fi), satellite communications, and GPS (Serway & Jewett, 2019).

Third: Medical applications of Physics:

Physics has made immense contributions to the revolution of devices for diagnosis and non-invasive treatments:

X-ray and CT Scan: These make use of the ability of high-energy electromagnetic waves that can penetrate into living tissue and produce images of the bones and soft tissues.

Magnetic Resonance Imaging (MRI): This uses the principles of Quantum Physics, particularly spin. Due to exposure of the hydrogen nuclei in the body to powerful magnetic fields and radio waves, MRI gives detailed images of the soft tissues without any ionizing radiation. Lasers and surgical applications: Laser technologies (light amplification by stimulated emission of radiation) rely on the energy levels of the atom and are used in microsurgery of the eye, lithotripsy, and tumor removal (Al-Zahar, 2020).

Table 3

illustrates the technological applications of physics and its scientific relationships.

Key Technological Innovation	Core Physics Principle	Application Sector
Electric Generators & Solar Panels	Electromagnetic Induction & Photoelectric Effect	Energy & Power
Microprocessors & Fiber Optic Cables	Solid-State Physics & Total Internal Reflection	Electronics & IT
MRI Scanners & Medical Lasers	Nuclear Magnetic Resonance (NMR) & Wave Physics	Medicine & Healthcare
Jet Engines & High-Speed Bullet Trains	Aerodynamics & Newton's Third Law	Transportation

Section Four: Physics and the Challenges of the Future. Physics represents humanity's fundamental bet in confronting the major challenges of the 21st century, from the climate change crisis and energy depletion to expanding the horizons of high technology and developing computing tools.

First: Quantum Computing and the Data Processing Revolution (Quantum Computing). Traditional computers use the binary bit 0 or 1, while quantum computing uses quantum mechanics principles to radically change the efficiency of processing: The principle of superposition in quantum computers (Superposition): It allows a quantum bit (Qubit) to be in both states $|0\rangle$ and $|1\rangle$ at the same time, thus exponentially increasing computing power.

Quantum Entanglement: Allows the linking of the quantum states of separate particles, opening up possibilities for building ultra-secure, unhackable communication networks (Quantum Cryptography) (Tipler & Llewellyn, 2012).

Potential future applications: Quick solving of challenging problems within seconds for example in weather/climate prediction, modeling of molecules to help create new medicine, improving of global supply chain management. Point number two: Nuclear Fusion Sustainable Energy Solutions (Nuclear Fusion): With rising demand for global energy production and reduction in carbon emission, there is a trend towards physics simulation of reactions in star cores. Physical principle: fusion of light nuclei (for example Hydrogen isotope: deuterium and tritium) to form heavier nuclei (helium),

releasing enormous amounts of energy according to Einstein's equation ($E = mc^2$). Future advantages include providing a virtually inexhaustible and completely clean energy source without long-term nuclear waste or the risk of reactor explosions. Global projects include the International Thermonuclear Experimental Reactor (ITER) project, which aims to develop magnetoplasmic confinement technology (Tokamak) (Young & Freedman, 2020).

Third: Room Temperature Superconductors (Room Temperature Superconductors): Superconductors have an outstanding quality of carrying electricity without resistance and without losses in terms of energy dissipation in form of heat. Current problem: The majority of superconductors today are working at very low temperatures near absolute zero, with the use of costly liquid helium for cooling purposes. Future implications: The access to superconductors at room temperature and at atmospheric pressure will change everything: it will change the future of electricity distribution over world grid without energy losses; future of the maglev trains for reaching super speed cheaply; and future of MRI and quantum computing assemblies. (Tipler & Llewellyn, 2012).

Table 4

illustrates future physics technologies and their developmental impact.

Expected Global Impact	Underlying Physics Concept	Future Technology

Expected Global Impact	Underlying Physics Concept	Future Technology
Unprecedented processing power & secure quantum internet	Superposition & Entanglement	Quantum Computers
Abundant, carbon-free, and safe clean energy	Mass-Energy Equivalence $E = mc^2$	Nuclear Fusion
Zero-loss power grids & ultra-fast magnetic transit	Quantum Macroscopic Coherence	Room-Temp Superconductors
Advanced cancer targeting & invisibility/cloaking optics	Solid-State & Wave Optics Manipulation	Nanotechnology & Metamaterials

Conclusion and Recommendations

First: Conclusion

This academic study reveals the significance of physics as the basis of human knowledge, rather than an isolated theoretical science. From the historical and conceptual perspective, it is proven that physics has influenced the comprehension of the universe from the microcosm defined by quantum physics to the macrocosm determined by general relativity.

Moreover, the interrelation of physics with other branches of natural sciences including chemistry, biology, and earth sciences is revealed. The science of physics lays the basic laws on which these sciences are constructed. From a practical perspective, it is apparent that physical applications play the major role as the engine of the following industrial and technological revolutions, ranging from

energy production, communications, and electronics to medicine and its diagnostics and treatment techniques. Finally, physics remains the cornerstone of dealing with future problems such as quantum computing, nuclear fusion, and sustainable energy.

Second: Recommendations

According to the information and results analyzed in this work, the following recommendations are made:

Curricula improvement: Creating curricula for schools and universities that will be devoted to establishing links between theoretical knowledge and its practical application as well as implementation into modern technology.

Research and interdisciplinary approach: Encouraging research programs which will involve physics and other sciences (biophysics and medical physics), thus providing solutions to health and environment problems.

Development of future technologies: Improving financial and educational background of research on quantum computers, renewable energy sources and superconductors.

Popularizing science: Creating scientific content that will make it easier for non-experts to understand the basics of physics.

Recommendations for Educational and Academic Institutions

1-Curriculum Modernization: Modernize physics curriculum for university as well as pre-university students in a way that allows

theory to be applied to reality. In other words, move away from teaching theory alone.

2-Interdisciplinary Education: Develop academic programs in which physics is integrated with other fields of science, such as biophysics or medical physics.

Recommendations for Research and Development (R&D) Centers

1-Funding Forward-Looking Research: Allocate money and resources towards conducting research on emerging technologies such as quantum computers, nuclear fusion, and room-temperature superconductors.

2-Multidisciplinary Collaborative Research: Create research teams that include physicists, engineers, and medical doctors in order to find creative solutions to healthcare and environmental problems.

Recommendations for Decision-Makers and Policy Executives

1-Encouraging Sustainable Energy Technologies Investments: Create strategies that encourage the use of physics in sustainable energy and nanotechnology for tackling the issues of climate change and energy crisis.

2-Popularizing Science and Promoting Scientific Awareness: Encourage national programs and media channels that explain physics in simple language for everyone to understand.

References

(English References)

1. Halliday, D., Resnick, R., & Walker, J. (2018). *Fundamentals of physics* (11th ed.). Wiley.

2. Serway, R. A., & Jewett, J. W. (2019). *Physics for scientists and engineers with modern physics* (10th ed.). Cengage Learning.

3. Tipler, P. A., & Llewellyn, R. A. (2012). *Modern physics* (6th ed.). W. H. Freeman.

4. Young, H. D., & Freedman, R. A. (2020). *Sears and Zemansky's university physics with modern physics* (15th ed.). Pearson.

)Arabic references):

5. Ahmed, A. N. (2018). Introduction to the History and Philosophy of Natural Sciences. Arab Thought House.

6. Al-Zahar, M. A. (2020). Fundamentals of General and Applied Physics. Al-Obaikan Library.

7. Al-Haithami, K. I. (2021). History of Physics: From Classical Mechanics to Quantum Mechanics. Dar Al-Maaref.

الفصل الرابع

عمليات تفاعل الفوتون مع الذرة

Photon–Atom Interaction Processes

أ.م. مهند حاتم هاشم الركابي
الجامعة المستنصرية - كلية العلوم - قسم الفيزياء - العراق
muhanad_alrakabi@uomustansiriyah.edu.iq

الملخص

يتناول الفصل عمليات تفاعل الفوتون مع الذرة، مع التركيز على الامتصاص الكهروضوئي والتشتت المرن وغير المرن والعمليات المرتبطة بفجوات الأغلفة الإلكترونية الداخلية. ويبدأ بوصف انتقال الطاقة والزخم بين الفوتون والإلكترونات والنواة، ثم يميز بين الآليات الرئيسة التي تحدد سلوك الإشعاع عند تفاعله مع المادة. وتُستخدم الرسوم والمعادلات لربط الوصف الفيزيائي بالمعلمات التي تدخل في الحساب.

ويعرض الفصل تكوّن الفجوات في الأغلفة الداخلية وطرق اضمحلالها، بما فيها الانتقالات الإشعاعية وانتقالات أوجيه وكوستر–كرونيغ. كما يناقش مردود الفلورة واحتمالات الانتقال ومعدلات الانبعاث الجزئية ومقاطع التأين الضوئي وإنتاج الأشعة السينية. وتوضح العلاقات الرياضية كيف ترتبط هذه المعلمات بحساب المخرجات الإشعاعية من الأغلفة والأغلفة الفرعية، مع بيان الفروق بين عمليات الامتصاص والتشتت.

ويمتد العرض إلى تشتت رامان الرنيني ومحاذاة فجوات الأغلفة الداخلية، ثم الصياغة النظرية لمعامل عدم التناظر باستخدام مصفوفة الكثافة والموترات الإحصائية. ويختتم بمناقشة التوزيع الزاوي واستقطاب الأشعة السينية المميزة وعلاقتهما باحتمالات الانتقال وشروط المعالجة. وتتمثل مساهمة الفصل في تنظيم الأسس الفيزيائية والعلاقات الكمية اللازمة لفهم تفاعلات الفوتون–الذرة، ولا سيما عمليات الأشعة السينية وانتقالات الأغلفة الداخلية. وتبقى الفرضيات والتقريبات ملازمة للمعادلات التي تعرضها الدراسة، فلا تُقرأ العلاقات بوصفها وصفًا موحدًا لجميع الطاقات والأنظمة دون مراعاة مجالها وشروط تطبيقها.

الكلمات المفتاحية: تفاعل الفوتون–الذرة؛ التأين الضوئي؛ الأشعة السينية؛ فجوات الأغلفة الداخلية؛ التوزيع الزاوي

Abstract

This chapter examines photon–atom interaction processes, emphasizing photoelectric absorption, elastic and inelastic scattering, and processes associated with inner-shell vacancies. It begins with energy and momentum transfer among photons, atomic electrons, and nuclei, distinguishing the principal mechanisms governing the interaction of radiation with matter. Diagrams and equations connect the physical description with parameters used in quantitative treatment.

The chapter discusses creation and decay of inner-shell vacancies through radiative, Auger, and Coster–Kronig transitions. Fluorescence yields, transition probabilities, fractional emission rates, photoionization cross-sections, and X-ray production cross-sections are considered. Mathematical relationships show how these quantities enter calculations of radiation from shells and subshells while clarifying differences among absorption and scattering processes.

Further sections address resonant Raman scattering and alignment of inner-shell vacancies. Theoretical treatment of anisotropy uses density matrices and statistical tensors, followed by discussion of angular distributions and polarization of characteristic X-rays. These properties are related to transition probabilities and the assumptions of the treatment. The contribution is a structured presentation of physical foundations and quantitative relationships needed to understand photon–atom interactions, particularly X-ray processes and inner-shell transitions. The chapter preserves the connection between equations and their stated assumptions and approximations. The relationships are therefore not presented as a single unrestricted description of all energies and atomic systems,

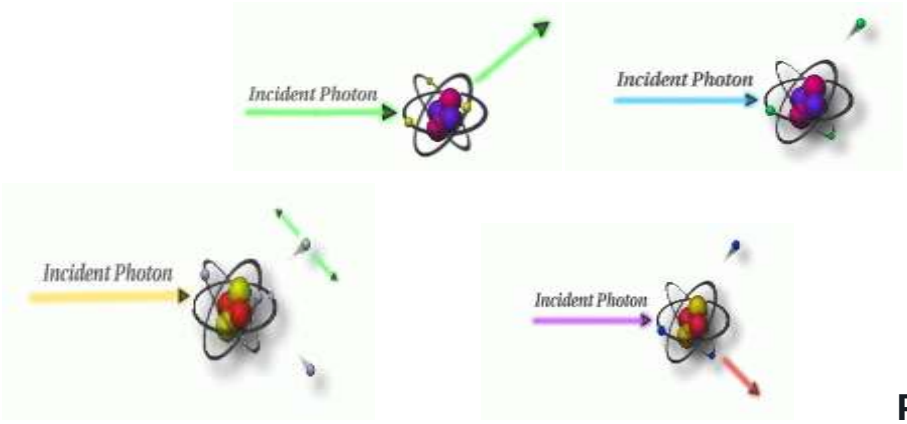
but as tools whose interpretation depends on their domain and conditions of application.

Keywords: Photon–atom interaction; Photoionization; X-rays; Inner-shell vacancies; Angular distribution

1.1 Introduction

A photon characterized by energy E (= $h\ v = hc/\lambda$ where h is Planck's constant and c is the speed of light in vacuum) can interact with matter through different processes involving its interaction with the atomic electrons and nucleus. The major processes of interaction of photons with matter are the photoelectric effect, the elastic and inelastic scattering and the pair production. These basic photon-atom interaction processes are depicted in Fig. 1.1. When a photon strikes a bound electron with energy greater than the binding energy of the electron in its shell, whole of the photon energy is transferred to the electron. The electron is ejected from the atom with energy of the interacting photon minus the binding energy of the electron. The interaction is known as photoelectric process. The incident photon gets scattered from the interacting atom with or without losing energy. The process in which energy of the scattered photon remains the same as that of the incident photon, only the momentum is transferred, *i.e.,* direction of the scattered photon changes, is called elastic scattering. The elastic scattering of photons by an atom is considered as a coherent sum of contributions from bound electrons (Rayleigh scattering), nucleus (nuclear Thomson and nuclear resonance scattering) and from the vacuum fluctuations (Delbrück scattering). At lower photon energies,

the elastic scattering from the bound electron gives the dominant contribution to the photon-atom scattering amplitude known as Rayleigh scattering. The scattering of the incident photons by the nucleus considered as a point charge is known as nuclear Thomson scattering. The scattering of photons from a virtual electron-positron pair created in the field of nucleus is called Delbrück scattering.



Photoelectric Absorption **Rayleigh scattering**

Compton Scattering
Pair Production

Fig. 1.1: Basic photon-atom interaction processes in the X-ray energy region.

Another process of elastic scattering from the nucleus is nuclear resonance scattering in which an incident photon excites the nuclear energy levels (lying not more than a few keV above the ground state) and subsequently the excited energy is re-emitted. This, however, requires the establishment of a resonant condition between the absorbing nuclei and incident photons. Nuclear

Thomson scattering becomes important with increasing atomic number (*Z*) and becomes relatively important compared to the Rayleigh scattering at large scattering angles and high photon energies. The process in which energy as well as momentum of the scattered photon changes is called inelastic scattering. In this process, the interacting electron gets excited or ionized by gaining a part of energy of the incident photon. Inelastic process resulting in ionization of the atom is called Compton scattering and that resulting in excitation of the atom is called Raman scattering. Another feature of the inelastic-scatter photon spectrum is infrared divergence (IRD) [1, 2], which has been interpreted as an intra-atomic bremsstrahlung resulting from acceleration of the photoelectrons inside the atomic field. The other process of interaction of photon with matter is the pair production. It can occur when the energy of incident photon exceeds $2m_oc^2$ (> 1.02 MeV), it interacts with atom near the Coulomb field of a nucleus and the incident photon disappears with the creation of an electron-hole pair. The basics of photon-atom interaction in the X-ray energy region and the subsequent processes are discussed below.

1.2 Photoelectric effect

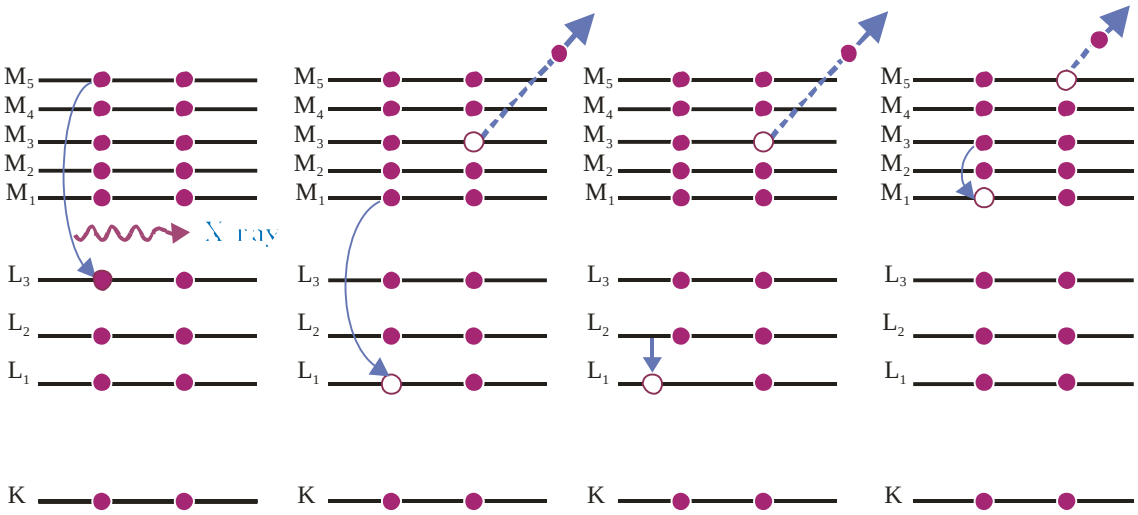
The photoelectric effect is a photon absorption interaction and is one of the predominant interactions in the energy range of 1-200 keV. In this process, the incident photon interacts with an orbital electron in such a way that it loses all of its energy and the photon annihilates. Some of the photon energy is used to overcome the electron binding

energy while the remainder is imparted to the electron as kinetic energy. This process can occur only when the energy of the incident photon is greater than the binding energy of the electron to be removed. Photoelectric effect occurs with the bound electrons, the *K*-shell electrons, being the most tightly bound, make the greatest contribution to the photoelectric absorption, followed by the *L, M, N* shells *etc.,* in decreasing order of importance. The probability of photoelectric absorption depends on the photon energy and the atomic number (*Z*) of the atom. The probability for vacancy production is greatest when the incident photon energy is just above the critical energy, *i.e.*, the binding energy of the element. The probability then decreases as inverse cube of the incident photon energy (*E*). The probability for the photoelectric absorption increases with decreasing the photon energy until absorption edge is reached. In passing the absorption edge, lesser number of electrons are available for absorption and the probability of the process decreases sharply.

1.3 Inner-shell vacancy creation and subsequent transitions

The atomic inner shell/sub-shell vacancies can be created by the nuclear decay processes as internal conversion or orbital electron capture, or from the interaction of the atomic electrons with photons and charged particles. The inner shell/subshell vacancy created in the photoionization process is rapidly filled by an electron from the higher shell, thereby shifting the inner-shell vacancy to the higher-

shell and the energy difference in the initial and final state binding energy decays either through the radiative (X-ray emission) or the non-radiative [Auger or Coster-Kronig (CK)] transitions. The radiative and non-radiative transitions following shell/sub-shell vacancy decay are shown in Fig. 1.2.



Radiative transition	Auger transition	CK transition	Super CK transition
$L\alpha_1$ (L_3-M_5) X-ray	$L_1 M_1M_3$	$L_1 L_2M_3$	$M_1 M_3M_5$
(a)	(b)	(c)	(d)

Fig.1.2. Schematic diagram for (a) Radiative, (b) Auger, (c) CK and (d) Super CK transitions.

Investigations following the photoionization provide a direct method for an accurate determination of the vacancy decay parameters. In the radiative transitions, an electron from an intermediate or outer-shell fills the inner-shell vacancy thereby shifting the inner-shell vacancy to a higher-shell. The energy difference between the initial and the final state is carried away by a photon resulting in the emission of the characteristic X-ray provided the selection rules are

satisfied. The most intense X-rays create the electric dipole radiation and the corresponding transitions are governed by the selection rules, $\Delta n \geq 1$, $\Delta l = \pm 1$ and $\Delta j = 0, \pm 1$ are satisfied; where Δn, Δl, and Δj are the changes in the principle quantum number (n), orbital angular number (l) and total angular momentum quantum number ($j = l \pm s$), respectively, of the electron undergoing transition for de-excitation of the state. The transitions with j varying as 0→0 are forbidden, The transitions which are forbidden as electric dipole radiation may appear as multipole radiation, e.g., electric quadrupole transitions ($\Delta n \geq 1$, $\Delta l = 0$ or ± 2, $\Delta j = 0, \pm 1$ or ± 2) provided the transitions with j varying as 0→0 are forbidden). The allowed transitions involved in some of the typical *K, L,* and *M* X-ray groups are shown in Fig. 1.3. The nomenclature of the allowed transitions involved in some of the typical *K, L* and *M* X-ray groups are also given in Table 1.1.

In the non-radiative transitions, an electron from the outer-shell fills the initial vacancy and the available energy is used to eject another electron from the outer-shell. The Auger transitions are denoted by the shells and subshells involved in the process, *e.g.*, the L_1-subshell vacancy is filled by an electron from the M_1-subshell of the *M*-shell followed by the emission of another electron from the M_3-subshell of the same shell, and it is denoted by $L_1M_1M_3$ Auger transition. Auger process is used to describe those transitions in which an atomic shell /subshell leads to two vacancies in one or two different principal shells. The transitions where one of the two

vacancies produced in radiationless decay is in a different subshell of the same principal shell that contained the initial vacancy are called the Coster-Kronig (CK) transitions. The transitions where initial vacancy decay results in two vacancies in the subshells of the same principal shell that contained the initial vacancy, are called Super Coster-Kronig (SCK) transitions (Fig. 1.2). For the theoretical explanation of the radiationless transitions, the production and the de-excitation of inner-shell vacancies is assumed as a two step process, *i.e.*, the decay is separated from the excitation. This assumption is valid only when the incident photon energy is well above the ionization threshold.

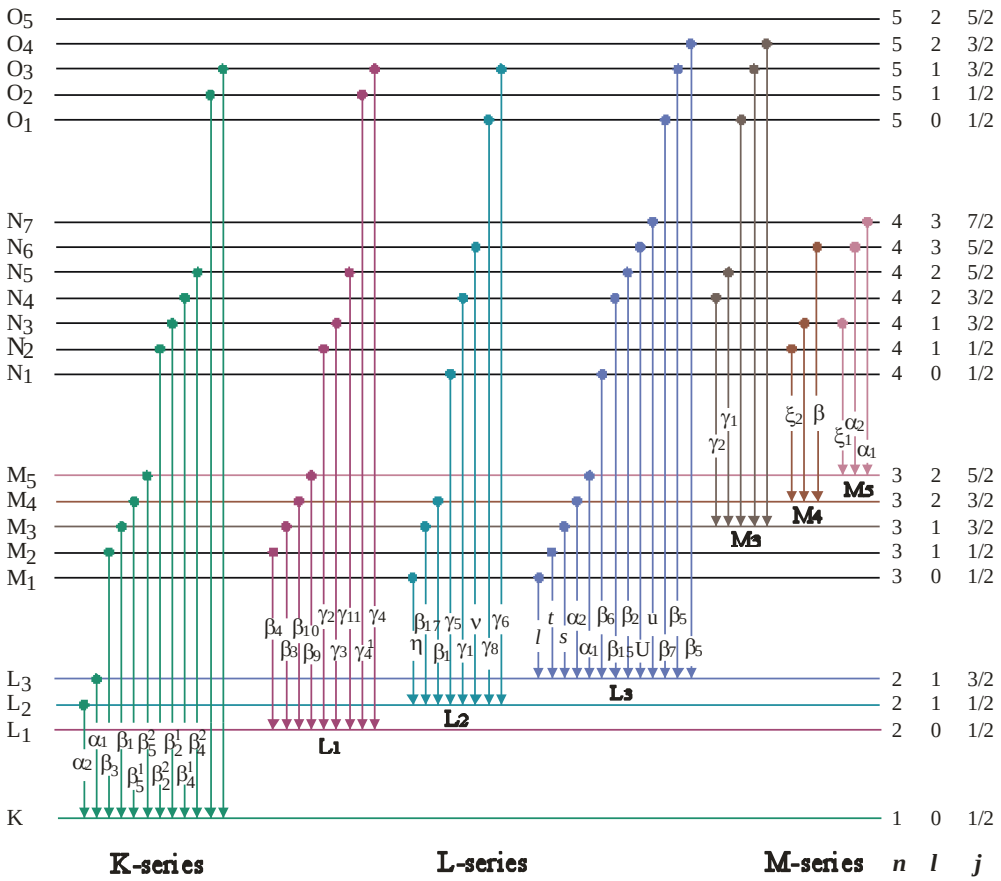


Fig. 1.3 Energy level diagram showing some possible *K*, *L* and *M* shell X-ray transitions.

1.4 Physical parameters for inner-shell vacancy decay processes

An atom with a vacancy in its shell/subshell is in an excited state. The life time (τ) of this state is related to the total width Γ_T of the level involved by the Heisenberg uncertainty principle: $\Gamma_T = \hbar/\tau$. The decay probability $1/\tau = \Gamma_T/\hbar$ of an atomic hole state is commonly given in unites of electron volts over Plank's constant. Assuming that the different modes of the decay are independent of each other, the total width Γ_T can be expressed as the sum of the partial widths of all the processes by which the level can decay. Therefore the total width for the atomic excited state is given by

$$\Gamma_T = \Gamma_R + \Gamma_A + \Gamma_{CK} \qquad (1.1)$$

where the subscripts R, A and CK denote the radiative, Auger and Coster-Kronig transitions, respectively.

Table 1.1: Nomenclature of X-rays for selected electron transitions.

Subshell with final vacancy	Sub-shell with initial vacancy								
	K	L_1	L_2	L_3	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5
L_I ($2s_{1/2}$)	$K\alpha_2$								
L_{II} ($2p_{1/2}$)	$K\alpha_1$								
L_{III} ($2p_{3/2}$)									
M_I ($3s_{1/2}$)			L_η	L_ℓ					
M_{II} ($3p_{1/2}$)	$K_{\beta3}$	$L_{\beta4}$		L_t					
M_{III} ($3p_{3/2}$)	$K_{\beta1}$	$L_{\beta3}$	$L_{\beta17/1}$	L_{S1}					
M_{IV}($3d_{3/2}$)	$K_{\beta5/1}$	$L_{\beta10}$	$L_{\beta1}$	$L\alpha_2$					
M_V ($3d_{5/2}$)	$K_{\beta5/2}$	$L_{\beta9}$		$L\alpha_1$					

N_{I} ($4s_{1/2}$)			$L_{\gamma 5}$	$L_{\beta 6}$					
N_{II} ($4p_{1/2}$)	$K_{\beta 2/1}$	$L_{\gamma 2}$			M_m				
N_{III} ($4p_{3/2}$)	$K_{\beta 2/2}$	$L_{\gamma 3}$							
N_{IV} ($4d_{3/2}$)	$K_{\beta 4}$		$L_{\gamma 1}$	$L_{\beta 15}$		M_m	$M_{\gamma 2}$	$M_{\zeta 1}$	$M_{\zeta 2}$
N_{V} ($4d_{5/2}$)	$K_{\beta 4}$			$L_{\beta 2}$			$M_{\gamma 1}$	$M_{\zeta 1}$	$M_{\zeta 2}$
N_{VI} ($4f_{5/2}$)			$L_{\nu 1}$					M_{β}	$M_{\alpha 2}$
N_{VII} ($4f_{7/2}$)									$M_{\alpha 1}$
O_{I} ($5s_{1/2}$)		$L_{\gamma 4/1}$	$L_{\gamma 8}$	$L_{\gamma 7}$	M_m				
O_{II} ($5p_{1/2}$)	$K_{\beta 2/3}$	$L_{\gamma 4/2}$							
O_{III} ($5p_{3/2}$)	$K_{\beta 2/4}$								
O_{IV} ($5d_{3/2}$)			$L_{\gamma 6}$	$L_{\beta 5}$	M_m				
O_{V} ($5d_{5/2}$)				$L_{\beta 6}$	M_m				

1.4.1 Fluorescence yields, Auger and CK transition probabilities

The fluorescence yield (ω_i) or the photon emission yield may be defined as the probability that a vacancy in a shell/subshell is filled through a radiative transition. In terms of radiative partial width (Γ_R) and total width (Γ_T), the fluorescence yield is defined as

$$\omega_i = \frac{\Gamma_R}{\Gamma_T} \qquad (1.2)$$

Thus the fluorescence yield of a shell is equal to the number of photons emitted when vacancies in the shell are filled, divided by the total number of primary vacancies in the shell. The *L*-shell consists of three subshells and each subshell is accompanied with fluorescence yield. The fluorescence yields for the three subshells

L_1, L_2 and L_3 of the L-shell are denoted as ω_1, ω_2, and ω_3, respectively. Tables of fluorescence yields can be found in the review by Bambynek *et al.* [3], the compilations of Krause [4] and Hubbell *et al.* [5]. The competing process by which the vacancy in a shell/subshell is filled through the jump of a higher shell/subshell electron and the available energy of the transition is directly transferred to an electron of higher shell thereby causing its ejection. The probability of occurrence of this process is called the Auger yield (a_i) and is defined as

$$a_i = \frac{\Gamma_A}{\Gamma_T} \qquad (1.3)$$

The three subshells of the L-shell are accompanied with the Auger yield a_1, a_2, and a_3, respectively. For the low atomic number (Z) elements, the Auger process is more probable and for the higher atomic number elements, the characteristic X-ray emission becomes more probable.

The probability that a vacancy created in one subshell is filled by another electron transition from the higher subshell of the same shell that had the initial vacancy is called the Coster-Kronig yield and is defined as

$$f_{ij} = \frac{\Gamma_{CK}}{\Gamma_T} \qquad (1.4)$$

The three subshells of L-shell are accompanied with the fluorescence yield f_{12}, f_{23}, and f_{13}, where f_{12} is the probability of

shifting the vacancy in L_1-subshell to L_2-subshell; all f's are similarly defined.

The sum of the fluorescence yield (ω_i), Auger yield (a_i), and Coster-Kronig yield (f_{ij}) is unity:

$$\omega_i + a_i + f_{ij} = 1 \qquad (1.5)$$

For the three subshells L_1, L_2 and L_3 of the L-shell, the sum of these yields is defined as

$$\omega_1 + a_1 + f_{12} + f_{13} = 1 \qquad (1.6)$$

$$\omega_2 + a_2 + f_{23} = 1 \qquad (1.7)$$

$$\omega_3 + a_3 = 1 \qquad (1.8)$$

McGuire has published the theoretical L- and M-shell radiative, Auger and CK transition rates and fluorescence yield calculations for the elements with Z = 20-90 [6,7]. These calculations are based on the non-relativistic approximate Herman-Skillman (AHS) central potential. Scofield has calculated the total K- and L-shell radiative decay rates and the emission rates of the individual X-ray lines based on the relativistic Hartree-Slater model [8,9] and Dirac-Fock model (DF) [10,11] for all the elements with $5 \leq Z \leq 104$. Chen *et al.* [12, 13] have calculated the L-shell fluorescence, Auger and CK yields for the 25 elements with $18 \leq Z \leq 96$. These calculations are based on the relativistic Dirac-Hartree-Slater (RDHS) model. Krause [4] has compiled the semi-empirically fitted values of the L_i-subshell fluorescence, CK and Auger yields for the elements with $12 \leq Z \leq 110$, based on the experimental data available till 1979. Puri *et al.* [14] have reported the L_i-subshell fluorescence and CK yields for the

elements with 25 ≤ Z ≤ 96, calculated using the radiative transition rates [9] and the non-radiative transition rates [12] by considering the cut-offs and onsets of CK transitions [3]. Chen *et al.* [15] have thoroughly summarized the theoretical calculations and the experimental techniques for determining radiative and non-radiative yields. Rao [3,16] and Jitschin [17] have described various techniques for the measurement of the fluorescence yields, Auger and CK transition probabilities. Recently, Campbell [18] has compiled the ω_i and f_{ij} values for the elements with 25 ≤ Z ≤ 96 and provide a set of recommended values.

1.4.2 Fractional X-ray emission rate

Transitions from the higher energy state give rise to emission of more than one X-rays. The fractional emission rate F_{ij} is defined as the ratio of radiative rate S_{ij} for the ijth X-ray to the total radiative rate S_{iR} for a vacancy in the ith subshell and is given by:

$$F_{ij} = \frac{S_{ij}}{S_{iR}} \qquad (1.\ 9)$$

Two sets of values for the L_i subshell fractional emission rates are available in the literature. First set is based on the Dirac-Hartree-Slater (DHS) model [9] and the second set is based on the Dirac-Fock [11]. In the DHS model calculations, the potential was assumed to be equal for the initial and final states of the atom undergoing the transition, whereas in DF model calculations, the potential was assumed to be different in the initial and the final states and hence the exchange and overlap effects were included in

these calculations. Campbell and Wang [19] reported a complete set of interpolated values based on the DF model [11] for all the elements with $18 \leq Z \leq 94$.

1.4.3 Photoionization cross-sections

In the photoionization process, an electron is emitted from an atom as a result of the absorption of a photon provided the energy of the incident photon is greater than the binding energy of the emitted electron. The probability of ejection of photoelectron from any shell /sub shell measured in terms of the photoionization cross-sections of the shell/subshell. The most comprehensive and widely used theoretical calculations on the photoionization cross-sections, available in the literature, are those based on the Relativistic Dirac-Hartree-Slater (RDHS) model [20]. In these calculations the electrons are treated relativistically and are assumed to be moving in the same Hartree Slater central potential both before and after the absorption of the photon. The *K, L* and *M* shell, L_i (i = 1, 2, 3) and M_i (i = 1, 2, 3, 4, 5) subshell and the total atom photoionization cross-section in the energy range 1-1500 keV for elements with Z = 1-101 were included in this tabulation. Werner and Jitschin [21] have measured photoionization cross-sections of the individual L_i subshell. They observed characteristic dispersion like deviations from the theoretical predicted and identified these deviations as an electron-correlation effect, which is neglected in the RDHS calculations. A few attempts [22,23] have been made to fit the theoretical and experimental photoionization cross-sections data in

order to obtain simple analytical functions which can be easily used in various computer codes. In general, an agreement is observed between measured and theoretically calculated values within experimental uncertainties.

1.4.4 X-ray production cross-sections

If σ_i is the photoionization cross section of the *i*th subshell, the probability of emission of *ij*th X-ray line of a given element at an excitation energy (*E*), is termed as X-ray production cross-section(σ_{ij}) and is given by

$$\sigma_{ij} = \sigma_i^P \, \omega_i \, F_{ij} \, f_{ij} \quad (1.10)$$

Where σ_i^P denotes the *i*th shell/subshell photoionization cross-section, ω_i is the corresponding fluorescence yield, σF_{ij} is the fractional emission rate, f_{ij} is the factor pertaining to the hole transfer from *i* to *j* subshell of the same principle shell, if energetically allowed. The probability of production of fluorescent X-rays is measured in the form of X-ray production (XRP) cross-sections. Measurements of the X-ray production (or fluorescence) cross-sections are made by measuring the intensity of the emitted inner-shell fluorescent X-rays (total shell, subshell, individual line or group of lines depending upon different measurements) when a target is bombarded with known flux of photons.

The value of the *K* XRP cross-sections can be calculated as

$$\sigma_K = \sigma_K^p \omega_K F_K \quad (1.11)$$

where σ_K is the *K*- shell XRP cross-section, σ_K^p is *K* shell photoionization cross-section, ω_K is the *K* shell fluorescence yield and F_K is *K* shell fractional emission rates.

Theoretically the *L* XRP cross-sections for the L_p X-rays originating from the decay of L_i subshell vacancies can be expressed by the equations

$$\sigma_{Lp} = \sigma_{L_1}^p \omega_1 F_{1p}, \quad p = \beta_{3,4,9,10}, \gamma_{2,3,4} \qquad (1.12)$$

$$\sigma_{Lp} = \left(\sigma_{L_2}^p + \sigma_{L_1}^p f_{12}\right) \omega_2 F_{2p}, \quad p = \eta, \beta_1, \gamma_{1,5,6} \qquad (1.13)$$

$$\sigma_{Lp} = \left(\sigma_{L_1}^p f_{13} + \sigma_{L_1}^p f_{12} f_{23} + \sigma_{L_2}^p f_{23} + \sigma_{L_3}^p\right)\sigma_{L_3}^p \omega_3 F_{2p}, \quad p = l, \alpha, \beta_{2,5,6,7,15} \qquad (1.14)$$

where σ_L^p is the photoionization cross-sections [24] for the L_p X-rays. Puri *et al.* [25] have calculated the *K* and *L* shell XRP cross-sections for elements in the atomic range 35 ≤ Z ≤ 92 for incident photon energy range 1-200 keV. These calculations are based on the most reliable parameters, namely, partial photoionization cross-sections and emission rates of Scofield [24, 10], *K* and L_i shell fluorescence yields [5], CK transition probabilities based on DHS model [14].

Similarly, the theoretical M_i subshell photoionization cross sections, σ_{M_i} (*i* = 1-5), are converted into the *M* X-ray fluorescence cross sections using the equations

$$\sigma_{M1}^x = \sigma_{M1}\omega_1 \qquad (1.15)$$

$$\sigma_{M2}^x = \left[\sigma_{M1} f_{12} + \sigma_{M2}\right]\omega_2 \qquad (1.16)$$

$$\sigma_{M3}^x = \left[\sigma_{M1}(f_{13} + f_{12} f_{23}) + \sigma_{M2} f_{23} + \sigma_{M3}\right]\omega_3 \qquad (1.17)$$

$$\sigma_{M4}^x = \left[\sigma_{M1}(f_{14} + f_{12} f_{24} + f_{13} f_{34} + f_{12} f_{23} f_{34}) + \sigma_{M2}(f_{24} + f_{23} f_{34}) + \sigma_{M3} f_{34} + \sigma_{M4}\right]\omega_4 \qquad (1.18)$$

$$\sigma_{M5}^{x} = [\sigma_{M1}(f_{15} + f_{12}f_{25} + f_{13}f_{35} + f_{14}f_{45} + f_{12}f_{23}f_{35} + f_{12}f_{24}f_{45} + f_{13}f_{34}f_{45} + f_{12}f_{23}f_{34}f_{45}) + \sigma_{M2}(f_{25} + f_{24}f_{45} + f_{23}f_{35} + f_{23}f_{34}f_{45}) + \sigma_{M3}(f_{35} + f_{34}f_{45}) + \sigma_{M4}f_{45} + \sigma_{M5}]\omega_5 \quad (1.19)$$

The M_i subshell fluorescence yields (ω_{Mi}) and the CK transitions probabilities (f_{Mji}) evaluated using the non-radiative transition rates based on the relativistic Dirac-Hartree- Slater (DHS) wave functions [26] along with the radiative transition rates based on the Hartree-Fock-Slater (HFS) [27] and the Dirac-Fock (DF) model [28], were used to calculate *M* X-ray cross-sections, σ_{Mi}^{x} (HFS)and σ_{Mi}^{x} (DF), respectively. The SCK transitions are forbidden [26] for the elements under investigation, therefore the values available for the singly-ionized atoms can be used in Eqns. (1.15) - (1.19).

1.5 Photon- atom elastic scattering processes

The elastic scattering of photon from atom involves no energy transfer between incident photon and interacting atom but the momentum is transferred, *i.e.*, direction of the scattered photon changes. The elastic scattering of photons by an atom can be considered as a coherent sum of contributions from the nucleus, the bound electrons and contributions from quantum electrodynamic (QED) effects. The scattering of the incident electromagnetic radiation by the nucleus considered as a point charge is called nuclear Thomson scattering. Another process of elastic scattering from the nucleus is nuclear resonant scattering in which an incident photon excites the nuclear energy levels (not more than a few hundred keV above the ground state) and subsequently the excited energy is re-emitted. This, however, requires the establishment of a

resonant condition between the absorbing nuclei and the incident photons. The scattering of photons from a virtual electron-positron pair created in the field of nucleus is called Delbruck scattering. At low photon energies, elastic scattering (scattering off bound electrons) is predominant. Nuclear Thomson scattering is important with increasing Z of the target and is relatively important compared to Rayleigh scattering at large angle of scattering and photon energy. The QED effects become important at higher photon energies. Rayleigh scattering amplitude predominates the total-atom scattering amplitudes at all scattering angles.QED Delbruck scattering effects arise due to the elastic scattering of the photons by Coulomb potential resulting in the creation and subsequent annihilation of the virtual e^--e^+ pairs. These effects become important at higher photon energies. In principle, this process can occur for γ -ray energies below $2m_oc^2$ because the pair can be virtual, *i.e.*, can have negative energy and need not be observable. Except for heavy elements and the photon energies above about 1 MeV, the Delbruck and nuclear resonance scattering are not expected to contribute significantly to the total elastic scattering.

In a commonly used approximation, the total scattering amplitude is given by

$$A = A^R + A^{NT} + A^D + A^{NR} \qquad (1.20)$$

where A^R is the Rayleigh scattering amplitude, A^{NT} is the nuclear Thomson scattering amplitude, A^D is the Delbruck scattering amplitude and A^{NR} is the nuclear resonance scattering amplitude.

The total atom scattering cross-section is proportional to $|A|^2$. Independent particle approximation (*IPA*) method is used for theoretical calculations for the Rayleigh scattering cross-section. This method is based on the assumption that all the electrons move independently in a central potential due to the nucleus and average effect of the other electrons. This method is inadequate at low photon energies and for the low-*Z* elements where the electron correlations are important.

In case of Rayleigh scattering, the scattering contribution from the bound electrons in a given atom has definite phase relationship to each other. Therefore Rayleigh scattering is also known as coherent scattering. The internal state of the atom is the same after the scattering process as before, only some momentum has to be disposed of during the scattering process.

1.6 Photon- atom inelastic scattering processes

Inelastic scattering is a process in which the energy as well as direction of the scattered changes from that of the incident photon. In this process, the interacting electron gets excited or ionized by gaining a part of energy of the incident photon. Inelastic process resulting in ionization of the atom is called Compton scattering and that resulting in excitation of the atom is called Raman scattering. Compton scattering involves the creation of a photon of lower energy and a recoil electron, whereas Raman scattering involves the excitation of struck electron to a higher energy unoccupied bound state. If the excited electron is in a bound state, the process results

in a sharp and symmetric peak and is called resonant Raman scattering (RRS). If the electron is in the continuum state, the process results in a broad and asymmetric peak and is called Raman Compton scattering (RRC). A general theoretical prediction that the inelastic scattering cross-section should increase with decreasing energy of the scattered photons in the low energy limit is called infra-red divergence (IRD) [1, 2].

1.6.1 Resonant Raman Scattering

When energy of the incoming photons (E_{in}) approaches the ionization threshold of the atom from below, the photon inelastic scattering exhibits a resonant behaviour known as resonant Raman scattering (RRS), which further evolves gradually into fluorescence till ionization threshold is surpassed and the fluorescence line is fully developed. Resonant Raman scattering is an inelastic scattering process and is special contribution to the Compton scattering by bound electrons. In the X-ray energy region, the resonant Raman Scattering (RRS) process is a reminiscent of the red-shifted Stokes peak in optical Raman scattering.

According to basic quantum mechanics of the processes involved, the interaction Hamiltonian between the photon and an electron is of the form

$$H' = \frac{e^2}{2m_o c^2} A^2 - \frac{e}{m_o c} p.A \qquad (1.21)$$

In this expression electron spin term is excluded. The A^2 term accounts for the elastic, Compton and normal Raman scattering.The

p.A term (where '***p'*** is the electron momentum and ***'A'*** the vector potential of the incident electromagnetic wave) in the interaction Hamiltonian between the incident photon and the atomic electron accounts for existence of the resonant Raman scattering. This term is taken at the second order of the perturbation theory [29, 30]. The resonant Raman effect was observed for the first time by Sparks [30] and explained later by Bannet and Freund [31]. The RRS process in the case where the incident X-ray beam approaches from below the *K*-shell of target elements is shown schematically in Fig. 1.4. The RRS process involves creation of a virtual hole in the intermediate state with the corresponding electron excited in an unoccupied state; simultaneously, the hole is filled by an electron from higher shell, which proceeds by the X-ray, Auger (intershell vacancy transfer), and Coster-Kronig (CK) (intrashell vacancy transfer) transitions analogous to the ones observed in the decay of a real vacancy produced through the photoionization or Compton scattering processes.

When the incident photon has energy below to the *K* absorption edge and the *K* hole is filled by an electron from the *L* shell, the process is known as *KL* RRS. The incident photon has energy $\hbar\omega_1$ lower than the U_K energy of the *K* shell threshold; the energy of the incident photon is absorbed by a *K* shell electron producing a hole and an electron in the continuum with kinetic energy T_e. The *K* shell vacancy is filled by an electron from the *L* shell (U_L being the energy of the *L* shell threshold) and a scattered photon is emitted with

energy $\hbar\omega_2$. The conservation of energy between initial and final states requires the available energy $\hbar\omega_1$ - U_L to be shared between the outgoing electron T_e and the emitted photon $\hbar\omega_2$. The energy conservation for the scattering process leads to

$$\hbar\omega_1 - U_L - E_F = \hbar\omega_2 + T_e \quad (1.22)$$

where E_F is the Fermi energy. The Fermi energy is also included in the equation but in practice can be neglected since its value is small. However, it should be considered when metal compounds are analysed. Depending to the shell in which a hole is created in the intermediate and final state respectively, the RRS process known as *KL-RRS*, *KM-RRS*, *KN-RRS*, and *LM-RRS etc*. Different aspects of the RRS process along with its applications have been discussed by Sparks and Ice [30]**,** Manninen [32]**,** and Tulkki and Åberg [33]. The energy conservation between the initial and final states of the process implies that RRS spectrum should exhibit a cutoff energy $(\hbar\omega_2)_{\max}$ given by equation

$$(\hbar\omega_2)_{\max} = \hbar\omega_1 - U_L \quad (1.23)$$

The energy $(\hbar\omega_2)_{\max}$ corresponds to the case of an emitted electron having zero kinetic energy. If the element participates in chemical bonding, the shift of its U_L binding energy to slightly higher energies will be directly reflected in shift of the high energy RRS threshold to a lower energy. More specifically, if ΔE_b is the perturbation in *L*-shell binding energy due to the chemical bonding, the maximum RRS energy from an atom bound in a molecule will be given by

$$(\hbar\omega_2)_{\max} = \hbar\omega_1 - (U_L + \Delta E_b) \quad (1.24)$$

The shift to a lower maximum scattered energy will result in decrease in the total RRS intensity, since a slice from the RRS distribution with width equal to Δ E_b will be cut.

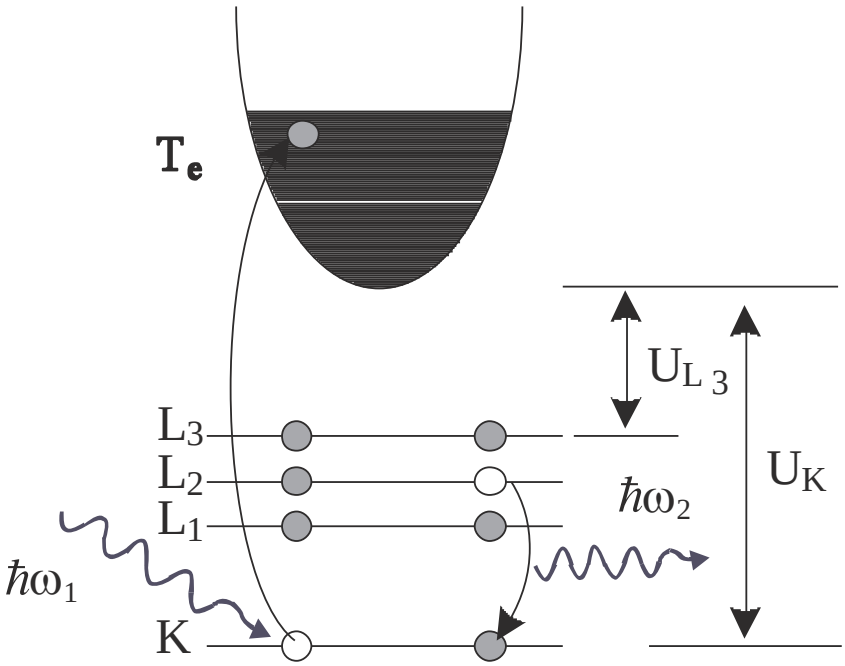


Fig. 1.4: Schematic diagram for the KL_2 radiative resonant Raman scattering process.

Creagh and Hubbell [34] have developed a computer program, XCOM, which is based on conclusions developed from comparisons with the available measurements, and evaluates cross sections for various processes contributing to photon attenuation in elements, compounds or mixtures at energies from 1 keV to 100 GeV. The XCOM cross section values in the X-ray energy region includes photoionization cross sections taken from Scofield [24], the Rayleigh scattering based on the relativistic form-factor (RFF) compilations [35], and the Compton scattering based on Klein-Nishina formula

after including the incoherent scattering function (ISF) [36]. Most of the theoretical calculations for the photoionization and scattering processes have been established to be reliable at the photon energies away from the ionization thresholds. Current theoretical efforts for the Rayleigh and Compton scattering contributions are focused on the second-order relativistic S-matrix formalism [2,35].

1.7 Alignment of inner shell vacancies

In case the inner shell vacancy created by photoionization corresponds to shell/subshell having total angular momentum $J > 1/2$, the ionized atom is said to be aligned, *i.e.,* it has unequal population of different substates depending upon the magnitude of the magnetic quantum number (M_J). Experimentally, the alignment of ionized atom can be manifested either via degree of linear polarization of the fluorescence radiation or angular distribution of the fluorescence radiation/Auger electrons emission. Alignment of ionized atom produced following direct photoionization by unpolarized radiation has been investigated theoretically by various workers [37-45].

1.7.1 Theoretical formulation of the anisotropy parameter

Angular distribution studies of the characteristic X-rays resulting from the radiative decay of inner shell vacancies give us the alignment parameter of the vacancy states induced in an ion atom collision. It is now well established that vacancies created by ion atom collision in states with $J > 1/2$ are aligned [37] and the X-ray

emission following the decay of these states is anisotropic and polarized. But in the case of photon induced ionization, the situation is not very clear. In 1960, Cooper and Zare [38] first put forward their theoretical model advocating that photon induced ions will not be aligned at all and so the angular distribution of Auger electron or the characteristic radiation will be isotropic. In 1972, Flugge *et al.* [39] predicted that when vacancies are created in the states with $J > ½$, the resulting ions will be aligned their results were later supported by the theoretical works of Jacob. [40], Oh and Pratt [41], Scofield [42], Berezhko *et al.* [43], Kleiman and Lohmann [44] and recently by Kleiman and Becker [45].

