The Libyan Journal of Science
University of Tripoli Vol. 26, No. 01
https://uot.ed.ly/journals/index.php/ljs

دراسة حسابية حديثة بنظرية الكثافة الوظيفية لحالة الطاقة الداخلية للعناصر الكيميائية في حالتها المستقرة

ابوبكر مفتاح احسونه*[1]، محمد زيدان[2]، مروة العمراوي[3]، عائشة محمد الزروق[3]
صفاء الحضيري[3]، حفصة مصباح فرحات[4]
قسم الكيمياء[3,2,1]، قسم الرياضيات[4] - كلية العلوم، جامعة سبها، ليبيا

Corresponding authors: bou.hosouna@sebhau.edu.ly

ARTICLE INFO

Article history:

Received 29/01/2023

Received in revised form 15/05/2023

Accepted 21/05/2023

المستخلص

تم في هذه الدراسة حساب الطاقة الداخلية كدراسة منفردة لعناصر الجدول الدوري بإستخدام نظرية الكثافة الوظيفية التي تختص بحوسبة المجال الإلكتروني لكل عنصر من خلال كثافة السحابة الإلكترونية، مع حساب الطول الموجي الحوسبي، وجدنا أن الطاقة الداخلية للعناصر في هذه الدراسة تعتمد علي الحجم الذري لكل عنصر، بحيث كلما زاد حجم الذرة زادت الطاقة الداخلية و قل إستقرار العنصر و كلما قل الحجم الذري قلت الطاقة الداخلية و أصبحت أكثر إستقراراً للعنصر، و كانت أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "S" هي لعنصر الماغنيسيوم (Mg =200.0779- hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "P" هي لعنصر الكريبتون (Kr = 2750.165017- hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "d" هي لعنصر الخارصين (Zn = 1778.955852- hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "f" هي لعنصر اللوتيتيوم (Lu = 1236.2224939- hartree)، فبهذه الدراسة يمكن القول أن طاقة العناصر حسابياً ستزداد وتنخفض اعتماداً على المستويات الإلكترونية الفيزيائية للذرة، والتي تعتمد بشكل أساسي على حلول معادلات شرودنجر التفاضلية، التي أعطتنا وصف أفضل للمجال الإلكتروني للذرة.

الكلمات المفتاحية: دالة الكثافة الوظيفية، الطاقة الداخلية للعناصر، الإستقرارية و قوة الترابط.

Abstract: In this study, the internal energy was calculated as a single study of the elements of the periodic table using the density functional theory, which is concerned with computing the electronic field of each element through the density of the electronic cloud, with the calculation of the computational wavelength, we found that the internal energy of the elements in this study depends on the atomic size of each element, so that the larger size of the atom will got greater internal energy but less stability of this element, also the lower of atomic size will got less internal energy but became more stable for this element, so it was The best stable energy for "S" group is magnesium (Mg = 200.0779-hartree) while the best stable energy for "P" group is krypton (Kr = 2750.165017-hartree) while the best stable energy for "d" group is zinc (Zn = 1778.955852-hartree) finally the best stable energy for "f" group is lutetium (Lu = 1236.2224939-hartree) so, can say the energy of the elements computationally DFT study will increases and decreases depends on the physical electronic levels of the atom, which depend mainly on the solutions of Schrödinger's differential equations, which gave us a better description of the physical field of the atom

1. المقدمة

تم استخدام الحاسوب لمعرفة التراكيب والتفاعلات الجزيئية ونما هذا المجال خلال السنوات الماضية بسبب التطور الهائل في الحواسيب والبرمجيات وزيادة كفاءتها واستخدامها لحساب خواص الجزيئات في كثير من التطبيقات في علم الكيمياء تنشر الكيمياء الحسابية والنظرية تقارير ذات جودة عالية و تقارير أصلية ذات دلالة في الكيمياء الحسابية، بما في ذالك تلك التي تعالج مشاكل البنية ونشاط الطاقة والتفاعلات الضعيفة، حيث أصبح استخدام هذه البرامج حتى وقتنا الحالي لسنة 2023م أداه روتينية لنمذجة الجزيئات والتفاعلات الكيميائية في الحالة الغازية. [1]
أيضاً تمكنُا من حساب خصائص الجزيئات بشكل أدق منها العزم ثنائي القطب، طاقة الترابط، الأشعة تحت الحمراء، الرنين المغناطيسي، حساب الهندسة الجزيئية، تستخدم أيضا في صناعة المستحضرات الصيدلانية ودراسة التفاعلات الأدوية وإنتاج نوع جديد من العقاقير، مفيدة في علم المواد، تعتبر رخيصة، سريعة، أمنة بيئيا.[2]

