



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

ابوبكر مفتاح احسونه*¹، محمد زيدان²، مروة العمراوي³، عائشة محمد الزروق³

صفاء الحضيري³، حفصة مصباح فرحات⁴

قسم الكيمياء^{3,2,1}، قسم الرياضيات⁴ - كلية العلوم، جامعة سبها، ليبيا

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

ARTICLE INFO

المستخلص

Article history:

Received 29/01/2023

Received in revised form 15/05/2023

Accepted 21/05/2023

تم في هذه الدراسة حساب الطاقة الداخلية كدراسة منفردة لعناصر الجدول الدوري باستخدام 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 على الحجم الذري لكل عنصر، بحيث كلما زاد حجم الذرة زادت الطاقة الداخلية وقل استقرار العنصر و كلما قل الحجم الذري قلت الطاقة الداخلية و أصبحت أكثر استقراراً للعنصر، و كانت أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "S" هي لعنصر الماغنيسيوم ($Mg = 200.0779 = \text{hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "P" هي لعنصر الكريبتون ($Kr = 2750.165017 = \text{hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "d" هي لعنصر الخارصين ($Zn = 1778.955852 = \text{hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "f" هي لعنصر اللوتيتيوم ($Lu = 1236.2224939 = \text{hartree}$)، 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 get greater internal energy but less stability of this element, also the lower of atomic size will get less internal energy but became more stable for this element, so it was The best stable energy for "S" group is magnesium ($Mg = 200.0779\text{-hartree}$) while the best stable energy for "P" group is krypton ($Kr = 2750.165017\text{-hartree}$) while the best stable energy for "d" group is zinc ($Zn = 1778.955852\text{-hartree}$) finally the best stable energy for "f" group is lutetium ($Lu = 1236.2224939\text{-hartree}$) 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 وتقارير أصلية ذات دلالة في الكيمياء الحسابية، بما في ذلك تلك التي تعالج مشاكل البنية ونشاط الطاقة والتفاعلات الضعيفة، حيث أصبح استخدام هذه البرامج حتى وقتنا الحالي لسنة 2023م أداة روتينية لنمذجة الجزيئات والتفاعلات الكيميائية في الحالة الغازية. [1]

أيضاً تمكناً من حساب خصائص الجزيئات بشكل أدق منها العزم ثنائي القطب، طاقة الترابط، الأشعة تحت الحمراء، الرنين المغناطيسي، حساب الهندسة الجزيئية، تستخدم أيضاً في صناعة المستحضرات الصيدلانية ودراسة التفاعلات الأديوية وإنتاج نوع جديد من العقاقير، مفيدة في علم المواد، تعتبر رخيصة، سريعة، آمنة بيئياً. [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 الحاسوبية لمركب البنزويك تم بناؤها على أساس الهياكل البلورية التي قدمتها Cambridge structural باستخدام حزمة برنامج Gaussian06 بطريقة PM3-Semiepirical بحيث تم تحسينها بشكل منفصل باستعمال [4] Hyperchem-08، في هذه الدراسة تم استخدام برامج تعتمد على معادلات ميكانيكا الكم وتقريباتها الرياضية وهذه 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 إجراء 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 ستة عناصر كيميائية في المجموعة الثانية من الجدول الدوري. هي عوامل مختزلة قوية بحيث تعطي إلكترونات بسهولة. هي أقل نشاطاً من الفلزات القلوية، لكنها نشطة بما فيه الكفاية بحيث لا توجد

حرة في الطبيعة. بالرغم من أنها هشّة، إلا 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: البيرييليوم، 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-block تتميز بالتكوين الإلكتروني ns np [7] وتزيد 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 بزواج الإلكترون الخاص ب ns للمشاركة في تكوين الرابطة مع زيادة الحجم الذري. داخل المجموعة، تصبح حالة الأكسدة الأعلى أقل استقراراً 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 عناصر d-block جميعها معادن وبالتالي تتمتع بكل خواص المعادن من حيث جودة التوصيل للتيار الكهربائي وسهولة السحب والطرق وتكوين سبائك مع الفلزات الأخرى. تشكل عدداً كبيراً من الأيونات الملونة والبار مغناطيسية وذلك 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 مدارات d فارغة تسمح بدخول الأزواج الإلكترونية التنت تتواجد على اللجانادات. وتتعدد حالات الأكسدة وذلك للفرق بين الإلكترونات (n-1) والإلكترونات ns صغيرة مما يمكن من استخدامها في التفاعلات الكيميائية. [8]

