



Al-Mustansiriyah

Journal of Science

ISSN 1814 - 635X

Vol. 17, No. 1, 2006



Issued by College of Science - Mustansiriyah University

AL- MUSTANSIRYA JOURNAL OF SCIENCE

Head Editor

Prof. Dr. Ihsan S. Damirdagh

General Editor

Prof. Dr. Redha I. AL-Bayati

Editorial Board

Dr. Subhi Kemal Hassun
Dr. Najat Jawad AL - Obaidi
Dr. Kais J amel Laif
Dr. Inaam A- Malloki
Dr. Naima muhsin
Dr. Ekbal kider al jofine

Member
Member
Member
Member
Member
Member

INSTRUCTION FOR AUTHORS

1. The journal accepts manuscripts in Arabic and English languages. Which had not been published before.
2. Author (s) has to introduce an application requesting publication of his manuscript in the journal. Four copies (one original) of the manuscript should be submitted. Should be printed by on the computer by lasser printer and re produced on A4 white paper in three coppice with flopy disc should be also submitted.
3. The title of the manuscript together with the name and address of the author (s) should typed on a separate sheet in both Arabic and English. Only manuscript,s title to be typed again with the manuscript.
4. For manuscripts written in English, full name (S) of author (s) and only first letters of the words (except prepositions and auxiliaries) forming title of the manuscript should be written in capital letters. Author (s) address (es) to be written in small letters.
5. Both Arabic and English abstracts are required for each manuscript. They should be typed on two separate sheets (not more then 250 words each).
6. Figures and illustrations should be drawn using black China ink on tracing papers. Two photocopies (Plus original) of each diagram should be submitted. Captions to figures should be written on separate papers. The same information should not be repeated in tables unless it is necessary and required in the discussion.
7. References should be denoted by a number between two bracket on the same level of the line and directly at the end of the sentence. A list of references should be given on a separate sheet of paper, following the intemational style for names and abbreviations of journals.
8. Whenever possible, research papers should follow this pattem: INTRODUCTION, EXPERIMENTAL (MATERIALS AND METHODS), RESULTS, DISCUSSION and REFERENCES. All written in capital

letters at the middle of the page. Without numbers or underneath lines.

9. The following pattern should be followed upon writing the references on the reference sheet: Sumame (s), initials of author (s), title of the paper, name or abbreviation of the journal, volume, number, pages and (Year). For books give the author(s) name(s), the title, edition, pages, publisher, place of publication and (Year).
10. A publication fees in the amount of ID. 15 thousand is charged upon a Reciepet of the paper and upon the acceptance for publication for their ID. 15 thousand should be paid for the editorial board.

CONTENTS

ITEM	Page No.
Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge - transfer and ion - pair complexes with some Π-acceptors and acid dyes Alaa K., Mohammed H. Yahya Y.Z.Farid	1-27
Physicochemical characterization of clotrimazole- β-cyclodextrine Bazigha Kadum, Hiba Muaffak, Faisal Taufiq	28-41
Synthesis of substituted 1,3-oxazepine-4,7-diones via Schiff bases (Part 1) F.A Hussein, Muhanned J. ,Maysoon T.	42-52
Estimation Of Creatine Kinase activity Zahra`A Salim Muhsin	53-63
PROFLING OF LITHIUM AND POTASSIUM INTO SILICON Ali M. MOUSA	64-72
Theoretical Calculations Of Gamma-GammaAngular Correlation Iman Tarik Al-Alawy	73-87
The Real Simple Lie Algebra $sl(2,R)$:an Approximate Lie algebra for Abel's Equation Qusay S.Abdul-Aziz	88-93

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge - transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K. Mohammed

College of Education (Ibn-Al-Haitham),
Chemistry Dept. University of Baghdad.

Mohammed H. Abdul Latif

College of Education (Ibn-Al-Haitham),
Chemistry Dept. University of Baghdad.

Yahya Y.Z.Farid

College of medicine, Chemistry Dept and
Biochemistry. Al-Nahrain University

Address Correspondence to **Dr. Alaa K. Mohammed.

E-mail:Alaakareem@maktoob.com.

تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

تاريخ تقديم البحث: 2005/1/28

Abstract:

Tow simple, accurate and sensitive spectrophotometric methods are proposed for the determination of imipramine-HCl in pure form and in pharmaceutical tablets. The first method is based on the formation of charge-transfer complexes between the drug base as an n-donor and 2,3-dichloro-5, 6-dicyano-p-benzoquinone (DDQ), p-chloranilic acid (p-CA) and p-chloranil (p-CL) as Π -acceptors. The colored products are measured spectrophotometrically at 450, 500 and 540nm for DDQ, p-CA and p-CL, respectively.

Beer's law is obeyed in a concentration range of 8-70 $\mu\text{g/ml}$ for the complex with DDQ and 10-50 $\mu\text{g/ml}$ for both complexes with p-CA and p-CL. The molar absorptivities are found to be 3.945×10^3 , 1.67×10^3 and $0.323 \times 10^3 \text{ l.mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ for DDQ, p-CA and p-CL, respectively.

The second method is based on the extraction of the formed ion - association complexes of the drug with either thymol blue or bromophenol blue at pH values 4.16 and 3.60, respectively.

The products exhibit absorption maxima at 415 and 410nm for thymol blue and bromophenol blue, respectively. Beer's law is obeyed in a concentration range of 50-250 and 20-60 $\mu\text{g/ml}$ with molar absorptivities of 0.7795×10^3 and $1.742 \times 10^3 \text{ l.mol}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ for thymol blue and bromophenol blue, respectively.

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

الخلاصة:

تم عرض طريقتين طيفيتين ذات دقة ، وسرعة وحساسية عالية لتقدير الامبرامين-هيدروكلورايد في المستحضرات الدوائية. تستند الطريقة الاولى على تكوين معقدات انتقال الشحنة بين الدواء ذي الصيغة القاعدية كمانح للالكترونات وبين المركبات 2، 3-دايكلورو-5، 6-داي سيانو-بارا- بنزوكوينون ، بارا- حامض الكلورانيك وبارا- كلورانيك كمستقبلات باي (Π) للالكترونات. أظهرت المركبات امتصاص اعظم عند طول موجي قدرة (450 ، 500 و 540 نانوميتر) مع مطاوعة لقانون بير ضمن مدى التراكيز (8 - 70) مايكروغرام /مل لمعقد 2، 3-دايكلورو-5، 6-داي سيانو-بارا- بنزوكوينون و (50-10) مايكروغرام/مل لمعقد بارا- حامض الكلورانيك وبارا- كلورانيك. كانت قيم الامتصاص المولاري 945، 3×10^3 ، 79 ، 1×10^3 و 332. لتر.مول⁻¹ سم⁻¹ لمعقدات 2، 3 - دايكلورو-5، 6-داي سيانو-بارا- بنزوكوينون ، بارا- حامض الكلورانيك وبارا- كلورانيك على التوالي.

الطريقة الثانية تستند على استخلاص معقدات الزوج الايوني للدواء اما مع صبغة الثايمول الازرق او البروموفينول الازرق عند دالة حامضية مقدارها 3 و 4، 16. تظهر المعقدات امتصاص اعظم عند طول موجي قدرة 415 نانوميتر لمعقد الثايمول الازرق و 410 نانوميتر لمعقد البروموفينول الازرق مع مطاوعة لقانون بير ضمن مدى التراكيز (50-250) ، (20-60) مايكروغرام/مل مع امتصاصية مولارية مقدارها 779، 1×10^3 و 742 ، 1×10^3 لتر.مول⁻¹ سم⁻¹ لمعقد الثايمول الازرق و البروموفينول الازرق على التوالي.

Introduction:

Imipramine -HCl is chemically 3-(10,11-dihydro-5h-dibenzo [b, f] azepin-5-yl)-N, N-dimethylpropan-1-amine hydrochloride, is a tricyclic antidepressants, a group of drugs widely used for treating endogenous depression with potent activity and outstanding effective in some cases of reactive depression ⁽¹⁾.

Several procedures have been reported in the literature for the analysis of imipramine-HCl. These methods are spectrophotometry ⁽²⁻⁶⁾, high-performance liquid chromatography ⁽⁷⁻⁹⁾, gas chromatography ⁽¹⁰⁻¹¹⁾ capillary zone electrophoresis ⁽¹²⁾ and flow -injection with different types of detection system ⁽¹³⁻¹⁴⁾.

Π -acceptors such as 2,3-dichloro-5,6-dicyano-p-benzoquinone (DDQ), 7,7,8,8-tetracyanoquino-dimethane (TCNQ), tetracyano-ethylene (TCNE), 2,4,7-trinitrofluoren-9-one (TNF), 2,3,5,6-tetrachloro-p-benzoquinone (p-chloranil) and 2,5-dihydroxy-3,6-dichloro-p-benzoquinone (p-chloranilic acid) are known to yield charge- transfer complexes and radical ions with a variety of electron donors such as amines^(15,16), vitamin A⁽¹⁷⁾, alkaloids⁽¹⁸⁾ and some cephalosporin derivatives⁽¹⁹⁾. On the other hand, ion -pair extraction spectrophotometry has been received considerable attention for quantitative estimation of pharmaceutical compounds. Bromophenol blue (BPB), bromothymol blue (BTP), bromocresol green (BCG), methylene blue (MB), thymol blue (TB) and light Green FCF has been reported to form an ion-pair complexes, thus offering simple and rapid spectrophotometric determination of a number of organic pharmaceutical compounds⁽²⁰⁻²⁵⁾.

This paper described two newly developed procedures for the determination of imipramine HCl. The first method is based on charge-transfer reaction with DDQ, p-CA and p-CL by exploiting its basic nature and electron- donating property. The other method is based on the complexation of the drug with TB and BPB at pH 4.1 and 3.6 respectively, to form ion-pair complexes. The methods are more simple, sensitive and applied successfully in different tableted dosage with good accuracy and precision.

Experimental:

Apparatus:

Absorbance measurements were carried out using a Beckman DU-65 single beam spectrophotometer with 10mm glass cells. The pH measurements were made with a Philips model a PW-9421 pH- meter.

Materials and Reagents:

All chemicals used were of analytical reagent grade:

l-Imipramine-hydrochloride standard powder material (purity 99.7%) was provided from the state company for drug industries and medical appliances Samara-Iraq (SDI).

Tofranil tablets (labeled to contain 25mg imipramine-HCl) were provided from (Novartis-Switzerland) and (Novartis-Cairo).

Tensonil tablets (labeled to contain 25mg imipramine -HCl) were provided from (Panther-London).

Imipramine-HCl tablets (labeled to contain 25mg imipramine) were provided from (Amin-pharma-IRAN).

2-Thymol blue, 1×10^{-3} M solution prepared by dissolving 46.7mg thymol blue in 100ml 0.1NaOH solution.

**Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge
- transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes**

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

3-Bromophenol blue, 1×10^{-3} M solution (prepared by dissolving 67.0 mg bromophenol blue in 5 ml methanol and completed to 100ml by distilled water).

4-DDQ solution, 0.1% in acetonitrile. The solution was prepared fresh daily.

5-p-CA solution, 0.125%w/v in acetonitrile.

6-p-CL solution, 2×10^{-3} M prepared by dissolving 0.0122 gm in 25ml of acetonitrile by using a volumetric flask.

7-Phthalate buffer (pH =3.60). To 250ml of 0.2M potassium hydrogen phthalate, 11.90ml of 0.2 M HCl was added, and then the solution was diluted to a final volume 1000ml with water⁽²⁶⁾.

Standard stock solutions:

1-Solution for procedure A (charge-transfer complexation):

One mg/ml standard solution of imipramine was prepared by dissolving 25mg of imipramine -HCl in 8-ml of methanol, then the solution was rendered distinctly alkaline (pH=9.0) by a drop wise of 0.2N sodium hydroxide. The solution was transferred into a separating funnel and the drug base extracted with four 5-ml portions of chloroform. The mixed chloroform extracts was filtered through a filter paper containing a small amount of anhydrous sodium sulphate into a 25 ml volumetric flask and diluted to volume with chloroform.

2-Solution for procedure B (Ion-Pair formation):

Half mg/ml standard solution of imipramine was prepared by dissolving 25mg of imipramine -HCl in 50ml of methanol by using volumetric flask.

General analytical procedures and calibration graphs:

Procedure A (Charge-transfer complexation)⁽²⁷⁾:

1-Method using DDQ:

Aliquot volumes of the standard stock solution-containing (0.008-0.10mg) drug were transferred into a 5-ml volumetric flask, 0.5 ml of the DDQ solution was added, and the mixture was allowed to stand 25 min at room temperature ($25 \pm 2^\circ\text{C}$), and then diluted to volume with acetonitrile. The absorbance of the resulting solutions was measured at the wavelength of maximum absorption (450nm) against reagent blank treated similarly (Table I).

2-Method using p-CA:

Aliquot volumes of the standard stock solution-containing (0.01-0.07mg) drug were transferred into a 5-ml volumetric flask. One ml of the p-CA solution was added, and then diluted to volume with acetonitrile. The absorbance of the resulting solutions was measured at the wavelength of maximum absorption (500nm) against reagent blank treated similarly (Table 1).

3-Method using p-CL:

Aliquot volumes of the standard stock solution-containing (0.01-0.07mg) drug were transferred into a 5-ml volumetric flask. 0.5 ml of the p-CL solution and two ml of the acetonitrile was added and the reactions were allowed to proceed for 10min at 60C⁰ in thermo stated water bath. The mixture was cooled and then diluted to volume with acetonitrile. The absorbance of the resulting solutions was measured at the wavelength of maximum absorption (540nm) against reagent blank treated similarly (Table1).

Table (1):Optimum conditions for the colour development of imipramine-HCl using charge –transfer complexation.

Item	Imipramine-HCl		
	DDQ	p-CA	p-CL
Conc. range of the drug (mg/ml)	0.008-0.100	0.010-0.070	0.010-0.070
Conc. of acceptor (% w/v) or molar	0.5 ml (0.1%)	1ml (0.125%)	0.5ml (2x10 ⁻³ M)
Reaction time (min)	25 min.	At once	10-min. warming
$\lambda_{\max}$ (nm)	450	500	540
Stability of the complex	More than 2hr	More than 2hr	More than 2hr
Dissolving solvent	Methanol	Methanol	Methanol
Diluting solvent	Acetonitrile	Acetonitrile	Acetonitrile

Procedure B (Ion-pair formation) ⁽²⁸⁾ :

1-Method using thymol blue:

One ml from each solution-containing (0.05-0.40mg) drug was transferred into 25-ml separating funnel. The solution was then treated with 1-ml of thymol blue solution. Five ml phthalate buffer (pH=3.60) was added and the complex was extracted for 1min with two portion of 5-ml chloroform. The organic layer was passed through anhydrous sodium sulphate into a 10-ml volumetric flask, then the volume was completed with chloroform and the absorbance was measured at the wavelength of maximum absorption (415nm) against reagent blank treated similarly (Table 2).

2-Method using bromophenol blue:

One ml from each solution-containing (0.02-0.14mg) drug was transferred into 25-ml separating funnel. The solution was then treated with 1-ml of bromophenol blue solution. Five ml phthalate buffer (pH=3.60) was added and the complex was extracted for 1min with two portion of 5-ml of chloroform. The organic layer was passed through anhydrous sodium sulphate into a 10-ml volumetric flask, then the volume was completed with chloroform and the absorbance was measured at the wavelength of maximum absorption (410nm) against reagent blank treated similarly (Table 2).

Table (2):Optimum conditions for the colour development of imipramine-HCl using ion- pair formation.

Item	Imipramine-HCl	
	Thymol blue	Bromophenol blue
Conc. range of the drug (mg/ml)	0.005-0.40	0.020-0.140
Conc. of acceptor (% w/v) or molar	1ml (1×10^{-3} M)	1ml (1×10^{-3} M)
Reaction time (min)	At once	At once
$\lambda_{\max}$ (nm)	415	410
Stability of complex	More than 2hr	More than 2hr
Drug dissolving solvent	Methanol	Methanol
Diluting solvent	0.1M HCl	Water

Procedure for pharmaceutical formulations:

1-Applying method A:

Twenty tablets were washed from the colour coat using distilled water, dried, weighed and finely powdered. A quantity of powdered tablets equivalent to 25 mg imipramine-HCl was dissolved by shaking with 5-ml methanol, then render alkaline (pH=9.0) by a drop wise of 0.1N sodium hydroxide, then the solution filtered and the filtrate was transferred to a separator funnel, followed by 50-ml water. The base was extracted by shaking with four successive 5-ml portions of chloroform. The mixed chloroform extracts were pooled through a filter paper contains anhydrous sodium sulphate in 25-ml volumetric flask and diluted to volume with chloroform. The procedure was continued as described under procedure for calibration curves.

2-Applying method B:

Twenty tablets were washed from the colour coat using distilled water, dried, weighed and finely powdered. A quantity of powdered tablets equivalent to 25 mg imipramine-HCl was dissolved by shaking with 5-ml methanol and the volume was made to 50-ml with either 0.1M HCl for the procedure using thymol blue or distilled water for procedure using bromophenol blue. The solution was filtered and the procedure was continued as described under procedure for calibration curves.

Results and discussion:

Charge- Transfer Complexation:

Absorption spectra:

Imipramine-hydrochloride reacted with DDQ solution in acetonitrile solvent in alkaline medium to form an intense red brown colour complex, which exhibits two maximum bands at 450,550nm respectively (Fig 1). The absorption maximum at 450, having highest absorption intensity, was selected for the examination of the conditions for the determination of imipramine -HCl and construction of Beers plot. The predominant color with DDQ is from red-brown radical anion $DDQ^{\cdot -}$, which was probably formed by the dissociation of an original donor-acceptor(DA) complexation reaction between the drug, the n-donor(D), and DDQ, the π -acceptor(A), followed by the formation of DDQ radical anions^(18,28) according to scheme (1).

**Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge
- transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes**

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

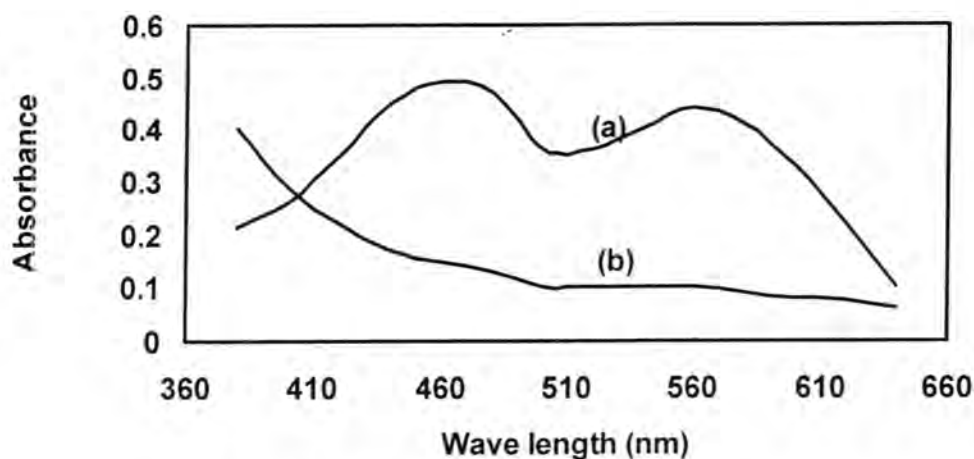
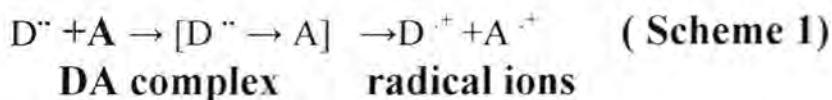


Fig (1) : Absorption spectra of :
(a) : 0.03 mg/ml imipramine ; 4.4×10^{-4} M DDQ at pH = 9.0
(b) : 4.4×10^{-4} M DDQ in acetonitrile (blank) .



The spectrum of chloranilic acid (p-CA) solution in acetonitrile solvent displayed a maximum absorption band (λ_{max}) at 430nm. Mixing the solutions of any of the investigated drug to a solution of p-CA in acetonitrile causes an immediate change of the yellowish-pink colour of the p-CA to an orange-brown. As a consequence, the absorption band of p-CA showed a bathchromic shift, λ_{max} at 500nm (Fig 2).

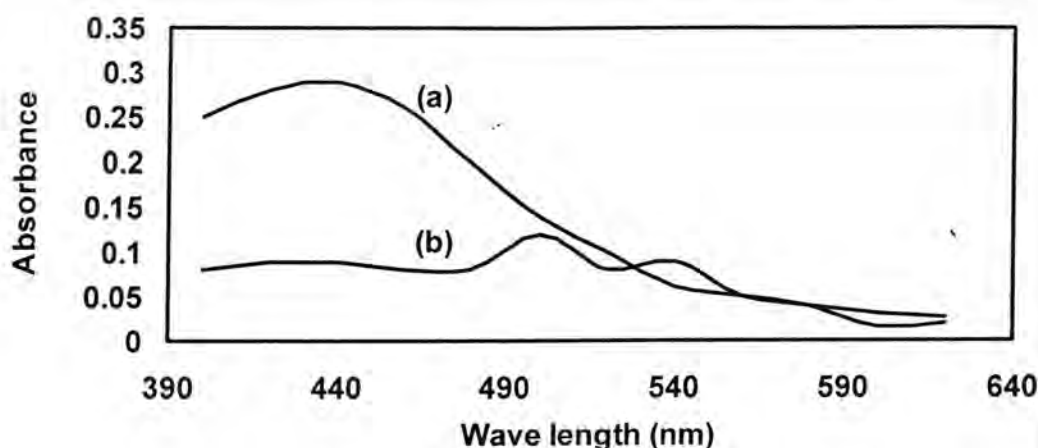


Fig (2) : Absorption spectra of :
 (a) : 0.02 mg/ml imipramine; 1.19×10^{-3} M p-CA at pH =9.0
 (b) : 1.19×10^{-3} M p- CA in acetonitrile (blank)

The band may be attributed to charge-transfer complex of the n- π type. This compound is supposed to be an intermediate molecular association complex, which produces the corresponding chloranilic-acid radical anion in acetonitrile solvent ^(29,30), which exhibits an absorption band at 510nm. On the other hand, the reaction of imipramine -HCl with halogenated quinones, p-chloranil (p-CL) solution results in the development of yellow colour of the p-CL to pail-yellow solution with a new characteristic band (bathochromic shift) at 540nm (Fig 3). The band may be attributed to the formation of a p-chloranil radical anion ^(27,28).

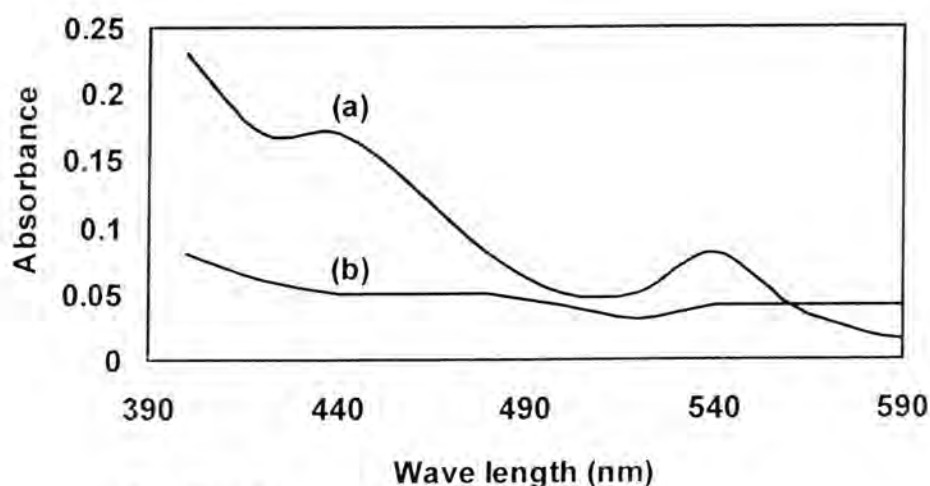


Fig (3) : Absorption spectra of :
 (a) : 0.04 mg/ml imipramine ; 2.0×10^{-4} M p-CL at pH = 9.0
 (b): 2.0×10^{-4} M p-CL in acetonitrile (blank)

Optimization of variables:

Effect of pH:

The influence of pH on the development of the coloured complex species between imipramine -HCl as n-donors and DDQ, p-CA and p-CL as Π -acceptor reagents was systematically investigated from pH 7.0 to 13.0. The pH being adjusted with few drops of 0.1M HCl and 0.1M NaOH.

(Fig 4); Shows that the absorbance increases and reaches a maximum value at pH=9.0. At pH values above 9.0 the absorbance decrease was probably due to the formation of a new species. Hence a pH of 9.0 was used in all the subsequent experimental work.

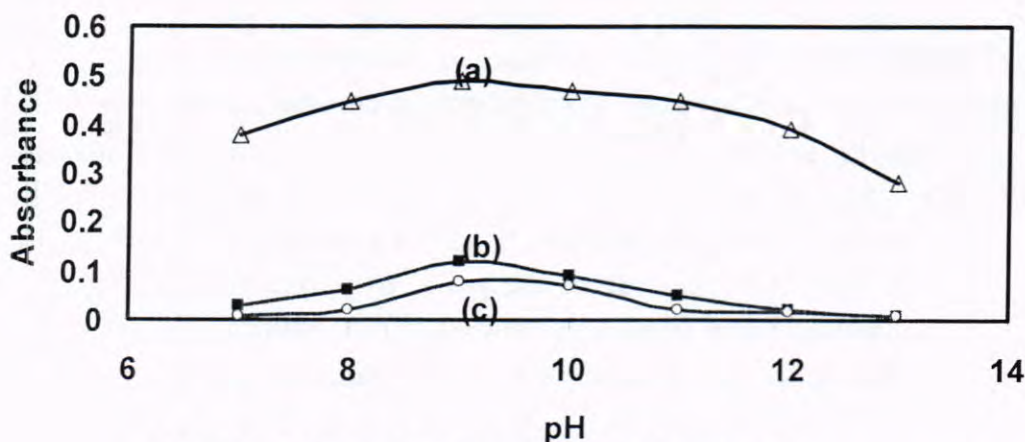


Fig (4) : Effect of pH on the absorbance of :

(a) : 0.03 mg/ml imipramine ; 4×10^{-4} M DDQ at 450 nm

(b) : 0.02 mg/ml imipramine ; 1.19×10^{-3} M p-CA at 510 nm

(c) : 0.04 mg/ml imipramine ; 2×10^{-4} p-CL at 540 nm.

Effect of amount of acceptors (Acceptors sensitivities):

The relative sensitivities of the three acceptors can be determined by comparing the molar absorptivities of the chromogen. When various volumes of DDQ, p-CA and p-CL were added to a fixed concentration of imipramine-HCl and absorbance were measured according to the standard procedure, it was observed that 0.5-ml of 0.1% of DDQ, 1-ml of 0.125% of p-CA and 0.5-ml of 2×10^{-3} M of p-CL were found to be sufficient for the production of maximum and reproducible color intensity (Fig 5).

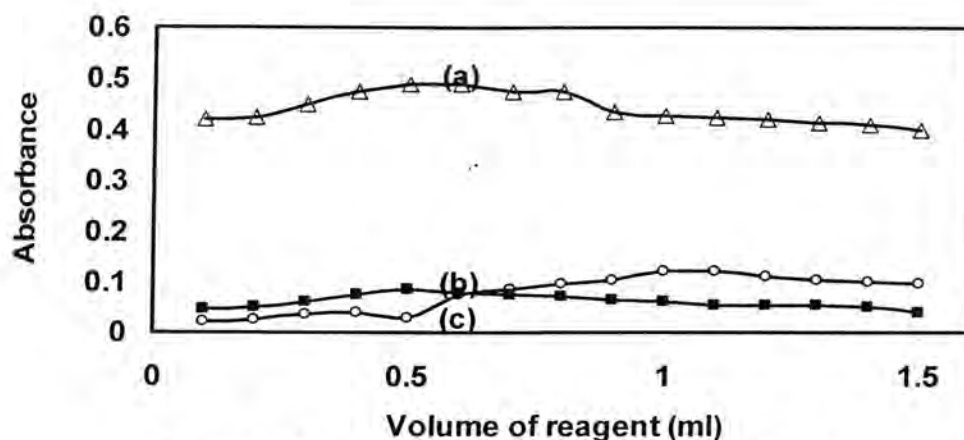


Fig (5): Effect of reagent volume on the absorbance of:

(a) : 0.03 mg/ml imipramine ; 4×10^{-4} M DDQ .

(b) : 0.02 mg/ml imipramine ; 1.19×10^{-3} M p-CA .

(c) : 0.04 mg/ml imipramine ; 2×10^{-4} M p-CL .

Effect of reaction time:

Although the colour intensity for the reaction of imipramine-HCl with DDQ was produced instantaneous, the colour maximum for the reaction was reached after 25 min. But the colour maximum was obtained at once in case of p-CA and needs heating at 60°C for 10 min in case of p-CL.

Calibration graph (Beer's law and sensitivity):

Under the experimental conditions described, standard calibration curves for imipramine-HCl with different Π -acceptor reagents were constructed by plotting absorbance versus concentration in the linearity range of; (8-70 $\mu\text{g/ml}$) with DDQ, (10-50 $\mu\text{g/ml}$) with p-CL, and (10-50 $\mu\text{g/ml}$) with p-CA respectively (Figures 6 - 8). The correlation coefficients, intercepts and slopes for the calibration data are calculated using the least squares method (Table 3).

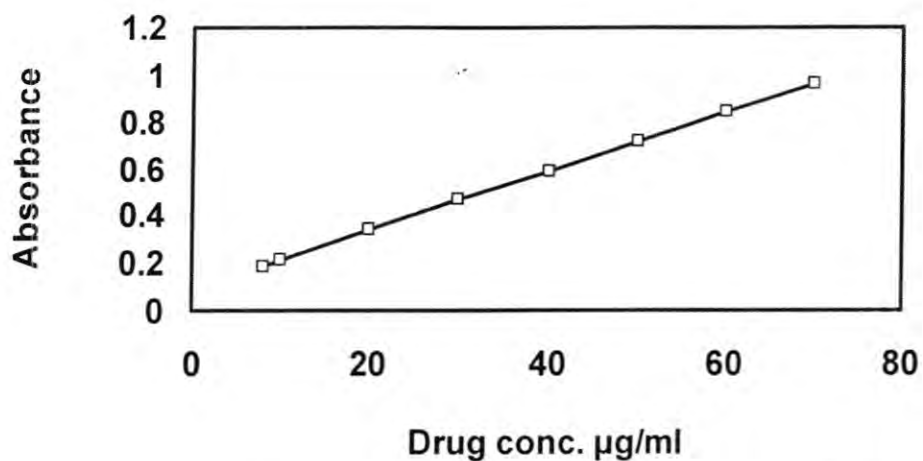


Fig (6) : Calibration graph of imipramine with 4.4×10^{-4} M DDQ at 450 (nm).

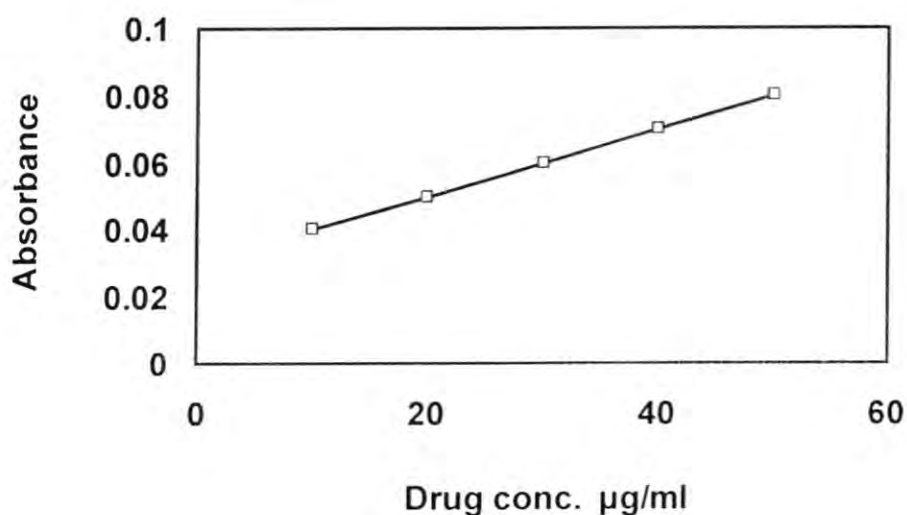


Fig (7) : Calibration graph of imipramine with 4×10^{-4} M p-CL at 540 (nm)

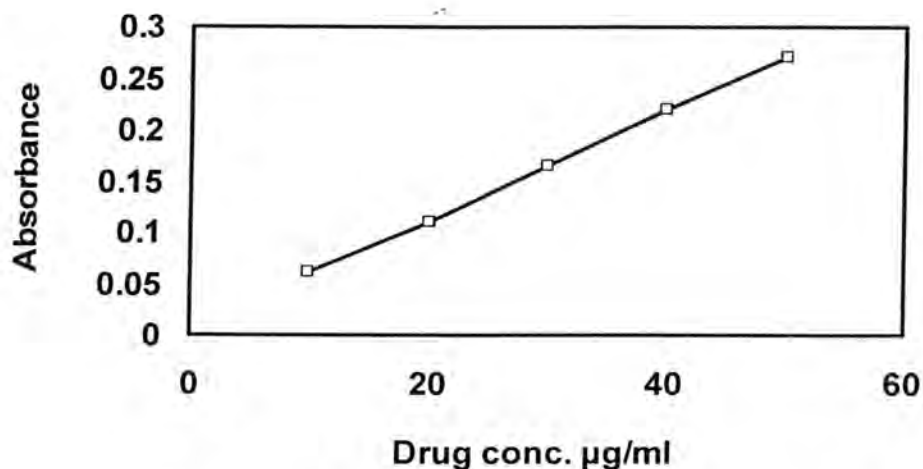


Fig (8) : Calibration graph of imipramine with 1.19×10^{-3} M p-CL at 500 (nm).

Table (3):Optical characteristics and statistical data of the regression equations for determination of imipramine-HCl using DDQ, p-CA and p-CL methods.

Parameters	Imipramine-HCl		
	DDQ	p-CA	p-CL
Linearity range of the drug (µg/ml)	8-70	10-50	10-50
Molar absorptivities ($\text{l. mol}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$)	3.945×10^3	1.679×10^3	0.332×10^3
Regression equation:			
Intercept (a)	0.0912	0.005	0.029
Slope (b)	0.01245	0.0053	0.00105
Correlation coefficient (r)	0.9996	0.9999	0.9941
Relative standard deviation (%)	0.53	0.51	0.27
Detection limit (d.l)	0.1117	0.012116	0.0383

$A = a + bc$, A=Absorbance, c=Concentration

Stoichiometric relationship:

Applying Job's method of continuous variation (Fig 9) and mole ratio procedure (Fig 10), the reaction stoichiometry of the charge-transfer complex between imipramine-HCl with DDQ, p-CA and p-CL was found to be 1:1.

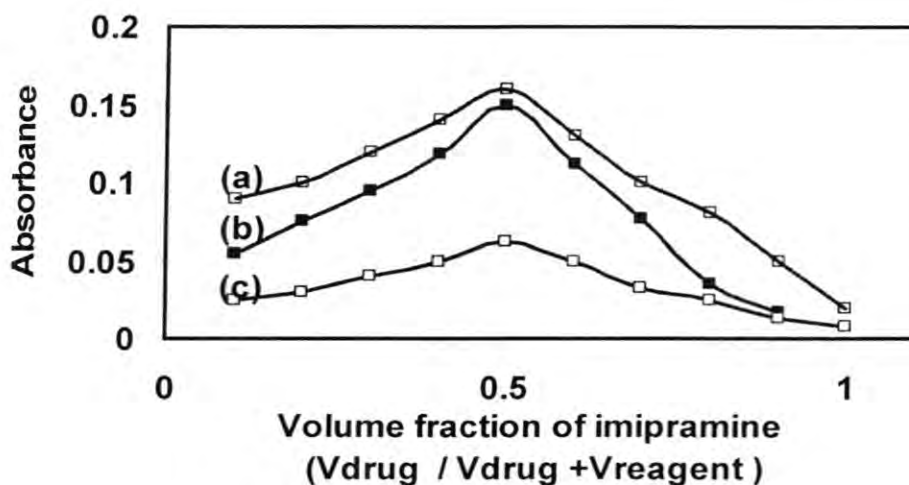


Fig (9) : Continuous variation plot of :
(a) : [DDQ] = [imipramine] = 6.31×10^{-5} M.
(b) : [p-CA] = [imipramine] = 1.26×10^{-4} M .
(c) : [p-CL] = [imipramine] = 1.26×10^{-4} M .

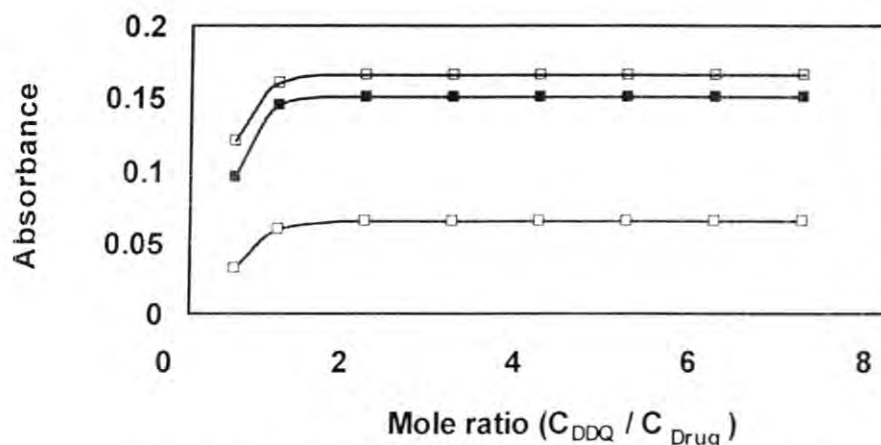
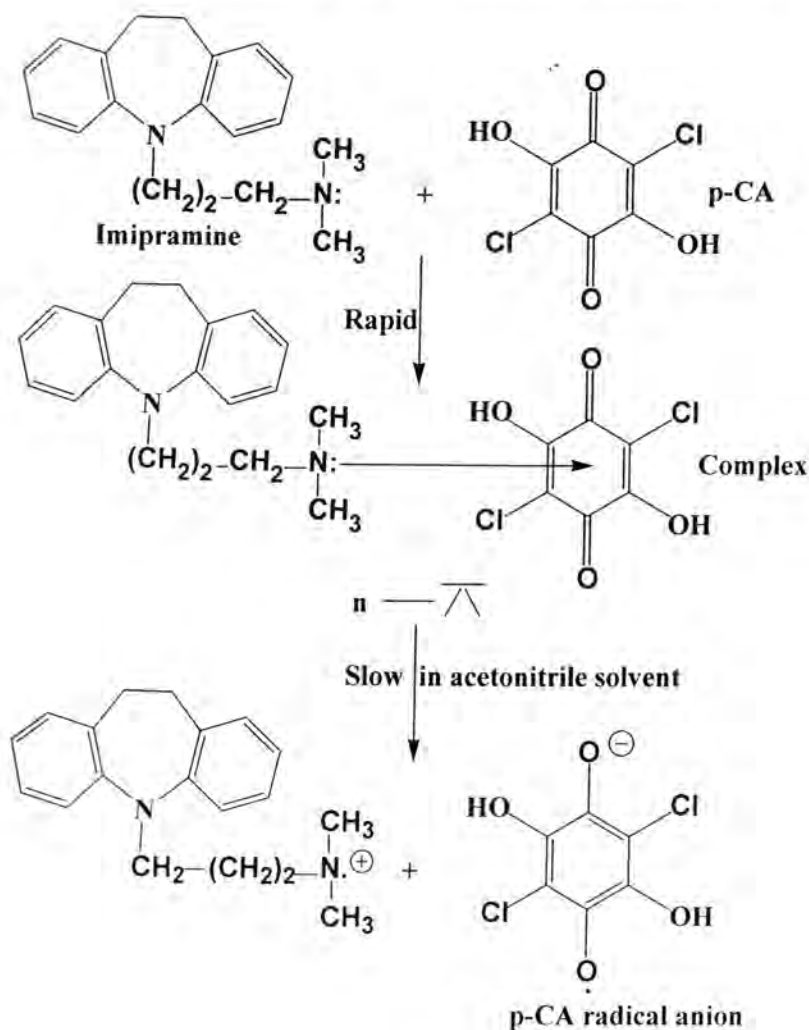


Fig (10): Mole ratio plot of 6.311×10^{-5} M imipramine with:
(a): DDQ solutions.
(b): p-CA solutions.
(c) : p-CL solutions.

The formation of the color reaction product can be represented, taking p-CA as an example, by the following scheme (2):



(Scheme – 2)

Ion-pair formation:

Absorption spectra:

Fig (11): shows the absorption spectra of the imipramine-thymol blue ion-pair complex and of the reagent blank in chloroform. An intense yellow colour was formed immediately, which become stable for at least two hour. The absorption maximum of the ion-pair in chloroform is at 410nm; in contrast to the reagent blank, which show negligible absorption over the range (380-540nm). Therefore, a wavelength of 410nm was used for the examination of the conditions for the determination of imipramine-HCl. On the other hand, a solution of imipramine and bromophenol blue exhibits an intense pale-yellow colour with maximum absorption band at 410nm,

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge - transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

whereas the blank has negligible absorbance in this region (Fig 12). Therefore, all absorbance measurements were made at 410nm.

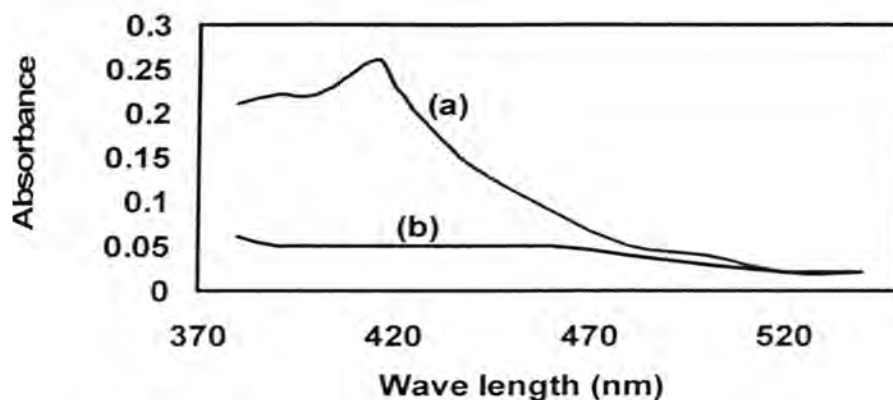


Fig (11) : Absorption spectra of :
(a) : 1.0×10^{-4} M thymol blue ; 0.1 mg/ml imipramine.
(b) : blank , solvent of extract (chloroform) .

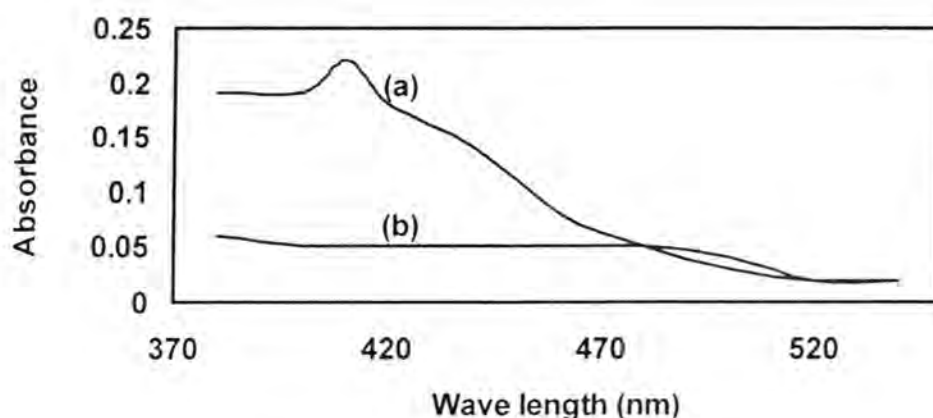


Fig (12) : Absorption spectra of :
(a): 1.0×10^{-4} M bromophenol blue; 0,04 mg/ml imipramine
(b) : blank , solvent of extract (chloroform) .

Optimization of variables:

Effect of pH :

One- milliliter of thymol blue and bromophenol blue solutions was mixed respectively with specified volume of imipramine –HCl solution, and then the pH was adjusted to a pH between 3.0-4.6 with hydrochloric acid – phthalate buffer solution (0.05M). Maximum and constant absorbances were obtained in the pH range 3.90-4.16 and 3.30-3.60 for thymol blue and bromophenol blue respectively (Fig 13). The absorbance decreased at pH

values above the optimum range, this may be attributed to the formation of a new ion –associated complex between thymol blue or bromophenol blue and hydroxyl anion in alkaline medium. Hence, a pH of 4.16 and 3.60 were used in all the subsequent experimental work the shape of the spectral and maximum position did not vary with pH, so it was concluded that only one complex was formed at this pH range.

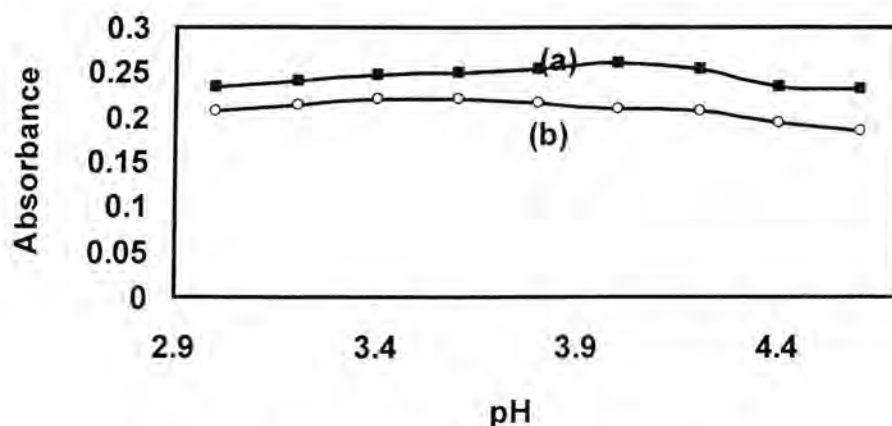


Fig (13) : Effect of pH on the absorbance of :
 (a): 1.0×10^{-4} M thymol blue ; 0.1 mg/ml imipramine .
 (b): 1.0×10^{-4} M bromophenol blue ; 0,04 mg/ml imipramine.

Effect of reaction time:

The optimum reaction time was determined by following the colour development at ambient temperature ($25\text{C}^0 \pm 2$). It was found that the reaction is instantaneous. Hence the product attained maximum and constant absorbance immediately after the imipramine-HCl has been reacted with thymol blue or bromophenol blue and the colour obtained remained strictly unaltered for 24 hr.

Calibration graphs (Beer's law and sensitivity):

Employing the conditions described under procedure, a linear calibration graph for imipramine with thymol blue (Fig 14) and bromophenol blue (Fig 15) was obtained. The correlation coefficient, intercept and slope for all calibration data are calculated by using least square methods (Table 4).

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

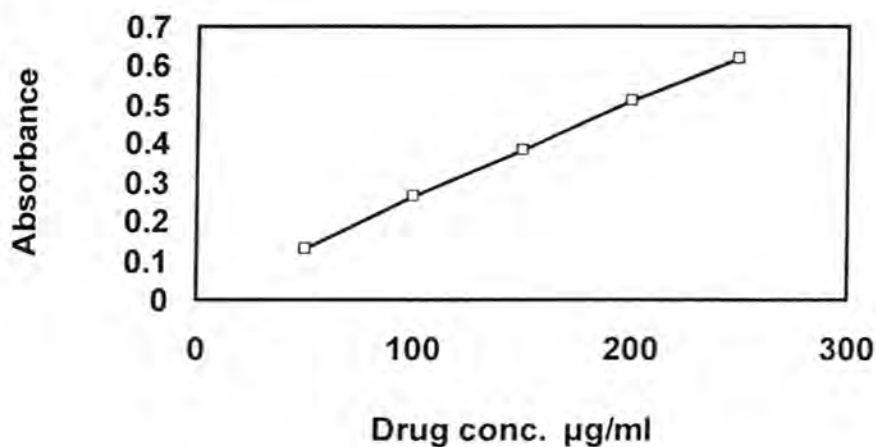


Fig (14) : Calibration graph of imipramine with 1×10^{-4} M thymol blue at 415 (nm).

