[19] المملكة العربية السعودية SA
مدينة الملك عبدالعزيز للعلوم والتقنية

[11] رقم النشر :SA 99191117 A
[43] تاريخ النشر: 1426/11/01هـ
الموافـــــق: 2005/12/03م

[12] طلب براءة اختراع

[72] اسم المخترع : دراك ايجلستون، ايان روبيرت لينش
[71] مقدم الطلب : ١) سميثكلاين بيتشام كوربوريشن
العنوان : وان فرانكلين بلازا الرمز البريدي : بنسلفانيا 19103 فيلادلفيا، أمريكا
الجنسية : أمريكية
مقدم الطلب : ٢) سميثكلاين بيتشام بي ال سي
العنوان : نيوهوريزونز كورت الرمز البريدي : ميدلسيكس تي دبليو 98 اس بي برينتفورد، المملكة المتحدة
الجنسية : بريطانية
[74] الوكيل :
المحامي سليمان ابراهيم العمار

[21] رقم الطلب : 99191117
[22] تاريخ الايداع : 1419/11/11هـ
الموافق : 1999/02/27م

[51] التصنيف الدولي :
Int. CL.: A61K 031/522
[30] بيانات الأسبقية :
US 063238 /60 1997/10/23

[54] اسم الاختراع :تكوينات جديدة متعددة الأشكال

NOVEL POLYMORPHIC FORMS

[57] الملخص: يتعلق هذا الاختراع بصورة بلورية متعددة الأشكال من مركب ١ ،٣ - ثنائي - بروبيل مثيل حلقي - ٨ -أمينو زانثين، وبطرق لتحضيرها وباستعمال تركيبات صيدلية منها.شكل(١)

هذا الطلب يتم نشره كما ورد من مقدم الطلب ولم يتم منح براءة اختراع عنه حتى تاريخه
ولا تتحمل المدينة أي مسؤولية بشأن محتوياته

بسم الله الرحمن الرحيم

تكوينات جديدة متعددة الأشكال

الملخص

يتعلق هذا الاختراع بصورة بلورية متعددة الأشكال من مركب ٣،١ -ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين، وبطرق لتحضيرها وباستعمال تركيبات صيدلية منها.
شكل (١)

تكوينات جديدة متعددة الأشكال

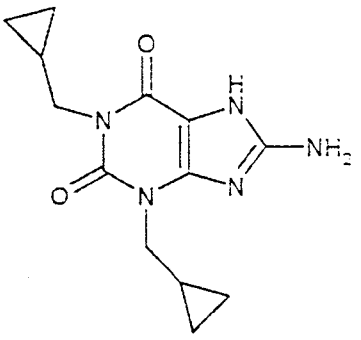
الوصف الكامل

خلفية الاختراع

يتعلق هذا الاختراع بتكوينات بلورية جديدة متعددة الأشكال من سيبامفلين ، وإلى طرق تحضيرها .

السعة الحادثة في التركيبات البلورية المختلفة تعرف بتعدد الأشكال ومن المعروف أنها تحدث في عدة مركبات عضوية. وهذه الصيغ البلورية المختلفة تعرف "تطورات متعددة الأشكال" أو "متعددات الأشكال" وتتحقق في حالتها البلورية. وبينما تكون هذه التطورات متعددة الأشكال لها نفس التركيب الكيميائي، فإنها تختلف في التعبئة، الترتيب الهندسي، الخواص الموصوفة للحالة البلورية الصلبة. كما في، هذه التطورات التي يمكن أن يكون لها خواص فيزيقية مختلفة في الحالة الصلبة، مثل الشكل، اللون، الكثافة، الصلابة، القابلية للتغير، الثبلت، وخواص الذوبان، الى آخره. وتغير شكل جزيئي عقار عضوي وما يتبعه يكون محل تقدير الصانع الماهر.

سيبا مفيليين ٣،١ - ثنائي - بروبيل ميثيل حلقي -٨- أمينو إكسانثين، وله صيغة كيميائية ك١٣ يد١٧ ن٥ أ٢، وزن جزيئي، ٢٧٥,٣١ ، والصيغة التركيبية التالية :



وتصنيعها موصوف في مثال ٩، في ماشلر وزملاؤه براءة بريطانيا العظمى رقم ٨٩٠٦٧٩٢,٠ في ٢٣ مارس ١٩٨٩، في البراءة الأوروبية EPO المقابلة لها، ٣٨٩٢٨٢، والبراءة الأمريكية المقابلة لها ٥,٧٣٤,٠٥١ وكشفها الكامل محتوى هنا بواسطة مراجع كاملة.

والسيبامفيلين يكون مثبط لمادة PDE_4 ويكون ذو فائدة في العلاج، بما فيه الوقاية من الحالات المرضية.

وقد أكتشف أيضاً أن سيبا مفيلين له نشاط مثبط لمادة TNF الصادر عن إيسير وزملاؤه PET/US91/٠٨٧٣٤ (منشور أيضاً كمثل EP ٥٥٨٦٥٩)، ويكون حينئذ ذو فائدة في العلاج، متضمناً الوقاية من الحالات المرضية المنقولة عن TNF . وتوجد مقالات مناسبة، صيغ جرعات، معدل جرعات الى آخره لمتعددات الأشكال من هذا الاختراع، معدة للاستخدام في العلاج الدوائي للأمراض يمكن أن يوجد في آي من ماشلر وآل، أو تطبيق براءة إسر وآل، الكشف عنها موجود هنا بواسطة مراجع.

وصف عام للاختراع

هذا الاختراع ينتمي الى متعدد أشكال بلوري جديد من ١، ٣-ثنائي-حلقي بروبيل ميثيل-٨-أمينو أكسانثين، يرجع الى المذكور فيما بعد كصيغة ١، وهذه الصيغة من مثل هذا المركب تكون ذات فائدة في علاج الأمراض المنقولة بواسطة PDE_4.

وهذا الاختراع ينتمي أيضاً الى متعدد أشكال بلوري جديد من ١، ٣-ثنائي-حلقي بروبيل ميثيل-٨-أمينو إكسانثين ، يرجع هنا فيما بعد الى صيغة ٢، والتي تصنع من مثل هذا المركب الذي يكون مفيداً في علاج الأمراض المنقولة بواسطة PDE_4 .

وهذا الاختراع ينتمي أيضاً الى متعدد أشكال بلوري جديد من ١، ٣-ثنائي-حلقي بروبيل ميثيل-٨-أمينو إكسانثين، يرجع هنا فيما بعد الى صيغة ٤، والتي تصنع من مثل هذا المركب الذي يكون مفيداً في علاج الأمراض عن طريق PDE_4 .

شرح مختصر للرسومات

الشكل ١ عبارة عن أشعة سينية ذات شكل خاص وتستخدم مسحوق تكسر الضوء أو تشعه للتكوين ١ (المحور الرأسي: العزم (CPS)، المحور الأفقي : زاوية التكسر، في ٢ ثيتا) (درجات).

شكل ٢ عبارة عن أشعة سينية ذات شكل خاص مسحوق تكسر الضوء أو تشعه للتكوين٢ . (المحور الرأسي : الشدة (CPS)، المحور الأفقي : زاوية التكسر، في ٢ ثيتا (درجات).

شكل ٣ عبارة عن جدول يوضح جدولة زاوية اللي للتكوين ٤،٢.

شكل ٤ عبارة عن جهاز رامان لقياس التكوين ٢ (المحور الرأسي: الشدة: المحور الأفقي السفلي : الرقم الموجي (سم < - ١>)).

شكل ٥ عبارة عن جهاز رامان لقياس التكوين ٢ (المحور الرأسي: الشدة ، المحور الأفقي السفلي: الرقم الموجي (سم < - ١ >))

شكل ٦ عبارة عن جهاز رامان لقياس التكوين ٤ (المحور الرأسي: الشدة ، المحور الأفقي السفلي: الرقم الموجي (سم < - ١ >)).

شكل ٧ عبارة عن مقارنة للأطياف المقاسه على جهاز رامان والخاصة بالتكوينات الثلاثة ٤،٢،١ على المنطقة الشادة الكاربونيلية من ١٧٥٠ - ١٦٠٠ سم$^{-١}$ (المحور الرأسي: الشدة، المحور الأفقي السفلي: الرقم الموجي (سم < - ١ >)).

شكل ٨ عبارة عن مقارنة للأطياف المقاسة على جهاز رامان والخاصة بالتكوينات الثلاثية ٤،٢،١ على المنطقة من ١٠٠٠ - ٨٠٠ سم$^{-١}$ (المحور الرأسي: الشدة، المحور الأفقي السفلي : الرقم الموجي (سم< - ١ >)).

شكل ٩ عبارة عن مقارنة للأطياف المقاسة على جهاز رامان والخاصة بالتكوينات ٤،٢،١ على المنطقة من ٤٠٠ - ٢٠٠ سم$^{-١}$ (المحور الرأسي: الشدة، المحور الأفقي السفلي: الرقم الموجي (سم < - ١ >)).

شكل ١٠ يصور جزيئي التكوين ١ في أبعاد ثلاثة مع تخطيط عليه العناوين.

شكل ١١ يعطي تصوير مجسم لجزيئي التكوين ١.

شكل ١٢ يوضح مسافات الترابط بالأنجستروم لجزيئي التكوين ١.

شكل ١٣ يوضح جدول لزوايا الترابط في درجات لجزيئي التكوين ١.

شكل ١٤ يوضح جدول لزوايا اللي في درجات لجزيئي التكوين ١ .

شكل ١٥ يوضح جدول لقياسات موضعية وانحرافاتها القياسية الموجدة لجزيئي التكوين ١ . X ، Y ، Z كسور من رتبة واحدة تدل على موضع ذرات لها علاقة بمنشأ وحدة الخلية، و B(Z2) تكون عامل الحرارة الأيزوتروبية.

شكل ١٦ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة واحدة من تكوين ١ .

شكل ١٧ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة واحدة من التكوين ٢ .

شكل ١٨ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة واحدة من التكوين ٤ .

شكل ١٩ عبارة عن مقارنة أطياف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة واحدة من التكوينات ١،٢،٤ .

شكل ٢٠ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبروميد البوتاسيوم من التكوين ١ (المحور الرأسي: التوصيل (٪)، المحور الأفقي السفلي : (رقم الموجة (سم < - ١ >)).

شكل ٢١ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء في بروميد بوتاسيوم من تكوين ٢ (المحور الرأسي: التوصيل (٪)، المحور الأفقي السفلي: (رقم الموجة (سم < - ١ >)).

شكل ٢٢ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة محطمة من التكوين ١ .

شكل ٢٣ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة محطمة من تكوين٢ .

شكل ٢٤ عبارة عن طيف امتصاص تحت حمراء مميز لبلورة محطمة من التكوين ٤ .

شكل ٢٥ عبارة عن مقارنة لأطياف امتصاص تحت حمراء لبلورة واحدة محطمة من التكوين ٤ .

شكل ٢٦ تصوير جزيئي تكوين ٤ في أبعاد ثلاثة، ومع تخطيط ذو عناوين.

شكل ٢٧ يتيح رسم مجسم لجزيئي تكوين ٤ .

شكل ٢٨ يوضح جدول لمسافات الترابط بالأنجستروم لجزيئي التكوين.

شكل ٢٩ يوضح جدول لزوايا الترابط بالدرجات لجزيئي تكوين ٤.

شكل ٣٠ يوضح جدول لزوايا اللي بالدرجات لجزيئي تكوين ٤ .

شكل ٣١ يوضح جدول للقياسات الموضعية وانحرافاتها القياسية الموجـــدة لجزيئـــي التكوين ٤.

شكل ٣٢ يصور جزيئي التكوين ٢ في ثلاثة أبعاد مع تخطيط عليه العناوين.

شكل ٣٣ يوضح جدول لمسافات الترابط بالأنجستروم لجزيئي التكوين ٢ .

شكل ٣٤ يوضح جدول لزوايا الترابط بالدرجات لجزيئي التكوين ٢ .

شكل ٣٥ يوضح جدول لزوايا الانحراف بالدرجات لجزيئي التكوين ٢ .

شكل ٣٦ يوضح جدول للقياسات الموضعية وتحولاتها القياســـية الموجـــدة لجزيئـــي التكوين ٢.

الوصف التفصيلي

لقد أكتشف الآن أن سيبا مفللين يمكن أن يوجد في صورة صيـــغ بلوريـــة جديـــدة متعددة، صيغ ذات أشكال متعددة، والتي تختلف كل عن الآخر من حيث الثبات، الخـــواص الطبيعية، معلومات الطيف، طرق التحضير. وقد تم شرح ثلاثة من هذه الصيغـــة الجديـــدة المتعددة الأشكال في هذا التطبيق وتكون فيما بعد راجعة الى صيغة ١ ، تكوين ٢ ، تكويـــن ٤ على الترتيب.

من الثلاثة الجدد متعددة الأشكال الراجعة لما سبق.

صيغة ١ تكون الأكثر ثباتاً.

صيغة ١ تتميز بأن لها حد أدنى ٥ سنوات لثبات البلورة.

هذا الاختراع أيضاً ينتمي الى تركيب دوائي يحتوى على كمية فعالة من متعدد أشكال من صيغة ١ مع أي من المزايا الملاحظة هنا، وحامل مقبول دوائياً أو مخفف منه.

والاختراع أيضاً ينتمي الى تركيب دوائي يحتوى على كمية فعالة من متعدد أشـــكال من صيغة ٢ مع أي من المزايا الملاحظة هنا، وحامل مقبول دوائياً، أو مخفف منه.

هذا الاختراع أيضاً ينتمي الى تركيب دوائي يحتوى على كمية فعالة من متعدد أشكال من صيغة ٤ مع أي من المزايا السابقة الملاحظة هنا، وحامل مقبول دوائياً، أو مخفف منه.

هذا الاختراع بصفة إضافية ينتمي الى الاستخدام في العلاج من الأمراض المنقولة عن طريق PDE_4 في ثديي في حاجة اليه، أي طريقة تقديمه الى حيوان ثديي كمية مؤثرة من متعدد أشكال من صيغة ١ مع أي من المزايا المذكورة هنا.

وهذا الاختراع له علاقة بصورة إضافية الى الاستخدام في معالجة الأمراض المنقولة عن طريق PDE_4 في حيوان ثديي في حاجة اليه بناء على ذلك، أي طريقة تتضمن إعطاء حيوان ثديي كمية مؤثرة من متعدد الأشكال صيغة ٢ مع أي من الخصائص الملحوظة في هذا.

هذا الاختراع له علاقة بصورة إضافية بالاستخدام علاج الأمراض المنقولة عن طريق PDE_4 في حيوان ثديي في وقت الحاجة وبناء على ذلك، أي طريقة تتضمن إعطاء جرعة مؤثرة من متعدد الأشكال من صيغة ٤ الى هذا الحيوان الثديي مع أي من الخصائص الملحوظة في هذا.

هذا الاختراع ناتج من تحقيق أن بقع معينة من سيبا مفيللين تظهر اختلافات في أطياف تحت الحمراء IR mull الخاصة بها. وتحضر كل البقع بنفس الطريقة بواسطة إيثانول كمذيب نهائي معيد للتبلر وبناء على ذلك يكون من الممكن أن سرعة التبلر يمكن أن تؤثر على شكل البلورة.

وعلى ضوء هذا، فإن العينات المعادة التبلر تحضر بسحق تبريدي لجزء من السائل الساخن بينما المتبقى يسمح له أن يبقى ويتبلر دون مساعدة. وفي كل حالة فإن حجم البقعة كانت ١ جم أو أقل. وتجفف العينات فوق هلام سيليكا تحت تفريغ وفي درجات حرارة الغرفة. وفي هذا البرنامج لإعادة التبلر، فإن هناك ثلاثة صيغ متعددة الأشكال أمكن التعرف عليها طريقة إيجابية، وهي مشروحة هنا في صورة الصيغ ١، ٢، ٤ .

وبناء على هذا فإن الاختراع له أيضاً علاقة بطريقة لتحضير متعدد أشكال من صيغة ١ مع أي من الخصائص السابقة متضمنة السيبا مفللين المتبلر في محلول كحولي من الإيثانول (س/ف)، بروبانول (ب/س)، بيوتانول (ب/س)، إيزوبروبانول (ب/س) أو مذيب عضوي من أسيتات الإيثيل (ب/س)، طولوين، أو كمذيب ماء*. وتحت ظروف معينة، فإن رباعي هيدروفيوران (ب/س)، وأسيتون (ب)، يمكن أيضاً أن يستخدم.

وفي شغل إضافي مع تبريد سريع بمعنى أن حمام مائي مثلج يستخدم مع عينات قـــاس صغيرة، والوقت المأخوذ بواسطة حرارة التفاعل لتنخفض من درجة الحرارة المرتجعة الى درجة الحرارة المحيطة تأخذ حوالى دقيقة واحدة مع الإيثانول كمذيب.

وفي مضمون مفضل من هذا الاختراع، ١- بروبانول يكون المذيب الأمثل لتحضـــير صيغة ١ من الصيغ متعددة الأشكال.

وهذا الاختراع أيضاً له علاقة بطريقة لتحضير متعدد الأشكال من صيغة ٢ مع أي من الخصائص السابقة المتضمنة سيبا مفللين المتبلر في محول كحولي مـــن الميثـــانول (ب/س) أو مذيب عضوي من رباعي هيدروفيوران (ب)، أو أسيتون. وتحت ظـــروف معينـــة، فـــإن الكلوروفورم أو بيريدين يمكن أن يستخدم.

وهذا الاختراع له علاقة أيضاً بطريقة لتحضير متعدد أشكال من صيغة ٤ مع أي مـــن الخصائص السابقة المتضمنة سيبا مفللين المتبلر في مذيب عضوي من خليط من ٥٠:٥٠ من إيثانول، وأيزوبروبانول.

ونتيجة لقلة ذوبان سيبا مفللين بصفة خاصة، في مذيب له علامة نجمـــة (*)، مثـــل التولوين أو الماء للصيغة ١، وعملية إعادة التبلر تكون مطورة بمعنى أن المحلول الساخن يصفى لإزالة المواد غير الذائبة والمذاب يسمح له أن يبقى ويتبلر خارج المركب.

والاصطلاح (ب) كما هو مستخدم هنا يرجع الى إعادة تبلر بطئي في درجة الحـــرارة المحيطة. ويلاحظ أن الاصطلاح تبريد "بطئ" (وتبريد "سريع") تكون اصطلاحات نســـبية. وفي هذا المعنى الخاص فإن التبريد البطئ يمكن أن يقحم إزالة الحمام الزيتي وتبريد الهواء.

وعلى أساس القياس وحده (تقريباً ١ جم كمية لبعض التجـــارب، عكـــس حجـــم البقعة التجارية) والتبريد يمكن أن يكون في الواقع سريعاً تماماً، مثل في معدل ١٥-٣٠ دقيقة. ولكن تحت ظروف محيطة متحكم فيها، فإن التبريد البطئ يعرف بصفة عامة بأنـــه حـــوالى ساعة واحدة (١) من الحرارة المرتجعة الى الحرارة المحيطة. والتبريد البطئ جداً يكون تقريبـــاً من حوالى (٤) ساعات من المرتجع الى المحيط. تحت هذه الظروف فـــإن الصيغـــة ٢ يمكـــن الحصول عليها أيضاً من الإيثانول كما هو مشروح فيما بعد في هذه الوثيقة. ولكن، بطريقـــة

مماثلة تحت أحجام البقعة الصغيرة في بعض الاختبارات المستخدمة للصيغة ١، فإن طريق الإيثانول (تبريد بطئ) ليس من الضروري أن يكون مذيب / حرارة الأفضل ما يمكن للصيغة ١ . ويلاحظ أيضاً أنه بالنظر الى استخدام الأسيتون في التبريد السريع (بمعنى استخدام حمام ثلجي)، فإن الصيغة ١ تتكون والتحليل المحدود يشير أيضاً الى أن استخدام الأسيتون تحت طريق التبريد السريع ليس من الضروري أن يكون مذيب / حرارة المختار للصيغة ٢ .

والمصطلح (س) كما هو مستخدم هنا يرجع الى إعادة التبلر السريع بالتحطيم البارد، مثلاً بواسطة وضع الإناء في حمام ماء مثلج أو عملية مشابهة للقياسات الأكبر.

هذه الثلاثة متعددات الأشكال الجديدة المتبلرة من سيبا مفللين، ترجع أيضاً إلى BRL - ٦١،٣٦ ، ولكن يذوب عن حوالى ٣٠٥ ° م إلى حوالى ٣١٣ ° م متعدد الأشكال المتبلر، صيغة ١ يعطي أشعة سينية ذات شكل خاص من مسحوق مشعع أو مكسر للضوء مع ارتفاعات مميزة، يعبر عنها بمسافة "م" منخفضة (A) في العزم المنخفض، عند ١٢,٣٠٢ ، ٧,٧٠٢ ، ٨,٥٣٢، ٤,٢٨٩، ٢,٨٥٤ كما هو موضحة في شكل ١ ويمكن أن توجد مناقشة لنظرية أشكال مسحوق الأشعة السينية المكسر والمشعع للضوء يمكن أن توجد في ستاوت وجنسن، تحقيق تركيب الأشعة السينية، مرشد خاص، شركة ماكميلان، نيويورك (١٩٦٨).

ومتعدد الأشكال البلوري، صيغة ٢ ، يوضح أشعة سينية ذات شكل خاص من مسحوق مكسر ومشعع للضوء، مع ارتفاعات مميزة يعبر عنها بمسافة م منخفضة (A) في العزم المنخفض، في ١٢,٠٠١ ، ٦,٧٠٢ ، ٣,٦٨٧، ٣,٧٧٣ ، ٧,٣٤٥ كما هو موضح في شكل ٢ .

وهذا الاختراع أيضاً له علاقة لمتعدد الأشكال البلوري صيغة ٤،٢،١، من سيبا مفللين والتي تتميز بصورة إضافية، بقياسات البلورة المأخوذة من التحليل الفوتوغرافي البلوري بالأشعة السينية لبلورة واحدة، كما هو موضوع في تصاعد في جدول ٣،٢،١ فيما بعد، ومعلومات الأشعة السينية ٣-دي مجموعة عند درجة الحرارة المحيطة.

جدول ١

المحددات البلورية للشكل ١

شكل البلورة : إبريات مفلطحـــــة.

أبعاد البلورة (مم) : ١ × ٠,١٢ × ٠,٠٨ مـــــم.

٥ لون البلورة : عديمة اللـــــون

المجموعة الفراغية : P_1 ثلاثي الميل # ٢

درجة الحرارة : ٢٩٥ ك

ثوابت الخلية : أ = ١٠,٨٢٩ (٢) إنجستروم.

ب = ١٢,٦٣٦ (٢) إنجستروم.

١٠ ج = ٥,١٠٥ (٣) إنسجتروم.

ألفا (α) = ٩٩,٤٨ (٤)

بتا (β) = ٩١,٥٣ (٤)

جاما (δ) = ٨٣,٨٤ (٣)

الحجم : ٦٥٠ (٨) إنجستروم ^{٣}

١٥ الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٤

الكثافة ، σ (حسابياً) : ١,٣٥٤ جم / سم$^{-٣}$

μ : ٧,٣٦٢ سم$^{-١}$

F (٥٥٥) : ٢٩٢

جدول ٢

المحددات البلورية للشكل ٢

شكل البلورة : مكعبـــات مســـتطيلة.

لون البلورة : عديمة اللـــــون

٥ أبعاد البلورة (مم) : ٠,٨٠ × ٠,٥٠ × ٠,١٥ مـــــم

المجموعة الفراغية : P_2 ١/٢ أحادية الميل # ١٤

ثوابت الخلية : أ = ١٢,٢٢٧ (٤) انجستروم.

ب = ٧,٤٤٨ (٢) إنجستروم.

ج = ١٤,٩٤٦ (٨) إنسجتروم.

١٠ بيتا (β) = ٩٧,٩٥ (٤).

الحجم : ١٣٤٨,١ (٩) إنجستروم

الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٤

الكثافة ، σ (حسابياً) : ١,٣٥٦ جم / سم$^{-٣}$

μ : ٠,٨٩٦ سم$^{-١}$

١٥ F (٥٥٥) : ٢٩٢٥٨٤ .

جدول ٣

المحددات البلورية للشكل ٤

شكل البلورة (مم) : إبريات مفلطحـــــة.

لون البلورة : عديمة اللـــــون

أبعاد البلورة (مم) : ٠,٦٠ × ٠,١٠ × ٠,٠٥ مـــــم

المجموعة الفراغية : P_1 ثنائي الميل # ٢

درجة الحرارة : ٢٩٥ ك

ثوابت الخلية : أ = ١٠,٢١٠ (٣) انجستروم.

ب = ١٣,٧٥٣ (٢) إنجستروم.

ج = ٤,٩٤٢ (٣١) إنسجتروم.

ألفا (α) = ٩٧,٩٤ (٢)

يتا (β) = ٩٧,٩٥ (٤).

جاما (δ) = ٨٣,٣٣ (٢)

الحجم : ٦٧٧,١ (٥) إنجستروم ^{٣}

الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٢

الكثافة ، σ (حسابياً) : ١,٣٥٠ جم / سم$^{-٣}$

μ : ٧,٤٤٨ سم$^{-١}$

F (٥٥٥) : ٢٩٢ .

يتم تعريف بعد وحدة الخلية بواسطة ثلاثة محددات طول أجناب الخليفـــة ، الزوايـــا النسبية بين الأجناب وبعضها وأخيراً حجم الخلية.

ويتم تعريف أطوال جوانب وحدة الخلية بالرموز أ، ب، جـــ. بينما تمثـــل الزوايـــا النسبية بين أجناب الخليفة الرموز ألفا، وبيتا وجاما. ويعرف حجم الخليـــة بـــالرمز (ح). وهناك المزيد من التفصيل عن حسابات وحدة الخلايا والتي يمكن الرجوع اليها من خـــلال الفصل ٣ من مرجع تحديد التركيب باستخدام الأشعة السينية، المرشـــد العملـــي، شـــركة مكميلان، نيويورك، (١٩٦٨).

ومن الممكن أن يتم وصف الحالة البلورية لمركب باستخدام مختلف المحددات الخاصة بالتمثيل البياني البلوري: أبعاد وحدة الخلية، المجموعة الفراغية، الوضع الذري لجميع الذرات الموجودة في المركب بالنسبة الى مصدر وحدة الخلية الخاصة به. ويمكن تحديد هذه المحددات تجريبية باستخدام التحليل البلوري بواسطة الأشعة السينية.

ومن الممكن أن يكون للمركب عدة أشكال بلورية وتسمى هذه بمتعددة الأشكال. ولقد تم التوصل الى وجود ثلاثة أشكال متعددة الشكل من السيبا مفيللين. ويؤكد هذا الاكتشاف تحليل الأشعة السينية لثلاثة بلورات منفصلة. ولقد تم رصد النتائج الخاصة بمقارنة هذه الأشكال البلورية الثلاثة والخاصة بأبعاد وحدة الخلية والمجموعات الفراغية من خلال الجداول من ١ الى ٣ السابقة.

ويؤكد رسم المواضع الذرية، لمتعددات الأشكال الثلاثة، الخاصة بالذارات المشتقة من تحليل الأشعة السينية للبلورة الأحادية أن البلورات تحتوى على سيبا مفللين ودون وجود شوائب أو جزيئات بلورية أخرى.

ويوضح الشكل ١٠ الجزئ في ثلاثة أبعاد مع وجود مخطط تركيبي موضح. ولقد تم إدراج الشكل ١١ لتوضيح الرسم الفراغي. ويطابق التركيب الجزيئ الموضح خلال الشكل (١) مثيله الخاص بالشكل (٤)، باستثناء عدم الانتظام الواضح في أحد مجموعات البروبيل الحلقي (الذرتان ك١٢ و ك١٣) والذي تم تعديله خلال موضعين متساويين بالنسبة الى هذه الذرات. وتشير الدرجة العالية من الحركة الحرارية من مجموعة البروبيل الحلقي (الذرات ك١٦، ك١٧) الى التشوه بالإنثناء المتوقع.

وتشابه وحدة الخلية الخاصة بالبلورة الخاصة بالشكل (١) مثيلتها الخاصة بالشكل ٣، بنفس أبعاد الخلية، وحجم أكبر مقدار ٨ أنجستروم ^{3} وبالتالى تنخفض الكثافة بواقع ٠,١٥ جم سم^{3} . تقع جميع هذه التأثيرات خلال الانتظامية الموجودة في القناة التي تشغلها مجموعات البروبيل حلقي.

