

حساب القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ لمجموعة من الذرات والأيونات

خليل هادي البياتي* احمد كمال احمد** نعيمة جيجان*

تاريخ قبول النشر ٢٠٠٦/٤/٣

خلاصة البحث

تم استخدام تقنية التجزئة لتحليل ذرة البريليوم Be والايون السالب لذرة الليثيوم Li^{-1} الى ستة ازواج من الدوال الموجية ، اثنان منها للغلافين (K) و (L) والبقية للاغلفة الوسطية (KL) ولتحليل ذرة الليثيوم والايون الموجب لذرة البريليوم Be^{+1} الى ثلاثة ازواج من الدوال الموجية ، زوج للغلاف (K) والبقية للاغلفة الوسطية (KL) باستخدام دالة موجة هارترتي-فوك (HF) . ولكل غلاف الكتروني تم حساب القيم المتوقعة لتواجد الالكترون $\langle r_1^n \rangle$ ورسمت العلاقة بين هذه القيم وقيم n عندما $-2 \leq n \leq +2$ حيث القيم السالبة تمثل المناطق القريبة من النواة والقيم الموجبة تمثل المناطق البعيدة في سحابة الشحنة الالكترونية وقورنت نتائج هذا البحث مع نتائج بحوث منشورة . كل رسم في هذا العمل يحقق شرط المعيارية للواحد وكل النتائج تم حسابها عددياً باستخدام برامج حاسوبية باستخدام برنامج الماتكاد $(Mathcad)$.

دالة موجة هارترتي - فوك $Hartree-Fock$ wave function

دوال موجة هارترتي - فوك الذرية تقريب لنموذج الجسيم الحر (Independent particle-model approximation) لمعادله شرودنكر غير النسبية للحالات المستقرة ، حيث المحددة المنفرده يمكن ان تكتب كحاصل ضرب غير متماثل لجميع اوربتالات هارترتي- فوك المغزلية $(Spin Hartree-Fock orbitals)$ والمشغولة للذرات والايونات كما موضع ادناه :

$$\psi_{HF}(123\dots N) = A \Pi(123\dots N) \quad \dots(1)$$

حيث A يمثل مؤثر عدم التماثل ، والذي يعطى بواسطة [1] :

$$A = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p p \quad \dots(2)$$

حيث تشير N الى عدد الالكترونات ، $(-1)^p$ تاخذ القيم $+1$ و -1 للتبديلات الزوجية والفردية ، P يمثل أي تبديل للالكترونات ، و العامل $\frac{1}{\sqrt{N!}}$ ادخل ليضمن عيارية الدالة الموجية .

حاصل الضرب $\Pi(123\dots N)$ في معادلة (4) يمكن ان يكتب كالاتي [2] :

$$\Pi(123\dots N) = |\phi_1(1)\phi_2(2)\phi_3(3)\dots\phi_N(N)| \quad \dots(3)$$

حيث ان $\phi_i(i)$ هي اوربتالات هارترتي فوك المغزلية التي تعتمد على الاحداثيات الفضائية والمغزلية للالكترون i وتعين هذه الاوربتالات بواسطة الاعداد $(N, \dots, 3, 2, 1)$ مبتدئين بادنى اوربتال مع الحركة المغزلية. ونتيجة لذلك فان كافة الاعداد الصحيحة الفردية تكون للحركة المغزلية α والزوجية للحركة المغزلية β :
وعند التجزئة الى ازواج يمكن ان تكتب الدالة الموجية بالصيغة الآتية :

$$\psi_{HF}(123\dots N) = \sum_{i < j} A_{ij}^{mn} (-1)^p A \Pi_{ij} \quad \dots(4)$$

حيث دالة الزوج A_{ij}^{mn} يمكن ان تعرف كالاتي [2] :

$$A_{ij}^{mn} = \phi_i(m)\phi_j(n) - \phi_j(m)\phi_i(n) \quad \dots(5)$$

و Π_{ij} تمثل حاصل ضرب اوربتالات هارترتي - فوك المغزلية والمشغولة باستثناء $\phi_i(m)$ و $\phi_j(n)$ ، i و j تشير الى الاوربتالات المغزلية بينما m و n تشير الى الالكترونات. معادلة (1) يمكن ان يعبر عنها بمحددة سليتر (Slater determinant) أي ان [3] :