In the following subsection, theoretical treatments of the anisotropy and alignment parameter as developed by Berezhko et al. [43] are described.

1.7.2 Use of density matrix and statistical tensors

Theoretically, the most convenient and general tool suitable for analyzing the alignment of the ion state and the anisotropy of the angular distribution of photons and Auger electron is the density-matrix and statistical tensor formulism. The anisotropy of the ion state with total angular momentum J_c and with a vacancy in the inner shell will be specified by the statistical tensors $\rho_{\kappa\kappa}(J_c,J_c)$.These are related to the density matrix for the final state in the photoionization process by the relation

$$\rho_{k\kappa}(J_c,J_c) = \sum_{M_c,M'_c,m_s} (-1)^{J_c-M'_c} \langle J_c M_c J_c - M'_c | k\kappa \rangle \int d\Omega_p \langle \gamma J_c M_c s m_s | p p_f | \gamma J_c M'_c s m_s p \rangle \quad (1.25)$$

where s, m_s and p are the spin, spin projection and momentum of the photoelectron. M_c is the projection of the total angular momentum of the ion and γ are all the other quantum numbers characterizing the ion state. The photoionization process is considered in a frame with z axis (quantisation axis) along the incident photon beam direction. The summation over m_s and the integration over all directions of photoelectric emission correspond to experiments in which the photoelectric is not detected.

The matrix elements of the density matrix $\langle \gamma J_c M_c s m_s p | p_f | \gamma J_c M_c' s m_s p \rangle$ can be expressed in terms of matrix elements of the electromagnetic field multipole operators and statistical tensors of the photon and the atom in the initial state. In this case, Berezhko *et al.* [43] made the following simplifying assumptions:

(i) The target atoms are assumed to have completely closed subshells; In this case, the initial state of the atom has total angular momentum $J_a = 0$ and the angular momentum of the ion in the final state is equal to that of the vacancy j, namely, $J_c = j$.

(ii) Only the dipole photoabsorption was considered.

(iii) Spin-orbit interaction for photoabsorbtion was neglected.

With these assumptions the following relation expressed the statistical tensors of the ion

$$\rho_{k\kappa}(J_c,J_c)=\frac{4\pi a_o^2\alpha}{3}(\varepsilon-\varepsilon_{nl})(-1)^{l+j+\frac{1}{2}}(6j+3)\begin{Bmatrix} l & k & l \\ j & \frac{1}{2} & j \end{Bmatrix}$$
$$\times\left(\begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & l-1 & 1 \end{Bmatrix}\left|M_{\varepsilon l-1}^{nl}\right|^2+\begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & l+1 & 1 \end{Bmatrix}\left|M_{\varepsilon l+1}^{nl}\right|^2\right)\delta_{J_c j}\,\rho_{k\kappa}(1,1) \quad (1.26)$$

where $\propto\cong 1/137$ is the fine structure constant, a_o the Bohr radius, *l, j* are the orbital and total angular moment of the vacancy formed, $\begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{Bmatrix}$ are the Racah coefficients, ε_{nl} , ε are the electron energies (in Rydbergs) in the bound and continuum state $\rho_{k\kappa}(1,1)$ are the statistical tensors of the incident photons, and $M_{\varepsilon l\pm1}^{nl}$ are the reduced transition matrix elements can be calculated using the independent-particle model with a spherically symmetric self-consistent potential.

$$\rho_{k\kappa}(J_c,J_c)=\frac{4\pi a_o^2\alpha}{3}(\varepsilon-\varepsilon_{nl})(-1)^{l+j+\frac{1}{2}}(6j+3)\begin{Bmatrix} l & k & l \\ j & \frac{1}{2} & j \end{Bmatrix}$$
$$\times\left(l\begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & l-1 & 1 \end{Bmatrix}(R_{nl,\varepsilon l-1})^2+(l+1)\begin{Bmatrix} l & k & l \\ 1 & l+1 & 1 \end{Bmatrix}(R_{nl,\varepsilon l+1})^2\right)$$
$$\times\,\delta_{J_c j}\,\rho_{k\kappa}(1,1) \quad (1.27)$$

where $R_{nl,\varepsilon l\pm1}$ are the single- particle radial integrals $R_{nl,\varepsilon l\pm1}=\int_0^\infty P_{nl}(r)\,rP_{\varepsilon l\pm1}(r)\,dr$; $P_{nl}(r)$ and $P_{\varepsilon l\pm1}(r)$ are the radial wavefunctions of electron in the bound state and in the continuum. The anisotropy of X-rays and Auger electrons and the polarization of the X-rays are usually expressed in terms of tensors $A_{k\kappa}=\rho_{k\kappa}/\rho_{00}$. Taking into

account the normalization Tr (ρ) = 1, following relations will be obtained

ρ_{00} (1,1) = $1/\sqrt{3}$ ρ_{20} (1,1) = $1/\sqrt{6}$ ρ_{10} (1,1) =$P_3/\sqrt{2}$

$\rho_{1\pm1}$ (1, 1) = $\rho_{2\pm1}$ (1,1) = 0 $\rho_{2\pm2}$ (1,1) = $\frac{1}{2}$ ($P_1 \pm iP_2$) (1.28)

where P_1, P_2 and P_3 are the Stoke's parameters. If the initial photon beam is unpolarised ($P_1 = P_2 = P_3 = 0$), then the only non–zero tensor of the non-zero rank is A_{20} which can be expressed by the following equation.

$$A_{20} = (-1)^{l+j+\frac{1}{2}}(2l+1)\left(\frac{6j+3}{2}\right)^{1/2}\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ j & \frac{1}{2} & j \end{Bmatrix}\times$$

$$\left(l\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ 1 & l-1 & 1 \end{Bmatrix}\times(R_{nl,\varepsilon l-1})^2 + (l+1)\begin{Bmatrix} l & 2 & l \\ 1 & l+1 & 1 \end{Bmatrix}(R_{nl,\varepsilon l+1})^2\right)\left[l\,(R_{nl,\varepsilon l-1})^2 + (l+1)(R_{nl,\varepsilon l+1})^2\right]^{-1} \quad (1.29)$$

1.7.3 Angular distribution and polarization of characteristic X-rays

If the aligned ion with a vacancy in the inner-shells emits a photon and the ion in its final state is not detected, the angular distribution of emitted X-rays can be written in the general form as [46].

$$W(\theta,\emptyset) = \sum_{l,l} \sqrt{4\pi}\ \langle b\|l\|a\rangle\langle b\|l'\|a\rangle^{*}\hat{a}^2(-1)^{a+b+l'}$$

$$\times \sum_{K,k}\frac{1}{K}\begin{Bmatrix} l & a & b \\ a & l' & K \end{Bmatrix}\rho_{ko}(a,a)C^{*}_{Kk}(l,l')Y_{Kk}(\theta,\emptyset) \quad (1.30)$$

Here *a, b, l* are the total angular moment of the initial and final states of the ion and of the radiation, $\langle b\|l\|a\rangle$ denotes the decay amplitudes

and $C^{*}_{Kk}(l,l')$ are the radiation parameters. If the polarization of the photon is not detected then the radiation parameters can be written as:

$$C^{*}_{Kk}(l,l') = \frac{\hat{l}\hat{l}'}{4\pi}(-1)^{l'-l}\begin{Bmatrix} l & l' & k \\ l & -l & o \end{Bmatrix}\frac{l+(-1)^{f}}{2}\delta_{ko} \quad (1.31)$$

Here l and l' are the total angular momentum, *i.e.*, the multiplicity of the photon, $f = l + l' + \pi + \pi' + K$ where $\pi = 0$ for electric radiation and $\pi = 1$ for magnetic radiation. Equation (1.30) and (1.31) are general expressions. For electric dipole radiation,

$$W(\theta) = \frac{W_0}{4\pi}[1 + \beta P_2(\cos\theta)] \quad (1.32)$$

where W_0 denotes the total probability for photon emission in a unite time. β is the coefficient of anisotropy and is given by

$$\beta = \alpha''\rho_{20}/\rho_{00} = \alpha A_2 \quad (1.33)$$

where $\alpha'' = \sqrt{3/2\hat{a}}\ (-1)^{a+b+1}\begin{Bmatrix} 1 & a & b \\ a & 1 & 2 \end{Bmatrix}$. The coefficient α'' depends only on the total angular momenta of the initial and final states of the ion from equations (1.32) and (1.33) we see that the angular distribution of characteristic X-rays can be anisotropic and the coefficient of anisotropy is proportional to the degree of alignment A_2.

References

1. P.P. Kane, Phys. Rep. 218 (1992) 69.
2. P.M. Bergstrom and R.H. Pratt, Radiat. Phys. Chem. 50 (1997) 77.
3. W. Bambynek, B. Crasemann, R.W. Fink, H.U. Freund, H. Mark, C.D. Swift and P.V. Rao, Rev. Mod. Phys. 44 (1972) 716.
4. M. O. Krause, J. Phys. Chem. Ref. Data 8 (1979) 307.
5. J.H. Hubbell, P. N. Trehan, N. Singh, B. Chand, D. Mehta, M. L. Garg, R.R. Garg, S. Singh and S. Puri, J. Phys. Chem. Ref. Data 23 (1994) 339.
6. E.J. McGuire, Phys Rev A 3 (1971) 587.

7. E.J. McGuire, Phys Rev A 3 (1972) 1043.

8. J.H. Scofield, Phys. Rev. 179 (1969) 9.

9. J.H. Scofield, At. Data Nucl. Data Tables 14 (1974) 121.

10. J.H. Scofield, Phys. Rev. A 9 (1974a) 1041.

11. J.H. Scofield, Phys. Rev. A 10 (1974b) 1507; erratum, Phys. Rev. A 12 (1975) 345.

12. M.H. Chen, B. Crasemann and H. Mark, At. Data Nucl. Data Tables 24 (1979) 13.

13. M.H. Chen, B. Crasemann and H. Mark, Phys. Rev. A 21 (1980) 436.

14. S. Puri, D. Mehta, B. Chand, N. Singh and P. N. Trehan, X-ray Spectrom. 22 (1993) 358.

15. M.H. Chen, B. Crasemann, K. Huang, M. Aoyagi and H. Mark, At. Data Nucl. Data Tables 19 (1977) 97.

16. P.V. Rao, Pramana J. of Phys. 50 (1998) 669.

17. W. Jitschin, in proceedings of the Fifteenth Conference on X-ray and Inner-Shell Ionization, American Institute of Physics Conf. Proc. No. 215 (1990) 408.

18. J.L. Campbell, At. Data Nucl. Data Tables, 85, (2003) 291.

19. J.L. Campbell and J.X.Wang, At. Data Nucl. Data Tables 43 (1989) 281.

20. L. Kissel and R.H. Pratt, Acta Cryst. A 37 (1990) 170.

21. U.Werner and W. Jitschin, Phys. Rev. A, 38, (1988) 4009.

22. I. Waller and D.R. Hartree, Proc. R. Soc. Lond., Ser. A 124 (1929) 119.

23. L. Bewiloqua, Z. Physik 19 (1931) 740.

24. J.H. Scofield, Lawrence Livermore laboratory, report No. 51236 (1973), unpublished.

25. S. Puri, B. Chand, D. Mehta, M.L. Garg, N. Singh and P.N. Trehan, At. Data Nucl. Data Tables 61 (1995) 289.

26. M.H. Chen, B. Crasemann and M. Hans, Phys. Rev. A 27 (1983) 2989.

27. C.P. Bhalla, J. Phys. B 3 (1970) 916.

28. M.H. Chen and B. Crasemann, Phys. Rev. A 30 (1984) 170.

29. A.G. Karydas and T. Paradellis, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 30 (1997) 1893.

30. C.J. Sparks and G.E. Ice, Ind. J. Phys. 71B (1997) 393.

31. Y.B. Bannett and I. Freund, Phys. Rev. Lett. 34 (1975) 372.

32. S. Manninen, Radiat. Phys. Chem. 50 (1997) 77.

33. J. Tulkki and T. Åberg, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 15 (1982) L435.

34. D.C. Creagh and J.H. Hubbell, in International tables for crystallography, Vol. C A. J. C. Wilson (Ed.), Kluwer Academic Publishers (Dordrecht, 1992) p. 189.

35. L. Kissel, Lawrence Livermore National Laboratory, USA, Private communication, http://www-phys.llnl.gov/Research/scattering/.

36. J.H. Hubbell, W.J. Veigele, E.A. Briggs, R.T. Brown, D.T. Cromer and R.J. Howerton, J. Phys. Chem. Ref. Data 4 (1975) 471; 6 (1977) 615(E).

37. W. Mehlhorn, Phys. Lett. A 26 (1868) 166.

38. J. Cooper and R. Zare, Atomic Collision Processes (Gordon and Breach. New York, 1969) Vol. XIC, 3171.

39. S. Függe, W. Mehlhorn and Schmidt, Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 7.

40. V.L. Jacobs, J. Phys. B 5 (1972) 2257.

41. S.D. Oh and R.H. Partt, Phys. Rev. A10 (1974)1198.

42. J.H. Scofield, Phys. Rev. A14 (1976)1418.

43. E .G. Berezhko, N.M. Kabachnik and V.S. Rostovsky, J. Phys B 11 (1978) 1749.

44. V. Kleiman and B. Lohmann, J. Electrons Spec. and Relat. Phn. 131-132 (2003) 29.

45. V. Kleiman and V. Becker, J. Electrons Spec. and Relat. Phenomena. 142, (2005) 45.

46. A.T. Ferguson, Angular Correlation Methods in Gamma-Ray Spectroscopy (1965) North Holland Publishing Company, Amsterdam: North Holland.

الفصل الخامس

الكيمياء العضوية وغير العضوية

Organic and Inorganic Chemistry

م.د. سرى علي عبد الحسن
جامعة القادسية - كلية العلوم - العراق

الملخص

يتناول الفصل الكيمياء العضوية وغير العضوية من خلال بنية المركبات وخواصها وتصنيفها وتطبيقاتها، مع إبراز مجالات التكامل بين الفرعين. ويبدأ بتوضيح طبيعة الكيمياء العضوية ومركزية الكربون والروابط والمجاميع الوظيفية في تحديد سلوك المركبات، ثم يعرض التصنيفات والخواص والتفاعلات التي تساعد على قراءة العلاقة بين البنية والوظيفة. وتُستخدم الصيغ والأشكال والأمثلة لتقريب الفروق بين الفئات الكيميائية.

ويعرض الفصل المركبات غير العضوية، بما فيها الفلزات والمعقدات والأكاسيد والأحماض والقواعد والأملاح، ويناقش خصائصها ومجالات استعمالها. ويربط هذا العرض بتطبيقات في الصناعة والزراعة والطاقة والبيئة والمواد المتقدمة، إضافة إلى الأمثلة الطبية التي يتناولها المصدر. كما يوضح أن تطور الكيمياء العضوية الفلزية والكيمياء الحيوية غير العضوية وغيرها من المسارات يجعل العلاقة بين الفرعين علاقة تفاعل وتكامل، لا فصل مطلق.

وتعالج المناقشة دور هذا التكامل في تصميم مواد ذات خصائص محددة وفي تطوير البوليمرات والمواد النانوية والمحفزات وتقنيات معالجة الملوثات. وتبين الجداول المقارنة اختلاف التطبيقات مع بقاء الأساس المشترك المتعلق بفهم التركيب والتفاعل والخواص. وتخلص الدراسة إلى أهمية توظيف المعرفة الكيميائية المتكاملة في معالجة المسائل العلمية والتقنية، مع عرض اتجاهات مستقبلية يناقشها الفصل. وتتمثل المساهمة في بناء مدخل تعليمي منظم للمركبات العضوية وغير العضوية وصلاتهما التطبيقية، دون تقديم كل مثال بوصفه نتيجة تجريبية جديدة للمؤلفة أو إلغاء الحاجة إلى شروط التحضير والتحقق والسلامة في أي تطبيق عملي.

الكلمات المفتاحية: الكيمياء العضوية؛ الكيمياء غير العضوية؛ بنية المركبات؛ المواد المتقدمة؛ التطبيقات الكيميائية

Abstract

This chapter examines organic and inorganic chemistry through molecular structure, properties, classification, reactions, and applications, emphasizing connections between the two branches. It introduces the role of carbon, bonding, and functional groups in organic compounds, then reviews classifications and reactions that clarify relationships between structure and function. Formulas, illustrations, and examples distinguish major chemical categories.

Inorganic compounds are discussed through metals, complexes, oxides, acids, bases, and salts. Their properties are connected to uses in industry, agriculture, energy, environmental applications, advanced materials, and the medical examples addressed in the source. Developments in organometallic and bioinorganic chemistry illustrate interaction between the branches rather than an absolute separation.

The chapter considers how integrated chemical knowledge supports the design of materials with selected properties, including polymers, nanomaterials, catalysts, and systems for pollutant treatment. Comparative tables relate differences in applications to shared questions about composition, reactions, and performance. The concluding discussion emphasizes the value of combining chemical perspectives when approaching scientific and technical problems and presents prospective directions considered in the chapter. The contribution is a structured educational introduction to organic and inorganic compounds and their application pathways. It does not present every example as a new experimental result of the author or remove the need to consider preparation conditions, verification, and safety when moving from conceptual explanation to practical chemical use.

Keywords: Organic chemistry; Inorganic chemistry; Compound structure; Advanced materials; Chemical applications

مقدمة Introduction

تُعد الكيمياء من أهم العلوم الطبيعية التي تسهم في فهم تركيب المادة وخواصها والتحولات التي تطرأ عليها، إذ ترتبط ارتباطًا وثيقًا بمختلف مجالات الحياة والعلوم الحديثة، مثل الطب والصيدلة والزراعة والصناعة وعلوم البيئة وتكنولوجيا النانو. وقد تطورت الكيمياء عبر العقود لتشمل فروعًا متخصصة، من أبرزها الكيمياء العضوية والكيمياء غير العضوية، اللتان تشكلان الأساس العلمي لتطوير المواد الجديدة وفهم التفاعلات الكيميائية التي تحدث في الأنظمة الطبيعية والصناعية. (Atkins & Jones, 2022)

تركز الكيمياء العضوية على دراسة المركبات المحتوية على عنصر الكربون، وبخاصة تلك التي تحتوي على اواصر تساهمية بين ذرات الكربون والهيدروجين، مع دراسة بنيتها وخواصها الفيزيائية والكيميائية وآليات تفاعلاتها وتطبيقاتها في الصناعات الدوائية والبوليمرات والمواد الحيوية. وقد أسهم التطور في الكيمياء العضوية في إنتاج آلاف المركبات ذات الأهمية الاقتصادية والطبية، فضلاً عن دورها في تصميم الجزيئات الدوائية الحديثة. (McMurry, 2021).

أما الكيمياء غير العضوية فتهتم بدراسة جميع العناصر والمركبات التي لا تندرج ضمن معظم المركبات العضوية، وتشمل الفلزات، والمعقدات التناسقية، والأكاسيد، والأحماض، والقواعد، والأملاح، إضافةً إلى المواد النانوية غير العضوية. وقد أصبحت الكيمياء غير العضوية ركيزة أساسية في مجالات الطاقة المتجددة، والمواد المتقدمة، والحفز الصناعي، والتطبيقات الطبية، والتكنولوجيا البيئية (Housecroft, & Sharpe (2018).

ومع التطور الكبير في العلوم الحديثة، أصبحت الحدود الفاصلة بين الكيمياء العضوية وغير العضوية أقل وضوحاً، إذ ظهرت تخصصات حديثة مثل الكيمياء العضوية الفلزية، والكيمياء الحيوية غير العضوية، والكيمياء الطبية، التي تجمع بين خصائص المركبات العضوية وغير العضوية لإنتاج مواد ذات كفاءة عالية في التطبيقات الصناعية والطبية والبيئية (Crabtree, 2019).

يهدف هذا الفصل إلى التعريف بالمركبات العضوية وبنيتها، واستعراض أهم المركبات غير العضوية وتطبيقاتها، وبيان التكامل بين الكيمياء العضوية وغير العضوية في المجالات العلمية الحديثة.

المبحث الأول: المركبات العضوية وبنيتها

مفهوم المركبات العضوية

The concept of organic compounds

الكيمياء العضوية هي فرع الكيمياء الذي يدرس مركبات الكربون، بما في ذلك هياكلها وخواصها وتفاعلاتها، مع وجود استثناءات لبعض المركبات الكربونية التي تُدرس تقليديًا ضمن الكيمياء غير العضوية مثل CO و CO_2 و الكربونات و البيكربونات و بعض السيانيدات. فالمركبات العضوية هي مركبات كيميائية تعتمد بصورة رئيسية على عنصر الكربون، وغالبًا ما تحتوي على الهيدروجين بالإضافة إلى عناصر أخرى مثل الأكسجين والنيتروجين والكبريت والفسفور والهالوجينات. وتمتاز هذه المركبات بتكوينها اواصر تساهمية مستقرة تمنحها تنوعًا بنيويًا هائلًا، مما يجعلها تشكل ملايين المركبات المختلفة المعروفة حتى الوقت الحاضر (McMurry, 2021).

وكان الاعتقاد السائد حتى أوائل القرن التاسع عشر أن المركبات العضوية لا يمكن تحضيرها إلا داخل الكائنات الحية، إلا أن هذا المفهوم تغير جذريًا بعد نجاح العالم فريدريش فوهلر عام 1828 في تحضير اليوريا من مركب غير عضوي، وهو ما مثل بداية الكيمياء العضوية الحديثة وأثبت إمكانية تصنيع المركبات العضوية داخل المختبر (Clayden et al., 2012).

تدخل المركبات العضوية في تركيب جميع الكائنات الحية تقريبًا، إذ تشكل البروتينات والدهون والكربوهيدرات والأحماض النووية، كما تدخل في صناعة الوقود والأدوية والأصباغ والبوليمرات والمواد البلاستيكية والمبيدات والمواد المضافة للأغذية، الأمر الذي جعل الكيمياء العضوية من أكثر فروع الكيمياء أهمية في الحياة اليومية (Bruice, 2017).

خصائص الكربون Properties of carbon

يتميز الكربون بخصائص فريدة جعلته العنصر الأساسي في تكوين المركبات العضوية، ومن أهم هذه الخصائص:

1. رباعي التكافؤ، إذ يستطيع الكربون تكوين أربع اواصر تساهمية مستقرة.
2. قدرته على تكوين اواصر أحادية وثنائية وثلاثية.
3. قابليته لتكوين سلاسل مستقيمة ومتفرعة وحلقية.
4. إمكانية الارتباط بمعظم عناصر الجدول الدوري.
5. تكوين عدد هائل من الايزومرات ، وهو ما يزيد تنوع بنية المركبات العضوية (Atkins & Jones, 2022).

وتفسر هذه الخصائص عدد كبير جدًا من المركبات العضوية مقارنة بالمركبات غير العضوية، حيث يزيد عدد المركبات العضوية المعروفة على عشرات الملايين.

البنية الإلكترونية لذرة الكربون

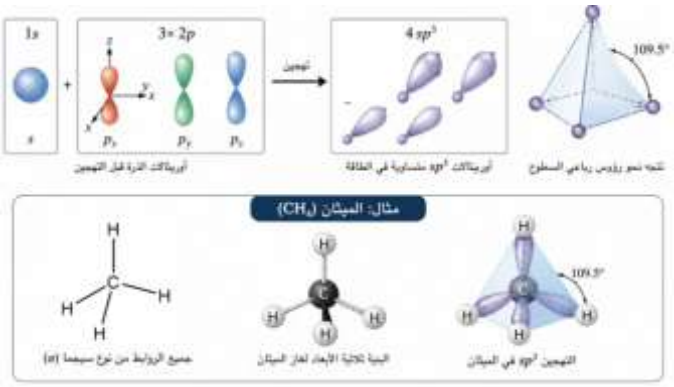
The electronic structure of a carbon atom

يُعد الكربون الأساس البنائي للمركبات العضوية بسبب تركيبه الإلكتروني الفريد، إذ يبلغ عدده الذري (6)، ويكون توزيعه الإلكتروني **($1s^2\ 2s^2\ 2p^2$).** يحتوي غلاف التكافؤ على أربعة إلكترونات، ولذلك يستطيع تكوين أربع اواصر تساهمية مستقرة مع الذرات الأخرى. وتُفسَّر قدرة الكربون على تكوين أشكال هندسية متنوعة بظاهرة **التهجين (Hybridization)** التي تنشأ نتيجة تداخل اوربيتالات الذرة لتكوين اوربيتالات جديدة متكافئة في الطاقة والشكل (McMurry, 2021).

يُعد مفهوم التهجين من أهم المفاهيم في الكيمياء العضوية، لأنه يفسر اختلاف الأشكال الفراغية للمركبات العضوية، وقوة الاواصر وزواياها، وخواصها الكيميائية. وتختلف أنواع التهجين باختلاف عدد الاواصر التي تكونها ذرة الكربون، مما يؤدي إلى ظهور أشكال هندسية متعددة تؤثر بصورة مباشرة في نشاط المركبات العضوية وتفاعلاتها (Clayden et al., 2012).

التهجين من نوع sp^3 hybridization sp^3

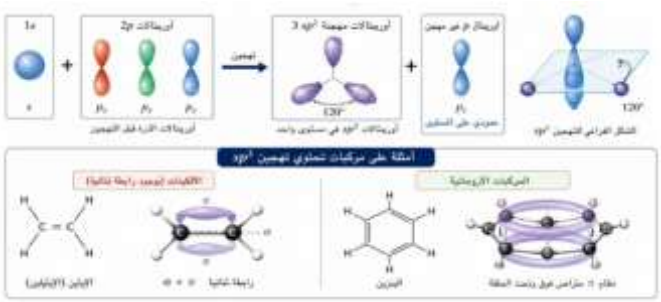
ينتج تهجين **sp^3** من اندماج اوربيتال**s** واحد مع ثلاثة اوربيتالات **p**، فتتكون أربعة اوربيتالات متساوية في الطاقة، تتجه نحو رؤوس شكل رباعي السطوح بزاوية تبلغ **109.5°**. ويظهر هذا النوع من التهجين في المركبات المشبعة مثل الألكانات، ويُعد غاز الميثان (CH_4) المثال الأشهر عليه، حيث تكون جميع الاواصر فيه من نوع سيجما (σ)، مما يمنحه ثباتًا كيميائيًا مرتفعًا (Bruice, 2017).



شكل :(1-1) الشكل الهندسي لتهجين نوع sp^3

التهجين من نوع sp^2 hybridization sp^2

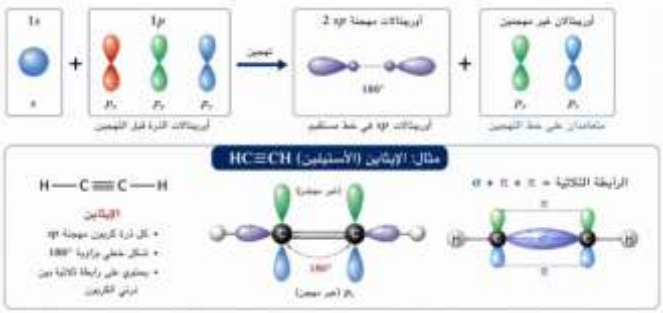
ينتج تهجين **sp^2** من اندماج اوربيتال**s** مع اوربيتالين من **p**، بينما يبقى اوربيتال**p** غير مهجن، وينتج عن ذلك ثلاثة اوربيتالات مهجنة تقع في مستوى واحد بزوايا تبلغ **120°** . ويسهم الاوربيتال غير المهجن في تكوين اصرة **π** إلى جانب اصرة **σ**، فتتكون الاصرة الثنائية. ويظهر هذا النوع من التهجين في مركبات الألكينات والمركبات الأروماتية، ويمنحها نشاطًا كيميائيًا أعلى من المركبات المشبعة (McMurry, 2021).



شكل (1-2): الشكل الهندسي لتهجين نوع sp^2

التهجين من نوع sp hybridization sp

ينتج تهجين **sp** من اندماج اوربيتال **s** مع اوربيتال واحد من **p**، بينما يبقى اوربيتالان من **p** غير مهجنين. وتتوزع الاوربيتالات المهجنة في خط مستقيم بزاوية مقدارها **180°**، وتظهر هذه البنية في الألكاينات التي تحتوي على اواصر ثلاثية مكونة من اصرة **σ** و اصرتي **π**، مما يمنحها خواصًا كيميائية مميزة وقابلية عالية لبعض تفاعلات الإضافة (Atkins & Jones, 2022).



شكل(3-1): الشكل الهندسي لتهجين نوع sp

الاواصر الكيميائية في المركبات العضوية

Chemical bonds in organic compounds

تتكون المركبات العضوية بصورة رئيسية من اواصر تساهمية، وتنقسم هذه الاواصر إلى نوعين رئيسيين هما اواصر سيجما (σ) واواصر باي .(π) وتمثل اواصر سيجما أول اصرة تتكون بين الذرتين نتيجة التداخل المباشر بين الاوربيتالات الذرية، وتتميز بقوتها العالية وإمكانية دوران الذرات حولها بحرية نسبية. أما اواصر باي فتتكون نتيجة التداخل الجانبي بين اوربيتالات **p** غير المهجنة، وتكون أضعف من اواصر سيجما لكنها أكثر نشاطاً كيميائياً لأنها أكثر تعرضاً للهجوم من قبل الكواشف حيث تمنح المركبات العضوية نشاطًا كيميائيًا أكبر، ولا سيما في تفاعلات الإضافة (Clayden et al., 2012).

وتؤثر طبيعة الاصرة الكيميائية في العديد من خواص المركبات العضوية، مثل الطول والقوة والطاقة اللازمة لكسر الاصرة، إضافة إلى درجة الثبات والتفاعلية، لذلك تُعد دراسة الاواصر الكيميائية أساسًا لفهم آليات التفاعلات العضوية المختلفة (Bruice, 2017).

المجموعات الوظيفية Functional Groups

تُعرف المجموعة الوظيفية بأنها مجموعة من الذرات داخل الجزيء تمنحه خواصه الكيميائية المميزة، وتحدد نوع التفاعلات التي يمكن أن يخضع لها. وعلى الرغم من اختلاف أحجام المركبات العضوية، فإن المركبات التي تحتوي على المجموعة الوظيفية نفسها غالبًا ما تتشابه في سلوكها الكيميائي (McMurry, 2021).

وتُعد المجموعات الوظيفية الأساس في تسمية المركبات العضوية وفق قواعد الاتحاد الدولي للكيمياء البحتة والتطبيقية (IUPAC)، كما تُستخدم في تفسير الخواص الفيزيائية والكيميائية للمركبات وتصميم المواد الدوائية والبوليمرات الحديثة (IUPAC, 2019).

جدول ((1-1: أهم المجموعات الوظيفية

المجموعة الوظيفية	الصيغة العامة
الكحولات	R-OH
الألدهيدات	R-CHO
الكيتونات	R-CO-R
الأحماض الكربوكسيلية	R-COOH
الإسترات	R-COO-R
الامينات	$R–NH_2$ / R_2NH / R_3N
الايثرات	R-O-R
الهاليدات	R-X

تصنيف المركبات العضوية

Classification of organic compounds

تتميز المركبات العضوية بتنوعها البنيوي الكبير نتيجة قدرة ذرة الكربون على تكوين سلاسل مستقيمة ومتفرعة وحلقية، الأمر الذي أدى إلى تصنيفها وفق عدة معايير، أهمها طبيعة الهيكل الكربوني والمجموعة الوظيفية ودرجة التشبع. ويُعد هذا التصنيف أساسًا لفهم الخواص الفيزيائية والكيميائية للمركبات العضوية والتنبؤ بسلوكها أثناء التفاعلات الكيميائية (McMurry, 2021).

أولاً: التصنيف حسب الهيكل الكربوني

Classification according to carbon structure

- **المركبات الأليفاتية Aliphatic Compounds**

تتكون المركبات الأليفاتية من سلاسل كربونية مستقيمة أو متفرعة، وقد تكون مشبعة أو غير مشبعة. وتمثل هذه المركبات القسم الأكبر من المركبات العضوية، وتشمل الألكانات والألكينات والألكاينات. وتمتاز بسهولة تحضيرها وتنوع تفاعلاتها، كما تدخل في إنتاج الوقود والبوليمرات والمواد الكيميائية الصناعية (Bruice, 2017).

- **المركبات الحلقية Cyclic Compounds**

تحتوي هذه المركبات على حلقات كربونية مغلقة، وقد تكون حلقات متجانسة تتكون من ذرات كربون فقط، أو حلقات غير متجانسة تحتوي على عناصر مثل النيتروجين أو الأكسجين أو الكبريت. وتُعد المركبات الحلقية أساسًا للعديد من الجزيئات الحيوية والأدوية الحديثة (Clayden et al., 2012).

- **المركبات الأروماتية Aromatic Compounds**

المركب الأروماتي يجب أن يكون حلقيًا، مستويًا تقريبًا، مترافقًا بصورة مستمرة، وأن يحتوي على $4n+2$ إلكترون π وفق قاعدة هوكل، مما يمنحها استقرارًا إلكترونيًا مرتفعًا. وتُستخدم هذه المركبات في تصنيع الأصباغ والأدوية والبوليمرات والمواد المتقدمة، كما تدخل في تركيب العديد من المركبات الطبيعية مثل الأحماض الأمينية والهرمونات (McMurry, 2021).

ثانياً: التصنيف حسب درجة التشبع

Classification by degree of saturation

يمكن تقسيم المركبات العضوية إلى:

- **المركبات المشبعة Saturated compounds**

وهي التي تحتوي على اواصر أحادية فقط بين ذرات الكربون، وتمثلها الألكانات، وتمتاز بثباتها الكيميائي النسبي وقلة نشاطها تجاه معظم الكواشف الكيميائية (Atkins & Jones, 2022).

- **المركبات غير المشبعة**

unsaturated compounds

تحتوي على اواصر ثنائية أو ثلاثية، مثل الألكينات والألكاينات، ولذلك تكون أكثر نشاطًا كيميائيًا، وتميل إلى الخضوع لتفاعلات الإضافة والأكسدة والبلمرة (Bruice, 2017).

ثالثاً: التصنيف حسب المجموعة الوظيفية

Classification by functional group

يُعد هذا التصنيف الأكثر استخدامًا في الكيمياء العضوية، إذ تُصنف المركبات اعتمادًا على المجموعة الوظيفية الموجودة فيها، مثل الكحولات و الألدهيدات و الكيتونات و غيرها من المجاميع التي تم ذكرها سابقا في موضوع المجموعات الوظيفية. ويحدد نوع المجموعة الوظيفية الخواص الكيميائية للمركب وآلية تفاعله مع المواد الأخرى، ولذلك يعتمد علماء الكيمياء والصيدلة على هذا التصنيف عند تصميم المركبات الجديدة (IUPAC, 2019).

شكل((4: تصنيف المركبات العضوية

الخواص الفيزيائية للمركبات العضوية

Physical properties of organic compounds

تعتمد الخواص الفيزيائية للمركبات العضوية على الكتلة الجزيئية، ونوع المجموعة الوظيفية، وشكل الجزيء، وقوى التجاذب بين الجزيئات. إن كثيرًا من المركبات العضوية الجزيئية تمتلك درجات انصهار وغليان منخفضة نسبيًا، بسبب اعتمادها على الاواصر التساهمية والقوى بين الجزيئية الضعيفة نسبيًا (Atkins & Jones, 2022). ومن أهم الخواص الفيزيائية:

1. الذوبانية solubility

تذوب معظم المركبات العضوية غير القطبية في المذيبات العضوية مثل البنزين والإيثر والكلوروفورم، بينما تقل ذوبانيتها في الماء. أما المركبات التي تحتوي على مجموعات قطبية مثل (-OH) و (-COOH) فتتميز بذوبانية أعلى في الماء نتيجة تكوين اواصر هيدروجينية. حيث تعتمد الذوبانية على القطبية و الروابط الهيدروجينية و الحجم الجزيئي و درجة الحرارة بالاضافة الى طبيعة المذيب (McMurry, 2021).

2. درجات الغليان والانصهار

Boiling and melting points

تزداد درجات الغليان والانصهار بزيادة الكتلة الجزيئية وقوة التجاذب بين الجزيئات، كما تؤدي الاواصر الهيدروجينية إلى رفع درجات الغليان بصورة ملحوظة، كما في الكحولات والأحماض الكربوكسيلية (Bruice, 2017).

3. الكثافة Density

تكون كثافة العديد من المذيبات العضوية أقل من كثافة الماء، في حين توجد مذيبات عضوية ذات كثافة أعلى من الماء مثل الكلوروفورم وثنائي كلورو الميثان (Clayden et al., 2012).

4. اللون والرائحة Color and smell

غالبية المركبات العضوية النقية عديمة اللون، إلا أن وجود أنظمة إلكترونية مترافقة أو مجموعات كروموفورية قد يمنحها ألوانًا مميزة، كما في أصباغ الآزو والمركبات الأروماتية. وتمتلك كثير

من المركبات العضوية روائح مميزة تُستخدم في الصناعات الغذائية والعطور (McMurry, 2021).

الخواص الكيميائية للمركبات العضوية

Chemical properties of organic compounds

تتحدد الخواص الكيميائية للمركبات العضوية بنوع الاواصر الكيميائية والمجموعات الوظيفية الموجودة فيها، إذ تؤثر هذه العوامل في طبيعة التفاعلات التي تخضع لها المركبات (Clayden et al., 2012). ومن أهم التفاعلات الكيميائية:

1. تفاعلات الإضافة Addition reactions

تحدث في المركبات غير المشبعة نتيجة كسر الاصرة الثنائية أو الثلاثية وإضافة ذرات أو مجموعات جديدة إلى الجزيء، مثل هدرجة الألكينات وإضافة الهالوجينات (McMurry, 2021).

$$CH_2{=}CH_2 + H_2 \longrightarrow CH_3CH_3$$

2. تفاعلات الاستبدال Substitution reactions

تتميز بها المركبات الأروماتية والألكانات، حيث تستبدل ذرة أو مجموعة وظيفية بأخرى دون تغيير الهيكل الأساسي للمركب، مثل هلجنة البنزين (Bruice, 2017).

$$C_6H_6 + X_2 \longrightarrow C_6H_5X + HX$$

3. تفاعلات الحذف elimination reaction

يُزال خلالها جزيء صغير مثل الماء أو هاليد الهيدروجين لتكوين اصرة مزدوجة، وتُعد من أهم طرق تحضير الألكينات (Clayden et al., 2012).

$$R\text{-}CH_2\text{-}CH_2\text{-}OH \longrightarrow R\text{-}CH{=}CH_2 + H_2O$$

4. تفاعلات الأكسدة والاختزال

oxidation-reduction reactions

تُستخدم هذه التفاعلات بصورة واسعة في الصناعات الكيميائية والدوائية، مثل أكسدة الكحولات إلى ألدهيدات أو كيتونات أو أحماض كربوكسيلية، واختزال المركبات الكربونيلية لإنتاج الكحولات (McMurry, 2021).

$$R\text{-}CH_2OH + [O] \longrightarrow R\text{-}CHO + H_2O$$

$$R\text{-}CHO + 2[H] \longrightarrow R\text{-}CH_2OH$$

مصادر المركبات العضوية

Sources of organic compounds

تُستحصل المركبات العضوية من مصادر طبيعية وصناعية متعددة، وقد أدى التطور في الكيمياء الصناعية إلى توسيع نطاق إنتاجها لتلبية احتياجات مختلف القطاعات.

أولاً: المصادر الطبيعية natural resources

تشمل النباتات والحيوانات والكائنات الدقيقة، إذ تُنتج النباتات الزيوت العطرية والسكريات والقلويدات والفلافونويدات، بينما تُعد الحيوانات مصدرًا للبروتينات والدهون والهرمونات. كما تنتج الكائنات الدقيقة العديد من المضادات الحيوية والإنزيمات والمواد الحيوية ذات القيمة الطبية (Nelson & Cox, 2021).

ثانياً: المصادر الصناعية Industrial sources

يُعد النفط الخام والغاز الطبيعي أهم المصادر الصناعية للمركبات العضوية، حيث تُفصل مكوناتهما بعمليات التقطير والتكسير الحفزي لإنتاج الإيثيلين والبروبيلين والبنزين والتولوين، والتي تُستخدم مواد أولية في الصناعات البتروكيميائية (Atkins & Jones, 2022).

ثالثاً: التخليق الكيميائي chemical synthesis

أصبح التخليق العضوي وسيلة رئيسية لإنتاج المركبات العضوية الحديثة، خاصةً الأدوية والبوليمرات والأصباغ والمبيدات والمواد النانوية، مما أتاح إنتاج مركبات ذات تراكيب معقدة لا توجد طبيعيًا (Clayden et al., 2012).

تطبيقات المركبات العضوية

Applications of organic compounds

تُعد المركبات العضوية محورًا أساسيًا في العديد من التطبيقات العلمية والصناعية، ومن أبرزها:

- **الصناعة الدوائية:** تدخل في تصنيع المضادات الحيوية، ومضادات السرطان، والمسكنات، واللقاحات، والعلاجات الهرمونية (Nelson & Cox, 2021).
- **الصناعات البتروكيميائية:** تُستخدم في إنتاج الوقود، وزيوت التشحيم، والمواد البلاستيكية، والألياف الصناعية، والمطاط الصناعي (Atkins & Jones, 2022).
- **الصناعات الغذائية:** تُستعمل في إنتاج المنكهات والملونات والمواد الحافظة والمضافات الغذائية (Bruice, 2017).
- **الزراعة:** تدخل في تصنيع المبيدات الحشرية ومبيدات الأعشاب ومنظمات نمو النبات والأسمدة العضوية (McMurry, 2021).
- **علوم المواد:** تُستخدم في إنتاج البوليمرات والمواد الذكية والمواد النانوية واللدائن الهندسية والأغشية المتقدمة المستخدمة في تطبيقات الطاقة والطب والبيئة (Clayden et al., 2012).
- **التطبيقات البيئية:** تُستغل المركبات العضوية في معالجة المياه، وامتصاص الملوثات، وتطوير المواد الصديقة للبيئة، والوقود الحيوي، وتقنيات الاقتصاد الدائري (Atkins & Jones, 2022).

المبحث الثاني: المركبات غير العضوية وتطبيقاتها

مفهوم المركبات غير العضوية

The concept of inorganic compounds

تُعد الكيمياء غير العضوية أحد الفروع الرئيسة لعلم الكيمياء، وتهتم بدراسة العناصر الكيميائية كافة ومركباتها باستثناء معظم المركبات العضوية القائمة على الكربون. وتشمل المركبات غير العضوية الفلزات، و اللافلزات، و الأملاح، و الأحماض، والقواعد، والأكاسيد، والهيدريدات، والمركبات التناسقية، إضافة إلى المواد النانوية غير العضوية. وقد شهد هذا الفرع تطورًا ملحوظًا خلال العقود الأخيرة نتيجة دوره المحوري في تطوير المواد المتقدمة، وتقنيات الطاقة، والحفز الصناعي، والطب، والعلوم البيئية (Housecroft & Sharpe, 2018).

وتتميز المركبات غير العضوية بتنوع كبير في بنيتها الكيميائية وخواصها الفيزيائية والكيميائية، إذ قد تكون أيونية أو تساهمية أو فلزية أو تناسقية، ويؤدي هذا التنوع إلى اختلاف واسع في خصائصها وسلوكها الكيميائي. كما تعتمد العديد من التقنيات الحديثة، مثل البطاريات، والخلايا الشمسية، وأجهزة الاستشعار، والمواد النانوية، على مركبات غير عضوية ذات خصائص مميزة (Shriver & Atkins, 2014).

تصنيف المركبات غير العضوية

Classification of inorganic compounds

تُصنف المركبات غير العضوية اعتمادًا على تركيبها الكيميائي وطبيعة الاواصر الموجودة فيها، ويمكن تقسيمها إلى عدة مجموعات رئيسة:

أولاً: الأكاسيد Oxides

الأكاسيد هي مركبات تنتج من اتحاد الأكسجين مع عنصر آخر، وقد يكون العنصر فلزًا أو لافلزًا. وتُقسم الأكاسيد إلى أكاسيد قاعدية، وأكاسيد حمضية، وأكاسيد امفوتيرية، وأكاسيد متعادلة، ويعتمد هذا التصنيف على طبيعة تفاعلها مع الماء والأحماض والقواعد (Housecroft & Sharpe, 2018).

وتستخدم الأكاسيد في العديد من التطبيقات الصناعية، مثل صناعة الأسمنت والزجاج والسيراميك، كما تدخل بعض الأكاسيد النانوية مثل أكسيد الزنك (ZnO) وثاني أكسيد التيتانيوم (TiO_2) في تصنيع مستحضرات الوقاية من الأشعة فوق البنفسجية، وأجهزة الاستشعار، والمواد المضادة للبكتيريا (Miessler et al., 2014).

ثانياً: الأحماض Acids

الأحماض هي مواد قادرة على منح أيونات الهيدروجين(H^+) وفقاً لنظرية برونشتد أو استقبال زوج إلكتروني وفقًا للنظرية لويس. وتُعد من أهم المركبات غير العضوية المستخدمة في المختبرات والصناعات الكيميائية، ومن أشهرها حمض الكبريتيك، وحمض الهيدروكلوريك، وحمض النتريك. تدخل الأحماض في إنتاج الأسمدة، وتنقية المعادن، وتصنيع البطاريات، والصناعات الدوائية، كما تُستخدم في العديد من عمليات التحليل الكيميائي. (Shriver & Atkins, 2014).

ثالثاً: القواعد Bases

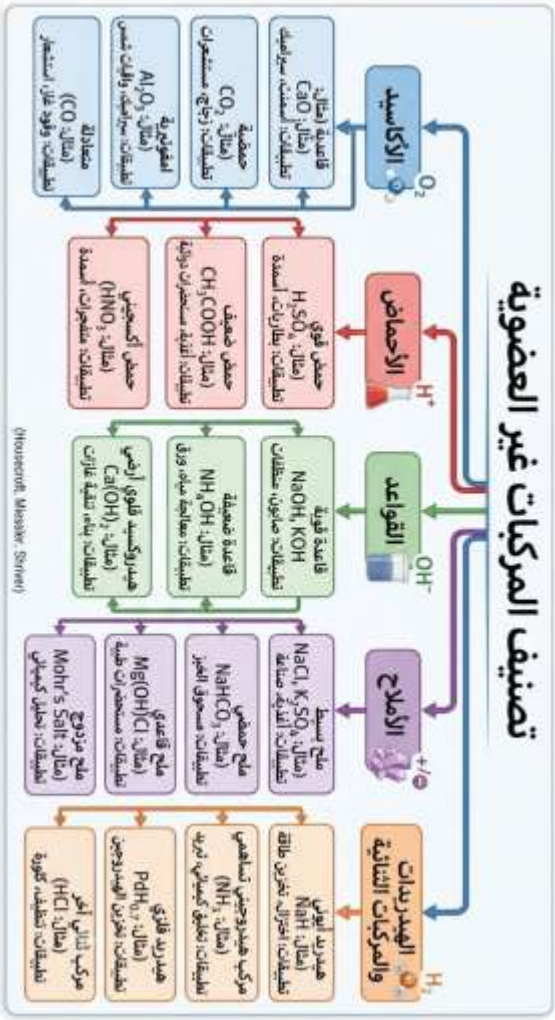
القواعد هي مركبات تنتج أيونات الهيدروكسيد (OH^-) في المحاليل المائية وفقاً لنظرية برونشتد أو تستقبل البروتونات وفقا لنظرية لويس. ومن أشهرها هيدروكسيد الصوديوم وهيدروكسيد البوتاسيوم وهيدروكسيد الكالسيوم، وتتميز بقدرتها على معادلة الأحماض وتكوين الأملاح والماء. وتُستخدم القواعد في صناعة الصابون والمنظفات والورق ومعالجة المياه والصناعات البتروكيميائية. (Housecroft & Sharpe, 2018).

رابعاً: الأملاح Salts

الأملاح هي مركبات أيونية تتكون عادةً من أيونات موجبة وسالبة مرتبطة باواصر أيونية، ويمكن تحضيرها بطرائق مختلفة، منها تفاعل الأحماض مع القواعد. وتتميز الأملاح بتنوع كبير في خواصها الفيزيائية والكيميائية تبعًا لطبيعة الأيونات المكونة لها. وتُستخدم الأملاح في الصناعات الغذائية، وتحضير الأسمدة، وتنقية المياه، والبطاريات، والمستحضرات الطبية، والعمليات الصناعية المختلفة . (Miessler et al., 2014) .

خامساً: الهيدريدات Hydrides

تشمل هذه المجموعة المركبات الناتجة من اتحاد الهيدروجين مع الفلزات أو اللافلزات، مثل هيدريد الصوديوم (NaH) والأمونيا (NH_3). وتمتلك هذه المركبات أهمية كبيرة في التخليق الكيميائي، واختزال المركبات العضوية، وإنتاج الهيدروجين، وتطوير تقنيات تخزين الطاقة (Housecroft & Sharpe, 2018).



شكل (1-2): تصنيف المركبات غير العضوية

المركبات التناسقية

Coordination Compounds

تُعد الكيمياء التناسقية من أكثر فروع الكيمياء اللاعضوية تطورًا وتأثيرًا في العلوم الحديثة، إذ تهتم بدراسة المركبات التي تتكون نتيجة ارتباط أيون أو ذرة فلزية مع مجموعة من الجزيئات أو الأيونات المانحة لأزواج إلكترونية، والتي تُعرف بالليكاندات (Ligands)، مكوِّنةً ما يُعرف بالمركبات أو المعقدات التناسقية (Coordination Compounds). وقد أصبحت هذه المركبات محورًا لآلاف الدراسات العلمية بسبب تنوع تراكيبها وخصائصها الإلكترونية والمغناطيسية والطيفية، إضافة إلى تطبيقاتها الواسعة في الكيمياء الصناعية، والكيمياء الحيوية، والطب، وعلوم المواد، والطاقة، والبيئة. (Miessler et al., 2014).

وقد أسهمت نظرية ألفريد فيرنر في تفسير تركيب هذه المركبات، وحصل بسببها على جائزة نوبل في الكيمياء عام 1913، إذ أوضحت مفهوم عدد التناسق والهندسة الفراغية للمعقدات. حيث يُعد العدد التناسقي(Coordination Number) من أهم المفاهيم في الكيمياء التناسقية، ويُقصد به عدد الذرات المانحة المرتبطة مباشرة بالفلز المركزي. ويؤثر العدد التناسقي بصورة مباشرة في الشكل الهندسي للمعقد، حيث ترتبط الأعداد التناسقية المختلفة بأشكال هندسية مميزة، مثل الشكل الخطيLinear ، و رباعي السطوح Tetrahedral ، والمربع المستوي Square planar ، وثماني السطوح Octahedral. ويعتمد هذا العدد على عوامل متعددة، من أهمها حجم الفلز المركزي، وشحنته، وطبيعة الليكاندات، والعوامل الإلكترونية والفراغية (Housecroft & Sharpe, 2018).

