حساب دالة التوزيع الجزيئية $g(r_{12},r_1)$ لذرة الكاربون المتأينة للحالات C^{+4},C^{+3},C^{+2} في فضاء المكان

بان حسن عادل*

استلام البحث 5، حزيران، 2009
قبول النشر 4، نيسان ، 2010

الخلاصة :

ان الهدف من البحث هو دراسة دالة التوزيع الجزيئية $g(r_{12},r_1)$ لأيونات الكاربون (C^{+4},C^{+3},C^{+2}) في فضاء المكان وبأستخدام الدالة الموجية لهارتري- فوك [1] وبأستخدام تقنية التجزئة لكل غلاف والمتمثلة أيون الكاربون C^{+2} $(1s^2 2s^2)$ ولأيون الكاربون $(1s^2 2s\ C^{+3})$ وايون الكاربون C^{+4} $(1s^2)$ وقد تمت مقارنة النتائج بين ايونات الكاربون الثلاثة لكل غلاف . ان النتائج المستحصلة تم حسابها نظريا باستخدام برامج حاسوبية Mathcad V.2001i .

الكلمات المفتاحية : دالة هارتري – فوك ، دالة التوزيع الجزيئية ، الكثافة الالكترونية.

المقدمة :

يحتوي ايون الكاربون C^{+4} على الكترونين يشغلان القشرة $(K_\alpha K_\beta)$، اما ايون الكاربون C^{+3} فيحتوي على ثلاثة الكترونات تتوزع على القشرة $(K_\alpha L_\alpha),(K_\alpha K_\beta)$ وايون الكاربون C^{+2} الذي يحتوي على اربعة الكترونات تتوزع الكتروناته بالشكل $(L_\alpha L_\beta)$, $(K_\beta L_\alpha)$, $(K_\alpha L_\alpha)$, $(K_\alpha K_\beta)$. وان احتمالية توزيع المسافة البينية r_{12} يعرف بوساطة دالة التوزيع الجزيئية $g(r_{12},r_1)$ وكما يأتي[2]:-

$$g(r_{12},r_1)=8\pi^2 r_1 r_{12}\int_{|r_{12}-r_1|}^{|r_{12}+r_1|}\Gamma(r_1,r_2)\,r_2 dr_2 \quad ...(1)$$

توضح هذه الدالة **$g(r_{12},r1)$** التغير في كثافة الشحنة الالكترونية لألكترون الأختبار عندما نثبت المسافة بين الألكترونين r_{12} وكذلك التغير في توزيع المسافة بين الألكترونين عندما نثبت الألكترون الأختبار على مسافة r_1 من النواة , وكما يستفاد من هذه الدالة في تقييم فجوة فيرمي وفجوة كولوم ,ويمكن التعبيرعن $\Gamma(r_1,r_2)$ بالمعادلة الأتية والتي تمثل كثافة الجسيمين لأي نظام ذري [3]:-

$$\Gamma_{HF}(1,2)=\Gamma_{ij}(1,2)=\tfrac{1}{2}\sum_{i\langle j}[\phi_i(1)\,\phi_j(2)-\phi_j(1)\,\phi_i(2)]^2 \quad ....(2)$$

حيث ان $\rho(r_1)$ كثافة الشحنة الالكترونية وتحسب من العلاقة الأتية [4] :-

$$\rho(r_1)=\int_0^\infty \Psi^2(r_1,r_2)dr_2 \quad ....(3)$$

وتسمى $\rho(r_1)$ كثافة الاحتمالية وتعرف بصورة عامة تعطى بالعلاقة [5] :-

$$\rho(\vec r)d\vec r=\left|\Psi(\vec r)\right|^2 d\vec r \quad ......(4)$$

$$\left|\Psi(\vec r)\right|^2=\Psi^*(\vec r)\Psi(\vec r) \quad ....(5)$$

دالة التوزيع الجزيئية $g(r_{12},r_1)$:-

يمكن حساب دالة التوزيع الجزيئية لكل غلاف الكتروني كما ياتي[6] :-

اولا:- للغلاف $K(^1s)$ للحالة المفردة:-

$$g(r_{12},r_1)_{K(^1s)}=0.5 r_1 r_{12}\int_{|r_{12}-r_1|}^{|r_{12}+r_1|}\phi_{1s}^2(r_1)\phi_{1s}^2(r_2)\,r_2 dr_2 \quad ...(6)$$

