

دراسة دالة الكثافة الوظيفية لتأثير الطاقة الداخلية و العزم القطبي في امتصاصية العناصر الثقيلة باستخدام مركبات هيدروكسليد أكسيد الحديد و أكسيد الحديدوز

ابوبكر مفتاح احسونه^{1*}، محمد مصباح عبدالرحيم²
2.1. قسم الكيمياء- كلية العلوم- جامعة سبها

Correspondent author: bou.hosouna@sebhou.edu.ly

المخلص:

تلخصت هذه الدراسة بأن مركب هيدروكسليد اكسيد الحديد $Fe_3O_2(OH)_3$ قد تحصل علي نتائج لطاقة أكثر استقرارية منفرد و كانت = 1962.811766411- هارترى، و في حالة الدمج مع العناصر الثقيلة كانت أفضل استقرارية من حالة أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 و هذه الخاصية لهذه النتائج بالذات تعطي الأفضلية في إستخدامه في التفاعل و سحب العناصر الثقيلة من أي بيئة ملوثة بها، أيضاً كانت نتائج العزم القطبي = 3.505542 ديباي و امتصاصية الأشعة فوق بنفسجية = 7289.97 نانومتر و هي أفضل من حالة مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 منفردة و مدمجة مع العناصر الثقيلة في هذه الدراسة.

المقدمة:

سنتطرق في هذه الدراسة البحثية إلي دراسة الطاقة الداخلية لهذه العناصر الثقيلة كمومياً باستخدام البرامج الحوسبية القاوسيان GS 06 و الهايبرك Hyp 08، بحيث تتمثل هذه الدراسة بملاحظة الإستقرارية الداخلية للعناصر و أيهم الذي يصعب إزالته من البيئة المراد إزالته منها، و أيضاً سنتطرق إلي دراسة إمكانية استخدام مركبات أكسيد الحديدوز و هيدروكسليد أكسيد الحديد و التي تم تحضيرها بطريقة السيلكا جل و الفرق بينهم في قابلية و قوة امتزاز و التفاعل و سحب العناصر الثقيلة من أي بيئة ملوثة بها، و يتم ذلك حوسبياً في إمكانية تداخلها و تفاعلها مع هذه العناصر .

مجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

العناصر الثقيلة : يطلق مصطلح المعدن الثقيل يشير إلى أي عنصر كيميائي معدني لديها كثافة عالية نسبيا وغير سامة أو سامة عند تركيزات منخفضة. و من أمثلة المعادن الثقيلة تتضمن الزئبق (Hg) الكادميوم (Cd)، الزرنيخ (As)، الكروم (Cr)، الثاليوم (TI)، الباريوم (Ba)، المنجنيز (Mn)، النيكل (Ni)، النحاس (Cu) القصدير (Sn)، و الرصاص (Pb). المعادن الثقيلة أغلبها عناصر طبيعية من قشرة الأرض. وبعض هذه المعادن (مثل النحاس، السيليونيوم، الزنك) ضرورية للحفاظ على عملية التمثيل الغذائي للجسم البشري. ومع ذلك، في تركيزات أعلى فإنها يمكن أن تؤدي إلى التسمم. يمكن أن يكون التسمم بالمعادن الثقيلة من تلوث مياه الشرب (أنابيب الرصاص على سبيل المثال)، وارتفاع تركيزات الهواء المحيط بالقرب من مصادر الانبعاثات، أو المدخول عبر السلسلة الغذائية.

المعادن الثقيلة خطيرة لأنها تميل إلي التراكم الإحيائي، و التراكم يعني زيادة في تركيز المادة الكيميائية في الكائن الحي البيولوجي مع مرور الوقت، مقارنة مع تركيز المادة الكيميائية في البيئة. مركبات تتراكم في الكائنات الحية أي وقت يتم تناولها وتخزينها بشكل أسرع من أنها يتم تقسيم لأسفل (يستقلب) أو يطرح.

المعادن الثقيلة يمكن أن تدخل إمدادات المياه عن النفايات الصناعية والاستهلاكية، أو حتى من المطر الحمضي التربة والإفراج عن المعادن الثقيلة في مجاري المياه والبحيرات والأنهار، والمياه الجوفية.

المخاطر البيئية والصحية. من أشهر العناصر الثقيلة التي لها تأثيرات صحية الأنتيمون (1-4) التعرض لمستويات عالية من الأنتيمون لفترات قصيرة من الوقت يسبب الغثيان، والتقيؤ، والإسهال. هناك القليل من المعلومات حول آثار التعرض على المدى الطويل الأنتيمون، لكن يشبه ان تكون مادة مسرطنة. معظم مركبات الأنتيمون لا يتراكم في الحياة المائية، كما يؤدي التعرض الطويل للكادميوم الى الفشل الكلوي و إلى مرض الانسداد الرئوي والذي تم ربطه بالإصابة بسرطان الرئة، و قد يؤدي أيضا الى إحداث عيوب في العظام (لين العظام و هشاشتها) في الإنسان والحيوان. و بالإضافة إلى ذلك، يمكن ربط المعدن بزيادة ضغط الدم و تأثيره علي عضلة القلب لدى الحيوانات، على الرغم من البيانات التي حصلت لا تدعم هذه النتائج، أيضاً عنصر الكروم يمكن أن يؤدي التعرض المنخفض لتتهيج الجلد وتقرح على المدى الطويل كما يمكن أن يسبب الفشل الكلى و تلف الكبد والضرر في الدورة الدموية والأنسجة العصبية. غالبا ما ما تتراكم الكروم في الحياة المائية، إضافة إلى خطر تناول الأسماك التي ربما تكون قد تعرضت لمستويات عالية منه . عنصر النحاس (5 - 6) يمكن أن تسبب الجرعات العالية منه فقر الدم والكبد والكلية وتهيج المعدة والأمعاء. الناس مع مرض ويلسون معرضون بشكل أكبر لخطر التأثيرات الصحية من التعرض المفرط للنحاس.

