حساب القيمة المتوقعة لتواجد الالكترون المفرد للدوال الموحية المختلفة لذرة البيريليوم*Be*

بان حسن عادل الأسعد * خليل هادي البياتي*
صلاح عبد الله حسون*

تاريخ قبول النشر 2007/4/8

الخلاصة:

ان الهدف من البحث هو حساب تواجد الالكترون حول النواة من خلال دراسة دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد $D(r_1)$ لذرة البيريليوم *Be* وبأستخدام مجموعة من الدوال الموجية لهارتري-فوك *(1960,1974,1993)* وقد تمت الدراسة باستخدام طريقة التجزئة لذرة البيريليوم في الحالة$1s^2 2s^2$ ،حيث تم تحليل ذرة البيريليوم*Be* الى ستة ازواج من الدوال الموجية زوج في الغلاف*K* وزوج في الغلاف *L* والبقيه في الأغلفة الوسطية*KL* والنتائج المستحصلة تم حسابها عدديا بأستخدام برامج حاسوبيه بأستخدام برنامج الماثكاد(Mathcad)

الدالة الموجية

ان نظرية هارتري فوك تمتاز باستخدامها الدوال الموجية ذات التماثل العكسي والتي يمكن كتابتها بشكل محددة سليترحيث يمكن كتابة محدد سليتر Slatre determinant للأنظمة الذرية بالمعادلة الاتية[1] :-

$$\phi(1,2,....N)=(N!)^{1/2}|\phi_1(1)\phi_2(2)....\phi_N(N)| \quad \dots (1)$$

N يمثل عدد الالكترونات

الدالة ϕ_1 تمثل دالة الالكترون الاول وتسمى هذه الدالة ببرم المدار وتعتمد على متجه البرم ومتجه الفضاء وتعرف بالمعادلة الاتية:-

$$\phi = \sum_{i=1}^{j} c_i \chi_j \quad \dots (2)$$

1

استخدمت j=12 للمصدر [2]
j=6 للمصدر[3]
j=7 للمصدر [4]

ويمكن كتابةُ χ_{nlm} والمتمثلة بالصيغة الاتية :-

$$\chi_{n\ell m}(r,\theta,\phi,\delta) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\phi)\delta(s) \quad \dots (3)$$

حيث ان Rnl(r) يمثل الجزء القطري من الدالة الموجية ويعرف بالمعادلة الاتية :-

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell m}\ S_{n\ell}(r) \quad \dots (4)$$

حيث ان Nnlm يمثل ثابت العيارية Normalization constant للدالة القطرية ويعرف بالمعادلة الاتية:-

$$N_{n\ell m} = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{[(2n)!]^{\frac{1}{2}}} \quad (5)$$

*جامعة بغداد – كلية العلوم للبنات / قسم الفيزياء

$$S_{n\ell}(r) = r^{n-1}e^{-(\zeta r)} \quad \dots (6)$$

حيث ان Snl(r) يمثل اوربيتال سليتر-Slater type orbitals ،اما ع تمثل دليل المدار orbital exponent .

النظرية

ان احتمالية تواجد الالكترونات في كل غلاف الكتروني يعرف بدالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد وبصورة عامة يعّرف بالمعادلة الاتية[1]:-

$$D(r_1)=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r_1^2\,\rho(r_1)\,d\Omega = 4\pi\, r_1^2\,\rho(r_1) \quad \dots (7)$$

حيث ان

$$\rho(r_1)=N\int\psi^*(X_1,X_2....X_N)\psi(X_1,X_2....X_N)\,d\delta_1\,dX_2\,dX_3....dx_N$$

...(8)

حيث ان $d\Omega_K = \sin\theta_K d\theta_K d\phi_K$

ويمكن الاستفادة من حساب توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد في ايجاد القيم المتوقعة لجسيم واحد كما في المعادلة[5]

$$< r_1^n >= \int_0^{\infty} D(r_1)\, r_1^{\,n}\, dr_1 \quad \dots (9)$$

اذ ان 2-≥ n ≥2

وعندما تكون قيمة n تساوي (صفر) فأن القيمة المتوقعة يجب ان تساوي (واحد) لأن الدالة متعايره اي ان

$$\int_0^{\infty} D(r_1)\, r_1^0\, dr_1 = \int_0^{\infty} D(r_1)\, dr_1 = 1 \quad \dots (10)$$

وللمزيد من المعلومات يمكن مراجعة المصدر رقم [6]

الحسابات والنتائج

بأستخدام المعادلة (9) تم حساب القيمة المتوقعة لجسيم واحد للغلاف KαKβ لذرة البيريليوم(Be) لدوال موجية مختلفة والنتائج موضحة في الجدول1 ،

وكذلك للغلاف LαLβ والنتائج موضحة في الجدول 2 اما بالنسبة للغلاف KαLα=KβLα فأن النتائج موضحةفي الجدول 3.

