

حساب دالة توزيع الكثافة القطرية للمدارات الرئيسية لذرة الكربون والأيونات المشابهة لها (N^+, B^-)

خليل هادي البياتي* وسن علي حسين* ميسون عبد الحميد محمود*

استلام البحث 18، كانون الاول، 2012
قبول النشر 12، شباط، 2014

الخلاصة:

تم حساب دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد $D(r_i)$ للمدارات الرئيسية لذرة الكربون والأيونات المشابهة لها (N^+, B^-) باستعمال تقنية التجزئة. تم عرض النتائج للقشرة K وللقشرة L لذرة الكربون والأيون السالب لذرة البورون والأيون الموجب لذرة النتروجين. تمت ملاحظة أنه عند زيادة العدد الذري تزداد احتمالية وجود الإلكترونات قرب النواة وبذلك تقل قيمة $(r_1 \max)$ بزيادة العدد الذري. تم في هذا البحث برمجة دالة هارترى - فوك باستعمال البرنامج الحاسوبي الماتكاد.

الكلمات المفتاحية: كثافة الجسيمين - هارترى-فوك- دالة توزيع الكثافة القطرية

المقدمة:

الكثافة الجسيمين في أي نظام ذري متعدد الإلكترونات يمكن أن تعرف كالاتي [1, 2]:

$$\Gamma_{ij}(X_m, X_n) = \frac{1}{2} \sum_{i < j} \frac{[\phi_i(X_m)\phi_j(X_n)]^2}{[\phi_j(X_m)\phi_i(X_n)]^2} \quad (5)$$

ويمكن تجزئة كثافة الجسيمين لكل غلاف الكتروني كما يأتي:

1- للغلاف $K_\alpha K_\beta$ يمكن كتابة كثافة الجسيمين كما يأتي:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(1, 2) = \frac{1}{2} [\phi_i(1)\phi_j(2) - \phi_j(1)\phi_i(2)]^2 = \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} \varphi_{1s}(1)\alpha(1)\varphi_{1s}(2)\beta(2) \\ -\varphi_{1s}(1)\beta(1)\varphi_{1s}(2)\alpha(2) \end{matrix} \right]^2 \quad (6)$$

2- الغلاف L يتكون من مدارين 2P و 2S، أن دالة الكثافة للمدار $(L_{2s}\alpha L_{2s}\beta)$ يمكن كتابتها كالاتي:

$$\Gamma_{\alpha\beta}(1, 2) = \frac{1}{2} \left[\begin{matrix} \varphi_{2s}(1)\alpha(1)\varphi_{2s}(2)\beta(2) \\ -\varphi_{2s}(1)\beta(1)\varphi_{2s}(2)\alpha(2) \end{matrix} \right]^2 \quad (7)$$

أما الكترونيات المدار $(L_{2p}\alpha L_{2p}\alpha)$ 2P فإن كثافة الجسيمين تكتب بالشكل الآتي:

كثافة الجسيمين في أي نظام ذري متعدد الإلكترونات يمكن أن تعرف كالاتي [1, 2]:

$$\Gamma_{HF}(x_m, x_n) = \binom{N}{2} \int \frac{\psi^*(\dots x_p \dots)}{\psi(\dots x_p \dots)} dx_p \quad (1)$$

أذ x_p تمثل مجموعة من الإحداثيات الفضائية والمغزلية للإلكترون p و dx_p مما يشير إلى إن التكامل يشمل جميع الإلكترونات باستثناء m, n ,

أما العامل $\binom{N}{2}$ فيسمى عامل التعددية

(Multiplicity coefficient) وضع ليضمن كون مصفوفة الكثافة من الرتبة الثانية عيارية لعدد أزواج الإلكترونات ضمن النظام ويكتب كالاتي:

$$\binom{N}{2} = \left[\frac{N!}{2!(N-2)!} \right] \dots (2)$$

وعند التجزئة إلى أزواج فإن كثافة الجسيمين تكتب بالصيغة:

$$\Gamma_{ij}(X_m, X_n) = \frac{1}{2} \sum_{i < j} B_{ij} B_{ij}^* \dots (3)$$

اذ:

$$B_{ij} = \phi_i(m)\phi_j(n) - \phi_j(m)\phi_i(n) \quad (4)$$

و ϕ_i هي المدارات المغزلية (spin orbital)