*قسم الفيزياء - كلية العلوم للبنات - جامعة بغداد

**قسم الفيزياء - كلية العلوم - جامعة النهرين

النظرية : Theory

في النظام الذري المتعدد الالكترونات ، كثافة الجسيمين يمكن ان تعرف كالاتي [5] :

$$\Gamma_{HF}(\chi_m, \chi_n) = \binom{N}{2} \int \psi^*(\dots \chi_p \dots) \psi(\dots \chi_p \dots) d\chi_p \dots (12)$$

حيث χ_p تمثل مجموعة الاحداثيات الفضائية والحركة المغزلية للالكترون p و $d\chi_p$ يشير الى ان التكامل يشمل جميع الالكترونات باستثناء n, m . اما العامل $\binom{N}{2}$ فأدخل ليضمن عيارية مصفوفة الكثافة من الرتبة الثانية ($\Gamma(\chi_m, \chi_n)$ The second-order density matrix) لعدد ازواج الالكترونات ضمن النظام

$$\int \Gamma_{HF}(\chi_m, \chi_n) d\chi_m d\chi_n = \binom{N}{2} \dots (13)$$

حيث $\binom{N}{2}$ تساوي :

$$\binom{N}{2} = \left[\frac{N!}{2!(N-2)!} \right] \dots (14)$$

وعند التجزئة الى ازواج (i, j) ، فإن كثافة الجسيمين يمكن ان تكتب بالصيغة :

$$\Gamma_{HF}(\chi_m, \chi_n) = \frac{1}{2} \sum_{i(j)} A_{ij}^{mm} (A_{ij}^{mm})^* \dots (15)$$

حيث ان A_{ij}^{mm} معرفة كما في المعادلة (5) . والكثافة Γ لكل زوج الكتروني (i, j) تحقق شرط العيارية . ويمكن تجزئة الكثافة لجسيمين لكل غلاف الكتروني كما يأتي :
1- لجميع الانظمة الذرية والايونية المدروسة في هذا البحث اي الانظمة التي تحوي الكترونيين في الغلاف $K_\alpha K_\beta$ يمكن كتابة كثافة الجسيمين كالاتي :

$$\Gamma_{\alpha\beta}(1,2) = \frac{1}{2} [\phi_\alpha(1)\phi_\beta(2) - \phi_\beta(1)\phi_\alpha(2)]^2 \dots (16)$$

$$= \frac{1}{2} [\phi_\alpha(1)\alpha(1)\phi_\beta(2)\beta(2) - \phi_\beta(1)\beta(1)\phi_\alpha(2)\alpha(2)]^2 \dots (17)$$

$$\Gamma_{K(\alpha)}(1,2) = [\phi_\alpha(1)\phi_\alpha(2)]^2 \left[\frac{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \right] \dots (18)$$

$$\psi_{HF}(123..N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1) & \phi_1(2) & \dots & \dots & \phi_1(N) \\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_N(1) & \phi_N(2) & \dots & \dots & \phi_N(N) \end{vmatrix} \dots (6)$$

وتوصف اوربتالات هارترى - فوك على انها تركيب خطي من مجموعة متكاملة من الدالات المعروفة التي تدعى بالدوال الاساسية (Basis function) ، لذا لاي ذرة او ايون اوربتالات هارترى-فوك الفضائية يمكن ان تكتب كالاتي [4] :

$$\phi_{HF} = \sum_{i=1}^J c_i \chi_i \dots (7)$$

حيث c_i معامل ثابت (Constant coefficient)

تنتج من طريقة SCF و χ_i دوال اساسية كالاوربتالات السليترية النوع العيارية (STO's) ، و التي يعبر عنها كما يأتي :

$$\chi_{nlm_\ell}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm_\ell}(\theta, \phi) \dots (8)$$

حيث $R_{nl}(r)$ يمثل الجزء القطري للدالة الموجية و يعطى بواسطة :

$$R_{nl}(r) = N_{nlm_\ell} S_{nl}(r) \dots (9)$$

في معادلة (11) يمثل ثابت العيارية و يساوي :

$$N_{nlm_\ell} = \frac{(2\zeta)^{n+\frac{1}{2}}}{[(2n)!]^{\frac{1}{2}}} \dots (10)$$

$$S_{nl}(r) = r^{n-1} e^{-\zeta r} \dots (11)$$

حيث $S_{nl}(r)$ تسمى بالاوربتالات

السليترية النوع (STO's) ، ζ يمثل معامل الاوربتال (Orbital exponent)

و $Y_{lm_\ell}(\theta, \phi)$ يمثل الجزء الزاوي من الدالة الموجية .

