

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي
جامعة محمد بوضياف - المسيلة



ميدان: علوم المادة
فرع: الفيزياء.
تخصص: الفيزياء النظرية

كلية: العلوم.
قسم: الفيزياء.
رقم: Ph/TH/09/2020

مذكرة مقدمة لنيل شهادة الماستر أكاديمي

إعداد الطالبتين:

مكاري ريمة و مكفس سهيلة

تحت عنوان

المقطع الفعال التفاضلي المضاعف SEDD للتأين البسيط
لذرة الهليوم

تمت المناقشة يوم / 09 / 2020 أمام اللجنة المكونة من:

| | | |
|--------------|---------------|----------------|
| رئيسا | جامعة المسيلة | د مجدل صهيب |
| مشرفا ومقررا | جامعة المسيلة | د نحاوة سمراء |
| مناقشا | جامعة المسيلة | دبوشلاغم فوزية |

السنة الجامعية: 2020/2019

إهداء مكاري ريمة

اهدي ثمرة جهدي الى :

الوالدين العزيزين:

أمي أطال الله عمرها.

أبي رحمه الله و اسكنه فسيح جناته.

علي الدعم والتشجيع .

أختي و أخوتي.

كل عائلتي.

الأحبة والأصدقاء.

الى كل طالب علم يجتهد في طريق النجاح.

إهداء مكفّس سهيلة

إلى الينبوع الذي لا يمل العطاء إلى من سعوا لكي انعم بالراحة والهناء

والذي الكريمين حفظهما الله ورعاهما وأطال في عمرهما

إلى جميع أفراد أسرتي وكل من ساعدني في إتمام المذكرة

إلى كل زملائي بالجامعة

شكر و عرفان

أتقدم أولاً وأخراً بالشكر لله عزوجل الذي وفقني في إنجاز هذا العمل والصلاة والسلام على الحبيب محمد عليه أفضل الصلاة والسلام .

أتقدم بأسمى عبارات الشكر والتقدير الى الأستاذة الفاضلة نحاوة سمراء علي مجهوداتها وتوجيهاتها خلال إشرافها علي إعداد هذه المذكرة ، كما أشكر أعضاء لجنة المناقشة بداية برئيس اللجنة الأستاذ: **مجدل صهيب** أستاذ محاضر بجامعة المسيلة وكذلك الأستاذة: بوشلاغم فوزية، أستاذة محاضرة بجامعة المسيلة على قبولهما مناقشة هذا العمل.

كما وجب عليا تقديم الشكر والتقدير لأساتذتي الكرام .

فهرس المحتويات

| | |
|---------|--|
| 06..... | مقدمة عامة |
| | الفصل الأول : نظرية الانتشار |
| 09..... | مقدمة |
| 09..... | 1. التآين البسيط (e,2 e) |
| 10..... | 2. المقطع الفعال لتفاعل |
| 11..... | 3. المقطع الفعال للتآين (e,2 e) |
| 12..... | 1.3. المقطع الفعال التفاضلي البسيط SESD |
| 12..... | 2.3. المقطع الفعال التفاضلي المضاعف SEDD |
| 12..... | 3.3. المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي SETD |
| 13..... | 4.3. المقطع الفعال الكلي |
| 13..... | 4. حركية التآين البسيط (e,2e) |
| 13..... | 1.4. الشكل الخطي المتناظر |
| 14..... | 2.4. الشكل الخطي غير المتناظر |
| 14..... | 3.4. الشكل اللاخطي المتناظر |
| 15..... | 4.4. الشكل اللاخطي غير المتناظر |
| 15..... | 5. النماذج النظرية |
| 15..... | 1.5. تقريب بورن Born |
| 16..... | 1.1.5. تقريب بورن الأول FBA |
| | الفصل الثاني: المدارات الذرية لذرة الهليوم |
| 19..... | مقدمة |

| | |
|---|---|
| 19..... | 1. المدارات الذرية لذرة الهيدروجين |
| 20..... | 2. المدار الذري |
| 23..... | 3. الجسيمات الشبيهة بالهيدروجين |
| 24..... | 4. الذرات متعددة الالكترونات |
| 25..... | 5. المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي |
| 26..... | 1.5. تقريب القلب المتجمد |
| 26..... | 1.1.5. نموذج القلب المتجمد بالكترونين نشيطين |
| 29..... | 2.1.5. نموذج القلب المتجمد بالكترون واحد نشيط |
| 29..... | 6. ذرة الهليوم |
| 30..... | 7. دالة ذرة الهليوم |
| 30..... | 1.7. دالة هيليراس <i>Hylleraas</i> |
| 31..... | 2.7. دالة كليمنتي <i>Clementi</i> |
| الفصل الثالث: حساب المقطع العرضي يختلف ثلاث مرات عن الهليوم | |
| 31..... | حركية التصادم (e,2 e) |
| 32..... | المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي |
| 32..... | تمثيل الالكترون المتحرر من ذرة الهليوم |
| 32..... | حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي |
| 36..... | حساب المقطع الفعال التفاضلي المضاعف |
| 36..... | الخاتمة |
| 37..... | الخاتمة العامة |
| 38..... | المراجع |

مقدمة عامة

تمثل دراسة التأين البسيط أو المتعدد للذرات أو الجزيئات بواسطة جسيمات سريعة خاصة الالكترونات من أهم مجالات الفيزياء، ويمكن تحليل المعلومات التي تقدمها هذه الدراسات من فهم بنية المواد وديناميكية اصطدام الجسيمات المجهرية، و التي بدورها تساعد على فهم العديد من الظواهر الطبيعية في عدة مجالات مثل البيو فيزياء وفيزياء البلازما.

خصت الدراسات الأولى للتأين البسيط و المتعدد اصطدام الذرات بواسطة حزمة من الالكترونات، و كانت ذرات الهيدروجين و الهليوم من أولى الأهداف التي استخدمت في الدراسة، و ذلك لتركيبها المبسط و توفر وصفها الدقيق في الميكانيك الكوانتي مقارنة بذرات أخرى، وفي السنوات الأخيرة تطورت الدراسة و شملت تأين جزيئات بسيطة و مركبة.

في دراستنا نقوم بدراسة التأين البسيط ($e, 2e$) لذرة الهليوم عن طريق قذف الكترونات ذات طاقة حركية كبيرة، سنستعمل تقريب بورن الأول FBA ونموذج القلب المتجمدمكون من الكترون واحد نشيط أو إلكترونين نشيطين لحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي والمضاعف لهذا التفاعل.

ينقسم هذا العمل من ثلاثة فصول :

في الفصل الأول نقدم بعض المفاهيم العامة حول نظرية تصادم الجسيمات المجهرية ، نبدأ بتعريف المقطع الفعال لتفاعل و سعة انتشاره، وكذلك نقوم بتحديد مختلف ظروفه الحركية و الهندسية الممكنة، سنعرف بعد ذلك تقريب Born ونموذج القلب المتجمد لكتابة مصفوفة الانتقال التي تمكننا من تعريف المقاطع الفعالة التفاضلية للتفاعل : المقطع الفعال التفاضلي البسيط، المقطع الفعال التفاضلي المضاعف ، المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي و المقطع الفعال الكلي.

في الفصل الثاني نركز على الوصف الكمي لذرة الهليوم و ذلك بتحديد مدارتها الذرية ومستويات الطاقة، و نستعرض معادلة شرودنجر والحلول الدقيقة لذرة الهيدروجين. ثم سنستخدم دالتي حالة لوصف ذرة الهليوم وتحديد الحالات المقيدة للإلكترون و هما: دالة كليمنتي Clementi و دالة هيليراس Hylleraas. في آخر الفصل نقوم بضبط عبارة المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي.

في الفصل الثالث يتم حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي و المضاعف للتأين البسيط ($e, 2e$) لذرة الهليوم ثم مقارنة النتائج بالقيم التجريبية مما يسمح لنا بتقييم حسابنا و التقريب الأول لبورن و كذلك ونموذج القلب المتجمد.

الفصل الأول: نظرية الانتشار

مقدمة

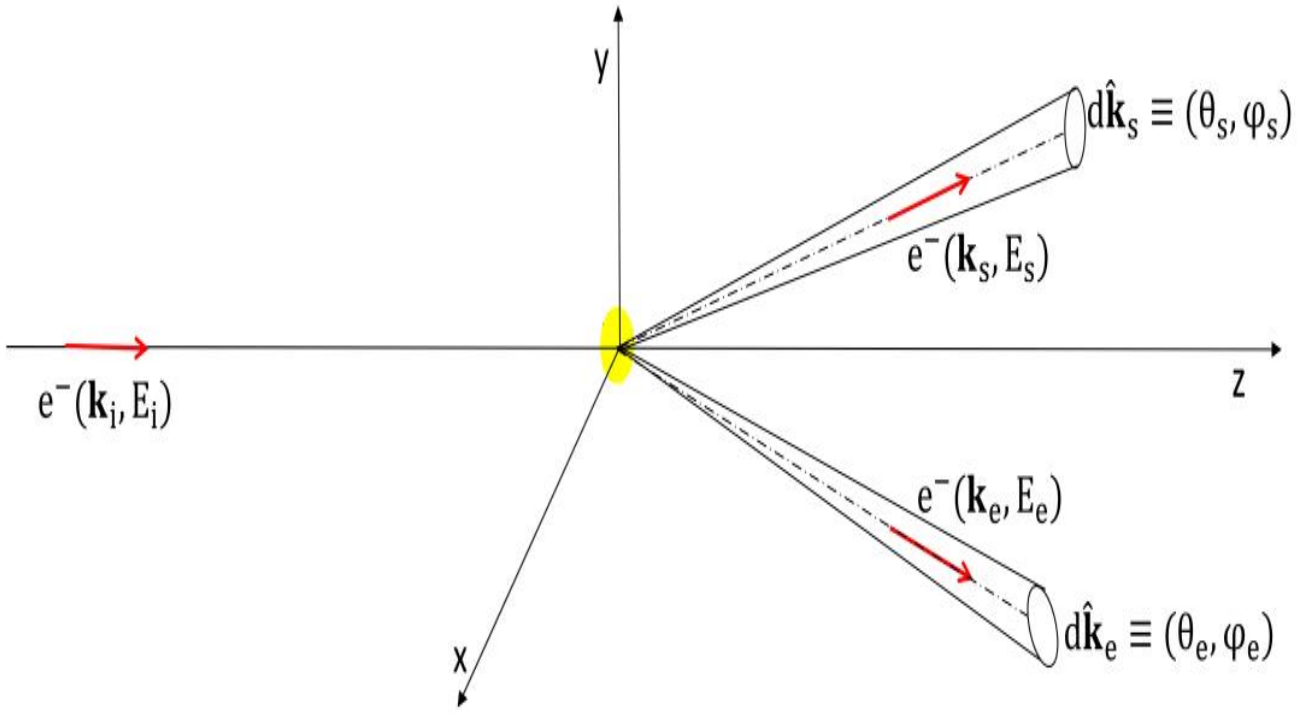
نقدم في هذا الفصل بعض المفاهيم العامة حول نظرية تصادم الجسيمات المجهرية، نبدأ بتعريف سعة الانتشار والمقاطع الفعالة التفاضلية و الكلية لهاته التصادمات، وكذلك تحديد مختلف ظروفها الحركية و الهندسية الممكنة , سنعرف بعد ذلك تقريب Born لتحديد مصفوفة الانتقال التي سيتم استخدامه في دراستنا.

