LJAST
Libyan Journal of Applied Science and Technology
مجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

Volume 11 Issue 01
Joune 2023
ISSN 2958-6119

دراسة دالة الكثافة الوظيفة لتأثير الطاقة الداخلية و العزم القطبي في امتصاصية العناصر الثقيلة باستخدام مركبات هيدروكسليد أكسيد الحديديك وأكسيد الحديدوز

ابوبكر مفتاح احسونه[1*]، محمد مصباح عبدالرحيم[2]
2.1. قسم الكيمياء- كلية العلوم- جامعة سبها
Correspondent author: bou.hosouna@sebhau.edu.ly

الملخص:

تلخصت هذه الدراسة بأن مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ قد تحصل علي نتائج لطاقة أكثر استقرارية منفرد و كانت = 1962.811766411- هارتري، 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 ديباى و امتصاصية الأشعة الفوق 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 القاوسيان06 GS و الهايبركم 08 Hyp، بحيث تتمثل هذه الدراسة بملاحظة الإستقرارية الداخلية للعناصر و أيهم الذي يصعب إزالته من البيئة المراد إزالته منها، و أيضاً سنتطرق إلي دراسة إمكانية إستخدام مركبات أكسيد الحديدوز و هيدروكسليد أكسيد الحديديك و التي تم تحضيرها بطرقة السيلكا جل و الفرق بينهم في قابلية و قوة امتزاز و التفاعل و سحب العناصر الثقيلة من أي بيئة ملوثة بها، و يتم دلك حوسبياً في إمكانية تداخلها و تفاعلها مع هذه العناصر .

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 (Tl), 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 , السيلينيوم , 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.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

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 يشتبه 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 والكلى وتهيج المعدة والأمعاء. الناس مع مرض ويلسون معرضون بشكل أكبر لخطر التأثيرات الصحية من التعرض المفرط النحاس.

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 الإجهاض التلقائي والتشوهات الخلقية.
أحادية مثيل الزئبق يسبب تلف في خلايا المخ والجهاز العصبي المركزي، في حين تعرض الجنين لها بعد الولادة
بودي التعرض المفرط لعنصر النيكل إلي مشاكل صحية كثيرة و يمكن أن يسبب التعرض علي المدى الطويل لانخفض 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 بالكلى 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 , تفادي الكثير من العقبات العلمية و مشكلات البحوث التطبيقية ,

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

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 واقل طاقة ترابط.**(16-17)**

طريقة العمل:

تحضير اكسيد الحديديك هيدروكسليد أكسيد الحديديك : تم تحضير 10 جم من أكسيد الحديديك الناتو بطريقة الصول-جل و ذلك باستخدام كبريتات الحديدوز المائية كماده بادئه و ذلك بإذابة 9.982 جم من كبريتات الحديدوز في اقل كميه من الماء المقطر منزوع الايونات, و اضافة 29.214 جم من حمض ألستريك و قمنا بإضافة 10.170 جم من الاديتا كعوامل تعقيد، و تم اضافة المخلوط إلى نترات الزنك بالنسبة المولية (1:1:1.5) (كبريتات الحديدوز - حمض ألستريك – الاديتا) و قمن 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 والتحريك 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 الأسيتون للحصول على قوام ناعم . و قمنا بتقسيم الكمية المتحصل عليها إلي قسمين:

تم تحضير عينة هيدروكسيلايتد اكسيد الحديديك (عملية الامتزاز بخار الماء عل سطح الأكسيد)

قسم الراسب إلي قسمين ووضعا في إطباق زجاجية بعد انتهاء عملية حرق الراسب عند درجة حرارة C^0 600 (طبق بتري) داخل مجفف يحتوي علي ماء معاد التقطير، وتركت العينة الأولي 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 علي سطح كسيد ألحديدك(O-H) للعينتين للتأكد من تكون مجموعات.

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 ـــ الجسيم، وبهذا تصبح ميكانيكا الكم مسؤلة 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 علي أساس الهيكل التي ثم إنشائها من المعلمات البلورية التي قدمتها Cambridge structural Hypercube **(19)**.

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

البرامج التطبيقية :

HyperChem Professional

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

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 كيفيه 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 مثلا 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 ، وفقًا لبعض النماذج الحسابية للارتباط الكيميائي ، قريبًا من الصفر ، الموقف على سطح الطاقة المحتملة هو نقطة ثابتة.

