

مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية و التطبيقية



مجلة فصلية محكمة تصدر عن جامعة بنى وليد

من محتويات العدد :

- الهوية الثقافية والنظام القيمي وخطاب الحياة اليومية قراءة سوسنولوجية في مخاطر العولمة الثقافية.
- نماذج من أدوات الترجيح لدى الإمام الطبرى في تفسيره "دراسة وصفية".
- التنظيم القضائي في ليبيا والاشكاليات ذات الصلة "دراسة تحليلية لمراحل القضاء ما قبل إنشاء المحكمة العليا".
- مفهوم إصابة العمل في إطار قانون الضمان الاجتماعي الليبي.
- حماية البيئة في ضوء قواعد القانون الدولي.
- مشاركة المرأة السياسية .
- الضمان في العقود الواردة على الملكية في القانون الليبي.
- الزواج المبكر " المفهوم و الأسباب والأثار" .
- التدفق النفسي لدى طلبة الجامعة.
- الإدارة الاستراتيجية في تطوير المؤسسة العسكرية.
- اتفاقية إجراءات الاستثمار المرتبطة بالتجارة "أبعادها الاقتصادية على مستقبل التنمية المستدامة في ليبيا".

السنة السادسة العدد الخامس والعشرون سبتمبر ٢٠٢٢

BANI WALEED UNIVERSITY JOURNAL OF SCIENCES & HUMANITIES



A QUARTERLY REFEREED JOURNAL ISSUED BY BANI WALEED UNIVERSITY

- Relationship between parvovirus B19 infection and anemia among hemodialysis, Libya.

مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية و التطبيقية - العدد السادس والعشرون - سبتمبر ٢٠٢٢

Sixth Year – Twenty-fifth Issue – September 2022



مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية والتطبيقية

مجلة علمية فصلية محكمة تصدر عن
جامعة بنى وليد
بنى وليد - ليبيا

السنة السادسة - العدد الخامس والعشرون –
سبتمبر 2022 م

التوثيق: الدار الوطنية للكتاب بنغازي 121/2017

**مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية
والتطبيقية**
السنة السادسة - العدد الخامس والعشرون -

سبتمبر ٢٠٢٢

رئيس تحرير المجلة

أ.د سالم محمد سالم التونسي

هيئة تحرير المجلة

د.أسامة غيث فرج

د. الطاهر سعد علي ماضي

د. السنوسي مسعود عبید الله

د. جعفر الصيد عوض

د. مفتاح أغنية محمد أغنية

د. فاتح عمر زيدان

د. حمزة خليفة ضو

أ. جمال معمر محمد الدبيب

أ. أشرف علي محمد لامه

اللجنة الاستشارية للمجلة

أ.د أبو العيد الطاهر عبد الله الفقهى

أ.د أحمد ظافر محسن

أ.د أنور حسين عبد الرحمن

أ.د بلقاسم السنوسي أبو حمرة

أ.د رضا علي عبد الرحمن

أ.د فخر الدين عبد السلام عبد المطلب

أ.د مرتضى مصطفى أبو كريشة

قواعد النشر بمجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية والتطبيقية

مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية والتطبيقية

مجلة علمية فصلية محكمة تهتم بنشر البحوث والدراسات العلمية الأصيلة والمبتكرة في العلوم الإنسانية والتطبيقية.

وإذ ترحب بالمجلة بالإنتاج المعرفي والعلمي للباحثين في المجالات المشار إليها تحيطكم علماً بقواعد النشر بها وهي كالتالي :

1- تقبل البحوث باللغتين العربية والإنجليزية على أن تعالج القضايا والموضوعات بأسلوب علمي موثق يعتمد الإجرائية المعتمدة في الأبحاث العلمية، وذلك بعرض موضوع الدراسة وأهدافها ومنهجها وتقنياتها وصولاً إلى نتائجها وتوصياتها ومقتراتها.

