دراسة نظريةلاستطارة الإلكترونات والبوزترونات لبعض الذرات الحرة والأيونات الموجبة عند طاقات مختلفة

رسالة مقدمة إلى مجلس كلية العلوم – جامعة البصرة وهي جزء من متطلبات نيل شهادة الماجستير في علوم الفيزياء

من قبل

أحلام خضير ياسر

بكالوريوس علوم فيزياء جامعة البصرة

(1988) م

بإشراف:

أ.د. فلحي عبدالحسن علي **م.د. عقيل هاشم حسين**

1439 هـ **2017 م**

توصية الأستاذ المشرف

نقر أن إعداد هذه الرسالة قد جرى تحت إشرافنا في كلية العلوم - جامعة البصرة، وهي جزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في علوم الفيزياء.

التوقيع:

اسم المشرف: د. فلحي عبدالحسن علي
المرتبة العلمية:استاذ
التاريخ: / /2018 م

التوقيع:

اسم المشرف: د. عقيل هاشم حسين
المرتبة العلمية:مدرس
التاريخ: / /2018 م

توصية رئيس قسم الفيزياء

إشارة إلى التوصية المقدمة من المشرفين الأستاذ الدكتور فلحي عبدالحسن علي والمدرس الدكتور عقيل هاشم حسين أحيل هذه الرسالة إلى لجنة المناقشة لدراستها وبيان الرأي فيها:

التوقيع:

الاســـــــم: د. ستـار جبـار قاسم
المرتبة العلمية:أستاذ مساعد
التاريـــــــخ: / /2018 م

قـرار لـجنـة الـمنـاقـشة

نحن أعضاء لجنة المناقشة الموقعون أدناه، نشهد بأننا قرأنا الرسالة الموسومة (دراسة **لاستطارة الإلكترونات والبوزترونات من الذرات الحرة والأيونات الموجبة عند طاقات مختلفة)** المقدمة من قبل الطالبة **أحلام خضيرياسر**،وهي جزء من متطلبات نيل درجة الماجستير في علوم الفيزياء، وبعد إجراء المناقشة وجدت اللجنة أن الرسالة مستوفية لمتطلبات نيل الشهادة المذكورة، وعليه توصي اللجنة بقبول الرسالة، وبتقدير ( ).

رئيس اللجنة

التوقيع:
الاسم: د. ايناس
المرتبة العلمية: أستاذ
العنوان: كلية العلوم / بنات - جامعة بابل
التاريخ: / /2017 م

عضو اللجنة

التوقيع:
الاسم: د. علاء عبد الحسن خلف
المرتبة العلمية:أستاذ
العنوان:كلية العلوم - جامعة البصرة
التاريخ: / /2017 م

عضو اللجنة

التوقيع:
الاسم:د. حمزة بكر سلمان
المرتبة العلمية:أستاذ
العنوان:كلية التربية للعلوم الصرفة
التاريخ: / /2017 م

عضو اللجنة

التوقيع:
الاسم:د. فلحي عبد الحسن علي
المرتبة العلمية:أستاذ
العنوان:كلية العلوم - جامعة البصرة
التاريخ: / /2017 م

عضو اللجنة

التوقيع:
الاسم:د. عقيل هاشم حسين
المرتبة العلمية:مدرس
العنوان:كلية العلوم - جامعة البصرة
التاريخ: / /2017 م

مصادقة السيد عميد كلية العلوم

أصادق على ما جاء في قرار اللجنة أعلاه
التوقيع:
الاسم: د. فلحي عبدالحسن علي
المرتبة العلمية: استاذ
التاريخ: / /2017 م

نَرْفَعُ دَرَجَاتٍ مِن نَّشَاءوَفَوْقَ كُلِّ ذِي عِلْمٍ عَلِيمٌ

"صدق الله العلي العظيم"

(يوسف/76)

الإهداء

أهدي ثمرة جهدي إلى ...

من شجعني على مواصلة مسيرتي العلمية ورفيق دربي

زوجي العزيز (وليد)

وفلذات قلبي وريحانة حياتي اولادي.....

أمي وأبي (رحمهما الله) ...

وجميع عائلتي لدعمهم لي وتشجيعي ...

أحلام

بسم الله الرحمن الرحيم

والصلاة والسلام على سيد المرسلين نبينامحمد صلى الله عليه وسلم وعلى آله الطيبين الطاهرين.

شكر وتقدير

أود ان أتقدم بالشكر والعرفان إلى حضرة المشرفين الأستاذ الدكتور فلحي عبد الحسن علي والمدرس الدكتور عقيل هاشم حسين على اقتراحهم موضوع البحث، فضلاً عما أبدوهُ من تعاون وتوجيهات طيلة فترة البحث ومراجعة الرسالة.