فمن دراسة المطافية يبين الإشعاع (سواء كان كهرومغناطيسياً أو إشعاع جسيمات) مع المادة والتي تشمل الذرات والجزيئات، يمكن توقع وحساب المطافية مثل RAMAN,UV,NMR,IR وخاصة للعناصر، والمركبات المجهولة والجديدة مستخدماً 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 و 64 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 من 10 نانومتر إلى 400 نانومتر، وطاقتها تبدأ من 3 إلى 124 إلكترون فولت. [9]

وبهذا تكون الطاقة الكلية وهي مجموع الطاقين الحركية والكامنة، وتكون قيمتها سالبة وهي ضرورية لكي يبقى الإلكترون مرتباً بالذرة ولو كانت قيمتها أكبر من الصفر

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 الجزيئية والبنية الفراغية للحالات الانتقالية وطاقة الرابطة وطاقة التفاعل والمدرات الجزيئية وعزم ثنائي القطب والشحنات الذرية وترددات الاهتزازات ومطيافية IR و RAMAN وخصائص NMR هذا البرنامج يتعامل حتى مع ذرات صغيرة ويعطي القيم دقيقة جدا ويوفر الوقت والجهد.

تمت الحساب باستخدام برنامج Gaussian 06 وذلك باتباع الخطوات التالية لحساب طاقة العناصر الانتقالية والأشعة فوق بنفسجية المرئية لكل عنصر. [11-12]

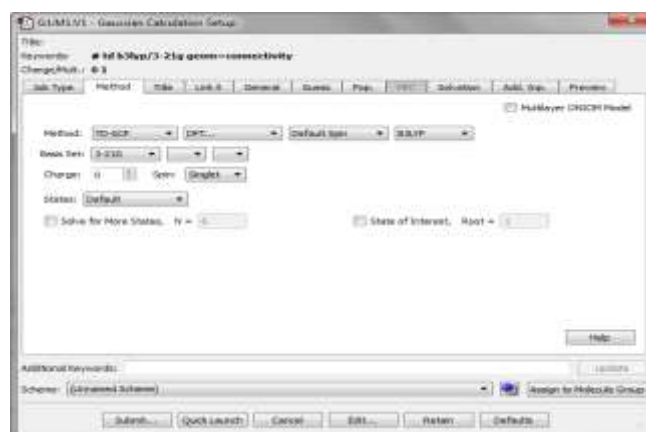
(موجبه) لامتك الإلكترون طاقة كافييه كي يفصل كليا عن مجال تأثير النواة، وكلما قلت الطاقة الكلية (زيادة حجم الذرة) كلما زاد الاستقرار. بينما طاقة التآين هي أدنى طاقة تكفي لانزع الإلكترون من الذرة في وضعها المستقر وحالتها الغازية، أو هي مقدار الطاقة بالكيلوجول اللازمة لنزع مول واحد من الألكترونات من مول واحد من الذرات الغازية، kJ/mol وحدة قياس طاقة التآين، تتناقص طاقة التآين مع زيادة العدد الذري في المجموعة الواحدة (أى كلما أنتقلنا إلى أسفل المجموعة). لعناصر المجموعة الواحدة توزيعات إلكترونية خارجية مشابهة لكن مع ازدياد عدد الكم الرئيسي (n) فإن متوسط بعد إلكترونات التكافؤ يزداد كذلك. أن ازدياد التباعد بين الألكترون والنواة يعني تجاذباً أضعف ما يزيد من سهولة إزالة الإلكترون

Create New Molecule Croup ← Element Fragments Gaussian 06



الشكل 1. يوضح الجدول الدوري والنافذة والعنصر

تم استخدام نظرية دالة الكثافة الوظيفية DFT ودالة الوظيفية الهجينة B3LYP

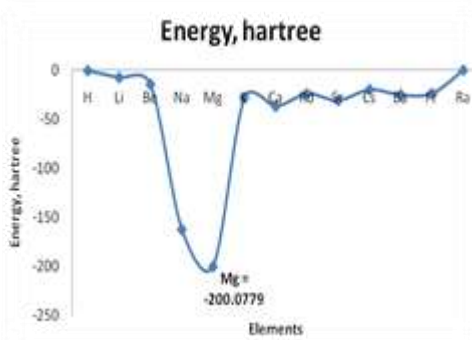


الشكل 2. نافذة حساب 3 لبرنامج Gaussian

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 الاختلاف المتباين في نتائج الطاقة الداخلية بين العناصر يوضح أثر الطبيعة الفيزيائية للعناصر مع التركيب الإلكتروني الناتج عن توزيعها بناءً على مستويات الطاقة الداخلية لكل عنصر، وبهذا تكون دالة الكثافة الوظيفية قد أعطت تفاصيل أكثر وضوحاً لنمط توزيع العناصر حسب خصائصها الفيزيائية، بحيث الشكل رقم 3 يوضح مدى الاختلاف 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 الماغنسيوم لطاقة تصل إلي -200.0779 hartree.