2- يكون التوثيق بذكر المصادر والمراجع بأسلوب أكاديمي يتضمن:

أ- الكتب : اسم المؤلف، عنوان الكتاب، مكان و تاريخ النشر، اسم الناشر، رقم الصفحة.

ب- الدوريات : اسم الباحث، عنوان البحث، اسم المجلة، العدد و تاريخه، رقم الصفحة.

3- معيار النشر هو المستوى العلمي والموضوعية والأمانة العلمية ودرجة التوثيق وخلو البحث من الأخطاء التحريرية واللغوية وأخطاء الطباعة.

4- أن يكون النص مطبوعاً على برنامج (Microsoft Word) ويكون حجم الخط (14) ونوعه (Simplified Arabic)، على حجم ورق A4 .

5-أن لا يزيد حجم الدراسة أو البحث على (25) صفحة محددة أقصى وان يرفق بخلاصة للبحث أو المقالة لا تتجاوز(60)كلمة تنشر معه عند نشره .

- 6- ترحب المجلة بتعطية المؤتمرات والندوات عبر تقارير لا تتعدي 10 صفحات (A4) كحد أقصى، يذكر فيها مكان الندوة أو المؤتمر وزمانها وأبرز المشاركين، مع رصد أبرز ما جاء في الأوراق والتعليقيات والتوصيات.
- 7- ترحب المجلة بنشر مراجعات الكتب بحدود 10 صفحات (A4) كحد أقصى على أن لا يكون قد مضى على صدور الكتاب أكثر من عامين. على أن تتضمن المراجعة عنوان الكتاب وأسم المؤلف ومكان النشر وتاريخه وعدد الصفحات، وتتألف المراجعة من عرض وتحليل ونقد، وأن تتضمن المراجعة خلاصة مركزة لمحتويات الكتاب، مع الاهتمام بمناقشة أطروحات المؤلف ومصداقية مصادره وصحة استنتاجاته.
- 8- يرفق مع كل دراسة أو بحث تعريف بالسيرة الأكademie والدرجة العلمية والعمل الحالي للباحث.
- 9- لا تدفع المجلة مكافآت مالية عما تقبله للنشر فيها.
- 10- لا تكون المواد المرسلة للنشر في المجلة قد نشرت أو أرسلت للنشر في مجلات أخرى.
- 11- تخضع المواد الواردة للتقدير، وتحتار هيئة تحرير المجلة (سريأ) من تراه مؤهلاً لذلك، ولاتعاد المواد التي لم تنشر إلى أصحابها.
- 12- يتم إعلام الباحث بقرار التحكيم خلال شهرين من تاريخ الإشعار باستلام النص، وللمجلة الحق في الطلب من الباحث أن يحذف أي جزء أو يعيد الصياغة، بما يتواافق وقواعدها.
- 13- تحتفظ المجلة بحقها في نشر المادة وفق خطة التحرير، وتوّل حقوق الطبع عند إخبار الباحث بقبول بحثه للنشر للمجلة دون غيرها.
- 14- مسؤولية مراجعة وتصحيح وتدقيق لغة البحث تقع على الباحث، على أن يقدم ما يفيد بمراجعة البحث لغوية، ويكون ذلك قبل تقديمها للمجلة.
- 15- ترسل البحوث والدراسات والمقالات باسم مدير التحرير.

بخصوص البحوث والدراسات والمقالات التي تسلم إلى مقر المجلة، فإن البحث يسلم على قرص مدمج(CD) مرفقا بعدد 2 نسخة ورقية.

