مجلة البحوث العلمية

جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية

طرابلس – ليبيا

(البحوث العلمية)

مجلة علمية محكمة نصف سنوية تصدر مرتين سنوياً عن جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية -طرابلس – ليبيا

منشورات جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية 2022م

جميع الحقوق محفوظة

رقم الإيداع القانوني: 2016/201 -دار الكتب الوطنية – بنغازي

النسخة الورقية ISSN: 2707- 9546 -

النسخة الإليكترونية ISSN: 2707- 9554 -

Journal of Scientific Research - Tripoli Libya

لا يسمح بإعادة إصدار محتويات هذه المجلة أو تخزينها في نطاق استعادة المعلومات أو نقلها أو استنساخها بأي شكل من الأشكال دون إذن خطي مسبق من الناشر.

All rights reserved. No part of this Journal maybe reproduced or transmitted in any form or any means، electronic or mechanical، including photocopying recording or by any stored retrieved system، without the permission from the publisher.

رؤية ورسالة وأهداف المجلة

الرؤية:

- تسعى مجلة البحوث العلمية لأن تكون الخيار الأول للباحثين الراغبين بنشر مقالاتهم البحثية على كافة المستويات المحلية والعربية والإقليمية والدولية.

الرسالة:

- نشر الأبحاث والدراسات العلمية المتميزة والأصيلة وتمكين الباحثين من الوصول إليها والرقي بمستوى البحث العلمي على كافة الأصعدة المحلية والعربية والإقليمية والدولية.

الأهداف:

- نشر الأبحاث والدراسات العلمية وتعزيز النشر العلمي في مختلف تخصصات العلوم الاجتماعية والتطبيقية للاستفادة منها محلياً وعربياً وإقليمياً ودولياً.
- استهداف المختصين من الباحثين في المجالات ذات العلاقة بتخصص الجامعة الأكاديمي.
- تقديم المجلة كنموذج رائد محلياً وعربياً وإقليمياً ودولياً في مجالات تخصص العلوم الإنسانية والتطبيقية.

مجلة (البحوث العلمية)

مجلة (البحوث العلمية) العدد (14) من النصف الثاني من السنة السابعة 2022م

منشورات مجلة (البحوث العلية) جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية

أسعار المجلة

الجهات	سعر النسخة داخل ليبيا	سعر النسخة خارج ليبيا
الطلبة	3 د.ل	4 دولارات أمريكية
المشتركون	5 د.ل	6 دولارات أمريكية
الأفراد	7 دولارات أمريكية	6 دولارات أمريكية
الوزارات والهيئات والمؤسسات وما في حكمها	10 دولارات أمريكية	12 دولاراً أمريكي

تنويه:

إن تقديم البحوث المنشورة أو تأخيرها في ترتيب الصفحات لا يعني المفاضلة لكن متطلبات التنسيق الفني هي التي تتحكم في هذا الترتيب. وإن البحوث المنشورة لا تعبر بالضرورة عن رأي المجلة أو الجامعة.

هيئة تحرير مجلة

(البحوث العلمية)

جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية

المشرف العام: د. المبروك مفتاح أبو شينة

رئيس التحرير: أ.د. عابدين الدردير الشريف

أعضاء لجنة التحرير:

أ. أكرم الهادي محمد

م. أشرف القماطي

التصحيح والمراجعة اللغوية:

د. محمود عمار المعلول

د. انتصار علي الشريف

الهيئة الاستشارية للمجلة

ر.م	الاسم	القسم	الكلية	الجامعة	الدولة
1	أ.د. أسامة بن غازي المدني.	قسم الإعلام	كلية العلوم الاجتماعية	جامعة أم القرى	السعودية
2	أ.د. أمطير سعد غيث	قسم التاريخ	كلية الآداب	جامعة المرقب	ليبيا
3	أ.د. تيسير أحمد محمد أبو عرجة	قسم الصحافة	كلية الإعلام	جامعة البتراء	الأردن
4	أ.د. جمال محمد جابر عبد الله	قسم الترجمة	كلية العلوم الإنسانية والاجتماعية	جامعة الإمارات العربية المتحدة	الإمارات
5	د. زكية علي الديب	قسم الترجمة	مدرسة اللغات	الأكاديمية الليبية	ليبيا
6	أ.د. علي الدوكالي	قسم المكتبات والمعلومات	كلية الآداب	جامعة طرابلس	ليبيا
7	أ.د. علياء عبد الفتاح رمضان	قسم الإعلام التربوي	كلية التربية النوعية	جامعة طنطا	مصر
8	أ.د. عمر إبراهيم حسين		كلية القانون	جامعة طرابلس	ليبيا
9	أ.د. عياد أبوبكر هاشم	قسم الفنون التشكيلية	كلية الفنون والإعلام	جامعة طرابلس	ليبيا
10	د. فتحي خليفة اليعقوبي.	قسم الهندسة المدنية	كلية الهندسة	جامعة طرابلس	ليبيا
11	د. فرج محمد نصر بن لامة	قسم العلوم السياسية	كلية الاقتصاد و العلوم السياسية	جامعة طرابلس	ليبيا
12	د. فرحة مفتاح عبد الله بشر	قسم اللغة العربية	كلية الآداب	جامعة سرت	ليبيا
13	أ.د. فيصل إبراهيم محمد المقدادي	قسم المسرح	كلية الفنون الجميلة	جامعة أربيل	العراق
14	د. لبنى رحموني	قسم العلوم الإنسانية	كلية العلوم الإنسانية والتطبيقية	جامعة أم البواقي	الجزائر
15	د. محمد عبد الفتاح عوض	قسم الإعلام	كلية الآداب	جامعة الزقازيق	مصر
16	أ.د. محمد عبد الله لامة	قسم الجغرافيا	كلية الآداب	جامعة طرابلس	ليبيا
17	أ.د. محمد علي غريب	قسم الإعلام	كلية العلوم الاجتماعية	جامعة أم القرى	السعودية
18	أ.د. مفتاح دخيل	قسم الجغرافيا	كلية الآداب	جامعة طرابلس	ليبيا
19	د. وجدان ميلاد الشتيوي	قسم علم النفس	أكاديمية الدراسات العليا	بنغازي	ليبيا

- الأسماء تم ترتيبها أبجدياً

قواعد النشر وشروطه بمجلة (البحوث العلمية)

بجامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية

نبذة عن المجلة:

مجلة محكمة نصف سنوية تصدر عن جامعة **إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية**-طرابلس -ليبيا باللغتين العربية والإنجليزية، وتهتم المجلة بنشر البحوث والدراسات العلمية، إلى جانب عرض ملخصات الكتب والدوريات، والرسائل العلمية (الماجستير والدكتوراه)، والتقارير الصادرة عن المؤتمرات والندوات وورش العمل من داخل ليبيا وخارجها.

أهداف المجلة:

- تفعيل البحث العلمي وإثراؤه في كافة المجالات العلمية ذات العلاقة بالتخصصات العلمية في الجامعة.
- الاهتمام بقضايا التنمية الشاملة في ضوء المتغيرات المحلية والإقليمية والدولية.
- إتاحة الفرصة للباحثين لنشر بحوثهم ودراساتهم العلمية، ونقل أفكارهم العلمية من أجل توسعة دائرة المعرفة لدى الباحثين وصانعي القرارات والممارسين في داخل ليبيا وخارجها.
- خلق حوار علمي بنّاء بين الباحثين والمهتمين بالموضوعات المستجدة في كافة المجالات العلمية ذات العلاقة بالتخصصات العلمية

قواعد النشر: يشترط في الموضوعات المقبولة للنشر بالمجلة إتباع القواعد والشروط الآتية:

1- **البحوث والدراسات:** يشترط في البحوث والدراسات المقدمة للنشر في المجلة أن تتصف بالآتي:

أ. أصالة أفكار البحث وموضوعه، وكونه لم يسبق نشره أو تقديمه للنشر في مجلة أخرى ولم يكن جزءًا من رسالة ماجستير أو أطروحة دكتوراه.

ب. سلامة المنهج العلمي المتبع في البحث.

ج. سلامة لغة البحث ووضوح أفكاره وترابطها.

2- **الإشارة إلى المرجع:** عند التوثيق تتم الإشارة إلى مصادر البحث ومراجعه بأرقام متسلسلة وفقاً لترتيب ورودها فيه، وكذلك الأمر في ثبت المصادر والمراجع، وعلى الباحث أن يلتزم بالأسلوب التالي: -

(أ) في حالة الكتب يذكر اسم المؤلف كاملاً، عنوان الكتاب، مكان النشر، سنة النشر، ورقم الصفحة أو الصفحات.

(ب)في حالة البحوث أو المقالات المنشورة في دوريات متخصصة، يذكر اسم الكاتب كاملاً، واسم الدورية، ورقم العدد، وتاريخ النشر، ورقم الصفحة أو الصفحات التي يشغلها المقال أو البحث.

(ت) إذا كان النقل غير مباشر، يذكر صاحب المصدر الأصلي.

3- **الهوامش: يقتصر** استخدام الهوامش على شرح أو توضيح بعض النقاط الغامضة التي لا يتسع المجال لتناولها في المتن، أو بهدف تسليط الضوء عليها، وترقم كل صفحة بشكل مستقل، ويظهر الهامش في أسفل الصفحة.