كما أتقدم بالشكر والتقدير إلى رئاسة قسم الفيزياء وعمادة كلية العلوم على ما قدموه من مساعدة طيلة فترة البحث.

وأتقدم بالشكر الجزيل إلى زملائي طلبة الدراسات العليا على ما أبدوهُ من تعاون ومساهمة في تذليل الصعوبات. ولابد من الاعتراف بالجميل بحق عائلتي لما أبدوه من مساعدة ودعم متواصل لامحدود بعد الله سبحانه وتعالى، مما شجعني بالاستمرار بالدراسة والبحث.

أحلام

الخلاصة

لقد اهتمت هذه الرسالة بدراسة نظرية لاستطارة الإلكترونات والبوزترونات من بعض الذرات الحرة والأيونات الموجبة عند طاقات مختلفة ودراسة تأثيرات الجهد الكلي المعتمد في هذه الرسالة والمتكون من مجموعة جهود، فهناك الجهد المستقر وجهد التبادل وجهد الاستقطاب للمديات الطويلة وجهد الترابط للمديات القصيرة، والذي يعود للباحثين بردو-زنكر (P-Z) في حالة إستطارة الإلكترونات. أما البوزترونات فيحذف جهد التبادل في البرنامج ويستبدل جهد الباحث (Jain) بدل جهد إرتباطبردو-زنكر.

لقد استعملنا طريقة الموجة المجزئة والمعتمدة من قبل الباحث Salvat وجماعتهبأستخدام المعادلات النسبية في البرنامج الدولي [ELSEPA]. وقد حسبت ازاحات الطور (δ_l) والمقاطع العرضية التفاضلية (DCS's) والمقاطع العرضية الكلية (TCS's) وزخوم الانتقال للمقاطع العرضية (MTCS's) فضلاً عن دراسة معاملات استقطاب البرم الإلكتروني لبعض الذرات والأيونات. وقد كانت نتائجنا متفقة مع القياسات العملية والحسابات النظرية للعديد من الباحثين.

كما تم الحصول على نتائج نظريةلبعض الذرات من خلال تطبيق أنموذج الجهد الكلي المعتمد في هذه الرسالة، لكن لم تتوفر بيانات للمقارنة معها، لذلك ستكون نتائجنا خاضعة للمقارنة.

Abbreviations: المختصرات:

DCS’s	:	Differential Cross-Sections.
CS’s	:	Cross-Sections.
H-F	:	Hartree-Fock.
LDA	:	Local Density Approximation.
SCE	:	Semi-Classical Exchange.
FEG	:	Free-Electron-Gas.
PO	:	Polarized Orbital.
PZ	:	Perdew-Zunger.
SIC	:	Self-Interaction Correction.
LSD	:	Local Spin Density.
PW	:	Perdew-Wang.
HPW	:	Hara-Perdew-Wang.
HPZ	:	Hara-Perdew-Zunger.
VWZ	:	Vosko-Wilk-Nusair.
DW	:	Distorted-Wave.
TCS’s	:	Total Cross-Sections.
MTCS’s	:	Momentum Transfer Cross-Sections.
SEP	:	Slater Exchange Potential.
HFEG	:	Hara of Free-Electron-Gas.
POM	:	Polarized Orbital Method.
TFD	:	Thomas-Ferm-Dirac.
DHF	:	Dirac-Hartree-Fock.
ELSEPA	:	Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Atoms.
PCP	:	Positron Correlation Polarization.
OEM		One - Electon model
SOC	:	Spin - orbit coupling
ICS’s	:	Integrated Cross – sections

المحتويات

	العنوان		رقم الصفحة
	الخلاصة		I
	المختصرات		II
	المحتويات		III-IV
	الفصل الأول: مقدمة عامة		
(1-1)	المقدمة		1
(1-2)	نظرية الاستطارة		3
(1-3)	جهود الاستطارة		4
(1-3-1)	جهود التبادل		6
(1-3-2)	جهود الاستقطاب		8
(1-3-3)	جهود الترابط		9
(1-4)	الهيكل العام للرسالة		10
	الفصل الثاني: الأنموذج النظري والتطبيقات		
(2-1)	المقدمة		13
(2-1-1)	جهد الاستقطاب		14
(2-1-2)	جهد الترابط		15
(2-2)	التطبيقات		17
(2-2-1)	استطارة الإلكترونات بواسطة الذرات القلوية الترابية		17
(2-2-2)	النتائج والمناقشة		18
(2-2-3)	استطارة الإلكترونات من الذرات		32
(2-2-4)	النتائج والمناقشة		33
(2-2-5)	استطارة الإلكترونات بواسطة الأيونات القلوية الموجبة		49
(2-2-6)	النتائج والمناقشة		49
	الفصل الثالث: استطارة البوزترونات من الذرات الحرة		
(3-1)	المقدمة		54
(3-2)	جهود الاستطارة		55
(3-3)	النتائج والمناقشة		57