DFTو هي طريقة جداً شائعة الاستخدام و تتخصص في حساب الكثافة الإلكترونية حول جميع المركبات المراد حساب طاقتها، بحيث تجعل الكثير من التقديرات والحصول على بعض المعلومات من البيانات إنها مهمة جدًا 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 شرونجر .

(B3LYP)

هي أكثر الطرق انتشار وتحظي 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 ذلكيمكننا 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 Gaussianو إخراج الملفات النهائية وتصور النتائج.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

النتائج و المناقشة:

حيود الأشعة السينية

يمكن باستخدام الأشعة السينية التعرف على تركيب بلورات أكسيد الحديد Fe2O3 و كذلك التأكد من البنية البلورية له. حيث تم استخدام جهاز مطياف حيود الاشعة السينية (XRD) . في نطاق 2θ من 0 - 70 درجة للتعرف على التركيب البلوري لمركب أكسيد الحديد. كما في الشكل (2) الذي يبين التحليل لجسيمات Fe2O3 النانوية المحضرة، حيث تشير القمم الحادة والقوية إلى أن الجسيمات النانوية ذات طبيعة بلورية عالية. أنماط حيود الأشعة السينية (XRD) للجسيمات النانوية Fe2O3تؤكد الطور السداسي الزوايا (Hexagonal) للجسيمات النانوية Fe2O3 والذي يتوافق جيدًا مع بطاقة "JCPDS" رقم 86-0550

تتوافق العديد من القمم المحددة جيدًا مع مستويات مختلفة من Fe2O3 مثل (200) و (201) و (211) و (102) و (310) و (212) ، والذي يرتبط جميعًا مع طور السداسي الزوايا (Hexagonal) من Fe2O3-NPs ويتوافق جيدًا مع بطاقة "JCPDS" رقم 26-0178. تم تأكيد النتائج المرصودة أيضًا مع الأدبيات امنشورة [47, 48].يُظهر نموذج XRD لجسيماتFe2O3 النانوية القممعند (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 Fe2O3 النانوية المطلوبة من معادلة Debye-Sherrer الآتية:

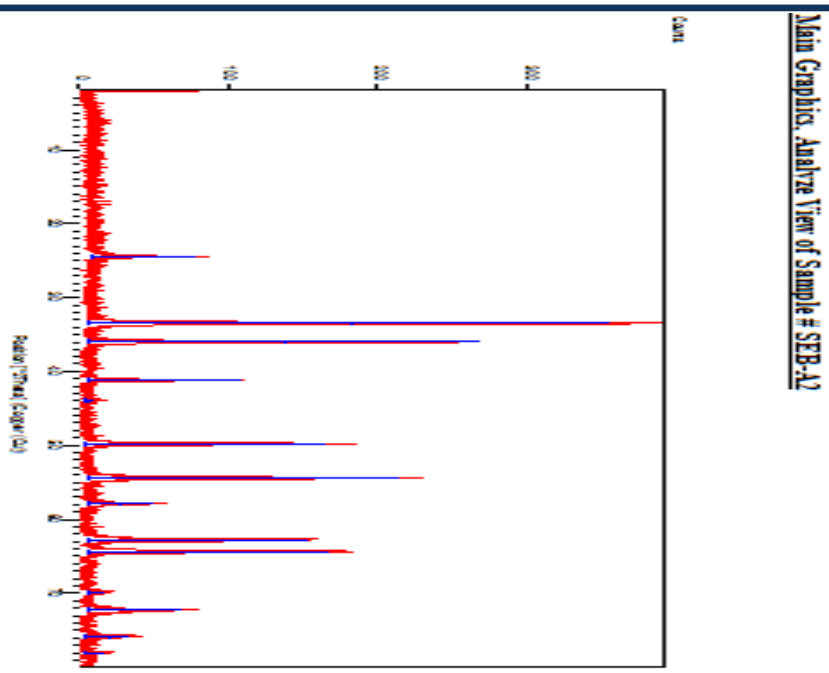
$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos(\theta)}$$

حيث k ثابت = 0.89، λ هو الطول ألموجي للأشعة السينية ، B هو (FWHM)، وθ هي زاوية براج. كان متوسط الحجم الحبيبي الجسيمات النانوية Fe2O3 المحضرة حوالي 62.87 نانو متر للعينة (أ) و حوالي 72.76 نانو متر للعينة (ب)من معادلة ديباي شيرير.