4- **قائمة المراجع والمصادر:** يراعى في كتابة قائمة المراجع والمصادر كتابة المراجع العربية أولاً، ثم الأجنبية، على أن تتضمن فقط ما اعتمد عليه الباحث وأشار إليه في متن البحث، ويرتب كل منها ترتيباً هجائياً، وأن تكتب على النحو الآتي:

أولاً: المراجع العربية:

- المهدي غنية "مبادئ التسويق"، (طرابلس: الجامعة المفتوحة (2002).).
- عبد السلام أبو قحف "مقدمة في إدارة الأعمال الدولية"، (الإسكندرية: مطبعة الإشعاع الفنية (1998).

- محمد المكي "أهمية المراقبة الداخلية للمراجع الخارجي"، (طرابلس: مجلة دراسات في الإدارة والأعمال المصرفية)، العدد 6 (1984)، ص ص: 5 – 18.

ثانياً: المراجع الأجنبية:

- Drury، Colin (2000)، Management and Cost Accounting، 5th edition، (London: Thomson Learning).
- Kaplan، Robert (2000)، "Balance without profit"، Financial Management، (January)، 23 26.

ثالثاً: مصادر ومراجع الإنترنت:

- Andersen، Arthur، (1997)، Learning about professional development: Our commitment to training، : http://WWW. Arthurandersen.com/careers/training.asp.

5- **الشروط العامة والفنية:**

- أن يكتب الباحث اسمه ودرجته العلمية ووظيفته وجهة عمله في الصفحة الأولى من بحثه، مع ضرورة ذكر العنوان الذي تتم مراسلته عليه، ورقم الهاتف والفاكس والبريد الإلكتروني.
- أن تكون البحوث والدراسات العلمية مكتوبة باللغة العربية، كما تقبل باللغة الإنجليزية بشرط إرفاقها بملخص باللغة العربية لا يتجاوز 150 كلمة.
- ألا يزيد عدد الصفحات عن (20) صفحة، بما فيها الجداول والمراجع والأشكال التوضيحية من صور ورسومات.
- أن تكون البحوث والدراسات العلمية مطبوعة على برنامج Microsoft Word، وتقدم في شكل ورقي بحجم (A4) مع ترك مسافة مفردة بين الأسطر (Single Spaced)، وعلى وجه واحد، بالإضافة إلى نسخة مخزنة على قرص ليزري (CD)، مع إرفاقها بنسخة من السيرة الذاتية للباحث.

- أن تكون كتابة البحوث المكتوبة باللغة العربية بالخط:((Times New Roman).). أما البحوث المكتوبة باللغة الإنجليزية فتكتب بالخط المعروف باسم (Times New Roman).
- أن يكون حجم الخط على النحو التالي:
  - ✓ بنط 18 داكن للعناوين الرئيسة.
  - ✓ بنط 16 داكن للعناوين الفرعية.
  - ✓ بنط 14 للمتن.
  - ✓ بنط 12 للمستخلص بخط مائل.
  - ✓ بنط 10 للهوامش والحواشي
- تكون الهوامش على النحو التالي:
  - ✓ أعلى وأسفل 2.5 سم.
  - ✓ أيمن 3 سم.
  - ✓ أيسر 2.5 سم.
- تخضع المواد العلمية المقدمة للنشر في المجلة للتقويم العلمي واللغوي من قبل أساتذة متخصصين تحددهم هيئة التحرير بشكل سري، يحق للمجلة مطالبة صاحب المادة العلمية بإجراء التعديلات الواردة من المقومين، كما يحق للمجلة إجراء التعديلات الشكلية فقط متى تطلب الأمر ذلك دون أخذ الإذن المسبق من الباحث، كما يجوز لهيئة التحرير الاستعانة بأكثر من محكم عند الضرورة، ويبلغ الباحث بقبول البحث من عدمه أو تعديله وفقاً لتقارير المحكمين.
- لا يحق للباحث الذي لم يقبل عمله العلمي للنشر أن يطالب باسترجاعه.
- على الباحث أن يتعهد كتابياً بعدم نشر البحث أو الدراسة بأية وسيلة أخرى إلا بعد مرور سنتين من تاريخ النشر.
- جميع الآراء الواردة في المجلة تعبر عن آراء أصحابها، ولا تعبر بالضرورة عن وجهة نظر المجلة أو الجامعة.
- تلتزم المجلة بإشعار الكاتب بوصول عمله وإحالته إلى هيئة التحرير في موعد غايته أسبوعان من تاريخ استلامه.
- تُشعر المجلة الكاتب بصلاحية عمله للنشر خلال أسبوعين من استلام ردود المحكمين.
- تعلم المجلة الكاتب في أيّ عدد سيتمّ نشر بحثه.
- تنتقل حقوق طبع البحث ونشره إلى المجلّة عند إعلام صاحب البحث المقبول للنشر بقبوله.
- يتم ترتيب نشر البحوث في أعداد المجلة وفقاً لاعتبارات فنية بحتة وأولوية تسليمها للمجلة، ولا علاقة لها بأهمية البحث أو مكانة الباحث.
- يحصل الباحث على ثلاث نسخ من عدد المجلة عند نشر بحثه أو دراسته.

