الخلاصة

الهدف من الدراسة الحالية و حساب الطاقات الكلية وبعض الخصائص الذرية باستعمال نوعين من الدوال الموجية التقريبية ،دالة موجة هارتري- فوك (HF) ودوال الموجة المترابطة (CI)

النوع الاول: دالة موجة هارتري – فوك (HF) وهي دالة موجية غير مترابطة تهمل الترابط الالكتروني،استعملت لدراسة ذرات He،Li و Be وباستعمال طريقة التجزئة The partitioning method من خلال حساب ودراسة الخصائص الذرية الآتية:

1. دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد ولجسيمين $D(r_1)$، $D(r_1,r_2)$.
2. دالة توزيع المسافة البينية $f(r_{12})$ ودالة التوزيع الجزئية $g(r_{12},r_1)$ وفجوات فيرمي $\Delta f_F(r_{12})$.
3. القيمة المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ والقيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين $\langle r_{12}^n \rangle$ وقيم الانحراف المعياري Δr_1، Δr_{12} .
4. التأثرية الدايا مغناطيسية المولارية X_m وثابت الحجب المغناطيسي النووي σ_d .
5. القيم المتوقعة للطاقات.

النوع الثاني:دوال موجية مترابطة Correlated wavefuntion التي اخذت بصيغة تفاعل الهيئات Configuration Interaction ومختصرها(CI)، وفي هذا المضمار استعملت دالتين من نوع CI :

ا- دالة طورت عن طريقة تقريب ماتسون – ستيوارت عام 1964 ،طورت باضافة حدود (هيئات) على الدالة الاصلية وسميت خلال البحث بـــ دالة CI المعدلة ،واستعملت لدراسة القشرة $K(1_S)$ لذرات He و Li و Be وقورنت نتائج دراسة الخصائص التالية مع نتائج دالة HF :

1. دالة توزيع الكثافة القطرية لجسيم واحد $D(r_1)$ ودالة التوزيع البينية $f(r_{12})$.
2. القيمة المتوقعة لجسيم واحد $\langle r_1^n \rangle$ والقيمة المتوقعة للمسافة بين الكترونين $\langle r_{12}^n \rangle$.
3. فجوات كولوم $\Delta f_C(r_{12})$ والقيم المتوقعة للطاقات.

ب- دالة موجة مترابطة اقترحت خلال البحث سميت بـــدالة CI المقترحة ،وقد استعملت لدراسة ذرتي He و Li بقشراتها المغلقة والمتداخلة وبشكل منفصل وقورنت النتائج مع نتائج القشرات باستعمال دالة HF.وقد درست الخصائص الذرية الآتية:

$\langle r_1^n \rangle$، $\langle r_{12}^n \rangle$، $f(r_{12})$, $\Delta f_C(r_{12})$، القيم المتوقعة للطاقات .

عند دراسة الخواص الذرية للذرات (He و Li و Be) لكل قشرة ومقارنة النتائج مع تلك التي تم الحصول عليها من استعمال دالة CI المعدلة والمقترحة، فكانت نتائج المقارنة متقاربة. أظهرت الدوال المترابطة المستعملة في هذه الدراسة سلوكا للخصائص الذرية متناسبة مع ما تم

الحصول عليه باستعمال دالة HF وقد كان تأثير الترابط الالكتروني واضحا في النتائج على سلوك تلك الخصائص.

إن استعمال دالة موجة هارتري – فوك اعطى قيما للطاقة الكلية لذرات He و Li متفقة بشكل جيد عند المقارنة مع الدراسات السابقة .الطاقات الكلية للذرات قيد الدراسة تقل (تزداد سالبية) بزيادة العدد الذري. وان نسبة المئوية للخطأ في حساب الطاقة لذرة الهليوم بين نتائج استعمال دالة CI المعدلة عن القيمة التجريبية بمقدار (0.000657%) ونسبة الخطأ باستعمال دالة CI المقترحة عن القيمة التجريبية كانت (0.01102%). بالنسبة لذرة الليثيوم فان نسبة الخطأ في حساب الطاقة باستعمال دالة CI المقترحة عن القيمة التجريبية بلغت (0.014312%) .

وقد استعمل برنامج حاسوبي (Mathcad-2007, ver. 14) لحساب كل ما مر من الخصائص الذرية.