فميكانيكا الكم "م-ك" هي مجموعة من النظريات الفيزيائية ظهرت في القرن العشرين، وذلك لتفسير الظواهر على مستويات الطاقة الداخلية، وقد دمجت "م-ك" بين الخاصية الجسمية والخاصية الموجية ليظهر مصطلح ازدواجية الموجة -الجسيم، وبهذا تصبح "م-ك" مسؤولة عن التفسير الفيزيائي على المستوى الذري كما أنها أيضاً تطبق على الميكانيكا الكلاسيكية ولكن لا يظهر تأثيرها على هذا المستوى، لذلك "م-ك" هي تعميم للفيزياء الكلاسيكية لإمكانية تطبيقها على المستويين الذري والعادي. [3]
ظهرت أهمية الحوسبة الكمومية نتيجة لعجز الفيزياء الكلاسيكية عن تفسير الظواهر مثل ظاهرة الجسم الأسود وظاهرة التأثير الكهروضوئي وتأثير كيمبتون وغيرها من الظواهر.
بالنسبة للنماذج الحوسبية لمركب البنزويك تم بناؤها علي أساس الهياكل البلورية التي قدمتها Cambridge structural باستخدام حزمة برنامج Gaussian06 بطريقة PM3-Semiepirical بحيث تم تحسينها بشكل منفصل بإستعمال. [4] Hyperchem-08، في هذه الدراسة تم إستخدام برامج تعتمد علي معادلات ميكانيكا الكم و تقريباتها الرياضية و هذه البرامج هي:

1.1. *HyperChem Professional 08*

هو برنامج حوسبي يقوم بتحسين المركبات الكيميائية في الفراغ الهندسي، وله القدرة على دمج المركبات مع بعضها، أيضاً يستطيع اجراء حسابات الطاقة الدورانية واهتزاز الروابط ورؤية كيفية تحريكها.

2.1. *Gaussian 06*

هو عبارة عن حزمة بنية إلكترونية قادرة على التنبؤ بالكثير من خصائص الذرات والجزيئات والأنظمة التفاعلية ورسم المركبات وإمكانية حساب أطوال الروابط والزوايا وحساب طاقات الترابط للمركبات باستخدام طريقة نظرية الكثافة الوظيفية، شبه التجريبية، الميكانيكا الجزيئية والطرق الهجينة. [5]

الفلزات القلوية الترابية، هي سلسلة من ستّة عناصر كيميائية في المجموعة الثانية من الجدول الدوري. هي عوامل مختزلة قوية بحيث تعطي إلكترونات بسهولة. هي أقل نشاطا من الفلزات القلوية، لكنها نشطة بما فيه الكفاية بحيث لا توجد حرة في الطبيعة. بالرغم من أنها هشّه، ألا أن الفلزات القلوية الترابية قابلة للسحب والطرق. هي جيدة التوصيل للتيار الكهربائي، وعندما تسخن، تحترق بسهولة في الهواء. الفلزات القلوية الترابية ترتب في المجموعة حسب الزيادة في العدد الذري كما يلي: البيريليوم، المغنيسيوم، الكالسيوم، السترونشيوم، الباريوم، والراديوم.[6]
أكسيدها تعرف بالقلويات الترابية.

إن التباين في خصائص عناصر P-block بسبب تأثير إلكترونات d و f في اللب الداخلي للعناصر الثقيلة يجعل كيميائهم مثير للاهتمام، إن عناصر p-block عناصر تنتمي إلى مجموعات من 13 إلى 18 في الجدول الدوري عناصر-p blockتتميز بالتكوين الإلكتروني ns np [7] و تزيد أنصاف الأقطار التساهمية والأيونية أسفل المجموعة. هناك زيادة ملحوظة في أنصاف الأقطار التساهمية من N إلى P هناك زيادة طفيفة من As إلى Bi بسبب وجود d ممتلئ بالكامل في العناصر الثقيلة، بينما يتناقص الوتر الخاص بزوج الإلكترون الخاص بـ ns للمشاركة في تكوين الرابطة مع زيادة الحجم الذري .داخل المجموعة، تصبح حالة الأكسدة الأعلى أقل استقرارًا فيما يتعلق بحالة الأكسدة المنخفضة مع زيادة العدد الذري .هذا الاتجاه يسمى" تأثير الزوج الخامل". بمعنى آخر، الطاقة المطلوبة لإلغاء اقتران الإلكترونات هي أكثر من الطاقة المنبعثة في تكوين رابطتين إضافيتين .