النحاس يوجد عادة في مياه الشرب من مواسير نحاس، وكذلك من المواد المضافة المصممة للسيطرة على نمو الطحالب، و أكثر العناصر الثقيلة خطورة هو عنصر الرصاص (7 - 11) الذي يؤدي التعرض له لمجموعة واسعة من التأثيرات البيولوجية وفقا لمستوى ومدة التعرض. تحدث تأثيرات مختلفة على طائفة واسعة من الجرعات، و يكون تأثيره علي الأجنة و الرضيع أكثر من تأثيره علي الكبار. و المستويات العالية من تعرض للرصاص تؤدي إلى آثار البيوكيميائية السامة في الإنسان والتي بدورها تسبب مشاكل في تركيب خضاب الدم و الكلى والجهاز الهضمي والمفاصل والجهاز التناسلي والضرر الحاد أو المزمن على الجهاز العصبي.

من العناصر الثقيلة الأخرى ذات التأثيرات الجانبية الخطيرة علي حياة الإنسان و بقية الكائنات الحية هو عنصر الزئبق (7 - 12) مادة سامة التي لا يوجد لها وظيفة معروفة في علم وظائف الأعضاء والكيمياء الحيوية والإنسان أو لا يحدث بشكل طبيعي في الكائنات الحية. ويرتبط التسمم بالزئبق غير العضوي مع الهزات، والتغيرات النفسية التهاب اللثة و الإجهاد التلقائي والتشوهات الخلقية. أحادية مثيل الزئبق يسبب تلف في خلايا المخ والجهاز العصبي المركزي، في حين تعرض الجنين لها بعد الولادة يؤدي التعرض المفرط لعنصر النيكل إلى مشاكل صحية كثيرة و يمكن أن يسبب التعرض علي المدى الطويل لانخفاض وزن الجسم وتلف في القلب و الكبد وتهيج في الجلد. و من أكثر تأثيرات العناصر الثقيلة هو عنصر السيلينيوم (13) يمكن أن يسبب تلف الجهاز العصبي، والتعب، و التهيج.

السيلينيوم يتراكم في الأنسجة الحية مما تسبب نسبة عالية مما يسبب مشاكل أكبر في الصحة البشرية عبر سنوات طويلة من التعرض المفرط. هذه المشاكل الصحية تشمل خسارة الشعر و الأظافر و إضرار بالكلية وأنسجة الكبد، تلف أنسجة الدورة الدموية، والمزيد من الضرر الشديد للجهاز العصبي .

الحوسبة الكيميائية:

الكيمياء الحوسبية هي احد فروع الكيمياء النظرية التي تهدف إلى ابتكار تقريبات رياضية فعالة لحل مشاكل الكيمياء بأسرع وقت وأقل تكلفة ووضع خوارزميات وبرامج حوسبية تقوم بحساب خصائص الجزيئات مثل الطاقة الكلية والعزم ثنائي القطب والترددات الاهتزازية , وغيرها من الخصائص والمقاطع العرضية لتصادم الجزيئات مع جزيئات مساقط درية وتحت درية مختلفة. (14-15) من أهمية الحوسبة الكيميائية تقليص كمية المواد العملية المستخدمة داخل المعامل , تقادي الكثير من العقبات العلمية و مشكلات البحوث التطبيقية ,

أيضا تحديد طرق البحث العلمي بالاعتماد على موضوع البحث وانجاز البحث العلمي في وقت زمني جيد لينسخ الفرصة في التعمق أكثر في البحث واستكشاف نتائج علمية, تستخدم الحوسبة الكيميائية في دراسة الأحماض وتأثيراتها الحيوية , كما أنها تستطيع قياس طاقات الترابط لمركبات الأحماض وإخراج أعلى وأقل طاقة ترابط. (17-16)

طريقة العمل:

تحضير اكسيد الحديدك هيدروكسليد أكسيد الحديدك : تم تحضير 10 جم من أكسيد الحديدك الناتو بطريقة الصول-جل و ذلك باستخدام كبريتات الحديدوز المائية كماده بادئه و ذلك بإذابة 9.982 جم من كبريتات الحديدوز في اقل كميته من الماء المقطر منزوع الايونات, و اضافة 29.214 جم من حمض أسترليك و قمنا بإضافة 10.170 جم من الاديئا كعوامل تعقيد, و تم اضافة المخلوط إلى نترات الزنك بالنسبة المولية (1:1:1.5) (كبريتات الحديدوز - حمض أسترليك - الاديئا) و قمنا اضافة الامونيا لضبط الأس عند الرقم 6 بعد ذلك تم تبخير المحلول باستخدام مسخن كهربائي مغناطيسي هزاز مع تحريك المحلول باستمرار بواسطة مقلب مغناطيسي لتوزيع الحرارة, وباستمرار التسخين والتحرك يتحول المحلول إلى جل كثيف اسود اللون و بعد دال إزالة المحرك المغناطيسي يترك الجل على المسخن حتى الجفاف ويتحول إلى رماد, وذلك عند 350 درجة و من ثمة قمنا بطحن المكونات الصلب المتحصل عليه و حرقها في فرن الحرق عند درجة حرارة 600 لمدة 3 ساعات لتخلص من المركبات العضوية المتبقية والحصول على طور نقي من أكسيد الحديد وبعد ذلك تم طحنه في الهاون باستخدام الأسيون للحصول على قوام ناعم . و قمنا بتقسيم الكمية المتحصل عليها إلى قسمين:

تم تحضير عينة هيدروكسلايد أكسيد الحديدك (عملية الامتزاز بخار الماء على سطح الأكسيد) قسم الراسب إلى قسمين ووضعها في إطباق زجاجية بعد انتهاء عملية حرق الراسب عند درجة حرارة 600 C^0 (طبق بتري) داخل مجفف يحتوي على ماء معاد التقطير, وتركت العينة الأولى لمدة شهر ونصف بينما تركت العينة الثانية بداخل الفرن لمدة شهرين ليتم تكوين مجموعة و وضع المجفف بمحتوياته بفرن درجة حرارة 80 درجة مئوية . و تم إجراء قياسات على سطح أكسيد الحديدك (O-H) للعينتين للتأكد من تكون مجموعات.

مجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

حساب ميكانيكا الكم :

ميكانيكا الكم هي مجموعة من النظريات الفيزيائية ظهرت في القرن العشرين، وذلك لتفسير الظواهر على مستوى وقد دمجت بين الخاصية الجسمية والخاصية الموجية ليظهر مصطلح ازدواجية الموجة — الجسيم، وبهذا تصبح ميكانيكا الكم مسؤولة عن التفسير الفيزيائي على المستوى الذري كما أنها أيضاً تطبق على الميكانيكا الكلاسيكية ولكن لا تظهر تأثيرها على هذا المستوى، لذلك ميكانيكا الكم هي تعميم للفيزياء الكلاسيكية لإمكانية تطبيقها على المستويين الذري والعادي . (18)

ظهرت أهمية الحوسبة الكمومية من عجز الفيزياء الكلاسيكية عن تفسير الظواهر مثل ظاهرة الجسم الأسود وظاهرة التأثير الكهروضوئي وتأثير كيمبتون وغيرها من الظواهر ثم بناء الهيكل الهندسية المجمعات على أساس الهيكل التي ثم إنشائها من المعلمات البلورية التي قدمتها

(19). Cambridge structural Hypercube

ثم استخدام برامج تعتمد على معادلات ميكانيكا الكم وتقريبها في هذه الدراسة والبرامج هي HyperChem Professional و Gaussian03 .

البرامج التطبيقية :

HyperChem Professional

هو برنامج حوسبي يقوم بتحسين المركبات العضوية وإمكانية وجودها في الفراغ الهندسي ، وله القدرة على دمج المركبات مع بعضها ومع الماء أيضاً وحساب الطاقة الدورانية واهتزاز الروابط ورؤية كيفية تحريكها .

Gaussian06

حزمة بنية إلكترونية قادرة على التنبؤ بالكثير من خصائص الذرات والجزيئات والأنظمة التفاعلية ورسم المركبات وإمكانية حساب أطوال الروابط والزوايا وحساب طاقات الترابط للمركبات مثلاً الاستفادة من أساسها ، نظرية الكثافة الوظيفية ، شبه التجريبية ، الميكانيكا الجزيئية ، والطرق الهجينة.(20)

الأساليب البرمجية :

Geometry Optimization

مجال الكيمياء الحاسوبية ، يكون التقليل إلى أدنى حد من الطاقة هو عملية العثور على ترتيب في الفضاء لمجموعة من الذرات ، حيث يكون صافي القوة بين الذرية على كل ذرة ، وفقاً لبعض النماذج الحسابية للارتباط الكيميائي ، قريباً من الصفر ، الموقف على سطح الطاقة المحتملة هو نقطة ثابتة.

DFT و هي طريقة جداً شائعة الاستخدام و تخصص في حساب الكثافة الإلكترونية حول جميع المركبات المراد حساب طاقتها، بحيث تجعل الكثير من التقديرات والحصول على بعض المعلومات من البيانات إنها مهمة جداً في الكيمياء الحاسوبية لعلاج الجزيئات الكبيرة حيث تكون طريقة Hartree-Fock الكاملة دون التقريب مكلفة للغاية. وهي إحدى أساليب الكيمياء الكمومية التي تعتمد في أساسها على معادلة شرودنجر . (B3LYP)

هي أكثر الطرق انتشاراً وتحظى بشعبية كبيرة في جميع الأنظمة الكيميائية وهي أكثر دقة من بقية الأدوات الأخرى في تحديد الصورة النهائية للمركب و الصيغة البنائية التقريبية و الطاقة النهائية و هي الأهم أيضاً أطوال الروابط الداخلية و الزوايا ككل. التفاصيل التقنية :

Gaussian 09: x86-Win32-G03RevB.04 —17Aug-2021

nprocshared=4%

.Will use up to 4 processors via shared memory

mem=1024MB%

chk=E:\ Fe3O2(OH)3 _As.chk%

Default route: MaxDisk=2000MB

b3lyp/sdd nosymm scf=qc 15eom.=connectivity #

طريقة العمل:

بناء مع Gauss View :

- بدلاً من كتابة جميع الإحداثيات النظرية و أساس المجموعة، وما إلى ذلك يمكننا استخدام Gauss View .
- يتم تحديد الحساب عن طريق الإشارة والنقر لبناء الجزيء، واستخدام القوائم المنسدلة لتحديد نوع الحساب ومستوى النظرية والأساس.
- Gauss View يولد ملف الإدخال Gaussian ، ويمكن تشغيل الجاوس دون العودة إلى يونيكس مستعجل.
- Gauss View يمكننا من أن نستخدم لقراءة Gaussian وإخراج الملفات النهائية وتصور النتائج.

النتائج و المناقشة:

حيود الأشعة السينية

يمكن باستخدام الأشعة السينية التعرف على تركيب بلورات أكسيد الحديد Fe_2O_3 و كذلك التأكد من البنية البلورية له. حيث تم استخدام جهاز مطياف حيود الأشعة السينية (XRD). في نطاق 2θ من 0 - 70 درجة للتعرف على التركيب البلوري لمركب أكسيد الحديد. كما في الشكل (2) الذي يبين التحليل لجسيمات Fe_2O_3 النانوية المحضرة، حيث تشير القمم الحادة والقوية إلى أن الجسيمات النانوية ذات طبيعة بلورية عالية. أنماط حيود الأشعة السينية (XRD) للجسيمات النانوية Fe_2O_3 تؤكد الطور السداسي الزوايا (Hexagonal) للجسيمات النانوية Fe_2O_3 والذي يتوافق جيداً مع بطاقة "JCPDS" رقم 0550-86