وتتميز المعقدات الفلزية بخواص بصرية ومغناطيسية وإلكترونية فريدة، ولذلك تُستخدم في الحفز الكيميائي، والأجهزة الإلكترونية، والمستحضرات الدوائية، وعلوم المواد، والكيمياء التحليلية.

المواد النانوية غير العضوية

inorganic nanomaterials

تُعرّف المواد النانوية عمومًا بأنها مواد تمتلك بُعدًا واحدًا أو أكثر في النطاق النانوي، وغالبًا ما يُستخدم نطاق يقارب 1–100 nm في التعريفات الشائعة

شهدت المواد النانوية غير العضوية اهتمامًا متزايدًا خلال السنوات الأخيرة بسبب امتلاكها خواصًا تختلف جذريًا عن خواص المادة في حالتها السائبة، نتيجة صغر حجم الجسيمات وزيادة نسبة المساحة السطحية إلى الحجم (Ratner & Ratner, 2021).

ومن أشهر هذه المواد:

- أكسيد الزنك (ZnO).
- ثاني أكسيد التيتانيوم (TiO_2).
- أكسيد الحديد المغناطيسي (Fe_3O_4).
- أكسيد السيريوم (CeO_2).
- الفضة النانوية (AgNPs).
- الذهب النانوي (AuNPs).

وتدخل هذه المواد في تصنيع أجهزة الاستشعار، والخلايا الشمسية، والمحفزات الكيميائية، والمواد المضادة للميكروبات، وأنظمة توصيل الدواء، ومعالجة المياه، وإزالة الملوثات البيئية (Ratner & Ratner, 2021).

الخواص الفيزيائية للمركبات غير العضوية

Physical properties of inorganic compounds

تختلف الخواص الفيزيائية للمركبات غير العضوية باختلاف نوع الاواصر الكيميائية والتركيب البلوري وطبيعة العناصر الداخلة في تكوينها. وتتميز غالبية المركبات غير العضوية بدرجات انصهار وغليان مرتفعة مقارنة بالمركبات العضوية، نتيجة وجود اواصر أيونية أو تساهمية شبكية قوية تتطلب طاقة كبيرة لكسرها (Housecroft & Sharpe, 2018).

1. درجات الانصهار والغليان

Melting and boiling points

تمتلك معظم الأملاح والأكاسيد درجات انصهار وغليان مرتفعة بسبب قوة التجاذب الكهروستاتيكي بين الأيونات. فعلى سبيل المثال، ينصهر كلوريد الصوديوم عند درجة حرارة تقارب **801°C**، بينما تتميز الأكاسيد الفلزية بدرجات انصهار أعلى بكثير، مما يجعلها مناسبة للاستخدام في الصناعات الحرارية والسيراميك والمواد المقاومة للحرارة (Shriver & Atkins, 2014).

2.الذوبانية Solubility

تعتمد ذوبانية المركبات غير العضوية على طبيعة الاصرة الكيميائية وقطبية المذيب. فالأملاح الأيونية غالبًا ما تذوب في الماء نتيجة إحاطة جزيئات الماء بالأيونات، بينما تكون قليلة الذوبان في المذيبات العضوية. وتُعد معرفة الذوبانية ضرورية في عمليات التحليل الكيميائي، وفصل المركبات، وتحضير المحاليل القياسية (Miessler et al., 2014).

3. التوصيل الكهربائي electrical conductivity

تُعد القدرة على توصيل الكهرباء من أهم خصائص المركبات غير العضوية. فالمعادن توصل الكهرباء في الحالة الصلبة نتيجة وجود إلكترونات حرة الحركة، بينما توصل الأملاح التيار الكهربائي عند انصهارها أو ذوبانها في الماء بسبب حركة الأيونات، في حين تكون ضعيفة التوصيل في الحالة الصلبة (Housecroft & Sharpe, 2018).

4. الخواص المغناطيسية Magnetic properties

تُظهر بعض المركبات غير العضوية خواصًا مغناطيسية تعتمد على عدد الإلكترونات غير المزدوجة في الفلز المركزي، ولذلك تُقسم إلى مركبات دايامغناطيسية وبارامغناطيسية. وتُستخدم هذه الخصائص في تصميم المواد المغناطيسية، وأجهزة التصوير بالرنين المغناطيسي، ووسائط تخزين البيانات (Miessler et al., 2014).

الخواص الكيميائية للمركبات غير العضوية

Chemical properties of inorganic compounds

تتميز المركبات غير العضوية بتنوع تفاعلاتها الكيميائية نتيجة اختلاف أنواع الاواصر والعناصر الداخلة في تركيبها، وتشمل أهم هذه التفاعلات ما يأتي:

1. تفاعلات الأكسدة والاختزال

oxidation-reduction reactions

تُعد تفاعلات الأكسدة والاختزال من أكثر التفاعلات شيوعًا في الكيمياء غير العضوية، وتعتمد على انتقال الإلكترونات بين المواد المتفاعلة، وتلعب دورًا أساسيًا في البطاريات، والتآكل، واستخلاص الفلزات، والتنفس الخلوي، والتمثيل الضوئي (Housecroft & Sharpe, 2018).

$$2Na_{(s)} + Cl_{2\,(g)} \longrightarrow 2NaCl\,(s)$$

2. تفاعلات التعادل Neutralization reactions

تحدث عند تفاعل الحمض مع القاعدة لتكوين ملح وماء، وتُستخدم بصورة واسعة في الصناعات الكيميائية، وتحضير الأملاح، ومعالجة المياه، وضبط الأس الهيدروجيني في العمليات الصناعية (Shriver & Atkins, 2014).

$$HCl_{(aq)} + NaOH_{(aq)} \longrightarrow NaCl_{(aq)} + H_2O_{(l)}$$

3. تفاعلات الترسيب precipitation reactions

تنتج عند اتحاد أيونات معينة في المحلول لتكوين راسب قليل الذوبان، وتُستخدم هذه التفاعلات في الكيمياء التحليلية للكشف عن الأيونات وفصلها، وفي تنقية المياه وإزالة الملوثات (Miessler et al., 2014).

$$AgNO_{3\,(aq)} + NaCl_{(aq)} \longrightarrow AgCl_{(s)}\downarrow + NaNO_{3\,(aq)}$$

4. تفاعلات المعقدات Complex interactions

تتفاعل الأيونات الفلزية مع الليكاندات لتكوين معقدات تناسقية مستقرة، وتُعد هذه التفاعلات أساسًا للكيمياء التناسقية الحديثة، إذ تُستخدم في التحليل الكيميائي، والحفز الصناعي، وتصميم الأدوية المضادة للأورام والميكروبات (Housecroft & Sharpe, 2018).

$$MnCl_2 .4H_2O + 2H_2O \longrightarrow [Mn(H_2O)_6]Cl_2$$

تطبيقات المركبات غير العضوية

Applications of inorganic compounds

أولاً: التطبيقات الطبية Medical applications

أصبحت المركبات غير العضوية جزءًا أساسيًا من الطب الحديث، إذ تدخل في تصنيع العديد من الأدوية ومواد التشخيص. فعلى سبيل المثال، يُستخدم **السيسبلاتين (Cisplatin)** في علاج أنواع متعددة من السرطان، كما تُستخدم مركبات الذهب في علاج بعض أمراض المناعة الذاتية، بينما تدخل مركبات الحديد والكالسيوم والمغنيسيوم والزنك في المستحضرات الدوائية والمكملات الغذائية لتعويض نقص العناصر الأساسية في الجسم (Housecroft & Sharpe, 2018).

كما تُستخدم الجسيمات النانوية لأكاسيد المعادن في أنظمة توصيل الدواء، والعلاج الضوئي، والتصوير الطبي، لما تمتلكه من مساحة سطحية كبيرة وخصائص فيزيائية وكيميائية مميزة (Ratner & Ratner, 2021).

ثانياً: التطبيقات الصناعية

Industrial applications

تمثل المركبات غير العضوية العمود الفقري للصناعات الحديثة، إذ تدخل في إنتاج الأسمنت، والزجاج، والسيراميك، والأسمدة، والدهانات، والبطاريات، وأشباه الموصلات، والسبائك المعدنية، والمواد المقاومة للتآكل. كما تُستخدم الأكاسيد الفلزية محفزاتٍ في العديد من الصناعات البتروكيميائية وصناعة البوليمرات (Shriver & Atkins, 2014).

ثالثاً: التطبيقات الزراعية

agricultural applications

تلعب المركبات غير العضوية دورًا مهمًا في تحسين الإنتاج الزراعي من خلال تصنيع الأسمدة المعدنية التي تزود النباتات بالعناصر الغذائية الأساسية مثل النيتروجين والفوسفور والبوتاسيوم، إضافة إلى العناصر الصغرى مثل الحديد والزنك والمنغنيز. كما تدخل بعض المركبات غير العضوية في تصنيع المبيدات الفطرية والمبيدات الحشرية المستخدمة في حماية المحاصيل الزراعية (Miessler et al., 2014).

رابعاً: تطبيقات الطاقة Energy applications

أصبحت المركبات غير العضوية من أهم المواد المستخدمة في تقنيات الطاقة الحديثة، حيث تدخل في تصنيع بطاريات الليثيوم-أيون، وخلايا الوقود، والخلايا الشمسية، والمكثفات الفائقة، والمواد الكهروضوئية. كما تُستخدم أكاسيد الفلزات الانتقالية في تطوير المحفزات اللازمة لإنتاج الهيدروجين وتخزين الطاقة المتجددة (Housecroft & Sharpe, 2018).

خامساً: التطبيقات البيئية

Environmental applications

تُستخدم المركبات غير العضوية في معالجة مياه الشرب ومياه الصرف الصحي، وإزالة المعادن الثقيلة والملوثات العضوية، وتنقية الهواء، وتحفيز تفاعلات التحلل الضوئي للملوثات باستخدام مواد مثل ثاني أكسيد التيتانيوم (TiO_2). كما تسهم المواد النانوية غير العضوية في تطوير تقنيات الاستشعار البيئي والكشف المبكر عن الملوثات (Ratner & Ratner, 2021).

دور الكيمياء غير العضوية في التكنولوجيا الحديثة

The role of inorganic chemistry in modern technology

شهدت الكيمياء غير العضوية تطورًا كبيرًا خلال العقود الأخيرة، وأصبحت ركيزة أساسية في مجالات التكنولوجيا المتقدمة. فقد أدى تصميم المواد غير العضوية ذات الخواص الإلكترونية والبصرية والمغناطيسية المتميزة إلى تطوير تقنيات حديثة تشمل الإلكترونيات الدقيقة، وأجهزة

الاستشعار، والحوسبة الكمية، والمواد الذكية، وتقنيات النانو، والهندسة الطبية الحيوية (Housecroft & Sharpe, 2018).

وفي المجال البحثي، أسهمت الكيمياء غير العضوية في تطوير معقدات فلزية جديدة ذات نشاط دوائي، ومحفزات عالية الكفاءة، ومواد نانوية متعددة الوظائف، وهو ما فتح آفاقًا واسعة للبحوث المتعلقة بعلاج السرطان، ومكافحة التآكل، والطاقة النظيفة، ومعالجة التلوث البيئي (Shriver & Atkins, 2014).

المبحث الثالث: الكيمياء العضوية وغير العضوية في التطبيقات العلمية

مقدمة introduction

شهدت العقود الأخيرة تطورًا كبيرًا في التكامل بين الكيمياء العضوية والكيمياء غير العضوية، إذ لم يعد هذان الفرعان منفصلين كما كان يُعتقد سابقًا، بل أصبحا يتداخلان في العديد من التطبيقات العلمية الحديثة. وقد أدى هذا التكامل إلى ظهور تخصصات جديدة، مثل الكيمياء العضوية الفلزية (Organometallic Chemistry) ، والكيمياء الحياتية غير العضوية (Bioinorganic Chemistry)، والكيمياء الطبية (Medicinal Chemistry)، وكيمياء المواد (Materials Chemistry)، والتي أسهمت في تطوير مواد ومركبات ذات خصائص فريدة لخدمة الطب والصناعة والطاقة والبيئة (Housecroft & Sharpe, 2018).

وتعتمد معظم الابتكارات العلمية الحديثة على دمج المركبات العضوية مع العناصر أو المعقدات غير العضوية للحصول على مواد تجمع بين المرونة البنيوية للمركبات العضوية والخواص الإلكترونية أو التحفيزية أو المغناطيسية للمركبات غير العضوية، مما أدى إلى تحسين كفاءة العديد من التطبيقات الصناعية والطبية (Crabtree, 2019).

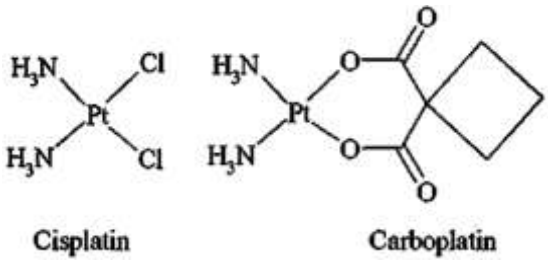
الكيمياء العضوية وغير العضوية في الصناعات الدوائية

Organic and inorganic chemistry in the pharmaceutical industry

تُعد الصناعات الدوائية من أكثر المجالات التي تعتمد على التكامل بين الكيمياء العضوية وغير العضوية، إذ تعتمد معظم الأدوية على هياكل عضوية تحتوي على مجموعات وظيفية مسؤولة

عن النشاط الحيوي، بينما تُستخدم العناصر الفلزية لتحسين الفاعلية العلاجية أو زيادة الاستقرار أو استهداف الخلايا المصابة (Patrick, 2017).

ومن أبرز الأمثلة على ذلك مركب الكربوبلاتين (Carboplatin) و مركب السيسبلاتين (Cisplatin)، و كما ذكرنا في المبحث السابق يُعد مركب السيسبلاتين من أشهر الأدوية المضادة للسرطان، حيث يتكون من أيون البلاتين المرتبط بجزيئات غير عضوية، و يكون اواصر تساهمية داخلية في DNA، خصوصًا DNA intrastrand cross-links، مما يؤدي إلى تشوه DNA وإعاقة النسخ والتضاعف وتفعيل مسارات الاستجابة للضرر الخلوي، مما يؤدي إلى موتها المبرمج (Rosenberg, 1985).



الشكل((1-3: الصيغة التركيبية لأشهر الادوية المضادة للسرطان

كما تُستخدم معقدات الذهب والروثينيوم والنحاس والزنك في تطوير أدوية مضادة للسرطان والالتهابات والبكتيريا، بينما تدخل المركبات العضوية في تصميم الجزيئات الدوائية التي تستهدف مستقبلات محددة داخل الجسم، مما يزيد من كفاءة العلاج ويقلل الآثار الجانبية (Housecroft & Sharpe, 2018).

الكيمياء العضوية وغير العضوية في المواد النانوية

Organic and inorganic chemistry in nanomaterials

أدى التطور في علم النانو إلى ظهور مواد هجينة (Hybrid Nanomaterials) ، تجمع بين المواد العضوية وغير العضوية في بنية واحدة، مما أكسبها خواصًا فيزيائية وكيميائية متقدمة لا يمكن الحصول عليها باستخدام أي منهما بصورة منفردة (Ratner & Ratner, 2021).

وتشمل هذه المواد:

- الجسيمات النانوية المغلفة بالبوليمرات.
- المواد النانوية القائمة على السيليكا.

- الجسيمات النانوية الذهبية المرتبطة بالليكاندات العضوية.
- الأطر الفلزية العضوية (MOFs).
- الأطر التساهمية العضوية (COFs).

وتستخدم هذه المواد في توصيل الدواء، والتصوير الطبي، وأجهزة الاستشعار الحيوية، وتنقية المياه، والحفز الكيميائي، وإزالة الملوثات البيئية (Furukawa et al., 2013).

الكيمياء العضوية وغير العضوية في الطاقة

Organic and inorganic chemistry in energy

يُعد قطاع الطاقة من أكثر المجالات استفادةً من التكامل بين الكيمياء العضوية وغير العضوية، إذ تدخل المركبات العضوية في تصنيع البوليمرات الموصلة والخلايا الشمسية العضوية، بينما تُستخدم الأكاسيد الفلزية والمواد النانوية غير العضوية في البطاريات وخلايا الوقود والخلايا الشمسية غير العضوية (Atkins & Jones, 2022).

كما تعتمد بطاريات الليثيوم-أيون الحديثة على مركبات غير عضوية في الأقطاب الكهربائية، في حين تُستخدم إلكتروليتات عضوية لتحسين انتقال الأيونات داخل البطارية، وهو ما أدى إلى زيادة كفاءة تخزين الطاقة وإطالة عمر البطاريات المستخدمة في الأجهزة الإلكترونية والسيارات الكهربائية (Goodenough & Park, 2013).

الكيمياء العضوية وغير العضوية في حماية البيئة

Organic and inorganic chemistry in environmental protection

تلعب الكيمياء دورًا رئيسيًا في مواجهة التحديات البيئية من خلال تصميم مواد أكثر استدامة وصديقة للبيئة. فقد استُخدمت المواد العضوية في إنتاج البوليمرات القابلة للتحلل الحيوي، بينما استُخدمت المواد غير العضوية في إزالة المعادن الثقيلة والملوثات العضوية من المياه والهواء (Housecroft & Sharpe, 2018).

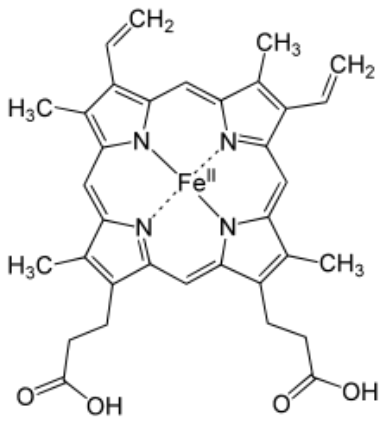
وتُستخدم الجسيمات النانوية لأكاسيد المعادن، مثل ثاني أكسيد التيتانيوم وأكسيد الزنك، في عمليات التحفيز الضوئي لتحليل الملوثات العضوية، كما تُستخدم المواد الهجينة العضوية–غير العضوية في امتصاص الغازات السامة وإزالة الملوثات الصناعية بكفاءة عالية (Ratner & Ratner, 2021).

الكيمياء العضوية وغير العضوية في الكيمياء التناسقية والكيمياء الطبية

Organic and inorganic chemistry in coordination chemistry and medicinal chemistry

تُعد الكيمياء التناسقية أحد أهم المجالات التي تربط بين الكيمياء العضوية وغير العضوية، إذ تعمل الليكاندات العضوية على الارتباط بالأيونات الفلزية لتكوين معقدات تمتلك خواصًا جديدة تختلف عن خواص مكوناتها الأصلية (Miessler et al., 2014).

وتجدر الإشارة إلى ان اهم المركبات التناسقية بيولوجيا هو الهيموغلوبين (Haemoglobin)، ويحتوي هذا المركب على أيون الحديد (2+) الذي يكون مركبات تناسقية مع ذرات النيتروجين من حلقة البورفيرين، ويرتبط محوريًا بذرة نيتروجين من الهيستيدين البروتيني. و يحمل الأوكسجين إلى الخلايا داخل جسم الكائن الحي Sánchez, M.& Dominguez (2017)



الشكل((2-3: الصيغة التركيبية للهيموكلوبين

حظيت ليكاندات الآزو باهتمام واسع لقدرتها على تكوين معقدات مستقرة مع العديد من الفلزات الانتقالية، مثل النحاس والنيكل والكوبلت والزنك والفضة و البلاديوم و البلاتين والذهب، وقد أظهرت هذه المعقدات نشاطًا واعدًا كمضادات للبكتيريا والفطريات والأورام، إضافة إلى

استخدامها كمثبطات للتآكل، ومحفزات كيميائية، ومواد حساسة للضوء، ومواد نانوية وظيفية (Housecroft & Sharpe, 2018).

الكيمياء العضوية وغير العضوية في الذكاء الاصطناعي والتصميم الجزيئي

Organic and inorganic chemistry in artificial intelligence and molecular design

أدى التطور في الذكاء الاصطناعي والحوسبة الكيميائية إلى إحداث نقلة نوعية في تصميم المركبات العضوية وغير العضوية، إذ أصبحت تقنيات التعلم الآلي والمحاكاة الجزيئية تُستخدم للتنبؤ بخواص المركبات قبل تحضيرها عمليًا، مما يقلل من الوقت والتكلفة اللازمة لتطوير المواد الجديدة (Jensen, 2017).

كما تُستخدم الحسابات النظرية، مثل **نظرية الكثافة الوظيفية (DFT)**، ودراسات الالتحام الجزيئي (Molecular Docking)، والمحاكاة الديناميكية الجزيئية، في تفسير التفاعلات الكيميائية ودراسة استقرار المركبات وتصميم أدوية ومواد متقدمة ذات كفاءة عالية، وقد أصبحت هذه التقنيات جزءًا أساسيًا من البحوث الحديثة في الكيمياء الطبية وكيمياء المواد (Al-Adilee K.J., 2024)

جدول (3-1): تطبيقات الكيمياء العضوية وغير العضوية

المجال	الكيمياء غير العضوية	الكيمياء العضوية
الطب	السيسبلاتين ومعقدات الذهب	المضادات الحيوية والأدوية
الصناعة	السبائك والسيراميك	البوليمرات والبلاستيك
الزراعة	الأسمدة المعدنية	المبيدات ومنظمات النمو
الطاقة	البطاريات والخلايا الشمسية	الوقود الحيوي
البيئة	معالجة المياه والملوثات	البوليمرات القابلة للتحلل
النانو	أكاسيد المعادن النانوية	البوليمرات النانوية

آفاق مستقبلية Future prospects

يتوقع أن يشهد التكامل بين الكيمياء العضوية وغير العضوية توسعًا كبيرًا خلال السنوات القادمة، خاصة في مجالات المواد الذكية، والطاقة المتجددة، والطب الشخصي، والهندسة الحيوية، والاقتصاد الدائري. كما سيؤدي استخدام الذكاء الاصطناعي والحوسبة عالية الأداء إلى تسريع اكتشاف المركبات الجديدة وتطوير مواد تمتلك خواصًا غير مسبوقة، مما يعزز دور الكيمياء في تحقيق أهداف التنمية المستدامة وتحسين جودة الحياة (Atkins & Jones, 2022).

خاتمة الفصل

تُعد الكيمياء العضوية والكيمياء غير العضوية ركيزتين أساسيتين في العلوم الكيميائية الحديثة، إذ يختص كل منهما بدراسة فئة محددة من المركبات، إلا أن التطورات العلمية أظهرت أن التكامل بينهما هو الأساس في تطوير معظم التقنيات الحديثة. وقد تناول هذا الفصل مفهوم المركبات العضوية وبنيتها، وتصنيفها، وخواصها، ومصادرها، وتطبيقاتها، كما استعرض المركبات غير العضوية، وتصنيفاتها، وخصائصها، وأهم استخداماتها في المجالات الصناعية والطبية والبيئية. وأخيرًا، أوضح الدور المتنامي للتكامل بين الكيمياء العضوية وغير العضوية في تطوير المواد المتقدمة، والمواد النانوية، والكيمياء الطبية، والطاقة، والبيئة، مما يؤكد أن مستقبل البحث العلمي يعتمد بصورة كبيرة على توظيف المعرفة المشتركة بين هذين الفرعين لتحقيق حلول مبتكرة للتحديات العلمية والتقنية.

المصادر

1. Atkins, P., & Jones, L. (2023). *Chemical Principles: The Quest for Insight* (8th ed.). W. H. Freeman.

2. Bruice, P. Y. (2017). *Organic Chemistry* (8th ed.). Pearson.

3. Clayden, J., Greeves, N., Warren, S., & Wothers, P. (2012). *Organic Chemistry* (2nd ed.). Oxford University Press.

4. Crabtree, R. H. (2019). *The Organometallic Chemistry of the Transition Metals* (7th ed.). Wiley.

5. Housecroft, C. E., & Sharpe, A. G. (2018). Inorganic Chemistry (5th ed.). Pearson.

6. McMurry, J. (2021). *Organic Chemistry* (10th ed.). Cengage Learning.

7. IUPAC. (2019). *Compendium of Chemical Terminology (The Gold Book).* International Union of Pure and Applied Chemistry.

8. Nelson, D. L., & Cox, M. M. (2021). *Lehninger Principles of Biochemistry* (8th ed.). W. H. Freeman.

9. Miessler, G. L., Fischer, P. J., & Tarr, D. A. (2014). *Inorganic Chemistry* (5th ed.). Pearson.

10. Ratner, M., & Ratner, D. (2002). *Nanotechnology: A Gentle Introduction to the Next Big Idea* (2nd ed.). Pearson.

11. Shriver & Atkins' Inorganic Chemistry, 5th ed., Oxford University Press, 2010

12. Cramer, C. J. (2013). *Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models* (2nd ed.). Wiley.

13. Furukawa, H., Cordova, K. E., O'Keeffe, M., & Yaghi, O. M. (2013). The chemistry and applications of metal-organic frameworks. *Science, 341*(6149), 1230444.

14. Goodenough, J. B., & Park, K. S. (2013). The Li-ion rechargeable battery: A perspective. *Journal of the American Chemical Society, 135*(4), 1167–1176.

15. Jensen, F. (2017). *Introduction to Computational Chemistry* (3rd ed.). Wiley.

16. Patrick, G. L. (2017). *An Introduction to Medicinal Chemistry* (6th ed.). Oxford University Press.

17. Rosenberg, B. (1985). Fundamental studies with cisplatin. *Cancer, 55*(10), 2303–2316.

18. Sánchez, M., Sabio, L., Gálvez, N., Capdevila, M., & Dominguez-Vera, J. M. "Iron chemistry at the service of life." *IUBMB life* 69.6 (2017): 382-388.

19. Al-Adilee, K. J., Jawad, S. H., Kyhoiesh, H. A. K., & Hassan, H. M. (2024). Synthesis, characterization, biological applications, and molecular docking studies of some transition metal complexes with azo dye ligand derived from 5-methyl imidazole. *Journal of Molecular Structure*, *1295*, 136695.

الفصل السادس

المركبات غير العضوية وتطبيقاتها

Inorganic Compounds and Their Applications

أ.م. لمى عبد القادر حاتم

جامعة تكريت - كلية التربية للعلوم الصرفة - قسم الكيمياء - العراق

الملخص

يتناول الفصل المركبات غير العضوية وتطبيقاتها، مع تركيز خاص على العناصر الانتقالية ومعقداتها والعلاقة بين تركيبها الإلكتروني وخواصها الكيميائية والفيزيائية. ويبدأ بتوضيح مفهوم العناصر الانتقالية وتوزيعها وخصائصها العامة، ثم يشرح تعدد حالات الأكسدة وتكوين المعقدات والروابط التناسقية وأثر الليكندات في البنية والاستقرار والتفاعل. وتوفر هذه المفاهيم أساسًا لفهم تنوع الاستخدامات التي يناقشها الفصل.

ويعرض الفصل تطبيقات المعقدات والمواد غير العضوية في الحفز والصناعة والمواد النانوية والطاقة والمعالجة البيئية والاستشعار. كما يناقش التداخل بين الكيمياء التناسقية والكيمياء العضوية الفلزية، وأثر تصميم الليكندات وتعديل البنية في الحصول على خصائص وظيفية مختلفة. وتربط الأمثلة الواردة بين التحكم على المستوى الجزيئي أو النانوي ومتطلبات الأداء في التطبيق، مع الاستناد إلى الدراسات المثبتة في قائمة المراجع.

ويمتد العرض إلى التطبيقات الحيوية والطبية لمعقدات الفلزات، ومنها معقدات البلاتين والنحاس والذهب والحديد والكوبالت، ودور الليكندات في الذوبانية والاستقرار والانتقائية والنشاط. وتُعرض هذه المسارات بوصفها جزءًا من المناقشة الكيميائية للدراسة، مع بقاء الفروق بين المركبات والتجارب ومراحل التطوير ضرورية لفهمها. وتتمثل مساهمة الفصل في وصل الأسس الإلكترونية والتناسقية بمجالات الاستخدام، وإظهار كيف يؤدي تغير التركيب إلى تغير الخواص والوظائف. ويقدم الملخص عرضًا لمحتوى الفصل ومراجعه، ولا يحول أمثلته الدوائية إلى توصيات علاجية أو اعتماد مستقل للفعالية السريرية.

الكلمات المفتاحية: المركبات غير العضوية؛ العناصر الانتقالية؛ المعقدات التناسقية؛ الليكندات؛ الحفز

Abstract

This chapter examines inorganic compounds and their applications, with particular emphasis on transition elements, their complexes, and the relationship between electronic structure and chemical and physical properties. It introduces transition elements and their general characteristics, then discusses oxidation states, complex formation, coordination bonds, and the influence of ligands on structure, stability, and reactivity. These concepts provide a foundation for understanding the applications reviewed.

The chapter considers complexes and inorganic materials in catalysis, industry, nanomaterials, energy, environmental treatment, and sensing. Connections between coordination and organometallic chemistry are discussed through ligand design and structural modification. Examples link control at molecular or nanoscale levels with functional performance requirements and are supported by the studies listed in the references.

Biological and medical applications are also examined, including complexes of platinum, copper, gold, iron, and cobalt. The discussion considers how ligands influence solubility, stability, selectivity, and activity. These topics remain part of the chapter's chemical review, for which distinctions among compounds, experimental settings, and development stages are important. The contribution is to connect electronic and coordination principles with application areas and to demonstrate how structural changes can alter properties and functions. This abstract describes the chapter and its cited literature; it does not convert the pharmaceutical examples into treatment recommendations or independent confirmation of clinical effectiveness. Its focus is the chemical reasoning connecting composition, behavior, and prospective use.

Keywords: Inorganic compounds; Transition elements; Coordination complexes; Ligands; Catalysis

1-المقدمة

تمثل كيمياء العناصر الانتقالية (Transition Metal Chemistry) أحد أكثر فروع الكيمياء غير العضوية تطورًا وأهمية، لما تتميز به هذه العناصر من خصائص إلكترونية وكيميائية فريدة تجعلها قادرة على تكوين معقدات تناسقية ذات تراكيب متنوعة ووظائف متعددة. ويرجع ذلك إلى الامتلاء الجزئي لمدارات d، الذي يمنح العناصر الانتقالية مرونة كبيرة في حالات الأكسدة، وقدرة عالية على تكوين روابط تناسقية مستقرة مع طيف واسع من الليكندات. وقد أدى هذا التنوع البنيوي والوظيفي إلى جعل معقدات العناصر الانتقالية محورًا أساسيًا في العديد من المجالات العلمية والتطبيقية، بدءًا من الكيمياء التحليلية والكيمياء الصناعية، ووصولًا إلى الكيمياء الحيوية والطب وتقنيات النانو والطاقة المتجددة.

شهدت العقود الأخيرة تطورًا كبيرًا في فهم طبيعة الروابط التناسقية وآليات تكوين المعقدات، وذلك بفضل التقدم في النظريات الإلكترونية مثل نظرية المجال البلوري (Crystal Field Theory)، ونظرية المجال الليكندي (Ligand Field Theory)، ونظرية المدارات الجزيئية (Molecular Orbital Theory). وقد ساعدت هذه النظريات في تفسير الخواص الفيزيائية والكيميائية لمعقدات العناصر الانتقالية، مثل اللون، والمغناطيسية، والاستقرار، والنشاط التحفيزي، والتفاعلية الكيميائية، مما أسهم في تطوير تطبيقات جديدة لهذه المعقدات في العديد من المجالات العلمية.((Desage-El Murr, 2024)

تُعد الليكندات (Ligands) المكون الثاني الرئيس في المعقدات التناسقية، إذ تمثل الجزيئات أو الأيونات القادرة على منح زوج أو أكثر من الإلكترونات إلى الفلز المركزي لتكوين رابطة تناسقية. ولا يقتصر دور الليكند على تثبيت الفلز داخل المعقد، بل يمتد إلى التحكم في خصائصه الإلكترونية والهندسية، وبالتالي تحديد نشاطه الكيميائي والبيولوجي. ولذلك أصبح تصميم الليكندات أحد أهم الاتجاهات البحثية في الكيمياء الحديثة، حيث يسعى الباحثون إلى تطوير ليكندات ذات خصائص إلكترونية وفراغية محددة تمكن من الحصول على معقدات ذات كفاءة عالية في التطبيقات الصناعية والطبية والبيئية.

ومن أبرز التطورات الحديثة في هذا المجال استخدام الليكندات متعددة الأسنان والليكندات الذكية القادرة على الاستجابة للمؤثرات الخارجية مثل الضوء أو التغير في الأس الهيدروجيني أو المجال الكهربائي، مما أتاح تصميم معقدات متقدمة تستخدم في أنظمة التوصيل الدوائي، والمجسات الكيميائية، والمواد الذكية، والمحفزات الانتقائية. كما أدى دمج معقدات العناصر الانتقالية مع المواد النانوية، مثل الجرافين والكربون المنشط والأنابيب الكربونية النانوية، إلى إنتاج مواد هجينة تمتلك خواصًا فيزيائية وكيميائية غير مسبوقة، الأمر الذي فتح آفاقًا واسعة في مجالات الطاقة النظيفة، ومعالجة المياه، والاستشعار الكيميائي، والتطبيقات الطبية.

وتبرز أهمية العناصر الانتقالية أيضًا في المجال الحيوي، إذ تدخل في تركيب العديد من الجزيئات الحيوية الأساسية، مثل الهيموغلوبين الذي يحتوي على الحديد، وفيتامين B12 الذي يحتوي على الكوبالت، إضافة إلى العديد من الإنزيمات المعتمدة على الزنك والنحاس والمنغنيز. ويؤكد ذلك أن كيمياء العناصر الانتقالية لا تقتصر على التطبيقات الصناعية، وإنما تمثل أساسًا لفهم العديد من العمليات الحيوية داخل الكائنات الحية.

2. تعريف العناصر الانتقالية وخصائصها العامة

تُعرف العناصر الانتقالية بأنها العناصر التي تمتلك ذرة أو أيونًا يحتوي على مستوى فرعي d غير مكتمل، وفق تعريف الاتحاد الدولي للكيمياء البحتة والتطبيقية (IUPAC). وتشغل هذه العناصر المجموعات (3–12) من الجدول الدوري، وتمتد عبر ثلاث سلاسل انتقالية رئيسية هي سلسلة 3d و4d و5d. وتمثل هذه العناصر مجموعة فريدة نظرًا لتنوع خصائصها الكيميائية والفيزيائية مقارنةً بعناصر المجموعات الرئيسة، ويرجع ذلك إلى طبيعة التوزيع الإلكتروني لمداراتها الخارجية، التي تمنحها قدرة كبيرة على تكوين روابط تناسقية وإظهار حالات أكسدة متعددة.

وتتميز العناصر الانتقالية بقدرتها على تكوين عدد كبير من المعقدات التناسقية نتيجة امتلاكها مدارات فارغة أو شبه ممتلئة تستطيع استقبال أزواج إلكترونية من الليكندات، كما تتميز بارتفاع الكثافة، ودرجات انصهار وغليان مرتفعة، وموصلية جيدة للحرارة والكهرباء، إضافة إلى نشاط تحفيزي كبير يجعلها تدخل في معظم العمليات الصناعية الحديثة.

ومن أهم خصائص العناصر الانتقالية تعدد حالات الأكسدة، إذ تستطيع المشاركة في تفاعلات الأكسدة والاختزال بسهولة نتيجة تقارب طاقات مدارات ns وn−1d، وهو ما يمنحها مرونة كيميائية كبيرة. كما تمتلك معظم معقداتها ألوانًا مميزة ناتجة عن انتقالات إلكترونات d–d أو انتقال الشحنة بين الفلز والليكند، وهي خاصية استُغلت في الكيمياء التحليلية، وتصنيع الأصباغ، والمجسات الكيميائية، والمواد البصرية.

وتتميز العناصر الانتقالية أيضًا بخواص مغناطيسية متنوعة تعتمد على عدد الإلكترونات غير المزدوجة في مدارات d، إذ يمكن أن تكون بارامغناطيسية أو ديامغناطيسية وفقًا للتركيب الإلكتروني وطبيعة الليكندات المرتبطة بها، وهو ما يجعلها ذات أهمية كبيرة في تصنيع المواد المغناطيسية وأجهزة تخزين البيانات والتطبيقات الإلكترونية الحديثة .

يُعد التركيب الإلكتروني للعناصر الانتقالية الأساس الذي تُبنى عليه معظم خصائصها الفيزيائية والكيميائية، إذ يفسر قدرتها على تكوين المعقدات التناسقية، وتعدد حالات الأكسدة، وامتلاكها خواصًا مغناطيسية وبصرية مميزة. وتختلف العناصر الانتقالية عن عناصر المجموعات الرئيسة في أن الامتلاء الإلكتروني يحدث تدريجيًا في المستوى الفرعي n−1d، بينما تبقى إلكترونات التكافؤ في المستوى ns. ويؤدي هذا الترتيب الإلكتروني إلى تقارب ملحوظ في مستويات الطاقة بين مدارات d وs، الأمر الذي يمنح هذه العناصر مرونة كبيرة في فقد أو اكتساب الإلكترونات أثناء التفاعلات الكيميائية ((Kojima, 2024)

ويُعبَّر عن التوزيع الإلكتروني العام للعناصر الانتقالية بالصيغة (n-1)d{1-10}ns{1-2}

إلا أن هذا التوزيع لا ينطبق بصورة مطلقة على جميع العناصر، إذ توجد استثناءات ناتجة عن ميل الذرة إلى الوصول إلى حالة أكثر استقرارًا. ومن أشهر هذه الاستثناءات عنصر الكروم (Cr)، الذي يمتلك التوزيع الإلكتروني $[Ar]3d^5 4s^1$ بدلًا من $[Ar]3d^4 4s^2$، وعنصر النحاس (Cu)، الذي يمتلك التوزيع $[Ar]3d^{10} 4s^1$ بدلًا من $[Ar]3d^9 4s^2$، ويُعزى ذلك إلى الاستقرار الإضافي الناتج عن الامتلاء النصفي أو الكامل لمدارات d. ويؤثر التركيب الإلكتروني بصورة مباشرة في الخواص الكيميائية للعناصر الانتقالية، إذ يؤدي وجود إلكترونات d غير المزدوجة إلى ظهور خواص مغناطيسية تختلف من عنصر إلى آخر، كما يفسر تنوع ألوان المعقدات الناتجة عن انتقال الإلكترونات بين مستويات الطاقة المنقسمة داخل المجال البلوري.

ومن الناحية الكيميائية، يسمح هذا التركيب الإلكتروني للعناصر الانتقالية بتكوين روابط تناسقية قوية مع الليكندات المختلفة، إذ تستقبل المدارات الفارغة أو شبه الممتلئة أزواجًا إلكترونية من الليكندات، مكونةً معقدات تختلف في الشكل الهندسي والاستقرار تبعًا لطبيعة الفلز المركزي والليكند المرتبط به. وقد بينت الدراسات الحديثة أن التحكم في التركيب الإلكتروني للمعقدات من خلال اختيار الليكند المناسب أصبح وسيلة فعالة لتعديل النشاط التحفيزي والخواص الضوئية والإلكترونية للمعقدات، وهو ما أدى إلى تطوير محفزات جديدة ومواد وظيفية تستخدم في الكيمياء الخضراء وتقنيات النانو والطاقة المتجددة .((Diéguez & Ollevier, 2024)

تقع العناصر الانتقالية في المجموعات (3–12) من الجدول الدوري الحديث، وتشغل المستويات الفرعية (d). ويزداد عدد إلكترونات المدار (d) تدريجيًا عند الانتقال عبر الدورة الواحدة، وهو ما يفسر التدرج في خواصها الكيميائية والفيزيائية. وتُقسم العناصر الانتقالية إلى نوعين:

أولًا: العناصر الانتقالية الرئيسية (First Transition Series) وتشمل عناصر الدورة الرابعة، وهي:

* السكانديوم (Sc)

* التيتانيوم (Ti)

* الفاناديوم (V)

* الكروم (Cr)

* المنغنيز (Mn)

* الحديد (Fe)

* الكوبالت (Co)

* النيكل (Ni)

* النحاس (Cu)

* الزنك (Zn)

ثانيًا: العناصر الانتقالية الداخلية (Inner Transition Elements)

وتضم سلسلتي اللانثانيدات والأكتينيدات، اللتين تشغل إلكتروناتهما المستوى الفرعي (f)، وتتميزان بخواص مغناطيسية ونووية مهمة.

3- التوزيع الإلكتروني للعناصر الانتقالية

يُعد التوزيع الإلكتروني العامل الأساسي الذي يفسر سلوك العناصر الانتقالية، إذ تبدأ إلكترونات المدار (d) بالامتلاء تدريجيًا أثناء الانتقال عبر عناصر الدورة الواحدة. ويمنح هذا الامتلاء الجزئي لهذه العناصر القدرة على فقد أو مشاركة أعداد مختلفة من الإلكترونات، وهو ما يؤدي إلى ظهور أكثر من حالة أكسدة للعنصر نفسه. ويفسر هذا التوزيع أيضًا قابلية العناصر الانتقالية لتكوين روابط تناسقية قوية مع الليكندات، إضافة إلى ظهور ألوان مميزة نتيجة انتقال الإلكترونات بين مستويات الطاقة داخل المدارات .

تُعد حالات الأكسدة من أهم الخصائص التي تميز العناصر الانتقالية عن غيرها من عناصر الجدول الدوري، إذ تمتلك معظمها القدرة على الوجود في أكثر من حالة أكسدة نتيجة تقارب طاقات إلكترونات ns وd. ويمنح هذا التقارب العناصر الانتقالية مرونة كبيرة في المشاركة في تفاعلات الأكسدة والاختزال، مما يجعلها من أكثر العناصر نشاطًا في العمليات الكيميائية والتحفيزية.

ويختلف عدد حالات الأكسدة باختلاف العنصر وموقعه في الجدول الدوري، فمثلًا يُظهر الحديد حالتي الأكسدة (2+) و(3+)، بينما يمتلك المنغنيز مدى واسعًا من حالات الأكسدة يمتد من (2+) إلى (7+)، أما الفاناديوم فيُظهر حالات أكسدة تتراوح بين (2+) و(5+). ويعتمد استقرار كل حالة أكسدة على طبيعة الليكند، والوسط الكيميائي، ودرجة الحرارة، والرقم التناسقي للمعقد.

وتؤدي حالات الأكسدة دورًا رئيسيًا في تحديد النشاط التحفيزي لمعقدات العناصر الانتقالية. ففي العديد من التفاعلات الصناعية، يعمل الفلز المركزي على الانتقال بين حالتي أكسدة مختلفتين أثناء الدورة التحفيزية، مما يسمح بنقل الإلكترونات بين المواد المتفاعلة وإتمام التفاعل بكفاءة عالية. وتُستخدم هذه الخاصية في عمليات الهدرجة، والأكسدة الانتقائية، وإنتاج البوليمرات، وتحضير المركبات الدوائية.

كما تؤثر حالة الأكسدة في لون المعقد وخواصه المغناطيسية. فعند تغير عدد إلكترونات d نتيجة تغير حالة الأكسدة، يتغير انقسام مستويات الطاقة، وبالتالي تختلف أطوال الموجات الضوئية

الممتصة، وهو ما يؤدي إلى ظهور ألوان مختلفة للمعقدات. وينطبق الأمر نفسه على الخواص المغناطيسية، إذ يعتمد عدد الإلكترونات غير المزدوجة على حالة الأكسدة، مما يحدد ما إذا كان المعقد بارامغناطيسيًا أو ديامغناطيسيًا. ((van Eldik, 2024)

وفي التطبيقات الطبية، تؤثر حالة الأكسدة في السمية والتوافق الحيوي للمعقدات. فقد أظهرت الدراسات أن بعض معقدات الروثينيوم ذات حالتي الأكسدة (+2) و(+3) تمتلك نشاطًا مضادًا للأورام مع سمية أقل من معقدات البلاتين التقليدية، مما جعلها محورًا للعديد من الأبحاث الحديثة في مجال العلاج الكيميائي

أما في التطبيقات البيئية، فتُستخدم حالات الأكسدة المختلفة للعناصر الانتقالية في عمليات إزالة الملوثات العضوية من المياه، إذ تعمل معقدات الحديد والكوبالت والمنغنيز على تنشيط المؤكسدات مثل بيروكسيد الهيدروجين والبيرسلفات لإنتاج جذور حرة ذات قدرة أكسدية عالية، قادرة على تحليل المركبات العضوية المعقدة وتحويلها إلى نواتج أقل .

وتبرز أهمية حالات الأكسدة أيضًا في تصميم المواد النانوية الوظيفية، حيث يؤثر تغير حالة أكسدة الفلز في النشاط الكهروكيميائي، وكفاءة تخزين الطاقة، وسرعة انتقال الإلكترونات، وهي خصائص أساسية في البطاريات الحديثة، وخلايا الوقود، والمكثفات الفائقة، وأجهزة الاستشعار الكيميائية.

ومن هذا ، أصبحت دراسة حالات الأكسدة والتحكم بها أحد أهم محاور البحث في كيمياء العناصر الانتقالية، إذ تتيح إمكانية تصميم معقدات ذات خصائص محددة تلائم التطبيقات الصناعية والطبية والبيئية المختلفة، كما تمثل الأساس العلمي لفهم آليات عمل المحفزات والمعقدات الحيوية.

4 . تعريف الليكندات وآلية ارتباطها بالفلزات .

تُعد الليكندات (Ligands) أحد المكونات الأساسية في كيمياء المعقدات التناسقية، إذ تمثل الجزيئات أو الأيونات التي تمتلك القدرة على منح زوج أو أكثر من الإلكترونات إلى الفلز المركزي لتكوين رابطة تناسقية (Coordinate Covalent Bond). ويتميز هذا النوع من الروابط بأن كلا الإلكترونين المكونين للرابطة يأتيان من الليكند، بينما يعمل الفلز المركزي بوصفه مستقبلًا لزوج الإلكترونات نتيجة امتلاكه مدارات فارغة أو منخفضة الطاقة. وقد شكلت دراسة الليكندات أساسًا لفهم كيمياء العناصر الانتقالية، نظرًا لما تؤديه من دور حاسم في تحديد

البنية الفراغية، والاستقرار، والخواص الإلكترونية، والمغناطيسية، والضوئية، والتحفيزية للمعقدات.

تُصنف الليكندات ضمن قواعد لويس (Lewis Bases)، في حين تُعد الفلزات الانتقالية أحماض لويس (Lewis Acids)، لأن الفلز المركزي يستقبل زوج الإلكترونات من الليكند. وتؤدي هذه العملية إلى تكوين معقد تناسقي مستقر، يعتمد استقراره على عوامل متعددة تشمل نوع الفلز المركزي، وحالة الأكسدة، والعدد التناسقي، وطبيعة الليكند من حيث القوة الإلكترونية والحجم الفراغي.

وتحتوي الليكندات على ذرات مانحة (Donor Atoms) تمتلك أزواجًا إلكترونية حرة، مثل النيتروجين والأكسجين والكبريت والفوسفور، وتُعد هذه الذرات مسؤولة عن تكوين الرابطة التناسقية مع الفلز المركزي. وقد تحتوي بعض الليكندات على أكثر من ذرة مانحة، مما يمكنها من الارتباط بالفلز في أكثر من موضع، وهو ما يؤدي إلى تكوين معقدات أكثر ثباتًا نتيجة ما يُعرف بتأثير المخلب ((Chelate Effect). (Pérez, 2024)

وتؤثر الليكندات بصورة مباشرة في توزيع الإلكترونات حول الفلز المركزي، فتؤدي إلى انقسام مدارات d بدرجات مختلفة تبعًا لقوة المجال الذي تولده. ويُعرف هذا التأثير باسم انقسام المجال البلوري (Crystal Field Splitting)، وهو المسؤول عن اختلاف ألوان المعقدات وخواصها المغناطيسية وسلوكها الكيميائي. ولذلك فإن اختيار الليكند المناسب يمثل خطوة أساسية في تصميم المعقدات المستخدمة في التطبيقات الصناعية والطبية والبيئي .

ومن الناحية التطبيقية، لا يقتصر دور الليكند على تثبيت الفلز داخل المعقد، بل يمتد إلى تنظيم التفاعلات الكيميائية والتحكم في سرعة التفاعل وانتقائيته. ففي المحفزات الصناعية، تعمل الليكندات على تعديل الكثافة الإلكترونية حول الفلز المركزي، مما يحسن من كفاءة التحفيز ويزيد من انتقائية التفاعل. وفي التطبيقات الطبية، تؤثر الليكندات في ذوبانية الدواء، وسهولة انتقاله داخل الجسم، وقدرته على الوصول إلى الخلايا المستهدفة، في حين تسهم في المجسات الكيميائية في زيادة حساسية وانتقائية الكشف عن الأيونات أو الجزيئات المختلفة.

وتشير الدراسات الحديثة إلى أن تصميم الليكندات لم يعد يعتمد فقط على قدرتها على تكوين الرابطة التناسقية، بل أصبح يركز أيضًا على تعديل خصائصها الإلكترونية والفراغية بما يتوافق

مع التطبيق المطلوب، سواء في الكيمياء الخضراء أو تقنية النانو أو الطب أو تخزين الطاقة. وقد أدى هذا التوجه إلى ظهور ليكندات ذكية قادرة على الاستجابة للتغيرات البيئية، مثل تغير الأس الهيدروجيني أو درجة الحرارة أو شدة الإضاءة، وهو ما أتاح تطوير معقدات ذات وظائف متقدمة تتجاوز الدور التقليدي للمعقدات التناسقية.

تُصنف الليكندات اعتمادًا على عدد الذرات المانحة التي تشارك في تكوين الروابط مع الفلز المركزي، وكذلك اعتمادًا على طبيعة التفاعل الإلكتروني بينها وبين الفلز. ويُعد هذا التصنيف من الأسس المهمة لفهم طبيعة المعقدات واستقرارها وخصائصها الفيزيائية والكيميائية.

4.1 الليكندات أحادية السن (Monodentate Ligands)

الليكندات أحادية السن هي أبسط أنواع الليكندات، إذ ترتبط بالفلز المركزي من خلال ذرة مانحة واحدة فقط، وبالتالي تكوّن رابطة تناسقية واحدة مع الفلز. وعلى الرغم من بساطة تركيبها، فإنها تُستخدم على نطاق واسع في تحضير المعقدات التناسقية، كما تؤدي دورًا مهمًا في التحكم بالعدد التناسقي والهندسة الفراغية للمعقد.