ويكون الترابط الهيدروجيني في هذا التركيب البلوري بين الجزيئات في الطبيعة ويماثل من الوجهة النوعية ذلك الموجود في الشكل ٤ . وكما هو الحال في تركيب الشكل (٤) فإن مواضع الهيدروجينات الأمينية يمكن تأكيدها من خلال خرائط فورير للكثافة الإلكترونية ولا

يتوافق موضع يد٢ ن٢ مع مشاركة الهيدروجين في الروابط الهيدروجينية البينية. وتفصل مسافة مقدارها ٣,٣٩٩ (٣) إنجستروم بين ذرات ن٢ وكذلك أ٥ في الشكل (١) مما يشير الى إمكانية التفاعل الضعيف المشابه للذي تم ملاحظته في تركيب الشكل (٢)، وذلك على الرغم من أن المسافة الموجودة في هذا الشكل تكون أطول بمقدار ٠,٤ انجستروم، وعند حساب الموضع يد٢ ن٢ مما يؤكد هذا التفاعل الهيدروجيني الترابطي، فإن القيمة الحرارية تصبح كبيرة بشكل غير معقول، مما يشير الى أن النتائج لم تدعم هذا الموضع التبادلي. ولهذا فإن التحسين يبلغ مداه عندما تكون ن٢ يد٢ في موضعه الأصلي المذكور من خلال فرق تخليق فوريور. وبالنسبة الى التفاصيل القياسية المرافقة لزوج الروابط الهيدروجينية الأخرى فلقد كانت كالآتي :

ن ٢ ---- ن١ ٣,٠٦٧ (٣) إنجستروم .

ن ١ ن٢ ---- ن ١ ٢,١٦ (٣) انجستروم زاوية ١٧٣ (٣)°

ن ٣ ---- أ ٥ ٢,٧٩٣ (٣) إنجستروم

يد ن ٣ ---- أ٥ ٢,٠٢ (٣) إنجستروم زاوية ١٦٥ (٤)°.

وبالنسبة الى التكوين (٤)، فإن الشكل ٢٦ يوضح الجزئ في ثلاثة أبعاد مع الاستعانة بالمخطط التركيب. ويقدم الشكل ٢٧ رسومات فراغية للتكوين (٤). وبالنسبة الى النتائج المذكورة في هذا الجزء، فإن بلورات التكوين (٤) تنمو في خليط ٥٠/٥٠ الإيثانول والأيزوبروبانول بالتبخير البطئ. إضافة الى ذلك فإن البلورات الخاصة بالتكوين (١) تنمو في خليط المذيب مع بلورات التكوين (٢)، مع إبريات من التكوين (٤) والتي تظهر عقب تبخير المحلول بأيام عديدة. ويشابه التكوين الجزيئ الخاص بالصورة (٤) بدرجة كبيرة لذلك الخاص بالصورة (٢). وتتركز الاختلافات الأساسية في توجيه الدوران الخاص بمجموعات البروبيل الحلقي والتي تقع في علاقة إينانتيوميرية شكلية بالنسبة الى أجزائها المضادة في تركيب الصورة ٢، وذلك حسب زاوية اللي المجدولة في جدول ٤ ، وتظهر في الشكل (٣).

وتكون الروابط الهيدروجينية الموجودة في التركيب البلوري الخاص بالشكل (٤) بين الجزيئات ذات طبيعة مشابهة، وتتفاعل فيما بينها نوعياً مع تلك الخاصة بالصورة (٢). ويتضمن الفارق الرئيسي واحداً من زوج الهيدروجين الموجود على

ن٢. وهناك توضيح لموضع يد ١ ن ٢ يمكن ملاحظته من خلال فرق فوريور على خرائط الكثافة الإلكترونية. ولا يتوافق الموضع مع مشاركة الهيدروجين في تفاعل الرابطة الهيدروجينية. وتفضل مسافة ٣,٢٧٣ (٣) إنجستروم بين ذرات ن٢ وكذلك او في التكوين (٤)، وعلى أي حال، فإنه من المقترح أن تكون إمكانية تفاعل الترابط الهيدروجين مشابهة لتلك الملاحظة في تركيب التكوين ٢، وعلى الرغم من ذلك فإن المسافة الملحوظة في هذا التكوين تزيد عن ٠,٢ أنجستروم. ويجب حساب موضع يد١ ن٢ الذي يجب أن يكون متوافقاً مع تفاعل الترابط الهيدروجين، وهناك الكثير من المحاولات المبذولة لتنقيته، وقد تصبح القيمة الحرارية كبيرة جداً، مما يشير الى أن النتائج لا تدعم هذا الموضع. وتبلغ التحسينات مداها عند الموضع الأصلي كما يظهر من فرق تخليق فوريور. ويمكن تمثيل التفاصيل القياسية الخاصة بالروابط الهيدروجينية كالآتي :

ن ٢ ---- ن ١ ٣,٠٤٢ (٢) إنجستروم

يد ١ ن ٢ ---- ن ١ ٢,١١ (٢) إنجستروم زاوية ١٧٣ (٢)°

ن ٣ ---- أ ٥ ٢.٧٣١ (٢) إنجستروم

يد ن٣ ---- أ ٥ ١,٩١ (٢) إنجستروم . زاوية ١٦٠ (٢).

وبالنسبة الى التكوين ٢، فإن الشكل ٣٢ يوضح التكوين ٢ الخاص بالجزئ في ثلاثة أبعاد وذلك كما يظهر في المخطط التركيبي. ويكون الترابط الهيدروجين لتركيب البلورة الخاص بتكوين (٢) متعدد الأشكال بين الجزيئات في الطبيعة. و بالنسبة الى التفاصيل القياسية فإنها كالآتي :

ن ٢ ---- أ٥ ٣,٠٤٩ (٣) انجستروم

يد ١ ن ٢ ---- أ٥ ٢,٢٦ (٣) انجستروم زاوية ١٥١ (٢)°

ن ٢ ---- ن ١ ٣,٠٧١ (٣) انجستروم

يد٢ ن ٢ ---- ن١ ٢,٤١ (٣) انجستروم زاوية ١٣٧ (٣)°

ن ٣ ---- أ ٥ ٢,٧٤١ (٣) أنجستروم

يد ن٣ ---- أ٥ ١,٩٠ (٣) إنجستروم زاوية ١٦٨ (٢)° .

التفاصيل التجريبية :

التكوين ١

تنمو الإبريات المفلطحة بالتبخير البطئ لخليط من خلات الإيثيل والبيوتانول. ويتم تحديد محددات الشبكة البلورية من إنعكاسات الزوايا ٢٥ الموزعة في الفراغ المقلوب المقاس على جهاز قياس التشتت Enraf Nonius CAD-4 وذلك حسب ما سيلي ذكره من خلال جدول ٥ ويتم جمع النتائج الخاصة بالشدة الكروية الكاملة باستخدام قياس التشتت باستخدام أشعة نحاس أحادية المصدر الضوئي جرافيتية الصادرة من مصدر مصعد كهربي دوار والطريقة الفنية لقياس سرعة الأشعة المتغيرة ω- 2 θ . ويتم قياس مقادير الشدة الخاصة بانعكاسات الشاشة الثلاثة عند البداية والنهاية وكل ساعتين من زمن التعرض المتغير بمقدار +/- ٠,١ ٪ ويتم التحكم في الموجهات الثلاثة عند الضبط لتحديد أي حركة للبلورة خلال التجربة ويتم ضبط النتائج على مؤثرات استقطابية لورنتز، ويستخدم كذلك الحساب العشري DIFABS، بالنسبة الى تأثيرات الامتصاص. ويتم عمل معدل للنتائج المقاسة حتى يتم الحصول على مجموعة النتائج النهائية.

ويتحمل التركيب بالطرق المباشرة باستخدام سلسلة برنامج SHELXS . ويتم توفيق المواضع الذرية مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية ثم مع المحددات الإزاحية اللاأيزوتروبية. ويتم تقليل الدالة الى أقصى حد كالآتي :

$$\Sigma \omega (| FO | - | FC |)^2$$

وتنسب الأوزان (W) مع النتائج على أساس أن :

$$W = 1 / \sigma 2 (FO) = \{\sigma^2 (IC) + (0.04 I)^2\}.$$

ويتم اكتشاف مواضع ذرات الهيدروجين الملامسة للنتروجين في خرائط فروق فوريور. ويتم حساب مواضع ذرات الهيدروجين الملامسة للكربون على أساس الاعتبارات الفراغية والمثبتة في المراحل النهائية للتحسين على طول الخط مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية المعلمة بالرمز 1.3(Beq) الخاص بالذرة الملامسة. ولا يتم احتساب ذرات الهيدروجين الموجودة على مجموعات البروبيل الحلقي عند التحسين. ويتم تحسين جميع المواضع الهيدروجينية على طول الخط مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية. ويتم جمع القيم العليا (max Δ / σ = 0.05) الخاصة

بالمربعات الدنيا للمادة الكاملة المحسنة من المتبقيات البلورية التمثيلية الملائمة على أسلس أن :

$R = 0.056, WR = 0.092$.

ولا يحمل فارق خريطة فوريور النهائي أي سمات عند الكثافة القصوى + / - ٠,٢٨٥ إنجستروم $^{-٣}$. ويمكن حساب قيم عوامل الاستطارة الخاصة بالذرة المتعادلة من الجداول العالمية لقياسات الأشعة السينية المتعلقة بعلم البلوريات.

جدول ٥

نتائج قياس الشدة الخاصة بالتكوين ١

جهاز قياس التشتت : Enrof Nonius CAD4

الإشعاع : $\alpha\lambda$ kcu = ١,٥٤٠٦ إنجستروم

مصدر أحادي الضوء : بلورة أحادية الجرافيت.

الطريقة الفنية للمسح الراداري : $\omega - 2\theta$

سرعة المسح الراداري : متغيرة بين ١,٥٠ الى ٦,٧ درجة دقيقة في ω .

قياسات الخلفية : بلورة متحركة - عداد متحرك عند كل طرف من أطراف مستوى المسح الراداري؛

زمن المسح الراداري / زمن الخلفية = ٢

مستوى النتائج : $^{\circ}٢ \geq 2\theta \geq ^{\circ}٦٠$

$١٢ \geq h \geq -١٢$

$١٤ \geq k \geq -١٤$

$٥ \geq ١ \geq -٥$

الانعكاسات القياسية : ثلاثة قياسات تقاس كل ثلاثة ساعات من زمن تعرضها للأشعة السينية.

عدد الانعكاسات الكلية : ٢٣٢٠

٢٠٣٢ مفرد

Rint : ١,٢ %

عدد النتائج المقاسة ١٧٤٩ I > 3 o (I)

عدد المتغيرات : ١٩٩

P : ٠,٠٤

R : ٠,٠٥٦ %

RW : ٠,٠٩٢ %

تصحيح الامتصاص: ٠,٨٦٨ دقيقة ١,٢٥٤ بحد أقصى ٩٩١ ave .

وبالنسبة الى نتائج الأشعة السينية التجريبية الخاصة بالبلورة المكتملة الأحادية المستخدمة في إنتاج التركيب فإنها ممثلة في الشكل ١٠ بالنسبة الى التكوين (١) الموجود في الأشكال من ١٢ الى ١٥ . ويتم قياس المحددات الموجودة في الجداول بالوحدات الشائعة الاستخدام والمعروفة للعاملين بهذا المجال. ويمكن الرجوع الى المزيد من التفاصيل عن الوحدات من خلال الجداول العالمية الخاصة بقياسات الأشعة السينية في علم البلوريات، جزء ٤ ، صفحه ٥٥ ، ٩٩ ، ١٤٩ ، برمنجهام: مطبعة كينوتش، ١٩٧٤، وكذلك من خلال المرجع G.M. Sheldtick, SHELXTL. User Manual, Nicolet Instrument. Co, 1981 .

التكوين ٢ :

يتم تكوين الطبقات المستطيلة عن طريق التبخير البطئ للمحلول المحضر في ميثانول/٢ بيوتانون. ويتم حساب محددات الشبكة البلورية من الزوايا المحيطة الخاصة بخمسة وعشرون انعكاس ويتم ترتيبها تبادلياً على جهاز تشتيت Enrof Nonius CAD-4 ولسوف يتم القاء المزيد من التوضيح من خلال الجدول ٦. ويتم جمع بيانات الشدة على المشتت باستخدام اشعاع موليبدنيوم جرافيتي أحادي الضوء وطريقة فنية للمسح الراداري السريع المتغير θ 2 - ω.

ويتم تصحيح النتائج الخاصة بالنقص ٤.٨ % في قسم الشدة لانعكاسات الشاشة الثلاثة المقاسة عند الابتداء، والنهاية وعقب ساعتين من زمن التعرض. ويتم التحكم في ثلاثة محددات للاتجاه لقياس أي حركة بلورية أثناء التجربة. ويتم تصحيح النتائج وفقاً لمؤثرات لورنتز المؤثرات القطبية، مع استخدام النتائج الكسرية العشرية DIFABS من أجل تأثيرات

الامتصاص. ويتم عمل معدل للانعكاسات المنطقية ومكافئات التماثل للحصول على مجموعة النتائج النهائية.

ويتم حل التركيب بالطريقة المباشرة مع استخدام سلسلة برنامج MOLTAN80 . ويتم توفيق المواضع الذرية ابتدائياً مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية ثم مع محددات الإزاحة الا أيزوتروبية. ويتم خفض الدالة الى حدها الأدنى كالآتي :

$$\Sigma \omega (| FO | - | FC |)^2$$

وينسب الأوزان، W ، للنتائج على أساس أن

$$W = I/\sigma 2 (FO) = [\sigma^2 (IC) + (0.04I)^2]$$

ويتم الكشف عن مواضع ذرات الهيدروجين من خلال خرائط فـــروق فوريـــور. ويسمح بتحسين الخواص والعوامل الحرارية الأيزوتروبية الخاصة بذرات هيدروجين الأحماض الأمينية وهيدروجينات الميثين على حلقات البروبيل الحلقي. ويتم حســـاب مواضـــع ذرات الهيدروجين الأخرى بالاعتماد على الاعتبارات الهندسية وتظل ثابتة حتى مراحل التحســـين النهائية على طول الخط مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية المعلمة بالرمز (Beq) 1.3 الخـــاص بالذرة الملامسة. ويتم جمع القيم العليا (max $\Delta / \sigma = 0.005$) بالمربعات الدنيا للمادة الكاملـــة المحسنة من المتبقيات البلورية التمثيلية الملائمة على أساس أن :

$R = 0.44$ ، $WR = 0.054$.

ولا يحمل فارق خريطة فوريور النهائي أي سمات عنـــد الكثافـــة القصـــوى +/- ٠,١٩٦ انجستروم $^{-3}$. ويتم احتساب قيم عوامل الاستطارة الخاصة بالذرة المتعادلـــة مـــن الجداول العالمية لقياسات الأشعة السينية المتعلقة بعلم البلوريات.

وبالنسبة الى نتائج الأشعة السينية التجريبية الخاصة بـــالبلورة المكتملـــة الأحاديـــة المستخدمة في انتاج التركيب فإنها ممثلة في الشكل ٣٢ بالنسبة الى التكوين (٢) الموجـــود في الأشكال من ٣٣ الى ٣٦ . ويتم قياس المحددات الموجودة في الجداول بالوحدات الشـــائعة الاستخدام والمعروفة للعاملين في هذا المجال.

جدول ٦

نتائج قياس الشدة الخاصة بالتكوين ٢

جهاز قياس التشتت : Enrof Nonius CAD4

الاشعاع : λ mok α = ٠,٧١١٠٧٣ أنجستروم

مصدر أحادي الضوء: بلورة أحادية الجرافيت.

الطريقة الفنية للمسح الراداري : $\omega - 2\theta$

سرعة المسح الراداري : متغيرة من ٢,٥ الى ٦,٧ درجة دقيقة في ω .

قياسات الخلفية : بلورة متحركة - عداد متحرك عند كل طرف من أطراف مستوى المسح الراداري / زمن الخلفي = ٢ .

مستوى النتائج : $٢^{\circ} \geq 2\theta \geq ٦٠^{\circ}$

صفر $\geq h \geq$ ١٤

صفر $\geq k \geq$ ٨

١٧ $\geq l \geq$ ١٧

الانعكاسات القياسية : ثلاثة انعكاسات تقاس كل ثلاثة ساعات من زمن التعرض للأشعة السنية.

عدد الانعكاسات الكلية : ٢٤٦٩

٢٣٥٣ مفرد

عدد النتائج المقاسة : $I > 3\sigma (I)$ ١٤١٧

عدد المتغيرات : ٢٠٢

P : ٠,٠٤

R : ٠,٠٤٤ %

RW : ٠,٠٥٤ %

جودة المطابقة : ١,٤٠٣

معامل الاثارة : $٧,٨٦٩ (١) \times ١٠^{-٧}$

تصحيح الانحلال : ٠,٩٧٦٩ دقيقة ، ١,١٣٧٤ واحد أقصى

تكوين ٤ :

تتكون إبريات مفلطحة بالتسخين البطيء باستخدام خليط ٥٠/٥٠ إيثانول وأيزوبروبانول. ويتم تقييم المحددات الخاصة بالشبكة البلورية الموزعة في الفراغ التبادلي مقاسة على مشتت Enrof Nonius CAD - 4 ، والمذكورة في الجدول ٧ .

ويتم حساب الكروية الكاملة لنتائج الشدة باستخدام التشتت باستعمال ضوء أحادي المصدر جرافيتي ذو أشعاع نحاسي يأتي من مصعد دوار المصدر والطريقة الفنية للمسح الراداري بسرعة متغيرة للمسح مقدارها $\omega - 2\theta$ ويتم قياس قيم الشدة الخاصة بانعكاسات الشاشة الثلاثة عند النهاية والبداية وكل ساعتين من زمن التعرض بمقدار + / - ١.١%. ويتم التحكم في الموجهات الثلاثة عند الضبط لتحديد أي حركة للبلورة خلال التجربة. ويتم ضبط النتائج على مؤثرات لورنتز والمؤثرات الاستقطابية ويستخدم كذلك الحساب العشري DIFABS الخاص بتأثيرات الامتصاص. ويتم عمل معدل لمكافئات التماثل وكذلك تلك الخاصة بمساعدات فريديل وذلك للحصول على مجموعة النتائج النهائية. ويتم حل التركيب بالطرق المباشرة باستخدام سلسلة برامج SHELXS . ويتم توفيق المواضع الذرية مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية تم مع المحددات الازاحية اللاأيزوتروبية. ويتم تقليل الدالة الى أقصى حد كالآتي :

$$\Sigma\, \omega\, (|FO| - |FC|)^2$$

وتنسب الأوزان (W) مع النتائج على أساس أن :

$$W = 1 / \sigma 2\,(FO) = [\sigma 2\,(IC) + (0.04I)^2]$$

ويتم إكتشاف مواضع ذرات الهيدروجين الملامسة لذرات النيتروجين في خرائط فارق فورير. ويتم حساب مواضع ذرات الهيدروجين الملامسة لذرات الكربون الخاصة بمثيلين البروبيل الحقي على أساس الاعتبارات الهندسية الفراغية والمثبتة في المراحل النهائية للتحسين على طول الخط مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية المعلمة بالرمز 1.3(Beq) الخاصة بالذرة الملامسة. ويتم توفيق جميع المواضع الهيدروجينية على طول الخط مع العوامل الحرارية الأيزوتروبية ويتم جمع القيم العليا ($\max\Delta / \sigma = 0.01$) الخاصة بالمربعات الدنيا للمادة الكاملة

المحسنة الخاصة بالمتبقيات البلورية التمثيلية الملائمة على أساس أن :

$R = 0.049 , WR = 0.071 .$

ولا يحمل فارق خريطة فوريور النهائي أي سمات عند الكثافة القصوى +/- ٠,٥١٥ إنجستروم $^{-3}$. ويمكن حساب قيم عوامل الاستطارة الخاصة بالذرة المتعادلة من الجداول العالمية لقياسات الأشعة السينية المتعلقة بعلم البلوريات.

جدول ٧

نتائج قياس الشدة الخاصة بالتكوين ٤

جهاز قياس الشدة الخاصة بالتكوين

جهاز قياس التشتت : Enrof Nonius CAD4

الاشعاع : α CUK λ = ١٥٤٠٦ أنجستروم

الطريقة الفنية للمسح الراداري : $\omega - 2\theta$

سرعة المسح الراداري : متغيرة من ٢,٥ الى ٦,٧ درجة دقيقة $^{-1}$ في ω .

قياسات الخلفية : بلورة متحركة - عداد متحرك عند كل طرف من أطراف مستوى المسح الراداري / زمن الخلفية = ٢ .

مستوى النتائج : $٢^{\circ} \geq 2\theta \geq ٦٠^{\circ}$

$-١١ \geq h \geq ١١$

$-١٥ \geq k \geq ١٥$

$-٥ \geq l \geq ٥$

الانعكاسات القياسية : ثلاثة قياسات عقب كل ثلاثة ساعات من زمن التعرض للأشعة السينية.

العدد الكلي للإنعكاسات : ٣٩٩٨

٢٠١٧ منفرد

عدد النتائج المقاسة : $I > ٣\sigma (I)$ ١٦٦٢

عدد المتغيرات : ٢٠٢

P : ٠,٠٤

R : ٠,٠٤٩ %

RW : ٠,٠٧١ %

جودة التطابق : ٢,٠٩٥

معامل الإخماد : ١,٤١١ (١) × ١٠ $^{-٦}$

تصحيح الامتصاص : ٠,٩١١ دقيقة ، ١,٠٨٨ بحد أقصى ٠,٩٩٧ ave .

وتكون نتائج تحليل الأشعة السينية للبلورة الأحادية محدودة بالبلورة الموضوعة في شعاع الأشعة السينية. وتعطي نتائج التمثيل البلوري على مجموعة كبيرة من البلورات إنكسار على المسحوق المستخدم في الأشعة السنية. وإذا ما كان المسحوق عبارة عن مركب متبلر نقى فإنه من الممكن الحصول علي مخطط بسيط للمسحوق. ولكي يتم مقارنة النتائج الخاصة بتحليل بلورة واحدة وتحليل بأشعة إكس للبودرة فإنه من الممكن إجراء عملية حسابية بسيطة لتحويل معلومات بلورة واحد الى رسم توضيحي بأشعة إكس للبودرة ، SHELXTL plus (علامة تجارية) كبرنامج كمبيوتر ، Reference Manual by Semen's Analytical x - ray Instrument, Chapter 10, p. 179 - 181 , 1990 . وهذا التحويل ممكن وذلك لأن تجربة البلورة الواحدة تحدد بطريقة روتينية أبعاد وحدة الخلية، المجموعة الفراغية والأوضاع الذرية. وبمقارنة شكل المسحوق المسحوب هذا مع شكل المسحوق الناتج بالتجربة من تجميع عدد كبير من البلورات سوف يؤكد إذا كانت نتائج الطريقتين واحدة أم لا.

تفرق البودرة الناتج عن أشعة أكس (XRD).

يوضح تفرق البودرة بواسطة أشعة إكس الفرق بين الأشكال الثلاثة لمتعددات الشكل. والتحاليل المجراة على عينات ٤× تكوين ١ وعينات ٤× تكوين ٢ توضح أن أشكال التفرق المتجانسة يتم الحصول عليها لكل مجموعة وهذه المعلومات نجدها في شكل ١ و ٢.

مقاس طيف الأشعة تحت الحمراء

إن الأطياف الماصة تحت الحمراء تحدد وجود الصيغ ٤،٢،١. وهـــذه المعلومـــات موجودة في أشكال ١٦ الى ٢٥ بالنسبة للبلورة الأحادية المركبـــة البلـــورات المســـحوقة للأشكال المتعددة المختلفة وفي دراسة عن الضغط نجد أن الصيغة ١ تكون ثابتـــة بالنســـبة للضغط والطحن، بينما الصيغة ٢ تكون ثابتة بالنسبة للضغط ولكن لا تثبت للطحن الشـديد وتوضح المقارنة بين الأطياف التحت حمراء للتكوينات ٤،١ فروقاً ملحوظـــة، إذ تنفصـــل الحزمة في منطقة تشوه الميثيلين عند ١٤٣٠ سم$^{-1}$ (مع الكتف عنـــد ١٤٤٢ $^{-1}$) والخاصـــة بالتكوين ١ الى التكوين ٤ كي تنتج حزمة عند ١٤٢٤سم$^{-1}$ وحزمة عند ١٤٥٥ سم$^{-1}$ (مع كتف عند ١٤٦٦ سم$^{-1}$) وتوجد حزم الكربونيل المشدود في التكوين (١) عنـــد ١٦٤٨ (مع كتف ١٦٥٦سم$^{-1}$)، وكذلك ١٦٨٢ سم$^{-1}$، حيـــث يتواجـــد التكويـــن (٤) عنـــد ١٦٥٦سم$^{-1}$ وكذلك ١٦٩٤ سم$^{-1}$ وتغيب الخصائص الضعيفة الموجودة في التكوين ٤ عند ٢٠٠٠ و ٢٣٠٠ سم$^{-1}$ من التكوين (١) ، ولكنها قد تمثل ضوءاً توافقياً لمنطقة الكربونيـــل وهذه الأطياف مسجلة باستعمال ميكروسكوب Spectra - Tech Plan II مع مقياس طيـــف P-E 1760 FTIR
(64 - 256 scans, ratio mode, MCT detector, 4 cm^{-1} resolution, dry air purge).

وأطياف العينات التي لم يجرى لها تحضير يتم الحصول عليها بواسطة تركيب بلورات على نافذة ماسية. ويتم تحضير البلورات المسحوقة باســتعمال Spectra - Tech m- Sample Plan (خلية ضغط) مثبتة مع نافذة ماسية. ويستعمل ميكروسكوب فراغي لملاحظة ســـلوك البلورات أثناء الضغط. وبعد الضغط، يتم فصل النوافذ الماسية ويتم تسجيل طيـــف المـــادة الملتصقة الى أحد النوافذ.

والأطياف تحت الحمراء للبلورات الأحادية ذات صيغ ٤،٢،١ توضح اختلافـــات عديدة ويمكن التعرف عليها . وتوجد اختلافات هامة في الشدة النسبية للروابط بين الأطياف تحت الحمراء للبلورات الأحادية ٢،١ والأطياف المناظرة التي تم الحصول عليها من أقـــراص بروميد البوتاسيوم، وهذه الاختلافات تحدث خلال الأطياف ولكنها تكون أكثر وضوحـــاً تحت ١٧٠٠ سم$^{-1}$. وبصفة خاصة، لاحظ الفرق في قوى الشد النسبية للأربطة بالقرب من

١٥٣٠ ،١٤٤٠ ، ١٢٦٠ و ٨٠٠سم$^{-١}$ في الأطياف الخاصة بالصيغة ٢ ، والروابط بالقرب من ١٥٤٠ ، ١٤٢٠ ، ١٢٦٠ و ١٠٦٠ سم$^{-١}$ في أطياف الصيغة ٢ .

وأطياف البلورات المسحوقة تشابه أطياف أقراص بروميد البوتاسيوم المناظرة. وهذا لا يدعو للدهشة بما أن كلاً من البلورات المسحوقة وأقراص بوتاسيوم بروميد تمثل كل التوجيه الجزيئي. وفي أحوال كثيرة فإن انتقال الأشعة تحت الحمراء خلال العينات البلورية من الممكن الوصول اليه فقط بواسطة السحق ويوجد توافق هزيل بين أطياف البلورة الأحادية والبلورة المسحوقة للصيغة ٤ ، مع حدوث فرق واضح بينهما في المواضع ١٦٦٠-١٦٢٠ ، ١٢٦٠-١١٨٠ ، ١٠٠٠-٩٢٠ و ٨٠٠-٧٥٠ سم$^{-١}$. وعلى أي حال فإن البلورة المسحوق للصيغة ٤ تشابه بشدة أطياف البلورة المسحوق للصيغة ١ . وبالنسبة لهذه الأطياف تحت الحمراء، فإن بلورات الصيغ ٤ يتم الحصول عليها في وجود هؤلاء من صيغة ٢ بواسطة تبخير بطئ ٥٠:٥٠ إيثانول: ايزوبروبانول ويتم فصلها باليد. وبالتحويل من صيغة ٤ الى صيغة ١ لا يثير الدهشة؛ وتوضح المعلومات التي تم الحصول عليها بواسطة التشتت الضوئي بواسطة الأشعة السينية ثلاثية الأبعاد أن المطابقة الجزيئية (بعيداً عن توجيه مجموعات سيكلو بروبيل) وربط الهيدروجين (في اشكال تداخلات خاصة) تشابه بعضها البعض في صيغ ١ و ٤ . وفي صيغ ١ و ٤ نجد أن واحد فقط من هيدروجينات الأمينو يشترك في ربط الهيدروجين (وهذا يخالف صيغة ٢، والتي تكون كل مانحات الهيدروجين فيها مشاركة). وهذه الاكتشافات تنتمي الى النتائج المسجلة من الأطياف تحت الحمراء للبلورة الأحادية للتكوينات الثلاثة، حيث مواضع ن - يد الممدودة لصيغ ١ و ٤ تكون متشابهة وتخالف صيغة ٢. والصيغ ١ و ٤ لكل منهما رابط بالقرب من ٣٤٥٥ سم$^{-١}$ وهو مخصص لوظيفة ن يد غير متزاملة. وفي الصيغة ٢ فإن هذه الرابطة غير موجودة ويكون من الواضح أن كل مانحات الهيدروجين تكون مشاركة في الربط الهيدروجيني.