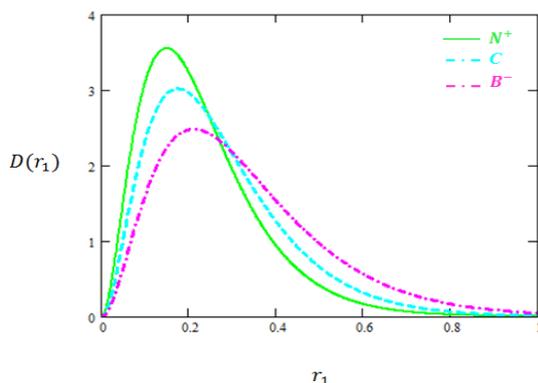
المعايرة المشغولة في تقريب هارترى-فوك، اذ i, j أرقام المدارات المغزلية المشغولة و n, m تشير إلى

جدول (2): القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة القطرية وموقعها للمدار 2S لذرة الكربون والايونات المشابهة لها .

Atom or Ion	2S	
	$D(r_1)_{max}$	r_1
B ⁻	0.074202	0.1673
	0.49149	1.5619
C	0.11069	0.1392
	0.66359	1.2194
N ⁺	0.15507	0.1173
	0.85753	0.9883

جدول (3): القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة القطرية وموقعها للمدار 2P لذرة الكربون والايونات المشابهة لها .

Atom or Ion	2P	
	$D(r_1)_{max}$	r_1
B ⁻	0.28252	1.8262
C	0.53076	1.2114
N ⁺	0.74078	0.9172



شكل (1): دالة توزيع الكثافة القطرية لجسم واحد $D(r_1)$ للقشرة K لذرة الكربون والايونات المشابهة لها

$$\Gamma_{\alpha}(1,2) = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} \varphi_{2p_x}(1)\alpha(1)\varphi_{2p_y}(2)\alpha(2) \\ - \varphi_{2p_y}(1)\alpha(1)\varphi_{2p_x}(2)\alpha(2) \end{array} \right]^2$$

$$D(r_1, r_2) \dots \dots \dots (8)$$

دالة توزيع الكثافة القطرية لإلكترونين

إن دالة توزيع الكثافة القطرية لإلكترونين تعطي قياساً لكثافة الاحتمالية لوجود الإلكترونين حول النواة من خلال الإحداثيات القطرية في المدى من r_1 إلى r_1+dr_1 وإلى r_2 إلى r_2+dr_2 . ومن خلال $D(r_1, r_2)$ يمكن أن نتعرف على تأثير التفاعل بين الإلكترونين في احتمالية توزيعهما في الفضاء. تكون دالة توزيع الكثافة القطرية لكل قشرة الكترونية معرفة بالشكل الآتي [6,5]:

$$D(r_1, r_2) = \iint \Gamma(x_1, x_2) r_1^2 r_2^2 d\Omega_1 d\Omega_2 d\sigma_1 d\sigma_2 \dots \dots \dots (9)$$

اذ تمثل $d\sigma_k$ البرم و $d\Omega_k$ تشير إلى إن التكامل لكل إحداثيات الزاوية لمتجه الموقع ويمكن التعبير عنها بالشكل:

$$d\Omega_k = \sin \theta_k d\theta_k d\phi_k \dots (10)$$

اذ $k=1$ أو $k=2$ ، وبذلك نستطيع حساب دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم من المعادلة الآتية [6]:

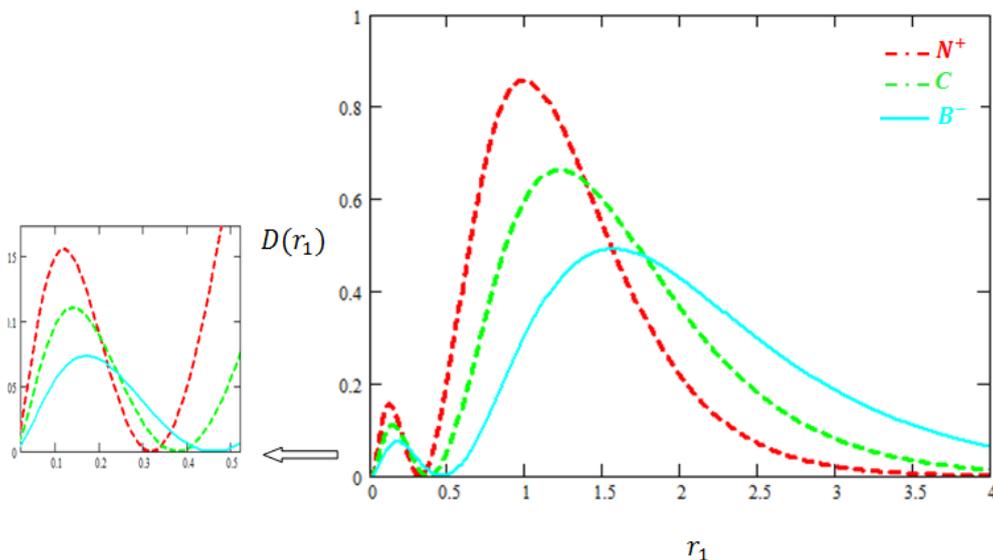
$$D(r_1) = \int_0^{\infty} D(r_1, r_2) dr_2 \dots (11)$$

الحسابات والنتائج:

باستعمال المعادلة (11) تم حساب دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم للمدارات الرئيسية لذرة الكربون والايونات المشابهة لها، وتم رسم دالة توزيع الكثافة القطرية للمدارات الرئيسية كما موضح في الأشكال (1) و(2) و(3)، والقيم العظمى للـ $D(r_1)$ للغلافين K وL موضحة في الجداول (1) و(2) و(3).

جدول (1): القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة القطرية وموقعها للمدار 1S لذرة الكربون والايونات المشابهة لها .

Atom or Ion	Results and comparison	1S	
		$D(r_1)_{max}$	r_1
B ⁻	P.w	2.4914	0.2097
	Ref[7]	2.484	0.21
C	P.w	3.0149	0.1743
	Ref[7]	3.022	0.17
N ⁺	P.w	3.5506	0.1488
	Ref[7]	3.564	0.15



شكل (2): دالة توزيع الكثافة القطرية لجسم واحد $D(r_1)$ للمدار $2S$ لذرة الكربون والايونات المشابهة لها

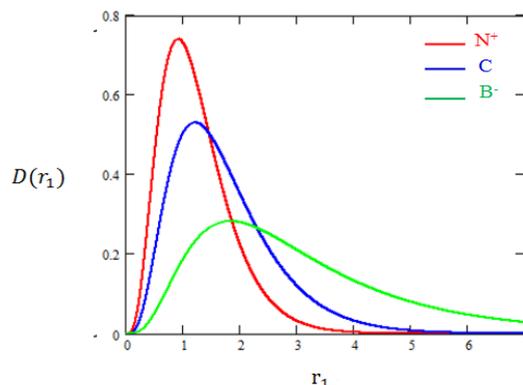
أما الغلاف L فله مداران $(2P, 2S)$ ، في كلا المدارين نلاحظ أن القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة $D(r_1)$ تزداد بزيادة العدد الذري ويقابله أيضا نقصان في قيم r_1 أي اقتراب المواقع من النواة . ومن ملاحظة الشكل (3) نجد أن هناك قمتين ، قمة صغيرة عند مسافة صغيرة من النواة وأخرى كبيرة على مسافة ابعدها منها ، القمة الكبيرة تمثل أغلبية الاحتمالية لوجود الإلكترون وهو تمثيل لوجود الإلكترون في المدار $2S$ ، أما القمة الصغيرة فتمثل احتمالية وجوده في المدار $1S$ إن هذه الظاهرة تسمى (بظاهرة الاختراق) أي أن الإلكترون له القدرة على اختراق الغلاف L ليكث مدة قصيرة في القشرة K .