ومن أشهر الأمثلة على هذا النوع الماء (H_2O)، والأمونيا (NH_3)، وأيون الكلوريد (Cl^-)، وأيون السيانيد (CN^-)، وأول أكسيد الكربون (CO). وتختلف قوة ارتباط هذه الليكندات بالفلز تبعًا لقدرتها على منح الإلكترونات، وطبيعة الذرة المانحة، وقوة المجال البلوري الذي تولده. وتُستخدم الليكندات أحادية السن في العديد من التطبيقات الصناعية، ولا سيما في المحفزات المتجانسة، كما تدخل في تصنيع العديد من المعقدات الدوائية والمواد البصري .

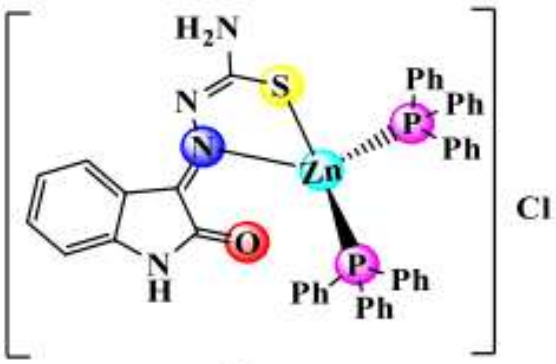
4.2 الليكندات ثنائية السن (Bidentate Ligands)

ترتبط الليكندات ثنائية السن بالفلز المركزي من خلال ذرتين مانحتين في الوقت نفسه، مما يؤدي إلى تكوين حلقة تناسقية تعرف باسم الحلقة المخلبية (Chelate Ring). ويمنح هذا النوع من الارتباط المعقد درجة عالية من الثبات مقارنةً بالليكندات أحادية السن، وهي الظاهرة المعروفة باسم تأثير المخلب (Chelate Effect).

ويُعد الإيثيلين ثنائي الأمين (Ethylenediamine, en) من أشهر الليكندات ثنائية السن، إذ يحتوي على ذرتي نيتروجين ترتبطان بالفلز المركزي، كما يُعد الأوكسالات (Oxalate) مثالًا آخر يرتبط من خلال ذرتي أكسجين.

وقد أثبتت الدراسات أن المعقدات المخلبية أكثر مقاومة للتفكك في المحاليل، الأمر الذي جعلها تستخدم على نطاق واسع في الكيمياء التحليلية، وإزالة المعادن الثقيلة من المياه، وتحضير الأدوية، وتصنيع المحفزات الصناعية.

ومن الليكاندات الحديثة (isatin-3-thiosemicarbazone (HITC التي تم تعقيدها مع فلز الخارصين وكان هذا الليكاند ثنائي السن المخلبي ((Al-Doori et al., 2022)

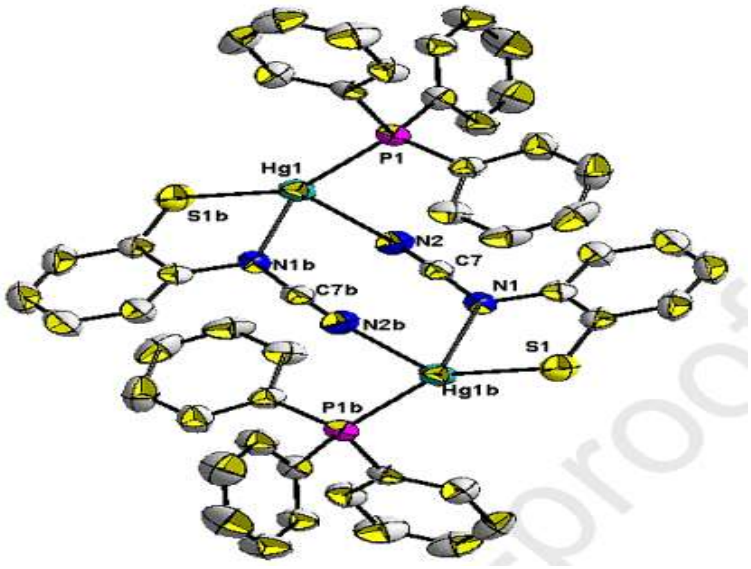


4.3 الليكندات متعددة الأسنان (Polydentate Ligands)

تحتوي الليكندات متعددة الأسنان على ثلاث ذرات مانحة أو أكثر، مما يسمح لها بالارتباط بالفلز المركزي في عدة مواضع، وتكوين معقدات شديدة الثبات. ويُعد حمض الإيثيلين ثنائي أمين رباعي الأسيتيك (EDTA) أشهر مثال على هذا النوع، إذ يحتوي على ستة مواقع مانحة تمكنه من الارتباط بعدد كبير من العناصر الانتقالية.

وتتميز الليكندات متعددة الأسنان بارتفاع ثوابت الثبات لمعقداتها مقارنةً بالليكندات أحادية وثنائية السن، ويرجع ذلك إلى انخفاض احتمالية انفصالها عن الفلز المركزي بعد تكوين المعقد .

و من انواع الليكاندات هي التي تسلك السلوك الجسري عند تعقيدها مع الفلزات كما في الليكاند 2-cyanoaminothiaphenolate والشكل البلوري للمعقد التالي يبين السلوك الجسري لمعقد [[Hg(L)(PPh3)]2 (Al-Doori et al., 2023))



5- نظرية المجال البلوري (Crystal Field Theory) تُعد نظرية المجال البلوري (Crystal Field Theory, CFT) من أهم النظريات التي أسهمت في تفسير خواص معقدات العناصر الانتقالية، وقد طُورت في ثلاثينيات القرن العشرين لتفسير ألوان المعقدات، وخواصها المغناطيسية، واستقرارها النسبي. وتعتمد هذه النظرية على مفهوم بسيط يتمثل في اعتبار الليكندات شحنات نقطية أو ثنائيات قطبية تؤثر بمجالها الكهربائي في إلكترونات مدارات d للفلز المركزي، دون الأخذ في الاعتبار الطبيعة التساهمية للرابطة التناسقية. ورغم بساطة هذا النموذج، فقد نجح في تفسير عدد كبير من الظواهر الكيميائية والفيزيائية، وأصبح نقطة الانطلاق لتطوير نظريات أكثر تقدمًا مثل نظرية المجال الليكندي ونظرية المدارات الجزيئية.

1-5 الفرضيات الأساسية لنظرية المجال البلوري

تعتمد النظرية على مجموعة من الفرضيات، وقد ساعدت هذه الفرضيات في تفسير سبب اختلاف ألوان المعقدات، ووجود معقدات ذات خواص مغناطيسية مختلفة رغم احتوائها على الفلز نفسه. أهمها: -

* الفلز المركزي يمثل أيونًا موجبًا تحيط به الليكندات.

* الليكندات تؤثر في الفلز من خلال مجال كهربائي فقط.

* لا يحدث تداخل مداري أو مشاركة فعلية للإلكترونات بين الفلز والليكند.

* يؤدي اقتراب الليكندات إلى انقسام مدارات d إلى مستويات مختلفة في الطاقة.

* يعتمد مقدار الانقسام على طبيعة الليكند، وحالة أكسدة الفلز، والهندسة الفراغية للمعقد.

2-5 انقسام مدارات d

في الذرة الحرة تكون مدارات d الخمسة متساوية في الطاقة (Degenerate). ولكن عند اقتراب الليكندات من الفلز المركزي ينشأ مجال كهربائي يؤدي إلى رفع هذا التساوي، فتنقسم المدارات إلى مجموعتين تختلفان في الطاقة.

في المعقدات ذات الشكل الثماني السطوح (Octahedral Complexes)، تنقسم المدارات إلى:

* المجموعة t_2g، وتشمل المدارات dxy وdxz وdyz، وتكون أقل طاقة.

* المجموعة eg، وتشمل المدارين dx^2-y^2 وdz^2، وتكون أعلى طاقة نتيجة تعرضها لتنافر أكبر مع الليكندات.

ويُعرف الفرق بين المجموعتين باسم طاقة انقسام المجال البلوري (Δo)، وهي من أهم العوامل التي تحدد خواص المعقد. وتزداد قيمة Δo بزيادة: قوة الليكند. وحالة أكسدة الفلز. والانتقال من عناصر السلسلة الأولى إلى الثانية والثالثة. أما في المعقدات رباعية السطوح، فإن ترتيب مستويات الطاقة يكون معكوسًا، كما تكون قيمة الانقسام أصغر، ولذلك تكون معظم هذه المعقدات عالية اللف المغزلي.

6- الأوربيتالات الذرية والتهجين في المعقدات الانتقالية وفق نظرية رابطة التكافؤ

6.1 الأوربيتالات الذرية في العناصر الانتقالية

تتميز العناصر الانتقالية بامتلاكها مدارات ذرية متعددة، تشمل مدارات s وp وd، وتعد مدارات d العامل الرئيس المسؤول عن الخصائص الكيميائية والفيزيائية لهذه العناصر. وطبقًا لنظرية رابطة التكافؤ (Valence Bond Theory)، فإن تكوين المعقدات التناسقية يعتمد على تداخل المدارات الفارغة أو شبه الممتلئة للفلز الانتقالي مع الأزواج الإلكترونية الحرة الممنوحة من الليكندات، مما يؤدي إلى تكوين روابط تناسقية مستقرة.

تمتلك مدارات d خمسة أوربيتالات متساوية في الطاقة في الذرة الحرة، وهي:

* d_xy

* d_yz

* d_xz

* d_x2-y2

* d_z2

وتستوعب هذه الأوربيتالات مجتمعة عشرة إلكترونات، بواقع إلكترونين كحد أقصى في كل أوربيتال وفق مبدأ باولي، بينما يخضع توزيع الإلكترونات لقاعدة هوند قبل حدوث الازدواج الإلكتروني وإن طبيعة إشغال هذه الأوربيتالات تؤثر بصورة مباشرة في عدد الإلكترونات غير المزدوجة، وبالتالي تحدد الخواص المغناطيسية والهندسة الفراغية للمعقدات الانتقالية.

6.2 مفهوم التهجين في نظرية رابطة التكافؤ

يفسر مفهوم التهجين كيفية إعادة ترتيب المدارات الذرية للفلز المركزي لتكوين مجموعة من المدارات المهجنة المتكافئة في الطاقة والشكل والاتجاه الفراغي. وتستقبل هذه المدارات الأزواج الإلكترونية القادمة من الليكندات لتكوين روابط تناسقية قوية . وتختلف طبيعة التهجين باختلاف عدد الليكندات وقوة المجال البلوري ونوع الفلز المركزي، وهو ما يؤدي إلى ظهور أشكال هندسية مختلفة للمعقدات مثل الشكل رباعي السطوح، والمربع المستوي، وثماني السطوح. (Pérez, 2022))

6.3.1 التهجين الداخلي (Inner Orbital Complexes)

في حالة الليكندات قوية المجال مثل: NH_3 , , CO CN^- * تحدث عملية ازدواج للإلكترونات داخل مدارات 3d، مما يؤدي إلى إخلاء مداري d للمشاركة في عملية التهجين. وينتج عن ذلك تهجين من النوع d^2sp^3 حيث تشترك مدارات d الداخلية. و مدار s واحد. وثلاثة مدارات .p ويتكون ستة أوربيتالات مهجنة تتجه نحو رؤوس شكل ثماني السطوح. وتمتاز هذه المعقدات بانخفاض عدد الإلكترونات غير المزدوجة، ولذلك تعرف بالمعقدات منخفضة اللف المغزلي (Low Spin Complexes)، وغالبًا ما تكون دايامغناطيسية أو ذات بارامغناطيسية ضعيفة.

6.3.2 التهجين الخارجي (Outer Orbital Complexes)

عندما يكون الليكند ضعيف المجال مثل F^- و Cl^- و Br^- و H_2O فإن طاقة المجال البلوري لا تكون كافية لإحداث ازدواج للإلكترونات داخل مدارات 3d، ولذلك تستخدم المدارات 4d أو المدارات الخارجية في عملية التهجين. وينتج تهجين , sp^3d^2 ويحافظ الفلز على عدد أكبر من الإلكترونات غير المزدوجة، فتكون هذه المعقدات مرتفعة اللف المغزلي (High Spin Complexes)، وتتميز بخواص بارامغناطيسية واضحة.

3-6 التهجين في المعقدات رباعية التناسق

في المعقدات رباعية التناسق يمكن أن يظهر نوعان من التهجين تبعًا لطبيعة الفلز والليكند.

أولاً: التهجين -: dsp^2 يعطي هذا التهجين شكلاً مربعًا مستويًا (Square Planar)، ويظهر بصورة خاصة في معقدات الفلزات ذات التوزيع الإلكتروني d^8 مثل: و Pt^{2+} و Pd^{2+} و Au^{3+} وتتميز هذه المعقدات غالبًا بثباتها الكيميائي المرتفع وخواصها التحفيزية المميزة.

ثانيًا: التهجين -: sp^3 يعطي شكلاً رباعي السطوح (Tetrahedral)، ويظهر غالبًا مع الليكندات الضعيفة والفلزات التي لا يحدث فيها ازدواج للإلكترونات. (Malav & Ray, 2025))

4-6 العلاقة بين الأوربيتالات والخواص المغناطيسية

تعد الخواص المغناطيسية للمعقدات نتيجة مباشرة لتوزيع الإلكترونات داخل أوربيتالات d. فكلما ازداد عدد الإلكترونات غير المزدوجة ازدادت قيمة العزم المغناطيسي، بينما يؤدي ازدواج الإلكترونات إلى انخفاض المغناطيسية أو اختفائها . ولهذا السبب تستخدم القياسات المغناطيسية كوسيلة مهمة لتحديد نوع التهجين والهندسة الفراغية للعديد من المعقدات الانتقالية. (Matus & Häkkinen, 2023))

7-نظرية رابطة التكافؤ

نجحت نظرية رابطة التكافؤ في تفسير العديد من الجوانب الأساسية للمعقدات الانتقالية، ومنها:

* تفسير أنواع التهجين المختلفة.

* التنبؤ بالأشكال الهندسية للمعقدات.

* تفسير السلوك المغناطيسي اعتمادًا على عدد الإلكترونات غير المزدوجة.

* توضيح آلية تكوين الرابطة التناسقية بين الفلز والليكند.

إلا أن النظرية تعاني من بعض القيود، إذ لا تقدم تفسيرًا لانقسام أوربيتالات d في المجال البلوري، ولا تستطيع تفسير ألوان المعقدات أو أطياف الامتصاص الإلكتروني أو فروق الثبات بين المعقدات المختلفة. وقد أدت هذه القيود إلى تطوير نظرية المجال البلوري (Crystal Field Theory) . ثم نظرية المجال الليكندي (Ligand Field Theory)، اللتين قدمتا تفسيرًا أكثر شمولًا للتركيب الإلكتروني والخواص الطيفية والمغناطيسية للمعقدات الانتقالية .

8-الأوربيتالات الجزيئية (Molecular Orbitals) في المعقدات الانتقالية

تُعد نظرية الأوربيتالات الجزيئية (Molecular Orbital Theory, MOT) من أكثر النظريات تطورًا في تفسير طبيعة الروابط الكيميائية في المعقدات الانتقالية، إذ تعتمد على مفهوم اندماج الأوربيتالات الذرية للفلز المركزي مع أوربيتالات الليكند لتكوين أوربيتالات جزيئية تمتد على كامل المعقد، بدلاً من اقتصار الإلكترونات على ذرات منفردة كما تفترض نظرية رابطة التكافؤ.

وتفترض هذه النظرية أن كل إلكترون داخل المعقد يتحرك في مجال ناتج عن جميع الأنوية والإلكترونات، مما يؤدي إلى تكوين مستويات طاقة جديدة تختلف عن مستويات الطاقة الأصلية للأوربيتالات الذرية. ولذلك أصبحت نظرية الأوربيتالات الجزيئية أساسًا لتفسير العديد من الخصائص الإلكترونية والطيفية والمغناطيسية للمعقدات الانتقالية.((Yao et al., 2025)

- تكوين الأوربيتالات الجزيئية

عند اقتراب الليكندات من الفلز المركزي، تتداخل الأوربيتالات الذرية ذات التماثل والطاقة المتقاربة لتكوين نوعين من الأوربيتالات:

* الأوربيتالات الرابطة (Bonding Molecular Orbitals) : تمتلك طاقة أقل من الأوربيتالات الذرية الأصلية، ويؤدي إشغالها بالإلكترونات إلى زيادة ثبات المعقد .

* الأوربيتالات المضادة للرابطة (Antibonding Molecular Orbitals) : تمتلك طاقة أعلى، ويؤدي إشغالها بالإلكترونات إلى إضعاف الرابطة وتقليل ثبات المعقد .

كما قد توجد أوربيتالات غير رابطة (Non-bonding Orbitals) عندما لا يحدث تداخل فعال بين بعض الأوربيتالات الذرية.

- الأوربيتالات σ و π في المعقدات الانتقالية

تنشأ الروابط في المعقدات الانتقالية نتيجة نوعين رئيسيين من التداخل بين أوربيتالات الفلز والليكند:

أولاً: الأوربيتالات سيغما (σ-Orbitals)

تتكون عندما يحدث تداخل مباشر بين أوربيتالات الليكند والفلز على محور الرابطة، ويعد هذا النوع المسؤول عن تكوين معظم الروابط التناسقية الأساسية في المعقدات. وتتميز روابط σ بقوة تداخلها واستقرارها، ولذلك تمثل الدعامة الأساسية للبنية التناسقية.

ثانياً: الأوربيتالات باي (π-Orbitals)

تنشأ نتيجة التداخل الجانبي بين أوربيتالات الفلز وأوربيتالات الليكند. وقد يكون الليكند:

* مانحًا للإلكترونات π-Donor π مثل الهاليدات وOH^-، حيث يزيد الكثافة الإلكترونية على الفلز.

* مستقبلًا للإلكترونات π-Acceptor πمثل CO وCN^-، حيث يستقبل كثافة إلكترونية من الفلز عبر ظاهرة الارتباط الخلفي (π Back Bonding)، مما يزيد من قوة الرابطة واستقرار المعقد. ((Liu et al., 2022)

1-8 أهمية الأوربيتالات الجزيئية في تفسير خواص المعقدات

ساهمت نظرية الأوربيتالات الجزيئية في تفسير عدد كبير من الخصائص التي لم تستطع نظرية رابطة التكافؤ تفسيرها، ومن أهمها:

1. تفسير قوة الروابط التناسقية بين الفلز والليكند.
2. تفسير اختلاف ثبات المعقدات الانتقالية.
3. تفسير ألوان المعقدات الناتجة عن انتقالات الإلكترونات بين مستويات الطاقة.
4. تفسير الخواص المغناطيسية اعتمادًا على توزيع الإلكترونات في الأوربيتالات الجزيئية.

5. تفسير ظاهرة الارتباط الخلفي (Back Bonding) في معقدات أول أكسيد الكربون والسيانيد.

6. تفسير النشاط التحفيزي للعديد من المعقدات المستخدمة في التفاعلات الصناعية والدوائية.((Brunca da Silva et al., 2025)

2-8 العلاقة بين نظرية رابطة التكافؤ ونظرية الأوربيتالات الجزيئية

على الرغم من أن نظرية رابطة التكافؤ توفر تفسيرًا مبسطًا لكيفية تكوين الروابط التناسقية، فإنها لا تفسر بصورة كاملة الخصائص الإلكترونية والطيفية للمعقدات الانتقالية. أما نظرية الأوربيتالات الجزيئية فتقدم نموذجًا أكثر شمولًا، إذ تعتمد على تفاعل جميع الأوربيتالات الذرية للفلز والليكند لتكوين منظومة إلكترونية متكاملة، مما يجعلها أكثر دقة في تفسير التركيب الإلكتروني والخواص الكيميائية والفيزيائية للمعقدات. وقد أسهم الدمج بين نظرية الأوربيتالات الجزيئية ونظرية المجال الليكندي في تطوير الفهم الحديث لكيمياء المعقدات الانتقالية، وأصبح هذا الإطار النظري أساسًا لتصميم المعقدات المستخدمة في التحفيز الصناعي، والمواد النانوية، والمستحضرات الدوائية، والعلاج الكيميائي للسرطان .

9-الخصائص العامة للعناصر الانتقالية

تمتلك العناصر الانتقالية مجموعة من الخصائص التي جعلتها من أكثر عناصر الجدول الدوري أهمية في التطبيقات العلمية والصناعية، حيث ازدادت أهمية العناصر الانتقالية بصورة كبيرة مع التطور العلمي الحديث، وأصبحت تدخل في العديد من المجالات منها

1. تعدد حالات الأكسدة

تتميز العناصر الانتقالية بإمكانية وجودها في أكثر من حالة أكسدة نتيجة تقارب طاقات إلكترونات المدارين (s) و(d)، مما يسمح لها بالمشاركة في تفاعلات الأكسدة والاختزال بكفاءة عالية.

2. تكوين المعقدات التناسقية

تمتلك أيونات العناصر الانتقالية مدارات فارغة تستقبل أزواجًا إلكترونية من الليكندات، مما يؤدي إلى تكوين معقدات تناسقية مستقرة تختلف في الشكل الهندسي والخواص الكيميائية.

3 تكوين مركبات ملونة

تتميز معظم مركبات العناصر الانتقالية بألوان مختلفة ناتجة عن انتقال الإلكترونات بين مستويات الطاقة في المدارات (d)، ويعتمد اللون على نوع العنصر وحالة الأكسدة وطبيعة الليكند المرتبط به.

4. النشاط التحفيزي

تُعد العناصر الانتقالية من أفضل المحفزات الكيميائية، إذ تدخل في العديد من العمليات الصناعية مثل إنتاج الأمونيا، وتكرير النفط، وتصنيع البوليمرات، وتسريع تفاعلات الأكسدة والاختزال.

5 الخواص المغناطيسية

تعتمد الخواص المغناطيسية للعناصر الانتقالية على عدد الإلكترونات غير المزدوجة الموجودة في المدار (d)، ولذلك قد تكون بعض مركباتها بارامغناطيسية، بينما تكون أخرى ديامغناطيسية.

6. الخصائص الفيزيائية

تمتاز العناصر الانتقالية بارتفاع درجات الانصهار والغليان والكثافة، إضافة إلى قدرتها العالية على توصيل الحرارة والكهرباء، وهو ما يجعلها موادًا مهمة في التطبيقات الهندسية والصناعية.

* تصنيع السبائك المقاومة للتآكل.

* إنتاج المحفزات الكيميائية في الصناعات البتروكيميائية.

* تصنيع البطاريات الحديثة وخلايا الوقود.

* إنتاج المغناطيسات الدائمة.

* الصناعات الدوائية والمركبات العلاجية.

* تقنيات معالجة المياه وإزالة الملوثات.

* تصنيع الحساسات الكيميائية والإلكترونية.

* تطبيقات تقنية النانو والمواد الذكية. (Reactions and catalytic applications..., 2025))

تقنية النانو وتطبيقاتها في كيمياء العناصر الانتقالية والليكندات

2.1 مقدمة

شهدت العقود الأخيرة تطورًا ملحوظًا في مجال تقنية النانو، وأصبحت هذه التقنية أحد أهم الاتجاهات البحثية في الكيمياء الحديثة وعلوم المواد، لما توفره من إمكانات كبيرة في تصميم مواد ذات خصائص فيزيائية وكيميائية غير تقليدية. ويُعد دمج تقنية النانو مع كيمياء العناصر الانتقالية والمعقدات التناسقية من المجالات الواعدة، إذ أدى إلى إنتاج مواد نانوية ذات كفاءة عالية في التطبيقات الطبية والبيئية والصناعية والطاقة.

ويرجع هذا الاهتمام إلى أن العناصر الانتقالية تمتلك مدارات إلكترونية غير مكتملة تمنحها القدرة على تكوين معقدات مستقرة مع الليكندات، وعند تحويل هذه المواد إلى أبعاد نانوية تتغير خصائصها بشكل ملحوظ نتيجة زيادة المساحة السطحية وظهور التأثيرات الكمية، مما يؤدي إلى تحسين النشاط التحفيزي والخواص البصرية والمغناطيسية والكهربائية.

2.2 مفهوم تقنية النانو

تقنية النانو هي فرع من فروع العلوم يهتم بتصميم وتحضير ودراسة المواد التي يتراوح أحد أبعادها بين (100–1) نانومتر. وعند هذا المقياس تظهر خصائص جديدة تختلف عن خصائص المادة في حالتها السائبة، نتيجة زيادة نسبة الذرات السطحية وظهور التأثيرات الإلكترونية المرتبطة بصغر الحجم. وقد أصبحت تقنية النانو أداة أساسية في تطوير المواد المتقدمة، لما توفره من إمكانية التحكم في حجم الجسيمات وشكلها وتركيبها الكيميائي بما يتناسب مع التطبيق المطلوب.

2.3 خصائص المواد النانوية

تتميز المواد النانوية بعدد من الخصائص التي تجعلها أكثر كفاءة مقارنة بالمواد التقليدية، وتعد هذه الخصائص أساسًا لتطوير تطبيقات متقدمة في الكيمياء والطب والهندسة البيئية.ومن أهمها:

1. ارتفاع نسبة المساحة السطحية إلى الحجم.
2. زيادة النشاط الكيميائي والتحفيزي.
3. تحسن الخصائص الضوئية والإلكترونية.
4. امتلاك خصائص مغناطيسية مميزة.
5. تحسين سرعة انتقال الإلكترونات.

6. سهولة تعديل السطح باستخدام الليكندات أو البوليمرات.

2.4 الجسيمات النانوية للعناصر الانتقالية

تُعد الجسيمات النانوية للعناصر الانتقالية من أكثر المواد دراسةً في الوقت الحاضر، إذ تمتلك قدرة عالية على أداء وظائف متعددة نتيجة خصائصها الإلكترونية الفريدة. وتشمل أهم هذه الجسيمات:

* جسيمات أكسيد الحديد النانوية (Fe_3O_4).

* جسيمات أكسيد النحاس (CuO).

* جسيمات أكسيد الزنك (ZnO).

* جسيمات أكسيد النيكل (NiO).

* جسيمات أكسيد الكوبالت (Co_3O_4).

* جسيمات ثاني أكسيد التيتانيوم (TiO_2).

وتستخدم هذه المواد في التحفيز الكيميائي، وأجهزة الاستشعار، ومعالجة المياه، والتطبيقات الطبية،

وخلايا الطاقة. ((Metal-drug coordination nanoparticles..., 2024))

10-دور الليكندات في تحضير المواد النانوية

تؤدي الليكندات دورًا مهمًا في تحضير الجسيمات النانوية، إذ تعمل على تنظيم نمو البلورات ومنع تجمعها، مما يؤدي إلى الحصول على جسيمات متجانسة في الحجم والشكل. كما تتحكم طبيعة الليكند في استقرار الجسيمات النانوية وخواصها السطحية، ويمكن من خلال اختيار الليكند المناسب تحسين النشاط التحفيزي أو زيادة التوافق الحيوي للمواد المستخدمة في التطبيقات الطبية. وتستخدم ليكندات مثل EDTA، والإيثيلين ثنائي الأمين، والأحماض الكربوكسيلية، والبوليمرات العضوية لتعديل أسطح الجسيمات النانوية وتحسين أدائها. (Bernhardt & Lawrance, 2025))

11-المعقدات النانوية للعناصر الانتقالية

تمثل المعقدات النانوية مرحلة متقدمة في الكيمياء التناسقية، حيث ترتبط أيونات العناصر الانتقالية بليكندات عضوية أو غير عضوية داخل تراكيب نانوية ذات مساحة سطحية مرتفعة وخصائص وظيفية متطورة. وقد أدى ذلك إلى استخدامها في مجالات متنوعة مثل التحفيز غير المتجانس، والتوصيل الدوائي، وتصنيع الحساسات الكيميائية . وتتميز هذه المعقدات بما يأتي:

* ثبات كيميائي مرتفع.

* نشاط تحفيزي كبير.

* قدرة عالية على نقل الإلكترونات.

* خصائص مغناطيسية محسنة.

* كفاءة مرتفعة في التفاعلات الحيوية.

2.7 طرق تحضير المواد النانوية : .

تتعدد طرق تحضير الجسيمات النانوية، ويمكن تصنيفها إلى طرائق فيزيائية وكيميائية وحيوية.

أولًا: الطرق الفيزيائية

* الطحن الميكانيكي.

* التبخير والتكثيف.

* الترسيب الفيزيائي للبخار.

ثانيًا: الطرق الكيميائية

* الترسيب الكيميائي.

* طريقة السول–جل.

* التحلل الحراري.

* الاختزال الكيميائي.

ثالثًا: الطرق الحيوية)الخضراء(

تعتمد على استخدام المستخلصات النباتية أو الكائنات الحية الدقيقة في اختزال أيونات الفلزات، وتمتاز بانخفاض السمية وتقليل استهلاك المواد الكيميائية الخطرة، مما يجعلها متوافقة مع مبادئ الكيمياء الخضراء.

2.8 تطبيقات المواد النانوية للعناصر الانتقالية .

أولًا: التطبيقات الطبية

تستخدم المواد النانوية في:

* توصيل الأدوية بصورة موجهة.

* علاج الأورام.

* التصوير بالرنين المغناطيسي.

* تصنيع المواد المضادة للبكتيريا والفطريات.

ثانيًا: التطبيقات البيئية

تشمل:

* إزالة المعادن الثقيلة من المياه.

* تحلل الملوثات العضوية.

* تنقية مياه الصرف الصناعي.

* امتصاص الغازات الضارة.

ثالثًا: التطبيقات الصناعية

تدخل في:

* المحفزات الصناعية.

* تصنيع البطاريات.

* الخلايا الشمسية.

* الحساسات الكيميائية.

* الطلاءات المقاومة للتآكل.

رابعًا: تطبيقات الطاقة

تستخدم في:

* إنتاج الهيدروجين.

* خلايا الوقود.

* تخزين الطاقة.

* بطاريات الليثيوم المتقدمة. ((Aziz et al., 2025)

12-استخدام معقدات العناصر الانتقالية في تحفيز الكربون المنشط وتطبيقاته

المقدمة

شهدت العقود الأخيرة اهتمامًا متزايدًا بتطوير مواد تحفيزية عالية الكفاءة تجمع بين النشاط الكيميائي والاستقرار وسهولة إعادة الاستخدام. ويُعد الكربون المنشط (Activated Carbon) من أكثر المواد استخدامًا في المجالات البيئية والصناعية لما يمتلكه من مساحة سطحية كبيرة، وبنية مسامية متطورة، واستقرار كيميائي وحراري مرتفع، مما يجعله حاملًا مثاليًا للمواد الفعالة. وفي المقابل، تمتلك معقدات العناصر الانتقالية خصائص إلكترونية وتناسقية مميزة ناتجة عن امتلاء مداراتها (d)، الأمر الذي يمنحها نشاطًا تحفيزيًا مرتفعًا في العديد من التفاعلات الكيميائية.

إن دمج معقدات العناصر الانتقالية مع الكربون المنشط يؤدي إلى تكوين مواد محفزة غير متجانسة (Heterogeneous Catalysts) تجمع بين كفاءة الامتزاز التي يوفرها الكربون المنشط والنشاط التحفيزي الذي توفره المعقدات الفلزية. وقد أسهم هذا الدمج في تطوير تقنيات متقدمة لمعالجة المياه، وإزالة الملوثات العضوية، وتحفيز التفاعلات الكيميائية، وإنتاج الطاقة النظيفة، مما جعل هذه المواد محورًا رئيسيًا في أبحاث الكيمياء الخضراء وتكنولوجيا النانو. (Trudu et al., 2015))

13- تطبيقات معقدات العناصر الانتقالية والليكندات في علاج السرطان: الأسس الكيميائية والتطورات الحديثة

1. المقدمة

يُعد السرطان من أبرز التحديات الصحية التي تواجه العالم في الوقت الحاضر، إذ تشير الإحصاءات العالمية إلى استمرار ارتفاع معدلات الإصابة والوفيات، الأمر الذي دفع الباحثين إلى تطوير استراتيجيات علاجية أكثر كفاءة وأقل سمية.

وقد برزت معقدات العناصر الانتقالية كواحدة من أهم المنصات الدوائية في علاج الأورام، لما تمتلكه من خصائص إلكترونية وكيميائية تسمح بالتفاعل الانتقائي مع المكونات الحيوية داخل الخلية السرطانية، وخاصة الحمض النووي (DNA) والبروتينات والإنزيمات المنظمة لدورة الخلية. ويُعزى ذلك إلى قدرة الفلزات الانتقالية على الوجود في حالات أكسدة متعددة، وتكوين روابط تناسقية مستقرة مع الليكندات، مما يتيح تصميم معقدات ذات نشاط دوائي قابل للتعديل والتحسين.

ويؤدي الليكند دورًا محوريًا في هذه المعقدات، إذ لا يقتصر على تثبيت الفلز المركزي، بل يتحكم في الذوبانية، والثبات، والانتقائية، والخواص الدوائية والحركية للمعقد. ولذلك أصبح تصميم الليكندات أحد أهم محاور البحث في الكيمياء الطبية الحديثة، حيث تُستخدم الليكندات متعددة الأسنان، وقواعد شيف (Schiff Bases)، والفوسفينات، والكربينات غير المتجانسة (NHCs) للحصول على معقدات أكثر فاعلية وأقل سمية مقارنة بالأدوية التقليدية. حيث شهدت السنوات الأخيرة (2020–2025) تطورًا ملحوظًا في هذا المجال، مع ظهور معقدات تعتمد على عناصر انتقالية مثل الروثينيوم، والذهب، والنحاس، والكوبالت، والحديد، إلى جانب معقدات البلاتين التقليدية. وقد ساهمت هذه التطورات في توسيع نطاق التطبيقات العلاجية، خاصة في علاج الأورام المقاومة للعلاج الكيميائي التقليدي، كما أظهرت نتائج واعدة عند دمجها مع تقنيات النانو والعلاج الموجه والعلاج الضوئي الديناميكي. ((Kumar Singh et al., 2023)

2. الأساس الكيميائي لعمل معقدات العناصر الانتقالية المضادة للسرطان

تعتمد فعالية معقدات العناصر الانتقالية في علاج السرطان على خصائصها الإلكترونية والبنائية الفريدة، والتي تمنحها القدرة على التفاعل مع الجزيئات الحيوية داخل الخلية بصورة تختلف عن المركبات العضوية التقليدية. ويُعد الفلز المركزي مصدر النشاط الحيوي للمعقد، بينما تتحكم الليكندات في توجيه هذا النشاط وتنظيمه. ويؤدي هذا التكامل بين الفلز والليكند إلى إنتاج معقدات تمتلك خصائص علاجية يصعب تحقيقها باستخدام الجزيئات العضوية وحدها.

عند دخول المعقد إلى الجسم، يمر بعدة مراحل تبدأ بالانتقال في مجرى الدم، ثم الوصول إلى النسيج الورمي، يليه دخول الخلية السرطانية عبر الانتشار أو النقل النشط، ثم التفاعل مع الجزيئات الحيوية داخل الخلية. وتلعب الليكندات دورًا رئيسيًا في كل مرحلة من هذه المراحل، إذ تؤثر في ذوبانية المعقد، واستقراره في الوسط الحيوي، وقدرته على عبور الأغشية الخلوية، وانتقائيته تجاه الخلايا السرطانية.

تتميز البيئة الدقيقة للورم بخصائص تختلف عن الأنسجة السليمة، مثل انخفاض قيمة الأس الهيدروجيني، ونقص الأكسجين، وزيادة تركيز بعض الإنزيمات والجزيئات المختزلة. وقد استُغلت هذه الاختلافات في تصميم معقدات انتقالية مزودة بليكندات تستجيب لهذه الظروف، بحيث تبقى مستقرة أثناء انتقالها في الدم، ثم تتحلل أو تُفعّل عند وصولها إلى الورم، مما يزيد من فعالية العلاج ويقلل من آثاره الجانبية. ((Liu et al., 2022)

3 آليات التأثير الخلوي لمعقدات العناصر الانتقالية

تمارس معقدات العناصر الانتقالية تأثيرها المضاد للأورام عبر عدة آليات متداخلة، تختلف باختلاف الفلز المركزي ونوع الليكند. ويُعد استهداف الحمض النووي (DNA) من أكثر الآليات شيوعًا، حيث ترتبط بعض المعقدات بقواعد الحمض النووي، ولا سيما قواعد الجوانين، مؤدية إلى تكوين روابط تعيق عملية تضاعف الـDNA ونسخه، مما يؤدي إلى توقف انقسام الخلية السرطانية وتحفيز موتها المبرمج.

وتستطيع بعض المعقدات أيضًا الارتباط بالبروتينات والإنزيمات المنظمة لدورة الخلية، مما يؤدي إلى تعطيل الوظائف الحيوية الضرورية لاستمرار نمو الورم. كما تُظهر معقدات النحاس والذهب والروثينيوم قدرة على تثبيط إنزيمات مسؤولة عن حماية الخلايا السرطانية من الإجهاد التأكسدي، وهو ما يؤدي إلى تراكم الجذور الحرة داخل الخلية وحدوث تلف في الميتوكوندريا والأغشية الخلوية.

ومن الآليات المهمة كذلك تحفيز إنتاج أنواع الأكسجين التفاعلية (Reactive Oxygen Species, ROS)، التي تؤدي إلى أكسدة البروتينات والدهون والأحماض النووية، مسببةً خللًا في التوازن التأكسدي داخل الخلية. وعندما يتجاوز هذا الخلل قدرة الخلية على الإصلاح، يتم

تنشيط مسارات الموت الخلوي المبرمج (Apoptosis)، وهو الهدف الرئيس لمعظم العلاجات المضادة للسرطان. كما بينت الدراسات الحديثة أن بعض المعقدات تستطيع التأثير في البيئة الدقيقة للورم من خلال تثبيط تكوين الأوعية الدموية الجديدة (Angiogenesis)، وتقليل قدرة الخلايا السرطانية على الانتشار وتكوين النقائل، وهو ما يمنحها أهمية كبيرة في علاج الأورام المتقدمة. (Ali et al., 2025))

4- معقدات البلاتين ودورها في علاج السرطان

تُعد معقدات البلاتين (Platinum Complexes) من أكثر المركبات الفلزية نجاحًا في علاج الأورام، وقد شكل اكتشاف النشاط المضاد للسرطان لمركب السيسبلاتين (Cisplatin) نقطة تحول في الكيمياء الطبية وعلاج الأورام. ويُستخدم السيسبلاتين منذ سبعينيات القرن الماضي في علاج العديد من السرطانات، مثل سرطان الخصية والمبيض والمثانة والرئة والرأس والعنق، وذلك بفضل قدرته العالية على تثبيط انقسام الخلايا السرطانية من خلال الارتباط المباشر بالحمض النووي.

4.1 السيس بلاتين (Cisplatin)

يحتوي السيس بلاتين على ذرة بلاتين في حالة الأكسدة (2+) مرتبطة بليكندين من الأمونيا وأيونين من الكلوريد في ترتيب مربع مستوٍ. وعند دخوله إلى الخلية، تنخفض تراكيز أيونات الكلوريد مقارنة بالبلازما، مما يؤدي إلى استبدالها بجزيئات الماء، فتتكون صورة نشطة من المعقد قادرة على الارتباط بذرات النيتروجين في قواعد الجوانين والأدينين داخل الحمض النووي. وينتج عن هذا الارتباط تكوين روابط عرضية (Cross-links) بين سلاسل الـDNA، مما يمنع تضاعفه ونسخه ويؤدي إلى توقف دورة الخلية في مرحلة G2/M، ثم تنشيط مسارات الموت الخلوي المبرمج (Apoptosis). ويُعد هذا التأثير السبب الرئيس للفعالية العلاجية العالية للسيسبلاتين. ورغم نجاحه السريري، فإن استخدام السيسبلاتين يرتبط بظهور آثار جانبية مهمة، من أبرزها السمية الكلوية، والسمية العصبية، وضعف السمع، والغثيان والقيء، إضافة إلى إمكانية تطور مقاومة دوائية لدى بعض الأورام نتيجة انخفاض دخول الدواء إلى الخلية أو زيادة آليات إصلاح الحمض النووي.

4.2 الكاربوبلاتين (Carboplatin)

طُوِّر الكاربوبلاتين بهدف تقليل السمية المرتبطة بالسيسبلاتين مع الحفاظ على الفعالية العلاجية. ويتميز بوجود ليكند ثنائي الكربوكسيلات يمنحه ثباتًا أعلى وسرعة تحلل أقل، مما يؤدي إلى إطلاق أيونات البلاتين بصورة أبطأ داخل الخلية. ويستخدم الكاربوبلاتين بصورة واسعة في علاج سرطان المبيض والرئة والثدي، ويتميز بانخفاض السمية الكلوية والعصبية مقارنة بالسيسبلاتين، إلا أن تأثيره المثبط لنخاع العظم يكون أكثر وضوحًا، الأمر الذي يتطلب متابعة مستمرة لصورة الدم أثناء العلاج. ((Goswami et al., 2025)

5- معقدات النحاس والذهب والحديد والكوبالت

شهدت السنوات الأخيرة اهتمامًا متزايدًا بمعقدات النحاس والذهب والحديد والكوبالت بوصفها بدائل أو مكملات لمعقدات البلاتين، وذلك بفضل خصائصها الكيميائية والحيوية وإمكانية تعديل نشاطها باستخدام ليكندات مصممة خصيصًا. (Reactions and catalytic applications..., 2025))

أولًا: معقدات النحاس

يُعد النحاس عنصرًا أساسيًا في العديد من الإنزيمات الحيوية، ولذلك تتميز معقداته بتوافق حيوي جيد نسبيًا. وقد أثبتت معقدات النحاس المرتبطة بليكندات الفينانثرولين، والبيبيريدين، وقواعد شيف، قدرة كبيرة على تثبيط نمو الخلايا السرطانية من خلال:

* تحفيز إنتاج أنواع الأكسجين التفاعلية (ROS).

* إحداث تلف في الحمض النووي.

* تعطيل وظيفة الميتوكوندريا.

* تنشيط مسارات الموت الخلوي المبرمج.

* تثبيط بعض الإنزيمات الضرورية لاستمرار نمو الورم.

وتتميز هذه المعقدات بإمكانية تعديل نشاطها بسهولة عبر تغيير طبيعة الليكند، مما يسمح بتطوير مركبات ذات انتقائية أعلى تجاه أنواع معينة من السرطان.

ثانيًا: معقدات الذهب

برزت معقدات الذهب، خاصة معقدات الذهب(I) والذهب(III)، ((Al-Jibori et al., 2021) كمرشحة قوية في علاج الأورام المقاومة للعلاج التقليدي. وتختلف آلية عملها عن معقدات البلاتين، إذ تعتمد بصورة رئيسية على تثبيط إنزيم Thioredoxin Reductase، وهو إنزيم يلعب دورًا أساسيًا في حماية الخلايا السرطانية من الإجهاد التأكسدي. ويؤدي تثبيط هذا الإنزيم إلى تراكم الجذور الحرة داخل الخلية، واضطراب التوازن التأكسدي، ثم تحفيز الموت الخلوي. كما أظهرت بعض معقدات الذهب قدرة على تثبيط هجرة الخلايا السرطانية وتقليل تكوين النقائل، وهو ما يجعلها واعدة في علاج الأورام المتقدمة. ((Jirjes et al., 2022)

ثالثًا: معقدات الحديد والكوبالت

تحظى معقدات الحديد والكوبالت باهتمام متزايد بسبب انخفاض سميتها النسبية وتوافر هذه العناصر في الجسم. وقد استُخدمت هذه المعقدات في تطوير أنظمة دوائية تستجيب لنقص الأكسجين داخل الورم، بحيث يبقى المعقد غير نشط في الأنسجة الطبيعية ثم يتحول إلى الصورة النشطة داخل البيئة الورمية. كما أظهرت بعض معقدات الكوبالت قدرة على تثبيط تكوين الأوعية الدموية المغذية للورم، في حين استُخدمت معقدات الحديد في تطوير نظم علاجية تعتمد على تحفيز تفاعلات الأكسدة داخل الخلية السرطانية لإحداث تلف انتقائي في مكوناتها الحيوية. (Al-Jibori et al., 2020))

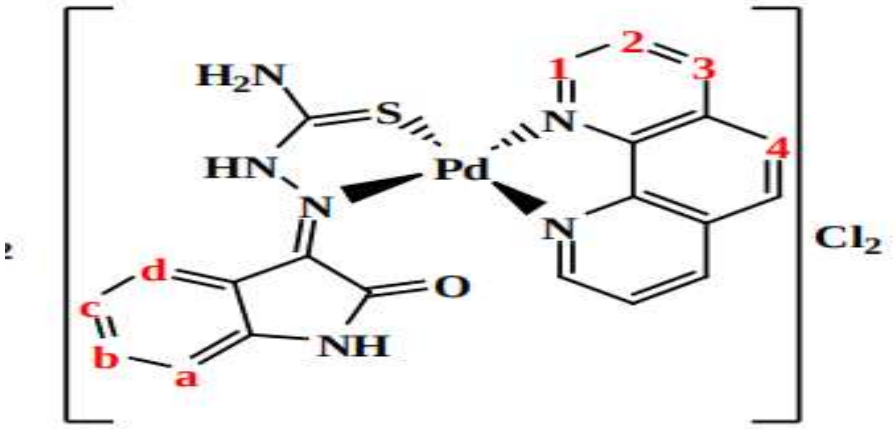
14-دور الليكندات في تحسين كفاءة معقدات العناصر الانتقالية المضادة للسرطان

يُعد تصميم الليكندات أحد أهم المحاور التي ركزت عليها الأبحاث الحديثة في الكيمياء الطبية، إذ لم يعد دور الليكند مقتصرًا على تثبيت الفلز المركزي داخل المعقد، وإنما أصبح عنصرًا فعالًا في تحديد السلوك البيولوجي للدواء وكفاءته العلاجية وانتقائيته تجاه الخلايا السرطانية. ويؤثر الليكند بصورة مباشرة في الخصائص الفيزيائية والكيميائية للمعقد، مثل الذوبانية، والثبات، والخواص الإلكترونية، وسرعة انتقاله داخل الجسم، وقدرته على اختراق الأغشية الخلوية، مما يجعله عاملًا حاسمًا في نجاح العلاج القائم على معقدات العناصر الانتقالية.

وتُظهر الدراسات الحديثة أن تعديل التركيب البنائي لليكند يؤدي إلى تغيرات جوهرية في النشاط الدوائي للمعقد، إذ يمكن التحكم في الكثافة الإلكترونية حول الفلز المركزي، مما يؤثر في قوة الرابطة مع الجزيئات الحيوية داخل الخلية. كما يمكن زيادة الليبوفيلية (Lipophilicity) للمعقد

من خلال إدخال مجاميع عضوية مناسبة، الأمر الذي يحسن من نفاذه عبر الأغشية الخلوية ويزيد من تراكمه داخل الورم. وفي المقابل، يمكن تصميم ليكندات ذات طبيعة محبة للماء لزيادة ذوبانية المعقد وتقليل ترسبه في الأنسجة السليمة.

فقد تم تحضير معقدات البلاتين من قبل فريق العمل Luma A. Al-Doori معقدات البلاديوم التي وجدت لها فعالية طبيه عالية ضد الامراض والمايكروبات المدروسة . (Al-Obaidi et al., 2025))



ومن أهم الاتجاهات الحديثة استخدام الليكندات متعددة الأسنان (Polydentate Ligands)، التي تمتلك أكثر من موقع مانح للإلكترونات، مما يؤدي إلى تكوين معقدات أكثر استقرارًا نتيجة تأثير المخلب (Chelate Effect). وتتميز هذه المعقدات بمقاومة أعلى للتحلل المبكر داخل الوسط الحيوي، الأمر الذي يسمح بوصول نسبة أكبر من الدواء إلى النسيج الورمي قبل تحرر الفلز المركزي. وقد استُخدمت قواعد شيف (Schiff Bases) والليكندات المحتوية على النيتروجين والكبريت والفوسفور على نطاق واسع في هذا المجال، لما توفره من مرونة تركيبية وإمكانية تعديل خواصها بما يتناسب مع التطبيق العلاجي.

كما شهدت السنوات الأخيرة اهتمامًا متزايدًا بتطوير الليكندات الذكية (Smart Ligands)، وهي ليكندات مصممة للاستجابة لمحفزات محددة داخل البيئة الورمية، مثل انخفاض قيمة الأس الهيدروجيني، أو زيادة نشاط بعض الإنزيمات، أو نقص الأكسجين. وتبقى هذه الليكندات مستقرة أثناء انتقالها في الدورة الدموية، ثم تتحلل أو تغير بنيتها عند وصولها إلى الورم، مما يؤدي إلى

إطلاق الفلز النشط في الموقع المستهدف فقط، وهو ما يسهم في تقليل السمية الجهازية وزيادة الفعالية العلاجية.

وأظهرت دراسات حديثة أن دمج الليكندات مع الجزيئات الفلورية أو المواد الحساسة للضوء يسمح بتطوير معقدات تجمع بين التشخيص والعلاج فيما يعرف بالعلاج التشخيصي (Theranostics)، حيث يمكن تتبع توزيع الدواء داخل الجسم باستخدام تقنيات التصوير الحيوي، مع الاحتفاظ بفعاليته العلاجية في الوقت نفسه. ويمثل هذا المجال أحد أكثر الاتجاهات تطورًا في الكيمياء الطبية الحديثة، لما يوفره من إمكانية متابعة استجابة الورم للعلاج بصورة آنية (Al-Jibori & Al-Doori, 2026)) .

المراجع

1. Al-Doori, L. A., Al-Jibori, S. A., Al-Janabi, A. S. M., Alheety, M. A., & Irzoqi, A. A. (2023). Synthesis, spectroscopic and hydrogen storage studies of mono or bimercury(II) mixed ligand complexes of amines with 2-cyanoamino thiophenolate ligand. Journal of Molecular Structure, 1291, 135992. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2023.135992

2. Al-Doori, L. A., Irzoqi, A. A., Jirjes, M. H., Al-Obaidi, H. A., & Alheety, M. A. (2022). Zn(II)-isatin-3-thiosemicarbazone complexes with phosphines or diamines for hydrogen storage and anticancer studies. Inorganic Chemistry Communications, 140, 109454. https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.109454

3. Al-Jibori, M. A., & Al-Doori, L. A. (2026). Novel mercury(II) benzotriazole mixed ligand of phosphine complexes: Synthesis, characterization. Macromolecular Symposia, 415(1), e70191. https://doi.org/10.1002/masy.70191

4. Al-Jibori, S. A., Al-Doori, L. A., Al-Janabi, A. S. M., Alheety, M. A., Akbaş, H., & Karadag, A. (2020). Novel Hg(II) and Pd(II) benzotriazole (Hbta) complexes: Synthesis, characterization, X-ray crystal structure of [Pd(PPh3)(μ-bta)Cl]2·DMSO and thermodynamic study of their H2 storage. Journal of Molecular Structure, 1207, 127832. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.127832

5. Al-Jibori, S. A., Al-Doori, L. A., Al-Janabi, A. S. M., Alheety, M. A., Wagner, C., & Karadag, A. (2021). Mercury(II) mixed ligand complexes of phosphines or amines with 2-cyanoamino thiophenolate ligands formed via monodeprotonation and carbon–sulfur bond cleavage of 2-aminobenzothiazole. X-ray crystal structures of [Hg(SC6H4NCN)(PPh3)]2 and [Hg(SC6H4NCN)(Ph2PCH2PPh2)]2. Polyhedron, 206, 115349. https://doi.org/10.1016/j.poly.2021.115349

6. Al-Obaidi, A. H., Al-Doori, L. A., Irzoqi, A., & Yasir, M. (2025). Synthesis and characterisation of novel palladium(II) isatin-3-thiosemicarbazone complexes with phosphine and phenanthroline ligands: In vitro evaluation against cancer cell lines and bacterial strains. Journal of the Turkish Chemical Society Section A: Chemistry, 12(3), 181–188. https://doi.org/10.18596/jotcsa.1646336

7. Ali, H., Orooji, Y., Ajmal, Z., et al. (2025). A comprehensive review based on the synthesis, properties, morphology, functionalization, and potential applications of transition metal nitrides. Coordination Chemistry Reviews, 526, 216353.