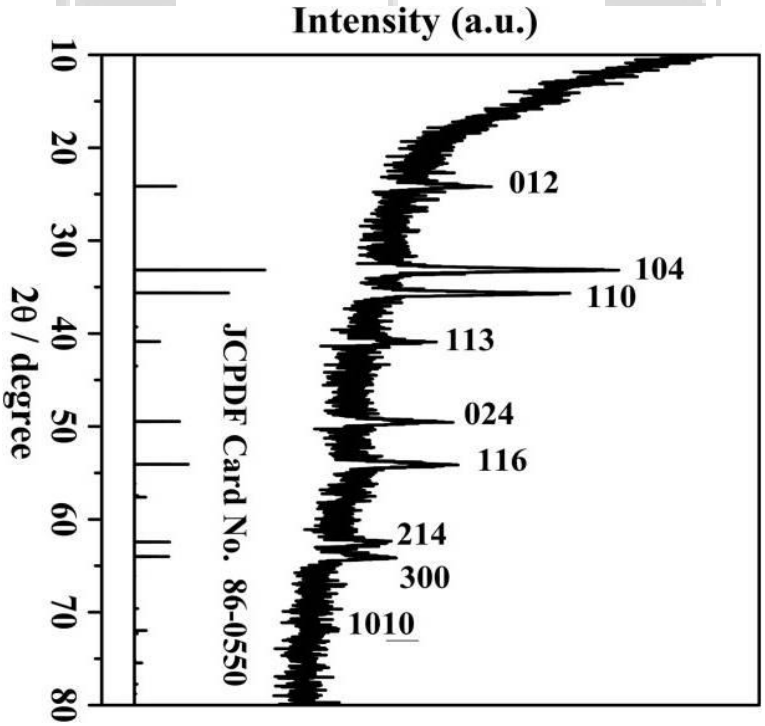
لعينة اكسيد حديديك محضرة بطريقة السول جلXRD.الجدول 1: توضح نتائج تحليل

Pos. [°2Th.]	Height [cts]	FWHM Left [°2Th.]	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

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية



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

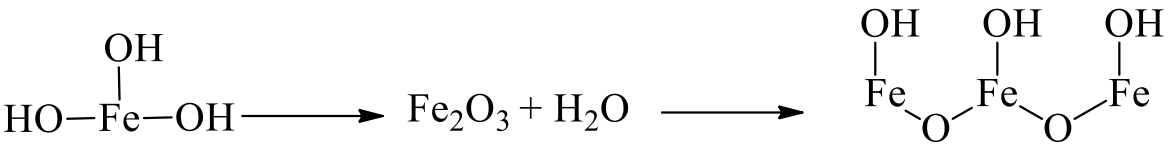


الشكل 2: بطاقة مرجعية لنمط XRD لأكسيد الحديد النانوي "JCPDS" رقم 26-0178

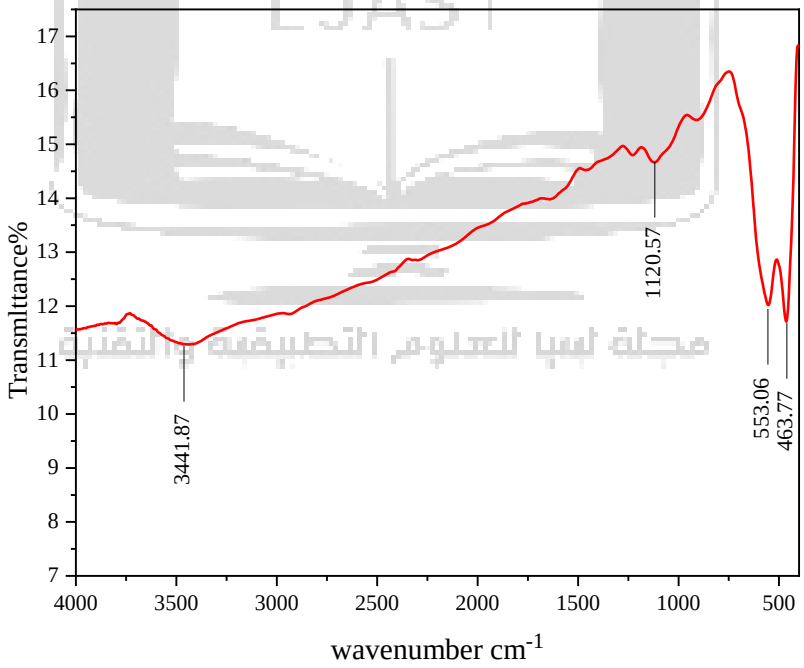
Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