ثانيا:- للغلاف $L(^1s)$ للحالة المفردة :-

$$g(r_{12},r_1)_{L(^1s)}=0.5 r_1 r_{12}\int_{|r_{12}-r_1|}^{|r_{12}+r_1|}\phi_{2s}^2(r_1)\phi_{2s}^2(r_2)\,r_2 dr_2 \quad ......(7)$$

*كلية العلوم للبنات – قسم الفيزياء

ثالثا:- للأغلفة الوسطية للحالة المفردة والحالة الثلاثية $KL(^1s),KL(^3s)$:-

$$g(r_{12},r_1)_{KL(^1s),KL(^3s)} = 0.5 r_1 r_{12} \int_{|r_{12}-r_1|}^{|r_{12}+r_1|} \left[\frac{\phi_{1s}(r_1)\phi_{2s}(r_2) \mp \phi_{2s}(r_1)\phi_{1s}(r_2)}{\sqrt{2}}\right]^2 r_2 dr_2 \quad ...(8)$$

حيث الاشارة السالبة تتمثل في الحالة الثلاثية والاشارة الموجبة للحالة المفردة.

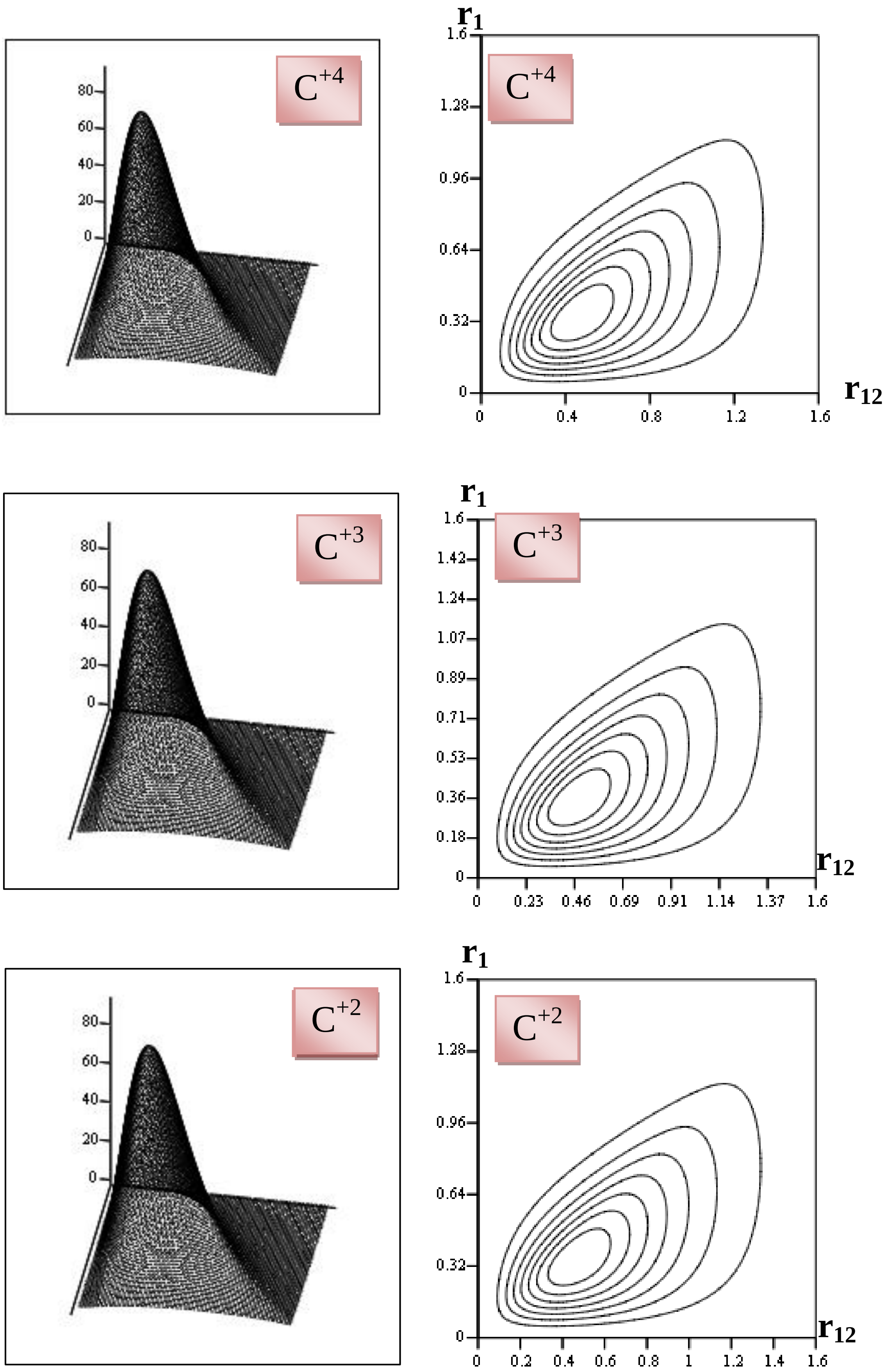
النتائج و المناقشة:

تم حساب دالة التوزيع الجزيئية لأيونات الكاربون $(C^{+2}$, C^{+3} , $C^{+4})$ للقشرة $K(^1s)$ باستخدام المعادلة رقم (6) والشكل والجدول رقم (1) يوضح مقارنة الدالة لأيونات الكاربون الثلاثة ، اما الزوج الالكتروني المتوزع بالغلاف $L(^1s)$ فتم حساب الدالة باستخدام المعادلة (7) وهناك توزيع الكتروني للأغلفة الوسطية سواء أكانت للحالة المفردة أو الثلاثية حسبت لها الدالة من المعادلة(8), وكانت النتائج موضحة بالجدول رقم (1) حيث نلاحظ من النتائج ما يأتي :-

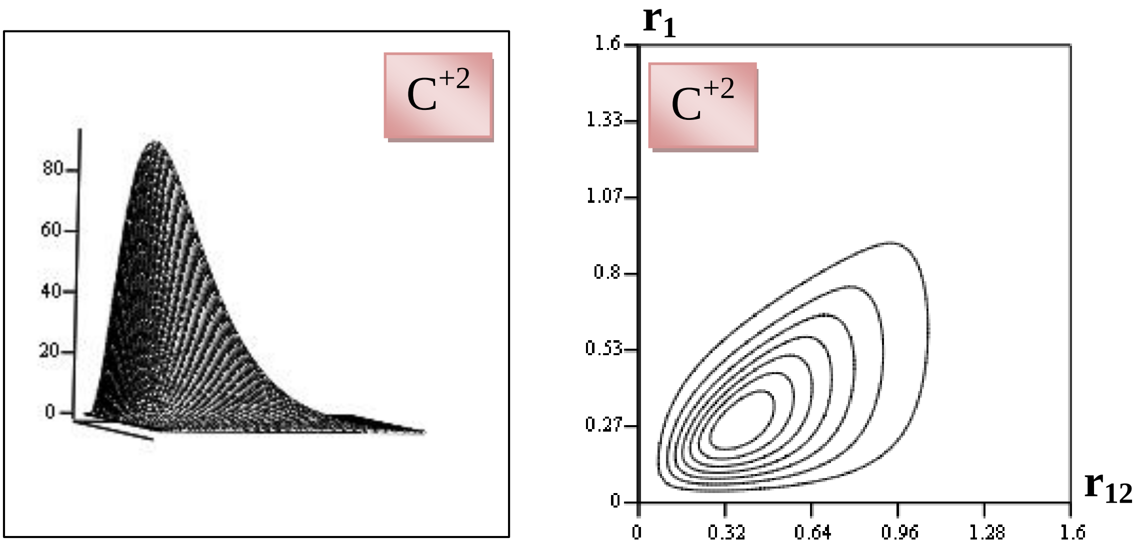
- ❖ من الجدول (1) والاشكال (1,2,3,4) ان توزيع الدالة الجزيئية لجميع الأيونات في الغلاف $K(^1s)$ يمثل اكبر توزيع للدالة عن بقية الأغلفة .
- ❖ نلاحظ من الجدول (1) والشكل (1) كلما ازداد تأين ذرة الكاربون قلت القيمة العظمى لدالة التوزيع الجزيئية $g_{max}(r_{12},r_1)$ للغلاف $K(^1s)$ على العكس من توزيع الدالة في الأغلفة الوسطية حيث ان كلما ازداد تأين الذرة ازداد قيمة توزيع الدالة سواء أ كانت للحالة المفردة او الثلاثية .
- ❖ من الأشكال (3,4) نلاحظ وجود ثلاث قمم للدالة في الحالة المفردة اما الحالة الثلاثية نلاحظ وجود قمتين فقط للدالة .
- ❖ من الجدول(1) نلاحظ ان كلما زاد تأين الذرة ان قيمة r_1,r_{12} تزداد بالنسبة للغلاف $K(^1s)$ بينما تقل قيمة r_1,r_{12} بالنسبة للأغلفة الوسطية للحالة المفردة والثلاثية .
- ❖ لجميع ايونات الكاربون ولجميع الاغلفة نلاحظ ان $r_1 \neq r_{12}$.

