دراسة القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين للقشرة الداخلية والخارجية

خليل هادي البياتي* بان حسن عادل الأسعد* بيداء سامي هادي*

استلام البحث 20، كانون الاول، 2012
قبول النشر 11، اذار، 2014

الخلاصة :
في هذا البحث تمت دراسة القيمة المتوقعة للمسافة البينية لجسيمين $\langle r_{12}^n \rangle$ لذرتي الهليوم He والبريليوم Be والايونات المشابهة لهما (Li^{-1}, B^{+1}‖ Li^{+1}, Be^{+2}, B^{+3}) باستخدام دالة هارتري – فوك ومقارنة النتائج لبعض الأيونات ذات العدد الذري المشترك من المجموعتين مع بعضها . تمت مقارنة النتائج مع النتائج المنشورة للدراسات السابقة .

الكلمات المفتاحية : دالة هارتري- فوك، القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين، المسافة البينية، الانحراف المعياري.

المقدمة:

في الانظمة الذرية متعددة الالكترونات يمكن كتابة كثافة الجسيمين $\Gamma_{HF}(X_m,X_n)$ بالعلاقة الأتية [1, 2]:

$$\Gamma_{HF}(X_m,X_n)=\binom{N}{2}\int\psi(X_1,X_2...X_i)\psi^*(X_1,X_2...X_i)\,dX_p...dX_N \quad \ldots(1)$$

حيث ان X_i تمثل مجموعة الاحداثيات الفضائية (للالكترون i)، وان dX_N ... dXp تمثل التكامل لجميع الألكترونات ماعدا n,m .
اما العامل $\binom{N}{2}$ فأنه يضمن عيارية المصفوفة لعدد الأزواج الألكترونية بأعتبار ان $\Gamma_{HF}(X_m,X_n)$ تمثل دالة للجسيمين n,m وان ناتج التكامل للدالة يعطي عدد الازواج في النظام وكالأتي[3,4]:-

$$\int\Gamma_{HF}(X_m,X_n)\,dX_m\,dX_n=\binom{N}{2}=\frac{N!}{[2!(N-2)!]} \quad \ldots(2)$$

يمكن حساب القيمة المتوقعة للمسافة بين اي الكترونين $\langle r_{12}^n \rangle$ بالمعادلة الأتية [5]:-

$$\langle r_{12}^n \rangle=\int_0^\infty f(r_{12})\,r_{12}^n\,dr_{12} \quad \ldots(3)$$

حيث ان :

$$(2 \geq n \geq -2)$$

وان دالة المسافة البينية $f_{ij}(r_{12})$ يمكن حسابها من المعادلة التي وضعها كولسن ونولسن [6] :-

$$f_{ij}(r_{12})\,dr_{12}=\int\Gamma_{ij}(r_1,r_2)\,dr_1\,dr_2 \quad \ldots(4)$$

اذ ان (i,j) يمثل اوربيتال البرم .
ان من الجدير بالذكر ان لحساب القيمة المتوقعة لقيم n المختلفة اهمية كبيرة في حساب الطاقة عند قيمة n=-1 وكذلك الانحراف المعياري من خلال العلاقة الاتية [7] :-

$$\Delta r_{12}=\sqrt{\langle r_{12}^2\rangle-\langle r_{12}\rangle^2} \quad \ldots(5)$$

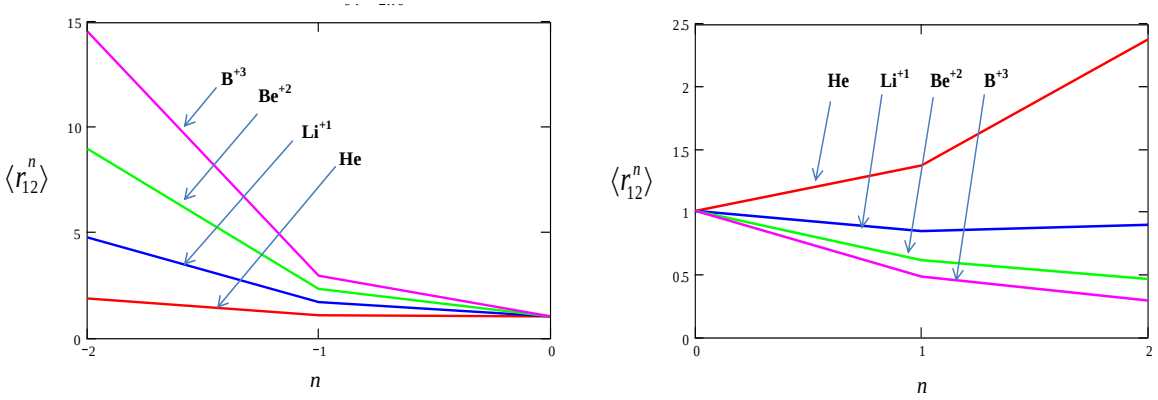
النتائج والمناقشة :

استخدمت المعادلتين (3)و(5) في حساب القيمة المتوقعة $\langle r_{12}^n \rangle$ والانحراف المعياري لذرة الهليوم He والايونات (Li^{+1}, Be^{+2}, B^{+3}) والنتائج مبينة في الجدول (1) والشكل (1) ، اما نتائج القيمة المتوقعة لذرة البريليوم Be والايونات المشابهة لها (Li^{-1}, B^{+1}) في القشرة K(1s) فموضحة في الجدول (2) والشكلين (2) و (3) ، اما الشكل (4) فيمثل العلاقة بين القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين لمجموعة الهليوم ومجموعة البريليوم مع العدد الذري Z.
وجميع النتائج في هذا البحث محسوبة بالوحدات الذرية a. u. .