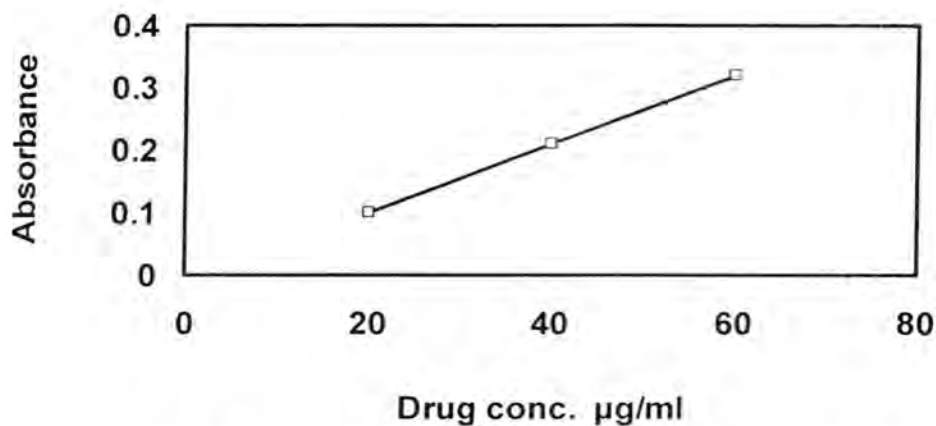


Fig (15) : Calibration graph of imipramine with 1×10^{-4} M bromophenol blue at 410 (nm).

Table (4): Optical characteristics and statistical data of the regression equations for determination of imipramine-HCl using ion-pair formation

Parameters	Imipramine-HCl	
	Thymol blue	Bromophenol blue
Linearity range of the drug ($\mu\text{g/ml}$)	50-250	20-60
Molar absorptivities ($\text{l.mol}^{-1}.\text{cm}^{-1}$)	0.7795×10^3	1.742×10^3
Regression equation		
Intercept (a)	0.11	0.0067
Slope (b)	0.00246	0.0055
Correlation coefficient (r)	0.9996	0.9999
Relative standard deviation (%)	0.51	0.51
Detection limit (D.L)	0.02967	0.02967

$A = a + bc$, A=Absorbance, c=Concentration

Stoichiometric relationship:

Applying Job's method of continuous variation (Fig 16) and mole ratio procedure (Fig 17), the reaction stoichiometry of the ion pair formation between imipramine-HCl with thymol blue and bromophenol blue was found to be 1:1. The formation of the complex can be represented taking thymol blue as an example by (scheme 3).

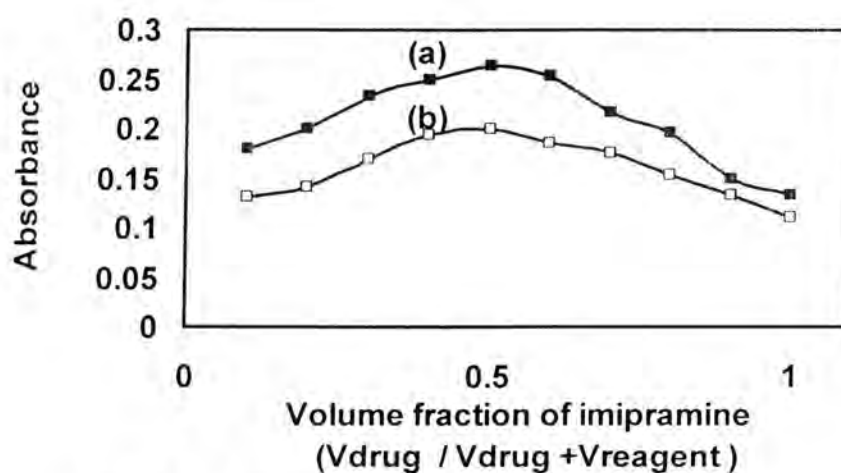


Fig (16) : Continuous variation plot of :

(a) : [Thymol blue] = [imipramine] = $3.15 \times 10^{-4} \text{ M}$.

(b) : [Bromophenol blue] = [imipramine] = $1.36 \times 10^{-4} \text{ M}$.

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

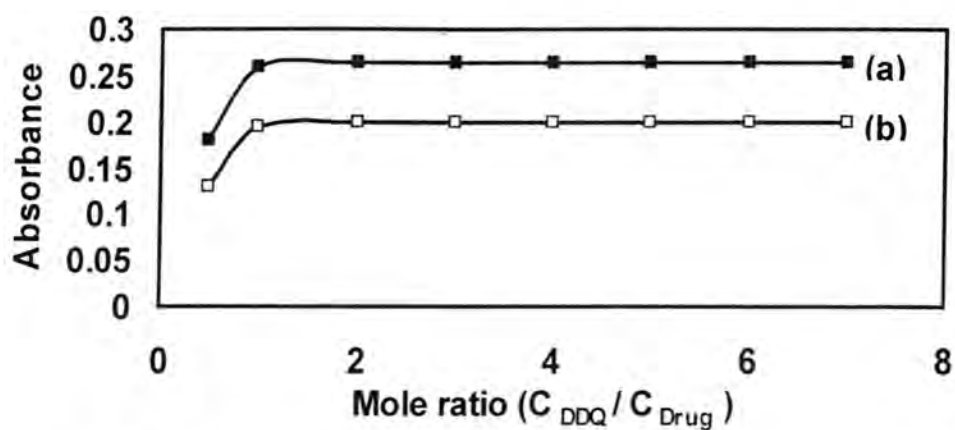
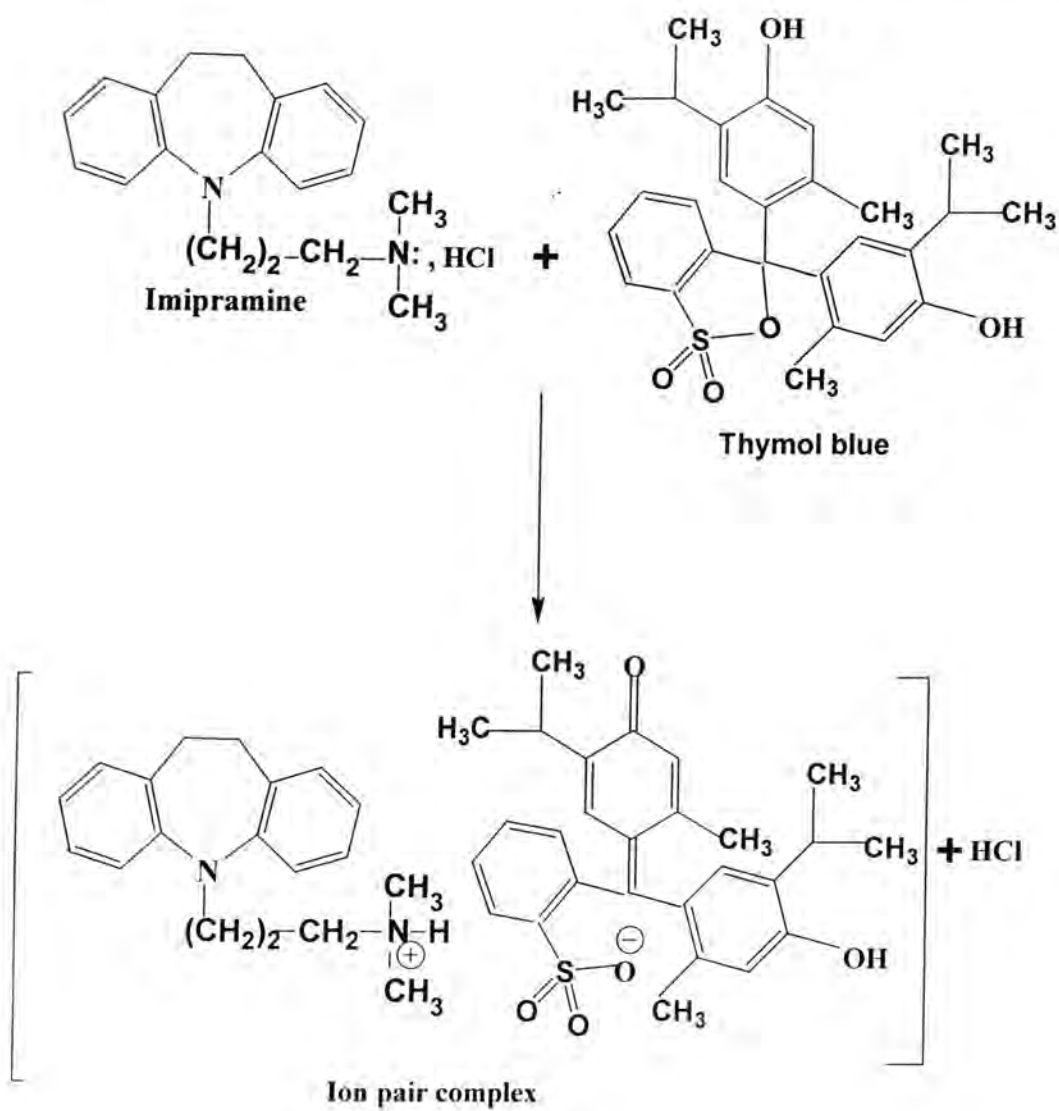


Fig (17): Mole ratio plot of 6.311×10^{-5} M imipramine with:
(a): Thymol blue solutions.
(b): Bromophenol blue solutions.



(Scheme 3)

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge - transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

Accuracy and precision:

The reproducibility and precision of the two proposed methods was tested by estimating three different concentrations of the cited drug within the Beers law limits. The analytical results are summarized in table (5).

Table (5): Test of precision and accuracy of the two methods for sample of pure imipramine-HCl.

Method	Amount of imipramine ($\mu\text{g/ml}$)		Recovery (%) n=3	R.S.D (%)
	Taken	Found		
DDQ	10	9.862	98.626	2.559
	15	14.842	98.947	1.984
	30	29.941	99.804	1.180
p-CA	15	14.905	99.371	6.520
	25	19.811	99.056	-
	30	29.622	98.742	2.760
p-CL	15	14.952	99.682	0.989
	20	19.523	97.619	-
	30	29.428	98.095	0.906
Thymol blue	70	69.512	99.303	2.457
	120	119.105	99.254	1.801
	170	169.512	99.713	1.044
Bromophenol Blue	30	29.563	99.545	3.511
	40	39.745	99.363	2.109
	50	49.927	99.854	1.668

R.S.D=Relative standard deviation

Analytical applications:

The applicability of the two methods to the assay of simple dosage form was examined by analyzing five types of pharmaceutical marked tablets containing imipramine-HCl; the results are summarized in table (6-7).

Table (6): Spectrophotometric determination of imipramine-HCl in pharmaceutical formation using charge- transfer methods.

Sample	wt.of tablet mg	Labeled amount mg	Method	Amount taken $\mu\text{g/ml}$	Amount found $\mu\text{g/ml}$	Recovery (%) n=3	R.S. (%)
Tofranil Switzer-land	99.0	25	DDQ	25	24.64	99.56	1.12
				50	49.05	98.11	0.63
			P-CA	25	24.71	98.86	6.75
				40	39.43	98.58	2.55
			P-CL	20	19.52	97.61	-
				40	38.57	96.42	-
Tensonil-25 England	104.90	25	DDQ	25	24.47	97.91	2.25
				50	48.89	97.79	1.04
			P-CA	25	24.33	97.35	4.08
				40	39.05	97.64	2.58
			P-CL	20	19.52	97.61	-
				40	38.57	96.42	-
Tofranil- Cairo	73.30	25	DDQ	25	24.31	97.27	2.96
				50	48.57	97.14	1.28
			P-CA	25	23.96	95.84	3.38
				40	38.67	96.69	-
			P-CL	25	23.33	93.33	10.14
				50	48.09	96.19	8.83
Imipramine- Iran	89.0	25	DDQ	25	24.15	96.63	2.13
				50	48.41	96.82	0.78
			P-CA	25	23.58	94.33	-
				40	38.30	95.75	4.02
			P-CL	25	21.42	85.71	8.60
				50	46.19	92.38	10.72

Spectrophotometric determination of imipramine-HCl by the formation of charge - transfer and ion - pair complexes with some Π -acceptors and acid dyes

Alaa K., Mohammed H., Yahya Y.Z.

Table (7): Spectrophotometric determination of imipramine-HCl in pharmaceutical formation using ion-pair methods.

Sample	Wt.of tablet mg	Labeled amount mg	Method	Amount taken $\mu\text{g/ml}$	Amount found $\mu\text{g/ml}$	Recovery (%) n=3	R.S.D (%)
Tofranil Switzerland	99.0	25	Thymol-blue	75	74.39	99.18	2.72
				125	123.98	99.18	1.73
			Bromophenol-blue	25	24.84	99.38	-
				50	49.58	99.16	2.05
Tensonil-25 England	104.90	25	Thymol-blue	75	73.57	98.10	2.32
				125	123.17	98.53	1.74
			Bromophenol-blue	25	24.48	97.93	3.49
				50	49.21	98.43	2.07
Tofranil Cairo	73.30	25	Thymol-blue	75	72.76	97.01	-
				125	122.35	97.88	1.43
			Bromophenol-blue	25	24.48	97.93	6.53
				50	48.85	97.70	1.70
Imipramine Iran	89.0	25	Thymol-blue	75	72.76	97.01	3.72
				125	121.54	97.23	-
			Bromophenol-blue	25	24.84	97.93	3.49
				50	48.49	96.98	-

References:

1. Martindale, The Extra Pharmacopoeia, Thirty second Edn. Thirty second Edn. The Pharmaceutical Press, 1999, p.217, 244.
2. El-Zeany, B.A; Moustafa A.A; Farid N.F. Determination of imipramine in presence of iminodibenzyl and in pharmaceutical dosage form. Journal of pharmaceutical and Biomedical Analysis; 33(4), 775-682; 24 Nov 2003.
3. Starczewska .B; Halaburda .P; Kojlo .A. Studies and analytical application of reaction of imipramine with chrome azurols. Journal of pharmaceutical and Biomedical Analysis. 30(2), 553-560 (2002).
4. Misiuk W; Kleszczewska E; Karpinska .J. Spectrophotometric of imipramine hydrochloride using ammonium peroxodisulphate and niobium (V) thiocyanate complex. Analytical letters, 34(2), 201-209 (2001).
5. Starczewska .B. Spectrophotometric studies and application of imipramine-Eriochrome Cyanine R system for determination of imipramine in pharmaceuticals. Journal of pharmaceutical and Biomedical Analysis. 23(2-3), 383-386 (2000).
6. Onal A, Kepeki SE. Spectrophotometric methods for the determination of antidepressant drug paroxetine-HCL in tablets. J AOAC Int, 88(2); 490-495 (2005).
7. Ivandini T.A; Sarada B.U; Terashima C; Rao T.N; Tryk D.A; Ishiguro.H; Kubota Y; Fujishima A. Electrochemical detection of tricyclic antidepressant drugs by high -performance liquid chromatography using highly boron-doped diamond electrodes. Journal of electroanalytical chemistry. 521 (1), 117-126 (2002).
8. Yoshida H; Hidaka K; Ishida J; Yoshikuni K; Nohta H; Yamaguchi M. Highly selective and sensitive determination of tricyclic antidepressants in human plasma using high -performance liquid chromatography with post-column tris (2-2' -bipyridyl) ruthenium (III) chemiluminescence detection. Analytical Chimica Acta, 413(1-2), 137-145(2000).
9. Chen.A.G; Wing Y.Y; Chiu H; Lee.S; Chen C.N. Simultaneous determination of imipramine, desipramine and their 2- and 10-hydroxylated metabolites in human plasma and urine by high-performance liquid chromatography. Journal of chromatography, B; Biomedical Applications. 693(1); 153-158(1997).
10. Pommier F; Sioufi A; Godbillon J. Simultaneous determination of imipramine and metabolite desipramine in human plasma by capillary gas chromatography with mass selective detection. Journal of chromatography, B; Biomedical Applications. 703(1-2), 147-158(1997).

11. Fujii T. Surface ionization organic mass spectrometry. Applications in gas chromatography. *European Mass Spectrometry*, 2(4-5).263-271(1996).
12. Zhou D; Li F.M. Determination of imipramine-human serum albumin, interaction by capillary zone electrophoresis. *Sepu*; 21(2), 143-146(2003).
13. Lope Z; Paz J.L; Townshend A. Flow-injection chemiluminescence determination of imipramine and chlopropazine. *Analytical Communication*, 33(1),31-33(1996).
14. Perez Ruiz T; Martinez-Lazano C; Sanz A; Alonso C. Flow-injection extraction-spectrophotometric determination of imipramine in pharmaceuticals with methyl orange. *Talanta*, 41(9), 1523-1527(1994).
15. Foster R. *Organic -Charge Transfer Complexes*, Academic Press, London, 1969.
16. Oztunc A; Docurmaci N; Tahtasakal E. The use of 7,7,8,8-tetracyanoquinodimethane for determination of nortriptyline and desipramide in tablets. *Farmaco*, 54,835-837(1999).
17. Taha A; Rucker G; Validated spectrophotometric and fluorimetric methods for analysis of clozapine in tablets and urine. *Arch. Pharm* 310,485 (1977).
18. Ayad M.M; Shalaby AA; Abdellatef H.E and El-said H.M. Spectrometric and atomic absorption spectrometric determination of certain cephalosporins. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*.18, 975-983 (1999).
19. Betello J.C; Perez Caballero G. Spectrophotometric determination of diclofenac sodium with methylene blue. *Talanta*, 42 (1),105-108 (1995).
20. Martinez J and Gomez B. Ion-pair formation applied to pharmaceutical analysis. *Quim Anal (Barcelona)* ;12,111-127 (1993).
21. Basavaiah K and Charan.V.S. Spectrophotometric determination of methdilazine using bromophenol blue. *Indian Pharmacist*. 2,96-100 (2003).
22. Somashekara P.G; Ramappa H. Extractive spectrophotometric determination of antihypertensive agents in pharmaceutical dosage forms. *Indian Drugs*; 38, 97-99(2001).
23. Singhvi I. Visible spectrophotometric methods for estimation of loratadine form tablets. *Indian J. Pharma Sci*,65,291-300 (2003).

24. Sane R.T; Vandana S; Mary F. Extractive colorimetric determination of meloxicam from its pharmaceutical preparations. *Indian Drug*; 37, 390-393 (2000).
25. Bhongade S.L; Kasture A.V. Extractive spectrophotometric determination of nortriptyline hydrochloride. *Indian J. Pharm. Sci*, 55, 155-157 (1993).
26. Vogel I A. Text books of macro and semimicro Quantitative in organic analysis. 4th .Edn. page 645 (1959).
27. Fekria M. Use of charge-transfer complex formation for the spectrophotometric determination of nortriptyline. *Farmaco*; 55, 659-664 (2000).
28. Hisham E. Utility of certain Π acceptors for the spectrophotometric determination of perindopril. *Journal of Pharmaceutical and Biomedical Analysis*; 17, 1267-1271 (1998).
29. Nafisur R and Syaed V. Spectrophotometric determination of amlodipine besylate by charge-transfer complex formation with p-chloranilic acid. *Analytical Sciences* 16, 1353-1356 (2000).
30. Gamal A.S, Hassan F.A, Ibrahim A.D and Abdel-Nasser A. Spectroscopic Analytical study for the charge transfer complexation of certain cephalosporin with chloranilic acid. *Aalytical Science* ; 19, 281-287 (2003).

Physicochemical characterization of clotrimazole- β -cyclodextrine inclusion complex

Bazigha Kadum al-Temimy*, Hiba Muaffak Salmo and
Faisal Taufiq Al-Akayleh**

Department of Pharmaceutics, College of pharmacy, University of
Baghdad, Baghdad, Iraq.

Department of Pharmaceutics, College of Pharmacy, University of Al-
Zaituna, Amman, Jordan.

تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

تاريخ تقديم البحث: 2005/9/12

الخلاصة

ان عقار الكلوتريمازول يستعمل بشكل واسع لعلاج الالتهابات المسببة بالفطريات و من المعروف ايضا بأن هذه المادة لها ذوبانية قليلة جدا في المحيط المائي لذلك تم في هذا البحث تحضير معقد من مادة الكلوتريمازول المتضمن في البيتا-سايكلودكسترين و ذلك باستعمال طريقة طور الاذابة كمحاولة لزيادة ذوبانيتها في المحيط المائي و بالتالي زيادة تأثيره العلاجي كمضاد للفطريات.

لقد اظهرت النتائج زيادة ملحوظة في ذوبانية الكلوتريمازول بعد تحضيره على شكل معقد مع البيتا-سايكلودكسترين و ان شكل طور الاذابة هو من نوع AL و نسبة تكون المعقد هي 1:1.

هذا و قد درست صفات المعقد الفيزيوكيميائية باستعمل الطرق التالية :- اطياف الاشعة فوق البنفسجية ، اطياف الاشعة تحت الحمراء و المسعر التفاضلي الماسح . بالاضافة الى ذلك ، لقد تم تعيين المقاييس الترموديناميكية المصاحبة لعملية تكوين المعقد ، و عندها وجد ان قيم ثابت تكوين المعقد الظاهري قلت مع زيادة درجة الحرارة و ان عملية تكوين المعقد هي عملية تلقائية ، باعثة للحرارة و مسافة للانثالبي .

Abstract

Clotrimazole is commonly used for treatment of fungal infections. Its well known that, it has extremely low aqueous solubility. In this work, an inclusion complex of clotrimazole with β -cyclodextrin was prepared by phase-solubility technique as an attempt to enhance clotrimazole solubility in water and consequently its therapeutic effect as antifungal agent.

Results showed that, the aqueous solubility of clotrimazole was significantly increased after complexation with β -cyclodextrin and the phase-solubility diagram was AL-type and the stoichiometric ratio of the complex was 1:1.

Moreover, the physicochemical properties of the complex was characterized by UV-spectrophotometry, FTIR-spectrometry, and differential scanning calorimeter (DSC). In addition, thermodynamic parameters of the complex process K_s , ΔG° , ΔH° , and ΔS° were determined. It was found that, the apparent stability constant values decreased with increasing of temperature and the process of complexation was spontaneous, exothermic and enthalpy-driven.

Introduction

Cyclodextrins (CDs) are crystalline, non hygroscopic, cyclic oligosaccharides derived from starch. Among the most commonly used forms are α , β , and γ -cyclodextrin, which respectively 6, 7, and 8 glucose units.

Cyclodextrins are cone like toroid molecules with a rigid structure and central cavity, the size of which varies according to the cyclodextrin type. The internal surface of the cavity is hydrophobic and the outside of the torus is hydrophilic, due to the arrangement of hydroxyl groups within the molecule⁽¹⁾.

Cyclodextrins may be used to form inclusion complexes with variety of drug molecules resulting in improvement of solubility⁽²⁻⁴⁾, chemical and physical stability^(5,6) and bioavailability⁽⁷⁾ of drugs. β -cyclodextrine (β -CD) is the favorite and the most commonly used cyclodextrin due to its low price, availability and cavity dimension which is suitable for many of pharmaceutical drugs with molecular weight between 200 and 800 g/mole⁽⁸⁾. However, the main problems of β -CD are its low water solubility and nephrotoxicity when used in parenteral formulations. Moreover, β -CD derivatives were utilized to enhance drug release rate from sustained release beads⁽⁹⁾, as well as, from osmotic pump tablets⁽¹⁰⁾.

Clotrimazole is a broad-spectrum antifungal agent, mainly prepared in form of cream, vaginal tablet, solution in polyethylene glycol (macrogol 400), alcoholic spray, and dusting powder⁽¹¹⁾. It is a basic drug ($pK_a = 4.7$) of a chemical structure shown in Fig1. This drug is considered as practically water insoluble compound⁽¹²⁾ and

for this reason this work is performed to enhance clotrimazole solubility and to develop new clotrimazole model solution by complexation with β -CD. The physicochemical properties of the inclusion complex were characterized by phase solubility technique, UV spectro-photometer, Fourier transform infrared (FTIR) and differential scanning calorimeter (DSC). Based on the results of the present work, clotrimazole ophthalmic solution is going to be formulated as a suggested future work.

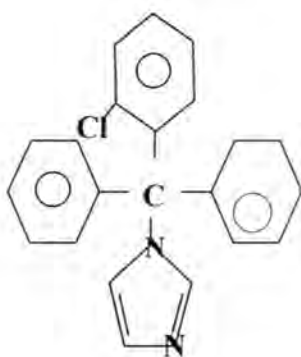


Fig.1 Chemical structure of clotrimazole

Materials and metnoas

Materials

Clotrimazole ,BP was supplied by Bayer Pharmaceutics, β -cyclodextrin(M.W=1135) was obtained from Sigma. All other materials used were of analytical reagent grade.

UV spectrophotometric analysis

A Specord 40- Analytikjena spectrophotometer was used to record UV-absorption spectra .The blank was cyclodextrin solutions of concentrations as of samples .The samples were scanned from 200 nm to 349 nm ⁽¹³⁾ .

Phase solubility study

Clotrimazole- β -cyclodextrine inclusion complex was obtained by phase solubility study. An excess amount of clotrimazole (1g) was added to β -cyclodextrine aqueous solutions of different concentrations ranging from 0 M to 0.62 M. Samples were kept in water- bath at 25,35 and 45° C and were shaken for 72 h after which the equilibrium was reached. Then they

were filtered through 0.22 μm membrane filter and the filtrate analyzed by UV spectrophotometer at the λ_{max} 264 nm⁽¹³⁾.

Preparation of solid samples

The solid complexes were obtained from the saturated supernatant of clotrimazole- 0.044M β -cyclodextrine solution. The supernatant was filtered and dried in hot -air oven at 50°C. The physical mixture was obtained by direct mixing of equal quantities of clotrimazole and β -cyclodextrine powders , using a mortar and a pestle for 5 min.

Fourier transform infrared spectroscopy(FTIR)

Samples of clotrimazole, β -cyclodextrine, inclusion complex, and the physical mixture were ground, mixed with potassium bromide and pressed in form of discs. The discs were analyzed by Shimadzu FTIR 8000 Spectroscopy from 4000- 400 cm^{-1} ⁽¹²⁾.

Differential scanning calorimeter (DSC)

DSC analysis was performed with Mettler TA 3000, Switzerland apparatus. Samples of drug, β -cyclodextrine, physical mixture, and the inclusion complex were placed in sealed aluminum pans and heated at rate of 10°C /min in the 50-300 °C range using an empty sealed pan as a reference⁽¹³⁾.

Results and discussion

UV spectrophotometer analysis

Fig.2 represents the UV spectra of clotrimazole in an aqueous solution of β -CD at various concentrations. No bathochromic shift of the λ_{max} was observed. However, significant increase in drug absorbance with the increment of β -CD concentrations was shown which indicates the inclusion of clotrimazole inside the host cavity.

Phase solubility study

Fig.3 shows phase solubility profiles at 25, 35, and 45 °C which were obtained by plotting the apparent equilibrium concentration of

clotrimazole against β -CD concentrations according to Higuchi and Connors equation ⁽¹³⁾:

$$[D] = S_0 + S_0 K_s / 1 + S_0 K_s [C]$$

where [D] and [C] are the molar concentrations of the drug and the complexing agent , respectively, S_0 is the solubility of clotrimazole in absence of β -CD and K_s is the stability constant of complexes.

Clotrimazole solubility in absence of β -CD and stability constants of complex formation at different temperatures were determined from the intercepts and the slopes of the obtained straight lines respectively, where:

$$K_{1:1} = \text{slope} / S_0 (1-\text{slope})$$

Results showed that, the apparent solubility of clotrimazole at the examined temperatures increased linearly as a function of β -CD concentration and this linearity suggested that water soluble complexes were formed in the solution. Furthermore, the slope values were always lower than one indicating that the inclusion complexes in the molar ratio of 1:1 between the drug and the host β -CD.

Table 1 represents the stability constants of the inclusion complexes, the inherent solubility of clotrimazole and the correlation coefficients of the straight lines at different temperatures.

It can be observed that, a 2.6 fold increase of the apparent solubility of clotrimazole in 62 mM β -CD solution at 25 °C clearly underlines the effect of complexation in the liquid state. On the other hand, a decrease in the values of stability constants with the increasing of temperature was obtained which could due to exothermic process of inclusion complexation ⁽²⁾.

Table-1 Clotrimazole solubility(S_0) , K_s , and correlation coefficient (r^2) from phase solubility diagrams at different temperatures.

Temperature(°C)	S_0 (10^{-3} M)	K_s (M^{-1})	r^2
25	1.4	0.285	0.995
35	1.9	0.263	0.993
45	2.5	0.244	0.999

Thermodynamic parameters

Based on the data represented in table-1, thermodynamic parameters of inclusion complexation between clotrimazole and β -CD were determined. Fig.4 indicates van't Hoff-Arrhneius plot that can be obtained by plotting $\ln K$ against the reciprocal of the absolute temperature according to the following equation ⁽¹⁴⁾ :

$$\ln K = -\Delta H^{\circ} / RT + \Delta S^{\circ} / R$$

The changes in standard enthalpy (ΔH°) and the changes in standard entropy (ΔS°) accompanying the complexation were determined from the slope and the intercept of the obtained straight line ($r^2 = 0.984$). Table-2 represents the thermodynamic values of the inclusion process including ΔH° , ΔS° and ΔG° .

Negative ΔG° value strongly suggest that the inclusion process proceed spontaneously, while negative ΔH° and ΔS° values mean that the inclusion complexation is exothermic and enthalpy-controlled, but not entropy-driven. The unfavorable ΔS° observed for this complex can be due to van der Waals forces between host and guest. While the hydrophobic interactions can be excluded as driving forces for this process since they are characterized by a high positive ΔH° and ΔS° values. Moreover, the negative ΔH° can be explained by a release of enthalpy-rich water molecules from the cavity of cyclodextrin moieties and their displacement by the suitable guest molecules, which have lower polarity than water molecules ⁽¹⁵⁾.

Table-2 Thermodynamic parameters of the clotrimazole- β -CD complexation

ΔH° (cal mol ⁻¹)	ΔS° (cal mol ⁻¹ K ⁻¹)	ΔG° (cal mol ⁻¹)
-1201.4	-6.56	-217.64

FTIR analysis

The infrared spectra of clotrimazole, β -CD, physical mixture and inclusion complex are shown in Fig.5.

The spectra of clotrimazole was characterized by bands at 3026 cm^{-1} due to C-H due to stretching vibration of aromatic compounds, bands at 1600, 1573, 1487, 1440 cm^{-1} that are corresponding to C=C skeletal in plane vibrations and a peak around 2330 due to C=N stretching of the imidazole ring, whereas the spectra of β -CD was characterized by bands at $3500\text{-}3200\text{ cm}^{-1}$ due to O-H stretching vibrations.

In physical mixture of clotrimazole and β -CD, the spectra obtained were akin to the superimposition of the individual spectrum of clotrimazole and β -CD. However the spectra of the complex showed no shift of the band corresponding to OH stretching vibration. These results may suggest that no hydrogen bonds were formed between the OH groups of β -CD and the guest molecules, which came in agreement with those, obtained from thermodynamic study.

DSC analysis

The DSC thermograms for raw materials, physical mixture of clotrimazole and β -CD, and the inclusion complex were reported in Fig.6.

Clotrimazole showed a typical sharp peak at 150°C which corresponding to its melting. The DSC curve of β -CD according to the results provided by Hassan et al ⁽¹⁶⁾, it exhibited a very broad endothermal peak due to the dehydration of cyclodextrin molecules. For the physical mixture, there is also a broad peak around 100°C due to the dehydration of β -CD and the sharp peak around 150°C which is likely to be the melting of clotrimazole. The DSC thermogram of the physical mixture is similar to the superimposition of the thermograms of individual clotrimazole and β -CD, this may indicate that, no interaction excisist between these two materials. However, the curve of the complex showed complete disappearance of clotrimazole peak, which suggests there is a strong interaction between clotrimazole and β -CD in the inclusion complex.

These results are inconsistent with those obtained by Jug M. et al. ⁽¹⁷⁾ who studied the complexation of piroxicam with cyclodextrin in gel formulation.

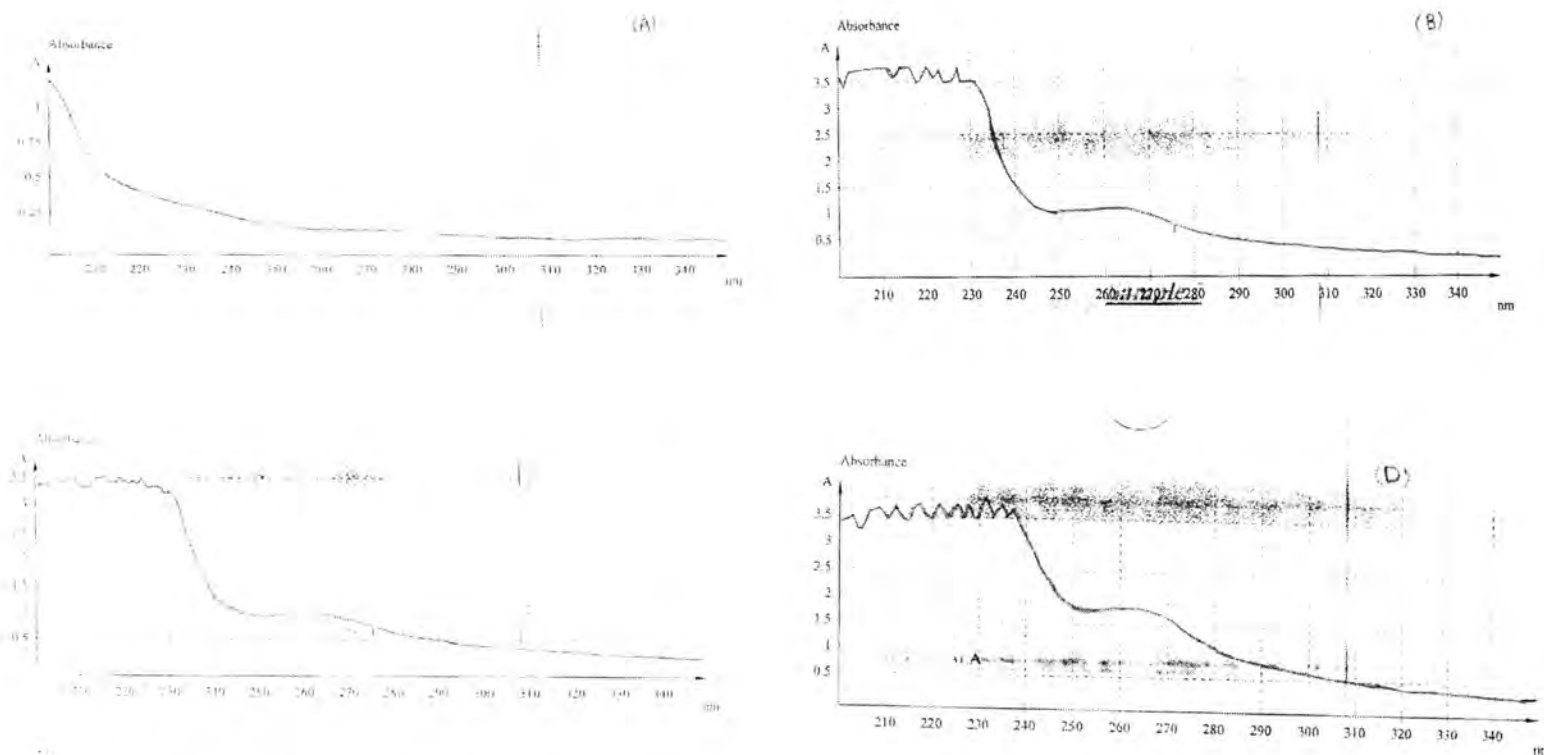


Fig 2 UV Absorption spectra of clotrimazole in water containing various concentrations of β - cyclodextrin :a-0 M , b- 0.026 M , c- 0.044 M , d- 0.062 M .

Physicochemical characterization of clotrimazole- β -cyclodextrine inclusion complex
Bazigha Kadum, Hiba Muaffak , Faisal Taufiq

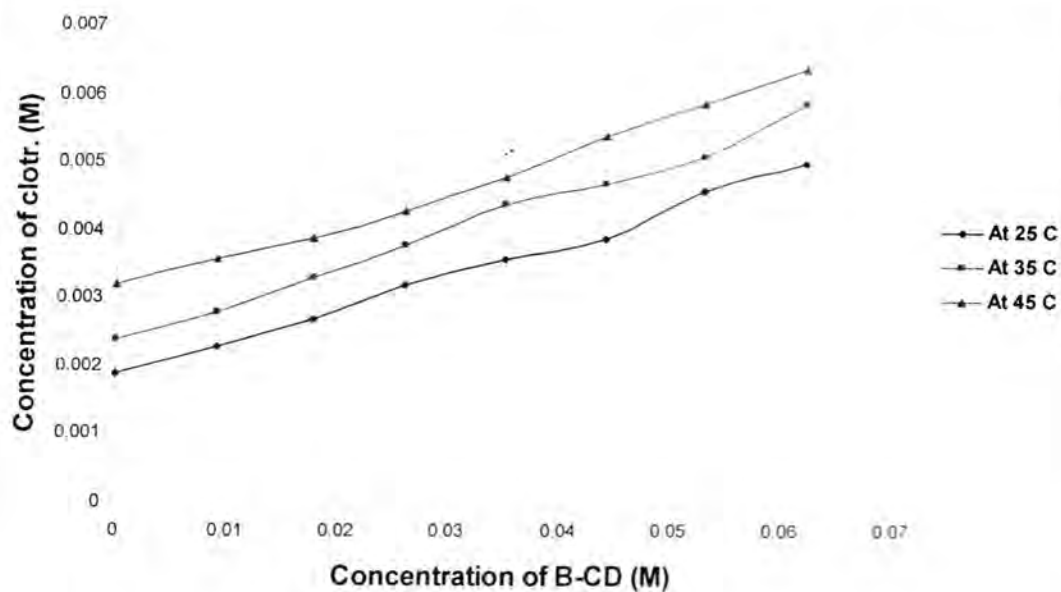


Fig.3 Phase solubility diagrams of clotrimazole-B-CD complexes at different temperatures.

0.0032	0.0024	0.0019	0
0.0036	0.0028	0.0023	0.009
0.0039	0.0033	0.0027	0.0176
0.0043	0.0038	0.0032	0.026
0.0048	0.0044	0.0036	0.035
0.0054	0.0047	0.0039	0.044
0.0059	0.0051	0.0046	0.053
0.0064	0.0059	0.005	0.062

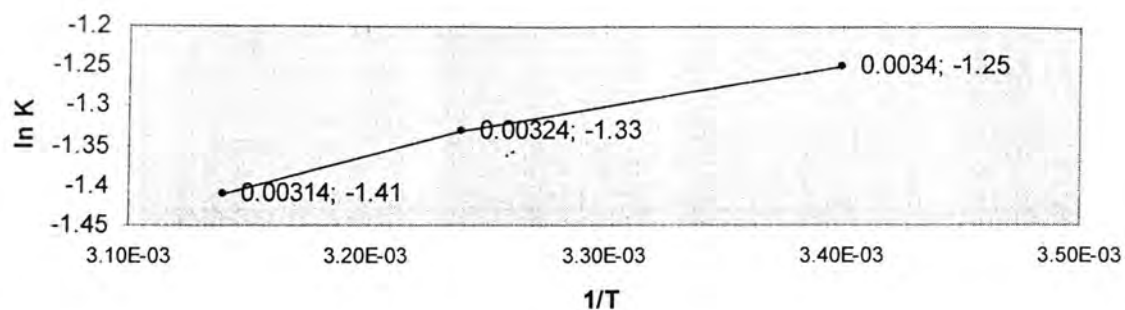


Fig.4 The van't Hoff-Arrhenius plot for clotrimazole-B-CD complexation.

-1.25	0.0034
-1.33	0.00324
-1.41	0.00314

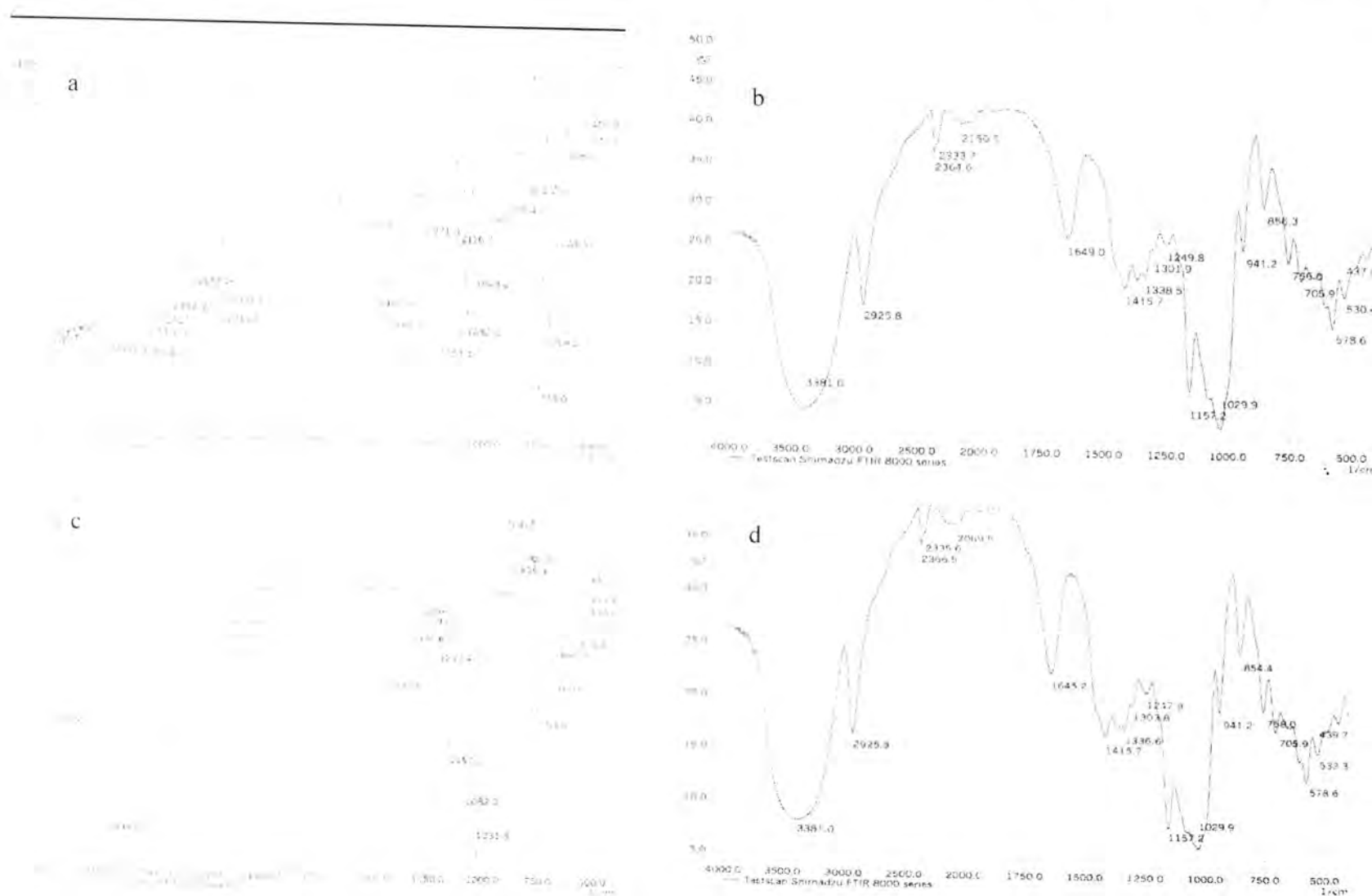


Fig 5 IR spectra of : a- clotrimazole , b- β -cyclodextrin , c- physical mixture of clotrimazole and β -cyclodextrin ,d- inclusion complex of clotrimazole - β -cyclodextrin.

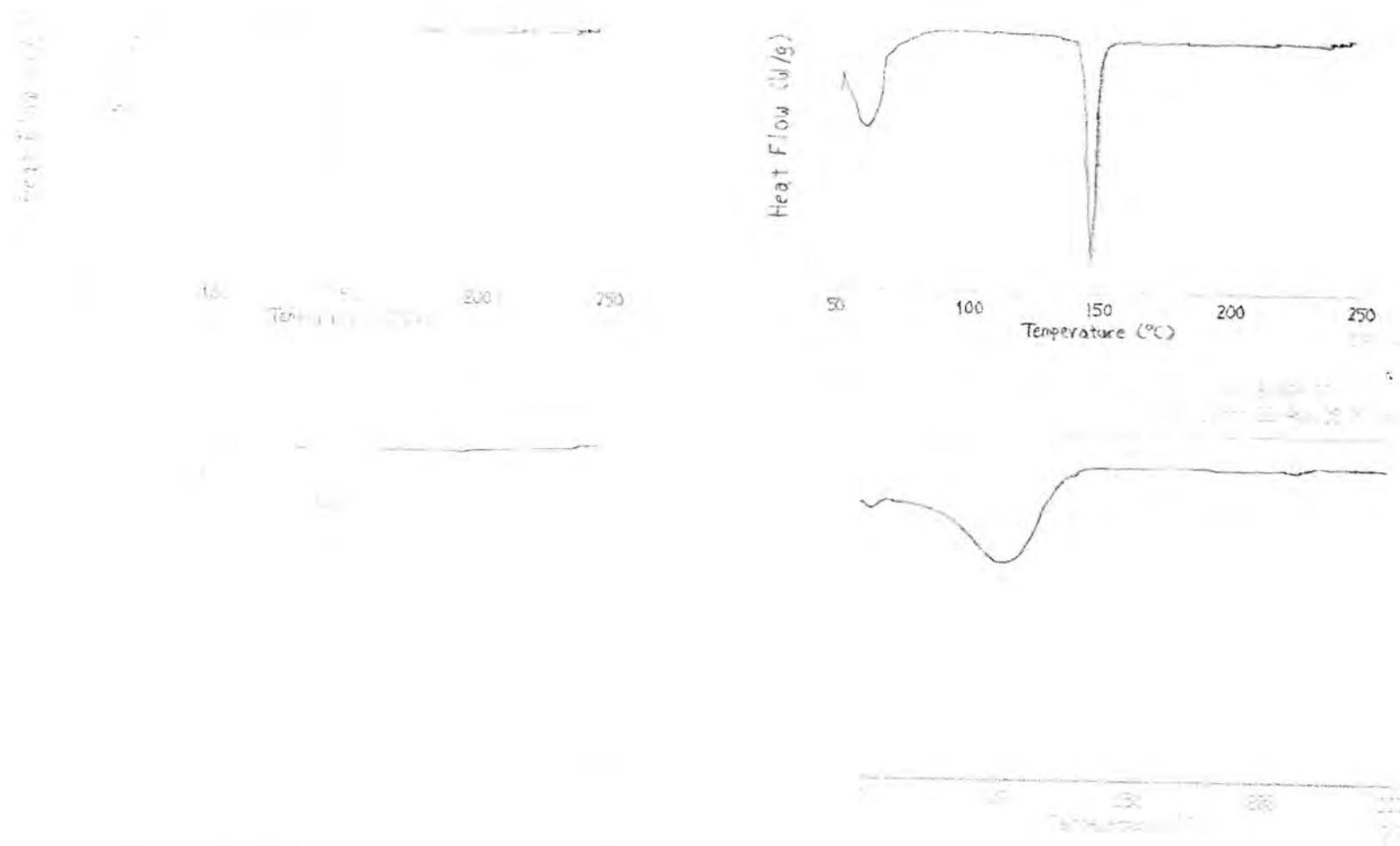


Fig 6 DSC curves of a- clotrizole , b- β -cyclodextrin (adapted from reference ⁽¹⁶⁾) ,c- physical mixture,d- inclusion complex of clotrizole - β -cyclodextrin

References

- (1) Duchene, D., Wouessidlewe, D. ; Physicochemical characteristics and pharmaceutical uses of cyclodextrin derivatives. **Part 1, Pharm. Technol.** **14(6), 26-34,(1990).**
- (2) Chen, Y., Xu, T., Shen, X., Gao, H.; Temperature dependence of the inclusion- dissociation behavior of the inclusion complexes between cationic substituted 3H - indoles and β -cyclodextrine.**J. Photochemistry and Photobiology A: Chemistry, xxx, xxx-xxx, (2005).**
- (3) Kadri, M., Djemil, R., Abdaoui, M., Winum, J. Inclusion of complexes of N-Sulfamoyloxazolidinones with β -cyclodextrine.**Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters, 15, 889-894, (2005).**
- (4) Li, N., Zhang, Y., Xiong, X.; Study of the Physicochemical properties of trimethoprim with β -cyclodextrine in solution. **J. Pharmaceutical and Biomedical Analysis, xxx,xxx-xxx, (2005).**
- (5) Rubessa, F., Zingone, G. ; Preformulation study of the inclusion complex warfarin- β -cyclodextrine. **Int. J. Pharma., 29,3-10 (2005).**
- (6) Yap, K. L., Liu, X. Thenmozhiyal, J. C., Ho, P. C. ; Characterization of 13-cis- retinoic acid / cyclodextrin inclusion complexes by phase solubility, photostability, physicochemical and computational analysis. **Eur.J. Pharmaceutical Science, 25, 49-56,(2005).**
- (7) Wong, J.W., Yuen, K.H. Improved oral bioavailability of artemisinin through inclusion complexation with β -and γ -cyclodextrin. **Int. J. Pharm., 227,177-185, (2001).**
- (8) Waleczek, K .J., Cabral Marques, H. M., Hempei, B., Schmidt, P. C. ; Phase solubility studies of pure (-)- α -bisabolol and camomile essential oil with B- cyclodextrin. **Eur. J. Pharmaceut. Biopharmaceut. , 55, 247-251, (2003).**
- (9) Smith, J. S., Mac Rae, R. J., Snowden, M. J. ; Effect of SBE7- β -cyclodextrine complexation on carbamazepine release from sustained release beads. **Eur. J. Pharm. and Biopharm., 60,73-80, (2005).**

- (10) Okimoto, K., Rajewski, R. A., Stella, V. J. ; Release of testosterone from an osmotic pump tablet utilizing (SBE)_{7m} - β -cyclodextrine as both solubilizing and an osmotic pump agent. **J. Control. Rel.**, **58**, 29-38, (1999).
- (11) Martindale, The complete drug reference, 32nd ed., p.377, (1999), Pharmaceutical Press, London.
- (12) British Pharmacopoeia, The Stationary Office Ltd., Crown Copyright, p.388., Vol.I ,(2002).
- (13) Martin, A., Physical Pharmacy, 4th ed., Ch.11, p. 274, pp. 265-268 and Ch.2, pp. 46-48, Lea and Febiger, Philadelphia, London.
- (14) Higuchi, T., Connors, K.A. ;**Adv. Anal. Chem. Instrum.** **4**, 117-212,(1965).
- (15) Menard, F.A., Pedhiya, M.G.,Rhodes, T.T. ; Physico-chemical aspects of the complexation of some drugs with cyclodextrins. **Drug Dev. Ind. Pharm.**, **16**, 91-113,(1990).
- (16) Hassan, M.A., Suleiman, M.S., Najib, N.M. ; Improvement of the in – vitro dissolution characteristics of famotidine by inclusion in β -cyclodextrine. **Int.J.Pharm.**, **58**, 19-24, (1990).
- (17) Jug, M., Lacan, M.B., Kwokal, A. ; Influence of cyclodextrin complexation on piroxicam gel formulations. **Acta Pharm.**, **55**, 223-236, (2005).

