حساب القيمة المتوقعة لشحنة الالكترون للانظمة الذرية ذات الالكترونين في فضاء المكان

بان حسن عادل* خليل هادي البياتي*

تاريخ قبول النشر 28/ 2 / 2010

الخلاصة

يهدف البحث الى حساب القيمة المتوقعة للشحنة الالكترونية للانظمة الذرية z=2, 3, ... 7، ومقارنتها مع ذرة الهيليوم. تم حساب كثافة الاحتمالية الالكترونية لذرة الهيليوم والايونات المشابهة لها. باستخدام دالة هارتري – فوك .

كلمات مفتاحيه : دالة هارتري – فوك , القيمة المتوقعة , كثافة الاحتمالية

المقدمة:-

تم دراسة دالة التوزيع القطرية لجسيم واحد $D(r_1)$ وهي مهمه لدراسة الالكترونات في الذرة وتعني دراسة احتمالية دراسة الشحنة الالكترونية في كل غلاف وقد تم في هذا البحث دراسة هذه الدالة للانظمة الذرية التي تحتوي على الكترونين وكذلك لبعض الذرات في الغلاف (K) وتعرف الدالة كالاتي : [1]

$$D(r_1)=\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} r_1^2\,\rho(r_1)\,d\,\Omega = 4\pi\, r_1^2\,\rho\,(r_1) \quad ....(1)$$

حيث ان [2]

$$\rho(r_1)=N\int \psi^*(X_1,X_2....X_N)\,\psi\,(X_1,X_2....X_N)\,d\delta_1\,dX_2\,dX_3....dx_N \quad ....(2)$$

حيث ان $d\Omega=\sin\theta\,d\theta\,d\phi$, x_i تشير الى مجموعة الاحداثيات الفضائية والحركة المغزلية و $\psi\,(x_1,x_2,\cdots\cdots x_N)$ دالة موجية عيارية .

ويستفاد من حساب توزيع الكثافة لجسيم واحد $D(r_1)$ في ايجاد عامل الاستطارة لاشعة (x) في ايجاد القيم المتوقعة لجسيم واحد $\langle\, r_1^n \,\rangle$ عندما $-2 \le n \le +2$.

وكما تم حساب القيمة المتوقعة لجسيم واحد $\langle\, r_1^n \,\rangle$ التي يمكن التعبير عنها بالاتي :[3]

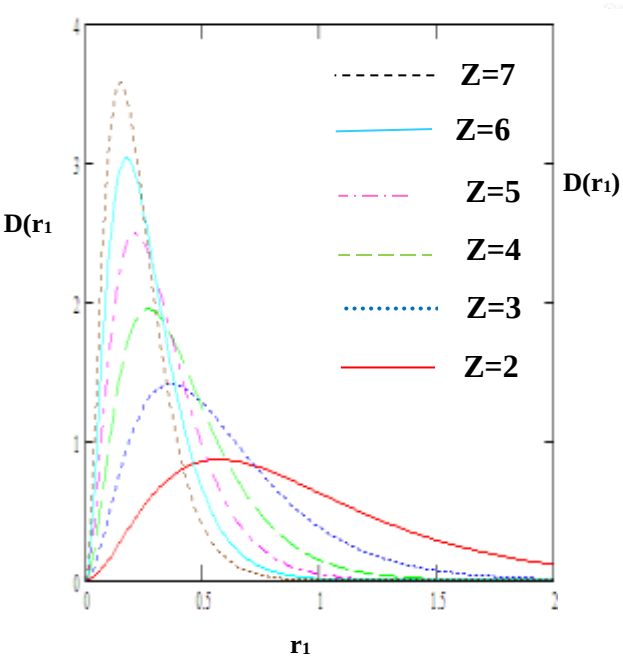
$$\langle\, r_1^n \,\rangle = \int_0^{\infty} D(r_1)\, r_1^n dr_1 \qquad ....(3)$$

عندما $n=0$ فأن قيمة $\langle\, r_1^n \,\rangle$ يجب ان تساوي واحد (شرط العيارية) وهذا يعني

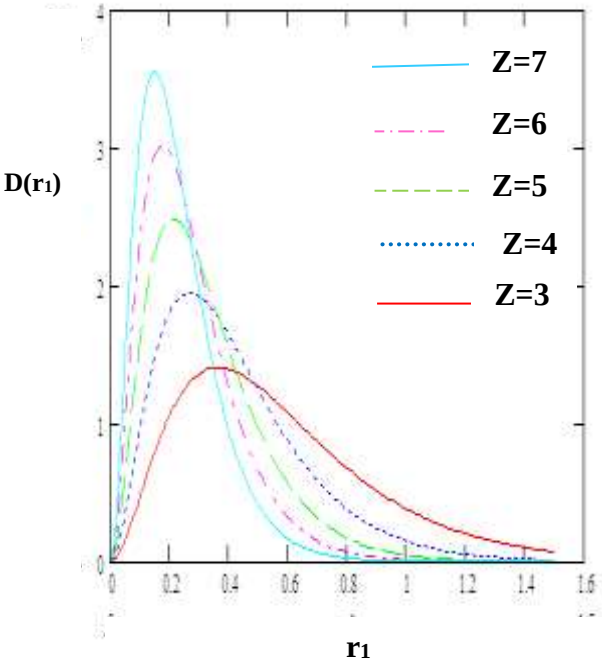
$$\int_0^{\infty} D(r_1)\, r_1^0 dr_1 = \int_0^{\infty} D(r_1) dr_1 = 1 \quad \cdots(4)$$