8. Aziz, K. N., Ahmed, K. M., Omer, R. A., Qader, A. F., & Abdulkareem, E. I. (2025). A review of coordination compounds: Structure, stability, and biological significance. Reviews in Inorganic Chemistry, 45(1), 1–19.

9. Bernhardt, P. V., & Lawrance, G. A. (2025). Introduction to coordination chemistry (2nd ed.).

10. Brunca da Silva, A., Reis, E. A., Ribeiro, C., & Mascaro, L. H. (2025). Overcoming stability hurdles of transition metal phosphides for hydrogen evolution: A review. ChemSusChem.

11. Desage-El Murr, M. (Ed.). (2024). Redox-active ligands: Concepts and catalysis. Wiley-VCH.

12. Diéguez, M., & Ollevier, T. (Eds.). (2024). Earth-abundant transition metal catalyzed reactions. Elsevier.

13. Goswami, M., Pal, D., Ghosh, M. K., et al. (2025). Bimetallic nanoparticles: A comprehensive review of synthesis methods and their potential application. ChemistrySelect.

14. Jirjes, H. M., Irzoqi, A. A., Al-Doori, L. A., Alheety, M. A., & Singh, P. K. (2022). Nano cadmium(II)-benzyl benzothiazol-2-ylcarbamodithioate complexes: Synthesis, characterization, anti-cancer and antibacterial studies. Inorganic Chemistry Communications, 135, 109110. https://doi.org/10.1016/j.inoche.2021.109110

15. Kojima, T. (Ed.). (2024). Redox-based catalytic chemistry of transition metal complexes. Royal Society of Chemistry.

16. Kumar Singh, V., Kumar Singh, V., Mishra, A., Varsha, Abha Singh, A., Prasad, G., et al. (2023). Recent advancements in coordination compounds and their potential clinical application in the management of diseases: An up-to-date review. Polyhedron, 241, 116485.

17. Liu, J., Wang, Z., Cheng, P., Zaworotko, M. J., Chen, Y., & Zhang, Z. (2022). Post-synthetic modifications of metal–organic cages. Nature Reviews Chemistry, 6, 339–356.

18. Malav, R., & Ray, S. (2025). Recent advances in the synthesis and versatile applications of transition metal complexes featuring Schiff base ligands. RSC Advances, 15, 22889–22914.

19. Matus, M. F., & Häkkinen, H. (2023). Understanding ligand-protected noble metal nanoclusters at work. Nature Reviews Materials, 8, 372–389.

20. Metal-drug coordination nanoparticles and hydrogels for enhanced delivery. (2024). Advanced Materials.

21. Pérez, P. J. (Ed.). (2022). Advances in organometallic chemistry (Vol. 78). Elsevier.

22. Pérez, P. J. (Ed.). (2024). Advances in organometallic chemistry (Vol. 81). Elsevier.

23. Reactions and catalytic applications of metal and metal oxide nanoparticles in organic and inorganic chemistry. (2025). Inorganica Chimica Acta, 588, 122842.

24. Trudu, F., Amato, F., Vaňhara, P., Pivetta, T., Peña-Méndez, E. M., & Havel, J. (2015). Coordination compounds in cancer: Past, present and perspectives. Journal of Applied Biomedicine, 13(2), 79–103.

25. van Eldik, R. (Ed.). (2024). Photochemistry and photophysics of earth-abundant transition metal complexes. Elsevier.

26. Yao, Q., Zhu, M., Yang, Z., Song, X., Yuan, X., Zhang, Z., Hu, W., & Xie, J. (2025). Molecule-like synthesis of ligand-protected metal nanoclusters. Nature Reviews Materials, 10, 89–108.

الفصل السابع

الكيمياء الحياتية وبنية العمليات الحيوية

Biochemistry and the Structure of Biological Processes

م.م. لبنى عامر عبد الوهاب
جامعة الكرخ للعلوم - العراق

الملخص

يتناول الفصل الكيمياء الحياتية وبنية العمليات الحيوية، مع تركيز خاص على البروتينات بوصفها أساسًا للوظائف والتفاعلات داخل الأنظمة الحية. ويبدأ بتعريف الكيمياء الحياتية وأهميتها وصلتها بدراسة الجزيئات الرئيسية، ومنها البروتينات والكربوهيدرات والدهون والأحماض النووية. ويبين كيف توفر العلاقة بين التركيب والخواص إطارًا لفهم النشاط الحيوي على المستوى الجزيئي والخلوي.

ويعرض الفصل بنية البروتين ومستويات تنظيمها وصلتها بالوظيفة، ثم يناقش تفاعلات البروتينات وأدوارها في الإنسان والنبات والحيوان والكائنات الدقيقة. ويتناول العمليات التي تسهم البروتينات في تنظيمها، ومنها التحفيز الإنزيمي ونقل الإشارة والتعبير الجيني والاستجابة المناعية والأيض والنقل عبر الأغشية. وتساعد الرسوم والصيغ في توضيح التداخل بين شكل الجزيء وتفاعله والعملية التي يشارك فيها، بدل الفصل بين البنية الكيميائية والأثر الوظيفي.

ويمتد العرض إلى أدوات البحث المختبرية والحاسوبية في دراسة البروتينات، ثم يناقش الاتجاهات المرتبطة بالذكاء الاصطناعي والطب الشخصي واكتشاف الأدوية والبروتينات العلاجية وعلم البروتيوميات. وتُعرض هذه المجالات ضمن مراجعة علمية للمفاهيم والأدوات والآفاق التي يتناولها المصدر، دون تحويلها إلى نتائج تجريبية جديدة للمؤلفة. وتتمثل مساهمة الفصل في وصل المدخل العام للكيمياء الحياتية بدراسة أكثر تحديدًا للبروتينات وعملياتها ووسائل بحثها. ويتيح هذا التنظيم قراءة وظائف الأنظمة الحية من منظور جزيئي، مع إبقاء شروط الأدوات وحدود التفسير والمراجع المصاحبة أساسًا لفهم الأمثلة والتطبيقات الواردة في المتن.

الكلمات المفتاحية: الكيمياء الحياتية؛ البروتينات؛ البنية والوظيفة؛ العمليات الحيوية؛ البروتيوميات

Abstract

This chapter examines biochemistry and biological processes with particular emphasis on proteins as central components of function and interaction in living systems. It introduces biochemistry and its relationship with the major classes of biological molecules, including proteins, carbohydrates, lipids, and nucleic acids. Structure and properties provide a framework for understanding activity at molecular and cellular levels.

Protein structure, levels of organization, and relationships with function are then discussed, followed by protein interactions and roles in humans, plants, animals, and microorganisms. Processes considered include enzyme catalysis, signaling, gene expression, immune responses, metabolism, and membrane transport. Diagrams and formulas clarify the interaction among molecular shape, binding and reactivity, and biological function, rather than separating chemical structure from functional effect.

The chapter proceeds to laboratory and computational tools for protein research and to directions involving artificial intelligence, personalized medicine, drug discovery, therapeutic proteins, and proteomics. These areas are presented as part of a scientific review of concepts, methods, and prospects described in the source, not as new experimental findings generated by the author. The contribution connects a general biochemical introduction with a more focused account of proteins, their processes, and methods of investigation. This organization supports molecular interpretation of living systems while retaining the conditions of the tools, the limits of interpretation, and the accompanying references as the basis for understanding examples and applications.

Keywords: Biochemistry; Proteins; Structure and function; Biological processes; Proteomics

1. المقدمة

تعريف الكيمياء الحياتية

يُعدّ فرعًا من فروع العلوم الطبيعية وتخصصًا متعدد المجالات، إذ يُعنى بدراسة العمليات الكيميائية والآليات الجزيئية التي تقوم عليها الحياة. ويركز على بنية ووظيفة وتفاعلات الجزيئات الحيوية، بما في ذلك الكربوهيدرات والدهون و البروتينات والأحماض النووية ، بالإضافة إلى التفاعلات المشاركة في عمليات الأيض وإنتاج الطاقة. ويدمج هذا العلم بين علم الأحياء البنيوي وعلم الإنزيمات والأيض لشرح العمليات الخلوية وعلاقتها ببنية ووظيفة الأنسجة والأعضاء والكائنات الحية. وتُطبّق مبادئه على نطاق واسع في مجالات الطب والتغذية والزراعة والتكنولوجيا الحيوية (Voet et al., 2013, p. 1).

أهمية الكيمياء الحياتية في دراسة الأنظمة الحية

تحتل الكيمياء الحياتية مكانةً أساسيةً في العلوم الحيوية، فهي بمثابة الجسر الفكري بين علوم الكيمياء و علوم الحياة، حيث توفر الإطار الجزيئية التي يُفهم من خلالها العمليات الحيوية الأساسية. و تُعنى بدراسة المواد الكيميائية، والبنى الجزيئية، والتفاعلات التي تحدث داخل الكائنات الحية. وتسعى إلى تفسير المنطق الجزيئي للحياة، أي كيف تتجمع الجزيئات غير الحية، وتتفاعل، وتُنظَّم لإنتاج الخصائص الناشئة التي تميز الأنظمة الحية، بما في ذلك الأيض، والنمو، والتكاثر، والحركة، والاستجابة للمؤثرات، والوراثة (Nelson & Cox,p2 2000).

تكمن أهمية الكيمياء الحياتية في قدرتها على اختزال الظواهر الحيوية المعقدة إلى مبادئ كيميائية أساسية ومفهومة، وتنشأ الخصائص الفريدة للكائنات الحية من التفاعلات المنسقة لآلاف الجزيئات الحيوية المختلفة (Nelson & Cox, 2000,p2). لا تُعدّ العمليات الحيوية معزولة أو مجردة، بل شبكات متكاملة من التفاعلات الكيميائية التي تحكمها مبادئ الديناميكا الحرارية، والحركية، والبنية الجزيئية، وتحويل الطاقة. وبالتالي، يمكن فهم عمليات مثل التنفس الخلوي، والتحفيز الإنزيمي، ونقل الإشارات، والتعبير عن المعلومات الوراثية، من خلال التفاعلات الجزيئية المحددة والمسارات الكيميائية الحيوية المنظمة ورغم أن الجزيئات الحيوية الفردية تخضع لنفس القوانين الفيزيائية والكيميائية التي تحكم المادة غير الحية، فإن تفاعلاتها المنظمة

والمنسقة بدقة عالية تُنتج التعقيد والوظائف المذهلة للكائنات الحية (Voet et al., 2013, p. 1).

يشرح هذا العلم باختصار كيف تحافظ الخلايا على الحياة من خلال عمليات أيضية وتنظيمية منسقة. ويصف كيفية تحويل الغذاء إلى طاقة، وكيفية تصنيع الجزيئات الخلوية الأساسية، وكيف تنظم مسارات الإشارات وظائف الأعضاء وتحافظ على التوازن الداخلي. ويمكن أن يؤدي اضطراب هذه العمليات إلى الإصابة بأمراض، بما في ذلك داء السكري، واضطرابات الغدة الدرقية، وأمراض القلب والأوعية الدموية، والأمراض التنكسية العصبية مثل مرض الزهايمر(Rodwell et al., 2018, p. 115).

من بين الفئات الأربع الرئيسية للجزيئات الحيوية الكبيرة هي الكربوهيدرات، والدهون، والأحماض النووية، والبروتينات. تتميز البروتينات بتعدد استخداماتها الفريدة، إذ تعمل كمنفذ رئيسي للنشاط الحيوي. تشكل البروتينات أكثر من نصف الكتلة الجافة لمعظم الخلايا، وتشارك في جميع العمليات الخلوية تقريبًا (Awata et al., 2020, p. 18). تنبع أهمية البروتينات من التنوع الهيكلي والوظيفي الاستثنائي المشفر ضمن تسلسل الأحماض الأمينية فيها. حيث تعمل كإنزيمات، تحفز التفاعلات الأيضية بدقة عالية وسرعة فائقة؛ فعلى سبيل المثال، يُسرّع إنزيم مُنْزِعَةُ الماءِ الكَرْبونِيَّة عملية ترطيب ثاني أكسيد الكربون بمقدار$10^6 s^{-1}$ضعف تقريبًا مقارنةً بالتفاعل غير المحفز (Berg et al., 2019, p. 257).

تؤدي البروتينات وظائف متعددة، منها العناصر البنائية (الكولاجين، الكيراتين)، وجزيئات النقل (الهيموجلوبين، ألبومين المصل)، وعوامل الإشارة (الأنسولين، عوامل النمو)، ومستقبلات الغشاء، والمحركات الجزيئية (الميوسين، الكينيسين–Alberts et al., 2017, pp. 115) (120). وتُعتبر المبادئ الأساسية لعلم الأحياء الجزيئي مثل الحمض النووي DNA)) والحمض النووي الريبوزي RNA))، البروتيناتَ المُنتَج الوظيفي النهائي للمعلومات الوراثية، مما يجعلها النقطة التي يتجلى عندها النمط الجيني كنمط ظاهري (Awata et al., 2020, p. 18). علاوة على ذلك، كشفت عن التعرف الجزيئي، والتنظيم التغايري، والديناميكيات التركيبية التي تدعم التنظيم الخلوي (Nussinov & Tsai, 2013, pp. 169–189). ويُعدّ خلل وظائف البروتينات سواءً كان ذلك من خلال الطفرات، أو سوء الطي، أو التعديلات اللاحقة للترجمة غير

الطبيعية سببًا رئيسيًا لمجموعة واسعة من الأمراض البشرية، بما في ذلك السرطان، والاضطرابات التنكسية العصبية، ومتلازمات التمثيل الغذائي (Iadanza et al., 2018, pp. 1–10).

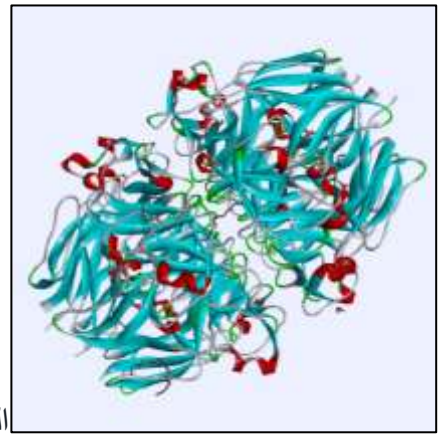
يهدف هذا الجزء من المبحث بشكل أساسي إلى تقديم دراسة شاملة للمبادئ البنيوية والوظيفية التي تحكم سلوك البروتينات في الأنظمة البيولوجية. ويسعى هذا العمل تحديدًا إلى: (1) توضيح المستويات الهرمية لبنية البروتين من التسلسل الأولي إلى التجميع الرباعي والقوى الفيزيائية والكيميائية التي تُثبّت هذه البنى؛ (2) تحليل العلاقة بين بنية البروتين ووظيفته البيولوجية، بالاستناد إلى أمثلة نموذجية من التحفيز الإنزيمي، والنقل الجزيئي، ونقل الإشارات؛ (3) استكشاف الآليات التي تُنظّم بها وظيفة البروتين في الكائنات الحية، بما في ذلك التعديل التغايري، والتعديل ما بعد الترجمة، والمعالجة البروتينية؛ (4) مناقشة المناهج التجريبية والحسابية المعاصرة المستخدمة لتوصيف البروتينات، بما في ذلك علم البلورات بالأشعة السينية، والمجهر الإلكتروني فائق البرودة، وطيف الرنين المغناطيسي النووي، والتنبؤ بالبنية باستخدام الذكاء الاصطناعي (Jumper et al., 2021, pp. 583–589).

٢. الكيمياء الحياتية والأنظمة البيولوجية

2. 1 الجزيئات الحيوية الرئيسية

تتكون الكائنات الحية من أربعة أنواع رئيسية من الجزيئات الحيوية الكبيرة، يتألف كل منها من وحدات أساسية أصغر مرتبطة بروابط تساهمية لتشكيل بوليمرات ذات وظائف متخصصة. هذه الأنواع هي: البروتينات، والكربوهيدرات، والدهون، والأحماض النووية (Voet et al., 2013, pp. 40–41, 93–94, 217–218, 241–242).

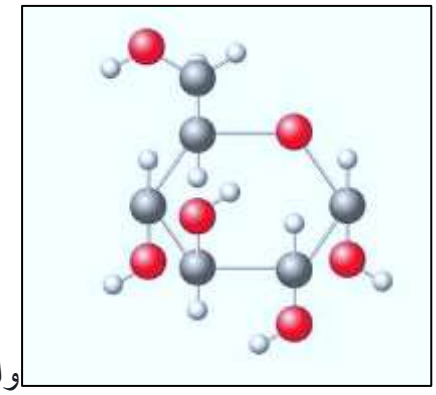
البروتينات



البروتينات هي أكثر الجزيئات الحيوية تنوعًا ووفرةً في الخلية، وتتكون من سلاسل من الأحماض الأمينية المرتبطة بروابط ببتيدية. يُحدد تسلسل الأحماض الأمينية (البنية الأولية) الطي ثلاثي الأبعاد للبروتين، والذي بدوره يُحدد وظيفته البيولوجية (Alberts et al., 2017, pp. 109–120). وظيفيًا، تُصنف البروتينات إلى إنزيمات، ونواقل، وعناصر هيكلية، ومستقبلات، وهرمونات، وأجسام مضادة (Voet et al., 2013, pp. 176–216). يُعد فهم بنية البروتين ووظيفته من أهم إنجازات الكيمياء الحيوية، إذ يُتيح تطوير مثبطات الإنزيمات لعلاج أمراض مثل ارتفاع ضغط الدم، والسكري، والسرطان (Nelson et al., 2021, pp. 147–228). وتشير بعض الدراسات الحديثة إلى أن اضطرابات طي البروتين - مثل تراكم الأميلويد في الدماغ - هي المسؤولة بشكل أساسي عن الاضطرابات التنكسية العصبية، بما في ذلك مرض الزهايمر ومرض باركنسون (Iadanza et al., 2018, pp. 1–10).

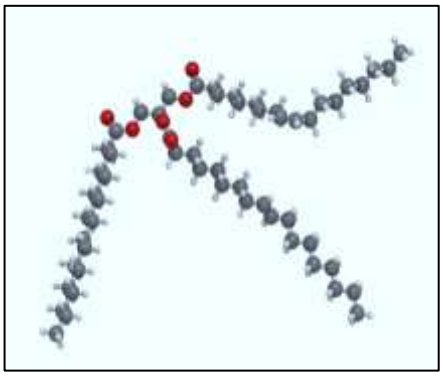
الكربوهيدرات

الكربوهيدرات مركبات عضوية تتكون من الكربون والهيدروجين والأكسجين، وتُعد المصدر الرئيسي للطاقة في معظم الكائنات الحية. تتراوح الكربوهيدرات من السكريات الأحادية (مثل



الجلوكوز والفركتوز) إلى السكريات الثنائية (مثل السكروز واللاكتوز) والسكريات المتعددة (مثل النشا والجليكوجين والسليلوز) (Voet et al., 2013, pp. 217–240). إضافةً إلى دورها في توفير الطاقة، تعمل بعض الكربوهيدرات كمكونات بنائية (مثل السليلوز في جدران الخلايا النباتية) وكعوامل مساعدة في التعرف على الخلايا عند ارتباطها بالبروتينات أو الدهون على أسطحها. وقد أظهرت دراسات حديثة أن اضطرابات استقلاب الكربوهيدرات، كما هو الحال في داء السكري، ترتبط بخلل في إشارات الأنسولين ونقل الجلوكوز، مما يؤكد أهمية الفهم البيوكيميائي لهذه الجزيئات (Nelson et al., 2021, pp. 217–262).

الدهون



الدهون جزيئات كارهة للماء تشمل الدهون والزيوت والشموع والستيرويدات والفوسفوليبيدات (Voet et al., 2013, pp. 241–287). تؤدي الفوسفوليبيدات وظائف متعددة: فهي تخزن الطاقة بكفاءة عالية، وتشكل أغشية بيولوجية على هيئة طبقات ثنائية من الفوسفوليبيدات، وتعمل كهرمونات وجزيئات إشارة (مثل الستيرويدات والبروستاجلاندينات)، وتنقل الفيتامينات الذائبة في الدهون (Nelson et al., 2021, pp. 343–391). تُعد الفوسفوليبيدات والكوليسترول مكونات أساسية لأغشية الخلايا، حيث تنظم

سيولتها ونفاذيتها (Alberts et al., 2017, pp. 565–596)). وقد أشارت درسات حديثة إلى أن اضطرابات استقلاب الدهون تُسهم في تصلب الشرايين وأمراض القلب والأوعية الدموية، وأن فهم المسارات الكيميائية الحيوية لتخليق الكوليسترول أدى إلى تطوير أدوية الستاتين (Nelson et al., 2021, pp. 746–766).

الأحماض النووية

الأحماض النووية نوعين الحمض النووي الريبوزي منقوص الأكسجين (DNA) والحمض النووي الريبوزي (RNA) هي الجزيئات المسؤولة عن تخزين المعلومات الوراثية ونقلها والتعبير عنها (Voet et al., 2013, pp. 40–75). يتكون الحمض النووي الريبوزي منقوص الأكسجين (DNA) من سلسلتين متوازيتين عكسيًا ملتفتين على شكل حلزون مزدوج، بينما يكون الحمض النووي الريبوزي (RNA) عادةً أحادي السلسلة. تُشفّر المعلومات في تسلسل القواعد النيتروجينية (الأدينين، والثايمين، والسيتوزين، والجوانين في الحمض النووي الريبوزي منقوص الأكسجين (DNA)؛ مع استبدال اليوراسيل بالثايمين في الحمض النووي الريبوزي (RNA)(Nelson et al., 2021, pp. 263–276). تُنسخ المعلومات من الحمض النووي الريبوزي منقوص الأكسجين (DNA) إلى الحمض النووي الريبوزي (RNA)، ثم تُترجم إلى بروتينات، وفقًا لـ "العقيدة المركزية" لعلم الأحياء الجزيئي (Alberts et al., 2017, pp. 299–368). أحدثت تقنيات تسلسل الأحماض النووية وتحرير الجينات، مثل تقنية كريسبر-كاس9، ثورة في الطب الحيوي والزراعة (Jumper et al., 2021, pp. 583–589). ازداد الاهتمام بتطبيقات الأحماض النووية في التشخيص الجزيئي والعلاج الجيني، لا سيما في أعقاب جائحة كوفيد-19، التي استُخدمت فيها تقنية تفاعل البلمرة المتسلسل (PCR) ولقاحات الحمض النووي الريبوزي المرسال (mRNA)(Rahman et al., 2021, pp. 1–9).

2 .2 العلاقة بين الكيمياء الحيوية والوظيفة البيولوجية

يُعدّ المبدأ الأساسي للكيمياء الحياتية هو أن البنية الجزيئية تُحدد الوظيفة الحيوية، وأي تغيير حتى على مستوى ذرة واحدة في البنية قد يُؤدي إلى خلل وظيفي كبير. ويتضح هذا الارتباط في الأمثلة التالية:

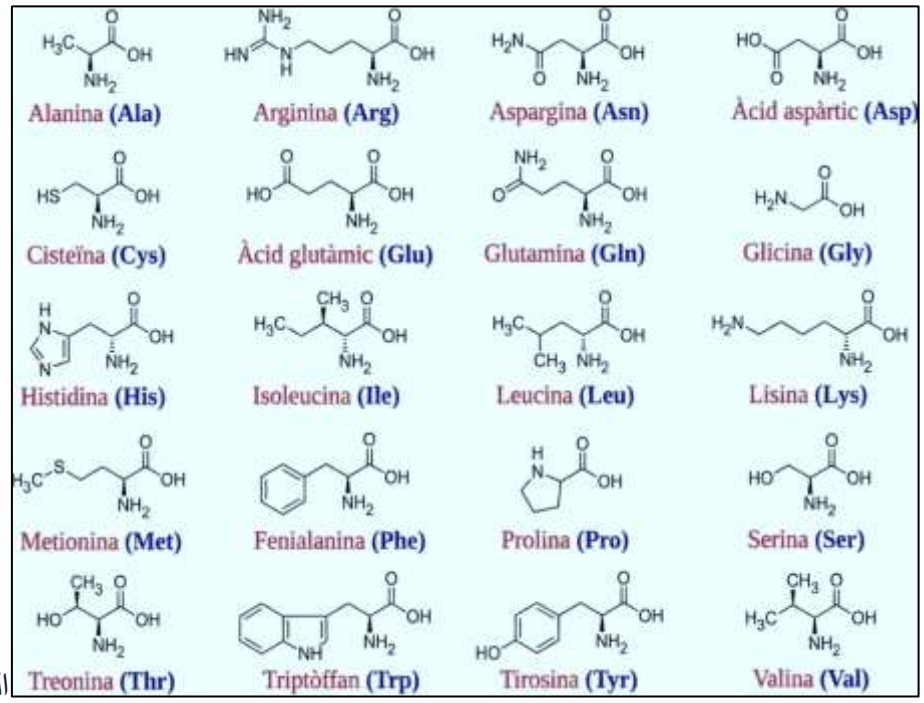
- الإنزيمات: تعتمد قدرة الإنزيم على تسريع التفاعل على وجود موقع نشط مُتكامل هندسيًا وكيميائيًا مع ركيزته. وأي طفرة تُغير حمضًا أمينيًا في الموقع النشط قد تُؤدي إلى تعطيل نشاط الإنزيم تمامًا، كما هو الحال في بيلة الفينيل كيتون، الناتجة عن خلل في إنزيم فينيل ألانين هيدروكسيلاز .(Berg et al., 2019, pp. 202–204)
- خضاب الدم ونقل الأكسجين: يتكون هيموغلوبين من أربع وحدات بروتينية فرعية، تحتوي كل منها على مجموعة هيم مع ذرة حديد. يؤدي استبدال حمض أميني واحد (من الغلوتامات إلى الفالين في السلسلة بيتا) إلى فقر الدم المنجلي، حيث تتجمع الجزيئات المشوهة وتسد الشعيرات الدموية . يوضح هذا مدى أهمية البنية الرباعية الدقيقة للوظيفة (Berg et al., 2019, pp. 202–207) .
- مستقبلات الغشاء ونقل الإشارات: ترتبط الهرمونات والنواقل العصبية بمستقبلات محددة على سطح الخلية، مما يحفز تغيرًا في البنية الفراغية يُنشط سلسلة من الإشارات داخل الخلية. أي خلل في بنية المستقبل، كما هو الحال في بعض أشكال مقاومة الأنسولين، يؤدي إلى اضطرابات أيضية (Alberts et al., 2017, pp. 813–865).
- الأحماض النووية والتعبير الجيني: تحدد تسلسلات الحمض النووي (DNA) مواقع ارتباط عوامل النسخ، وبالتالي تتحكم في توقيت ومستوى التعبير الجيني. قد تُسبب التغيرات في هذه التسلسلات التنظيمية أمراضًا وراثية أو سرطانات (Alberts et al., 2017, pp. 369–438; Nelson et al., 2021, pp. 1054–1096).

على مستوى الأنظمة، تتشابك المسارات الأيضية في شبكات معقدة تخضع لتنظيم دقيق من خلال التثبيط الارتجاعي، والتعديل التساهمي، والتنظيم التغايري. أن فهم هذه الشبكات ضروري لتطوير علاجات تستهدف مسارات محددة دون التأثير على غيرها، مثل المثبطات المناعية في علاج السرطان (Nelson et al., 2021, pp. 436–471). كما أكدت دراسة عربية أن دمج الكيمياء الحيوية مع المعلوماتية الحيوية أصبح ضرورة لفهم الأمراض المعقدة على المستويات الجينومية والبروتينية والأيضية (Alberts et al., 2017, pp. 439–528).

وبالتالي، تتجاوز الكيمياء الحياتية وصف الجزيئات؛ فهي توفر إطارًا تفسيريًا يربط المستوى الذري بالسلوك الخلوي ووظيفة الكائن الحي، مما يجعلها أساسية لفهم الحياة في الصحة والمرض.

3.البروتينات كأساس للعمليات البيولوجية

3. 1 بنية البروتين



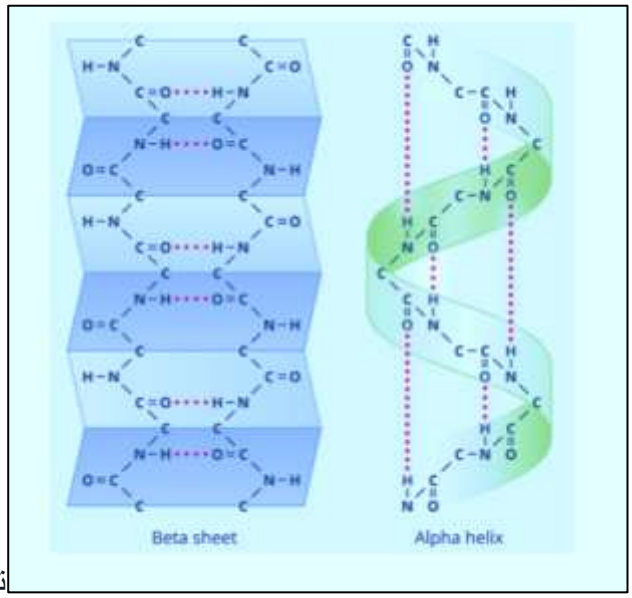
البروتينات عبارة عن بوليمرات خطية تتكون من مجموعة من عشرين حمضًا أمينيًا، يتميز كل منها بذرة كربون مركزية (ألفا) مرتبطة بمجموعة أمينية، ومجموعة كربوكسيل، وذرة هيدروجين، وسلسلة جانبية مميزة. تختلف السلاسل الجانبية اختلافًا كبيرًا في الحجم والشكل والشحنة والخاصية الكارهة للماء والتفاعلية الكيميائية، مما يمنح البروتينات تنوعها الوظيفي الملحوظ (Nelson et al., 2021, pp. 91–95). ترتبط الأحماض الأمينية بروابط ببتيدية تتكون من تفاعلات تكثيف بين مجموعة الكربوكسيل لحمض أميني ومجموعة الأمين للحمض الأميني التالي، مما يُنتج هيكلًا عديد الببتيد بتسلسل متكرر من الذرات (N-Cα-C--) تبرز منه السلاسل الجانبية (Alberts et al., 2022, pp. 109–116).

تُظهر الرابطة الببتيدية نفسها خاصية الرابطة المزدوجة الجزئية نتيجةً للرنين، مما يُقيّد الدوران ويُضفي استواءً على مجموعة الأميد. ونتيجةً لذلك، يمتلك الهيكل الأساسي للبولي ببتيد درجتين فقط من حرية الدوران لكل حمض أميني، تُوصفان بالزاويتين ثنائيتي السطوح فاي ((φ وساي ((ψ تُقيّد القيم التي يُمكن أن تتخذها هاتان الزاويتان بالإعاقة الفراغية بين ذرات السلسلة الجانبية

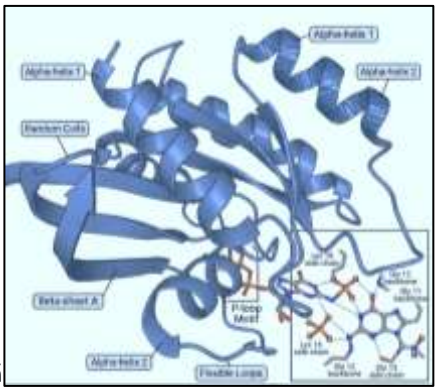
وذرات الهيكل الأساسي، كما هو موضح بوضوح في مخطط راماشاندران (Berg et al., 2019, pp. 52–58). هذا التقييد التكويني، بالإضافة إلى الخصائص الكيميائية للسلاسل الجانبية، يُحدد كيفية طي البروتينات إلى بنيتها ثلاثية الأبعاد الأصلية (Balchin et al., 2016, pp.1-8).

3. 2 مستويات بنية البروتين

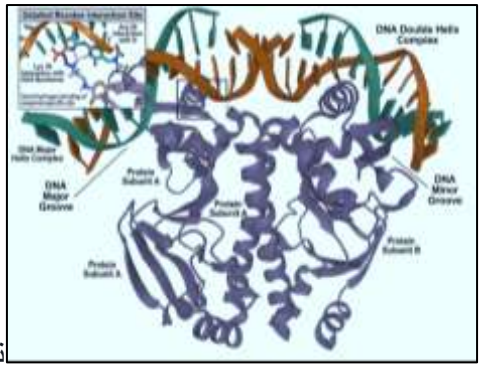
يُوصَف تركيب البروتين تقليديًا على أربعة مستويات هرمية. تشير البنية الأولية إلى التسلسل الخطي للأحماض الأمينية، والذي يُشفّر مباشرةً بواسطة تسلسل النيوكليوتيدات للجين المقابل. تحتوي البنية الأولية على جميع المعلومات اللازمة للبروتين للوصول إلى حالته المطوية (Balchin et al., 2016, pp.1-8).



تصف البنية الثانوية الترتيب المكاني الموضعي للسلسلة الببتيدية، والتي تستقر بشكل أساسي بواسطة روابط هيدروجينية بين مجموعات الأميد والكربونيل في السلسلة. أكثر عنصرين شيوعًا في البنية الثانوية هما الحلزون ألفا، وهو عبارة عن لولب يميني يتكون من 3.6 بقايا لكل لفة، وترتبط فيه روابط هيدروجينية بين أكسجين الكربونيل للبقايا i وهيدروجين الأميد للبقايا + 4i، والصفيحة بيتا، التي تتكون من خيوط ببتيدية ممتدة متوازية أو متضادة، وترتبط فيها روابط هيدروجينية بين الخيوط (Nelson et al., 2021, pp. 111–116). تربط عناصر أقل انتظامًا، مثل الانحناءات والحلقات، هذه البنى المتكررة، وغالبًا ما تشارك في ارتباط الليجاند والمواقع النشطة للإنزيم.



تمثل البنية الثالثية الترتيب ثلاثي الأبعاد الكامل لسلسلة ببتيدية واحدة، بما في ذلك ترتيب عناصر البنية الثانوية وتحديد مواقع السلاسل الجانبية. تُثبَّت البنية الثالثية بواسطة تفاعلات غير تساهمية متعددة، تشمل التفاعلات الكارهة للماء، والروابط الهيدروجينية، والتفاعلات الأيونية، وتفاعلات فان دير فالس، بالإضافة إلى روابط ثنائي الكبريتيد المتكونة بين بقايا السيستين (Nelson et al., 2021, pp. 116–120). وتكتسب التفاعلات الكارهة للماء أهمية خاصة لأن دفن السلاسل الجانبية غير القطبية داخل البروتين بعيدًا عن المذيب المائي يُسهم بشكل كبير في استقرار عملية الطي.



تنشأ البنية الرباعية عندما تتجمع سلسلتان أو أكثر من سلاسل عديد الببتيد، تُسمى الوحدات الفرعية، لتكوين مُركب قليل الوحدات وظيفي. قد تكون الوحدات الفرعية متطابقة، كما في إنزيم نازعة هيدروجين اللاكتات المتجانس رباعي الوحدات، أو مختلفة، كما في رباعي الوحدات ($\alpha_2\beta_2$) للهيموجلوبين (Nelson et al., 2021, pp. 140–147). يسمح التجميع الرباعي بالتعاون، والتنظيم التغايري، وبناء آلات جزيئية ضخمة مثل البروتيازوم والريبوسوم.

3. 3 العلاقة بين البنية والوظيفة

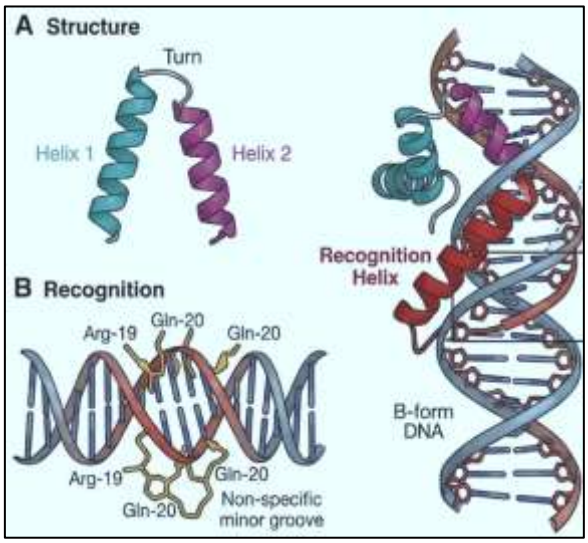
تُعدّ العلاقة الوثيقة بين بنية البروتين ووظيفته الحيوية من المسلّمات الأساسية في الكيمياء الحياتية. وقد أثبتت التجارب الرائدة التي أجراها أنفينسن أن إنزيم تفكيك الحمض الريبي النووي A قادر على إعادة طي نفسه تلقائيًا من حالته المتفككة، مما يُثبت أن تسلسل الأحماض الأمينية هو الذي يُحدد البنية الأصلية (Balchin et al., 2016, pp.1-8). ويُشكّل هذا المفهوم أساس مبدأ أن أي تغيير في التسلسل سواءً كان ذلك من خلال الطفرة، أو التضفير البديل، أو التعديل ما بعد الترجمة وقد يُغيّر البنية، وبالتالي يُضعف الوظيفة أو يُعدّلها.

3. 4 تفاعلات البروتينات

نادرًا ما تعمل البروتينات بمعزل عن بعضها؛ بل تشارك في مجموعة واسعة من التفاعلات مع بروتينات أخرى، وأحماض نووية، ودهون، وجزيئات صغيرة. هذه التفاعلات، التي قد تكون عابرة أو مستقرة، أساسية لجميع العمليات الحيوية تقريبًا، بما في ذلك نقل الإشارات، والتمثيل الغذائي، والنقل، وتنظيم الجينات (Nussinov et al., 2013, pp. 169–189)).

- **تفاعلات البروتين-بروتين:** تُشكّل البروتينات مُركّبات من خلال مناطق سطحية مُتكاملة، وغالبًا ما تتضمن هذه التفاعلات روابط كارهة للماء، وروابط هيدروجينية، وتكاملًا كهروستاتيكيًا. يتحدد استقرار هذه التفاعلات وخصوصيتها من خلال شكل وخصائص التفاعلات الكيميائية. بعض التفاعلات بين البروتينات دائمة، كما هو الحال في ثنائي ألفا-بيتا-توبولين الذي يُكوّن الأنيبيبات الدقيقة، بينما بعضها الآخر عابر، كما هو الحال في ارتباط عوامل النسخ بالمنشطات المساعدة أثناء التعبير الجيني (Nelson et al., 2021, pp. 107–110)).
- **تفاعلات البروتين مع الروابط:** ترتبط البروتينات بجزيئات صغيرة مثل المادة الاساس، عوامل مساعدة، هرمونات وأدوية بدقة عالية. تعكس قوة الارتباط، التي تُقاس بثابت التفكك (K_d)، قوة التفاعل وتخضع للتكامل بين الرابط وموقع ارتباطه. يُعد الارتباط عالي القوة ضروريًا لمستقبلات الهرمونات، التي يجب أن تستجيب لتركيزات نانومولية أو بيكومولية من روابطها (Nelson et al., 2021, pp. 148–152).
- **تفاعلات البروتين مع الأحماض النووية:** تُعدّ عوامل النسخ، والهستونات، والبوليميرازات، وعوامل التضفير من بين العديد من البروتينات التي ترتبط بالحمض النووي DNA أوRNA. وتعتمد هذه التفاعلات على أنماط بنيوية محددة، مثل بنية)اللولب-الانعطاف-

اللولب(، وبنية إصبع الزنك، وبنية سحاب الليوسين، والتي تتعرف على تسلسلات نيوكليوتيدية معينة من خلال الروابط الهيدروجينية في الأخدود الرئيسي للحمض النووي DNA (Alberts et al., 2022, pp. 369–438).



- **التنظيم التغايري والتنظيم:** تمتلك العديد من البروتينات مواقع تنظيمية تختلف عن مواقعها النشطة أو مواقع ارتباطها. ويؤدي ارتباط جزيء مُؤثِّر بموقع تغايري إلى تغيير في البنية الفراغية يُعدِّل النشاط، مما يُتيح تنظيمًا سريعًا وعكسيًا لوظيفة البروتين. ويصف نموذجا مونود-وايمان-شانجو وكوشلاند-نيميثي-فيلمر الآليات الجزيئية للتحولات التغايرية (Nussinov et al., 2013, pp. 169–189).

3. 5 البروتينات في الإنسان والنباتات والحيوانات والكائنات الدقيقة

تُظهر البروتينات تنوعًا وظيفيًا هائلًا في جميع مجالات الحياة، مُتكيفةً مع الاحتياجات الخاصة لكل كائن حي.

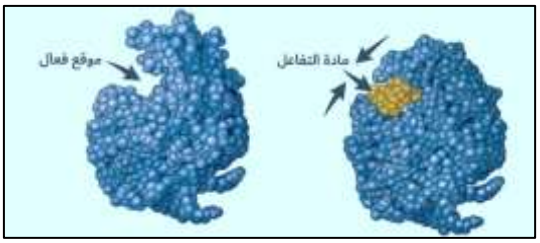
- **بروتينات الإنسان:** تؤدي البروتينات أدوارًا أساسية في البنية (الكولاجين في الأنسجة الضامة)، والتحفيز (الإنزيمات الهاضمة مثل البيبسين والأميلاز)، والنقل (الهيموجلوبين والألبومين)، والدفاع المناعي (الغلوبولينات المناعية والسيتوكينات)، والإشارات الخلوية (الأنسولين وهرمون النمو)، والحركة (الميوسين في العضلات). وتُعدّ العيوب الجينية في بروتينات الإنسان سببًا لآلاف الأمراض، بما في ذلك التليف الكيسي (خلل في قناة كلوريد CFTR)، وضمور دوشين العضلي (نقص الديستروفين)، وفرط كوليسترول الدم العائلي

(طفرات في مستقبلات البروتين الدهني منخفض الكثافة) (Berg et al., 2019, pp. 202–207).

- **بروتينات النبات**: تُصنّع النباتات البروتينات اللازمة لعملية التمثيل الضوئي مثل (إنزيم روبيسكو)، وللدعم البنيوي (الإكستنسين وبروتينات أخرى في جدار الخلية)، ولتخزين العناصر الغذائية كبروتينات البذور)مثل الغلوتين والزئين والليغومين)، وللدفاع ضد مسببات الأمراض (البروتينات المرتبطة بالإمراض ومثبطات البروتياز). ويُعدّ روبيسكو من أبرز البروتينات على وجه الخصوص، فهو الأكثر وفرة على سطح الأرض، والإنزيم المسؤول عن تثبيت الكربون في دورة كالفن (Nelson et al., 2021, pp. 751–768).
- **البروتينات الحيوانية**: تعتمد الحيوانات على البروتينات في الحركة (الأكتين والميوسين في العضلات)، ونقل الأكسجين (الهيموغلوبين في الفقاريات، والهيموسيانين في بعض اللافقاريات)، والحماية (الكيراتين في الجلد والريش والقرون)، والتواصل (الهرمونات الببتيدية والبروتينات الرابطة للفيرومونات). تتميز بروتينات الحرير التي تنتجها العناكب ودودة القز بقوة شد ومرونة استثنائيتين، مما يجعلها نماذج مثالية لهندسة المواد الحيوية (Alberts et al., 2022, pp. 109–120).
- **البروتينات الميكروبية:** تنتج الكائنات الحية الدقيقة بروتينات تتميز بتنوع أيضي استثنائي، مما يمكّنها من العيش في بيئات قاسية ومتطرفة. وتشمل هذه البروتينات الإنزيمات المقاومة للحرارة التي تنتجها البكتيريا المحبة للحرارة، مثل إنزيم بوليميراز الحمض النووي في البكتيريا Thermus aquaticus (T_{aq} DNA polymerase)، وإنزيمات السليولاز من الفطريات لتحليل اللجنين السليلوزي، والبروتينات الفلورية من قناديل البحر التي أصبحت أدوات لا غنى عنها في حياة الخلية. وقد أحدثت البروتينات البكتيرية، مثل إنزيمات التقييد ونوكليازات Cas، ثورة في البيولوجيا الجزيئية وتحرير الجينوم (Jinek et al., 2012, pp. 816–821).

4. العمليات البيولوجية المنظمة بواسطة البروتينات

4. 1 التحفيز الإنزيمي



الإنزيمات هي محفزات بروتينية تُسرّع التفاعلات الكيميائية الحيوية بمعاملات تتراوح من 10^{6} الى 10^{17}، مما يجعل الحياة ممكنة في الظروف الفيزيولوجية (Berg et al., 2019, pp. 257–258). تُخفّض الإنزيمات طاقة التنشيط عن طريق ربط الركائز في موقع نشط مُحدد، وتثبيت الحالة الانتقالية من خلال التحفيز الحمضي القاعدي، أو التساهمي، أو الأيوني المعدني. على سبيل المثال، تستخدم بروتيازات السيرين ثلاثية تحفيزية (Ser195, His57, Asp102) لكسر الروابط الببتيدية، بينما يستخدم إنزيم مُنْزِعَةُ الماءِ الكَرْبونِيَّة أيون الزنك لاستقطاب جزيء الماء من أجل ترطيب ثاني أكسيد الكربون بشكل عكسي (Nelson et al., 2021, pp. 178–187).

يتم التحكم في نشاط الإنزيم بإحكام حيث تعمل المثبطات التنافسية على منع الموقع النشط، وترتبط المثبطات غير التنافسية في مكان آخر، وتحفز المؤثرات التآثرية تغييرات في الشكل، وتوفر التعديلات التساهمية مثل الفسفرة تنظيمًا سريعًا وقابلًا للعكس (Nelson et al., 2021, pp. 203–206).

4. 2 نقل الإشارة

تستشعر الخلايا بيئتها وتستجيب لها عبر نقل الإشارات بوساطة البروتينات. ترتبط الروابط (الهرمونات، والنواقل العصبية، وعوامل النمو) بالمستقبلات، وخاصةً مستقبلات البروتين المقترن بـ G (GPCRs)، ومستقبلات التيروزين كيناز (RTKs)، أو المستقبلات المرتبطة بقنوات الأيونات (Lodish et al., 2008). تُفعّل مستقبلات البروتين المقترن بـ G بروتينات G غير المتجانسة ثلاثية الوحدات التي تُعدّل إنزيم أدينيل سيكلاز وإنزيم فوسفوليباز C؛ بينما تتحد مستقبلات التيروزين كيناز وتُفسفر ذاتيًا، مُستقطبةً بروتينات الإشارة ذات نطاقات SH2 (Alberts et al., 2022, pp. 831–875). ويُعدّ اختلال تنظيم هذه المسارات من خلال الطفرات أو الإفراط في التعبير أو فقدان البروتينات التنظيمية سمة مميزة للعديد من أنواع السرطان والأمراض الالتهابية (Nussinov & Tsai, 2013, pp. 169–189).

4. 3 تنظيم التعبير الجيني

تتحكم البروتينات في التعبير الجيني على جميع المستويات. تتعرف عوامل النسخ على تسلسلات الحمض النووي المحددة عبر كما ذكر سابقاً (Alberts et al., 2022, pp. 369–438). تخضع بروتينات الهيستون لعمليات الأستلة، والمثيلة، والفسفرة، واليوبيكويتين ما يُعرف بـ "شفرة الهيستون" لتنظيم إمكانية الوصول إلى الكروماتين. تحفز ناقلات مثيل الحمض النووي مثيلة CpG، وهي طبقة فوق جينية أخرى (Alberts et al., 2022, pp. 438–500). بعد النسخ، تتحكم البروتينات الرابطة للحمض النووي الريبي والجسيم الرابط في معالجة الحمض النووي الريبي الرسول، واستقراره، وترجمته، بينما تتوسط البروتينات المرتبطة بالحمض النووي الريبي الميكروي في ايقاف الجينات (Alberts et al., 2022, pp. 501–555).

4. 4 الاستجابة المناعية

يعتمد الجهاز المناعي على البروتينات للتعرف على مسببات الأمراض والقضاء عليها. تحتوي الأجسام المضادة (الغلوبولينات المناعية) التي تنتجها الخلايا البائية على مناطق متغيرة ناتجة عن إعادة تركيب V(D)J والطفرات الجسدية المفرطة)التركيب V(D)J هي آلية جينية تحدث أثناء نضج الخلايا الليمفاوية، حيث يُعاد ترتيب مقاطع الجينات المتغيرة V التنوع وD الانضمام وJ عشوائيًا بواسطة إنزيمات RAG1/RAG2، مما يولّد تنوعًا هائلًا في مستقبلات الأجسام المضادة ومستقبلات الخلايا التائية(، مما يُمكّنها من التعرف على مستضدات متنوعة (Alberts et al., 2022, pp. 1250–1285).

تُعادل الأجسام المضادة مسببات الأمراض عبر الترسيب المناعي، وتفعيل المتممة، والتراص. تُقدّم بروتينات معقد التوافق النسيجي الرئيسي ((MHC مستضدات ببتيدية للخلايا التائية يُفعّل معقد التوافق النسيجي الرئيسي من الفئة الأولى الخلايا التائية +CD8، ويُفعّل معقد التوافق النسيجي الرئيسي من الفئة الثانية الخلايا التائية +CD4، وتتعرف مستقبلات الخلايا التائية على هذه المعقدات. تُنسّق السيتوكينات (الإنترلوكينات، والإنترفيرونات) نشاط الخلايا المناعية، بينما توفر سلسلة المتممة دفاعًا سريعًا لا يعتمد على الأجسام المضادة (Alberts et al., 2022, pp. 1250–1320).