6 – عناوين المراسلة: كافة البحوث والدراسات **وجميع المراسلات المتعلقة بالمجلة ترسل باسم رئيس تحرير مجلة (البحوث العلمية) جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية– طرابلس -- ليبيا**، وذلك على العنوان التالي:

العنوان:(البحوث العلمية) مجلة **جامعة إفريقيا للعلوم الإنسانية والتطبيقية**-، طرابلس-ليبيا.

أو ترسل إلى العنوان البريدي التالي: **صندوق بريد: 83060 بريد شارع الزاوية-طرابلس -ليبيا.**

أو ترسل على التالي: **البريد الإلكتروني:**Info@africaun.edu.Ly

الهاتف:218217291428+

بريد مصور:218217291428+

موقع الجامعة على الإنترنت:WWW.africauniversityedu.ly

حساب تثبيط تآكل الالومنيوم بواسطة بعض الكربوهيدرات

عبدالحميد محمد العزومي ,ماجستير كيمياء ، في المعهد العالي للعلوم و التقنيات الطبية / طرابلس

نزهة مختار العلوص ، ماجستير كيمياء بالمعهد العالي سوق الخميس

- Hamidch768@Gmail.com

- Nozhamakthar73@Gmail.com

الملخص

لقد اجرينا حساب DFT على الجلوكوز و الفركتوز و المالتوز والسكروز كمثبطات تآكل للألومنيوم مع التحسين الكامل الهندسي باستخدام B3LYP/6-31-G مستوى الاروبتال d, p لإيجاد علاقة بين التركيب الجزئي وعملية تثبيط التآكل ، ومن خلال المدارات الحدودية والبار مترية الكمية مع وظيفة الديناميكا الحرارية ΔG لامتصاص مثبطات الالومنيوم، وجد ان الجلوكوز والفركتوز هما الاكثر كفاءه يليهما اللاكتوز والمالتوز ويظهر السكروز تأثير تثبيط ضعيف .

الكلمات الدليلية Keywords

Aluminum, inhibitors, Corrosion, Carbohydrates, DFT

Abstract:

We have performed a DFT calculation on glucose, fructose, lactose, maltose and sucrose as corrosion inhibitors of aluminum with complete optimization of geometries using B3LYP/6-31 G LEVEL (D, P) to find a relation between the molecular structure and corrosion inhibition. Frontier orbital and quantum parameters together with calculated thermodynamic function ΔG for adsorption of the inhibitors on aluminum are reported. Glucose and fructose are found to be the most efficient, followed by lactose and maltose. Sucrose shows poor inhibitive effect.

1- المقدمة

يحتوي الألومنيوم على عدد كثير من التصنيفات كمعدن مخلوط او نقي ويدخل في عدة تطبيقات صناعية بسبب قيمته القياسية السلبية الأكثر ود [1]، في السنوات الاخيرة بحماية البيئة والآثار الخطرة للاستخدام المواد الكيميائية فقد تغير النهج التقليدي لمثبطات التآكل تدريجياً بحيث ان تؤخذ بعض الجوانب في الاعتبار عند تطوير مثبطات التآكل وهي سميتها وتأثيرها على التلوث البيئي. تمت دراسة المنتجات الطبيعية إلى حد كبير كمثبطات للتآكل من المعادن باستخدام استخراج الخام من مصادر مختلفة مثل المنتجات النقية المستمدة اساساً من زراعة النباتات. لذلك كان هناك عدد كثير من المقالات البحثية التي تستخدم المنتجات الطبيعية كمثبطات للتآكل [2,3]. تمت تجربة الكربوهيدرات كمثبطات للتآكل لأنظمة مختلفة من المعدن في التحليل الكهربائي [4,7] .

وقد تم ذكر ان السكروز لديه كفاءه مثبطات جيده اتجاه الحديد في الأحماض المعدنية المختلفة في درجة حرارة 25م^{o}. ودراسة تأثير الكربوهيدرات على تأثير الالومنيوم في حامض النتريك عند درجة 35م^{o} والجلوكوز هو مثبط أفضل من الفركتوز، ويكون اللاكتوز أكثر فاعلية من السكروز حيث اظهر السكروز تأثيراً مثبطاً سيئاً للغاية عندما يكون التركيز منخفض، وإن السكريات لها كفاءه معتدلة اتجاه النحاس في حمض النيتريك [5a, 5b] والجلوكوز والسكروز اظهرا مثبطات جيده للتآكل من الالومنيوم في المحاليل القلوية.

ولقد كان الهدف من هذه الورقة هو إعطاء المزيد من الأفكار النظرية عن الجلوكوز والفركتوز والمالتوز والسكروز من اجل البحث عن علاقة بين التركيب الجزئي لهذه المركبات وموانع التآكل الالومنيوم. وايضاً هذه الورقة لمقارنة بين النتائج المحسوبة مع العمل السابق على تثبيط الحديد [6].