والاطياف تحت الحمراء للبلورات الأحادية للتكوين والمسجلة على أجهزة مختلفة تكون متشابهة، كما هو ملاحظ من قبل (ماعدا موضع ١٢٨٠ - ١٢٦٠ سم$^{-١}$) ويمكن شرح ذلك عن طريق المؤثرات الموجهة، ويتم تمثيل الأطياف الخاصة بالتكوين ٤ من خلال الشكل ١٨ .

أطياف RAMAN

أطياف RAMAN للصيغ ١ ، ٢ ، ٤ موضحة هنا أيضاً في أشكال ٤ الى ٩ . وكما هو واضح جلياً، فإنه توجد فروق هامة بين أطياف التكوينات الثلاثة، وهـــذا يـــؤدي الى سهولة التعرف عليهم.

وبفحص التكوين ٤، تحت الضغط تبين أنه تحت بعض الظروف المحيطة ليتحـــول الى التكوين ١، وهكذا فإن تقنيات عمل العينات التقليدية مثل أقراص هـــاليدات الالكيـــل أو Nujal mull، من الممكن ألا تكون الطريقة المثلى للحصول على اطياف تحت حمـــراء لهـــذه الأشكال المتعددة بما أن الوقت المستخدم في اختيار البلورات ذات الأحجام المناسبة والحصول على أطياف جيدة يكون كبيراً.

والتنظير الطيفي بواسطة RAMAN يوفر طريقة سريعة للتعرف على صيـــغ ١،٢،٤ من بعضها البعض بدون الحاجة الى تحضير عينات.

ويتم تسجيل الأطياف باستعمال مقياس أطياف RAMAN من نوع Perkin - Elman 2000 FT مزود بليزر Nd: YAG NIR laser (1.064 Mm). وحالات الفحص تكـــون ٦٤-٢٥٦ ، فاصل شعاع كوارتز، درجة ثبات ٤ سم - ١ وقوة ليزر ١ وات. وأطياف الصيغة ٤ (شكل ٦) توضح كمية قيمة من تشتت RAMAN من القارورة الزجاجية. وهذا يـــرى بوضوح من المنحنى الواقع مع الحد الأقصى للزيادة بالقرب من ٤٠٠ ســـم$^{-١}$. والزجـــاج يسبب فقط اسهام لا يذكر بالنسبة للأطياف الشديدة للصيغ ١ و ٢ (شكلي ٤ و ٥).

وتوضح أطياف RAMAN للتكوينات ١ ، ٢ و ٤ اختلافات عديدة وهي واضحـــة للتعرف عليها. وموضع امتداد الكربونيل ١٧٥٠ - ١٦٢٠ سم$^{-١}$ (شكل ٧) توضح الفرق الأكثر وضوحاً بين الصيغ (كما هو الحال بالنسبة للأطياف تحت الحمراء والمســـجلة مـــن البلورات المنفردة (الموضحة هنا في أشكال ١٦ - ١٨).

ويوجد فرق واضح بين الصيغ الثلاثـــة في المجـــال مـــن ١٠٠٠ - ٨٠٠ ســـم$^{-١}$ (شكل٨). ويوضح الموضع ٤٠٠ - ٢٠٠ سم$^{-١}$ (وهو لا يمكن الوصول اليه عند تســـجيل الأطياف باستعمال ميكروسكوب تحت الحمراء) فروق واضحة (شكل ٩)، بالرغم مـــن أن حساسية هذا الموضع تكون قليلة نسبياً بسبب رد فعل الكاشف.

حراريات المحلول

يتم تحديد حراريات المحلول باستعمال اسيتون وميثانول كمذيبات مناسبة. وقيم مص الحرارة موجودة في الجدول ٨. ومختلف صيغ تعدد الأشكال تؤدي الى حرارايات مختلفة للمحول. وهذه موضحة بالبيانات التي تم الحصول عليها هنا. وقيمة HT وتعنى نقل الحرارة ، تساوي الفرق في طاقة شبكة البلورة للصيغتين وهي واحد في كلا المحلولين.

وهذا متوقع بما أن المحتويات الحرارية الفردية تعتمد على المذيب ولكن الاختلاف ليس كذلك. ومن هذه النتائج توحي بأن ذوبان الصيغة ٢ يكون أكثر إمتصاصاً للحرارة في كلا المذيبين هكذا يعطي الصيغة الأكثر ثباتاً. وحراريات المحلول بالنسبة للصيغة ٤ تكون في تقدم.

جدول ٨

الصيغة	ميثانول (Kcal /mal)	اسيتون (K cal / mal)
١	٤,٨١	٣,٩٣
٢	٦,٤٧	٥,٥٩
Δ HT	١,٦٦	١,٦٦

التحليل الحراري

إن مقياس السعرات للفحص التمييزي (DSC) لا يمكنه أن يميز الصيغ الثلاثة من Cipamfylline وفي كل حالة فإن مخفضات الحرارة توضح انصهار فقط مع درجات حرارة بداية وأقصى حد متشابهة، وبالضبط عند ٣١٢ م° وكذلك ٣١٤ م°، وعلى أي حال عندما يتم تقليل معدل الحرارة بدرجة كافية ، حرارة المص المصهرة تظهر كمنصهر مندمج أي منصهر مكونين. وهذا السلوك معتاد للصيغتين ١ و ٢ .

وتوضح الملاحظات الميكروسكوبية الحرارية أن الصيغ الثلاثة متسامية. وبداية التسامي تختلف لكل صيغة وتستمر على مدى حرارة واسع (١٣٠-٢٩٠ ° م على أجهزة غير عيارية). وهذا غير واضح في مخططات حرارة DSC . ويحدث الانصهار على مدى (٣١٠-٣٢٣ ° م-على أجهزة غير عيارية) لكل الصيغ الثلاثة. واحتمال انصهار مكونين

تتابعياً لا يمكن معرفته. ويتم تجميع المتسامي لكل الصيغ الثلاثة ويتم تحليله بواسطة IR و NMR. وهذا يوضح أن صيغة ١ تم انتاجها.

وتتم تسقية الصيغة ١ و ٢ بالتسخين ثم التبريد وتتحول الى صيغة ١ بواسطة IR . وخطوة التسقية تتكون من التسخين ١٠ م° / دقيقة من درجة الحرارة المحيطة وحتى ٢٥٠ °م وتظل عند هذه النقطة لمدة ٢/١ - ١ ساعة، ثم تبرد العينة ببطء حتى درجة ح الغرفة. والتجارب الحرارية السابقة توضح أن صيغة ١ هي الأكثر ثباتاً وهذا يوضح تشابه نقطة الانصهار في الصيغة الثلاثة.

طرق صناعية لإعادة البلورة :

يتم تحضير دفعات مختلفة من السيبا مفللين بنفس الطريقة وقد تم توضيح مذيب إعادة البلورة النهائي ومعدل التبريد المختلف من خلال الجدول (٩)

جدول (٩)

المذيب	معدل التبريد	الاسترداد	متعدد الشكل الناتج
إيثانول	بطئ	٧٥ %	صيغة ٢
إيثانول	بطئ جداً	٧٥ %	صيغة ٢
ميثانول	بطئ	٧٥ %	صيغة ٢
أسيتون	سريع	٢٢ %	تكوين ١
رابع هيدروفيوران	سريع	٣٣ %	تكوين ١ و ٣
رابع هيدروفيوران	بطئ	٥٨%	تكوين ١

وفي حالة THF (سريع)، يبدو أن التكوين الناتج تكون ملوثاً بتكوين ٢ ، تكوين ٣.

وكل البيانات توضح أن تكوين ٣ ممكن أن تكون متعددة الشكل، ولكنها لا تنتج دائماً في المخالط.

والتبريد البطئ في هذا المذيب يعطي صيغة ١.

اعادة بلورات التكوين ٢

ستعمل خطوات تجريبية أخرى لإعادة بلورة التكوين (٢) من خليط مذيب من ميثانول/٢ - بيوتانون كالتالى:

يتم إضافة مادة صلبة م عينة سيبا مفيللين الى قاسم من ٢- بيوتانون في قارورة زجاجية ويسخن بخفة على لوح ساخن مع التقليب. ثم يضاف ميثانول بالتنقيط الى السائل الدافئ ويقلب حتى تذوب المادة الصلبة كلها. ويتم عمل ثقوب صغيرة في الغطاء البلاستيكي للقارورة، ويترك السائل الرائق عديم اللون ليتبخر ببطء في درجة الحرارة المحيطة. وتظهر بلورات مستطيلة من صيغة ٢ خلال ١١ يوم .

وهناك دراسة أخرى ، يذاب فيها (١ جم) من السيبا مفللين في إيث أ يد (٥٥ جم) ويبرد المحاليل حتى ٢٠ - ٢٥ م° لمدة بين ساعة وأربعة ساعات على التوالي وقد تم رصد النتائج كما يظهر من خلال جدول ١٠ .

جدول (١٠)

إعادة تبلر السيبا مفللين باستخدام إيث أ يد

مثال	المؤثر (مل مول)	زمن التبريد a الى ٢٠ - ٢٥ م° (ساعة)	الناتج المستخلص %	التكوين b متعدد الأشكال
١	٣,٦	١	٧٤,٩	٢
٢	٣,٦	٤	٧٥,٢	٢

a : زمن التبريد من الارتجاع (٧٨ م°) الى حوالي ٢٠ - ٢٥ م°.

B : يتم تحديده بواسطة طيف الأشعة تحت الحمراء.

في كلتا الحالتين، فإن التبريد لفترة طولية (≤ ١ ساعة) يعطي سيبا مفللين على هيئة التكوين (٢) متعدد الأشكال .

اعادة بلورة التكوين ٤

وفي تجربة أخرى لإعادة بلورة صيغة ٤ ، يتم اضافة مادة صلبة من عينية سبيا مفيللين الى قاسم للأيزوبروبانول في قارورة زجاج ويسخن خفيفاً على لوح ساخن مع التقليب. ويضاف حجم مساوي من إيثانول ويستمر التقليب حتى تذوب كل المادة الصلبة. ثم يتم عمل ثقوب في غطاء القارورة ويترك المحلول الصافي ليتبخر ببطء في درجة الحرارة المحيطة.وبعد وقت قصير تظهر بلورات مستطيلة من تكوين ٢ وبعد عدة أيام تظهر إبريات وتستعمل احداها لتحديد التكوين ٤.

اعادة بلورة التكوين ١

وفي تجربة أخرى لتنقية سيبا مفيللين، يتم إذابة BRL - 61063 (١٥,٥جم) في بروبانول- ٤ (٣٠٠ مل) عند الارتجاع. ويؤدي التبريد لدرجة حرارة الغرفة الى ترسب الناتج النقي للصيغة ١ والذي يتم عزلة بالترشيح ويجفف عند درجة ح ٧٠ ° م طوال الليل. وزن BRL-61063 المستخلص = ١١,٩٦ جم، ناتج ٦٣ % والمذيبات الأخرى مثل بروبانول- ٤/ماء ، ٣ : ١ تؤدي أيضاً الى ناتج ونتائج مشابهة.

وكما هو ملاحظ مما سبق، يفضل ١-بربانول كمذيب لتحضير BRL-61063 في صيغة ١ متعددة الشكل. وخطوة إعادة البلورة بواسطة ١-بربانول تطبق على مجال واسع، تقريباً مجال ٢ كجم بنجاح.

وأوقات التبريد من ٩٧ م° حتى درجة الحرارة المحيطة تختلف من حوالى ٧٠ دقيقة الى طوال الليل (٨-٢ ساعة) وينتج تكوين ١ .

وهذه العملية تتلخص كالآتي :-

يتم إذابة مادة خام من BRL-61063 (٢,٠٦ كجم) في ١-بربانول (٤٠ ل) عند حوالى ٩٧ م° . ثم يبرد التفاعل الى حوالى ١٨ م° على مدى حوالى ٧٠ دقيقة. والمعلق الناتج يتم ترشيحه، ويتم غسيل المادة الصلبة بواسطة ١-بربانول (٣ × ٠,٦ لتر) سابق التبريد يجفف في الهواء عند حوالى ٥٠ م° طوال الليل ليعطي BRL-61063 نقي (١,٨٥ كجم، ٩٠ %) من ناتج التكوين ١.

ومن خلال دراسة أخرى لإعادة التبلر، مشابهة لتلك الموضحة سابقاً في جدول ٩، يتم استخدام مث أ يد ، ر هـ ف وكذلك الأسيتون ، ولقد تم تدوين النتائج السابقة كما هو الحال في جدول ١١ .

جدول ١١

إعادة تبلر السيبا مفيللين من مذيبات مختلفة a

مدخل	مذيب	تركيز n (جم/مل)	زمن التبريد b من ٢٠-٢٥ م° (دقيقة)	الناتج المستخلص (%)	التكوين c متعدد الأشكال
١	مث أ يد	٠,٠١٨	٦٠	٧٠	٢
٢	أسيتون	٠,٠٠٤	٤٠	٦٤	١ + ٢ d
٣	أسيتون	٠,٠٠٤	١ e	٢٢	١
٤	أسيتون	٠,٠٠٤	١e	٤٩	١
٥	ر هـ ف	٠,٠١٧	١e	٣٣	٣+١
٦	ر هـ ف	٠,٠١٧	٦٠	٥٨	١

ملحوظة :

a : الطريقة العامة : يتم عمل معلق من جم من ٦١٠٦٣ - BRL في ص مل من مذيب ملائم ويسخن بالارتجاع حتى يتم الذوبان. ويبرد عند ذلك المحلول خلال زمن ملائم ويتم الحصول على المنتج بالترشيح.

B : زمن التبريد من درجة حرارة الارتجاع الى ٢٠ - ٢٥ م°

C: يتم تحديدها بواسطة طيف الأشعة التحت حمراء.

D: التكوين ٢ بصفة سائدة، مع البعض من تكوين ١ .

E: تبريد المحلول بحمام ثلجي.

وهكذا فإن وجه آخر من الاختراع هو عملية لانتاج صيغة ١ ، وهذه العملية تتضمن وضع سيبا مفللين خام في مذيب عضوي، يذيب الناتج الخام بواسطة الحرارة الى حوالى درجة حرارة الارتجاع ثم التبريد لبلورة الشكل المرغوب. وبالنسبة للتكوين ١ ، فإن المذيب المفضل هو ١- بربانول، أسيتون، ر هـ ف وإن كان الأفضل ١- بروبانول . وبالنسبة للتكوين ١، فإن وقت التبريد للتفاعل يتم تحديده. وهذه النتائج (جدول ١١) توضح أن التبلر البطئ للمركب ٦١٠٦٣- BRL باستخدام المثانول (مدخل ١) ينتج عنه مركب التكوين (٢) متعدد الأشكال. و الذي يتواجد بصورة سائدة إذا ما تم استخدام التبريد البطئ لمحلول ٦١٠٦٣- BRL في الأسيتون (مدخل٢). وبالتبريد السريع (المفاجئ) لنفس المحلول (مدخل ٣) فإن ٦١٠٦٣ - BRL تكوين (١) ينتج بصورة مكثفة. ولقد تمت إعادة تجربة التبريد السريع (مدخل ٤) للتأكد من التجارب الأصلية.

ويذاب ٦١٠٦٣ - BRL في ر هـ ف ويبرد بسرعة فينتج عن ذلك انفصال المادة الموجودة في التكوينات ١ و ٣ متعددة الأشكال (مدخل ٥). ويتم الحصول على التكوين (١) بصورة مكثفة بالتبريد البطئ (مدخل ٦).

أقل وقت للبرودة، أي من الحد الأدنى للوقت لتبريد المحلول من درجة الارتجاع، أو من الدرجة التي يذوب فيها المنتج الخام في المذيب، أي من الزمن الأدنى الى التبريد المفاجئ للمحلول، وهو حوالى ١٥ دقيقة في المجال التجاري .

ويفضل يكون الحد الأدنى لوقت التبريد هو من ٥٠ - ٧٠ دقيقة وحتى المرغوب مثل طوال الليل (أي ٨ - ١٢ ساعة).

ويفضل أن يكون وقت التبريد من حوالى ٦٠ - ٧٠ دقيقة على مدى يتراوح بين ١٢٠ دقيقة الى طوال الليل حسب الرغبة. ودرجة حرارة التبريد يفضل أن تكون من حوالى صفر م° حتى حوالى ٢٥ م° ، والأفضل من ١٥ م° الى حوالى ٢٥م° والأفضل مما سبق من حوالى ١٨ م° الى ٢٥ م°. و الإيثانول يعتبر مذيب آخر، ولكن فقط إذا استعملنا التبريد المفاجئ. وإذا كنا نرغب في التكوين (٢) بصورة أكثر فإنه يتم استعمال إيثانول أو الميثانول إذ تم استعمال مدة تبريد طويلة (أنظر جدولي ٩ أو ١١).

وإذا ما تم استخدام ر هـ ف كمذيب لانتاج التكوين (١)، وإذا ما تم استخدام ر هـ ف كمذيب لانتاج التكوين (١)، تكون هناك ضرورة للتبريد البطيء، وعند استخدام الأسيتون فإن الحاجة الى التبريد السريع تزداد.

ومن المعروف أنه يمكن استخدام مخاليط من المذيبات تحت ظروف ملائمة، وقد يتم خلط بعض من هذه المخاليط بالماء أو بمذيب عضوي آخر، مثال ذلك ث م ف، هيبتان، مثل ك ن ، بيوتانول- ع ، أيزوبروبانول، خلات الإيثيل، TBME، طولوين، ديكالين، إلخ.

ويدخل جميع ما سبق ذكره من خلال التحويرات والتحسينات التي قد يتم اجرائها على التجسيدات الممثلة من خلال هذا السياق. ويتضح للعاملين في هذا المجال أنه من الممكن إنتاج مذيب مثال لإعادة التبلر بواء داخل المعمل أو على المستوى التجاري وذلك باستخدام التوضيحات المذكورة من خلال هذا السياق.

ولقد تم ادراج جميع النشرات السابقة وبما ذلك دون تحديد البراءات وتطبيقات البراءات المذكورة على سبيل الاستدلال بها كمراجع من خلال هذا السياق.

ولقد تم شرح الوصف الكامل للاختراع بما في ذلك التجسيدات المفضلة منه. ويمكن تحوير أو تحسين التجسيدات الخاصة بهذا الاختراع من خلال المنظور الشامل للعناصر التاليه. ودون المزيد من الاسهاب، فإنه سوف يكون واضحاً تماماً للعاملين في هذا المجال أنه بامكانهم استخدام الوصف السابق والخاص بالاختراع المقدم والاستفادة منه الى أقصى حد. ولهذا فإن الأمثلة المذكورة من خلال هذا السياق تقدم تصويراً بسيطاً للاختراع دون تحديد لمنظور الاختراع المقدم بأي صورة من الصور. ولقد تم اثبات التجسيدات التابعة للاختراع وتفرعاتها من خلال عناصر الحماية التاليه.

عناصر الحماية

١- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين يتضمن نموذج مسحوق لأشعة-إكس وله نهايات عظمى مميزة معبراً عنها بمسافات فاصلة (أ) متناقصة الشدة عند ١٢,٣٠٢ ، ٧,٧٠٢ ، ٨,٥٣٢، ٤,٢٨٩ ، ٢,٨٥٤ تقريباً وكما هو موضح في شكل ١ .

٢- متعدد أشكال متبلر من مركب ١،٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين يتضمن طيف امتصاص أشعة تحت الحمراء في بروميد بوتاسيوم وله حزم امتصاص مميزة معبراً عنها بسنتيمترات تبادلية كما هو موضح في شكل ٢٠ .

٣- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين يتضمن تحليل بلوري بياني لبلورة واحدة بأشعة إكس مع متغيرات تبلر (Y) مساوية تقريباً لما يلي:

لون البلورة : عديمة اللون

المجموعة الفراغية : P_1 ثلاثي الميل # ٢

درجة الحرارة : ٢٩٥ ك

ثوابت الخلية : أ = ١٠,٨٢٩ (٢) إنجستروم.

ب = ١٢,٦٣٦ (٢) إنجستروم.

ج = ٥,١٠٥ (٣) إنسجتروم.

ألفا (α) = ٩٩,٤٨ (٤)

يتا (β) = ٩١,٥٣ (٤)

جاما (δ) = ٨٣,٨٤ (٣)

الحجم : ٦٥٠ (٨) إنجستروم ^{3}

الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٤

١٥ الكثافة ، σ (حسابياً) : ١,٣٥٤ جم / سم$^{-٣}$

١٦ μ : ٧,٣٦٢ سم$^{-١}$

١٧ F (٥٥٥) : ٢٩٢

١٨ والأوضاع الذرية لجميع الذرات بالنسبة لأصل وحدة الخلية كما هي ممثلة في جداول

١٩ الأشكال ١٢ الى ١٥ .

١ ٤- متعدد أشكال متبلر من مركب ٣،١-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينـــــو

٢ زانثين يتضمن نموذج كشف طيفي رامان كما هو معبر عنه في شكل ٤.

١ ٥- متعدد أشكال متبلر من مركب ٣،١-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينـــــو

٢ زانثين يتضمن نموذج حيود مسحوق لأشعة إكس وله نهايات عظمى مـــــميزة

٣ معبراً عنها بمسافات فاصلة (أ) متناقصة الشدة، عنـــد ١٢,٠٠١ ، ٦,٧٠٢ ،

٤ ٣,٦٨٧ ، ٣,٧٧٣ و ٧,٣٤٥ تقريباً وكما هو موضح في شكل ٢ .

١ ٦- متعدد أشكال متبلر من مركب ٣،١-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينـــــو

٢ زانثين يتضمن طيف امتصاص أشعة تحت الحمراء في بروميد بوتاســـيوم ولـــه

٣ حزم امتصاص مميزة معبراً عنها بسنتيمترات تبادلية كما هو موضح في شـــكل

٤ ٢١ .

١ ٧- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينـــــو

٢ زانثين يتضمن تحليل بلوري بياني لبلورة واحدة بأشعة إكس مع متغيرات تبلـــر

٣ (Y) مساوية تقريباً لما يلي:

٤ شكل البلورة : مكعبـــات مســـتطيلة.

٥ المجموعة الفراغية : $P_{2_1/1}$ أحادية الميل # ١٤

٦ ثوابت الخلية : أ = ١٢,٢٢٧ (٤) انجستروم.

٧ ب = ٧,٤٤٨ (٢) إنجستروم.

٨ ج = ١٤,٩٤٦ (٨) إنسجتروم.

٩ بيتا (β) = ٩٧,٩٥ (٤).

١٠ الحجم : ١٣٤٨,١ (٩) إنجستروم ^{٣}

١١ الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٤

١٢ الكثافة ، σ (حسابياً) : ١,٣٥٦ جم / سم$^{-٣}$

١٣ μ : ٠,٨٩٦ سم$^{-١}$

١٤ F (٥٥٥) : ٢٩٢٥٨٤ .

١ ٨- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو

٢ زانثين يتضمن نموذج كشف طيفي رامان كما هو موضح في شكل ٥ .

١ ٩- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو

٢ زانثين يتضمن طيف امتصاص أشعة تحت الحمراء لبلورة ذات حزم امتصاص

٣ مميزة معبراً عنها بسنتيمترات تبادلية كما هو موضح في أشكال ١٨ ، ٢٤ أو

٤ ٢٥ .

١ ١٠- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو

٢ زانثين يتضمن تحليل بلوري بياني لبلورة واحدة بأشعة إكس مع متغيرات تبلر

٣ مساوية تقريباً لما يلي:

٤ شكل البلورة (مم) : إبريات مفلطحة.

٥ لون البلورة : عديمة اللون

٦ أبعاد البلورة (مم) : ٠,٦٠ × ٠,١٠ × ٠,٠٥ مم

٧ المجموعة الفراغية : P_1 ثنائي الميل # ٢

٨ درجة الحرارة : ٢٩٥ ك

٩ ثوابت الخلية : أ = ١٠,٢١٠ (٣) انجستروم.

١٠ ب = ١٣,٧٥٣ (٢) إنجستروم.

١١ ج = ٤,٩٤٢ (٣١) إنسجتروم.

١٢ ألفا (α) = ٩٧,٩٤ (٢)

١٣ بيتا (β) = ٩٧,٩٥ (٤).

١٤ جاما (δ) = ٨٣,٣٣ (٢)

١٥ الحجم : ٦٧٧,١ (٥) إنجستروم ^{٣}

١٦ الجزيئات / وحدة خلية (Z) : ٢

١٧ الكثافة ٥ جم / سم$^{-٣}$ ١,٣٥٠

١ ١١- متعدد أشكال متبلر من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو

٢ زانثين نموذج كشف طيفي رامان كما هو موضح في شكل ٦ .

١ ١٢- تركيب صيدلية يتضمن مقدار من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر ١ الى

٢ ٤ ، ومادة حاملة و مخففة مقبولة صيدلياً.

١ ١٣- تركيب صيدلية يتضمن مقدار من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر٥ الى

٢ ٨ ، ومادة حاملة ومخففة مقبولة صيدلياً.

١ ١٤- تركيب صيدلية يتضمن مقدار من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر٩ الى

٢ ١١، ومادة حاملة ومخففة مقبولة صيدلياً.

١٥- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث PDE_4 في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر ١ الى ٤ .

١٦- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث PDE_4 في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر ٥ الى ٨ .

١٧- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث PDE_4 في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر٩ الى ١١ .

١٨- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث TNF في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر١ الى ٤ .

١٩- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث TNF في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر ٥ الى ٨ .

٢٠- طريقة لعلاج مرض ناشئ عن حيث TNF في كائن ثديي في حاجة لهذا العلاج، وتتضمن هذه الطريقة اعطاء الكائن الثديي المذكور مقدار فعال من متعدد أشكال وفقاً لأي من العناصر ٩ الى ١١ .

٢١- عملية لانتاج متعدد أشكال بلوري من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين، صورة ١، حيث تتضمن هذه العملية :

أ) إذابة ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين في ١-بروبانول؛ و

ب) تبريد المحلول لكي يتبلر من خارج المحلول الصورة ١ المتعددة الأشكال المرغوبة.

٢١- عملية وفقاً للعنصر ٢١ حيث يتم مزج ١- بربانول مع ماء.

٢٣- عملية وفقاً للعنصر ٢١ حيث تتراوح درجة حرارة التبريد ما بين حوالى صفر وحوالى ٢٥ م° .