بينما عناصرd-block جميعها معادن وبالتالي تتمتع بكل خواص المعادن من حيث جودة التوصيل للتيار الكهربائي وسهولة السحب والطرق وتكوين سبائك مع الفزات الأخرى. تشكل عددا كبير من الأيونات الملونة والبار مغناطيسية وذالك لوجود إلكترونات فردية.أما سبب تلون العناصر الانتقالية فهذا يرجع إلى الانتقالات الإلكترونية، أيضاً لها القدرة على تكوين مركبات تناسقية بسبب ارتفاع شحنة أغلب الأيونات ووجود أفلاك مدراتd فارغة تسمح بدخول الأزواج الكترونية التت تتواجد على الليجاندات. وتتعدد حالات الأكسدة وذالك للفرق بين الإلكترونات d(n-1) والإلكترونات nsصغيرة مما يمكن من استخدامها في التفاعلات الكيميائية.[8]

فمن دراسة المطافية يبين الإشعاع (سواء كان كهرو مغناطيسيا أو إشعاع جسيمات) مع المادة والتي تشمل الذرات والجزيئات، يمكن توقع وحساب المطيافية مثل RAMAN,UV,NMR,IR وخاصة للعناصر، والمركبات المجهولة والجديدة مستخدما برنامج Gaussian وهو أحد البرامج الشهيرة المستخدمة في الكيمياء الحسابية يمكنه العمل في نظام التشغيل ويندوز ولينوكس ويوجد منه نسخة الذاكرة المؤقتة RAM = 32 bit و64 bit نتطرق للأشعة فوق البنفسجية، هي موجة كهرومغناطيسية ذات طول موجي أقصر من الضوء المرئي لكنها أطول من الأشعة السينية سميت بفوق البنفسجية لأن طول موجة اللون البنفسجي هو الأقصر بين ألوان الطيف. وطول موجاتها يبدأ من10 نانومتر إلى 400 نانومتر، وطاقتها تبدأ من 3 إلى 124 إلكترون فولت.[9]

وبهذا تكون الطاقة الكلية وهي مجموع الطاقتين الحركية والكامنه،وتكون قيمتها سالبة وهي ضرورية لكي يبقى الالكترون مرتبطا بالذرة ولو كانت قيمتها اكبر من الصفر

(موجبه) لامتلك الالكترون طاقة كافيه كي ينفصل كليا عن مجال تأثير النواة، وكلما قلت الطاقة الكلية(زيادة حجم الذرة) كلما زاد الاستقرار. بينما طاقة التأين هي أدني طاقة تكفي لانتزاع إلكترون من الذرة في وضعها المستقر وحالتها الغازية، أو هى مقدار الطاقة بالكيلوجول اللازمة لنزع مول واحد من الألكترونات من مول واحد من الذرات الغازية، kj/mol وحدة قياس طاقة التأين، تتناقص طاقة التأين مع زيادة العدد الذري في المجموعة الواحدة (أى كلما انتقلنا إلى أسفل المجموعة). لعناصر المجموعة الواحدة توزيعات إلكترونية خارجية مشابهة لكن مع ازدياد عدد الكم الرئيسي (n) فان متوسط بعد إلكترونات التكافؤ يزداد كذلك. أن ازدياد التباعد بين الألكترون والنواة يعني تجاذباً أضعف ما يزيد من سهولة إزالة الإلكترون الأول كلما أنتقلنا من عنصر إلى آخر أسفل المجموعة، لذلك تزداد الخاصية المعدنية للعناصر من أعلى إلى أسفل[9].

2. *طريقة الحساب*

برنامج Gaussian يستخدم لحساب الطاقة الجزئية والبنية الفراغية للحالات الانتقالية وطاقة الرابطة وطاقة التفاعل والمدرات الجزئية وعزم تنائي القطب والشحنات الذرية وترددات الاهتزازات ومطيافية RAMAN و IR وخصائص NMR هذا البرنامج يتعامل حتى مع ذرات صغيرة ويعطي القيم دقيقة جدا ويوفر الوقت والجهد.