وبذلك نستطيع ان نحسب القيم المتوقعة لجسيم واحد ولكل غلاف الكتروني باستخدام العلاقة الآتية :

$$\langle r_1^n \rangle = \int \int \Gamma(\chi_1, \chi_2) r_1^n dr_1 dr_2 d\sigma_1 d\sigma_2 \dots (26)$$

وللمزيد من التفاصيل اقرأ (M. Sc. Thesis of AL-Tamime) [6]

ولقياس انتشار منحنى الدالة $D(r_1)$ حول القيم المتوقعة $\langle r_1^n \rangle$ يمكن الحصول عليه بوساطة الانحراف المعياري Δr_1 والمعرفة كالآتي :

$$\Delta r_1 = \sqrt{\langle r_1^2 \rangle - \langle r_1 \rangle^2} \dots (27)$$

اي ان Δr_1 تعني اختلاف القياسات المختلفة للكمية r_1 عن القيمة المتوقعة لها .

النتائج ، المناقشات والاستنتاجات Results , Discussions and Conclusions

تم استخدام معلومات الدوال الموجية الموضحة في الملحق للحصول على القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ والتي تمثل متوسط نصف القطر او القيمة المتوقعة لنصف القطر باستخدام معادلة (26) والنتائج مثبتة في الجدول (1) للغلافين $K'(s)$ و $L'(s)$ والجدول (2) للمدارات البيئية (KL) والاشكال البيانية الموضحة في الشكل (1)A و (1)B و (2) توضح العلاقة بين القيم المتوقعة لجسيم واحد n عندما $-2 \leq n \leq +2$ للغلفة (K) و (L) و (KL) على التوالي .

فمن خلال فحص المعلومات وتحليلها في الجدول (1) الذي يوضح القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ للغلافين $K'(s)$ و $L'(s)$ لبعض الذرات والايونات التي كانت مطابقة للنتائج المنشورة في [9,8,7,4] نستنتج العلاقات الآتية :

1. في جميع الذرات والايونات التي درست في هذا البحث تزداد $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف (K) عندما (n) تاخذ القيم (-1) ، (-2) على التوالي اي ان احتمالية تواجد الالكترون تزداد كلما اقتربنا من النواة ونقل $\langle r_1^n \rangle$ عندما تاخذ (n) القيم (+1) ، (+2) على التوالي باستثناء ذرة الهليوم حيث تزداد $\langle r_1^n \rangle$ عند القيم المذكورة اعلاه لابتعاد

2. للغلاف $L_\alpha L_\beta$ بالتتابع نفس الاجراءات اعلاه يستحصل على كثافة الجسيمين لذرة البريليوم والايونات المشابهة لها كالآتي :

$$\Gamma_{\alpha\beta}(1,2) = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{2s}(1)\alpha(1)\phi_{2s}(2)\beta(2) - \phi_{2s}(1)\beta(1)\phi_{2s}(2)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \dots (19)$$

$$\Gamma_{L(s)}(1,2) = [\phi_{2s}(1)\phi_{2s}(2)]^2 \left[\frac{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \dots (20)$$

3- بالنسبة للغلفة الوسطية (KL-shells) ، وبعد اجراء بعض الترتيبات يمكن الحصول على الكثافة لجسيمين للحالات الثلاثية والفردية لذرة البريليوم (triplet and singlet state) والايونات المشابهة لها وكالآتي :

$$\Gamma_{KL(s)}(1,2) = \left[\frac{\phi_{2s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 [\alpha(1)\alpha(2)]^2 \dots (21)$$

$$\Gamma_{KL(s)}(1,2) = \left[\frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 [\beta(1)\beta(2)]^2 \dots (22)$$

$$\Gamma_{KL(s)}(1,2) = \left[\frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) - \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \left[\frac{\beta(1)\alpha(2) + \alpha(1)\beta(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \dots (23)$$

$$\Gamma_{KL(s)}(1,2) = \left[\frac{\phi_{1s}(1)\phi_{2s}(2) + \phi_{2s}(1)\phi_{1s}(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \left[\frac{\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \dots (24)$$

المعادلات (23,22,21) تمثل الحالة الثلاثية $KL(s)$ اما المعادلة (24) فتمثل الحالة الفردية $KL(s)$.