جدول (1) القيمة المتوقعة لذرة البيريليوم *(Be)* للغلاف $K_\alpha K_\beta$ لعدد من الدوال الموجية المنشورة في السنوات 1993,1974,1960 .

القيمة المتوقعة $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف $K_\alpha K_\beta$			
n	**1960[2]**	**1974[3]**	**1993[4]**
-2	27.75345	27.75583	27.75338
-1	3.68188	3.68183	3.68188
0	1	1	1
1	0.41499	0.41499	0.41499
2	0.16532	0.23295	0.23295

جدول (2) القيمة المتوقعة لذرة البيريليوم (Be) للغلاف LαLβ لعدد من الدوال الموجية المنشورة في السنوات 1993,1974,1960 .

القيمة المتوقعة $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف $L_\alpha L_\beta$			
n	**1960[2]**	**1974[3]**	**1993[4]**
-2	1.35915	1.05611	1.05564
-1	0.56969	0.52248	0.52252
0	1	1	1
1	2.64136	2.64865	2.64852
2	8.40033	8.42051	8.41665

جدول (3) القيمة المتوقعة لذرة البيريليوم (Be) للغلاف KαLα= KβLα لعدد من الدوال الموجية المنشورة في السنوات 1993,1974,1960 .

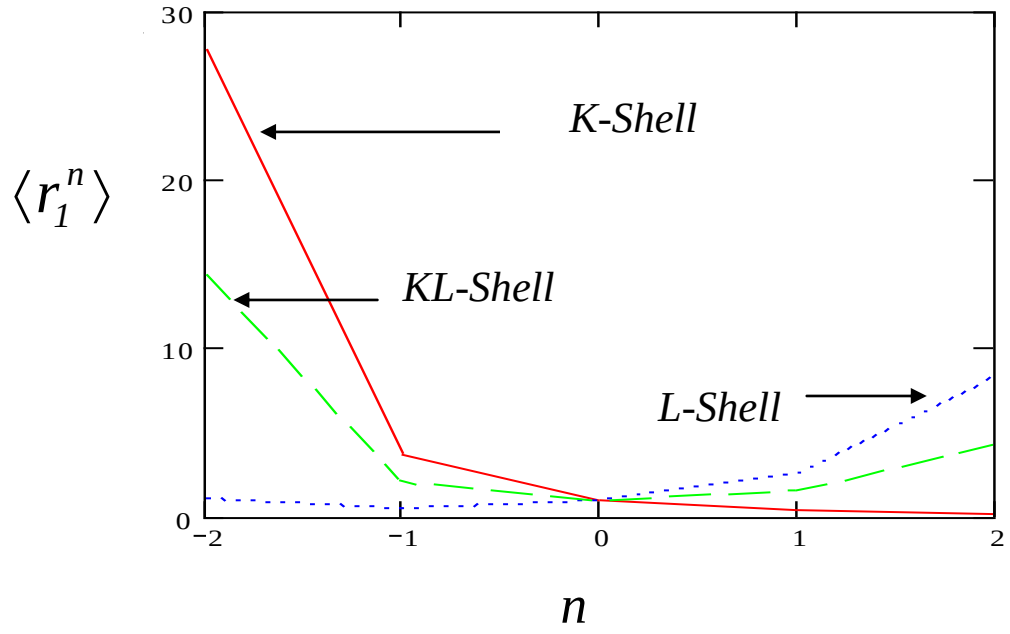
القيمة المتوقعة $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف $K_\alpha L_\alpha = K_\beta L_\alpha$			
n	**1960[2]**	**1974[3]**	**1993[4]**
-2	14.55654	14.40597	14.40451
-1	2.12579	2.10216	2.10220
0	1	1	1
1	1.52864	1.53234	1.53220
2	4.32159	4.33237	4.32955

من الجداول السابقة تم حساب معدل القيمة المتوقعة من المعادلة الاتية:-

$$\langle r_1^n \rangle_{Total} = \frac{1}{3}\sum\left[\langle r_1^n \rangle_{1960} + \langle r_1^n \rangle_{1974} + \langle r_1^n \rangle_{1993}\right] \quad ...(11)$$