للمزيد من المعلومات والاستفسار يمكنكم المراجعة عبر :

البريد الإلكتروني
jurbwu@bwu.edu.ly

صفحة المجلة على فيسبوك
(مجلة جامعة بنى وليد للعلوم الإنسانية والتطبيقية)

مقر المجلة
إدارة المكتبات والمطبوعات والنشر بالجامعة – المبني الإداري
لجامعة بنى وليد
بني وليد – ليبيا

محتويات العدد

الصفحة	اسم الباحث	عنوان البحث
8	د. ضوخليفة الترهوني	الهوية الثقافية والنظام القيبي وخطاب الحياة اليومية قراءة سوسيولوجية في مخاطر العولمة الثقافية
27	د. نجية محمود ميلود	نماذج من أدوات الترجيح لدى الإمام الطبرى في تفسيره "دراسة وصفية"
46	د. عزيزة محمد شقاف	التنظيم القضائي في ليبيا والاشكاليات ذات الصلة "دراسة تحليلية لمراحل القضاء ما قبل إنشاء المحكمة العليا"
68	أ. معزم صباح إمجد	مفهوم إصابة العمل في إطار قانون الضمان الاجتماعي الليبي
	د. فرhat محمد فرحات	
86	د. علي محمد سالم	حماية البيئة في ضوء قواعد القانون الدولي
	أ. الفيتوري سعد علي	
110	أ. خالد محمد نصر	مشاركة المرأة السياسية
130	د. عبدالسلام بلعيدي خليفة	الضمان في العقود الواردة على الملكية في القانون الليبي
146	د. حنان أحمد عثمان	"الزواج المبكر" المفهوم والأسباب والأثار"
175	د. رقية محمد حامد	التدفق النفسي لدى طلبة الجامعة
193	د. مرعي علي الرمحي	الإدارة الاستراتيجية في تطوير المؤسسة العسكرية
224	د. أحمد محمد النقراط	اتفاقية إجراءات الاستثمار المرتبطة بالتجارة
	أ. علي امبارك النقراط	"أبعادها الاقتصادية على مستقبل التنمية المستدامة في ليبيا"

محتويات العدد

عنوان البحث	اسم الباحث	الصفحة
Relationship between parvovirus B19 infection and anemia among hemodialysis, Libya.	Dr. Musbah Emhamed Almbsuot	242
Integrating Activity-Based Pedagogy and Process Drama in the Classroom/EFL	Dr. Hussein Faraj Albozeidi . Naser Muftah Alferjani	256
Fabrication of Concrete Mixer machine	Abdelrazag Faraj Emhemed Walid Aborid Abdannabi.	278
DFT study of Polyethylene Oxide (PEO)/Polyvinyl Phenol (PVPH) Blends	Masoud Omar Masoud Boubaker Muftah Hosouna Abdulsalm Ibrahim Abdulsalm	292

السنة السادسة - العدد الخامس والعشرون - سبتمبر ٢٠٢٢

DFT study of Polyethylene Oxide (PEO)/Polyvinyl Phenol (PVPH) Blends

BOUBAKER.M.HOSOUNA^{1*}, ABDULSALM IBRAHIM²

1. Department of Chemistry, Faculty of Science, Sebha University, Sebha City — Libya
2. Department of Chemistry, Faculty of Science, University of Benghazi,Benghazi,Libya

Abstract:

The state of the intermolecular hydrogen bond of the PVPH hydroxyl group and the ether oxygen of PEO was determined; it was as we can see from the results of the calculations for the two polymers PVPH and PVPH-PEO. The results of stability, absorbance, and polar moment were [E-DFT = -771.801858 Hartree – Dipole Moment = 4.377541 Debye – Uv-vis Absorbance = 835.68 nm, E(TD-HF/TD-DFT) = -616.000585 Hartree – Dipole Moment = 6.341427 Debye – Uv-vis Absorbance = 740.64 nm respectively] that the polar moment of PVPH-PEO is higher than that of PVPH, thus PVPH-PEO is more cohesive and highly flexible, but in the case of the first polymer it has a high internal energy, which gives it a high toughness that tends to break due to the decrease in the polar moment, which is the main reason that will facilitate its bonds to be broken easily, and with this, we qualify PVPH-PEO as a case Better in its specifications than PVPH.

Keywords: PVPH, PVPH-PEO, E-DFT, Dipole Moment and Uv-vis Absorbance.