اما الحالات الثلاثية والفردية لذرة الليثيوم والايونات المشابهة لها فعند الغلاف $K_\alpha L_\alpha$ يمكن ان نطبق المعادلة (21) اما بالنسبة للغلاف $K_\beta L_\alpha$ فلا يمكن ان نطبق المعادلة (24) لكون الغلاف $2s$ غير مشبع وعليه تُكتب المعادلة بالصيغة الآتية :

$$\Gamma_{\alpha\beta}(1,2) = \frac{1}{2} \left[\frac{\phi_{1s}(1)\beta(1)\phi_{2s}(2)\alpha(2) - \phi_{2s}(1)\alpha(1)\phi_{1s}(2)\beta(2)}{\sqrt{2}} \right]^2 \dots (25)$$

وهذه العلاقة ناتجة عن زيادة تأثير الشحنة النووية لذرة البريليوم وايونها الموجب

اما عند فحصنا لجدول (2) الذي ثبتت فيه القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ للاغلفة الوسطية $KL^2(s) \equiv KL^1(s)$ والتي قورنت مع النتائج المنشورة في [8,9] فستنتج .

1. زيادة $\langle r_1^n \rangle$ عندما تذهب n من (-1) الى (-) 2) ومن (+1) الى (+2) لجميع الذرات والايونات المدروسة في هذا البحث كما موضح في الشكل (2) .

2. عند المقارنة بين الذرات المختلفة في العدد الذري وبين الذرات والايونات المشابهة لها في عدد الالكترونات نستنتج نفس العلاقة التي استنتجت عند دراستنا للغلافين $K^1(s)$ و $L^1(s)$.

3. اذا قارنا بين كل ذرة وايونها نجد في المنطقة القريبة من النواة (-n) تكون $\langle r_1^n \rangle$ لذرة الليثيوم اكبر مما لايون الليثيوم السالب ولذرة البريليوم اصغر مما لايون البريليوم الموجب لكن الشكل (2) لم يوضح هذه العلاقة بسبب تطابق منحنى الكثافة القطرية لجسيم واحد للغلاف $K^1(s)$ وتكون العلاقة عكسية في المنطقة البعيدة في سحابة الشحنة الالكترونية والشكل اعلاه يوضح هذه العلاقة بوضوح بسبب ابتعاد منحنى الكثافة القطرية لجسيم واحد للغلاف $L^1(s)$ لايون الليثيوم السالب واقترابه لايون البريليوم الموجب كما وضح سابقا

4. $\langle r_1^n \rangle$ عند (+n) اكبر من $\langle r_1^n \rangle$ عند (-n) لذرة وايون الليثيوم وبالعكس لذرة وايون البريليوم الموجب لزيادة تأثير الشحنة النووية .

5. الانحراف المعياري $\Delta(r_1)$ يقل بزيادة العدد الذري (Z) . وللغلاف $K^1(s)$ يكون $\Delta(r_1)$ في $Li^+ > Li^- > Li$ وفي Be^+ $Be^+ > Be > Be^+$ وللغلفة $L^1(s)$ و $KL^1(s)$ و $KL^2(s)$ يكون في $Li^- > Li$ وفي $Be > Be^+$.

6. $\Delta r_1(KL) > \Delta r_1(L) > \Delta r_1(K)$.

7. شرط العيارية يمكن الحصول عليه عند $n=0$ اي ان $\langle r_1^n \rangle = 1$ وتطبق هذه العلاقة على كل غلاف الكتروني .

الاستنتاجات : Conclusions

من العمل الحالي استنتجنا بعض الاستنتاجات لبعض الخواص الالكترونية مثل القيمة المتوقعة لتواجد الالكترون والانحراف المعياري وهذه الاستنتاجات هي :

الغلاف (K) عن النواة ، ويمكن ملاحظة ذلك في الشكل A(1) .

2. لكل ذرة او ايون تزداد $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف (L) عند الاقتراب من النواة (اي عندما n تاخذ قيم سالبة) باستثناء ايون الليثيوم السالب حيث تقل $\langle r_1^n \rangle$ بسبب ابتعاد الغلاف (L) عن النواة عند اكتسابه لالكترون لزيادة قوة التنافر بينه وبين الغلاف (L) . اما عندما نبتعد في سحابة الشحنة الالكترونية (اي عندما تاخذ n قيم موجبة) فان $\langle r_1^n \rangle$ تزداد لجميع الذرات والايونات كما موضح في الشكل B(1) .