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

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

حيث المعادلة لدالة الكثافة الوظيفية:

$$EDFT[\rho] = T[\rho] + E_{ne}[\rho] + J[\rho] + Exc[\rho]$$

حيث E هي الطاقة، T هي الطاقة الحركية للإلكترونات، E_{ne} هي الإلكترون النووي طاقة الجذب (الكولومية)، J هي طاقة الإلكترون الطاردة (الكولومية)، و Exc 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، y، و z). على هذا النحو، فإن كل من المصطلحات أعلاه - T و E_{ne} و J و Exc وظيفية.

1.2 المجموعات الأساسية Basis Set

يتم تقريب الدالة الموجية الجزيئية على أنها تركيب خطي للمدارات الذرية LCAO ومن خلال هذا التقريب يمكن توليف (اصطناع) مدارات 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 المدارات الجزيئية وذلك من تركيب الخطي لهذه الدوال. (12-13)

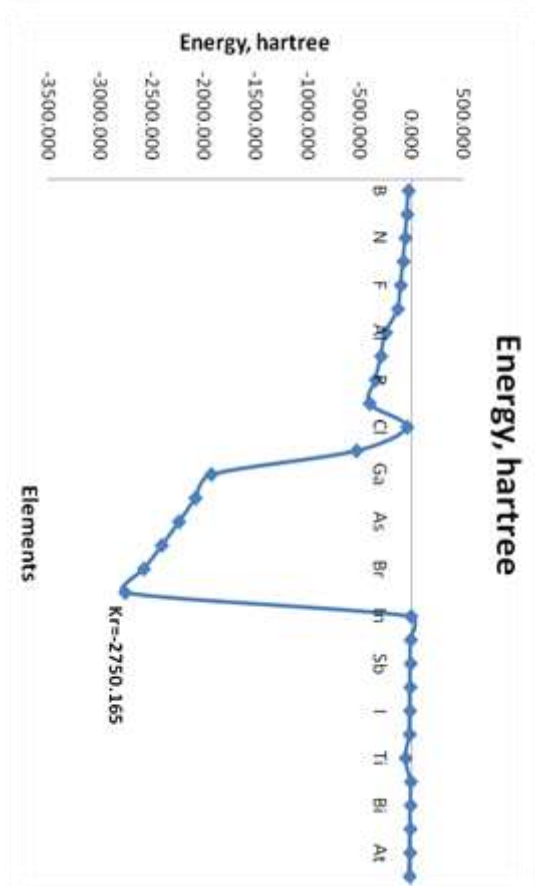
تم استخدام خاصية 6.311G وهذه من أحد خاصية المهمة على مجموعة الأساس ذات الأس الثلاثي triple Zeta واستخدمت لحساب العناصر الانتقالية في الدورة الرابعة من Sc إلى Zn واستخدمت خاصية Lan12DZ للعناصر الانتقالية في الدورة الخامسة والسادسة ولوحظ أن عناصر الانتقالية في الدورة السابعة لم تتمكن حسابها بأي خاصية من خواص Basis Set في الذرات الكبيرة لا يمكن استخدام مجموعات الأساس العادية لذا تم تطوير هذه الطريقة حيث تقوم باستبدال الإلكترونات في الطبقات الداخلية بتقريبات شبة مهمة وبالمقابل الاهتمام بالإلكترونات الطبقات الخارجية حيث تعبر عن جميع الخصائص الكيميائية مثل القوة الرابطة وطاقة التأيين.

[17-16]

3. النتائج والمناقشة

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 والأشكال 3، 4، 5 و 6 أعطت صورة عميقة لحالة كل عنصر بالطاقة الداخلية.



الشكل 4. يوضح منحنى الطاقة الداخلية 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 $-2750.165 \text{ hartree}$.