تمت الحساب بإستخدام برنامج Gaussian 06 وذلك بإتباع الخطوات التالية لحساب طاقة العناصر الإنتقالية والأشعة فوق بنفسجية المرئية لكل عنصر.[12-11]

Create New Molecule Croup ← Element Fragments Gaussian 06

الشكل.1. يوضح الجدول الدوري والنافذة والعنصر

تم استخدام نظرية دالة الكثافة الوظفية DFT ودالة الوظيفية الهجينة B3LYP

الشكل.2. نافذة حساب3 لبرنامج Gaussian

DFT نظرية دالة الكثافة الوظيفية هي أهم الطرق المستعملة في الكيمياء الفيزيائية الكُمَية، و التي بواسطتها نستطيع أن نحدد خواص النظام متعدد الجسيمات وهي من أكثر الطرق المستخدمة في العمليات الحسابية الكمومية بسبب إمكانية تطبيقها على أنظمة متنوعة.[15-14-13]

حيث المعادلة لدالة الكثافة الوظيفية:

$$EDFT\ [\rho] = T\ [\rho] + Ene\ [\rho] + J\ [\rho] + Exc\ [\rho]$$

حيث E هي الطاقة ، T هي الطاقة الحركية للإلكترونات ، Ene هي الإلكترون النووي طاقة الجذب (الكولومبية) ، J هي طاقة الإلكترون الطاردة (الكولومبية) ، و Exec هي طاقة ارتباط التبادل الإلكتروني والإلكترون. لاحظ أن كل من هذه المصطلحات هي دالة للدالة ρ ، وهي كثافة الإلكترون ، والتي هي في حد ذاتها دالة للإحداثيات الموضعية الثلاثة (x ، و y ، و z). على هذا النحو ، فإن كل من المصطلحات أعلاه - T و Ene و J و Exec وظيفية.

1.2. *المجموعات الأساسية Basis Set*

يتم تقريب الدالة الموجيةالجزيئية على أنها تركيب خطي للمدارات الذرية LCAO ومن خلال هذا التقريب يمكن توليف (اصطناع) مدرات جزيئية عن طريق دمج دوال أبسط .هذه المجموعة من الدوال تسمى بالمجموعات الأساسية وبالتالي المجموعة الأساسية هي عبارة عن مجموعة من الدوال المستخدمة للتعبير عن شكل المدرات الجزيئية وذلك من تركيب الخطي لهذه الدوال.(12-13)

تم استخدام خاصية 6.311G وهذه من أحد خاصية المهمة على مجموعة الأساس ذات الأس الثلاثي triple Zeta واستخدمت لحساب العناصر الانتقالية في الدورة الرابعة من Sc إلى Zn واستخدمت خاصية Lanl2DZ للعناصر الانتقالية في الدورة الخامسة والسادسة ولوحظ أن عناصر الانتقالية في الدورة السابعة لم نتمكن حسابها بأي خاصية من خواص Basis Set في الذرات الكبيرة لايمكن استخدام مجموعات الأساس العادية لذا تم تطوير هذه الطريقة حيث تقوم باستبدال الإلكترونات في الطبقات الداخلية بتقريبات شبة مهملة وبالمقابل الاهتمام بالالكترونات الطبقات الخارجية حيث أنها تعبر عن جميع الخصائص الكيميائية مثل القوة الرابطة وطاقة التأين.[17-16]

3. النتائج و المناقشة

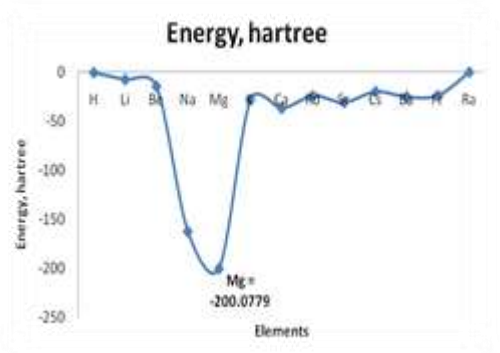
بعد عدة سنوات من التطوير المتتالي لنماذج شبه تجريبية أكثر دقة وأكثر تكلفة من الناحية الحسابية، أدرك جون أنه مع التحسينات التي أدخلت على الخوارزميات، سيكون من الممكن إجراء حسابات غير تجريبية (تسمى آنذاك "ab initio") بسرعة كافية لتطبيقها على مشاكل كبيرة. حيث ظل هذا النوع من النظرية محور تركيزه خلال العقود الثلاثة الأخيرة من عمله إلى حين تطبيق نظرية وطريقة دالة الكثافة الوظيفية، والتي من خلال نتائجها في هذه الدراسة أعطت أفضل تصور ورؤية لعناصر الجدول الدوري.