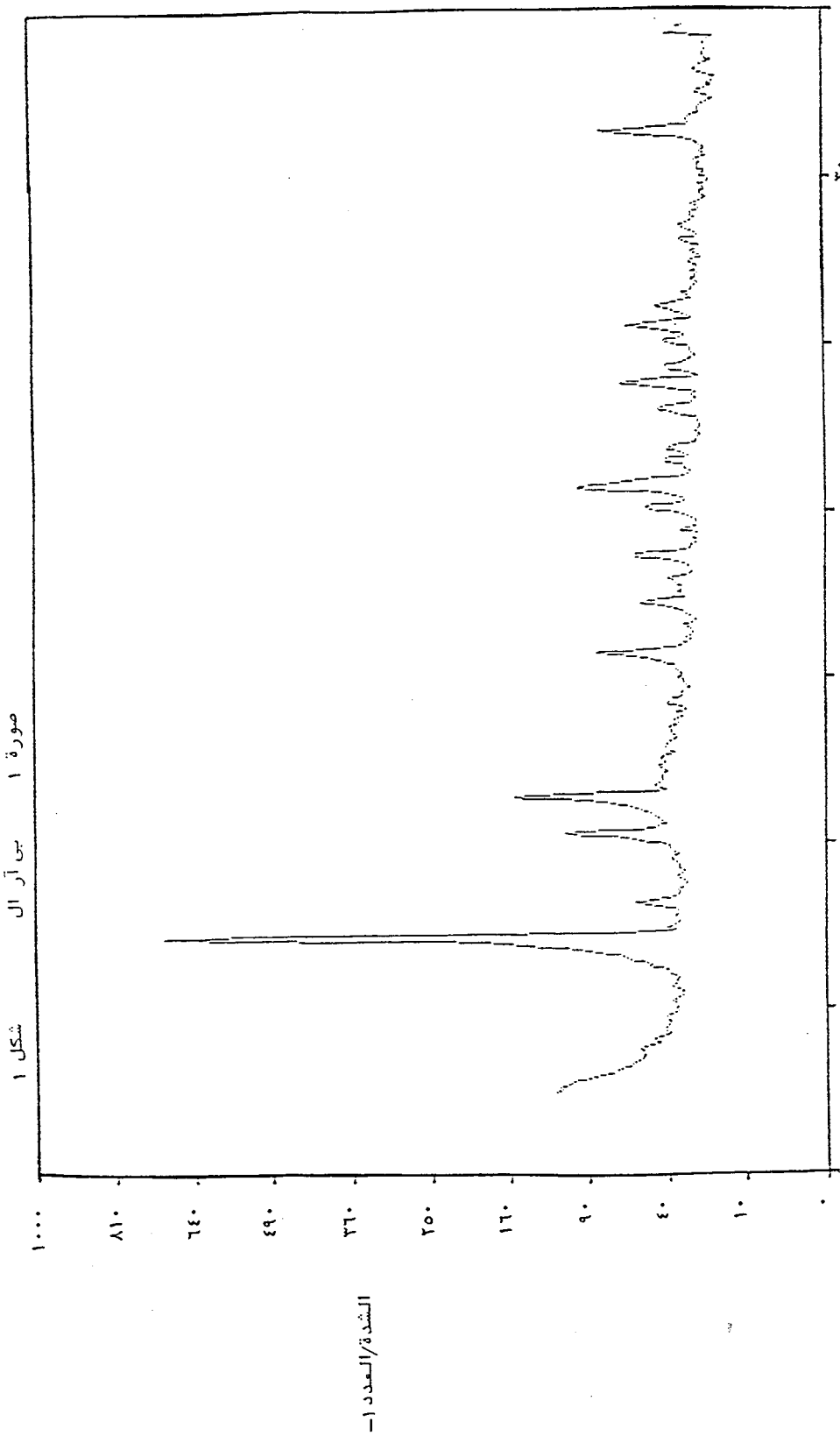
٢٤- عملية وفقاً للعنصر ٢٣ حيث يتراوح زمن التبلر ما بين حوالى ١٥ وحوالى ١٢٠ دقيقة.

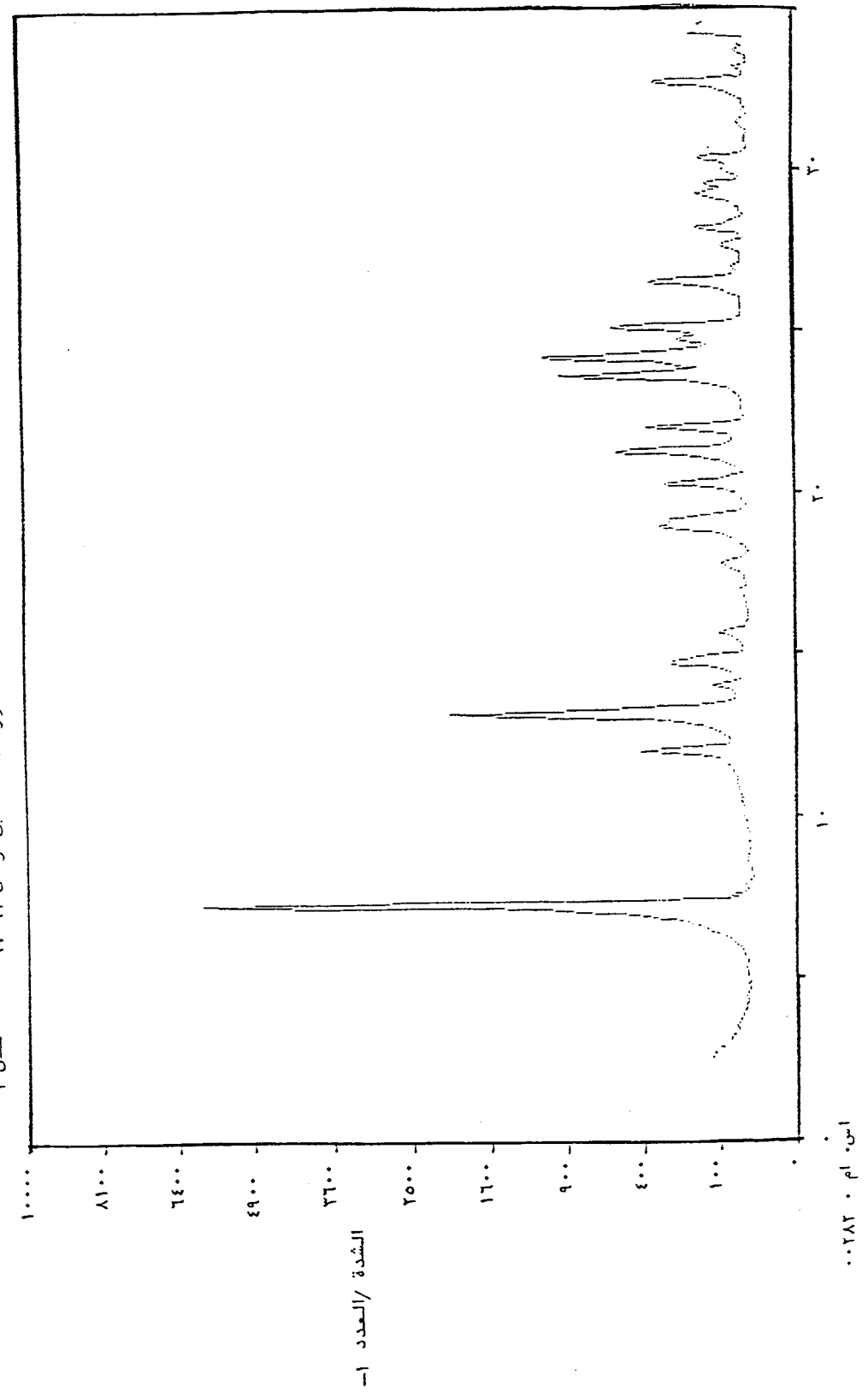
٢٥- عملية وفقاً للعنصر ٢١ حيث يذاب الزانثين بتسخين ١-بروبانول الى حالة الارتجاع.

٢٦- عملية لانتاج متعدد أشكال بلوري من مركب ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين، صورة ١ ، حيث تتضمن هذه العملية :

أ) إذابة ١، ٣-ثنائي-بروبيل مثيل حلقي-٨-أمينو زانثين في رباعي هيدروفيوران أو أسيتون ؛ و

ب) تبريد المحلول لكي يتبلر خارج المحلول الصورة المتعددة الأشكال المرغوبة.


شكل ١
صورة ١ سي آر ال
الشدة/العدد ا–
١٠٠٠
٨١٠
٦٤٠
٤٩٠
٣٦٠
٢٥٠
١٦٠
٩٠
٤٠
١٠
٠
٠
١٠
٢٠
٣٠
اس ام ٠ ٢٨١٠٠

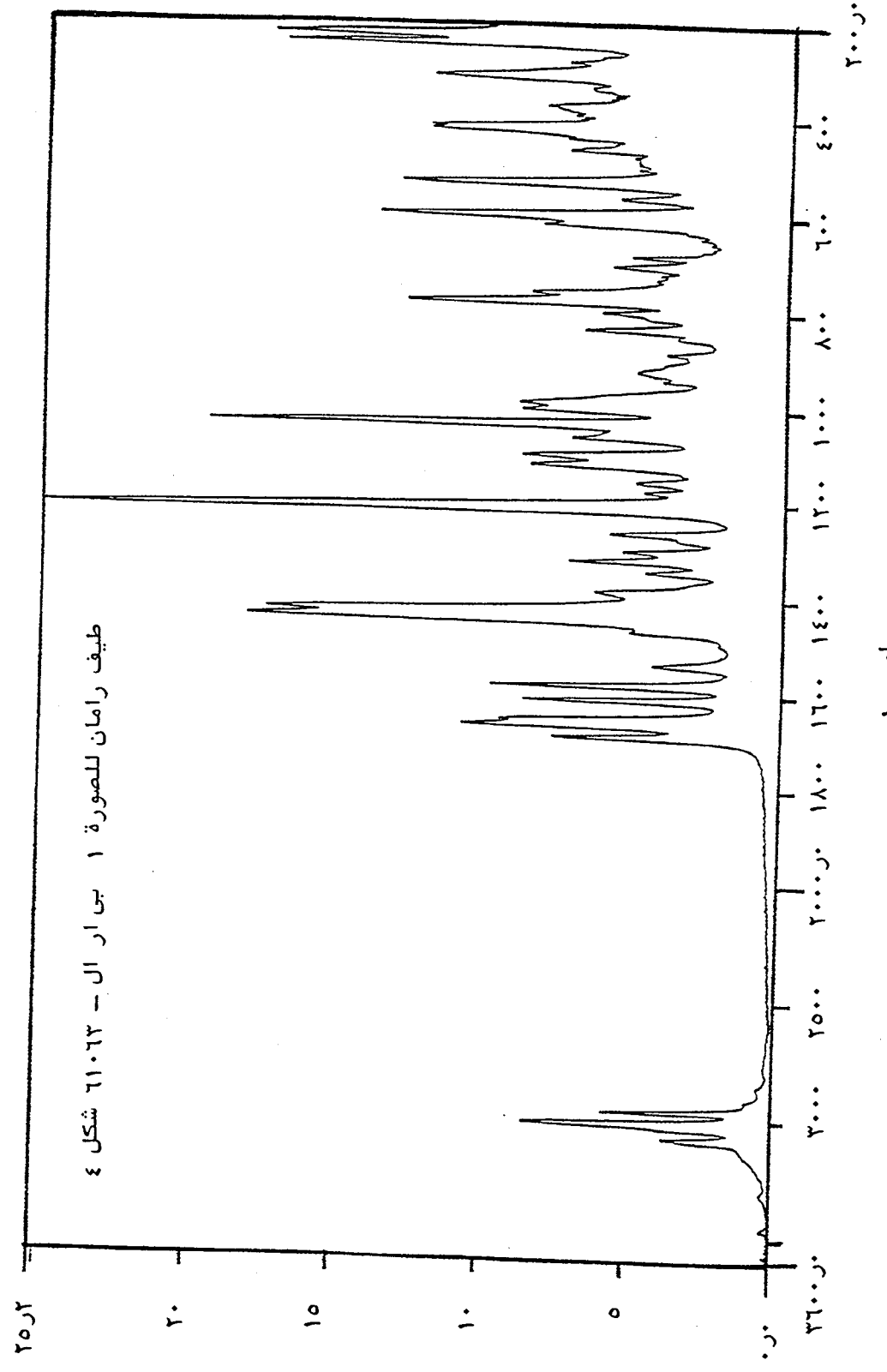

صورة ٢
س ا ر ال ٦١٠٦٣
شكل ٢
الشدة /العدد ا-
١٠٠٠٠٠
٨١٠٠
٦٤٠٠
٤٩٠٠
٣٦٠٠
٢٥٠٠
١٦٠٠
٩٠٠
٤٠٠
١٠٠
٠
٣٠
٢٠
١٠
٠
اس. ام ٠ ٢٨٢ ٠٠

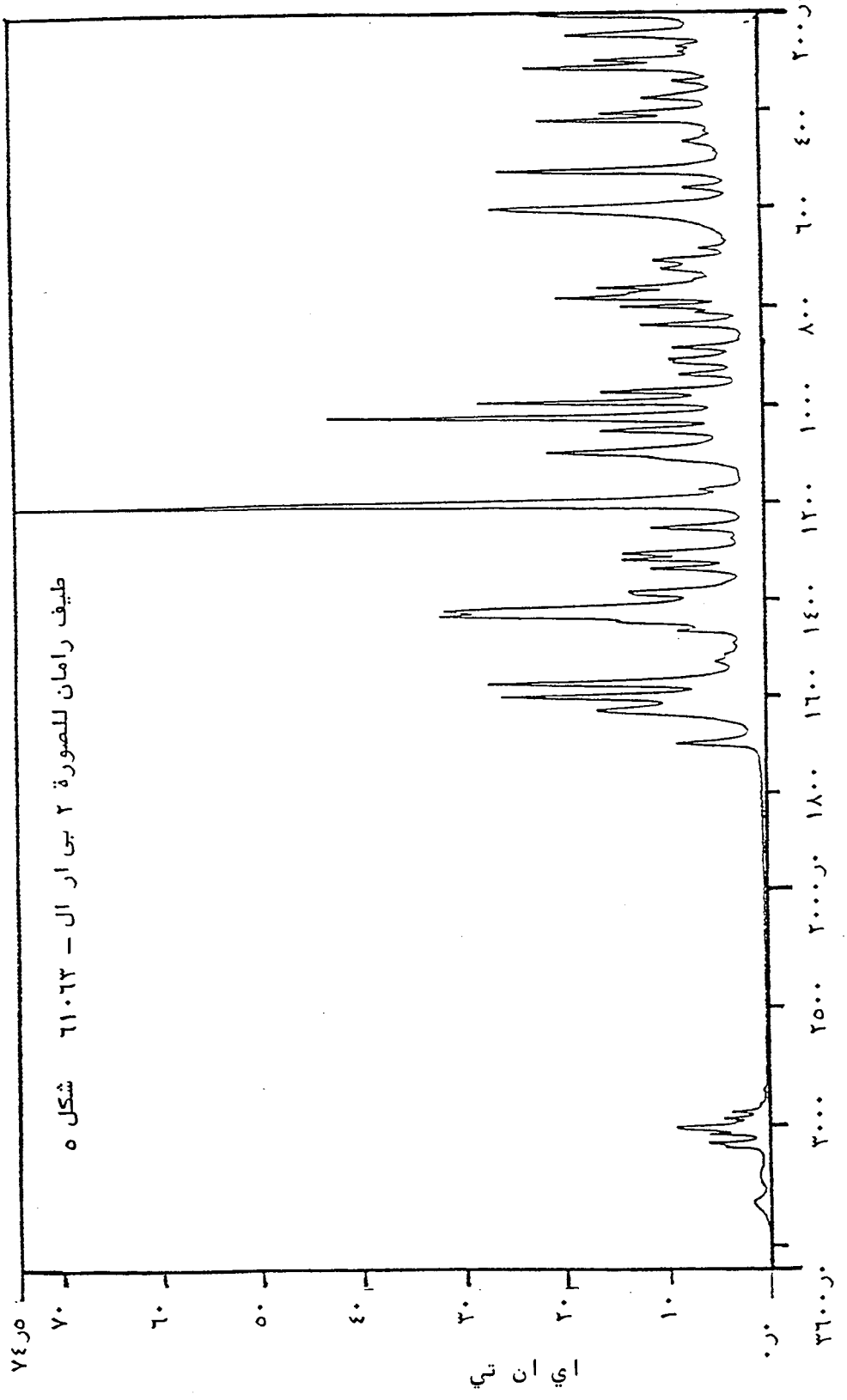
شكل ٣

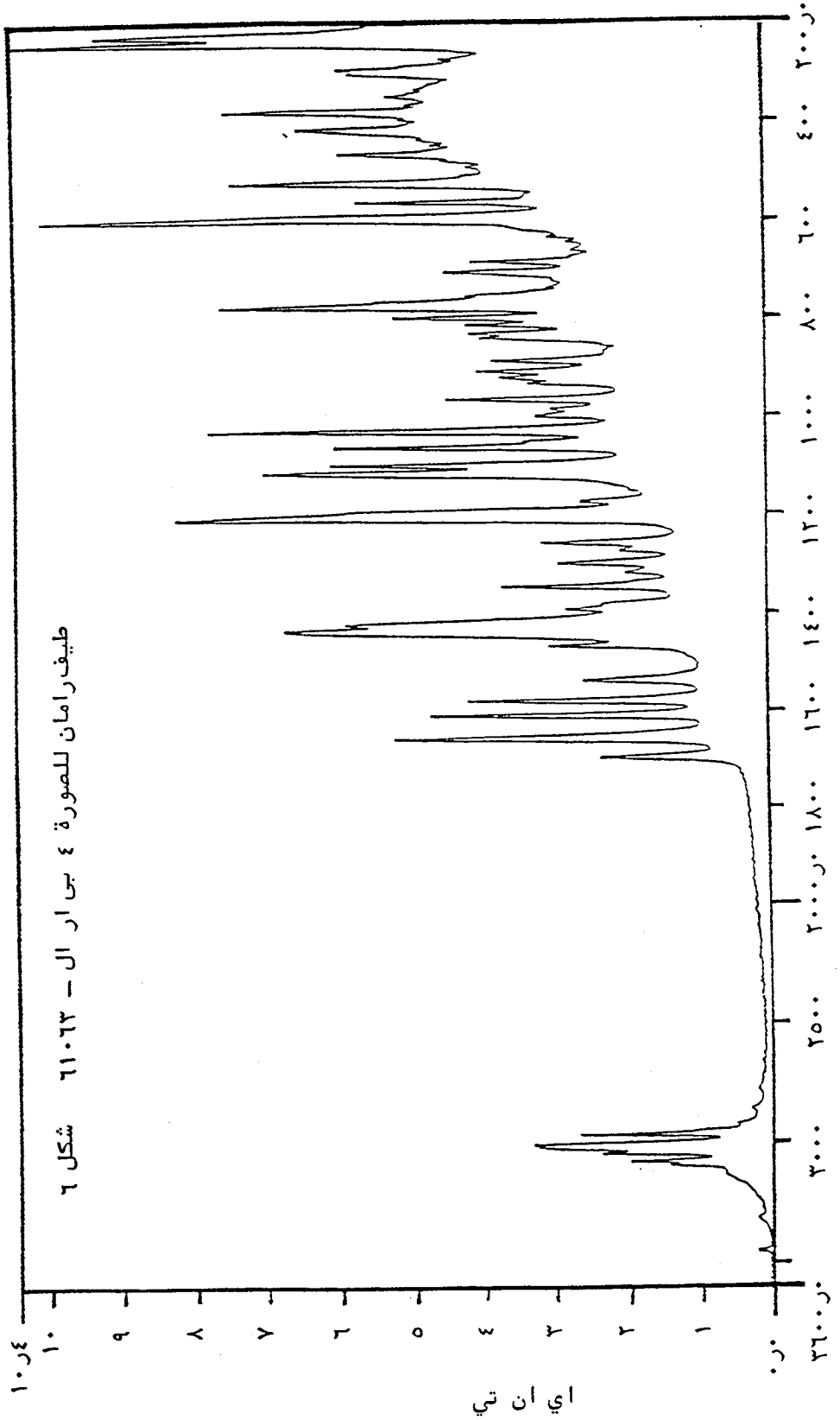
جدول ٤

جدولة زوايا الالتواء للصور ٢ و ٤

	صورة ٢	صورة ٤
ك٧ – ن ٨ – ك ١٠ – ك١١	١٠١ر٨ (٣)	٧٤ر٦ (٣)
ك٩ – ن ٨ – ك ١٠ – ك١١	– ٨٤ر٦ (٣)	– ٩٩ر٥ (٣)
ك٥ – ن ٨ – ك ١٠ – ك١١	٩٨ر٧ (٣)	٩١ر٧ (٣)
ك٧ – ن ٦ – ك ١٤ – ك١٥	– ٨٠ر٢ (٣)	– ٨٥ر١ (٣)
ن٨ – ك١٠ – ك ١١ – ك١٢	–٧٧ر٥ (٣)	٨٠ر٤ (٣)
ن٨ – ك١٠ – ك ١١ – ك١٣	–١٤٦ر٦ (٣)	١٤٩ر٨ (٣)
ك١٠ – ك١١ – ك ١٢ – ك١٣	–١٠٤ر٩ (٤)	– ١٠٧ر٥ (٣)
ن٦ – ك١٤ – ك ١٥ – ك١٦	–٨٨ر٥ (٣)	٨٩ر٤ (٣)
ن٦ – ك١٤ – ك ١٥ – ك١٦	–١٥٨ر٣ (٣)	١٥٨ر٨ (٣)
ك١٤– ك١٥ – ك ١٦ – ك١٧	–١٠٨ر١ (٣)	–١١١ر٤ (٣)

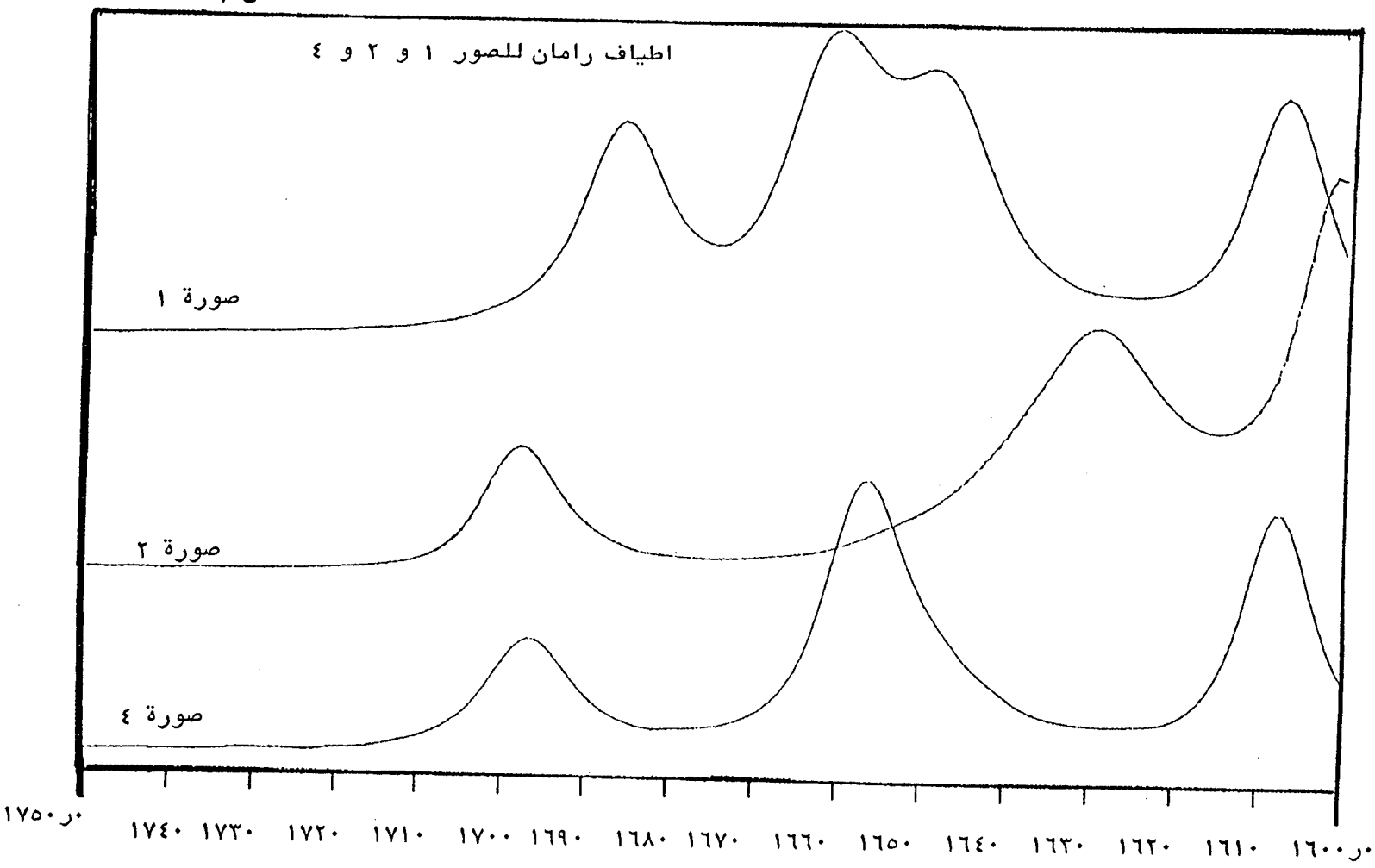

طيف رامان للصورة ١ بي ار ال – ٦١٠٦٣ شكل ٤
٢٥ر٢
٢٠
١٥
١٠
٥
ر٠
ر٠
٣٦٠٠
٣٠٠٠
٢٥٠٠
ر٠٠٠٢
١٨٠٠
١٦٠٠
١٤٠٠
١٢٠٠
١٠٠٠
٨٠٠
٦٠٠
٤٠٠
ر٠٠٢
ان ان تي
سي ام – ١


طيف رامان للصورة ٢ بي ار ال – ٦١٠٦٣
شكل ٥
اي ان تي
٧٤ر٥
٧٠
٦٠
٥٠
٤٠
٣٠
٢٠
١٠
٠ر٠
٣٦٠٠ر٠
٣٠٠٠
٢٥٠٠
٢٠٠٠ر٠
١٨٠٠
١٦٠٠
١٤٠٠
١٢٠٠
١٠٠٠
٨٠٠
٦٠٠
٤٠٠
٢٠٠ر٠
سي ام – ١


طيف رامان للصورة ٤ بي ار ال – ٦١٠٦٣
اي ان تي
اس ام – ١
٠ر٠
١ر٠
٢
٣
٤
٥
٦
٧
٨
٩
١٠
١٠ر٤
٠ر٠
٣٦٠٠ر٠
٣٠٠٠
٢٥٠٠
٢٠٠٠ر٠
١٨٠٠
١٦٠٠
١٤٠٠
١٢٠٠
١٠٠٠
٨٠٠
٦٠٠
٤٠٠
٢٠٠ر٠

