حساب العلاقة الألكترونية لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة

خليل هادي البياتي *   صلاح عبد الله حسون*

بان حسن عادل الأسعد*

تاريخ قبول النشر 2007/5/24

الخلاصة

ان الهدف من البحث هو دراسة العلاقة بين الألكترونات لذرة الليثيوم في الحالة المستقرة من خلال دراسة دالة التوزيع البيني الالكتروني $f(r_{12})$ والقيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين r_{12}^{n} باستخدام الدالة $f(r_{12})$ للقشرة KL في الحالتين المفردة والثلاثية تم تقييم فجوة فيرمي. تم في هذا البحث استخدام الدالة الموجية لهارتري فوك المنشورة عام 1993.

كلمات مفتاحية: فجوة فيرمي، دالة هارتري، الكثافة الالكترونية.

المقدمة

استخدمت دالة التوزيع البينية في الفضاء المكاني لذرة الهليوم في الحالة الارضية من قبل كولسون ونيلسون[1] ، ويمكن دراسة العلاقة الالكترونية لكل زوج من الالكترونات للغلاف الواحد بأستخدام الدالة الموجية لهارتري فوك فعلى سبيل المثال يمكن ملاحظة المصدرين[3,2] .

وقد تم في هذا البحث تحليل ذرة الليثيوم ودراسة العلاقة بين كل زوج الكتروني للغلاف الواحد. ان كثافة الجسيمين $\Gamma_{HF}(X_m,X_n)$ لأي نظام ذري يحتوي على N من الإلكترونات يمكن ان يكتب بالعلاقة الأتية[3]:-

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

حيث تمثل X_i مجموع كل من متجه الفضاء ومتجه البرم للالكترون i، وان $dX_p.....dX_N$ تدل على تكامل كثافة كل الألكترونات ماعدا n,m .

$\binom{N}{2}$ تمثل عدد 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]:-

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

* قسم الفيزياء – كلية العلوم للبنات – جامعة بغداد

حيث ان $\binom{N}{2}=3$

ولحساب كثافة الجسيمين يمكن كتابة المعادلة(1) كالأتي[4]:-

$$\Gamma_{HF}(X_m,X_n)=\sum_{i\langle j}^{N}\Gamma_{ij}(X_m,X_n) \quad ...(3)$$

Γ_{ij} يمكن ان يكتب بالعلاقة الأتية:-

$$\Gamma_{ij}(X_m,X_n)=\frac{1}{2}\sum_{i\langle j}^{N}A_{ij}^{mn}(A_{ij}^{nm})^* \quad ...(4)$$

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

حيث ان i,j يمثلان اوربيتال البرم بينما n,m يمثلان رقم الالكترونات

النظرية

ان احتمالية توزيع المسافة البينية الالكترونية المرافقة لزوج من الالكترونات(i,j) تعطى بالمعادلة الاتية [5] :-

$$f_{ij}(r_{12})=\int\Gamma_{ij}(r_1,r_2)dr_1dr_2 \quad ...(6)$$

وهي دالة عيارية ويمكن التعبير عنها بالمعادلة الاتية:-

$$f(r_{12})=8\pi^2 r_1\{J_1+J_2\}$$

$$J_1=\int_0^{r_{12}}r_1\int_{r_{12}-r_1}^{r_{12}+r_1}\Gamma(r_1,r_2)r_2dr_2dr_1 \qquad r_1\langle r_{12}$$

$$J_2=\int_{r_{12}}^{\infty}r_1\int_{r_1-r_{12}}^{r_1+r_{12}}\Gamma(r_1,r_2)r_2dr_2dr_1 \qquad r_1\rangle r_{12} \quad ...(7)$$

اما القيمة المتوقعة للمسافة البينية لألكترونين فأنها تعطى بالمعادلة الاتية [1] :-

$$\langle r_{12}^n\rangle=\int_0^{\infty}f(r_{12})r_{12}^n dr_{12} \quad ...(8)$$

وللمزيد من المعلومات يمكن مراجعة المصدرين [6] [7].