Introduction:

Physical elasticity resulting from the value of the dipole moment between hydrogen atoms is the term used to describe the located changes in

residences of polymer materials as a stability function, at a temperature under the glass transition^[1]. For amorphous polymers, a quench from above Tg into the glassy country introduces a non-equilibrium structure which, on annealing at constant temperature will method with time to an equilibrium country at that temperature. Physical getting old may be detected via the time evolution of thermodynamic properties along with the unique extent or enthalpy, in addition to the mechanical, dielectric, or other bodily homes. The time dependence of material residences could have a vast impact on the use and top-rated application of polymers and requires a better knowledge of this time-established behavior. It's far crucial so that you can are expecting lengthy-time period homes from quick-term checks. Bodily getting old of amorphous polymer blends has been extensively pronounced inside the literature the usage of techniques together with enthalpy relaxation, quantity rest, and strain relaxation [2-13].

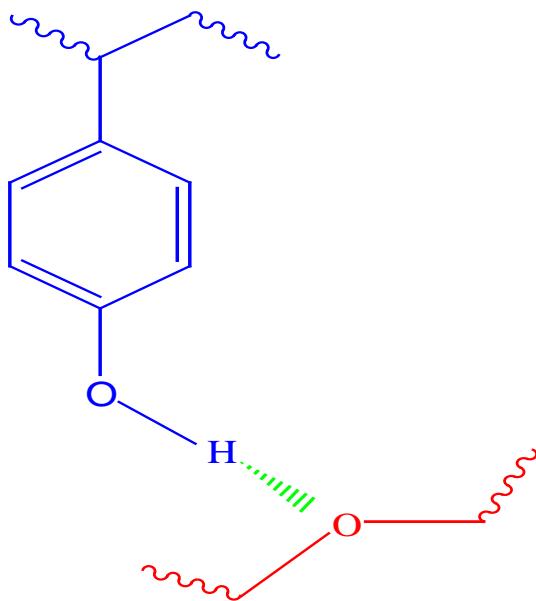


Figure 1: PVPH/PEO

Experimental Methods

PEO is one of the Low molecular mass polymers of ethylene oxide is a transparent, essentially colorless liquid, and becomes partially crystalline solids at a molecular mass of ca. 800. As the molecular mass increases, they change from soft waxy solids to hard waxes.

At high molecular mass, they are rigid thermoplastics. Polyoxyethylenes of less than ca. 20 000 number-average molecular mass are usually referred to as poly(ethylene glycols). The crystalline polymer is spherulitic with four molecular chains, and has a fiber identity period of seven repeat units in two helical turns. The molecules are in an array of dihedral symmetry with twofold axes. One axis bisects the carbon–carbon bond and the other passes through the ether oxygens.

The glass transition temperature of PEO is listed as \approx 52 C in Table 1; however, this is the value for a high molecular mass, partially crystalline polymer. This parameter is complicated by crystallinity in the molecular mass range 103 –105^[14], and abnormal values as high as 17 C is found for the polymer with M \approx 6000, which is known to have the highest crystallinity (ca. 95 %). Macrospherulites or spherulites that can be seen without magnification have been prepared^[15]. PEO is soluble in water, chlorinated hydrocarbons, aromatic hydrocarbons, methyl ethyl ketone, 2-ethoxyethyl acetate, butyl acetate, cyclohexanone, esters, dimethylformamide, and other solvents^[16].

PVP is commonly prepared by unfastened radical polymerization of four-vinylphenol or a included shape of four-vinylphenol.^[17] The included monomers can be organized from 4-hydroxybenzaldehyde, through vinylation of phenols, or acylation of polystyrene followed by way of

oxidation at room temperature. If poly(4-methoxystyrene) is produced, the methoxy institution can be cleaved through treating it with trimethylsilyliodide. There are numerous patents at the synthesis of 4-hydroxystyrene due its importance within the improvement of photoresist materials. RAFT polymerization may be used to prepare nicely-described PVP chains. This could be performed by mediating free radical polymerization of acetoxy styrene, which is then followed by way of deacetylation. Nitroxide mediated polymerization can also be used to prepare polyacetoxy styrene, which can converted in polyphenols by using UV irradiation. ATRP also can be used for the guidance of described block copolymers of PVP, by way of polymerization of four-acetoxy styrene that is ultimately selectively hydrolysed.^[17]