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%) إلي بروميد البوتاسيوم ، ثم طحنها، وعمل قرص تحت ضغط 8 طن ، وذلك للتأكد من أنشاء مجموعات الهيدروكسيل علي سطح عينة أكسيد الحديديك وتحويلها إلي هيدروكسيلايتد الحديديك , ويمكن اقتراح الميكانيكية الآتية الامتزاز بخار الماء علي سطح أكسيد الحديديك.



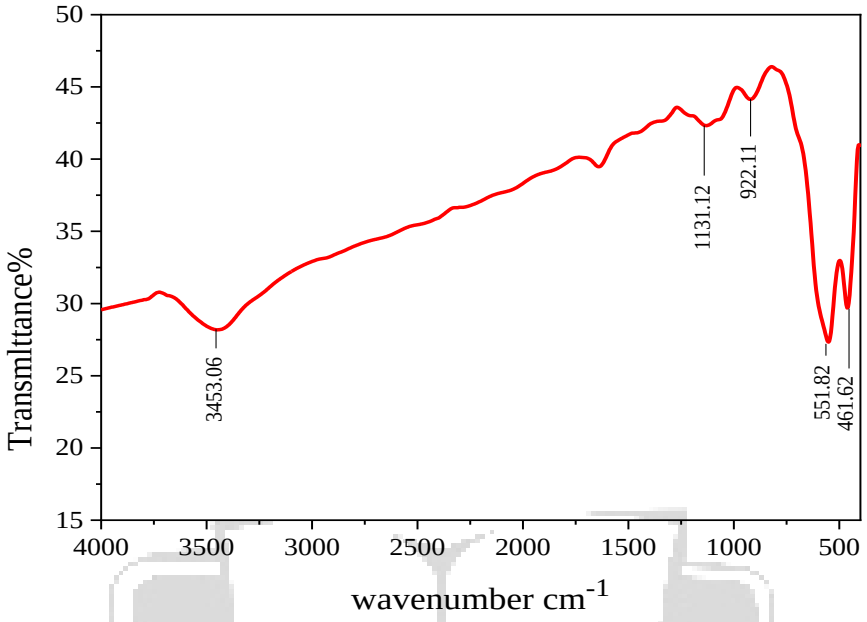
من خلال هذا الاقتراح يتضح وجود مجموعات من هيدروكسيل علي سطح أكسيد الحديديك.ولقد أكدت نتائج التحليل طيف الأشعة دون الحمراء وجود مجموعات من الهيدروكسيل الخاص بالماء .



الشكل 3: طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديديك .

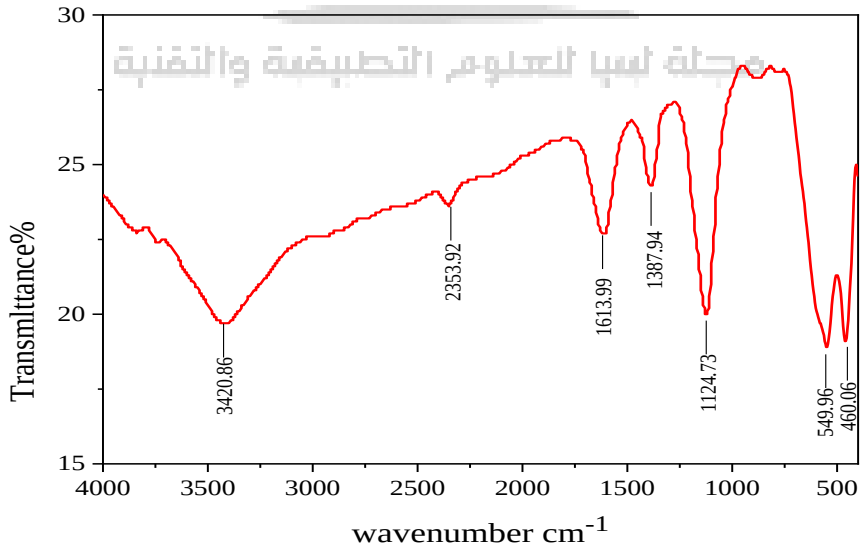
يظهر الشكل (3) تحليل حزم امتصاصية عند عدد موجي 3441.87 cm-1 وهي ناتجة عن اهتزاز امتطاطي υ(O-H) و أخري عند 1120.57Cm-1ناتجة من اهتزاز انكماشي (OH) δ نتيجة لوجود بعض جزئيات الماء في بروميد البوتاسيوم المستخدم وكذلك يظهر التحليل امتصاصان عند كل من 1553.06-cmو463.77Cm-1 نتيجة لوجود Fe-O.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية



الشكل 4: طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديديك المعرض لبخار الماء لمدة شهر ونصف .

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



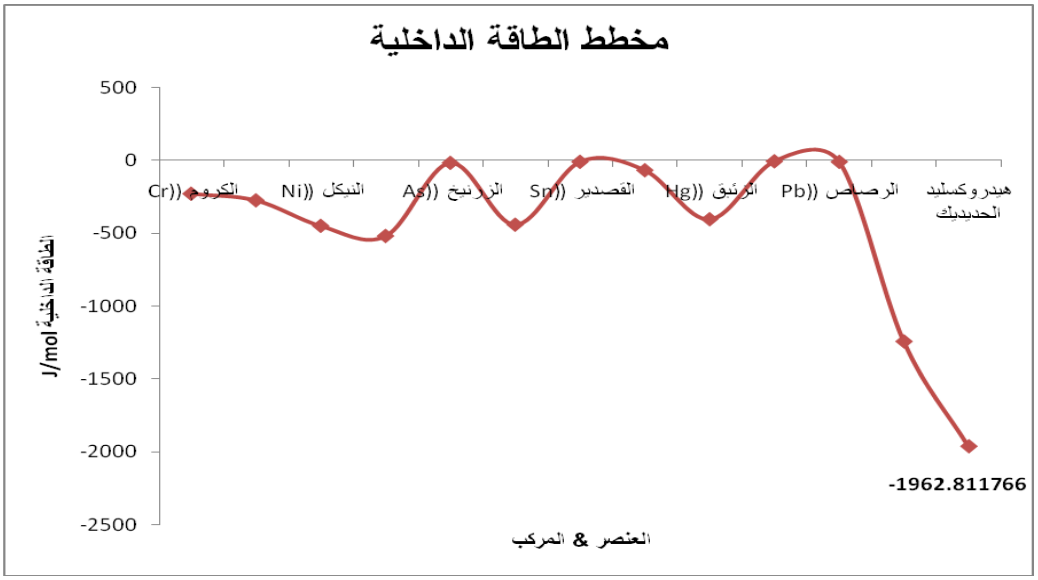
الشكل 5: نتائج تحليل طيف الأشعة دون الحمراء لأكسيد الحديديك المعرض لبخار الماء لمدة شهرين (الهيدروكسيلايتد الحديديك).

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

يظهر الشكل (5) وجد حزمتان امتصاص لبخر الماء ناتجة عن امتصاص امتطاطي عند العدد ألموجي3420.86 cm-1و أخري اهتزاز انكماشي عند العدد ألموجي1613.99cm-1وكذلك حزمتي امتصاص عند 549.96 cm-1 و 460.06cm-1 للتردد الاهتزازي لرابطة Fe-O . من خلال هذا الشكل يتضح لنا إن زيادة تعرض اكسيد الحديديك لبخار الماء لمدة شهرين تزيد من اتساع وشدة الامتصاص عند التردد الاهتزازي3420.86cm-1و 1613.99 cm-1نتيجة لوجود مجموعات من الهيدروكسيل (O-H) الخاصة بجزئيات الماء ,وهذا يؤكد إن مجموع مجموعات الهيدروكسيل تزداد بزيادة مدة تعرض أكسيد الحديديك لبخار الماء . ونتيجة لذلك تزداد كفاءة الادمصاص نتيجة لزيادة مجموعات الهيدروكسيل علي سطح اكسيد الحديديك المعرض لبخار الماء.