نظرية الكثافة الوظيفة [7] ,[G 9a] DFT/B3LYP تم استخدام حساب البارامترات الكمية التي يمكن الحصول عليها من حساب طاقة جبس ΔG لامتصاص مثبطات الالومنيوم .

النتائج والمناقشة:

طاقة المدارات الجزئية الحدودية وفجوة الطاقة ΔE و الصلابة (η) والنعومة (σ) من حساب مؤشر الكهروسالبية مع الطاقة جبس ΔG وجزء من الأكثرون المنقول NN مع طاقة ΔG من امتصاص مثبطات على الالومنيوم لهذه المركبات، ووفقاً لنظرية المدارية الجزئية [8] ترتبط E_{HOMO} and E_{LUMO} لجزئي المانع يكون له علاقة جهد تأين (I) و الفه الإلكترونية (A) على التوالي .

$$I = - E_{HOMO} \quad \text{and} \quad A = -E_{LUOM}$$

تعطى الكهروسالبية المطلقة (X) والصلابة المطلقة (η) من المثبط، والنعومة (σ) ومؤشر الكهربائية (ω) وتكون معطاه بواسطة [9a]

$$X = \frac{1+A}{2} \qquad \eta = \frac{\quad}{2} \qquad \sigma = \frac{\quad}{\eta} \qquad \omega = \frac{\quad}{\eta 2}$$

حيث μ تمثل الجهد الكيـ ، تكون مساوـ ية (X) [9] . وتمثل ω مؤشر الكهربية كمقياس لقوة الكهربائية لجزئي، وحيث يتم تجميعها معا وسوف تتدفق من الاسفل x (المثبط) إلى الاعلى x (المعدن) حتى تصبح الجهود الكيميائية متساوية. يتم استخدام القيم التي تم الحصول عليها من (x)،(y) لحساب جزء الأكثرون المنقول (NN)، ومن المانع إلى السطح المعدني على النحو التالي

$$\Delta N = \frac{X_{metal} - X_{inh}}{2(\eta_{metal} + \eta_{inh})}$$

حيث X_{inh} , X_{metl} يدل على الكهربائية المطلقة η_{inh} , ـل للمعدن و المثبط على التوالي . ويودي الاختلاف في السالبية الكهر توضح النتائج المحسوبة لطاقات المدارات الجزئية للمثبـ

Compounds	$E_{HOMO(ev)}$	$E_{LUOM(ev)}$
Al	-5.985	-0.438
Glucose	-6.897	-1.640
Fructose	-6.729	-0.520
Lactose	-4.461	0.064
Maltose	-6.790	1.124
Sucrose	-6.590	1.019

ووفقاً للنظرية المدارية الجزئية الحدودية FMO فإن التفاعل الكيمائي هو دالة التفاعل بين مستويات LUOM , HOMO للأنواع المتفاعلة [11] .

حيث ترتبط طاقة E_{HOMO} بقدرة التبرع للإلكترون للجزئي تشير القيمة العلية E_{LUOM} إلى ميل الجزئي إلى التبرع بالإلكترونات لجزئي القابل من ذو الطاقة المدارية المنخفضة الفارغة [12]. تشير طاقة المدار الجزئي الفارغة بأنها منخفضة لـ E_{LUOM}، إلى القدرة الجزئي على قبول الإلكترون [13]، ولذلك كلما انخفضت قيمة E_{LUOM} كلما زادة قدرة الجزئي على قبول الإلكترونات. وبالتالي فإن قدرة الرابطة المثبطة على سطح المعدن تزداد بزيادة HOMO وتناقص قيم الطاقة LUOM وتمت مقارنة طاقة LUOM،

HOMO [14] للألمونيوم بالفلور المحسوب لمركبات الكربوهيدرات لتحديد نوع التفاعل وترجع فجوات LUOM , HOMO كمثبطات تفاعل الالمونيوم في الجدول 2 ،وجميع القيم الكمية الكيميائية المحسوبة في الجدول (3)

جدول 2

Inhibition	$LUMO_{inh}$-$HOMO_{Al}$ (eV)	$LUMO_{Al}$–$HOMO_{inhib}$ (eV)
Glucose	4.3454	6.4647
Fructose	5.4649	6.2971
Lactose	6.0501	4.0282
Maltose	7.1106	6.3578
Sucrose	7.0053	6.1578

من الجدول السابق يمكين ملاحظة ان الألمونيوم يعمل كمثبطات لقاعدة لويس، حيث يعمل الجلوكوز والفركتوز كمحض لويس. لذلك سوف يستخدم الالمونيوم اوربتال HOMO لمثبطات الجلوكوز والفركتوز وسيكون للتفاعل مقدار معين من الخاصية الايونية لأن قيم فجوة $LUOM_{inhib} - HOMO_{Al}$ تنخفض تقريبا ما بين 4-5 فولت.