Synthesis of substituted 1,3-oxazepine-4,7-diones via Schiff bases (Part 1)

F.A Hussein, Muhanned J. Mahmoud and Maysoon T. Tawfiq
Chemistry Department, College of Education (Ibn Al- Haitham), University of
Baghdad, Adhamia, IRAQ

تاريخ قبول البحث: 2006/3/7

تاريخ تقديم البحث: 2005/8/4

الخلاصة

تم تحضير عدد من مشتقات سناميليدين - أرين أمين (قواعد شف) بتكاثف سنامالديهايد مع الأمينات الأروماتية الأولية. فوعلت قواعد شف مع أنهريد المالبيك، أنهريد الفثالبيك، 3-نترو أنهريد الفثالبيك فأعطت مشتقات 3,1 - أوكسازيبين، بنز [3,1][e-2,1] أوكسازيبين و 3-نتروبنز [3,1][e-2,1] أوكسازيبين على التوالي.

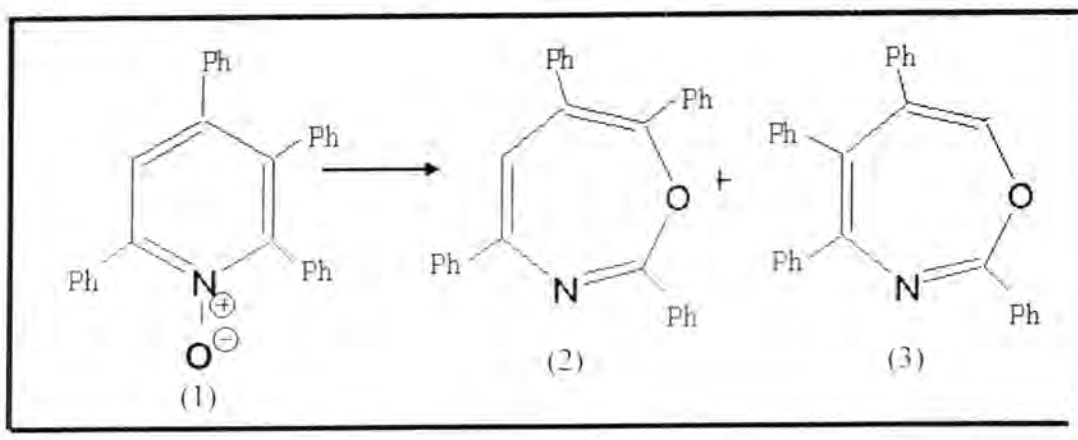
Abstract

N-Cinnamylideneareneamines were prepared by condensation of cinnamaldehyde with primary aromatic amines, and were found to react with maleic anhydride, phthalic anhydride, and 3-nitrophthalic anhydride to give 1,3-oxazepine 4,7-diones, benz[1,2-e][1,3]-oxazepine 4,7-diones, and 3-nitrobenz[1,2-e][1,3]-oxazepine 4,7-diones respectively.

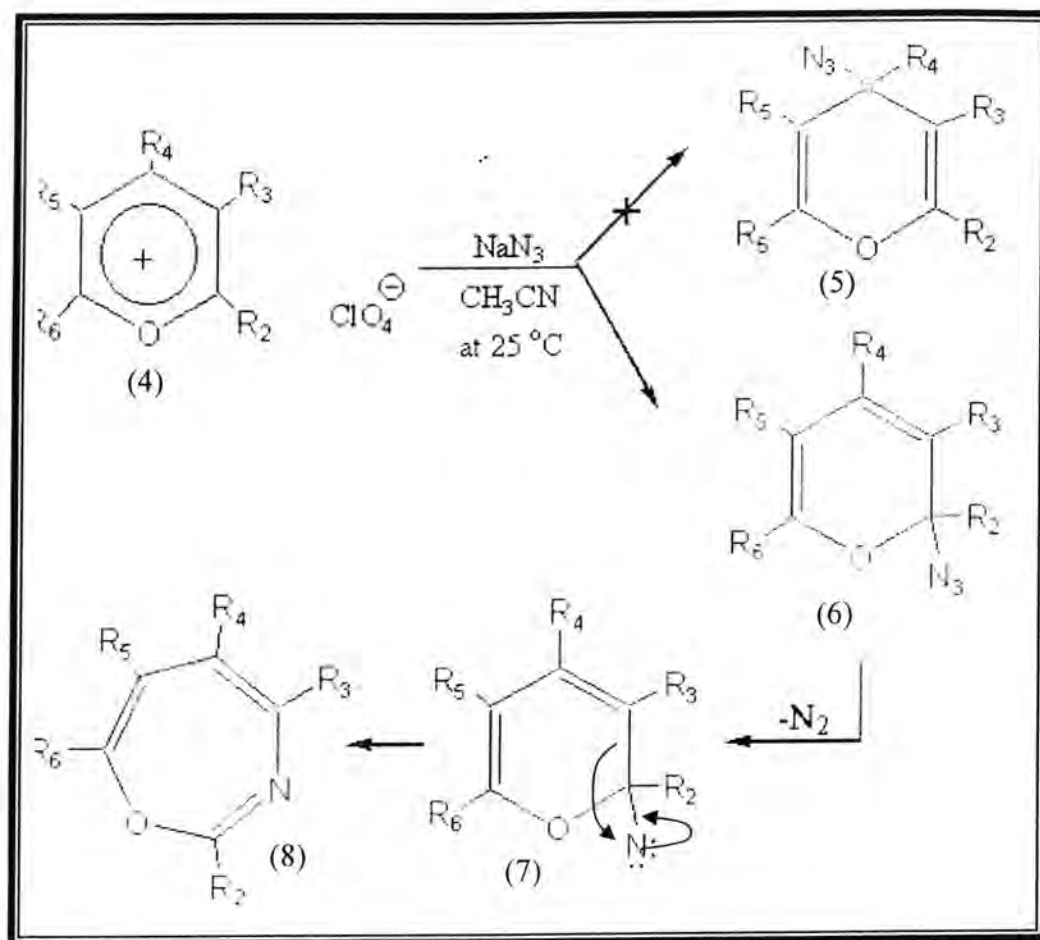
Introduction

Many syntheses of 1,3-Oxazepines have been reported the following two examples are representatives:

1) Irradiation of polyarylpyridine *N*-oxides results in ring expansion to 1, 3-oxazepines in high yield and some deoxygenation to the parent amines^(1,2)



2) Sterically hindered substituted pyrylium perchlorates (4a-e) react with sodium azide in acetonitrile at 25° to give azido-2H-pyranes (6), which on heating lose Nitrogen and form the corresponding nitrens(7) which undergo rearrangement to 1,3-oxazepine(8)^(3,4):



- a) $\text{R}_2=\text{R}_3=\text{R}_5=\text{R}_6=\phi$, $\text{R}_4=\text{H}$
- b) $\text{R}_2=\text{R}_3=\text{R}_4=\text{R}_6=\phi$, $\text{R}_5=\text{H}$
- c) $\text{R}_2=\text{R}_3=\text{R}_4=\phi$, $\text{R}_5=\text{H}$, $\text{R}_6=\text{P-BrC}_6\text{H}_4$
- d) $\text{R}_2=\text{R}_4=\text{R}_6=\phi$, $\text{R}_5=\text{ipr}$, $\text{R}_5=\text{H}$
- e) $\text{R}_2=\text{P-CH}_3\text{C}_6\text{H}_4$, $\text{R}_4=\text{R}_6=\phi$, $\text{R}_3=\text{ipr}$, $\text{R}_5=\text{H}$.

Experimental

1. Melting points were determined with: Stuart Melting Point Apparatus and were uncorrected.
2. IR. Spectra were recorded with: PYE UNICAM SP3-300 Infrared Spectrophotometer in (KBr) in the range $(4000-200)\text{ cm}^{-1}$.
3. FT-IR spectra were recorded with: SHIMADZU FTIR-8400S Infrared Spectrophotometer in (KBr).
4. Elemental Analysis (C. H. N.) was carried out with: Perkin Elmer B-240 Elemental Analyzer.
5. Thin Layer Chromatography (TLC) was performed on alumina plates.

Synthesis of cinnamylideneareneamines (I)

A mixture of equimolar amounts (0.06 mole) of cinnamaldehyde and primary aromatic amine dissolved in (35 mL) of absolute ethanol was refluxed in water bath for (30) minutes. The reaction mixture was then allowed to cool to room temperature, and the solid product was filtered and recrystallized from ethanol (95%) to give colored crystals of cinnamylideneareneamines.

Synthesis of:

2-styryl-3-aryl-2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-diones(II).

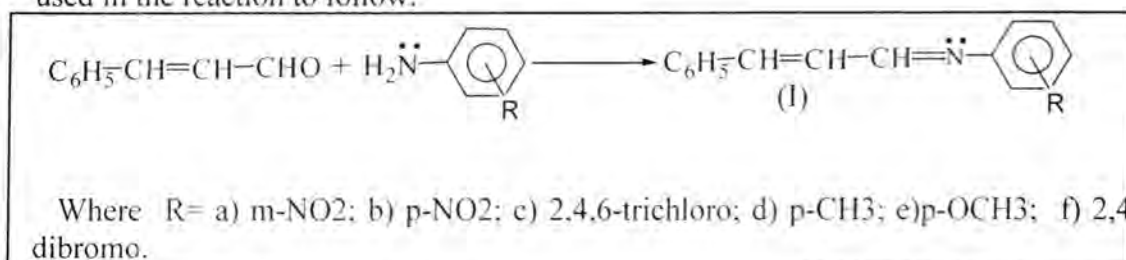
2-styryl-3-aryl-2,3-dihydrobenz[1,2-e][1,3]-oxazepine-4,7-diones(III).

2-styryl-3-aryl-2,3-dihydro-3-nitrobenz[1,2-e][1,3]-oxazepine-4,7-diones(IV).

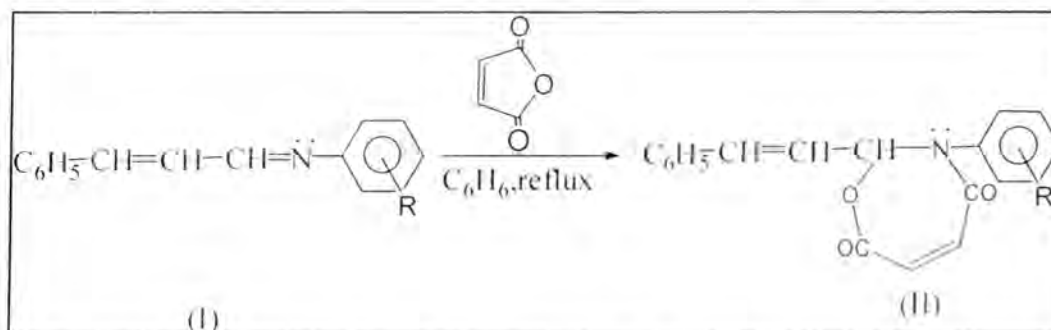
A mixture of (0.02mole) of cinnamylideneareneamine(I) and (0.02mole) of the selected anhydride dissolved in (25 mL) of dry benzene was refluxed in a water bath for 2hrs. The solvent was removed and the resulting colored crystalline solid was recrystallized from dry 1,4-dioxane to give the title products.

Discussion

Cinnamylideneareneamines (Schiff bases), (I) are prepared by condensation of cinnamaldehyde with aromatic primary amines according to reported procedure⁽⁵⁾, identified by their m.ps, elemental analysis (table-1), and IR. spectra (table-2) and used in the reaction to follow:

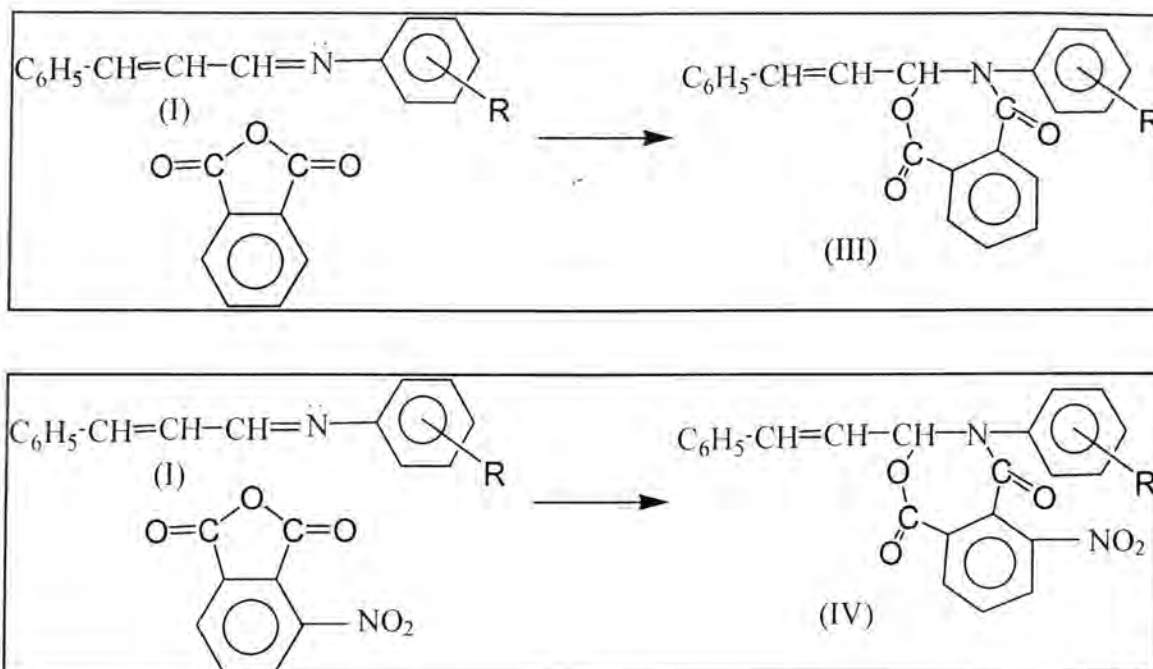


Schiff bases are known to react with acid halides and anhydrides^(6,7,8,9) to give the corresponding addition products. Therefore, cinnamylideneareneamines (I) are expected to react with maleic anhydride to give 2-styryl-3-aryl-2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-diones, II.



The reaction is followed by disappearance of (N=C) absorption band at (1630-1660) cm⁻¹, and appearance of (N-C) absorption band at (1170)cm⁻¹. The products (II) are identified by their m.ps, elemental analysis (table-3) and IR. spectra (table-4).

Similar results are obtained by the reaction of phthalic anhydride and 3-nitrophthalic anhydride to give 2-styryl-3-aryl-2,3-dihydrobenz-[1,2-e][1,3]-oxazepine-4,7-diones,



The products (III) and (IV) are identified by their m.ps, elemental analysis (table-5) and IR. Spectra (table-6).

The structure of 2-styryl-3-aryl-2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-dione (II) is a combination of both lactone and lactam in a 7-membered heterocyclic ring. This is indicated by the appearance of the characteristic ($\text{C}=\text{O}$ lactone/ $\text{C}=\text{O}$ lactam) absorption band at $(1725-1810)\text{cm}^{-1}$ in their IR spectra.

It is noticeable that the values of C-H allylic absorption bands are rather high. This is explained by the shift towards longer wavelengths that takes place when the allylic-carbon is linked to three electron-withdrawing groups: $\text{C}_6\text{H}_5\text{-CH}=\text{CH}$, O, and N as in the title compounds.

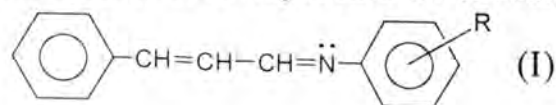
It is impressive to note that the absorption bands at $(1740-1780)\text{cm}^{-1}$ and $(1800-1850)\text{cm}^{-1(11-12)}$ in the IR spectrum of pure maleic anhydride have disappeared when the anhydride became part of the 7-membered ring of [1,3]-oxazepine-4,7-dione. This may be attributed to the fact that the combined ($\text{C}=\text{O}$) of the lactone and ($\text{C}=\text{O}$) of the lactam absorbs in the same region of the IR spectra of these cyclic products. Moreover, the ($\text{C}=\text{O}$) group in the IR spectra of the title [1,3]-oxazepine-4,7-diones or benz[1,2-c][1,3]-oxazepine-4,7-diones and 2-aryl-3-methyl-5,6-dihydro-7H-Pyrrolo [1,2-d][1,4]-benzodiazepine-6-ones⁽¹³⁾ absorbs in the same region $(1680-1700)\text{cm}^{-1}$, thus confirming the assigned 7-membered ring structure. However, the IR spectrum of pure phthalic anhydride and 3-nitro phthalic anhydride maintains these two absorption bands, when it became part of the 7-membered cyclic ring of benz[1,2-c][1,3]-oxazepine-4,7-diones. This may be attributed to the interaction of the benzene ring with the carbonyl groups of this anhydride.

The industrial, medical, biological importance of the prepared compounds has not been studied and is open to those who are interested in these product aspects.

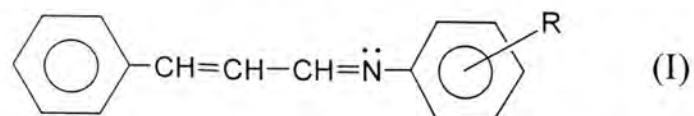
Synthesis of substituted 1,3-oxazepine-4,7-diones via Schiff bases (Part 1)

F.A Hussein, Muhanned J. Mahmoud and Maysoon T. Tawfiq

Table (1) M.F., m.p.s, Yields %, and Elemental Analysis of Cinnamylideneareneamines(I).

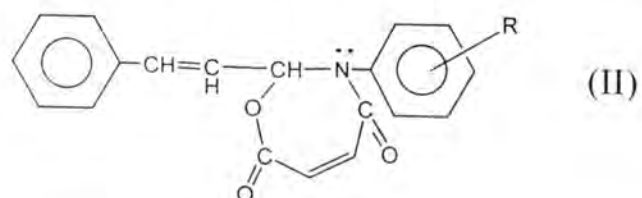


Comp.	R	M.F.	m.p.C°	Yield%	Calc.			found		
					C%	H%	N%	C%	H%	N%
Ia	3-NO ₂	C ₁₅ H ₁₂ O ₂ N ₂	80-82	85	71.42	4.76	11.11	71.46	4.68	11.81
Ib	4-NO ₂	C ₁₅ H ₁₂ O ₂ N ₂	105-107	80	71.42	4.76	11.11	71.31	4.21	11.41
Ic	2,4,6-trichloro	C ₁₅ H ₁₀ NCl ₃	128-130	77	57.97	3.22	4.50	57.44	3.11	4.85
Id	4-Me	C ₁₆ H ₁₅ N	78-80	87	86.87	6.78	6.33	86.46	6.13	6.00
Ie	4-OMe	C ₁₆ H ₁₅ ON	118-120	93	81.01	6.32	5.90	80.97	6.14	5.39
If	2,4-dibromo	C ₁₅ H ₁₁ NBr ₂	102-104	91	49.31	3.01	3.835	48.67	2.73	3.23

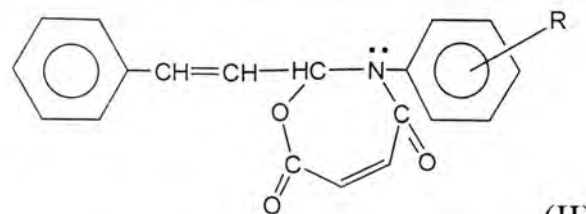
Table (2) IR absorption bands (cm^{-1}) of Cinnamylideneareneamines(I)

Comp.	=CH str Vinylic	C-H str. Aromatic	C=N str. Imine	C=C str. Vinylic	C=C str. Aromatic	=CHbend.	Others
Ia	3120	3020	1630	1475	1580,1450	1010	C-NO ₂ aromatic 1525, 1330
Ib	3100	3020	1625	1475	1560,1450	1010	C-NO ₂ aromatic 1530, 1330
Ic	3115	3025	1650	1585	1565,1470	1020	C-Cl aromatic 630
Id	3120	3025	1590	1510	1540,1455	1010	C-H str. 2980
Ie	3125	3040	1660	1580	1535,1460	1010	C-H str. 2980, C-O-C 1030
If	3120	3025	1620	1585	1550,1460	1020	C-Br aromatic 545

Table (3) M.F., m.ps, Yields %, and Elemental Analysis of 2-Styryl-3-aryl-2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-diones(II).



Comp.	R	M.F.	m.p.C°	Yield%	Calc.			found		
					C%	H%	N%	C%	H%	N%
Ila	3-NO ₂	C ₁₉ H ₁₄ O ₅ N ₂	165-167	71	65.14	4	8	64.97	3.51	8.55
Ilb	4-NO ₂	C ₁₉ H ₁₄ O ₅ N ₂	174-175	64	65.14	4	8	64.57	3.71	8.47
Ilc	2,4,6-trichloro	C ₁₉ H ₁₂ O ₃ NCl ₃	124-126	70	55.81	2.93	3.42	55.47	2.68	3.72
Ild	4-Me	C ₂₀ H ₁₇ O ₃ N	159-161	77	75.23	5.32	4.38	75.68	4.97	4.12
Ile	4-OMe	C ₂₀ H ₁₇ O ₄ N	171-173	81	71.64	5.07	4.17	71.33	4.89	4.82
Ilf	2,4-dibromo	C ₁₉ H ₁₃ O ₃ NBr ₂	144-146	76	49.24	2.80	3.02	48.97	2.69	2.63

Table (4) IR absorption bands (cm^{-1}) of 2-Styryl-3-aryl-1,2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-diones(II)

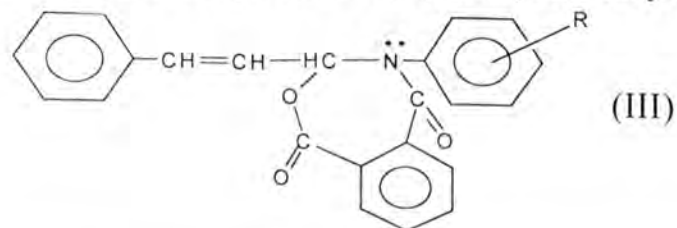
(II)

Comp.	C-H str. Allylic	=CH str Vinyllic	C-H str. Aromatic	C=O str. Lactone/ Lactam	C=C str. Vinyllic	C=C str. Aromatic	C-N str.	C-O str. Lactone	C-H bend Allylic	Cis =CH .bend.	Others
IIa	3165	3135	3050	1725	1545	1640	1170	1240	1315	865	C-NO ₂ aromatic 1530, 1355
IIb	3175	3135	3050	1725	1540	1640	1170	1240	1315	865	C-NO ₂ aromatic 1540, 1340
IIc	3175	3135	3050	1725	1570	1665	1170	1245	1310	865	C-Cl aromatic 635
II d	3165	3135	3060	1810	1575	1735	1170	1240	1310	855	C-H str. 2870
IIe	3175	3135	3060	1740	1585	1685	1170	1240	1310	865	C-H str. 2875, C-O-C 1025
II f	3175	3135	3060	1730	1575	1610	1170	1225	1310	855	C-Br aromatic 610

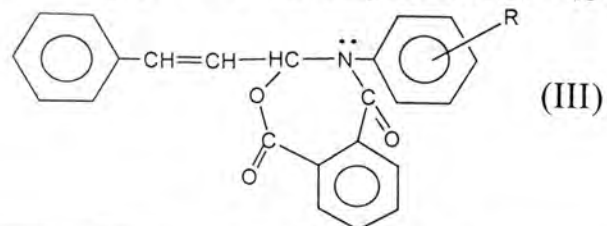
Synthesis of substituted 1,3-oxazepine-4,7-diones via Schiff bases (Part 1)

F.A Hussein, Muhanned J. Mahmoud and Maysoon T. Tawfiq

Table (5) M.F., m.ps, Yields %, and Elemental Analysis of 2-Styryl-3-aryl-2,3-dihydro[1,3]-oxazepine-4,7-diones(III).



Comp.	R	M.F.	m.p.C°	Yield%	Calc.			found		
					C%	H%	N%	C%	H%	N%
IIIa	3-NO ₂	C ₂₃ H ₁₆ O ₅ N ₂	158-160	63	69	4	7	68.59	3.65	7.50
IIIb	4-NO ₂	C ₂₃ H ₁₆ O ₅ N ₂	195(de.) over250	61	69	4	7	69.15	3.97	7.59
IIIc	2,4,6-trichloro	C ₂₃ H ₁₄ O ₃ NCl ₃	102-104	60	60.19	3.05	3.05	60.27	2.98	3.37
IIId	4-Me	C ₂₄ H ₁₉ O ₃ N	116-118	67	78.04	5.14	3.79	77.41	5.11	3.36
IIIe	4-OMe	C ₂₄ H ₁₉ O ₄ N	151-153	70	74.80	4.93	3.63	74.67	4.78	3.27
IIIf	2,4-dibromo	C ₂₃ H ₁₅ O ₃ NBr ₂	168-169	69	53.80	2.92	2.72	53.73	2.58	2.12

Table (6) IR absorption bands (cm^{-1}) of 2-Styryl-3-aryl-2,3-dihydrobenz[1,2-e][1,3]-oxazepine-4,7-diones(III).

Comp.	C-H str. Allylic	=CH str Vnylic	C-H str. Aromatic	C=O str. Lactone/ Lactam	C=C str. Vinylic	C=C str. Aromatic	C-N str.	C-O str. Lactone	C-H bend Allylic	=CH bend.	Others
IIIa	3195	3140	3060	1710	1535	1645	1165	1230	1335	815	C-NO ₂ aromatic 1540, 1335
IIIb	3195	3145	3055	1730	1560	1620	1165	1235	1315	855	C-NO ₂ aromatic 1510, 1325
IIIc	3195	3140	3045	1715	1545	1625	1165	1230	1345	840	C-Cl aromatic 625
IIId	3190	3135	3035	1720	1555	1630	1170	1250	1345	815	C-H str. 2870
IIIe	3185	3130	3050	1725	1560	1630	1170	1245	1310	835	C-H str. 2865, C-O-C 1040
IIIf	3195	3140	3040	1710	1560	1625	1170	1245	1345	825	C-Br aromatic 560

REFERENCES

1. Ole Buchardt, Christian L. Pedersen, and Niels Harrit "Light- Induced Ring Expansion of Pyridine N-Oxides" *J.Org. Chem.* Vol. 37, No. 23, 1972 P(3592-3595).
2. Otohiko Tsuge, Kaji Oe, and Toshiyuki Ohnishi. *Heterocycles*, Vol. 19, No. 9, 1982 PP(1609-1614).
3. P.-L. Desbene, J.-C. Cherton, J.-P. Le Roux et J.- J. Basselier. Etude De La Reactivite De Lion Azoture Vis A Vis De Cations Heterocycliques- I. *Tetrahedron* Vol. 40, No. 18. PP (3539-3548) 1982.
4. Data Sheet, Internet, 2002.
5. Arthur I. Vogel " Practical Organic Chemistry ", 3ed., Longmann Group Limitid, London (1971) P.253.
6. R.G. Hiskey and J.M. Jung., *J. Am. Chem. Soc.*, 85(1963)578.
7. Robert M. Moriarty, and Charles W. Jefford., "Organic Chemistry " A Problems Approach, W.A. Benjamin, Inc., London(1975)P.489.
8. R. Huisgen, *Angew. Chem.*. Internet. Edit., 7(321)(1968).
9. F.A. Hussein and Obaid H. Abid "Sythesis and Characterization of 2-aryl- 3- phenyl- 2,3- dihydro- 1,3- oxazepine- 1,4- diones, (2)" *Iraqi Journal of Chemistry* 27(3)(2001) P.943., *ibid* 27(2) (2002).
10. J.G. Martin and R.K. Hill., *Chem. Rev.*, 61(1961)537.
11. الطرق الطيفية في الكيمياء العضوية: دارلي. أ. ج. وليامس. أيان فليمنك ترجمة د. جورج يوناثان سر كيس . الطبعة الأولى، جامعة بغداد (1986) ص 91.
12. John R. Dyer "Application of Absorption Spectroscopy of Organic Compounds", Prentice- Hill, Inc., London (1965) p. 35.
13. E. Aiello, G. Cirilamo Cirrincion., "Poly Condensed Nitrogen Heterocycles, VII.5,6-dihydro-7H-pyrrolo[1,2-][1,4]benzodiazepine - 6- ones. A novel series of annelated 1,4- benzodiazepine." *J. Heterocyclic Chem.*, 16(1979)p.209.

Estimation Of Creatine Kinase activity In Colorectal Cancer, Polyps, And Ulcerative Colitis Patients.

Zahra`A Salim Muhsin Chemistry dep-College of science-Al-
Mustansyria univ.

تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

تاريخ تقديم البحث: 2005/12/22

الخلاصة

ان الهدف الرئيسي من هذه الدراسة هو تقدير فائدة استعمال انزيم الكرياتين كايينز في تشخيص بعض الامراض والاورام السرطانية . لقد تم قياس فعالية الانزيم في مصول اشخاص يعانون سرطان القولون (قبل وبعد العملية ، $n=30$) ، سرطان المستقيم (قبل وبعد العملية ، $n=16$) ، اورام حميدة ($n=10$) و 9 اشخاص اخرين مصابين بتهيج القولون . تم قياس الفعالية الانزيمية الكلية للاشخاص الاصحاء ($n=20$) وكل الحالات المرضية بطريقة طيفية بعد المعرفة الاكيدة للتشخيص السريري .

ان معدل الفعالية الانزيمية (الانحراف المعياري) لم يختلف معنويا بين الاشخاص الاصحاء 125.17(37.85) والمصابين بالحالات التالية :

أ) سرطان القولون-مستقيم قبل وبعد العملية 130.82 (49.41) و 132.11 (32.95) ، على التوالي ، ($p>0.3$) .

ب) تهيج القولون 156.56 (65.55) ، $p>0.1$ ولكنه كان مرتفعا معنويا عند الاشخاص المصابين باورام القولون-مستقيم الحميدة 223.08 (27.39) ، $p<0.01$.

ان مجمل النتائج قيد الدراسة لاتعطي اثبات على وجود علاقة بين معرفة مستوى انزيم الكرياتين كايينز وظهور الاورام السرطانية للقولون-مستقيم او مرض تهيج القولون ، ولكن يمكن القول ان تلك المعرفة مفيدة لتشخيص وجود الاورام الحميدة للقولون-مستقيم .

Abstract

The aim of this study is to evaluate the usefulness of serum creatine kinase enzyme (Ck) in the diagnosis of some cancers and diseases . Serum Ck activity prospectively measured in patients undergoing colon cancer (pre and post operation, $n=30$), rectum cancer (pre and post operation $n=16$) , polyps($n=10$) ,and another 9 patients with ulcerative colitis(U.C).The total

activities of CK in 20 healthy individuals and in all the patients were assayed by enzymatic colorimetric method with knowledge of the clinical The mean diagnosis.

(SD) activity of Ck did not differ significantly between controls 125.17(37.85) and :

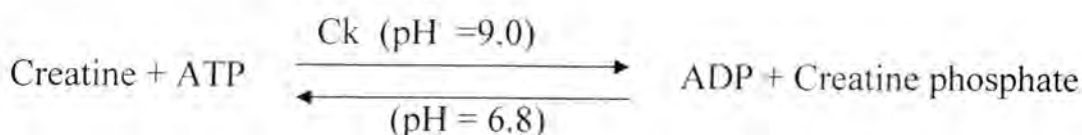
a) colorectal cancer (CRC) preoperation (PrO) 121.66(43.67)and post operation (PoO) 132.11(32.95) , respectively $p > 0.3$].

b) U.C 156.56(65.55) , $p > 0.1$, but it was significantly higher in colorectal polyps CRP 223.08(27.39), $p < 0.01$.

The results suggest that there is no evidence of an association between knowledge the level of CK and the appearance of CRC and U.C. However, such a knowledge is useful in diagnosing colorectal polyps.

Introduction

Creatine kinase (Ck , 2.7.3.2) is a cytoplasmic and mitochondrial enzyme with a wide tissue distribution and catalyzes the reversible transfer of the phosphate group of phosphocreatine (PCr) to ADP, to yield ATP and creatine (Cr) [1,2] :



The Ck / PCr/ Cr system is present primarily in tissues with high and fluctuating energy demands such as brain , heart and skeletal muscle , and serves as a temporal and spatial " energy buffer " that helps to maintain a high intracellular phosphorylation potential in situations of increased metabolic demand [3,4].

The molecule is a dimeric enzyme composed of either M or B type subunits . The subunits combine to form 3 isoenzymes : Ck1(BB), Ck2 (MB) and Ck3(MM) . These isoenzymes are expressed at different levels in various tissues in humans : Ck-BB (brain tissues) , Ck-MB (heart muscle) , and CK-MM in skeletal & heart muscle [5 , 6] .

It is used clinically in the diagnosis of acute myocardial infarction [7, 8]. As a typical isoenzyme, macro-Ck 2 which is not found in the sera of healthy individuals , has been reported in patients with gastrointestinal tract malignancies and in particular of colorectal cancer [9]. Other reports showed the apparently high concentration of Ck-MB isoenzyme in the sera of lung , prostate cancer, metastatic ovarian tumor 10, 11 ,12] , while

the enzyme activity was lower than the normal in colon and lung adenocarcinomas, and squamous cell carcinomas [13].

Because of the above conflicting data of Ck level in carcinoma parts , the goal of the present study was to analyse the Ck enzyme in CRC,colorectal polyps ,and in (U.C)disease and the change of its activitys were discussed.

People undergoing CRC have an increasing risk for it starting at the age of 40. People over the age of 50 account for 93% of colorectal cancer cases[14]The exact cause is unknown, but most cases begin as polyps, which are small growths inside the colon or rectum[1 5] while the U.C (adisease of dysregulation of the immune system of the colon) is associated with a major increase in the risk of colon cancer [16 , 17] .

The highest risk groups for CRC include ulcerative colitis, previous history of polyps or cancer, family history of colon cancer, certain genetic conditions and a personal history of female cancer. Smoking, drinking and physical inactivity are additional risk factors for CRC [16] .

Materials and method

Patients :

The present project was approved by the ethics commission of Baghdad Teaching and AL-Shaheed Adnan Khir Alla hospital.

In total, 43 colorectal cancer samples were analysed . Nineteen samples were obtained from PrO colonic cancer (11 males cases and 8 femals cases) , 8 males cases from PoO colonic cancer , 11 male sample was obtained from PrO rectal cancer and 5 males samples from PoO rectal cancer .The diagnosis was based on clinical and biological exam. Reports by Dr.Falih AL-Aubaidy , Dr. Abd AL-salam AL-Taie, and Dr. Saaeb AL-Gailaney .

Ten male patients with colorectal polyps , where chosen from the same Hospitals to study the comparison of the Ck level in malignant and benign tumors .Nine males with U.C were also enrolled in this study , the diagnosis was based on Endoscopies tests reports by Dr. Azaam Agah and Dr. Helmey AL-Kazaz.

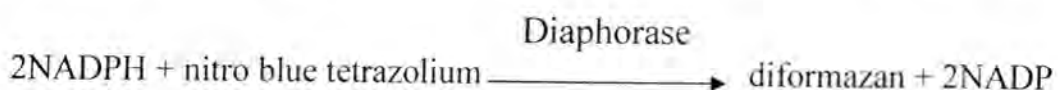
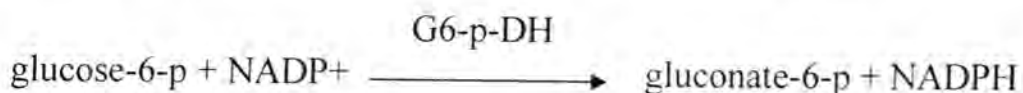
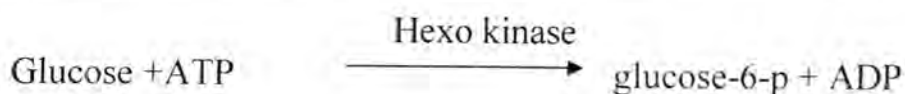
Twenty adjacent control (10 males, 10 females) were included to define the normal Ck values.

Blood samples were collected between 9.00 and 11.00 am , sera were separated at 4500 xg for 20 min and directly analyzed . Creatine kinase

activity was measured in sera of patients and normal donors by colorimetric method .

Method :

Colorimetric determination of Ck activity utilizes creatine phosphate as substrate to act as the initial catalyst for a series of reactions resulting in the formation of NADPH as outlined in the coupled enzyme assay :



the reaction is stopped by the addition of HCl , the blue /violet colour of diformazan has an absorption maximum around 560nm [18,19,20] .

Statistical analysis:

Descriptive statistics were used in analyzing the patients , characteristics and laboratory parameter for each group . In addition , unpaired Student's T test was used to assess group differences when appropriate .Correlation between groups were assayed by person test .A statistical significance difference was accepted as p value < 0.05 . All the statistical analysis in this study were made using SPSS 10 for windows program .

Results

Comparison of serum ck between healthy males and females:

The mean(SD) level of serum Ck in healthy males (n=10)and females (n=10) was nearly closed 126.18(40.91) vs 123.61 (34.10) U/l ,p >0.5 , (table -1, fig- 1) .

Comparison of serum Ck between male & female in colon cancer:

The differences between Ck activity in male (n=11) and female (n=8) colon cancer was non significant : 135.74(37.92) vs 98.02(18.11) U/l ,p >0.05 , (table -1 , fig- 2).

Patients characteristics :

The table(2) shows some of characteristics of the different groups. Patients with CRC (30-60 years old) were older than either patients with polyps (5-15 years old) or U.C (20-55), but they were in the same range with healthy individuals (27-58 years old) .

Serum Ck values in carcinoma and control cases :

The mean (SD) of serum Ck in control value was 125.17 (37.85) and in patients with colon cancer PrO was 119.86 (35.95) , colon cancer PoO 138.10 (34.08) u/l ,rectum cancer PrO 132.47 (49.81), rectum cancer PoO 107.98(48.93) u/l , CRC pre- 130.819 (49.41) u/l, CRC post- 132.11(32.95) u/l, polyps 223.08 (27.39) u/l , U.C 156.56 (65.56) , (table -2 , fig- 3) .

Comparison of serum Ck in carcinoma patients and control :

The great activity of serum Ck was significantly shown in colorectal polyps , this enzyme activities was significantly larger than these in colorectal cancer ($0.0001 < p < 0.003$) or healthy control individuals ($p < 0.0002$) .Otherwise, the enzyme activity shows non significantly increase than control in patients with U.C ($p > 0.1$), while it is still significantly closed to control ranges in colorectal cancer (PrO & PoO) when compared with normal adjacent values($p > 0.4$) .

Correlation of serum ALP between carcinoma types and disease :

There was a positive correlation between serum ck in rectum cancer pre and post operation ($r = 0.575$) . Likewise , correlation between serum Ck in polyps and U.C ($r = 0.517$). On the other hand , a weak positive correlation between rectum cancer (PrO and PoO) with polyps ($r = 0.389$ and 0.319 respectively) , thus the occurrence of polyps may lead to the development of benign rectum tumor to malignant .

In other hand , there was no correlation of serum Ck between colon cancer (PrO and PoO) with polyps ($r = -0.475$ and 0.117 respectively).

Table-1: The distribution of CK activity in males & females

subjects	gender		Mean (S.D) u/l		Significancy
	M	F	M	F	
Controls	10	10	126.18 (40.91)	123.61(34.10)	p>0.5
Colon CA(PrO)	11	8	135.74(37.92)	98.02(18.11)	p>0.05

Table -2 : Characteristics of cases and controls

Groups	No.of cases	gender		Age (year)	CK mean(SD) u/l
		m	f		
colon CA(PrO)	19	11	8	32 - 60	119.86 (35.95) n.s *
Colon CA(PoO)	8	8		30 - 60	138.10 (34.08) n.s *
Rectal CA (PrO)	11	11		30 - 65	132.47 (49.81) n.s *
Rectal CA(PoO)	5	5		25 - 65	107.98 (48.93) n.s *
Colorectal CA (PrO)	30	22	8	27-65	130.82 (49.41) n.s *
Colorectal CA (PoO)	13	13		25-65	132.11 (32.85) n.s *
Colorectal polyps	10	10		5-15	223.08 (27.39) ***s
Ulcerative colitis	9	9		20-55	156.56 (65.5) n.s *
normal	20	10	10	27 - 55	125.17 (37.85)

*n.s : non significant, ***s : p< 0.001

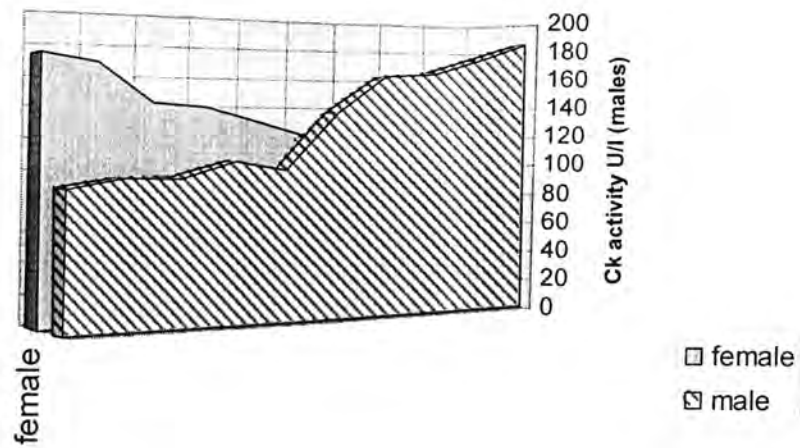


fig-1 : The level of creatine kinase in control males and females

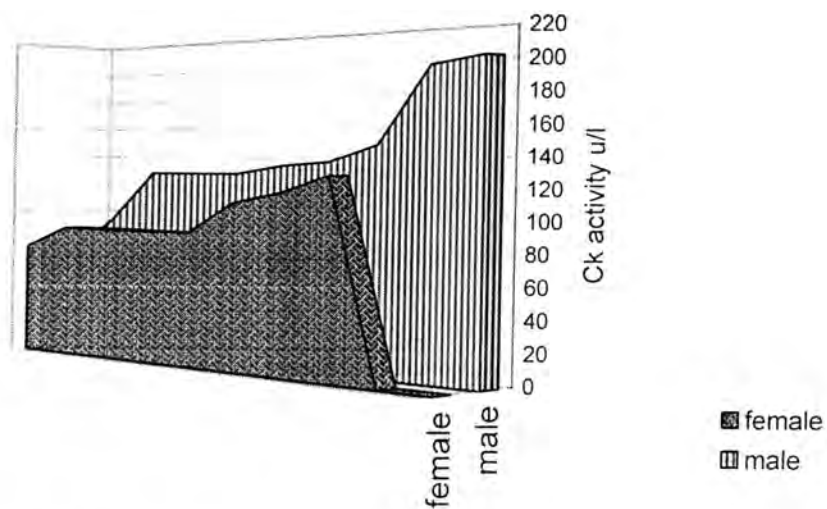


fig -2 : The level of Ck in males and females colon cancer (PrO) patients.

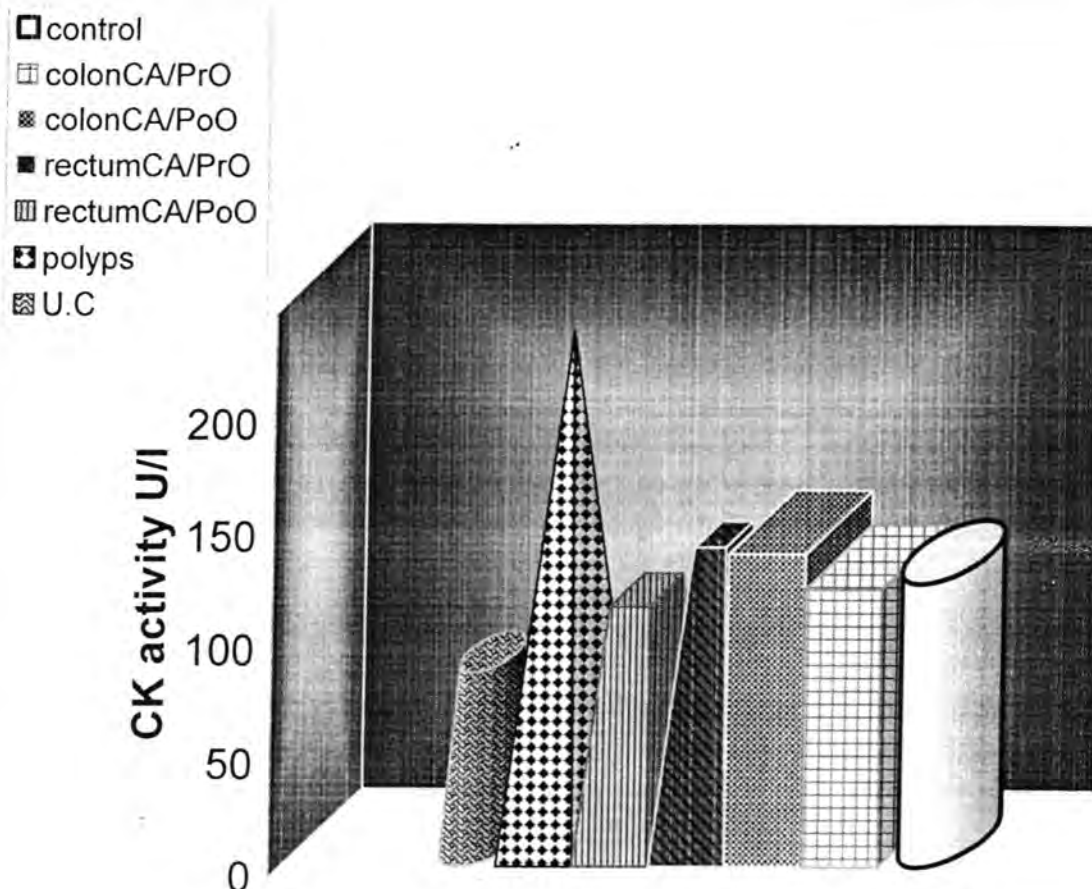


fig-3 : The activity of Ck in colorectal cancer (PrO& PoO), colorectal polyps, and ulcerative colitis.

Discussion

Creatine kinase is an enzyme still widely analyzed in clinical diagnostics. Although a wealth of ck measurements have been reported in the scientific literature, there still exist inconsistency and incomplete knowledge on such an apparently simple question as the Ck enzyme content of mammalian colorectal in both health and disease.

In the present study, we detected the presence of total ck activity in normal control subjects, CRC (pre- and post operation), colorectal polyps, and U.C.

However, the total Ck activity in normal and most colorectal cancer samples that was analyzed in serum, was significantly similarly ($p > 0.5$), this finding result is lower than data reported for a malignancy of

gastrointestinal tract [9] where macro-Ck2 isoenzyme was present before operation , and data reported for lung cancer or primary hepatocellular carcinoma [10 ,21] where Ck-MB and mitochondrial Ck isoenzymes were strongly increased. But our results were consistently higher than that reported for gastric cancer [22] and colon adenocarcinoma [12] where lower Ck activity observed than the normal samples because there is a decrease in the expression of type B- and M-Ck subunits .