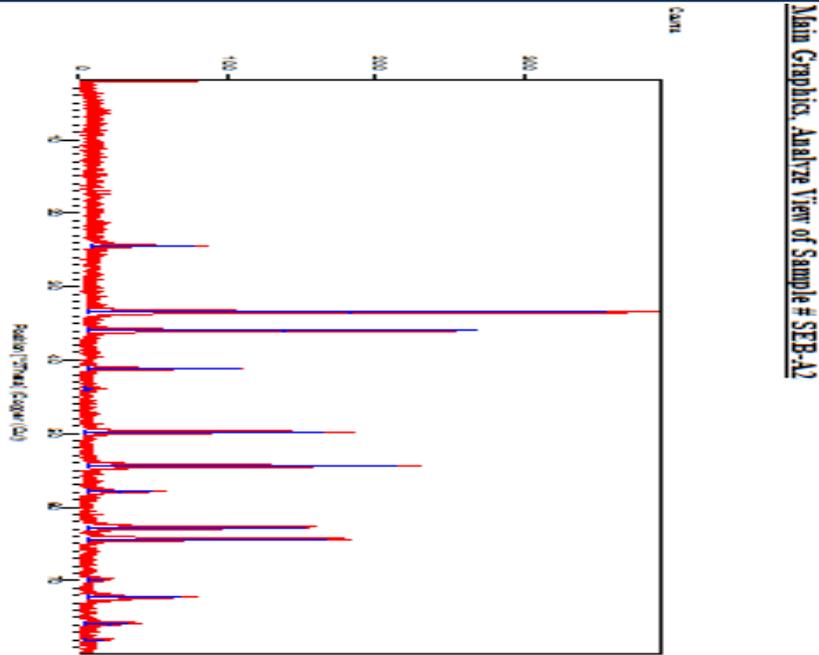
تتوافق العديد من القمم المحددة جيداً مع مستويات مختلفة من Fe_2O_3 مثل (200) و (201) و (211) و (102) و (310) و (212)، والذي يرتبط جميعاً مع طور السداسي الزوايا (Hexagonal) من Fe_2O_3 -NPs ويتوافق جيداً مع بطاقة "JCPDS" رقم 0178-26. تم تأكيد النتائج المرصودة أيضاً مع الأدبيات المنشورة [48, 47]. يُظهر نموذج XRD لجسيمات Fe_2O_3 النانوية القمم عند (100) و (002) و (101) و (102) و (110) و (103) و (112) و (004) و (202) لمعاملات ميلر. تم تقدير متوسط الحجم الحبيبي لجسيمات Fe_2O_3 النانوية المطلوبة من معادلة Debye-Sherrer الآتية:

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos(\theta)}$$

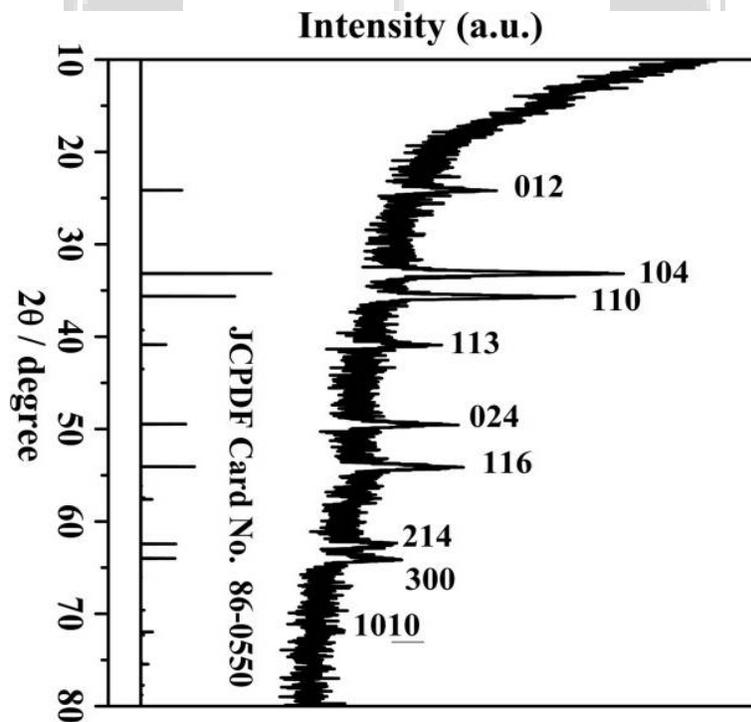
حيث k ثابت = 0.89، λ هو الطول الموجي للأشعة السينية، B هو (FWHM)، و θ هي زاوية براج. كان متوسط الحجم الحبيبي للجسيمات النانوية Fe_2O_3 المحضرة حوالي 62.87 نانومتر للعينة (أ) و حوالي 72.76 نانومتر للعينة (ب) من معادلة ديبي شيرر.

لعينة أكسيد حديدك محضرة بطريقة السول جل XRD الجدول 1: توضح نتائج تحليل

Pos. [$^{\circ}2\theta$.]	Height [cts]	FWHM Left [$^{\circ}2\theta$.]	d-spacing [Å]	Rel. Int. [%]
24.481930	70.653910	0.196800	3.63609	20.21
33.475480	349.568200	0.137760	2.67695	100.00
35.964420	263.097200	0.098400	2.49719	75.26
41.200860	104.590500	0.098400	2.19110	29.92
43.844770	5.950517	0.472320	2.06492	1.70
49.747570	160.039200	0.236160	1.83286	45.78
54.391610	210.124600	0.118080	1.68683	60.11
57.840240	45.037840	0.196800	1.59420	12.88
62.730840	149.106400	0.236160	1.48116	42.65
64.308830	163.666200	0.275520	1.44858	46.82
69.854010	13.718960	0.236160	1.34654	3.92
72.212970	64.226850	0.157440	1.30825	18.37
75.737050	31.233650	0.472320	1.25590	8.93
78.013250	12.574410	0.236160	1.22486	3.60



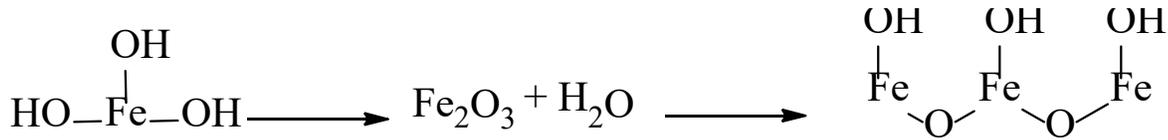
لأكسيد الحديد النانوي المحضرة بطريقة السول جل XRD الشكل 1: نمط