أعطت نتائج الدالة صورة متكاملة لحالة العنصر من ناحية الطاقة الداخلية الكلية كما هي موضحة في الجداول 1 ، 2 ، 3 و 4 و الأشكال 3 ، 4 ، 5 و 6 أعطت صورة عميقة لحالة كل عنصر بالطاقة الداخلية.

الجدول.1. يوضح الطول الموجي وطاقات عناصر المجموعة S

Elements	Energy, hartree
H	0.465099
Li	-7.413365
Be	-14.472959
Na	-162.196764
Mg	-200.0779
K	-599.825935
Ca	-677.418935
Rd	-2926.449191
Sr	-3118.841084
Cs	-19.822311
Ba	-25.116470
Fr	-19.1545883
Ra	-24.0367512

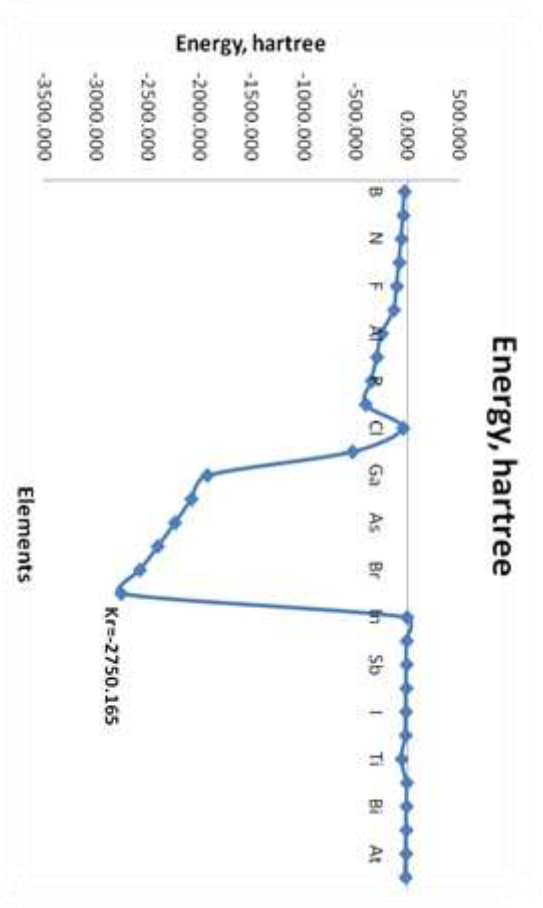
إن الإختلاف المتباين في نتائج الطاقة الداخلية بين العناصر يوضح أثر الطبيعة الفيزيائية للعناصر مع التركيب الإلكتروني الناتج عن توزيعها بناءً علي مستويات الطاقة الداخلية لكل عنصر، و بهذا تكون دالة الكثافة الوظيفية قد أعطت تفاصيل أكثر وضوحاً لنمط توزيع العناصر حسب خصائصها الفيزيائية، بحيث الشكل رقم 3 يوضح مدى الإختلاف في استقرارية العناصر من خلال نتيجة الطاقة الداخلية لدالة الكثافة الوظيفية.



الشكل.3. يوضح منحنى الطاقة الداخلية لعناصر مجموعة S

كما نلاحظ الطاقة في حالة تناقص داخل الكتل الذرية للعناصر بسبب زيادة الحجم الذري، إلي أقل طاقة داخلية كانت عند عنصر الماغنيسيوم لطاقة تصل إلي **-200.0779 hartree**.

هنا اختلفت نتائج حسابات دالة الكثافة الوظيفية لعناصر المجوعة P عن عناصر المجموعة S من حيث الاستقرار الداخلي للطاقة الداخلية الناتج عن أثر الطبيعة الفيزيائية للعناصر مع التركيب الإلكتروني الناتج عن توزيعها بناءً علي مستويات الطاقة الداخلية لكل عنصر كما ذكرنا مسبقاً، و الشكل رقم 4 يبين أن هناك استقرار أعلى نتيجة لزيادة السالبية الكهربية كصفة فيزيائية لعناصر هذه المجموعة بالذات عن بقية عناصر مجموعات الجدول الدوري الأخريات.