We additionally observed that :

- (i) The mean CK activity did not differ significantly in healthy males and females ($p>0.5$) .
- (ii) The mean CK activity did not differ significantly in males and females ($p>0.05$) CRC patients.
- (iii) The Ck activity in the colorectal polyps patients were significantly higher than that in adjacent control and colorectal cancer($p<0.02$). This maybe due to the predominant increscent of Ck-BB fraction in polyps [23].
- (ix) The good positive correlation between Ck in polyps and U.C may indicates that elevation of Ck in one part may be a prognostic signal of other disease cases appearance .
- (x) A weak positive correlation between rectum cancer (PrO and PoO) with polyps means; the occurrence of polyps may lead to the development of benign rectum tumor to malignant [14, 16] .
- (xi) Ulcerative colitis samples revealed non significant increasing Ck activity than control ($p>0.1$) . This result consist with that obtained by Perez C. et.al [24] where the total CK is not elevated , but MB- isoenzyme activity was greater in U.C cases , and with that obtained in gastric ulcer patients [22] where total CK was significantly not elevated than control values.

Conclusion

The present findings shed light on some old enigmas and opened up fascinating avenues for future research in Iraqi patients . our findings don't support significant expression of serum CK in most CRC and U.C , but rather indicate that many of the previous misconceptions in this field can be explained by interference from Ck isoenzymes. On the other hand , give the need for improved the induction of Ck expression in colorectal polyps .

References

1. Tsung.S.W ; creatine kinase patterns in human tissue obtained at surgery; *clin.chem.* 22: 173-175 ; 1976.
2. Neumeier.D : tissue specific and subcellular distribution of creatine kinase isoenzymes ; In Lang, H, editor : *creatine kinase isoenzymes* , Berlin, 1981, Springer-Verlag.
3. Wallimann T, Wyss M, Brdiczka D, Nicolay K, Eppenberger H ; intracellular compartmentation , structure and function of creatine kinase isoenzymes in tissues with high and fluctuating energy demands : the " phosphocreatine circuit" for cellular energy homeostasis ; *Biochem j.* ; 281 : 21-40 ; 1992 .
4. Wyss M, Kaddurah – Daouk R ; creatine and creatinine metabolism ; *physiol Rev* , 80:1107-1213 ; 2000
5. Saks V, Ventura-Clapier R, Leverve X, Rigoulet M, And Rossi A; Eds. *Bioenergetics of the cell: quantitative aspects.*; Mol Cell Biochem 184: 1-460, 1998.
6. Saksv A, Ventura-Clapier R, And Aliev MK.; *Metabolic control and metabolic capacity: two aspects of creatine kinase functioning in the cells*; Biochim Biophys Acta 1274: 81-88, 1996.
7. Yuu H ; diagnostic significance of serum creatine kinase isoenzyme MB fractin in acute myocardial infarction ; *j.jpn .Soc .Intern .Med* ; 67,476; 1978 .
8. Serdar A, Navy, Serhat T,Gürkan M, Serkan,Maj K, Adnan H, Maj L; Cumhuriyet B,Türker K ; *Effect of Macro-Creatine Kinase and Increased Creatine Kinase BB on the Rapid Diagnosis of Patients with Suspected Acute Myocardial Infarction in the Emergency Department* ; Vol 170, (8) ; 2005
9. Koven I, Freedman M, Miller D , Reece S , Maitland A , Sigurdson E, Blackstein M ; *macro-creatine kinase 2 : a possible marker of gastrointestinal cancer* ; *surgery* , 94 (4) : 631-5 ; 1983.
- 10.Wang H, Lu J, Ting Y ; *E Creatine kinase (Ck) enzymatic colorimetric method levated serum Ck-MB and Ck-BB isoenzymes in patient with small cell lung cancer : a case report.* Chin Med J ; 55 : 270-273 ; 1995.
- 11.Liu T; *unusually high proportion of creatine kinase MB isoenzyme evidently of nonmyocardial origin in serum of a patient with cancer of the prostate* ; *Clin Chem* ; 29 : 2127 ; 1983 .
- 12.Ng R, Ethirajan S , O'Neill M, Statland B ; *increased activities of creatine kinase and lactate dehydrogenase isoenzymes in a patient with metastatic ovarian tumor* ; *Clin Chem* ; 33(8) : 1484-5; 1987.

13. Joseph J, Cardesa A, Carreras J; Creatine kinase activity and isoenzymes in lung, colon and liver carcinomas; Br J cancer; 76(5): 600-5; 1997.
14. Levin B; Colorectal cancer. In DC Dale, DD Federman, eds., Scientific American Medicine, 12 (5); 2004.
15. Eaden, Arams, Ekbom, Jackson & Mayberry; Colorectal cancer in ulcerative colitis: a case control study, Alimentary Pharm.& therap.; 14(2) 145-53; 2000.
16. Adam Brochert, MD; Colorectal Polyps; Health opedia.com, reviewed 2001, copy right 2005.
17. Colin P. Kerr, M.D., M.P.H., J.D.; Is crohn's disease associated with an increased risk of bowel cancer? : The Family Practice Newsletter Department of Family and Community Medicine; Vol. 4 (16); 1989.
18. Hess J, etal; Creatine kinase (Ck) enzymatic colorimetric method; clin. Chem. 13(11); 944; 1967
19. Hess J, etal; Creatine kinase (Ck) enzymatic colorimetric method; Amer. J.clin. path.; 50(1); 89; 1968.
20. Allain C., etal.; Colorimetric determination of CK activity; clin.chem.; 1973; 19(2); 223
21. Georg M, Frank N, Raimund M and Markus W; elevated creatine kinase activity in primary hepatocellular carcinoma; BMC Gastroenterology; 5:9 doi: 10.1186/1471-230X -5-9; 2005.
22. AL_Taei W.A.; PhD thesis; Biochemical studies on Alpha-Fetoprotein(AFP) and some tumor markers in gastric cancer; college of Science; AL_Mustansirayh Univ.; 2000.
23. Berezniatsky S, Lobstein O, Ko S, Weinstock A, alterations of creatine kinase isoenzymes in colon washings from patients with colonic and rectal diseases; Cancer. 50(6): 1177-80; 1982.
24. Perez C, Marcos I, Carneros J, Barrio J, Trascasa C, Munoz E, Mancheno E, Gonzalez L; Macromolecular creatine kinase in patients dignosed with ulcerative colitis; Gastroenterol Hepatol; 24(1) 16-9; 2001.

PROFLING OF LITHIUM AND POTASSIUM INTO SILICON

Ali M. MOUSA Material Research Unit, Department of Applied Sciences
University of Technology -Baghdad - IRAQ

تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

تاريخ تقديم البحث: 2005/2/21

Key Words: Semiconductor, Diffusion, Sheet resistance, Surface concentration.

ABSTRACT

The profiling of Lithium and Potassium into Silicon doped by electro deposition from molten salts (LiBr,KI) have been studied for various time and deposition current. For samples studied changing the deposition time and current have a significant effect on the conductivity type and sheet resistance variation. This has attributed to high value of solid solubility of Lithium and Potassium in Silicon. Also, surface concentration variation with depth is affected significantly by variation in deposition time, particular for samples with deposition time of 7 mints. A junction was found to be at 156 micron from the surface.

For constant deposition current diffusion profiles show two distinguishing regions, one with large diffusivity and the second less diffusion constant.

الملخص

درست هيئة توزيع الليثيوم والبوتاسيوم في السيلكون الذي تمت اصابته كهربائيا من منصهر ملحي (LiBr,KI) لأزمان مختلفة وتيارات ترسيب مختلفة . من خلال النتائج ظهر ان لتغير زمن وتيار الترسيب تأثيرا كبيرا على طبيعة التوصيلية الكهربائية والتغير في المقاومة الكهربائية السطحية. تم ارجاع هذا التغير لقيم الاذابة الصلبة العالية لليثيوم والبوتاسيوم في السيلكون. كذلك تغير التركيز السطحي للشوائب مع العمق بتغير ظروف الترسيب وبالذات مع زمن ترسيب قدره (7 دقائق. تولد مفرق على عمق (156) مايكرون من السطح.

عند استخدام تيار انتشار ثابت اظهرت هيئة التركيز السطحي وجود منطقتين مختلفتين احدهما بانتشارية عالية والثانية اقل انتشارية.

INTRODUCTION

It is well known that the crystal characteristics can be changed quite dramatically by adding chemical impurities into semiconductor crystal. In order to introduce impurities into semiconductor, several methods have been tried [1-8], and almost all these techniques either sophisticated devices or expensive. Looking for a new less expensive techniques, we found that electrolysis doping from molten salt is the most successful [7,8].

During the electrolysis, the metals layer deposited on the surface of the sample is able to overcome the barriers and diffuse into the crystal [7]. The aim of this investigation was to study the profiling variation of Lithium and Potassium into Silicon as a function of deposition time and current using the electrode position of impurities from molten salt (LiBr, KI). No annealing was done subsequent to electrode position. Sheet resistance was measured by the four-probe method, which permits determination of the electrically active doping atom distribution as function of depth in doped sample, for various deposition times and currents. We have been able to measure the changes in type and value of electrical conductivity when the compensating Lithium and Potassium atom concentration increases.

EXPERIMENT

In this work Boron doped p-type Silicon sample with ($\rho = 6\Omega\text{cm}$) itself was used as Cathode and a piece of Tantalum as Anode. Molten salts of (LiBr, KI) with melting temperature (550C, 770C) respectively as the electrolyte. Electrolysis start when dc. Voltage is applied between the Cathode and the Anode. The experimental arrangement used is presented elsewhere [8] is shown in Fig. (1). The metallic layer deposited on the sample surface removed by polishing the surface with (1 μ) diamond paste. Penetration profiles were determined by means of serial Sectioning using a precision chemical etching, the chemical solution consist of $\text{CH}_3\text{COOH}:\text{HF}:\text{HNO}_3$ with volume ratio 5:3:3. The system was initially calibrated by the weight loss method using a mettler M7 microbalance. Sheet measured at various depths of the doped samples by stripping layers of Silicon. Detailed data on variation of sheet resistance as a function of depth was measured by the four-probe method for a large number of steps. Surface concentration (N_s) of electrically

PROFLING OF LITHIUM AND POTASSIUM INTO SILICON

Ali M. MOUSA

active atoms calculated from [11].

$$N_s = \frac{1}{R_s \times \mu \times q}$$

Where R_s is the sheet resistance, μ is the charge carrier mobility

For the present study, Lithium and potassium was chosen as donor impurities for their high solid solubility and diffusivity ($6 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, $7 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{sec}$ for Lithium and $9 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $5 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{sec}$ for Potassium). Study of the literature reveals that the present investigation is probably the first to employ this technique for the study of net surface carrier concentration profiles in silicon doped by elector deposition from salts.

Results and discussion

Figures (2,3), giving variation of sheet resistance as a function of deposition time for various deposition currents, the figures shows that the effect of deposition current on doped samples is significant. Decreasing in sheet resistance with increase in deposition time and currents are mainly due to the corresponding increase in the carrier concentration. This result is mainly due to the compensation of Boron atoms at the surface of the Silicon. As the deposition time increased, sheet resistance per square decreases, indicating an increase in the occupation of substitution sites of Silicon crystal by the Lithium and Potassium atoms.

For the samples studied showing changes in the conductivity type from p to n- type even with short deposition time (≥ 7 min.) and for high current used ($>15\text{mA}$) is mainly due to the complete compensation of Boron atoms.

Figures (4,5) give profiles for carrier concentration with deposition time. These results have been derived from figures (2,3) for the same samples and are consistent with the discussion above; The smooth curve drawn through the experimental points shows that the Lithium and Potassium diffusion profile in Silicon can be divided into two parts showing distinctly an initial increase of surface concentration followed by a region where concentration remains steady. A possible explanation of this nature of surface concentration variation can be given as follows. N-type doping is diffused in a P-type substrate from the top of the surface and then driven in where they compensate the boron atoms. For short deposition time the number of deposited atoms is limited and increased with the deposition time. Also increasing the deposition current will allow more doping atoms to contribute in the surface concentration as shown in Figure (6). Figures (7, 8) show the experimentally determined Potassium diffusion profiles. For short deposition time (7 min.) a junction depth of approximately 150 microns is

indicated. Increasing the deposition time with the same deposition current and using Lithium salt no junction noticed even at depth of 250 microns, and concentration appears to be study.

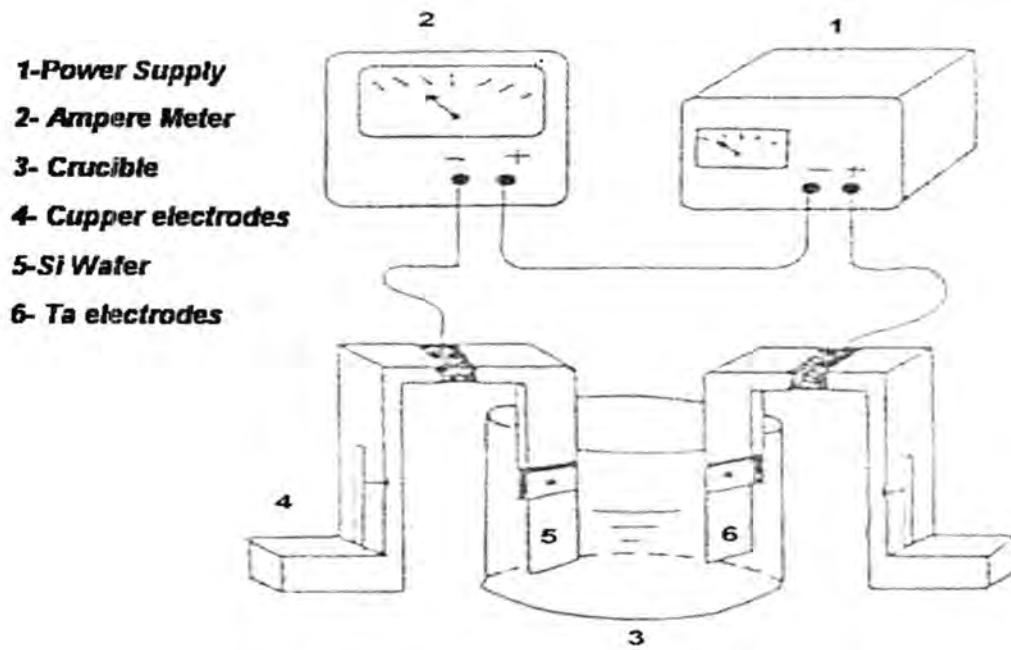
Conclusions

The following conclusions may be drawn from the results for the samples studies indicated:

1. Changes in the deposition times and currents have a significant effect on the conductivity type and sheet resistance variation.
2. Surface concentration variation with depth is affected significantly by variation in deposition time. In particular for sample when deposition time was 7 min. A junction was found to be at 150 micron from the surface.
3. Diffusion profiles shows two distinguishing region, one with large diffusivity and the second less diffusion constant.

PROFLING OF LITHIUM AND POTASSIUM INTO SILICON

Ali M. MOUSA



Fig(1) Schematic of the doping assembly used

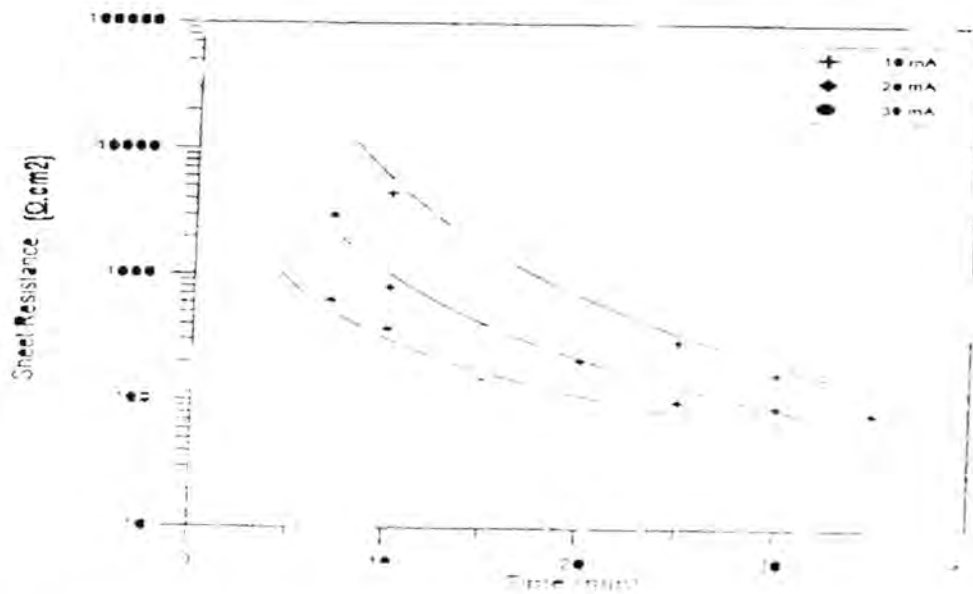
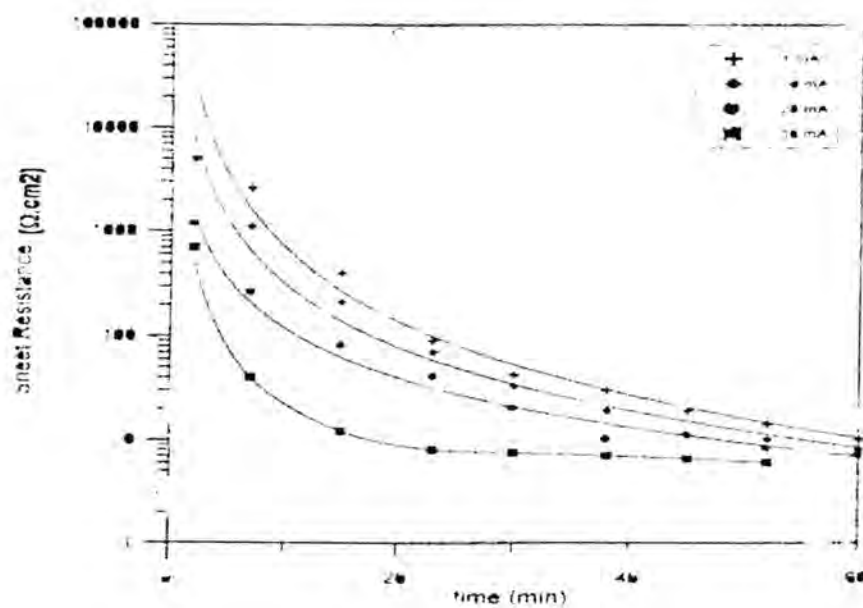
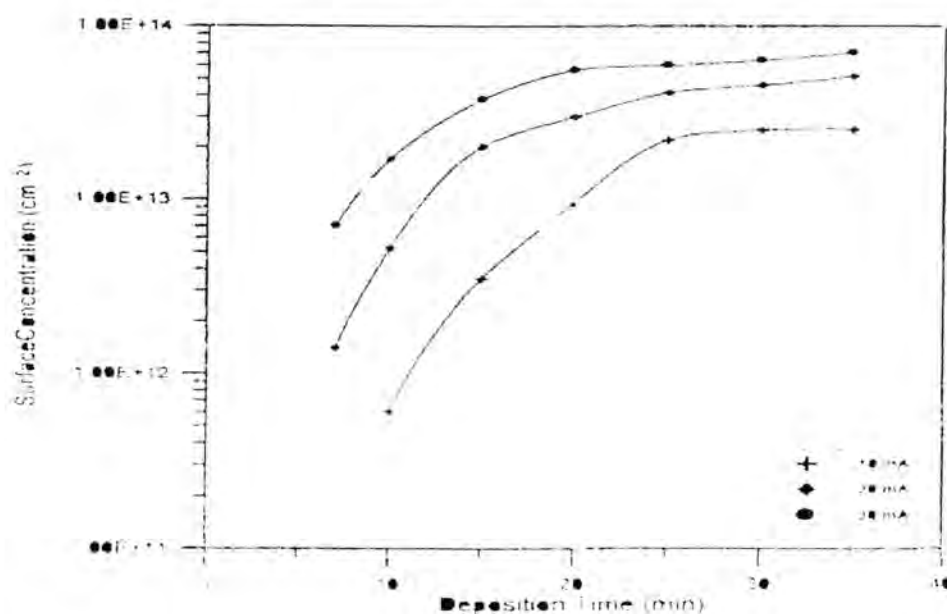


Fig.(2) variation of sheet resistance with deposition time at different current
Using KI as molten salt



**Fig.(3) variation of sheet resistance with deposition time at different current
Using LiBr as molten salt**



**Fig.(4). Surface concentration with deposition time at different deposition
current using KI as molten salts.**

PROFLING OF LITHIUM AND POTASSIUM INTO SILICON

Ali M. MOUSA

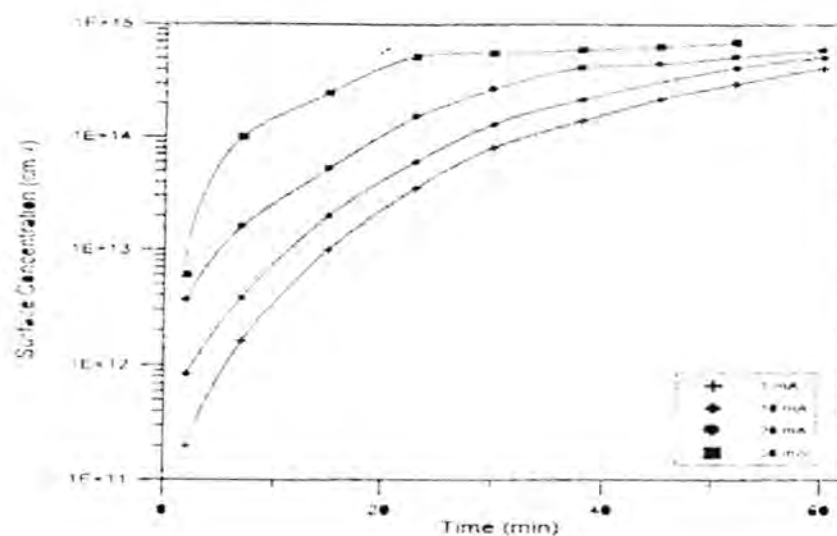


Fig.(5). Surface concentration with deposition time at different deposition current using LiBr as molten salts.

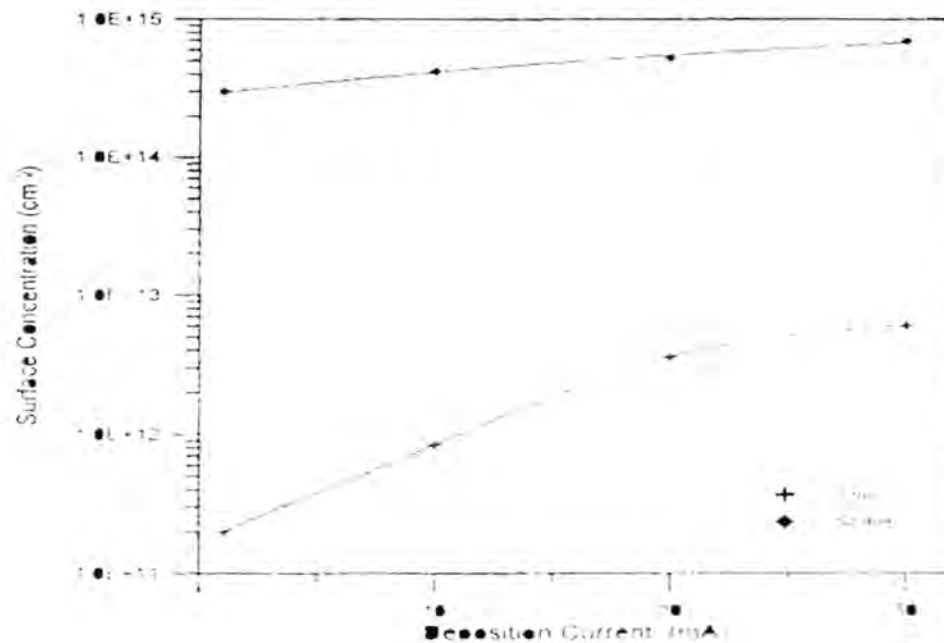


Fig.(6). Surface concentration as function of deposition current for different deposition time.

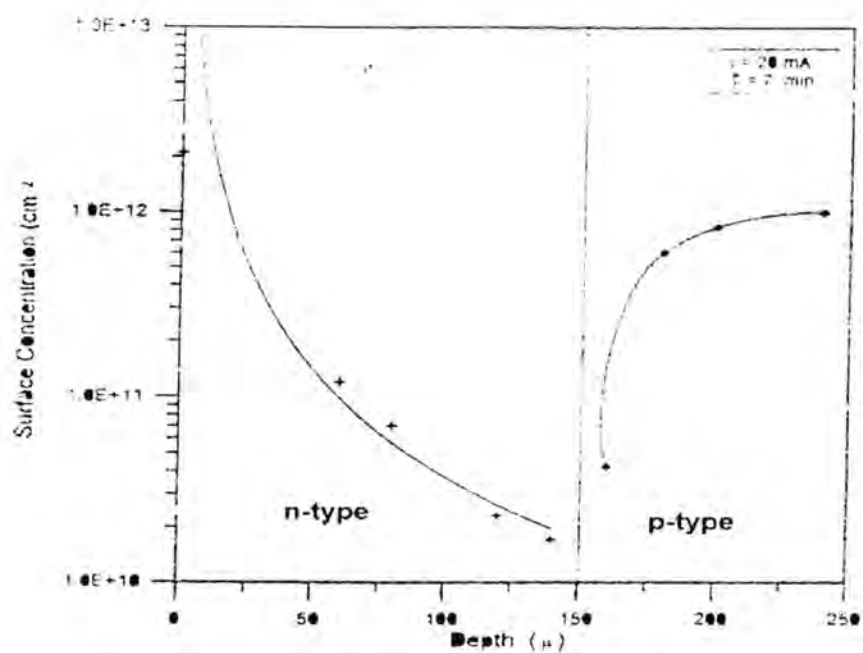


Fig.(7). Surface concentration as function of depth using KI salt with deposition time 7 min.

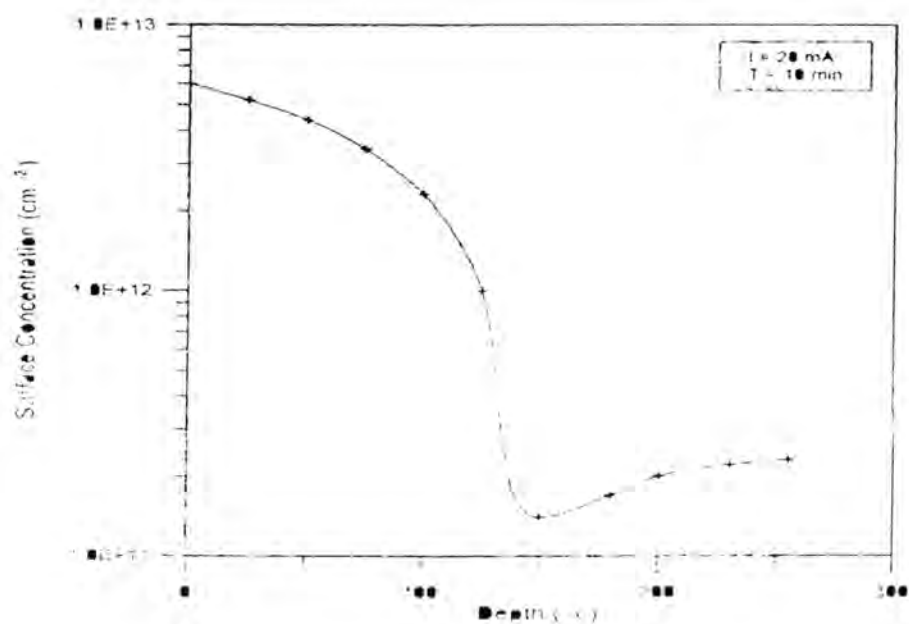


Fig.(8). Surface concentration as function of depth using LiBr salt with deposition time 10 min.

REFERENCES

1. Sze S.M ; Semiconductor Devices: Physics and Technology (John – Wiely and son; NewYourk 1985).
2. Hu S.M ; Atomic Diffusion in Semiconductors (D.Shaw , ed . Plenum Press 1973).
3. Schiavulli L ; thin Solid Films, (1989)
4. Mousa A. & Ismail R.A ; Engineering and technology. 15 No.1, (1996).
5. Eranna G. and Katati D.; Solid - State Electronics Vol. 25 No.7, PP. 611 (1982).
6. Kumar A., Viridi G.S , George P.J. , Chattopa S.K. and Nath N.; Microelectronics Journal Vol. 29 , PP299, (1998) .
7. Ho L.T.; Proceeding of the 14th “International Conference on Defects in Semiconductors. (Guest Editor; H.J. Von Bardclehen),1989.
8. Mousa A. and Sloum HZ.; accepted to published in Engineering and technology.
9. Ismail R. A. and Hadi A.A; Turk. J. Phys. Vol. 27 , PP145 (2003).
10. Brennan R. and Dickey D.; Solid State Technology Vol.27 No. 12 PP125 ,(1984).
11. K.Abbs M.; Thesis Ph.D., Department of Production Engineering and Metallurgy of University of Technology , ,IRAQ (1995).

THEORETICAL CALCULATIONS OF GAMMA-GAMMA ANGULAR CORRELATION OF $^{179}_{72}\text{Hf}(n, \gamma)^{180}_{72}\text{Hf}$

REACTION AND DELTA MIXING RATIOS

Iman Tarik Al-Alawy Department of Physics, College of Science, Al-Mustansiriyah University

تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

تاريخ تقديم البحث: 2005/2/21

E-mail: ImanTarik2006@yahoo.com

ABSTRACT

We examine the usefulness of the γ - γ (θ) technique for obtaining nuclear level spins and γ -ray multiplicities and hence leading to the identification of delta mixing ratios that are populated following neutron capture of $^{179}_{72}\text{Hf}(n, \gamma)^{180}_{72}\text{Hf}$ reaction. The angular correlation data were obtained using the 0.2152 MeV, $4_1^+ - 2_1^+$ transitions, as a gate since it has high intensity and the large a_2 and a_4 coefficients of $2_1^+ - 0_1^+$ transition give great sensitivity to the correlation data.

In this work we made theoretical analysis to solve the coincidence relations, angular correlation results, delta mixing ratios, and multiplicities.

The comparison was made between our theoretical calculations and the experimental data. The results show good agreement between them.

الخلاصة:

ان اشعة كاما المنبعثة من عملية اقتناص النيوترون لها اهمية كبيرة وقدرة في تحليل دراسة التركيب النووي. وان ربط القياسات العملية لانتقالات كاما الاولى مع نتائج الحسابات الموجودة من الممكن ان نعتبرها امتداد لدراسة التركيب النووي.

ان طريقة تطابق كاما-كاما في ايجاد مستويات الطاقة والبرم وتعدد القطبية تؤدي لإيجاد نسبة الخلط لانتقالات كاما المنبعثة نتيجة الاقتناص النيوتروني من تفاعل $^{179}_{72}\text{Hf}(n, \gamma)^{180}_{72}\text{Hf}$. ان نتائج الترابط الزاوي قد تم استحصاليها باستخدام الانتقال الكامي 0.2152 MeV للبرم $4_1^+ - 2_1^+$ ك بوابة قياس (gate)، وذلك لان لهذا الانتقال اكبر شدة وان معاملات a_2 و a_4 كبيرة للانتقال $2_1^+ - 0_1^+$ وله ارتباط بشلالات تعاقبية كثيرة.

في هذا البحث قمنا بتحليل نظرية لحل علاقات الترابط الزاوي وتسب الخلط وتعدد القطبية.

لقد تمت المقارنة بين الحسابات النظرية التي قمنا بها مع نتائج عملية فكانت متطابقة فيما بينها.

INTRODUCTION

Neutron capture γ -ray employs the most sensitivity and resolving power to study nuclear structure. The combination of precise measurements of primary γ -transitions with the precision obtained to date has considerably extended the possibilities in the study of nuclear structure.

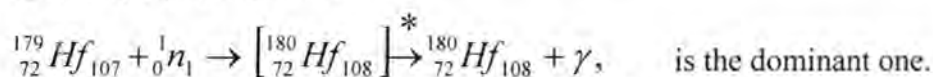
The nuclear excitation subject has attention of many authors [1-5] to improve the knowledge of the role forces play within the nucleus.

The (n, γ) reaction is the main frame of this work. This reaction has an important and specific rule in the testing of nuclear structure. Since we are using data taken by instruments of Institute Laue-Langevin (ILL) in Grenoble-France[6].

Most common angular distributions, which are symmetric around 90° , are described by second order Lagender polynomial ($P_2(\cos\theta)$), which means that, they are over determined in our study; but this redundancy is translated into higher measurement precision. Moreover, at least three measurement points are necessary when the distribution is described by ($P_4(\cos\theta)$) components, as it happens in the interesting case of E2 absorption followed by $L=2$ gamma emission. In case of overlapping states, also odd terms may appear in the Lagender polynomials.

Comparison between coincidence spectra of forward angles $18^\circ, 36^\circ, 54^\circ, 70^\circ$, and 90° and backward angles $108^\circ, 126^\circ, 144^\circ, 162^\circ$, and 180° would then be useful for detecting interference effects between opposite parity states. The 0° direction was never used because of exceedingly high intensity of the gamma-flash.

The theoretical identification of energy levels of $^{180}_{72}\text{Hf}$ is examine to be in the present work as deformed – rotor nucleus, SU (3)-O(6). The γ - γ directional correlation technique was applied to study neutron capture γ -rays. However, the $^{179}_{72}\text{Hf}(n, \gamma)^{180}_{72}\text{Hf}$ reaction,



This theoretical analysis had been done for even-even $^{180}_{72}\text{Hf}$ nucleus since the A_k -coefficients describing the $2_1^+ - 0_1^+$ transition are unique, and the $4_1^+ - 2_1^+$ transition is considered as a gate. This reduces the number of unknowns from five to two in a direct cascade represented by $I_i(L, L+1) I(\tilde{L}, \tilde{L}+1) I_f$; where $\tilde{L}=L+1$.

Special programs were to be written in Fortran-77 Language (using Fortran power station 90) for the calculations in the present work.

THEORY

Gamma-ray angular correlation coefficients are given in terms of the Legendre polynomials expansion as [7]:

$$W(\theta) = \sum_{k=\text{even}} a_k P_k(\cos \theta) \dots \dots \dots (1)$$

$$a_k = B_k(\gamma_1) A_k(\gamma_2) \dots \dots \dots (2)$$

The modification of the finite detector size and miss centering was according to the following equation:

$$W(\theta) = \sum_{k=\text{even}} B_k(\gamma_1) G_k Q_k A_k(\gamma_2) P_k(\cos \theta) \dots \dots \dots (3)$$

where

$Q_k = Q_{k1}(\gamma_1) Q_{k2}(\gamma_2)$ is the attenuation factor which corrects for the detector finite size, and

$G_k = G_{k1}(\gamma_1) G_{k2}(\gamma_2)$ is the miss centering correction factor.

The values of Q_k together with G_k values are shown in table -1. The $B_k(\gamma_1)$ and $A_k(\gamma_2)$ coefficients may be written as[8]:

$$B_k(\gamma_1) = \left\{ F_k(LLI_0I_1) + (-1)^{(L+L')} 2\delta_1 F_k(LL'I_0I_1) + \delta_1^2 F_k(L'L'I_0I_1) \right\} (1 + \delta_1^2)^{-1} \dots \dots \dots (4)$$

$$A_k(\gamma_2) = \left\{ F_k(LLI_2I_1) + 2\delta_2 F_k(LL'I_2I_1) + \delta_2^2 F_k(L'L'I_2I_1) \right\} (1 + \delta_2^2)^{-1} \dots \dots \dots (5)$$

where I_0 , I_1 , and I_2 are the initial, intermediate, and final states linked by the γ_1 , γ_2 -ray respectively and $L' = L+1$.

When the unobserved transition has mixed multipolarity with a mixing amplitude defined by $\delta = E(L+1)/M(L)$, then for γ -ray emission the U_k coefficients may be written as follows[7]:

$$U_k(L, L') = \frac{U_k(L) + \delta^2 U_k(L')}{1 + \delta^2} \dots\dots\dots (6)$$

Thus, the correlation function has the general form [7]:

$$W(\theta) = \sum_{k=\text{even}} B_k(\gamma_1) G_k Q_k U_k(\gamma_1) \dots U_k(\gamma_n) A_k(\gamma_2) P_k(\cos \theta) \dots\dots\dots (7)$$

and the normalized expansion form can be written as:

$$W(\theta) = 1 + a_2 G_2 U_2 P_2(\cos \theta) + a_4 G_4 Q_4 U_4 P_4(\cos \theta) \dots\dots\dots (8)$$

The correlation coefficient for a mixed E1+M2+E3 transition is permitted by the spin change and could be given as[7]:

$$\begin{aligned} A_k = & \{F_k(LLI_2I_1) + 2\delta_1 F_k(LL'I_2I_1) + \delta_1^2 F_k(LL''I_2I_1) \\ & + 2\delta_1\delta_2 F_k(L'L''I_2I_1) + \delta_1^2 F_k(L'L'I_2I_1) \\ & + \delta_2^2 F_k(L''L''I_2I_1)\} \{1 + \delta_1^2 + \delta_2^2\}^{-1} \dots\dots\dots (9) \end{aligned}$$

where

$$L'' = L' + 1 \dots\dots\dots (10)$$

$$\delta_1 = \langle I_2 \| M2 \| I_1 \rangle / \langle I_2 \| E1 \| I_1 \rangle \dots\dots\dots (11)$$

and

$$\delta_2 = \langle I_2 \| E3 \| I_1 \rangle / \langle I_2 \| E1 \| I_1 \rangle \dots\dots\dots (12)$$

and the corresponding expression for B_k may be expressed as[7]:

$$\begin{aligned} B_k = & \{F_k(LLI_oI_1) - 2\delta_1 F_k(LL'I_oI_1) + \delta_1 F_k(LL''I_oI_1) \\ & - 2\delta_1\delta_2 F_k(L'L''I_oI_1) + \delta_1^2 F_k(L'L'I_oI_1) \\ & + \delta_2^2 F_k(L''L''I_oI_1)\} \{1 + \delta_1^2 + \delta_2^2\}^{-1} \dots\dots\dots (13) \end{aligned}$$

For an M2+E1 transition and conversion in the k-shell the α_k conversion coefficient may be written as[7]:

$$\alpha_k(M2, E1) = [\delta^2 \alpha_k(M2) + \alpha_k(E1)] / (1 + \delta^2) \dots\dots\dots (14)$$

Where F_k coefficients, $\alpha_k(M2)$, and $\alpha_k(E1)$ are tabulated in Seighben (1965)[9].

The theoretical analysis in the present work is corresponding to the equations (4→14). Figure (1) shows the block diagram to the input and output data of program.

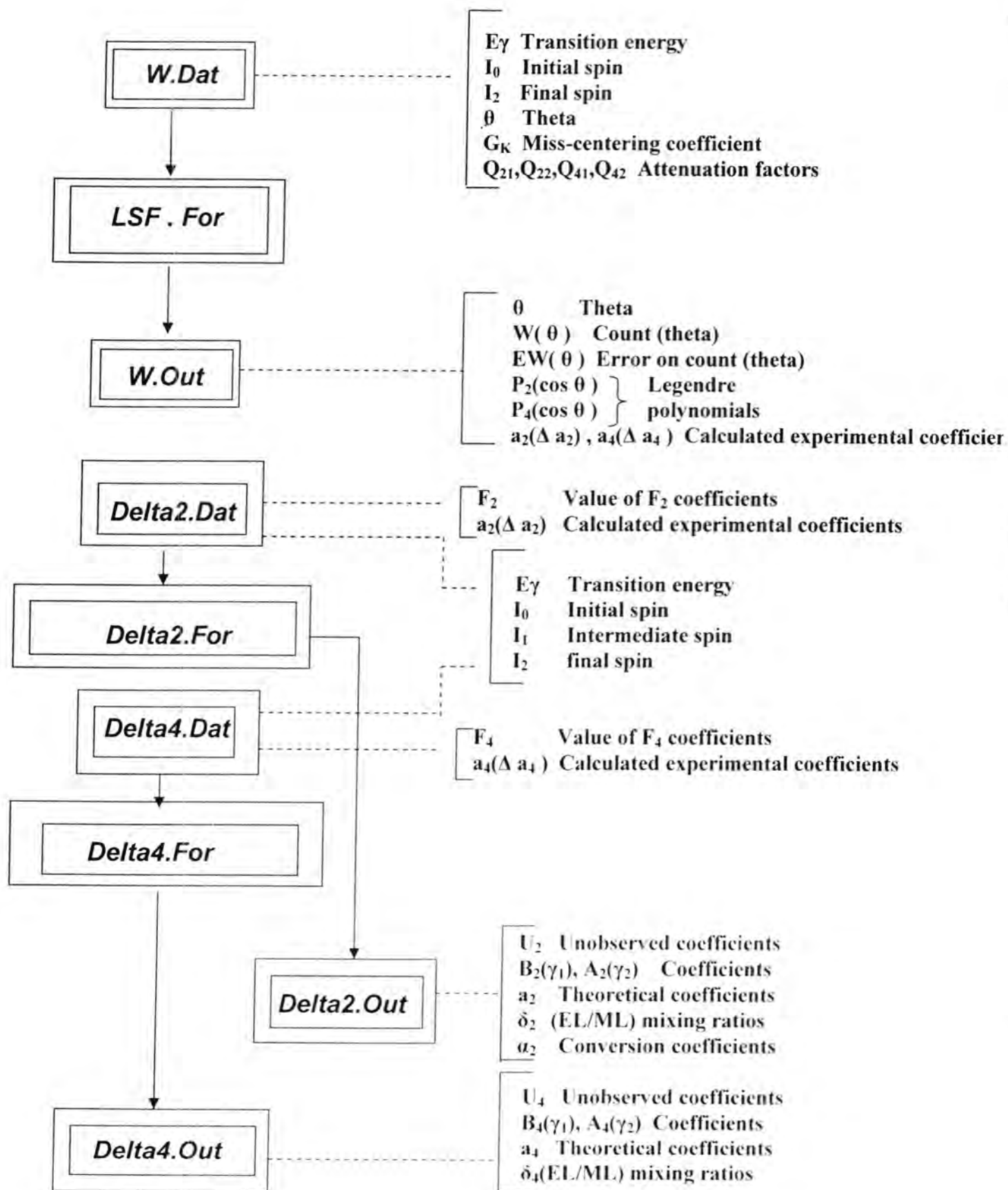


Figure (1): Block diagram for least squared fitting and delta mixing ratios programs.

RESULTS AND DISCUSSION

1. The angular correlation coefficients calculations of $^{180}_{72}\text{Hf}_{108}$

Figure (2) shows the scheme of cascade had been taken in this work corresponding to transition of 0.2152 MeV as a gate.

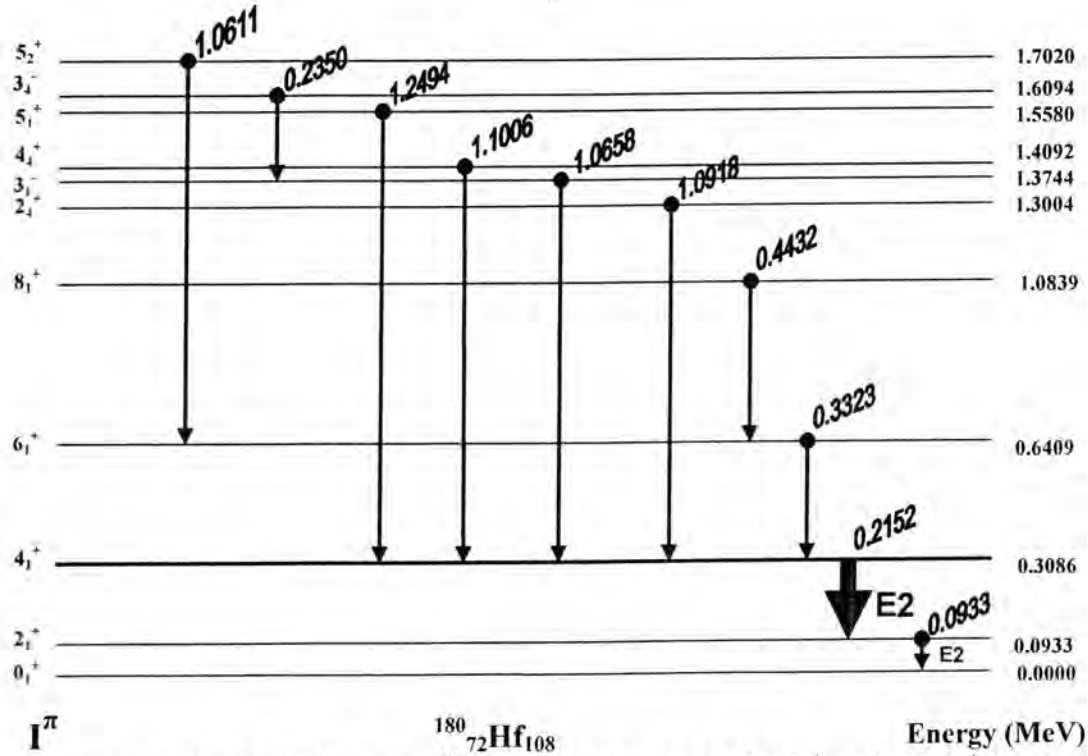


Figure (2) : Transitions in $^{180}_{72}\text{Hf}_{108}$ nucleus feed the 2_1^+ and the 4_1^+ levels. The gating transition is strong line.

The comparison of experimental of counts with their corresponding errors and the corrections needed related to their angles are presented in table -1. The agreement of the present work results for the measured transitions is good. The correlations and the fitted curves for gamma transitions are shown in figures (3→11).

The calculated experimental angular correlation coefficients and the our theoretical results with their indicated spin sequence for each cascade have been shown in table -2 with recommended delta mixing ratio and the deduced multipolarity.

The individual cascades have been taken for the gate of 0.2152MeV as shown in figure (2). These cascades will be discussed as follows.

• 1. The 0.2152-0.0933 MeV cascade

The 0.0933 MeV $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ and the 0.2152 MeV $4_1^+ \rightarrow 2_1^+$ transitions are intense transitions and most of the transitions in this nucleus feed the 0.0933MeV 2_1^+ and the 0.3086 MeV 4_1^+ levels.

After introducing the corrections related to the finite solid angle for detectors and miss centering, the calculated experimental correlation coefficients for the $4_1^+ - 2_1^+ - 0_1^+$ cascade are:

$$a_2=0.100(20), a_4=-0.035(31)$$

The theoretical parameters for a $4_1^+ - 2_1^+ - 0_1^+$ cascade are $a_2=0.118$, $a_4=-0.051$. It is clear that there is good agreement between them.

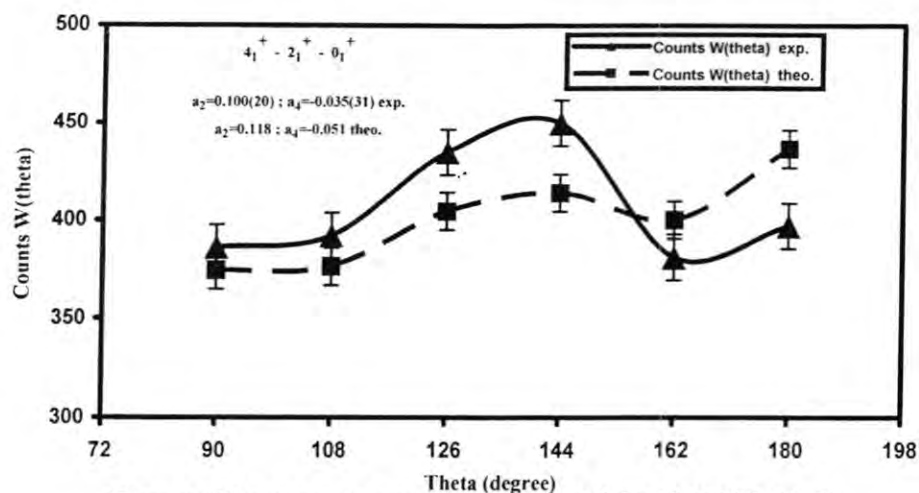


Figure (3) : Angular correlations of 0.2152-0.093 MeV gamma transitions and the fitted curves.