Computational Methods

Gaussian 06

It is an electronic structure package capable of predicting many properties of atoms, molecules, interactive systems, drawing compounds, calculating bond lengths and angles, and calculating the bonding energies of compounds using the method of functional density theory, semi-experimental, molecular mechanics, and hybrid methods.^[18]

Geometry Optimization

It is the process of finding the best arrangement in space for a group of atoms to give the best computational geometry by adjusting the lengths of the bonds and angles of the atoms that make up the compound depending on the electronic density of each atom, where the net atomic force on each atom according to computer modeling is close to zero point on the surface of the potential energy.

DFT

It is a very commonly used method that specializes in calculating the electronic density around all compounds to be calculated for their energy so that it makes a lot of computational mathematical estimates on some information very important in computational chemistry for the treatment of large molecules, and the DFT method is one of the quantum chemistry methods that rely on the Schrodinger equation.^[19]

B3LYP)

It is the most widespread method and is very popular in all chemical systems and is more accurate than other tools in determining the final form of the compound, the approximate structural formula, and the final energy, and it is also the most important in calculating the lengths of internal bonds and angles as a whole.

Technical details

User computer features: *hp* manufacturer Installed memory (RAM) 8 GB bit Windows 10 Processor Intel CORE i7.

How it works

Build with Gauss View: Instead of writing all the theoretical coordinates, the base of the set, etc. The calculation is determined by pointing and clicking to build the molecule, also using drop-down menus to determine the calculation type, theory level with basis. Gauss View generates a Gaussian input file, and Gauss can run without returning to Unix urgently. Gauss View enables us to use to read Gaussian, output final files, and visualize the results.^[20]

Results & Discussion

The computational results indicated the strength of the PEO/PVPh elasticity than PVPh and this was through the DFT result.

Table 1: Shows the values of electronic, transitional, rotational and vibrational energies of a polymer PEO.

	E (Thermal)	CV (Cal/Mol–Kelvin)	S (Cal/Mol–Kelvin)
Total	158.333	37.960	101.392
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	41.537
Rotational	0.889	2.981	32.308
Vibrational	156.555	31.999	27.547

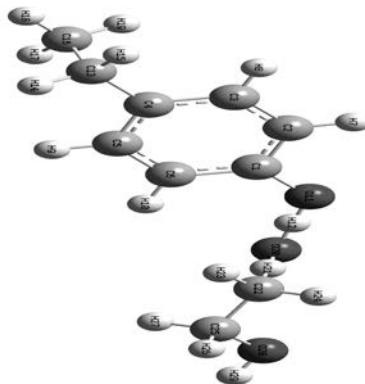


Figure 2: PVPH/PEO chemical structure.