1. التآين البسيط (e,2e)

تنتج عملية التآين البسيط (e,2e) لذرة أو جزئي من خلال قذفهم بإلكترون سريع e_i ، مما يحزر إلكترون واحد من السحابة الالكترونية المحيطة بالذرة أو جزئي، يخرج الإلكترون المحزر e_s مع الإلكترون المسبب للتآين e_s ، بسبب تماثل الالكترونات الخارجة نعتبر الإلكترون الأسرع هو الإلكترون المنتشر e_s و الإلكترون البطيء هو الإلكترون الصادر e_e من الذرة أو الجزئي. نفترض في مرجع المخبر ان الهدف (الذرة أو الجزئي) ساكن و في اتجاه عشوائي، نقوم بقذف الهدف A بحزمة الكترونية في اتجاه واحد ذات الطاقة حركية تكون أعلى من أول كمون تآين للذرة أو الجزئي (الشكل 1). يمكن ان نمثل التآين البسيط (e,2e) لهدف A بالتصادم مع إلكترون بالمعادلة التالية [1,2]:

$$(I.1) \quad e_i(\vec{k}_i, E_i) + A \rightarrow A^+ + e_s(\vec{k}_s, E_s) + e_e(\vec{k}_e, E_e)$$

حيث: \vec{k}_i تمثل شعاع موجة الإلكترون الوارد e_i ، \vec{k}_e تمثل شعاع موجة الإلكترون المتحرر e_e ، \vec{k}_s تمثل شعاع موجة الإلكترون المنتشر e_s . الزوايا θ_e , θ_s و φ_s , φ_e تمثل زوايا الورود والانتشار.



الشكل:1.I- رسم توضيحي للتأين البسيط (e,2 e)

تعطى الطاقة الحركية E_c لكل إلكترون كما يلي:

$$E_c = \frac{1}{2} K^2 \quad (I.2)$$

من شرط الحفظ الطاقة الكلية و كميات الحركة نجد [3]:

$$E_i = E_s + E_e + I + E_r^+ \quad (I.3)$$

$$\vec{k} = \vec{k}_i - \vec{k}_s = \vec{k}_e + \vec{q} \quad (I.4)$$

حيث: E_r^+ و \vec{q} هي على الترتيب طاقة ارتداد و كمية الحركة للشاردة A^+ والتي تكون مهملة مقارنة بالطاقة الحركية للإلكترونات، I تمثل طاقة تأين الهدف A ، \vec{k} يمثل كمية الحركة المحولة.

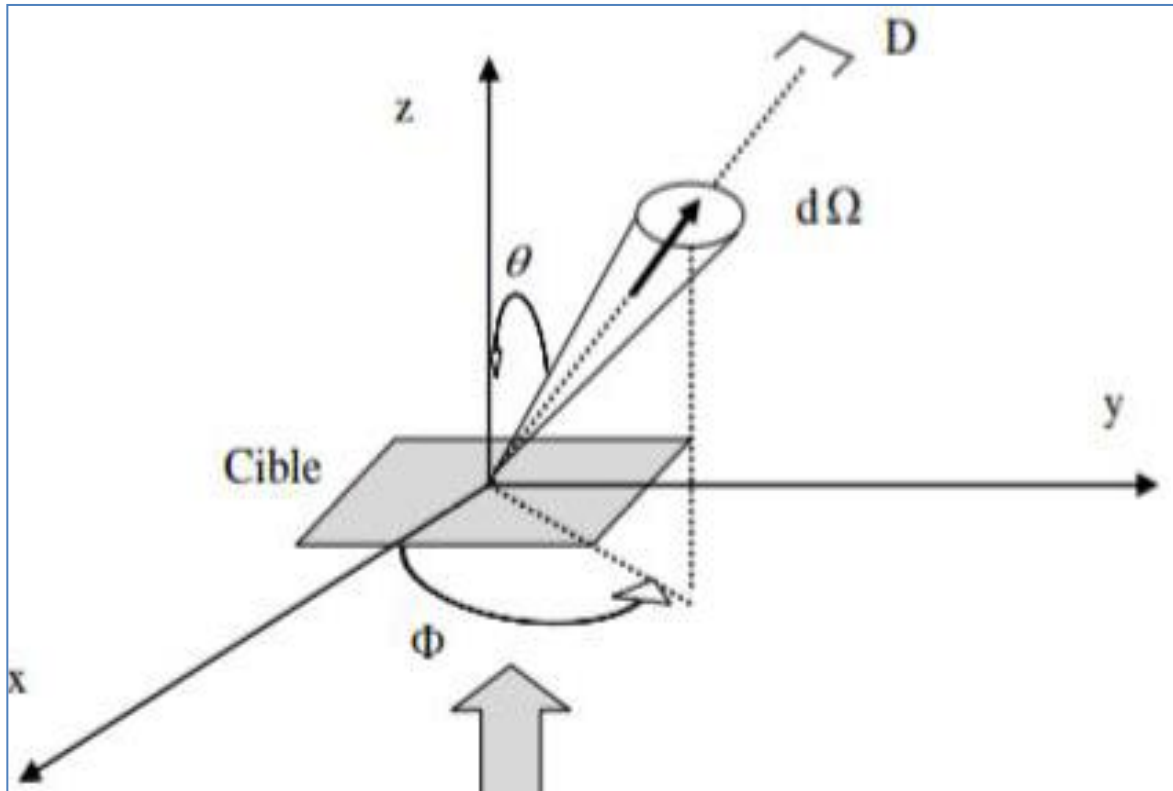
2. المقطع الفعّال لتفاعل

يعتبر المقطع الفعّال أهم كمية لدراسة اي تفاعل فهو يمثل احتمال حدوثه، لإعطاء الصيغة الرياضية للمقطع الفعّال σ نفترض التفاعل الموضح في الشكل (I.2). نعتبر التدفق F المتكون من الجسيمات المقذوفة في الاتجاه الموازي (OZ) التي تتصادم مع جسيمات الهدف و التي عددها N_i . بواسطة الكاشف D نقوم بتحديد عدد الجسيمات المنتشرة في الثانية N ، يعرف المقطع الفعّال σ للانتشار بمعامل التناسب بين عدد الجسيمات الملتقطة N و عدد جسيمات الهدف N_i و التدفق F و يعبر عنه على النحو التالي [2,4]:

$$\sigma = \frac{N}{N_i F} \quad (I.5)$$

يقدر المقطع الفعّال σ بالمتري مربع m^2 , و يكتب بدلالة عنصر مصفوفة الانتقال T_{if} من الحالة الابتدائية الي الحالة النهائية بواسطة العلاقة [5,6]:

$$\sigma_{i \rightarrow f} = \frac{(2\pi)^4}{K_i} \delta(E_i - E_f) \delta(\vec{K}_i - \vec{K}_f) |T_{if}|^2 \quad (I.6)$$



الشكل 2.I: مخطط لمفهوم المقطع الفعّال

3. المقطع الفعّال للتأين

في عملية التأين البسيطة، تتكون الحالة النهائية من ثلاثة جسيمات (الإلكترون المقذوف و الإلكترون المحرر و الشاردة)، يمثل المقطع الفعّال $\sigma_{(e,2e)}$ احتمال حدوث التأين البسيط (e,2e) لهدف ما يرتبط هذا التفاعل بين الإلكترون والهدف بعدة عوامل منها: الظروف الحركية والهندسية كطاقة الإلكترون الوارد وزاوية الورود و الانتشار. يمكن تعريف المقطع الفعّال الكلي و المقاطع الفعّالة التفاضلية: المقطع الفعّال التفاضلي البسيط، المقطع الفعّال التفاضلي المضاعف و المقطع الفعّال التفاضلي الثلاثي كما يلي:

1.3 المقطع الفعال التفاضلي البسيط SEDS

تتكون الحالة النهائية في تجربة التصادم من إلكترونين حرين و الأيون المتبقي، عندما يتم الكشف انتقائيا عن أحد جسيمات الحالة النهائية في اتجاه معين، يمكن تعريف المقطع الفعال التفاضلي البسيط كما يلي [5,7]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} \int k_s^2 dk_s d\vec{k}_e \delta(E_i - E_f) |T_{if}|^2 \quad (I.7)$$

بحيث [4].

$$d\vec{k}_s = K_s^2 dk_s d\Omega_s \quad (I.8)$$

تربط مصفوفة الانتقال T_{if} دالة الموجة التي تصف الجملة قبل التصادم ودالة بعد موجتها بعد التصادم.

$$T_{if} = \langle \Psi_f | V | \Psi_i \rangle \quad (I.9)$$

2.3 المقطع الفعال التفاضلي المضاعف SEDD

يعطي المقطع الفعال التفاضلي المضاعف وصفا حركيا للجسيمات المنتشرة أو المقذوفة و الذي يعرف كما يلي [8]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} K_s K_e \int d\Omega_s |T_{if}|^2 \quad (I.10)$$

الكاشف يسمح بتحديد اتجاه وطاقة أحد الكترولونات الحالة النهائية للجملة.

3.3 المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي SETD

في التأين البسيط ($e, 2e$) يتم التقاط إلكترونني القناة النهائية (المنتشر و المنبعث) بواسطة كاشفين يتم وضعهما علي التوالي في الزوايا الصلبة Ω_e و Ω_s ، متمركزة في الاتجاهات (θ_s, φ_s) و (θ_e, φ_e) . يعطي المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي معلومات أكثر من تلك التي يوفرها المقطع الفعال التفاضلي البسيط و المقطع الفعال التفاضلي المضاعف، ويكتب كالتالي:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^3}{k_i} K_s K_e |T_{if}|^2 \quad (I.11)$$

من اجل طاقة قذف معينة، يعطي المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي التوزيع الزاوي للإلكترون بعد الانتشار.