للقيم المتوقعة اهمية عندما تحسب لمناطق قطرية مختلفة حيث يمكن الاستفادة منها في مقارنة احتمالية تواجد الالكترونات في المناطق القريبة من النواة والمناطق البعيدة في كثافة الشحنة الالكترونية لكل غلاف الكتروني وفي، حساب الطاقة الكامنة لتجاذب الالكترون الى النواة electron-nuclear attraction energy من خلال $\langle\, r_1^{-1} \,\rangle$. ولمقارنة $\langle\, r_1^{-2} \,\rangle$ التي تحسب من دالتين موجيتين تشير الى كيفية تشابه توزيع الكثافة في المنطقة القريبة من النواة و $\langle\, r_1^{+3} \,\rangle$ تشير الى تشابه توزيع الكثافة في المنطقة البعيدة في سحابة الشحنة الالكترونية .

*قسم الفيزياء، كلية العلوم للبنات، جامعة بغداد



شكل (2) يوضح كثافة الاحتمالية لوجود الالكترونات حول النواة لذرة الهيليوم والايونات المشابهه لها



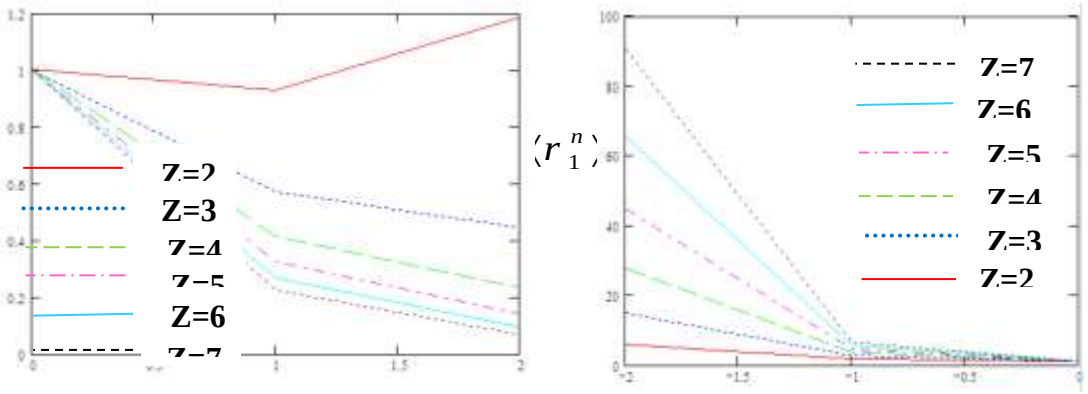
شكل (1) يوضح كثافة الاحتمالية لوجود الالكترونات للقشرة K حول النواة لبعض الذرات.

جدول (1) يوضح كثافة الاحتمالية لوجود الالكترونات للقشرة K حول النواة لبعض الذرات المشابهة لها.

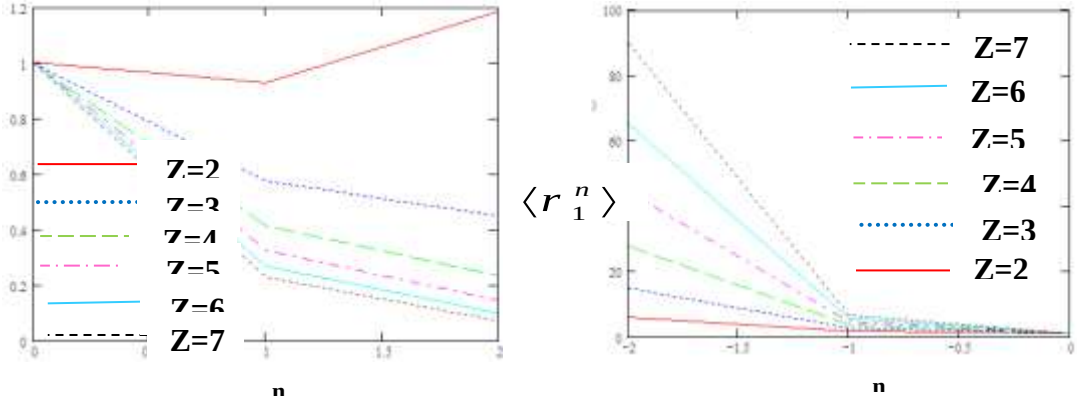
Atom	Z	r_1	$D(r_1)_{max}$
He	2	0.58	0.866
Li	3	0.37	1.407
Be	4	0.27	1.948
B	5	0.23	2.471
C	6	0.19	3.008
N	7	0.15	3.572

جدول (2) يوضح كثافة الاحتمالية لوجود الالكترونات حول النواة لذرة الهيليوم والايونات المشابهة لها.