	الفصل الرابع: أستقطاب برم الإلكترونات من الذرات		
(4-1)	المقدمة		**73**
(4-2)	النظرية		**74**
(4-3)	النتائج والمناقشة		**77**
	الفصل الخامس: المناقشة والاستنتاج		
(5-1)	المقدمة		**96**
(5-2)	مقترحات حول العمل المستقبلي		**97**
	المحلق (A)		**99**
(A-1)	طريقة الموجة المجزئة		**100**
	المصادر		**105**

الفصل الأول

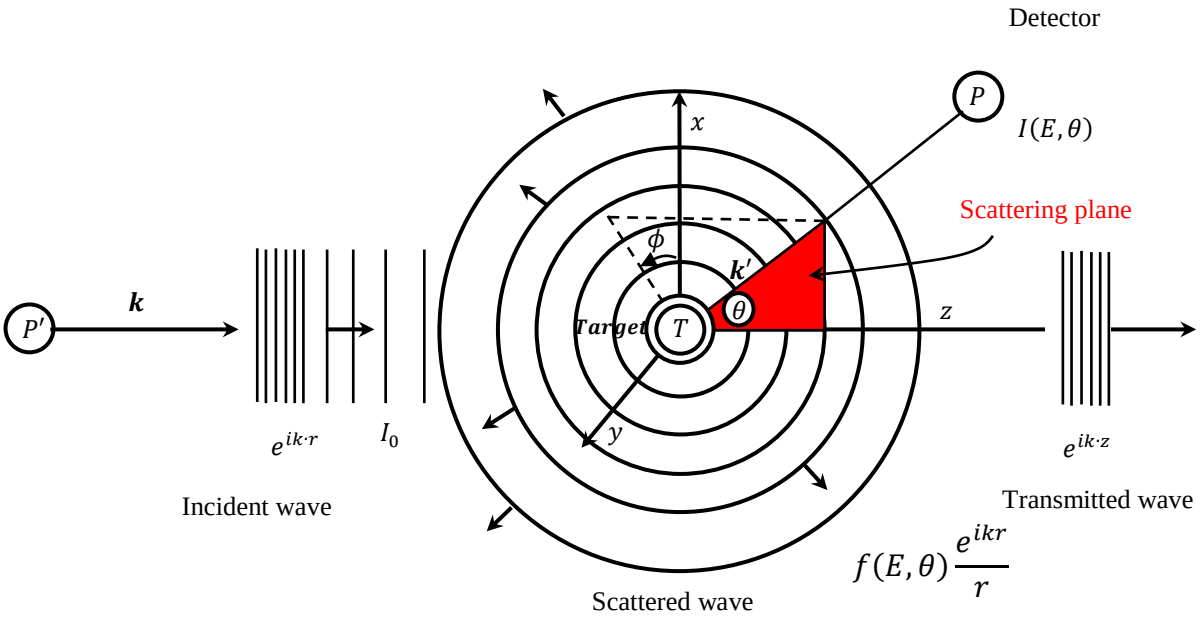
مقدمة عامة

General Introduction

1-1 المقدمة Introduction

إن ظاهرة التصادمات الذرية مهمة وأساسية في الفيزياء الذرية، إذ تستعملللدراسة تركيب الذرات الثقيلة والأيونات الموجبة أو السالبة، وتلعب دورا مهما في مجالات واسعة، منها فيزياء الفلك والكيمياء وبلازما الفيزياء والليزر، ...الخ. أن هذه التصادمات تحدث بين الجسيمات الأولية مثل (الإلكترونات، البوزونات، الفوتونات، ...الخ) والأنظمة الذرية (الذرات، الأيونات، الجزئيات)[1]. لقد أهتم الباحثون في هذا المجال، وبالأخص تصادم الإلكترون أو البوزترون مع الذرات ، لأن هذه العمليات تزودنا بوسائل لمعرفة آلية التفاعل في الأنظمة الذرية المتعددة[2]، وقد أجريت تجارب عملية عديدة لتصادم الإلكترونات مع الذرات من قبل الباحث Lenard[3]في بداية القرن السابق، إذ لوحظ أن حزمة شدة الإلكترونات الساقطة I_0 والتي طاقتها الساقطة Eوالمستطارة في غاز يمكن تحسسها بالمقدار $I(E,\theta)$ من خلال الكاشف عند زاوية إستطارة θ ومن خلال زاوية مجسمة مقدارها dΩ كما في الشكل (1-1)[4]، ومن خلال هذه الدراسة سوف نتطرقللاستطارة المرنة عند الطاقات الواطئة والاستطارةغير المرنة عند الطاقات العالية، ولوحظ أن التصادم الذي يصاحبه عدم فقدان بالطاقة يعرف بالتصادم المرن .