جدول (1) يوضح القيم العظمى لدالة التوزيع الجزيئية $g(r_{12},r_1)$ لأيونات الكاربون

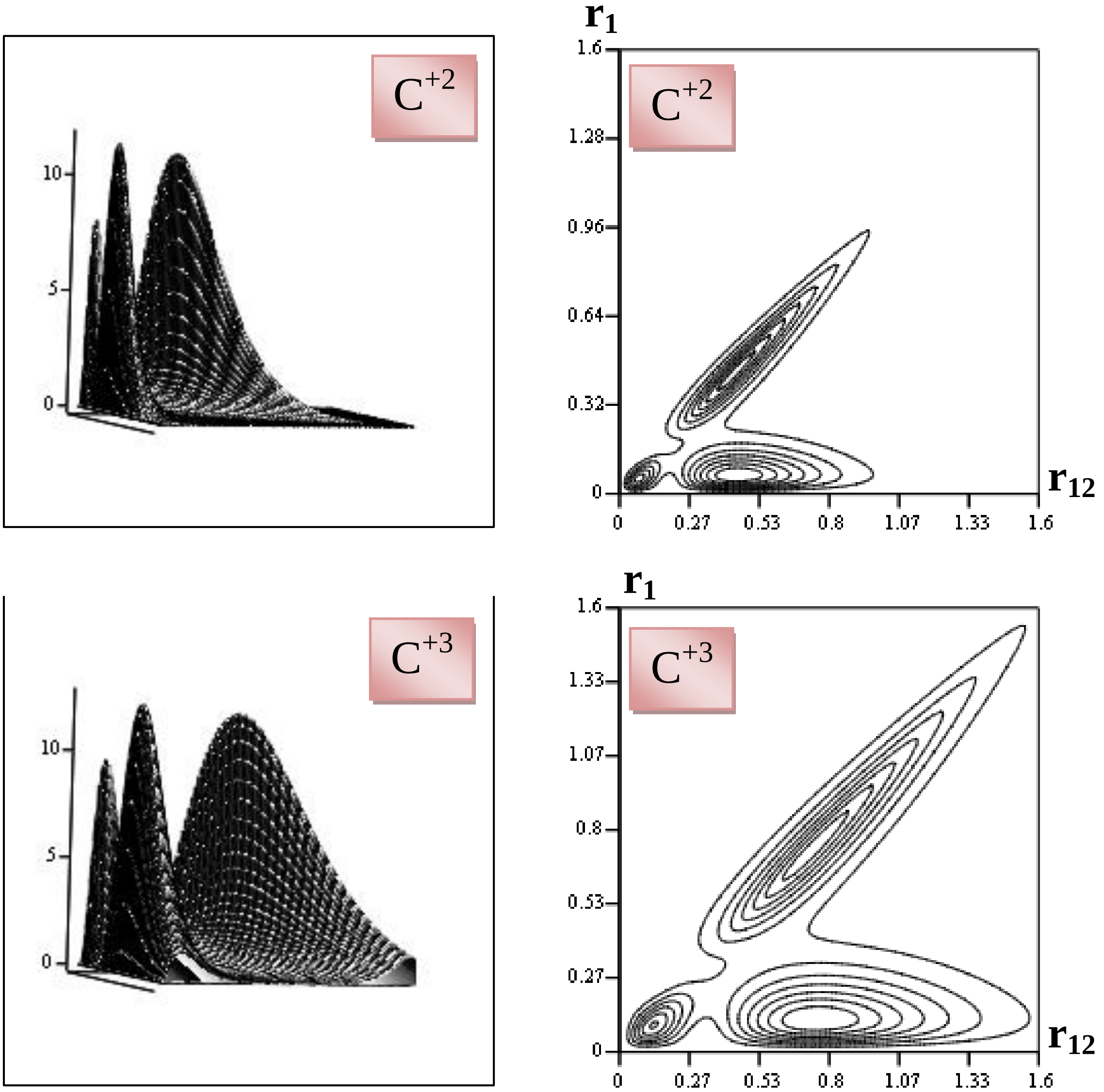
ion	Shell	r_{12}	r_1	$g(r_{12},r_1)$
C^{+2}	K	0.23	0.17	91.149
	L	0.9	0.855	3.042
	$KL(^1s)$	1.2	0.17	11.585
		1.2	1.2	11.084
		0.18	0.12	7.889
	$KL(^3s)$	1.1	0.2	12.024
		1.3	1.3	10.827
C^{+3}	K	0.24	0.18	91.013
	L	......	.....	……
	$KL(^1s)$	1.15	0.17	12.542
		1.15	1.15	12.062
		0.19	0.14	9.681
	$KL(^3s)$	1.06	0.17	13.601
		1.0	1.0	12.73
C^{+4}	K	0.25	0.19	90.48
	L	......	.....	.....
	$KL(^1s)$	......	.....	.....
	$KL(^3s)$	......	.....	.....