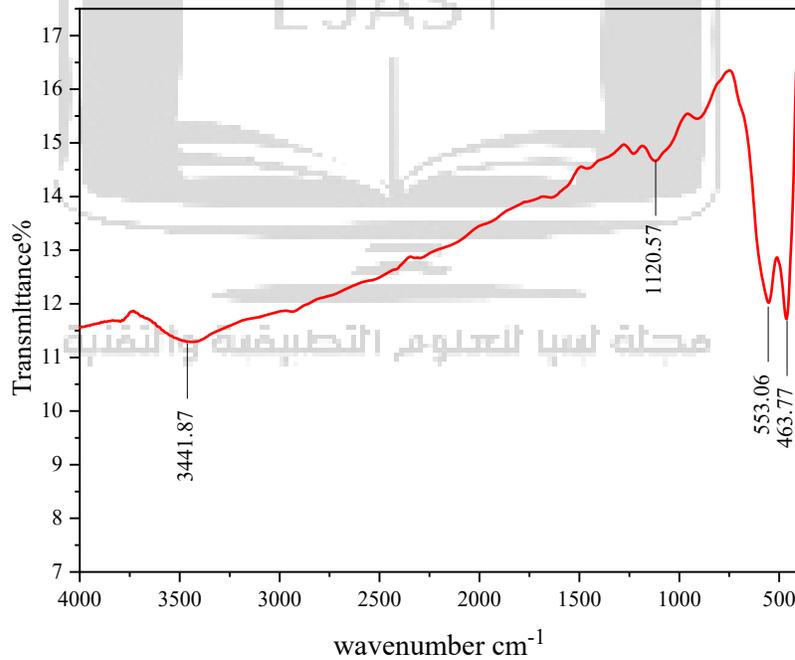
الشكل 2: بطاقة مرجعية لنمط XRD لأكسيد الحديد النانوي "JCPDS" رقم 0178-26

طيف الأشعة تحت الحمراء

تم إجراء تحليل طيف الأشعة تحت الحمراء للعينات موضع الدراسة قبل التعرض وبعد التعرض لبخار الماء، بإضافة جزء من العينة (1%) إلى بروميد البوتاسيوم ، ثم طحنها، وعمل قرص تحت ضغط 8 طن ، وذلك للتأكد من إنشاء مجموعات الهيدروكسيل علي سطح عينة أكسيد الحديد وتحويلها إلي هيدروكسيلاتيد الحديد , ويمكن اقتراح الميكانيكية الآتية الامتزاز بخار الماء علي سطح أكسيد الحديد.

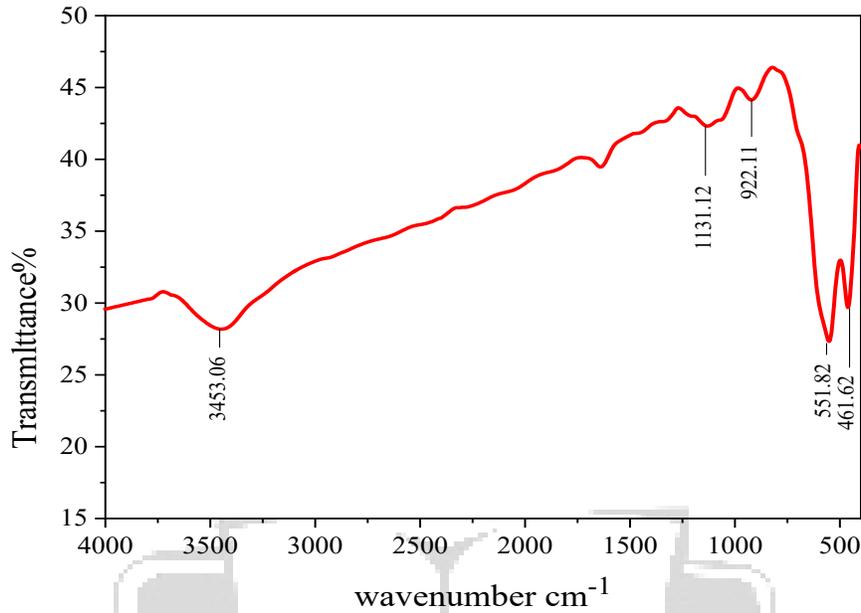


من خلال هذا الاقتراح يتضح وجود مجموعات من هيدروكسيل علي سطح أكسيد الحديد. ولقد أكدت نتائج التحليل طيف الأشعة دون الحمراء وجود مجموعات من الهيدروكسيل الخاص بالماء .



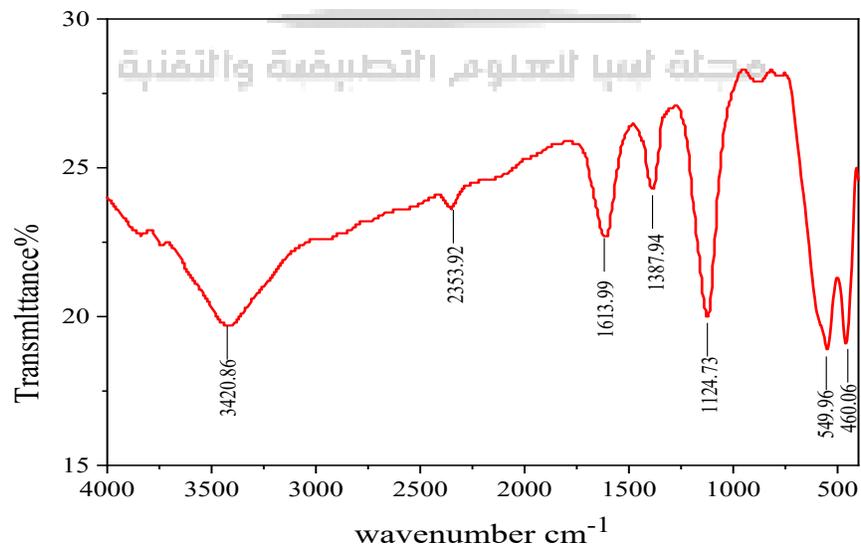
الشكل 3: طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديد.

يظهر الشكل (3) تحليل حزم امتصاصية عند عدد موجي 3441.87 cm-1 وهي ناتجة عن اهتزاز امتطاطي (O-H) و أخرى عند 1120.57cm-1 ناتجة من اهتزاز انكماشى (OH) δ نتيجة لوجود بعض جزيئات الماء في بروميد البوتاسيوم المستخدم وكذلك يظهر التحليل امتصاصان عند كل من 463.77cm-1 و 553.06cm-1 نتيجة لوجود Fe-O.



الشكل 4: طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديد المعروض لبخار الماء لمدة شهر ونصف .

يظهر الشكل (4) العينة بعد تعرض لبخار الماء مدة شهر ونصف حزماتان أساسيتان لمجموعة الهيدروكسيل (O-H) عند امتصاص (3453Cm-1) و (1131.129Cm-1) نتيجة لوجود مجموعات من الهيدروكسيل (O-H) الامتطاطية علي سطح أكسيد الحديد المعروض لبخار الماء لمدة شهر ونصف وبعض المنحنيات الإضافية عند عدد موجي (551.82) cm-1 و (461.61Cm-1) للتردد الاهتزازي لرابطة Fe-O.