لا يمكن توقع وجود رابطة تساهمية قوية إلا إذا كانت فجوة $HONO_{Fe} - LUOM_{inhib}$ تقارب صفر [15] .

تم العثور على تفاعلات الالمونيوم مع مثبطات تكون اقوى من الحديد [6] . والتي قد تكون بسبب الفجوة الاصغر في الطاقة ($ELUOM - E_{HOMO}$) من الالمونيوم (5.5529 فولت) مقارنة بالفجوة الحديد (7.7514 فولت). ويعمل مثبط اللاكتوز والمالتوز والسكروز كقاعدة لويس، وبينما يعمل الالمونيوم كمحض لويس (جدول2). يعمل الفركتوز والجلوكوز والمالتوز والسكروز بمثابة مثبطات أنوديه.

فصل الطاقة $\Delta E_{gap} = (ELUOM - EHOMO)$

تعتبر طاقة الفصل كمياً موضح بالجدول 3. وهي دالة على تفاعل جزئي المانع اتجاه الامتزاز على السطح المعدني مع انخفاض فجوة الطاقة (ΔE_{gap}) تؤيد تفاعلية الجزئي مما يودي زيادة كفاءة المانع [16]. تم معالجة فعالية مركبات الكربوهيدرات قيد التحقيق كمثبطات من خلال تقيم مقياس التفاعل. حيث تم وضع السالبية الكهربائية والصلابة الكيميائية η، والنعومة σ، وجزء الإلكترونات المنقول ΔN، والكهربائية ω موضحا في الجدول (3)

جدول 3 يوضح

Quantum parameter	Fructose	Glucose	Lactose	Maltose	Sucrose
E_{HOMO} (eV)	-6.8975	-6.7299	-4.4610	-6.7906	-6.5906
E_{lumo}(eV)	-1.6403	-0.5208	0.0644	1.1249	1.0196
ΔE_{gap}	5.2572	6.2091	4.5254	7.9155	7.6102
I (eV)	6.8975	6.7299	4.4610	6.7906	6.5906
A(eV)	1.6403	0.5208	-0.0644	-1.1249	-1.0196
X (eV)	4.2689	3.6253	2.1983	2.8328	2.7855

η (eV)	2.6286	3.1045	2.2627	3.9577	3.8051
Σ	0.3804	0.3221	0.4419	0.2526	0.2628
ΔN	-0.0980	-0.0353	0.1003	0.0279	0.0321
ω	3.4663	2.1167	0.9197	1.0138	1.0195

X_{Al} =3.2029 η_{Al} = 2.7764

يمكن التميز بين ميول الترابط للمثبطات اتجاه ذرة المعدن من حيث (HSAB) (الصلبة – اللينة – الحامضية – القاعدية) ومفاهيم التفاعل المتحكم فيه [17,18]. القاعدة العامة التي يقترحها مبدأ HSAB إن الاحماض القاسية تفضل ان تكون مع القواعد الصلبة الناعمة، وان الاحماض اللينة تكون مع القواعد الناعمة ذرات المعدن تشبه الاحماض اللينة [19] وتحتوي الجزئيات الصلبة على فجوة HOMO -LUOM [[20 . وبالتالي فإن مثبطات القواعد اللينة هي الاكثر فعالية مرة واحد بالنسبة للمعادن[16]، ولذلك من المتوقع ان يكون للفركتوز والجلوكوز واللاكتوز الذي به أدني فجوه في الطاقة وأعلى ليونة، أكبر كفاءة تثبيط بالمقارنة مع المالتوز والسكروز.

ويمكن تأكيد ذلك من خلال حساب معاملات كمية كيميائية اخرى، والتي تقس بالليونة (σ) وبالتالي تفاعله. ومن الجدول (3) يمكن ملاحظة ان الفركتوز و الجلوكوز لهما قيم اكبر اتجاه للإحساس بالكهربائية من اللاكتوز والمالتوز والسكروز ،وهذا يدل على ان المانع ذو قيمة عالية لنعومة وهو الافضل لأنه اكثر تفاعلاً من الجزئي القاسي (الصلب) (21) .

تم حساب جزء الإلكترونات المنقولة ΔN في الجدول (3) لفركتوز والجلوكوز واللاكتوز ويوضح مؤشر الكهربائية (ω) قدرة جزئيات المانع على قبول الأكثرون من الالمونيوم ويمكن ملاحظه ان الفركتوز والجلوكوز يكون لهما أعلى قيمة كهربائية مقارنة باللاكتوز والمالتوز، مما يؤكد قدرتها العالية على قبول الأكثرون. وهذا بسبب انخفاض نسبة سكر الجلوكوز والفركتوز مقارنة مع نسبة اللاكتوز، المالتوز، السكروز. اي يعمل الالمنيوم كقاعدة لويس بينما يعمل الفركتوز والجلوكوز كأحماض لويس (مثبط كاثود).