شكل ٦

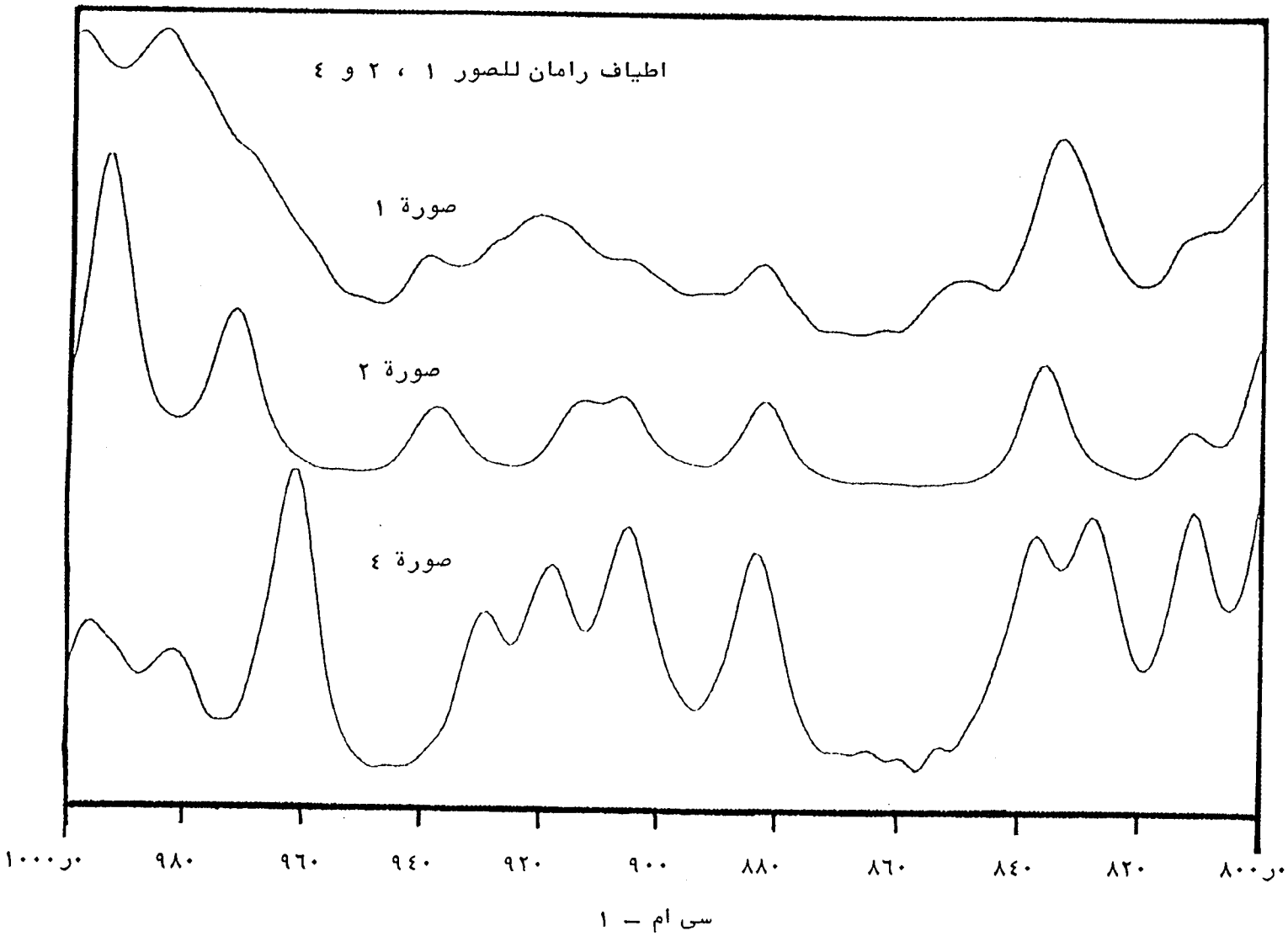
شكل ٧



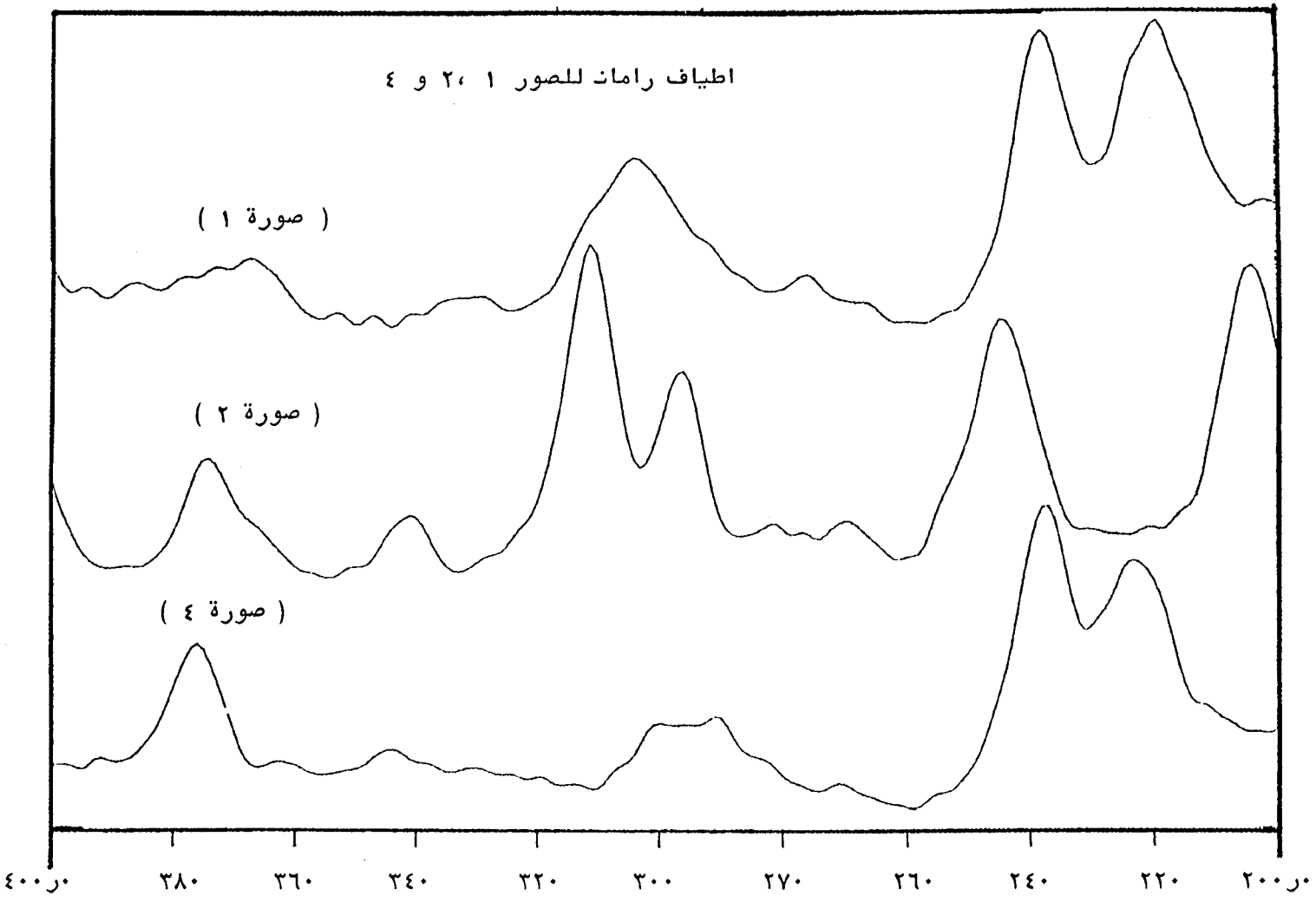
ای ان تی

سی ام — ١

شكل ٨

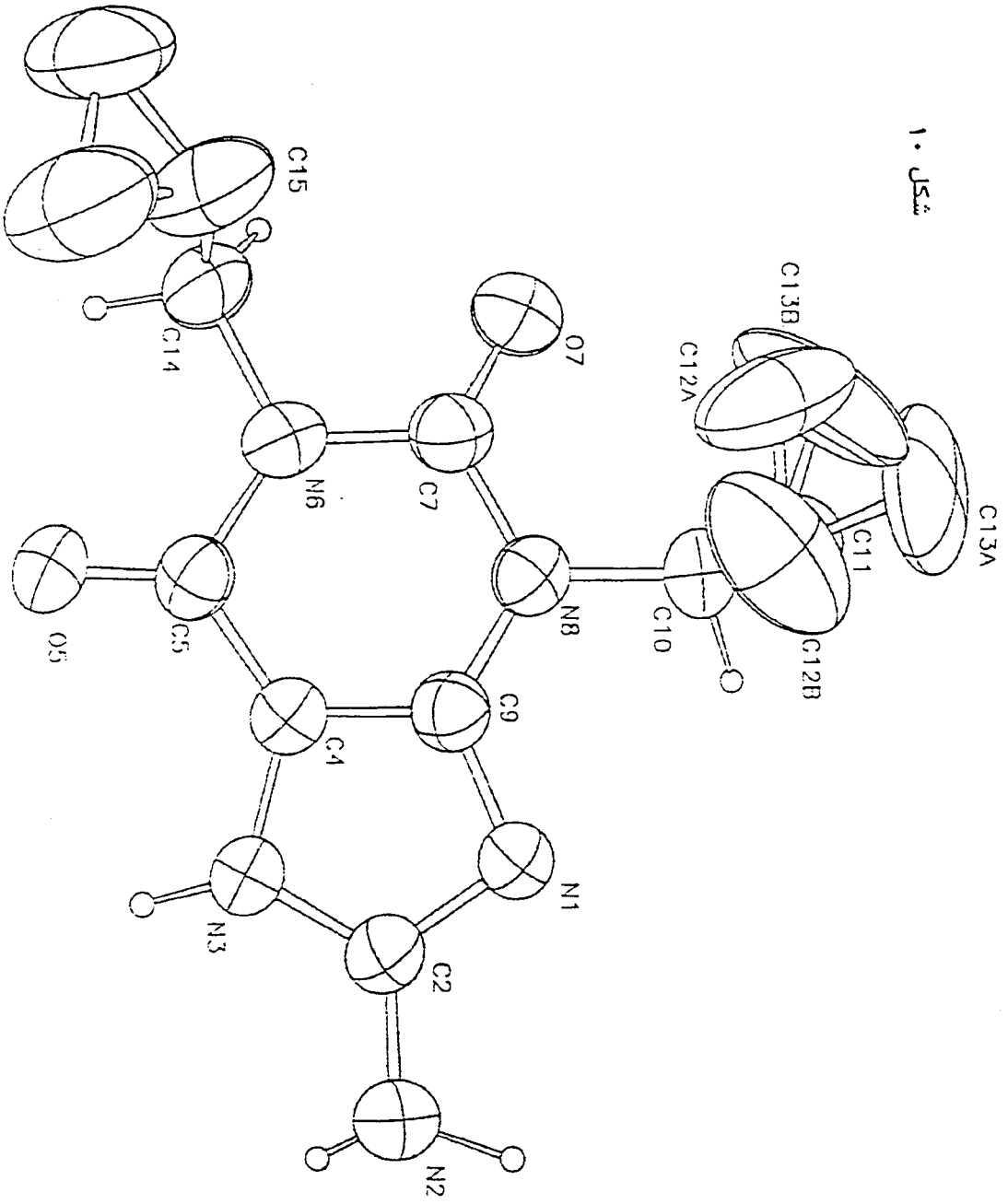

اطياف رامان للصور ١ ، ٢ و ٤
صورة ١
صورة ٢
صورة ٤
ای ان تی
١٠٠٠ر٠
٩٨٠
٩٦٠
٩٤٠
٩٢٠
٩٠٠
٨٨٠
٨٦٠
٨٤٠
٨٢٠
٨٠٠ر٠
سی ام — ١

شكل ٩

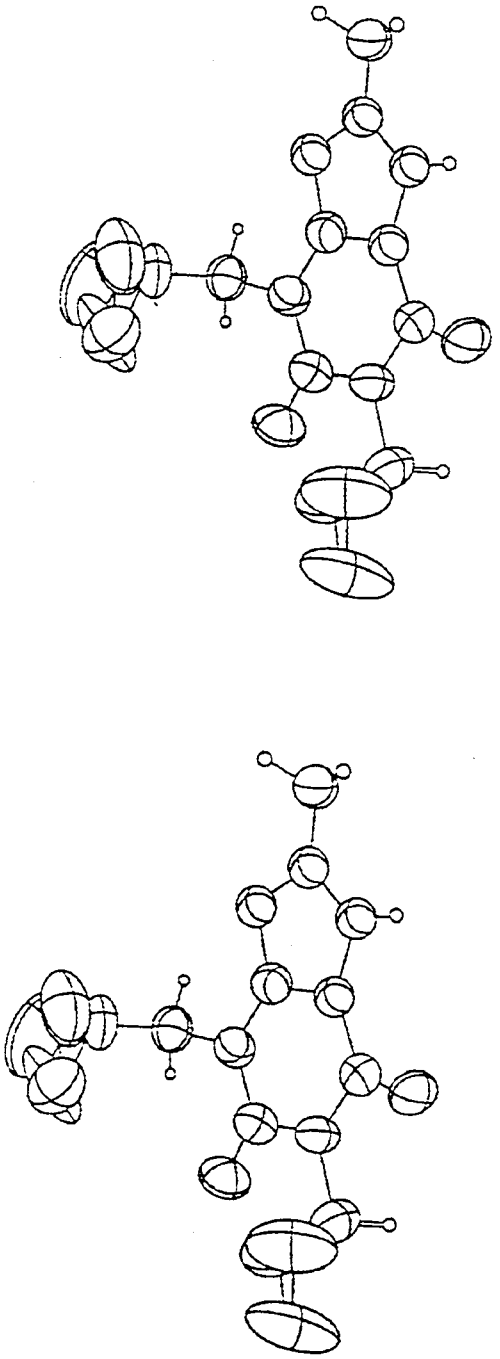


اس ام – ١

اى ان تي


C15
C14
O7
C13B
C12A
C13A
C11
N6
C7
N8
C10
C12B
O5
C5
C9
C4
N1
N3
C2
N2

شکل ۱۰



شكل ١١

شكل ١٢

جدول مسافات الارتباط بالانجستروم

ذرة ١	ذرة ٢	المساحة	ذرة ١	ذرة ٢	المساحة
٥٠	ك٥	١ر٢٣٧ (٢)	ك١٠	ك١١	١ر٤٩٣(٣)
٥٧	ك٧	١ر٢١١ (٢)	ك١١	ك١٢ب	١ر١٥٥(٥)
ن١	ك٢	١ر٣٤٤ (٢)	ك١١	ك١٢ أ	١ر٤٨١(٨)
ن١	ك٩	١ر٣٦٧ (٢)	ك١١	ك١٣ ب	١ر٣٦٦(٩)
ن٢	ك٢	١ر٣٥٥ (٢)	ك١١	ك١٣ أ	١ر٢٩٢(٥)
ن٣	ك٢	١ر٣٤٣ (٢)	ك١٢ب	ك ١٢ أ	١ر٢٨٧(٩)
ن٣	ك٤	١ر٣٩٧ (٢)	ك١٢ب	ك ١٣ ب	١ر٥٠(١)
ن٦	ك٥	١ر٣٩٩ (٢)	ك١٢ب	ك ١٣ أ	١ر٥٩٧(٨)
ن٦	ك٧	١ر٤٠٢ (٢)	ك١٢أ	ك ١٣ ب	٠ر٥٥(٢)
ن٦	ك١٤	١ر٤٧٦ (٢)	ك ١٢أ	ك ١٣ أ	١ر٥٥(١)
ن٨	ك٧	١ر٣٨٨ (٢)	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	١ر١٦(١)
ن٨	ك٩	١ر٣٦٥ (٢)	ك ١٤	ك ١٥	١ر٤٩٢(٣)
ن٨	ك١٠	١ر٤٦١ (٢)	ك١٥	ك١٦	١ر٤٥٣(٣)
ك٤	ك٥	١ر٤٠٧ (٢)	ك١٥	ك ١٧	١ر٤٩٠(٣)
ك٤	ك٩	١ر٣٦٢ (٢)	ك ١٦	ك ١٧	١ر٥٠١(٤)

الأرقام داخل الأقواس تمثل انحرافات قياسية تقديرية لأقل الأرقام أهمية .

شكل ١٣

جدول زوايا الارتباط بالدرجات

ذرة ١	ذرة٢	ذرة ٣	الزاوية	ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ك٢	ن١	ك٩	٥ر١٠٢(١)	ك١٠	ك١١	ك١٢أ	٩ر١٢٤(٤)
ك٢	ن٣	ك٤	٦ر١٠٥(١)	ك١٠	ك١١	ك١٣ب	٦ر١٢١(٥)
م٥	ن٦	ك٧	١ر١٢٦(١)	ك١٠	ك١١	ك١٣أ	١ر١٣٢(٥)
ك٥	ن٦	ك١٤	٠ر١١٩(١)	ك١٢ب	ك١١	ك١٢أ	٩ر٥٦(٤)
ك٧	ن٦	ك١٤	٨ر١١٤(١)	ك١٢ب	ك١١	ك١٣ب	٥ر٧٢(٥)
ك٧	ن٨	ك٩	٤ر١١٩(١)	ك١٢ب	ك١١	ك١٣أ	٣ر٨١(٤)
ك٧	ن٨	ك١٠	٤ر١١٩(١)	ك١٢أ	ك١١	ك١٣ب	٦ر٢١(٧)
ك٩	ن٨	ك١٠	٢ر١٢١(١)	ك١٢أ	ك١١	ك١٣أ	٨ر٦٧(٦)
ن١	ك٢	ن٢	٨ر١٢٢(١)	ك١٣ب	ك١١	ك١٣أ	٦ر٥١(٦)
ن١	ك٢	ن٣	١ر١١٤(١)	ك١١	ك١٢ب	ك١٢أ	٥ر٧٤(٥)
ن٢	ك٢	ن٣	٠ر١٢٣(١)	ك١١	ك١٢ب	ك١٣ب	٣ر٦٠(٤)
ن٣	ك٤	ك٥	٥ر١٣١(١)	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	١ر٥٣(٣)
ن٣	ك٤	ك٩	١ر١٠٥(١)	ك١٢أ	ك١٢ب	ك١٣ب	٩ر٢٠(٧)
ك٥	ك٤	ك٩	٣ر١٢٣(١)	ك١٢أ	ك١٢ب	ك١٣أ	١ر٦٤(٦)
أ ٥	ك٥	ن٦	٧ر١٢٠(١)	ك١٣ب	ك١٢ب	ك١٣أ	٨ر٤٣(٥)
أ ٥	ك٥	ك٤	٩ر١٢٦(١)	ك١١	ك١٢أ	ك١٢ب	٧ر٤٨(٤)
ن٦	ك٥	ك٤	٤ر١١٢(١)	ك١١	ك١٢أ	ك١٣ب	ر٦٧(١)
أ ٧	ك٧	ن٦	٥ر١٢١(٢)	ك١١	ك١٢أ	ك١٣أ	٣ر٥٠(٤)
أ ٧	ك٧	ن٨	٦ر١٢١(١)	ك١٢ب	ك١٢أ	ك١٣ب	ر١٠٢(٢)
ن٦	ك٧	ن٨	٨ر١١٦(٢)	ك١٢ب	ك١٢أ	ك١٣أ	٧ر٦٧(٥)
ن١	ك٩	ن٨	٤ر١٢٥(١)	ك١٣ب	ك١٢أ	ك١٣أ	ر٣٦(٢)
ن١	ك٩	ك٤	٧ر١١٢(٢)	ك١١	ك١٣ب	ك١٢ب	٢ر٤٧(٤)
ن٨	ك٩	ك٤	٩ر١٢١(١)	ك١١	ك١٣ب	ك١٢أ	ر٩١(٢)
ن٨	ك١٠	ك١١	٦ر١١٣(٢)	ك١١	ك١٣ب	ك١٣أ	٩ر٦٠(٦)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	٤ر١٤٦(٤)	ك١٢ب	ك١٣ب	ك١٢أ	ر٥٧(١)

شكل ١٣

(تابع) زوايا الارتباط

ذرة ١	ذرة٢	ذرة ٣	الزاوية	ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ك١٢ب	ك١٣ب	ك١٣أ	٥ر٧٢(٩)	ك١٢أ	ك١٣أ	ك١٣ب	٢ر١٦(٧)
ك١٢أ	ك١٣ب	ك١٣أ	ر١٢٧(٢)	ن٦	ك١٤	ك١٥	٧ر١١١(٢)
ك١١	ك١٣أ	ك١٢ب	٦ر٤٥(٣)	ك١٤	ك١٥	ك١٦	٢ر١٢٢(٢)
ك١١	ك١٣أ	ك١٢أ	٩ر٦١(٤)	ك١٤	ك١٥	ك١٧	٢ر١١٩(٢)
ك١١	ك١٣أ	ك١٣ب	٥ر٦٧(٥)	ك١٦	ك١٥	ك١٧	٣ر٦١(٢)
ك١٢ب	ك١٣أ	ك١٢أ	٢ر٤٨(٤)	ك١٥	ك١٦	ك١٧	٦ر٦٠(٢)
ك١٢ب	ك١٣أ	ك١٣ب	٦ر٦٣(٦)	ك١٥	ك١٧	ك١٦	١ر٥٨(١)

الأرقام داخل الأقواس تمثل انحرافات قياسية لأقل الأرقام أهمية

شكل ١٤

جدول زوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك٩	ن١	ك٢	ن٢	١٧٨ر٣٩ (٠ر٢١)
ك٩	ن١	ك٢	ن٣	٠ر٠٠ (٠ر٦٣)
ك٢	ن١	ك٩	ن٨	١٧٩ر٦٥ (٠ر٢٠)
ك٢	ن١	ك٩	ك٤	٠ر٠٧ (٠ر٢٢)
يد١ن٢	ن٢	ك٢	ن١	١٧ر٦٧ (١ر٥٠)
يد١ن٢	ن٢	ك٢	ن٣	-١٦٤ر٠٦ (١ر٤٨)
يد٢ن٢	ن٢	ك٢	ن١	١٦٥ر٣٣ (٢ر٤٣)
يد٢ن٢	ن٢	ك٢	ن٣	-١٦ر٤٠ (٢ر٤٥)
ك٤	ن٣	ك٢	ن١	- ٠ر٠٤ (٠ر٢٢)
ك٤	ن٣	ك٢	ن٢	- ١٧٨ر٤٥ (٠ر٢١)
يد ن٣	ن٣	ك٢	ن١	-١٧٣ر٤٧ (٠ر٢٢)
يد ن٣	ن٣	ك٢	ن	٨ر١٣ (٠ر٤٠)
ك٢	ن٣	ك٤	ك٥	-١٧٦ر٩٤ (٠ر٢٤)
ك٢	ن٣	ك٤	ك٩	٠ر٠٩ (٠ر٢٥)
يد ن ٣	ن٣	ك٤	ك٥	- ٢ر٣١ (٠ر٣٦)
يد ن ٣	ن٣	ك٤	ك٩	١٧٤ر٧١ (٠ر١٩)
ك٧	ن٦	ك٥	أ٥	١٧٨ر٥٦ (٠ر٢١)
ك٧	ن٦	ك٥	ك٤	-١ر١٧ (٠ر٣١)
ك١٤	ن٦	ك٥	أ٥	٣ر٢٣ (٠ر٣٢)
ك١٤	ن٦	ك٥	ك٤	-١٧٦ر٥٠ (٠ر٢٠)
ك٥	ن٦	ك٧	أ٧	١٧٩ر٠٨ (٠ر٢٢)
ك٥	ن٦	ك٧	ن٨	- ٠ر٠٣ (٠ر٣٠)
ك١٤	ن٦	ك٧	أ٧	- ٥ر٤٢ (٠ر٣٢)
ك١٤	ن٦	ك٧	ن٨	١٧٥ر٤٧ (٠ر٢٠)

شكل ١٤

تابع جدول زوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك٥	ن٦	ك١٤	ك١٥	٩٧ر٤١ (٠ر٢٧)
ك٧	ن٦	ك١٤	ك١٥	-٧٨ر٤٣ (٠ر٢٧)
ك٩	ن٨	ك٧	أ٧	- ١٧٨ر٩٠ (٠ر٢١)
ك٩	ن٨	ك٧	ن٦	٠ر٢١ (٠ر٣١)
ك١٠	ن٨	ك٧	أ٧	٢ر٣١ (٠ر٣٣)
ك١٠	ن٨	ك٧	ن٦	-١٧٨ر٥٨ (٠ر١٩)
ك٧	ن٨	ك٩	ن١	-١٧٨ر٦٠ (٠ر٢٠)
ك٧	ن٨	ك٩	ك٤	٠ر٩٤ (٠ر٣١)
ك١٠	ن٨	ك٩	ن١	٠ر١٧ (٠ر٣٤)
ك١٠	ن٨	ك٩	ك٤	١٧٩ر٧١ (٠ر٢٠)
ك٧	ن٨	ك١٠	ك١١	٩٢ر٩١ (٠ر٢٨)
ك٩	ك٤	ك١٠	ك١١	-٨٥ر٨٦ (٠ر٢٩)
ن٣	ك٤	ك٥	أ٥	- ٠ر٨٢ (٠ر٤٢)
ن٣	ك٤	ك٥	ن٦	١٧٨ر٨٩ (٠ر٢٢)
ك٩	ك٤	ك٥	أ٥	- ١٧٧ر٣٨ (٠ر٢٢)
ك٩	ك٤	ك٥	ن٦	٢ر٣٣ (٠ر٣٢)
ن٣	ك٤	ك٩	ن١	-٠ر١٠ (٠ر٢٧)
ن٣	ك٤	ك٩	ن٨	-١٧٩ر٦٩ (٠ر٢٠)
ك٥	ك٤	ك٩	ن١	١٧٧ر٢٣ (٠ر٢٠)
ك٥	ك١٠	ك٩	ن٨	-٢ر٣٦ (٠ر٣٤)
ن٨	ك١٠	ك١١	ك١٢ب	١٨ر١٤ (١ر٠١)
ن٨	ك١٠	ك١١	ك١٢أ	-٦٢ر٨٩ (٠ر٥٧)
ن٨	ك١٠	ك١١	ك١٣ب	- ٨٨ر٥٣ (٠ر٦٢)
ن٨	ك١١	ك١١	ك١٣أ	- ١٥٣ر٢٠ (٠ر٦٠)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	- ١٠٤ر٥٢ (٠ر٨٩)

شكل ١٤

تابع جدول زوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٣ب	-١٢١ر١٦ (٠ر٩٦)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	- ١٧٣ر٥٨ (٠ر٩٨)
ك١٢أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٣ب	-١٦ر٦٤ (٠ر٦٣)
ك١٢أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	- ٦٩ر٠٥ (٠ر٦١)
ك١٣ب	ك١١	ك١٢ب	ك١٢أ	١٦ر٦٤ (٠ر٦٣)
ك١٣ب	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	-٥٢ر٤٢ (٠ر٦٦)
ك١٣أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٢أ	٦٩ر٠٥ (٠ر٦١)
ك١٣أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٣ب	٥٢ر٤٢ (٠ر٦٦)
ك١٠	ك١١	ك١٢أ	ك١٢ب	١٣٩ر٢٠ (٠ر٦٩)
ك١٠	ك١١	ك١٢أ	ك١٣ب	- ٨٨ر٥٦ (١ر٤١)
ك١٠	ك١١	ك١٢أ	ك١٣أ	-١٢٦ر٦٩ (٠ر٦٩)
ك١٢ب	ك١١	ك١٢أ	ك١٣ب	١٣٢ر٢٥ (١ر٥٤)
ك١٢ب	ك١١	ك١٢أ	ك١٣أ	٩٤ر١٢ (٠ر٧٩)
ك١٣ب	ك١١	ك١٢أ	ك١٢ب	-١٣٢ر٢٥ (١ر٥٤)
ك١٣ب	ك١١	ك١٢أ	ك١٣أ	- ٣٨ر١٣ (١ر٤١)
ك١٣أ	ك١١	ك١٢أ	ك١٢ب	-٩٤ر١٢ (٠ر٧٩)
ك١٣أ	ك١١	ك١٢أ	ك١٣ب	٣٨ر١٣(١ر٤١)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٢ب	١٤٦ر١٩ (٠ر٦٣)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٢أ	١٠٥ر٦٦ (١ر٢٧)
ك١٠	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	-١٢١ر١٢(٠ر٧٦)
ك١٢ب	ك١١	ك١٢ب	ك١٢أ	-٤٠ر٥٣ (١ر٣٣)
ك١٢ب	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	٩٢ر٦٩ (٠ر٨٤)
ك١٢أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٢ب	٤٠ر٥٣ (١ر٣٣)
ك١٢أ	ك١١	ك١٢ب	ك١٣أ	١٣٣ر٢٢ (١ر٥٩)

شكل ١٤

تابع جدول زوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ١٣أ	ك ١١	ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	- ٩٢ر٦٩(٠ر٨٤)
ك ١٣ أ	ك ١١	ك ١٣ ب	ك ١٢ أ	- ٢٢ر١٣٣(١ر٥٩)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	٢١ر١٧٥(٠ر٧٢)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	٥٥ر١١٧(٠ر٦٣)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	٦٦ر١٠٠(٠ر٧١)
ك ١٢ ب	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	-٦٦ر٥٧(٠ر٦٠)
ك ١٢ ب	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	-٥٥ر٧٤(٠ر٧٠)
ك ١٢ أ	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	٦٦ر٥٧(٠ر٦٠)
ك ١٢ أ	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	-٨٨ر١٦(٠ر٥٨)
ك ١٣ ب	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	٥٥ر٧٤(٠ر٧٠)
ك ١٣ ب	ك ١١	ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	٨٨ر١٦ (٠ر٥٨)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	-٢٩ر٤٤(١ر٣٨)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	١٠ر٥٦(٠ر٥٢)
ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١١	٢٩ر٤٤(١ر٣٨)
ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	-٨١ر١١(١ر٢٢)
ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١١	١٠ر٥٦(٠ر٥٢)
ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	٨١ر١١(١ر٢٢)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٢ أ	٢٢ر١٢٩(١ر٤٨)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٣ ب	-٢١ر٦٦(٠ر٦٦)
ك ١٢ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١١	-٢٢ر١٢٩(١ر٤٨)
ك ١٢ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	٥٧ر١٦٤(١ر٥٦)
ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١١	٢١ر٦٦(٠ر٦٦)
ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٢ أ	-٥٧ر١٦٤(١ر٥٦)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	٥٢ر٨٩(٠ر٦٥)
ك ١١	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	٤٨ر٨٣(٠ر٦٩)
ك ١٢ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١١	-٥٢ر٨٩(٠ر٦٥)

جدول ١٤

تابع جدول زوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ١٢ أ	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	-٤ر٠٦(٥٨ر٠)
ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١١	-٤٨ر٨٣(٦٩ر٠)
ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	٤ر٠٦(٥٨ر٠)
ك ١١	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	-٦٦ر٣٤(٨٩ر٠)
ك ١١	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	-٢٩ر٥٣(١٦ر١)
ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١١	٦٦ر٣٤(٨٩ر٠)
ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	-٦٣ر١٨(٧٦ر١)
ك ١٣ أ	ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٢ ب	٦٣ر١٨(٧٦ر١)
ك ١١	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١٢ ب	-٠٨ر٥٤(٥٦ر٠)
ك ١١	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	١٩ر١٠٦(٧٥ر١)
ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١١	٠٨ر٥٤(٥٦ر٠)
ك ١٢ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١٣ ب	٢٧ر١٦٠(٨٦ر١)
ك ١٣ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١١	-١٩ر١٠٦(٧٥ر١)
ك ١٣ ب	ك ١٢ أ	ك ١٣ أ	ك ١٢ب	-٢٧ر١٦٠(٨٦ر١)
ك ١١	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢ب	٢٣ر٥٠(٤٨ر٠)
ك ١١	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢أ	٥٤ر٦٦(٦٤ر١)
ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك١١	٢٣ر٥٠ (٤٨ر٠)
ك ١٢ ب	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢أ	٣١ر١٦(٥٥ر١)
ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك١١	٥٤ر٦٦(٦٤ر١)
ك ١٢ أ	ك ١٣ ب	ك ١٣ أ	ك ١٢ب	٣١ر١٦(٥٥ر١)
ن ٦	ك ١٤	ك ١٥	ك ١٦	-٢٥ر١٦٠(٣١ر٠)
ن ٦	ك ١٤	ك ١٥	ك ١٧	-٦١ر٨٧(٣٥ر٠)
ك ١٤	ك ١٥	ك ١٦	ك ١٧	١٧ر١٠٨(٤٠ر٠)
ك ١٤	ك ١٥	ك ١٧	ك١٦	-٩٨ر١١٢(٣٧ر٠)