3. للغلافين (K) و (L) بزيادة العدد الذري (Z) في الذرات المتعادلة كهربائيا تزداد $\langle r_1^n \rangle$ عند قيم n السالبة وتقل عند قيم n الموجبة وهذا ناتج عن انكماش كل غلاف باتجاه النواة . ونفس العلاقة نجدها اذا قارنا بين كل ذرة والايونات الشبيهة لها .

4. عند كل عملية تايين لذرتي الليثيوم والبريليوم تزداد $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف K عندما تاخذ n قيم سالبة ولايون الليثيوم الموجب اكبر مما لايون الليثيوم السالب وبالعكس عند قيم n الموجبة بالنسبة لذرة الليثيوم وايوناتها اما لذرة البريليوم عند $n = +1$ فان $\langle r_1^n \rangle$ في Be اكبر مما في Be^+ وهذه اكبر مما في Be^+ وعند $n = +2$ تكون في Be^+ اكبر مما في Be وهذه اكبر مما في Be^+ ولم توضح هذه العلاقة في الجدول اعلاه بسبب استخدام طريقة التقريب وينتج عن هذه العلاقة زيادة الانحراف المعياري لايون البريليوم الموجب Be^+ .

5. عند قيم n السالبة للغلاف (L) تكون $\langle r_1^n \rangle$ في $Li^- > Li$ وفي $Be^+ > Be$ وبالعكس عند قيم n الموجبة لابتعاد الغلاف في Li^- واقترابه في Be^+ .

6. عند (-n) للغلاف (K) تكون $\langle r_1^n \rangle$ اكبر مما عليه عند (+n) وبالعكس للغلاف (L) .

7. تكون $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف $K^1(s)$ اكبر من $\langle r_1^n \rangle$ للغلاف $L^1(s)$ عند (-n) وبالعكس عند (+n)

8. للغلاف (K) تكون $\langle r_1^n \rangle$ عند (-n) اصغر مما عليه للغلاف (L) عند (+n) لذرة وايون الليثيوم السالب وبالعكس لذرة وايون البريليوم الموجب . والعلاقة عكسية اذا قارنا بين $\langle r_1^n \rangle$ عند (+n) للغلاف (K) و (-n) للغلاف (L)

٢. كلما يقترب الغلاف الإلكتروني من النواة تزداد احتمالية تواجد الإلكترون في المناطق القريبة من النواة وتقل احتمالية تواجده في المنطقة البعيدة في سحابة الشحنة الإلكترونية وبالعكس عند ابتعاد الغلاف الإلكتروني عن النواة .
٣. يقل الانحراف المعياري بزيادة العدد الذري (Z) أي كلما يقترب الغلاف من النواة .

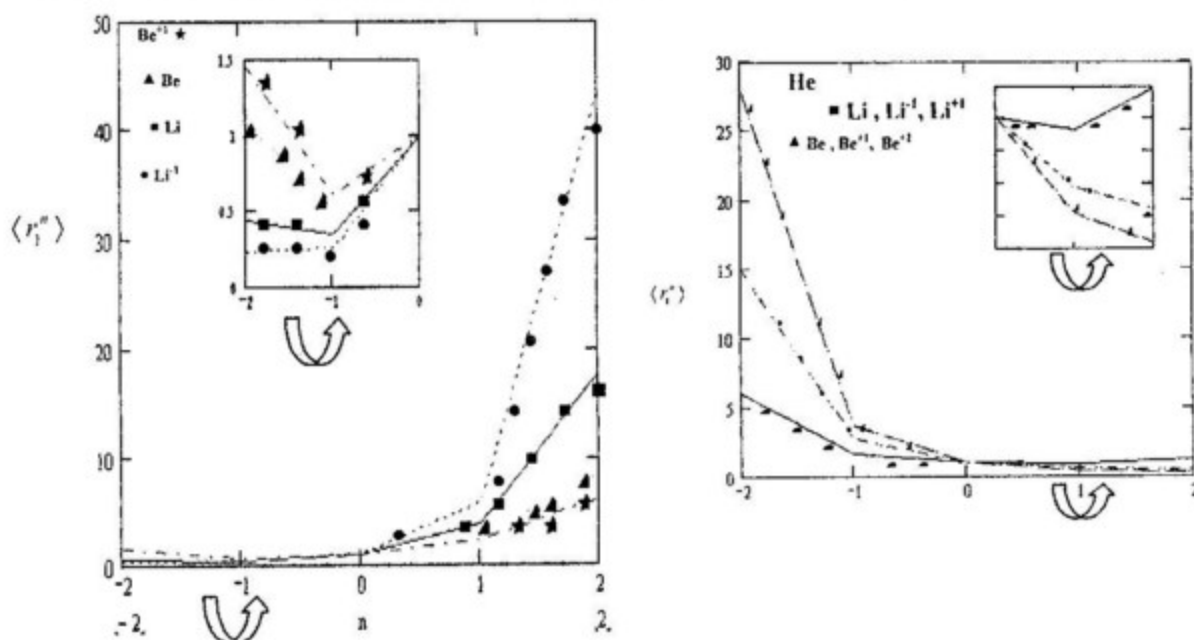
١. في المنطقة القريبة من النواة وفي جميع الاغلفة الإلكترونية تزداد القيم المتوقعة $\langle r_1^n \rangle$ بزيادة العدد الذري (Z) . وفي الغلاف (K) تكون هذه القيم في $Li^+ > Li > Li^-$ وفي $Be^{+2} > Be > Be^+$ أما في الاغلفة (L) و (KL) فتزداد هذه القيم للذرات في حالة فقدانها للإلكترون ونقل في حالة اكتسابها للإلكترون . والعلاقة عكسية في المنطقة البعيدة في سحابة الشحنة الإلكترونية .