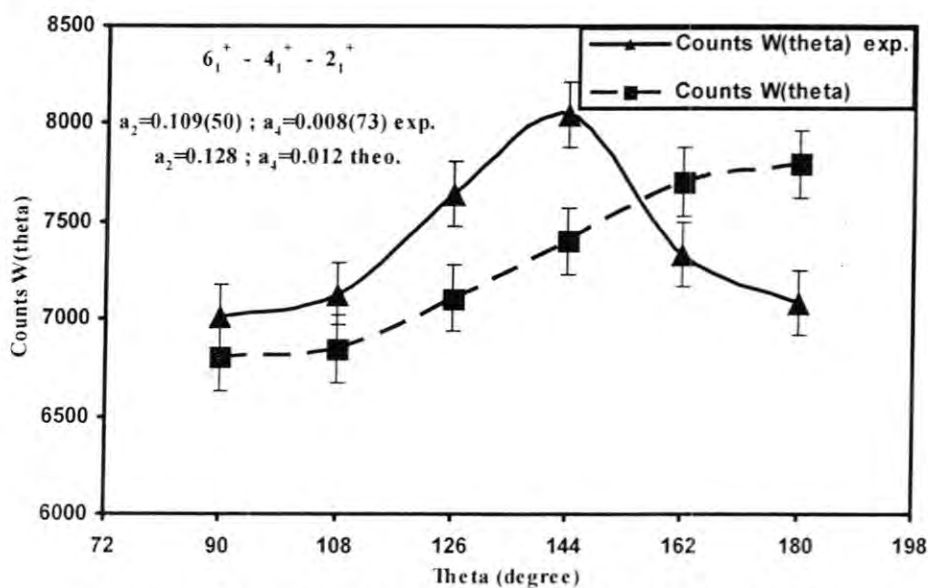


Figure (4) : Angular correlations of 0.332 -0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

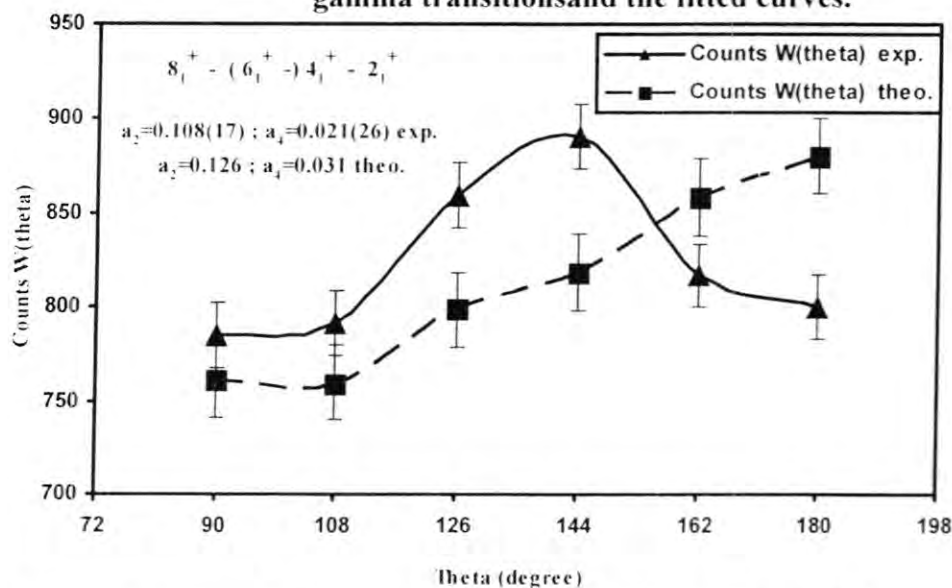


Figure (5) : Angular correlations of 0.443 -(0.332-) 0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

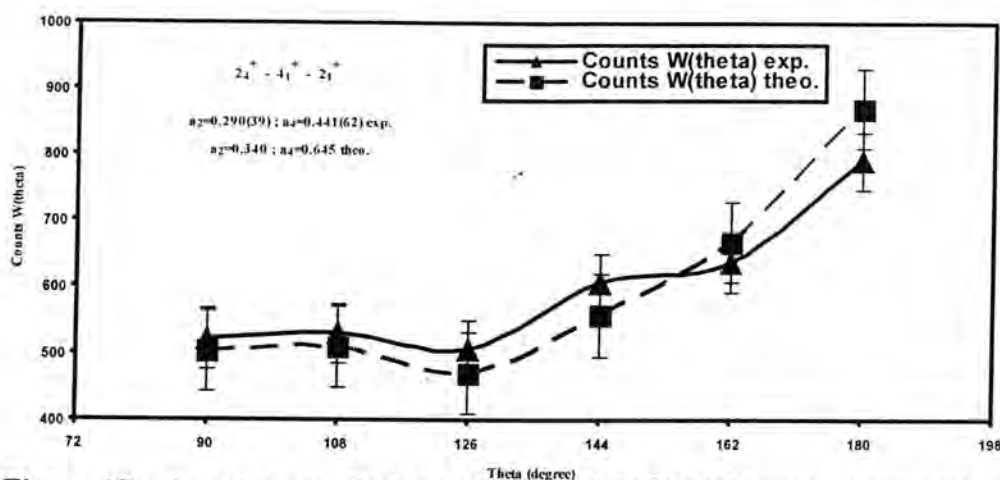


Figure (6) : Angular correlations of 1.092 -0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

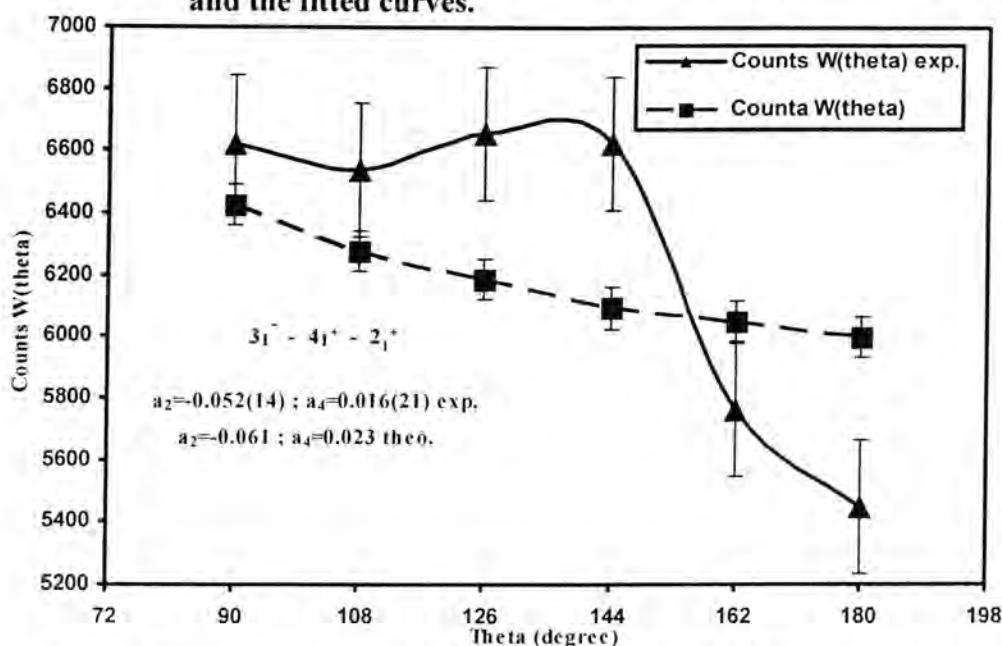


Figure (7) : Angular correlations of 1.0658-0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

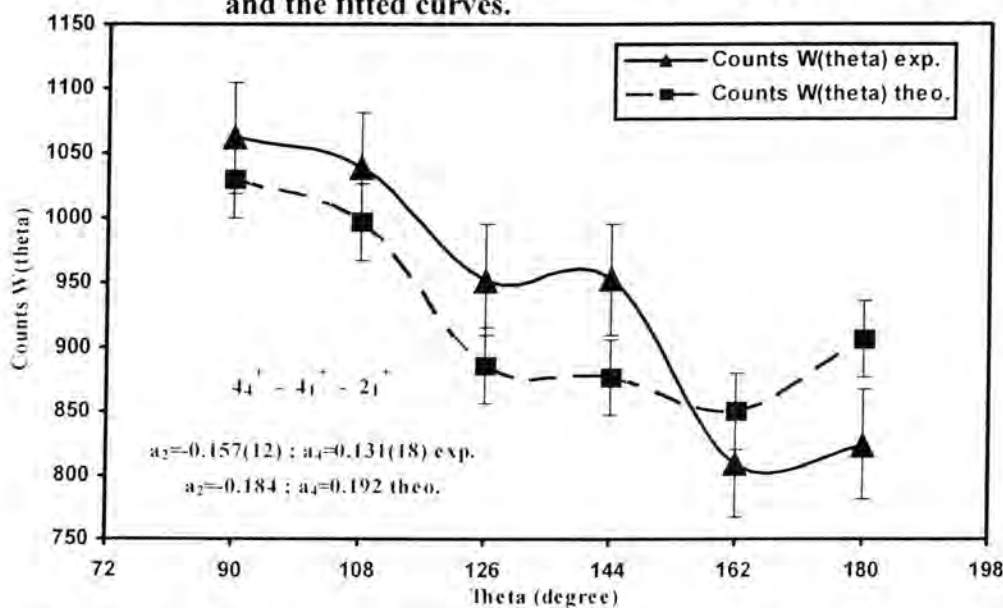


Figure (8) : Angular correlations of 1.101 -0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

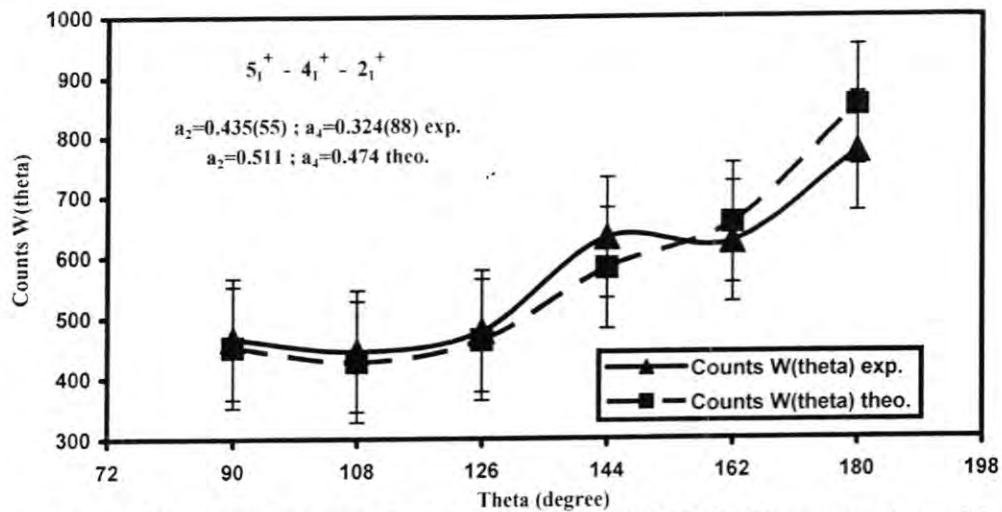


Figure (9) : Angular correlations of 1.249 - 0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

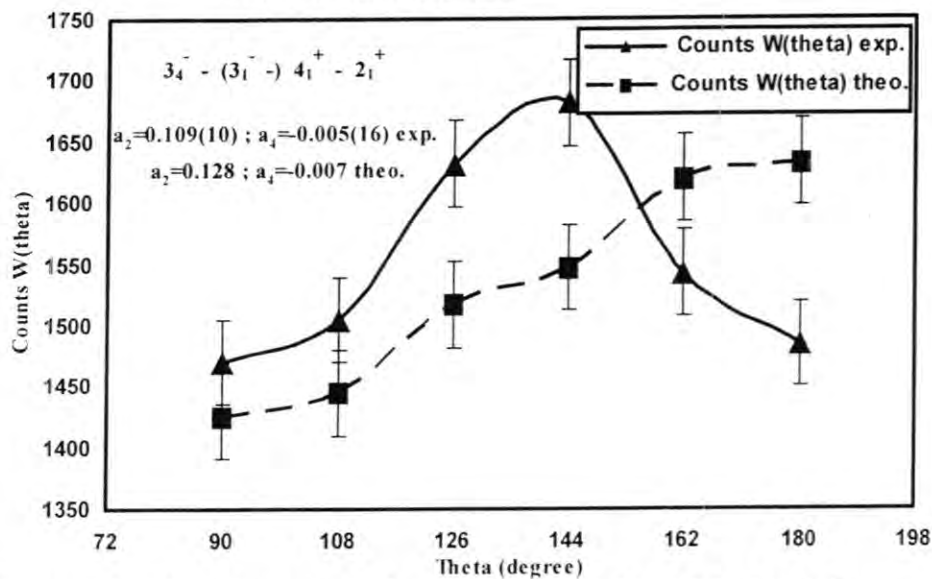


Figure (10) : Angular correlations of 0.235 - (1.066 -) 0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

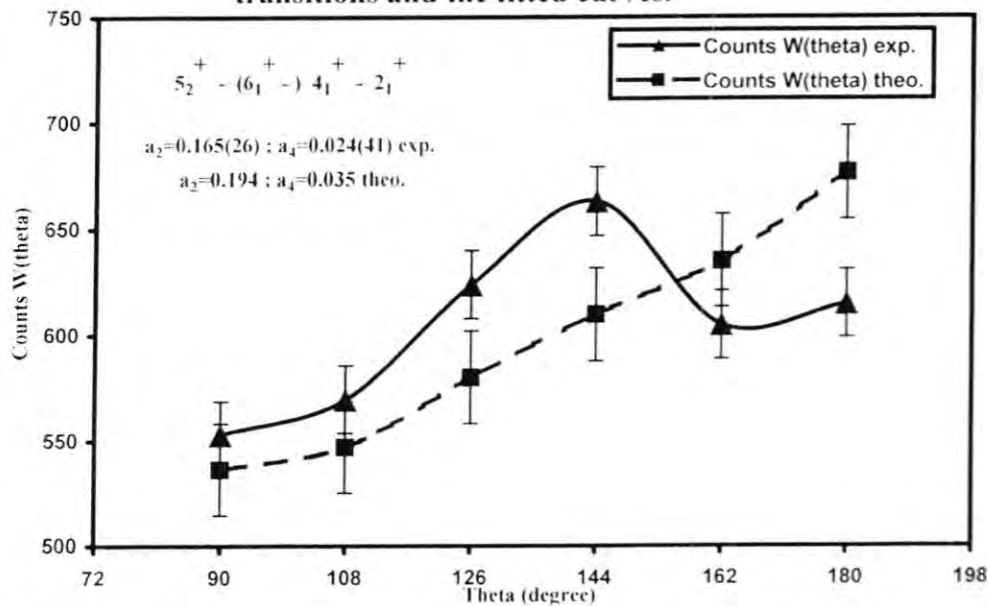


Figure (11) : Angular correlations of 1.061 - (0.332 -) 0.2152 MeV gamma transitions and the fitted curves.

• **2. The 0.3323-0.2152 MeV cascade**

The calculated directional correlation coefficients of this cascade which has the initial state 6_1^+ (0.6409MeV) and the intermediate state 4_1^+ (0.3086MeV) are;

$$a_2=0.0109(50), a_4=0.008(73)$$

The theoretical parameters for a $6_1^+-4_1^+-2_1^+$ cascade are $a_2=0.128, a_4=0.012$.

• **3. The 0.4432-(0.3323)-0.2152MeV cascade**

This cascade has a $8_1^+(6_1^+-)4_1^+-2_1^+$ spin sequence and the calculated experimental angular correlation coefficients are;

$$a_2=0.108(17), a_4=0.021(26)$$

The theoretical parameters $a_2=0.126; a_4=0.031$. The U_k coefficients, for the unobserved transition 0.3323MeV of $6_1^+-4_1^+$ gamma ray, are obtained by using the definition in equation (6). Where $U_2(0.3323)=0.9000, U_4(0.3323)=0.6861$ [7].

Therefore, we may arrange the following table to show the related parameters.

$4_1^+-2_1^+$	$A_2=-0.4477$	$A_4=-0.3044$
$(6_1^+-4_1^+)$	$U_2=0.9000$	$U_4=0.6861$
$8_1^+-6_1^+$	$B_2=-0.268(42)$	$B_4=-0.101(125)$

It is worth noting that data of the cascades which contain pure E2 transitions, namely the $4_1^+-2_1^+-0_1^+, 6_1^+-4_1^+-2_1^+,$ and $8_1^+-(6_1^+-)4_1^+-2_1^+$ cascades, are in good agreement with the theoretical values, and that is a positive judgment of the validity of the experiment.

• **4. The 1.0918-0.2152MeV cascade**

This cascade is $2_4^+-4_1^+-2_1^+$ spin sequence which occurs in the decay of $^{180}_{72}\text{Hf}_{108}$. The calculated experimental angular correlation coefficients are;

$$a_2=0.290(39), a_4=0.441(62)$$

The mixing ratio of the 1.0918MeV transition is $\delta(E2/M1)=-5.768^{+2.059}_{-5.824}$ and the spin assignment to the 1.3004 MeV level is confirmed to be 2^+ . The theoretical correlation coefficients are; $a_2=0.340, a_4=0.645$.

• **5. The 1.0658-0.2152 MeV cascade**

The 1.0658 MeV transition links the 1.3744MeV 3_1^- level with the 0.3086 MeV 4_1^+ level when 0.2152 MeV transition is the gate. The calculated experimental directional correlation coefficients are;

$$a_2=-0.052(14), a_4=0.016(21)$$

The 1.0658MeV transition is found to be predominantly E1 with mixing ratio; $\delta(M2/E1)=-0.104(16)$, as shown in table -2 and the spin assignment to the 1.3744MeV level is confirmed to be 3.

The theoretical correlation coefficients are; $a_2=-0.061, a_4=0.023$.

• **6. The 1.1006 -0.2152 MeV cascade**

This cascade is the $4_4^+-4_1^+-2_1^+$ spin sequence and the calculated experimental angular correlation coefficients are;

$$a_2=-0.157(12), a_4=0.131(18)$$

The mixing ratio of the 1.1006 MeV transition is $\delta(E2/M1)=2.513^{+4.818}_{-0.804}$ and the spin assignment to the 1.4092MeV level is confirmed to be 4. The theoretical correlation coefficients are $a_2=-0.184, a_4=0.192$.

• **7- The 1.2494-0.2152 MeV cascade**

The initial level of the 1.2494MeV transition is the 1.5580MeV and it is confirmed to be 5^+ state. The calculated experimental directional correlation coefficients are;

$$a_2=0.435(55), a_4=0.324(88)$$

The mixing ratio of the 1.2494MeV transition is calculated to be $\delta(E2/M1)=1.334^{+0.002}_{-0.005}$, and the theoretical correlation coefficients are; $a_2=0.511$, $a_4=0.474$.

• **8. The 0.2350 – (1.0658-) 0.2152 MeV cascade**

When the 0.2152MeV is the gate. The calculated experimental correlation coefficients for the $3_4^- (3_1^-) 4_1^+ - 2_1^+$ cascade are;

$$a_2=0.109(10), a_4=-0.005(16)$$

and agree with the theoretical correlation coefficients $a_2=0.128$, $a_4=-0.007$. Hence, the 0.2350MeV transition is found to be E1, and the spin assignment to the 1.6094 MeV level is confirmed to be 3.

The U_k coefficients, for the unobserved transition 1.0658MeV of $3_1^- 4_1^+$ gamma ray are $U_2(1.0658)$ and $U_4(1.0658)$. Therefore, the following table showing the related parameters taken from Hamilton, 1975[7];

$$\begin{array}{lll} 4_1^+ - 2_1^+ & A_2 = -0.4477 & A_4 = -0.3044 \\ (3_1^- - 4_1^+) & U_2(L) = 0.3167 & U_4(L) = -0.5000 \\ & U_2(L+1) = -0.1667 & U_4(L+1) = -0.1667 \end{array}$$

Since, the delta mixing ratio of the 1.0658 MeV transition is $\delta(E2/M1)=2.063^{+0.107}_{-0.101}$ (Here, theoretical delta mixing ratio is used since the experimental mixing ratio is not available). Therefore, the calculated values of U_k and B_k may arrange in the following table related to above parameters with the help of equation (2);

$$\begin{array}{lll} 4_1^+ - 2_1^+ & A_2 = -0.4477 & A_4 = -0.3044 \\ (3_1^- - 4_1^+) & U_2(1.0658) = 0.3252 & U_4(1.0658) = -0.4280 \\ 3_5^- - 3_1^- & B_2 = -0.749(69) & B_4 = -0.038(123) \end{array}$$

• **9. The 1.0611 – (0.3323-) 0.2152MeV cascade**

The 1.0611 MeV transition is in coincidence with the 0.3323MeV transition and therefore it should feed the 0.6409MeV 6_1^+ level and not the 0.3086MeV 4_1^+ level. Thus, the initial level of 1.0611 MeV transition is 1.7020 MeV which has been proposed to be as 5^+ . The calculated experimental correlation coefficients are;

$$a_2=0.165(26), a_4=0.024(41)$$

which agree with theoretical correlation coefficient $a_2=0.194$, $a_4=0.035$. The mixing ratio of the 1.0611 MeV transition is $\delta(E2/M1)=-9.6(1.7)$. The U_k coefficients for the unobserved transition 0.3323MeV of $6_1^+ - 4_1^+$ are [7];

$$\begin{array}{lll} 5_2^+ - 6_1^+ & A_2 = 0.1698 & A_4 = 0.0000 \\ (6_1^+ - 4_1^+) & U_2(L) = 0.9000 & U_4(L) = 0.6861 \\ & U_2(L+1) = 0.6107 & U_4(L+1) = -0.0490 \end{array}$$

Delta mixing ratio of the 0.3323 MeV transition is $\delta(E2/M1) = 1.888^{+0.292}_{-0.270}$. Therefore, the calculated values of U_k (using equation (6) and B_k could be arranged as;

$$\begin{array}{lll} 5_2^+ - 6_1^+ & A_2 = 0.1698 & A_4 = 0.0000 \\ (6_1^+ - 4_1^+) & U_2 = 0.614(685) & U_4 = -0.041(140) \\ 4_1^+ - 2_1^+ & B_2 = -0.600(95) & B_4 = -1.846(3.154) \end{array}$$

Using the definition of $U_2 A_2 B_2$. The error on B_4 is large. The value of B_4 agree with large mixing ratio obtained from B_2 which is $\delta(E2/M1)=1.888^{+0.292}_{-0.270}$.

2. Presentation of typical results

The δ value which is the unknown parameter in the measurement that we calculated in the present work and recommended the value for it as shown in table -2. In this section we were choosed two typical transition to be evaluated, first one discuss the negative parity of initial state and the second one to discuss pure E2 of one member of the cascade.

- **First cascade: $3_1^- - 4_1^+ - 2_1^+$**

The occurrence of more than two multipole components in a mixed transition is often permitted by the spin change but, as the relative strengths of transitions fall off very rapidly with increasing multipolarity, it is only under special circumstances that the presence of a third component may be seen. The E1+M2+E3 mixing occur when the lowest permitted multipole component is strongly retarded.

In the cascades which involve a change in parity, and where the selection rules allow triple mixing to take place a special treatment was used to deduce the values of $\delta(M2/E1)$ and $\delta(E3/E1)$ and estimate the errors on them. The errors plot is made for B_2 , B_4 and α_k in δ_1 - δ_2 space, such transitions present a particular problem for the evaluation of the relative amplitudes and phases of the multipole components, see equations (9,11,12). The corresponding expression for B_k may be obtained by using equation (13). Thus, even if the spins of the initial and final states are known it is not possible to evaluate δ_1 and δ_2 from a single correlation measurement. Figure (12) shows the analysis of the E1+M2+E3 mixing of the 1.0658-0.2152MeV $3_1^- - 4_1^+ - 2_1^+$ transition in $^{180}_{72}\text{Hf}$. Both directional distribution and correlation have been used and these give A_2 and B_2 coefficients, which are adequate to specify δ_1 and δ_2 as shown in table-2. The α_k conversion coefficient is also consistent with these results. α_k is calculated, using equation (14), to be 0.00665(5) as shown in figure (12), with $\alpha_k(M2)=0.1140$ and $\alpha_k(E1)=0.0053$ for 1.0658-0.2152MeV $3_1^- - 4_1^+ - 2_1^+$ transition in $^{180}_{72}\text{Hf}$.

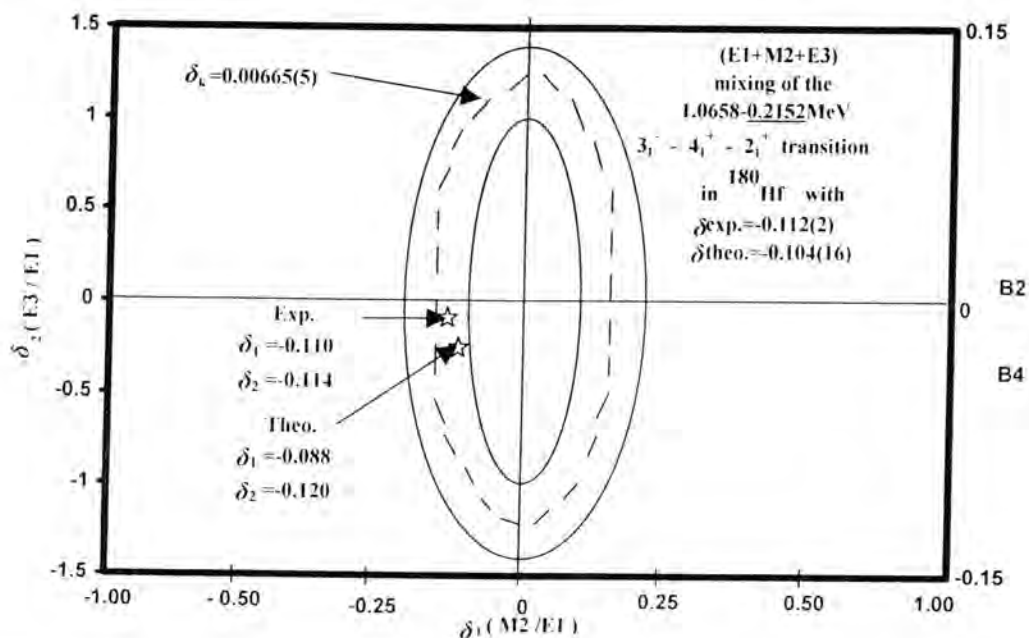


Figure-12: The results of directional distribution and correlation calculations and the K conversion coefficient of the 1.0658-0.2152 MeV transition in ^{180}Hf are shown in the plot of δ_1 (E2/M1) and δ_2 (E3/E1). The region of δ exp. and the recommended δ theo. values which are possible, are also shown.

• **Second cascade $4_1^+ - 2_1^+ - 0_1^+$**

The correlation data were obtained using the 0.2152MeV $4_1^+ - 2_1^+$ transition as a gate. Most intense cascades contain this γ -ray as a component and from the point of view of subsequent analysis it is the most suitable one since high intensity and the large A_2 and A_4 coefficients, which are -0.599 and -1.060 respectively, the $2_1^+ - 0_1^+$ transition give great sensitivity to the correlation data. The 0.3086 -0.0933MeV cascade contains the 0.2152MeV transition, which is a $4_1^+ - 2_1^+$ transition with pure E2 multipolarity.

Since one member of the cascade in the above example is pure E2; it is possible to plot the coefficient B_2 and B_4 corresponding to the mixed component. This is convenient to express the mixing ratio in terms of $Q = \delta_2 / (1 + \delta_2)$ [10]. This quantity is positive and ranges between 0 and 1 and is the fraction of $L+1$ radiation present in the transition. A plot of B_2 or A_2 versus Q is an ellipse with the a_2 and a_4 coefficients as its axes, as shown in figure (13), while the variation of B_4 or A_4 as a function of Q is of course a straight line, see equations (4,6), for $4_1^+ - 2_1^+ - 0_1^+$ transition from 0.3086MeV initial state with 0.2152 -0.0933 KeV gamma transition.

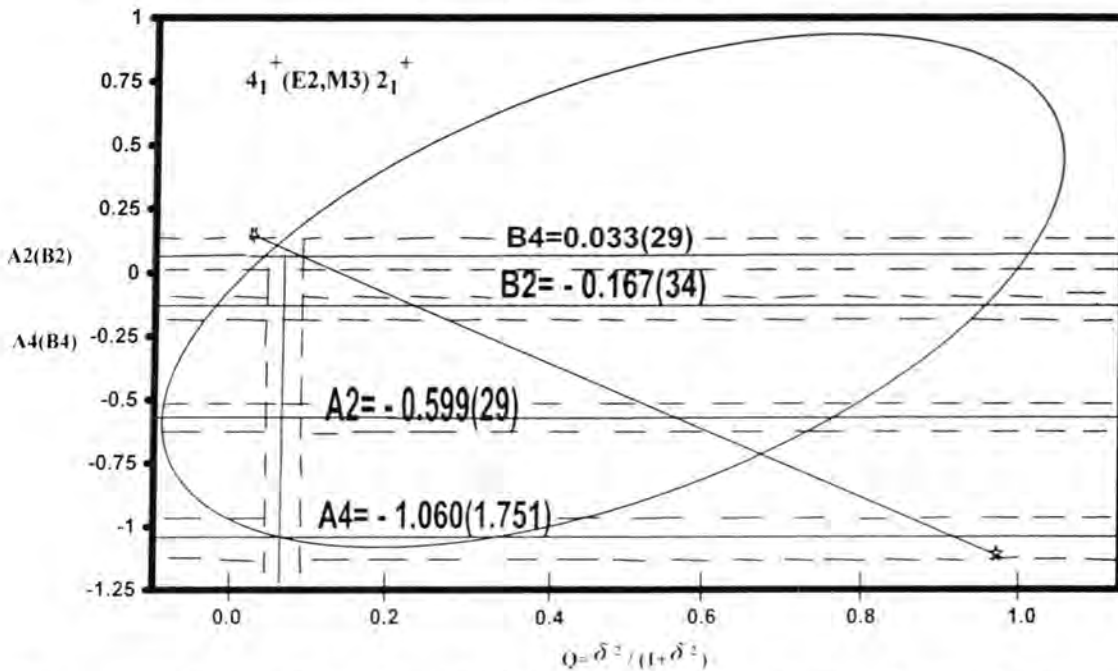


Figure (13): A plot of $A_2(B_2)$ and $A_4(B_4)$ as a function of $Q = \delta^2 / (1 + \delta^2)$ for $4_1^+ - 2_1^+$ transition. The displayed data are calculated in the present work. The B_2 and B_4 was obtained from the calculated of $4_1^+ - 2_1^+ - 0_1^+$ gamma-gamma correlation in ^{180}Hf and the A_2 and A_4 from the equivalent nuclear orientation measurement of a_2 and a_4 respectively. The value of Q derived from the calculated δ - values.

Table-1: Experimental and calculated values of $^{180}_{72}\text{Hf}_{108}$; for number of counts $W(\theta)$ and their errors (EW) measured at underlined gate 0.2152MeV. The data of energy are pointed to four decimal.

Initial level (MeV)	Transition energy (MeV)	Spin sequences	Experimental [6] counts W(θ) errors (EW)						Calculated (PW) counts W(θ) errors (EW)					
			90°	108°	126°	144°	162°	180°	90°	108°	126°	144°	162°	180°
0.3086	<u>0.2152</u> -0.0933	$4_1^- - 2_1^- - 0_1^-$	386 (7)	392 (9)	435 (8)	450 (12)	381 (8)	397 (9)	374.42 (6.79)	376.32 (8.64)	404.55 (7.44)	414.00 (11.04)	400.05 (8.40)	436.70 (9.90)
0.6409	0.3323- <u>0.2152</u>	$6_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	7011 (38)	7130 (40)	7644 (36)	8045 (38)	7335 (32)	7085 (33)	6800.67 (36.86)	6844.80 (38.4)	7108.92 (33.48)	7401.40 (34.96)	7701.75 (33.60)	7793.50 (36.30)
1.0839	0.4432-(0.3323-) <u>0.2152</u>	$8_1^- - 6_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	785 (13)	792 (14)	859 (16)	890 (15)	817 (14)	800 (14)	761.45 (12.61)	760.32 (13.44)	798.87 (14.88)	818.80 (13.80)	857.85 (14.70)	880.00 (15.40)
1.3004	1.0918- <u>0.2152</u>	$2_4^- - 4_1^- - 2_1^-$	520 (19)	530 (23)	505 (22)	605 (21)	635 (23)	790 (25)	504.40 (18.43)	508.8 (22.08)	469.65 (20.46)	556.60 (19.32)	666.75 (24.15)	869.00 (27.50)
1.3744	1.0658- <u>0.2152</u>	$3_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	6625 (95)	6539 (92)	6653 (96)	6620 (94)	5762 (92)	5449 (85)	6426.25 (92.15)	6277.44 (88.32)	6187.29 (89.28)	6090.4 (86.48)	6050.10 (96.60)	5993.90 (93.50)
1.4092	1.1006- <u>0.2152</u>	$4_4^- - 4_1^- - 2_1^-$	1062 (12)	1039 (13)	952 (12)	953 (11)	810 (13)	824 (12)	1030.14 (11.64)	997.44 (12.48)	885.36 (11.16)	876.76 (10.12)	850.50 (13.65)	906.40 (13.20)
1.5580	1.2494- <u>0.2152</u>	$5_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	465 (25)	445 (27)	498 (28)	632 (32)	625 (30)	775 (35)	451.05 (24.25)	427.20 (25.92)	463.14 (26.04)	581.44 (29.44)	656.25 (31.50)	852.50 (38.50)
1.6094	0.2350-(1.0658-) <u>0.2152</u>	$3_4^- - 3_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	1470 (14)	1505 (17)	1632 (18)	1682 (20)	1543 (16)	1485 (14)	1425.90 (13.58)	1444.80 (16.32)	1517.76 (16.74)	1547.44 (18.40)	1620.15 (16.80)	1633.50 (15.40)
1.7020	1.0658-(0.3323-) <u>0.2152</u>	$5_2^- - 6_1^- - 4_1^- - 2_1^-$	553 (15)	570 (14)	624 (17)	663 (18)	605 (17)	615 (15)	536.41 (14.55)	547.20 (13.44)	580.32 (15.81)	609.96 (16.56)	635.25 (17.85)	676.50 (16.50)
Centering corrections (G_k) are:			0.97	0.96	0.93	0.92	1.05	1.1						

Detector 1 (fixed): $\frac{Q_2}{Q_1} = 0.920$ $\frac{Q_4}{Q_1} = 0.822$
 Detector 2 (movable): $\frac{Q_2}{Q_3} = 0.926$ $\frac{Q_4}{Q_3} = 0.832$

Table -2: The directional correlation coefficients of gamma –ray transitions of $^{180}_{72}\text{Hf}_{108}$ are given with the corresponding spin sequence. The gating transition is underlined.

Initial level (MeV)	Transition energy (MeV)	Spin sequences	Calculated experimental coefficients (pw)				Delta mixing ratios (pw)				Deduced multipolarity (pw)
			Theoretical calculated coefficients (pw)				Calculated		$\delta_{\text{recommended}}$		
			$a_2(\Delta a_2)$	$a_4(\Delta a_4)$	$B_2(\Delta B_2)$	$B_4(\Delta B_4)$	δ_2	δ_4			
0.3086	0.2152-0.0933	$4_1^- \rightarrow 2_1^- \rightarrow 0_1^+$	0.100(20) 0.118	-0.035(31) -0.051	-0.167(34) -0.197	0.033(29) 0.048	E2	E2	E2	E2	
0.3469	0.3323-0.2152	$6_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.109(50) 0.128	0.008 0.012	-0.243(112) -0.285	-0.026(23) -0.039	E2	E2	E2	E2	
1.0839	0.4432-0.3323-0.2152	$8_1^- \rightarrow 6_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.108(17) 0.126	0.021(26) 0.031	-0.268(42) -0.241	-0.101(125) -0.069	E2	E2	E2	E2	
1.3094	1.0918-0.2152	$2_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.290(39) 0.340	0.441(62) 0.645	-0.648(87) -0.759	-1.449(204) -1.219	-0.195 -0.097 -5.768	+0.088 -0.097 +2.059 0.007 -5.824	+0.008 -0.057 +0.276 -0.171	+2.059 -5.824	$E2+(1.71^{+1.10}_{-1.03})\%M1$
1.3744	1.0658-0.2152	$3_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	-0.052(14) -0.061	0.016(21) 0.023	0.116(31) 0.136	-0.053(69) -0.076	-0.104(16) +2.809 11.798 -1.906	0.283(12) -0.283(12)	-0.104(16)		$E1+(1.07 \pm 0.02)\%M2$
1.4902	1.006-0.2152	$4_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	-0.157(12) -0.184	0.131(18) 0.192	0.351(27) 0.411	-0.430(59) -0.630	0.118 -0.034 +0.079 -1.209	+0.033 -2.513 -4.818 +4.880 2.513 -0.804	+0.804 -4.818 +4.880	+4.818 -0.804	$E2+(3.70^{+1.46}_{-1.66})\%M1$
1.5500	1.2494-0.2152	$6_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.435(55) 0.511	0.324(88) 0.474	-0.972(123) -1.141	-1.064(40) -1.556	1.334 +0.005 +0.132 -0.100	0.920(3) -0.920(3)	+0.002 -0.005		$E2+(5.99^{+2.32}_{-2.83})\%M1$
1.6934	0.2150-1.0658-0.2152	$1_1^- \rightarrow 3_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.109(10) 0.128	-0.005(16) -0.007	-0.749(69) -0.644	-0.038(123) -0.026	2.063 -0.101 0.014(20)	+0.107 0.239 -0.075 -0.075 -0.239 -0.118	+0.118 -0.075 -0.099 -0.099	+0.107 -0.101	$E1+(8.99^{+1.06}_{-1.01})\%M2$
1.9020	1.0658-0.3323-0.2152	$4_1^- \rightarrow 6_1^- \rightarrow 4_1^- \rightarrow 2_1^-$	0.065(26) 0.104	0.024(41) 0.035	-0.600(95) -0.469	1.846(3.154) 1.709	1.888 -0.270 +0.081 0.428 -0.066	+0.292 0.638 -0.099 -0.099 -0.638 -0.087	+0.087 -0.099 -0.099	+0.292 -0.270	$E2+(4.68^{+2.80}_{-2.61})\%M1$

(pw) = present work

REFERENCES

1. Hamilton J.H.: E2-M1 admixtures in transitions in deformed and transitional even-even nuclei. Proceedings of the International Conference on Angular Correlations in Nuclear Disintegration. PP.181-223 (1971). Published by Wolters-Noordhoff, Rotterdam University Press, Groningen. The Netherlands.
2. Lange J., Kumar K., and Hamilton J.H.: EO-E2-M1 multipole admixtures of transitions in even-even nuclei. Rev. Mod. Phys. Vol.54, No.1, PP.119-194 (1982).
3. Borner H.G.: Methods and new techniques in neutron capture gamma-ray spectroscopy. Institute of Physics Conference 'Capture Gamma Spectroscopy' Series number 88. PP. 143-160 (1987). Published by the Institute of Physics imprint by IOP Publishing Ltd. Great Britain by J.W.Arrowsmith LTD, Bristol.
4. De Haan R.C., Aprahamian A., Borner H.G., Doll C., Jentschel M., Bruce A.M., and Leshner S.R.: Lifetime Measurements in ^{178}Hf . Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. Vol.105, No.1, PP.125-131(2000).
5. Banerjee P.: Nuclear structure studies at Saha Institute of Nuclear Physics Using Gamma detector arrays. Journal of Physics. Indian Academy of Sciences. Vol.57, No.1, PP.41-55(2001).
6. Private communication with, Institute Laue-Langevin (ILL) at Grenoble-France.
7. Hamilton W.D.: The electromagnetic interaction in nuclear spectroscopy. PP. 645-698 (1975). Published by North-Holland Company. Amsterdam, Oxford.
8. Krane K.S.: E2, M1 multipole mixing ratios in even-even nuclei, $A \geq 152$. Atomic Data and Nuclear Data Tables. Vol. 16, No.4, PP. 383-408(1975).
9. Siegbahn K.: Alpha, Beta and Gamma-Ray Spectroscopy, Fauenfelder H. and Steffen R.M. Vol. II, 3rd printing, PP. 97-1008 (1968). Published by North-Holland Company. Amsterdam, Oxford.
10. Arns R.G., and Wiedenbeck M.L.: Gamma ray angular distribution and correlation measurements (I) experimental methods using radioactive sources. Phys. Rev. Vol. 111, No.3, P.1631-1645 (1958). Published in the electromagnetic interaction in nuclear spectroscopy. PP. 645-700(1975). Published by North-Holland Company. Amsterdam, Oxford.

The Real Simple Lie Algebra $sl(2, \mathbb{R})$: an Approximate Lie algebra for Abel's Equation

Qusay S. Abdul-Aziz Basrah University-Science College-Mathematics
Department

تاريخ قبول البحث: 2006/4/11

تاريخ تقديم البحث: 2006/2/5

E-Mail: qusaysoad78@yahoo.com

Abstract:

The problem of classification of Abel's equation (when increased in order to the second) is considered. It is based on investigating Lie's invariance conditions to obtain Lie algebra. It has been proved that the real simple Lie algebra $sl(2, \mathbb{R})$ can be realized as an approximate Lie algebra for this class of equations.

المستخلص :

تمت معالجة مسألة تصنيف معادلة أبل (عندما ترفع إلى الدرجة الثانية) وقد اعتمد في ذلك على بحث شروط لا تغاير لي لإيجاد جبر لي. وأثبتنا أن جبر لي الحقيقي البسيط $sl(2, \mathbb{R})$ يمكن أن يحقق كجبر لي تقريبي لمثل هذا الصنف من المعادلات.

Introduction:

In [1], M. Boyko had suggested an approach of description of integrable cases of the Abel equations. It is based on increasing of the order of equations up to the second one.

Abel's equation can readily be seen to arise in a variety of nonlinear problems [2]

Boyko had considered the following second order ODE.

$$y''(y' + f_0(y)) = y' f_1(y) + y'^2 f_2(y) + y'^3 f_3(y) + y'^4 f_4(y) \quad (1)$$

which is related to the Abel's equation of the 2nd kind

$$p'(p + f_0(y)) = p^3 f_4(y) + p^2 f_3(y) + p f_2(y) + f_1(y)$$

by the substitution $y' = p(y)$.

In the case when (1) admit two dimensional Lie algebra, then it is shown that eq.(1) is integrable in the frame work of the invariance Lie approach [1].

Invariance (Lie point analysis) of DE with respect to one-parameter groups of transformation in the space of independent and dependent variables carries important information, see [3] .

Many authors have studied what is called approximate symmetries [4,5] and properties of this kind of Lie point analysis are discussed by Gazizov [6] .It turns out that approximate symmetries form an approximate Lie algebra.

The plan of this paper is as follows:

In section (2) we calculate the characterizing system of equation (1) using Lie's invariance criterion. Solving partially two equations of them ,we construct a basis to the real simple algebra $sl(2, \mathbb{R})$ in section (3) .Finally in section (4) ,while testing the remaining determining equations we see that $sl(2, \mathbb{R})$ can be proved to be as an approximate Lie algebra for the class of equations.

Preliminary group classification of equation (1)

We are looking for infinitesimal operator of Lie point analysis of equation (1) in the form

$$Q = \xi(x, y)\partial x + \eta(x, y)\partial y$$

(2)

where ξ and η are arbitrary real-valued smooth functions .Operator (2) generates one-parameter invariance group of (1) , iff it's coefficients ξ and η satisfy the equation (Lie's invariance criterion):

$$\eta [y^{\bullet\bullet} f_0'(y) - y^{\bullet 4} f_4'(y) - y^{\bullet 3} f_3'(y) - y^{\bullet 2} f_2'(y) - y^{\bullet} f_1'(y)] + \eta^{(1)} [y^{\bullet\bullet} - 4y^{\bullet 3} f_4 - 3y^{\bullet 2} f_3 - 2y^{\bullet} f_2 - f_1] + \eta^{(2)} (y^{\bullet} + f_0) \Big|_{eq.(1)} = 0$$

(3)

where $y^{\bullet} = \frac{dy}{dx}$, $f_i'(y) = \frac{df_i}{dy}$, and

$$\eta^{(1)} = \eta_x + (\eta_y - \xi_{xx})y^{\bullet} - \xi_{xy}y^{\bullet 2}$$

$$\eta^{(2)} = \eta_{xx} + (2\eta_{xy} - \xi_{xx})y^{\bullet} + (\eta_{yy} - 2\xi_{xy})(y^{\bullet})^2 - \xi_{yy}(y^{\bullet})^3 + (\eta_y - 2\xi_x)y^{\bullet\bullet} - 3\xi_{xy}y^{\bullet}y^{\bullet\bullet}$$

After simplifying eq.(3) we represent it in the form of the following equations

$$f_0^2 \eta_{xx} - \eta_x f_1 = 0 \quad (4a)$$

$$f_4 \xi_y = 0 \quad (4b)$$

$$2\eta_y f_4 - 3\xi_x f_4 - \eta f_4' = 0 \quad (4c)$$

$$\eta_{yy} - (\eta_y - 2\xi_x) f_3 + (\eta_y - 2\xi_x) f_0 f_4 + \eta f_0 f_4' - \eta f_3' - \eta f_0' f_4 + \eta_x f_4 + (\eta_y - \xi_x) f_3 - 4(\eta_y - \xi_x) f_4 = 0 \quad (4d)$$

$$(2\eta_{xy} - \xi_{xx}) + 2f_0 \eta_{yy} + (\eta_y - 2\xi_x) f_2 + (\eta_y - 2\xi_x) f_0 f_3 + \eta f_0' f_3 - \eta f_2' - \eta f_0 f_3' + \eta_x f_3 + (\eta_y - \xi_x) f_2 - 4\eta_x f_4 - 3(\eta_y - \xi_x) f_3 = 0 \quad (4e)$$

$$\eta_{xx} + 2(2\eta_{xy} - \xi_{xx}) f_0 + f_0^2 \eta_{yy} + (\eta_y - 2\xi_x) f_1 + (\eta_y - 2\xi_x) f_0 f_2 + \eta f_0' f_2 - \eta f_1' - \eta f_0 f_2' + \eta_x f_2 + (\eta_y - \xi_x) f_1 - 3\eta_x f_3 - 2(\eta_y - \xi_x) f_2 = 0 \quad (4f)$$

$$2f_0 \eta_{xx} + f_0^2 (2\eta_{xy} - \xi_{xx}) + (\eta_y - 2\xi_x) f_0 f_1 + \eta f_0' f_1 - \eta f_0 f_1' + \eta_x f_1 - 2\eta_x f_2 - (\eta_y - \xi_x) f_1 = 0 \quad (4g)$$

first we solve (4a) which gives that

$$\eta_x = F(y) \exp\left(\frac{f_1}{f_0^2} x\right) \quad (5)$$

F is an arbitrary function.

According to eq.(5) the class of DEs (1) is divided into two subclasses when $f_1 = 0$ which leads to $\eta = F(y)x + G(y)$ and if $f_1 \neq 0$ which gives

$$\eta = F(y) \exp\left(\frac{f_1}{f_0^2} x\right) + G(y) \quad , G \text{ integration constant.}$$

From equation (4b) we have $f_4 = 0$ or $\xi = \xi(x)$.

The Lie algebra, representation of the group:.

A feature of Lie point analysis of a DE is that they constitute an algebra, a representation of the group. And since all the second order ODEs have eight point symmetries and so belong to the equivalence class of $y''=0$ [7] hence our equation will have the eight Lie point analysis $Q_1, Q_2, \dots, Q_8$. Moreover, any 2nd order ODE is completely specified by three Lie point analysis [8]. The three Lie point analysis for eq.(1) will be obtained in the following result.