Atom or ion	Z	r_1	$D(r_1)_{max}$
He	2	0.58	0.866
Li^{+}	3	0.37	1.407
Be^{+2}	4	0.27	1.948
B^{+3}	5	0.23	2.471
C^{+4}	6	0.19	3.008
N^{+5}	7	0.15	3.572



شكل (3) يوضح n ة المتوقعة لوجود الالكترونات حول النواة لذرة الهليوم n نات المشابهة لها.



شكل (4) يوضح القيمة المتوقعة لوجود الالكترونات للقشرة K حول النواة لبعض الذرات

جدول (3) يوضح القيمة المتوقعة لوجود الالكترونات حول النواة لذرة الهيليوم والانظمة

Atom	Z	n=-2	n=-1	n=0	n=1	n=2
He	2	5.995	1.687	1.000	0.927	1.184
Li^{+}	3	14.910	2.687	1.000	0.572	0.445
Li	3	14.888	2.685	1.000	0.573	0.446
Be^{+2}	4	27.825	3.687	1.000	0.414	0.232
Be	4	27.753	3.681	1.000	0.414	0.232
B^{+3}	5	44.738	4.687	1.000	0.324	0.141
B	5	44.538	4.674	1.000	0.325	0.143
C^{+4}	6	65.654	5.687	1.000	0.267	0.096
C	6	65.234	5.664	1.000	0.268	0.097
N^{+5}	7	90.569	6.687	1.000	0.226	0.069
N	7	89.841	6.653	1.000	0.228	0.070

الحسابات والنتائج:

لقد تم دراسة الخواص النظرية للفضاء المكاني لدالة التوزيع القطرية والقيمة المتوقعة لبعض الذرات والايونات في فضاء المكان، ومن خلال ملاحظة الرسوم والجداول نستنتج ما يأتي:-

- في الجدول (1)والشكل رقم (1) يبين القيم العظمى ومواقعها لدالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد $D(r_1)_{max}$ في الفضاء المكاني للغلاف $K(^1s)$ ومن خلال هذه القيم نلاحظ للذرات المتعادلة كهربائيا (N,C,B,Be,Li,He) زيادة القيم العظمى للدالة تقابلها اقتراب مواقع تلك القيم من النواة للغلاف$K(^1s)$ وزيادة قوة التنافر هذا الغلاف مع الغلاف L حسب قانون كولوم .
- كذلك نلاحظ العلاقة نفسها اذا قارنا بين كل ذرة والايون المشابهه لها كما موضح بالجدول رقم (2) والشكل رقم(2) .
- عند مقارنة كل ذرة وايونها نلاحظ زيادة القيم العظمى للدالة تقابلها اقتراب مواقع تلك القيم من النواة ويمكن ملاحظتها بمقارنة جدول رقم (1) وجدول رقم(2).
- من خلال دراسة القيمة المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^{\,n} \rangle$ لذرة الهليوم والايونات المشابهه

الاستنتاجات

1. لجميع الذرات والايونات التي تم دراستها في هذا البحث بزيادة العدد الذري تزداد القيمة المتوقعة عندما n تأخذ القيم السالبة اي ان احتمالية وجود الشحنة الالكترونية كلما اقتربنا من النواة وتقل هذه الدالة عندما تأخذ n القيم الموجبة ،كما موضح بالجدول (3) والشكل (3,4)[6].
2. عند كل عملية تأين تزداد $\langle r_1^{\,n} \rangle$ عندما n تأخذ القيم السالبة هذه الدالة عندما تأخذ n القيم الموجبة كما موضح بالشكل (3) والجدول (3) .

المصادر:-

1-Frederick W.King. 1991. Phys. Rev, 44,5.

2- N.H.March.2003. J. of Chemical physics,118,15.

3- K .H.Al-Bayati. 2004.J of Um Salama for Science, 1 ,2.

4- - C.F .Bunge , J.A.Barrientos ,and A.V. Bunge . 1993,Atomic Data Nucl.Data Table 53,1 .

5-- C.C.J.Roothaan ,and A.W.Weiss. 1960. Reviews of Modern physics, 32,2.

6- B. H.Al-assad,K. H.Al-bayati,S. A.Hasson.2005 , J of Um Salama for Science, 4,3 .

Calculate the one – expectation to electronic charge of atomic system contiun two electron

Ban .H.Adel* K.H.Al-bayati*

* physics Dept., College of Science for Women, Baghdad University

Abstract:-

The aim of this work is to calculate the one- electron expectation value $\langle r_1^{\,n} \rangle$ of the electronic charge of atomic system Z=2,3….7 and we compare with He atom . the electronic density function $D(r_1)$ of He atom and like ions are evaluated . using Hartree –Fock wave.