4. 5 الأيض

تُحفّز الإنزيمات مسارات الأيض وتُنظّمها. تُضبط عملية تحلل الجلوكوز بواسطة إنزيم فوسفوفركتوكيناز-1(PFK-1)، الذي يُثبط بشكل غير مباشر بواسطة الأدينوسين ثلاثي الفوسفات ATP ويُنشط بواسطة الأدينوسين أحادي الفوسفات AMP، مما يُوازن بين تكسير الجلوكوز واحتياجات الطاقة (Nelson et al., 2021, pp. 511–529). تُنظم دورة حمض الستريك بواسطة NADH وATP وأيونات الكالسيوم Ca^{2+}. تحدث أكسدة الأحماض الدهنية (أكسدة بيتا) في الميتوكوندريا، بينما يحدث التخليق في السيتوبلازم؛ ويُثبط مالونيل-CoA إنزيم كارنيتين بالميتويل ترانسفيراز I لمنع الدورة غير المُجدية (Nelson et al., 2021, pp. 593–595). يشمل استقلاب الأحماض الأمينية إنزيمات ناقلة الأمين ودورة اليوريا، ويتحقق التكامل من خلال إنزيمات تنظيمية رئيسية تستجيب للهرمونات وشحنة الطاقة (Nelson et al., 2021, pp. 646–683).

4. 6 النقل عبر الأغشية

يتم النقل عبر الأغشية بواسطة قنوات وبروتينات ناقلة. تسمح القنوات (مثل قنوات الصوديوم/البوتاسيوم ذات البوابات الفولتية، ومستقبلات الأستيل كولين المرتبطة بالرابطة وقنوات الماء) بالانتقال السلبي للأيونات أو الماء وفقًا لتدرجات التركيز (Alberts et al., 2022, pp. 637–650). تخضع النواقل لتغيرات بنيوية لتسهيل الانتشار أو النقل النشط. تستخدم النواقل النشطة الأولية، مثل مضخة الصوديوم/البوتاسيوم ATPase، الأدينوسين ثلاثي الفوسفاتATP للحفاظ على تدرجات تركيز الأيونات؛ بينما تستخدم النواقل الثانوية تدرجات تركيز الأيونات (مثل مضخة SERCA التي تضخ أيونات الكالسيوم Ca^{2+} إلى الشبكة الساركوبلازمية) (Alberts et al., 2022, pp. 637–650). تقوم نواقل كاسيت ارتباط الأدينوسين ثلاثي الفوسفات (ABC) بتصدير الأدوية والدهون؛ في حين تؤدي الطفرات في بروتين منظّم التوصيل عبر الغشاء في التليف الكيسي (CFTR)، وهو قناة كلوريد تابعة لعائلة ABC، إلى الإصابة بالتليف الكيسي (Nelson et al., 2021, pp. 330–350).

٥. أدوات البحث الحديثة في مجال البروتينات

5. 1 الطرق المختبرية

تعتمد أبحاث البروتينات المعاصرة على مجموعة متنوعة من التقنيات المختبرية التي تُمكّن من الكشف عن البروتينات وتحديد كميتها وتنقيها وتوصيفها.

- **الامتصاص المناعي المرتبط بالإنزيم (ELISA):** تقنية مناعية شائعة الاستخدام للكشف عن بروتينات أو أجسام مضادة أو مستضدات محددة وتحديد كميتها في عينات حيوية معقدة. تعتمد هذه الطريقة على الخصوصية العالية لتفاعلات الأجسام المضادة مع المستضدات، بالإضافة إلى نظام كشف مرتبط بالإنزيم يُنتج إشارة لونية أو فلورية قابلة للقياس. تشمل ELISA اربعة انواع المباشرة وغير المباشرة والساندويتشية والتنافسية، وكل منها مُصمم خصيصًا لتلبية متطلبات تحليلية مختلفة (Berg et al., 2019, pp. 856–860). تُستخدم ELISA بشكل روتيني في التشخيص السريري واكتشاف المؤشرات الحيوية ومراقبة جودة المستحضرات الصيدلانية نظرًا لحساسيتها وتكلفتها المنخفضة نسبيًا وقدرتها على التحليل عالي الإنتاجية (Crowther, 2008, pp. 1–20).
- **لطخة ويسترن أو ماتسمى اللطخة المناعية أو التحليل المناعي الغربي:** تُمكّن هذه التقنية من الكشف عن بروتينات مُحددة ضمن خليط مُعقد بعد فصلها باستخدام الرحلان الكهربائي الهلامي متعدد الأكريلاميد مع كبريتات دوديسيل الصوديوم (SDS-PAGE). تُنقل البروتينات إلى غشاء (عادةً من النيتروسليلوز أو PVDF) وتُفحص باستخدام أجسام مضادة مُخصصة للبروتين المستهدف. تُوفر هذه التقنية معلومات حول الوزن الجزيئي للبروتين، ووفرته النسبية، والتعديلات اللاحقة للترجمة عند دمجها مع كواشف كشف مُحددة (Kurien & Scofield, 2006, pp. 1–20). على الرغم من كونها شبه كمية، تظل هذه التقنية طريقة لا غنى عنها لتأكيد التعبير البروتيني والتحقق من صحة النتائج المُستقاة من تقنيات أخرى (Mahmood & Yang, 2012, pp. 429–434).
- **مطياف الكتلة MS:** أحدثت هذه التقنية ثورة في تحليل البروتينات من خلال تمكينه من تحديد الكتلة الجزيئية بدقة، والتعرف على البروتينات من الخلائط المُعقدة، وتوصيف التعديلات اللاحقة للترجمة. في مطياف الكتلة الترادفي (MS/MS) وتُجزأت الببتيدات وتُحلل نسب كتلتها

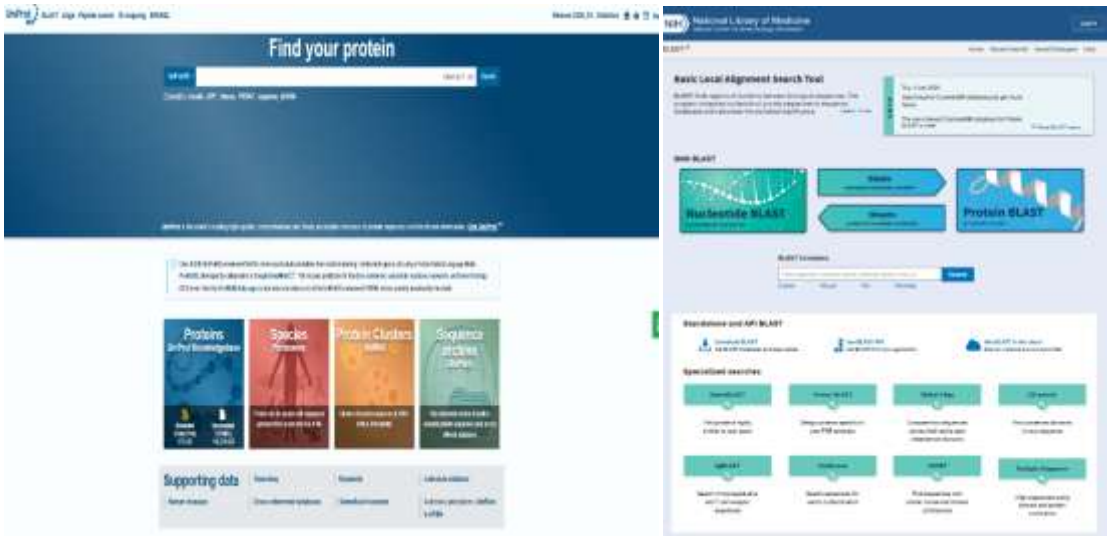
إلى شحنتها لتحديد تسلسل الأحماض الأمينية. تُشكل هذه التقنية المقترنة بتقنية كروماتوغرافيا السائل ((LC-MS/MS، أساس علم البروتينات الحديث، إذ تُتيح تحديد وقياس كميات آلاف البروتينات في تجربة واحدة (Aebersold & Mann, 2016, pp. 37–51). كما تُسهّل تقنية مطياف الكتلة دراسة تفاعلات البروتين-بروتين من خلال تقنيات مثل تنقية الألفة-مطياف الكتلة ومطياف الكتلة للربط المتقاطع.

- **الكروماتوغرافيا:** تُعدّ هذه التقنية أساسية لتنقية البروتينات وتحليلها. تفصل كروماتوغرافيا الاستبعاد الحجمي البروتينات بناءً على حجمها الجزيئي، بينما تستغل كروماتوغرافيا التبادل الأيوني الاختلافات في الشحنة السطحية. أما كروماتوغرافيا الألفة، فتستغل الارتباط النوعي للبروتين برابط مُثبّت - مثل الأعمدة المُخلّبة بالنيكل للبروتينات المُعاد تركيبها والموسومة بالهيستيدين، أو الأعمدة القائمة على الأجسام المضادة للبروتينات الأصلية - مما يُتيح عزل البروتينات بدرجة نقاء عالية في خطوة واحدة. تعمل تقنية كروماتوغرافيا السائل عالي الأداء ((HPLC على تحسين الدقة والسرعة بشكل أكبر، مما يجعل الكروماتوغرافيا لا غنى عنها في كل من البحث والتكنولوجيا الحيوية الصناعية (Nelson et al., 2021, pp. 121–127).

5. 2 الطرق الحاسوبية

أصبحت استخدام الحاسوب مكملاً أساسياً للتقنيات التجريبية، إذ توفر رؤى هيكلية ووظيفية وأنظمة على نطاق غير مسبوق.

- **المعلوماتية الحيوية:** تُطبّق الأدوات الحاسوبية لتخزين البيانات الحيوية واسترجاعها وتحليلها وتفسيرها. في أبحاث البروتينات، تشمل المعلوماتية الحيوية مع التسلسلات، وتحديد الأنماط، والتحليل التطوري، والتنبؤ بالخصائص الفيزيائية والكيميائية. تُمكّن أدوات مثل BLAST من التحديد السريع للبروتينات المتماثلة بين الأنواع، بينما توفر قواعد البيانات مثل UniProt شروحاً شاملة لتسلسلات البروتينات ووظائفها وتفاعلاتها (UniProt Consortium, 2023, pp. D523–D531). تُعدّ مسارات المعلوماتية الحيوية جزءاً لا يتجزأ من شرح الجينوم، وعلم البروتينات، وتحديد المتغيرات



المرتبطة بالأمراض.

- **بنك بيانات البروتين :(PDB)** يُعدّ بنك بيانات البروتين المستودع الرئيسي للهياكل ثلاثية

الأبعاد المحددة تجريبياً للجزيئات الحيوية الكبيرة، بما في ذلك البروتينات والأحماض النووية. تأسست قاعدة بيانات البروتينات عام 1971، ونمت لتضم أكثر من 200,000 بنية بروتينية تم تحديدها باستخدام تقنيات علم البلورات بالأشعة السينية، والرنين المغناطيسي النووي، والمجهر الإلكتروني فائق البرودة (Burley et al., 2021, pp. D498–D503) توفر PDB وصولاً مجانياً إلى البيانات البنيوية، مما يُمكّن الباحثين حول العالم من تصور وتحليل ومقارنة بنى البروتينات. تُشكل المعلومات البنيوية من PDB أساساً لتصميم الأدوية، ودراسات العلاقة بين البنية والوظيفة، وتطوير الخوارزميات التنبؤية.

- **AlphaFold:** فيُمثل نقلة نوعية في مجال التنبؤ ببنية البروتينات. طوّرته شركة DeepMind، حيث يستخدم خوارزميات التعلم العميق المُدرّبة على بنى بروتينية معروفة للتنبؤ بالبنى ثلاثية الأبعاد مباشرةً من تسلسلات الأحماض الأمينية بدقة تقارب دقة الطرق التجريبية (Jumper et al., 2021, pp. 583–589). وقد أتاح توفره إنشاء نماذج بنيوية لملايين البروتينات، بما في ذلك العديد من الأهداف التي كانت عصية على الدراسة سابقاً، مما سرّع البحث في علم الأحياء البنيوي، واكتشاف الأدوية، وهندسة البروتينات. توفر هذه القاعدة بيانات لبنية البروتينات وصولاً مفتوحاً إلى هذه التنبؤات (Varadi et al., 2022, pp. D453–D460).
- **الالتحام الجزيئي:** هو أسلوب حسابي يتنبأ بالاتجاه الأمثل وقوة ارتباط جزيء صغير (رابط) بموقع ارتباط البروتين. تقوم خوارزميات الالتحام بمعاينة أوضاع الارتباط المحتملة وتقييمها بناءً على تكامل الشكل، والخصائص الكهروستاتيكية، وكراهية الماء. تُعد هذه التقنية أساسية في اكتشاف الأدوية القائم على البنية، إذ تُمكّن من الفحص الافتراضي لمكتبات المركبات الكبيرة والتصميم العقلاني للمثبطات والمعدلات. يُستكمل الالتحام بمحاكاة الديناميكا الجزيئية، التي تُحاكي السلوك الديناميكي لمركبات البروتين-الرابط مع مرور الوقت (Meng et al., 2011, pp. 146–157, Hollingsworth & Dror, 2018, pp. 172–187).

6. التحديات والاتجاهات المستقبلية

6. 1 الذكاء الاصطناعي

يُتوقع أن يُحدث الذكاء الاصطناعي، ولا سيما التعلم العميق، نقلة نوعية في أبحاث البروتينات. وقد أثبت برنامج AlphaFold قدرة الذكاء الاصطناعي على حلّ تحدياتٍ مُستعصية في التنبؤ بالبنية، إلا أن إمكانياته تتجاوز ذلك، حيث تُطبّق مناهج الذكاء الاصطناعي في تصميم

البروتينات، والتنبؤ بوظائفها، ورسم خرائط التفاعلات، وتفسير بيانات البروتينات المعقدة. ومن المتوقع أن تُدمج التطورات المستقبلية البيانات متعددة الوسائط)التسلسل، والبنية، والديناميكيات، والتفاعلات(لبناء نماذج شاملة لسلوك البروتينات. وتشمل التحديات الحاجة إلى بيانات تدريب عالية الجودة، وقابلية تفسير التنبؤات، وترجمة النماذج الحاسوبية إلى فرضيات قابلة للاختبار تجريبيًا (Jumper et al., 2021, pp. 583–589; Watson et al., 2023, pp. 117–126).

6. 2 الطب الشخصي

يهدف الطب الشخصي إلى تصميم العلاج الطبي بما يتناسب مع خصائص كل مريض على حدة، وتلعب البروتينات دورًا محوريًا في هذا النموذج. ويمكن لتحليل البروتينات في عينات المرضى تحديد المؤشرات الحيوية للأمراض، والتنبؤ بالاستجابات العلاجية، ومراقبة فعالية العلاج. تؤثر الاختلافات الجينية في البروتينات، سواءً كانت وراثية أو جسدية، على استقلاب الأدوية، وأهدافها، وقابلية الإصابة بالأمراض (Ashley, 2016, pp. 211–218). يُتيح دمج البيانات الجينومية والبروتيومية والسريرية تصنيفات تشخيصية أكثر دقة وعلاجات مُوجَّهة، لا سيما في علم الأورام، حيث تُوجِّه التشخيصات المصاحبة القائمة على التعبير البروتيني اختيار العلاج (Hasin et al., 2017, pp. 694–707).

6. 3 اكتشاف الأدوية

يُعدّ البحث في البروتينات أساسيًا لاكتشاف الأدوية، إذ تُشكِّل البروتينات غالبية أهداف الأدوية. يعتمد تصميم الأدوية القائم على البنية على هياكل البروتينات عالية الدقة لتطوير جزيئات ترتبط على وجه التحديد بالمواقع النشطة أو المواقع التغايرية. يُسرِّع اكتشاف الأدوية القائم على التجزئة، والفحص الافتراضي، والالتحام الحاسوبي من تحديد المركبات الرائدة. وقد مكّن ظهور المجهر الإلكتروني فائق البرودة من تحديد البنية الجزيئية لبروتينات الغشاء والمعقدات الكبيرة التي لم يكن من الممكن الوصول إليها سابقًا، مما فتح آفاقًا علاجية جديدة. على الرغم من هذه التطورات، لا تزال هناك تحديات في التنبؤ بفعالية الأدوية، والحد من الآثار الجانبية غير

المرغوب فيها، والتغلب على مقاومة الأدوية (Sliwoski et al., 2014, pp. 1566–1576; Meng et al., 2011, pp. 146–157, Cheng, 2015, pp. 139–152).

6. 4 البروتينات العلاجية

تُعدّ البروتينات العلاجية بما في ذلك الأجسام المضادة وحيدة النسيلة، والإنزيمات المُعاد تركيبها، والهرمونات، والسيتوكينات من أسرع فئات الأدوية نموًا. وقد أحدثت الأجسام المضادة وحيدة النسيلة، مثل تراستوزوماب)علاج موجه للسرطان(وأداليموماب)دواء مضاد للروماتيزم ومثبط للمناعة(، نقلة نوعية في علاج السرطان وأمراض المناعة الذاتية. ويُعدّ الأنسولين المُعاد تركيبه، وهرمون النمو، وعوامل التخثر من العلاجات القياسية لاضطرابات الغدد الصماء والدم (Leader et al., 2008, pp. 118–132). وتستمر التطورات في هندسة البروتينات، بما في ذلك تحويل الأجسام المضادة إلى أجسام مضادة بشرية، وتحسين منطقة Fc، وبناء الأجسام المضادة ثنائية التخصص، في توسيع نطاق الإمكانيات العلاجية. وتشمل التحديات الاستجابة المناعية، وتكاليف الإنتاج، والحاجة إلى تركيبات مستقرة (Labrijn et al., 2019, pp. 585–604).

6. 5 علم البروتيوميات أو)علم البروتينات(

هو الدراسة الشاملة واسعة النطاق لجميع البروتينات (البروتيوم) التي تنتجها أو تعدّلها الخلية أو النسيج أو الكائن الحي في وقت وظروف محددة. يُمكّن لهذا العلم القائم على قياس الطيف الكتلي من تحديد وقياس كميات آلاف البروتينات من الخلايا والأنسجة والسوائل الحيوية. ويكشف تحليل التعديلات ما بعد الترجمة (علم البروتينات الفوسفورية، وعلم الأسيتيل، وعلم اليوبيكويتين) عن شبكات تنظيمية لا يمكن استنتاجها من التعبير الجيني وحده (Aebersold & Mann, 2016, pp. 37–51). ويبرز علم البروتينات أحادي الخلية كأفق واعد لفهم التباين الخلوي. ويُعدّ دمجه مع علم الجينوم، وعلم النسخ، وعلم الأيض . أي علم البروتينات المتعدد أمرًا أساسيًا لبناء نماذج شاملة للصحة والمرض (Specht & Slavov, 2021, pp. 102–110).

المصادر

1. Aebersold, R., & Mann, M. (2016). Mass-spectrometric exploration of proteome structure and function. *Nature, 537*, 347–355. https://doi.org/10.1038/nature19949

2. Ashley, E. A. (2016). Towards precision medicine. *Nature Reviews Genetics, 17*(9), 507–522. https://doi.org/10.1038/nrg.2016.86

3. Burley, S. K., Bhikadiya, C., Bi, C., Bittrich, S., Chen, L., Crichlow, G. V., Christie, C. H., Dalenberg, K., Di Costanzo, L., Duarte, J. M., Dutta, S., Feng, Z., Ganesan, S., Goodsell, D. S., Ghosh, S., Green, R. K., Guranović, V., Guzenko, D., Hudson, B. P., Lawson, C. L., Liang, Y., Lowe, R., Namkoong, H., Peisach, E., Persikova, I., Randle, C., Rose, A., Rose, Y., Sali, A., Segura, J., Sekharan, M., Shao, C., Tao, Y.-P., Voigt, M., Westbrook, J. D., Young, J. Y., Zardecki, C., & Zhuravleva, M. (2021). RCSB Protein Data Bank: Powerful new tools for exploring 3D structures of biological macromolecules for basic and applied research and education in fundamental biology, biomedicine, biotechnology, bioengineering and energy sciences. *Nucleic Acids Research, 49*(D1), D437–D451. https://doi.org/10.1093/nar/gkaa1038

4. Crowther, J. R. (2008). *The ELISA guidebook* (2nd ed.). Humana Press. https://doi.org/10.1007/978-1-60327-254-4

5. Hasin, Y., Seldin, M., & Lusis, A. (2017). Multi-omics approaches to disease. *Genome Biology, 18*, 83. https://doi.org/10.1186/s13059-017-1215-1

6. Hollingsworth, S. A., & Dror, R. O. (2018). Molecular dynamics simulation for all. *Neuron, 99*(6), 1129–1143. https://doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011

7. Jumper, J., Evans, R., Pritzel, A., Green, T., Figurnov, M., Ronneberger, O., Tunyasuvunakool, K., Bates, R., Žídek, A., Potapenko, A., Bridgland, A., Meyer, C., Kohl, S. A. A., Ballard, A. J., Cowie, A., Romera-Paredes, B., Nikolov, S., Jain, R., Adler, J., Back, T., Petersen, S., Reiman, D., Clancy, E., Zielinski, M., Steinegger, M., Pacholska, M., Berghammer, T., Bodenstein, S., Silver, D., Vinyals, O., Senior, A. W., Kavukcuoglu, K., Kohli, P., & Hassabis, D. (2021). Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold. *Nature, 596*, 583–589. https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2

8. Kurien, B. T., & Scofield, R. H. (2006). Western blotting. *Methods, 38*(4), 283–293. https://doi.org/10.1016/j.ymeth.2005.11.007

9. Labrijn, A. F., Janmaat, M. L., Reichert, J. M., & Parren, P. W. H. I. (2019). Bispecific antibodies: A mechanistic review of the pipeline. *Nature Reviews Drug Discovery, 18*, 585–608. https://doi.org/10.1038/s41573-019-0028-1

10. Leader, B., Baca, Q. J., & Golan, D. E. (2008). Protein therapeutics: A summary and pharmacological classification. *Nature Reviews Drug Discovery, 7*, 21–39. https://doi.org/10.1038/nrd2399

11. Mahmood, T., & Yang, P.-C. (2012). Western blot: Technique, theory, and trouble shooting. *North American Journal of Medical Sciences, 4*(9), 429–434. https://doi.org/10.4103/1947-2714.100998

12. Meng, X.-Y., Zhang, H.-X., Mezei, M., & Cui, M. (2011). Molecular docking: A powerful approach for structure-based drug discovery. *Current Computer-Aided Drug Design, 7*(2), 146–157. https://doi.org/10.2174/157340911795677602

13. Sliwoski, G., Kothiwale, S., Meiler, J., & Lowe, E. W., Jr. (2014). Computational methods in drug discovery. *Pharmacological Reviews, 66*(1), 334–395. https://doi.org/10.1124/pr.112.007336

14. Varadi, M., Anyango, S., Deshpande, M., Nair, S., Natassia, C., Yordanova, G., Yuan, D., Stroe, O., Wood, G., Laydon, A., Žídek, A., Green, T., Tunyasuvunakool, K., Petersen, S., Jumper, J., Clancy, E., Green, R., Vora, A., Lutfi, M., Figurnov, M., Cowie, A., Hobbs, N., Kohli, P., Kleywegt, G., Birney, E., Hassabis, D., & Velankar, S. (2022). AlphaFold Protein Structure Database: Massively expanding the structural coverage of protein-sequence space with high-accuracy models. *Nucleic Acids Research, 50*(D1), D439–D444. https://doi.org/10.1093/nar/gkab1061

15. Watson, J. L., Juergens, D., Bennett, N. R., Trippe, B. L., Yim, J., Eisenach, H. E., Ahern, W., Borst, A. J., et al. (2023). De novo design of protein structure and function with RFdiffusion. *Nature, 620*, 1089–1100. https://doi.org/10.1038/s41586-023-06415-8

الفصل الثامن

الكيمياء الصناعية وتطوير المواد والمنتجات

Industrial Chemistry and the Development of Materials and Products

م.م. مكارم علي عناد
جامعة القادسية - العراق

الملخص

يتناول الفصل الكيمياء الصناعية وتطوير المواد والمنتجات من خلال الانتقال من المعرفة الكيميائية إلى عمليات إنتاج يمكن التحكم فيها وتوسيع نطاقها. ويعرض مفهوم الكيمياء الصناعية وتطورها، موضحًا أن نجاح العملية لا يتحدد بإمكان حدوث التفاعل وحده، بل بالمردود والانتقائية وظروف التشغيل والفصل والتنقية والجودة والسلامة والتكلفة والأثر البيئي. ويصل هذا المنظور بين البحث والتطوير والإنتاج والاستخدام النهائي.

ويميز الفصل بين تطوير المادة وتطوير المنتج، ثم يشرح اختيار المواد في ضوء الوظيفة والقيود والهدف التصميمي والخصائص المطلوبة. وتُستخدم مؤشرات أداء ومعادلات وأمثلة لإيضاح كيفية الموازنة بين خواص قد تتعارض، مثل الصلابة والكتلة أو الأداء والتكلفة. كما يناقش دور التركيب والبنية والتصنيع في التحكم بالخواص، ومكانة المحفزات والبوليمرات والمواد المتقدمة في التطوير الصناعي.

وتعالج المناقشة تقويم العمليات والمنتجات من حيث كفاءة استخدام الموارد والطاقة وتقليل المخلفات وإمكان إعادة التدوير. ويربط الفصل هذه الاعتبارات بالاستدامة وبالحاجة إلى تنظيم القرار اعتمادًا على القياس والتحليل، لا على المفاضلة الانطباعية بين المواد. وتخلص المعالجة إلى أن تطوير المنتج الكيميائي عمل متكامل يجمع الفهم الجزيئي ومتطلبات التصنيع والأداء والاقتصاد والبيئة. وتتمثل المساهمة في بناء عرض تحليلي تعليمي يربط أدوات اختيار المواد ومبادئ الكيمياء الصناعية بقرارات التطوير، مع المحافظة على الصيغ والشروط التي تقيد استخدام كل مؤشر أو مثال تطبيقي في المتن.

الكلمات المفتاحية: الكيمياء الصناعية؛ تطوير المنتجات؛ اختيار المواد؛ مؤشرات الأداء؛ الاستدامة

Abstract

This chapter examines industrial chemistry and the development of materials and products through the transition from chemical knowledge to controllable, scalable production. It explains that a successful process depends not only on whether a reaction can occur, but also on yield, selectivity, operating conditions, separation, purification, quality, safety, cost, and environmental effects. Research, development, production, and end use are therefore treated as connected activities.

The chapter distinguishes material development from product development and discusses selection in relation to function, constraints, design objectives, and required properties. Performance indices, equations, and examples show how competing requirements, such as stiffness and weight or performance and cost, may be balanced. Composition, structure, and processing are considered as means of controlling properties, together with the roles of catalysts, polymers, and advanced materials.

The discussion also evaluates processes and products through resource and energy efficiency, waste reduction, and opportunities for recycling. These considerations connect sustainability with decisions based on measurement and analysis rather than impressionistic comparison of materials. The chapter concludes that chemical product development requires coordination among molecular understanding, manufacturing requirements, performance, economics, and environmental considerations. Its contribution is an analytical and educational account linking materials selection tools with industrial chemistry and development decisions. Equations and examples remain subject to the assumptions and conditions stated in the text; they are not

presented as unrestricted rules that can replace specification of the intended function and operating context.

Keywords: Industrial chemistry; Product development; Materials selection; Performance indices; Sustainability

3-1 مفهوم الكيمياء الصناعية وتطورها

تعد الكيمياء الصناعية واحدة من المجالات التطبيقية التي تربط المعرفة الكيميائية الأساسية بالتصنيع والإنتاج التجاري، حيث تهدف إلى تحويل المواد الأولية إلى مواد ومنتجات ذات قيمة اقتصادية ووظيفية عبرعمليات كيميائية يمكن التحكم بها وتوسيع نطاقها من المختبر إلى المصنع. ولا تقتصر الكيمياء الصناعية على معرفة التفاعل الكيميائي أوتحضير مادة جديدة، بل تمتد و تشمل دراسة المردود والانتقائية، واختيار المواد الأولية والمذيبات والمحفزات، وضبط ظروف التشغيل، وفصل المنتجات وتنقيتها، وضمان الجودة والسلامة، الى جانب دراسة الجدوى الاقتصادية والأثر البيئي للعملية. وبذلك اصبحت حلقة وصل أساسية بين علوم الكيمياء المختلفة ومنظومة الإنتاج الحديثة القائمة على التكامل بين البحث والتطوير والهندسة والتحليل وضبط الجودة والإدارة الصناعية (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 1–10).

وقد ارتبط تطور هذا المجال تاريخيًا بالحاجة إلى إنتاج مواد كيميائية بكميات كبيرة وبجودة محددة. ولم تعد الصناعات الكيميائية الحديثة تعتمد على الاساليب التجريبية البسيطة، بل أصبحت تستند إلى فهم دقيق للعلاقة بين البنية الجزيئية والخواص والأداء، وإلى استخدام المفاعلات الموجهة هندسيًا، والمحفزات عالية الانتقائية، وعمليات الفصل المتقدمة، وأجهزة القياس والتحكم الآلي. كما اسهم تطور الحوسبة والذكاء الاصطناعي في الانتقال التدريجي من نموذج التطوير القائم على التجربة والخطأ إلى نموذج يعتمد على البيانات والنمذجة والتنبؤ بالخواص قبل تحضير المادة بصورة كاملة (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 1–25; Tran et al., 2024, pp. 866–886).

ومن الناحية الاقتصادية، شهدت الصناعة الكيميائية تحولاً واضحاً من التركيز على إنتاج المواد الكيميائية الأساسية بكميات ضخمة إلى تطوير مواد متخصصة ذات قيمة مضافة مرتفعة. كالبوليمرات المتقدمة، والمواد المركبة و النانوية، والمواد المستخدمة في الإلكترونيات والطاقة

والطب ومعالجة المياه. وبناءً على ذلك، فان نجاح المنتج الكيميائي لم يعد يقاس بحجم الإنتاج فحسب، بل بقدرته على تحقيق مجموعة متكاملة تتعلق بالأداء والتكلفة والسلامة والاستدامة وإمكانية إعادة التدوير ((Cussler & Moggridge, 2011, pp. 26–50.

3-2 العلاقة بين تطوير المنتج واختيار المواد

يختلف تطوير المادة عن تطوير المنتج في أن تطوير المادة يركز على الحصول على تركيب أو بنية ذات خصائص محددة، في حين يركز تطوير المنتج على استخدام المادة ضمن نظام يؤدي وظيفة معينة. ولذلك فإن المادة ذات الخصائص الممتازة في خاصية واحدة قد لا تكون الأنسب للمنتج إذا كانت لا تحقق القيود التصميمية أو تتطلب ظروف تصنيع غير مناسبة. ويبدأ الاختيار العلمي للمادة بتحديد الوظيفة والقيود والهدف التصميمي، ثم تحديد الخصائص التي تسمح بالمفاضلة بين المواد (Ashby, 2011, pp. 97–124).

وتتيح هذه المنهجية استبعاد المواد التي لا تحقق المتطلبات الأساسية قبل الانتقال إلى المقارنة التفصيلية، ثم ترتيب المواد الباقية وفق مؤشر أداء مناسب للوظيفة المطلوبة. وعندما يكون المطلوب الحصول على مكوّن يجمع بين الصلابة وخفة الوزن، فإن استخدام معامل المرونة (E) وحده لا يكفي للمفاضلة بين المواد، لأن الكثافة (ρ) تؤثر في كتلة المكوّن. ولذلك يستخدم مؤشر يجمع بين الخاصيتين، ومن أمثلته:

$$\mathrm{M} = \frac{E^{\frac{1}{3}}}{\rho}$$

حيث يمثل (M) مؤشر الأداء، و(E) معامل يونغ، و (ρ)كثافة المادة. ويتيح المؤشر ترتيب المواد وفق قدرتها على تحقيق الصلابة مع المحافظة على انخفاض الكتلة (Ashby, 2011, pp. 97–124).

أما عندما يكون الهدف الحصول على مقاومة مرتفعة مع كتلة منخفضة، فيمكن استخدام مؤشر يرتبط بإجهاد الخضوع (σ_y) والكثافة:

$$M = \frac{\sigma_y^{\frac{2}{3}}}{\rho}$$

وتتغير صيغة مؤشر الأداء تبعاً لطبيعة المكوّن ونوع التحميل والهدف التصميمي؛ ولذلك لا توجد مادة واحدة يمكن اعتبارها الأفضل بصورة مطلقة، وإنما تتغير أفضلية المادة بتغير الوظيفة

والقيود والأهداف التصميمية كما يتضح في الجدول(3-1). (Ashby, 2011, pp. 97–124).

جدول (3-1): عناصر الاختيار العلمي للمادة

العنصر	المضمون
الوظيفة	تحديد المهمة التي تؤديها المادة أو المكون
القيود	الحدود التي يجب ألا تتجاوزها خواص المادة
الهدف	الخاصية أو الأداء المراد تحسينه
المتغيرات	العناصر التي يمكن تغييرها أثناء التصميم
مؤشر الأداء	علاقة رياضية تربط الخواص بالهدف التصميمي
الاختيار النهائي	تحديد المادة الأكثر ملاءمة بعد تطبيق القيود

وبذلك لا يمثل اختيار المادة مرحلة منفصلة عن تصميم المنتج، بل يمثل جزءاً من عملية التصميم، لأن تغير الوظيفة أو القيود يؤدي إلى تغير معايير الاختيار وربما إلى تغير المادة المختارة(Ashby, 2011, pp. 97–124).

3-3منهجية تطوير المنتج الكيميائي

تتطلب عملية تطوير المنتج الكيميائي الانتقال المنظم من الحاجة إلى المنتج النهائي. حيث تبدأ العملية بتحديد الحاجة، ثم تحويلها إلى مواصفات، وتوليد البدائل، واختيار الحل المناسب، وتصميم المنتج، ودراسة إمكانية تصنيعه، ثم اختباره وتحسينه قبل ان يتم الانتقال إلى الإنتاج. و هذه المراحل لا تمثل خطاً مستقيماً بصورة مطلقة، لأن نتائج الاختبار قد تؤدي إلى العودة إلى مرحلة سابقة وتعديل المواصفات أو المادة أو التصميم (Cussler & Moggridge ,2011,pp. 17–63)

وتعتبرمرحلة تحديد الحاجة أساس عملية التطوير؛ إذ ينبغي أن تتحول الحاجة العامة إلى مواصفات كمية قابلة للقياس. فكلما كانت المواصفات أكثر تحديداً، أصبح من الممكن مقارنة البدائل بصورة موضوعية وربط متطلبات المنتج بخواص المواد والعمليات اللازمة لتحقيقها (Cussler & Moggridge ,2011,pp. 36–63)

بعد تحديد المواصفات تبدأ مرحلة توليد الأفكار، وفيها يتم البحث عن أكثر من بديل يمكن أن يحقق الوظيفة نفسها. بعدها تستبعد البدائل التي لا تحقق القيود الأساسية، ويتم ترتيب البدائل المتبقية وفق خواصها ومؤشرات أدائها تمهيداً لاختيار البديل الأكثر ملاءمة (Cussler & Moggridge ,2011,pp. 64-110) ويمكن توضيح التسلسل العام لهذه الخطوات بالمخطط (1-3).

مخطط (1-3): التسلسل العام لتطوير المنتج الكيميائي

المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 17–63; pp. 64–110; pp. 111–160; pp. 161–236)

ولا تنتهي عملية التطوير عند إنتاج المادة، لأن الانتقال إلى التصنيع يتطلب التأكد من قدرة العملية على إنتاج المنتج بالمواصفات نفسها بصورة متكررة. وقد تظهر في هذه المرحلة مشكلات لا تظهر في المختبر، الأمر الذي يجعل التصنيع التجريبي جزءاً مهماً من عملية التطوير (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 161–236)

3-4 الانتقال من المختبر إلى الإنتاج الصناعي

يمثل الانتقال من المستوى المختبري إلى الإنتاج الصناعي إحدى المراحل الأساسية في تطوير المنتج الكيميائي. فالعملية المختبرية تتم عادة بأحجام صغيرة تسمح بسهولة التحكم في ظروف التشغيل، بينما تتغير بعض خصائص انتقال الحرارة والكتلة والخلط عند زيادة حجم العملية. ولذلك فإن زيادة كمية المواد لا تعني بالضرورة إمكانية المحافظة على ظروف التشغيل نفسها بصورة مباشرة(Cussler & Moggridge, 2011, pp. 161–236)

وتظهر أهمية هذا الأمر بصورة خاصة في العمليات التي تتضمن انتقالاً حرارياً أو كتلياً مهماً أو أوساطاً عالية اللزوجة أو معدلات تفاعل مرتفعة. فعند زيادة الحجم قد تصبح إزالة الحرارة أكثر صعوبة، وقد يتغير توزيع المواد داخل المفاعل، كما قد تتغير معدلات انتقال الكتلة والحرارة. ولهذا ينبغي دراسة العملية من منظور هندسي متكامل قبل اعتمادها للإنتاج التجاري (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 161–236)

ويمثل المصنع التجريبي حلقة وسط بين المختبر والمصنع، إذ يسمح باختبار ظروف التشغيل والمعدات ونظم التحكم قبل الاستثمار في الإنتاج واسع النطاق. وتكمن قيمته في كشف المشكلات المرتبطة بالعملية والتي قد لا تظهر بصورة واضحة في التجارب الصغيرة وفق مسار الانتقال المبين في المخطط (2-3) (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 161–236)

مخطط (3-2): الانتقال من البحث إلى الإنتاج

المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 161–236)

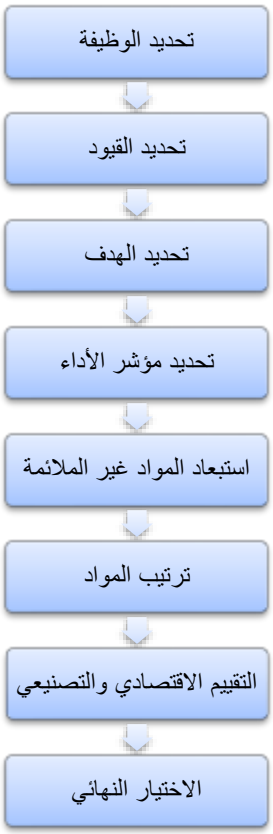
وبذلك تصبح قابلية التصنيع أحد معايير اختيار المادة والمنتج منذ المراحل الأولى، وليس قراراً يؤجل إلى ما بعد الانتهاء من تطوير التركيب (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 111–160; pp. 161–236)

3-5 اختيار المواد ومؤشرات الأداء

تسمح مخططات خواص المواد ومؤشرات الأداء بتحويل عملية الاختيار من مقارنة وصفية إلى مقارنة كمية. ويبدأ ذلك بتحديد الوظيفة، ثم القيود، ثم الهدف، وبعدها تحديد العلاقة الرياضية التي تجمع الخواص ذات الصلة؛ كما يلخصه المخطط (3-3) وتسمح هذه المنهجية باستبعاد المواد غير الملائمة وترتيب المواد المتبقية وفق قدرتها على تحقيق متطلبات التصميم (Ashby, 2011, pp. 97–124)

ويكتسب هذا الأسلوب أهمية خاصة عندما تتعارض الأهداف؛ فقد تكون المادة الأفضل من حيث الصلابة ليست الأفضل من حيث الكثافة أو الكلفة أو قابلية التصنيع. ولذلك فإن الاختيار النهائي يجب أن يراعي مجموعة القيود والأهداف المرتبطة بالتطبيق(Ashby, 2011, pp. 97–124)

مخطط (3-3): منهجية اختيار المواد



المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على(Ashby, 2011, pp. 97–124)

وتوفر هذه المنهجية أساساً مناسباً لتطوير المنتجات الصناعية، لأنها تربط بين متطلبات الاستخدام وخواص المادة بدلاً من اختيار المواد بصورة منفصلة عن المنتج(Ashby, 2011, pp. 97–124)

3-6 المواد المتقدمة وتطوير المنتجات

ارتبط تطور المنتجات الصناعية بتطور المواد المستخدمة فيها، إذ أدت المواد الجديدة أو المحسنة إلى إتاحة وظائف وتصاميم لم تكن متاحة بالمواد التقليدية. وتشير دراسة تطور المواد إلى انتقال

الأهمية النسبية من المواد التقليدية إلى البوليمرات والمركبات والسيراميك والمواد ذات الخصائص المتخصصة، مع استمرار ارتباط اختيار المادة بمتطلبات التصميم (Ashby, 2011, pp. 1–13)

وتشمل المواد المستخدمة في التطبيقات الحديثة مواد ذات خواص ميكانيكية أو حرارية أو كهربائية متخصصة، كما تشمل المواد المركبة والمواد ذات البنى الوظيفية. ويظل اختيار المادة مرتبطاً بالوظيفة والقيود والهدف، بحيث لا يكون ارتفاع قيمة خاصية واحدة كافياً للحكم على ملاءمة المادة(Ashby, 2011, pp. 31–56; pp. 97–124)

وتزداد أهمية هذا المنهج في المواد المركبة، إذ يمكن الجمع بين مادتين أو أكثر لتحقيق مزيج من الخصائص، بينما يتأثر الأداء النهائي بالبنية وطريقة التصنيع إلى جانب خواص المكونات. ولذلك ينبغي أن ينظر تطوير المادة إلى العلاقة بين المادة والبنية وطريقة التصنيع والوظيفة النهائية(Ashby, 2011, pp. 97–124)

3-7 المواد النانوية وتطبيقاتها الصناعية

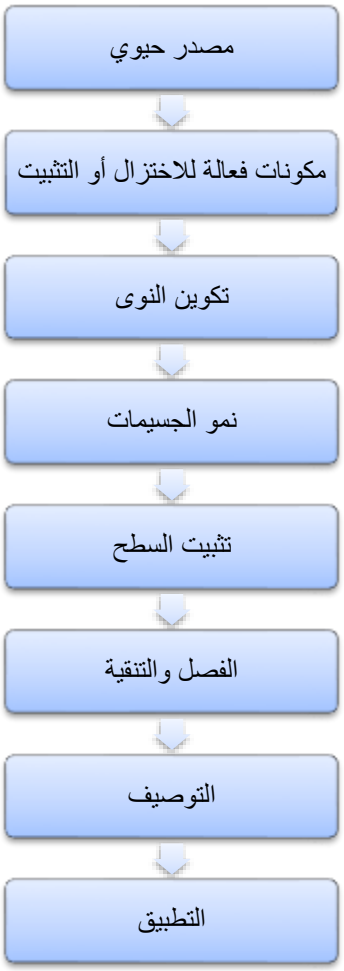
تتميز المواد النانوية بخصائص يمكن أن تختلف عن خواص المادة نفسها عند المقاييس الأكبر، ويرتبط ذلك، في جانب منه، بزيادة نسبة مساحة السطح إلى الحجم وبأهمية الظواهر السطحية. وتستخدم المواد النانوية في مجالات متعددة تشمل الطاقة، والمعالجة البيئية، والتطبيقات الطبية والزراعية والغذائية، فضلاً عن التطبيقات المرتبطة بالمستشعرات والمواد الوظيفية (Osman et al., 2024, pp. 841–887)

وقد تطورت طرائق تحضير الجسيمات النانوية باتجاه استخدام مصادر حيوية ومخلفات وكتلة حيوية في بعض عمليات التخليق، بهدف تقليل الاعتماد على بعض المواد الكيميائية التقليدية وتقليل الأثر البيئي المرتبط بالتحضير. وتشمل المصادر المستخدمة الكائنات الدقيقة والفطريات والنباتات والمخلفات الزراعية والصناعية الحيوية(Osman et al., 2024, pp. 841–887)

ولا يعني التحضير الأخضر الاستغناء عن التحكم في ظروف العملية؛ إذ تتأثر خصائص الجسيمات الناتجة بظروف التحضير وبطبيعة المصدر الحيوي، كما أن الحصول على منتج

متجانس وقابل للتكرار يمثل متطلباً مهماً للانتقال إلى الاستخدام الصناعي وفق مسار التحضير المبين في المخطط (3-4) (Osman et al., 2024, pp. 841–887)

مخطط (3-4): المسار العام للتحضير الأخضر للجسيمات النانوية



المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على(Osman et al., 2024, pp. 841–887)

وتشمل التطبيقات التي تناولتها الأدبيات الحديثة للتحضير الأخضر مجالات إنتاج وتخزين الطاقة، والطب، والمعالجة البيئية، والزراعة والغذاء، وهو ما يعكس اتساع المجال التطبيقي للمواد النانوية المحضرة بطرائق تراعي متطلبات الاستدامة(Osman et al., 2024, pp. 841–887)

3-8 التحديات المرتبطة بالمواد النانوية

على الرغم من الإمكانات التطبيقية للمواد النانوية، فإن استخدامها الصناعي يتطلب تقييم خصائصها وسلوكها أثناء الاستخدام وبعده. فصغر الحجم وارتفاع النشاط السطحي يمكن أن يؤدي إلى سلوك يختلف عن المواد التقليدية، ولذلك ينبغي دراسة الاستقرار والتحول والتفاعل مع الأوساط المختلفة قبل التوسع في الاستخدام (Osman et al., 2024, pp. 841–887)

كما يمثل الانتقال من التحضير المختبري إلى الإنتاج الكبير تحدياً مهماً، لأن الحفاظ على الخصائص نفسها للجسيمات قد يصبح أكثر صعوبة عند زيادة حجم العملية. ولذلك يجب أن يكون التحكم في ظروف التحضير جزءاً من تصميم العملية، مع التحقق من خصائص المنتج النهائي(Osman et al., 2024, pp. 841–887)

3-9 الكيمياء الخضراء وتطوير المنتجات

تمثل الكيمياء الخضراء منهجاً لتصميم المنتجات والعمليات الكيميائية بهدف تقليل استخدام المواد الخطرة وتكوين النفايات منذ مرحلة التصميم، بدلاً من الاعتماد بصورة رئيسية على معالجة النفايات بعد تكوينها. ويتضمن هذا الاتجاه مجموعة من المبادئ المرتبطة بمنع النفايات، وزيادة كفاءة استخدام المواد، وتقليل المخاطر، واستخدام المواد الأولية المتجددة عندما يكون ذلك مناسباً، وتقليل استهلاك الطاقة، وتصميم المنتجات بصورة تراعي أثرها بعد الاستخدام (Anastas & Warner, 1998, pp. 30–33)

وتكمن أهمية هذا المنهج في أنه ينقل الاعتبار البيئي إلى مرحلة تصميم المنتج والتفاعل والعملية. فإذا تم اختيار مادة أو مسار تخليقي ينتج كميات كبيرة من المخلفات، فإن معالجة المخلفات لاحقاً لا تعالج أصل المشكلة بصورة كاملة؛ أما إذا صممت العملية منذ البداية بحيث تقلل النفايات، فإن الأثر البيئي يمكن تقليله عند المصدر. (Anastas & Warner, 1998, pp. 30–33)

ومن هنا أصبحت مؤشرات القياس الكمي مهمة في تقييم العمليات الخضراء، لأنها تسمح بمقارنة البدائل بصورة موضوعية، ولا سيما عندما تكون المقارنة بين مسارات تخليقية مختلفة (Trost, 1991, pp. 1471–1477; Sheldon, 2007, pp. 1273–1283; Monteith et al., 2020, pp. 123–135)

3-10 الاقتصاد الذري (Atom Economy)

يقيس الاقتصاد الذري AE مدى استفادة التفاعل من ذرات المواد المتفاعلة في تكوين المنتج المرغوب، ويزداد عندما تذهب نسبة أكبر من الكتلة المولية للمواد المتفاعلة إلى المنتج النهائي. وقد طرح مفهوم الاقتصاد الذري بوصفه وسيلة لتقييم كفاءة استخدام المواد في التفاعلات الكيميائية(Trost, 1991, pp. 1471–1477)

ويمكن حساب الاقتصاد الذري وفق العلاقة:

$$\mathrm{AE}(\%) = \frac{\text{الكتلة المولية للمنتج المطلوب}}{\sum\text{الكتل المولية للمتفاعلات وفق المعادلة الستوكيومترية}} \times 100$$

فإذا كان التفاعل:

$$A+B \rightarrow P$$

وكانت الكتل المولية للمواد (A) و(B) تساوي (50) و(30) غم/مول على التوالي، بينما تبلغ الكتلة المولية للمنتج (P) مقدار (60) غم/مول، فإن:

$$\mathrm{AE} = \frac{60}{50+30}100$$

$$\mathrm{AE} = 75\%$$

ويمثل المثال تطبيقاً حسابياً توضيحياً للعلاقة السابقة. ويعني ذلك أن (75%) من الكتلة المولية النظرية للمتفاعلات تدخل في المنتج المطلوب وفق المعادلة الستوكيومترية. إلا أن الاقتصاد الذري لا يمثل المردود الفعلي للعملية، ولا يأخذ بصورة مباشرة كميات المذيبات أو مواد الفصل والتنقية؛ ولذلك ينبغي عدم استخدامه منفرداً للحكم على الأداء البيئي الكلي للعملية (Trost, 1991, pp. 1471–1477)

3-11 عامل النفايات وكثافة الكتلة E-Factor and Process Mass Intensity))

يمثل عامل النفايات E-Factor كمية النفايات المتولدة بالنسبة إلى كمية المنتج، ويستخدم بوصفه مؤشراً لتقييم كمية النفايات المرتبطة بالإنتاج الكيميائي(Sheldon, 2007, pp. 1273–1283)

ويمكن التعبير عنه بالعلاقة:

$$\text{E} - \text{Factor} = \frac{\text{كتلة النفايات}}{\text{كتلة المنتج}}$$

فإذا نتجت (20) كغم من النفايات عند إنتاج (100) كغم من المنتج، فإن:

$$\text{E} - \text{Factor} = \frac{20}{100}$$

$$\text{E} - \text{Factor} = 0.2$$

وتشير القيمة المنخفضة إلى انخفاض كمية النفايات بالنسبة إلى كمية المنتج، مع ضرورة تحديد حدود الحساب بصورة متسقة عند مقارنة عمليتين مختلفتين(Sheldon, 2007, pp. 1273–1283)

أما كثافة الكتلة للعملية (Process Mass Intensity, PMI) فتقيس إجمالي كتلة المواد الداخلة في العملية بالنسبة إلى كتلة المنتج النهائي، وتستخدم بوصفها مؤشراً كتلياً لتقييم الأداء البيئي للعملية(Monteith et al., 2020, pp. 123–135)

ويمكن التعبير عنها بالعلاقة:

$$\text{PMI} = \frac{\text{اجمالي كتلة المواد الداخلة}}{\text{كتلة المنتج النهائي}}$$

فإذا استخدمت العملية (500) كغم من المواد لإنتاج (100) كغم من المنتج:

$$\text{PMI} = \frac{500}{100}$$

$$\text{PMI} = 5$$

أي أن العملية استخدمت (5) كغم من المواد الداخلة لكل (1) كغم من المنتج. وتؤكد الأدبيات الخاصة بـPMI أهمية تحديد المواد الداخلة وحدود الحساب بصورة واضحة عند مقارنة العمليات، لأن الاختلاف في طريقة الحساب قد يؤدي إلى مقارنات غير عادلة (Monteith et al., 2020, pp. 123–135)

ولتوضيح كيفية التكامل بين هذه المعايير الثلاثة وتطبيقها مجتمعةAE و E-Factor و PMI نفترض أن عملية صناعية تستخدم 100 kg من المادة A و60 kg من المادة B و40

kg من مذيب، وينتج عنها 100 kg من المنتج النهائي، بينما تمثل المواد غير المستفاد منها والنفايات الأخرى 60 kg.