الحسابات والنتائج

بأستخدام المعادلة (6) تم حساب دالة التوزيع البينية الالكترونية $f(r_{12})$ للغلاف $K_\alpha K_\beta$ وكما موضح في الجدول رقم (1) والشكل (1) واما بالنسبة للحالة المفردة فالنتائج موضحة بالشكل (2) اما الحالة الثلاثية فالشكل (3) يوضح النتائج .

وبأستخدام المعادلة (8) تم حساب القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين r_{12} وكما موضح في الجدول رقم(2).

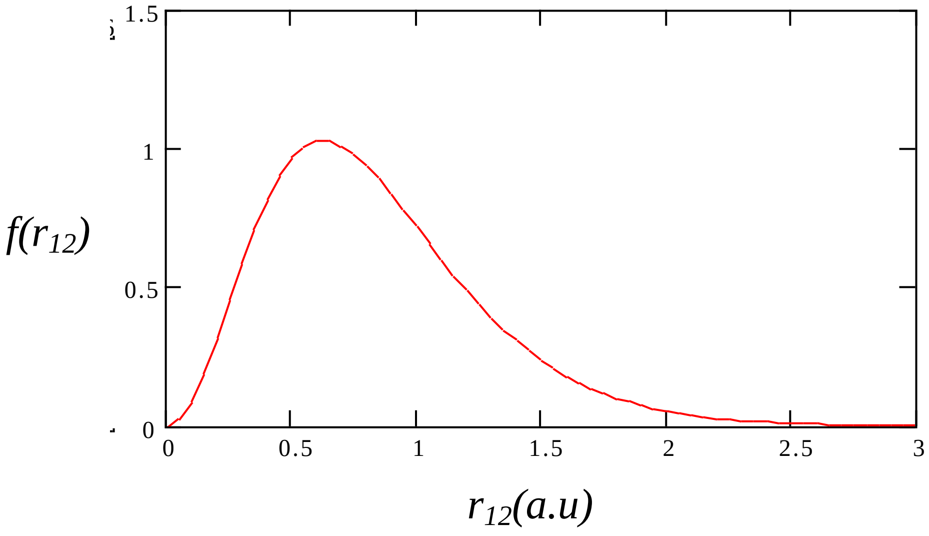
ولغرض توضيح الفرق بين الحالة المفردة والثلاثية فقد تم رسم الفرق بين الدالتين كما موضح في الشكل(4).

جدول(1) دالة التوزيع البينية الالكترونية لذرة الليثيوم

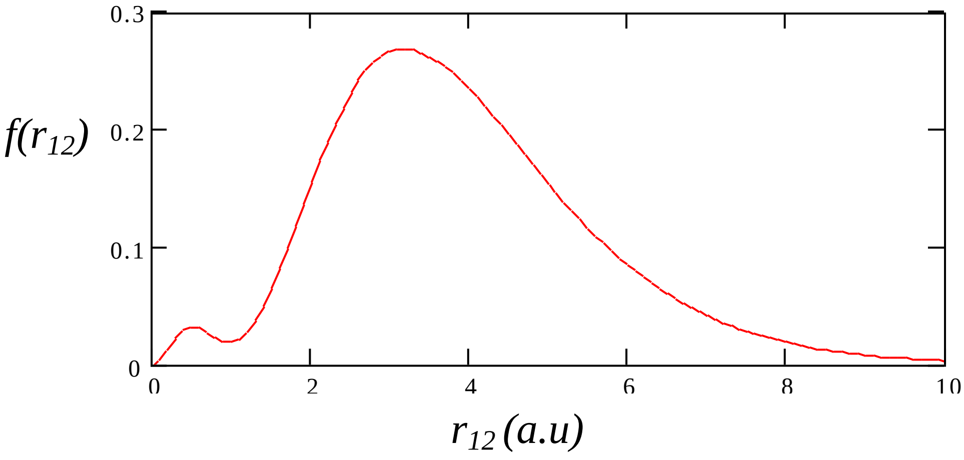
Shell	r_{12}(a.u)	$f(r_{12})_{max}$
K	0.6	1.0259
KL(^{1}S)	0.5 3.3	0.03204 0.26772
KL(^{3}S)	3.35	0.26457