Proposition .1

$sl(2,R)$ is a Lie algebra for equation (1) when $f_1 \neq 0$ and $f_4 \neq 0$

Proof .

$$\text{Let } Q_i = \xi_i \partial x + (F_i \exp\{F_0 x\} + G_i) \partial y, \quad i=1,2 \quad F_0 = \frac{f_1}{f_0^2}$$

It is clear that equation (1) is invariant under the operator $Q_3 = \partial x$. We have to satisfy the commutator relation of $sl(2,R)$, i.e.,

$$[Q_1, Q_3] = -2Q_3, \quad [Q_1, Q_2] = 2Q_2 \text{ and } [Q_2, Q_3] = 2Q_1$$

$$[Q_1, Q_3] = -\xi_1' \partial x - F_1 F_0 \exp\{F_0 x\} \partial y = -2\partial x$$

This implies that, $\xi_1' = 2$ and $F_1 F_0 \exp\{F_0 x\} = 0$ which means that ,

$$Q_1 = (2x + k_1) \partial x + G_1(y) \partial y, \quad k_1 \text{ arb. Const.}$$

To obtain : Q_2

$$[Q_1, Q_2] = 2Q_2$$

i.e.

$$(2x + k_1) \xi_2' - 2\xi_2 = 2\xi_2 \quad (6)$$

and

$$(2x + k_1) F_2 F_0 \exp\{F_0 x\} + G_1[(F_2' + F_2 F_0' x) \exp\{F_0 x\} + G_2'] - G_1'[F_2 \exp\{F_0 x\} + G_2] = 2(F_2 \exp\{F_0 x\} + G_2) \quad (7)$$

Eq. (6) leads to

$$\xi_2 = k_2 (2x + k_1)^2, \quad k_2 \text{ arb. Const.}$$

To satisfy the third relation

$$[Q_2, Q_3] = 2Q_1$$

$$[Q_2, Q_3] = -4k_2(2x + k_1)\partial x - F_2 F_0 \exp\{F_0 x\}\partial y$$

$$2Q_1 = 2(2x + k_1)\partial x + 2G_1(y)\partial y$$

Thus

$$-4k_2(2x + k_1) = 2(2x + k_1) \rightarrow k_2 = -\frac{1}{2}$$

and

$$-F_2 F_0 \exp\{F_0 x\} = 2G_1(y) \quad (8)$$

since $F_0 \neq 0$, hence eq.(8) cannot be satisfied unless $F_2 = G_1 = 0$. This result, when implemented in eq.(7) leads to $G_2 = 0$ too. Thus we get the operators:

$$Q_1 = (2x + k_1)\partial x$$

$$Q_2 = -\frac{1}{2}(2x + k_1)^2 \partial x$$

$$\text{and } Q_3 = \partial x \square$$

Approximate Lie algebra:

Since $\eta = 0$ and $\xi = \xi(x)$, for the previous discussion, the remaining characterizing system (4c-4g) will be reduced to the following equations:

$$\begin{aligned} \xi_x f_4 &= \xi_x f_3 = \xi_{xx} + 3\xi_x f_2 = (4f_0 f_2 - 3f_1 + 2f_2)\xi_x \\ &= (3f_0^2 f_2 - 2f_0 f_1 + f_1)\xi_x = 0 \end{aligned} \quad (9)$$

For the operator Q_3 , it is clear that $\xi_x = 0$ and consequently all the equation (9) are satisfied. While, if $\xi_x \neq 0$ as in Q_1 and Q_2 then we have the restrictions:

$$f_3 = f_4 = 4f_0 f_2 - 3f_1 + 2f_2 = 3f_0^2 f_2 - 2f_0 f_1 + f_1 = 0$$

Solving the equation $\xi_{xx} + 3\xi_x f_2 = 0$ yields that f_2 is constant (λ). If $\lambda \neq 0$

$$\text{then } \xi(x) = \frac{c_1}{\lambda} \exp(\lambda x) + c_2 \quad \text{or} \quad \xi(x) = c_1 \left(\frac{1}{\lambda} + x + \frac{\lambda}{2!} x^2 + \dots \right) + c_2$$

This expansion, when truncated, will recover Q_1 and Q_2 . Thus we have an approximate Lie algebra.

Conclusion:

The approach taken, is a combination of Lie point analysis and testing some types of Lie algebras. In this paper $sl(2,R)$ has been chosen to be the representation. The result, we get, of no realization is implemented to prove that this type of algebra can be an approximate one.

One can use the same approach to test other types of algebras.

Reference:

- [1]-Boyko V.M. Symmetry, Equivalence and integrable classes of Abel Equations, available from <http://arxiv:nlin.SI/0404020> v2 2005
- [2]-Hill J.M. Abel's Differential Equation, Math. Scientist, 1982, 7, 115-125
- [3]-Olver P. J. Applications of Lie Groups to Differential Equations Springer-Verlag, New York, 1986
- [4]-Fuchchich W. I. and Shtelen W. M. On Approximate Symmetry and Approximate Solution with a small parameter, J.Phys. A:Math. Gen.1989, 22, L887-L890
- [5]-Narain O. K., Mahomed, F. M. and Qu, C., Approximate conditional Symmetries for a nonlinear heat equation, The international conference MOGRAN 2000, Ufa, RUSSIA.
- [6]-Gazizov R.K. Lie algebras of approximate symmetries, Nonlinear Mathematical Physics, 1996, 3, N 1-2, 96-101
- [7] Cotsakis S. and Leah P.G.L. Symmetries, Singularities and Integrability in Nonlinear Mathematical Physics and cosmology. Proceeding of institute of Mathematics of NAS of Ukraine 2002, vol.43, part 1, 128-135.
- [8] Andripoulos K., Leach P.G.L. and Flessas G.P., Complete Symmetry groups of ODEs and their integrals: some basic considerations, J.Math.Anal.Appl.,2001,v.262,256-273.

مجلة علوم المستنصرية

مدير التحرير

الأستاذ الدكتور رضا ابراهيم البياتي

رئيس التحرير

الأستاذ الدكتور احسان شفيق دمير داغ

هيئة التحرير

عضو

أ.د. صبحي كمال حسون

عضو

أ.د. نجاه جواد العبيدي

عضو

أ.م.د. قيس جميل لطيف

عضو

أ.م.د. انعام عبد الرحمن ملوكي

عضو

أ.م.د. نعمة محسن لفقة

عضو

م.د. اقبال خضر الجوفي

بسم الله الرحمن الرحيم

تعليمات النشر لمجلة علوم المستنصرية

~~~~~

1. تقوم المجلة بنشر البحوث الرصينة التي لم يسبق نشرها في مكان آخر بعد إخضاعها للتقويم العلمي من قبل مختصين وبأي من اللغتين العربية أو الانكليزية .
2. يقدم الباحث طلبا تحريريا لنشر البحث في المجلة على أن يكون مرفقا بأربع نسخ من البحث مطبوعة على الحاسوب ومسحوب بطابعة ليزيرية وعلى ورق ابيض قياس (A4) مع قرص مرن (Disk) محمل بأصل البحث ويرفض البحث الذي يكون عدد صفحاته اكثر من 15 صفحة وبضمنها الاشكال والجداول على ان لا يكون الحرف اصغر من قياس 12 .
3. يطبع عنوان البحث واسماء الباحثين (كاملة) وعناوينهم باللغتين العربية والانكليزية على ورقة منفصلة شرط ان لا تكتب اسماء الباحثين وعناوينهم في أي مكان اخر من البحث ، وتعاد كتابة عنوان البحث فقط على الصفحة الاولى من البحث .
4. تكتب اسماء الباحثين كاملة بحروف كبيرة وفي حالة استخدام اللغة الانكليزية وكذلك الحروف الاولى فقط من الكلمات ( عدا حروف الجر والاضافة ) المكونة لعنوان البحث ، وتكتب عناوين الباحثين بحروف اعتيادية صغيرة .
5. تقدم خلاصتان وافيتان لكل بحث ، احدهما بالعربية والاخرى بالانكليزية وتطبع على ورقتين منفصلتين بما لا يزيد على (250) كلمة لكل خلاصة.
6. تقدم الرسوم التوضيحية منفصلة عن مسودة البحث ، وترسم على ورق شفاف (Tracing Paper) بالحبر الصيني الاسود ، وترفق ثلاث صور لكل رسم وتكتب المعلومات تحته على ورقة منفصلة.
7. يشار الى المصدر برقم يوضع بين قوسين بمستوى السطر نفسه بعد الجملة مباشرة وتطبع المصادر على ورقة منفصلة ، ويستخدم الاسلوب الدولي المتعارف عليه عند ذكر مختصرات اسماء المجلات.

8. يفضل قدر الامكان تسلسل البحث ليتضمن العناوين الرئيسية الاتية : المقدمة ، طرائق العمل ، النتائج والمناقشة ، الاستنتاجات ، المصادر ، وتوضع هذه العناوين دون ترقيم في وسط الصفحة ولا يوضع تحتها خط وتكتب بحروف كبيرة عندما تكون بالانكليزية .

9. يتبع الاسلوب الاتي عند كتابة المصادر على الصفحة الخاصة بالمصادر: ترقيم المصادر حسب تسلسل ورودها في البحث ، يكتب الاسم الاخير ( اللقب) للباحث او الباحثين ثم مختصر الاسمين الاولين فعنوان البحث ، مختصر اسم المجلة ، المجلد او الحجم ، العدد ، الصفحات ، (السنة) . وفي حالة كون المصدر كتابا يكتب بعد اسم المؤلف او المؤلفين عنوان الكتاب ، الطبعة ، الصفحات ، (السنة) الشركة الناشرة ، مكان الطبع .

10. بخصوص اجور النشر يتم دفع مبلغ (15000) خمسة عشر الف دينار عند تقديم البحث للنشر وهي غير قابلة للرد ومن ثم يدفع الباحث (15000) خمسة عشر الف دينار اخرى عند قبول البحث للنشر وبهذا يصبح المبلغ الكلي للنشر ثلاثون الف دينار .

~~~~~

المحتويات

الموضوع	رقم الصفحة
دراسة الانظيم (DNase) المنتج من العزلة المحلية <i>Serratia marcescens</i> المعزولة من خمج السبل البولية في بغداد حسن علي السعدي	١٠-١
الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية الاصطناعية ذات التغذية الامامية والتنافسية ندى ذنون أحمد	٢٦-١١
تأثير الغبار على قياسات متحسسات الاقمار الاصطناعية نوع لاندسات عوني أدوار، عمر برهان، عبد الوهاب حسين	٤٥-٢٧
تأثير التظليل بواسطة مانعات الشمس الأفقية لنوافذ باتجاهات مختلفة مهدي عبد الجبار، قيس جميل، أسامة طارق الطائي	٥٨-٤٦

دراسة الانزيم (DNase) المنتج من العزلة المحلية *Serratia marcescens* المعزولة من خمج السبل البولية في بغداد

حسن علي السعدي جامعة ديالى / كلية العلوم / قسم علوم الحياة والاحياء المجهرية
تاريخ تقديم البحث: 2005/8/21 تاريخ قبول البحث: 2006/1/24

الخلاصة

تم الحصول على ثلاثة عزلات تعود لبكتيريا *Serratia marcescens* من مجموع 60 عينة ادرار من مرضى مصابين بخرمج السبل البولية واطهرت نتائج التحري عن انتاج انزيم (DNase) اذ كانت العزلات الثلاثة (1، 2، 3) منتجة له وقد تميزت العزلة (2) بانتاجها العالي لهذا الانزيم واختيرت هذه العزلة لتنقية الانزيم المذكور بواسطة الترسيب بكبريتات الامونيوم والترشيح الهلامي باستخدام عمود Sephadex G-100 وكانت فعالية الانزيم وتركيز البروتين هي على التوالي : (11,74) وحدة/ مليلتر ، (0.85) ملغم/ مللتر .

Abstract

Three isolates were obtaining which belongs to *Serratia marcescens* from sixty urine samples of patients with urinary tract infection . Our study showed that all there isolates were producer of DNase, and the isolates (1,2,3)characterized with high enzyme production enzyme purification therefore was second isolate selected for the enzyme using ammonium sulfate precipitation and gel filtration using Sephadex G- 100, enzyme activity and protein concentration were (11,74)U/ml , (0.85)mg/ ml respectively.

المقدمة

بكتريا *Serratia marcescens* سالبة لصيغة غرام تسبب المرض في النباتات وفي مدى واسع من عوائل الفقريات واللافقرات (1)

وهي عصيات مستقيمة مايكروميتر الطول ، متحركة بواسطة اسواط محيطية . لاهوائية اختيارية ، كيميائية عضوية التغذية (Chemoorganotrophic) ، تنمو عند درجات حرارة (30-37)°م ، تستهلك سكر الكلوكوز والكاربوهيدرات الاخرى منتجة حامض وغالبا غاز ، سالبة لفحص الاندول ماعدا *S.odorifera* ، متغيرة في اختبار احمر المثل ، موجبة لفحص الستريت وفوكس بروسكاور ، معظم الانواع موجبة لفحص (Lysine decarboxylase) ، سالبة لفحص (Arginine dihydrolase) وموجبة لفحص Ornithine decarboxylase ، غير منتجة لغاز H₂S وغير محللة لليوريا ، وغير مستهلكة للـ (Malonate). والجدول (1) يظهر الصفات الكيميائية الحيوية للأنواع التابعة لجنس *Serratia* معظم السلالات منتجة لا نظيم Dnase ومحللة لزيت الذرة ، ومحللة عادة للجيلاتين . تتواجد في العينات السريرية للانسان ، التربة ، الماء ، اسطح النبات ، والبيئات الاخرى ، تتواجد في القناة الهضمية للحشرات ، هذه البكتيريا تنتقل الى المرضى الراقدين في المستشفيات مسببة الانتان الدموي (Septicemia) واصابات السبل البولية . تعزل الانواع الاخرى من قيح المرضى ، تسبب (mastitis) في الابقار والحيوانات الاخرى (2) . تنتج صبغة حمراء عادة ناشئة عند انتاج الـ prodigiosin (3) عوامل الفوعة في بكتريا *S.marcescens* تتمثل في انتاج انظيمات الـ DNase الـ chitinase الـ Protease (4) ، هذه العوامل ضرورية بالنسبة لهذه البكتريا لتمكنها من احداث الامراضية في العائل (5) .

تتمكن بكتريا *S.marcescens* من قتل *Caenorhabditis elegans* المسببة للاصابات المعوية (6) .

يقطع انزيم الـ Nuclease الأصرة S-phosphate ، 3¹-Oxygen الموجودة في جزيئة السكر ضمن قطع DNA ، RNA بوجود ايون المغنيسيوم (Mg²⁺) او عدة ايونات معدنية ، وقدرة الانزيم على قطع كلا من الشريط المفرد والمزدوج للركيزة بطريقة مشابهة (7) .

تمثل الاحماض الامينية الخمسة (Asn119, Glu127, Arg57, Arg87, His89) المنطقة التحفيزية التي ترتبط مع المادة الاساس (8) .

وجاءت هذه الدراسة لتهدف الى ماياتي:

عزل وتشخيص بكتريا *Serratia marcescens* من خمج السبل البولية والتحرري عن العزلات المنتجة لانزيم الـ DNase وايجاد فعاليته الانظيمية وتركيز البروتين في الانزيم المذكور والحصول على الأنزيم المنقى باستعمال عمود هلام السيفادكس ج - 100

جدول (1) يبين الصفات الكيميائية الحيوية للأنواع التابعة لجنس *Serratia* (2)

Test	<i>S. entomophila</i>	<i>S. ticaria</i>	<i>S. fonticola</i>	<i>S. grimesii</i>	<i>S. liquefaciens</i>	<i>S. marcescens</i>	<i>S. odorifera</i> biogroup 1	<i>S. odorifera</i> biogroup 2	<i>S. plymuthica</i>	<i>S. proteamaculans</i>	<i>S. rubidaea</i>
Voges-Proskauer	+	d	-	d	+	+	d	+	[+]	[+]	+
Lysine decarboxylase	-	-	+	+	+	+	+	+	-	+	d
Arginine dihydrolase	-	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-
Ornithine decarboxylase	-	-	+	+	+	+	+	-	-	+	-
Gelatin hydrolysis	+	+	-	+	+	+	+	+	d	+	+
Malonate utilization	-	-	[+]	-	-	-	-	-	-	-	+
D-Glucose, gas	-	-	[+]	+	[+]	d	-	[-]	d	+	d
D-Adonitol, acid	-	-	+	-	-	d	d	d	-	-	+
L-Arabinose, acid	-	+	+	+	+	-	+	+	+	+	+
Cellobiose, acid	-	+	-	-	-	-	+	+	[+]	-	+
Dulcitol, acid	-	-	+	-	-	-	-	-	-	-	-
Lactose, acid	-	[-]	+	-	-	-	d	+	[+]	-	+
Melibiose, acid	-	d	+	+	[+]	-	+	+	+	+	+
α -CH ₂ -D-glucoside	-	-	+	-	-	-	-	-	d	-	-
Raffinose, acid	-	d	+	+	[+]	-	+	-	+	+	+
L-Rhamnose, acid	-	d	[+]	-	[-]	-	+	+	-	d	-
D-Sorbitol, acid	-	+	+	+	+	+	+	+	d	[+]	-
Sucrose, acid	+	+	[-]	+	+	+	+	-	+	+	+
D-Xylose, acid	d	+	[+]	+	+	-	+	+	+	+	+
Deoxyribonuclease	+	+	-	+	[+]	+	+	+	+	+	+
Lipase	[-]	[+]	-	+	[+]	+	d	d	d	+	+
Pigment (red, pink, orange)	-	-	-	-	-	d	-	-	d	-	+

Test	<i>S. liquefaciens</i>	<i>S. proteamaculans</i> subsp. <i>proteamaculans</i>			<i>S. proteamaculans</i> subsp. <i>quinovora</i>	<i>S. grimesii</i>	
		biotype Clc	biotype EB	biotype RB		biotype Cld	biotype ADC
<i>trans</i> -Aconitate, growth	-	+	+	-	+	-	+
Adonitol, growth	-	-	(+)	-	-	-	-
Benzate, growth	-	-	(+)	d	-	+	-
<i>m</i> -Erythritol, growth	-	-	+	-	-	-	-
Gentisate, growth	-	-	-	+	-	-	-
<i>o</i> -Malate, growth	+	-	-	-	d	(d)	(d)
<i>l</i> -Rhamnose, growth	-	-	-	+	d	-	-
<i>m</i> -Tartrate, growth	+	-	-	-	d	-	-
Arginine dihydrolase	-	-	-	-	-	+	+
Esculin hydrolysis	+	+	+	+	-	+	+

Symbols: +, 90% or more positive; -, 10% or less positive; d, 11-89% positive; (+), positive in 3-7 days.

المواد وطرائق العمل :-

1- عزل وتشخيص بكتريا *S.marcescens* :

تم جمع 60 عينة من الادرار من المرضى الراقدين في مستشفى بغداد / مدينة الطب بعد تشخيصها سريريا من قبل الطبيب المختص للفترة من 2004/11/1 لغاية 2005/2/1 وتم زرع العينات على اوساط العزل الاولى المتمثلة بوسط اكار الدم وتم نقلت المستعمرات المفردة الى اوساط الاكار المغذي للحصول على المستعمرات النقية والمفردة وتم تشخيصها باستخدام الاختبارات الكيميائية الحيوية (2) .

2- التحري عن البكتريا المنتجة لانظيم الـ DNase:

استخدم وسط اكار الـ DNA للكشف عن العزلات البكتيرية المنتجة للانظيم المذكور ، اذ تم تحضير الوسط بأذابة 30 غم من اكار الـ DNase في لتر من الماء المقطر وازافة 0.01 % من صبغة التوليودين الزرقاء للوسط المذكور . وعدل الاس الهيدروجيني الى 7.3 وعقم بالموعصدة بدرجة حرارة (121) م ولمدة 15 دقيقة ، وصب في أطباق بتري معقمة. ونقلت المستعمرات النقية بوساطة عروة الناقل الى وسط اكار الـ DNA وحضنت الاطباق هوائيا عند درجة حرارة (37) م ولمدة (12-24) ساعة وقرأت في اليوم التالي مناطق التثبيط (9) . وانتخبت العزلات التي اعطت اعلى نسب تحلل.

استخلاص وتنقية انظيم الـ DNase (11) :

تم تنمية العزلة المنتجة لانظيم الـ DNase على وسط Tryptic soy broth وتم وضعها في حاضنة هزازة بدرجة (30) م ولمدة (24) ساعة وبسرعة (150) دورة / دقيقة. وفي اليوم التالي تم التحري عن فعالية الانظيم وتم التخلص من الخلايا البكتيرية بالنبد المركزي بسرعة (7000) دورة/ دقيقة. اهمل الراسب واخذ الراشح المحتوي على الانظيم المذكور اذ تم ترسيب الانظيم باضافة ملح كبريتات الامونيوم بنسبة تشبع (50%) . واخذ الراسب واهمل الراشح وتم ديلزة الراسب باستخدام اكياس الديلزة لمدة (24-48) ساعة ضد المحلول Tris- HCl (0.1) مولاري وتم الكشف عن خلو الانظيم من الملح باستخدام كلوريد الباريوم.

دراسة الانزيم (DNase) المنتج من العزلة المحلية *Serratia marcescens* المعزولة من خمج السبل البولية في بغداد
حسن علي السعدي

اضيف الانزيم الخام الناتج من عملية الترسيب بمقدار (5) مللتر الى عمود الترشيح الهلامي
Sephadex G- 100 بابعاد (2x50) سم وباضافة محلول Tris- HCl
(0.1) مولاري وجمع محلول الاسترداد المار خلال عمود الترشيح في انابيب الجمع وبمعدل
(3) مللتر / انبوب وقيست الامتصاصية عند (260،280) نانوميتر ورسم المنحنى الذي يظهر
قمم الامتصاصية.

تقدير فعالية انزيم الـ DNase:

تم تقدير الفعالية الانزيمية (11)

قدرت الفعالية الانزيمية وفقا للخطوات الاتية:-

- وضع 0.05 مللتر من محلول الانزيم (بعد اجراء التخفيف المناسب) في انابيب اختبار
سعة 5 مللتر.
- اضيف 0.2 مللتر من محلول الركيزة الى المحلول الانزيمي وحضنت الانابيب بدرجة
حرارة 37م لمدة 10 دقائق.
- نقلت الانابيب الى حمام ثلجي (ice bath) واضيف لها في الحال مللتر من محلول
0.2 عياري حامض البركلوريك المبرد وتركت لمدة 10 دقائق للسماح بترسيب الـ DNA
غير المتحلل.
- نبذ المحلول مركزيا بسرعة 6000 دورة بالدقيقة لمدة 15 دقيقة.
- قيس الامتصاصية الضوئية للطافي عند طول موجي 260 نانوميتر بوساطة جهاز
المطياف الضوئي للأشعة فوق البنفسجية
(UV-Spectrophotometer) .
- وقدرت الفعالية الانزيمية (على اساس تحلل Degradation الحامض النووي DNA
او RNA الى نيوكليوتيدات ذائبة في الحامض بفعل الانزيم وعلى فرض المعادلة الاتية:-

$$\text{Activity (unit/ml)} = \frac{\Delta_{\text{Abs}}}{10} \times \frac{2.25}{0.05 \times 1}$$

اذ ان :

Δ_{Abs} = مقدار الامتصاصية عند طول موجي 260 نانوميتر .

2.25 = الحجم الكلي لوسط التفاعل (مللتر) .

10 = زمن التفاعل (دقيقة) .

0.05 = حجم محلول الانزيم المضاف (مللتر) .

1 = ثابت من قانون الفعالية .

(وتمثل وحدة الفعالية للانزيم مقدار التغير في الامتصاصية عن (1) للنيوكلينوتيدات الذائبة في الحامض على طول الموجي 260 نانوميتر بعد مدة حضائه 10 دقائق بدرجة حرارة 37م وتحت ظروف الاختبار القياسية) .

تقدير تركيز البروتين:

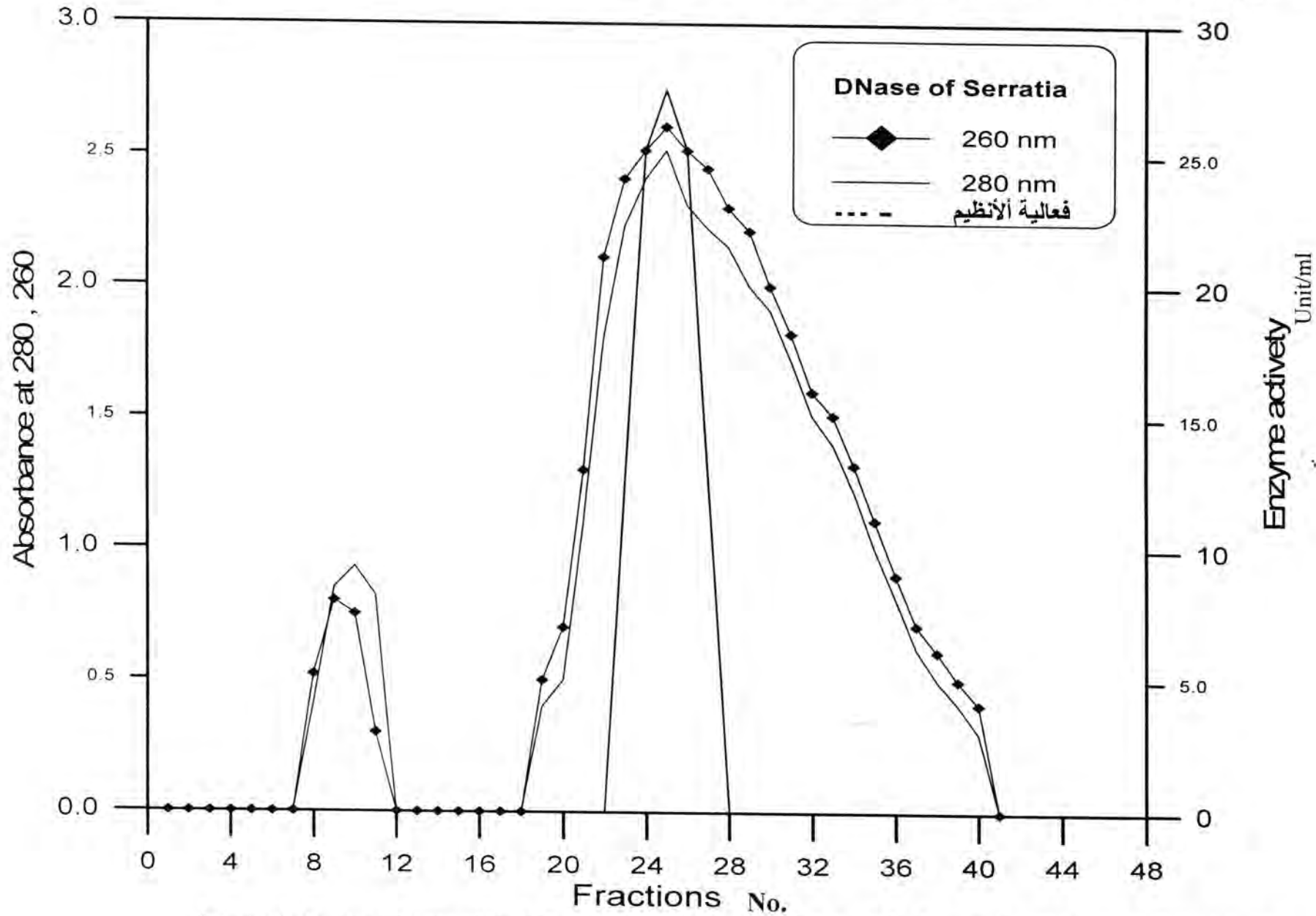
تم تقدير تركيز البروتين (12) وذلك بتطبيق القانون التالي:

$$\text{تركيز البروتين (ملغم/مل)} = 1.55 \times \text{الامتصاصية (280)} - 0.77 \times \text{الامتصاصية (260)}$$

النتائج والمناقشة:

تم الحصول على ثلاثة عزلات تعود لبكتريا الـ *Serratia marcescens* من مجموعة (60) عينة ادرار من المرضى المصابين بخمج السبل اليولية وقد شخّصت العزلات (2) .

اظهرت نتائج هذه الدراسة ان العزلات الثلاثة (3,2,1) كانت منتجة لانزيم الـ DNase من خلال ملاحظة منطقة التحلل الشفافة حول المستعمرات البكتيرية اذ تراوحت اقطارها على التوالي (30,34,36) ملم واختيرت العزلة (2) لاستخلاص وتنقية الانزيم وتم ترسيب الانزيم باستخدام كبريتات الامونيوم بتسبع مقداره (50%) وتم ديلزته ضد محلول Tris-HCl خلال (48) ساعة وتبين من خلال عملية فصل الانزيم ان انابيب الفصل المحتوية على محلول الاسترداد Tris- HCl المتمثلة في الانابيب (22, 23, 24, 25, 26, 27, 28, 29) انها كانت تحتوي على الانزيم المذكور بعد قراءتها على الاطوال الموجية (260, 280) نانوميتر واكد ذلك باستخدام الفحص بأكار الـ DNase ، وتم قياس فعاليته وتركيز البروتين فكانت على التوالي (11.74) وحدة /مللتر ، (0.85) ملغم / مللتر . الشكل (1) يظهر منحنى الامتصاصية لانابيب الفصل المحتوية على انزيم الـ DNase .



الشكل (١) يظهر منحنى الامتصاصية لانايبب الفصل المحتوية على انزيم DNase باستخدام هلام السيفادكس G100 بجريان ٣٠ ملليتر / ساعة

References:

- 1- Grimont , P.A. and Grimont , F. The genus *Serratia*. Annu. Rev. Microbiol.32: 221-248. (1978).
- 2- Holt ,J.G., Kreig , N.R.; Sneath, P.H.A.; Staley ,J.T.& Williams , S.T..Bergy's Manual of Determinative Bacteriology , 9th ed. Williams &Wilkins.(1994)
- 3- Thomson, N.R.,Crow, M.A., McGowan, S.J.,Cox,A. and Salmond, G.P..Biosynthesis of carbapenem antibiotic and prodigiosin pigment in *Serratia* is under quorum sensing control. Mol. Microbiol.36:539-556.(2000)
- 4- Chen,Y.C.;Shipley,GL.;Ball,TK.,Benedik,MJ. Regulatory mutants and transcriptional control of the *Serratia marcescens* extracellular nuclease gene . Mol.Microbiol.6:643- 651. (1992).
- 5- Tan, M.W.and Ausubel,F.M.. *Caenorhabditis elegans*: a model genetic host to study *Pseudomonas aeruginosa* a pathogenesis .Curr.Opin.Microbiol.3: 29- 34.(2000).
- 6- Mallo,G.V.,Kurz, C.L., Couillault,C., Pujol,N.,Granjeaud, S., Kohara, Y. and Ewbank, J.J..Inducible antibacterial defence system in *C.elegans*. Curr. Biol. 12: 1209- 1214. (2002).
- 7- Nestle,M. and Roberts , W.K..Cited in: Friedhoff, P.,Kolmes, B., Gimadutdinow ,O., Wende, W., Krause, K.L.,and Pingoud, A.1996. Analysis of the mechanism of the *Serratia* nuclease using site- directed mutagenesis. Nucleic Acids Res. 2632-2640. (1969).
- 8- Friedhoff, P.Kolmes, B. ,Gimadutdinow, O., Wende ,W., Krause, K.L., and Pingoud, A-.Analysis of the mechanism of the *Serratia* nuclease using site- directed mutagenesis. Nucleic Acids Res.2632- 2640. (1996).
- 9- Jeffries,C.D..Comparision of six physiological characteristics of staphylococci from laboratory specimens. American J.of Clin.Path.36: 114-118.(1961)

- 10- McAlister, V., Zou, C.; Winslow, R.H., and G.E.Christie ..Purification and invitro characterization of the *Serratia marcescens* Nuc C protein ,a zinc-binding transcription factor homologous to P2 Ogr. J. of Bacteriol. 185:1808 – 1816.(2003).
- 11- Marker , S.C. and Gray, E.D.. Simple method for the purification of streptococcal nuclease. Appl. Microbiol .23(2): 368-371.(1972).
- 12- Johnstone ,A., and Thorpe. Immunochemistry in Practice. P.152.3^d ed. U.S.A.(1996).

الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية الاصطناعية ذات التغذية الامامية والتنافسية

ندى ذنون أحمد علوم الحاسبات / كلية العلوم الجامعة المستنصرية / العراق
تاريخ تقديم البحث: 2005/12/5 تاريخ قبول البحث: 2006/3/7

الخلاصة

شاع حديثا استعمال الشبكات العصبية الاصطناعية والخوارزميات الجينية المستلهمة من أساس بيولوجي في معظم مجالات المعرفة . أحد التطبيقات الناجحة للخوارزميات الجينية هو استعمالها لتصميم ولتعلم الشبكات العصبية الاصطناعية . هذا البحث يبرهن تجريبيا اقتدار الخوارزميات الجينية على اكتشاف قواعد تعلم للشبكات العصبية الاصطناعية المنتمية لمعمارياتي التغذية الامامية والتنافسية. وللحصول على قواعد التعلم المناسبة يستعمل هذا البحث الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار (SSGA) مع احلال المجموعات الثنائية والثلاثية. ولقد اوضحت التجارب اقتدار هذا التوجه على اكتشاف تقريبا كل قواعد التعلم الأساسية المعروفة إضافة إلى عدد كبير آخر هو في الحقيقة توليفات من حدود تلك القواعد الأساسية المعروفة.

Abstract

At most of knowledgment horizons, both the Artificial Neural Networks and the Genetic Algorithms, derived from biological roots, are commonly used now days.

One of the most successful Genetic Algorithm applications, is its usage in designing and learning the Artificial Neural Networks. The research proves experimentally the ability of the genetic algorithms, in discovering learning rules of Artificial Neural Networks belonging to competitive and feed forward. In order to achieve every proper learning rule this research for this purpose, adopts the Steady State Genetic algorithm with binary and triple replacement successfully for this aim.

Tests showed a competence in this field in discovering all well-known fundamental rules, in addition to others, which they are actually, similarities taken from the same fundamentals.

مقدمة

فكرة الجمع بين الخوارزميات الجينية والشبكات العصبية الاصطناعية بدأت في الظهور في أواخر الثمانينيات وقد ولدت مجالا بحثيا خاصا فيه تعالج الخوارزميات الجينية مشاكل الشبكات العصبية الاصطناعية حيث استعملت الخوارزميات الجينية لتشفير أوزان موصلات الشبكة العصبية فقد استعملها الباحث ديفيد مونتانا ورفاقه في مسالة تمييز الاشارات تحت الماء [1] وكذلك البحث الذي قام به بورات ورفاقه [2] حيث استخدم الخوارزمية الجينية لتدريب الشبكة لمسالة XOR مستعملا التشفير الثنائي . وكذلك استخدمت الخوارزمية الجينية لتشفير تبولوجية الشبكة العصبية ومن الباحثين في هذا المجال جيوفري ورفاقه [1] وميللر وشافير وغيرهم من الباحثين [2]. وقد اعطت طرقهم نتائج مثيرة لأمثلية تصميم الشبكة العصبية. وحديثا ركزت البحوث على العلاقة بين التطور والتعلم. فقد اصبح واضحا أن الشبكة العصبية الجينية توفر أداة نمذجة مثالية في هذا الاتجاه: الخوارزميات الجينية توفر نموذجا رائعا للتطور والشبكة العصبية توفر آليات تعلم مقادرة وبسيطة. ومن البحوث في هذا المجال البحث الذي قام به مارتن ورفاقه [2] وذلك لتدريب الشبكة حيث يتم البدء بالخوارزمية الجينية وبعد الوصول الى حالة التوازن يتم الانتقال الى خوارزمية انسياب الخطا خلفا . اما ديفيد شالمرز [4], [3] سلك اتجاها مختلفا فيه تكون عملية التعلم نفسها هي كيان التطور. وذلك باستعمال الخوارزمية الجينية التي تحتوي على كروموسومات (قواعد تعلم ممكنة للشبكات العصبية) غير مقادرة على التعلم وإخضاعها للعوامل الجينية خلال فترة حياتها وملاحظة ما إذا كان ممكنا بزوغ قواعد تعلم للشبكات العصبية كفاءة . هذا الباحث استعمل الخوارزميات الجينية البسيطة (SGA) لاكتشاف قواعد تعلم للشبكات العصبية أحادية الطبقة ذات التعلم الموجه والتغذية الأمامية. وقد اكتشف قاعدة تعلم شبيهة بقاعدة ويدرو - هوف (Widrow-Hoff)

يحاول بحثنا اكتشاف قواعد تعلم للشبكات العصبية وذلك باستعمال الخوارزميات الجينية لحالة الاستقرار مع احلال المجموعات الثنائية والثلاثية وكذلك احلال بدل الوالد الاقل صلاحية اذا كانت صلاحية الطفل اعلى منه وذلك بهدف اكتشاف كل قواعد تعلم للشبكات العصبية المعروفة إضافة إلى قواعد تعلم أخرى ممكنة لمعمارياتي التغذية الأمامية أحادية الطبقة والتنافسية. ولقد أوضحت التجارب نجاح طريقتنا في تحقيق أهداف البحث . والجدول رقم (1) يوضح الاختلاف بين طريقة شالمرز وطريقة البحث المقترحة.

جدول رقم (1) يوضح الاختلاف بين طريقة شالمرز والطريقة المقترحة

الخاصية	طريقة شالمرز	الطريقة المقترحة
معمارية الشبكة	معمارية التغذية الأمامية أحادية الطبقة	معماريتي التغذية الأمامية أحادية الطبقة والتنافسية
الخوارزمية الجينية	الخوارزمية الجينية البسيطة	الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار إضافة إلى توليفة من صيغ العوامل الجينية الأكثر فعالية
دالة تغيير الأوزان	$\Delta w_{ij} = F(a_j, o_i, t_i, w_{ij})$	$\Delta w_{ij} = F(a_j, o_i, t_i, w_{ij}, o_i')$
تشفير الكروموسوم	11 بارامتر ذات مديات تحديداتها غير موفقة	16 بارامتر تحدد وجود الحد أو غيابه إضافة إلى إشارته
قواعد التعلم المكتشفة	أهمها تشبه قاعدة ويدرو- هوف	كل القواعد الأساسية المعروفة إضافة إلى عدد كبير آخر يعتبر توليفات مختلفة من حدود القواعد الأساسية

حيث a_j = نشاط خلية الادخال j

O_i = نشاط خلية الاخراج i

t_i = المخرجات المرغوبة لخلية الاخراج i

O_i' = مشتقة نشاط خلية الاخراج i

W_{ij} = وزن الموصل بين خلية الادخال j و خلية الاخراج i

ملخص للطريقة المقترحة

يشفر الكروموسوم قاعدة تعلم ممكنة للشبكة العصبية. وتتقرر درجة ملائمة قاعدة التعلم بتطبيقها لعدد من المهام الممكنة التعلم. هذا يتم بخلق عدد من الشبكات ووضعها في بيئات مختلفة لزمن محدد. (في تجاربنا، تتكون البيئة من مجموعة أنماط تدريب بيانية) ولكل شبكة حالة ابتدائية عشوائية ولكن تتحدد حالتها النهائية عبر تفاعلها مع قاعدة التعلم والبيئة. صلاحية الشبكة تتحدد بدرجة تعلمها مع بيئتها خلال الزمن المحدد. وتتحدد صلاحية قاعدة التعلم تبعاً لصلاحيات مختلف الشبكات المستعملة لها. قواعد التعلم تتكاثر اعتماداً على درجة

الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار. تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية ذات التغذية الأمامية والتنافسية
ندى ذنون أحمد

نجاحها في إنتاج شبكات متعلمة. بالبدء بمجتمع من قواعد التعلم العشوائية غير الفعالة يكون
الأمل هو الحصول في النهاية على شيء يمكن من التعلم المقندر.

الفراغ الممكن لآليات التعلم يعد غير مفهوم لكن البحث الجيني مقندر على استكشاف هذا
الفراغ. وليس مستحيلا أن ينتج البحث الجيني قواعد تعلم تتفوق على تلك المصممة - بشريا.
وعلى الأقل ينبغي أن ينتج قواعد التعلم المعروفة بفعاليتها. هذا هو ما أوضحته تجارب بحثنا.

تفاصيل تنفيذ الطريقة المقترحة

1- نوع مهمة التعلم

الفئات القياسية الثلاثة لمهام التعلم هي التعلم الموجه (تعلم بتغذية تدريب ارجاعية كاملة
عن الأفعال المرغوبة) والتعلم القسري (حيث معلومات التدريب تكون كمية لامتجهة تمثل
فائدة الفعل المعطى) والتعلم اللاموجه (تعلم بدون أي موجه خارجي) [5],[6],[7] في
بحثنا هذا اخترنا التعلم الموجه والتعلم اللاموجه لسهولةهما. المهام تتضمن إرفاق أنماط
مدخلات بأنماط مخرجات مرغوبة للتعلم الموجه بينما تكون أنماط مدخلات فقط للتعلم
اللاموجه.

2- معمارية الشبكة العصبية

المعماريات القياسية الثلاثة للشبكات العصبية هي شبكات التغذية الأمامية وشبكات التغذية
الارجاعية وشبكات التنافس [7]. في بحثنا هذا اخترنا معماريتي التغذية الأمامية أحادية
الطبقة والتنافسية.

3 - التشفير الجيني لقاعدة التعلم (هيكل الكروموسوم)

في هذا البحث قمنا بتشفير الصيغ المعقدة لديناميكيات فراغ - الأوزان في كروموسوم
خطي بسيط. وقد استعملنا التشفير الثنائي لتشفير قواعد تعلم الشبكات العصبية. وقررنا بأن
تكون تغييرات أوزان الموصلات دالة للمعلومات المحلية فقط [7]. وعموما تحتاج قاعدة تعلم
الشبكات العصبية إلى العناصر التالية لعملية تعديل الأوزان بين خلية الإدخال i و خلية
الإخراج j :

$$a_j = \text{نشاط خلية الإدخال } i \quad \& \quad i_j = \text{المخرجات المرغوبة لخلية الإخراج } i$$

$$o_i = \text{نشاط خلية الإخراج } i \quad \& \quad o_j = \text{مشتقة نشاط خلية الإخراج } i$$

$$w_{ij} = \text{وزن الموصل بين خلية الإدخال } j \text{ و خلية الإخراج } i$$

ولذلك يشفر الكروموسوم الدالة f المعبرة عن التغيير في الأوزان Δw_{ij} تبعاً للعلاقة التالية:

$$\Delta w_{ij} = f(a_j, o_i, t_j, w_{ij}, o_i')$$

ولقد عبرنا عن الدالة f كدالة خطية ذات ستة عشر معاملاً (وشفرناها على هيئة كروموسوم يتكون من 34 ثنائية) كالتالي:

$$\Delta w_{ij} = k_0 \cdot (k_1 \cdot o_i + k_2 \cdot o_i' + k_3 \cdot a_j + k_4 \cdot w_{ij} + k_5 \cdot t_j + k_6 \cdot a_j \cdot t_j + k_7 \cdot a_j \cdot o_i + k_8 \cdot a_j \cdot o_i' + k_9 \cdot t_j \cdot o_i + k_{10} \cdot t_j \cdot o_i' + k_{11} \cdot a_j \cdot t_j \cdot o_i' + k_{12} \cdot a_j \cdot o_i + k_{13} \cdot o_i \cdot o_i' + k_{14} \cdot a_j \cdot o_i \cdot o_i' + k_{15} \cdot t_j \cdot o_i \cdot o_i')$$

حيث أن:

$$k_m = \text{تمثل باراميتراً } (1 \leq m \leq 15) \text{ يحدد وجود الحد أو غيابه إضافة إلى إشارته وتكون قيمته } k_m \in \{-1, 0, 1\}$$

$k_0 =$ يمثل معامل التعلم الابتدائي للشبكة ويكون عادة $k_0 \in [0.6, 0.9]$ (حيث نستعمل معامل تعلم تناقصي).

وقد شفرنا كل معامل k_m بثنائيتين (ثنائية اليسار تمثل إشارة الحد والثنائية الأخرى تمثل وجود أو عدم وجود الحد) والمعامل الابتدائي بأربعة ثنائيات وتقوم الخوارزمية الجينية بتوليد قيم k_m وقيمة المعامل الابتدائي. الثنائيات الأربعة الأولى الممثلة للباراميتير k_0 تفسر ثم نحول تبعاً للعلاقة التالية:

$$k_0 = U_{\min} + \left(\frac{U_{\max} - U_{\min}}{2^l - 1} \right) * U_{\text{coded}}$$

حيث أن $U_{\text{coded}} =$ ناتج عملية تفسير الأربع ثنائيات وتحويله من النظام الثنائي إلى النظام العشري وتكون قيمته في المدى $0 \leq U_{\text{coded}} \leq 15$ وبتطبيق العلاقة أعلاه نحصل على معامل التعلم الابتدائي (k_0) تبعاً للمدى $[U_{\min}, U_{\max}]$ الذي يحدده مصمم الخوارزمية. ويوضح الشكل (1) هيكل الكروموسوم.

K ₀	K ₁	K ₂	K	K	K	K	K	K	K	K ₁₀	K ₁	K ₁	K ₁₃	K ₁	K ₁₅	
			3	4	5	6	7	8	9		1	2		4		

شكل (1) هيكل الكروموسوم

الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية ذات التغذية الراجعة والتنافسية
ندى ذنون أحمد

ولتوضيح طريقة التفسير والتفسير نأخذ المثال التالي: نفترض أن للكروموسوم الشكل التالي :

0	1	1	1	00	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	1	0	0
				K_0	K_1	K	K_3	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K	K
						2		4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15										

تفسر الثنائيات الأربع الأولى الممثلة لمعامل التعلم الابتدائي بتحويل قيمتها من الصيغة الثنائية إلى الصيغة العشرية ثم تحول باستعمال العلاقة الموضحة اعلاه لتعطي $k_0=0.74$. وبعد ذلك يتم تفسير بقية جينات الكروموسوم وتحسب قيمة k_m تبعا للعلاقة:

$$k_m = 1 \text{ if } (b_i = 1 \ \& \ b_{i+1} = 1), \ -1 \text{ if } (b_i = 0 \ \& \ b_{i+1} = 1) \text{ else } 0$$

وبالنتيجة نحصل على قاعدة-دلتا (Delta-rule) لتعلم الشبكات العصبية التالية:

$$\begin{aligned} \Delta w_{ij} &= k_0 * (t_i \cdot a_j \cdot o_i' - o_i \cdot a_j \cdot o_i') \\ &= k_0 * (t_i - o_i) \cdot a_j \cdot o_i' \end{aligned}$$

وهكذا تفسر بقية الكروموسومات .

4- البيئة

كما نعرف فان البحث يحاول اكتشاف قواعد لتعلم الشبكات العصبية وخصوصا قواعد التعلم المعروفة ولذلك نحتاج إلى بيئة ملائمة تشمل عددا من المهام (مسائل التدريب) التي يمكن للشبكة أن تتدرب عليها حسب قاعدة التعلم المطورة (الكر وموسوم المفسر). وبسبب استخدامنا لشبكتين عصبيتين مختلفتين، احدهما ذات تغذية أمامية و تعلم موجه والأخرى ذات تنظيم ذاتي (تعلم تنافسي)، فانه يجب استخدام بيئتين مختلفتين حيث تتدرب كل شبكة عصبية على البيئة الخاصة بها. وكل مسألة (بيئة) تحتوي على مجموعة من أنماط التدريب. ومن المعروف بأنه كلما زادت مسائل التدريب في البيئة تزداد الثقة في قاعدة التعلم المطورة ولكن هذا يكون على حساب الكلفة التحاسبية العالية جدا في حالة استخدامنا لجميع المسائل الموجودة في البيئة في مرحلة التقييم. ولهذا السبب استخدمنا مسألة تدريب واحدة معقدة لكل بيئة، أما بقية المسائل فتستعمل في نهاية عمل الخوارزمية الجينية كمسائل لأختبار قواعد التعلم المكتشفة وحساب نسبة كفاءتها وذلك لأنه لو استخدمنا جميع المسائل والتي عددها عشرين مسألة تدريب في مرحلة التطور فستكون الكلفة التحاسبية عالية.

5 - وصف الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار

توجد صيغتان شائعتان للخوارزميات الجينية هما الخوارزمية الجينية البسيطة (وهو التوجه الأصلي الذي اقترحه هولاند ويستعمل مجتمع حلول حيث يولد كل المجتمع في كل جيل اعتمادا على الجيل السابق) والخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار (وهو نوع بديل للخوارزمية الجينية حيث المجتمع يتغير تدريجيا بتوليد قلة من الأفراد الجدد واحلالهم في المجتمع في كل جيل)[10],[9],[8],[2]. يستخدم هذا البحث الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار، وفيما يلي توضيح موجز للتقنيات المختارة لتحقيق خطوات الخوارزمية الجينية :

أ- التمهيد:

ابتدائيا تتسب قيم ثنائيات عشوائية لجينات كل كروموسومات الأفراد. هذه الكروموسومات هي نقاط البداية في فراغ البحث للخوارزمية الجينية حيث يتم بناء مجتمع ابتدائي عشوائي يتكون من مجموعة من الأفراد (ممثلة بكروموسومات) .

ب- تقييم صلاحيات أفراد المجتمع

يقيم كل فرد وذلك بتفسير كل كروموسوم وتطبيق دالة صلاحية على كل فرد مفسر. صلاحية كل فرد (كروموسوم مفسر) تحسب اعتمادا على خطأ الشبكة العصبية المستعملة لقاعدة التعلم المطورة (الكروموسوم المفسر) على أنماط التدريب للمسألة المختارة تبعا للعلاقة التالية:

$$fitness = \frac{1}{1 + costnet}$$

حيث $costnet$ = خطأ الشبكة العصبية.

ج- الانتقاء

استعملنا طريقة انتقاء المجموعات الصدفية حيث ينتقى فردين عشوائيا من المجتمع ويولد عدد عشوائي r ($0 \leq r \leq 1$). اذا كان $r \leq k$ (حيث البارامتر $k=0.75$ مثلا) ينتقى الفرد الأعلى صلاحية وخلافا لذلك ينتقى الفرد الأقل صلاحية [10]. هذا الانتقاء يمتاز بكونه موزعا، يمكن حدوثه على التوازي كما يحدث في الطبيعة .