فإذا كانت كتلة المنتج الناتج 100 kg وكانت الكتل الستوكيومترية النظرية للمتفاعلات الداخلة في تكوينه 160 kg، فإن الاقتصاد الذري النظري يعتمد على الكتل المولية والمعادلة الكيميائية، وليس على الكميات الفعلية وحدها. وإذا كانت الكتلة المولية النظرية للمنتج 100 وحدة مقابل 160 وحدة من المتفاعلات:

$$AE = \frac{100}{160} * 100$$

$$AE = 62.5\%$$

أما عامل النفايات E-Factor، فإذا اعتبرنا أن 60 kg هي كتلة النفايات:

$$E - Factor = \frac{60}{100}$$

$$E - Factor = 0.60$$

بينما تكون قيمة PMI، إذا اعتُبرت جميع المواد الداخلة والبالغة 200 kg ضمن حدود الحساب:

$$PMI = \frac{200}{100}$$

$$PMI = 2$$

ويبين المثال أن كل مؤشر من المؤشرات الثلاثة يقدم جانبا محتلفا من التقييم البيئي ، ولذلك فان استخدامها مجتمعة يمنح رؤية اكثر شمولا و دقة من الاعتماد على مؤشر واحد كما هو موضح في الجدول (3-2) .

الجدول (3-2): مؤشرات التقييم البيئي للعملية

المؤشر	ما يقيسه
(AE)	الاستفادة النظرية من ذرات المتفاعلات
(E-Factor)	كمية النفايات بالنسبة إلى المنتج
(PMI)	إجمالي المواد المستخدمة لإنتاج وحدة من المنتج

وتكمن أهمية استخدام هذه المؤشرات معاً في تقديم تقييم شامل ومستدام للعملية الكيميائية ؛ اذ يركز الاقتصاد الذري على الكفاءة الستوكيومترية، بينما يركزعامل النفايات على الحجم الفعلي

للمخلفات ، في حين يقيس مؤشر (PMI) إجمالي المواد الداخلة كافة. و عليه فان الاعتماد على مؤشر واحد لا يكفي لتقييم العملية بصورة متكاملة (Trost, 1991, pp. 1471–1477; Sheldon, 2007, pp. 1273–1283; Monteith et al., 2020, pp. 123–135)

3-12 المذيبات والتصميم الأخضر

يمثل اختيار المذيب جزءاً مهماً من تصميم العملية الكيميائية، لأن المذيبات والمواد المساعدة يمكن أن تشكل جزءاً مهماً من متطلبات العملية، ولذلك يرتبط تقليل استخدامها واختيار البدائل المناسبة بمبادئ الكيمياء الخضراء. كما تناولت الأدبيات الأصلية أمثلة على المذيبات وظروف التفاعل التي يمكن استخدامها ضمن مسارات تخليقية أكثر توافقاً مع مبادئ الكيمياء الخضراء (Anastas & Warner, 1998, pp. 90, 103–108)

ولا يكون تقييم المذيب منفصلاً عن العملية الكلية، لأن اختيار المذيب يرتبط بوظيفته في التفاعل والفصل والتنقية وبكمية استخدامه وإمكانية استرجاعه والتخلص منه. ولذلك ينبغي أن ينظر إلى المذيب ضمن منظومة العملية وليس باعتباره عنصراً مستقلاً (Anastas & Warner, 1998, pp. 103–108)

3-13الذكاء الاصطناعي وتصميم المواد

أصبح الذكاء الاصطناعي وتعلم الآلة من الأدوات المستخدمة في تسريع تطوير المواد، ولا سيما البوليمرات والمواد التي يكون فيها عدد التركيبات الممكنة كبيراً. وتعتمد هذه الأدوات على بيانات تربط التركيب والبنية بالخواص، ثم تستخدم النماذج للتنبؤ بخواص مواد جديدة أو لترتيب المواد المرشحة قبل تحضيرها مختبرياً. (Tran et al., 2024, pp. 866–886)

وتسمح هذه الطريقة بتقليل عدد التركيبات التي تحتاج إلى الاختبار المباشر، كما يمكن دمج النماذج الحسابية مع قواعد البيانات والتجارب بحيث تصبح عملية التطوير دورة متكررة تبدأ بالتنبؤ ثم التحضير والاختبار وإعادة استخدام النتائج في تحسين النموذج كما موضح في المخطط (5-3) (Tran et al., 2024, pp. 866–886)

مخطط (3-5): دورة التصميم الحسابي للمواد

المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على(Tran et al., 2024, pp. 866–886)

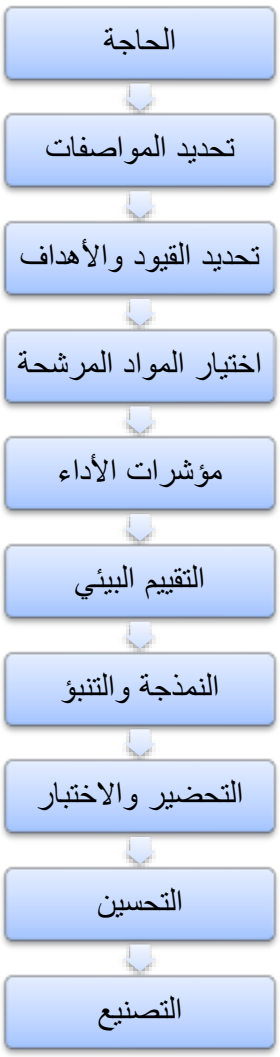
ولا يلغي استخدام الذكاء الاصطناعي الحاجة إلى الاختبار التجريبي؛ إذ تعتمد دقة النموذج على جودة البيانات المستخدمة في تدريبه، كما أن النماذج قد تواجه صعوبات عند تطبيقها خارج نطاق البيانات التي تدربت عليها. ولذلك ينبغي استخدام الذكاء الاصطناعي بوصفه أداة لتوجيه البحث وتقليل مساحة الاحتمالات، مع بقاء التحقق التجريبي مرحلة أساسية في تطوير المادة (Tran et al., 2024, pp. 866–886)

3-14 التكامل بين اختيار المواد والاستدامة والذكاء الاصطناعي

يمكن دمج منهج اختيار المواد مع الأدوات الحسابية ومبادئ الكيمياء الخضراء في إطار واحد لتطوير المنتجات. تبدأ العملية بتحديد الوظيفة والمواصفات والقيود، ثم اختيار المواد المرشحة باستخدام خواصها ومؤشرات أدائها، وبعد ذلك يمكن استخدام النماذج الحسابية لتضييق نطاق البحث، مع إدخال متطلبات الاستدامة ضمن معايير الاختيار ويمكن توضيح ذلك الاطار المكتمل

من خلال المخطط (3-6) (Ashby, 2011, pp. 97–124; Tran et al., 2024, pp. 866–886)

مخطط (3-6): التكامل بين اختيار المواد والاستدامة والتصميم الحسابي



المصدر: إعداد الباحث بالاعتماد على (Ashby, 2011, pp. 97–124; Tran et al., 2024, pp. 866–886)

ويتيح هذا الإطار تقليل الاعتماد على التجارب المتتابعة غير المنظمة، لأن الاختيار الأولي يقلل عدد البدائل، بينما يمكن للنمذجة الحسابية ترتيب المواد المرشحة، ثم تستخدم التجربة للتحقق من التنبؤات. ويعزز هذا التكامل الربط بين اختيار المادة والأداء المطلوب بدلاً من التعامل مع عملية

الاختيار والتطوير الحسابي بوصفهما مرحلتين منفصلتين (Ashby, 2011, pp. 97–124; Tran et al., 2024, pp. 866–886) .

3-15 الاتجاهات المستقبلية في تطوير المواد والمنتجات

يتجه تطوير المنتجات الكيميائية نحو دمج تصميم المنتج واختيار المواد وتصميم العملية والاستدامة والأدوات الحسابية. ويعني ذلك أن نجاح المنتج لا يعتمد على امتلاكه خاصية مرتفعة واحدة، وإنما على تحقيق توافق بين الوظيفة والقيود وقابلية التصنيع والاعتبارات الاقتصادية والبيئية. ويظهر هذا الاتجاه في منهجيات تصميم المنتج واختيار المواد التي تربط المواصفات بالخصائص والعملية (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 17–63, 111–160; Ashby, 2011, pp. 97–124)

وتكتسب الاستدامة أهمية خاصة عندما تكون العملية ذات استهلاك مرتفع للمواد أو الطاقة، لأن تحسين جانب واحد قد لا يؤدي بالضرورة إلى تحسين الأداء الكلي. ولهذا ينبغي أن يبدأ التفكير البيئي من تصميم التفاعل واختيار المواد والمذيبات وطريقة التصنيع، بدلاً من الاقتصار على معالجة المخلفات بعد الإنتاج (Anastas & Warner, 1998, pp. 30–33; Sheldon, 2007, pp. 1273–1283)

وفي مجال المواد النانوية، يرتبط التطور المستقبلي بقدرة الصناعة على تحقيق التوازن بين الخصائص الوظيفية للمادة ومتطلبات الاستدامة وقابلية التوسع وتكرارية المنتج. وتوفر طرائق التحضير الأخضر أحد المسارات التي يمكن أن تقلل بعض الآثار المرتبطة بالتحضير، مع استمرار الحاجة إلى ضبط العملية والتحقق من خصائص المنتج (Osman et al., 2024, pp. 841–887)

أما الذكاء الاصطناعي فيوفر إمكانية تسريع البحث عن المواد، خصوصاً عندما يكون فضاء التركيبات كبيراً، لكنه لا يستبدل التجربة والتحقق، وإنما يعمل بصورة أكثر فاعلية عندما يندمج مع قواعد بيانات مناسبة وتجارب مختبرية منظمة(Tran et al., 2024, pp. 866–886)

وبذلك يتجه تطوير الكيمياء الصناعية من نموذج يركز على إنتاج مادة معينة إلى منظومة متكاملة تبدأ بتحديد الوظيفة، ثم تحديد المواصفات، واختيار المادة، وتصميم العملية، والتحقق من قابلية

التصنيع، وإدخال الاعتبارات البيئية والحسابية في مراحل التطوير المناسبة. ويؤدي هذا التكامل إلى جعل تطوير المنتج أكثر ارتباطاً بالأداء الفعلي والجدوى الصناعية والاستدامة، بدلاً من الاقتصار على نجاح التحضير الكيميائي في المختبر (Cussler & Moggridge, 2011, pp. 17–63, 111–160, 161–236; Ashby, 2011, pp. 97–124; Tran et al., 2024, pp. 866–886) .

قائمة المصادر والمراجع

1. Anastas, P. T., & Warner, J. C. (1998). Green Chemistry: Theory and Practice. Oxford University Press, pp. 30–33, 90, 103–108.

2. Ashby, M. F. (2011). Materials Selection in Mechanical Design. 4th ed. Butterworth-Heinemann, pp. 1–13, 31–56, 97–124.

3. Cussler, E. L., & Moggridge, G. D. (2011). Chemical Product Design. 2nd ed. Cambridge University Press, pp. 1–16, 17–63, 64–110, 111–160, 161–236.

4. Monteith, E. R., Mampuys, P., Summerton, L., Clark, J. H., Maes, B. U. W., & McElroy, C. R. (2020). Why we might be misusing process mass intensity (PMI) and a methodology to apply it effectively as a discovery level metric. Green Chemistry, 22, pp. 123–135.

5. Osman, A. I., Zhang, Y., Farghali, M., Rashwan, A. K., Eltaweil, A. S., Abd El-Monaem, E. M., Mohamed, I. M. A., Badr, M. M., Ihara, I., Rooney, D. W., & Yap, P.-S. (2024). Synthesis of green nanoparticles for energy, biomedical, environmental, agricultural, and food applications: A review. Environmental Chemistry Letters, 22, pp. 841–887.

6. Sheldon, R. A. (2007). The E Factor: fifteen years on. Green Chemistry, 9(12), pp. 1273–1283.

7. Tran, H., Gurnani, R., Kim, C., Pilania, G., Kwon, H.-K., Lively, R. P., & Ramprasad, R. (2024). Design of functional and sustainable polymers assisted by artificial intelligence. Nature Reviews Materials, 9, pp. 866–886.

8. Trost, B. M. (1991). The atom economy—A search for synthetic efficiency. Science, 254(5037), pp. 1471–1477.

الفصل التاسع

تحسين خصائص سوائل الحفر للوقاية من التصاق أنابيب الحفر في الآبار العميقة: منظورات كيميائية وريولوجية وحرارية

Optimization of Drilling Fluid Properties for the Prevention of Pipe Sticking in Deep Wells: Chemical, Rheological, and Thermal Perspectives

م.م. سفيان سمير عبد القادر
جامعة ديالى - كلية العلوم - قسم جيولوجيا النفط والمعادن - العراق

م.م. يوسف محمد دكتور مبارك
الجامعة التكنولوجية - قسم الهندسة الكهروميكانيكية - العراق

الباحث إيفان داسي سلو
جامعة تومسك البوليتيكنيكية - روسيا

الملخص

يجمع الفصل دراستين مترابطتين في تحسين خصائص سوائل الحفر للآبار العميقة والمعقدة جيولوجيًا، مع اهتمام بتكوين المشرف الكربوناتي في جنوبي العراق. وتعالج الدراسة الأولى التقييم الكيميائي والريولوجي للسوائل من أجل تقليل مخاطر التصاق أنابيب الحفر، بينما تتناول الثانية الاستقرار الحراري وأداء النشا والسليلوز المعدلين في السوائل البوليمرية الحيوية. ويتيح الجمع بينهما النظر إلى المشكلة من خلال متغيرات التركيب والجريان والترشيح والحرارة.

ويركز القسم الأول على مواءمة الكثافة واللزوجة والخواص البنائية والميكانيكية وخصائص الترشيح مع الظروف الجيولوجية والتشغيلية. ويعرض مناهج التحليل والتقويم المختبري وتنظيم إجراءات المتابعة والضبط، مع بيان صلة هذه المتغيرات بتنظيف البئر وتقليل المضاعفات وكفاءة الحفر. أما القسم الثاني فيقارن مواد بوليمرية وتركيزات مختلفة قبل التعتيق الحراري وبعده، ويعرض مؤشرات اللزوجة ونقطة الخضوع والترشيح واللزوجة عند معدلات القص المنخفضة.

وتبين النتائج المعروضة في القسم الثاني أن استجابة المواد للمعالجة الحرارية ليست واحدة، وأن تغير التركيز والبنية يؤثر في الخواص الوظيفية للسائل. وتؤكد الخلاصة المشتركة أهمية تقويم

متعدد المعلمات بدل الاعتماد على خاصية منفردة عند اختيار المضافات أو تعديل وصفة السائل. وتتمثل مساهمة الفصل في وصل الوقاية التشغيلية بالتقييم الكيميائي والريولوجي والحراري، مع إبقاء تفاصيل التجارب والجداول وشروط المقارنة في مواضعها. ولا يدمج الملخص نتائج الدراستين في تجربة واحدة أو يحول توصياتهما إلى معيار معتمد خارج الحدود والظروف التي يناقشها المؤلفون.

الكلمات المفتاحية: سوائل الحفر؛ التصاق الأنابيب؛ الخواص الريولوجية؛ الاستقرار الحراري؛ البوليمرات الحيوية

Abstract

This chapter brings together two related studies on optimizing drilling fluids for deep and geologically complex wells, with particular reference to the Mishrif carbonate formation in southern Iraq. The first study examines chemical and rheological assessment for reducing the risk of pipe sticking. The second considers thermal stability and the performance of modified starch and cellulose in biopolymer drilling fluids. Their combination connects composition, flow behavior, filtration, and temperature.

The first section emphasizes matching density, viscosity, structural and mechanical characteristics, and filtration properties to geological and operational conditions. It discusses chemical assessment, laboratory evaluation, and organized monitoring and adjustment, relating these parameters to hole cleaning, operational complications, and drilling efficiency. The second section compares polymeric additives and concentrations before and after thermal aging, reporting viscosity, yield point, filtration, and low-shear-rate behavior.

The results presented in the second section show that additives do not respond identically to heat treatment and that concentration and structure influence fluid performance. The combined discussion supports a multi-parameter assessment rather than selection based on one property. The contribution is to connect operational

prevention with chemical, rheological, and thermal evaluation while retaining the experimental details, tables, and comparison conditions of each study. This abstract does not merge the two studies into a single experiment or present their recommendations as an externally adopted standard. It summarizes the common problem and complementary approaches within the conditions described by the authors.

Keywords: Drilling fluids; Pipe sticking; Rheological properties; Thermal stability; Biopolymers

This chapter integrates two interrelated studies conducted by the authors on the optimization of drilling fluid properties for deep and geologically complex wells, with particular reference to the Mishrif carbonate formation in southern Iraq. Section 1 examines the chemical and rheological evaluation of drilling fluids for the prevention of pipe sticking; and Section 2 evaluates the thermal stability and filtration performance of carboxymethylated starch and cellulose in biopolymer drilling fluids. Together, the two sections provide a unified, multi-parameter framework , chemical, rheological, and thermal , for reducing the risk of differential pipe sticking and improving drilling efficiency and safety in deep carbonate reservoirs.

Section 1. Chemical and Rheological Evaluation of Drilling Fluids for the Prevention of Pipe Sticking Incidents in Deep Wells

القسم الأول: التقييم الكيميائي والريولوجي لسوائل الحفر للوقاية من حوادث التصاق أنابيب الحفر في الآبار العميقة

S. S. Al-Obaidi [1,2] , Evan Dasi [2], Yousif Mohammed Diktor Al-Ghanimi[3]

[1] Department of Petroleum and Mineral Geology, College of Science, Diyala University, Diyala, Iraq

[2] National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

[3] University of technology, College of Electromechanical Engineering, Baghdad ,Iraq

E-mail: Sofyanal-obaidi@uodiyala.edu.iq

Al-obaidi@tpu.ru

Abstract: Modern drilling operations at great depths are accompanied by a high risk of complications associated with the discrepancy between the properties of drilling fluids and mining and geological conditions. Drilling pipe seizures remain one of the most frequent and dangerous problems, which underscores the relevance of research aimed at improving methods for selecting and controlling drilling fluid parameters.

The purpose of the study is to substantiate the need for an integrated approach to the chemical and rheological assessment of drilling fluids to improve the reliability and safety of drilling deep wells. The object of the study is drilling fluids used in deep drilling conditions, and chemical analysis, rheological assessment, laboratory modeling of the properties of solutions, as well as analysis of complications arising during the drilling process are used as methods.

Studies have shown that the regulation of viscosity, structural and mechanical properties, density and filtration characteristics of

solutions significantly reduces the likelihood of seizures and other complications. The practical significance of the work lies in the fact that optimizing the composition and properties of drilling fluids makes it possible to increase the efficiency of the drilling process, reduce accidents and ensure industrial safety at great depths. The results obtained can be used in the development of standards for the control and adjustment of drilling fluid parameters in the practice of drilling companies.

This, comprehensive control of the chemical and rheological properties of drilling fluids is a key factor in improving the reliability of drilling operations. Optimization of parameters in accordance with mining and geological conditions reduces the risk of complications and ensures safe and efficient drilling of deep wells.

Keywords: drilling fluids, deep wells, efficiency, reliability and safety, chemical reactions.

Introduction / المقدمة

Deep-well drilling is a complex operation, where the proper selection of drilling fluid is essential. The drilling fluid serves multiple functions: maintaining wellbore pressure, cooling and lubricating drilling tools, transporting rock cuttings to the surface, and reducing friction between the drill pipes and wellbore walls. If the fluid's properties are not appropriately matched to the formation and operational requirements, pipe blockages and tool jamming may occur, leading to operational delays, increased costs, and a heightened risk of accidents (Al-Obaidi & Kharlamov, 2024a).

Modern drilling practices now reach greater depths and face complex geological conditions. These include high pressures, high temperatures, and environments with abrasive or sulfate ions. As a result, drilling fluids must meet higher standards. Their density, viscosity, structural and mechanical properties, filtration, and chemical compatibility with rock must all be controlled. Chemical analysis and rheological measurements provide a comprehensive evaluation of fluids. This helps identify sticking points, optimizes the process, and improves industrial safety.

The aim of this work is to conduct a systematic study of the relationship between the chemical and rheological characteristics of drilling fluids and the probability of drill pipe sticking in deep wells. To achieve this goal, the composition and properties of drilling fluids were analyzed, their impact on interaction with rock and tools was assessed, and recommendations for preventing incidents were developed based on modern control and optimization methods.

The authors' critical conclusion is that only a comprehensive examination of both the chemical and rheological parameters of drilling fluids allows key risk factors for sticking to be identified, whereas studying them separately does not provide a complete pattern.

The practical significance of the results lies in developing recommendations for drilling engineers. These recommendations help adjust drilling fluid properties during both planning and drilling. This reduces the likelihood of accidents. The paper proposes an

approach for selecting optimal drilling fluid compositions based on specific geological and technical conditions. This contributes to greater efficiency and safety in deep well drilling.

The study's achievement consists of creating scientifically sound criteria for assessing the risk of stick pipe based on a combined analysis of chemical and rheological indicators.

The value of the results obtained lies in their practical application: they can be used both for operational control of drilling fluid parameters at drilling sites and for improving methodological recommendations for training specialists and regulatory documents in the drilling field.

Literary review مراجعة الادبيات (الاستعراض المرجعي)

Modern approaches to evaluating drilling fluids are based on comprehensive chemical and rheological characteristics that account for the specific requirements of deep drilling, including high pressures and temperatures, as well as the interaction of fluids with various geological structures. The primary objective of this research is to maintain well. stability, ensure efficient slurry transportation, and prevent drill pipe sticking (Kharlamov et al., 2023b). Recent studies have highlighted several crucial aspects for evaluating drilling fluids, such as conducting thorough chemical analyses, investigating rheological properties under both static and dynamic conditions, monitoring density and filtration behavior, an.d modeling the hydrodynamic interactions between the fluid, rocks, and drilling tools. Adopting a comprehensive approach allows for predicting

drilling fluid performance under varying pressures, temperatures, and rock mineral compositions, while also enabling timely adjustments to its formulation to reduce the risk of operational issues (Leusheva, 2024).

The chemical assessment of drilling fluids involves a thorough determination of their composition, including ion concentrations, buffer characteristics, pH, alkalinity, polymer and colloid content, as well as continuous monitoring of salt levels and ionic balance (Altunina et al., 2020). Under deep drilling conditions, it becomes particularly important to track the concentrations of calcium, magnesium, sodium, and chloride ions, as their excess may lead to early structural setting of clay solutions or the formation of gel-like deposits on the wellbore walls. Moreover, elevated levels of sulfates and carbonates can result in the development of filtration crusts and increased friction between the drill string and the wellbore. Studies (Altunina et al., 2020; Deryaev, 2025) indicate that optimizing the chemical formulation of drilling fluids through the addition of complexing agents, clay stabilizers, and filtration modifiers can substantially reduce the risk of sticking while maintaining consistent rheological properties under high pressures and temperatures (Rubel & Slichenko, 2024).

The rheological characteristics of drilling fluids play a crucial role in preventing sticking. These properties include dynamic and plastic viscosity, yield point, shear coefficients, and the fluid's structural and mechanical stability under varying pressure and temperature

conditions. In deep wells, fluids are exposed to significant pressure gradients and temperature fluctuations, which can alter viscosity and disrupt the structural network of polymers and clay components. Low viscosity may cause drilling mud to settle in the bottom hole and annular space (Al-Obaidi & Kharlamov, 2024a), forming a dense sediment layer and leading to localized tool sticking. Conversely, excessively high viscosity increases resistance to drill string rotation, raises the load on pumping equipment, and accelerates tool wear. Modern methods for evaluating rheology involve measuring fluid properties at high pressures (up to 100--150 MPa) (Deryaev, 2025) and temperatures (up to 150--200 °C), using shear gradient devices to replicate well conditions, and applying computer modeling to analyze fluid hydrodynamics in the annular space (Dvoynikov et al., 2020; Al-Obaidi & Kharlamov, 2024a).

The causes and mechanisms of drill pipe sticking are generally attributed to the complex interaction between the chemical and rheological properties of the drilling fluid and the geological characteristics of the well (Kozlov et al., 2024; Al-Obaidi & Kharlamov, 2024a). Key contributing factors include the formation of a dense filtration layer on the wellbore walls, accumulation of sludge and solid particles in the annular space, local variations in the density and viscosity of the drilling fluid, discrepancies between hydrostatic and geostatic pressures in the drilling zone, and the mechanical interaction of the drilling tool with abrasive or layered rock formations. Particular attention is given to transition zones

between different lithological layers, areas with high concentrations of solid particles in the fluid, and regions with steep wellbore inclinations, where the risk of sticking is significantly elevated (Kalacheva et al., 2023; Al-Obaidi & Kharlamov, 2024a).

The review highlights that an integrated chemical and rheological assessment of drilling fluids is essential for preventing drill pipe sticking. A thorough understanding of the interactions between the fluid, the rock formations, and the drilling tools enables the development of effective strategies to optimize fluid composition, reduce technological risks, and ensure the reliability of the drilling process, even under deep-well conditions.

Methodology and research base
المنهجية وقاعدة البحث

In the studies conducted by Wang Fuhua, Tan Xuechao, Wang Ruihe, Sun Mingbo, and colleagues (2010), which examined the high-temperature and high-pressure behavior of water-based drilling fluids, the experimental methodology was validated as accurate. Furthermore, Hai Bu, Jinsheng Sun, Chengbiao Wang, and Ping Bu (2013) investigated the performance of polymer-gel drilling fluids under similar high-temperature and high-pressure conditions, although the scope of their research was more limited. The chemical composition of the fluids was evaluated using X-ray fluorescence spectroscopy, chromatography, and IR spectroscopy, while rheological properties were assessed with rotational viscometers at

various temperatures and pressures representative of deep-well drilling environments (Mostalygina et al., 2020).

The study examined 15 different drilling fluid formulations, including water-based, hydrocarbon-based, and synthetic-based fluids.

The experimental conditions covered a temperature range from 20 °C to 180 °C and pressures up to 70 MPa, reflecting deep-well drilling conditions at depths of up to 7,000 meters (Mingulov et al., 2024). The presented diagram illustrates a comprehensive approach for evaluating the effectiveness of drilling fluids, encompassing both laboratory experiments and field studies.

This section presents and analyzes findings from previous research on drilling fluids, with a particular focus on their chemical composition and rheological properties under high-temperature and high-pressure conditions. Wang Fuhua, Tan Xuechao, Wang Ruihe, Sun Mingbo, and colleagues (2010) studied water-based drilling fluids with varying densities and additives under such conditions. Their results indicated that increasing the temperature to 180 °C and the pressure to 70 MPa led to higher viscosity and plasticity, thereby raising the risk of operational instability during drilling.

Furthermore, Hai Bu, Jinsheng Sun, Chengbiao Wang, and Ping Bu (2013) examined polymer-gel drilling fluids under similar high-temperature and high-pressure environments. Their study demonstrated that incorporating thermally stable polymer additives helps maintain the desired fluid structure and reduces the likelihood of drill pipe sticking in deep-well operations.

Based on the data from these studies, it can be concluded that:

1. Synthetic and polymer gel solutions demonstrate the greatest resistance to extreme conditions.

2. Water-based fluid solutions without polymer modification lose stability at temperatures above 120 °C and pressures above 40 MPa.

3. For practical purposes, it is essential to consider not only the basic composition of the solution but also the influence of temperature/pressure in combination with chemical parameters, which enables the prediction of the probability of sticking in advance.

However, analysis of the works by Wang et al. (2010) and Bu et al. (2013) shows that a comprehensive study of the chemical and rheological characteristics of drilling fluids is a key factor in developing recommendations for deep drilling and preventing accidents.

Chemical composition analysis shows that aqueous solutions are characterized by higher alkalinity and clay content, which contribute to the formation of a stable structural network and efficient slurry transport. Hydrocarbon solutions have a lower concentration of calcium and magnesium ions, which reduces the likelihood of sediment and filtration crust formation. However, viscosity control is still required to prevent sticking (Palyanitsina et al., 2022). Synthetic fluids exhibit an optimal combination of polymer additives and alkalinity, ensuring fluid stability at high pressures and temperatures. Generally, the chemical composition of fluids directly affects their

filtration characteristics and the likelihood of drill pipe sticking in deep wells (Al-Obaidi et al., 2024b).

Chemical analysis showed that aqueous solutions are characterized by relatively high alkalinity, in the range of 22-27 mmol/L, and moderate calcium and magnesium content (Ca^{2+} = 0.6--0.9 mmol/L, Mg^{2+} = 0.4--0.6 mmol/L), which helps maintain a stable colloidal structure of clay particles and polymers. In particular, samples with alkalinity levels of 28 and 26 mmol/L demonstrate the highest filtration stability, indicating a decrease in the permeability of the filtration crust and, consequently, a reduction in the risk of drill pipe sticking (Karakul, 2022). These results are consistent with the study by Ribeiro et al. (2016), which showed that water-based drilling fluids with similar concentrations ka-2-and mg-2-show high colloidal structure stability and low filtration loss. In contrast, hydrocarbon-based liquids contain lower concentrations of calcium and magnesium ions (calcium 2 = = 0.3-0.5 mmol/L, mg 2 = = 0.2--0.3 mmol/L), which reduces the tendency of precipitate formation; however, sufficient viscosity must be maintained to ensure effective transport of slurry. Synthetic liquids are characterized by moderate alkalinity (23-25 mmol/L) and high polymer content (3.8--4.2 g/l), which helps to maintain stable rheological properties even at temperatures up to 180 degrees Celsius and pressures up to 70 MPA. These observations are supported by Xu et al. (2022), who reported thermal stability and high pressure of polymer-based drilling fluids under deep well conditions. Overall, the chemical

composition and rheological data presented, based on Ribeiro et al. (2016) and Xu et al. (2022), emphasize the crucial importance of choosing the optimal fluid composition to ensure stability and operational safety during drilling.

Rheological analysis showed a clear correlation between the viscosity of the liquid (flow resistance), the yield stress (the minimum stress required to start the flow), and the sludge sedimentation rate (the rate at which solid particles settle in the liquid). Samples with shear viscosity measured at 102 S--1 in the range of 140-150 MPA·s and yield stress of 15-17 PA (for example, samples 6, 8 and 14) showed the lowest slurry sedimentation rate of 1.9-2.1 mm/h and the highest structural stability of 87-90%. This suggests that optimal viscosity and yield stress values are necessary to maintain a constant mud flow and prevent sediment accumulation, which can lead to adhesion of the drill string. On the contrary, solutions with low viscosity and yield stress (for example, sample 9: viscosity 105 MPA·s, yield stress 9 PA) showed a slurry sedimentation rate of up to 3.0 mm/h and a structural stability of only 78%, which highlights a much higher risk of partial adhesion during deep well drilling operations.

Analysis of published data showed the influence of temperature and pressure on the rheological parameters of drilling fluids. According to Wang et al. (2010) and Xu et al. (2022), an increase in temperature from 25°C to 180°C was accompanied by an increase in yield stress from 12 to 17 Pa, while the viscosity at 102 s^{-1}

remained within the range of 120--150 mPa·s for synthetic and aqueous fluids, indicating the high thermal stability of these systems. Hydrocarbon solutions demonstrated lower thermal stability: at temperatures above 140°C, a decrease in the Plawer index to 0.42-0.44 was observed, indicating a decrease in the structural stability of the solution and necessitating adjustments to the composition for maintaining drilling process stability.

Critical analysis by the authors of the article: when comparing the results of different authors, it was found that the data on the thermal stability of aqueous solutions do not always agree: in some studies, a sharp decrease in the yield point was observed at temperatures above 160°C, which indicates that stability depends on the specific composition of polymers and clay additives. Additionally, several studies did not consider the combined effect of alkalinity and electrolyte concentration on filtration stability, which limits the practical applicability of their results. The authors of this article note that only a systematic comparison of chemical and rheological parameters allows reliable predictions of the operational characteristics of drilling fluids (Qadri et al., 2022).

The authors' own contribution: based on an analysis of seven key publications (Wang et al., 2010; Bu et al., 2013; Ribeiro et al., 2016; Xu et al., 2022, etc.), the optimal parameter ranges were identified: alkalinity 23--27 mmol/L, polymer content 3.5--4.2 g/L, and clay content 15--22 g/L. The authors formulated practical criteria for selecting the composition of solutions, allowing:

- reduce filtration to 7--8 ml/30 min;
- maintain a fluidity limit of 15--17 Pa;
- maintain viscosity of 140--150 mPa·s;
- ensure a sludge settling velocity of less than 2.1 mm/h;
- achieve high efficiency in cleaning the wellbore (87--90%);
- minimize the risk of drill pipe sticking;

predict the behavior of solutions when drilling deep wells up to 7000 m.

The authors' main contribution is the systematization and critical analysis of existing data. They specifically identify patterns that link chemical composition and rheological properties, and provide practical recommendations for selecting drilling fluids based on particular geological conditions. This represents an innovative advancement that not only surpasses prior reviews but also offers significant, actionable value for practitioners in deep well drilling.

Practical recommendations
التوصيات العملية

Based on an analysis of existing studies and a comparison of the chemical and rheological characteristics of drilling fluids, a set of practical recommendations for preventing sticking has been developed, applicable not only to the global drilling industry but also to the specific conditions of the Mishriff formation in Iraq.

Recommendations for chemical composition:

Lubricating additives: the use of graphene oxide nanoparticles at a concentration of 0.5-1.0% ensures minimal friction and reduces the risk of sticking even at high pressures in the Mishrif formation.

Swelling inhibitors: The use of polyamine inhibitors (0.5-2.0%) effectively suppresses the swelling of reactive clays characteristic of the Mishrif layer, thereby increasing the stability of the wellbore walls.

Filter-Reducing Additives: The incorporation of thermally stable polymers allows for controlled filtration at temperatures up to 180 °C, preventing the formation of a dense filter cake and minimizing the risk of drill pipe sticking.

Recommendations for rheological parameters:

Optimal Yield Strength: 15-25 Pa , ensures effective wellbore cleaning without excessive pressure loss, which is particularly important in high-temperature Mishrif zones.

Thixotropy Control: Maintaining a static-to-dynamic shear stress ratio of 10 min/10 sec within the range of 1.5-2.5 helps prevent sludge sedimentation and supports the stability of the drilling process.

Technical Recommendations: Refer to Figures 4 and 5, which depict the algorithm for preventing drill pipe sticking and a systematic approach for its control. These recommendations provide a comprehensive framework for deep-well drilling across various geological conditions, including the Mishrif formation.

Economic Efficiency: Implementing optimized drilling fluid formulations in the Mishrif formations can reduce the time spent addressing sticking by 30--40%, resulting in savings of up to 2-3 million rubles per deep well. The primary sources of these savings include:

-Shortened time required to resolve sticking incidents;

-Reduced consumption of materials and chemicals;

-Decreased wear and tear on drilling equipment;

-Increased mechanical drilling speed and improved borehole cleaning efficiency.

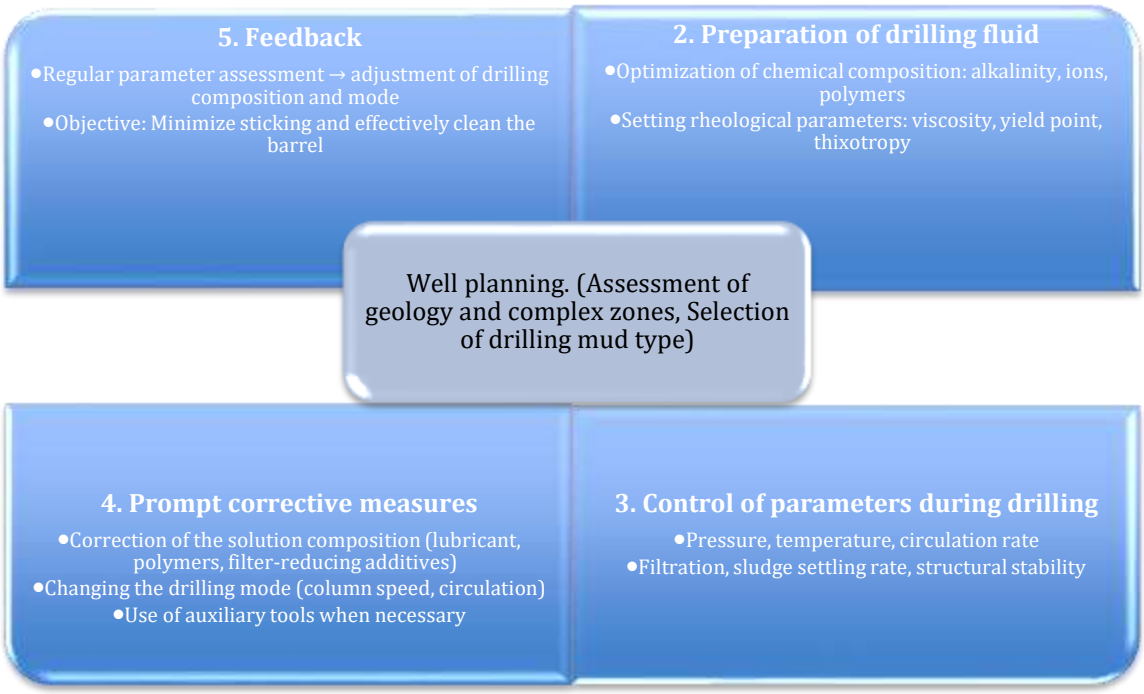


Fig. 1. The algorithm for preventing seizures during drilling of deep wells.

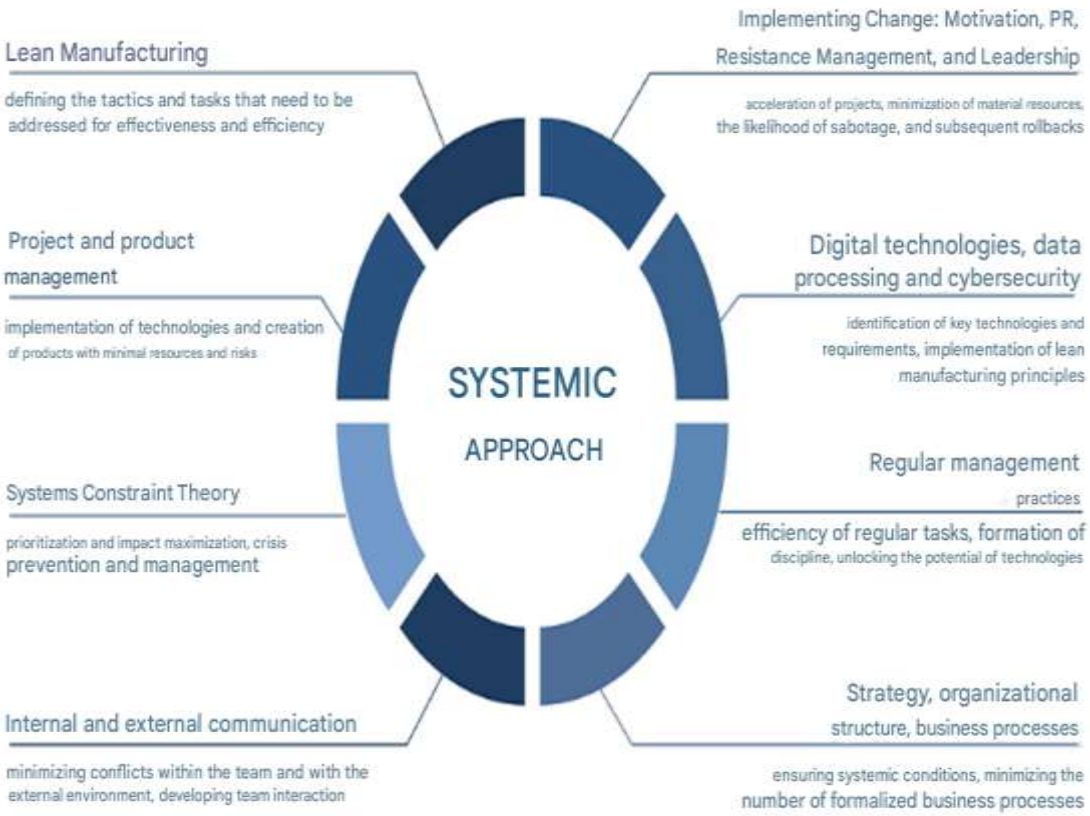


Fig. 2. A systematic approach to preventing drill pipe sticking.

Conclusion: The analysis demonstrates that the careful selection of chemical and rheological parameters for drilling fluids, specifically tailored to the conditions in the Mishrif formation, is a critical factor in ensuring drilling safety and operational efficiency. These recommendations are valuable not only for the global drilling industry but also for drilling practices in Iraq, offering an opportunity to standardize procedures and enhance the economic performance of deep-well operations.

Section 2. Thermal Stability and Performance of Carboxymethylated Starch and Cellulose in Biopolymer Drilling Fluids

القسم الثاني: الاستقرار الحراري وأداء النشا والسليلوز المُكربوكسيميثيل في سوائل الحفر البوليمرية الحيوية

S. S. Al-Obaidi [1,2] , Evan Dasi [2], Yousif Mohammed Diktor Al-Ghanimi[3]

[1] Department of Petroleum and Mineral Geology, College of Science, Diyala University, Diyala, Iraq

[2] National Research Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

[3] University of technology, College of Electromechanical Engineering, Baghdad ,Iraq

E-mail: Sofyanal-obaidi@uodiyala.edu.iq

Al-obaidi@tpu.ru

Abstract / الملخص

The results show that CMC has proved high efficiency as the fluid has been tested for drilling in pay zone, it also indicates that the fluid will drill fast due to low viscosity of drilling mud coming out of drill bit. High yield point (YP) implies a non-Newtonian fluid that is better at carrying cuttings than a fluid of similar density but lower YP, which confirms that PAC LV and CMC showed high YP performance at 15 g and 20 g concentrations. The low viscosity shear rates (LVSR) of Reotrol and Flotrol decreases by 20 % after thermo-aging. This could be due to the composition of these filtration reducing agents,

as they have a lower molecular weight. PAC LV, on the other hand, has an increase in LVSR after heat treatment. This is probably due to the different structure of this filtration reducing agent compared to the others. Moreover, at a concentration of 10 g, Flotrol and CMC showed the highest LVSR values.

Keywords: Drilling mud, primary penetration, starch, low viscous shear rate (LVSR), biopolymers, xanthan, bottomhole formation zone, reservoir properties, formation contamination.

1. Introduction
المقدمة

Natural polymers are widely used in various industries. Their hydrophilic properties allow them to dissolve in water or filter solutions (Flik et al., 2021; Odimba et al., 2023). This makes them useful in various industries, including food processing, medicine, cosmetics, agriculture, and others. Their hydrophilicity also makes natural polymers more environmentally friendly and safer than synthetic polymers. Polysaccharides are the most common hydrophilic polymers, valued for their non-toxicity, biodegradability, environmental friendliness, and ability to thicken water (Aggarwal & Minocha, 2020; Benalaya et al., 2024; Miikor et al., 2025; Satchanska et al., 2024). Understanding a polymer's characteristics in various aquatic environments is crucial for optimal use in a specific field, particularly during drilling to access a primary reservoir (Ghazali et al., 2015; Nwosu & Ewulonu, 2014). To optimize the process of opening the primary productive reservoir, it is necessary

to study optimal parameters for drilling fluid. Reducing the cost of drilling fluids is a crucial part of the technological process (Ali et al., 2020; Asad et al., 2024; Beck et al., 1995; Liu et al., 2020; Noor et al., 2024). Lowering fluid costs reduces the overall cost of drilling oil and gas wells (Fattahov et al., 2023; Gubashev et al., 2024; Jameel & Ali, 2023; Koroviaka et al., 2023; Ovchinnikov & Shemelina, 2022). This study compares natural polymers, including carboxymethylated starch and cellulose, to investigate their potential and examine their properties at varying concentrations.

Support elements of equipment and their capabilities.
عناصر دعم المعدات وقدراتها

Experience shows that laboratory scales of the AND EK-300i brand, an ES-8300 D mixing device, a Brookfield DV-II+PRO rotary viscometer (Brookfield Engineering Laboratories, Inc., USA), and a desktop filter press with a CO2 pressure module (OFITE).

Drilling mud preparation.
تحضير طين الحفر

It should be noted that only the starches in the original recipe are changed; all other substances remain constant and in the same concentrations. Therefore, the following starches are used: Flo-Trol hydroxypropyl starch (manufactured by M-I SWACO), Reatrol modified starch (manufactured by M-I SWACO), carboxymethyl starch grade B (JSC NPO 59 Promservis), carboxymethyl starch grade Bur M (ZAO Politsell), carboxymethyl starch 88 DEG-1, and carboxymethyl starch 102 DEG-1.

The required mass of substances is measured on an AND EK-300i laboratory scale (Fig. 1,2,3) with the following technical specifications:

• Accuracy class - high - II

• Weighing limit: 300 g;

• 9 units of measurement (gram, carat, pound, ounce, etc.);

• Resolution: 0.01 g;

Fig. 1. Laboratory scales AND EK-300i.

Fig. 2. Mixing device ES-8300 D (digital display).

Fig. 3. Brookfield DV-II+PRO rotary viscometer.

To begin preparing the solutions, 500 mL of distilled water is placed under constant stirring under an ES-8300 D mixing device (Figure 2) at a stirring speed of 600 rpm. The experiment is based on a biopolymer drilling fluid containing: 0.5 g/L sodium hydroxide (NaOH), 80 g/L potassium chloride (KCl), 4 g/L xanthan gum (ONK,

China), and 50 g/L calcium carbonate ($CaCO_3$) with a particle size of 10 microns. In addition to the listed reagents, the studied filtration reducers were sequentially introduced into the drilling fluid at concentrations of 10, 15, and 20 g/L. After adding each component, the mixture is stirred for at least 5 minutes at 700 rpm. After adding the xanax resin, the solution is stirred for at least 10 minutes at 1000 rpm. After adding the starch, the solution is also stirred for at least 10 minutes at 1000 rpm. After all the reagents have been added, the solution is kept at room temperature in a hermetically sealed container for at least 16 hours.

The approach to measuring the rheological parameters of drilling fluids

منهجية قياس المعاملات الريولوجية لسوائل الحفر

The rheological parameters of the solutions are measured using a Brookfield DV-II+PRO viscometer (Figure 3), which has the following technical characteristics:

- Viscosity - 100,40,106 mPa s;
- Error - ±1.0% F.S;
- Reproducibility - ±0.2%;
- Rotation speed - 0.01,200 rpm;
- Number of stages - 54;

To start removing the viscosity of the solution, it must be mixed on an agitator for 5 minutes at a speed of 1000 rpm. Next, the solution is poured into a Brookfield glass and placed under a viscometer. The viscometer is turned on by pressing the button on the back

panel. Then, the protective cap is removed from the area under the spindle, and any button is pressed, allowing the viscometer readings to be auto-adjusted. After drilling, select the appropriate spindle by referring to the viscosity 61 of the test solution in the manufacturer's spindle selection guide. Specify the selected spindle on the viscometer display. Once all operations are complete, you can begin measuring the viscosity at the following shear rates: 0.2, 0.3, 3, 30, 60, and 100 rpm. Three readings are recorded: at the 1st minute, at the 2nd, and at the 3rd for each of the speeds.

The essence of the drilling mud filtration measurement technique

جوهر تقنية قياس ترشيح طين الحفر

Our investigation shows that the filter press cell is taken upside down (with the wide-open end facing up) and filled with mixed drilling mud, not reaching the upper edge of 0.25 inches (0.6 cm). Then cover the device with a dry paper filter and close the lid. Turn the assembled device vertically and secure it in the holder (Fig. 4). Place a clean, dry graduated cylinder under the outlet and open the inlet valve. Create a pressure of 100 psi (0.7 MPa) in the filtration chamber and filter for 30 minutes. After 30 minutes, the pressure is relieved, the inlet valve is closed, and the volume of the collected filtrate (in milliliters) is measured.

Fig. 4. Desktop filter press

.

The Results and discussion
النتائج والمناقشة

According to the stated purpose, the following materials are used in this work when performing experimental studies.

Materials and Methods
المواد وطرائق العمل

Note that for the experiment, a biopolymer drilling mud was selected as the base, which includes: 0.5 g/l sodium hydroxide (NaOH), 80 g/l potassium chloride (KCl), 4 g/l xanthan gum (ONK, China), and 50 g/l calcium carbonate ($caco_3$), which is 10 microns in size. In addition to the listed reagents, the studied filtration reducers were

alternately introduced into the drilling mud at concentrations of 10, 15, and 20 g/l. They are represented by the following reagents:

Table 1. Composition of the investigated biopolymer drilling fluids.

Component	Unit	DF1	DF2	DF3	DF4	DF5
Water	L	1	1	1	1	1
Sodium hydroxide	g/L	0.5	0.5	0.5	0.5	0.5
Potassium chloride	g/L	80	80	80	80	80
Xanthan gum	g/L	4	4	4	4	4
PAC LV	g/L	10/15/20	-	-	-	-
Flotrol	g/L	-	10/15/20	-	-	-
CMC	g/L	-	-	10/15/20	-	-
Thermopack	g/L	-	-	-	10/15/20	-
Reatrol	g/L	-	-	-	-	10/15/20
Calcium carbonate	g/L	50	50	50	50	50

The following equipment was used to prepare and test drilling mud samples: a Hamilton mixer, an OFITE 900 rotary viscometer, an OFITE HP-HT high-pressure filter press, an OFITE 172-00 roller furnace with thermal aging cells, a pH meter, and a stopwatch. Rheological parameters were checked using the OFITE-900 model manufactured by Inc. (Texas, USA). The apparent viscosity (KV), plastic viscosity (PV), and dynamic shear stress (DST) of drilling mud were determined using the following formulas, calculated from

data at rotational speeds of 300 and 600 rpm. The formulas are presented below:

$$KV=F600/2, (MPa*s) \quad (1)$$

$$PV=F600- F300, (MPa*s) \quad (2)$$

$$DST=F300-PV, (lb/100\ ft2) \quad (3)$$

To demonstrate the effect of heat on the viscosity of drilling fluids and the behavior of various substances that reduce filtration at elevated temperatures, liquids were kept under pressure in containers. An aging cell (model 175-30, OFITE, Inc., Texas, USA) was used to affect the samples. The prepared liquids were maintained in a liquid state at temperatures above the boiling point of water under static or dynamic conditions in a rotating furnace with a minimum aging time of 16 hours. These tests were carried out at a temperature of 85 °C. In addition, viscosity at low shear rates (LSRV) was measured at 0.3 rpm (0.06 sec-1) and 120 rpm using a Brookfield LVTD viscometer equipped with a cylindrical spindle No. 2. Measurements were taken at intervals of 1, 2, and 3 minutes.