الشكل.4. يوضح منحنى الطاقة الداحلية لعناصر مجموعات P

أيضاً نلاحظ أن الطاقة تتناقص داخل الكتل الذرية للعناصر بسبب زيادة الحجم الذري، إلي أقل طاقة داخلية كانت عند اخر عناصر المجموعة عند عنصر الكريبتون الخامل لطاقة تصل إلي **hartree -2750.165**.

فيما يخص عناصر المجموعة الأرضية فهي مميزة بوفرتها في الطبيعة وفي القشرة الأرضية بالذات، أيضاً تتميز بأوزانها الثقيلة فيزيائياً و التي تعطيها خاصية إستخدامها في عمليات التعدين الناتج عن قوة ترابطها داخلياً و الذي يوضحهُ شكل رقم 5، و نتائج الكثافة الوظيفية أضفت إلينا إمكانية تقريب العناصر التي يمكن تعدينها مع بعض و تكوين متراكبات و منتجات ذات صلابة و صلادة عالية قد تستخدم في بناء البناءات الشاهقة و المنشآت العسكرية بالذات.

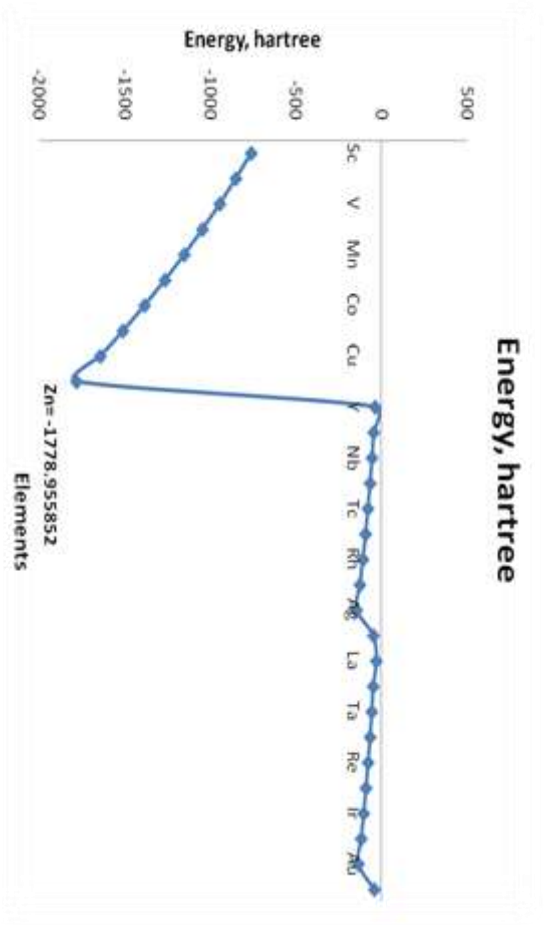
الجدول 3: يوضح الطول الموجي وطاقات عناصر المجموعة d.

Elements	Energy, hartree
Sc	-760.609789
Ti	-849.273838
V	-943.856546
Cr	-1044.38
Mn	-1150.804748
Fe	-1263.486227
Co	-1382.636931

الجدول .2. يوضح الطول الموجي وطاقات عناصر المجموعة p

Elements	Energy, hartree
B	-24.651816
C	-37.77223
N	-54.551809
O	-74.953664
F	99.712573
Ne	-127.402117
Al	-242.365407
Si	-289.325336
P	-341.244505
S	-398.037146
Cl	-37.772223
Ar	-526.716912
Ga	-1922.802539
Ge	-2074.710680
As	-2233.480196
Se	-2399.034709
Br	-2571.529283
Kr	-2750.165017
In	-1.848700
Sn	-3.283993
Sb	-5.35735
Te	-7.964905
I	-11.362597
Xe	-14.748207
Ti	-51.596049
Pb	-3.393689
Bi	-5.409905
Po	-7.8397014
At	-11.03618527
Rn	-14.8792769