4.3. المقطع الفعال الكلي:

يصف المقطع الفعال الكلي (SET) التفاعل بشكل عام، يتم تعريفه بدلالة كل المعلومات الحركية للتأين، حيث نكامل على جميع طاقات الجسيمات الصادرة من خلال زاوية صلبة $d\Omega$ ثم كل الفضاء [3]، [9]:

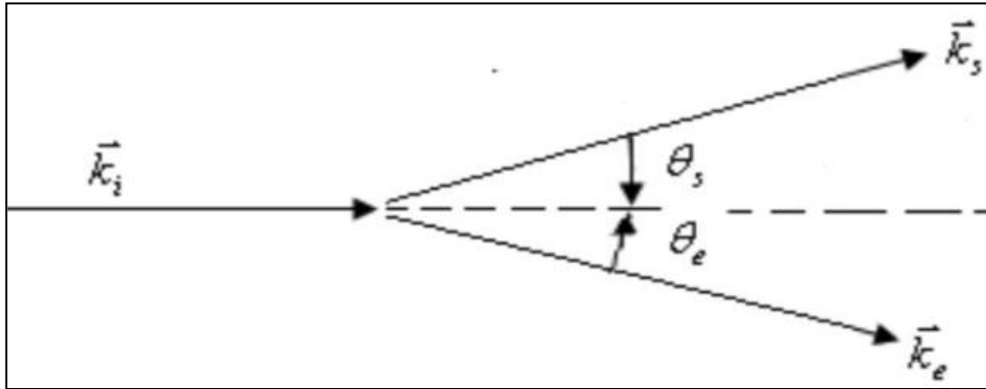
$$\sigma = \int_0^\pi \sin(\theta) d\theta \int_0^{2\pi} \frac{d\sigma(\theta, \varphi)}{d\Omega} d\varphi \quad (I.12)$$

4. حركية التأين البسيط (e,2e)

نستعمل في دراسة التصادم (e,2e) عدد كبير من المقادير الحركية و الهندسية وهي: $k_i, k_s, k_e, \theta_s, \varphi_e, \theta_e$ ، هذه الاخيرة تحدد كمية حركة كل الجسيمات المكونة للجلمة وكذا موقعها. يمكن ان يتحقق التصادم وفق 4 وضعيات و التي نفضلها فيما يلي:

4.4. الشكل الخطي المتناظر

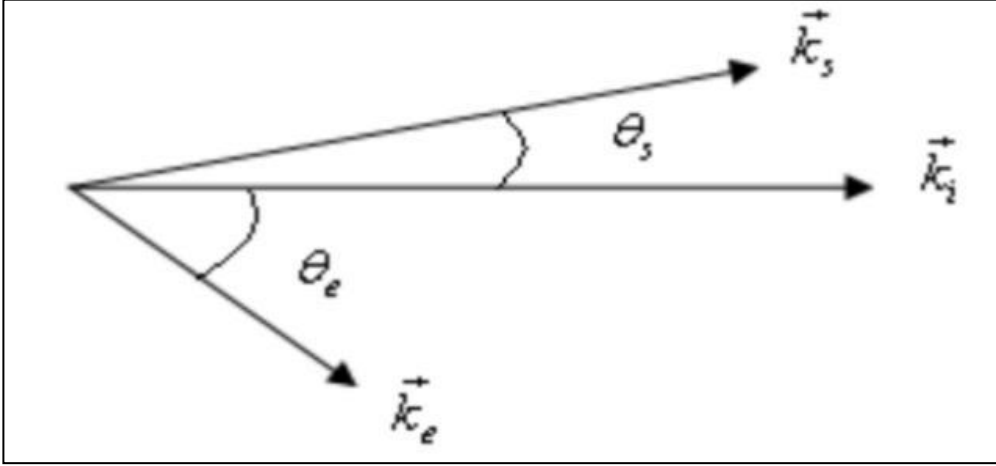
في هذه الوضعية يتم التقاط الإلكترونين المنتشر و المنبعث بطاقات حركية متساوية $E_e = E_s$ وزوايا قطبية متساوية $\theta_s = \theta_e = \theta$ ، أشعة كميات حركة الالكترونات: المقذوف، المنتشر و المحرر توجد في نفس المستوي [10].



الشكل I-3: الشكل الخطي المتناظر

4.5. الشكل الخطي غير المتناظر

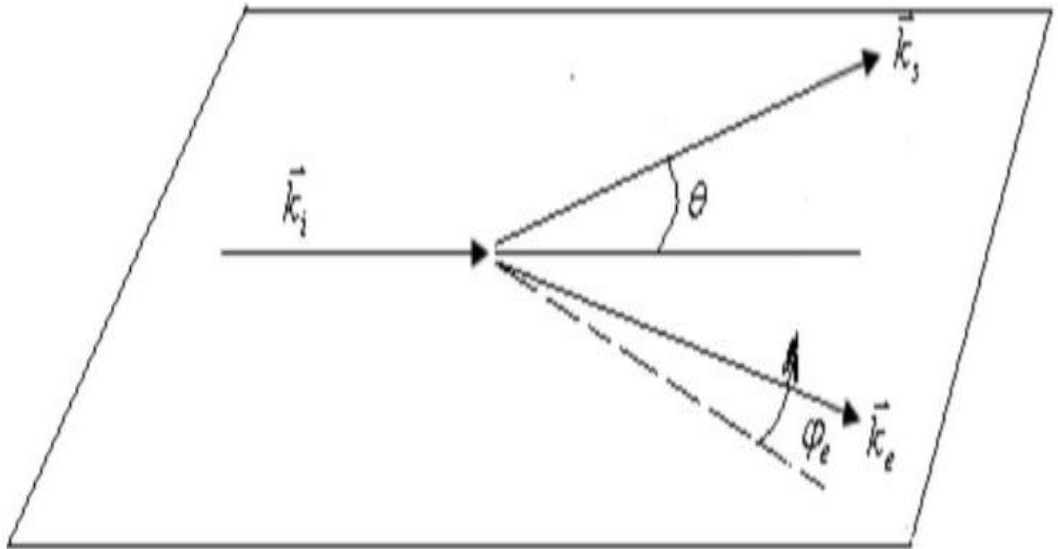
في هذه الشكل يتم عادة قياس المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي بدلالة زاوية الخروج θ_e (بحيث $0^\circ < \theta_e < 360^\circ$) ، زاوية الانتشار ثابتة θ_s وأقل من 20° ، في هذه الحالة الإلكترونين المنتشر والصادر يتواجدان في نفس مستوي التصادم مع طاقتين حركيتين مختلفتين $E_s \ll E_e$ [11,12].



الشكل I-4 الشكل الخطي غير المتناظر

6.4. الشكل اللاخطي المتناظر

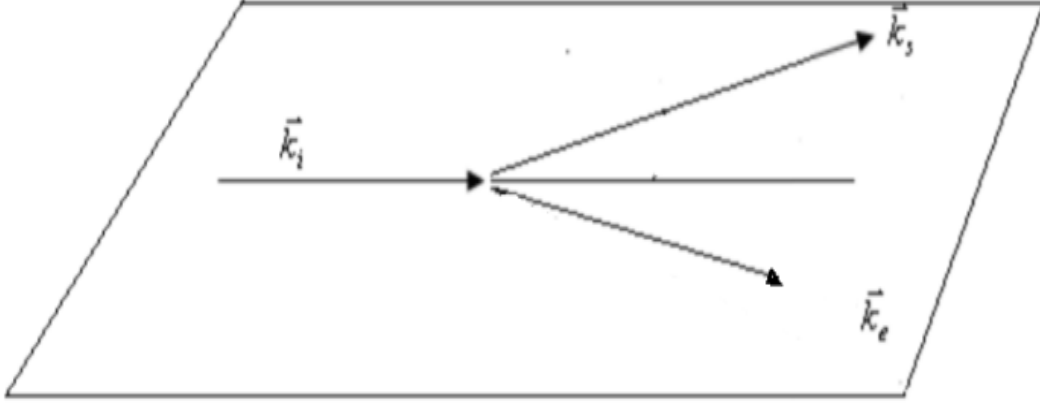
في هذا الشكل الهندسي لا تكون الإلكترونات الصادرة في نفس المستوي، يقاس المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي بدلالة الزاوية φ_e ($\theta_s = \theta_e, \varphi_s = 0^\circ$) [13].



الشكل I.5: الشكل متناظر وليس في نفس المستوي

7.4. الشكل اللاخطي غير المتناظر

يصدر إلكترونين $e_o e_s$ بعد التصادم بطاقات حركية مختلفة تماما وفي اتجاهات مختلفة , لا توجد كمية حركة الإلكترونات $e_i, e_o e_s$ في نفس المستوي [14].



الشكل 6-I الشكل اللاخطي غير المتناظر

5. النماذج النظرية

توجد دراسات نظرية و تجريبية كثيرة لعملية التآين البسيط ($e, 2e$) لهدف ذري، المقطع الفعال هو المقدار الفيزيائي الأساسي لفهم عمليات التآين و خاصة المقطع الفعال التفاضلي، المقطع الفعال التفاضلي يحوي علي أكثر المعلومات والتي تستعمل في تطوير النظريات نماذج النظرية لفهم آلية التآين البسيط ($e, 2e$) لهدف ما، في ما يلي نقدم النموذج النظري المستخدم غالبا لحساب المقطع الفعال للتآين البسيط.

5.1. تقريب بورن Born

التآين البسيط لهدف عن طريق قذف إلكترون عملية معقدة للغاية ، يتطلب دراستها تحديد احتمال الانتقال من حالة ابتدائية إلى حالة النهائية، لحساب المقاطع الفعالة في دراسة التصادمات الذرية و الجزيئية من الضروري استخدام عدد من التقريبات و نذكر منها تقريب بورن المقترح سنة 1926 [8]. يعتمد تقريب بورن على حقيقة ان تأثير كولوم بين الالكترون المقذوف والجسيمات المكونة للهدف يكون ضعيفا أمام الطاقة الكلية للجملة (الهدف وإلكترون المقذوف)، أو بعبارة أخرى نعتبر الإلكترون المقذوف والذرة المستهدفة كجملتين منفصلتين قبل وبعد الاصطدام ، من اجل طاقات عالية للإلكترون المقذوف أمام سرعة إلكترونات الهدف يمكن اعتبار الكمون الناشر V على انه اضطراب.

تقريب بورن يسمح بكتابة مؤثر الانتقال T على النحو التالي [15,16]:

$$T = V + V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V + V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V \frac{1}{E_i - h + i\varepsilon} V + \dots \quad (I.13)$$

حيث: h هو مؤثر الهاميلتوني للجلمة بدون اضطرابات.

يمكن بكتابة مؤثر الانتقال باستخدام دالة قرين G_0^+ كما يلي [5]:

$$T = V + VG_0^+V + VG_0^+VG_0^+V + \dots \quad (I.14)$$

$$G_0^+ = \frac{1}{E_i - h + i\epsilon} \quad \text{حيث تعطى دالة قرين Green كما يلي:}$$

يسمح لنا تقريب بورن بالتعبير عن سعة الانتشار بدلالة الكمون V بين الإلكترون الوارد والهدف وذلك باستخدام دالة الموجة المستوية لوصف الإلكترون الوارد و الإلكترون المنتشر.

يتم كتابة سلسلة بورن Born استنادا الى هذا التقريب الاحتمالي كما يلي [17][18]:

$$f_{Bn} = \sum_{j=1}^n \tilde{f}_{Bj} \quad (I.15)$$

$$\tilde{f}_{Bj} = \langle \varphi_f | VG_0^{(+)}V \dots G_0^{(+)}V | \varphi_i \rangle \quad (I.16)$$

حيث يمثل f_{Bn} نشر لسلسلة بورن Born ذو الدرجة n .

2.5. تقريب بورن الأول FBA:

يفترض تقريب بورن الأول FBA وجود تصادم مع الهدف مرة واحدة فقط. يسمح تقريب هذا بالاحتفاظ بالحد الأول فقط من السلسلة (I.16)، تقريب بورن الأول يكون صالح إذا تحقق تصادم واحد فقط للمقذوف مع الهدف و هو الحال بالنسبة للتصادمات بواسطة الكترونات تكون طاقتها كبيرة مقارنة مع طاقة الالكترونات المرتبطة بالهدف.

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \quad (I.17)$$

φ_f و φ_i هما علي التوالي الدوال الموجية للحالات الابتدائية والنهائية للجلمة .