جدول(2) القيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين r_{12} لذرة الليثيوم

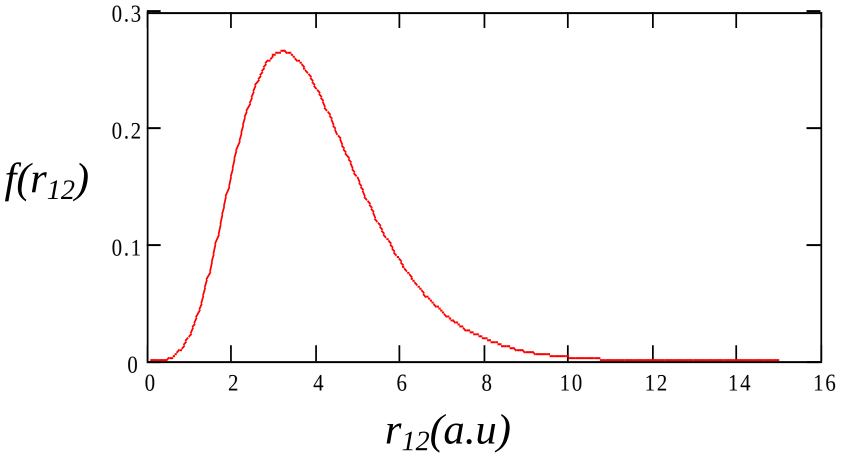
Shell	n=-2	n=-1	n=0	n=1	n=2
K	4.71722	1.64988	1	0.83950	0.89360
KL(^{1}S)	0.27030	0.33696	1	3.91686	18.18520
KL(^{3}S)	0.11994	0.30837	1	3.92742	18.18521



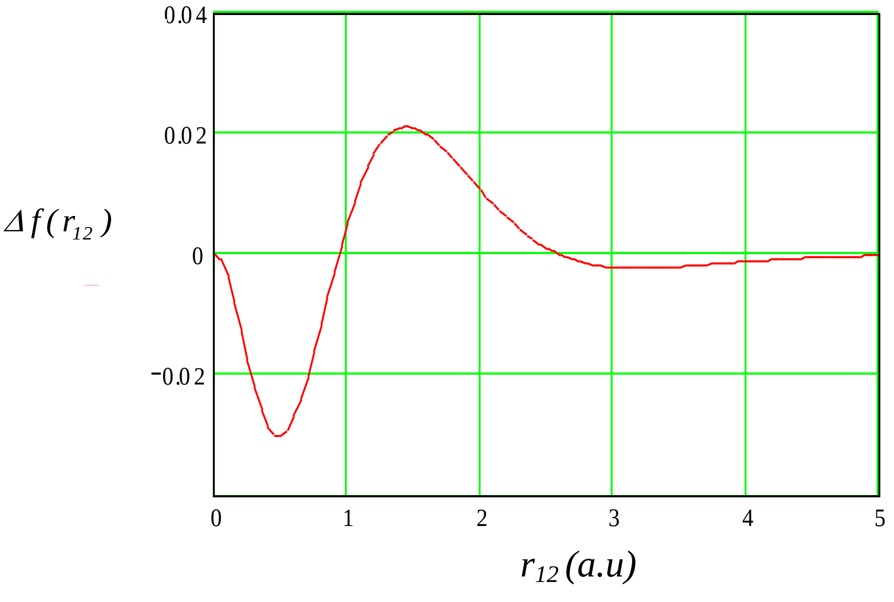
شكل(1) دالة التوزيع البينية الالكترونية للقشرة K لذرة الليثيوم



شكل(2) دالة التوزيع البينية الالكترونية للقشرة الوسطية للحالة المفردة $KL(^1S)$ لذرة الليثيوم



شكل(3) دالة التوزيع البينية الالكترونية للقشرة الوسطية للحالة الثلاثية $KL(^3S)$ لذرة الليثيوم



شكل (4) تأثير فيرمي ويمثل الفرق بين دالة التوزيع البينية للاغلفة الوسطية للحالة المفردة والثلاثية لذرة الليثيوم