Ni	-1508.113966
Cu	-1640.376067
Zn	-1778.955852
Y	-37.8479933
Zr	-46.382818
Nb	-56.124076
Mo	-67.281259
Tc	-79.887368
Ru	-93.701904
Rh	-109.435056
Pd	-126.6673617
Ag	-145.62111
Cd	-47.888857
La	-31.141355
Hf	-48.710829
Ta	-57.621482
W	-67.560421
Re	-78.874284
Os	-90.823407
Ir	-104.568884
Pt	-119.03663
Au	-135.37149
Hg	-42.57149



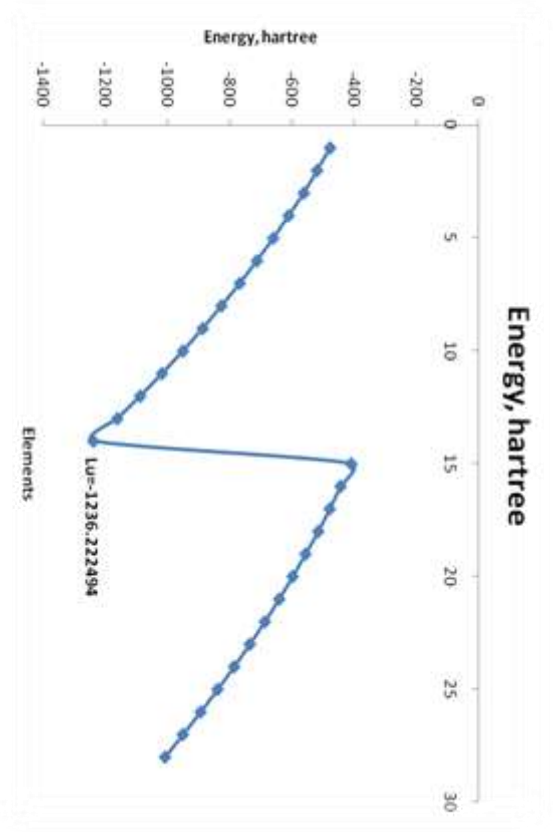
الشكل.5. يوضح منحنى الطاقة الداخلية لعناصر مجموعات d

تقل طاقة العناصر الانتقالية في الجدول الدوري في الدورة الرابعة والخامسة والسادسة من اليسار إلى اليمين وتزداد من الأعلى إلى أسفل المجموعات وبزيادة العدد الذري مع الملاحظة أن قيمة طاقة العناصر الانتقالية تكون سالبة وذلك يدل على أن العناصر الانتقالية أكثر استقرار فكلما قلت طاقة العنصر كلما كان العناصر أكثر استقرار. تتراوح قيم الطاقة بين (**1778- إلى 31-**) HF أقل قيمة طاقة تكون لعنصر Zn وأعلى قيمة تكون عند عنصر La. و توجد علاقة طردية بين طاقة العناصر والطول الموجي وتتراوح قيم الطول الموجي من (112 إلى 23231.37 nm)و كانت أعلى قيمة عند عنصر La وأقل قيمة عند Zr.

نتائج عناصر f الانتقالية الداخلية ذات الصفة الإشعاعية، وهي الميزة الهامة لهذة العناصر، بحيث نتائج دالة الكثافة الوظيفية أوضحت التقارب في قيمة الطاقة الداخلية بينهم مقارنة مع بقية المجموعات للجدول الدوري، الناتج عن أثر الطبيعة الفيزيائية للعناصر مع التركيب الإلكتروني وتوزيعها بناءً على مستويات الطاقة الداخلية لكل عنصر، أيضاً دالة الكثافة الوظيفية قد أعطت تفاصيل أكثر وضوحاً لنمط توزيع العناصر حسب خصائصها الفيزيائية كما هو موضح في الشكل رقم 6.

الجدول. 4. يوضح الطول الموجي وطاقات عناصر المجموعة f

Elements	Energy, hartree
Ce	- 474.9848796
Pr	- 516.9456527
Nd	- 559.4471759
Pm	- 608.3108566
Sm	- 657.8711687
Eu	- 710.1525567
Gd	- 765.4251233
Tb	- 824.3657327
Dy	- 884.6301421
Ho	- 948.2339779
Er	- 1015.3859288
Tm	- 1085.7529372
Yb	- 1159.3837631
Lu	- 1236.2224939
Th	- 407.4357571
Pa	- 441.1343902
U	- 476.2597159
Np	- 513.2263586
Pu	- 553.7592219
Am	- 595.2631656
Cm	- 638.6358293
Bk	- 684.5290981
Cf	- 733.0030795
Es	- 783.7216023
Fm	- 836.6236104
Md	- 891.3433818
No	- 948.6214029
Lr	- 1005.5124435