*قسم الفيزياء / كلية العلوم للبنات / جامعة بغداد

جدول (1) : القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين لذرة الهليوم والايونات المشابهة لها في الغلاف الالكتروني K(1s)

shell	Atom or ion	Results and comparisons	$\langle r_{12}^n \rangle$ (a. u.)					Δr_{12}
			n=2	n=1	n=0	n=-1	n=-2	
K (1s)	He	Present work Ref.[8,1]	2.369648 2.3696	1.3621263 1.3621	1.000003	1.025773 1.0258	1.842052 1.8420	0.717119 0.7171
	Li^{+1}	Present work Ref.[8,1]	0.890632 0.8906	0.8383080 0.8383	0.999993	1.651677 1.6516	4.726370 4.7263	0.433442 0.4334
	Be^{+2}	Present work Ref.[1]	0.463663 0.463663	0.6058200 0.60582	1.000006	2.277081 2.277081	8.944018 8.944018	0.310878 0.3109
	B^{+3}	----------	0.283769	0.4743450	0.999999	2.902277	14.494845	0.242417

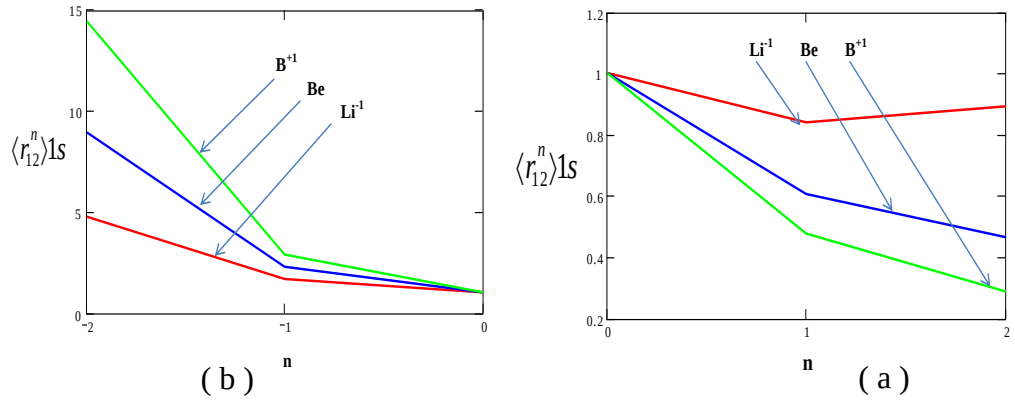


(b) (a)

شكل (1) : القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين لذرة الهليوم والايونات المشابهة لها للقشرة $K(^1s)$
a) عندما n قيمة موجبة. b) عندما n قيمة سالبة.

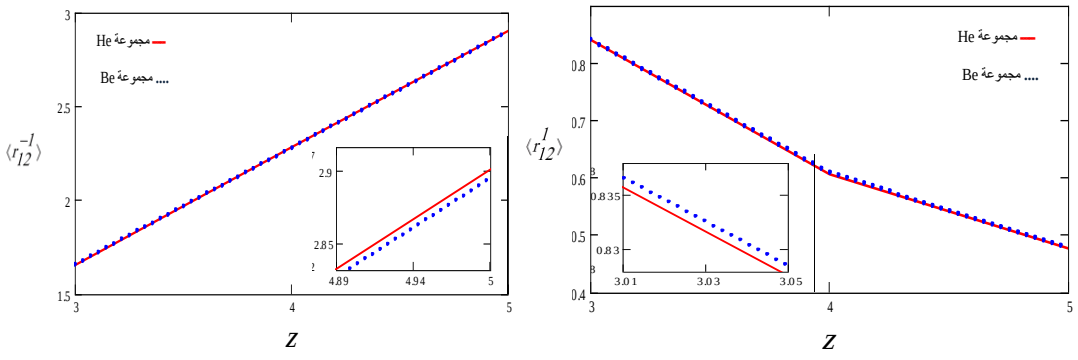
جدول (2) : القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين لذرة البريليوم والايونات المشابهة لها في الغلاف K(1s)

shell	Atom or ion	Results and comparisons	$\langle r_{12}^n \rangle$ (a. u.)					Δr_{12}
			n=2	n=1	n=0	n=-1	n=-2	
K (1s)	Li^{-1}	Present work Ref.[8,1]	0.892731 0.8927	0.839195 0.8392	0.999999	1.650262 1.6502	4.718942 4.7189	0.434146 0.4342
	Be	Present work Ref.[8,1]	0.465909 0.4659	0.607136 0.6071	0.999999	2.272987 2.2730	8.914689 8.9146	0.311921 0.3119
	B^{+1}	Present work Ref.[1]	0.285370 0.285358	0.475553 0.47555	1.000000	2.896191 2.896208	14.43930 14.43950	0.243350 0.2433