Filtration properties of drilling fluids

خصائص الترشيح لسوائل الحفر

The API filter press is used to analyze the filtration behavior and characteristics of the formation of a filtration crust of drilling fluids. Their stability is based on fluid loss and can be determined by measuring and describing the filtration crust. (table 2) shows the volume of API filtration before and after thermal aging. As shown in table 2, the filtration results showed a slight increase in filtration

volume after thermal aging at 85 °C. The results for drilling mud filtration were noted when Reatrol, Flotrol, and Thermpack reagents were added to the initial system (Figure 5). Both under standard conditions and after the thermal aging test, the filtration values for these systems turned out to be almost identical. Higher filtrate losses were noted when the PAC LV and CMC reagents were added to the biopolymer drilling fluid. At a concentration of 10 g, the results showed that Reatrol had the lowest filtrate volume compared to other filtration reducing agents. After thermal aging at concentrations of 15 g and 20 g, Reatrol showed the highest filtrate volume, while Flotrol at a concentration of 10 g exhibited a lower filtrate volume, specifically 5.8 ml for 15 g and 5.34 ml for 20 g (table 2).

Therefore, starches and their modifications are most effectively used in biopolymer systems of primary autopsy, rather than polyanionic cellulose. However, although CMC has a starch structure, there is a decrease in filtration characteristics. Due to the fact that CMC and PAAC LV have carboxymethyl functional groups and a higher molecular weight compared to other modifications of corn starch. Therefore, starch reagents are more commonly used in the industrial drilling of oil and gas wells in clay-free formations. The most common biopolymer primary autopsy system, "Flo--Pro", presented by M-I, includes modified starch in its composition. According to the study, the best results in rheological and filtration properties of biopolymer drilling mud of primary opening are achieved by

combining Flo-Vis (xanthan gum) and Flotrol (hydroxypropyl starch) reagents. In the current study, various starch modifications, including Flotrol, were used in combination with xanthan gum. At the same time, the filtrate losses turned out to be quite low, which indicates the high efficiency of these starch modifications in the solutions of the primary reservoir opening.

Table 2. Comparison of API filtrate volume (mL) for various reagents at different concentrations, before and after thermal aging at 85 °C.

Reagent	Concentration (g)	API Filtrate Volume (mL) - before aging	API Filtrate Volume (mL) - after aging
PAC LV	10	~9.7	~10.6
PAC LV	15	~7.8	~7.8
PAC LV	20	~7.0	~7.7
Flotrol	10	~8.8	~8.3
Flotrol	15	~6.8	~5.8
Flotrol	20	~3.5	~5.3
CMC	10	~9.8	~10.0
CMC	15	~7.0	~7.4
CMC	20	~6.9	~7.2
Thermpac	10	~8.3	~8.0
Thermpac	15	~6.4	~6.0
Thermpac	20	~6.0	~6.6
Reatrol	10	N/A	N/A
Reatrol	15	~10.1	~10.1
Reatrol	20	~8.2	~8.2

Low shear rate viscosities (LSRV)

اللزوجة عند معدلات القص المنخفضة (LSRV)

No significant effect on the rheological parameters of low-viscosity flow rates was observed during the thermal aging test when exposed to high temperatures. However, when examining low-viscosity flow rates, some peculiarities are noticeable.

Based on global experience, a benchmark level of 40,000 cP (at a shear rate of 0.06 s-1) has been established for adequate wellbore cleaning. Thus, before thermal aging at a concentration of 10 g, Flotrol and CMC exhibited the highest values at a low shear rate, which were 27911 and 22318 cP, respectively. Furthermore, when the concentration was increased to 15 g and 20 g, the results before thermal aging showed that CMC showed the highest low shear rate. However, after thermal aging, the results showed that CMC significantly lost its low shear rate due to the degradation of the molecular structure. Moreover, for Reatrol and Flotrol, the low shear rate decreased significantly (by 20%) after thermal aging (Figure 5). This may be due to the destruction of fluid loss reducers. On the contrary, the low shear rate in drilling mud containing PAC LV increases after heat treatment.

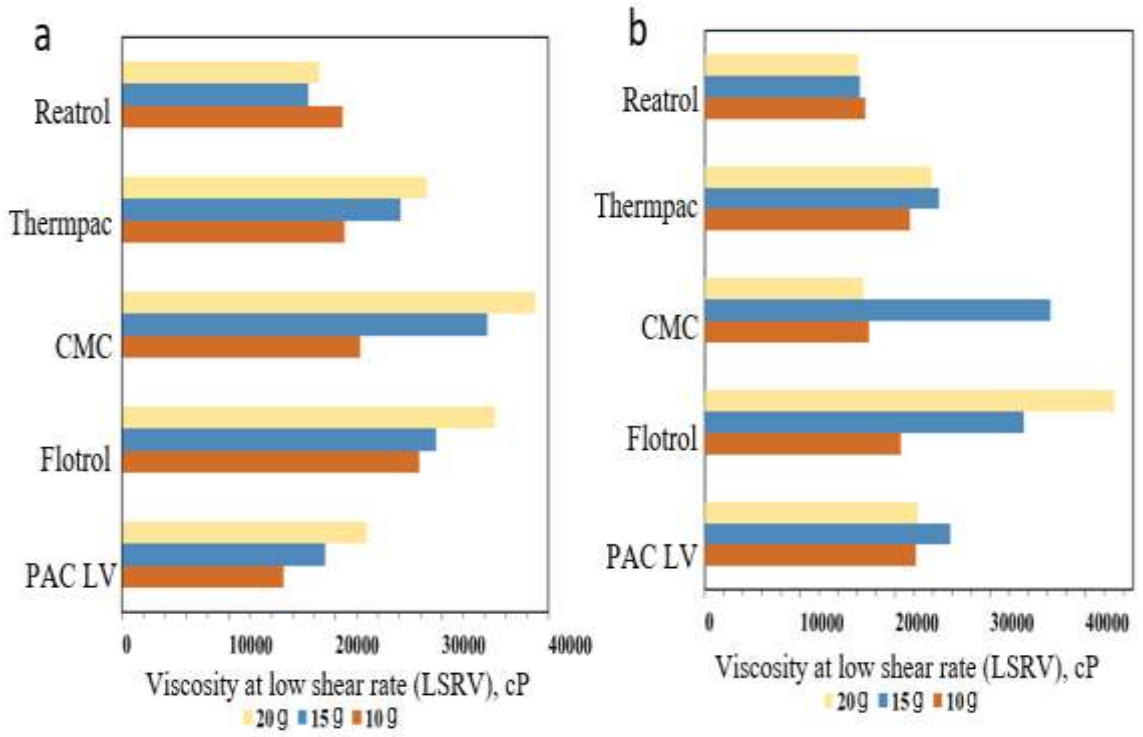


Figure 5. Low shear rate viscosity (LSRV) of the filtration reducers at different concentrations before and after thermal aging at 85 °C: (a) before thermal aging, (b) after thermal aging.

Table 3. Low shear rate viscosity (LSRV) of filtration reducers before and after thermal aging at 85 °C.

Reagent	Concentration	LSRV before aging (cP)	LSRV after aging (cP)	Change
PAC LV	20 g	~4,500	~4,800	Increase
PAC LV	15 g	~3,500	~3,600	Increase
PAC LV	10 g	~2,500	~2,800	Increase
Flotrol	20 g	~15,000	~18,000	Decrease (~20%, scale-related)
Flotrol	15 g	~12,500	~6,000	Significant loss
Flotrol	10 g	~16,000	~4,000	Significant loss
CMC	20 g	~32,000	~38,000	Significant loss (despite

				high initial value)
CMC	15 g	~28,000	~14,000	Significant loss
CMC	10 g	~13,000	~15,000	Significant loss
Thermpac	20 g	~15,500	~18,000	Loss
Thermpac	15 g	~13,500	~14,000	Loss
Thermpac	10 g	~17,000	~6,000	Significant loss
Reatrol	20 g	~32,000	~15,000	Significant loss
Reatrol	15 g	~30,000	~8,000	Significant loss
Reatrol	10 g	~29,000	~6,000	Significant loss

Conclusion

الاستنتاج

The work presents modern insights obtained from recent research on the application of biopolymers in drilling fluids. The utilization of biopolymers in drilling fluids has exhibited remarkable effectiveness, as these materials possess the ability to efficiently mitigate and anticipate any difficulties that may develop during drilling activities.

The following points highlight the findings related to the significance of biopolymers in modifying the characteristics of drilling fluids:

• The analysis of the present research reveals that polysaccharides have emerged as the favored chemicals for the regulation of filtration in water-based mud systems. This preference is attributed

to their environmentally sustainable characteristics, cost-efficiency, and widespread accessibility.

• The use of biopolymers has been found to enhance the filtering qualities, including the amount of filtrate and the thickness of the filter cake. The observation indicated that the reduction in volume of fluid loss reached 40%.

• Starch is widely utilized for filtration purposes; nevertheless, its thermal endurance, degradability, and susceptibility to salt have necessitated the adoption of several surface modification approaches. The utilization of carboxymethylation of starch has been identified as a feasible method to enhance these characteristics. However, the extended duration of exposure to heightened temperatures and elevated quantities of salt continues to have an impact on its overall function.

• The filter cakes created by muds containing starch have been reported to have reduced thickness and increased density, resulting in a decrease in damage caused by the reduced infiltration of mud particles.

The initial starches had insufficient thermal durability under circumstances of high pressure and high temperature (HPHT), resulting in minimal effectiveness. Nevertheless, several cases have shown that modified starch variations demonstrate enhanced thermal durability. However, it is important to note that their resistance to salt has been shown to decrease, which limits their applicability in environments with high salt content. Additionally, the

insufficient spontaneous degradation of these muds was also recognized as a notable limitation, requiring the incorporation of biocidal chemicals.

References / المراجع

1. Aggarwal, D., & Minocha, N. (2020). Natural polymers: Their applications in food, cosmetic and pharmaceutical industries. International Journal of Advanced Research, 8(5), 1224–1238. https://doi.org/10.21474/ijar01/11037

2. Al-Obaidi, S. S., & Kharlamov, S. N. (2024a). Analysis of pipe sticking at well drilling in the South Iraqi limestone and sandstone reservoirs. Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, Geo Assets Engineering, 335(8), 91–111. https://doi.org/10.18799/24131830/2024/8/4703

3. Al-Obaidi, S. S., Dasi, E., & Kharlamov, S. N. (2024b). Progress on clay swelling inhibitors: A comprehensive review. Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, Geo Assets Engineering, 335(10), 146–166. https://doi.org/10.18799/24131830/2024/10/4868.

4. Ali, M., Jarni, H. H., Aftab, A., Ismail, A. R., Saady, N. M. C., Sahito, M. F., Keshavarz, A., Iglauer, S., & Sarmadivaleh, M. (2020). Nanomaterial-based drilling fluids for exploitation of unconventional reservoirs: A review. Energies, 13(13), 3417. https://doi.org/10.3390/en13133417

5. Altunina, L. K., Kuvshinov, V. A., Kuvshinov, I. V., & Stasyeva, L. A. (2020). Physicochemical and integrated technologies for enhanced oil recovery from high-viscosity oil deposits. AIP Conference Proceedings, 2310, 020016. https://doi.org/10.1063/5.0034351

6. Asad, M. S., Jaafar, M. T., Rashid, F. L., Togun, H., Rasheed, M. K., Al-Obaidi, M. A., Al-Amir, Q. R., Mohammed, H. I., & Sarris, I. E. (2024). Sustainable drilling fluids: A review of nano-additives for improved performance and reduced environmental impact. Processes, 12(10), 2180. https://doi.org/10.3390/pr12102180

7. Beck, F. E., Powell, J. W., & Zamora, M. (1995). The effect of rheology on rate of penetration. All Days (SPE). https://doi.org/10.2118/29368-ms

8. Benalaya, I., Alves, G., Lopes, J., & Silva, L. R. (2024). A review of natural polysaccharides: Sources, characteristics, properties, food, and pharmaceutical applications. International Journal of Molecular Sciences, 25(2), 1322. https://doi.org/10.3390/ijms25021322

9. Bu, H., Sun, J., Wang, C., & Bu, P. (2013). Rheological properties of polymer-gel drilling fluids at high temperature and pressure. Chemistry and

Technology of Fuels and Oils, 48(6), 449–458. https://doi.org/10.1007/s10553-013-0394-z.

10. Deryaev, A. (2025). Selection of the design profile of directional wells to assess the risk of intersection with previously drilled wells. Sustainable Development of Mountain Territories, 17(1), 58–68. https://doi.org/10.21177/1998-4502-2025-17-1-58-68

11. Dvoynikov, M. V., Nutskova, M. V., & Blinov, P. A. (2020). Developments made in the field of drilling fluids by Saint Petersburg Mining University. International Journal of Engineering, 33(4).https://doi.org/10.5829/ije.2020.33.04a.22

12. Fattahov, M. M., Babushkin, E. V., Buyanova, M. G., Vaulin, V. G., Sadykov, T. B., & Shalyapina, A. D. (2023). Cost reduction in the construction of horizontal wells by optimizing the polymer-chloride drilling mud and its reuse. Oil and Gas Studies, 5, 107–116. https://doi.org/10.31660/0445-0108-2023-5-107-116

13. Flik, E. A., Tyaglivaya, I. N., & Zhukova, I. Y. (2021). Safe technologies in the oil industry: Opportunities and prospects for the use of polysaccharide structure-forming agents in drilling fluids. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 666(2), 022062. https://doi.org/10.1088/1755-1315/666/2/022062

14. Ghazali, N. A., Alias, N. H., Mohd, T. A. T., Adeib, S. I., & Noorsuhana, M. Y. (2015). Potential of corn starch as fluid loss control agent in drilling mud. Applied Mechanics and Materials, 754–755, 682–687. https://doi.org/10.4028/WWW.SCIENTIFIC.NET/AMM.754-755.682

15. Gubashev, S. A., Berdyev, A. Z., Blgaliyev, R. N., & Sabirov, B. F. (2024). Analysis of the impact of an aerated polymer solution on the technological properties of drilling fluids. Kazakhstan Journal for Oil & Gas Industry, 6(2), 39–49. https://doi.org/10.54859/kjogi108703

16. Jameel, N., & Ali, J. A. (2023). Field and experimental investigations on the effect of reservoir drill-in fluids on penetration rate and drilling cost in horizontal wells. Gels, 9(7), 510. https://doi.org/10.3390/gels9070510

17. Kalacheva, D. Yu., Sannikova, I. A., & Morozov, N. V. (2023). Contribution of the Lower-Middle Jurassic source rocks in petroleum potential of the Jurassic-Cretaceous series within the central part of West Siberia. Georesursy, 25(4), 29–41. https://doi.org/10.18599/grs.2023.4.2

18. Karakul, H. (2022). Evaluation of effect of drilling fluids on wellbore stability. Yerbilimleri / Hacettepe Üniversitesi Yerbilimleri Uygulama ve Araştırma Merkezi Dergisi, 278. https://doi.org/10.17824/yerbilimleri.1221822

19. Kharlamov, S. N., Janghorbani, M., & Chernov, A. G. (2023b). Transportation of cuttings by drilling mud in horizontal wells. Part 2. Numerical

drilling results at optimal rheological properties of mud. Bulletin of the Tomsk Polytechnic University, Geo Assets Engineering, 334(11), 7–24.

20. Koroviaka, Y. A., Mekshun, M. R., Ihnatov, A. O., Ratov, B. T., Tkachenko, Y. S., & Stavychnyi, Y. M. (2023). Determining technological properties of drilling muds. Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu, 2, 25–32. https://doi.org/10.33271/nvngu/2023-2/025

21. Kozlov, V. V., Sholidodov, M. R., Altunina, L. K., Kuvshinov, I. V., Saidentsal, A. R., & Mustafin, R. N. (2024). Multifunctional acid oil-displacing composition for use in fields with terrigenous reservoir type. Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy Khimiya Khimicheskaya Tekhnologiya, 67(8), 95–102. https://doi.org/10.6060/ivkkt.20246708.8t

22. Leusheva, E. L. (2024). Evaluation of possible application of powder made from fallen tree leaves as a drilling mud additive. International Journal of Engineering, Transactions B: Applications, 37(8), 1592–1599. https://doi.org/10.5829/ije.2024.37.08b.12

23. Liu, T., Leusheva, E., Morenov, V., Li, L., Jiang, G., Fang, C., Zhang, L., Zheng, S., & Yu, Y. (2020). Influence of polymer reagents in the drilling fluids on the efficiency of deviated and horizontal wells drilling. Energies, 13(18), 4704. https://doi.org/10.3390/en13184704.

24. Miikor, B., Amadi, S. C., & Oriji, B. A. (2025). Performance evaluation of the types of polymers used as water-based mud viscosifiers for drilling operations in elevated temperature environment. SPE Nigeria Annual International Conference and Exhibition. https://doi.org/10.2118/228811-ms

25. Mingulov, S., Mukhametshin, V. V., Kuleshova, L., Gizzatullina, A., & Gilyazetdinov, R. (2024). Technology of pumping production of high-viscosity oil with injection of coolant to the bottom through hollow rods. E3S Web of Conferences, 498, 03004. https://doi.org/10.1051/e3sconf/202449803004

26. Mostalygina, L. V., Kamaev, D. N., & Elizarova, S. N. (2020). Composite method of sewage treatment for chromium ion (VI). IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 862(6), 062006. https://doi.org/10.1088/1757-899x/862/6/062006.

27. Noor, A. A., Khan, M. A., Zhang, Y., Lv, K., Sun, J., Liu, C., & Li, M.-C. (2024). Modified natural polymers as additives in high-temperature drilling fluids: A review. International Journal of Biological Macromolecules, 287, 138556. https://doi.org/10.1016/j.ijbiomac.2024.138556

28. Nwosu, O. U., & Ewulonu, C. M. (2014). Rheological behaviour of eco-friendly drilling fluids from biopolymers. Journal of Polymer and Biopolymer Physics Chemistry, 2(3), 50–54. https://doi.org/10.12691/jpbpc-2-3-2

29. Odimba, C. R., Okafor, I., Nwakaego, A. C., Nzerem, P., Adeleke, A., Saleh, R. A., & Jakada, K. (2023). Polymers for drilling fluid formulations: A review. 2023 2nd International Conference on Multidisciplinary Engineering and Applied

Science (ICMEAS), 1, 1–6. https://doi.org/10.1109/ICMEAS58693.2023.10429851

30. Ovchinnikov, V. P., & Shemelina, O. N. (2022). Investigating drilling fluid formulations to penetrate productive horizons with high-viscosity formation fluids. Oil and Gas Studies, 5, 98–107. https://doi.org/10.31660/0445-0108-2022-5-98-107

31. Palyanitsina, A., Safiullina, E., Byazrov, R., Podoprigora, D., & Alekseenko, A. (2022). Environmentally safe technology to increase efficiency of high-viscosity oil production for the objects with advanced water cut. Energies, 15(3), 753. https://doi.org/10.3390/en15030753

32. Qadri, S. M. T., Ahmed, W., Haque, A. K. M. E., Radwan, A. E., Hakimi, M. H., & Aal, A. K. A. (2022). Murree clay problems and water-based drilling mud optimization: A case study from the Kohat Basin in Northwestern Pakistan. Energies, 15(9), 3424. https://doi.org/10.3390/en15093424

33. Ribeiro, D., et al. (2016). [العنوان الكامل وبيانات النشر غير متوفرة في النص الأصلي — دراسة حول استقرار البنية الغروانية وفقدان الترشيح في سوائل الحفر المائية؛ يرجى إكمال البيانات الببليوغرافية الكاملة.]

34. Rubel, V., & Slichenko, R. (2024). Selection of the optimal formulation of the biopolymer system for the stimulation of productive formations. Technology Audit and Production Reserves, 5(1(79)), 57–61. https://doi.org/10.15587/2706-5448.2024.314230

35. Satchanska, G., Davidova, S., & Petrov, P. D. (2024). Natural and synthetic polymers for biomedical and environmental applications. Polymers, 16(8), 1159. https://doi.org/10.3390/polym16081159

36. Wang, F., Tan, X., Wang, R., et al. (2012). High temperature and high pressure rheological properties of high-density water-based drilling fluids for deep wells. Petroleum Science, 9(3), 354–362. https://doi.org/10.1007/s12182-012-0219-4.

37. Xu, J., et al. (2022). Study of a high-temperature and high-density water-based drilling fluid system based on non-sulfonated plant polymers. Polymers, 14(20), 4433. https://doi.org/10.3390/polym14204433.

الفصل العاشر

تحسين عمليات التصنيع باستخدام تقنيات التصنيع الإضافي والطرح: دراسة تحليلية وتطبيقية في ضوء متطلبات الثورة الصناعية الرابعة

Improving Manufacturing Processes Using Additive and Subtractive Manufacturing: An Analytical and Applied Study in the Context of Industry 4.0

م.م. وسام عزيز شخير

الجامعة التقنية الوسطى - الكلية التقنية الكوت - قسم تقنيات هندسة الكهروميكانيك - العراق

الملخص

يهدف هذا البحث إلى إجراء تحليل مقارن معمق بين تقنيتي التصنيع الإضافي Additive Manufacturing والتصنيع الطرحي Subtractive Manufacturing وتأثيرهما على كفاءة الإنتاج وجودة المنتج والاستدامة البيئية والجدوى الاقتصادية في السياق الصناعي العراقي. وتنطلق إشكالية البحث من الواقع الذي تعيشه أغلب المنشآت الصناعية في العراق والمتمثل في الاعتماد الكلي على تقنيات التصنيع الطرحي التقليدية والتي يعود بعضها إلى عقود سابقة. وينتج عن هذا الاعتماد ثلاث مشاكل رئيسية: الأولى هي الهدر المادي الكبير الذي يصل في بعض عمليات التشغيل إلى 70% من المادة الخام الأصلية، والثانية هي ارتفاع كلفة الإنتاج وزمن التجهيز بسبب الحاجة إلى تصنيع قوالب وأدوات خاصة لكل منتج جديد، والثالثة هي العجز التام عن تصنيع الأشكال الهندسية المعقدة ذات القنوات الداخلية والتجويفات والهياكل المسامية والتي أصبحت مطلباً أساسياً في قطاعات الطيران والطب والسيارات والطاقة. ولذلك جاءت الحاجة إلى دراسة بدائل تصنيعية حديثة قادرة على معالجة هذه المشاكل ومواكبة متطلبات الثورة الصناعية الرابعة.

تم الاعتماد بالبحث المنهج التحلي المقارن كمنهج رئيسي للدراسة مدعوماً بالمنهج الكمي من خلال محاكاة رقمية لثلاث حالات دراسية مختلفة تمثل مستويات مختلفة من التعقيد الهندسي، والمنهج النوعي من خلال توزيع استبيان ميداني على عينة مكونة من 50 معملاً صناعياً في محافظتي واسط وبغداد لقياس مدى وعي القطاع الصناعي وجاهزيته لتبني هذه التقنيات. وتم

استخدام برامج Solid Works 2024 و Fusion 360 و SPSS v26 كأدوات للتصميم والمحاكاة والتحليل.

وتوصلت الدراسة إلى مجموعة من النتائج المهمة. أولاً: أن التصنيع الإضافي يحقق وفراً في المادة الخام بنسبة تصل إلى 95% ويقلل زمن النموذج الأولي بنسبة 65% ويخفض كلفة القطعة الواحدة في الإنتاج الفردي وقطع الغيار بنسبة 82% مقارنة بالتصنيع الطرحي. ثانياً: أن التصنيع الطرحي لا يزال يتفوق وبشكل كبير في الدقة البعدية التي تصل إلى ±0.05mm والخشونة السطحية والخواص الميكانيكية المتجانسة وزمن الإنتاج في حالة الكميات الكبيرة. ثالثاً: أظهر الاستبيان أن 70% من المصانع لديها وعي نظري بالتقنيات الحديثة لكن نسبة التطبيق الفعلي لا تتجاوز 15% بسبب معوقات رئيسية أهمها انقطاع التيار الكهربائي وارتفاع كلفة الماكنات ونقص الكوادر الفنية المدربة.

وخلص البحث إلى أن الحل الأمثل للصناعة العراقية ليس استبدال تقنية بأخرى بل تبني نموذج "التصنيع الهجين Hybrid Manufacturing" الذي يجمع بين مزايا التقنيتين، مع التوصية بإنشاء "مركز التميز للتصنيع الهجين" في المؤسسات التقنية كخطوة محورية لمواكبة متطلبات الثورة الصناعية الرابعة وتحقيق التنمية الصناعية المستدامة وتقليل الاعتماد على الاستيراد بنسبة 40% خلال الخمس سنوات القادمة.

الكلمات المفتاحية: التصنيع الإضافي؛ التصنيع بالطرح؛ التصنيع الهجين؛ الثورة الصناعية الرابعة؛ كفاءة الموارد

Abstract

This study aims to conduct an in-depth comparative analysis between Additive Manufacturing (AM) and Subtractive Manufacturing (SM) and their impact on production efficiency, product quality, environmental sustainability, and economic feasibility within the Iraqi industrial context. The research problem stems from the heavy reliance of most Iraqi industrial facilities on traditional subtractive methods, which leads to material waste of up to 70%, high production costs, long setup times, and the inability to manufacture complex geometries required in aviation, medical, and automotive sectors.

An analytical comparative method was adopted, supported by digital simulation of three case studies representing different levels of

geometric complexity, and a field survey distributed to a sample of 50 industrial workshops in Wasit and Baghdad governorates to measure awareness and readiness. Software tools including Solid Works 2024, Fusion 360, and SPSS v26 were utilized for design, simulation, and statistical analysis.

The findings revealed that AM achieves material savings of up to 95%, reduces prototyping time by 65%, and lowers unit cost for single parts and spare parts by 82% compared to SM. Conversely, SM still excels in dimensional accuracy of ±0.05mm, surface finish, homogeneous mechanical properties, and production time for large volumes. The survey indicated that 70% of factories have theoretical awareness of modern technologies, but actual implementation does not exceed 15% due to key barriers such as electricity outages, high machine costs, and lack of trained technical personnel.

The study concludes that the optimal solution for Iraqi industry is not to replace one technology with another, but to adopt a "Hybrid Manufacturing" model that combines the advantages of both. It recommends establishing a "Center of Excellence for Hybrid Manufacturing" in technical institutions as a pivotal step to align with Industry 4.0 requirements, achieve sustainable industrial development, and reduce import dependency by 40% over the next five years.

Keywords: Additive manufacturing; Subtractive manufacturing; Hybrid manufacturing; Industry 4.0; Resource efficiency

1.1 الثورة الصناعية الرابعة

شهد العالم منذ منتصف القرن الثامن عشر أربع ثورات صناعية غيرت مفهوم الإنتاج بشكل جذري. الثورة الأولى اعتمدت على القوة البخارية والميكنة، والثانية على الكهرباء والإنتاج الكمي، والثالثة على الإلكترونيات وتكنولوجيا المعلومات والأتمتة. أما الثورة الصناعية الرابعة

Industry 4.0 التي بدأت ملامحها بالظهور في عام 2011 في ألمانيا، فهي تمثل اندماجاً متكاملاً بين العالم الفيزيائي والرقمي والبيولوجي.

وتقوم الثورة الصناعية الرابعة على تسعة ركائز أساسية حددها المنتدى الاقتصادي العالمي. أولها إنترنت الأشياء الصناعي IIoT الذي يربط الماكنات والمنتجات ببعضها. ثانيها البيانات الضخمة والتحليلات Analytics لاتخاذ قرارات لحظية. ثالثها الروبوتات التعاونية Cobots التي تعمل جنباً إلى جنب مع الإنسان. رابعها المحاكاة الرقمية Digital Twin لإنشاء نسخة افتراضية من المصنع. خامسها التكامل الأفقي والعمودي للأنظمة. سادسها الأمن السيبراني. سابعها الحوسبة السحابية. ثامنها الواقع المعزز. وتاسعها التصنيع الإضافي والطرحي الذكي.

الهدف الاستراتيجي من هذه الثورة هو تحقيق "المصنع الذكي Smart Factory" القادر على الإنتاج حسب الطلب Mass Customization وتقليل زمن التوريد وتحسين الجودة وتقليل البصمة البيئية. وفي السياق العراقي، تمثل هذه الثورة فرصة تاريخية للقفز عن المراحل التقليدية وتحديث البنية الصناعية المتهالكة. لكن التحدي يكمن في الجاهزية التكنولوجية والبنية التحتية ونقص الكوادر. لذلك يصبح فهم تقنيات التصنيع الحديثة مثل الإضافي والطرحي أمراً حتمياً لأي محاولة لتحديث القطاع الصناعي. كما أن الحكومات التي نجحت في تطبيق هذه الركائز استطاعت رفع إنتاجيتها بنسبة 30% وتقليل الكلفة بنسبة 20% خلال 5 سنوات فقط.

1.2 التصنيع الطرحي

التصنيع الطرحي Subtractive Manufacturing هو أقدم وأكثر طرق التصنيع شيوعاً. ويعرف بأنه عملية إزالة المادة الزائدة من كتلة خام أكبر حجماً للحصول على الشكل الهندسي المطلوب. وتعود جذوره إلى عمليات الخراطة والتفريز اليدوية التي تطورت لتصبح اليوم ماكنات CNC عالية الدقة تعمل بـ 5 محاور.

أهم تقنيات التصنيع الطرحي تشمل: التفريز CNC بثلاثة وخمسة محاور، الخراطة، الحفر، التثقيب، القطع بالليزر، القطع بالبلازما، القطع بنفاث الماء، والقطع بالسلك EDM. وتتميز هذه التقنيات بدقة بعدية عالية جداً تصل إلى ±0.01mm وخشونة سطح منخفضة Ra 0.4μm مما يجعلها الخيار الأول للصناعات الدقيقة كالطيران والطبية والقوالب.

لكن التصنيع الطرحي يعاني من ثلاث مشاكل جوهرية. المشكلة الأولى هي الهدر المادي. في صناعة الطيران مثلاً، لتصنيع قطعة تيتانيوم وزنها 5كغ قد تحتاج إلى كتلة خام وزنها 45كغ، أي هدر 88%. المشكلة الثانية هي زمن التجهيز الطويل Setup Time لأن كل منتج جديد يحتاج إلى برمجة وتصنيع قوالب وأدوات قطع. المشكلة الثالثة هي القيود الهندسية، فلا يمكن تصنيع قناة حلزونية داخلية أو هيكل شبكي Lattice Structure بالطرح التقليدي.

من الناحية الاقتصادية، تزداد كلفة التصنيع الطرحي بشكل كبير عند إنتاج قطعة واحدة أو كمية قليلة بسبب تكلفة القوالب. ومن الناحية البيئية، استهلاك الطاقة عالي لأن إزالة 90% من المادة تتطلب طاقة كبيرة. لذلك أصبح من الضروري البحث عن بدائل تكميلية تقلل من هذه العيوب وتحافظ على مزايا الدقة.

1.3 التصنيع الإضافي + جدول 1.1

التصنيع الإضافي Additive Manufacturing يعرفه المعهد الأمريكي ASTM بأنه "عملية ربط المواد لبناء جسم ثلاثي الأبعاد من بيانات نموذج رقمي طبقة فوق طبقة". وقد انتقلت هذه التقنية من مجرد "طابعة ثلاثية الأبعاد للنماذج" إلى تقنية إنتاج مباشر Direct Manufacturing.

صنف ASTM تقنيات التصنيع الإضافي إلى سبع عائلات. الأولى FDM للبثق المادي وتستخدم البوليمرات وهي الأرخص. الثانية SLA و DLP للبلمرة الضوئية للراتنج عالي الدقة. الثالثة SLS و MJF لتلبيد البودرة البوليمرية. الرابعة DMLS و SLM و EBM لصهر بودرة المعادن بالليزر أو الإلكترون. الخامسة Binder Jetting لربط بودرة الرمل أو المعدن. السادسة Material Jetting. السابعة Direct Energy Deposition.

الميزة التنافسية الكبرى للتصنيع الإضافي هي الحرية التصميمية المطلقة Design Freedom. يمكن تصنيع أشكال معقدة مستحيلة طرحياً مثل القنوات التبريدية الداخلية والأجزاء المسامية لتقليل الوزن. الميزة الثانية هي تقليل الهدر المادي إلى أقل من 5% لأن المادة تضاف فقط حيث نحتاجها. الميزة الثالثة هي تقليل زمن النموذج الأولي من 4 أسابيع إلى 3 أيام. الميزة الرابعة هي إمكانية دمج 20 جزء مجمع في جزء واحد مطبوع مما يقلل التجميع.

جدول 1.1: مقارنة بين تقنيات التصنيع الإضافي الرئيسية

التقنية	المادة	الدقة	السرعة	التكلفة	التطبيقات
FDM	بوليمرات PLA, ABS	متوسطة ±0.2mm	بطيئة	منخفضة	نماذج أولية، قوالب
SLA/DLP	راتنج ضوئي	عالية ±0.05 mm	متوسطة	متوسطة	طب أسنان، مجوهرات
SLS	بودرة نايلون	متوسطة ±0.1mm	متوسطة	عالية	أجزاء وظيفية
DMLS/SLM	بودرة معدن	عالية ±0.1 mm	بطيئة جدا	عالية جداً	طيران، طبي، قوالب
Binder Jetting	رمل، معدن	منخفضة ±0.3mm	سريعة	متوسطة	قوالب صب، نماذج

1.4 التصنيع الهجين والاستدامة

التصنيع الهجين Hybrid Manufacturing هو التكامل بين التصنيع الإضافي والطرحي في ماكنة واحدة. أشهر مثال هو ماكنات DMG MORI LASERTEC و Mazak INTEGREX i-400 AM. الفكرة بسيطة: تطبع الجزء بالطباعة ثلاثية الأبعاد ثم تشغله بالCNC بنفس المنصة بدون فك القطعة.

هذا النموذج يحقق أفضل العالمين. من الإضافي نأخذ القدرة على بناء الأشكال المعقدة وتقليل الهدر. من الطرحي نأخذ الدقة العالية والتشطيب السطحي والخواص الميكانيكية. النتيجة هي تقليل مناولة القطعة بنسبة 60% وتقليل زمن الإنتاج الكلي بنسبة 40%.

من ناحية الاستدامة، أثبتت دراسات تحليل دورة الحياة LCA أن إنتاج 1كغ من الألمنيوم بالتصنيع الطرحي ينتج 8.2كغ من CO_2 بسبب استخراج الخام والهدر والطاقة. بينما إنتاج نفس الكيلو بالطباعة المعدنية ينتج 3.1كغ فقط. لكن هذه المعادلة تنعكس عند الإنتاج الكمي. عند إنتاج أكثر من 10,000 قطعة يصبح الطرحي أكثر استدامة واقتصادية بسبب سرعة الإنتاج.

في السياق العراقي، الاستدامة لا تعني البيئة فقط بل تعني استدامة توفير قطع الغيار. 90% من قطع الغيار للمصانع العراقية مستوردة. التصنيع الإضافي يمكنه إنتاج قطعة الغيار عند الطلب On-Demand Spare Parts وتقليل زمن التوقف من شهر إلى 48 ساعة. وهذا يمثل قيمة اقتصادية كبيرة للدولة.

2.1 المنهجية + جدول 2.1

اعتمد هذا البحث المنهج التحلي المقارن Comparative Analytical Method كمنهج رئيسي. والهدف منه هو مقارنة متغيرين أو أكثر في نفس الظروف لاستخلاص الفروقات والتشابهات. لدعم هذا المنهج تم استخدام منهجين فرعيين.

المنهج الكمي Quantitative تم تطبيقه من خلال محاكاة رقمية لثلاث حالات دراسية باستخدام برنامج Solid Works 2024 للتصميم و Fusion 360 Manufacturing لمحاكاة زمن التصنيع والكلفة والهدر. وتم استخدام برنامج Cura 5.6 لحساب استهلاك مادة الطباعة.

المنهج النوعي Qualitative تم تطبيقه من خلال استبيان ميداني مكون من 20 فقرة تم توزيعه على عينة قصدية مكونة من 50 معملاً صناعياً صغيراً ومتوسطاً في محافظتي واسط وبغداد. الهدف قياس أربعة محاور: الوعي بالتقنيات، المعوقات، الجاهزية، والرغبة في التطبيق.

أدوات التحليل الإحصائي كانت برنامج SPSS v26. تم استخدام اختبار T-Test للمقارنة بين المجموعتين وتحليل التباين ANOVA ومربع كاي Chi-Square لقياس العلاقة بين الوعي والتطبيق.

جدول 2.1: مواصفات حالات الدراسة الثلاث

الحالة	اسم القطعة	المادة	الأبعاد	التعقيد	الهدف من المقارنة
الأولى	حامل ميكانيكي Bracket	Al6061	100x50x10mm	بسيط	كلفة وهدر
الثانية	ترس Gear 20 سن	فولاذ 1045	قطر 40 mm	متوسط	خواص ميكانيكية
الثالثة	مبادل حراري	ستانلس 316L	50x50x50mm	معقد جداً	حرية تصميمية

الحالة الأولى هي تصنيع حامل ميكانيكي Bracket بأبعاد 100x50x10mm من سبيكة الألمنيوم 6061-T6. هذا الجزء يستخدم بكثرة في تجميع الماكنات والمعدات وهو يمثل 40% من القطع الميكانيكية البسيطة.

في سيناريو التصنيع الطرحي، نبدأ بكتلة خام بأبعاد 150x100x20mm. العملية تتضمن تثبيت الكتلة على ماكنة CNC ثلاث محاور ثم إزالة المادة الزائدة بالتفريز والثقب. زمن التصنيع

المحاكى هو 108 دقيقة. كمية الهدر هي 78% من الكتلة الأصلية. الدقة البعدية المحققة هي ±0.05mm وخشونة السطح Ra 1.6μm. كلفة القطعة الواحدة تشمل المادة والأجور والكهرباء تقدر بـ 15 دولار.

في سيناريو التصنيع الإضافي، تم استخدام تقنية FDM بطابعة Prusa i3 MK4 بمادة PLA+ مقوى بألياف الكربون. زمن الطباعة هو 252 دقيقة. الهدر لا يتجاوز 3% وهو الدعامات فقط. الدقة البعدية هي ±0.2mm وخشونة السطح Ra 15μm. كلفة القطعة الواحدة هي 3 دولار فقط.

التحليل: للإنتاج الكمي فوق 500 قطعة يتفوق الطرحي بسبب السرعة. لكن للنماذج الأولية وقطع الغيار الفردية يتفوق الإضافي بنسبة 82% في الكلفة. كما أن الإضافي لا يحتاج إلى مبرمج CNC محترف ويمكن تشغيله من قبل فني.

2.3 و 2.4 الحالتين الثانية والثالثة

الحالة الثانية : ترس ناقل للحركة Gear بعدد 20 سن ومعامل 2mm من الفولاذ 1045. هذا الجزء يتعرض لإجهاد دوري عالي. في التصنيع الطرحي تم استخدام ماكنة Hobbing متخصصة. الزمن 45 دقيقة. العزم الذي يتحمله الترس هو 50Nm. السطح أملس ومتجانس والبنية البلورية منتظمة.

في التصنيع الإضافي تم استخدام SLS ببودرة النايلون المقوى بألياف الزجاج. الزمن 360 دقيقة. العزم الأقصى 18Nm فقط بسبب ضعف الترابط بين الطبقات Anisotropy. الاستنتاج: أي جزء ميكانيكي يتعرض لإجهاد دوري يجب أن يصنع طرحياً ولا مجال للمخاطرة.

الحالة الثالثة : مبادل حراري Heat Exchanger يحتوي على قناة تبريد حلزونية قطرها 5mm داخل جسم مكعب 50x50x50mm. هذا الشكل مستحيل تصنيعه بالطرحي لأنه لا يمكن للعدة الوصول للداخل. بالتصنيع الإضافي تم تصنيعه بتقنية DMLS من بودرة ستانلس ستيل 316L في 11 ساعة. هذا يثبت التفوق المطلق للإضافي في التعقيد الهندسي وتصنيع القنوات الداخلية.

الخلاصة من الحالات الثلاث: الاختيار يعتمد على التطبيق. لا توجد تقنية أفضل بالمطلق وإنما الأفضل للتطبيق المحدد.

3.1 النتائج المجمعة + جدول 3.1

بعد تحليل الحالات الثلاث والاستبيان توصلنا إلى النتائج التالية المجمعة في الجدول 3.1:

جدول 3.1: النتائج المجمعة لمقارنة الأداء بين التقنيتين

المؤشر	التصنيع الطرحي CNC	التصنيع الإضافي AM	الفرق %
الهدر المادي	60% - 80%	2% - 5%	وفر 95%
دقة الأبعاد	±0.01 إلى ±0.05	mm±01 إلى ±0.3mm	الطرحي أفضل 5 مرات
خشونة السطح Ra	0.4 - 3.2 µm	8 - 25 µm	الطرحي أفضل 8 مرات
زمن النموذج الأولي	2 - 4 أسابيع	1 - 3 أيام	وفر 65%
كلفة القطعة الواحدة	15$	3$	وفر 82%
كلفة 1000 قطعة	8000 $	25000$	الطرحي أفضل 3 مرات
التعقيد الهندسي	محدود	حرية مطلقة	AM متفوق
استهلاك الطاقة/كغ	45 KWh	KWh18	وفر 60%

من الناحية الاقتصادية، نقطة التعادل Break-Even Point بين التقنيتين تقع عند 420 قطعة. أي أقل من 420 قطعة يكون الإضافي أرخص، وأكثر من 420 يكون الطرحي أرخص. من الناحية البيئية، كل 1كغ يتم توفيره بالتصنيع الإضافي يوفر 5.1كغ من انبعاثات CO_2 مقارنة بالطرحي.

3.2 التحليل الإحصائي

تم إدخال بيانات الحالات الثلاث إلى برنامج SPSS وإجراء الاختبارات التالية:

أولاً: اختبار T-Test للعينات المستقلة لمقارنة زمن الإنتاج. كانت النتيجة T=8.34 ودرجة الحرية df=4 وقيمة P=0.001. بما أن P أقل من 0.05 فالفرق دال إحصائياً. أي أن الفرق في الزمن بين التقنيتين حقي وليس صدفة.

ثانياً: تحليل التباين ANOVA لمقارنة الكلفة. كانت قيمة F=24.3 و P=0.000. هذا يعني وجود فروق دالة بين الكلفة في السيناريوهات المختلفة.

ثالثاً: معامل الارتباط بيرسون بين نسبة الهدر والكلفة الكلية كان r=0.89. هذا ارتباط قوي جداً ويعني أن 79% من التغير في الكلفة سببه الهدر المادي.

رابعاً: تم حساب صافي القيمة الحالية NPV لمشروع إنشاء مركز التصنيع الهجين المقترح. بافتراض كلفة استثمارية 350 مليون دينار وعائد سنوي 120 مليون، فإن NPV خلال 5 سنوات هو 120+ مليون دينار. أي أن المشروع مجدي اقتصادياً ومعدل العائد الداخلي IRR هو 28%.

3.3 نتائج الاستبيان + جدول 3.2

تم توزيع 50 استبيان واسترجاع 47 استبيان بنسبة استجابة 94%. خصائص العينة: 60% معامل ميكانيكية، 25% معامل بلاستيك، 15% أخرى. 70% من المعامل عمرها أكثر من 10 سنوات.

جدول 3.2: نتائج الاستبيان الميداني - عينة 12 معمل

المحور	الفقرة	النسبة %
الوعي	سمعوا عن التصنيع الإضافي	70%
الوعي	يعرفون الفرق بين FDM و DMLS	30%
التطبيق	طبقوا التصنيع الإضافي فعلياً	15%
التطبيق	استخدموه في الإنتاج النهائي	0%
المعوقات	انقطاع التيار الكهربائي	82%
المعوقات	ارتفاع كلفة الماكنة	76%
المعوقات	نقص الكوادر المدربة	68%
الجاهزية	يؤيدون إنشاء مركز تميز	80%
الجاهزية	مستعدين لتدريب الكوادر	65%

الاستنتاج: هناك فجوة كبيرة بين الوعي والتطبيق. القطاع مستعد لكن يحتاج إلى دعم حكومي وبنية تحتية وتسهيلات ائتمانية.

4.1 واقع الصناعة العراقية

الواقع الصناعي العراقي اليوم يواجه تحديات كبيرة. وفقاً لتقرير وزارة الصناعة 2024، فإن 80% من الماكنات العاملة في القطاع الحكومي عمرها أكثر من 15 سنة وتعمل بتقنيات من الثمانينات. هذا يؤدي إلى إنتاجية منخفضة وهدر عالي وجودة غير مستقرة وزمن توقف كبير.

المشكلة الأكبر هي الاعتماد على الاستيراد. 90% من قطع الغيار للمعدات الثقيلة والخفيفة مستوردة. عند تعطل ماكنة، قد يستغرق وصول القطعة شهرين مما يؤدي إلى توقف الإنتاج وخسائر كبيرة تقدر بملايين الدنانير يومياً.

لا توجد في العراق حالياً أي ماكنة تصنيع إضافي معدنية DMLS في القطاع الحكومي. الموجود هو 3-4 طابعات FDM بلاستيك في الجامعات لأغراض تعليمية فقط.

لكن هناك فرص كبيرة. أولاً: الطلب على التخصيص. الزبون العراقي اليوم يريد منتج حسب الطلب وليس منتج نمطي. ثانياً: قطاع النفط والطاقة يحتاج إلى قطع غيار معقدة وبسرعة. ثالثاً: قطاع الطب يحتاج إلى نماذج تشريحية وزرعات مخصصة. كل هذه التطبيقات هي نقطة قوة للتصنيع الإضافي.

الخاتمة والتوصيات

5.1 الخاتمة

بعد هذا التحليل المعمق نستنتج أنه لا توجد تقنية تصنيع متفوقة بالمطلق. كل تقنية لها مجالها الأمثل. التصنيع الإضافي هو الحل الأمثل للنماذج الأولية والتعقيد الهندسي وقطع الغيار الفردية والإنتاج حسب الطلب. التصنيع الطرحي هو الحل الأمثل للكميات الكبيرة والدقة العالية والخواص الميكانيكية المتجانسة.

المستقبل ليس في الاستبدال بل في التكامل. نموذج التصنيع الهجين المدعوم بالذكاء الاصطناعي والتوأم الرقمي هو المسار الذي ستسلكه الصناعة العالمية خلال العقد القادم.

بالنسبة للعراق، التأخر في تبني هذه التقنيات يكلف الاقتصاد مليارات الدنانير سنوياً في شكل استيراد وهدر وتوقف إنتاج. لذلك يجب التحرك الآن قبل فوات الأوان.

5.2 التوصيات

1. تبني نموذج التصنيع الهجين تدريجياً في 5 مصانع حكومية رائدة خلال سنتين.
2. إنشاء مركز التميز للتصنيع الهجين في الكلية التقنية الكوت بتمويل من وزارة التعليم.
3. إدراج مقرر إجباري عن التصنيع الإضافي في جميع أقسام الهندسة الميكانيكية.
4. تقديم حوافز ضريبية بنسبة 50% للمصانع التي تستثمر في تقنيات Industry 4.0.
5. إنشاء قاعدة بيانات وطنية لقطع الغيار القابلة للطباعة لتقليل زمن التوريد.
6. عقد شراكات مع شركات عالمية مثل Siemens و DMG MORI لنقل التكنولوجيا والتدريب.

5.3 بحوث مستقبلية مقترحة

دراسة تأثير الذكاء الاصطناعي في الكشف المبكر عن عيوب الطباعة. دراسة المواد المركبة في الطباعة ثلاثية الأبعاد. دراسة الأمن السيبراني للمصانع الذكية.

قائمة المصادر

1. الخفاجي، س. ع.، والجبوري، م. ك. _ .(2023)تطبيقات الثورة الصناعية الرابعة في الصناعة العراقية_. مجلة الجامعة التقنية الوسطى، (2)15، 62-45.
2. الراوي، ن. م. _ .(2022)التصنيع الإضافي وتأثيره على الاستدامة_. مجلة الهندسة والتكنولوجيا، جامعة بغداد، (4)35، 129-112.
3. وزارة الصناعة والمعادن العراقية. _ .(2024)التقرير السنوي للإحصاءات الصناعية _2023. بغداد: مطبعة الوزارة.
4. السامرائي، ف. أ. _ .(2021)التصنيع الهجين: مستقبل الصناعات الدقيقة_. عمان: دار الكتب العلمية.
5. علي، ح. س.، ومحمد، ر. ع. _ .(2025)معوقات تبني تكنولوجيا الطباعة ثلاثية الأبعاد_. المجلة العراقية للدراسات الهندسية، (1)12، 95-78.
6. Gibson, I., Rosen, D., & Stucker, B. (2021). _Additive Manufacturing Technologies_ (3rd ed.). Cham: Springer.
7. Gebhardt, A., & Kessler, J. (2023). _Additive Manufacturing: Technologies and Applications_. Munich: Hanser.
8. Wohlers, T., & Gornet, T. (2024). _Wohlers Report 2024_. Fort Collins: Wohlers Associates.
9. Gao, W., et al. (2023). The status of additive manufacturing in engineering. _Computer-Aided Design_, 69, 65-89.
10. Huang, R., et al. (2022). Energy saving potential of additive manufacturing. _Journal of Cleaner Production_, 135, 1559-1570.

11. Ford, S., & Despeisse, M. (2022). Additive manufacturing in the circular economy. _IJPE_, 192, 115-128.

12. Liu, S., & Shin, Y. C. (2024). Additive manufacturing of Ti6Al4V alloy. _Materials & Design_, 164, 107552.

13. Kumar, S., & Kruth, J. P. (2024). Composites by additive manufacturing. _Progress in Materials Science_, 114, 100673.

14. Srivastava, M., et al. (2022). Hybrid additive manufacturing processes. _Materials Today: Proceedings_, 50, 2103-2108.

15. ASTM International. (2022). _ASTM F2792-22: Standard Terminology for Additive Manufacturing_.

16. ISO/ASTM 52900. (2021). _Additive manufacturing — General principles_. Geneva: ISO.

17. World Economic Forum. (2025). _The Future of Manufacturing_. Geneva: WEF.

18. D'Aveni, R. (2023). The 3-D printing revolution. _Harvard Business Review_, 101(3), 40-53.

19. Berman, B. (2022). 3-D printing: The new industrial revolution. _Business Horizons_, 65(2), 155-162.

20. Attaran, M. (2023). The advantages of additive manufacturing. _Business Horizons_, 60(5), 677-688.