لقد حدثت تطورات إيجابية مهمة في الجانبين العملي والنظري، ففي الجانب الأول، حدث تطور وإنجاز قياسات مطلقة للمقاطع العرضية (CS's) باستعمال أحدث التقنيات التجريبية والمتضمنة حزم مستقطبة وأهداف مستقطبة وحزم إلكترونية ذات طاقات عالية وحزم من البوزترونات. أما في الجانب الثاني (النظري)، فهناك تطورات حصلت نتيجة الزيادة في قابلية وكفاءة الحاسبات مما أدى إلى حسابات تفصيلية اكثر دقة وسرعة[5]. واعتمدت على نظريات مختلفة منها نسبية مثل طريقة الموجة المجزئة (Partial Wave Method) أو (R-matrix) أو غيرها من الطرائق الحسابية.



الشكل (1-1): الموجات الساقطة والمستطارة والنافذة. لاحظ إن مستوي الاستطارة يتشكل بواسطة k ، ’kو θ تمثل زاوية الاستطارة و ϕ تمثل زاوية السمت (After Landau ,1990 [4])

1-2 نظرية الاستطارة Scattering Theory

لدراسة نظرية الاستطارة غير النسبية، سوف نفترض أن دالة الموجة الكلية Ψ_{k_i} هي مجموع الموجة المستوية للحزمة الساقطة والموجة المستطارة للحزمة والممثلة بالعلاقة:

$$\Psi_{k_i}(\bar{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \Psi_{inc}(\bar{r}) + \Psi_{sc}(\bar{r})$$

أذ $\Psi_{inc}(\bar{r})$: تمثل الموجة الساقطة.

$\Psi_{sc}(\bar{r})$: تمثل موجة الجسيمات المستطارة.

وان الجسيمات الساقطة أحادية الطاقة وتنتقل باتجاه $\hat{k}_i$ وتمثل بموجة مستوية لانهائية تمتد باتجاه مستعرض كما في الشكل (1-1):

$$\Psi_{in}(\bar{r}) = A \cdot e^{i\bar{k}_i \cdot \bar{r}} = A \cdot e^{ikz}$$

إذA تمثل ثابت العيارية الافتراضي الذي يعتمد على $\bar{r}$.

أما دالة موجة الاستطارة، فأنها سيل من الجسيمات خارج من مركز الاستطارة (الهدف)، وتكون ممثلة بموجة كروية خارجة، إذ تعتمد سعتها على الاتجاه $\bar{r}$ وعلى مقدار الطاقةالساقطةE وتمثل بالعلاقة التالية[6]:

$$\Psi_{sc}(\bar{r}) = Af(E,\theta)\frac{e^{ikr}}{r}$$

إذأن$f(E,\theta)$ تمثل سعةالاستطارة المعتمدة على الاتجاه r والطاقة E والتي تصف التوزيع الزاوي للموجة المستطارة، وتمثل θ زاوية واقعة ما بين اتجاه الموجة المستطارة خلال الزاوية المجسمة المعطاة لوحدة الزمن[7].

لقد اعتمدت التقريبات النظرية على مدى الطاقة، مثلا تقريب Close-Coupling عند الطاقات الواطئة كذلك طريقة R-matrix على انحرافات الطور δ_l لاستطارة الإلكترونات من الذرات بواسطة Andrick و Bitsch وباحثين آخرين[8]. ولقد واجهت الباحثين الكثير من الصعوبات عند حسابهم

لاستطارة الإلكترونات من الذرات ذات الأعداد الذرية الكبيرة[9] إذ لوحظ أنها لا تتوافق مع القياسات العملية بشكل كبير مما يؤدي إلى الدخول في حسابات غير دقيقة في تحديد الكتلة والسرعة للإلكترون الساقطمما دفع الباحثين إلى إيجاد طرائق رياضية دقيقة لفهم عملية الاستطارة والمعاملات التي تدخل في حساباتها المقاطع العرضية التفاضلية ومعاملات استقطاب البرم وسعة الاستطارةوإزاحات الطور، لذا بدأ الباحثون بدراسة الاستطارة باستعمال معادلة ديراك النسبية والتي أعطت نتائج مقاربة للقياسات العملية، ووجود فارق بين النتائج النسبية وغير النسبية[10]. لقد قام عدد من الباحثين بتقديم دراسة لتوضيح الاختلاف بين المعالجات النسبية وغير النسبية، إذ قدم الباحث Spruch[11] في عام 1966 دراسة وضح فيها الاختلاف بين النتائج النسبية وغتير النسبية لاستطارة الإلكترونات من الذرات، وفي السنة نفسها قدم الباحث Manna Rotenberg ,[12] مقارنة بين النتائج النسبية وغير النسبية لإزاحة الطور والمقاطع العرضية الكلية، أما في عام 1967، فقد أستطاع الباحث Dowson[13] تقديم دراسة موضحا فيها الاختلاف لسعة الاستطارة وقيم إزاحات الطور.