جدول (1) : القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ والانحراف المعياري للغلافين $L(s)$ و $K(s)$.

shell	Atom or Ion	Results and comparisons	$n=2$	$n=1$	$n=1$	$n=2$	Δr_1
$K(s)$	He	Present work	5.9955	1.6873	0.9273	1.1848	0.5701
		Ref.[4]	5.9955	1.6873	0.9273	1.1848	...
	Li	Present work	14.8883	2.6850	0.5731	0.4468	0.3440
		Ref.[4]	14.8883	2.6850	0.5731	0.4468	...
	Li^-	Present work	14.8923	2.6855	0.5729	0.4464	0.3437
	
	Li^+	Present work	14.9102	2.6874	0.5724	0.4453	0.3431
		Ref.[7]	...	2.6874	0.5724	0.4453	0.3429
Be	Present work	27.7534	3.6819	0.4150	0.2330	0.2464	
	Ref.[8]	27.7590	3.6819	0.4149	0.2330	0.2465	
Be^+	Present work	27.7633	3.6824	0.4150	0.2330	0.2466	
	Ref.[9]	...	3.6824	0.4150	0.2330	...	
Be^{+2}	Present work	27.8249	3.6875	0.4141	0.2318	0.2460	
	Ref.[7]	...	3.6875	0.4141	0.2318	0.2456	
$L(s)$	Li	Present work	0.4354	0.3454	3.8737	17.7384	1.6532
		Ref.[4]	0.4354	0.3454	3.8737	17.7384	...
	Li^-	Present work	0.2255	0.2496	5.7503	43.5989	3.2454
	
Be	Present work	1.0556	0.5225	2.6494	8.4262	1.1861	
	Ref.[8]	1.0560	0.5225	2.6498	8.4318	1.1875	
Be^+	Present work	1.4496	0.6074	2.2801	6.0886	0.9434	
	

جدول (2) : القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ والانحراف المعياري للاغلفة الوسطية $KL(s) \equiv KL(s)$

shell	Atom or Ion	Results and comparisons	$n=2$	$n=1$	$n=1$	$n=2$	Δr_1
$KL(s) \equiv KL(s)$	Li	Present work	7.6619	1.5152	2.2234	9.0926	2.0369
		Ref.[9]	...	1.5152	2.2231	9.0874	...
	Li^-	Present work	7.5589	1.4675	3.1616	22.0226	3.4679
	
Be	Present work	14.4045	2.1022	1.5322	4.3296	1.4078	
	Ref.[8]	14.4080	2.1022	1.5324	4.3324	1.4086	
Be^+	Present work	14.6065	2.1449	1.3475	3.1608	1.1598	
	Ref.[9]	...	2.1449	1.3483	3.1670	...	



شكل (1) : العلاقة بين القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ و n للغلاف $L(s)$. حيث (A) للغلاف $K(s)$ و (B) للغلاف $L(s)$.