V يمثل كمون التفاعل بين الإلكترون المقذوف والهدف الذري [19]:

$$V = -\frac{Z}{|\vec{r}|} + \sum_{j=1}^{N_e} \frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}_j|} \quad (I.18)$$

حيث:

$|\vec{r} - \vec{r}_j|$ هي المسافة بين الإلكترون المقذوف و إلكترون الهدف .

المسافة بين الإلكترون والمقدوف ونواة والهليوم He و e هو عدد الإلكترونات في الهدف.

يمكن كتابة عبارة المقطع الفعال الثلاثي التفاضلي في هذه الحالة كما يلي [2]:

$$\sigma^{(3)} = \frac{k_e k_s}{k_i} |f_{b1}|^2 \quad (\text{I.19})$$

الفصل الثاني: المدارات الذرية لذرة الهليوم

في دراستنا نستعمل التقريب الأول بورن FBA لحساب المقطع الفعال التفاضلي الثنائي للتأين البسيط لذرة الهليوم بواسطة إلكترون، في هذا الفصل نركز على الوصف الكمي لذرة الهليوم و ذلك بتحديد مداراتها الذرية (دوال الحالة)، نتحصل على هذه المدارات بحل معادلة شرودنغر، لكن لا يمكن الحصول على حلول دقيقة إلا لذرة الهيدروجين. سنستخدم اثنين من دوال الحالة لوصف الإلكترون وتحديد حالاته المقيدة في ذرة الهليوم وهي: دالة كليمنتي Clementi و دالة هيليراس Hylleraas.

1. المدارات الذرية لذرة الهيدروجين

في عام 1926، كتب اروين شرودنغر معادلته الشهيرة لذرة الهيدروجين. سمحت حلول هذه المعادلة بإيجاد مستويات الطاقة التي تم الحصول عليها من طرف Bohr. تكتب معادلة شرودنغر المستقرة لذرة الهيدروجين في الإحداثيات الكروية كما يلي :

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2mr^2} \left(-\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{L^2}{\hbar^2} \right) + u(r) \right\} \Psi(r, \theta, \varphi) = E \Psi(r, \theta, \varphi) \quad (\text{II.1})$$

بعد فصل المتغيرات r, θ, φ يمكن إيجاد حلول دقيقة لمعادلاتها التفاضلية، المدارات الذرية $\Psi(\vec{r})$ يمكن ان تكتب بالشكل التالي :

$$\Psi_{n,l,m}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) y_l^m(\theta, \varphi) \quad (\text{II.2})$$

حيث: n هو العدد الكمي الأساسي، l هو العدد الكمي الزاوي، m هو العدد الكمي المغناطيسي [23]:

n^* : هي العدد الكمي الأساسي ; عدد تام موجب.

l^* : هو العدد الكمي الثانوي ; هو عدد تام موجب أو معدوم.

m^* : هو العدد الكمي المغناطيسي ; هو عدد تام موجب أو معدوم .

| | |
|-----------|---|
| Niveau 1S | $\Psi_{n=1,l=0,m=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$ |
| Niveau 2S | $\Psi_{n=2,l=0,m=0}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{8\pi a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta e^{-\frac{r}{2a_0}}$ |
| Niveau 2P | $\Psi_{n=2,l=1,m=1}(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta e^{i\varphi}$ $\Psi_{n=2,l=1,m=1}(\vec{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi a_0^3}} \left(-\frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta$ $\Psi_{n=2,l=1,m=1}(\vec{r}) = \frac{1}{8\sqrt{\pi a_0^3}} \left(-\frac{r}{2a_0}\right) \sin \theta e^{-i\varphi}$ |

الجدول II.1: لذرة الهيدروجين للمدارات الذرية $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ الموافقة ل $n=1$ و $n=2$.

2. المدار الذري

تسمى حلول معادلة شرودنجر المستقرة المدارات الذرية وتعطى كما يلي:

$$\Psi_{n,l,m}(r) = R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \quad (II.3)$$

تكون الدالات الكروية $y_l^m(\theta, \varphi)$ مقننة ومتجانسة [20]:

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{(1)^l}{2^l l!} \sqrt{\frac{(2l+1)(l+m)!}{4\pi(l-m)!}} e^{im\varphi} \frac{1}{(\sin \theta)^m} \frac{d^{l-m}}{d(\cos \theta)^{l-m}} (\sin \theta)^{2l} \quad (II.4)$$

$R(r)$ هي حل المعادلة المعادلة القطرية وتكتب كما يلي :

$$R_{n,l}(r) = -\frac{2a_0^{\frac{3}{2}}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}} \left(\frac{2r}{na_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) \quad (II.5)$$

حيث $N_{n,l}$ وهو يعطى معامل التقنين:

$$N_{n,l} = -\frac{2a_0^{\frac{3}{2}}}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3}}$$

تكتب طاقات الذاتية E_n لذرة الهيدروجين للمدارات الذرية $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ كما يلي:

$$E_n = -\frac{E_1}{n^2} \quad (II.6)$$

حيث $E_1 = -13,6 \text{ eV}$ هي طاقة لذرة الهيدروجين ($n = 1$).

الجدول (II.1) يعطي للمدارات الذرية $\Psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi)$ لذرة الهيدروجين الموافقة ل $n=1$ و $n=2$.

من أجل $l=m=0$, تكون دالة الموجة $\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi)$ مدار s .

$$\Psi_{n,0,0}(r, \theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi a_0^3}} R_{n,0} \quad (II.7)$$

من أجل $l=1$, دوال الموجة $\Psi_{n,1,0}, \Psi_{n,1,\pm 1}$. هي المدار p (الشكل II.1), من أجل الحصول عن دوال حقيقية نقوم بالتركيبات الخطية بين المدارات $\Psi_{n,1,1}$ و $\Psi_{n,1,-1}$ [20]:

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_{n,1,-1} - \Psi_{n,1,1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \cos \varphi \quad (II.8)$$

$$\frac{i}{\sqrt{2}} (\Psi_{n,1,-1} + \Psi_{n,1,1}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \sin \theta \sin \varphi$$

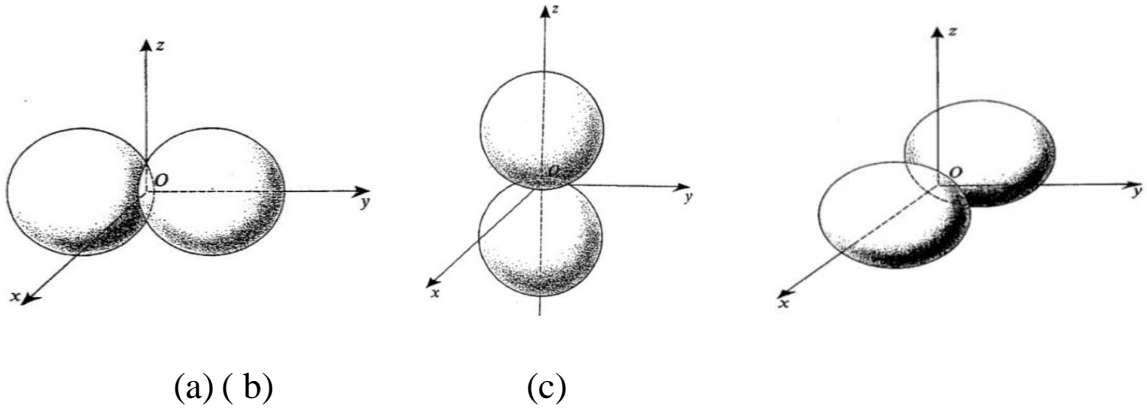
العلاقة بين الإحداثيات الكارتيزية والكروية هي

$$\frac{x}{r} = \sin \theta \cos \varphi, \frac{y}{r} = \sin \theta \sin \varphi, \frac{z}{r} = \cos \theta \quad (II.9)$$

ثم يتم كتابة المدارات p :

$$p_x = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{x}{r}, p_y = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{y}{r}, p_z = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} R_{n,1}(r) \frac{z}{r} \quad (II. 10)$$

الشكل (1.II) يمثل المدارات P_z, P_y, P_x , متناظرة محوريا علي التوالي بالنسبة الى المحاور oz, oy, ox .



الشكل (1.II): (a, b, c) - المدارات الذرية P_z, P_y, P_x

3. الجسيمات الشبيهة بالهيدروجين

تتكون الجسيمات الشبيهة بالهيدروجين من عدد من بروتونات إلكترون واحد ويكتب كمون كولوم

$V(r)$ للإلكترون كما يلي:

$$V(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (II. 11)$$

يمكن استنتاج المدارات الذرية للذرات الشبيهة بالهيدروجين, بإضافة المعامل Z تقريبا, بحيث تعطى مستويات الطاقة كما يلي:

$$E_n = -\frac{m_e e^2 Z^2}{8h^2 \epsilon_0^2 n^4} \quad (II. 12)$$

يكفي استبدال a_0 ب a_0/Z في المدارات الذرية لذرة الهيدروجين للحصول على المدارات الذرية

4. الذرات متعددة الإلكترونات

تتكون الذرة متعددة الإلكترونات ($Z > 1$) من نواة موجبة الشحنة يدور حولها Z إلكترون، يتطابق مركز ثقل الذرة عمليا مع مركز النواة والتي سنأخذ كمبدأ للإحداثيات، بإهمال التأثيرات النسبية و التأثيرات الناتجة عن الدوران الذاتي للإلكترون spin يعطى هاملموني الذرة متعددة الإلكترونات كما يلي:

$$H = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta r_i - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (II.13)$$

حيث: r_i هي المسافة بين مركز النواة والإلكترون "i"، r_{ij} هي المسافة بين الإلكترونين "i" و "j".

يعطى حل معادلة شرودنجر:

$$\left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta r_i - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}} \right] \Psi(r_1, \dots, r_N) = E \Psi(r_1, \dots, r_N) \quad (II.14)$$

المتغير $\frac{1}{r_{ij}}$ يجعل من الصعب الحصول على حل لمعادلة شرودنجر من أجل ذرة متعددة الإلكترونات حتى لذرة الهليوم، لابد من اللجوء الى تقريب الحقل المركزي H_C لإيجاد حل تقريبي للمعادلة، في هذا التقريب ويمكننا أن نعتبر أن الإلكترون "i" ينتقل في الكمون المتوسط الناتج عن النواة والإلكترونات الأخرى الذي يتعلق إلا بموضع الإلكترون r_i ، هذا التقريب يساعدنا على كتابة الهاملتوني أين نعتبر w كاضطراب بالشكل التالي [20,22]:

$$H = H_C + W \quad (II.15)$$

$$H_C = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \Delta r_i + V(r_i) \right) \quad (II.16)$$

$$W = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (II.17)$$

تكتب معادلة القيمة الذاتية للهاملتوني H_C كما يلي [22,23]:

$$H_C \Psi_C = E \Psi_C \quad (II.18)$$

هذه المعادلة تقبل الحل التالي :

$$\dots\dots\dots u_{\alpha N}(\vec{r}_N) \quad (II.19) \quad \Psi_c = u_{\alpha 1}(\vec{r}_1)u_{\alpha 2}(\vec{r}_2)$$