وفي سنة 1970 قدم الباحثان Marrcan وBarro[14] تحليلاً للاختلاف بين المعالجات النسبية وغير النسبية للمقاطع العرضية وبإدخال تأثيرات التبادل exchange effect في دراستهم، وفي عام 1981 قدم الباحثان Lam وBaylist[15] دراسة مقارنة بين المقاطع العرضية النسبية وغير النسبية لذرة الزئبق، لذا نلاحظ في السنوات الأخيرة، أعتمد الكثير من الباحثين على المعالجات النسبية في دراستهم لاستطارة الإلكترونات في الذرات بسبب النتائج الدقيقة عند مقارنتها مع القياسات العملية.

1-3 جهود الاستطارة: The Scattering Potentials

إن عملية الاستطارة تعتمد في حساباتها على بناء جهد الاستطارة الملائم للهدف، ومن المعلوم أن المعادلة التفاضلية لشرودنجر (الحالة غير النسبية) تصف استطارة الإلكترون.

$$\widehat{H}\Psi(\bar{r}) = E\Psi(\bar{r}) \qquad (1\text{-}1)$$

$$\left[\nabla^2 + k^2 - 2V_{opt}(\bar{r})\right]\Psi(\bar{r}) = 0 \qquad (1\text{-}2)$$

اذ :

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

k : تمثل العدد الموجي النسبي

$\Psi(\bar{r})$: تمثل دالة الموجة.

وإن جهد الاستطارة سوف نطلق عليه بالجهد البصري للنظام $V_{opt}(\bar{r})$ يعطى بالعلاقة التالية:

$$V_{opt}(\bar{r}) = V_R(\bar{r}) \quad + \text{iV}_\text{I}(\bar{r})(1-3)$$

علماً اننا عالجنا في هذه الرسالة مسألة الاستطارة المرنة بحيث يكون الحد الخيالي فيها مساوي للصفر

إذ أن كلا من $V_I(\bar{r})$ و$V_R(\bar{r})$ يكون مقدارا حقيقيا[16]، وان حد الجهد الحقيقي $V_R(\bar{r})$ هو:

$$V_R(\bar{r}) = V_{st}(\bar{r}) + V_{ex}(\bar{r}) + V_{Pol}(\bar{r}) \ + V_{cor}(\bar{r})(\mathbf{1-4})$$

إذ $V_{st}(\bar{r})$ هو الجهد المستقر و $V_{ex}(\bar{r})$ هو جهد التبادل. و $V_{pol}(\bar{r})$ جهد الاستقطاب بينما يمثل $V_{cor}(\bar{r})$ جهد الترابط، ومن المعلوم ان هناك صعوبات في مسئلة تركيب جهد الاستطارة الملائم للهدف، وهذه الصعوبات ناتجة من جهد الترابط القصير المدى $V_{cor}^{SR}(\bar{r})$ وجهد الاستقطاب الطويل المدى $V_{pol}^{LR}(\bar{r})$ والذي يسبب تشوه شحنة الذرة الهدف بواسطة الإلكترون الساقط عند المسافات الطويلة إلى تفاعل التبادل الخاضع لمبدأ باولي للاستبعاد[16]. لقد أوضح الباحث Slater[17]إن نظرية تصادم الإلكترون بالذرة الهدف في تقريب التبادل المستقر تأخذ بنظر الاعتبار تفاعل التبادل والتفاعل المستقر فقط، وإن هذه التأثيرات يمكن وصفها بواسطة معادلة Hartree-Fock (H-F) [18] المقاسة بالوحدات الذرية (a_0=ħ=m=e=1) كما يلي

$$\left[-\frac{\nabla_i^2}{2}-\frac{Z}{r_i}+\sum_j\int\frac{u_j^*(2)u_j(2)}{r_{12}}dV_2\right.$$
$$\left.-\sum\delta(m_{si},m_{sj})\int\frac{u_i^*(1)u_j^*(2)u_j(1)u_i(2)}{r_{12}}dV_2\right]u_i(1) \quad (1\text{-}3)$$
$$=E_iu_i(1)$$