د - التزاوج

أفراد مجموعة الأباء المنتقاة تتزاوج عشوائيا باحتمالية P_c (حيث $0.6 \leq P_c \leq 0.9$) باستعمال عامل تزاوج مناسب لينتج كل زوج طفلين . إذا لم ينتقى التزاوج تستنسخ الأباء مباشرة. تم استخدام عوامل التزاوج الشائعة (لغرض المقارنة) وهي عامل تزاوج القطع الواحد (1X) والقطعين (2X) والمنظم (UX) . وقد أعطت كلها نتائج جيدة [10],[11],[12].

هـ - الطفرة

الطفرة هي تغيير لقيمة موضع عشوائي باحتمالية P_m . معدل الطفرة يكون عادة أعلى في الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار عنه في الخوارزمية الجينية البسيطة. الفكرة الأساسية هي بقاء المجتمع مستقرا نسبيا حتى عند استعمال معدل طفرة عال حيث أننا نستبدل عددا قليلا من الأفراد في كل خطوة ولهذا لا يؤثر كثيرا على انجازية الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار . ربما ينصح بمعدل طفرة عال لتأثيره الاكتشافي القوي على بحث الخوارزمية الجينية حيث تعرف الطفرة بحثا عشوائيا حول أفراد التزاوج [10],[1] يتم إدخال طفرة عشوائية على كل طفل جديد، وتكون الطفرة على كل جينات الكروموسوم وباحتمالية P_m يحدث تغيير لقيمة الجينة .

و - تقييم الصلاحية

يقيم الطفلان الناتجان وكما تم توضيحه سابقا وتحسب دالة الصلاحية لكل طفل ثم يختار الطفل الأكبر صلاحية ليحل محل أحد أفراد المجتمع.

ز - الإحلال

عامل الإحلال يحذف أفرادا قلة لهم صلاحية ضعيفة من المجتمع ليحل محلهم أفراد جدد. وهناك عدد من طرق الإحلال منها إحلال المجموعات الثنائية حيث تقوم بانتقاء فردين مختلفين عشوائيا من المجتمع ويحل الطفل في المجتمع محل الفرد الأقل صلاحية إذا كانت صلاحيته تفوق صلاحية ذلك الفرد . وإحلال المجموعات الثلاثية تقوم بانتقاء ثلاثة افراد مختلفين عشوائيا من المجتمع ويحل الطفل في المجتمع محل الفرد الأقل صلاحية إذا كانت صلاحيته تفوق صلاحية ذلك الفرد [10],[1] . وكذلك استخدنا إحلال الطفل محل الوالد

الاقبل صلاحية اذا كانت صلاحيته تفوق صلاحية ذلك الفرد. وعملنا مقارنة بين طرق الاحلال الثلاثة .

6- مقياس التوقف

تم استخدام مقياس مركب للتقارب (توقف الخوارزمية الجينية) حيث تتوقف الخوارزمية الجينية عندما يتحقق أحد الشروط التالية: الوصول الي حد أقصى (معرف مسبقا) لعدد الأجيال أو عندما يصبح المجتمع كله حلوًا مثلي أي صلاحية كل فرد من أفراد المجتمع = 1 أو عندما لا يوجد إحلال نهائيًا بعد عدد محدد من الأجيال.

النتائج

بعد تجارب تمهيدية مكثفة لتحديد المعاملات المناسبة لخوارزمية التطور، تم تنفيذ برنامج التطور عشر مرات باستعمال مجتمعات ابتدائية عشوائية مختلفة وباستعمال حجم مجتمع = 40 فرد واحتماليات تزاوج P_c في المدى [0.6,1] واحتماليات طفرة في المدى [0.005,0.2] واستعمال انتقاء المجموعات الصدفية واستعمال عامل احلال المجموعات الثنائية والثلاثية وكذلك استعملنا عامل احلال بدل الوالد الاقل صلاحية اذا كانت صلاحية الطفل اعلى منه. ويوضح الجدول رقم (3) النتائج النهائية التي حصلنا عليها لاكتشاف قواعد تعلم للشبكات العصبية المعروفة والموضحة في الجدول رقم (2) اضافة الي قواعد تعلم جديدة.

جدول رقم (2) يوضح قواعد تعلم الشبكات العصبية المعروفة والتي اكتشفت في الطريقة المقترحة

نوع التعلم	صيغة ضبط الأوزان	سم قاعدة التعلم
غير موجه	$\Delta w_{ij} = \alpha (o_i, a_j)$	Hebbian
موجه	$\Delta w_{ij} = \alpha (t_i - \text{sgn}(w_{ij} a_j)) a_j$	Perceptron
موجه	$\Delta w_{ij} = \alpha (t_i - o_i) f(\text{net}_i) a_j$	Delta
موجه	$\Delta w_{ij} = \alpha (t_i a_j)$	Correlation
غير موجه	$\Delta w_{mj} = \alpha (a_j - w_{mj})$	Winner-take-all
موجه	$\Delta w_{ij} = \alpha (t_i - w_{ij})$	Outstar

الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار. تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية ذات التغذية الامامية والتنافسية

ندى ذنون أحمد

جدول رقم (3) يوضح خلاصة متوسطات أعداد قواعد التعلم المكتشفة والأجيال خلال عشرة تنفيذات

Crossover	Replacement	Pc	Pm	Common rule			New rules			Generation		
				Min	Max	Avg	Min	Max	Avg.	Min	Max	avg.
UX	احلال المجموعات الثنائية	0.7	0.07	2	4	3.0	2	5	4.0	605	807	661.7
	احلال المجموعات الثلاثية	0.9	0.01	3	5	3.6	0	9	7.2	553	765	650.1
	أحلال بدل الوالد الاقل صلاحية	0.9	0.01	3	6	4.2	2	7	5.8	850	1975	1200.4
2-X	احلال المجموعات الثنائية	0.7	0.07	2	5	3.2	3	8	5.7	715	962	810.6
	احلال المجموعات الثلاثية	0.9	0.01	2	5	3.5	0	7	6.1	842	998	877.2
	أحلال بدل الوالد الاقل صلاحية	0.9	0.01	3	5	4	2	7	5.2	840	1150	1067.4
1-X	احلال المجموعات الثنائية	0.7	0.07	2	3	2.5	0	6	5.2	644	792	683.4
	احلال المجموعات الثلاثية	0.9	0.01	3	5	3.4	2	7	6.3	763	1050	851.8
	احلال بدل الوالد الاقل صلاحية	0.9	0.01	2	5	3.5	2	6	4.7	900	1250	1137.2

مناقشة

يوضح الجدول رقم (3) عددا من الاستنتاجات وكالتالي :

(1) عامل احلال الطفل محل الوالد الاقل صلاحية اذا كانت صلاحية الطفل افضل ، تعتبر افضل من احلال المجموعات الثنائية والثلاثية في اكتشاف قواعد تعلم الشبكات العصبية المعروفة ولكن باجبال اكثر ولجميع طرق التزاوج بسبب أنه في الأولى يحل الطفل محل والده محافظا على التنوعية بدرجة أعلى (وذلك لأنه يحل الطفل محل الفرد الأكثر شبها مما في البقية التي يحل فيها الطفل محل فرد عشوائي يختار من المجتمع) .

(2) لاحتمالية الطفرة تأثير كبير على اكتشاف قواعد تعلم الشبكات العصبية المعروفة حيث كلما كانت احتمالية الطفرة عالية كلما كانت النتائج أفضل. فقد لاحظنا الحصول على افضل النتائج عندما تكون احتمالية الطفرة في المدى $[0.07, 0.1]$ أي بمعنى احتمالية طفرة عالية، وهذا متوقع ويرجع السبب الى ان احتمالية الطفرة العالية تزيد بالتدرج المعاملات الفعالة في الكروموسوم .

(3) عدد الاجيال في عمليات احلال المجموعات الثنائية والثلاثية اقل من عدد اجيال احلال الطفل محل الوالد الاقل صلاحية ويرجع السبب الى ان الخوارزمية الجينية تصل الى الحلول المثلى بسرعة في طرق الاحلال الاولى ولكن على حساب اكتشاف قواعد تعلم الشبكات العصبية المعروفة . والمخطط رقم (1) يوضح الاستنتاجات السابقة.

جدول رقم (4) يوضح مقارنة بين نتائج طريقة ديفيد شالمرز وطريقتنا المقترحة

الطريقة	طريقة الاحلال	حجم المجتمع	عدد القواعد المعروفة المكتشفة	نسبة اكتشافها في التنفيذات العشرة	معدل عدد القواعد الجديدة في التنفيذات العشرة	سبة كفاءتها على مسائل الاختبار
طريقة ديفيد شالمرز باستخدام الخوارزمية الجينية البسيطة	—	40	1	20 %	1	92 %
الطريقة المقترحة باستخدام الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار	احلال المجموعات الثنائية	40	6	53%	5.7	100 %
	احلال المجموعات الثلاثية	40	6	56,5%	7.2	100 %
	احلال الطفل بدل الوالد الاقل صلاحية	40	6	69,8%	5.8	100%

الاستنتاجات

1- لقد اثبت هذا البحث اقتدار الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار SSGA علي اكتشاف قواعد التعلم المعروفة لمعمارياتي الشبكات العصبية ذات التغذية الأمامية أحادية-الطبقة والتنافسية، بالإضافة إلى اكتشاف قواعد تعلم جديدة وكثيرة للشبكات العصبية والتي يمكن اعتبارها توليفات من حدود قواعد التعلم المعروفة.

2- لقد قدمت لنا الخوارزمية الجينية بالاتحاد مع خوارزمية التعلم للشبكات العصبية قواعد تعلم جديدة للشبكات العصبية لايمكن للانسان ان يتنبأ بها او يتوصل اليها وذلك لان اي قاعدة تعلم قد يتنبأها الانسان تحتاج الى عدد هائل من الاختبارات .

الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار تكتشف قواعد تعلم للشبكات العصبية ذات التغذية الراجعة والتنافسية
ندى دنون أحمد

3- لقد اثبت البحث بان الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار SSGA افضل من حيث عدد
قواعد تعلم الشبكات العصبية من الخوارزمية الجينية البسيطة SGA والتي استعملها ديفيد
شالمرز في بحثه (جدول رقم 4).

ملحق رقم (1)

قواعد تعلم الشبكات العصبية الجديدة (التي اجتازت الاختبارات بنجاح 100%) والمكتشفة في
التنفيذات العشر

NO	new learning rules
1	$-W_{ij} + A_j * O_i$
2	$+O_i - W_{ij} - A_j * O_i$
3	$+A_j * T_i - A_j * O_i - A_j * T_i * O_i'$
4	$+A_j * T_i - A_j * O_i - A_j * O_i'$
5	$+A_j * T_i - A_j * O_i + T_i * O_i'$
6	$+A_j * T_i - A_j * O_i + O_i * O_i'$
7	$-O_i + T_i + A_j * T_i - A_j * O_i$
8	$+A_j * T_i - A_j * O_i - A_j * O_i * O_i'$
9	$-O_i + T_i + A_j * T_i * O_i' - A_j * O_i * O_i'$
10	$+O_i' + A_j * T_i - A_j * O_i - T_i * O_i * O_i'$
11	$+A_j * T_i - A_j * O_i + T_i * O_i' + O_i * O_i'$
12	$+A_j * T_i - A_j * O_i - O_i * O_i' + T_i * O_i * O_i'$
13	$-O_i + A_j * T_i - A_j * O_i + T_i * O_i$
14	$+A_j * T_i - A_j * O_i - T_i * O_i * O_i'$

ملحق رقم (2) : قاموس المصطلحات

المختزل	المصطلح بالانجليزية	المصطلح بالعربية
GAs	Genetic Algorithms	الخوارزميات الجينية
SGA	Simple Genetic Algorithm	الخوارزمية الجينية البسيطة
SSGA	Steady State Genetic Algorithm	الخوارزمية الجينية لحالة الاستقرار
	Selection	الانتقاء
	Crossover	التزاوج
	Mutation	الطفرة
	Replacement	الإحلال
	Chromosome	كروموسوم
	Bit	ثنائية
	Stochastic tournament selection	انتقاء المجموعات الصدفية
ANN	Artificial Neural Networks	الشبكات العصبية الاصطناعية
	Feed forward networks	شبكات التغذية الامامية
	Feed back Networks	شبكات التغذية الارجاعية
	Competitive Networks	شبكات التنافس
	Neurons	العصبونات
	Single layer	احادية الطبقة
	Supervised learning	التعلم الموجه
	Unsupervised learning	التعلم اللاموجه
	Reinforcement learning	التعلم القسري
	Inputs	مدخلات
	Outputs	مخرجات
	Patterns	انماط
	Weight space dynamics	ديناميكية فراغ الاوزان
	Learning Rules	قواعد التعلم

المصادر

- 1- Mitchell M. *An introduction to Genetic Algorithms*. [1996] . Abradford book.
- 2- Maričić B. *Current Trends in Neural Network Design Tools Research*. EC-Newsletter, Vol.3,No. 1,pp37-45. [1991].
- 3- Chalmers David J. *The evolution of learning: An experiment in genetic connectionism*. In Connectionist Models Summer School. San Mateo, GA. [1990]. E-mail: dave@cogsci.indiana.edu.
- 4- Miller G.,Todd P. & Hegde S. *Designing neural networks using genetic algorithms*. In *Proceedings of the Third Conference on Genetic Algorithms and their Applications*, San Mateo, CA: Morgan Kaufmann. [1989] .
- 5- Fausett L. *Fundamentals of Neural Networks* , Prentice Hall international Inc.,USA. [1994].
- 6- Davalo E. ,Naim P. *Neural Networks*, Macmillan. [1991].
- 7-Kohonen T. *The Self-Organizing Map*. *Proceedings of the IEEE* Vol. 78, No. 9. [1990]
- 8- Schmidt M., Stidsen T. *Hybrid Systems : Genetic Algorithms ,Neural Networks and Fuzzy Logic* , DAIMIR. [1997] .
- 9- Luger G. F.,Stubblefield W.A. *Artificial Intelligence Structures and Strategies for Complex Problems* . [1998]. Third Edition,Addison Wesley Longman.
- 10- Golberg D.E. *Genetic Algorithms in search ,optimization and machine learning* . [1989]. Reading, MA: Addition-Wesley.
- 11- Rzepoluck E.J. *Neural Networks Data Analysis Using Simulnet*, Springer-Verlag . [1998] .
- 12- Patterson D. W. *Artificial Neural Networks Theory and Application*, Prentice Hall. [1996].

تأثير الغبار على قياسات متحسسات الاقمار الاصطناعية نوع لاندسات

عوني أدوار عبدالأحد

كلية العلوم/الجامعة المستنصرية

عمر برهان الجراح

وزارة العلوم والتكنولوجيا

عبد الوهاب حسين العبيدي

كلية العلوم/الجامعة المستنصرية

تاريخ تقديم البحث: 2005/3/1

تاريخ قبول البحث: 2005/7/17

المستخلص:

تم في هذه الدراسة تحديد قيم الانعكاسية الطيفية على التسجيلات الفضائية حيث أخذت بحيرة الثرثار كخلفية طبيعية لهذه التسجيلات وبالمتحسين المتعدد الأطياف (Multi MSS spectral scanner) و الراسم الموضوعي (Thematic mapper) TM المحمولين على سلسلة الأقمار الاصطناعية الأمريكية نوع لاندسات Landsat وذلك لدراسة المديات المختلفة لتأثير حالات الغبار وأستنباطها من الصور الرقمية الناتجة. أستخدمت القناتين (4) و (7) ذواتي المديات الطيفية (0.6-0.5) ، (1.1-0.8) مايكرون على التوالي للمتحسس MSS ، والقناتين (2) و (4) ذواتي المديات الطيفية (0.6-0.52) ، (0.9-0.76) مايكرون للمتحسس TM . أختيرت هذه القنوات كون احدهما ضمن المدى المرئي والأخرى في نطاق تحت الحمراء IR لكلا المتحسين كل على حدة. تم اجراء خمسة أختبارات لتحديد تأثير الغبار (الجو الصافي، غبار خفيف، تصاعد غبار، وعاصفة رملية) على قيم الانعكاسية الطيفية للصور الرقمية.

وجد في الأختبار الأول أن حالات تأثير الغبار تحدث ازاحة كبيرة نسبيا عن نقطة الأصل. وفي الأختبار الثاني لوحظ ابتعاد المدرج التكراري للانعكاسية عن نقطة الأصل وانفتاحه وانتشار قيم الانعكاسية. وفي الأختبار الثالث لوحظ أن الصور الناتجة من عمليات طرح الحزم الطيفية تعطي قيم مختلفة ما بين المتحسين بسبب فرق التأثير بين القناتين والذي يولد مناطق ذات شدة انعكاسية مختلفة تعتمد على كثافة الغبار في يوم التسجيل الفضائي. في الأختبار الرابع ومن خلال ايجاد نسبة الانعكاسية الطيفية لوحظ ان القيم الكبيرة نسبيا ناتجة من الجو الصافي والصغيرة نسبيا تدل على حالة الغبار. أما الأختبار الخامس فقد تم حساب قيم الانحراف المعياري Standard deviation لكل قناة ولوحظ ان قيمته في حالات الغبار تكون أكبر من قيمه لليوم الصافي.

Abstract:

This study deals with the analysis of spectral reflectivity values from Landsat satellite records for Thrthar Lake in Iraq. Records were mined by two sensors, MSS (Multi spectral scanner) and TM (Thematic mapper) in order to study the effect of dust on the records. This study depends on bands (4),(7) for MSS sensor (0.5-0.6),(0.8-1.1) micron respectively and bands (2),(4) for TM sensor (0.52-0.6),(0.76-0.9) micron respectively. Five Image processing tests have been done to study the effect of dust on spectral estimates.

The results were in first test by scatter plot for reflectivity values of band (7) against the values of band (4), then test the values of Best fit line offset in case of dust. It was found that the shift increases with increasing dust. The second test was to use the histogram of each band and for different dust conditions; results show wide changes in reflectivity values with dust cases. The third test deal with subtracting the values of reflectivity for different bands for each sensor to estimate the effect of dust. The fourth test was used is to determine the different bands reflectivity ratio for each sensor, results show that when this ratio is large that indicates clear atmosphere and when it small indicates dusty atmosphere. The final test was to measure the standard deviation (SD) of reflectivity for each band, results show if the SD value is big then there is dust and if SD value is low then there is no dust.

المقدمة:

يعتبر الغلاف الجوي جزء من الوسط الذي تنتقل من خلاله الطاقة التي تستعملها الأقمار الاصطناعية وأن جميع أنظمة التحسس النائي الطيفية المستخدمة تحتاج لطاقة اما منعكسة او منبعثة او الاثنين معا، وتعد طاقة الأشعاع الشمسي هي أهم مصدر للطاقة التي تستخدمها الأقمار الاصطناعية. أستخدم في هذا البحث تسجيلات رقمية لصور فضائية للمساح MSS والمساح TM المحمولين على سلسلة الأقمار الاصطناعية الأمريكية Landsat والذي من المفروض أن يكون المتحسس TM خالياً من أي تأثير ومصحح راديويًا وكما تشير التقارير الفنية لهذه الأقمار حيث من خلال الاختبارات التي أجريت والتسجيلات الفضائية التي عولجت توضح ان المتحسس TM والمستخدم في الجيل الجديد من الأقمار لاندسات تتأثر بحالات الغبار كما هو الحال للمتحسس MSS والمستخدم من الجيل الأول لهذه الأقمار وأن كان أقل تأثيراً.

الأسس النظرية:

1- الغلاف الجوي:

هو مزيج من الغازات والمواد العالقة الصلبة والسائلة التي تحيط بالكرة الأرضية بفعل قوة جذب الأرض لها ويحتوي الغلاف الجوي السفلي مكونات أساسية تشكل نسبة 99.93% وأخرى متغيرة وتشكل نسبة 0.07% تعتمد الأخيرة على الظروف الجوية والتي احد مكوناتها الغبار⁽¹⁾.

2- الغبار:

يعرف الغبار بأنه حبيبات ترابية غير متماسكة تتراوح أقطارها بين (0.05-100) ميكرون والدقائق الصغيرة التي تقل أقطارها عن 1 ميكرون تبقى عالقة في الهواء لفترات تصل الى أيام وترتفع مئات الأمتار عن سطح الأرض حيث الدقائق الأصغر قطراً يمكن ان ترتفع أعلى من غيرها في الهواء⁽²⁾. يختلف شكل وحجم الدقائق الترابية باختلاف مصدرها وتكوينها الفيزيائي والكيميائي وسرعة الرياح الحاملة لها، حيث يتكون الغبار عموماً من نسب مختلفة من الطين Clay والغرين Slit والرمل Sand ويمكن ان ترتفع الدقائق الصغيرة للغبار الى ارتفاع قد يصل الى 3 كم عن سطح الأرض عند اضطراب حركة الرياح ولكن لا يزيد ارتفاعها في العراق عن 1 كم. تؤثر دقائق الغبار على مسار الموجات الكهرومغناطيسية المخترقة لها حيث تقوم هذه الدقائق بامتصاص قسم من طاقة الموجات وتشتت قسماً آخر منها. ويعتمد كل من الامتصاص والتشتت على حجم وشكل هذه الدقائق والطول الموجي للموجات المرسله التي تسبب ظاهرة التوهين لطاقتها. تقسم حالات الغبار في الأنواء الجوية حسب مدى الرؤية وسرعة الرياح الى ثلاثة انواع وهي:

أ- الغبار العالق: يتكون الغبار العالق من دقائق صغيرة جداً وتبقى عالقة في الجو مدة تصل الى بضعة أيام وتسبب انخفاضاً قليلاً في مدى الرؤية لا يقل عن 4 كم وتكون سرعة الرياح المسببة لها اقل من 15 كم/ساعة.

ب- الغبار المتصاعد: يحدث هذا النوع من الغبار نتيجة للحالة غير المستقرة للجو من ارتفاع درجة حرارة سطح الأرض الذي يؤدي الى انخفاض الضغط حيث ترتفع الى الأعلى الدقائق الغبارية عند هبوب الرياح (15-25) كم/ساعة ولا ينتقل هذا النوع من الغبار الى مسافات بعيدة ولا يزيد ارتفاعها عن 15 م عن سطح الأرض عدا حالات عدم الاستقرار الشديدة التي يمكن ان يرتفع عندها الغبار الى اكثر من ذلك، حيث يهبط مدى الرؤية الى مديات تتراوح بين (1-4) كم. ويتميز الغبار بصغر دقاتها.

ج-العواصف الترابية والرملية: وتعرف بأنها كتلة كبيرة من الهواء الحاملة لدقائق الغبار والتي تسبب انخفاض في الرؤية لمسافة قد تصل الى بضعة أمتار حيث تنصف بسرعة عالية جدا" قد تصل الى 100 كم/ساعة وتغطي مساحات واسعة تصل الى 300 كم² وتختلف مصادرها ومسبباتها وفي العراق غالبا" يكون مصدرها الصحراء الغربية. تتكون من الطين والغرين والرمل وتتميز بكبر حجمها وقد تصل أقطارها الى 100 مايكرون.

3- ظاهرة الغبار في العراق:

أن ظاهرة الغبار هي من احد الصفات الرئيسية لمناخ الأقاليم الجافة وشبه الجافة التي تتميز بوجود تقلبات مناخية تتسبب في تصاعد الأتربة والرمال وحملها الى مسافات بعيدة مكونة ظاهرة الغبار. تتعرض معظم مناطق القطر الى هذه الظاهرة وبأنواعها المختلفة معظم اشهر السنة. تنشط الرياح في المناطق الصحراوية وشبه الصحراوية، وذلك لعدم وجود الغطاء النباتي وقلة سقوط الأمطار الأمر الذي يؤدي الى ظاهرة الغبار وتدني مدى الرؤية الى 10 م أحيانا". أما مصادر الغبار في موقع الثرثار فتتبع الموقع الجغرافي للموقع فيبدو ان معظم حالات الغبار تحدث في وسط العراق لأحاطته بمناطق صحراوية والمناطق الغير زراعية. تم استعراض تسجيلات هيئة الأنواء الجوية العراقية للموقع (الثرثار) فأنها تؤكد وجود جميع حالات الغبار وأكثرها حدوثا" حالة الغبار العالق وهذا يدل الى ان سرعة الرياح هادئة نسبيا" وان مصدرها ليس بعيدا" عن الموقع، وان حالات العواصف الترابية لا يزيد تكرارها عن 10% من حالات الغبار الكلي (3).

4- توهين الأشعاع الشمسي بواسطة الغبار في الغلاف الجوي:

أن الأشعاع الشمسي (الذي يستخدم لأغراض التحسس في الأقمار الاصطناعية) الذي ينتقل خلال الغلاف الجوي يتعرض للتغيير في طاقته نتيجة لعمليات اساسيتين وهي التشتت والامتصاص مما يؤدي الى توهين شدة الأشعاع. من أهم المؤثرات هي الغازات و الغبار وبخار الماء في مكونات الغلاف الجوي، فلا يصل من الأشعاع الشمسي الواصل الى الأرض من قمة الغلاف الجوي أكثر من 51% من شدته نتيجة للتشتت والامتصاص (4).

أ- التشتت: يحدث التشتت بواسطة جزيئات الهواء والغبار وبخار الماء التي تقع في مسار الأشعة القادمة من الشمس حيث تقوم هذه الجزيئات بعكس الأشعة في جميع الاتجاهات عشوائيا" واقطار الجزيئات المسؤولة عن التشتت تتراوح من اسم الى 10⁻⁸ سم وتعتمد

الكثافة النسبية للتشتت بشكل كبير على النسب ما بين حجم الجزيئات الى الطول الموجي للموجات الساقطة عليها، ويقسم التشتت الى نوعين التشتت الانتقائي والتشتت غير الانتقائي. التشتت الانتقائي يقسم الى تشتت رايلي *Raleigh scattering* وتشتت مي *Mie scattering*. يعتمد تشتت رايلي على الجزيئات التي أقطارها اقل بكثير من 0.1 مايكرون وان حجم هذه الجزيئات يكون اقل بكثير من الطول الموجي للاشعاع ويتمز كون شدة التشتت تتناسب عكسياً مع القوة الرابعة للطول الموجي. ويعتمد تشتت مي على جسيمات الغبار الكبيرة الحجم نسبة الى جزيئات الهواء وتتغير في الحجم والتراكيب مع الارتفاع والوقت حسب الحالة الجوية ونوع الغبار ويتميز كون شدة التشتت تتناسب عكسياً مع القوة 0.75 للطول الموجي. ومن صفات هذا التشتت انه يطغي على تشتت رايلي عندما يحتوي الجو على الجسيمات المسببة لتشتت مي، أي ان الأشعة المشتتة حسب نظرية مي تكون ذات اطوال موجية اكبر مقارنة مع الاشعة المشتتة حسب نظرية رايلي (4). أما التشتت الغير انتقائي فيحدث لجميع الأطوال الموجية بالتساوي تبعاً لقيم هذه الأطوال، والتي تختلف عن التشتت الانتقائي فهو يحدث لأطوال موجية معينة على حساب اطوال موجية اخرى من نفس الطيف.

ب- الأمتصاص: وهي العملية التي تتحول فيها الطاقة الأشعاعية الى أشكال اخرى من انواع الطاقة مثل حرارة، ومكونات الغلاف الجوي سواء كانت جسيمات مثل الهواء، الضباب او الغبار فأنها تؤثر على الأشعاع وتقوم بتوهينه ويعتمد هذا الأمتصاص على الطول الموجي للاشعاع الساقط.

5- التحسس النائي والانعكاسية الطيفية:

التحسس النائي هو الطريقة ذات التقنية العالية في الحصول على معلومات من هدف باستخدام الطيف الكهرومغناطيسي في تحليل البيانات بدون تماس مباشر مع الهدف ويسمى الجهاز الذي يقوم بهذه العملية بالمتحسس *Sensor* وتستخدم في هذه العمليات الكاميرات والمشاطات الطيفية الألكترونية أو اجهزة قياس الانعكاسية الطيفية كالراديوميتر، وقد تكون هذه الأجهزة محمولة يدوياً او على بالونات او أقمار اصطناعية وتعمل هذه الأجهزة بجزء او اكثر من أجزاء الطيف الكهرومغناطيسي. تعرف الانعكاسية الطيفية أو الانبعاثية لهدف معين بأنها النسبة بين شدة الطاقة الكهرومغناطيسية المنعكسة عن السطح في طول موجي محدد او حزمة موجية محددة الى شدة الطاقة الكهرومغناطيسية الكلية الساقطة عليها من نفس الطول الموجي او الحزمة الموجية نفسها ويعبر عن الانعكاسية الطيفية بنسبة مئوية تكون قيمتها محصورة بين (0-100) % (5).

تأثير الغبار على قياسات متحسسات الاقمار الاصطناعية نوع لاندسات
عوني أدوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي

6- المتحسسات المستخدمة في الأقمار الاصطناعية لاندسات:

تم استخدام ثلاثة انواع من المتحسسات في الأقمار الاصطناعية لاندسات حيث بدأ العمل بالمتحسس MSS (Multi spectral scanner)، أضيف المتحسس TM (Thematic mapper) إلى القمر الاصطناعي Landsat-4⁽⁶⁾ ثم أجريت بعض التحسينات على المتحسس TM لاستحداث متحسس جديد هو المتحسس ETM (Enhancement thematic mapper) حيث أدخل هذا المتحسس للعمل في القمرين Landsat-6, Landsat-7 وهما اخر الأقمار لهذه السلسلة. يوضح الجدول (1) و (2) خواص ومواصفات القنوات الطيفية للمتحسين MSS و TM على التوالي⁽⁷⁾.

النتائج والمناقشة:

أستخدم في هذا البحث تسجيلات رقمية لصور فضائية للمساح MSS والمساح TM المحمولين على الاقمار الاصطناعية لاندسات في اوقات مختارة من عام 1972 ولغاية 2001 لبحيرة التثرار في العراق لغرض ابقاء خلفية التسجيلات ذات طبيعة متجانسة (سطح مائي) واعتمدت خمسة أختبارات⁽⁸⁾ لتأثير حدوث ظاهرة الغبار على التسجيلات الفضائية المستحصلة من المتحسين MSS و TM وخلال الأيام المشمولة بالدراسة. تم اختيار القناتين (4،7) لأجراء الأختبارات للمتحسس MSS حيث ان القناة 4 ذات طول موجي (0.5-0.6) مايكرون طيف مرئي اخضر مزرق. القناة 7 ذات طول موجي (0.8-1.1) مايكرون (طيف تحت الحمراء القريبة). أما المتحسس TM الذي اختير منها القناتين (2،4) لأجراء الأختبرات وكما يلي: القناة 2 ذات طول موجي (0.52-0.6) مايكرون (طيف مرئي) أخضر اللون. القناة 4 ذات طول موجي (0.67-0.9) مايكرون (تحت الحمراء القريبة). تمت معالجة التسجيلات الرقمية لصور الأقمار الاصطناعية بواسطة منظومة الحاسبة المتخصصة M75 لتحليل التسجيلات الفضائية حيث حولت من الأشرطة المغناطيسية الرقمية الى قيم الانعكاسية الرقمية بشدة من (0-255) مستوى قياس انعكاسية معتمدة على التسجيل الطيفي للمنطقة ومن ثم تدمج الحزم الطيفية المطلوبة للعمل في المتحسسات. بعد اختيار الحزم تكون صور ثنائية الانعكاسية لأية نقطة قياس مختارة ومن ثم استخراج القيم بعد عرض الصورة الرقمية وتسجيل قيم الانعكاسية لكلتا القناتين وبناء جداول رقمية ترسم بالحاسب الإلكتروني.

الاختبار الأول: ترسم القيم العددية لكل بكسل (وحدة الصورة) للقناة (7) على المحور Y والقيم العددية لكل بكسل للقناة (4) على المحور X لتسجيلات كل متحسس ونرسم احسن خط مستقيم يمر بالنقاط باستخدام طريقة المربعات الصغرى ⁽⁵⁾، ففي حالة الجو الصافي سوف يمر المستقيم بنقطة الأصل (0,0) وعكسه سوف يحدث انحراف. الشكل (1a) يوضح علاقة الانعكاسية لبحيرة الثرثار لتسجيلات MSS في حالة الجو الصافي ليوم 21-11-1972 حيث كان احسن خط مستقيم يمر بنقطة الأصل. والشكل (1b) يوضح نفس العلاقة لنفس المتحسس ولكن بوجود غبار خفيف لتسجيلات يوم 12 تموز 1975 حيث يظهر الانحراف على المحور السيني ومقداره حوالي 10 وحدات وهي حالة مثالية ضمن عدة حالات تم تحليلها بنفس الظروف والحصول على نفس النتائج. الشكل (1c) تمثل نفس العلاقة السابقة ولكن في حالة وجود غبار متصاعد ولتسجيلات يوم 9-12-1972 ولنفس المتحسس والتي تظهر ازاحة كبيرة 21 وحدة وهذه القيمة ناتجة من تأثير القناة 4 ذات الطول الموجي الأقصر مقارنة مع الطول الموجي للقناة 7 وتأثرها المحدود بالغبار. أن مثل هذه الأزاحة الكبيرة ذات اثر سلبي كبير على دقة تسجيلات الصور الفضائية الناتجة فيجب تصحيحها من تأثير الغبار وخاصة التأثير على القنوات ذات الأطوال الموجية القصيرة. أما عند استخدام بيانات المتحسس TM الجيل الثاني من سلسلة الأقمار لاندسات الذي يعد أكثر دقة في التحسس من تسجيلات MSS الجيل الأول فليوم المختار 16 شباط 1990 حيث يتسم الجو كونه صافي وكما موضح في الشكل (1d) الذي يشير الى ازاحة مقدارها 4 وحدات الممثل للقناة 2 ذات الطول الموجي الأقصر حيث ان الحالة المثالية لعدم وجود غبار يتوجب ان تكون الأزاحة صفراً" يعلل ذلك ربما لتأثير بخار الماء في الجو. أما في حالة وجود عاصفة ترابية فتتأثر تسجيلات المتحسس TM بشكل واضح وكما مبينة في الشكل (1e) ليوم 6 آذار 2000 حيث كانت الأزاحة بقيمة 19 وحدة مما يدل على ان المتحسس ذا حساسية كبيرة للغبار، علماً ان المتحسس يجب ان يكون مصححاً انعكاسياً وقليل التأثير، ويظهر في الأشكال أعلاه معادلة أحسن خط المستقيم المار بالنقاط. R^2 تمثل Coefficient of determination.

الاختبار الثاني: استخدام المدرج التكراري للانعكاسية Histogram لتحديد تأثير الغبار على التسجيلات، حيث ان المدرج التكراري للانعكاسية هو عبارة عن علاقة خطية لبيان مدى تكرار كل انعكاسية لقيم البيكسل ويمتد من 0-255 وحدة انعكاسية حيث تتركز اعلى التكرارات لوحداث الصورة مما يعطي فكرة على تجانس الصورة وتحديد اعلى واصغر قيمة للانعكاسية. فاستخدام المدرج التكراري لتسجيلات المتحسس MSS لكل من القناتين الطيفيتين 7 و4 ليوم 10 تشرين الأول 1975 حيث كان الجو صافي موضحة في الشكل (2a) يلاحظ انخفاض قيم الانعكاسية للقناة

7 وعدم انتشارها واقتربها من الصفر أي اقترابها من الحالة المثالية وذلك لعدم وجود غبار، كما يلاحظ انخفاض قيمة المعدل الذي يوضح اقصى تكرار لوحداث الصورة في القناة 7 حيث بلغت قيمتها 4 وللقناة 4 بلغت مقدار 7. عند استخدام المتحسس TM لتسجيلات يوم 16 شباط 1990 حيث الجو صافي وخالي من الغبار بأستخدام المدرج التكراري كما يوضح في الشكل (2b) للقناتين يلاحظ تجمع قيم الانعكاسية من بعضها في منطقة ضيقة حيث يبلغ معدلها 32 للقناة 4 وان 20% من قيم الانعكاسية تقع في هذه المنطقة، بينما للقناة 2 ذات الطول الموجي القصير بلغ المعدل 74 وان 40% من قيم الانعكاسية تقع في هذه المنطقة ويلاحظ كذلك ان المدرج بأجمعه بعيد عن الصفر و بسبب ابتعاد المعدل عن الصفر هو وجود عوامل اخرى قد يكون وجود بخار الماء. أما نتائج المتحسس MSS في حالة تصاعد غبار كما في تسجيلات 9 تشرين الثاني 1972 الموضحة في الشكل (2c) يلاحظ عدم تأثر القناة 7 بالغبار واقترب المدرج التكراري من الصفر حيث كانت قيمة المعدل 4 وان 95% من هذه التكرارية تتركز في هذه القيمة. أما القناة 4 يلاحظ انها تتأثر بالغبار بشكل واضح في انتشار قيم الانعكاسية وانفتاحه وابتعاده عن الصفر حيث بلغ قيمة المعدل 107 ونسبة التكرارية في هذه النقطة 4%. في حالة المتحسس TM عند حصول عاصفة ترابية وذلك لتسجيلات يوم 6 آذار 2000 وكما موضحة في الشكل (2d) حيث من المدرج التكراري للقناة 4 يتبين ابتعاد قيم الانعكاسية عن نقطة الأصل واقترب القيم من بعضها حيث يبلغ المعدل 138 ونسبة تركيز التكرارية 19%. اما القناة 2 فيلاحظ تأثرها الكبير بالغبار وزيادة التششت الحاصل لقيم الانعكاسية وعدم انتظامها لوجود قمتين دلالة على انتشار القيم بفعل تأثير الغبار.

الاختبار الثالث: ويتلخص بعملية طرح قيم الانعكاسية للحزمتين الطيفيتين في كل متحسس حيث كانت النتائج كما موضحة في الشكل (3a) للصورة الناتجة من عملية طرح الحزم لتسجيلات MSS في يوم صافي المصادف 2 آذار 1973 حيث يلاحظ تجانس كبير لقيم الانعكاسية بسبب عدم وجود غبار، والشكل (3b) لنفس المتحسس ليوم 9 تشرين الثاني 1975 حيث يتسم بغبار متصاعد ويلاحظ وجود مناطق متباينة في قيم الانعكاسية مسببة بقع داكنة واخرى براقية في الصورة بسبب الغبار. أما نتائج طرح الحزم للمتحسس TM ففي يوم 16 شباط 2000 حيث الجو صافي وخالي من الغبار يلاحظ التجانس الكبير في قيم الانعكاسية وكما مبينة في الشكل (3c)، بينما تظهر نتيجة الطرح ليوم 6 آذار 2000 حيث يوجد عاصفة ترابية في هذا اليوم لنفس

المتحسس السابق، معالم تأثير الغبار في الصورة حيث المناطق غير متجانسة منها المعتمدة واخرى البراقة لأختلاف قيم الانعكاسية وكما في الشكل (3d) .

الاختبار الرابع: يلخص هذا الاختبار بإيجاد نسب الانعكاسية للقنوات المستخدمة لكل متحسس للتعرف على تأثير الغبار في تسجيلات الأقمار الاصطناعية والطريقة المستخدمة هي ايجاد النسبة من قسمة قيم الانعكاسية للقناة 7 على القيم المناظرة لها للقناة 4 عند استخدام المتحسس MSS وإيجاد النسبة الناتجة من قسمة قيم الانعكاسية للقناة 4 على القيم المناظرة لها للقناة 2 عند استخدام المتحسس TM ، وجد ان قيمة الكبيرة لنسب الانعكاسية يدل على صفاء الجو وفي حالة القيم الصغيرة للنسب فيشير الى وجود تأثير للغبار. الجدول (3) يوضح نتائج هذا الاختبار وحسب اللقطات المختارة حسب تاريخها المحدد ونوع المتحسس والقنوات الطيفية المستخدمة والحالة الجوية لساعة تسجيل هذه اللقطات.

الاختبار الخامس: في هذا الاختبار يتم التعرف على تأثير الغبار على تسجيلات الأقمار الاصطناعية من خلال حساب الانحراف المعياري الأحصائي والذي يعطى كما يلي : $(\sum x^2/n)^{1/2}$ حيث $\alpha = ((\sum x^2 - n\bar{x}^2)/n)^{1/2}$ ، α الانحراف المعياري، n عدد قيم الانعكاسية، x قيم الانعكاسية، $\bar{x}$ معدل قيم الانعكاسية. نتائج هذا الاختبار موضحة في الجدول (4) ويلاحظ انه في حالات الغبار تكون قيم الانعكاسية منتشرة حول المعدل المثالي لها، أي احصائياً يكون الانحراف المعياري لهذه القنوات عالي القيمة ويتضح ان المعدل Mean للقنوات الطيفية تتأثر بالحالة الجوية، فكلما كان الجو مغبراً زادت قيمة المعدل وخاصة للقنوات ذات الطول الموجي القصير.

الاستنتاجات:

- 1- نستنتج من الاختبار الأول باستخدام المخطط البياني الانتشاري ان للغبار تأثير على تسجيلات المتحسس MSS اكثر من تأثيره على المتحسس TM وفي حالات الغبار المختلفة تكون الأزاحة كبيرة.
- 2- نستنتج من الاختبار الثاني باستخدام المدرج التكراري ان تسجيلات المتحسسين في حالة الجو الصافي تتركز الانعكاسية بمعدل منخفض وقريب من الصفر، أما في حالة الغبار تزداد قيمة المعدل وينفتح المدرج التكراري للانعكاسية ويبتعد عن نقطة الأصل.
- 3- من استخدام اختبار طرح قيم الانعكاسية يلاحظ ان القناة 4 للمتحسس MSS تكون اكثر تأثيراً بالغبار من القناة 7 وذلك بسبب طولها الموجي واقتراب قيمتها من اقطار الدقائق

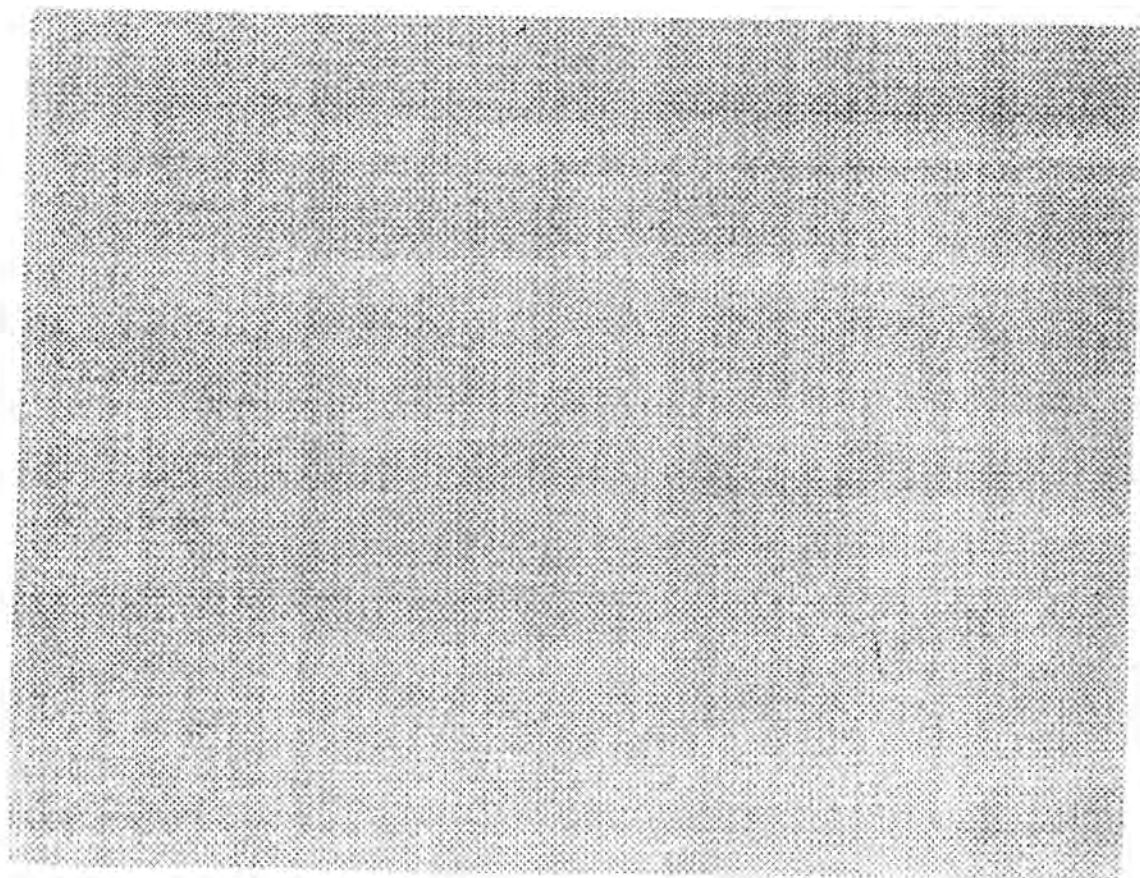
تأثير الغبار على قياسات متحسسات الأقمار الاصطناعية نوع لاندسات

عوني أدوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي

الغبارية. وعموماً يكون تأثير الغبار على تسجيلات المتحسس MSS أكثر من المتحسس TM.

4- وجد من الاختبار الرابع ان نسبة الانعكاسية تكون بقيمة كبيرة في حالة الجو الصافي، وتكون قيمتها صغيرة نسبياً في حالات الغبار.

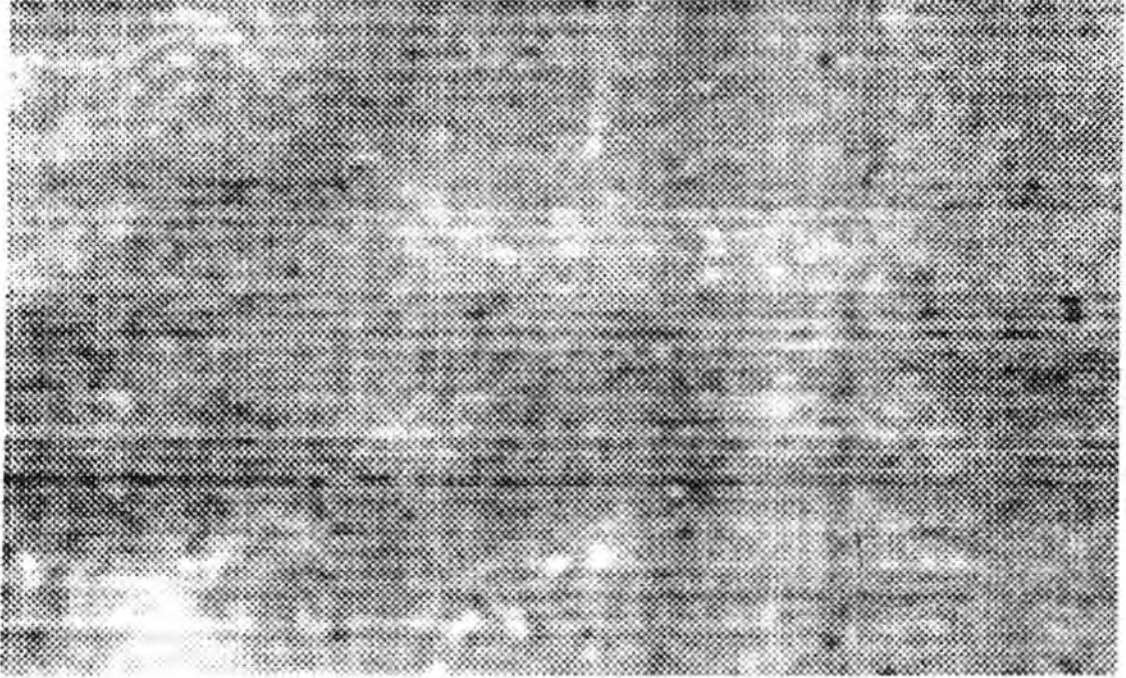
5- تضمن الاختبار الخامس حساب الانحراف المعياري لقيم الانعكاسية الطيفية، وجد ان قيم الانعكاسية منتشرة حول المعدل وقيمة الانحراف المعياري تكون كبيرة نسبياً في حالة وجود غبار وللمتحسسين.



