



كلية العلوم

أسماء بنيامين المليجي

أحمد هاشم منجود

اسم الباحث:

تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/11/20

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

دراسة حاسوبية على التركيب والطاقات للتحلل الحراري للأيزوبوتانول

طريقة البحث:

وقد استخدمت نظرية الكثافة الوظيفية (BMK و BBIK) وطريقه الابونيشيو (CBS-QB3) لدراسة التفسير الحراري أحادي الجزى للأيزوبوتانول (2-ميثيل بروبانول) كبديل الوقود الأحفوري. وقد تم التحقيق التحليلات المعقدة والبسيطة. نزع جزيء الماء وتكوين الايزوبيوتين يمثل أفضل مسارات التحلل الحراري للأيزوبيوتانول حراريا وديناميكيا. ومع ذلك، تم العثور على الانشطار رابطته $C\alpha-C\beta$ لإعطاء شقوق الهيدروكسي ميثيل والأيزوبروبيل يكون الأكثر المسارات التحلل البسيط ملائمة. أظهرت النتائج اتفاق جيد بين المحتوى الحراري المحسوبة والمتاحة عمليا للأيزوبوتانول و الشقوق الناتجة منه.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

التحقيق النظري في خصائص التوصيل لمستبدلات الأوليجومر للفوسفور.

طريقة البحث:

علي مدار العقود الماضية تم دراسة البوليمرات الجزيئية المكونة من الحلقة الخماسية غير المتجانسة كوحدات بنائية لتكوين بوليمرات الثيوفين و البيرول و الفيوران للاستخدام في مجال الالكترونيات الجزيئية. من بين هذه المركبات الحلقية الخماسية غير المتجانسة يوجد الفوسفور ذو الخصائص المميزة لأسباب ترجع إلي كيمياء ذرة الفوسفور الثلاثية التي تتمتع بالانشاط الكيميائي نظرا للطبيعة الهرمية لهذه الذرة.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

دراسة حاسوبية على التراكيب و الطاقات من الانحلال الحراري للايزوبيوتانول.

طريقة البحث:

مؤخراً، تم استخدام أنواع الوقود الحيوي كوقود لوسائل النقل كبديل للوقود الحفري. وتمثل الكحولات الحيوية واحدة من اهم مصادر الطاقة البيولوجية. وتم العثور على البيوتانول الذي يتميز بارتفاع المحتوى الحراري، قله التآكل وانخفاض ضغطه البخاري مما يميزه عن الإيثانول. حيث يمكن خلطه بسهولة مع البنزين و نقله في خطوط الأنابيب الموجودة حالياً واستخدامه في المحركات الحالية دون تعديل. للبيوتانول أربعة ايزومرات. وقد كرسنا على الايزوبيوتانول (2- ميثيل بروبانول) الذي يحتوى على رقم اوكتان عالي ويتم إنتاجه من الكتلة الحيوية عن طريق عمليات التخمر وعدم التخمر.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

التركيب والثبات للماغنسيوم ثنائي الشحنة المذاب بواسطة داي ميثيل سلفيد.

طريقة البحث:

يصعب دراسة المتراكبات عديدة الشحنة في الحالة الغازية نتيجة للفرق الكبير بين جهد التأين الثاني (IE2) لمعظم الفلزات وجهد التأين الأول لغالبية المترابطات, لذلك قمنا بدراسة تركيب وثبات متراكبات الماغنسيوم ثنائي الشحنة مع جزئ واحد من داي ميثيل سلفيد DMS لفحص إمكانية تكوين متراكبات ثابتة في الحالة الغازية. وقد تم دراسة قنوات التفكك المختلفة بعد تكون المتراب (Mg²⁺+DMS) باستخدام حسابات كيمياء الكم عند دالة الكثافة (BMK/6-311+G (2d, 2p)//BMK/6-31+G (d



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

تأثير الفوسفونات العديدة على ترسيب كبريتات الاسترونشيوم (السليستت) من المحاليل المائية.