إذ ان $\delta(m_{sj},m_{si})$ تمثل Kroneckel delta وان m_{sj} و m_{si} يمثلان برم المدار i والمدار j على التوالي، بحيث ان المقدار $\delta=1$ عندما $m_{sj}=m_{si}$ ، وعدا ذلك فأنه يساوي صفراً، ونلاحظ أن الحد الثالث من يسار المعادلة (1-5)، يمثل جهد Hartree والذي يمكن أن يمثل بالعلاقة التالية:

$$V_H(r)=\int\frac{\boldsymbol{\rho(r')}}{|\boldsymbol{r'-r}|}\boldsymbol{dr'} \quad (1\text{-}6)$$

أذ $\boldsymbol{\rho(r')}$: تمثل كثافة الشحنة الإلكترونية الكلية، أما الحد الرابع من اليسار في المعادلة (1-5) فيمثل حد التبادل والذي تظهر أهميته في إستطارة الإلكترونات من الذرات، الجزئيات، والمواد الصلبة وهذا الحد ناتج بسبب مبدأ باولي للاستثناء ويجب أن تكون الدالة الموجية للنظام غير متناظرة بالنسبة إلى تبادل الإحداثيات (الفضاء-البرم) لأي إلكترونين طبقا لمبدأ باولي للاستثناء، وفيما يلي أنواع الجهود التي تتعلق بعملية استطارة الإلكترونات من الذرات، وسنوضحها باختصار:

1-3-1- جهود التبادل Exchange Potentials

أ. **جهد تبادل سليتر: Slater Exchange Potential (SEP)**

وهو ابسط أنموذج لجهد التبادل وأوسعها استعمالاً في تطبيقات الحالة المقيدة ويرمز له بالرمز V_{x_α} ويعطى بالعلاقة التالية[17]:

$$V_{x_\alpha}=-\left(\frac{3\alpha}{2\pi}\right)[3\pi^2\rho(r')]^{\frac{1}{3}} \quad (1\text{-}7)$$

لقد نجح هذا الجهد في إيجاد خواص الذرات والمواد الصلبة، بينما لم ينجح في الاستطارة الإلكترونية المرنة، إذ أختبر المعامل α بطرائق مختلفة، وفي تطبيقات الحالة المقيدة أقترح Slater أن قيمة

$\alpha = 1$[18]. وقد وجد عدد من الباحثين مثل Caspar[19] و Sham و Kohn[20] و Cowan وجماعته[21]أن قيمة $\alpha = 2/3$، إذ كانت متوافقة مع مبدأ التغاير، وطبقت $\alpha = 2$ على أغلب الذرات في الجدول الدوري[22]، ولوحظ ان أغلب التقريبات المستعملة في هذا المجال هي تقريب التبادل شبه الكلاسيكي (Semi Classical Exchange) والتي اقترحت من قبل الباحثين Riley وTruhlar[23] وهي طريقة عامة تستعمل للذرات ذات القشرات المفتوحة[17]، أما تقريب التبادل للغاز الإلكتروني الحر (FEG) فهو يستند إلىأنموذج غاز فيرمي للإلكترونات غير المتداخلة[24]إذأن دالة الموجة الكلية تكون غير متناظرة تبعا لمبدأ الاستبعاد لباولي. وان طاقة التبادل تمحسابها بواسطة جمع كل حالات الزخم وبجميع المستويات ولحد مستوى فيرمي عن طريق تغير كثافة الغاز الإلكتروني وزخم فيرمي مع الموضع r̄ ، لذا فأن جهد التبادل للغاز الإلكتروني الحر (FEG) يعطى بالعلاقة التالية [24]:

$$V_{ex}^{FEG} = -\frac{2}{\pi} k_F(\bar{r}) F[\eta(\bar{r})] (1-8)$$

إذ$k_F(\bar{r})$: يمثل زخم فيرمي الموضعي ويرتبط مع كثافة الشحنة $\rho(\bar{r})$ من خلال العلاقة التالية:

$$(\bar{r}) = [3\pi^2 \rho(\bar{r})]^{\frac{1}{3}} (1-\ 9\ )$$

$$F[\eta(\bar{r})] = \frac{1}{2} + \frac{1-\eta^2}{4\eta} \ln\left|\frac{1+\eta}{1-\eta}\right| (1-10)$$

أذ

$$\eta(\bar{r}) = k(\bar{r})/k_F(\bar{r}) (1\text{-}11)$$

والتي تمثل نسبة مقدار الزخم ħk للإلكترونالمستطارإلى مقدار أقصى زخم مقابل لسطح فيرمي الكروي.