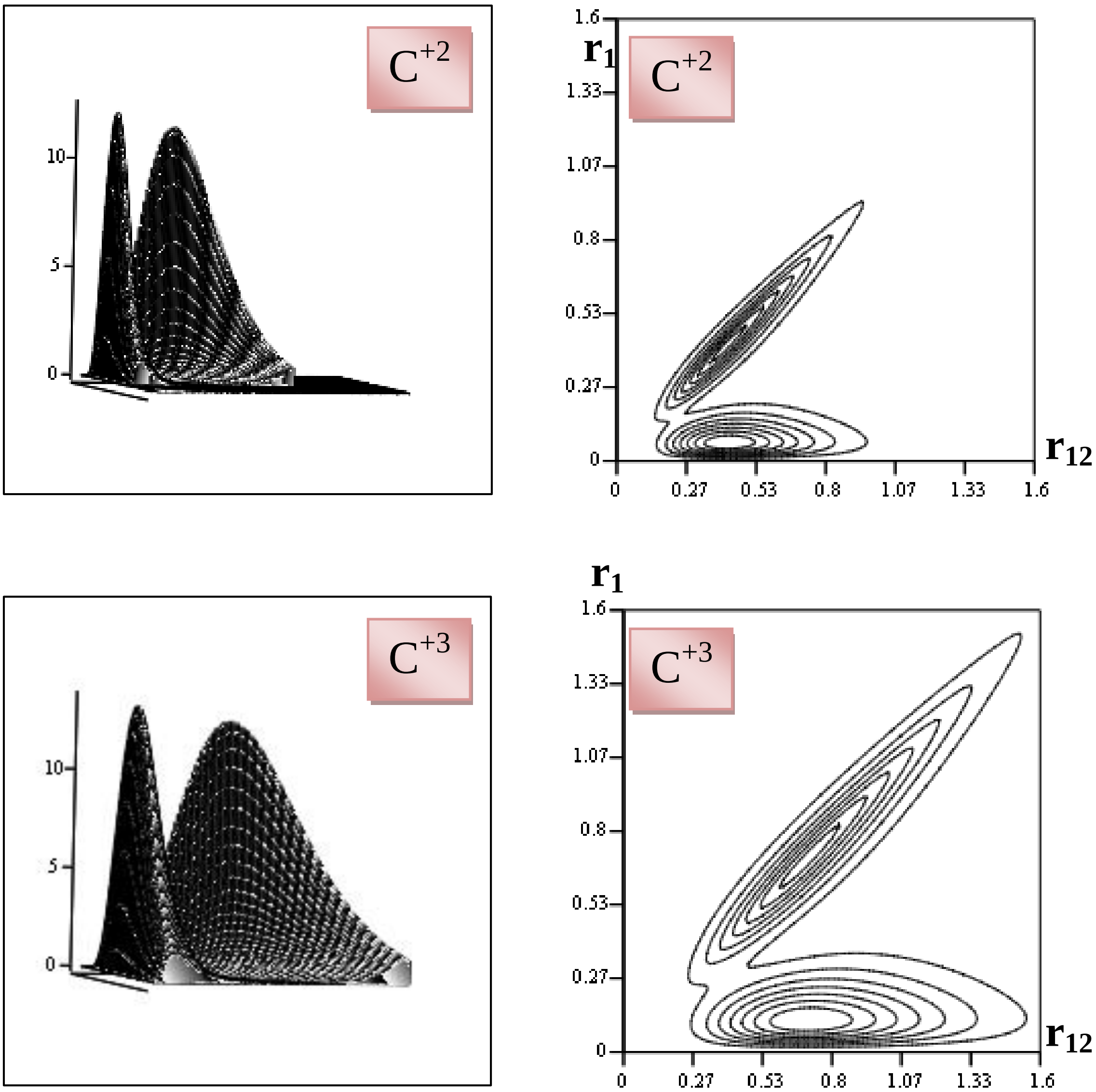
شكل (1) يوضح دالة التوزيع الجزيئية لأيونات الكربون للقشرة K