شكل ١٥

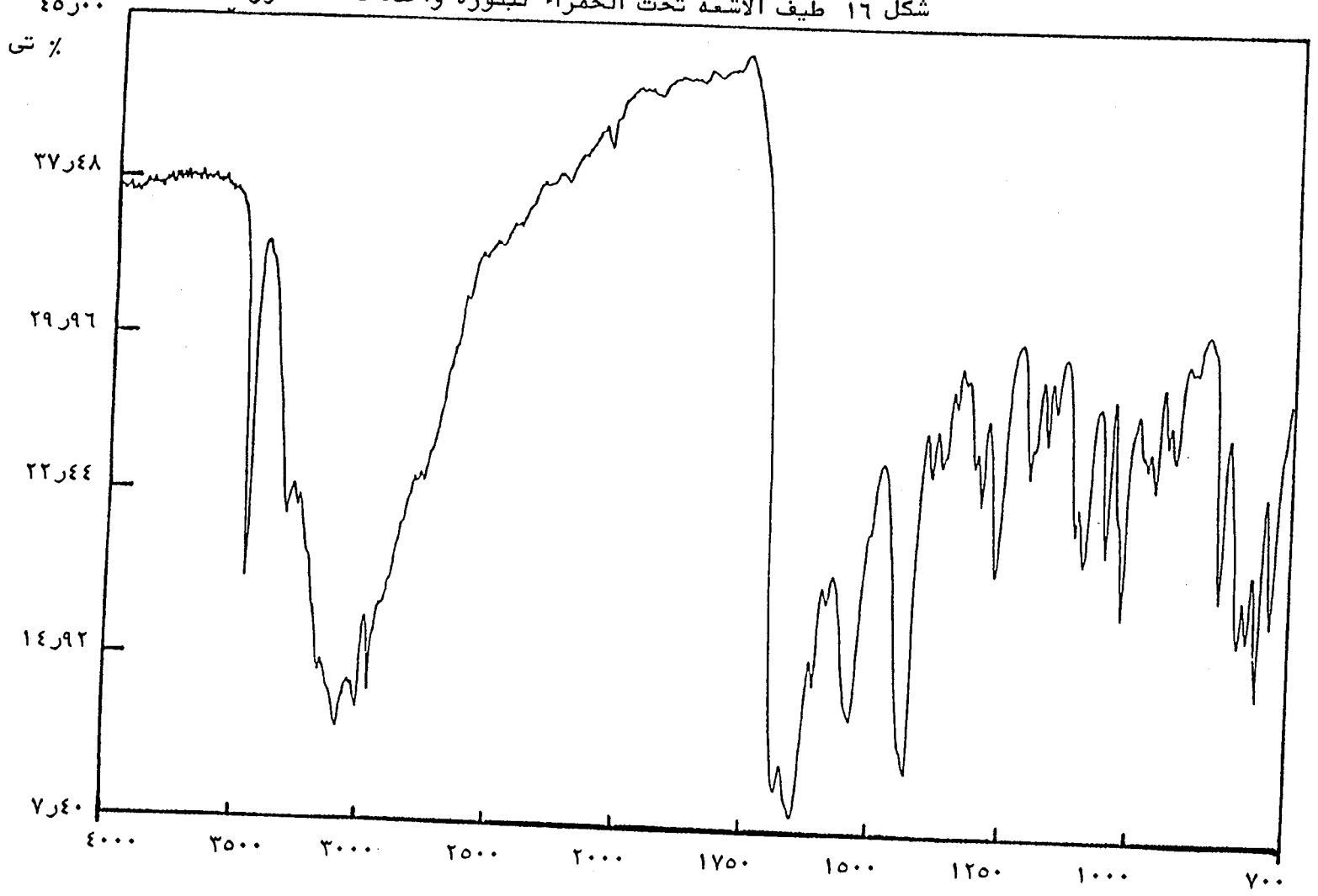
المتغيرات الموضعية و حيوداتها القياسية التقديرية

الذرة	س	ص	ع	ب(أ٢)
أد	١,٥٥٩٩(١)	١,٨٩١٨(١)	١,٨٩١٨(٣)	٤,٨٨(٤)
أ٧	١,٣٠٤٧(٢)	١,٧١٩٧(١)	١,٧١٩٧(١)	٥,٢٥(٤)
ن١	١,١٣٤١(٢)	١,٩٥٢٧(١)	١,٩٥٢٧(١)	٣,٧٧(٤)
ن٢	١,١٣٩٧(٢)	٢,٠٧٧١(٢)	٢,٠٧٧١(٢)	٤,٧١(٤)
ن٣	١,٣٢٠٦(٢)	١,٩٩٦٧(١)	١,٩٩٦٧(١)	٣,٨٩(٤)
ن٦	١,٤٣١١(٢)	١,٨٠٦٣(٢)	١,٨٠٦٣(٢)	٤,١٣(٤)
ن٨	١,٢١١٣(٢)	١,٨٣٠٥(١)	١,٨٣٠٥(١)	٣,٩٠(٤)
ك٢	١,١٩٦٨(٢)	٢,٠٠٩٩(٢)	٢,٠٠٩٩(٢)	٣,٧٠(٤)
ك٤	١,٣٤٢٠(٢)	١,٩٢٤٢(٢)	١,٩٢٤٢(٢)	٣,٨٣(٤)
ك٥	١,٤٥٢٨(٢)	١,٨٧٦٩(٢)	١,٨٧٦٩(٢)	٣,٩٤(٥)
ك٧	١,٣١٤٦(٢)	١,٧٨٠٩(٢)	١,٧٨٠٩(٢)	٤,١١(٥)
ك٩	١,٢٢٧٣ (٢)	١,٩٠٠٣(٢)	١,٩٠٠٣(٢)	٣,٥٧(٤)
ك١٠	١,٠٨٧٦(٢)	١,٨٠٥٤(٢)	١,٨٠٥٤(٢)	٤,٦٠(٥)
ك١١	١,٠٤١٧(٣)	١,٧١٦١(٣)	١,٧١٦١(٣)	٨,٤٢(٩)
ك١٢ب	١,٠٥٢٧(٨)	١,٦٦٤٩(٦)	١,٦٦٤٩(٦)	١٠,٧(٢)
ك١٢أ	١,١٠٠٦(٧)	١,٦٠٣٤(٥)	١,٦٠٣٤(٥)	٩,٩(٢)
ك١٣ب	١,٠٦٦(١)	١,٦١٠٧(٥)	١,٦١٠٧(٥)	١١,٤(٣)
ك١٣أ	٠,٩٦٣٨(٧)	١,٦٤٧٥(٨)	١,٦٤٧٥(٨)	١٢,٢(٣)
ك١٤	١,٥٣٨١(٢)	١,٧٤٥٣(٢)	١,٧٤٥٣(٢)	٥,١٢(٦)
ك١٥	١,٥٦٣٠(٣)	١,٦٣٣٩(٣)	١,٦٣٣٩(٣)	٧,٨٩(٩)
ك١٦	١,٦٨٢٣(٤)	١,٥٧٠١(٤)	١,٥٧٠١(٤)	١١,٢(١)
ك١٧	١,٦٤٥٣(٤)	١,٦١٥٢(٤)	١,٦١٥٢(٤)	١٠,٩(١)

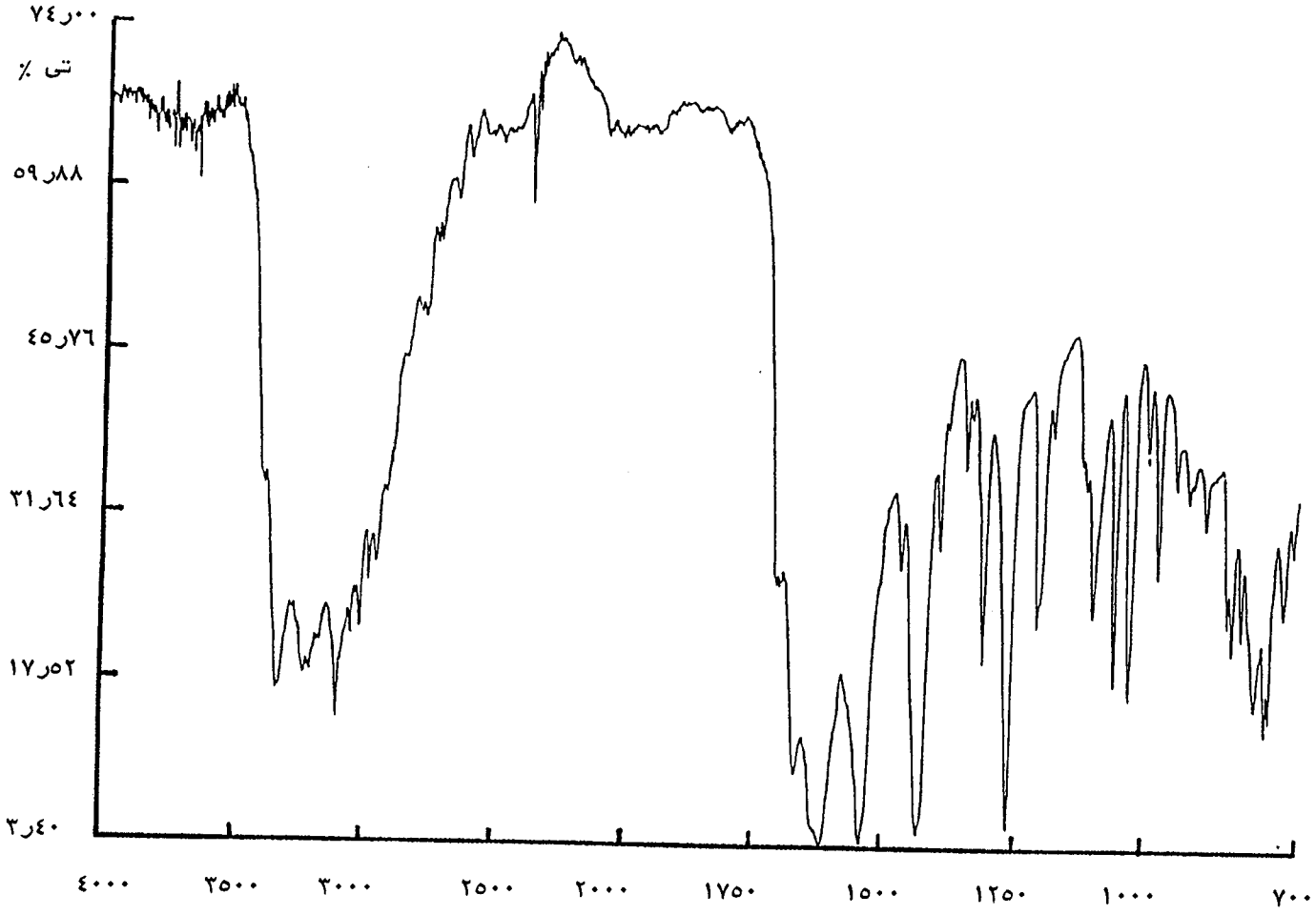
يبين الجدول الذرات الأيزوتروبية المنقاه فى صورة متغير الازاحة الأيزوتروبى المكافىء المحدد كالآتى :

```
(14/3) + (a2+B (1,1) + b2 + B (2,2) + c2+B(3,3)+ ab
(cos gamma)+ B(1,2)+ac(cos beta)+B(1,3)+bc(cos alpha)
 + B(2,3)
```

شكل ١٦ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة واحدة ذات الصورة ١ من بى ار ال ـ ٦١٠٦٣

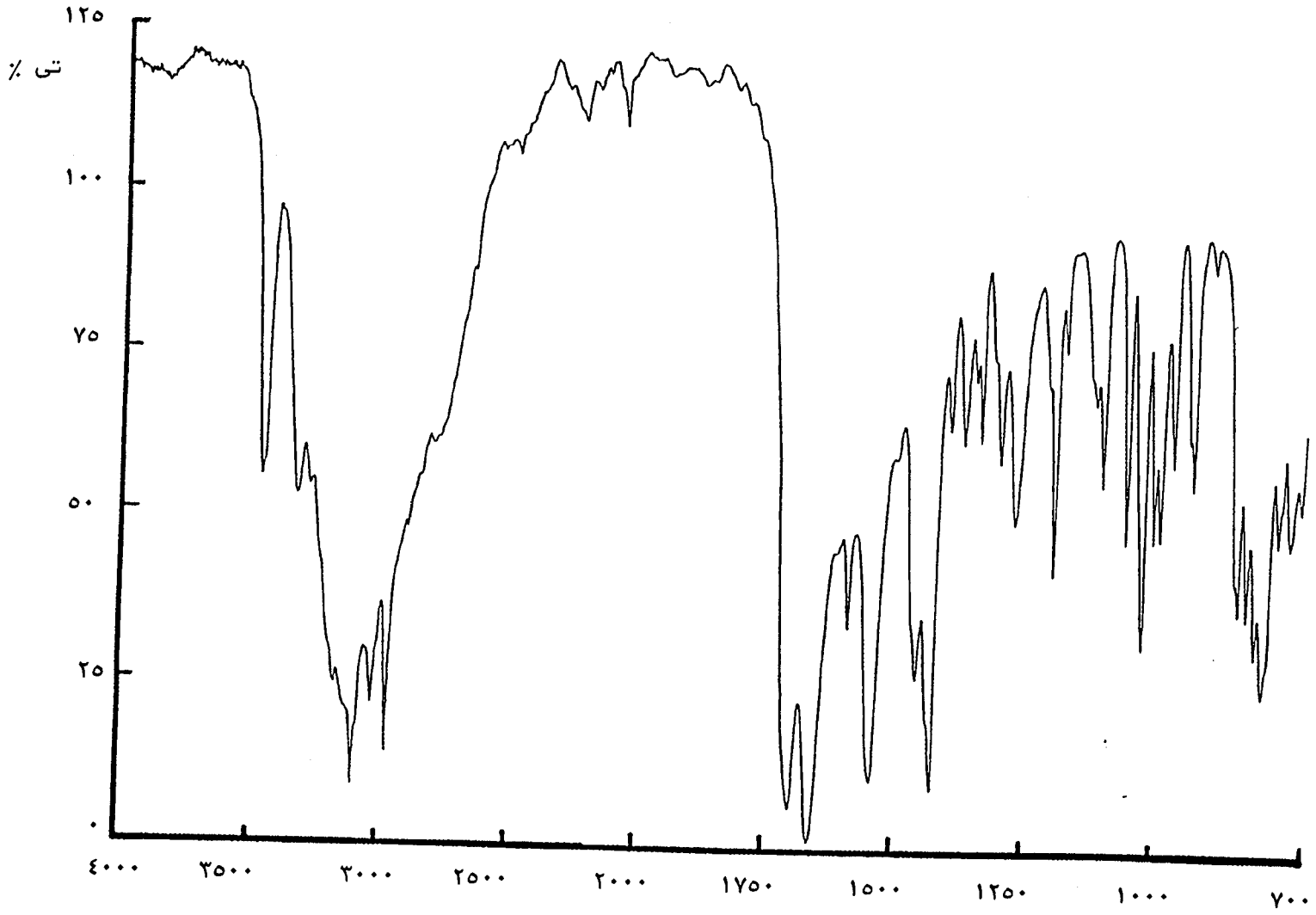


شكل /١٧ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة واحدة ذات الصورة ٢ من بى ار ال – ٦١٠٦٣

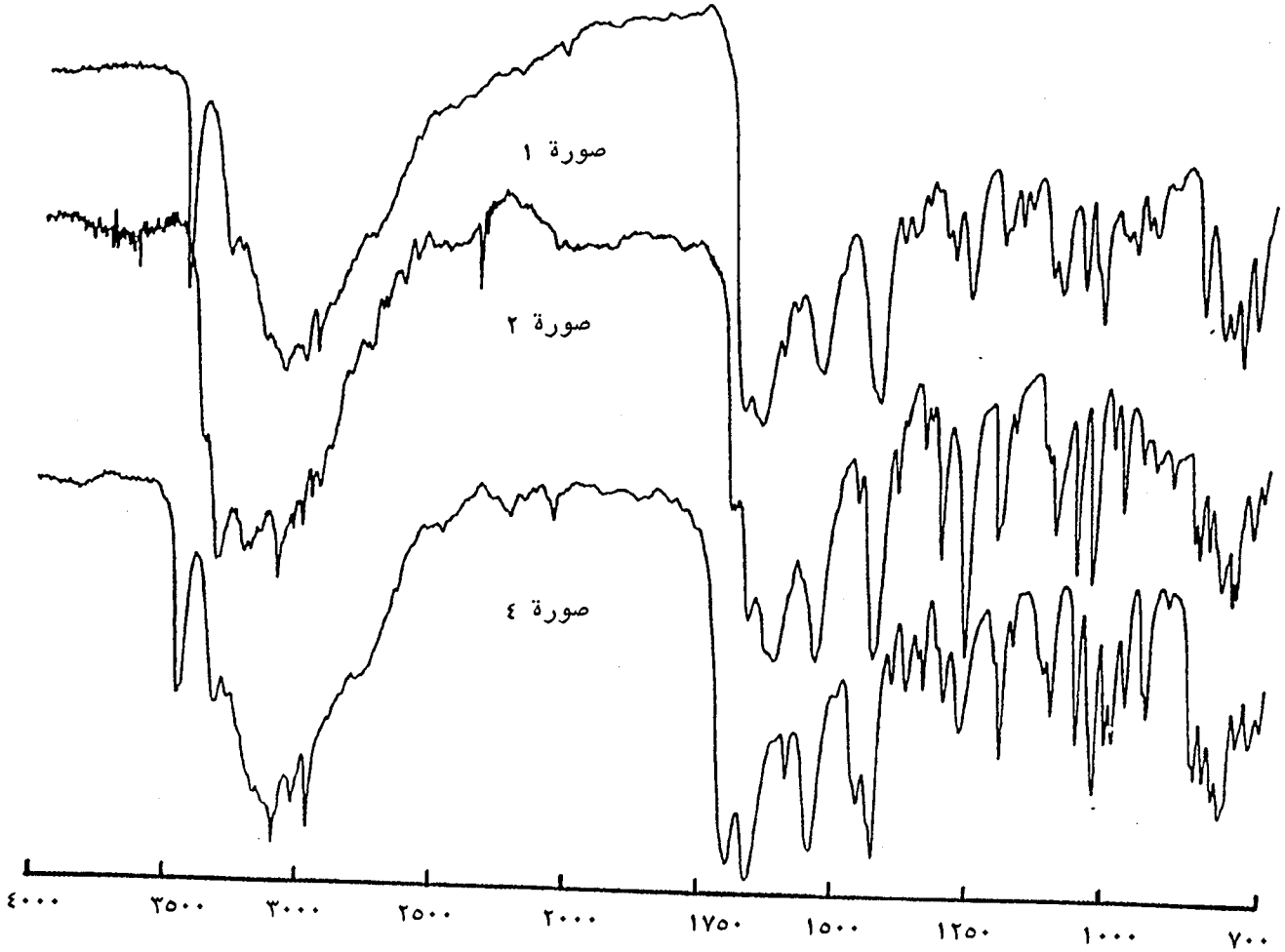


اس ام – ١

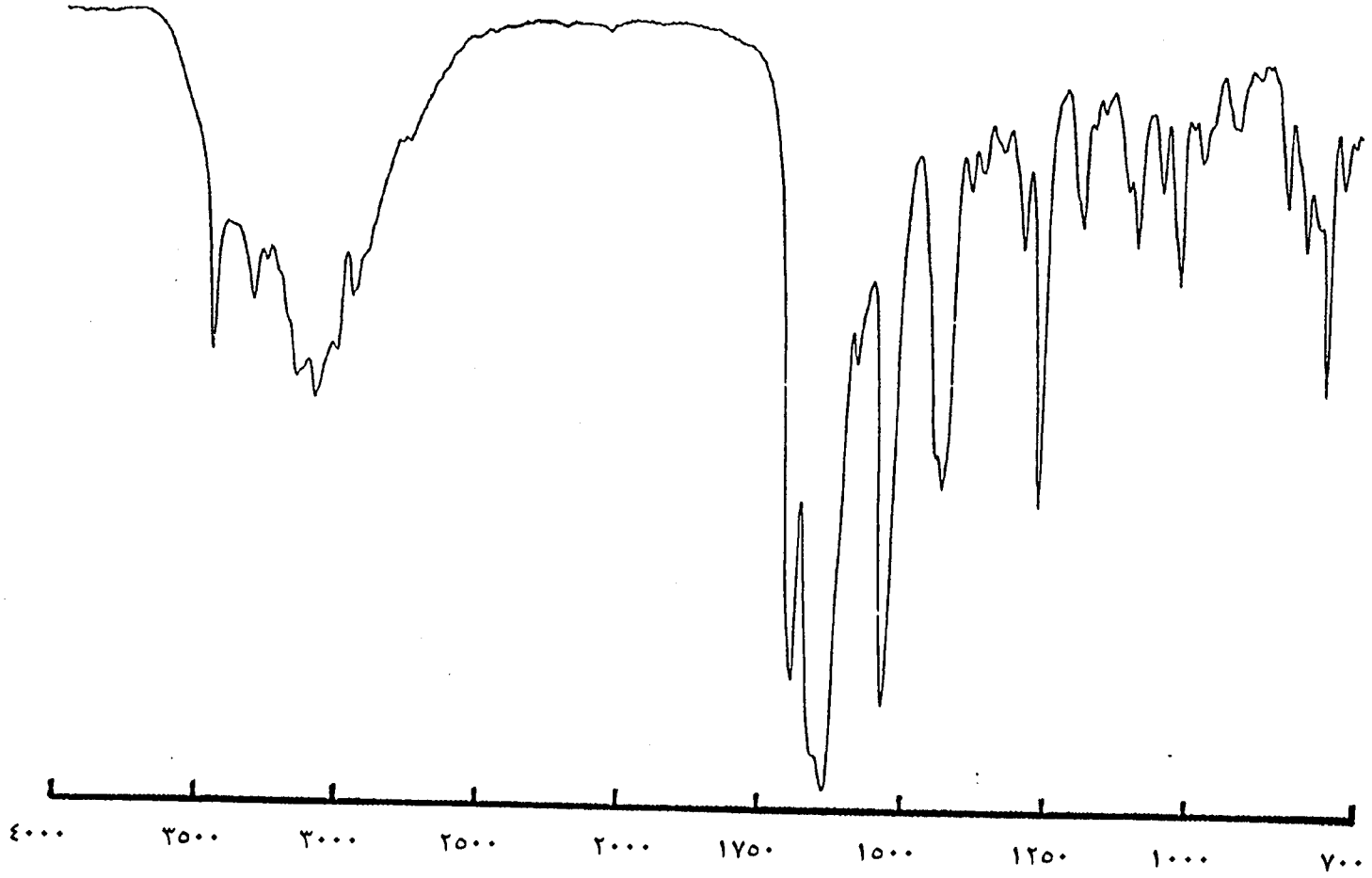
شكل ١٨ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة واحدة ذات الصورة ٤ من بى ار ال – ٦١٠٦٣



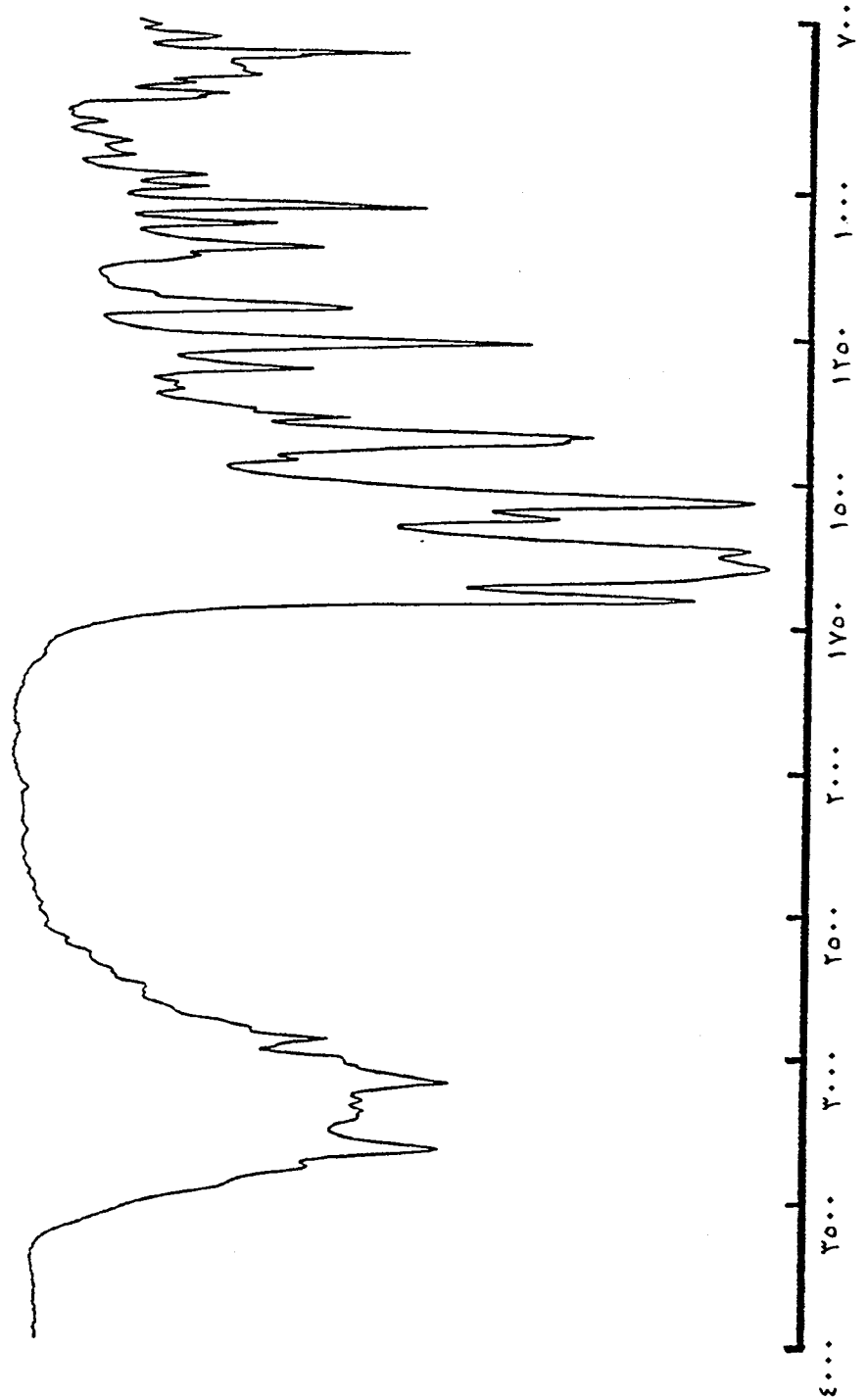
شكل ١٩ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة واحدة ذات الصورة ١ ، ٢ و ٤ من بى ار ال – ٦١٠٦٣