الشكل.6. يوضح منحنى الطاقة الداخلية لعناصر مجموعات f

الطاقة في حالة تناقص داخل الكتل الذرية للعناصر كما هو ملاحظ لعناصر المجموعات الأخرى للجدول الدوري، إلي أقل طاقة داخلية كانت عند اخر عناصر مجموعة اللانثنيدات في نهاية الصف عند عنصر الليتيتيوم Lu المشع، لطاقة تصل إلي **hartree -1236.22**.

4. الخلاصة

استنتجنا أن دراسة نظرية دالة الكثافة الوظيفية DFT أعطت صورة أكثر وضوحاً عن حالة الطاقة الداخلية لعناصر الجدول الدوري، لتكون بدلك هذه الدراسة داعمة للدراسات الأولى في وصف حالة الجدول الدوري من ناحية المحاكاة الحوسبية لكل عنصر، و استنتجنا أن قيم الطاقة الداخلية للعناصر تقل كلما اتجهنا من اليسار إلى اليمن وكلما قلت قيم الطاقة كلما زاد استقرار العنصر و العكس في ذلك، قيمة الطاقة كانت سالبة وهذا يدل على استقرار العناصر، و لاحظنا أن الطاقة الداخلية للعناصر في هذه الدراسة تعتمد علي الحجم الذري لكل عنصر، بحيث كلما زاد حجم الذرة زادت الطاقة الداخلية و قل إستقرار العنصر و كلما قل الحجم الذري قلت الطاقة الداخلية و أصبحت أكثر إستقراراً للعنصر، و كانت أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "S" هي لعنصر الماغنيسيوم (Mg = -200.0779 hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "P" هي لعنصر الكريبتون (Kr = -2750.165017 hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "d" هي لعنصر الخارصين (Zn = -1778.955852 hartree) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "f" هي لعنصر اللوتيتيوم (Lu = -1236.2224939 hartree).

5. المراجع

1. Chemistry is Quantum Computing's Killer App | October 30, 2017 Issue – Vol. 95 Issue 43 | Chemical & Engineering News [Internet]. [cited 2018 Oct 19].
2. D. Young, Computational Chemistry (A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems).
3. A. L. Lehninger, D. L. Nelson, M. M. Cox, and M. M. Cox, Lehninger principles of biochemistry: Macmillan, 2005.
4. R. F. Doolittle, "Redundancies in protein sequences," in prediction of protein structure and the principles of protein conformation, ed: Springer, 1989, pp. 599-623.
5. Tsuji M (2015) Homology Modeling Professional for HyperChem, revision G1, Institute of Molecular Function, Saitama, Japan.
6. Wilkinson G, Gillard RD, McCleverty JA. Comprehensive Coordination Chemistry: Applications :Pergamon Press, 1987.
7. Kaufman, Myron J.; Trowbridge, C. G. "The Ionization Energy of Helium ." J. Chem. Educ. 1999 76 88.
8. Rioux, Frank; DeKock, Roger L. "The Crucial Role of Kinetic Energy inInterpreting Ionization Energies." J. Chem. Educ. 1998 75 537.
9. Computational Chemistry (A Practical Guide For Applying Techniques To Real-World Problems), D. Young, 2001.
10. Computational Chemistry Introduction to The Theory And Applications of Molecular and Quantum Mechanics 2nd, Errol G. Lewars, 2011.
11. Computational Chemistry Using The PC, Donald W. Rogers, 2003 COMPUTATIONAL ORGANIC CHEMISTRY, Steven M. Bachrach, 2007.
12. Theory and Applications in Computational Chemistry The First Decade of The Second Millennium, Enrico Clementi, Jean-Marie André, J. Andrew Mccammon, 2012.

13. Introduction to Computational Chemistry, 2 Ed, F. Jensen, 2007.

14. A Bird's-Eye View of Density-Functional Theory, Klaus Capelle, 2006.

15. A Chemist's Guide to Density Functional Theory, 2 Ed, W. Koch and M. Holthausen, 2001.

16. Density Functional Theory - John P. Perdew, 2003.

17. Density Functional Theory A Practical Introduction, D. Sholl And J. Steckel, 2009.