جدول (4) : معلومات لأيون الليثيوم الموجب
(Li+ve ion)

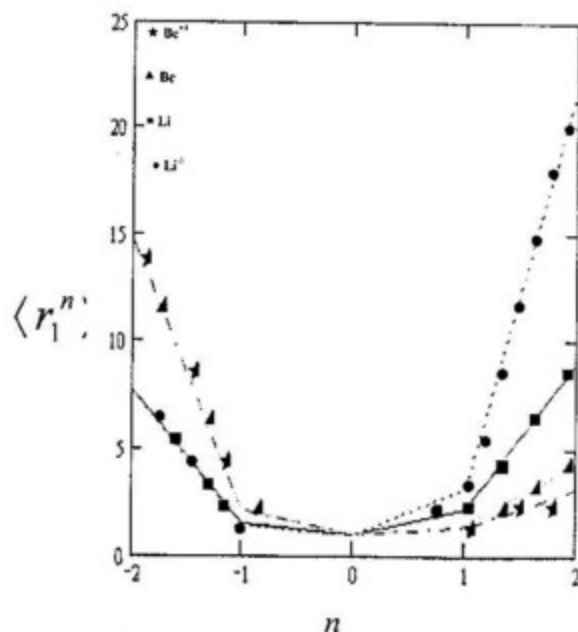
Data of HF for Li ⁺ Z=3 Ref.[10]			
n	ℓ	ζ	C _{1s}
1	0	4.40	-0.000000
2	0	4.40	-0.220023
3	0	4.40	-0.126397
4	0	4.40	-0.021018
5	0	4.40	-0.028489
6	0	4.40	0.015049
1	0	2.40	1.246497
2	0	2.40	0.459177
3	0	2.40	-0.675516
4	0	2.40	0.408814
5	0	2.40	-0.135526
6	0	2.40	0.020320

جدول (5) : معلومات لذرة البريليوم (Be atom)

Data of HF for Be Z=4 Ref.[4]				
n	ℓ	ζ	C _{1s}	C _{2s}
1	0	5.7531	0.285107	-0.016378
1	0	3.7156	0.474813	-0.155066
3	0	9.9670	-0.001620	0.000426
3	0	3.7128	0.052852	-0.059234
2	0	4.4661	0.243499	-0.031925
2	0	1.2919	0.000106	0.387968
2	0	0.8555	-0.000032	0.685674

جدول (6) : معلومات لأيون البريليوم الموجب
(Be+ve ion)

Data of HF for Be ⁺ Z=4 Ref.[10]				
n	ℓ	ζ	C _{1s}	C _{2s}
1	0	6.50	0.440586	0.081689
2	0	6.50	0.195205	0.035570
3	0	6.50	0.068732	0.010554
4	0	6.50	0.029457	0.005376
1	0	3.40	0.000000	0.000000
2	0	3.40	0.487708	0.130829
3	0	3.40	-0.161563	-0.011894
4	0	3.40	0.022777	0.015755
1	0	1.20	0.027352	0.182542
2	0	1.20	-0.022703	-1.224015
3	0	1.20	0.010700	0.031685
4	0	1.20	-0.002141	-0.016516



شكل (2) : العلاقة بين القيم المتوقعة لجسيم

واحد $\langle r_1^n \rangle$ و n للاغلفة الوسطية $KL(s) \equiv$

الملحق : Appendix

معلومات الدوال الموجية لمجموعة من الذرات
والايونات :

جدول (1) : معلومات لذرة الهيليوم (He atom)

Data of HF for He Z=2 Ref.[4]			
n	ℓ	ζ	C _{1s}
1	0	1.4595	1.347900
3	0	5.3244	-0.001613
2	0	2.6293	-0.100506
2	0	1.7504	-0.270779

جدول (2) : معلومات لذرة الليثيوم (Li atom)

Data of HF for Li Z=3 Ref.[4]				
n	ℓ	ζ	C _{1s}	C _{2s}
1	0	4.3069	0.141279	-0.022416
1	0	2.4573	0.874231	-0.135791
3	0	6.7850	-0.005201	0.000389
2	0	7.4527	-0.002307	-0.000068
2	0	1.8504	0.006985	-0.076544
2	0	0.7667	-0.000305	0.340542
2	0	0.6364	0.000760	0.715708

جدول (3) : معلومات لأيون الليثيوم السالب

(Li-ve ion)

Data of HF for Li ⁻ ion Z=3 Ref.[10]				
n	ℓ	ζ	C _{1s}	C _{2s}
1	0	4.40	0.501848	0.075238
2	0	4.40	0.189087	-0.021164
3	0	4.40	0.074281	-0.025592
4	0	4.40	0.032005	-0.013139
1	0	2.40	-0.000000	0.000000
2	0	2.40	0.391039	0.382450
3	0	2.40	-0.102103	-0.203580
4	0	2.40	0.012513	0.128352
1	0	0.285	0.000733	-1.266294
2	0	0.285	-0.001219	0.388390
3	0	0.285	0.000964	-0.237092
4	0	0.285	-0.000314	-0.004595

function , Atomic. Data and Nucl. Data Tables , 53 : 113-124 .