حيث: $\alpha_i = n_i |l_i m_i\rangle$

(II. 18) هي حل المعادلة $u_{n \ l \ m_l}(\vec{r})$:

$$(II.20) \left[-\frac{1}{2} \Delta r + v(r) \right] u_{n \ l \ m_l}(\vec{r}) = E u_{n \ l \ m_l}(\vec{r})$$

$$(II.21) \quad u_{n \ l \ m_l}(\vec{r}) = R_{n,l}(r) y_l^m(\theta, \varphi)$$

والطاقة الكلية هي مجموع الطاقات E_i :

$$E_T = \sum_{i=1}^N E_i \quad (II.22)$$

6. المقطع الفعّال التفاضلي الثلاثي

يعطى المقطع الفعّال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لهدف ذري بواسطة N إلكترون , يتم تعريفها بالتعبير كما يلي :

$$SETD = \frac{d^3 \sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{(2\pi)^4}{k_i} k_s k_e |T_{if}|^2 \quad (II.23)$$

T_{if} هو عنصر مصفوفة الانتقال للهدف الذري , من الحالة الأولية $(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ Ψ_i الي الحالة النهائية $(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N)$ Ψ_f و يعطى بتقريب بورن الأول بالعبارة الآتية:

$$T_{if} = \langle \Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) | V(r_0, r_1, \dots, r_N) | \Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \rangle \quad (II.24)$$

حيث: \vec{r}_0 هو شعاع الموضع بين الإلكترون المقذوف ومركز نواة الهدف، $V(r_0, r_1, \dots, r_N)$ هو كمون التفاعل كولوم بين الإلكترون المقذوف والذي يكتب في الوحدة الذرية كما يلي:

$$V(r_0, \dots, r_N) = -\frac{z}{r_0} + \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_0|} \quad (II.25)$$

للجملة و التي يتم إعطاؤها كما يلي :

$$(II.26) \Psi_i(\vec{r}_0 \dots \vec{r}_N) = \varphi_i(\vec{k}_i) \varphi'_{i,cible}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N)$$

$$\Psi_f(\vec{r}_0, \dots \vec{r}_N) = \varphi_f(\vec{k}_s) \varphi'_{(ion+e \acute{e}ject\acute{e})}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N) \quad (II.27)$$

حيث: $\varphi_i(\vec{k}_i)$ و $\varphi_f(\vec{k}_s)$ تمثل على التوالي دوال الموجة المستوية للإلكترون المنتشر و الإلكترون المقذوف وتكتب كما يلي:

$$\varphi_i(\vec{k}_i) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_i \vec{r}_0) \quad (II.28)$$

$$\varphi_f(\vec{k}_s) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} \exp(i\vec{k}_s \vec{r}_0)$$

و $\varphi'_{(ion+ \acute{e}ject\acute{e})}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N)$ و $\varphi'_{cible}(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N)$ هي دوال الموجة التي تمثل الأهداف قبل وبعد التأين على التوالي .

1.5. تقريب القلب المتجمد

تعتمد الكثير من الخواص الفيزيائية و الكيميائية للمواد الصلبة بشكل كبير على الكترونات التكافؤ (الكترونات المدار الخارجي) أكثر من الكترونات القلب (الكترونات المدارات الداخلية) , هذه الأخيرة تكون مرتبطة بقوة بالنواة . علي سبيل المثال تتكون الرابطة التكافؤية بشكل أساسي من الكترونات التكافؤ. تقريب القلب المتجمد هو نموذج يساعد على تبسيط الحسابات عن طريق أخذ الكترونات التكافؤ فقط في الاعتبار لدراسة اصطدام الإلكترون المقذوف مع الهدف. هذا النموذج مناسب لطاقات قذف مرتفعة . يمكننا أن نفترض ما يلي: [24]:

$$n(r) = n_{coeur}^{atomique}(r) + n^{valence}(r)$$

استعمل هذا النموذج في حالة تأين ذرة الهليوم في العديد من الأعمال و سنحاول في هذا الفصل تطبيقه في حالة الذرة الهليوم للفصل بين الكترونات القلب و الإلكترونات التكافؤ.

1.1.5. نموذج القلب المتجمد بإلكترونين نشيطين

في هذا النموذج يتم تعويض الهدف ذو N الإلكترون إلى إلكترونين نشطين فقط. و تكتب عبارة الكمون التي تعبر عن التفاعل بين الإلكترون المقذوف و الهدف على النحو التالي:

$$(II.29) V(r_0, r_1, r_2) = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{r_{10}} + \frac{1}{r_{20}}$$

دالة موجة الهدف في الحالة الابتدائية تعطى كما يلي:

$$(II.30) \quad \varphi'_{i,cible}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_{OA}(\vec{r}_1)\varphi_{OA}(\vec{r}_2)$$

$\varphi_{OA}(\vec{r})$ يمثل المدار الذري المؤين للهدف . ودالة الموجة للهدف $\varphi'_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ في الحالة النهائية تكتب بدلالة موجة إلكترون الصادر و الايون المتبقي كما يلي [25]:

$$\varphi'_f(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{ion}(\vec{r}_1)\varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2)\varphi_c(\vec{r}_1)] \quad (II.31)$$

\vec{r}_1 و \vec{r}_2 أشعة الموضع الإلكترونات النشطة،

دالة موجة الإلكترون الصادر $\varphi_c(\vec{r})$ تعطى بدالة كولوموهي كما يلي :

$$(II.32) \quad \varphi_c(\vec{k}_e, \vec{r}) = \frac{\exp(\frac{\pi}{2}\eta)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \Gamma(1 + \eta) \exp(i\vec{k}_e \vec{r}) {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \vec{r}))$$

حيث $\Gamma(1 + \eta)$ هي الدالة قامة ، و ${}_1F_1(-i\eta, 1, -i(kr + \vec{k}\vec{r}))$ هي الدالة الهندسية المقاربة [27].

$\eta = \frac{Z}{K_e}$ معامل سومر فيلد .

يمكننا أن نلاحظ أن هذه موجة الكولوم تصبح موجة مستوية من اجل $Z \rightarrow 0$.

تكتب سعة الانتشار T_{2e} باعتبار الكترونيين نشطين فقط كما يلي :

$$T_{2e} = \langle \Psi_f(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_2) | V(r_0, r_1, r_2) | \Psi_i(\vec{r}_0, \vec{r}_1, \vec{r}_1) \rangle \quad (II.33)$$

$T_{2e} =$

$$(II.34) \quad \frac{(2\pi)^{-3}}{\sqrt{2}} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1)\varphi_c(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2)\varphi_c(\vec{r}_1) \right| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \left(\frac{-2}{r_0} + \frac{1}{r_{10}} + \frac{1}{r_{20}} \right) \left| \varphi'_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\rangle$$

باستخدام علاقة Bethe [27]:

$$\int \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}_0}}{|\vec{r} - \vec{r}_0|} d\vec{r}_0 = \frac{4\pi}{k^2} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (II.35)$$

نجد:

$$T_{2e} = \frac{(2\pi)^{-3} 4\pi}{\sqrt{2}k^2} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_C(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_C(\vec{r}_1) \left| -2 + e^{i\vec{k}\vec{r}_1} + e^{i\vec{k}\vec{r}_2} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (II.36)$$

العبارة (I.36) تبقى ثابتة عندما يتم تبديل إحداثيات الأول بإحداثيات الإلكترون الثاني إذن يمكننا كتابتها:

$$T_{2e} = \frac{(2\pi)^{-3} 8\pi}{\sqrt{2}k^2} \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_C(\vec{r}_2) + \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \quad (II.37)$$

بنشر الحدود تصبح العلاقة (II.37) :

$$T_{2e} = \frac{4}{\sqrt{2}k^2 (2\pi)^2} \left\{ \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \varphi_C(\vec{r}_2) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle + \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} - 1 \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \right\}$$

$$(II.38) T_{2e} = \frac{4}{\sqrt{2}k^2 (2\pi)^2} \left\{ \left\langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_C(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle + \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle - 2 \langle \varphi_{ion}(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \langle \varphi_C(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \right\}$$

إذن يتم إعطاء المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للهدف الذري :

$$\sigma^3 = \frac{8K_S K_e}{k_i k^4} \left| \begin{aligned} & \left\langle \varphi_{\text{الأيون}}(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_C(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \\ & + \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k}\vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \left\langle \varphi_{\text{الأيون}}(\vec{r}_2) \left| \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \right\rangle \right. \\ & \left. - 2 \left\langle \varphi_{\text{الأيون}}(\vec{r}_1) \left| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle \langle \varphi_C(\vec{r}_2) | \varphi_{OA}(\vec{r}_2) \rangle \right. \end{aligned} \right|^2 \quad (II.39):$$

2.1.5. نموذج القلب المتجمد بالإلكترون واحد نشيط

باستخدام نموذج إلكترون واحد نشيط , يمكننا تبسيط الدراسة بالإلكترونين إلى دراسة باستعمال إلكترون واحد , في هذه النموذج توصف الحالة النهائية بموجة مستوية تصف الإلكترون المنتشر وموجة كولوم تمثل الإلكترون الصادر , نعبر عن الحالة الابتدائية والنهائية للهدف $\varphi'_i(\vec{r}_1), \varphi'_f(\vec{r}_1)$ ها كما يلي:

$$\varphi'_i(\vec{r}_1) = \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \quad (\text{II. 40})$$

$$\varphi'_f(\vec{r}_1) = \varphi_{OA}(\vec{r}_1)$$

في نموذج إلكترون واحد نشيط يكتب كمون التفاعل بين الإلكترون المقذوف والهدف كما يلي:

$$V(r_0, r_1) = -\frac{1}{r_0} + \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_0|} \quad (\text{II. 41})$$

تكتب سعة الانتشار كما يلي :

$$(\text{II.42}) T_{1e} = \frac{2}{(2\pi)^2 k^2} \left\{ \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle - \langle \varphi_C(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \right\}$$

في هذه الحالة , المقطع الفعال الثلاثي لهدف ذري يكتب كما يلي :

$$= \frac{8k_s k_e}{k^2 k_i} \left| \left\langle \varphi_C(\vec{r}_1) \left| e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_1} \right| \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \right\rangle - \langle \varphi_C(\vec{r}_1) | \varphi_{OA}(\vec{r}_1) \rangle \right|^2 (\text{II.43}) \sigma^{(3)}$$

6. ذرة الهليوم

الهليوم هو عنصر كيميائي أحادي عديم اللون والرائحة , رمزه الكيميائي ${}^4_2\text{He}$ ورقمه الذري $Z = 2$. عند درجة حرارة منخفضة للغاية أقل من $217 K$ يصبح الهيليوم مائعا . يعتبر الهليوم العنصر الثاني الأكثر وفرة في الكون بعد الهيدروجين ، يتم إنتاجه على الأرض بواسطة تفكك العناصر المشعة [20]:

ذرة الهليوم هي المثال النموذجي للجمل الكوانتية ذات ثلاثة أجسام وتظهر دراسته كل تعقيدات الذرات , وبشكل عام يمثل نموذج للجسيمات متعددة الإلكترونات. تتم كتابة معادلة شرودنغر المستقر لذرة الهليوم في نظام الوحدات الذرية كما يلي:

$$(II.44) \left[\frac{\nabla_1^2}{2} + \frac{\nabla_2^2}{2} + \frac{2}{r_1} + \frac{2}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} + E \right] \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$$

المعادلة (II.44) لا يمكن حلها بالضبط بسبب وجود $\ll \frac{1}{r_{12}} \gg$.