طريقة البحث:

ترسيب وذوبان أملاح كبريتات وكربونات عناصر الاقلاء الأرضية مثل الاسترونشيوم, الباريوم والكالسيوم لها أهمية كبيرة في كثير من المجالات مثل علوم البحار، الترسيبات، وعلم المياه العذبة. ونظرا لأهميتها في الصناعة حيث أنها تمثل مشكلة خطيرة في حقول النفط ومحطات تحلية المياه والآبار الجوفية حيث وجود هذه الترسيبات يسبب ما يعرف بالتكلسات scale formation داخل أنابيب رفع النفط ورفع المياه. في هذه البحث تم دراسة معدل ترسيب كبريتات الاسترونشيوم في محاليل قوتها الايونية 0.7 مول/ لتر من كلوريد الصوديوم عند درجات مختلفة من فوق التشبع تتراوح من 0.2 - 0.62 وعند أس هيدروجيني 7.5 ودرجة حرارة 25 درجة مئوية. أظهرت الدراسة أن ميكانيكية التفاعل تتبع نظام التفاعل عند السطح ذات الرتبة الثنائية عند السطح عند درجات فوق التشبع تحت الدراسة. وأثبتت الدراسة أيضا أن وجود الفوسفونات حتى ولو بنسب صغيرة 2.5×10^{-6} - 2.0 مول/لتر يقلل من سرعة الترسيب. عزى تأثير المواد المضافة إلى حجب المواقع النشطة بواسطة امتزاز الجزيئات المضافة على سطح البلورات. وقد تم تأكيد تلك النتائج باستخدام نظام لانجمير للادمصاص.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

التفكك الحراري ل 2- بيوتانول كوقود غير حفري: دراسة حاسوبية

طريقة البحث:

لقد أعتبر الوقود الحيوي بديلا مناسباً للوقود الحفري الذي يمكن استخدامه منفصلاً أو كمخلوط مع الوقود الحفري. تمثل الكحولات نوع هام من أنواع الوقود الحيوي. في العقود الماضية تم الاهتمام بشكل أكبر بألية احتراق الكحولات من أجل رقم الأوكتان الخاص بها خاصة الكحولات المتفرعة بالمقارنة بالجازولين. كان الهدف هو التوصل إلى ميكانيكية الاحتراق لتفاعل التحلل الحراري لجزيء واحد لمركب 2- بيوتانول للوصول لعملية الاحتراق التام للوقود. لذلك قمنا بدراسة الكيمياء الحرارية و الكيمياء الحركية لإحتراق مركب 2- بيوتانول باستخدام نظرية دالة الكثافة (DFT) و حسابات الأب إنيشيو (CBS-QB3 و CCSD(T)). تم حساب حرارات التكوين و طاقات تفكك الروابط لبعض الكحولات التي تشمل 2- بيوتانول و الشقوق الناتجة عنه.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

التراكيب والطاقات للتكسير الحراري لبيوتانوات الأيزوبروبيل كنموذج لوقود حيوي: دراسات بواسطة نظرية دالة الكثافة والاب انيشيو.

طريقة البحث:

يمثل الوقود الحيوي احد مصادر الطاقة الواعدة التي تحد من انبعاث غازات الصوبة الزجاجية و الاحتباس الحراري. يشكل الديزل الحيوي أحد أهم أنواع الوقود الحيوي. حيث أن دراسة آلية احتراق وقود الديزل الحيوي الحقيقي صعبة جدا لذا فإننا اخترنا العمل على نماذج مركبات. فقد تم دراسة الأشكال الهندسية و الطاقات خلال التحلل الحراري لجزيء واحد لمركب بيوتانوات الأيزوبروبيل (IPB) $C_3H_7C(O)OCH(CH_3)_2$, كنموذج للوقود الحيوي في غياب الهواء باستخدام نظرية دالة الكثافة (DFT) عند مستوى BMK و حسابات الآب إنيشيو (CBS-QB3). تم أيضا مناقشة النواتج والمراحل الانتقالية المتضمنة والتغيرات في أطوال الروابط خلال مسارات التفاعل.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

النمو البلوري لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور في وجود أحماض امينية.