الاستنتاجات:

- 1- القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة القطرية $D(r_1)$ تزداد بزيادة العدد الذري ، وبما يقابل ذلك نلاحظ نقصاناً في قيم أنصاف أقطار (r_1) المدارات الإلكترونية .
- 2- أعلى قيمة لدالة الكثافة القطرية هي للمدار $1S$ وأقل للمدار $2S$ ثم أقل للمدار $2P$.
- 3- تظهر للمدار $2S$ قمتان ، قمة صغيرة عند مسافة صغيرة من النواة وأخرى كبيرة على مسافة ابعدها منها .

المصادر:

1. Koga, T. and Matsuyama, H. 2004. Interelectronic angle densities of equivalent electrons in Hartree–



شكل (3): دالة توزيع الكثافة القطرية لجسم واحد $D(r_1)$ للمدار $2P$ لذرة الكربون والايونات المشابهة لها

المناقشة:

نلاحظ إن القيم العظمى لدالة توزيع الكثافة القطرية $D(r_1)$ تزداد بزيادة العدد الذري ، وبما يقابل ذلك نلاحظ نقصاناً في قيم أنصاف أقطار المدارات الإلكترونية (r_1) ويعزى السبب في ذلك إلى زيادة قوة الجذب الإلكترونيستاتيكي بزيادة العدد الذري ، وكذلك زيادة تنافر هذه الإلكترونات مع بعضها لذلك تحدث زيادة في قيم دالة توزيع الكثافة القطرية ، كما نلاحظ أن منحنيات $D(r_1)$ عندما تبتعد كثيراً عن النواة تبدأ بالاضمحلال إلى أن تنتهي إلى قيمة صغيرة جداً .

والجداول (1) و (2) و (3) تبين أن أعلى قيمة لدالة الكثافة القطرية هي للمدار $1S$ وأقل للمدار $2S$ ثم أقل للمدار $2P$ والسبب كلما ابتعد المدار عن النواة تقل قوة جذب النواة .

- electron atoms, J. Theo. Chem. Acc, 118(6):931–935
5. Banyard, K. E. and Baker, C. 1969. Analysis of Electron Correlation in Two-Electron Systems. I. H^- , He, and Li^+ , J. Chem. Phys, 51(6) : 2680
 6. Matsuyama, H. and Koga, T. 2010. Inner and outer radial density functions in singly-excited 1snl states of the He atom, J. Comp & App Math, 233(6): 1584-1589.
 7. Hadi, B.S .2013. M.Sc. Thesis: Study the Scattering effect for the closed shell atomic shell ,college of science for women, University of Baghdad .
1. Fock theory of atoms, J. Chem. Phys, 120(17):7831- 7836.
 2. Seddon, G.J. and Banyard, K.E. 1973. Coulomb holes and expectation values configuration interaction wavefunction , J. Chem. Phys, 59(3) :1065 .
 3. Banyard, K. E. and Mobbs, R. J. 1981. Coulomb holes and correlation coefficients for electronic shells: A comparative analysis of several wave functions for Be, J. Chem, Phys, 75(7): 3433.
 4. Koga, T. and Matsuyama, H. 2007. Direct and exchange contributions to inner and outer radii in many-

Calculation of Radial Density Distribution Function for main orbital of Carbon atom and Carbon like ions

*Khalil H. AL-Bayati**

*Wasan Ali Hussein**

*Maysoon Abdul Hameed Mahmood**

*Physics department, College of Science for Women, Baghdad University

Abstract:

Radial density distribution function of one particle $D(r_1)$ was calculated for main orbital of carbon atom and carbon like ions (N^+ and B^-) by using the Partitioning technique. The results presented for K and L shells for the Carbon atom and negative ion of Boron and positive ion for nitrogen ion. We observed that as atomic number increases the probability of existence of electrons near the nucleus increases and the maximum of the location r_1 decreases. In this research the Hartree-fock wavefunctions have been computed using Mathcad computer software.