مناقشة النتائج

- الشكل رقم(1) يظهر سلوك الكثافة الالكترونية البينية لذرة الليثيوم للقشرةK. ويلاحظ في الشكل ان اعلى قيمة بينيه مقدارها 1.0259 تكون في الموضع r_{12}=0.6 . نلاحظ في الشكل رقم (2) دالة التوزيع البينية الالكترونية للقشرة الوسطية(KL) للحالة المفردة (^1s) موزعة على كثافتين بسبب اختلاف البرم. ان اعلى قيمة بينيه للقمة الاولى هي 0.03204 في الموضعr_{12}=0.5 والتي تعكس عن احتمالية تواجد الالكترونين في القشرة K اما اعلى قيمة بينيه للقمة الثانية فتساوي0.26772 في الموضع r_{12}=3.3 والتي تفسر عن احتمالية عالية لتواجد الالكترونين في القشرة KL. الشكل(3) يظهر سلوك هذه الدالة للحالة الثلاثية،ان اعلى قيمة بينيه0.26457 في الموضعr_{12}=3.35 وفي هذا الشكل نلاحظ عدم احتمالية تواجد الالكترونين في القشرةK بسبب تأثير فيرمي ويمكن ملاحظة نتائج دالة التوزيع البينية الالكترونية لذرة الليثيوم في القشرتينK، KL بالجدول رقم(1) الذي يوضح القيم العظمى لدالة التوزيع البينية الالكترونية .
- نلاحظ من الجدول (2) عند القيم السالبة لـn فإن القيمة المتوقعة للحالة المفردة $KL(^1S)$ اكبر مما هو عليه عند الحالة الثلاثية$KL(^3S)$ والعكس صحيح.
- عندما يكون $n = 0$ فإن القيمة المتوقعة لاحتمالية تواجد الالكترون حول النواة يساوي واحداً وهذا هو شرط العيارية .
- لغرض عرض تأثير فيرمي فقد تم حساب الفرق بين دالة التوزيع البينية للاغلفة الوسطية للحالتين المفردة والثلاثية للذرة وكما موضح بالشكل (4) .
- كما ويلاحظ من الشكل (4) ان القيمة العظمى لدالة التوزيع البينية في الحالة المفردة اكبر مماعليه في الحالة الثلاثية وذلك لان المسافة بين الالكترونات ذات البرم المتعاكس اقل من المسافة بين الالكترونات ذات البرم المتوازي وهذا يتفق مع قاعدة باولي.

المصادر

1. Coulson, C.A. and Neilson A.H.,1961.Electron Correlation in the Ground state of Helium,Phys. Soc.,78:831.
2. Benesch, R and Smith VH. Jr., 1971.Redial electron – electron distribution and the coulomb hole for Be. J. Chem . Phys.55, 482.
3. Seddon,G.J. and Banyard K.E., 1973 .Coulomb holes and expectation values .II.Configration interaction wavefunction . J.Chem .Phys.59,1065.
4. Bunge,C.F , Barrientos J.A.,and A.V. Bunge 1993.Roothaan – hartree-Fock ground –state atomic wave function, Atomic Data and Nucl.Data Table. 53:113-124.
5. Smith,D.W. and Larson E.G. 1970 .On the Interpretative Aspects of Second – Order reduced density matrices., International Journal of Quantum Chemistry .35.689.
6. Al-Asaad, B.H. 2005 .A study of the physical properties for the electrons outer shells for same atoms, M.Sc Thesis.College of Scince for Women. Baghdad University, Iraq.
7. Al-bayati, K.H., Ahamd A.K. 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

Evaluation of the electron correlation for lithium atom *(Li)* in ground state

Khalil H.Al-bayat*i ***Salaah A.Hasson**** ***Ban H.Al-asaad****

* Baghdad University - College of Science for Women - Physics Department

Abstract

The aim of this work is to study the correlation between the electrons for *Li* atom in ground state through the calculation of the inter-particle distribution function f (r_{12}) and inter-particle expectation values r_{12}^n . By using the $f(r_{12})$ function for *KL* shell in both singlet and triplet state .The Fermi hole have been evaluated .In this work the Hartree-Fock wave function (1993) have been used.

Key Words: Fermi hole, Hartree Function, electron density.