يستخدم تقريب الجسيمات المستقلة (إهمال الجزء $\ll \frac{1}{r_{12}} \gg$) لحل هذه المعادلة و التي يمكن استنتاج حلها كما يلي:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \Psi_{n_1, l_1, m_1}(\vec{r}_1, \theta_1, \varphi_1) \Psi_{n_2, l_2, m_2}(\vec{r}_2, \theta_2, \varphi_2) \quad (II.45)$$

وتكون طاقة ذرة الهليوم هي مجموع الطاقات هيدروجين :

$$(II.46) E_n = E_{n_1} + E_{n_2} = -4E_0 \left(\frac{1}{n_1^2 + n_2^2} \right)$$

تعرف طاقة التآينالهليوم I على إنها الطاقة اللازمة لاستخراج إلكترون من ذرة وتقدر بـ $I=24,592 \text{ Ev}$.

7. دالة ذرة الهليوم

يجب أن تكون دالة الموجة التي تصف ذرة الهليوم التي تمثل بالصيغة الالكترونية $1S^2$ (في حالتها الأساسية) هي الدالة الذاتية للمؤثر L^2 و حل لمعادلة شرودنجر. على الرغم من وجود عدة دراسات لتحديد دالة الهليوم في هذا المجال إلا أنها غير دقيقة. في دراستنا سنقوم باستعمال دالتي كليمنتي (Clementi) و هيليراس (Hylleraas).

1.7. دالة هيليراس (Hylleraas)

مقارنة بدوال أخرى استعملت لوصف ذرة الهليوم، أعطت دالة هيليراس Hylleraas على نتائج مهمة، تكتب دالة هيليراس على النحو التالي:

$$(II.47) \sum c_{(l,m,n)} s^l t^m u^n \exp(-as)$$

مع العلم ان u, t تعرف كما يلي :

$$s=r_1 + r_2 \quad (II.48)$$

$$t=r_1 - r_2$$

$$u=r_{12}$$

هذا التقريب صالح لذرة الهليوم، يتم تحديد المعاملات C بواسطة مبدأ التغيرات. دالة الموجة هي جداء لدالتين لإلكترونين. وهي بالشكل التالي :

$$(II.49) \Psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] = \exp(-\alpha s)$$

α هو وسيط غير خطي قيمته تقدر كما يلي في المرجع [29] :

$$\alpha = 27/16 = 1.6875$$

2.7 دالة كليمنتي (Clementi)

تكتب دالة ذرة الهليوم كما يلي [30]:

$$(II.50) \quad \varphi_{He} = R(r) Y_m^l(\theta, \vartheta)$$

بالنسبة للحالة الأساسية للهليوم ($l=0, m=0$) تعطى الدالة القطرية بالعبارة التالية (الجدول):

$$(II.51) R(r) = \sum_{i=5}^6 c_i \xi_i^{3/2} e^{-\xi_i r}$$

$$(II.52) Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$$

| Valeur de i | c_i | ξ_i |
|-------------|----------|---------|
| 1 | 0,78503 | 1,43000 |
| 2 | 0,20284 | 2,44150 |
| 3 | 0,03693 | 4,09960 |
| 4 | -0,00293 | 6,48430 |
| 5 | 0,00325 | 0,79780 |

الجدول II.2: قيم c_i و ξ_i لدالة Clementi للهليوم.

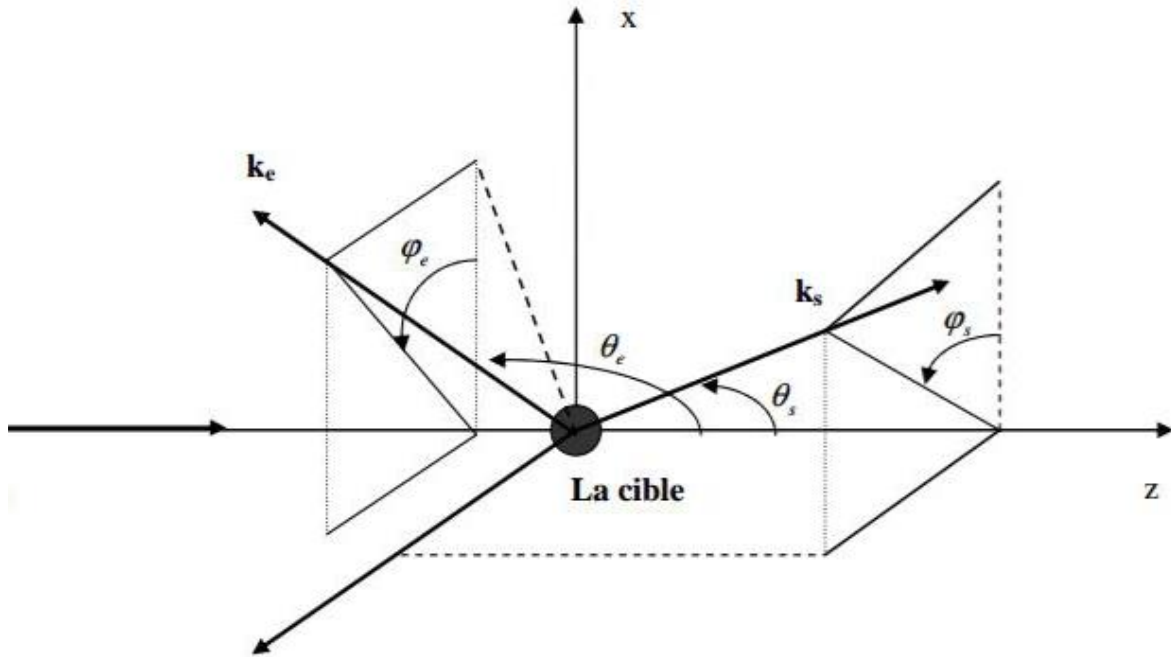
الفصل الثالث:

المقطع الفعال التفاضلي المضاعف

في هذا الفصل نقوم من خلال استعمال تقريب بورن الأول بتطبيق نموذج القلب المتجمد ذو الكترون نشيط أو إلكترونين نشيطين لحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي و المضاعف للتأين البسيط لذرة الهليوم. سنقوم بدراسة تغير المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي المضاعف بدلالة الزاوية القطبية للإلكترون المتحرر من ذرة الهليوم في ظروف هندسية وحركية مختلفة. في الأخير نقوم بمقارنة مع النتائج التجريبية.

1. حركية التصادم (e,2 e)

في هذا العمل نستعمل تصادم خطي غير متناظر (géométrie coplanaire asymétrique) حيث يوجد الإلكترون المنتشر والمحرر في مستوي التصادم (\vec{i}, \vec{k}_s) ، يتم الكشف عن هذين الإلكترونين بمقارنة طاقتهما الحركية، حيث أن طاقة الإلكترون المنتشر تقترب من طاقة الإلكترون المقذوف إما طاقة الإلكترون المحرر تكون ضعيفة.



الشكل الأول: التأين البسيط لذرة الهليوم

2. المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي

يعطى المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي في تقريب بورن الأول كما يلي:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_e d\Omega_s dE_s} = \frac{K_a K_b}{K_o} |f_{B1}|^2 \quad (\text{III.1})$$

تكتب سعة الانتشار f_{B1} في التقريب الأول من بورن كما يلي:

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \langle \varphi_f | V | \varphi_i \rangle \quad (\text{III.2})$$

V تمثل كمون التفاعل بين الإلكترون الحادث و ذرة الهليوم، φ_i و φ_f هي على التوالي دوال الموجة التي تمثل الأهداف قبل وبعد التأيين .

3. تمثيل الإلكترون المتحرر من ذرة الهليوم

في نموذج تقريب بورن يخرج الإلكترون من الاصطدام بطاقة منخفضة ، في دراستنا نستعمل دالة كولوم $\varphi_c(\vec{r})$ fonction coulombienne لتمثيل الإلكترون المتحرر من ذرة الهليوم بعد اصطدامها بإلكترون سريع كما يلي:

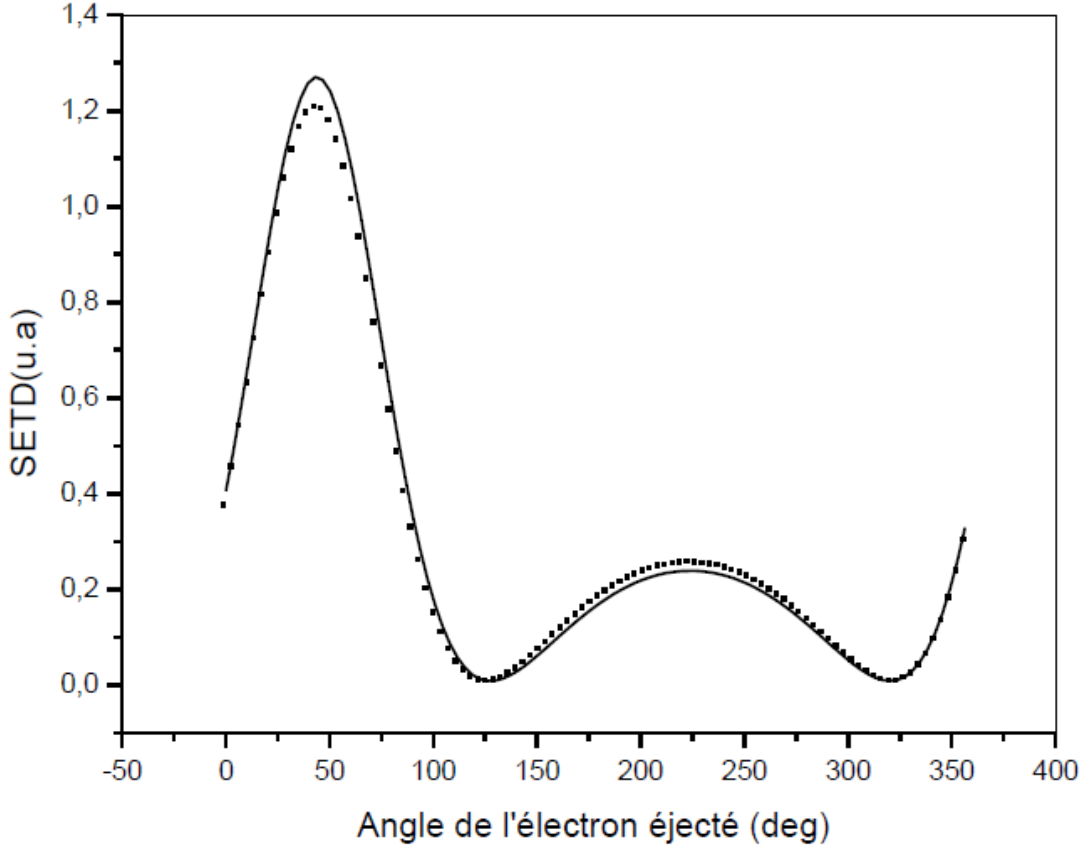
$$(\text{III.3}) \varphi_c(\vec{k}_e, \vec{r}) = \frac{\exp\left(\frac{\pi}{2}\eta\right)}{(2\pi)^2} \Gamma(1 + \eta) \exp(i\vec{k}_e \vec{r}) {}_1F_1(-i\eta, 1, -i(k_e r + \vec{k}_e \vec{r}))$$

4. حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي

سنقوم بحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي باستعمال نموذجي القلب المتجمد مع الكترون نشيط أو إلكترونين نشيطين وذلك في الشروط الطاقوية والهندسية التالية:

- طاقة الورد: $E_i = 250 \text{ eV}$
- طاقة التحرر: $E_e = 20 \text{ eV}$
- زاوية الانتشار: $\theta_s = -6^\circ$

نمثل نتائج تغير المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي في الشكل الثاني، نلاحظ أن المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي يمثل ذروتين عند الزاوية هي 50° (فص ثنائي) و عند الزاوية هي 230° درجة (فص منخفض)، يكمن الفرق بين النموذجين في الذروتين فقط. النموذج ذو إلكترونين نشيطين يعطي نتائج أكثر دقة ولكن نموذج إلكترون واحد نشيط يعطي نتائج قريبة نوعا ما لذلك هذا الأخير لتبسيط حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي وتقليل زمن المعالجة.