شكل ٢٠ طيف الاشعة تحت الحمراء لقرص بو بر ذى الصورة ١ من بى ار ال – ٦١٠٦٣

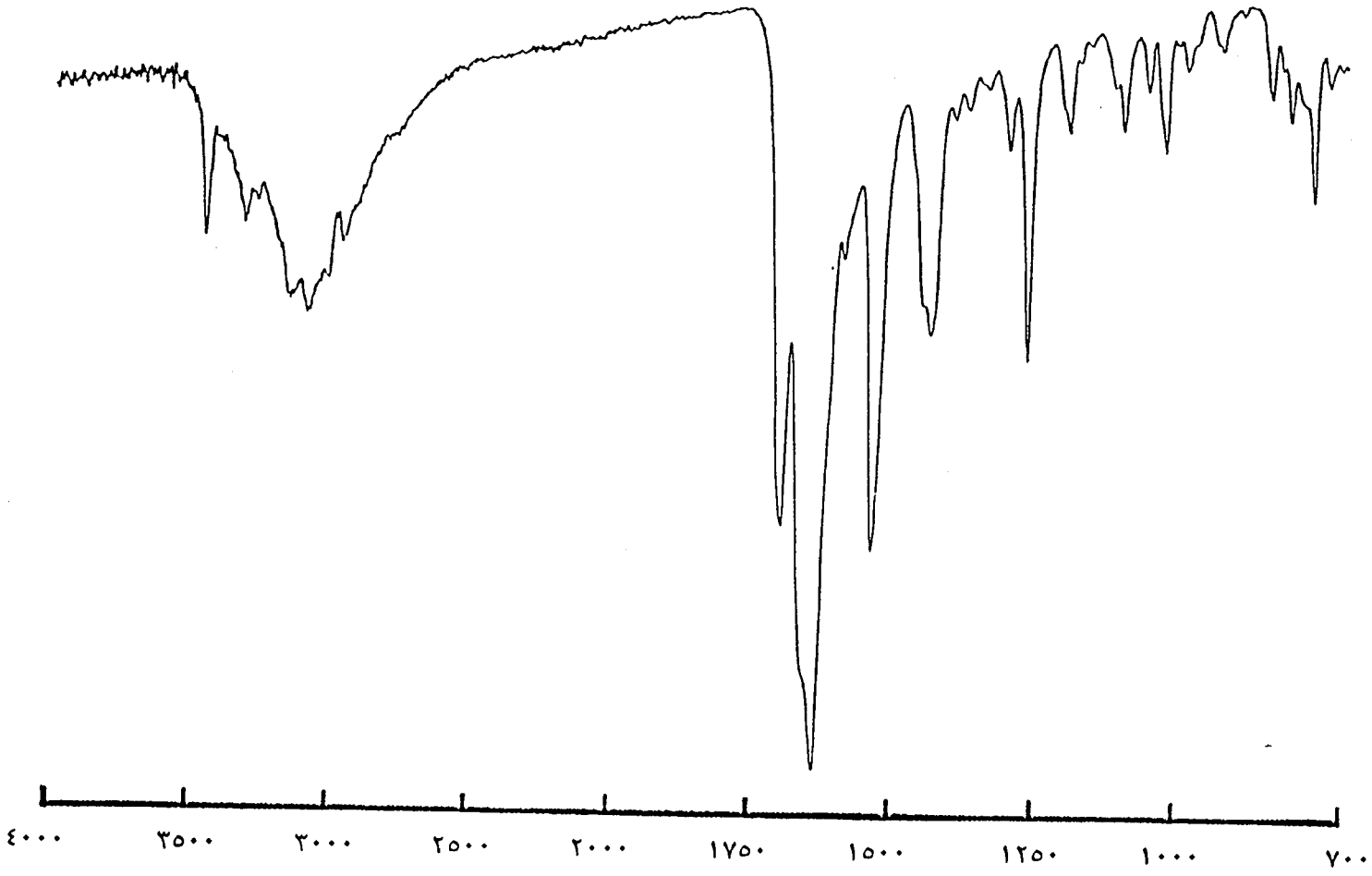


سى ام – ١



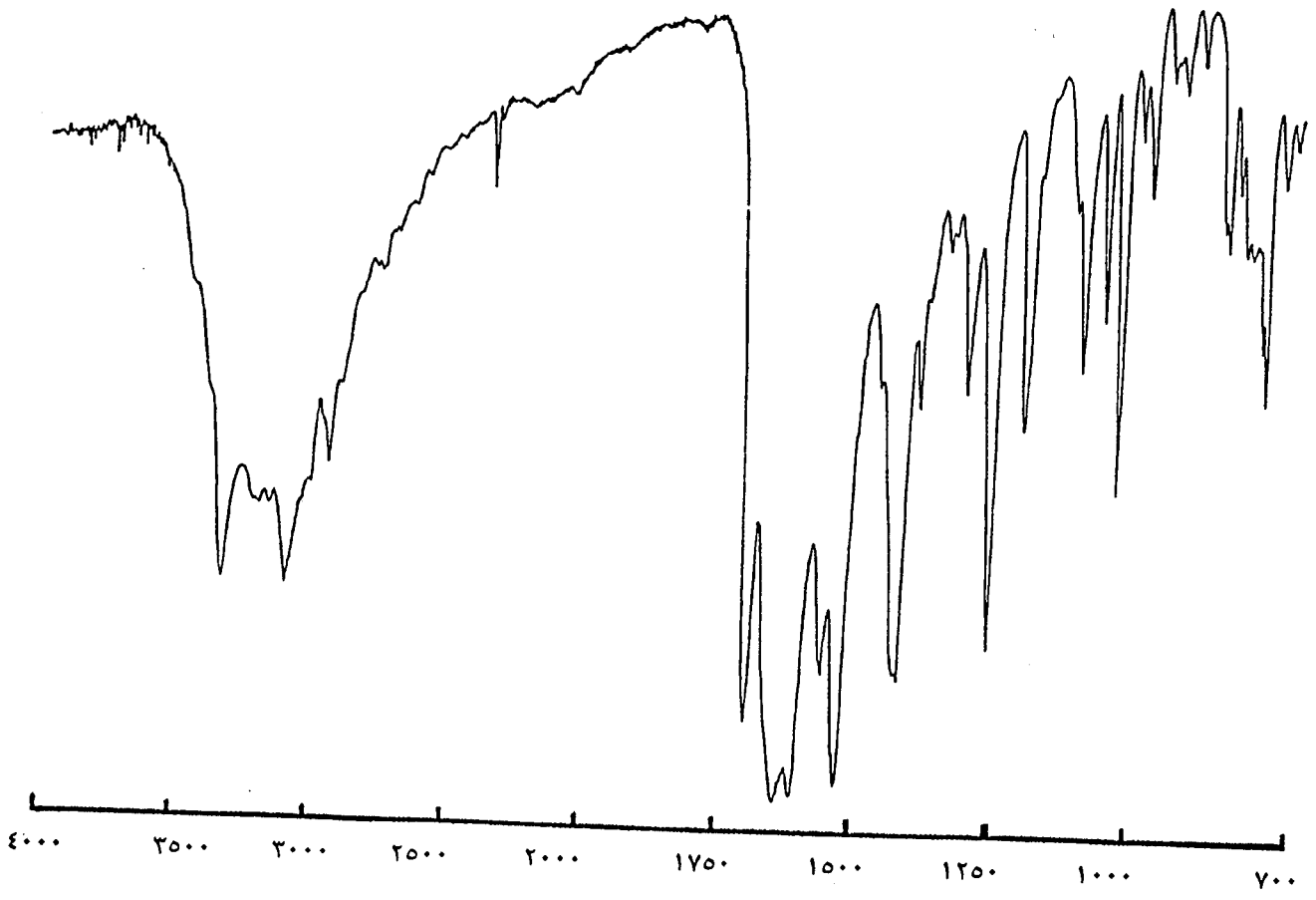
شكل ٢١ طيف الاشعة تحت الحمراء لقرص بو بر ذى الصورة ٢ من بى ار ال — ٦١٠٦٣

شكل ٢٢ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة مسحوقة ذات الصورة ١ من بى ار ال – ٦١٠٦٣



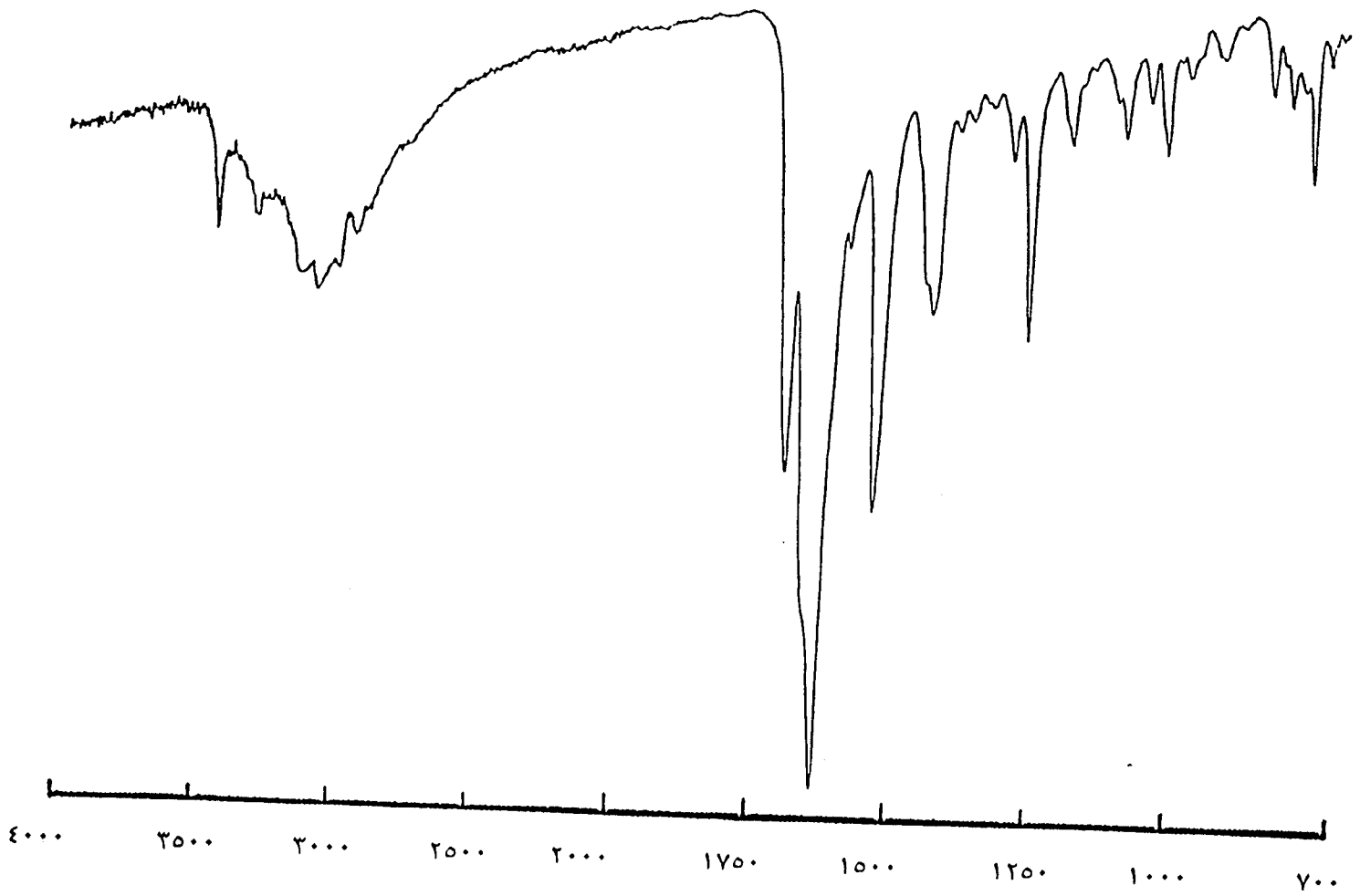
سى ام – ١

شكل ٢٣ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة مسحوقة ذات الصورة ٢ من بى ار ال – ٦١٠٦٣

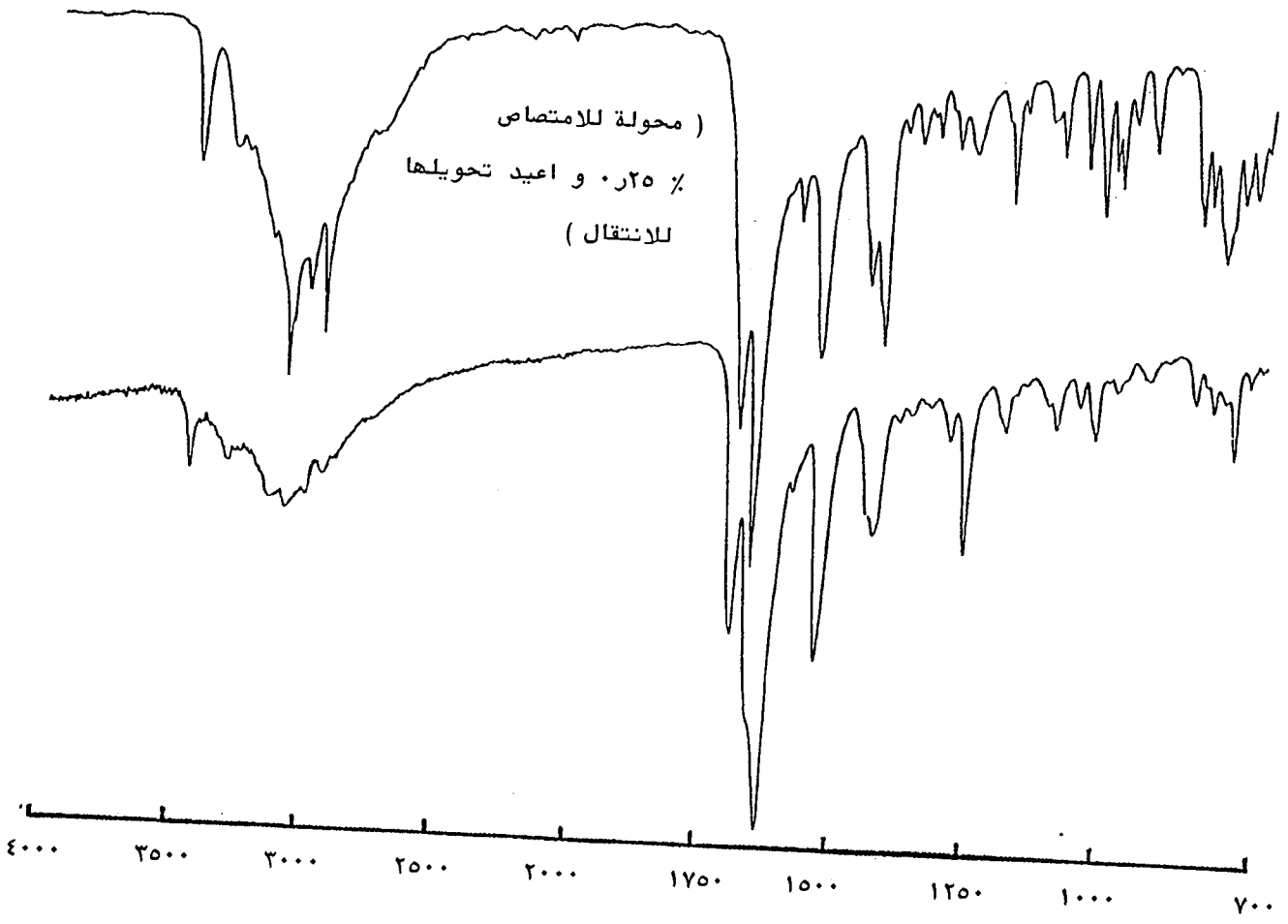


سى ام – ١

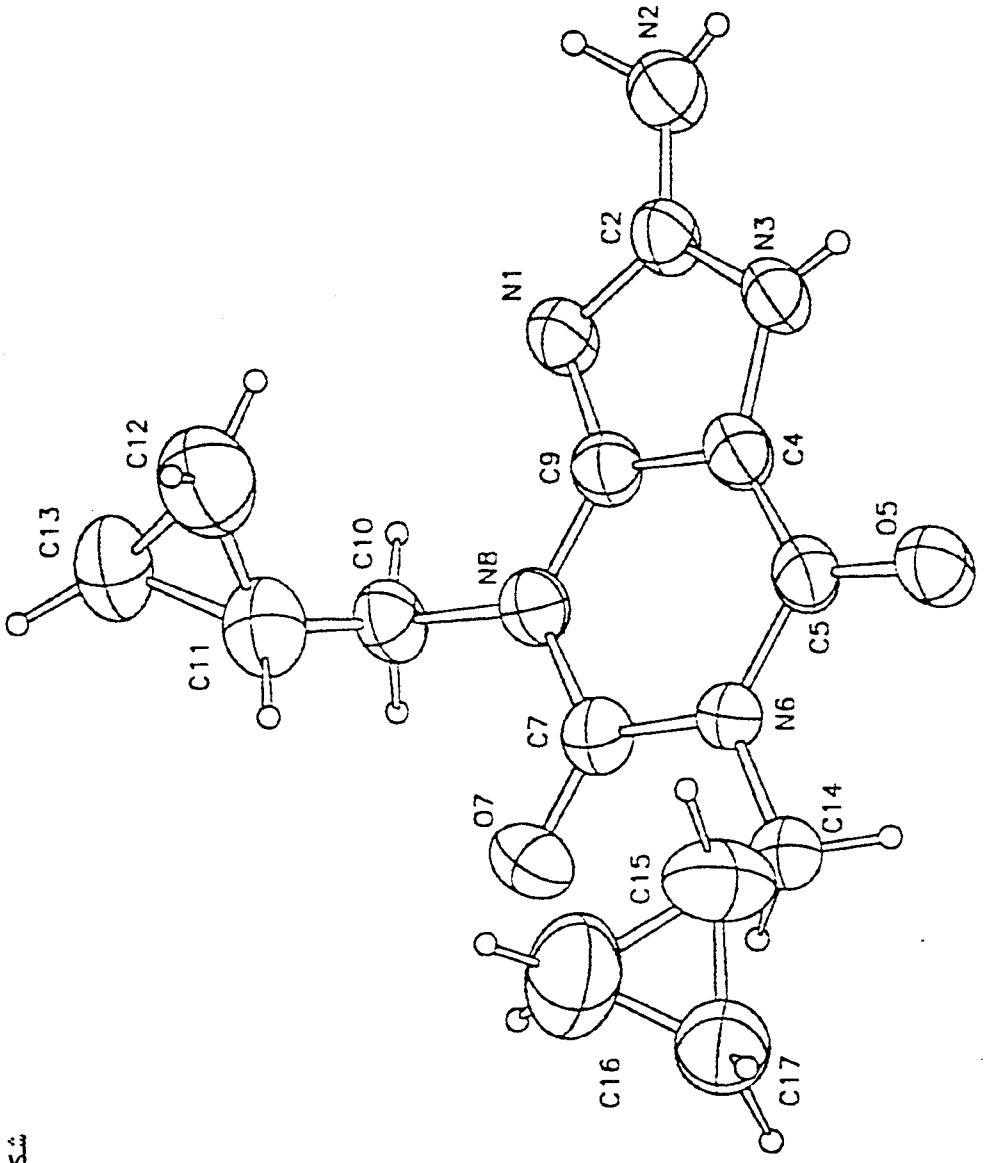
شكل ٢٤ طيف الاشعة تحت الحمراء لبلورة مسحوقة ذات الصورة ٤ من بى ار ال — ٦١٠٦٣



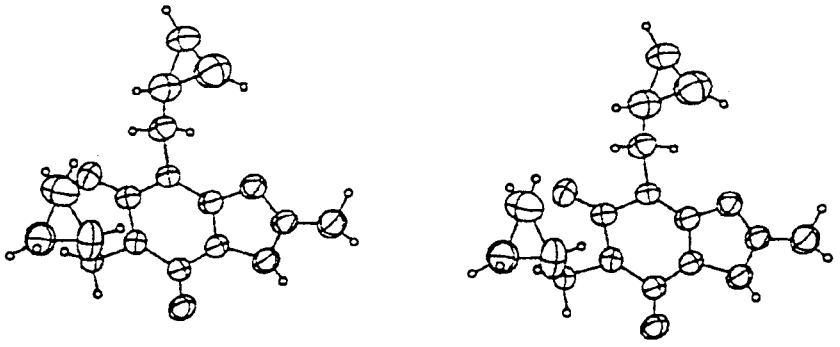
شكل ٢٥ اطياف الاشعة تحت الحمراء لبلورات فردية و مسحوقة ذات الصورة ٤ مذ بى ار ال – ٦١٠٦٣



سى ام – ١



شكل ٢٦



شكل ٢٧

جدول ٢٨

جدول مسافات الارتباط بالانجستروم

ذرة ١	ذرة٢	المسافة	ذرة ١	ذرة ٢	المسافة	ذرة ١	ذرة ٢	المسافة
أ٥	ك٥	١,٢٤٣(٢)	ن ٦	ك ٧	١,٣٩٦(٢)	ك ١١	ك ١٢	١,٤٨٠(٤)
أ٧	ك٧	١,٢١٤(٢)	ن ٦	ك ١٤	١,٤٧٧(٢)	ك ١١	ك ١٣	١,٤٦٨(٣)
ن١	ك٢	١,٣٣٥(٢)	ن ٨	ك ٧	١,٣٩٠(٢)	ك ١٢	ك ١٣	١,٤٥٧(٣)
ن١	ك٩	١,٣٦٧(٢)	ن ٨	ك ٩	١,٣٦٢(٢)	ك ١٤	ك ١٥	١,٤٩٤(٣)
ن٢	ك٢	١,٣٥١(٢)	ن ٨	ك ١٠	١,٤٧٥(٢)	ك ١٥	ك ١٦	١,٤٧٨(٤)
ن٣	ك٢	١,٣٤٥(٢)	ك ٤	ك ٥	١,٤١٢(٢)	ك ١٥	ك ١٧	١,٤٨٧(٣)
ن٣	ك٤	١,٣٩١(٢)	ك ٤	ك ٩	١,٣٥٨(٢)	ك ١٦	ك ١٧	١,٤٦٧(٣)
ن٦	ك٥	١,٣٩٨(٢)	ك ١٠	ك ١١	١,٤٩٤(٣)			

الارقام داخل الاقواس تمثل انحرافات قياسية تقديرية لاقل الارقام اهمية

جدول ٢٩

جدول مسافات الزوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ك ١	ن ١	ك ٩	١٠٣,٠(١)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	١٠٥,٨(١)
ك ٥	ن ٦	ك ٧	١٢٦,٣(١)
ك ٥	ن ٦	ك ١٤	١١٧,٧(١)
ك ٧	ن ٦	ك ١٤	١١٥,٩(١)
ك ٧	ن ٨	ك ٩	١١٩,٧(١)
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	١١٧,٦(١)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	١٢٢,٤(١)
ن ١	ك ٢	ن ٢	٢٩١٢٤,٢)
ن ١	ك ٢	ن ٣	١١٣,٧(١)
ن ٢	ك ٢	ن ٣	١٢٢,١(٢)
ن ٣	ك ٤	ك ٥	١٣١,٣(٢)

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ن ٣	ك ٤	ك ٩	١٠٥,٣(١)
ك ٥	ك ٤	ك ٩	١٢٣,٢(٢)
أ ٥	ك ٥	ن ٦	١٢١,١(١)
أ ٥	ك ٥	ك ٤	١٢٦,٥(٢)
ن ٦	ك ٥	ك ٤	١١٢,٢(١)
أ ٧	ك ٧	ن ٦	١٢٢,٤(٢)
أ ٧	ك ٧	ن ٨	١٢١,٠(٢)
ن ٦	ك٧	ن ٨	١١٦,٦(١)
ن ١	ك ٩	ن ٨	١٢٥,٩(١)
ن ١	ك ٩	ك ٤	١١٢,٣(١)
ن ٨	ك٩	ك ٤	١٢١,٨(١)
ن ٨	ك ١٠	ك ١١	١١٢,٠(٢)

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ك ١٠	ك ١١	ك ١٢	١١٨,٩(٢)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	١٢٠,٦(٢)
ك ١٢	ك ١١	ك ١٣	٥٩,٢(٢)
ك ١١	ك ١٢	ك ١٣	٦٠,٠(٢)
ك ١١	ك ١٣	ك ١٢	٦٠,٨(٢)
ن ٦	ك ١٤	ك ١٥	١١٢,٣(٢)
ك ١٤	ك ١٥	ك ١٦	١٢١,٢(٢)
ك ١٤	ك ١٥	ك ١٧	١١٨,٣(٢)
ك ١٦	ك ١٥	ك ١٧	٥٩,٣(٢)
ك ١٥	ك ١٦	ك ١٧	٦٠,٦(٢)
ك ١٥	ك ١٧	ك ١٦	٦٠,٠(٢)

الارقام داخل الاقواس تمثل انحرافات قياسية تقديرية لاقل الاقام أهمية

جدول ٣٠

جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ٩	ن ١	ك ٢	ن ٢	١٧٩,٢٢(٠,٢٢)
ك ٩	ن ١	ك ٢	ن ٣	٠,٧٧(٠,٢٥)
ك ٢	ن ١	ك ٩	ن ٨	١٧٨,٥٠(٠,٢١)
ك ٢	ن ١	ك ٩	ك ٤	-٠,٦٨(٠,٢٤)
يد١ن٢	ن ٢	ك ٢	ك ١	١٦٧,٥٦(٢,١٥)
يد١ن٢	ن ٢	ك ٢	ن ٣	-١٤,١١(٢,١٧)
يد٢ن٢	ن ٢	ك ٢	ن ١	١١,٨٤(١,٩٦)
يد٢ن٢	ن ٢	ك ٢	ن ٣	-١٦٩,٨٣(١,٩٣)
ك ٤	ن ٣	ك ٢	ن ١	٠,٥٩(٠,٢٦)
ك ٤	ن ٣	ك ٢	ن ٢	-١٧٩,٠٧(٠,٢١)
يد ن ٣	ن ٣	ك ٢	ن ١	-١٧٧,٦٢(١,٧٧)
يد ن ٣	ن ٣	ك ٣	ن ٢	٣,٨٩(١,٧٩)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	ك ٥	-١٧٥,٧٠(٠,٢٣)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	ك ٩	٠,١٣(٠,٢٣)
يد ن ٣	ن٣	ك ٤	ك ٥	٠,٧٨(٢,١٤)
يد ن ٣	ن ٣	ك ٤	ك ٩	١٧٦,٦٠(٢,١١)
ك ٧	ن ٦	ك ٥	أ ٥	١٧٨,١١(٠,٢١)
ك ٧	ن ٦	ك ٥	ك ٤	-١,٧٧(٠,٣١)
ك ١٤	ن٦	ك ٥	أ ٥	١,٦٩(٠,٣١)
ك ١٤	ن٦	ك ٥	ك ٤	-١٧٨,١٩(٠,١٩)
ك ٥	ن٦	ك ٧	أ ٧	١٧٩,٨٠(٠,٢٢)
ك ٥	ن ٦	ك ٧	ن ٨	-٠,٢٠(٠,٣٢)
ك ١٤	ن ٦	ك ٧	أ ٧	-٣,٧٢(٠,٣٢)
ك ١٤	ن٦	ك ٧	ن ٨	١٧٦,٢٩(٠,١٩)
ك ٥	ن٦	ك ١٤	ك ١٥	٩١,٦٧(٠,٢٥)
ك ٥	ن ٦	ك ١٤	يد١ك٤	-١٥٠,٠٤(٢,٧٣)
ك٧	ن ٦	ك ١٤	ك ١٥	-٨٥,١٣(٠,٢٦)
ك ٧	ن ٦	ك ١٤	يد١ك٤	٣٣,١٦(٢,٧٤)
ك ٩	ن ٨	ك ٧	أ ٧	١٧٨,٩٩(٠,٢١)
ك ٩	ن ٨	ك ٧	ن ٦	١,٠١(٠,٣٠)
ك ١٠	ن ٨	ك ٧	أ ٧	٦,٧٣(٠,٣٢)
ك ١٠	ن٨	ك ٧	ن ٦	١٧٣,٢٨(٠,١٩)
ك ٧	ن٨	ك ٩	ن ١	١٧٨,٧٧(٠,٢١)
ك ٧	ن٨	ك ٩	ك ٤	٠,٣٣(٠,٣٢)
ك ١٠	ن٨	ك ٩	ن ١	٤,٧٨(٠,٣٤)
ك ١٠	ن ٨	ك ٩	ك ٤	١٧٤,٣٢(٠,٢١)
ك ٧	ن٨	ك ١٠	ك١١	٧٤,٦١(٠,٢٧)
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	يد١ك٠	٥٠,٤٩(٢,٧٩)