ب- جهد Hara للغاز الإلكتروني الحر: Hara of FEG Potential (HFEG)

أقترح Hara[25]وجود زخم الإلكترونالمستطار $k(\bar{r})$ متساوٍ مع زخم الإلكترونات المقيدة في الغاز، وعليه فعندما يتغير $\bar{r}$ مع $K(\bar{r})$ بسب تغير $k_F(\bar{r})$ والمقاسة بالوحدات الذرية (a_0=ħ= e=1)حسب العلاقة التالية[24]

$$k^2(\bar{r}) = k_F^2(\bar{r}) + 2I + k^2 \qquad (1\text{-}12)$$

أذ I: يمثل جهد تأين الذرة الهدف.

$\frac{k^2}{2}$:الطاقة الحركية للإلكترون الساقط.

وعليه فأن جهد Hara للغاز الإلكتروني الحر والممثل بالعلاقة (8-1) يعتمد على طاقة الإلكترون الساقط من خلال المعادلة (12-1)[24] ومن الملاحظ أن أغلب تقريبات التبادل الموضعي تستند على أنموذج الغاز الإلكتروني الحر، إذ تفترض أن عدد الإلكترونات كبير جداً بحيث أن حدود التفاعل الذاتي تهمل[26].

2-3-1 جهد الاستقطاب: Polarization Potential

إن تأثيرات الاستقطاب مهمة جدا في استطارة الإلكترونات والبوزترونات عند الطاقات الواطئة، وتحصل هذه التأثيرات عند المسافات الذرية الطويلة $\bar{r}$ ، بحيث تؤدي إلى تشويه الذرة الهدف بسبب الإلكترونالمستطار[27]، لكن جرت معالجة هذه التأثيرات من قبل Temkin[29-28] باستعمال طريقة المدار المستقطب Polarized Orbital Method (POM)[30] عندما يقترب الجسيم الساقط بصورة بطيئة من الذرة الهدف مما يؤدي بالإلكترونات المقيدة بالذرة أن تتأثر بالمجال الكهربائي للشحنة الخارجية للإلكترون وبسبب ذلك سوف يحدث إعادة توزيع لكثافة الشحنة الإلكترونية المقيدة على شكل عزم ثنائي القطب على الذرة الهدف، ولان اقتراب الإلكترون يكون بطيئا، لذا يحدث تغير بالطاقة وستظهر صيغة تقريبية لجهد الاستقطاب وكما موضح بالعلاقة التالية[24]:

$$V_{POL}(\bar{r}) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} -\frac{\alpha_D}{2r^4} \qquad (1-13)$$

أذ $\boldsymbol{\alpha_D}$: تمثل معامل الاستقطاب لثنائي القطب المستقر، ويعتمد على اتجاه المجال الكهربائي الخارجي وعلى قيمة موضع الإلكترون تبعا لذلك، وقد استعمل الباحثانJhanwar وKhare[31] جهد إستقطاب تجريبي متناظر كرويا ومعتمد على الطاقة ويتضمن تأثيرات ثنائي القطب ورباعي القطب ويمثل بالعلاقة التالية:

$$V_{POL}(\bar{r}) = -\frac{1}{2}\left[\frac{\alpha_D r^2}{(r^2+d^2)^3} + \frac{\alpha_Q r^4}{(r^2+d^2)^5}\right] \qquad (1\text{-}14)$$

أذ $\boldsymbol{\alpha_Q, \alpha_D}$: معاملات الاستقطاب الثنائية والرباعية على التوالي.

وتمثل d: معامل القطع من مرتبة الحجم الذري وهو مهم جدا لأنه يعطي تصحيح لتأثيرات الترابط عند المسافات الطويلة .

1-3-3 - جهود الترابط: Correlation Potentials

تعرف طاقة الارتباط بأنها الفرق بين الطاقة الكلية غير النسبية المضبوطة وطاقة الترابط الناتجة من تقريب (HF)[32]، ولوحظ إن تأثيرات الارتباط تؤدي إلى تشويه شحنة الذرة الهدف بسبب الإلكترون أو البوزترون الساقط، وتحصل هذه التأثيرات عند المسافات القصيرة والقريبة من النواة والتي لها دور كبير في معرفة وصف استطارة الإلكترون عند الطاقات الواطئة[33] وتعالج تأثيرات الترابط باستعمال نظرية التصحيح أو نظرية التغاير[17]، وسنذكر في هذه الفقرة بعض الأنواع من جهود الترابط[34,35,36,37] ونترك التفاصيل للفصل الثاني عندما نتحدث عن جهد الترابط المستعمل في رسالتنا :

أ. أنموذج جهدHedin-Lundqvist

ب.أنموذج جهدCohen-Pack

ج. أنموذج جهد O'connnel-Lane

د. أنموذج جهدPerdew-Wang

ه. أنموذج جهدPerdew-Zunger(الجهد المستعملفي هذه الرسالة)

ومن الجدير بالذكر أن الجهد المستعمل في هذه الرسالة يكون حسب استعمال المؤثر الهاملتوني لمعادلة شرودنجر:

$$\widehat{H}\Psi = E\Psi \qquad (1-15)$$

ويكون على نوعين:

أ. إذا استعملنا $\widehat{H}_{Sch}$ فتؤول المعادلة (15-1) إلى معادلة شرودنجر (وهي الحالة غير النسبية).