$$E(TD-HF/TD-DFT) = -616.000585 \text{ Hartree}$$

$$\text{Dipole Moment} = 6.341427 \text{ Debye}$$

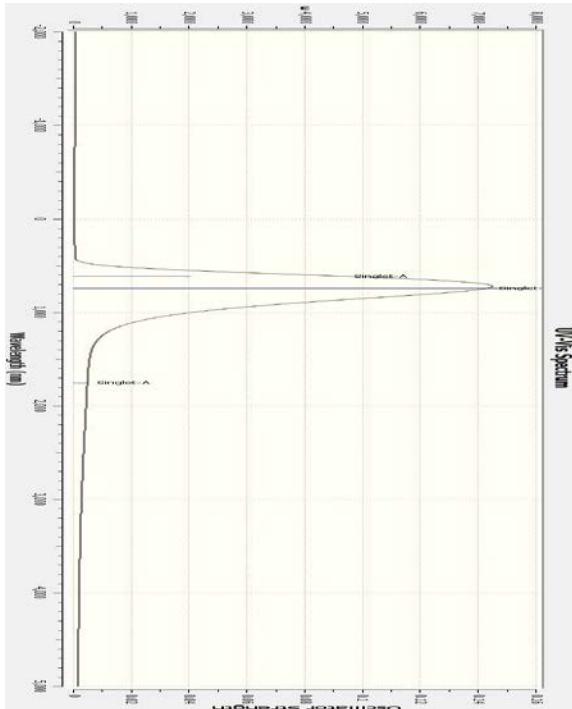


Figure 3: Uv-vis Absorbance curve of PVPH/PEO

Uv-vis Absorbance = 740.64 nm

From Figures 2 and 3 of the PEO polymer, can see that the effect of the dipole moment in its absorption of ultraviolet rays reaches a maximum of 740.64 nm, which is a high absorbance as a good computational specification for this polymer.

$$\mathbf{KE} = 6.089387755218 \times 10^2 \text{ Kcal/Mol}$$

Zero-point vibrational energy = 152.2543 Hartree

Zero-point Energies = -612.43433 Hartree

Thermal Energies = -612.42465 Hartree

Thermal Enthalpies = -612.42370 Hartree

Thermal Free Energies = -612.47188 Hartree

As we can see from the kinetic energy, it is high due to the elasticity and stability force of the compound, while the results of the other energies are energy at zero point, thermal energy, enthalpy, and gypsum-free energy are close to the value of = - 612.40000 Kcal/Mol.

Table 2: Shows the values of electronic, transitional, rotational and vibrational energies of a polymer PVPH.

	E (Thermal)	CV (Cal/Mol– Kelvin)	S (Cal/Mol– Kelvin)
Total	209.285	54.792	117.239
Electronic	0.000	0.000	0.000
Translational	0.889	2.981	42.379
Rotational	0.889	2.981	34.377
Vibrational	207.508	48.830	40.483

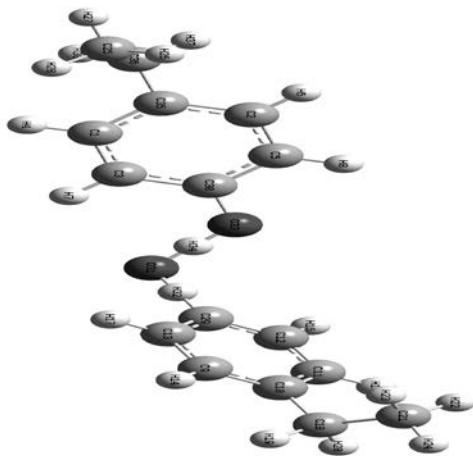


Figure 4: PVPH chemical structure.

$$E(TD-HF/TD-DFT) = -771.801858 \text{ Hartree}$$

$$\text{Dipole Moment} = 4.377541 \text{ Debye}$$

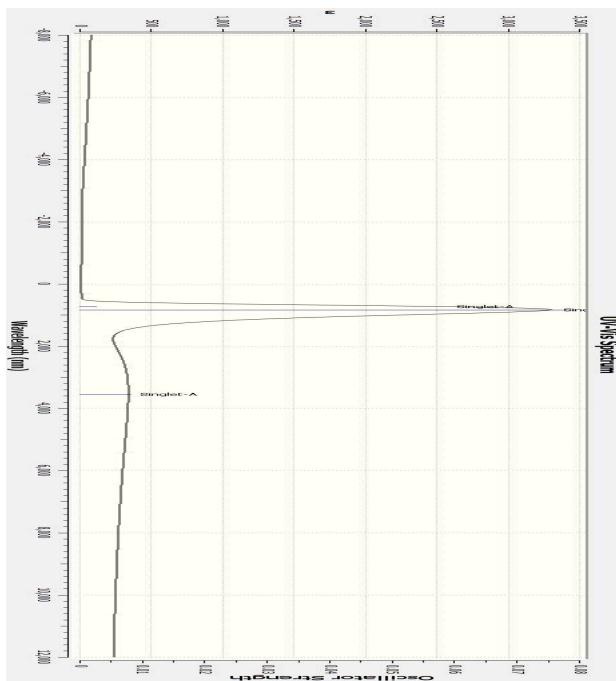


Figure 5: Uv-vis Absorbance curve of PVPH.

Uv-vis Absorbance = 835.68 nm

From Figures 4 and 5 of the PVPH polymer, we see the extension of the effect of the internal energy very low and with high stability, which gave it a high absorption of ultraviolet rays up to a maximum of 835.68 nm, but its polar moment remains low, which harms its high hardness and easy breaking of its hydrogen bonds for this PVPH polymer compared to the PVPH/PEO polymer.

KE= $7.625192157726 \times 10^2$ Kcal/Mol

Zero-point vibrational energy = 200.91926 (Kcal/Mol)

Zero-point Energies= -767.349583 Hartree

Thermal Energies= -767.336250 Hartree

Thermal Enthalpies= -767.335306 Hartree

As we can see from the kinetic energy, it is high due to the internal energy with high stability of the compound, while the results of the other energies are energy at zero point, thermal energy, enthalpy, and gypsum free energy are close at the value of = –767.30000 Hartree.

CONCLUSION

We conclude from the calculations of the PVPH–PEO, PVPH polymers that the stability, absorbency, and dipole moment of the first polymer PVPH–PEO are higher than that of the second polymer PVPH, thus the first polymer is more cohesive also it is internal energy is higher than the second polymer, which gives it the characteristic of flexibility for the bond, also increased the hydrogenation associated with it increases of PEO in the polymer, but in the case of the second polymer, it has less internal energy, also more rigidity, stability, but it has a less dipole moment, instead, its hardness will qualify it to easily break its bonds, so we qualify the first polymer PVPH–PEO as a better condition in its specifications than The second polymer PVPH.

ACKNOWLEDMENT

I would like to thank the all library media experts for their participation who supported my study in this manner and helped me to get consequences of higher quality.

REFERENCES

1. Hutchinson, J. M. Prog. Polym. Sci 1995, 20, 703, Determination of the Glass Transition by DSC: A Comparison of Conventional and Dynamic Techniques.
2. Cowie, J. M. G, Ferguson, R. Macromolecules 1989, 22, 2312, Physical aging studies in polymer blends. 2. Enthalpy relaxation as a

function of aging temperature in a poly (vinyl methyl ether)/polystyrene blend.

3. Cameron, N. R., Cowie, J. M. G., Ferguson, R., McEwan, I. *Polymer*. 2001, 42, 6991, Enthalpy relaxation of styrene–maleic anhydride (SMA) copolymers. 2. Blends with poly (methyl methacrylate)(PMMA).
4. Oudhuis, A. A. C. M., ten Brinke, G. *Macromolecules* 1992, 25, 698, Enthalpy relaxations and concentration fluctuations in blends of polystyrene and poly (oxy-2, 6-dimethyl-1, 4-phenylene).
5. Bosma, M., ten Brinke, G., Ellis, T.S. *Macromolecules* 1988, 21, 1465, Polymer–polymer miscibility and enthalpy relaxations.
6. Ho, T. and Mijović, J. *Macromolecules* 1990, 23, 1411, Physical aging in poly (methyl methacrylate)/poly (styrene–co–acrylonitrile) blends. 3. Simulation of enthalpy relaxation using the Moynihan model.
7. Ellis, T. S. *Macromolecules* 1990, 23, 1494, Aromatic polyamide blends: enthalpy relaxation and its correlation with phase phenomena.
8. Robertson, C. G., Wilkes, G.L. *Polymer* 2000, 41, 9191, Physical aging behavior of miscible blends containing atactic polystyrene and poly (2, 6-dimethyl-1, 4-phenylene oxide).
9. Landry, C. J. T., Lum, K. K., O'Reilly, J. M. *Polymer* 2001, 42, 5781, Physical aging of blends of cellulose acetate polymers with dyes and plasticizers.
10. Robertson, C. G., Wilkes, G. L. *Polymer* 2001, 42, 1581, Physical aging behavior of miscible blends of poly (methyl methacrylate) and poly (styrene–co–acrylonitrile).
11. Cowie, J. M. G., Harris, S., Gómez, Ribelles, J. L., Meseguer, J. M., Romero, F., Torregrosa, C. *Macromolecules* 1999, 32, 4430, Glass transition and structural relaxation in polystyrene/poly (2, 6-dimethyl-1, 4-phenylene oxide) miscible blends.

-
12. Ho, T., Mijović, J., Lee, C., Polymer 1991, 32, 619, Effect of structure on stress relaxation of polymer blends in glassy state.
 13. Cowie, J. M. G., McEwen, I. J., Matsuda, S. J. Chem. Soc. Faraday Trans. 1998, 94, 3481, Stress relaxation and physical ageing in a blend of poly (styrene–co–acrylonitrile) and poly (methyl methacrylate).
 14. F. E. Bailey, Jr., J. V. Koleske: Poly(ethylene oxide), Academic Press, New York 1976.
 15. F. E. Bailey, Jr., J. V. Koleske, J. Chem. Ed. 55 (1973) 761.
 16. F. E. Bailey, Jr., J. V. Koleske: Alkylene Oxides and Their Polymers, Marcel Dekker, New York 1991.
 17. Barclay, G. G; Hawker, C. J; Ito, H; Orellana, A; Malenfant, P. R. L; Sinta, R. F (1998). "The "Living" Free Radical Synthesis of Poly(4-hydroxystyrene): Physical Properties and Dissolution Behavior". Macromolecules. 31 (4): 1024
 18. Tsuji M (2015) Homology Modeling Professional for HyperChem, revision G1, Institute of Molecular Function, Saitama, Japan.
 19. Tsuji M (2015) Docking Study with HyperChem, revision G1, Institute of Molecular Function, Saitama, Japan.
 20. HyperChem Professional, version 8.0.10, Hypercube, Inc., Gainesville, Florida, USA.

دراسة دالة الكثافة الوظيفية لمزيج من أكسيد البولي إيثيلين / (PEO) بولي فينيل فينول (PVPH)

الملخص:

تم تحديد حالة رابطة الهيدروجين بين جزيئات مجموعة هيدروكسيل PVPH والأكسجين الأثير لـ PEO ، حيث تمكنا من رؤية نتائج الحسابات للبوليمرات PVPH-PEO و PVPH. حيث كانت نتائج الاستقرار والامتصاص والعزم القطبى [- E-DFT = -771.801858 Hartree - Dipole Moment = 4.377541 Debye - Uv-vis Absorbance = 835.68 nm 6.341427 (TD-HF / TD-DFT) = -616.000585 Hartree - Dipole Debye - امتصاص الأشعة فوق البنفسجية = 740.64 نانومتر على التوالي] و تم تحديد أن العزم القطبى لـ PVPH-PEO أعلى من تلك الخاصة بـ PVPH ، وبالتالي فإن PVPH-PEO هو أكثر تمسكاً ومرنة للغاية، ولكن في حالة البوليمر الثاني PVPH لديه طاقة داخلية عالية ، مما يمنحه صلابة عالية تميل إلى الانكسار بسبب انخفاض العزم القطبى ، وهو السبب الرئيسي الذي يسهل كسر روابطه بسهولة ، وبهذا نعتبر PVPH-PEO حالة أفضل في مواصفاتها من PVPH.

الكلمات المفتاحية: دالة الكثافة الوظيفية، أكسيد البولي إيثيلي / (PVPH -PEO) ، بولي فينيل فينول (PVPH) ، امتصاصية الأشعة فوق بنفسجية، العزم القطبى.