شكل (2) يوضح دالة التوزيع الجزيئية لأيونات الكربون للقشرة L



شكل (3) يوضح دالة التوزيع الجزيئية لأيونات الكربون للحالة المفردة $KL(^1s)$



شكل (4) يوضح دالة التوزيع الجزيئية لأيونات الكربون للحالة الثلاثية KL(^{3}s)

المصادر:

1. Rothaan. C. C. J., and Weiss .A. W. 1960. Antytical self-consistent field function for the atomic configurations 1s^{2}2s^2 .J Reviews of Modern physics, 32(2).

2. Banyard. K. E. and Mobbs. R. J. 1981. Coulomb hole and correlation coefficients for electronic shells acomparative analysis of several wave function Be. J .Chem.phys. 75(7):3433.

3. Banyard. K. E. 1968.Correlation of electrons within the Hydride ion .J.Chem.phys, 48(5):2121-2129.

4. March .N. H. .2003. Local energy equation for two-electron atoms and relation between kinetic energy and electron densities .J. Chem.phys 118(15).

5. Levine. N. 2000. Quantum Chemistry fifth edition , Prentice – Hall ,Upper Saddle River,New Jersey.07458. New York .

6. Mahmoud Abdl-kader. 2008. Study the effect the nuclear charge on the physical properties for some of the atoms and ions Z= 2, 3, 4, 5,"M.SC .Thesis Collage of Scince for women , Baghdad University,Iraq,2008.

The Calculation of the partical distribution function $g(r_{12},r_1)$ for Carbon Ion cases (C^{+2},C^{+3},C^{+4}) in the position space ..

Ban Hasan Adil*

*College of Science for women- Departmant of physics

Abstract:

The aim of this work is study the partical distribution function $g(r_{12},r_1)$ for Carbon ion cases (C^{+2},C^{+3},C^{+4}) in the position space using Hartree-Fock's Wave function, and the partitioning technique for each shell which is represented by Carbon Ions [C^{+2} ($1s^22s^2$)], [C^{+3} ($1s^22s$)] and [C^{+4} ($1s^2$)]. A comparision has been made among the three Carbon ions for each shell. A computer programs (MATHCAD ver. 2001i) has been used texcute the results.