يتم حساب قيم ΔG لامتصاص الكربوهيدرات التي تم التحقق منها على سطح الالمنيوم معطاه بالجدول (4). جميع قيم ΔG السالبة تشير إلى عملية تلقائية للجلوكوز والفركتوز يمكن الاختلاف بين متطلبات الفيزيائية والكيميائية في حجم التغيرات في طاقة جبس الحرة (22، 25). وبشكل عام تكون قيمة ΔG في حدود (0، 40-)

كيلوجول/ مول للادمصاص الفيزيائي 80 إلى 400-كيلوجول/ مول للامتصاص الكيميائي، والاليه المقترحة للاكتوز و المالتوز و السكروز هي عملية ادمصاص فيزيائي لإن ΔG تكون في المدى 36.3228 – إلى 97.5525 كيلوجول/ مول (26) .مثبط الكاثود جلوكوز وتكون قيمة ΔG 132.1742 – كيلوجول/مول اكثر سالبيه من تفاعل الفركتوز 117.9524- كيلوجول/مول .

ليس تفاعل $LUOM_{inhib}$ - $HOMO_{Al}$ من الجلوكوز 3.836 فولت ويكون اقوى من الفركتوز 4.4116فولت كما تتفق القيم المحسوبة (ΔN)، (ω) المعطاة من الجلوكوز اكبر من الفركتوز وهذا يكون متفق مع العمل التجربي (4) . بالنسبة لمثبط انودي تكون ΔG للاكتوز اكثر سالبية من المالتوز و السكروز لإن لحدوث تتدخل قوي بين $LUOM_{inhib}$ $HOMO_{Al}$ مقارنة مع المالتوز و السكروز جدول(2) كما وإن قيم ΔN ، ω اكبر مع العمل التجريبي (4b) لذلك يتبع كفاءة التثبيط الاتجاه الجلوكوز> فركتوز> لاكتوز> مالتوز> سكروز

النتائج

1- جميع قيم ΔG السالبة تشير إلى عملية الادمصاص التلقائي.
2- الكربوهيدرات التي تم بحثها تظهر أفضل تدخل مع الالمونيوم من ذلك مع الحديد.
3- يمكن ان تلخص إلى ان الجلكوز والفركتوز يمكن ان يكون مثبطاً جيداً للألمونيوم يليه اللاكتوز والمالتوز والسكروز لأنه يوافق النتائج التجريبية

المراجع

[1] J.L.M. Mendoz, J.G. Chacon-Nava, G. Zavala-Olivares, M.A. Gonzales-Nunez, S. Turgoose, Corros. Eng., 58, 554 (2007).
[2] M.A. Shaker, H.H.Abdel-Rahman, Am. J. Appl. Sci., 4, 554 (2007).
[3] M.S. Abdel-Aal, M.S. Morad, Br. Corros. J., 36, 253 (2001).
[4] M.M. El-Naggar, Corros. Sci., 49, 2226 (2007).
[5] Y. Feng, K.S. Siow, W.K. Teo, A.K. Hsieh, Corros. Sci., 41, 829 (1999).
[6] H.L. Wang, R.B. Liu, J. Xin, Corros. Sci., 46, 2455 (2004).
[7] G. Mu, X.Li, J. Coll. Interf. Sci, 289, 184 (2005).
[8] L. Larabi, Y. Harek, O. Benali, S. Ghalem, Prog. Org. Coat., 54, 256 [2005].
[9] K Laarej, H. Abou El Makarim, L. bazzi, R. Salghi, B. Hammouti, Arab. J. Chem., 3, 55 (2010); B. Donnelly, T. C. Downier, R. Grzeskowiak, H. R. Hamburg, D. Short, Corros. Sci.,18, 109 (1977).
[10] A.B. Tadros, A.B. Adbennabey, J. Electroanal. Chem., 24, 433 (1988).
[11] M.A. Quraishi, R. Sardar. Mater.Chem. Phys., 78, 425 (2002).
[12] L. Tang, X. Li, G. Mu, G. Liu, Surf. Coat.Technol., 201, 384 (2006).
[13] A. Chetouani, B. Hammouti, M. Daudi, Appl. Surf. Sci., 249, 375 (2005).
[14] N.O. Obi-Egbedi, I. B. Obot, M.I. El-Khaiary, J. Mol. Struct., 1002, 86 (2011).
[15] M.K. Awad, M.R. Mustafa, J. Mol. Struct. (THEOCHEM), 959, 66 (2010).
[16] J.Zhang, G. Oiao, S. Hu, Y. Yan, X. Ren, L. Yu, Corros. Sci., 53, 147 (2011).
[17] M. Bouklah, H. Harek, R. Touzani, B. Hammouti, Y. Harek, Arab. J. Chem., 5, 163 (2012).
[18] M. Benabdellah, A. Yahyi, A. Dafali, A. Aouniti, B. Hammouti, Arab. J. Chem., 4, 243 (2011).
[19] S.S. Abdel-Rehim, K.F. Khaled, N.A. Al-Mobarak, Arab. J. Chem., 4, 333 (2011).
[20] M. Mihit, K. Laarej, H. Abou El Makarim, L. Bazzi, R. Salghi, Arab. J. Chem., 3, 55 (2010).
[21] E. E. Ali-Shattle, M.H. Mami, M.M. Alnaili, Asian. J. Chem., 21, 5431 (2009).