شكل (a3)

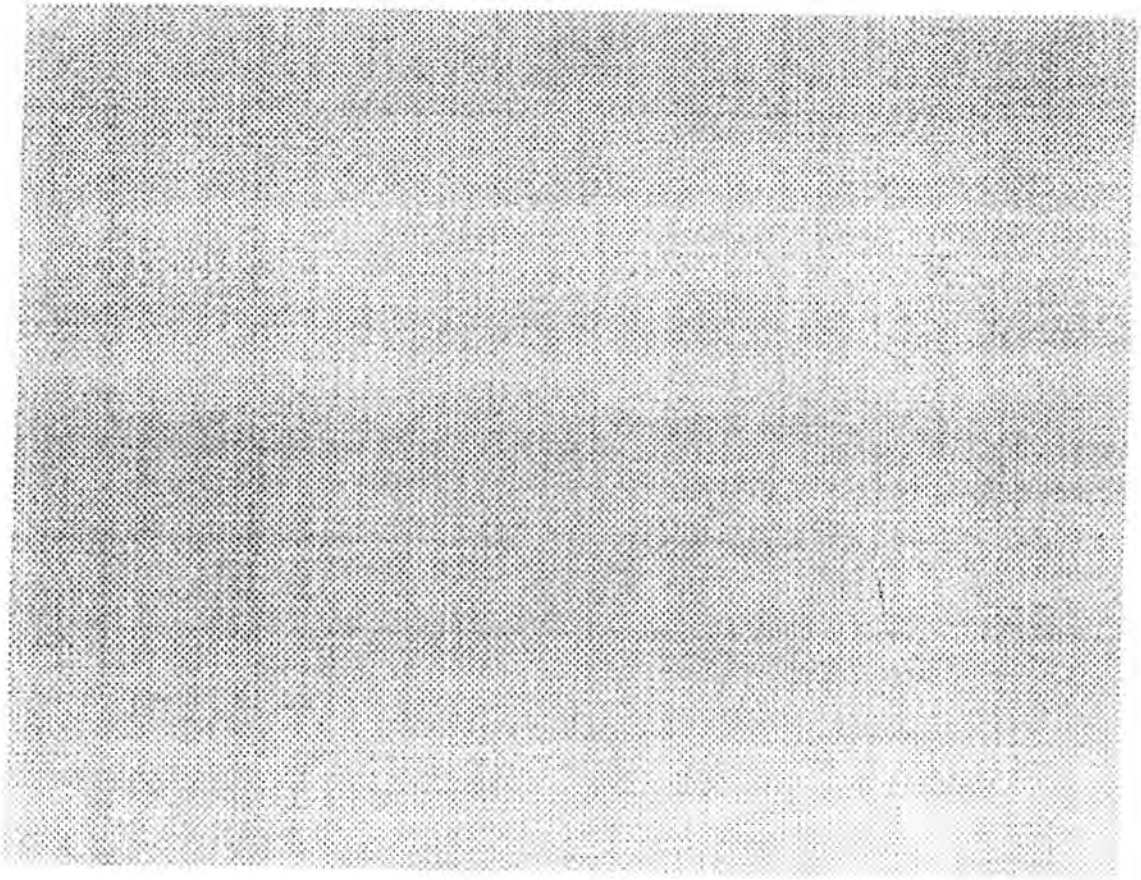
الصورة الناتجة من عملية طرح الحزم لتسجيلات MSS في يوم صاف

تأثير الغبار على قياسات متحسسات الأقمار الاصطناعية نوع لاندسات
عوني أدوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي



شكل (b3)

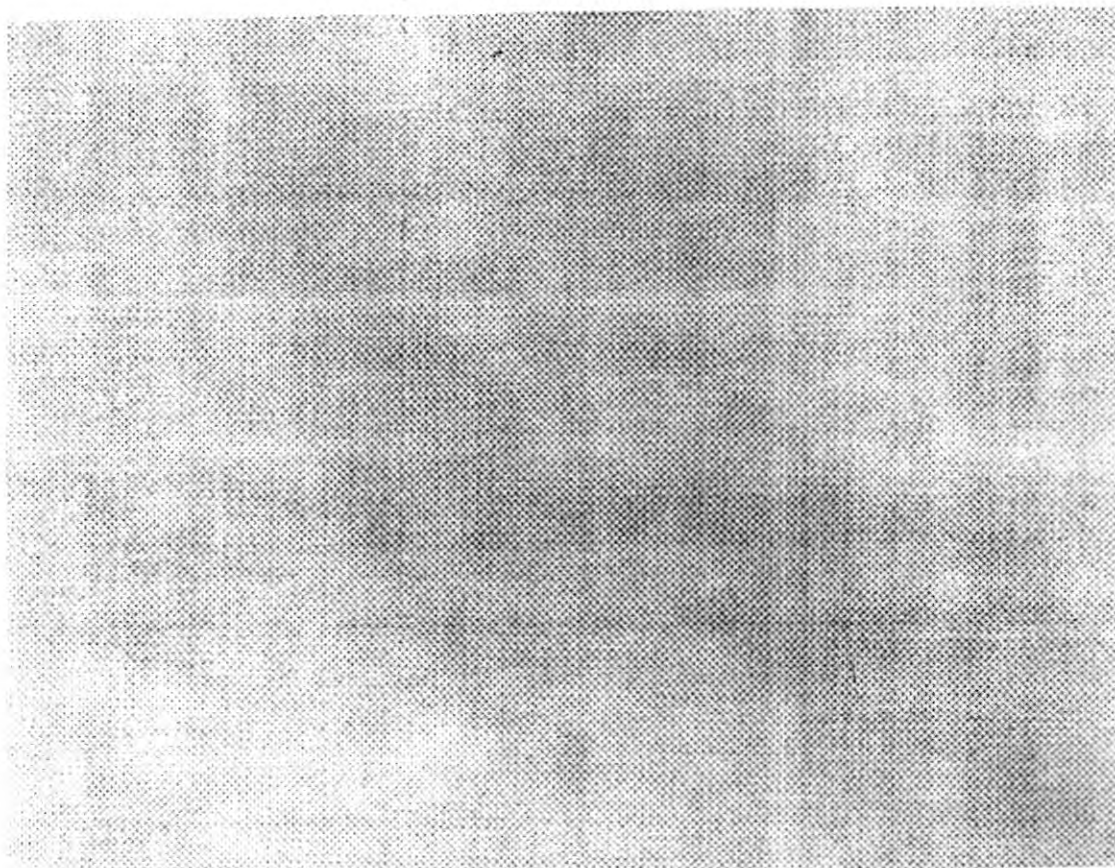
الصورة الناتجة من عملية طرح الحزم لتسجيلات MSS عند وجود غبار متصاعد



شكل (c3)

الصورة الناتجة من عملية طرح الحزم لتسجيلات TM ليوم صحو

تأثير الغبار على قياسات متحسسات الأقمار الاصطناعية نوع لاندسات
عوني أدوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي



شكل (d3)

الصورة الناتجة من عملية طرح الحزم لتسجيلات TM في حالة وجود عاصفة ترابية

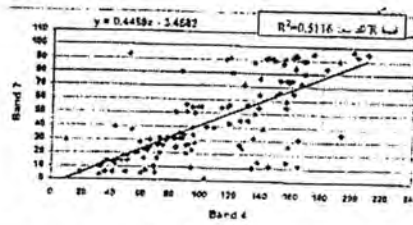
جدول (1) نتائج إيجاد نسبة الانعكاسية للقطات المختارة:

ت	التاريخ	BAND	نوع المتحسس	نسبة الانعكاسية	حالة الجو
1	21-11-1972	4 و 7	MSS	0.585	صاف
2	9-12-1972	=	=	0.036	غبار
3	27-12-1972	=	=	0.913	صاف
4	2-5-1973	=	MSS	0.496	=
5	8-3-1975	=	=	0.779	=
6	13-4-1975	=	=	0.447	=
7	14-4-1975	=	=	0.117	غبار متصاعد
8	6-6-1975	=	=	0.611	صاف
9	10-7-1975	=	=	0.110	غبار متصاعد
10	12-7-1975	=	=	0.630	صاف
11	28-7-1975	=	=	0.117	غبار
12	30-7-1975	=	=	0.579	صاف
13	11-8-1975	=	=	0.435	صاف
14	15-8-1975	=	=	0.116	غبار متصاعد
15	22-9-1975	=	=	0.492	صاف
16	10-10-1975	=	=	0.612	صاف
17	25-4-1976	=	=	0.532	صاف
18	18-6-1976	=	=	0.073	غبار متصاعد
19	24-7-1976	=	=	0.180	غبار
20	11-8-1976	=	=	0.515	صاف
21	15-4-1999	2 و 4	TM	0.092	غبار
22	16-2-1990	=	TM	0.99	صاف
23	6-3-2000	=	TM	0.068	عاصفة غبارية
24	21-5-2001	=	TM	0.160	غبار

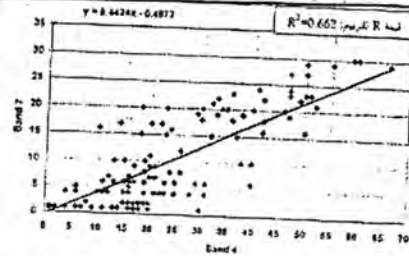
تأثير الغبار على قياسات متحسسات الاقمار الاصطناعية نوع لاندسات
عوني أدوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي

جدول (2) نتائج حسابات الانحراف المعياري للقطات المختارة:

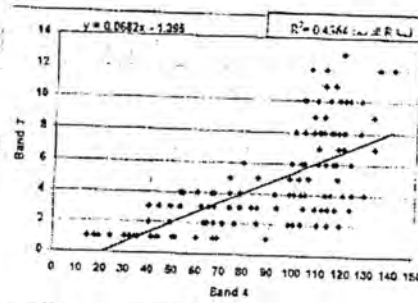
ت	التاريخ	نوع التحسس	Band	المدى Miran	S.D.	حالة الجو
1	21-11-1972	MISS 2	1 4	9.23 25.18	2.26 1.35	صاف
2	9-12-1972	"	"	4.14 100.4	5.03 9.24	غبار
3	27-12-1972	"	"	68.92 76.18	1.07 2.94	صاف
4	2-5-1973	MISS 3	"	4.06 5.42	0.84 2.13	صاف
5	8-3-1975	"	"	4.23 4.22	1.17 1.3	صاف
6	13-1-1975	"	"	4.19 8.09	0.84 4.27	صاف
7	13-1-1975	"	"	7.3 26.4	3.19 11.38	غبار متصاعد
8	6-6-1975	"	"	4.22 9.22	0.71 3.98	صاف
9	10-5-1975	"	"	7.23 8.28	4.8 9.2	غبار متصاعد
10	12-7-1975	"	"	4.18 17.07	0.56 8.46	صاف
11	25-7-1975	"	"	13.92 16.25	6.25 11.2	غبار
12	26-7-1975	"	"	4.1 12.65	1.1 5.34	صاف
13	11-8-1975	"	"	4.43 6.85	0.88 1.11	صاف
14	15-8-1975	"	"	4.3 21.2	2.95 6.70	غبار متصاعد
15	22-9-1975	"	"	5.85 21.5	1.16 5.94	صاف
16	18-10-1975	"	"	4.53 4.69	3.11 1.72	صاف
17	25-4-1976	"	"	5.12 59.77	1.54 18.6	صاف
18	18-6-1976	"	"	5.26 66.76	6.11 9.43	غبار متصاعد
19	24-7-1976	"	"	4.97 16.15	7.04 10.69	غبار
20	11-8-1976	"	"	7.24 12.45	2.48 6.15	صاف
21	13-4-1979	TN 5	4 2	59.5 48.9	10.3 13.6	غبار
22	16-2-1980	TN 6	"	3.32 5.7	1.7 6.84	صاف
23	6-3-2000	TN 7	"	28.0 150.54	9.78 12.35	غاصقة ترابية
24	21-5-2001	TN 7	"	6.85 9.25	6.25 5.32	غبار



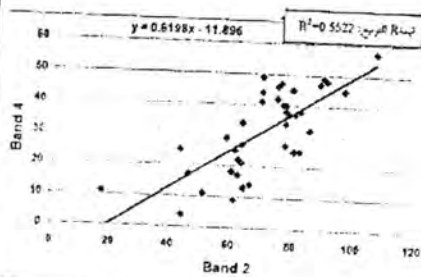
علاقة الانعكاسية بحركة الترددات لتسجيلات المحسس MSS مرحوة غبار حفيف



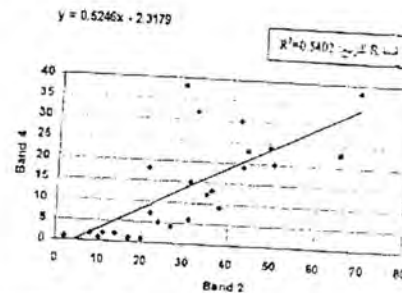
علاقة الانعكاسية بحركة الترددات لتسجيلات MSS في حالة جو صاف



علاقة الانعكاسية بحركة الترددات لتسجيلات MSS في حالة وجود غبار متناثر

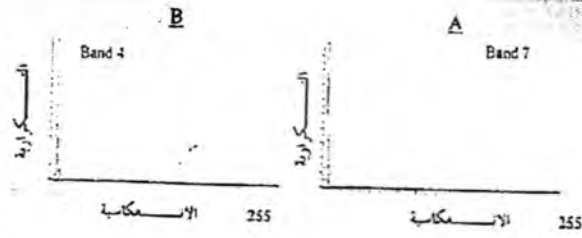


علاقة الانعكاسية بحركة الترددات لتسجيلات TM في حالة وجود عاصفة



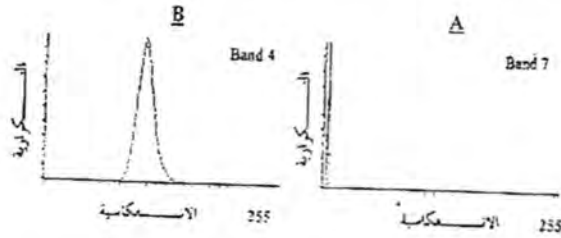
علاقة الانعكاسية بحركة الترددات لتسجيلات TM في حالة الجو العالي

تأثير الغبار على قياسات متحسسات الاقمار الاصطناعية نوع لاندسات
عوني ادوار عبد الأحد، عمر برهان الجراح، عبد الوهاب حسين العبيدي



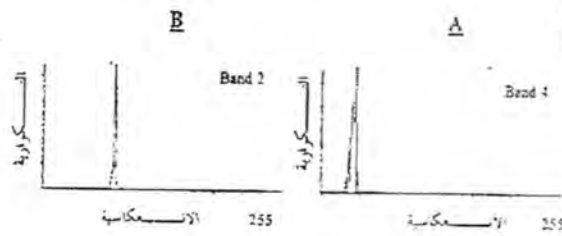
شكل (8)

المخرج التكراري الانعكاسي لتسجيلات MSS ليوم صاف



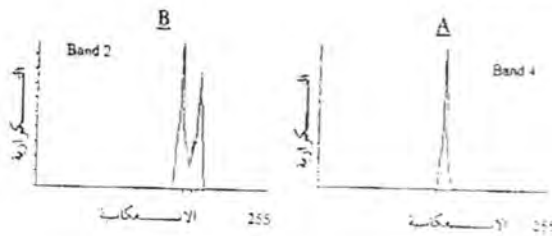
شكل (9)

المخرج التكراري الانعكاسي لتسجيلات MSS في حالة تصاعد غبار



شكل (10)

المخرج التكراري الانعكاسي لتسجيلات TM ليوم صاف



شكل (11)

المخرج التكراري الانعكاسي لتسجيلات TM عند حصول عاصفة ترابية

المصادر :

- 1- Wallace, J.M., "Atmospheric science", An introductory survey, Univ. of Washington, p.467, 1976.
- 2- Koning, H.W., Krftzchmar J.O., Akland, G.G. and Bennett, B.G., "Atmospheric environment", Vol. 20, p. 102, 1986.
- 3- Climatic Atlas of Iraq (1951-1980), Baghdad, Iraq, 1989.
- 4- Elachi, C., "Introduction to the physics and techniques of remote sensing", Awiley – Interscience pub. Co., p. 407, U.S.A., 1990.
- 5- Sabin, F.F., "Remote sensing principles and interpretation", p. 426, W.H., Freeman and Company, San fransisco, 1978.
- 6- U.S.G.S., Historical Landsat data comparisons, p. 8, Erore data center geological survey, U.S.A., 1995.
- ٧- ليلساند و كيفر، " الأستشعار عن بعد وتفسير المرئيات"، ترجمة د. حلمي حسن خروف، المنظمة العربية للتربية والثقافة والعلوم، صفحة ٩٧٤ ، سورية - دمشق، ١٩٩٤ .
- 8- Paul, Menzel, " WMO Satellite reports", Notes on satellite meteorology, Tech. Doc., Sat-17, WMO/TD No. 824, 1985.

تأثير التظليل بواسطة مانعات الشمس الأفقية لنوافذ باتجاهات مختلفة

مهدي عبد الجبار الرياحي مركز بحوث الطاقة والبيئة-وزارة الصناعة والمعادن-بغداد-العراق.

قيس جميل الجميلي الجامعة المستنصرية-كلية العلوم - قسم علوم الجو

أسامة طارق الطائي الجامعة المستنصرية / كلية العلوم - قسم علوم الجو

تاريخ الاستلام: 30 / 10 / 2005 تاريخ القبول: 28 / 5 / 2006

Abstract

Solar radiation incident on windows, both unshaded and shaded by overhangs having dimensions ratios, $Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ & 1.0 were calculated for different orientations in Baghdad. It is seen that the south windows were quite shaded during summer when using overhang ratio greater than 0.6 , whereas summer radiation increased for windows facing SE&SW and SSE&SSW using a Z -value greater than 0.6 . Summer radiation for nushaded windows facing E&W were found higher than winter radiation, with use of $Z=0.2, 0.4$ leading to reduction in radiation received, whilst maintaining an edge for summer over winter radiation. Use of $Z=0.6$, however effectively reduce summer radiation without drastically reducing winter radiation.

المستخلص

تم حساب الإشعاع الشمسي الساقط على النوافذ باتجاهات مختلفة لمدينة بغداد في حالة عدم التظليل بوتر أو التظليل بوتر نسبة أبعاده $Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$. لقد وجد أن النوافذ الجنوبية خلال الصيف تظل تماماً عند استخدام وتر نسبة أبعاده أكبر من 0.6 ، في حين يزداد الإشعاع الصيفي على النوافذ SE&SW و SSE&SSW لوتر نسبة أبعاده أكبر من 0.6 . إن الإشعاع الشمسي على النوافذ E&W بدون وتر يكون خلال الصيف أعلى من الشتاء، وأن استخدام الاوتاد التي أبعادها $0.4, 0.2$ مع تلك الواجهات سيؤدي إلى تقليل كميات الأشعاع المستلمة عليها ولكن يبقى الإشعاع الصيفي أعلى من الإشعاع الشتوي، بينما استخدام الوتر الذي أبعاده 0.6 يؤدي إلى خفض الإشعاع الصيفي بدرجة أكبر بكثير من الإشعاع الشتوي إلى الحد الذي يجعله مساوياً له تقريباً.

المقدمة

عندما يكون الجريان الحراري في الأبنية بصورة كلية بواسطة طرق طبيعية مثل الاشعاع ، التوصيل والحمل ، وتشارك الطاقة الشمسية بأكثر احتياجات الطاقة المطلوبة للتدفئة والتبريد ، فإن ذلك يمثل أسلوب ذاتي في التصميم Passive design. ولذلك يمكن أن تصنف طرق التصميم الذاتي على أساس العلاقة الوظيفية والهندسية بين الشمس وفضاء الاستخدام (هو الفضاء المستفيد من عملية التدفئة والتبريد بالطاقة الشمسية) [1].

أن أنظمة استخدام التسخين والتبريد الذاتي بأنواعها الثلاثة (المباشر، الغير مباشر والمعزول) يكون مرغوباً فيها من الناحية الاقتصادية بسبب كون الهيكلية الاعتيادية للمباني بسيط والتكاليف ليست بالمقدار الكبير مقارنة مع المباني ذات النظام المعقد [2]. أن عملية السيطرة الشمسية للمبنى (التحكم بالسلوك الشمسي والحد من تأثير الظروف المناخية المتطرفة) تشمل تعريض أكبر مساحة ممكنة للمبنى والواجهات الزجاجية (النوافذ) للأشعة الشمسية في الفترات الباردة وحجب أشعة الشمس المباشرة عنها في الفترات الحارة . ويمكن أن يتحقق مبدأ السيطرة الشمسية بالوسائل الآتية :-

1. توجيه المبنى بشكل يضمن استلام السطوح الخارجية أكبر كمية من الاشعاع الشمسي في الفترات لباردة و اقل كمية في الفترات الحارة .
2. التحكم بابعاد النوافذ والفتحات اعتماداً على التوجيه ، بحيث يتم استعمال الفتحات الكبيرة في الواجهات التي تستلم أقل مقدار من الاشعاع الشمسي ، وبالعكس .
3. تحقيق مبدأ التظليل الشمسي Solar Shading بواسطة استخدام المظلات الشمسية ، أو باستخدام الأشجار او المتسلقات .

يمكن تعريف التظليل الشمسي بأنه عملية تقليل التأثير الحراري على المبنى كلياً أو جزئياً بواسطة منع سقوط الأشعة الشمسية المباشرة عليه ، لذلك فإن التظليل الشمسي يشمل تظليل كل من السطوح الأفقية والعمودية والفضاءات الخارجية . وهنا تبرز أهمية تظليل النوافذ الزجاجية

لما تسببه من زيادة درجة حرارة الفضاء الداخلي بسبب خاصية تأثير البيت الزجاجي Glass house effect. أن اختيار واختبار وسائل التظليل الخارجية يتم من خلال معرفة وملاحظة المسار الشمسي الدقيق و المحدد ، حيث أن وسائل التظليل يجب أن توفر نوعاً من السيطرة بحيث تكون أشعة وحرارة الشمس متوفرة في الفترات الباردة ومقطوعة عن المبنى في الفترات الحارة .

أن عملية التظليل الشمسي للنوافذ يمكن تحقيقها وذلك بإضافة حواجز تدعى بالمظلات الشمسية Overhangs ، وتكون المظلات الشمسية المرتبطة بالمبنى وفتحات النوافذ على نوعين هي : المظلات الشمسية الثابتة والمتحركة . وهناك ثلاث أنواع للمظلات الشمسية الثابتة والمتحركة وهي المظلات الأفقية ، المظلات العمودية والمظلات المركبة (الأفقية والعمودية). ولمعرفة الأداء الحراري للنافذة المظللة لأي توجيه بدقة يجب حساب كفاءة التظليل ومعامل التظليل للمظلات الشمسية [3] ، وهناك عدة عوامل تؤثر على كفاءة المظلة الشمسية منها: التوجيه الأمثل للنافذة ، مجاورات الموقع من الأبنية والأشجار ، أبعاد النافذة ووقت استعمال المبنى [4,5,6] .

لقد بدأت تقنية التسخين الذاتي تدخل مرحلة العمارة والموضوعية في التصميم منذ بداية القرن العشرين وحينذاك وضعت الأسس لطريقة العمل العصرية في تصميم العديد من البيوت الشمسية Solar house باستخدام النوافذ الزجاجية ذات المظلات الشمسية للحفاظ على الظروف المناخية المناسبة داخل المبنى [7] . واشتهرت هذه التقنية فيما بعد في بلدان مختلفة من العالم [8] . وحيث أن مناخ القطر العراقي بشكل عام يقع ضمن الأقاليم الحارة الجافة وشبه القارية فقد برز الاهتمام في هذا المجال منذ ما يقرب من 20 عاماً وخلال تلك الفترة تم تقديم العديد من الدراسات اشتملت على دور وسائل التظليل في تقليل الاشعاع الشمسي واستخدام تصاميم هندسية لأبعاد مختلفة للنوافذ والمظلات ولكل الاتجاهات للأبنية بما يتلائم والظروف المناخية في العراق [4,9,10,11].

تم في هذا البحث حساب المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي على الواجهات العمودية المختلفة الاتجاه بدون مظلة (وتد) وأخرى بوتد له نسبة أبعاد مختلفة لمدينة بغداد (خط عرض 33 درجة شمالاً) ، حيث تم أعداد نموذج حسابي بالمعادلات الرياضية المستخدمة من قبل ليو وجوردان Liu & Jordan [12] وكلين Klein [13] بعد إضافة تأثير المعامل الهندسي للإشعاع المباشر والمنتشر لمستوى التظليل Shading plane بالنسبة للأوتاد . ومن الدراسات الحديثة في هذا المجال [14,15,16].

الجزء النظري

إن قياسات الاشعاع الشمسي الكلي على السطوح الأفقية متوفرة في العديد من المواقع ، في حين ما زالت هذه القياسات على السطوح المائلة والعمودية نادرة جداً . وهناك طريقة بسيطة لتخمين معدل الاشعاع اليومي لكل شهر من السنة على سطوح مواجهة لخط الاستواء Equator استخرجها ليو و جوردان Liu & Jordan [12] . أما كلين Klein [13] فقد استطاع ومن خلال فرضيات ليو و جوردان Liu & Jordan أن يوجد معادلات عامة

مهدي عبد الجبار، قيس جميل، أسامة طارق الطائي

وشاملة لتقدير المعدل الشهري لشدة الإشعاع الكلي اليومي على السطوح المائلة والعمودية باتجاهات مختلفة $H_{\beta\gamma}$ كما يأتي :-

$$H_{\beta\gamma} = R \cdot H \dots\dots\dots(1)$$

حيث H : المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي على السطح الأفقي ، R : النسبة للمعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي على السطوح المائلة الى نفس الاشعاع على السطوح الافقية لكل شهر ويمكن التعبير عنها بالعلاقة التالية في حالة النماذج المتشابهة الخواص isotropic model [17] .

$$(p+(1+\cos\beta)/2)(\frac{H_d}{H})R_b + (\frac{H_d}{H})R = (1-(1-\cos\beta)/2) \dots(2)$$

حيث H_d : المعدل الشهري نسبة للإشعاع اليومي المنتشر على السطح الأفقي ، β : زاوية ميل السطح عن الأفق (بالدرجات) ، p : الانعكاسية الأرضية ، R_b : النسبة للمعدل الشهري للإشعاع اليومي المباشر على السطوح المائلة الى نفس الاشعاع على السطوح الافقية ويمكن حسابها للسطوح المواجهة مباشرة لخط الاستواء او لأي اتجاه آخر (أنظر المصدر [17]).
أن الإشعاع المنتشر H_d/H هو دالة للنفذية الجوية Clearness index K_T (وهي النسبة بين الاشعاع الشمسي الكلي على سطح الأرض H الى الاشعاع الكلي خارج الغلاف الجوي H_0). وقد وجد الريا حي وعقراوي Al- Riahi & Akrawi بإيجاد العلاقة التالية بينهما عند مدينة بغداد [18] :

$$H_d/H = 1.076 - 1.287 K_T \dots\dots\dots(3)$$

وعند استخدام وتد بعرض X متر فوق قمة نافذة عمودية ارتفاعها Y متر فان معدل الاشعاع المباشر الساقط على النافذة المظللة هو نفس كمية الاشعاع المار خلال مستوي التظليل مضروبة بالعامل الهندسي Geometrical factor $(1+Z^2)^{-1/2}$ ، حيث $X/Y = Z$ (نسبة عرض الوتد الى ارتفاع النافذة) . وكذلك الحال بالنسبة لكمية الاشعاع المنعكس والمنتشر المار خلال مستوي التظليل فيمكن تصحيحها من خلال العامل الهندسي لمركبة الاشعاع المنعكس F_d^* لمستوي التظليل والعامل الهندسي لمركبة الاشعاع المنتشر S_d^* لمستوي التظليل والتي يمكن كتابتهما على النحو التالي[19] :

$$F_d^* = \frac{1}{2} \left[1 + Z - \frac{1}{\sin\{\tan^{-1}(1/z)\}} \right] \dots\dots\dots(4)$$

$$S_d^* = Z \left[\frac{1}{\cos\{\tan^{-1}(1/z)\}} - 1 \right] \dots\dots\dots(5)$$

من خلال جمع كل النتائج السابقة لمركبات الاشعاع الشمسي فانه يمكن أن نحصل على المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي للنافذة المظلمة $H_{\beta\gamma}^*$ كما يأتي [19] :

$$H_{\beta\gamma}^* = (1 + Z^2)^{1/2} R_b(\beta^*) H_b + S_d^* \frac{1}{2} H_d + H \frac{1}{2} \rho (1 + \rho_1 F_d^*) \dots\dots\dots(6)$$

حيث $R_b(\beta^*)$: النسبة لمعدل الاشعاع اليومي المباشر على السطح المائل الى نفس الاشعاع على السطح الأفقي وبأي اتجاه لمستوي التظليل ، H_b : المعدل الشهري للإشعاع اليومي المباشر على السطح الأفقي ، ρ_1 : انعكاسية الوند .

مناقشة النتائج

يبين الشكل (1) المعدلات الشهرية للإشعاع اليومي على السطوح الأفقية والسطوح العمودية المواجهة للجنوب (S) ، الشرق والغرب (E&W) ، الجنوب الشرقي والجنوب الغربي (SE&SW) ، الشمال (N) ، الشمال الشرقي والشمال الغربي (NE&NW) ولاتجاهات SSW&SSE بدون استخدام وتد . يوضح الشكل بأن السطح الأفقي يستلم أكبر كمية من الطاقة الشمسية خلال فصل الصيف وأقل كمية خلال فصل الشتاء ، في حين نلاحظ بأن السطح المواجهة للجنوب يستلم أقل كمية من الطاقة خلال فصل الصيف وأكبر كمية من الطاقة الشمسية خلال الشتاء مقارنة بجميع السطوح الأخرى عدا السطح المواجه للشمال الذي يمتاز بأنه يستلم أقل مقدار من الطاقة خلال السنة بسبب اتجاهه المعاكس لمستوي الحركة الظاهرية للشمس على القبة السماوية . من هنا يتضح بأن السطح المواجه للجنوب هو انسب الواجهات التي تلائم الاستخدام غير الفعال للطاقة الشمسية وبالتالي توفير استهلاك الطاقة التقليدية ، ولكن من جانب آخر نجد بأن الواجهات الجنوبية تتمتع بخصائص متميزة عن غيرها من الواجهات بسبب أن أشعة الشمس تسقط عليها لفترة طويلة خلال اليوم والمطلوب هو تقليل آثار الحرارة الناتجة عن الإشعاع الشمسي عن طريق حجب الأشعة بواسطة المظلات .

تبين الأشكال من 2 إلى 5 المعدلات الشهرية للإشعاع اليومي لنوافذ عمودية باتجاهات SSE&SSW, SE&SW, S و E&W مظلمة بوند نسبة أبعاده $Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$.

مهدي عبد الجبار، قيس جميل، أسامة طارق الطائي

نشاهد من الشكل (2) بأن تظليل النوافذ الجنوبية يؤثر بدرجة كبيرة على تقليل الاشعاع الصيفي من دون تقليل شديد في الاشعاع الشتوي ، ويبدو واضحاً أيضاً بأن التظليل يكون كلي عندما تكون قيمة Z اكبر من 0.6 بسبب أن مركبة الاشعاع الشمسي المباشر سوف تحجب تماماً . أن نسبة التظليل المثلّي تعتمد بدرجة كبيرة على نوع الطلب ، على سبيل المثال فأن بناية خدمية تولد تسخين داخلي كبير تحتاج بلاشك الى أوتاد فوق النوافذ أكبر مما يحتاجه مسكن لعائلة واحدة حيث يكون الاستهلاك السنوي من الطاقة المستخدمة للتدفئة هو الأساس و اكبر من استهلاك التبريد .

بالنسبة للنوافذ العمودية باتجاه (SSE&SSW) الشكل (3) فأن الوضع هنا مختلف قليلاً وفي بعض الأحيان غير مرغوب فيه لان الاوتاد تقلل من الاشعاع الشتوي وتزيد من الاشعاع الصيفي خصوصاً عندما تكون قيمة Z أكبر من 0.4 .

أما النوافذ العمودية باتجاه SE&SW (الشكل (4)) فأن تغير الاشعاع يكون مشابهاً لحد ما الاتجاهات SSE&SSW ولكن يختلف تأثير نسبة التظليل على الاشعاع حيث يزداد الاشعاع الصيفي ويقل الاشعاع الشتوي عندما تكون قيمة Z أكبر من 0.6. أن تباير الاشعاع للواجهات SE&SW بدون وتد يبدو غير منتظم خلال السنة ، ولكن عند استخدام وتد نسبة أبعاده $Z = 0.2$ يلاحظ بأن الاشعاع الصيفي ينخفض قليلاً ويزداد هذا الانخفاض الى أقصى قيمة له عندما تكون قيمة $Z = 0.4$.

أن اتجاهات النوافذ E&W (الشكل (5)) بدون وتد تسمح بإشعاع صيفي كبير وإشعاع شتوي واطئ. أما الاوتاد فأنها تقلل من الاشعاع الصيفي ولكن يبقى دائماً أعلى من الاشعاع الشتوي عدا الحالة عندما تكون قيمة $Z = 0.6$ حيث يقل الاشعاع الصيفي بشكل ملحوظ .

الاستنتاجات

يمكن تلخيص أهم النتائج بما يأتي :-

1. تستلم الواجهات الجنوبية الغير مظلة بوتد أقل مقدار من الطاقة الشمسية خلال فصل الصيف و اكبر كمية من الطاقة خلال فصل الشتاء مقارنة بجميع السطوح الأخرى عدا السطح المواجه للشمال .

2. يساعد تظليل النوافذ باستخدام مانعات الشمس (الاوراد) على تقليل كمية الطاقة الشمسية الساقطة عليها، حيث يقل الاشعاع الصيفي للواجهات الجنوبية بدرجة أكبر من الاشعاع الشتوي ولجميع قيم Z .

3. يتم حجب مركبة الاشعاع المباشر كلياً في فصل الصيف بالنسبة للواجهات الجنوبية فيحالة استخدام وتد نسبة أبعاده أكبر من 0.6 .

4. أن أقصى زاوية انحراف للواجهات العمودية المظللة بوند عن اتجاه الجنوب الجغرافي التيتسهم في تقليل الاشعاع الصيفي مع الإبقاء على قيم الاشعاع الشتوي عالية هو اتجاه SSE&SSW (زاوية سمت السطح $\gamma = \pm 22.50$) . وعندما تتجاوز نسبة أبعاد الوند عن $Z = 0.4$ فإن الاشعاع الصيفي يبدأ بالزيادة . وغالباً ما تستخدم هذه الواجهات عند تصميم الريح المباشر الحيوي للتسخين الشمسي (viable heat gain).

5. أن تغير المعدل الشهري للإشعاع اليومي الصيفي والشتوي للواجهات العمودية SE&SW بدون وتد قليل جداً، ولكن باستخدام الوندات يزداد الفرق بين الاشعاع الصيفي والإشعاع الشتوي حتى يبلغ هذا الفرق أكبر قيمة له عند الوند $Z = 0.4$ الذي يؤثر بدرجة كبيرة على خفض الاشعاع الصيفي . وكما هو الحال بالنسبة للسطوح SSE&SSW يبدأ الاشعاع الصيفي بالزيادة عندما تتجاوز نسبة أبعاد الوند عن $Z = 0.6$.

6. تستلم السطوح العمودية المواجهة للشرق أو الغرب E&W خلال فصل الصيف كمية من الطاقة الشمسية أعلى من فصل الشتاء ، وأن مقدار هذه الطاقة أكبر حتى من باقي السطوح الأخرى عدا السطح الأفقي . أما استخدام المظلات فوق النافذة فإنه يساعد على تقليل كميات الطاقة المستلمة .

وعندما تكون نسبة أبعاد الوند $Z = 0.6$ نلاحظ أن الاشعاع الصيفي ينخفض كثيراً وينخفض معه الاشعاع الشتوي ولكن بدرجة أقل مما ينتج عنه حدوث تغير طفيف في المعدلات الشهرية للإشعاع اليومي خلال السنة . من هنا فإن استخدام التظليل بالنسبة لهذه الواجهات ليس له جدوى كما أن هذه الواجهات غير مرغوبة في التصميم .

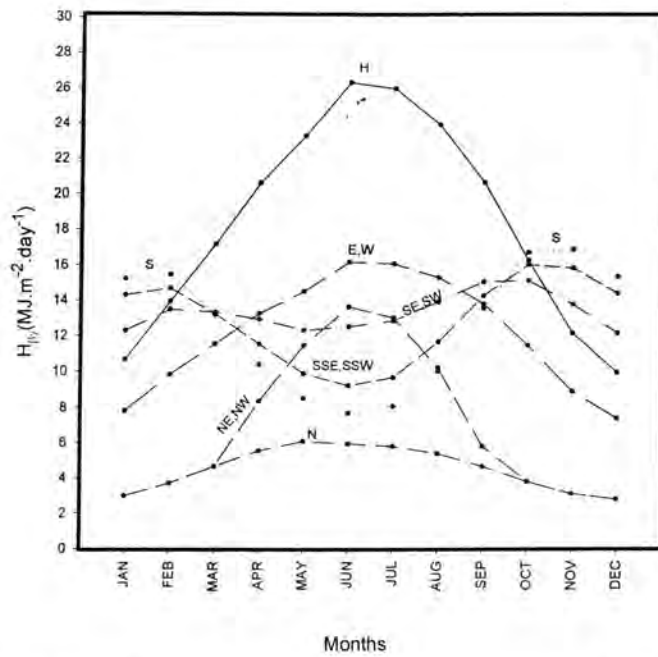
قائمة الرموز

γ	زاوية سمت السطح (الجدار)
β	زاوية ميل السطح
β^*	زاوية ميل السطح لمستوي التظليل
H	المعدل الشهري للإشعاع اليومي الاعتيادي الساقط على السطح الافقي
H_0	المعدل الشهري للإشعاع اليومي خارج الغلاف الجوي الساقط على السطح الافقي
H_d	المعدل الشهري للإشعاع اليومي المنتشر الساقط على السطح الافقي
H_b	المعدل الشهري للإشعاع اليومي المباشر الساقط على السطح الافقي
$H_{\beta\gamma}$	المعدل الشهري للإشعاع اليومي الساقط على السطح المائل بأي زاوية وبأي اتجاه
$H_{\beta\gamma}^*$	المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على نوافذ عمودية مظلة بمانعة
R	النسبة بين المعدل الشهري للإشعاع اليومي الساقط على السطح المائل الى نفس الإشعاع الساقط على السطح الافقي
R_b	النسبة بين المعدل الشهري للإشعاع اليومي المباشر الساقط على السطح المائل الى نفس الإشعاع الساقط على السطح الافقي
$R_b(\beta^*)$	النسبة بين المعدل الشهري للإشعاع اليومي المباشر الساقط على السطح المائل الى نفس الإشعاع الساقط على السطح الافقي ولمستوي التظليل
Y	ارتفاع النافذة
X	عرض المانعة
K_T	المعدل الشهري لمعامل النفاذ الجوي لليوم الاعتيادي
ρ	الانعكاسية الارضية (انعكاسية السطح الافقي)
ρ_v	انعكاسية المانعة
Z	نسبة عرض المانعة الى ارتفاع النافذة (نسبة بعد المانعة)
Sd^*	المعامل الهندسي للإشعاع المنتشر لمستوي التظليل
Fd^*	المعامل الهندسي للانعكاسية و المنعكسة بواسطة المانعة

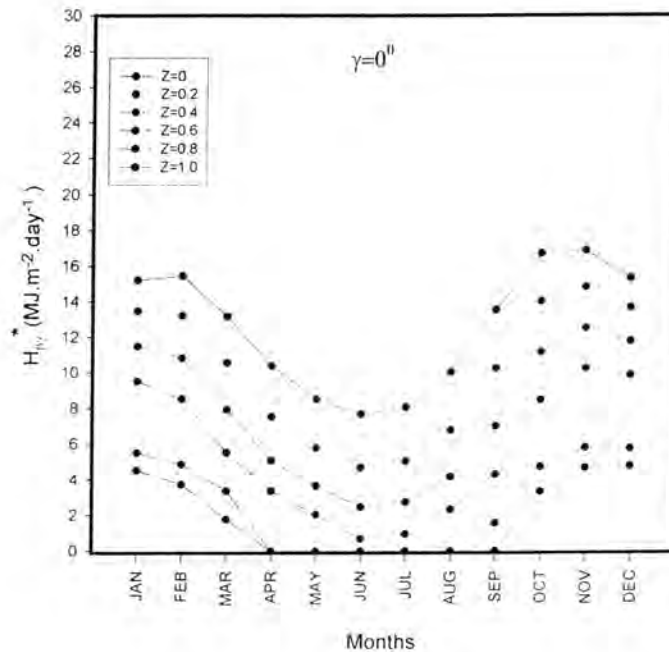
قائمة الوحدات

الرموز	الوحدات
γ	بالدرجات
β	بالدرجات
β^*	بالدرجات
H	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
H_0	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
$H_{\beta\gamma}$	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
$H_{\beta\gamma}^*$	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
H_d	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
H_b	$\text{MJ.m}^{-2}.\text{day}^{-1}$
X	سنتيمتر أو متر
Y	سنتيمتر أو متر
Z	خالي من الوحدات
ρ_l	خالي من الوحدات
P	خالي من الوحدات
K_T	خالي من الوحدات
R	خالي من الوحدات
R_b	خالي من الوحدات

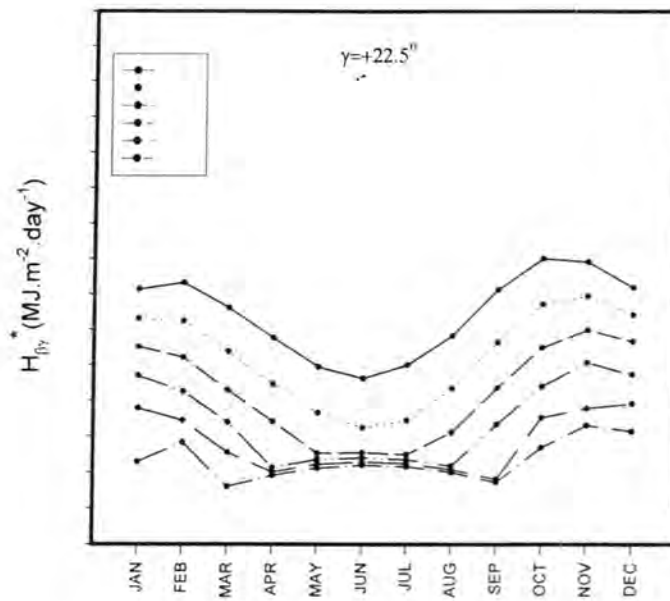
مهدي عبد الجبار، قيس جميل، أسامة طارق الطائي



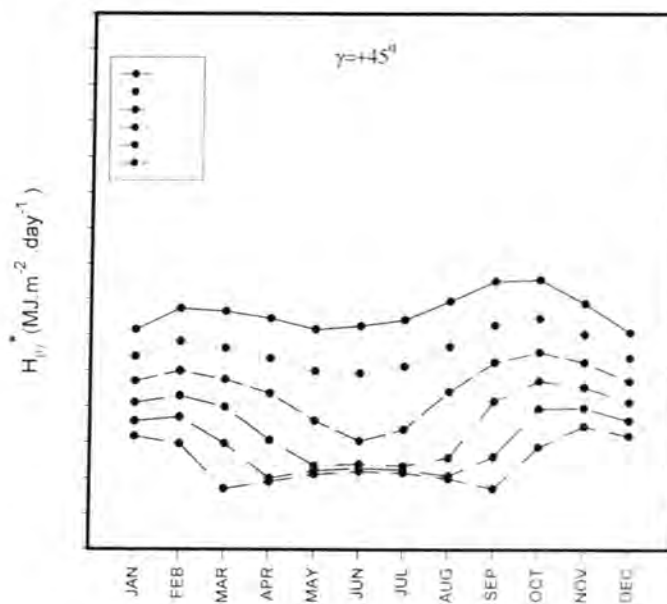
شكل (1) المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على السطح الأفقي (H) والمعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على نوافذ عمودية غير مظلة بتد (Z=0) للاتجاهات (N, NE, E, SE, SSE, S, SW, W, NW).



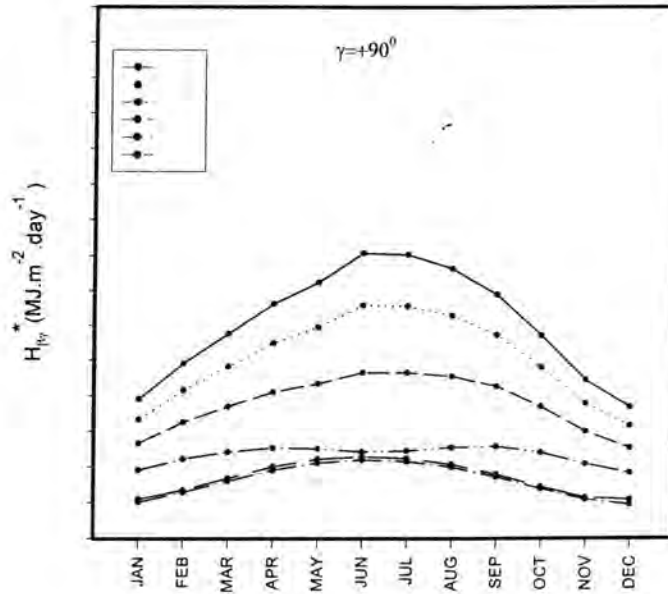
شكل (2) المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على نوافذ عمودية غير مظلة بتد (Z=0) والمظلة بتد (Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0) لاتجاه الجنوب الجغرافي ($\gamma = 0^\circ$).



شكل (3) المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على نوافذ عمودية غير مظلة بوتد ($Z=0$) والمظلة بوتد ($Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$) وباتجاه ($\gamma = \pm 22.5^\circ$) (SSE, SSW)



شكل (4) المعدل الشهري للإشعاع اليومي الكلي الساقط على نوافذ عمودية غير مظلة بوتد ($Z=0$) والمظلة بوتد ($Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$) وباتجاه ($\gamma = \pm 45^\circ$) (SE, SW)



شكل (5) المعدل الشهري للاشعاع اليومي الصافي الكلي الساقط على نوافذ عمودية غير مظلة بوتد ($Z=0$) والمظلة بوتد ($Z=0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$)، واتجاه الجنوب (E.W). ($\gamma = \pm 90^\circ$)

المصادر

- 1- Abud D.W., "The effect of the amount and position of thermal insulation on heat transfer through roofs". Msc. University of Baghdad, (1986).
- 2- Simonson J.R., "Computing methods in solar heating design". pp.143-145, (1984) By Academic Press, Canada.
- 3- شمعون عصام، "المعالجات المعمارية للمظلات الشمسية في المناطق الحارة الجافة". اطروحة ماجستير، الجامعة التكنولوجية، بغداد، (1989).
- 4- زكو رائد، "تصميم المظلات الشمسية للنوافذ باستخدام الحاسب الالى". اطروحة ماجستير، الجامعة التكنولوجية، بغداد، (1988).
- 5- Cowman H.J., "Solar energy applications in the design of buildings". Second Edition, pp.35-40, (1980) By Academic Press, printed on acid-free paper, London.
- 6- Kueln T.H., Ramsey J.W. & Threlkeld J.L., "Thermal environmental engineering". pp.11-12, (1998) By Academic Press, New Jersey.

- 7- "Passive solar energy design and materials". Energy Technology Review , Vol.2, No. 41, pp.22-28,(1978).
- 8- Duffie J. A. & Beckman W. A. ,. "Solar engineering of thermal processes". pp. 77-80, (1960) By Academic Press, U.S.A .
- 9- الجوادى مقداد ، " ابعاد مانعات الشمس للفتحات والشبابيك للمباني العراقية ". مجلس البحث العلمي ، النشرة العلمية (79/58) ، (1982) .
- 10- البزاز أنعام ، " توظيف الطاقة الشمسية في الابنية في العراق ". اطروحة ماجستير ، الجامعة التكنولوجية ، بغداد، (1990).
- 11- العلوان هدى ، " تأثير الاشعة الشمسية على البناية الكاديمية ودور وسائل التظليل ". مجلة الهندسة والتكنولوجيا ، المجلد (14) ، العدد (2) ، (1995) .
- 12- Liu B.H.Y. & Jordan R.C. , " Daily insolation on surfaces towards the equator". Ashrae . Journal, Vol.3, No.10, pp. 53-59, (1961).
- 13- Klein S.A. , " Calculation of monthly average insolation on tilted surfaces". Solar Energy , Vol.19, No.14, pp. 325-329,(1977).
- 14- Hendron R. , Judkoff P., Reeves P. , "Passive solar heating ,cooling and day lighting "NREL is a U.S. department of energy laboratory ,pp.22,(2005) By Academic Press, U.S.A .
- 15- Griffith B. , Pless S., Talbert B., "Energy design analysis and evaluation of a proposed air rescue and fire fighting administration building for teeterboard airport "NREL/TP-550-33294, pp.200-2004, July(2003) By Academic Press, Colorado.
- 16- Anderson R., Christensen C., Hancock E., "Building America performance analysis procedures .Revision 1"NREL/TP-550-35567, pp.99-101, June(2004) By Academic Press, Colorado.
- 17- Iqbal M. , " An introduction to solar radiation ". pp.20-21 , (1983) By Academic Press, Canada.
- 18- AL-Riahi M. & Akrawi A. , " Angular distribution of global solar radiation on inclined surface at Baghdad". Proc. Of the ISES, Hamburg FRG, 4, 3779-3783, (1992).
- 19- Jones JR R.E., " Effect of overhangs shading of windows having arbitrary azimuth". Solar Energy, Vol.24, No.16, pp. 305-312, (1980).