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

ر.ت	العنصر & المركب	الطاقة الداخليةJ/mol
.1	الكروم (Cr)	-227.8009832
.2	المنجنيز (Mn)	-273.4837153
.3	النيكل (Ni)	-448.5279547
.4	النحاس (Cu)	-518.0674033
.5	الزرنيخ (As)	-15.98569377
.6	الكادميوم (Cd)	-440.5759967
.7	القصدير (Sn)	-8.659914415
.8	الباريوم (Ba)	-66.7965381
.9	الزئبق (Hg)	-403.2097471
.10	الثاليوم (Tl)	-5.150887714
.11	الرصاص (Pb)	-8.831232504
.12	أكسيد الحديدوز Fe_2O_3	-1242.660856722
.13	هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$	-1962.811766411

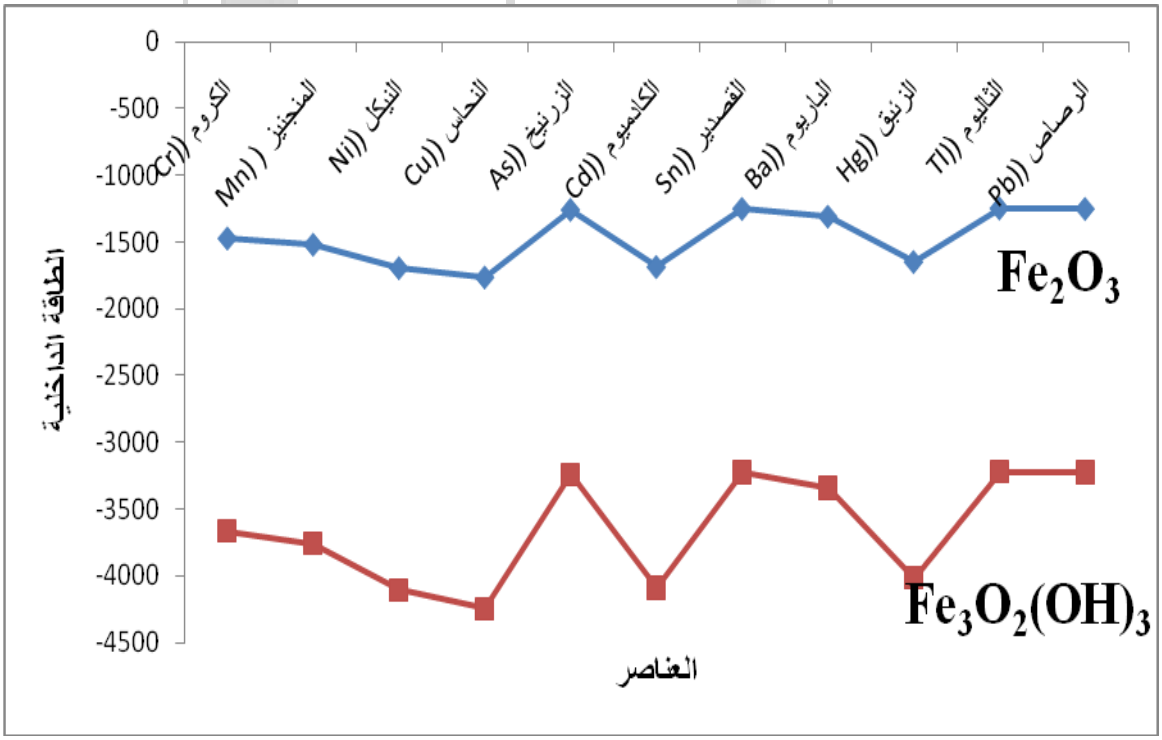


الشكل 6: نتائج الطاقة الداخلية منفردة لهيدروكسليد اكسيد الحديديك و اكسيد الحديدوز و بقية العناصر الثقيلة.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

الجدول 3: يوضح الطاقة الداخلية لكل عنصر من العناصر الثقيلة ناتج عن إضافة لمركبي اكسيد الحديدوز و هيدروكسليد اكسيد الحديديك.