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

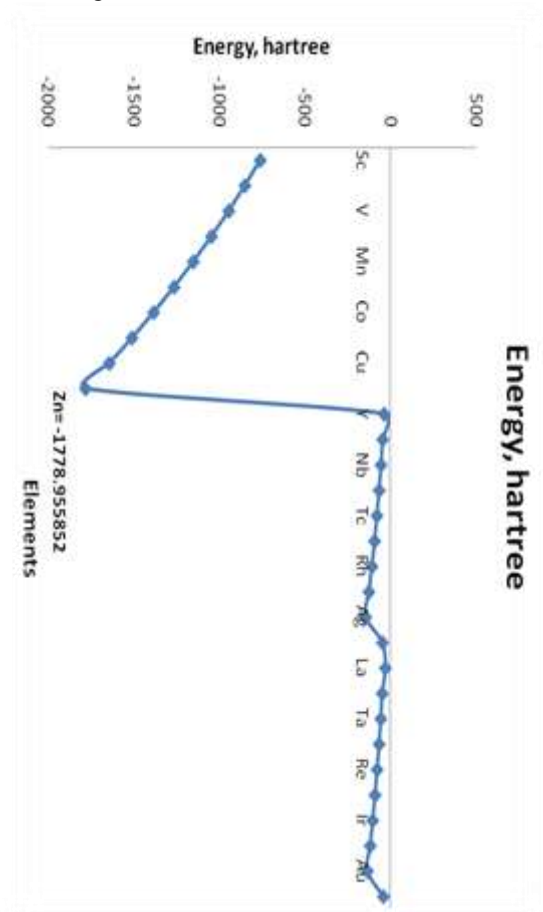
استقرار فكلما قلت طاقة العنصر كلما كان العناصر أكثر استقرار. تتراوح قيم الطاقة بين (-1778 إلى -31 HF) أقل قيمة طاقة تكون لعنصر Zn وأعلى قيمة تكون عند عنصر La. و توجد علاقة طردية بين طاقة العناصر والطول الموجي وتتراوح قيم الطول الموجي من (112 إلى 23231.37 nm) وكانت أعلى قيمة عند عنصر La وأقل قيمة عند Zr.

نتائج عناصر f الانتقالية الداخلية ذات الصفة الإشعاعية، وهي الميزة الهامة لهذه 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

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

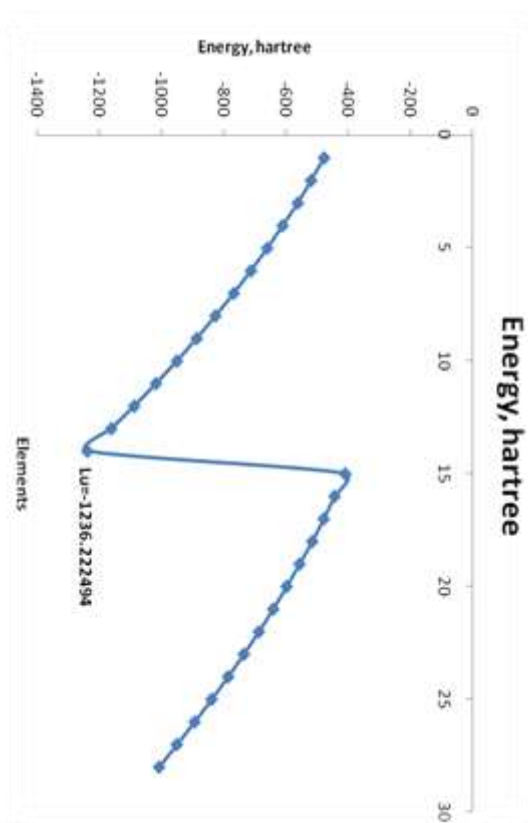


الشكل. 5. يوضح منحنى الطاقة الداخلية لعناصر مجموعات d

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

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 in Interpreting 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.



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، إلى أقل طاقة داخلية كانت عند آخر عناصر مجموعة اللانثانيدات في نهاية الصف عند عنصر اللوتيتيوم Lu المشع، لطاقة تصل إلى -1236.22 hartree .

4. الخلاصة

استنتجنا أن دراسة نظرية دالة الكثافة الوظيفية DFT أعطت صورة أكثر وضوحاً عن حالة الطاقة الداخلية لعناصر الجدول الدوري، لتكون بذلك هذه الدراسة داعمة للدراسات الأولى في وصف حالة الجدول الدوري من ناحية المحاكاة الحاسوبية لكل عنصر، واستنتجنا أن قيم الطاقة الداخلية للعناصر تقل كلما اتجهنا من اليسار إلى اليمين 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 ($\text{Mg} = -200.0779 \text{ hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "P" هي لعنصر الكريبتون ($\text{Kr} = -2750.165017 \text{ hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "d" هي لعنصر الزنك ($\text{Zn} = -1778.955852 \text{ hartree}$) و أفضل طاقة مستقرة لعناصر مجموعات "f" هي لعنصر اللوتيتيوم ($\text{Lu} = -1236.2224939 \text{ hartree}$).

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.