الشكل الثاني: المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لذرة الهليوم بدلالة زاوية التحرر للنموذجي القلب المتجمد بإلكترون واحد نشيط (الخط المستمر) وبإلكترونين نشيطين (الخط المنقطع).

يتم الحساب الثاني دائما في إطار تقريب بورن الأول من خلال اعتماد نموذج القلب المتجمد بإلكترون واحد نشيط ولكن نستعمل دالتين مختلفتين لوصف حالة الهليوم وهما دالة هيليراس Hylleraas ودالة كليمنتي Clementi اللتان تكتبان على التوالي:

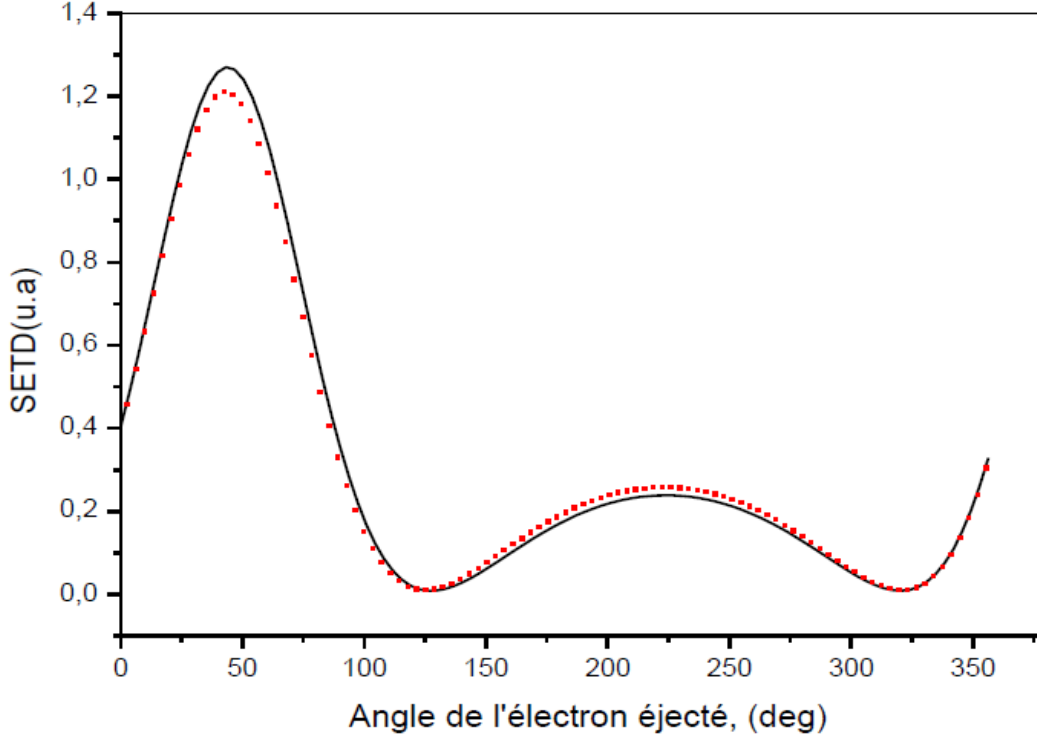
$$\psi_0^{nor} = \exp[-\alpha(r_1 + r_2)] = \exp(-\alpha s)$$

$$\Phi(r) = a_1 1s_1 + a_2 1s_2 + a_3 1s_3 + a_4 1s_4 + a_5 1s_5$$

يمثل الشكل الثالث المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لذرة الهليوم بدلالة زاوية التحرر في الشروط الطاقوية والهندسية التالية:

$$E_i = 250 \text{ eV}; E_e = 20 \text{ eV}; \theta_s = -6^\circ$$

نلاحظ أن نفس النتائج تم الحصول عليه باستعمال كلتا الدالتين باستثناء الذروتين، لذلك نفضل استعمال دالة هيليراسHylleraas ذات الشكل البسيط. النتائج السابقة تسمح لنا باختيار الدالة البسيطة لوصف حالة إلكترون الهليوم مع النموذج بإلكترون نشيط واحد لحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط للهليوم في وقت قصير.

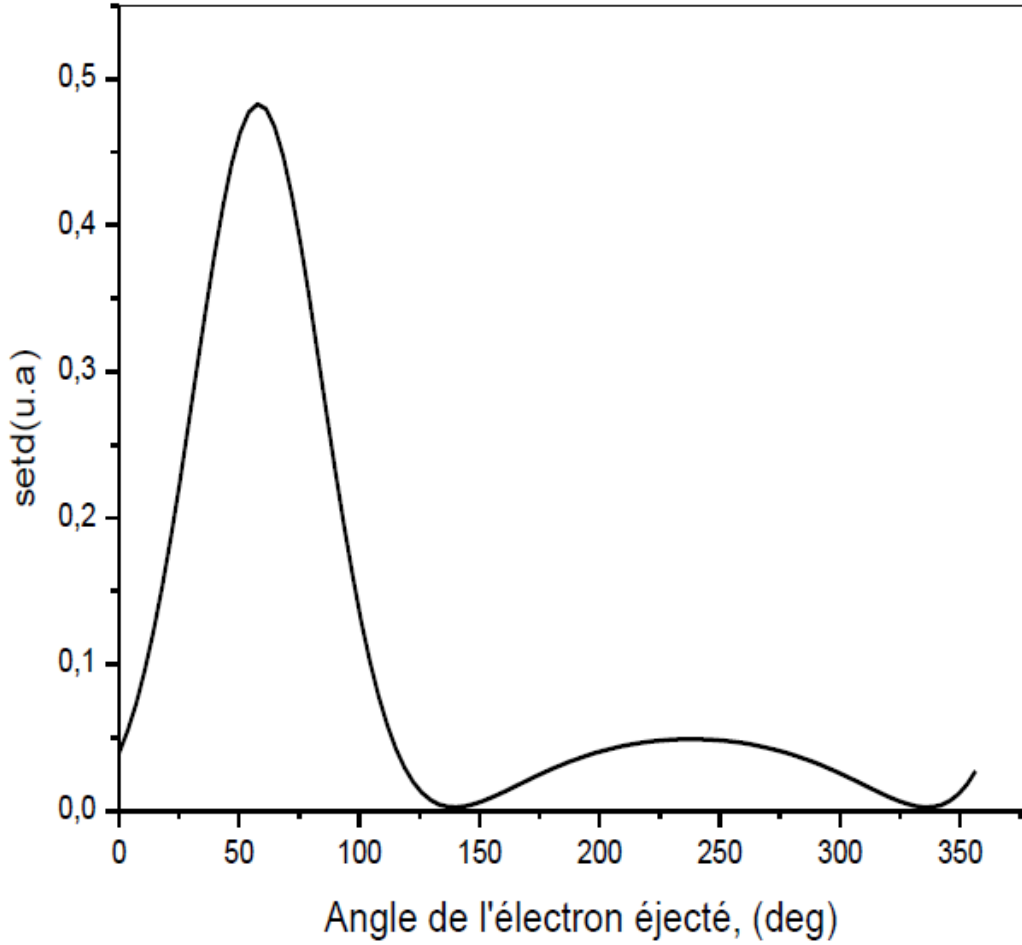


الشكل الثالث: المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لذرة الهليوم بواسطة الإلكترون بدلالة زاوية التحرر باستعمال دالة كليمنتي (الخط المستمر) و دالة هيليراس (الخط المتقطع) في الشروط الهندسية و الحركية $\theta_s = -6^\circ$; $E_e = 20 \text{ eV}$; $E_i = 250 \text{ eV}$.

في الحساب الثالث نقوم بتعيين المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون في الشروط الطاقوية والهندسية التالية:

- طاقة الورود: $E_i = 561,6 \text{ eV}$.
- طاقة الانتشار: $E_s = 500 \text{ eV}$.
- طاقة التحرر: $E_e = 37 \text{ eV}$.
- زاوية الانتشار: $\theta_s = -6^\circ$.

يمثل الشكل الرابع المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي لتأين البسيط لذرة الهليوم بدلالة زاوية التحرر، نلاحظ ان الحساب باعتماد تقريب بورن الأول مع نموذج القلب المتجمد باكترون نشيط واحد ينجح في استخراج تغيرات المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي.



الشكل الرابع: المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون بدلالة زاوية التحرر. الشروط الطاقوية والهندسية المتخذة هي: طاقة الورود: $E_i = 561,6 \text{ eV}$ ، طاقة الانتشار: $E_s = 500 \text{ eV}$ ، طاقة التحرر: $E_e = 37 \text{ eV}$ وزاوية الانتشار: $\theta_s = -6^\circ$.

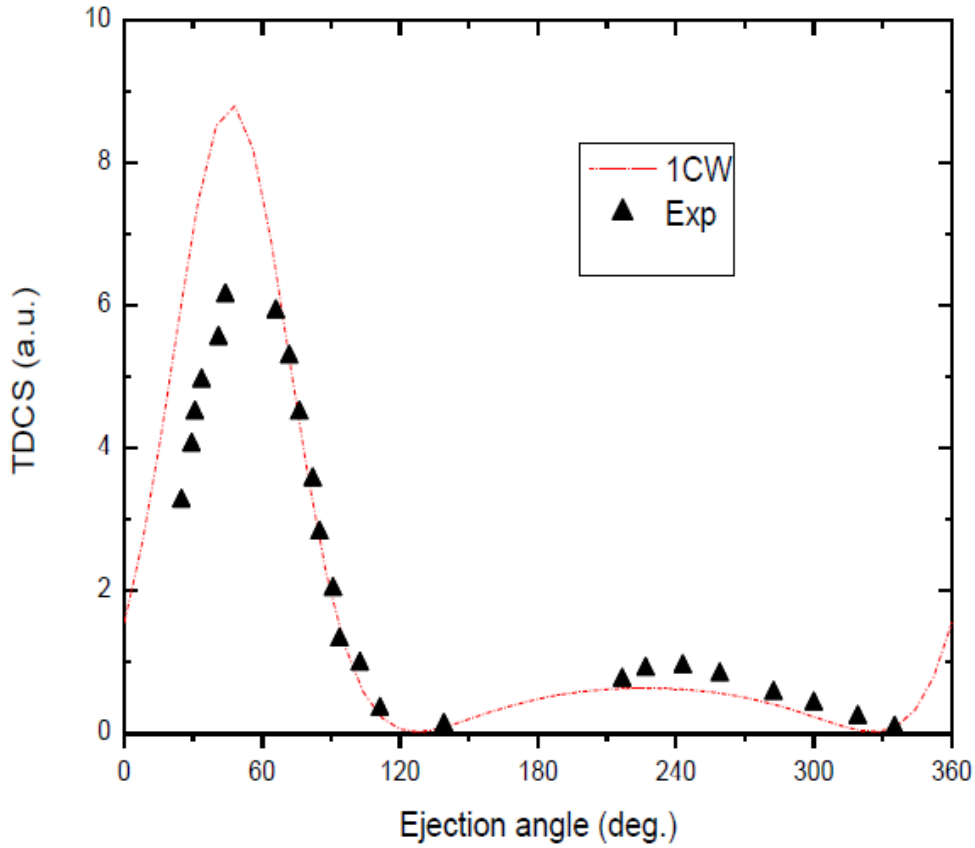
في هذه المرحلة نقوم بحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون في الشروط الطاقوية والهندسية التالية :

• طاقة الورود $E_i = 598,6 \text{ eV}$.