طريقة البحث:

من المعروف أن اوكسالات الكالسيوم هي المكون الاساسى للحصوات المتكونة في الكلى ومن المعروف أيضا أن لها أشكال عدة أكثرهم ثباتا اوكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور. في هذا العمل تم دراسة معدل النمو البلوري لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور في المحاليل المائية في وجود وعدم وجود بعض الأحماض الامينية تحت الظروف الباثولوجية pH 7.40 وقوة أيونية M 0.15 , ودرجة حرارة 37°C بطريقة التركيب الثابت. تم دراسة معدل النمو لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور على مدى من درجات فوق التشبع يتراوح من 1.8 - 3.0 , وقد وجد ان ميكانيكية التفاعل تتبع نظام متعدد النويات والذي يؤكد ميكانيكية التفاعلات ذات التحكم السطحي. ومن دراسة معدل النمو لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور في وجود الأحماض الامينية, الاتين, فينيل الاتين, جليسين و أرجينين تم الحصول على النتائج التالية. قد وجد ان الزيادة من تركيزات هذه المواد تقلل من معدل النمو لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور. وقد عزى هذا النقص في معدل النمو إلى مساحة السطح المغطاة بواسطة ادمصاص المواد المضافة على السطح لأكسالات الكالسيوم أحادية ماء التبلور.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

نظرة جديدة على تأثير الفوسفونات الثنائية على العظام: الاختلافات في التفاعل مع هيدروكسي اباتيت.

طريقة البحث:

الفوسفونات الثنائية bisphosphonates, هي الآن من أكثر الأدوية المستخدمة على نطاق واسع للأمراض المرتبطة بالعظام، مثل هشاشة العظام. رغم أن الفوسفونات الثنائية تعمل مباشرة على الخلايا الأكلة، وتتداخل مع عمليات حيوية مثل prenylation للبروتين إلا أنها لها القدرة على الادمصاص المباشر على أملاح العظام مما يسهم أيضا في قوتها ومدة عملها. كان الهدف من هذه الدراسة المقارنة بين تأثير 6 من الفوسفونات الثنائية المستخدمة الآن على نطاق واسع في علاج كثير من الأمراض على الهيدروكسي اباتيت (HAP) المكون الرئيسي لعظام الانسان. ولتحديد تأثير هذه الفوسفونات الثنائية على خصائص سطح الهيدروكسي اباتيت تم قياس فرق الجهد زيتا وكذلك التوتر السطحي لسطح الهيدروكسي اباتيت. تم حساب ثوابت الامتزاز (KL) للفوسفونات الثنائية على سطح الهيدروكسي اباتيت من الدراسات الحركية باستخدام طريقة التركيب الثابت عند ظروف محاكاة للظروف الباثولوجية, 37 درجة مئوية وقوة الأيونية (M 0.15) واس هيدروجيني 7.4.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

النمو البلوري لهيدروكسي اباتيت في وجود اسيتامينوفين.

طريقة البحث:

اجتذبت أملاح فوسفات الكالسيوم انتباه العديد من الباحثين ويرجع ذلك إلى ترسيبها في العمليات البيولوجية. ويعتبر الهيدروكسي اباتيت HAP، $[Ca_5(PO_4)_3OH]$ ، أكثر أملاح فوسفات الكالسيوم ثباتاً، وهو نموذج جيد لدراسة تكلس الأنسجة مثل العظام والأسنان وفي كثير من الأحيان يكون غير مرغوب في ترسيبه لأنه يسبب حالات مرضية مثل ترسيبه في مفاصل الغضروف، وصمامات القلب وحصوات الكلى.



تاريخ اعتماد تسجيل البحث: 2012/10/31

نوع البحث: أكاديمي

عنوان البحث:

نمو الكالسيت على البوليمرات الكربوكسيلية.

طريقة البحث:

كربونات الكالسيوم هي أكثر المعادن وفرة في عالمنا وتوجد في أشكال بلورية مختلفة مثل الكالسيت، أراجونيت، فاتريت، كربونات الكالسيوم أحادية ماء التبلور و كربونات الكالسيوم سداسية ماء التبلور. وتعتبر كربونات الكالسيوم هي إحدى مكونات المحارات البحرية، الشعب المرجانية، قشر البيض والهيكل الخارجي للمفصليات، واللؤلؤ والمرجان ولذلك تتأثر بالملوثات مثل المنظفات. ومن دراسات سابقة وجد أن بعض البوليمرات التي تحتوى على مجموعات وظيفية لها القدرة على إنماء بعض الأملاح شحيحة الذوبان مثل كربونات الكالسيوم، كبريتيد الكاديوم، فوسفات الحديد والهيدروكسي اباتيت.