[22] C. Chakrabarty, M.M. Singh, C.V. Agarwal, Ind. J. Technol., 20, 371 (1982).
[23] A. Maria, E.D. Mor, Br Corros. J., 13, 186 (1978).
[24] N. Subramanyiam, M. Krishnan, Br Corros. J., 7, 72 (1972).
[25] T.L. Ramachar, J. Sundrajan, J. Corros., 17, 391 (1961).

[26] M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, J. A. Montgomery, Jr., T. Vreven, K. N. Kudin, J. C. Burant, J. M. Millam, S. S. Iyengar, J. Tomasi, V. Barone, B. Mennucci, M. Cossi, G. Scalmani, N. Rega, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, M. Klene, X. Li, J. E. Knox, H. P. Hratchian, J. B. Cross, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R. E. Stratmann, O. Yazyev, A. J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J. W. Ochterski, P. Y. Ayala, K. Morokuma, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, V. G. Zakrzewski, S. Dapprich, A. D. Daniels, M. C. Strain, O. Farkas, D. K. Malick, A. D. Rabuck, K. Raghavachari, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, Q. Cui, A. G. Baboul, S. Clifford, J. Cioslowski, B. B. Stefanov, G. Liu, A. Liashenko, P. Piskorz, I. Komaromi, R. L. Martin, D. J. Fox, T. Keith, M. A. Al-Laham, C. Y. Peng, A. Nanayakkara, M. Challacombe, P. M. W. Gill, B. Johnson,W. Chen, M. W. Wong, C. Gonzalez, and J. A. Pople, Gaussian,Inc., Pittsburgh PA, 2003.
[27] S. M. Khalil, Z. Naturforsch. 63a, 42 (2008).
[28] K. Fukui, Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 21, 801 (1982).
[29] Lesar, I. Miosev, Chem. Phys., 483, 198 (2009).
[30] R. G. Parr, L. V. Szentpaly, S. Liu, J. Am. Chem. Soc., 121, 1922 (1999).
[31] I. Lukovits, E. Kalman,F. Zucchi, Corrosion (NACE), 57, 3 (2002); S. Martinez, Mater. Chem. Phys., 77, 97 (2002).
[32] A. Y. Musa, A. H. Kadhum, A. B. Mohamad, A. B. Rohoma, H. Mesmari, J. Mol. Struct., 969, 233 (2010).
[33] G. Gece, S. Bilgic, Corros.Sci., 51, 1876 (2009).
[34] I. Ahamd, R. Prasad, M. A. Quraishi, Corros. Sci., 52, 1472 (2010).

[35] D. R. Lide, CRC Handbook of Chemistry and Physics, 88th ed., 2007-2008.
[36] G. Klopman, J. Am. Chem. Soc., 90, 233 (1968); W. B. Jensen, Chem. Rev. 78, 1(1978).
[37] M. K. Awad, M. R. Mustafa, M. M. Abo Elnga, J. Mol. Struct. (Theorem), 959, 66 (2010).
[38] R. G. Pearson, Inorg. Chem., 27, 734 (1988).
[39] E. Koch, Propellants Explos. Pyrotech., 30, 5 (2005).
[40] X. Li, S. Deng, H. Fu, T. Li, Electrochim. Acta, 54, 4089 (2009).
[41] T. Arslan, F. Kandemirli, E. E. Ebenso, I. Love, H. Alemu, Corros. Sci.51, 35

Journal of Scientific Research

Issued By;

Africa University for Humanities and Applied Sciences

General Advisor;

Dr.Mabruk Muftah Abushina

Head of the Editorial Committee;

Dr. Abdin A. Sharif

Members of the Editorial Committee;

Dr. Abdelhamed Ali Magrus

.Akram H. Mom Moamer

Eng. Asharf Elgomati

Revision and proofreading of the Arabic language:

Dr... Mahmoud Ammar Maaloul

Revision and proofreading of the English language:

Dr... Intisar Ali Al-Sharif

Journal of Scientific Research

Biannual, Refereed, Scholarly Journal

Issued By

Africa University for Humanities & Applied Sciences