5. Banyard , K. E. and M. M. Mashat , 1977 Coulomb Holes and Correlation Coefficients for Electronic Shell : The Be-Like Ions , J. Chem. Phys. , 67 (4) : 1405-1411 .

6. AL-Tamimei , N. CH. 2005 Calculation of Effect of Electronic Correlation Force on the Energy of Some Atoms , M. Sc. Thesis , College of Science , Baghdad University , Iraq .

7. Banyard , K. E. and G. J. Seddon , 1973 Colomb Hole and Expectation Values.I. Explicity Correlated Wave Functions , J. Chem. Phys. , 58 (3) : 1132-1142 .

8. Banyard , K. E. and R. J. Mobbs , 1981 Coulomb Holes and Correlation Coefficients for Electronic Shells : Acomparative Analysis of Several Wave Functions for Be , J. Chem. Phys. , 75 (7) : 3433-3442 .

9. Banyard , K. E. and K. H. Al-Bayati , 1986 Intra- and Inter-Shell Correlation Effects in Li-Like Ions : Coulomb Holes and their Interpretation , J. Phys . B: Atom. Molec. Phys., 19 : 2211-2225 .

10. Roothaan , C. C. J. , L. Sachs and A. W. Weiss , 1960 Analytical Self-Consistent Field Functions for the Atomic Configurations $1s^2$, $1s^2 2s$ and $1s^2 2s^2$, Reviews of Modern Physics , 32 (2) : 186-193 .

جدول (7) : معلومات لأيون البيريليوم الموجب . (Be+2ve ion)

Data of HF for Be ⁺⁺ Z=4 Ref.[10]			
n	l	ζ	C _{1s}
1	0	6.50	0.443327
2	0	6.50	0.189357
3	0	6.50	0.059425
4	0	6.50	0.025014
5	0	6.50	-0.004885
6	0	6.50	0.000707
1	0	3.40	0.000000
2	0	3.40	0.533882
3	0	3.40	-0.168932
4	0	3.40	0.003107
5	0	3.40	0.019426
6	0	3.40	-0.005592

وفي جميع الجداول اعلاه تمثل C_{1s} و C_{2s} معاملات ثابتة تنتج من طريقة المجال القائم لذاته ، ζ معامل الاوربتال orbital exponent و n عدد الكم الرئيسي ، l عدد الكم المداري .

References

1. Sims , J. S. and S. A. Hagstrom , 1975 Combined configuration-interaction- Hylleraas studies of atomic states , Physical Review A , 11 (2) : 418-420 .
2. AL-Bayati , K. H. , 2004 Evaluation of the One-electron expectation values for different wave functions , Um-Salama Science Journal , College of Science for Women , University of Baghdad , 2 : 336-339 .
3. Johnson , W. R. 2002 "Lecture on Atomic Physics " , Department of physics university of Notredam , Notredam , Indiana , U.S.A .
4. Bunge , C. F. , J. A. Barrientos And A. V. Bunge, 1993 Roothaan-Hartree-Fock ground-state atomic wave

CALCULATION OF THE ONE-PARTICLE EXPECTATION VALUES TO SOME ATOMS AND ION

Khalil H. AL-Bayati*

Ahmad K. Ahmad**

Naaema CH. AL-Tamimej*

*Physics Dept-College of Science for Women-University of Baghdad .

** Physics Dept-College of Science-University of AL-Nahrain .

Abstract .

The *Hartree-Fock* wave function with the aid of Partitioning technique have been used to analyze *Be atom* and *Li -ve ion* for six-pairs electronic wave functions , two of these are for the intra-shells(*K,L*) and the rest for inter-shells (*KL*) . The above technique is also used to analyze *Li atom* and *Be +ve ion* for three-pairs electronic wave functions , one of these is for the *K-shell* and the rest for inter-shells . For each electronic shell the expectation values have been calculated and plotted the relation between this values and the values of *n* where $-2 \leq n \leq +2$. The negative values represented the nearest regions from the nucleus and the positive values represented the far regions in cloud of electronic charge . The results of this work are compared with the results of published researches . Each plot in this work is normalized to unity . All results are obtained numerically by using computer programs (Mathcad).