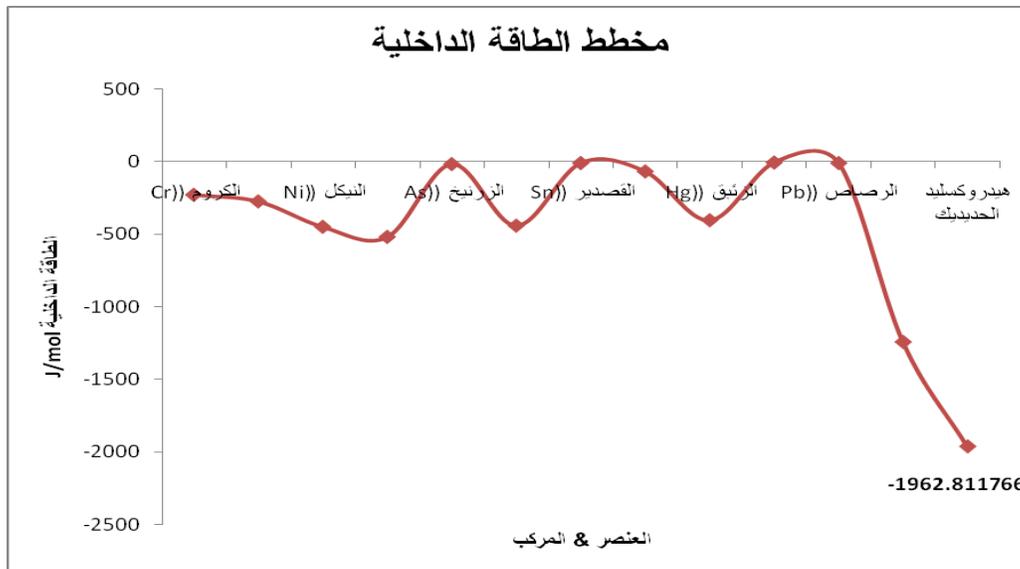


الشكل 5: نتائج تحليل طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديد المعروض لبخار الماء لمدة شهرين (الهيدروكسيل ألتد الحديد).

يظهر الشكل (5) وجد حزمتان امتصاص لبخر الماء ناتجة عن امتصاص انعطافي عند العدد الموجي 3420.86 cm^{-1} و 1613.99 cm^{-1} وكذلك حزمتي امتصاص عند 549.96 cm^{-1} و 460.06 cm^{-1} للتردد الاهتزازي لرابطة Fe-O . من خلال هذا الشكل يتضح لنا إن زيادة تعرض اكسيد الحديدك لبخار الماء لمدة شهرين تزيد من اتساع وشدة الامتصاص عند التردد الاهتزازي 3420.86 cm^{-1} و 1613.99 cm^{-1} نتيجة لوجود مجموعات من الهيدروكسيل (O-H) الخاصة بجزيئات الماء , وهذا يؤكد إن مجموع مجموعات الهيدروكسيل تزداد بزيادة مدة تعرض أكسيد الحديدك لبخار الماء . ونتيجة لذلك تزداد كفاءة الامتصاص نتيجة لزيادة مجموعات الهيدروكسيل علي سطح اكسيد الحديدك المعرض لبخار الماء.

الجدول 2: يوضح الطاقة الداخلية منفردة لكل عنصر من العناصر الثقيلة بالإضافة لمركبي اكسيد الحديدوز و هيدروكسيد اكسيد الحديدك.

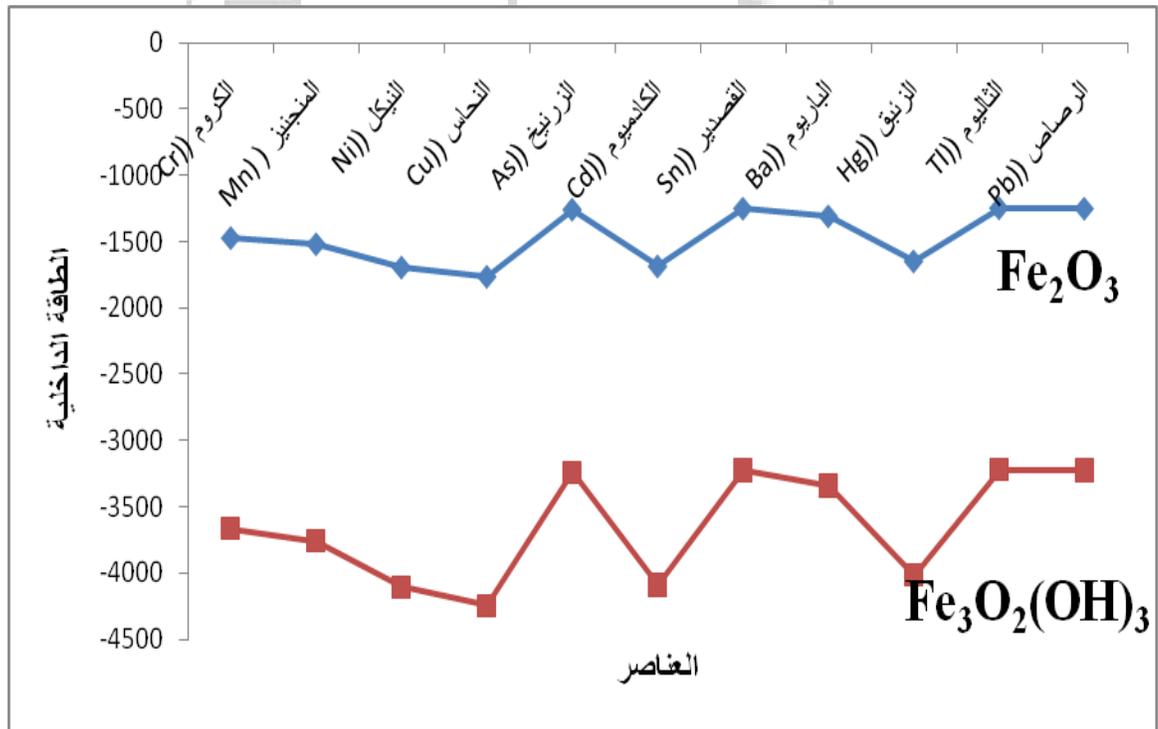
الطاقة الداخلية J/mol	العنصر & المركب	رتب
-227.8009832	الكروم (Cr)	.1
-273.4837153	المنجنيز (Mn)	.2
-448.5279547	النيكل (Ni)	.3
-518.0674033	النحاس (Cu)	.4
-15.98569377	الزرنيخ (As)	.5
-440.5759967	الكاديوم (Cd)	.6
-8.659914415	القصدير (Sn)	.7
-66.7965381	الباريوم (Ba)	.8
-403.2097471	الزئبق (Hg)	.9
-5.150887714	الثاليوم (Tl)	.10
-8.831232504	الرصاص (Pb)	.11
-1242.660856722	أكسيد الحديدوز Fe_2O_3	.12
-1962.811766411	هيدروكسيد اكسيد الحديدك $\text{Fe}_3\text{O}_2(\text{OH})_3$.13