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



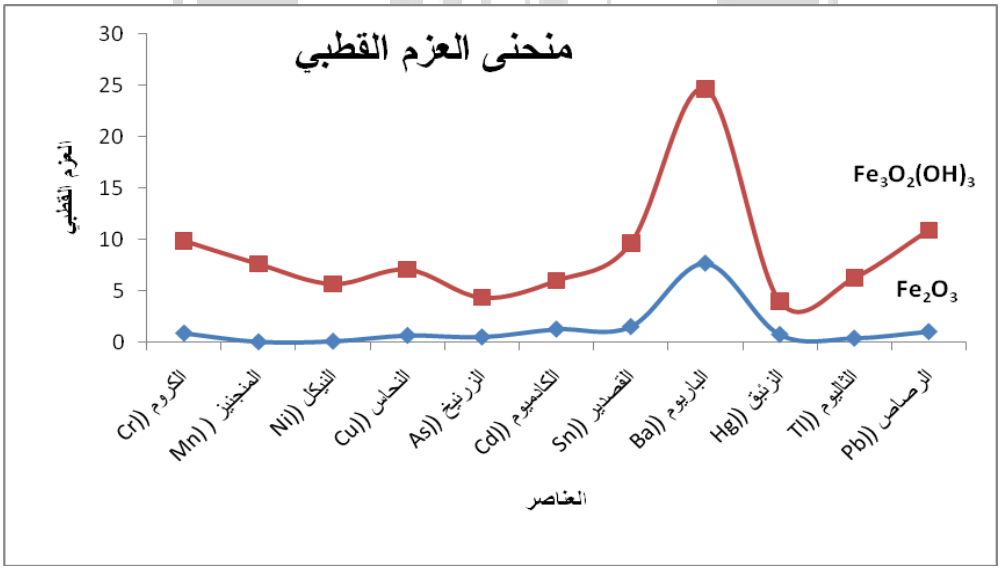
و بهذا نستنتج أن مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ ذو ثباتية و استقرار عالي أكثر من مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3، و هذه الميزة الفيزيائية أدت إلي أن يتداخل و يتفاعل مع العناصر الثقيلة و يعطي أفضل و أقوى استقرار داخلي بصورة أعلي و أفضل من حالة المركب الثاني أكسيد الحديدوز Fe_2O_3، و بهذا نؤكد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

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

الجدول 4: يوضح العزم القطبي لكل عنصر من العناصر الثقيلة ناتج عن إضافة لمركبي اكسيد الحديدوز و هيدروكسليد اكسيد الحديديك.

ر.ت	العنصر & المركب	Fe_2O_3, **Debye**	$Fe_3O_2(OH)_3$, **Debye**
.1	الكروم (Cr)	0.929541	8.963464
.2	المنجنيز (Mn)	0.098679	7.538822
.3	النيكل (Ni)	0.146766	5.554348
.4	النحاس (Cu)	0.709865	6.404600
.5	الزرنيخ (As)	0.560746	3.818789
.6	الكادميوم (Cd)	1.316210	4.709405
.7	القصدير (Sn)	1.563596	8.094779
.8	الباريوم (Ba)	7.688514	16.970391
.9	الزئبق (Hg)	0.798289	3.225051
.10	الثاليوم (Tl)	0.446537	5.834305
.11	الرصاص (Pb)	1.080421	9.832155

من خلال نتائج الجدول رقم (4) نلاحظ أن قيم العزم القطبي في حالة اضافة مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ أعلى من الحالة الثانية مع مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 و بهذا نستنتج أن مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$يملك امتصاصية عالية للعناصر الثقيلة عنه كما في مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3.



الخلاصة:

نستنتج بأن مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ قد تحصل علي نتائج لطاقة أكثر استقرارية كمنفردة كانت = 1962.811766411- هارتري و في حالة الدمج مع العناصر الثقيلة كانت أفضل استقرارية من حالة أكسيد الحديدوز 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 ديباى و امتصاصية الأشعة الفوق بنفسجية = 7289.97 نانومتر أفضل من حالة مركب أكسيد الحديدوز Fe_2O_3 منفردة و مدمجة مع العناصر الثقيلة في هذه الدراسة.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

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).
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.