• طاقة التحرر $E_e = 74 \text{ eV}$.

• زاوية الانتشار $\theta_s = -6^\circ$.

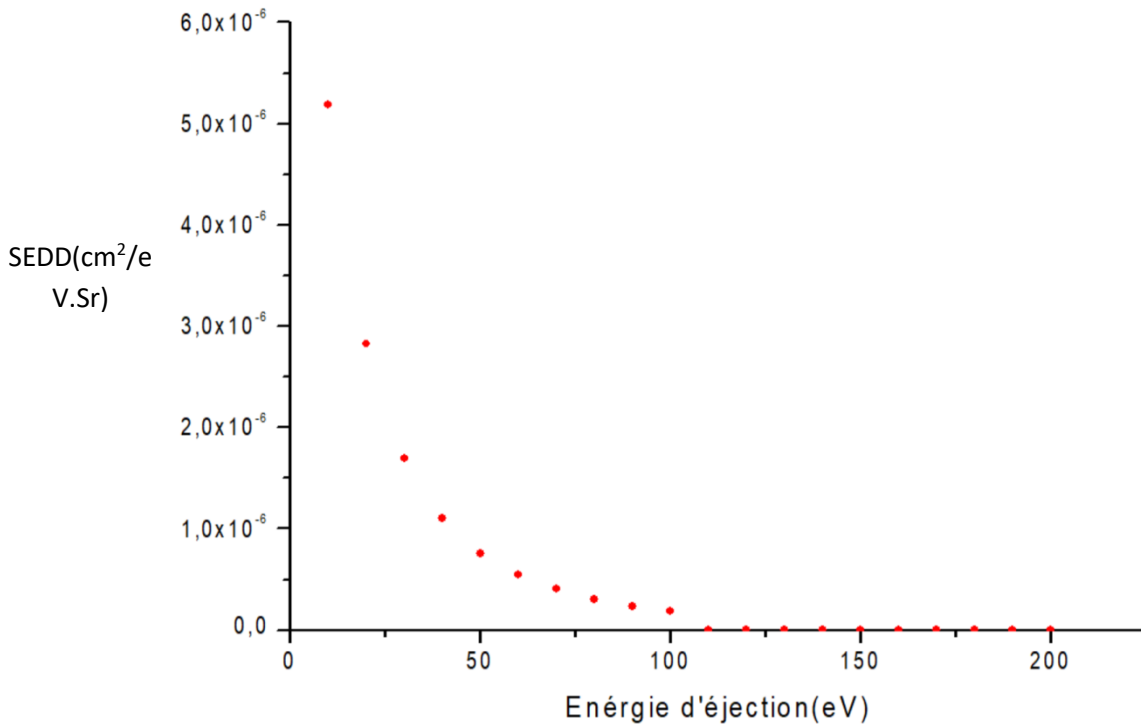
الشكل الخامس يمثل نتائج هذا الحساب مع قيم تجريبية، نلاحظ من تغير المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي بدلالة زاوية التحرر ان حسابنا النظري نجح في إنتاج قيم التجربة وخاصة بالنسبة لزاويا انتشار اكبر من 70° .



الشكل الخامس: المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون بدلالة زاوية التحرر في الشروط الطاقوية والهندسية: طاقة الورود $E_i = 598,6 \text{ eV}$ ، طاقة التحرر $E_e = 74 \text{ eV}$ وزاوية الانتشار $\theta_s = -6^\circ$ ، الخط المتقطع يمثل نتائج الحساب النظري و الرمز (Δ) يمثل النتائج التجريبية .

5. حساب المقطع الفعال التفاضلي المضاعف

في المرحلة الثانية نقوم بحساب المقطع الفعال التفاضلي المضاعف لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون بدلالة طاقة التحرر التي تتغير من 10 eV إلى 200 eV. الشكل السادس يمثل المقطع الفعال التفاضلي المضاعف بدلالة طاقة التحرر، نلاحظ ان التأين البسيط للهليوم يصبح صعبا لتحرير الكترول بطاقة حركية اكبر من 100 eV، من اجل طاقات تحرر اقل من 100 eV يصبح التأين ممكننا لكن باحتمال يبقى نسبيا ضعيفا.



الشكل السادس: المقطع الفعال التفاضلي المضاعف لتأين ذرة الهليوم بواسطة إلكترون بدلالة طاقة التحرر.

خاتمة

من خلال دراستنا التي قمنا فيها بحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لذرة الهليوم بإلكترون ذو طاقة كبيرة، استعمال تقريب بورن الأول مع نموذج القلب المتجمد ذو الكترول نشيط يعطي نتيجة دقيقة قريبة من النتائج التجريبية مع زمن المعالجة قصير، نتائج حسابنا بينت ان باختيار دوال حالة بسيطة كدالة هيليراسHylleraasيساعد في تبسيط حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي، نلاحظ من تغير المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي بدلالة زاوية التحرر ان حسابنا النظري نجح في محاكاة القيم التجريبية، حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي ممكننا من استنتاج المقطع الفعال التفاضلي المضاعف الموافقة لطاقات تحرر مختلفة.

خاتمة عامة

تكتسي التصادمات الذرية أهمية خاصة في العديد من مجالات الفيزياء كالفيزياء النووية، الفيزياء الفلكية و فيزياء الليزر وحتى في الكيمياء. الأهداف الذرية التي كانت موضوع اكبر عدد من الدراسات هي ذرات الهيدروجين و الهليوم، في عملنا قدمنا نظرية الانتشار واستخدمنا تقريب بورن الأول لكتابة سعة الانتشار والمقاطع العرضية التفاضلية والبسيطة. قمنا باستخدام دالتي حالة لوصف الحالات المقيدة للإلكترون ذرة الهليوم هما : دالة هيليراسHylleraas و دالة كليمنتي Clementi.

في هذه المذكرة قمنا بحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي و المضاعف للتأين البسيط للهليوم والتي تفقد تبعاً لهذا الاصطدام الكترون واحد مقذوف بسرعة كبيرة باستعمال تقريب بورن الأول ، ، استعملنا موجة كولوم لوصف الإلكترون المحرر و موجة مستوية لتمثيل الإلكترون السريع (الوارد والمنتشر).

من خلال دراستنا التي قمنا فيها بحساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي المقطع و الفعال التفاضلي الثلاثي للتأين البسيط لذرة الهليوم بالإلكترون ذو طاقة كبيرة، استعمال تقريب بورن الأول مع نموذج القلب المتجمد ذو الكترون و دالة هيليراسHylleraasيساعد في تبسيط حساب المقطع الفعال التفاضلي الثلاثي قريبة للقيم المحصل عليها في التجربة، وكذلك يبسط حساب المقطع الفعال التفاضلي المضاعف.

المراجع

- [1] Sahlaoui M 2012 Thèse de doctorat ,Université de Abou –Belkaid Tlemcen.
- [2] Rezallah Z 1 2011 Thèse de doctorat en sciences ,Université de Sétif.
- [3] Nehaoua S 2016 Thèse de doctorat en sciences, Université de Sétif.
- [4] Goldberger M. L., and Watson K. M., (1967) ,<Collision Theory>
(John Wiley & Sons ,New York).
- [5] EL Boudali F 2001 Thèse de doctorat ,Université de Metz.
- [6] H. Hda ,Double Ionisation des Gaz Rares par Impact Electronique, Thèse Doctorat ,Université de Metz (1994)
- [7] Joachain J.C, Quantum Collision Theory, North-Holland publishing,
(Amsterdam) (1983).
- [8] P. Lamy ,Double Ionisation De L'atome D'hélium Et L'ion De Hydrure Par Impact Electronique : étude Des Sections Efficaces Multiplement Différentielles ,
Thèse Doctorat ,Université De Metz (1995)
- [9] Nouredine Z,Quantum Mechanics concepts and applications (2009).
- [10] Mokrani S Thèse de doctorat en sciences , Université de Tizi-Ouzou.
- [11] Pochat A, Tweed R J , Peresse J , Joachain C J ,Piroux B and Byron F W Jr
1983 J .phys. B 16 L775.
- [12] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaats T and Willmann K 1969 Phys.Rev.Lett. 22 89.
- [13] Brion C E 1986 Int .J.Quantum Chem .2 1397.
- [14] Beaty E C ,Hesselbacher K H,Hong S P and Moore J H 1977 J.Phys .B 10 611
- [15] Dal Cappello .C, Thèse de Doctorat d'état ,Université de Metz(1986)

- [16] J. J. Sakurai .Jim Napolitano ,Modern Quantum Mechanic,Seconde Edition
- [17] M. Born ,Z. Phys .37, 863(1926).
- [18] Glauber R.J "Iectures in theoretical physics" New-york interscience,1,414(1959).
- [19] Bom M, Z. Phys.37 ,863,(1926).
- [20] Hladik J,Chysos M ,Hladik E P ,Ancarani L U 'Mécanique quantique'.Dunod (2006).
- [21] Louis Marchildon,Mécanique Quantique ,De Boeck & Larcier .S.a .2000,Edition De Boeck Université,B-1000 Bruxelles.
- [22] CC Tannoudji,B Diu et F Laloe 'Mécanique quantique 'TII Ed Hermann.
- [23] B. H .Bransden and C.J. Joachain ,Physics of Atoms and Molecules, Longman . Scientific & Technical .Copublished In The United States With .John Wiley (1983)
- [24] C.Hajlaoui. Etude Des proprietes Structurales Et Electroniques Des Nanofils Semi-Conducteurs,Thése Doctorat,Université Européenne De Bretage.(2014)
- [25] Byron F.W and Joachain C. J , phys . Let .A. 24, 617(1967).
- [26] Abramowitz M and stegum I. Hundbook mathematical function "New york : Dover" (1972).
- [27] Bethe H, Ann. Phys . (Leipzig) 5,325(1930).
- [28] Hiroyuki N ,Hiroshi N. THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127, 224104 2007
- [29] Donald A, Mcquarrie 'Quantum chemistry' université de California , davis.
- [30] Clementi E and Roetti C 1974 At .Data Nucl .Data .Tables 14 177.

[31]Catoire F 2006 Thèse de doctorat, université paris –Sud XI.