(b) (a)

شكل (2) : القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين لذرة البريليوم والايونات المشابهة لها للقشرة $K(^1s)$
a) عندما n قيمة موجبة. b) عندما n قيمة سالبة.



(b)   (a)

شكل (4) : مقارنة القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين مع العدد الذري للمجموعتين للقشرة $K(^1s)$
a) عندما n=1 .   b) عندما n=-1 .

عند فحص وتحليل النتائج والتحقق من شرط العيارية في الجداول والرسومات نستخلص المؤشرات التالية :-

1) عند زيادة العدد الذري Z تزداد القيمة المتوقعة اي كلما اقتربنا من النواة،(عند القيم السالبة لـ n) وذلك بسبب قوة التجاذب بين النواة (الشحنة الموجبة) والالكترونات (الشحنة السالبة) .

2) عند زيادة العدد الذري تقل القيمة المتوقعة لاحتمالية تواجد الالكترونات حول النواة عند القيم الموجبة لـ n وتفسير ذلك يعزى الى ضعف قوة التجاذب بين الالكترونات والنواة.

3) عند زيادة العدد الذري تزداد قوة التنافر بين الالكترونين في القشرة K للذرات والايونات قيد الدراسة .

4) عند زيادة العدد الذري تقل قيم الانحراف المعياري .

الاستنتاجات:

من خلال مقارنة نتائج طاقة التنافر بين مجموعة الذرات التي تحوي الكترونين والذرات التي تحوي اربعة الكترونات ان القشرة K في المجموعة الثانية (مجموعة ذرة البريليوم Be والايونات المشابهة لها (Li^-, B^{+1})) اقرب الى النواة مما عليها في المجموعة الاولى (مجموعة ذرة الهليوم He والايونات المشابهة لها (Li^{+1}, Be^{+2}, B^{+3})) .

المصادر :

1- Al-Asaad, B. H., (**2005**), " M. Sc. , Thesis: A study of the physical properties for the electrons outer shells for some atoms", Baghdad University (College of Science for Women), Baghdad, Iraq.

2- Reid, E., (**2010**), Physical Chemistry, Pearson Education, Inc., 3rd Edition, University of Washington, in the United States of America, 1103 .

3- Ibrahim, N. I., (**2012**), " M. Sc. Thesis: Study of the Scattering Factor and Some Atomic Properties for Be and Be - like ions", Baghdad University (College of Science for Women), Baghdad, Iraq.

4- AL-Tamimei, N. C., (**2005**), "Ph.D. Thesis: Calculation of effect of electronic correlation force on the energy of some atoms ", Baghdad University (College of Science for Women), Baghdad, Iraq.

5- Al-bayati, K. H. and Hasson, S. A. and Al-asaad, B. H., (**2009**), " Evaluation of the electron correlation for lithium atom (Li) in ground state", Um-Salama J. sci. (binder 6(1):62.

6- Al-Robayi, E. M., (**2007**), "Numerical Evaluation for the Electron- Electron Distribution Function for the Four-Electron Systems for $1s^2$ $2s^2$-State by using Hartree- Fock Method", Babylon J. sci. (binder 3(14): 117.

7- Al-Bayati, K. H., (**1984**), "Ph.D .Thesis: Electron Correlation in the $(1s2s)^2s$ and $(1s2p)^2p$ states of the Lithium Isoelectronic sequence in Position and Momentum Space", University of Leicester(England), Faculty of Science.

functions", Baghdad University (college of education (Ibn-AL-Haitham)) Baghdad, Iraq.

8- Murshed, M. N., (**2004**), "Ph.D. Thesis: Evaluation of X-Ray Scattering Factor for Closed Shell Atoms using Hartree-Fock and Correlated Wave

Study of the Inter-Particle Expectation Values for Inter and Outer Shell

Khalil H. Al-Bayati* Ban H. Al-Asaad* Baidaa S. H.*

*Baghdad university/ College of Science for Women/ Department of Physics

Abstract:

In this research the Inter-Particle Expectation Values $\left\langle r_{12}^{n} \right\rangle$ have been studied for atomics Helium (He) and Beryllium (Be) also for He-like ions, Be-like ions (Li^{-1}, B^{+1}‖ Li^{+1}, Be^{+2}, B^{+3}) by using Hartree-Fock wave functions, We compared the results to some ions which have the same atomic number from each group with atomic number, We compared the results with published calculations to the last studied .