جدول (4) معدل القيمة لذرة البريليوم *Be* وحسب الاغلفة

$\langle r_1^n \rangle$			
n	$K_\alpha K_\beta$	$L_\alpha L_\beta$	$K_\alpha L_\alpha = K_\beta L_\alpha$
-2	27.75432	1.05581	14.40506
-1	3.68186	0.5225	2.10219
0	1	1	1
1	0.41499	2.64856	1.53225
2	0.23295	8.41792	4.33855



شكل (1) معدل القيمة لذرة البريليوم *Be* وحسب الاغلفة

مناقشة النتائج

عند مقارنة القيم المتوقعة لمجموعة الدوال الموجية المختلفة نجد ان :-

- الغلاف $K_\alpha K_\beta$ اغلب القيم متساوية باستثناءالقيم عندما تكون n=-2,-1 تكون حسب العلاقة

n=-2 as HF(1974) >HF(1960)>HF(1993)
n=-1as HF(1993)=HF(1960) >HF(1974)

- الغلاف$L_\alpha L_\beta$ القيم المتوقعة لمجموعة الدوال الموجية لهارتري فوك كالاتي:-

n=-2 as HF(1974)>HF(1960)>HF(1993)
n=-1 as HF(1993) >HF(1960)>HF(1974)

اما القيم التوقعة عندما تكون $n \geq 1$ كما يأتي:-

n=-2 as HF(1974)>HF(1993)>HF(1960)

- الغلاف $K_\alpha L_\alpha = K_\beta L_\alpha$ القيم المتوقعة لمجموعة الدوال الموجية لهارتري فوك كالاتي:-

n=-2 as HF(1974)>HF(1960)>HF(1993)
n=-1 as HF(1993) =HF(1960)>HF(1974)

اما القيم التوقعة عندما تكون $n \geq 1$ كما يأتي:-

n=-2 as HF(1974)> HF(1960)>HF(1993)

- تكون القيمة المتوقعة للغلاف$K_\alpha K_\beta$ عندما قيم n سالبةاكبر مما عليه عند القيم الموجبة لـn اي ان احتمالية تواجد الالكترونات تكون في المناطق القريبة من النواة.
- $\langle r_1^n \rangle_K$ < $\langle r_1^n \rangle_L$ عند القيم الموجبة لـn وذلك لأن النوى الثقيلة قوة التجاذب بين الكتروناتها كبيرة لاتسمح بتواجد الكترونات بعيدا عنها والعكس صحيح.

المصادر:

1- King, F.W.1991.Radial electronic density function for selected low-lying excited ^{2}s state of Li isoelectronic series Phys.Rev, 44: 3350-3353.

2-Roothaan, C.C, L.Sachs,and A.W.Weiss.1960.Analytical self-consistent field function for the atomic configurations $1s^2$,$1s^2 2s$, and $1s^2 2s^2$,Reviews of modern Physics, 32:186-193

3-Clementi, E. and Roetti.1974.Atomic Data and Nuclear Data Tables, 14:177-478.

4-Bunge, C.F, J.A.Barrientos, and A.V. Bunge .1993.Roothaan-Hartree Fock ground State atomic Wave function, Atomic Data Nucl.Data Table, 53:113-124.

5-Al-bayati, K.H., A.K.Ahamd and N. CH.Al-Tamimei 2006. Calculation of the one –particle expectation Values to some atoms and ions. Um-Salama Science Journal, College of Science for Women, Baghdad University,3:246-253.

6-Al-Asaad, B.H, A.2005. Study of the physical properties for the electrons outer shells for some atoms, M.Sc Thesis college of Scince for Women, Baghdad University,Baghdad, Iraq.

Evaluation of the one electron expectation values for different wave function of *Be* atom

Ban H.Al-asaad ***Khalil H.Al-bayati****
Salaah A.Hasson*

*Physics department Baghdad University - College of Science for Women

Abstract:

The aim of this work is to evaluate the one- electron expectation value $\langle r_1^n \rangle$ from the radial electronic density function $D(r_1)$ for different wave function for the ^2S state of *Be* atom . The wave function used were published in 1960,1974and 1993, respectavily.

Using Hartree-Fock wave function as a Slater determinant has used the partitioning technique for the analysis open shell system of *Be* ($1s^2 2s^2$) state, the analyze *Be* atom for six-pairs electronic wave function , tow of these are for intra-shells (K,L) and the rest for inter-shells(KL) . The results are obtained numerically by using computer programs (Mathcad).