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

17. M.Vieth, J. D.Hirst, B. N. Domini, H. Daigler, and C. L. Brooks, *Journal of Computational Chemistry*. 1998, 19,1612–1622.
18. Frisch, M.J.; Trucks, G.W.; Schlegel, H.B.; Scuseria, G.E.; Robb, M.A.; Cheeseman, J.R.;Montgomery, J.A.; Vreven, T., Jr.; Kudin, K.N.; Burant, J.C.; *et al. Gaussian 03, Revision B.03*;Gaussian, Inc.: Pittsburgh, PA, USA, (2003).
19. CHEM, E.N.C.H., *HyperChem Computational Chemistry*, in *Practical Guide Theory and Methods*, I. Hypercube, Editor 1996: CANADA. p. 366.
20. bartok, a., *The Gaussian Approximation Potential*, 2010: Berlin Springer Heidelberg DordrechtLondon New York. p. 96.

الملحق الحوسبي:

للقياسات الداخلية بميكانيكا الكم لأقل طاقة داخلية و استقرار عالي كان بين مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ مع عنصر النحاس Cu، و أعلى عزم قطبي كان بين مركب هيدروكسليد اكسيد الحديديك $Fe_3O_2(OH)_3$ مع عنصر الباريوم Ba .

Title Card Required>>>>>>**$Fe_3O_2(OH)_3$ ------Ba**
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 1

Fe	-3.5586	0.1054	0.
Fe	-0.3348	0.1639	0.
Fe	2.8935	0.2691	0.
O	-5.2035	1.0158	0.
O	-1.9122	-0.8022	0.
O	1.2924	-0.7163	0.
O	4.4955	1.2532	0.
O	-0.3885	2.0131	0.
H	-5.2209	1.9757	0.
H	4.4694	2.2128	0.
Ba	**-2.7578**	**3.2867**	**0.**

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms) X	Y	Z
1	26	0	-3.558600	0.105400	0.000000
2	26	0	-0.334800	0.163900	0.000000
3	26	0	2.893500	0.269100	0.000000
4	8	0	-5.203500	1.015800	0.000000
5	8	0	-1.912200	-0.802200	0.000000

Title Card Required>>>>>>**$Fe_3O_2(OH)_3$ ------Cu**
Symbolic Z-matrix:
Charge = 0 Multiplicity = 2

Fe	3.6166	0.2129	-0.1194
Fe	0.4098	-0.1324	-0.1411
Fe	-2.8075	-0.4297	-0.1509
O	5.1322	1.3232	-0.0472
H	5.1017	2.1457	0.447
O	0.2337	1.7059	-0.032
O	-4.5216	0.3418	-0.105
H	-4.68	1.1302	0.4197
O	2.0963	-0.8912	-0.1907
O	-1.0957	-1.2064	-0.1977
Cu	**-1.4739**	**2.4899**	**0.0251**

Input orientation:

Center Number	Atomic Number	Atomic Type	Coordinates (Angstroms) X	Y	Z
1	26	0	3.616600	0.212900	-0.119400
2	26	0	0.409800	-0.132400	-0.141100
3	26	0	-2.807500	-0.429700	-0.150900
4	8	0	5.132200	1.323200	-0.047200
5	1	0	5.101700	2.145700	0.447000

Copyright © LJAST
حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية

6	8	0	1.292400	-0.716300	0.000000
7	8	0	4.495500	1.253200	0.000000
8	8	0	-0.388500	2.013100	0.000000
9	1	0	-5.220900	1.975700	0.000000
10	1	0	4.469400	2.212800	0.000000
11	56	0	-2.757800	3.286700	0.000000

E(TD-HF/TD-DFT) = -774.4954947 Hartree
RMS Gradient Norm = Hartree/Bohr
Dipole Moment = 16.970391Debye

6	8	0	0.233700	1.705900	-0.032000
7	8	0	-4.521600	0.341800	-0.105000
8	1	0	-4.680000	1.130200	0.419700
9	8	0	2.096300	-0.891200	-0.190700
10	8	0	-1.095700	-1.206400	-0.197700
11	29	0	-1.473900	2.489900	0.025100

E(TD-HF/TD-DFT) = -946.4935401Hartree
RMS Gradient Norm = Hartree/Bohr
Dipole Moment = 6.404600 Debye

Copyright © LJAST

حقوق الطبع محفوظة
لمجلة ليبيا للعلوم التطبيقية والتقنية