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة٤	الزاوية
ن ٣	ك ٤	ك ٩	ن ٨	-١٧٨,٨٦(٠,١٩)
ك ٥	ك ٤	ك ٩	ن١	١٧٦,٦٠(٠,٢٠)
ك٥	ك ٤	ك ٩	ن٨	-٢,٦١(٠٣٤)
ن ٨	ك١٠	ك١١	ك١٢	٨٠٤٤(٠,٣٢)
ن ٨	ك١٠	ك١١	ك١٣	١٤٩,٧٩(٠,٢٧)
ن٨	ك١٠	ك١١	يدك١١	٤,٣٢(٢,٩٤)
يد١ك١٠	ك١٠	ك١١	ك١٢	-١٥٩,٣١(٢,٩٨)
يد١ك١٠	ك١٠	ك١١	ك١٣	-٠٩,٩٦(٢,٩٨)
يد١ك١٠	ك١٠	ك١١	يدك١١	١٢٤,٥٧(٤,١٦)
ك ١٠	ك١١	ك١٢	ك١٣	١١٠,٣٨(٠,٣٢)
ك ١٠	ك١١	ك١٢	يدك١١	-١٤٧,٣٥(١,٦٣)
ك١٠	ك١١	ك١٢	يد١ك١٣	-١,٥٩(٠,٥٠)
ك ١٣	ك١١	ك١٢	يد ك ١١	١٠٢,٢٦(١,٦١)
ك١٣	ك١١	ك١٢	يد١ك١٣	-١١١,٩٨(٠,٤٠)
يد ك ١١	ك١١	ك١٢	ك١٣	-١٠٢,٢٦(١,٦١)
يد ك ١١	ك١١	ك١٢	يد١ك١٣	١٤٥,٧٦(١,٦٤)
ك ١٠	ك١١	ك١٣	ك١٢	-١٠٧,٥٠(٠,٣٣)
ك١٠	ك١١	ك١٣	يد١ك١٢	١٤١,٢٣(٠,٣١)
ك١٢	ك١١	ك١٣	يد١ك١٢	-١١١,٢٨(.٠٣٨)
يد ك ١١	ك١١	ك١٣	ك١٢	٥٦,٨٥(١,٣٩)
يدك١١	ك١١	ك١٣	يد١ك١٢	-٥٤,٤٣(١,٤١)
ك١٠	ك١١	يدك١١	ك١٢	٩٢,٩١(٢,٦٨)
ك١٣	ك١٢	يدك١١	ك١٢	-٥٧,٦٨(٠,٨٠)
ك١١	ك١٢	ك١٣	يد١ك١٢	١٠٩,٣٦(.٠٣٦)
يد ك ١١	ك١٢	ك١٣	ك١١	-٤٥,٧٧(١,١٩)
يدك١١	ك١٢	ك١٣	يد١ك١٢	٦٣,٥٩(١,٢٢)
يد١ك١٣	ك١٢	ك١٣	ك١١	١٠٨,٥٠(٠,٤١)
يد١ك١٣	ك١٢	ك١٣	يد١ك١٢	-١٤٢,١٥(٠,٣٦)
ك١٣	ك١٢	يدك١١	ك١١	٦٠,١٠(١,٠٤)
يد١ك١٣	ك١٢	يدك١١	ك١١	-٧٣,٥٤(٢,٥٨)
ن٦	ك١٤	ك١٥	ك١٦	٨٩,٣٦(٠,٣٢)
ن٦	ك١٤	ك١٥	ك١٧	١٥٨,٧٩(٠,٢٥)
ن٦	ك١٤	ك١٥	يدك١٥	-٥٣,٥٤(٢,٦٨)
يد١ك١٤	ك١٤	ك١٥	ك١٦	-٢٦,٦١(٢,٧٩)
يد١ك١٤	ك١٤	ك١٥	ك١٧	٤٢,٨٢(٢,٧٨)
يد١ك١٤	ك١٤	ك١٥	يدك١٥	-١٦٩,٥١(٣,٨٤)
ك١٤	ك١٥	ك١٦	ك١٧	١٠٦,٦٢(٠,٣٢)
يدك١٥	ك١٥	ك١٦	ك١٧	-١٠٤,٩٤(٢,٣٤)

جدول ٣٠

تابع جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	ك ١١	٩٩,٥١ (٠,٢٦)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	يد١ك٠	١٣٥,٣٩ (٢,٧٩)
ن ٣	ك ٤	ك د	أ د	١,٥٥ (٠,٤٠)
ن ٣	ك ٤	ك د	ن ٦	١٧٨,٣٢ (٠,٢١)
ك ٩	ك ٤	ك د	أد	١٧٦,٧٣ (٠,٢٢)
ك ٩	ك ٤	ك د	ن ٦	٣,١٤ (٠,٣١)
ن ٣	ك ٤	ك ٩	ن ١	٠,٣٥ (٠,٢٥)

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة٤	الزاوية
ك١٤	ك١٥	ك١٧	ك١٦	-١١١,٣٥ (٠,٣٢)
ك١٤	ك١٥	ك١٧	يد١ك١٦	١٣٩,٧٩ (٠,٣٠)
ك١٦	ك١٥	ك١٧	يد١ك١٦	-١٠٨,٨٥ (٠,٣٧)
يدك١٥	ك١٥	ك١٧	ك١٦	٩٧,١٠ (٢,٤١)
يدك١٥	ك١٥	ك١٧	يد١ك١٦	-١١,٧٥ (٢,٤٣)
ك١٥	ك١٦	ك١٧	يد١ك١٦	١١٠,١٧ (٠,٤٠)

جدول ٣١

المتغيرات الموضعية و حيوداتها القياسية التقديرية

الذرة	س	ص	ع	ب(أ٢)
أ ٥	٠,١١٩٣(٢)	٠,٨٨٤٧(١)	٠,٧٦٤٣(٣)	٤,١٧(٤)
أ ٥	-٠,٠٤٣٢(٢)	٠,٧٠٧٠(١)	-٠,٠٤٤٨(٣)	٤,٩٤(٤)
ن ١	-٠,٣٢٧٠(٢)	٠,٩٤١٣(١)	٠,٤٣٣٧(٤)	٣,٦١(٤)
ن ٢	-٠,٣٨١٣(٢)	١,٠٦٤٩(٢)	٠,٧٩٦٩(٥)	٥,٠٨(٥)
ن ٣	٠,١٦٤٦(٢)	٠,٩٨٦٨(١)	٠,٧٦٦٨(٤)	٣,٦٢(٤)
ن ٦	٠,٠٣٧٤(٢)	٠,٧٩٦٧(١)	٠,٣٥٧٠(٤)	٣,٦٩(٤)
ن ٨	٠,١٨٩٤(٢)	٠,٨١٨٢(١)	٠,١٦٨٨(٤)	٣,٦٣(٤)
ك ٢	٠,٢٩٤٤(٢)	٠,٩٩٨٧(٢)	٠,٦٦٨٩(٥)	٣,٦٨(٥)
ك ٤	٠,١٠٧٢(٢)	٠,٩١٤٧(٢)	٠,٥٨١١(٥)	٣,٤٨(٥)
ك ٥	٠,٠٢٣٦(٢)	٠,٨٦٧٩(٢)	٠,٥٨٥٠(٥)	٣,٤٢(٥)
ك٧	٠,٠٦٣٣(٢)	٠,٧٦٩٧(٢)	٠,١٤٧٦(٥)	٣,٨٣(٥)
ك٩	٠,٢٠٨٥(٢)	٠,٨٨٩١(٢)	٠,٣٨٤٥(٥)	٣,٣٣(٤)
ك١٠	٠,٣٠٠٢(٢)	٠,٧٨٣٢(٢)	-٠,٠٣٢٣(٥)	٤,٢١(٥)
ك١١	-٠,٣٧٠٤(٣)	٠,٦٨٨٣(٢)	٠,٠٢٧٩(٧)	٥,٨٩(٧)
ك١٢	-٠,٤٢٨٢(٤)	٠,٦٩٠٨(٣)	٠,٢٤٣٩(٨)	٧,٠٩(٩)
ك١٣	-٠,٤٧٨٩(٣)	٠,٦٦٤٧(٢)	-٠,٠٤٤٥(٧)	٦,٨٢(٨)
ك١٤	٠,١٦٨٧(٢)	٠,٧٤٠١(٢)	٠,٣٤٠٤(٥)	٤,٣٣(٥)
ك١٥	٠,١٨٠٧(٣)	٠,٦٤٦٧(٢)	٠,٤٦٨٧(٦)	٥,٨١(٧)
ك١٦	٠,١٤١٥(٣)	٠,٥٥٣٨(٢)	٠,٣٠٦٠(٩)	٧,٦(١)
ك١٧	٠,٢٨٣٠(٣)	٠,٥٦٦٣(٢)	٠,٣٨٥٨(٨)	٦,٨٦(٩)

يبين الجدول الذرات الايزوتروبية المنقاة فى صورة متغير الازاحة الايزوتروبة المكافىء المحدد كالآتى :

```
(14/3) + (a2+B (1,1) + b2 + B (2,2) + c2+B(3,3)+ ab
(cos gamma)+ B(1,2)+ac(cos beta)+B(1,3)+bc(cos alpha)
 + B(2,3)
```

شكل ٢٢

جدول ٣٣

جدول مسافات الارتباط بالانجستروم

ذرة ١	ذرة ٢	المسافة	ذرة ١	ذرة ٢	المسافة
أ ٥	ك ٥	١,٢٥١(٣)	ن ٨	ك ١٠	١,٤٨٥(٣)
أ ٧	ك ٧	١,٢١٦(٣)	ك ٤	ك ٥	١,٣٨٦(٣)
ن ١	ك ٢	١,٣٥٢(٣)	ك ٤	ك ٩	١,٣٦٨(٣)
ن ١	ك ٩	١,٣٥١(٣)	ك ١٠	ك ١١	١,٤٩٤(٤)
ن ٢	ك ٢	١,٣٤٤(٣)	ك ١١	ك ١٢	١,٤٩٣(٤)
ن ٣	ك ٢	١,٣٤٠(٣)	ك ١١	ك ١٣	١,٥٠٩(٤)
ن ٣	ك ٤	١,٣٩٤(٣)	ك ١٢	ك ١٣	١,٥١٣(٥)
ن ٦	ك ٥	١,٤٠٢(٣)	ك ١٤	ك ١٥	١,٤٩٦(٤)
ن ٦	ك ٧	١,٤٠٣(٣)	ك ١٥	ك ١٦	١,٤٩٨(٤)
ن ٦	ك ١٤	١,٤٧٤(٣)	ك ١٥	ك ١٧	١,٤٩١(٤)
ن ٨	ك ٧	١,٣٧٥(٣)	ك ١٦	ك ١٧	١,٤٩٧(٤)
ن ٨	ك ٩	١,٣٧٥(٣)			

الارقام داخل الاقواس تمثل انحرافات قياسية تقديرية لاقل الارقام أهمية

جدول ٣٤

جدول مسافات الزوايا بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
ك ٢	ن ١	ك ٩	١٠٢,٩ (٢)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	١٠٦,٥ (٢)
ك ٥	ن ٦	ك ٧	١٢٥,٤(٢)
ك ٥	ن ٦	ك ١٤	١١٩,٤ (٢)
ك ٧	ن ٦	ك ١٤	١١٥,٣ (٢)
ك ٧	ن ٨	ك ٩	١١٩,٧ (٢)
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	١١٩,٠(٢)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	١٢١,٠(٢)
ن ١	ك ٢	ن ٢	١٢٢,٦(٢)
ن ١	ك ٢	ن ٣	١١٣,٢(٢)
ن ٢	ك ٢	ن ٣	١٢٤,٢(٢)
ن ٣	ك ٤	ك ٥	١٣٢,٣(٢)
ن ٣	ك ٤	ك ٩	١٠٤,٣(٢)
ك ٥	ك ٤	ك ٩	١٢٣,٤(٢)
أ ٥	ك ٥	ن ٦	١٢٠,١(٢)
أ ٥	ك ٥	ك ٤	١٢٦,٧(٢)
ن ٦	ك ٥	ك ٤	١١٣,٢(٢)
أ ٧	ك ٧	ن ٦	١٢٠,٧(٢)

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	الزاوية
أ ٧	ك ٧	ن٨	١٢٢,٢(٢)
ن ٦	ك ٧	ن٨	١١٧,١(٢)
ن ١	ك ٩	ن٨	١٢٥,٦(٢)
ن ١	ك ٩	ك٤	١١٣,٢(٢)
ن ٨	ك ٩	ك٤	١٢١,٢(٢)
ن ٨	ك١٠	ك١١	١١٣,٢(٢)
ك ١٠	ك ١١	ك١٢	١١٨,٩(٣)
ك ١٠	ك١١	ك١٣	١١٥,٧(٣)
ك ١٢	ك١١	ك١٣	٦٠,٥(٢)
ك ١١	ك١٢	ك١٣	٦٠,٣(٢)
ك ١١	ك١٣	ك١٢	٥٩,٢(٢)
ن ٦	ك١٤	ك١٥	١١١,٥(٢)
ك ١٤	ك١٥	ك١٦	١١٩,٣(٢)
ك ١٤	ك١٥	ك١٧	١١٨,٦(٣)
ك ١٦	ك١٥	ك١٧	٦٠,١(٢)
ك ١٥	ك١٦	ك١٧	٥٩,٧)٢)
ك ١٥	ك١٧	ك١٦	٦٠,٢(٢)

الارقام داخل الاقواس تمثل انحرافات قياسية لاقل الارقام أهمية

جدول ٣٥

جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ٩	ن ١	ك ٢	ن ٢	١٧٨,٠٥(٠,٢٤)
ك ٩	ن ١	ك ٢	ن ٣	٠,٠٨(٠,٣٠)
ك ٢	ن ١	ك ٩	ن ٨	-١٧٧,٩٢(٠,٢٤)
ك ٢	ن ١	ك ٩	ك ٤	٠,١٠(٠,٢٨)
يد١ن ٢	ن ٢	ك ٢	ن ١	٢٣,١٢(٢,٠٣)
يد١ن ٢	ن ٢	ك ٢	ن ٣	-١٥٩,١٤(٢,٠١)
يد٢ن٢	ن ٢	ك ٢	ن ١	١٦٨,٨٦(٢,٣٧)
يد٢ن٢	ن ٢	ك ٢	ن ٣	-١٣,٤٠(٢,٣٩)
ك ٤	ن ٣	ك ٢	ن ١	-٠,٢٣(٠,٢٨)
ك ٤	ن ٣	ك ٢	ن ٢	-١٧٨,٠٥(٠,٢٤)
يدن٣	ن ٣	ك ٢	ن ١	-١٧٩,٣٨(٢,٠٦)
يدن٣	ن ٣	ك ٢	ن ٢	٢,٧٠(٢,٠٩)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	ك ٥	١٧٨,٣٠(٠,٢٨)
ك ٢	ن ٣	ك ٤	ك ٩	٠,٢٧(٠,٢٦)
يد ن٣	ن ٣	ك ٤	ك ٥	-٢,٥٦(٢,١٣)
يد ن٣	ن ٣	ك ٤	ك ٩	١٧٩,٤١(٢,٠٩)
ك ٧	ن ٣	ك ٥	أ ٥	-١٧٦,٢١(٠,٢٣)
ك ٧	ن ٦	ك ٥	ك ٤	٤,٠٦(٠,٣٥)
ك ١٤	ن ٦	ك ٥	أ ٥	٥,٠٦(٠,٣٥)
ك ١٤	ن ٦	ك ٥	ك ٤	-١٧٤,٦٧(٠,٢٢)
ك ٥	ن ٦	ك ٧	أ ٧	١٧٨,٠٧(٠,٢٤)
ك ٥	ن ٦	ك ٧	ن ٨	-١,٥٠(٠,٣٧)
ك ١٤	ن ٦	ك ٧	أ ٧	-٣,١٥(٠,٣٦)
ك ١٤	ن ٦	ك ١٧	ن ٨	١٧٧,٢٨(٠,٢٢)
ك ٥	ن ٦	ك ١٤	ك ١٥	٩٨,٧١(٠,٢٨)
ك ٥	ن ٦	ك ١٤	يد١ ك ١٤	-٢٣,٦٢(١,٦٦)
ك٥	ن ٦	ك ١٤	يد ٢ك١٤	-١٣٩,٣٠(١,٣٤)
ك ٧	ن ٦	ك ٤	ك ١٥	-٨٠,١٥(٠,٢٩)
ك ٧	ن ٦	ك ١٤	يد ١ك١٤	١٥٧,٥٢(٠,٦٤)
ك ٧	ن ٦	ك ١٤	يد ٢ك١٤	٤٠,٨٤(١,٣٦)
ك ٩	ن ٨	ك ٧	أ ٧	١٧٨,١٣(٠,٢٥)
ك ٩	ن ٨	ك ٧	ن ٦	-٢,٣٠(٠,٣٥)
ك ١٠	ن ٨	ك ٧	أ ٧	-٨,١٧(٠,٣٨)
ك ١٠	ن ٨	ك ٧	ن ٦	١٧١,٣٩(٠,٢٢)
ك ٧	ن ٨	ك ٩	ن ١	-١٧٨,٨٨(٠,٢٤)
ك ٧	ن ٨	ك ٩	ك ٤	٣,٢٦(٠,٣٦)
ك ١٠	ن ٨	ك ٩	ن ١	٧,٥٥(٠,٣٨)
ك ١٠	ن ٨	ك ٩	ك ٤	-١٧٠,٣٢(٠,٢٤)

تابع جدول ٣٥

جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	ك ١١	١٠١,٨٣(٠,٢٨)
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	يد١ك ١٠	-١٣٨,٧٤(١,٣٧)
ك ٧	ن ٨	ك ١٠	يد٢ ك ١٠	-٢٠,٥٤(١,٤٩)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	ك ١١	-٨٤,٥٦(٠,٣٠)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	يد١ك١٠	٣٤,٨٧(١,٣٩)
ك ٩	ن ٨	ك ١٠	يد٢ ك ١٠	١٥٣,٠٧(١,٤٧)
ن ٣	ك ٤	ك د	أ د	-٠,٥٠(٠,٤٧)
ن ٣	ك ٤	ك د	ن ٦	١٧٩,٢١(٠,٢٥)
ك ٩	ك ٤	ك د	أ د	١٧٧,٢٢(٠,٢٥)
ك ٩	ك ٤	ك د	ن ٦	-٣,٠٨(٠,٣٦)
ن ٣	ك ٤	ك ٩	ن ١	-٠,٢٣(٠,٢٩)
ن ٣	ك ٤	ك ٩	ن ٨	١٧٧,٨٨(٠,٢٢)
ك د	ك ٤	ك ٩	ن ١	-١٧٨,٤٩(٠,٢٣)
ك د	ك ٤	ك ٩	ن ٨	-٠,٣٨(٠,٤٠)
ن ٨	ك ١٠	ك ١١	ك١٢	-٧٧,٤٦(٠,٣٧)
ن ٨	ك ١٠	ك ١١	ك١٣	-١٤٦,٤٥(٠,٢٨)
ن ٨	ك ١٠	ك ١١	يد ك ١١	٦٩,٣٣(٢,٠٠)
يد١ك١٠	ك ١٠	ك ١١	ك ١٢	١٦٥,٥٥(١,٤٦)
يد١ك١٠	ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	٩٦,٥٥(١,٤٦)
يد١ك١٠	ك ١٠	ك ١١	يد ك١١	-٤٧,٦٦(٢,٤٦)
يد٢ك١٠	ك ١٠	ك ١١	ك ١٢	٣٨,٨٣(١,٦٣)
يد٢ك١٠	ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	-٣٠,١٦(١,٦٣)
يد٢ك١٠	ك ١٠	ك ١١	يد ك ١١	-١٧٤,٣٨(٢,٥٤)
ك١٠	ك ١١	ك ١٢	ك ١٣	-١٠٤,٨٩(٠,٣٥)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٢	يد١ك١٢	-٣,٠١(٢,٣٢)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٢	يد٢ك١٢	١٤٥,٣٧(٢,٥٧)
ك ١٣	ك ١١	ك ١٢	يد١ك١٢	١٠١,٨٧(٢,٢٩)
ك ١٣	ك ١١	ك ١٢	يد٢ ك ١٢	-١٠٩,٧٤(٢,٥٨)
يدك١١	ك ١١	ك ١٢	ك ١٣	١٠٦,٣٨(١,٨٩)
يدك١١	ك ١١	ك ١٢	يد١ ك ١٢	-١٥١,٧٤(٢,٩٤)
يدك١١	ك ١١	ك ١٢	يد٢ ك ١٢	-٣,٣٥(٣,٢٠)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	ك ١٢	١١٠,٠٨(٠,٣٢)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	يد١ك١٣	-١٤٢,٦٢(٣,٠٥)
ك ١٠	ك ١١	ك ١٣	يد٢ك١٣	-١٢,٣٧(٠,٧٢)
ك ١٢	ك ١١	ك ١٣	يد١ك١٣	١٠٧,٣٠(٣,٠٦)
ك ١٢	ك ١١	ك ١٣	يد٢ك١٣	-١٢٢,٤٥(٠,٦٥)
يد ك ١١	ك ١١	ك ١٣	ك ١٢	-١٠٤,٠١(١,٩٠)
يد ك ١١	ك ١١	ك ١٣	يد١ك١٣	٣,٢٩(٣,٥٩)

تابع جدول ٣٥

جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
يد ك ١١	ك ١١	ك ١٣	يد٢ك١٣	١٣٣,٥٤(١,٩٤)
ك ١١	ك ١٢	ك ١٣	يد١ك١٣	-٩٥,١٤(٣,١٩)
ك ١١	ك ١٢	ك ١٣	يد٢ك١٣	١٣٠,٨٢(٠,٥٣)
يد١ك١٢	ك ١٢	ك ١٣	ك١١	-١٠٦,٤٦(٢,٠٨)
يد١ك١٢	ك١٢	ك ١٣	يد١ك١٣	١٥٨,٤٠(٣,٧٩)
يد١ك١٢	ك١٢	ك ١٣	يد٢ك١٣	٢٤,٣٦(٢,١٤)
يد٢ك١٢	ك١٢	ك١٣	ك ١١	١٠٤,٥٨(٢,٦٥)
يد٢ك١٢	ك١٢	ك١٣	يد١ك١٣	٩,٤٣(٤,١٥)
يد٢ك١٢	ك١٢	ك١٣	يد٢ك١٣	-١٢٤,٦١(٢,٦٧)
ن ٦	ك١٤	ك ١٥	ك ١٦	-٨٨,٥٤(٠,٣٣)
ن ٦	ك١٤	ك ١٥	ك ١٧	-١٥٨,٣٣(٠,٢٦)
ن ٦	ك١٤	ك ١٥	يدك١٥	٦٣,٣١(١,٨٦)
يد١ك١٤	ك١٤	ك ١٥	ك ١٦	٣١,٤٥(١,٦٦)
يد١ك١٤	ك١٤	ك ١٥	ك ١٧	-٣٨,٣٥(١,٦٥)
يد١ك١٤	ك١٤	ك ١٥	يد ك١٥	-١٧٦,٧١(٢,٤٥)
يد٢ك١٤	ك١٤	ك ١٥	ك ١٦	١٥٣,٥١(١,٤٢)
يد٢ك١٤	ك١٤	ك ١٥	ك ١٧	٨٣,٧١(١,٤٤)
يد٢ك١٤	ك١٤	ك ١٥	يد ك١٥	-٥٤,٦٥(٢,٣٣)
ك١٤	ك١٥	ك ١٦	ك ١٧	-١٠٨,٠٥(٠,٣٢)
ك١٤	ك١٥	ك ١٦	يد١ك ١٦	-٠,٢٠(١,٧٣)
ك١٤	ك١٥	ك ١٦	يد٢ك١٦	١٤٤,٤٦(٢,٤٢)
ك١٧	ك١٥	ك ١٦	يد١ك ١٦	١٠٧,٨٥(١,٧٢)
ك١٧	ك١٥	ك ١٦	يد٢ك١٦	-١٠٧,٤٩(٢,٤٣)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٦	ك ١٧	١٠٣,٣٤(٢,٠٥)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٦	يد١ك١٦	-١٤٨,٨١(٢,٦٥)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٦	يد٢ك١٦	-٤,١٥(٣,١٩)
ك١٤	ك١٥	ك ١٧	ك ١٦	١٠٩,٢٤(٠,٣٢)
ك١٤	ك١٥	ك ١٧	يد١ك١٧	-١٤٣,٤٦(٢,٠٦)
ك١٤	ك١٥	ك ١٧	يد٢ك١٧	-٠,٢٨(٢,٠٦)
ك١٦	ك١٥	ك ١٧	يد١ك١٧	١٠٧,٣٠(٢,٠٨)
ك١٦	ك١٥	ك ١٧	يد٢ك١٧	-١٠٩,٥٢(٢,٠٤)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٧	ك١٦	-١١٤,١٩(٢,٠٠)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٧	يد١ك١٧	-٦,٨٩(٢,٨٨)
يدك١٥	ك١٥	ك ١٧	يد١ك١٧	١٣٦,٢٩(٢,٨٣)
ك ١٥	ك ١٦	ك ١٧	يد١ك١٧	-١٠٨,٧٠(٢,١٢)
ك ١٥	ك ١٦	ك ١٧	يد٢ك١٧	١٠٧,٤٢(٢,٠٨)
يد١ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	ك ١٥	-١٠٠,٢٤(١,٨٨)
يد١ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	يد١ك١٧	١٥١,٠٦(٢,٨١)

تابع جدول ٣٥

جدول زوايا الالتواء بالدرجات

ذرة ١	ذرة ٢	ذرة ٣	ذرة ٤	الزاوية
يد١ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	يد٢ك١٧	٧,١٨(٢,٨٠)
يد٢ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	ك ١٥	١١١,٧٩(٢,٥٥)
يد٢ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	يد١ك١٧	٣,٠٩(٣,٣٢)
يد٢ك١٦	ك ١٦	ك ١٧	يد٢ك١٧	-١٤٠,٧٩(٣,٢٧)

جدول ٣٦

المتغيرات الموضعية و حويداتها القياسية التقديرية

الذرة	س	ص	ع	ب(أ ٢)
أ ٥	٠,٩٠٧٥(٢)	-٠,٣٩٩٠(٢)	٠,٨٨٧٨(١)	٣,٢٢(٤)
أ ٧	٠,٧١٣٥(٢)	٠,١٢٨٠(٣)	٠,٨٥٦٩(١)	٣,٩٣(٥)
ن ١	٠,٩٢٠٢(٢)	-٠,٠٢١٥(٣)	١,١٣٤٨(١)	٢,٦٠(٥)
ن ٢	١,٠٣٩٨(٢)	-٠,١٩٩٧(٣)	١,٢٣٦٤(٢)	٣,٣٥(٥)
ن ٣	٠,٩٧٧١(٢)	-٠,٢٨٥٧(٣)	١,٠٨٥١(١)	٢,٥٨(٥)
ن ٦	٠,٨٠٧٠(٢)	-٠,١٣٧١(٣)	٠,٨٧٤٣(١)	٢,٦١(٥)
ن ٨	٠,٨١٢٨(٢)	٠,٠٧٢٩(٣)	٠,٩٩٤١(٢)	٢,٦١(٥)
ك ٢	٠,٩٨٠٣(٢)	-٠,١٧٢٠(٤)	١,١٥٤٩(٢)	٢,٥٨(٥)
ك ٤	٠,٩٠٩٦(٢)	-٠,٢٠٦١(٣)	١,٠١٣١(٢)	٢,٤٤(٥)
ك ٥	٠,٨٧٨٥(٢)	-٠,٢٥٩٠(٤)	٠,٩٢٤٣(٢)	٢,٥٣(٥)
ك ٧	٠,٧٧٣٠(٢)	٠,٠٢٨٧(٤)	٠,٩٠٦١(٢)	٢,٨٦(٦)
ك ٩	٠,٨٧٨١(٢)	-٠,٠٤٦٨(٣)	١,٠٤٧٣(٢)	٢,٣٣(٥)
ك ١٠	٠,٧٩٣٢(٢)	٠,٢٥٦٩(٤)	١,٠٢٦٨(٢)	٣,٢٠(٦)
ك ١١	٠,٧٠١٠(٣)	٠,٢٦٦٠(٥)	١,٠٨٢٧(٢)	٤,٢٢(٧)
ك ١٢	٠,٥٨٤٨(٣)	٠,٢٦٢١(٦)	١,٠٣٦٣(٣)	٦,٢(١)
ك ١٣	٠,٦٣٤٢(٣)	٠,٤٣٧٠(٥)	١,٠٧٤٣(٣)	٧,٠(١)
ك ١٤	٠,٧٥٩٢(٢)	-٠,١٨٢٧(٤)	٠,٧٨١٢(٢)	٣,٠٤(٦)
ك ١٥	٠,٦٤٤٣(٢)	-٠,٢٥٤٤(٤)	٠,٧٧٧٣(٢)	٣,٧٣(٧)
ك ١٦	٠,٦٢٧٥(٣)	٠,٤٥١٨(٥)	٠,٧٨٩١(٣)	٥,٤٩(٩)
ك ١٧	٠,٥٩٨٥(٣)	-٠,٣٦٦٤(٥)	٠,٦٩٨٣(٣)	٥,٣٦(٩)

يبين الجدول الذرات الايزوتروبية المنقاه فى صورة متغير الازاحة الايزوتروبية المكافىء المحدد كالاتى :

```
( 4/3) + (a2+B (1,1) + b2 + B (2,2) + c2+B(3,3)+ ab
(cos gamma)+ B(1,2)+ac(cos beta)+B(1,3)+bc(cos alpha)
 + B(2,3)
```