ب.إذا استعملنا $\widehat{H}_{Dirac}$ فتؤول المعادلة (15-1) إلى معادلة ديراك (وهي الحالة النسبية)، لذلك يكون الجهد الكلي المستعمل:

$$V(\bar{r}) = V_{st}(\bar{r}) + V_{ex}(\bar{r}) + V_{cp}(\bar{r})(1-16)$$

V_{ex}: جهد التبادل الذي يستخدم فقط لاستطارة الإلكترونات ويحذف في حالة البوزترونات.

V_{cp}: جهد الاستقطاب-الترابط، ويكون على أنموذجين، أنموذج خاص بالإلكترونات وآخر خاص بالبوزترونات، ويكون فعالا للطاقات الواطئة الأقل من 10KeV، لكن يظهر عدم تأثيره فوق هذه الطاقة.

1-4 الهيكل العام للرسالة:

تتناول هذه الرسالة، دراسة الاستطارة للإلكترونات والبوزترونات من الذرات والأيونات عند طاقات سقوط مختلفة، وتوضيح تأثيرات الجهود المستقرة (الاستاتيكية) والتبادل والترابط والاستقطاب بين الجسيمات المختلفة الشحنة مع الذرات والايونات. أهتم الفصل الأول بتقديم نبذة مختصرة حول الاستطارة، وشرح موجز عن وصف نظرية الاستطارة للإلكترونات والبوزترونات بواسطة الذرات والأيونات، وتقديم شرح موجز عن الأنموذجات المختلفة من الجهود والتي ساهمت بعضها في تركيب وتكوين جهد الاستطارة المناسب لعملية الاستطارة، واختير أنموذج[38]Perdew-Zungerإلكترونات في جهد الترابط، أما البوزترونات فكان أنموذج[39]Jain هو المستعمل في جهد الترابط بواسطة استعمالالبرنامج الدولي (ELSEPA) ولإنجاز الحسابات المتعلقة بهذه الرسالة بتضمين الجهد المناسب في حالة الإلكترونات وحل معادلة الاستطارة باستعمال طريقة الموجة المجزئة (PWM) بينما في حالة استطارة البوزترونات، فأن

البرنامج يقوم بحذف جهد التبادل وإضافة جهد ترابط Jain[39] بدلاً من جهد Perdew-Zunger[38] والخاص باستطارةالبوزترونات.

أما الفصل الثاني، فقد أستعرضنا فيه الأنموذج المستعمل في هذه الرسالة لاستطارة الإلكترونات من الذرات والأيونات وجرى تطبيقه على ذرات شبه مغلقة المدارات مثل ذرات Mg , Ca , Ra (عناصر قلوية ترابية)، وعلى ذرة ذات مدارات مغلقة مثل ذرة Rn ، كما جرى تطبيقه على ذرات Cm , Eu , Yb فضلا عن الأيونات الموجبة (Li^+, Na^+, K^+)، وحسبت المقاطع العرضية التفاضلية وإزاحات الطور، وقورنت نتائجنا مع النتائج النظرية والعملية لباحثين آخرين وكانت نتائج بحثنا متوافقة بصورة جيدة وتناولنا في الفصل الثالث إستطارةالبوزترونات من الذرات وتم استبدال جهد الترابط للباحثين Perdew-Zunger[38] بأنموذجJain[39] وكانت نتائجنا متوافقة مع نتائج باحثين أخرين أيضا.

أما الفصل الرابع فبعد التأكد من نجاح الأنموذجالمستخدملحساب معاملات الاستقطاب البرمي T(θ), U(θ) و S(θ) باستعمال معادلة ديراك النسبية، وكانت لمجموعة من الذرات المستعملة في هذه الرسالة ، وقورنت نتائجنا مع النتائج المتوفرة لباحثين آخرين، وكانت متوافقة.

أما الفصل الخامس والأخير فيحتوي على أهم الاستنتاجات المتعلقة بالعمل المقدم في هذه الرسالةو بعض المقترحات حول العمل المستقبلي.

الفصل الثاني

الأنموذج النظري وتطبيقاته على استطارة الالكترونات من الذرات الحرة والايونات الموجبة

Theoretical Model and Applications of Scattering Electrons from Free Atoms and PositiveEarthAlkaline Ions.