الشكل 6: نتائج الطاقة الداخلية منفردة لهيدروكسيد اكسيد الحديدك و اكسيد الحديدوز و بقية العناصر الثقيلة.

الجدول 3: يوضح الطاقة الداخلية لكل عنصر من العناصر الثقيلة ناتج عن إضافة لمركبي أكسيد الحديدوز و هيدروكسيد أكسيد الحديدك.

العنصر & المركب	Fe_2O_3 , J/mol	$Fe_3O_2(OH)_3$, J/mol	رت
الكروم (Cr)	-1471.308474745	-2194.559858099	.1
المنجنيز (Mn)	-1517.275548199	-2240.99275725	.2
النيكل (Ni)	-1691.773867109	-2415.168445769	.3
النحاس (Cu)	-1761.429043265	-2485.018978831	.4
الزرنيخ (As)	-1259.468529492	-1983.136256791	.5
الكاديوم (Cd)	-1683.292973475	-2406.957510792	.6
القصدير (Sn)	-1252.043843082	-1975.380493231	.7
الباريوم (Ba)	-1310.111993723	-2033.438076234	.8
الزئبق (Hg)	-1645.970154900	-2369.537384618	.9
الثاليوم (Tl)	-1248.375196208	-1972.226468551	.10
الرصاص (Pb)	-1252.026312617	-1975.544406359	.11

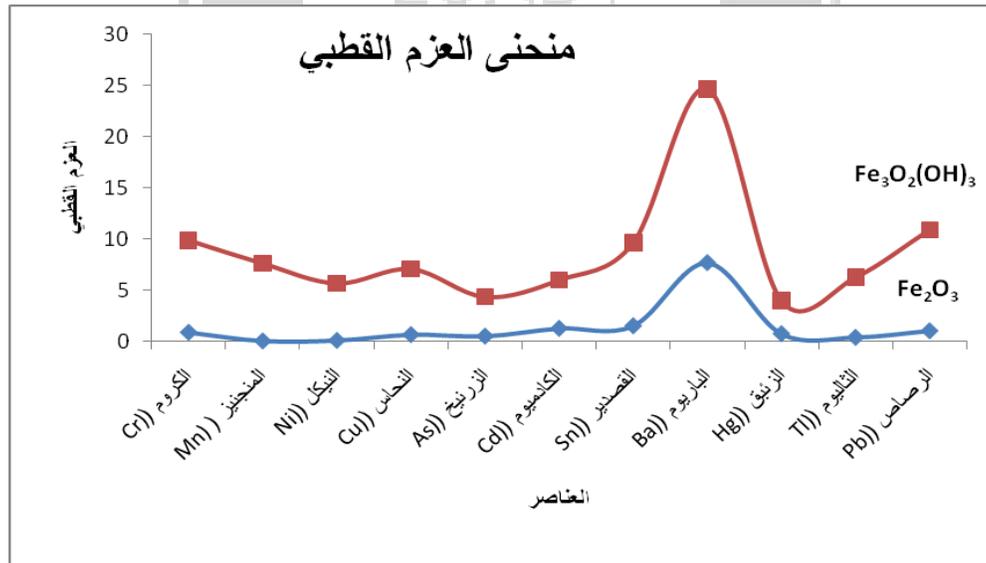


و بهذا نستنتج أن مركب هيدروكسيد أكسيد الحديدك $Fe_3O_2(OH)_3$ ذو ثباتية و استقرار عالي أكثر من مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 ، و هذه الميزة الفيزيائية أدت إلي أن يتداخل و يتفاعل مع العناصر الثقيلة و يعطي أفضل و أقوى استقرار داخلي بصورة أعلي و أفضل من حالة المركب الثاني أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 ، و بهذا نؤكد علي أهمية استخدام مركب هيدروكسيد أكسيد الحديدك $Fe_3O_2(OH)_3$ في عمليات امتصاص العناصر الثقيلة من أي بيئة ملوثة بها و ذلك بناءً علي النتائج الحاسوبية الكمومية المرفقة أعلاه في الجدول 3.

الجدول 4: يوضح العزم القطبي لكل عنصر من العناصر الثقيلة ناتج عن إضافة لمركبي أكسيد الحديدوز و هيدروكسيد أكسيد الحديدك.

Fe ₃ O ₂ (OH) ₃ , Debye	Fe ₂ O ₃ , Debye	العنصر & المركب	رتب
8.963464	0.929541	الكروم (Cr)	.1
7.538822	0.098679	المنجنيز (Mn)	.2
5.554348	0.146766	النكل (Ni)	.3
6.404600	0.709865	النحاس (Cu)	.4
3.818789	0.560746	الزرنينخ (As)	.5
4.709405	1.316210	الكاديوم (Cd)	.6
8.094779	1.563596	القصدير (Sn)	.7
16.970391	7.688514	الباريوم (Ba)	.8
3.225051	0.798289	الزنيق (Hg)	.9
5.834305	0.446537	الثاليوم (Tl)	.10
9.832155	1.080421	الرصاص (Pb)	.11

من خلال نتائج الجدول رقم (4) نلاحظ أن قيم العزم القطبي في حالة إضافة مركب هيدروكسيد أكسيد الحديدك Fe₃O₂(OH)₃ أعلى من الحالة الثانية مع مركب أكسيد الحديدوز Fe₂O₃ وبهذا نستنتج أن مركب هيدروكسيد أكسيد الحديدك Fe₃O₂(OH)₃ يملك امتصاصية عالية للعناصر الثقيلة عنه كما في مركب أكسيد الحديدوز Fe₂O₃.



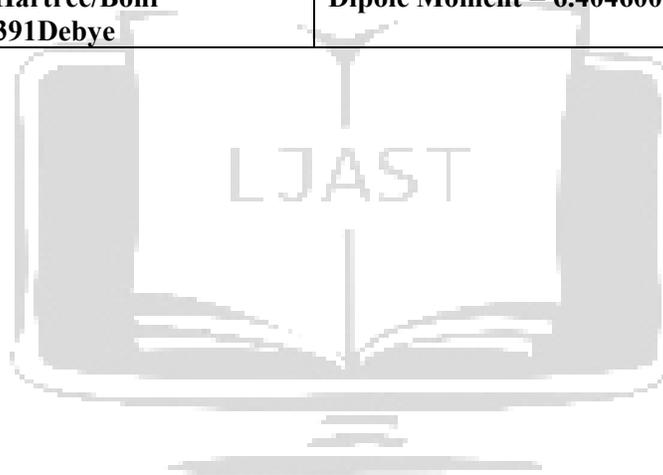
الخلاصة:

نستنتج بأن مركب هيدروكسيد أكسيد الحديدك Fe₃O₂(OH)₃ قد تحصل علي نتائج لطاقة أكثر استقرارية كمفردة كانت = 1962.811766411- هارترى و في حالة الدمج مع العناصر الثقيلة كانت أفضل استقرارية من حالة أكسيد الحديدوز و هذه الخاصية لهذه النتائج بالذات تعطي الأفضلية في استخدامه في التفاعل و سحب العناصر الثقيلة من أي بيئة ملوثة بها، أيضاً كانت نتائج العزم القطبي = 3.505542 ديباي و امتصاصية الأشعة فوق بنفسجية = 7289.97 نانومتر أفضل من حالة مركب أكسيد الحديدوز Fe₂O₃ مفردة و مدمجة مع العناصر الثقيلة في هذه الدراسة.

المراجع :

1. United States Environmental Protection Agency 1988, Ambient Aquatic Life Water Quality Criteria for Antimony (III), draft, Office of Research and Development, Environmental Research Laboratories, Washington.
2. Uden P. C. 2005, 'Speciation of Selenium,' in R. Cornelis, J. Caruso, H. Crews & K. Heumann (eds), Handbook of Elemental Speciation II: Species in the Environment, Food, Medicine and Occupational Health, John Wiley & Sons, Chichester, pp. 346–65, (978-0-470-85598-0).
3. De Zuane J. 1997, Handbook of Drinking Water Quality, 2nd ed., John Wiley & Sons, New York, (978-0-471-28789-6).
4. Dev N. 2008, 'Modelling Selenium Fate and Transport in Great Salt Lake Wetlands', PhD dissertation, University of Utah, Ann Arbor, Michigan, ([978-0-549-86542-1](https://doi.org/10.1002/9780549865421)).
5. Raymond R. 1984, Out of the Fiery Furnace: The Impact of Metals on the History of Mankind, South Melbourne, (978-0-333-38024-6).
6. Nieboer E. & Richardson D. 1978, "Lichens and 'heavy metals' ", International Lichenology Newsletter, vol. 11, no. 1, pp. 1–3.
7. Duffus J. H. 2002, " 'Heavy metals'—A meaningless term?", Pure and Applied Chemistry, vol. 74, no. 5, pp. 793–807:10.1351/pac200274050793.
8. Baird C. & Cann M. 2012, Environmental Chemistry, 5th ed., W. H. Freeman and Company, New York, (978-1-4292-7704-4).
9. Rusyniak D. E., Arroyo A., Acciani J., Froberg B., Kao L. & Furbee B. 2010, "Heavy metal poisoning: Management of intoxication and antidotes", in A. Luch (ed.), Molecular, Clinical and Environmental Toxicology, vol. 2, Birkhäuser Verlag, Basel, pp. 365–396, (978-3-7643-8337-4).
10. Vernon R. E. 2013, "Which elements are metalloids", Journal of Chemical Education, vol. 90, no. 12, pp. 1703–1707:10.1021/ed3008457.
11. Goldsmith R. H. 1982, "Metalloids", Journal of Chemical Education, vol. 59, no. 6, pp. 526–527:10.1021/ed059p526.
12. Baldwin D. R. & Marshall W. J. 1999, "Heavy metal poisoning and its laboratory investigation", Annals of Clinical Biochemistry, vol. 36, no. 3, pp. 267–300:10.1177/000456329903600301.
13. Emsley J. 2011, Nature's Building Blocks, new edition, Oxford University Press, Oxford, (978-0-19-960563-7).
14. David C. Young, Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems, New York (2001), 408 pages.
15. M. F. Schlecht, Molecular Modeling on the PC. Wiley-VCH, New York (1998), 3-10.
16. P. W. Atkins, and R. S. Friedman, Molecular Quantum Mechanics, Oxford, (1997), 76, 2, p 170.

6	8	0	1.292400	-0.716300	0.032000					
0.000000					7	8	0	-4.521600	0.341800	-
7	8	0	4.495500	1.253200	0.105000					
0.000000					8	1	0	-4.680000	1.130200	
8	8	0	-0.388500	2.013100	0.419700					
0.000000					9	8	0	2.096300	-0.891200	-
9	1	0	-5.220900	1.975700	0.190700					
0.000000					10	8	0	-1.095700	-1.206400	-
10	1	0	4.469400	2.212800	0.197700					
0.000000					11	29	0	-1.473900	2.489900	
11	56	0	-2.757800	3.286700	0.025100					
0.000000										
-----					-----					
E(TD-HF/TD-DFT) = -774.4954947 Hartree					E(TD-HF/TD-DFT) = -946.4935401Hartree					
RMS Gradient Norm = Hartree/Bohr					RMS Gradient Norm = Hartree/Bohr					
Dipole Moment = 16.970391Debye					Dipole Moment = 6.404600 Debye					



مجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية