



الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية  
وزارة التعليم العالي والبحث العلمي  
جامعة الوادي  
كلية العلوم والتكنولوجيا



رقم الترتيب:  
رقم التسلسل:

مذكرة تخرج لنيل شهادة

**ماستر أكاديمي**

مجال: علوم المادة

فرع: فيزياء

تخصص: فيزياء تطبيقية إشعاع و طاقة

من إعداد: نور الهدى عقبة

الموضوع

المعطيات الذرية و برامج الحساب:

**تطبيق على برنامج FAC**

نوقشت يوم: 2013/06 /30

أمام لجنة المناقشة المكونة من:

رئيس  
مناقش  
مناقش  
مؤطر

أستاذ محاضر صنف ب  
أستاذ مساعد صنف أ  
أستاذ مساعد صنف أ  
أستاذ محاضر صنف أ

محبوب محمد الصادق  
ليتيم فتحي  
عطية محمد الهادي  
قده الحبيب

الموسم الجامعي 2013/2012

## شكر و عرفان

الشكر الأول لله تعالى خالق الإنسان وواهب العقل والبيان الذي هدانا إلى الحق والطريق المستقيم وسير لنا سبل النجاح وأخرجنا من ظلمات الجهل إلى نور العلم فله الحمد حتى يرضى وله الحمد بعد الرضا.

أتقدم بالشكر العميق إلى الأستاذ الفاضل "قده الحبيب" على مساعداته العلمية الجبارة لإتمام هذه المذكرة وتوجيهاته القيمة التي كانت عوناً لي في إتمام هذا العمل.

كما أتقدم بجزيل الشكر والامتنان إلى الأستاذتين "دلي سامية" و "زواري أحمد فاطمة" على تقديمهما يد العون .

وكذلك إلى كافة أعضاء لجنة المناقشة وأتمنى أن يفيدونا بأرائهم القيمة والبناءة لهذا العمل

وأخيراً إلى كل من ساعدني ولو بكلمة وإلى كل من أوصلني إلى ما أنا عليه .

# الإهداء

أهدي ثمرة جهدي هذا إلى:

أبوي الكريمين.

أخواتي وأخي وكل العائلة.

صديقاتي العزيزات.

وكل أساتذتي الكرام.

## ترميز

+Ze	شحنة النواة.
-e	شحنة الإلكترون.
m	كتلة الإلكترون.
M	كتلة النواة.
$\mu$	الكتلة المختزلة.
$\alpha$	ثابت البنية الدقيقة.
c	سرعة الضوء في الخلاء.
$\rho$	الكثافة الإلكترونية.
$\epsilon_0$	السماحية.
h	ثابت بلانك.
$\nu$	تردد الأشعة.
$\sigma(\nu)$	المقطع الفعال.
$v$	سرعة الجسيمات عند التصادم.
$f(v)$	دالة توزيع السرعات.
$A_{ij}$	معامل اينشتاين للانبعاث التلقائي.
$f_{ij}$	قوة الهزاز بين السويين i و j.
$g_i$	هو الوزن الإحصائي للسوي i.
$\tau_i$	زمن الحياة الإشعاعي.
$\omega_\nu$	كثافة الطاقة الطيفية لحقل الإشعاع.
$n(\nu)$	عدد الفوتونات $h\nu$ .
$B_{ij}$	معامل اينشتاين للانبعاث المحرض.
$S_{ij}$	قوة الخط بين السويين i و j.
$\alpha^R$	معامل إعادة التشكيل الإشعاعي.
$g_i$	توالد السوي الابتدائي i.

$a_0$	نصف قطر بور.
$I_H$	طاقة التأين للهيدروجين.
$K_B$	هو ثابت بولتزمان.
$T_e$	درجة حرارة الإلكترون.
$n_j$	كثافة الإسكان للحالة $j$ .
$C$	معامل الإثارة بالتصادم.
$I$	معامل التأين بالتصادم.
$T$	معامل إعادة التشكيل لثلاثة أجسام.
$R$	معامل إعادة التشكيل الإشعاعي.
$\Gamma$	معامل التأين التلقائي.
$D$	معامل إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون.
$\Omega_{ij}$	قوة التصادم.
$I$	الشدة الطيفية.
$N_j$	عدد الذرات في الحالة $j$ في وحدة الحجم.
$P_w$	كثافة استطاعة طيف الإشعاع.
$\delta V_D$	عرض دوبلر.
$d$	عزم ثنائي القطب الكهربائي للأيون.
$Z$	الشحنة النووية.

# فهرس المحتويات

	ترميز.
	فهرس المحتويات.
	فهرس الأشكال.
	فهرس الجداول.
14	مقدمة عامة.....
	<b>الفصل الأول: طرق حساب البنية الذرية.</b>
16	مقدمة.....
16	1.I الذرات وحيدة الإلكترون.....
16	1.1.I معادلة شرودينجر للذرات وحيدة الإلكترون.....
17	2.1.I معادلة ديراك.....
20	3.1.I التصحيحات النسبية على معادلة شرودينجر.....
22	4.1.I البنية الدقيقة لذرة الهيدروجين.....
22	1.4.1.I التصحيحات النسبية على عبارة الطاقة.....
22	2.4.1.I التصحيح سبين مدار.....
23	3.4.1.I حد داروين.....
24	4.4.1.I التصحيح الكلي للبنية الدقيقة.....
24	2.I الذرات المتعددة الالكترونات.....
24	1.2.I ذرة الهليوم.....
25	1.1.2.I طريقة التغيرات.....
25	2.1.2.I نظرية الاضطراب.....
26	2.2.I الذرات متعددة الإلكترونات.....
26	1.2.2.I تقريب الحقل المركزي.....
27	2.2.2.I طريقة توماس- فيرمي.....
29	3.2.2.I طريقة هارترى فوك.....
30	4.2.2.I تقريب برايت- باولي.....
31	خاتمة.....

## الفصل الثاني: المعطيات الذرية و المطيافية.

33	.....	مقدمة
33	.....	1.II انبعاث و امتصاص الأشعة
33	.....	2.II معامل الاحتمال
34	.....	3.II الآليات الإشعاعية
34	.....	1.3.II الانبعاث التلقائي
34	.....	2.3.II الانبعاث المحرض و الامتصاص
37	.....	3.3.II التأين الضوئي
37	.....	4.3.II إعادة التشكيل الإشعاعي
38	.....	4.II العمليات التصادمية
38	.....	1.4.II الإثارة بالتصادم الالكتروني
39	.....	2.4.II التأين بالتصادم الالكتروني
40	.....	3.4.II إعادة التشكيل لثلاثة أجسام
41	.....	4.4.II إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون
42	.....	5.II الاتزان ونمذجة الإسكان في البلازما
43	.....	6.II المطيافية
43	.....	1.6.II الحالات و التشكيلات الإلكترونية
43	.....	2.6.II عمليات الازدواج
43	.....	1.2.6.II الازدواج $LS$
44	.....	2.2.6.II الازدواج $JJ$
44	.....	3.6.II الرموز الطيفية
44	.....	4.6.II قواعد الاصطفاء
44	.....	5.6.II الخطوط الطيفية
45	.....	7.II عرض الخطوط الطيفية
45	.....	1.7.II تعريض الخط الطبيعي
46	.....	2.7.II تعريض دوبلر
46	.....	3.7.II التعريض بالتصادم الالكتروني
46	.....	4.7.II تعريض ستارك
47	.....	8.II أهداف المطيافية

47 ..... خاتمة

## الفصل الثالث: برامج حساب المعطيات الذرية.

49 ..... مقدمة

49 ..... 1.III برنامج Hullac

50 ..... 1.1.III الجانب النظري

51 ..... 2.1.III الجانب العملي

51 ..... 2.III برنامج Cowan

52 ..... 1.2.III الجانب النظري

52 ..... 2.2.III الجانب العملي

53 ..... 3.III برنامج ATOM

53 ..... 1.3.III الجانب النظري

53 ..... 2.3.III الجانب العملي

54 ..... 4.III برنامج MZ

54 ..... 1.4.III الجانب النظري

55 ..... 2.4.III الجانب العملي

55 ..... 5.III برنامج MCHF

55 ..... 1.5.III الجانب النظري

56 ..... 2.5.III الجانب العملي

56 ..... 6.III برنامج Superstructure

58 ..... 7.III برنامج CIV3

59 ..... 8.III برنامج FAC

59 ..... خاتمة

## الفصل الرابع: تطبيق برنامج FAC على بعض الذرات و الأيونات

61 ..... مقدمة

61 ..... 1.IV برنامج FAC

61 ..... 1.1.IV الجانب النظري

63 ..... 2.1.IV الخصائص العملية

63 ..... 2.IV حساب المعطيات الذرية

64 ..... 1.2.IV الهيدروجين و الأرقون الشبيه بالهيدروجين

66	..... الأيونات الشبيهة بالهليوم. 2.2.IV
66	..... الكربون الشبيه بالهليوم. 1.2.2.IV
68	..... الحديد الشبيه بالهليوم. 2.2.2.IV
70	..... مقارنة بين نتائج FAC و نتائج NIST 3.IV
70	..... الهيدروجين. 1.3.IV
72	..... الأرقون الشبيه بالهيدروجين. 2.3.IV
72	..... الكربون الشبيه بالهليوم. 3.3.IV
74	..... الحديد الشبيه بالهليوم. 4.3.IV
75	..... خاتمة
77	..... خاتمة عامة
79	..... قائمة المراجع
83	..... الملحق
	ملخص.

## فهرس الأشكال

34	..... شكل (1-II): عملية الانبعاث التلقائي
34	..... شكل (2-II): عملية الانبعاث المحرض
35	..... شكل (3-II): عملية الامتصاص
37	..... شكل (4-II): التأين الضوئي
38	..... شكل (5-II): عملية الإثارة و العودة من الإثارة بالتصادم الالكتروني
41	..... شكل (6-II): إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون
44	..... شكل (7-II): عمليتي الانبعاث و الامتصاص

## فهرس الجداول

- 64 جدول (1-IV): مستويات الطاقة لـ H I و Ar XVIII من ملفي ne.lev لبرنامج FAC.....
- 65 جدول (2-IV): معاملات الانتقال الإشعاعي لـ H I و Ar XVIII من ملفي ne.tr لبرنامج FAC.
- 66 جدول (3-IV): مستويات الطاقة لـ C IV من ملف ne.lev لبرنامج FAC.....
- 67 جدول (4-IV): معاملات الانتقال الإشعاعي لـ C IV من ملف ne.tr لبرنامج FAC.....
- 68 جدول (5-IV): مستويات الطاقة لـ Fe XXV من ملف ne.lev لبرنامج FAC.....
- 69 جدول (6-IV): مستويات الطاقة لـ Fe XXV من ملف ne.tr لبرنامج FAC.....
- 70 جدول (7-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات ذرة الهيدروجين.....
- 71 جدول (8-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال لذرة الهيدروجين.....
- 72 جدول (9-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الأرقون الشبيه بالهيدروجين.....
- 72 جدول (10-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الكربون الشبيه بالهليوم.....
- 73 جدول (11-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال للكربون الشبيه بالهليوم.....
- 74 جدول (12-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الحديد الشبيه بالهليوم.....
- 74 جدول (13-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال للحديد الشبيه بالهليوم.....



# مقدمة عامة

تعتمد دراسة البنية الذرية لمختلف الذرات على حساب الطاقات و الدوال الموجية لها، و تتم هذه الدراسة حسب نوع الذرة المراد معرفة بنيتها الذرية. فمن أجل أبسط ذرة و هي الهيدروجين و كذلك الأيونات الشبيهة بها يمكن إيجاد حلها الدقيق بالطرق التحليلية من خلال الميكانيك الموجي الغير نسبي لشرودينجر و النظرية النسبية لديراك [1]. أما من أجل ذرة الهليوم و الأيونات الشبيهة بها فالحساب التحليلي الدقيق غير ممكن، و يستدعي حلها استعمال طرق تقريبية مختلفة لتوجيه الحسابات إلى درجة عالية من الدقة [1]، و كذلك بالنسبة للذرات المتعددة الإلكترونات ذات العدد الكمي  $n$  الكبير. و نظرا لأهمية حساب البنية الذرية لإيجاد المعطيات الذرية المطلوبة لدراسة بلازما المختبرات، الفيزياء الفلكية و الانصهار الحراري النووي، و تعقيد الحلول بالنسبة للذرات المتعددة الإلكترونات فالأمر يستدعي اللجوء إلى برامج حساب البنية و المعطيات الذرية، حيث تتوفر مجموعة من البرامج لهذا الغرض و تختلف فيما بينها من ناحية الطرق التقريبية المستعملة في الحساب و صعوبة تثبيتها و التعامل معها. و يعتبر برنامج FAC بديلا هاما لهذه البرامج نظرا لطواعيته و سهولة الحصول عليه و استخدامه حتى من طرف المبتدئين، و كذلك سرعة التنفيذ و الدقة بالنسبة للمعطيات الذرية المختلفة [2].

سنناقش في هذه المذكرة المعطيات الذرية و برامج الحساب كما سنجري تطبيق على برنامج FAC لحساب بعض المعطيات الذرية (الطاقات و الانتقالات) من خلال أربعة فصول حيث يتضمن الفصل الأول طرق حساب البنية الذرية، و يتم ذلك تحليلا بالنسبة للذرات الوحيدة الإلكترون ، أما الذرات المتعددة الإلكترونات فحلها يستدعي استعمال طرق تقريبية مختلفة.

و يناقش الفصل الثاني المعطيات الذرية و المطيافية حيث تتمثل هذه المعطيات في الطاقات، الانتقالات، المعاملات و المقاطع الفعالة للآليات الذرية الأساسية في البلازما. و تكمن أهمية المعطيات الذرية في دراسة و تحليل انبعاثات البلازما.

و يدرس الفصل الثالث بعض البرامج المتوفرة لحساب المعطيات الذرية من الناحية النظرية و العملية من أجل معرفة نوع التقريبات التي تعتمد عليها لإجراء الحساب و كيفية عملها.

أما الفصل الرابع فهو تطبيق على برنامج FAC للذرات: الهيدروجين (H I)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) و الحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV) من أجل حساب الطاقات و الانتقالات لهاته الذرات و الأيونات ثم مقارنة النتائج مع النتائج المنشورة لـ NIST.



الفصل الأول

طرق حساب البنية الذرية

## مقدمة

تتكون الذرات عموماً من نواة شحنتها  $+Ze$  و إلكترونات تدور حولها شحنتها  $-e$ . تعتمد دراسة بنية الذرات على أسس ميكانيك الكم، فمن أجل الذرات وحيدة الإلكترون يمكن الوصول إلى الحل الدقيق سواء من خلال معادلة شرودينجر الغير نسبية أو من نظرية ديراك النسبية. أما من أجل الذرات المتعددة الإلكترونات فحلها الدقيق غير ممكن فالحصول على طاقات النظام يكون من خلال استعمال بعض التقريبات [1].

و سنتطرق في هذا الفصل إلى حساب البنية الذرية من خلال دراسة الذرات وحيدة الإلكترون، ثم الانتقال إلى دراسة الذرات متعددة الإلكترونات من خلال عدة طرق تقريبية.

**1.I الذرات وحيدة الإلكترون**

تعتبر ذرة الهيدروجين نموذج للذرات وحيدة الإلكترون فهي تتكون من بروتون و إلكترون حيث يمكن الحصول على الحل الدقيق (التحليلي) لمعادلة شرودينجر غير النسبية [3].

**1.1.I معادلة شرودينجر للذرات وحيدة الإلكترون**

تعطى معادلة شرودينجر لجملة متكونة من إلكترون (كتلته  $m$  و شحنته  $-e$ ) و نواة (كتلتها  $M$  و شحنتها  $+Ze$ )، بالعلاقة التالية [4]:

$$H_0\psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) \psi = E\psi \quad (I-1)$$

$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2$ : يمثل الطاقة الحركية للذرة في جملة مركز الكتل حيث  $\mu$  هي الكتلة المختزلة.

$-\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ : يمثل طاقة التفاعل الكهروستاتيكي بين الإلكترون و البروتون .

$\psi$  هي دالة الموجة و هي حل لهذه المعادلة حيث تصف الحالات المستقرة بقيمة معلومة للطاقة  $E$ .

نكتب دالة الموجة باستعمال الإحداثيات الكروية بالشكل التالي [5]:

$$\psi = \psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (I-2)$$

حيث:  $R_{nl}(r)$  هي دالة الموجة القطرية، و  $Y_l^m(\theta, \phi)$  هي دالة الموجة التوافقية الكروية [6].

و  $R_{nl}(r)$  هي حل لمعادلة شرودينجر:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2\mu}{\hbar^2} \left( E + \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right) R = 0 \quad (I-3)$$

- إذا كانت  $E > 0$  فإن حلول هذه المعادلة مستمرة و منتهية من أجل أي قيمة لـ  $E$  و  $l$  [7].
- إذا كان  $E < 0$  فإن حلول هذه المعادلة ممكنة عند بعض القيم المتقطعة للطاقة  $E$  [7].

$$E = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 \hbar^2} \quad (I-4)$$

$n$ : هو العدد الكمي الرئيسي.

$l$ : هو العدد الكمي المداري الثانوي.

### 2.1.1 معادلة ديراك

تصف معادلة شرودينجر الأجسام المتحركة بحركات غير نسبية أي الأجسام ذات الطاقات المنخفضة، أما معادلة ديراك فتأخذ المفاهيم النسبية للحركة و هي تصف الأجسام ذات الطاقة العالية. و يعطى مؤثر ديراك لحركة جسيم حر بالعلاقة [8]:

$$H^D = c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 \quad (I-5)$$

و من أجل ذرة الهيدروجين و باعتبار حركة الإلكترون في كمون  $V(r)$  و بطاقة مختزلة  $E = mc^2$  تعطى معادلة ديراك بالعلاقة [9]:

$$(c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta mc^2 + V(\mathbf{r})) \psi(\mathbf{r}, t) = E \psi(\mathbf{r}, t) \quad (I-6)$$

حيث  $\psi(\mathbf{r}, t)$ : هي مصفوفة عمودية مكونة من أربع مركبات [10]:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_2(\mathbf{r}, t) \\ \psi_3(\mathbf{r}, t) \\ \psi_4(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \quad (I-7)$$

المعامل  $\beta$  و شعاع المعاملات  $(\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$  هي أبعاد ذاتية للجسم.

تمثل معادلة ديراك أربع معادلات تفاضلية جزئية من أجل المركبات الأربعة  $\psi(\mathbf{r}, t)$ .

المعاملات  $\alpha_i, \beta$  تسمى مصفوفات باولي حيث [10]:

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_z \\ \sigma_z & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (\text{I-8})$$

و تعطى المصفوفات  $\sigma_x$ ،  $\sigma_y$ ،  $\sigma_z$  بالشكل التالي [8]:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-9})$$

و باعتبار سبين الالكترونات حيث  $s=1/2$  فإن المصفوفات  $I$  ذات بعدين (2x2) و المصفوفات  $\beta$ ،  $\alpha_i$  لابد أن تكون ذات أربعة أبعاد (4x4) [11]:

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{I-10})$$

و باعتبار أن [8]:

$$\psi_B = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad , \quad \psi_A = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad \text{حيث: } \psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}$$

تصبح معادلة ديراك لذرة الهيدروجين عبارة على معادلتين مزدوجتين وفقا للشكل التالي [8]:

$$\begin{aligned} \sigma \cdot \mathbf{p} \psi_B &= \frac{1}{c} [E - V(\mathbf{r}) - mc^2] \psi_A \\ \sigma \cdot \mathbf{p} \psi_A &= \frac{1}{c} [E - V(\mathbf{r}) + mc^2] \psi_B \end{aligned} \quad (\text{I-11})$$

و باستعمال التوافقيات الكروية المعممة  $Y_{j,m,l}$  المعطاة من طرف كلايش-جوردان تكتب  $\psi_A$  و  $\psi_B$  بالشكل التالي [8]:

$$\begin{aligned} \psi_A &= \frac{F(r)}{r} Y_{j,m,l_A} \\ \psi_B &= i \frac{G(r)}{r} Y_{j,m,l_B} \end{aligned} \quad (\text{I-12})$$

و باعتبار خصائص  $\sigma$  و  $\mathbf{p}$  [8]:

$$\sigma \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r^2} (\sigma \cdot \mathbf{r}) \left( \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} + i \sigma \cdot \mathbf{L} \right) \quad (\text{I-13})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})Y_{j,m,l=j+\frac{1}{2}} &= -Y_{j,m,l=j-\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{r}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r})Y_{j,m,l=j-\frac{1}{2}} &= -Y_{j,m,l=j+\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (\text{I-14})$$

و المؤثر  $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} = \left(\frac{2}{\hbar}\right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}$ ، فإنه من أجل كل عدد كمي للدفع الزاوي الكلي  $j$  يوجد احتمالين متاحين للعديدين الكميين  $l_A$  و  $l_B$  للدفع الزاوي المداري.

$$\begin{aligned} l_A = j - \frac{1}{2}, l_B = j + \frac{1}{2} & \quad (i) \\ l_A = j + \frac{1}{2}, l_B = j - \frac{1}{2} & \quad (ii) \end{aligned} \quad (\text{I-15})$$

تعويض عبارتي  $\psi_B$  و  $\psi_A$  في المعادلة (I-11) و استعمال الخصائص (I-13) و (I-14) يؤدي إلى معادلة ديراك الشعاعية من أجل الدوال الموجية  $F(r)$  و  $G(r)$  حيث [8]:

$$\begin{aligned} \hbar c \left( \frac{dF}{dr} + \frac{\kappa}{r} F \right) &= (E - V(r) + mc^2) G \\ \hbar c \left( \frac{dG}{dr} - \frac{\kappa}{r} G \right) &= -(E - V(r) + mc^2) F \end{aligned} \quad (\text{I-16})$$

القيمة المطلقة للثابت  $\kappa$  هي  $j + \frac{1}{2}$  و تتعلق إشارته بالدفع الزاوي المداري المعطى في المعادلة (I-15) حيث من أجل :

$$\begin{aligned} \kappa = -j - \frac{1}{2} & \quad (i) \\ \kappa = j + \frac{1}{2} & \quad (ii) \end{aligned} \quad (\text{I-17})$$

المعادلة (I-16) هي جملة معادلتين تفاضليتين من الدرجة الأولى. من أجل حقل كولوم الجاذب

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad 0 < E < mc^2 \quad \text{[8]}$$

$$E_{nj} = mc^2 \left[ 1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(n - \delta_j)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} \quad (\text{I-18})$$

حيث :  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137}$  هو ثابت البنية الدقيقة . و  $\delta_j = j + \frac{1}{2} - \sqrt{\left(j + \frac{1}{2}\right)^2 - (Z\alpha)^2}$

الطاقات المعطاة بالعلاقة (I-18) لا تتعلق فقط بالعدد الكمي الرئيسي  $n$  بل بالعدد الكمي للدفع الزاوي الكلي  $j$  أيضا [8].

من أجل  $n$  معطى يمكن لـ  $j$  أن تأخذ القيم :  $j = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots, n - \frac{1}{2}$  ، و من أجل كل قيمة لـ  $j$  حيث :

يوجد حلين خطيين مستقلين لمعادلة ديراك الشعاعية المميزة بالأعداد الكمية للدفع الزاوي  $\frac{1}{2} \leq j < n - \frac{1}{2}$

المداري  $l_A = j - \frac{1}{2}$  و  $l_A = j + \frac{1}{2}$  و يتضح من المعادلة (I-18) أنها متاحة فقط من أجل  $Z\alpha < 1$  أي  $Z < 137$  وهي محققة من أجل كل الأنوية الذرية المعروفة . و يمكن كتابة المعادلة (I-18) على شكل قوى  $Z\alpha$  من خلال [8]:

$$E_{nj} = mc^2 \left[ 1 - \frac{(Z\alpha)^2}{2n^2} - \frac{(Z\alpha)^4}{2n^3} \left( \frac{1}{j + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right) + \dots \right] \quad (\text{I-19})$$

يمثل الحد الأول الطاقة المختزلة للجسم  $mc^2$  و الحد الثاني يتوافق مع الطيف الغير نسبي.

الحد الثالث يتضمن التصحيحات و التي هي أقل من الطاقة الغير نسبية [8].

### 3.1.I التصحيحات النسبية على معادلة شرودينجر

يمكن كتابة معادلة ديراك المعطاة بالعلاقة (I-11) على شكل معادلة تفاضلية جزئية واحدة من الدرجة الثانية لـ  $\psi_A$  ، من خلال عبارة  $\psi_B$  حيث [8]:

$$\psi_B = \frac{c}{E - V(\mathbf{r}) + mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_A \quad (\text{I-20})$$

و تعويضها في المعادلة الأولى من (I-11) لينتج :

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \frac{c^2}{mc^2 + E - V} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_A = (E - V - mc^2) \psi_A \quad (\text{I-21})$$

و بتعويض  $E - mc^2 \rightarrow \varepsilon$  :

$$\frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left[ 1 + \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \right]^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_A = (\varepsilon - V) \psi_A \quad (\text{I-22})$$

$$\frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left[ 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \right] \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi_A = \left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \right) \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2m} + \frac{\hbar}{i} \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{4m^2 c^2} \right] \psi_A \quad (\text{I-23})$$

و باعتبار الخصائص التالية:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$$

حيث  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$  و باعتبار الكمون متناظر شعاعيا  $V = V(r)$  و  $\nabla V = (1/r)dV/dr$  تكتب المعادلة (I-23) بالشكل التالي [8]:

$$\left[ \left( 1 - \frac{\varepsilon - V}{2mc^2} \right) \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{4m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) + \frac{\hbar}{4m^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) \right] \psi_A = (\varepsilon - V) \psi_A \quad (\text{I-24})$$

بتقريب  $\varepsilon - V$  إلى  $\frac{\mathbf{p}^2}{2m}$  في الحد الأول من المعادلة (I-24) و بوضع  $\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  يتم الحصول

على معادلة شرودينجر المتضمنة للتصحیحات النسبية من الرتبة الأولى لـ  $\frac{\mathbf{p}^2}{(mc^2)}$  و التي تعطى بالشكل التالي [12]:

$$\left( \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2} + V(r) + H_{SO} + H_D \right) \psi_A = \varepsilon \psi_A \quad (\text{I-25})$$

$H_{KE} = -\frac{\mathbf{p}^4}{8m^3 c^2}$ : يمثل التصحيح على الطاقة الحركية.

$H_{SO} = \frac{Ze^2}{2m^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ : يمثل مؤثر الازدواج سبين مدار.

$H_D = \frac{\pi \hbar^2 Ze^2}{2m^2 c^2} \delta(\mathbf{r})$ : يمثل مؤثر داروين، و هو يساهم من أجل  $l = 0$  فقط.

## 4.1.I البنية الدقيقة لذرة الهيدروجين

تعود البنية الدقيقة لمستويات الطاقة لذرة الهيدروجين إلى الأفعال النسبية حيث تنتج من التصحيحات النسبية لمعادلة شرودينجر، و يعطى هاميلتون الجملة بالعلاقة [12]:

$$H = H_0 + H_1 \quad (I-26)$$

حيث  $H_0 = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$  هو مؤثر الطاقة لذرة الهيدروجين الغير نسبية و  $H_1$  يؤخذ كاضطراب لـ  $H_0$ .

$H_1 = H_{FS}$ : يمثل مجموع التصحيحات للبنية الدقيقة لذرة الهيدروجين و يعطى بالعلاقة [11]:

$$H_{FS} = H_{KE} + H_{SO} + H_D \quad (I-27)$$

و من خلال نظرية الاضطراب يعطى التصحيح من الرتبة الأولى للطاقة بـ  $\langle H^{(1)} \rangle = E^{(1)}$  حيث  $H^{(1)} = H_{FS}$  [4].

## 1.4.1.I التصحيحات النسبية على عبارة الطاقة

يعطى التصحيح من الرتبة الأولى للطاقة بالشكل التالي [4]:

$$\begin{aligned} E_{KE}^{(1)} &= \langle H_{KE}^{(1)} \rangle \quad (I-28) \\ &= -\frac{1}{2m_0 c^2} \langle \psi_{nlm_l} | T^2 | \psi_{nlm_l} \rangle \end{aligned}$$

حيث  $T = \frac{p^2}{2m}$  و بالتالي عبارة  $E_{KE}^{(1)}$  هي من الشكل [4]:

$$E_{KE}^{(1)} = \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} E_n^{(0)} \left[ \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \quad (I-29)$$

و تعطى عبارة  $E_n^{(0)}$  بالشكل التالي [12]:

$$E_n^{(0)} = -\left(\frac{1}{2}\right) m c^2 \alpha^2 / n^2$$

## 2.4.1.I التصحيح سبين مدار

يكتب مؤثر الإزدواج سبين مدار المعطى في المعادلة (I-25) بالشكل التالي [12]:

$$H_{SO} = \xi(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (I-30)$$

حيث:  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2)/2$  و  $\xi(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2m^2 c^2 r^3}$

و يعطى الانتقال في الطاقة الناتج عن  $H_{SO}$  بالعبارة [12]:

$$E_{SO}^{(1)} = \langle H_{SO}^{(1)} \rangle$$

$$= \left\langle \psi_{nljm_j} \left| \frac{1}{2} \xi(r) [\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2] \right| \psi_{nljm_j} \right\rangle \quad (\text{I-31})$$

حيث الدوال الموجية  $\psi_{nljm_j}$  التي هي حالات خاصة للمؤثرات  $H_0$ ،  $\mathbf{L}^2$ ،  $\mathbf{S}^2$ ،  $\mathbf{J}^2$ ،  $J_z$  بالقيم الخاصة الموافقة لها:  $E_n$ ،  $\hbar^2 l(l+1)$ ،  $\hbar^2 s(s+1)$ ،  $\hbar^2 j(j+1)$ ،  $m_j \hbar$ .

و يصبح للمعادلة (I-31) الشكل:

$$\frac{\hbar^2}{2} \langle \xi(r) \rangle \left[ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (\text{I-32})$$

و بالتالي تكتب عبارة التصحيح في الطاقة  $E_{SO}^{(1)}$  بالشكل التالي [13]:

$$E_{SO}^{(1)} = -\frac{1}{2} \alpha^2 E_n^{(0)} \frac{1}{n(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad j = l + \frac{1}{2}$$

$$= -\frac{1}{2} \alpha^2 E_n^{(0)} \frac{1}{nl(l+\frac{1}{2})} \quad j = l - \frac{1}{2} \quad (\text{I-33})$$

حيث:

$$\langle \xi(r) \rangle = \frac{1}{2m^2 c^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{Z^3}{a_0^3 n^3 l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \quad (\text{I-34})$$

### 3.4.1.1 حد داروين

يكتب مؤثر داروين المعطى بالعبارة (I-25) بالشكل التالي [12]:

$$E_D^{(1)} = \langle \psi_{nlm} | H_D | \psi_{nlm} \rangle \quad (\text{I-35})$$

$$= \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 \hbar^2 \pi}{2m^2 c^2} \langle \psi_{n00} | \delta(\mathbf{r}) | \psi_{n00} \rangle$$

$$= \frac{Z}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2 \hbar^2 \pi}{2m^2 c^2} \frac{1}{\pi a_0^3 n^3}$$

و منه يعطى التصحيح  $E_D^{(1)}$  بدلالة  $E_n^{(0)}$  بالشكل التالي [12]:

$$E_D^{(1)} = -E_n^{(0)} \frac{\alpha^2}{n} \quad (\text{I-36})$$

#### 4.4.1.I التصحيح الكلي للبنية الدقيقة

من خلال المعادلات (I-29) و (I-33) و (I-36) تكتب  $E_{FS}^{(1)}$  بالعلاقة [12-4] :

$$E_{FS}^{(1)}(n, l) = E_n^{(0)} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ \frac{n}{l + \frac{1}{2}} - \frac{3}{4} \right] \quad j = l + \frac{1}{2} \quad (\text{I-37})$$

$$= E_n^{(0)} \frac{(Z\alpha)^2}{n^2} \left[ \frac{n}{l} - \frac{3}{4} \right] \quad j = l - \frac{1}{2}$$

#### 2.I الذرات المتعددة الإلكترونات

تتكون الذرات متعددة الإلكترونات من نواة شحنتها  $Ze$  و  $N$  إلكترون، و تعتبر ذرة الهليوم أبسط ذرة متعددة الإلكترونات [13].

#### 1.2.I ذرة الهليوم

تتكون ذرة الهليوم من نواة شحنتها  $+Ze = +2e$  و إلكترونين لهما الشحنة  $q = -e$  [3]، و تعطى معادلة شرودينجر لذرة الهليوم في وحدة الكتل الذرية بالعلاقة [14]:

$$\left\{ -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{\nabla_2^2}{2} + \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right\} \psi = E\psi \quad (\text{I-38})$$

حيث  $r_1$  و  $r_2$  موضعي الإلكترونين الأول والثاني على الترتيب و  $r_{12} = |r_1 - r_2|$  هي المسافة بين الإلكترون الأول والثاني. و التنافر الكهروستاتيكي للإلكترونات متناسب مع  $1/r_{12}$ ، بإهمال هذا التنافر و بفصل دالة الموجة بالشكل :

$$\psi(r_1, r_2) = \psi_1(r_1)\psi_2(r_2) \quad (\text{I-39})$$

تكتب المعادلة (I-37) على الشكل [3]:

$$\left( -\frac{\nabla_1^2}{2} - \frac{Z}{r_1} \right) \psi_1(r_1) = E_1 \psi_1(r_1) \quad (\text{I-40})$$

$$\left( -\frac{\nabla_2^2}{2} - \frac{Z}{r_2} \right) \psi_2(r_2) = E_2 \psi_2(r_2)$$

حيث:  $E = E_1 + E_2$

كل من هاتين المعادلتين ماثلة لمعادلة شرودينجر لذرة الهيدروجين (I-1)، و باستعمال هذا التقريب حيث  $Z = 2$  يتم الحصول على طاقة الحالة الأساسية  $n = 1$  للهليوم باعتبار استقلالية حركة الإلكترونين عن بعضهما. قيمة الطاقة المحسوبة غير مقاربة للقيمة التجريبية للحالة الأساسية لذرة الهليوم، لهذا فإن هذا التقريب بعيد جدا عن النتائج المتحصل عليها تجريبيا، إذ يتوقع أن طاقة المستوي الأساسي تقارب القيمة  $108.8 \text{ eV}$  - في حين أن القيمة التجريبية تقارب  $79 \text{ eV}$  - لذا وجب اللجوء لطرق تقريبية أنجع.

### 1.1.2.I طريقة التغيرات

لقد استخدمت طريقة التغيرات للحصول على طاقات الحالة الأساسية و الدوال الموجية للهاملتون المستقل عن الزمن H من خلال المعادلة التالية [4]:

$$E[\phi] = \frac{\int \phi^* H \phi d\tau}{\int \phi^* \phi d\tau} \quad (\text{I-41})$$

حيث  $\phi$ : هي دالة اختبار.

تعتبر كل دالة  $\phi$  يعطي من أجلها  $E[\phi]$  قيمة هي حل للمعادلة (I-41).

تعتمد طريقة التغيرات لـ Ritz على اختيار تابع الاختبار  $\phi$  كتابع للوسطاء بحيث يحسب التكامل بشكل دقيق، و عندئذ تصبح الطاقة E تابعا لهذه الوسطاء و يجب أن تقرب القيمة الصغرى من القيمة الحقيقية لهذا التابع. تتجلى صعوبة هذه الطريقة في اختيار تابع الاختبار الذي يجب مراعاة كل المعلومات الممكنة عن الجملة عند اختياره، كما لا توجد طريقة معينة في اختياره. طريقة التغيرات لا تعطي تقدير جيد للقيم الخاصة الكبيرة [4].

### 2.1.2.I نظرية الاضطراب

بتطبيق نظرية الاضطراب، يكتب هاميلتون المعادلة (I-38) بالشكل [16]:

$$H = H_0 + \lambda H' \quad (\text{I-42})$$

حيث  $H_0$  هو الهاملتون الغير مضطرب و يكتب بالشكل التالي:

$$H_0 = -\frac{1}{2}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V_1(r_1) + V_2(r_2) \quad (\text{I-43})$$

و يمكن إيجاد حل معادلة شرودينجر الموافقة له و التي تعطى بالشكل [4]:

$$H_0 \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(0)} \quad (\text{I-44})$$

أما الحد  $\lambda H'$  فيعتبر اضطراب صغير و يعطى بالشكل التالي [16]:

$$\lambda H' = -\frac{Z}{r_1} - V_1(r_1) - \frac{Z}{r_2} - V_2(r_2) + \frac{1}{r_{12}} \quad (\text{I-45})$$

حيث تكتب الدوال الخاصة  $\psi$  و القيم الخاصة  $E$  على شكل قوى  $\lambda$  بالشكل التالي:

$$\psi = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \psi^{(n)} \quad , E = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n E^{(n)} \quad (\text{I-46})$$

$$H_0 \psi^{(1)} + H' \psi^{(0)} = E^{(0)} \psi^{(1)} + E^{(1)} \psi^{(0)} \quad \text{تعطى المعادلة :}$$

حيث تعطى الطاقة من الرتبة الأولى بالعلاقة التالية [4]:

$$E^{(1)} = \langle \psi^{(0)} | H' | \psi^{(0)} \rangle \quad (\text{I-47})$$

و من خلال العبارة [16]:

$$H_0 \psi^1 + H' \psi = E \psi^1 + E^1 \psi \quad (\text{I-48})$$

تحدد الطاقة من الرتبة الثانية بالعلاقة [4]:

$$E^2 = \langle \psi | H' - E^1 | \psi^1 \rangle \quad (\text{I-49})$$

تتسع هذه الطريقة من أجل إعطاء قيم باقي القيم التقريبية للطاقات و الدوال الموجية.

### 2.2.1 الذرات متعددة الإلكترونات

تتكون الذرات متعددة الإلكترونات من نواة شحنتها  $Ze$  و  $N$  إلكترون، و يستدعي حساب الطاقات و الدوال الموجية لهذه الذرات استعمال طرق تقريبية لأن حل معادلة شرودينجر بالشكل التحليلي غير ممكن. و تعتبر طريقة الحقل المركزي من أهم الطرق المستعملة لحساب البنية الذرية للذرات المتعددة الإلكترونات.

#### 1.2.2.1 تقريب الحقل المركزي

يعتمد هذا التقريب على اعتبار أن كل إلكترون في الذرة يتحرك في حقل ذاتي التوافق ناشئ من طرف النواة و بقية الإلكترونات. تعطى معادلة شرودينجر لذرة متعددة الإلكترونات بالعلاقة [17]:

$$\left\{ \sum_i^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right\} \psi = E \psi \quad (\text{I-50})$$

يمكن كتابة هاميلتون المعادلة (I-50) على الشكل:  $H = H_0 + H_1$  حيث:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 + V(r_i) \right) \quad (\text{I-51})$$

$$\sum_i V(r_i) = \sum_i \left( \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + S(r_i) \right) \text{ هو الكمون المركزي الكلي و يعطى بالشكل التالي}$$

$$\sum_i S(r_i) = \sum_{i>j} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \right) \text{ حيث يرمز لطاقة التفاعل بين الإلكترونات بالشكل التالي:}$$

$$H_1 = \sum_{i>j} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} - \sum_i \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_i} + V(r_i) \right) \quad (\text{I-52})$$

يهمل  $H_1$  في تقريب الحقل المركزي بالمقارنة مع  $H_0$  ، و بالتالي تكتب معادلة شرودينجر (I-50) لذرة متعددة الإلكترونات بالشكل التالي:

$$H_0 \psi = \sum_i^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V(r_i) \right) \psi = E \psi \quad (\text{I-53})$$

حيث  $H_0$  هو الهاميلتون الموافق لتقريب الحقل المركزي [4]. بافتراض  $H_0 = \sum_i H_{0i}$  ، يمكن كتابة دالة الموجة  $\psi$  على شكل جداء دوال الكترونات فردية أو بالأصح على شكل محدد سلاتر، و الطاقة الكلية هي مجموع القيم الخاصة لطاقات الإلكترونات الفردية:  $E = \sum_i E_{n_i}$  ، و تعطى معادلة شرودينجر من أجل كل إلكترون بالشكل التالي [18]:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r_i) \right) \psi_{n l m_l m_s} = E_{n l} \psi_{n l m_l m_s} \quad (\text{I-54})$$

حيث تكتب دالة الموجة بالشكل التالي [17]:

$$\psi_{n l m_l m_s} = R_{n l}(r) Y_l^{m_l}(\theta, \phi) \chi(m_s) \quad (\text{I-55})$$

حل المعادلة (I-54) يعتمد على إيجاد عبارة  $V(r_i)$  ، و يتم ذلك من خلال طريقة توماس-فيرمي [17] أو طريقة هارترى فوك.

### 2.2.2.I طريقة توماس-فيرمي

تعتمد طريقة توماس-فيرمي للحالة الأساسية للذرات متعددة الإلكترونات على المفاهيم الإحصائية و الشبه كلاسيكية حيث تعتبر الإلكترونات غازا الكترونيا عند  $T = 0K$  و الهدف من هذه الطريقة هو تقديم طريقة حسابية للكمون  $V(r)$  و الكثافة الإلكترونية  $\rho(r)$  بافتراض أن الكمون يتغير ببطء [19].

من خلال عبارة كثافة الشحنة  $\rho(r)$  :

$$\rho(r) = -\frac{8\pi}{3h^3} e (2me\phi)^{3/2} \quad (I-56)$$

و معادلة بواسون:

$$\nabla^2\phi = -\rho / \epsilon_0 \quad (I-57)$$

تعطى المعادلة التفاضلية لتوماس- فيرمي بالشكل التالي [17]:

$$\nabla^2\phi = \frac{4}{3\pi h^3} \frac{e(2me\phi)^{3/2}}{4\pi\epsilon_0} \quad (I-58)$$

حيث تكون حلول هذه المعادلة كما يلي:

$$\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r) = \frac{Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (I-59)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r\phi(r) = 0 \quad (I-60)$$

و يمكن كتابتها بالشكل التالي [19]:

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} = x^{-1/2} \chi^{3/2} \quad (I-61)$$

$$b \approx 0.885a_0 Z^{-1/3} \text{ و } r = bx \text{ ، } \phi(r) = \frac{\chi(r)Ze}{4\pi\epsilon_0 r} \text{ حيث}$$

المعادلة (I-61) هي معادلة توماس- فيرمي من الدرجة الثانية غير خطية يمكن حلها عدديا [17].

تعطى عبارة  $\chi(x)$  من أجل  $x$  صغير بالعبارة [17]:

$$\chi(x) = 1 + Bx + \frac{4}{3}x^{3/2} + 0(x^{5/2}) \quad (I-62)$$

يعطى العدد الكلي للنيوترونات بالعبارة:

$$4\pi \int_0^{r_0} \rho(r) r^2 dr = N \quad (I-63)$$

من خلال المعادلات السابقة :

$$x_0 \chi'(x_0) = \frac{N - Z}{Z} \quad (I-64)$$

حلول معادلة توماس-فيرمي (I-61) تكون حسب نوع الذرات: متعادلة ، أيونات موجبة أو سالبة و بالتالي يتم تحديد عبارة  $V(r)$  حسب الحالة المدروسة فمن أجل الذرات المتعادلة  $N = Z$  تعطى عبارة الكمون بالشكل التالي [4]:

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{(4\pi\epsilon_0)r} \chi(x) \quad (I-65)$$

و من أجل  $\chi(x) \approx 1 - 1.588x + \dots$  للذرات المتعادلة تصبح عبارة الكمون  $V(r)$  من أجل  $r$  صغير بالشكل [4]:

$$V(r) \approx \frac{e^2}{(4\pi\epsilon_0)} \left( -\frac{Z}{r} + 1.794 \frac{Z^{4/3}}{a_0} \right) \quad (I-66)$$

تمكنت هذه الطريقة من دراسة الأيونات الموجبة، و لكنها لم تتمكن من دراسة الأيونات السالبة [4].

### 3.2.2.1 طريقة هارترى فوك

تسمح طريقة هارترى فوك بدراسة أكثر تفصيلا لبنية النواة حيث تمكن من معرفة توزع الإلكترونات في الذرات الثقيلة و تعتبر أكثر دقة من طريقة توماس-فيرمي الإحصائية لكن استخدامها يتطلب عملا حسابيا كبيرا [4]. تعتبر طريقة هارترى فوك من أهم الطرق المتبعة لحل مسألة الطاقات و الدوال الموجية، من خلال حل المعادلات التفاضلية و التكاملية في الحقل ذاتي التوافق ، حيث تعطى هذه المعادلات من أجل كل حالة  $n_i l_i$  بالشكل التالي [20]:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + \frac{Z}{r} - \sum_j V_{ij}(r) + \epsilon_i \right] P_i(r) = \sum_j [V'_{ij}(r) - \epsilon_{ij} \delta_{l_i l_j}] P_j(r) \quad (I-67)$$

حيث  $V$  و  $V'$  هما الكمون المباشر و كمون التبادل على الترتيب.

$$V_{ij}(r) = \sum_{\kappa} \alpha_{ij}^{\kappa} \int_0^{\infty} P_j(r_1) P_i(r_1) \frac{r_1^{\kappa}}{r_1^{\kappa+1}} dr_1$$

$$V'_{ij}(r) = \sum_{\kappa'} \beta_{ij}^{\kappa'} \int_0^{\infty} P_j(r_1) P_i(r_1) \frac{r_1^{\kappa'}}{r_1^{\kappa'+1}} dr_1 \quad (I-68)$$

يعطى حل الجملة (I-67) بالاعتماد على مبدأ التغيرات "variational principle" على عبارة الطاقة الكلية  $\langle \psi | H | \psi \rangle$  للجملة الذرية المدروسة [20].

تعطى الوسائط  $\epsilon_{ij}$  من خلال شروط التعامد للدوال الموجية  $P_j$  و  $P_i$  من أجل  $l_i = l_j$  و  $n_i \neq n_j$  و  $\alpha, \beta$  هي معاملات [20].

يمكن حل المعادلة (I-67) عددياً من خلال طريقة التكرار، ثم يتم حساب الطاقة الكلية الغير نسبية لكل حد LS في الازدواج LS. بعد ذلك يتم حساب التصحيحات النسبية على الطاقة باستعمال نظرية الاضطراب ومؤثر برايت باولي الكلي أو المختزل [20].

تعطي طريقة هارترى فوك دوال موجية جيدة تنشأ من ازدواج عزوم الدوال الموجية للإلكترون واحد للتشكيل المعطى أي لمجموعة  $n_i l_i$  معطاة ،  $i = 1, 2, \dots, N$  حيث  $N$  العدد الكلي للإلكترونات [20].

تستعمل طريقة هارترى فوك الكمون المتوسط ذاتي التوافق، لكنها لا تأخذ بعين الاعتبار التفاعل الإلكتروني الدقيق و يوصف الاختلاف بينهم بأفعال الترابط. و لأخذ هذه الأفعال بعين الاعتبار في طريقة هارترى فوك يجب استعمال تقريب تفاعل التشكيلات (CI)، حيث تعطى الدوال الموجية على شكل جمع مختلف التشكيلات [20]:

$$\psi_a = \sum_b C_{ab} \phi_b \quad (I-69)$$

تعطى المعاملات  $C_{ab}$  من خلال مبدأ التغير أو نظرية الاضطراب.

و تكتب عبارة الطاقة بالشكل التالي [20]:

$$E_a = \sum_{bb'} C_{ab} \langle \Phi_b | H | \Phi_{b'} \rangle C_{b'a} \quad (I-70)$$

تعتبر طريقة MCHF (Multi Configuration Hartree Fock) أكثر فعالية حيث تعطى جملة المعادلات من خلال تغير المعادلة (I-70) على  $\Phi_b$  و  $C_{ab}$ . و هي أكثر تعقيداً من طريقة هارترى فوك ، و تستعمل بشكل واسع في برامج حساب البنية الذرية [20].

#### 4.2.2.I تقريب برايت- باولي

يتضمن مؤثر برايت- باولي التصحيحات النسبية من الدرجة  $(Z\alpha)^2$ ، و يكتب هذا المؤثر بالشكل التالي [21]:

$$H_{BP} = H_{nr} + H_{rel} \quad (I-71)$$

حيث في الوحدات الذرية يكتب المؤثر  $H_{nr}$  بالشكل [17]:

$$H_{nr} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \left( \nabla_i^2 + \frac{2Z}{r_i} \right) + \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (I-72)$$

أما  $H_{rel}$  و الذي يمثل المساهمات النسبية فيمكن تقسيمه إلى مساهمة البنية الغير دقيقة  $H_{NFS}$  و البنية الدقيقة  $H_{FS}$  حيث يكتب  $H_{rel}$  بالشكل [21]:

$$H_{rel} = H_{NFS} + H_{FS} \quad (I-73)$$

يمثل  $H_{NFS}$  انزياح مستويات الطاقة الغير نسبية بدون انقطاع في سويات الطاقة، أما  $H_{FS}$  فيمثل انقطاع في مستويات الطاقة الغير نسبية إلى سلاسل البنية الدقيقة.

### خاتمة

تطرقنا في هذا الفصل إلى طرق حساب البنية الذرية من خلال تصنيف الجمل الذرية إلى ذرات وحيدة الإلكترون و ذرات متعددة الإلكترونات. حيث تمت دراسة ذرة الهيدروجين من خلال معادلة شرودينجر و معادلة ديراك بالإضافة إلى اعتبار التصحيحات النسبية على معادلة شرودينجر، أما الذرات متعددة الإلكترونات بدءاً بأبسط نموذج لها و هي ذرة الهليوم فتمت معالجتها من خلال طرق تقريبية من أجل إيجاد الطاقات و الدوال الموجية حيث أن حلها باستعمال معادلة شرودينجر غير ممكن.



# الفصل الثاني

المعطيات الذرية و المطيافية

## مقدمة

تشكل البلازما 99% من الكون، و هي عبارة عن غاز مؤين يتشكل من عدد كبير من الجسيمات (أيونات، إلكترونات و فوتونات) المتحركة في الفضاء. تؤدي حركتها إلى تصادمها مع بعضها البعض، و بتفاعلها مع الحقول الكهرومغناطيسية تنتقل الطاقة فيما بينها و ينتج عن ذلك تفاعل الأيونات مع الإلكترونات أو الفوتونات من خلال عدة آليات ذرية أساسية يمكن تصنيفها إلى نوعين: آليات إشعاعية وآليات تصادمية. و تتمثل المعطيات الذرية في المعاملات و المقاطع الفعالة لهذه الآليات و هي ذات أهمية كبيرة في نمذجة الخصائص الإشعاعية للأيونات و الذرات من أجل دراسة و تحليل الأطياف [22].

سنتعرف في هذا الفصل على الآليات الذرية الأساسية في البلازما بنوعها ثم نبرز أهمية المعطيات الذرية في نمذجة الإسكان و دراسة الأطياف.

## 1.II انبعاث و امتصاص الأشعة

من المعلوم أن المنظومات الذرية كالذرات و الأيونات و الجزيئات بإمكانها التواجد في حالات مستقرة معينة يناظر كل منها قيمة محددة للطاقة، تتميز هذه الحالات بالأعداد الكمية الأربعة و يمكن أن تحدث انتقالات بين هذه الحالات مصحوبة بانبعاث أو امتصاص طاقة على شكل أشعة. و تعطى طاقة الأشعة المنبعثة أو الممتصة من قبل المنظومة بعلاقة بور [23]:

$$h\nu = E_j - E_i \quad (\text{II-1})$$

حيث  $E_i$  و  $E_j$  هما طاقات الحالات التي حدث بينها الانتقال.

$h$ : ثابت بلانك .

$\nu$ : تردد الأشعة .

## 2.II معامل الاحتمال

تتمثل المعطيات الذرية في الطاقات و الاحتمالات (المقاطع الفعالة و معاملات الآليات الذرية) [20]، و يعطى معامل الاحتمال  $\langle \sigma_v \rangle$  لأي آلية ذرية بدلالة المقطع الفعال  $\sigma(v)$  بالشكل التالي [24]:

$$\langle \sigma_v \rangle = \int v \sigma(v) f(v) d^3v \quad (\text{II-2})$$

$v$ : سرعة الجزيئات عند التصادم.

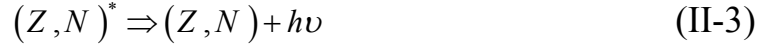
$\sigma(v)$ : المقطع الفعال .

$f(v)$ : دالة توزيع السرعات .

## 3.II الآليات الإشعاعية

## 1.3.II الانبعاث التلقائي

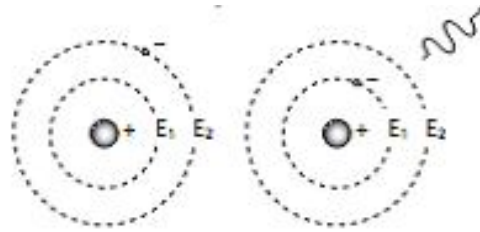
يحصل هذا الانبعاث عند تواجد الأيون في حالة مثارة (غير مستقرة)، بإرسال فوتون لينتقل إلى حالة أقل طاقة حيث الفوتونات المنبعثة لها اتجاه عشوائي [23] ، ويعبر عن الانبعاث التلقائي بالشكل [25]:



حيث:

$(Z, N)$ : أيون له عدده الذري  $Z$  و عدد إلكتروناته  $N$  و  $(Z, N)^*$  هي حالة مثارة.

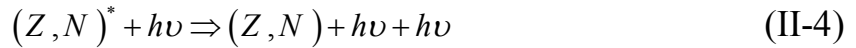
يوضح الشكل (1-II) عملية الانبعاث التلقائي لفوتون عند انتقال إلكترون من حالة مثارة إلى حالة أساسية تلقائياً.



الشكل (1-II): عملية الانبعاث التلقائي [23].

## 2.3.II الانبعاث المحرض و الامتصاص

تحدث هذه العمليات في حالة تجاوز الفوتون الوارد مع الأيون ، إذا كان هذا الأخير في مستوى أعلى من انتقال الرنين فستعاد إثارته بإرسال فوتون و تسمى هذه العملية بالانبعاث المحفز حيث الفوتونات المنبعثة يكون لها نفس الاتجاه ، الطور و الطاقة [26]. و يصف هذه العملية التفاعل التالي [25]:



يوضح الشكل (2-II) عملية الانبعاث المحرض.

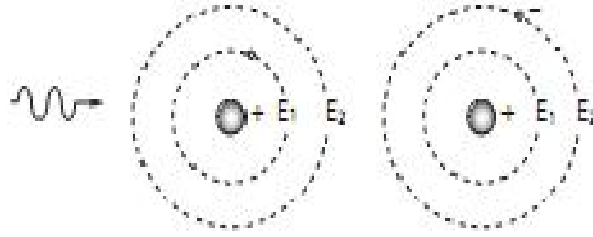


الشكل (2-II): عملية الانبعاث المحرض [23].

أما في الحالة المعاكسة حيث الأيون في مستوى طاقي منخفض، فيمكن ملاحظة امتصاص للفوتون الوارد لينتقل الأيون بذلك إلى مستوى أعلى طاقة و تسمى هذه العملية بالامتصاص، و تعطى من خلال التفاعل [25]:



يوضح الشكل (3-II) عملية الامتصاص.



الشكل (3-II): عملية الامتصاص [23].

#### • معاملات أينشتاين للانتقالات المحرزة و التلقائية

يعطى احتمال الانبعاث التلقائي في وحدة الزمن الموافق لانتقال الذرة من الحالة  $i$  إلى الحالة  $j$  تلقائياً بالعلاقة [3]:

$$\frac{dP_{ij}^{sp.em}}{dt} = A_{ij} \quad (\text{II-6})$$

حيث :

$A_{ij}$  : هو معامل اينشتاين للانبعاث التلقائي و يعطى بدلالة قوة الهزاز بالعلاقة [26]:

$$A_{ij} = \frac{1}{g_i} \frac{e^2 \omega^2}{m_e \epsilon_0 \pi c^3} f_{ij} \quad (\text{II-7})$$

$f_{ij}$  : قوة الهزاز بين السويين .

$g_i$  : هو الوزن الإحصائي للسوي  $i$  .

#### ❖ زمن الحياة الذري

زمن الحياة الإشعاعي  $\tau_i$  لسوي ذري  $i$  يرتبط بمجموع احتمالات الانتقال إلى السويات  $j$  الأقل طاقة من  $i$  و يعطى بالعلاقة [21]:

$$\tau_i = \left( \sum_j A_{ij} \right)^{-1} \quad (\text{II-8})$$

ويعطى احتمال الامتصاص الموافق لتفاعل ذرة في الحالة  $j$  و بالطاقة  $E_j$  مع الإشعاع الكهرومغناطيسي و الانتقال إلى حالة أعلى طاقة  $E_i$  حيث  $E_i = E_j + h\nu$  بالعلاقة [3]:

$$\frac{dP_{ji}^{abs}}{dt} = B_{ji} \omega_\nu(\nu) \quad (II-9)$$

حيث  $\omega_\nu(\nu) = n(\nu)h\nu$  هي كثافة الطاقة الطيفية لحقل الإشعاع، و  $n(\nu)$  هو عدد الفوتونات  $h\nu$ .  
 $B_{ji}$  هو معامل أينشتاين للامتصاص.

أما احتمال الانبعاث المحرض في وحدة الزمن فيعطى بالعلاقة [3]:

$$\frac{dP_{ij}^{ind.em}}{dt} = B_{ij} \omega_\nu(\nu) \quad (II-10)$$

$B_{ij}$  هو معامل أينشتاين للانبعاث المحرض ويعطى بالعلاقة [26]:

$$B_{ij} = \frac{\pi e^2}{m_e \epsilon_0 h \nu c} f_{ij} \quad (II-11)$$

### ❖ قوة الخط

تعرف قوة الخط على أنها مربع القيمة المطلقة لعنصر المصفوفة لثنائي القطب الكهربائي و تعطى بالعلاقة [22]:

$$S_{ij} = \left| \langle i | e\vec{r} | j \rangle \right|^2 \quad [eVcm^3] \quad (II-12)$$

### ❖ قوة الهزاز

تتعلق قوة الهزاز بقوة الخط من خلال عدة ثوابت ذرية، و تعطى بالشكل [22]:

$$f_{ij} = \frac{2}{3} \frac{mc^2}{e^2 (\hbar c)^2} \Delta E_{ij} \frac{1}{2J_i + 1} \left| \langle i | e\vec{r} | j \rangle \right|^2 = \frac{2}{3} \frac{mc^2}{e^2 (\hbar c)^2} \Delta E_{ij} \frac{1}{2J_i + 1} S_{ij} \quad (II-13)$$

$J_i$ : العدد الكمي للعزم الزاوي الكلي للحالة المثارة  $i$ .

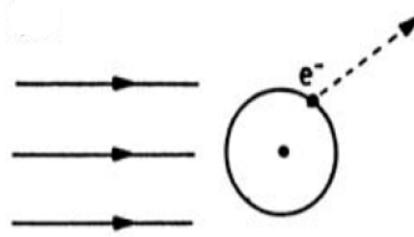
$\Delta E_{ij}$ : الفرق في الطاقة بين الحالتين الابتدائية و النهائية و يعطى بـ:  $\Delta E_{ij} = E_i - E_j$ .

### 3.3.II التأيين الضوئي

تحدث هذه العملية عند امتصاص ذرة للفوتون الوارد و تحرير الكترون حيث طاقة الفوتون يجب أن تكون أعلى من كمون تأين للذرة و هو يوافق العملية [25]:



يوضح الشكل (4-II) عملية التأيين الضوئي:



شكل (4-II): التأيين الضوئي [7].

### 4.3.II إعادة التشكيل الإشعاعي

هي عملية امتصاص لإلكترون من طرف أيون، ثم تعاد إثارته بإرسال فوتون [26]. و يمكن التعبير عن هذه الظاهرة بالمعادلة التالية [25]:



و هي العملية العكسية للتأيين الضوئي [27]، و يعطى معامل إعادة التشكيل الإشعاعي بالعلاقة التالية [26]:

$$\alpha^R = 8 \left( \frac{\pi a_0^2 I_H}{k T_e} \right)^{3/2} \frac{\pi \alpha^4 c}{3\sqrt{3}\pi a^2} z_1^4 \left( \frac{2}{v_i^3} \right) e^{I_i/kT_e} \int_{I_i/kT}^{\infty} \frac{g'' e^{-x}}{x} dx \quad (\text{II-16})$$

حيث:

$g''$ : هو معامل "Gaunt".

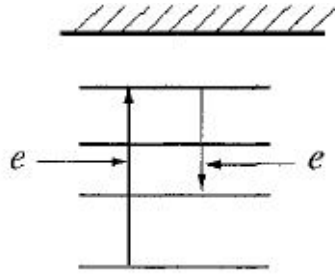
### 4.II العمليات التصادمية

#### 1.4.II الإثارة بالتصادم الإلكتروني

في حالة الإثارة يعطي الإلكترون الساقط جزءا من طاقته إلى الذرة، لتنتقل بذلك إلى حالة أعلى طاقة، و العملية العكسية لها هي العودة من الإثارة [26]. و تعطى من خلال التفاعل [25]:



يوضح الشكل (II-5) عملية الإثارة و العودة من الإثارة بالتصادم الإلكتروني.



شكل (II-5): عملية الإثارة و العودة من الإثارة بالتصادم الإلكتروني [23].

تعطى عبارة المقطع الفعال  $\sigma_{ij}(\varepsilon)$  بدلالة قوة التصادم  $\Omega_{ij}$  بالعلاقة [26]:

$$\sigma_{ij}(\varepsilon) = \frac{h^2}{8\pi m_e \varepsilon g_i} \Omega_{ij}(\varepsilon) \quad (\text{II-18})$$

$g_i$ : الوزن الإحصائي للسوي الابتدائي  $i$ .

$h$ : ثابت بلانك .

$m_e$ : كتلة الإلكترون .

قوة التصادم للانتقال من الحالة  $i$  إلى الحالة  $j$  مساوية للانتقال العكسي من  $j$  إلى  $i$  [26]:

$$\Omega_{ij} = \Omega_{ji} \quad (\text{II-19})$$

$$\Omega_{ij}(\varepsilon) = g_i \left( \frac{\varepsilon_i}{I_H} \right) \left( \frac{\sigma_{i \rightarrow j}(\varepsilon_i)}{pa_0^2} \right) = g_j \left( \frac{\varepsilon_j}{I_H} \right) \left( \frac{\sigma_{j \rightarrow i}(\varepsilon_j)}{pa_0^2} \right) \quad (\text{II-20})$$

حيث  $\sigma_{i \rightarrow j}(\varepsilon_i)$  و  $\sigma_{j \rightarrow i}(\varepsilon_j)$  المقطع الفعال للإثارة و العودة من الإثارة على الترتيب.

$a_0$ : نصف قطر بور.

$g_j, g_i$ : الوزن الإحصائي للحالتين  $i$  و  $j$  على الترتيب .

$I_H$ : ثابت طاقة ريدبرغ (طاقة التأين للهيدروجين المتعادل).

و يعطى معامل الإثارة بالتصادم الإلكتروني بالعلاقة التالية [29]:

$$C_{i \rightarrow j}(T_e) = 2\sqrt{p} \alpha c a_0^2 \left( \frac{I_H}{KT_e} \right)^{1/2} \frac{1}{g_i} \exp\left(-\frac{\Delta E_{ij}}{KT_e}\right) Y_{ij}(T_e) \quad (\text{II-21})$$

أما معامل العودة من الإثارة فيعطى بـ [29]:

$$C_{j \rightarrow i}(T_e) = 2\sqrt{p} \alpha c a_0^2 \left( \frac{I_H}{KT_e} \right)^{1/2} \frac{1}{g_j} \exp Y_{ij}(T_e) \quad (\text{II-22})$$

حيث:

$\alpha$ : هو ثابت البنية الدقيقة.

$c$ : هي سرعة الضوء في الفراغ.

$\Delta E_{ij}$ : طاقة الإثارة.

$Y_{ij}$ : هو متوسط شدة التصادم بدلالة درجة حرارة الإلكترون  $T_e$  و يعطى بالعلاقة [29]:

$$Y_{ij}(T_e) = \int_0^{\infty} \Omega_{ij}(\varepsilon_j) \exp\left(-\frac{\varepsilon_j}{KT_e}\right) d\left(\frac{\varepsilon_i}{KT_e}\right) \quad (\text{II-23})$$

من الطرق الفعالة و الدقيقة في حساب المقطع الفعال للإثارة بالتصادم الإلكتروني و العودة من الإثارة هي طريقة  $R$ -matrix [29].

## II.4.2 التآين بالتصادم الإلكتروني

يحدث التآين عندما يقتلع إلكترون التصادم إلكتروننا من الذرة المستهدفة وفقا للتفاعل [25]:



احتمال حدوث هذه الظاهرة يعتمد على الطاقة الحركية للإلكترون الوارد، جزيئات الذرة و طاقة التآين، و توصف عموما من خلال المقطع الفعال للتآين بواسطة التصادم الإلكتروني، الظاهرة العكسية لهذه العملية هي إعادة التشكيل لثلاثة أجسام. و توجد ثلاث نظريات لحساب المقطع الفعال للتآين و هي نظرية كولوم، النظرية الكلاسيكية و نظرية بور شبه التجريبية.

و تعطى عبارة المقطع الفعال للتآين بالشكل [26]:

$$\sigma(z, \varepsilon) = C \sum_i \zeta_i \left( \frac{I_H}{I_i} \right)^2 \frac{I_i}{\varepsilon} \ln\left(\frac{\varepsilon}{I_i}\right) W\left(\frac{\varepsilon}{I_i}, z\right) \pi a_0^2 \quad (\text{II-25})$$

و تعطى الدالة  $W(x, z)$  بالشكل [26]:

$$W(x, z) = \begin{cases} 0 & (x \leq 1) \\ [\ln(x)]^{\beta(z)/x} & (x > 1) \end{cases} \quad (\text{II-26})$$

حيث:

$$\beta(z) = \frac{1}{4} \left[ \left( \frac{100z + 91}{4z + 3} \right)^{1/2} - 5 \right] \quad (\text{II-27})$$

و يعطى معامل التآين بالتصادم الإلكتروني بالشكل التالي [26]:

$$S = 3.24 \times 10^{-4} T_e \times \sum_{i=1,2} \zeta_i \chi_i^{-1} E_1(\chi_i / kT) \quad (\text{II-28})$$

$$\chi_i = 13.6 n_i^{-2} (Z - a_i)^2 \quad \text{حيث:}$$

$n_i$ : العدد الكمي الرئيسي.

$\zeta_i$ : عدد الالكترونات في الحجرة .

$a_i$ : عدد الحجب الفعال .

### II.3.4 إعادة التشكيل لثلاثة أجسام

تحدث هذه العملية عند دخول إلكترونين إلى حجم التأثير للأيون حيث يلتقط أحدهما من قبل الأيون، أما الآخر فيحمل الطاقة الإضافية، و هي العملية العكسية للتآين بالتصادم الالكتروني و يعبر عنها بالشكل [25]:



تعطى العبارة العامة لمعامل إعادة التشكيل لثلاثة أجسام بالشكل التالي [30]:

$$\alpha_i(i) = \frac{g(i)}{2g_0} \left( \frac{h^2}{2\pi m K_B T_e} \right)^{3/2} S(i) \exp\left( \frac{\varepsilon_i}{K_B T_e} \right) \quad (\text{II-30})$$

حيث:

$\varepsilon_i$ : كمون التآين.

$S(i)$ : ثابت يعطى بواسطة معادلة "Lotz" [30].

$$S(i) = 6.6 \times 10^7 \frac{a_i \varepsilon_i}{T_e (eV)} \left\{ \frac{1}{\chi_i} \int_{\chi_i}^{\infty} \frac{e^{-x}}{x} dx - \frac{b_i e^{c_i}}{\chi_i + c_i} \int_{\chi_i + c_i}^{\infty} \frac{e^{-y}}{y} dy \right\} \quad (cm^3 s^{-1}) \quad (\text{II-31})$$

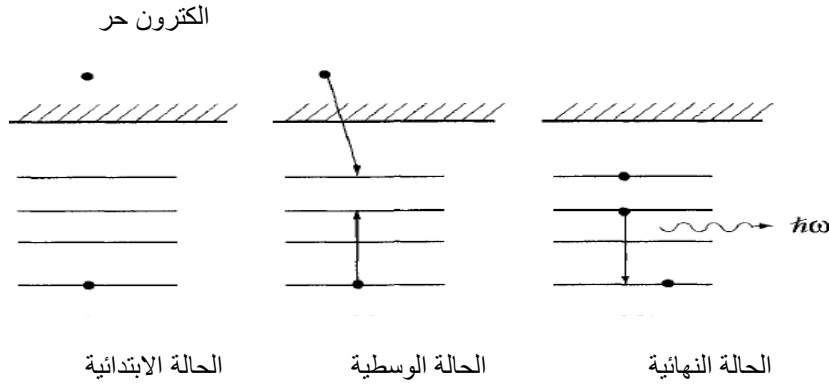
$$\chi_i = \frac{\varepsilon_i}{T_e (eV)} \text{ حيث:}$$

#### 4.4.II إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون

تحصل هذه العملية بالتقاط إلكترون حر من قبل أيون بإثارة أحد الإلكترونات المرتبطة عن طريق الرنين، ينتقل الأيون الغير مستقر إلى حالة أكثر استقرار إما بالتأين التلقائي أو بانبعث فوتون [31]. و يعبر عن إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون بالمعادلة [25]:

$$(Z, N - 1) + e \Leftrightarrow (Z, N)^{**} \Rightarrow (Z, N)^* + h\nu \quad (\text{II-32})$$

حيث:  $(Z, N)^{**}$  هي حالة ذات إثارة مضاعفة.



شكل (6-II): إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون [27].

يعطى معامل إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون  $\alpha_{iv}^{DR}$  لأيون من الحالة الابتدائية  $v$  إلى الحالة النهائية  $i$  بالشكل التالي [32]:

$$\alpha_{iv}^{DR} = \left( \frac{4\pi a_0^2 I_H}{K_B T_e} \right)^{3/2} \sum_j \frac{g_j}{2g_v} e^{-E_c/K_B T_e} \times \frac{\sum_l A_{j \rightarrow v}^a A_{j \rightarrow i}^r}{\sum_h A_{j \rightarrow h}^r + \sum_{m,l} A_{j \rightarrow m}^a} \quad (\text{II-33})$$

حيث :

$I_H$  : طاقة التأين للهيدروجين .

$K_B$  : هو ثابت بولتزمان.

$T_e$  : درجة حرارة الإلكترون .

$g_j$ : الوزن الإحصائي لـ  $(N + 1)$  حالة الكترونية مضاعفة الإثارة  $j$ .

$g_v$ : الوزن الإحصائي لـ  $N$  حالة  $v$ .

$E_c$ : طاقة الإلكترون.

$A^r, A^a$ : معاملي التأيين التلقائي و إعادة التشكيل الإشعاعي على الترتيب.

## 5.II الاتزان ونمذجة الإسكان في البلازما

يوجد عدة أنواع للاتزان في البلازما، ويمكن لمخابر دراسة البلازما الوصول إلى نوعين من الاتزان هما الاتزان الترموديناميكي المحلي (LTE) والاتزان التاجي (CE) "Coronal Equilibrium"، حيث يتعلق الاتزان في البلازما بالكثافة الالكترونية ودرجة الحرارة [33].

في الاتزان الترموديناميكي المحلي حيث الكثافة الالكترونية  $n_e > 10^{18} cm^{-3}$  تكون الآليات التصادمية هي السائدة، أما في الاتزان التاجي فتكون الكثافة الالكترونية  $n_e \leq 10^{10} cm^{-3}$  و تسود الآليات الإشعاعية. و توجد حالة وسطية بينهما تسمى بالاتزان التصادمي الإشعاعي تأخذ بعين الاعتبار كل الآليات الذرية التصادمية والإشعاعية [33]، و تتم دراسة إسكان البلازما في هذه الحالة من خلال النموذج التصادمي الإشعاعي حيث يعطى التغير في كثافة الإسكان للمستويات الذرية بالمعادلة التفاضلية [25]:

$$\frac{dn_j}{dt} = \sum_{i=1}^{N_s} n_i w_{ij} - n_j \sum_{k=1}^{N_s} w_{jk} \quad (II-34)$$

حيث:

$n_j$ : كثافة الإسكان للحالة  $j$ .

$N_s$ : العدد الكلي للحالات.

وتعطى عناصر مصفوفة الانتقال التصادمي الإشعاعي بالعلاقة [25]:

$$w_{ij} = C_{ij} + R_{ij} + I_{ij} + T_{ij} + \Gamma_{ij} + D_{ij} \quad (II-35)$$

حيث:

C: معامل الإثارة/العودة من الإثارة.

I: معامل التأيين بالتصادم.

T: معامل إعادة التشكيل لثلاثة أجسام.

R: معامل إعادة التشكيل الإشعاعي.

$\Gamma$ : معامل التآين التلقائي.

$D$ : معامل إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون.

## 6.II المطيافية

### 1.6.II الحالات و التشكيلات الإلكترونية

تعرف كل حالة بالأعداد الكمية  $n l m_l m_s$  أو  $[21] n l j m_j$ .

حيث:

$n$ : العدد الكمي الرئيسي وهو عدد صحيح.

$l$ : هو العدد الكمي للعزم الزاوي المداري و  $l = 0, 1, \dots, n-1$ .

$j$ : يمثل العزم الزاوي للازدواج سبين مدار للإلكترون  $j = l + s = l \pm \frac{1}{2}$ .

$m_l, m_s, m_j$ : الأعداد الكمية المغناطيسية و تمثل المسقط الموافق للعزم الزاوي حيث:

$$m_s = \pm \frac{1}{2} \quad \text{و} \quad m_l = -l, -l+1, \dots, +l$$

و يعطى التشكيل الإلكتروني لإلكترونات الذرة بالشكل:  $nl^N n'l'^M \dots$

حيث  $N, M$ : هو عدد الإلكترونات في ما تحت الطبقة، و حسب مبدأ باولي تُستبعد الحالات الذرية التي لها إلكترونين لهما نفس الأعداد الكمية الأربعة. و  $l = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots$  يوافق الرموز  $s, p, d, f, g, h, \dots$  على الترتيب [21].

### 2.6.II عمليات الازدواج

#### 1.2.6.II الازدواج LS

يسمى أيضا بازدواج Russell-Saunders، و يحدث عندما يكون العدد الذري صغير، بإهمال التفاعل سبين مدار في تقريب الحقل المركزي مقارنة مع التنافر الكهروستاتيكي [21] حيث:

ازدواج العزم الزاوي المداري للإلكترونات يعطى العزم الزاوي المداري الكلي  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$

ازدواج لف الإلكترونات: يعطى اللف الكلي  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$ .

و بالتالي [22]:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (\text{II-36})$$

### II.2.2.6. II الازدواج jj

يحدث هذا الازدواج في حالة الذرات الثقيلة و يعطى العزم الزاوي  $j_i$  للإلكترون  $i$  من خلال  $j_i = l_i + s_i$  و يصبح العزم الزاوي الكلي هو [22]:

$$J = \sum_i j_i \quad (II-37)$$

### II.3.6. II الرموز الطيفية

توصف الحالات الذرية باستعمال الترميز الطيفي  $^{2S+1}L_J$  حيث [21]:

$S$ : اللف الكلي.

$L$ : العزم الزاوي المداري الكلي.

$J$ : العزم الزاوي الكلي للإلكترون.

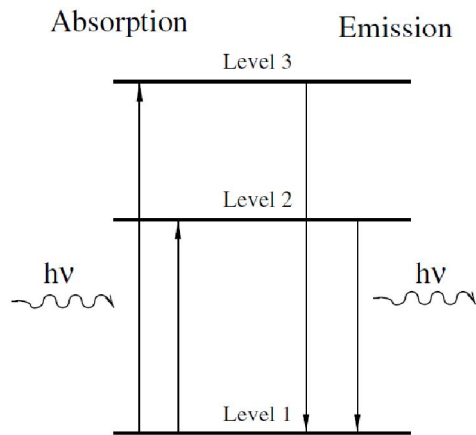
### II.4.6. II قواعد الاصطفاء

يتطلب الانتقال من سوي ذري إلى آخر (في تقريب ثنائي القطب الكهربائي) تحقيق قواعد الاصطفاء التالية:

$$\Delta J = 0, \pm 1 \text{ و } \Delta S = 0, \Delta L = \pm 1 \text{ (باستثناء الانتقال } 0 \rightarrow 0 \text{) [21].}$$

### II.5.6. II الخطوط الطيفية

يتألف خط الطيف من مجموعة من الخطوط المنفصلة و تعرف الخطوط الطيفية على أنها انتقالات بين السويات الطاقوية [35]، حيث يعطي الانتقال من السويات السفلى إلى السويات العليا طيف الامتصاص، أما الانتقال من السويات العليا باتجاه السويات السفلى فيعطي طيف الانبعاث و يوضح الشكل (7-II) عمليتي الامتصاص و الانبعاث [36].



شكل (7-II): عمليتي الانبعاث و الامتصاص [27].

و تعطى الشدة الطيفية لطيف الانبعاث من السوي  $i$  إلى السوي  $j$  بالعلاقة [35]:

$$I = N_j h\nu_{ji} A_{ji} \quad (\text{II-38})$$

حيث:

$N_j$ : عدد الذرات في الحالة  $j$  في وحدة الحجم .

$A_{ji}$ : معامل اينشتاين للانبعاث التلقائي و يعطي عدد الانتقالات في وحدة الزمن لذرة من الحالة المثارة  $j$  إلى الحالة  $i$ .

## 7.II عرض الخطوط الطيفية

يعتبر عرض الخطوط الطيفية المنبعثة من البلازما أداة هامة لدراسة انبعاث الأيونات، و هو بسيط يستعمل لإعطاء معلومات عن درجة الحرارة المحلية و الكثافة و التي لا يمكن الحصول عليها من خلال وسائط أخرى، و توجد عدة طرق لتعريض خط الطيف و هي: تعريض الخط الطبيعي، تعريض دوبلر، تعريض التصادم الإلكتروني، تعريض ستارك [22]. يشتمل التعريض الكلي على كل هذه التعريضات مع وجود نوع مهيمن بينما تعتبر بقية الآثار كتصحيحات صغيرة [21].

### 1.7.II تعريض الخط الطبيعي

و هو التعريض الناتج عن انتهاء زمن حياة الحالات الأيونية المثارة، و تعطى كثافة استطاعة طيف الإشعاع بالعلاقة [3]:

$$P_w(w) = P_0 \frac{\gamma/2\pi}{(\omega - \omega_0)^2 + (\gamma/2)^2} \quad (\text{II-39})$$

حيث :

$\omega$  هو التواتر.

$\omega_0$  هو التواتر المركزي.

$\gamma$  هو ثابت التخماد.

حيث الكثافة لها شكل لورانتز.

و يعطى العرض الكامل عند منتصف الشدة (FWHM) من خلال العبارة:  $\delta\omega_n = \gamma \Rightarrow \delta\nu_n = \gamma/2\pi$  و يسمى منتصف التعريض بتعريض الخط الطبيعي لأنه ينتج من الانبعاث التلقائي للذرة بدون أي تأثير خارجي [3].

## 2.7.II تعريض دوبلر

ينتج هذا التعريض عن الحركة الحرارية للذرات، ويعطي تأثير دوبلر التوزيع الترددي الذي له شكل غاوسي [17]:

$$P(v)dv = P_0 e^{-\beta(v-v_0)^2/v_0} dv \quad (\text{II-40})$$

$$P_0 = \frac{c}{v_0} \left( \frac{M}{2\pi K_B T} \right)^{1/2} \text{ حيث يعطى } \beta \text{ بالعلاقة: } \beta = Mc^2 / 2K_B T, \text{ و } P_0 \text{ بالعلاقة:}$$

و يعطى اتساع منحنى التوزيع بالشكل التالي [3]:

$$\delta v_D = \frac{2v_0}{c} \sqrt{(2K_B T / M) \ln 2} \quad (\text{II-41})$$

بتعويض قيم الثوابت في العلاقة (II-40) نحصل على عبارة تعريض دوبلر للخطوط الطيفية [3]:

$$\delta v_D = 7.16 \times 10^7 v_0 \sqrt{(T / M)} \quad (\text{II-42})$$

و عموما يسود هذا التعريض في حالة درجات الحرارة المرتفعة و الكثافات المنخفضة .

## 3.7.II التعريض بالتصادم الالكتروني

ينتج هذا التعريض عن تصادم الذرات أو الأيونات مع بعضها البعض في البلازما و التوقف الناتج للعملية الإشعاعية، و يوصف التوزيع الترددي للخط المعرض تعريضا تصادميا- والذي له توزيع لورانتز- من خلال العبارة [22]:

$$g(v) = \frac{\Delta v}{2\pi} \frac{1}{(v-v_0)^2 + (\Delta v/2)^2} \quad (\text{II-43})$$

## 4.7.II تعريض ستارك

ينتج هذا التعريض عندما يكون زمن التفاعل بين المظطرب و المشع أكبر من الزمن بين تصادمين حيث المظطرب هو عبارة عن أيون سرعته أقل بكثير من سرعة الإلكترونات و يصبح لهذا التعريض أهمية في حالة البلازما شديدة التأين. الآلية الأساسية لتعريض ستارك هي الحقل الكهروستاتيكي المتولد حيث يضيف هذا التفاعل بين الهزاز و المشع إلى المؤثر الحد [22]:

$$H_{elec} = -\vec{F} \vec{d} \quad (\text{II-44})$$

F: هو الحقل الكهروستاتيكي و d هو عزم ثنائي القطب الكهربائي للأيون.

## II 8. أهداف المطيافية

تسمح مطيافية البلازما بتحديد العديد من الوسائط المهمة من بينها درجة الحرارة، الكثافة الإلكترونية و الأيونية، توزيع حالات الشحنة. و يعتمد استنتاج الكثافة الإلكترونية على تحليل قياسات الكميات التالية: تعريضات و أشكال الخطوط الطيفية، الشدات المطلقة للخطوط الطيفية، الشدات المستمرة أو الشدات النسبية [36-37].

يعتبر قياس درجات الحرارة للإلكترونات و الأيونات أو الذرات من الطرق الطيفية المهمة في بحوث الانصهار، و يعتمد على: شدات الخطوط النسبية، الشدات المستمرة المطلقة، الشدات المطلقة و النسبية للبلازما السميكة ضوئياً [37].

### خاتمة

ناقشنا في هذا الفصل المعطيات الذرية لمختلف الآليات الأساسية في البلازما. و تتمثل هذه المعطيات في الطاقات و المقاطع الفعالة و المعاملات لهذه الآليات الإشعاعية و التصادمية بما في ذلك الانتقال التلقائي و المحرض، الامتصاص، التأين، الإثارة، إعادة التشكيل بمختلف أنواعه. كما تعرضنا إلى النموذج التصادمي الإشعاعي الذي يدرس إسكان المستويات بالاعتماد على معاملات الآليات الذرية. ثم تطرقنا إلى تعريض الخطوط الطيفية ذات الأهمية الكبيرة في دراسة انبعاث البلازما.



# الفصل الثالث

برامج حساب المعطيات الذرية

## مقدمة

تتطلب دراسة بلازما المختبرات، الفيزياء الفلكية و الانصهار الحراري النووي معرفة سابقة للبنية الذرية مثل الطاقات و الدوال الموجية للمستويات المختلفة و كذلك المقاطع الفعالة و المعاملات للآليات الأساسية في البلازما. لكن الحساب المباشر لهذه المعطيات يكون معقدا بالنسبة للذرات متعددة الإلكترونات و أيضا للأعداد الكمية الكبيرة. في هذه الحالة يتم اللجوء إلى برامج الحساب التي تعتمد على طرق تقريبية بما فيها النسبية و الغير نسبية على سبيل المثال: [38] Hullac، [39] Cowan، [20] ATOM، [20] MZ، [40] MCHF، [40] MCDF، [24] Superstructure، برنامج التفاعل الغير نسبي للتشكيلة CIV3 CIV3 [41]، برنامج النسبية التام SZ [2] حيث سنتطرق إلى بعض هذه البرامج في هذا الفصل.

## 1.III برنامج Hullac

طور برنامج Hullac من طرف "Bar-Shalom" سنة 1998. و كلمة Hullac هي اختصار لـ (Hebrew University Lawrence Livermore Atomic Code) [38]. وهو عبارة عن برنامج متكامل لحساب البنية الذرية و المقاطع الفعالة و المعاملات للآليات الذرية التصادمية و الإشعاعية. إن هذه المعطيات مطلوبة من أجل محاكاة أطياف الانبعاث و الامتصاص للبلازما الغير موجودة في التوازن الترموديناميكي المحلي (non-LTE plasma) من خلال النموذج التصادمي الإشعاعي (CRM) [42]. و يعتمد هذا البرنامج على حسابات ميكانيك الكم النسبي التي تتضمن تفاعل التشكيلة من خلال معادلة ديراك، حيث يستعمل الكمون المركزي المحلي لحساب المدارات القطرية، و تقريب الموجة المشوهة "distorted wave" (DW) من أجل الآليات المستمرة [2]. و تعود فعاليته إلى الحسابات و الطرق الأصلية إذ تحسب العمليات المناسبة بنفس الدوال الموجية. أنشئ هذا البرنامج و استعمل منذ سنوات عديدة، و لكن لحد الآن لا يوجد ترابط و تمثيل عميق له [42].

Hullac هو تناسق لمجموعة من البرامج تستعمل نفس المجموعة من الدوال الموجية لحساب الآليات المختلفة بنفس الدقة. تعد نظرية الاضطراب من الرتبة الأولى مع تقريب الحقل المركزي الهيكل النظري لهذا البرنامج و تعد الدوال الموجية ذات الرتبة صفر حلول لمعادلة ديراك. يقتر الهاميلتون في أساس هذه الدوال الموجية (تفاعل التشكيلة)، و الأشعة الخاصة الناتجة تستعمل لكل الآليات و يضاف إلى الطاقات حد برايت و التصحيحات "Quantum Electro Dynamics" (QED) [42].

تتكون المدخلات (input) فقط من تشكيلات مختلف الأيونات في النموذج، و من قائمة آليات موصوفة بكلمات مفتاحية في الشكل الحر للبرنامج. أما المخرجات (output) فتتضمن أحد المعطيات التالية: الدوال الموجية القطرية للذرات وحيدة الإلكترون، مستويات الطاقة للبنية الدقيقة، معاملات التشكيلة المختلطة، احتمالات الانتقال الإشعاعي، المقاطع الفعالة و معاملات الانتقال للتأين و الإثارة بالتصادم، التأين الضوئي أما العمليات العكسية فتعطى من خلال معادلات التوازن (detailed balance) التي تربط بين العملية المباشرة و العملية العكسية لها. يتم الحصول على إسكان المستويات عند حل معادلات المعاملات [42].

### 1.1.III الجانب النظري

يعتمد هذا البرنامج على المفاهيم النسبية من خلال دراسة البنية الذرية، حيث الحالات الذرية النسبية تعطى من هاميلتون ديراك متعدد الالكترونات، و المتضمن لحد برايت و تصحيحات QED بالشكل التالي [42]:

$$H = H' + H_{Breit} + H_{QED} \quad (III-1)$$

حيث يكتب  $H'$  في نظام الوحدات الذرية بالشكل التالي :

$$H' = \sum_i \left[ h_i^D - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (III-2)$$

حيث:

$h_i^D$ : هو مؤثر ديراك لإلكترون حر .

$Z$ : الشحنة النووية .

باستعمال تقريب الحقل المركزي ، فإن  $H'$  يمكن كتابته وفق الشكل [42]:

$$H' = H_0 + H_1 \quad (III-3)$$

حيث يتضمن المؤثر  $H_0$  بالإضافة إلى هاميلتون ديراك المتعدد الالكترونات، الكمون القطري الذي يمثل المتوسط الكروي للتفاعل بين الإلكترونات، و يكتب بالشكل التالي [42]:

$$H_0 = \sum_i \left[ h_i^D + U(r_i) \right] \quad (III-4)$$

و بالتالي فإن الاضطراب  $H_1 = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + \sum_i \left[ \frac{Z}{r_i} - U(r_i) \right]$  صغير.

تسمى المركبات الرباعية لسبينور وحيد الإلكترتون و التي هي حلول لمعادلة ديراك :

$$\left[ h_i^D + U(r_i) \right] \varphi_{nljm} = \varepsilon_{nlj} \varphi_{nljm}(r) \quad (III-5)$$

بالمدارات النسبية و التي يمكن وصفها في فضاء الأعداد الكمية  $nljm$ ، أين  $l$  هو العدد الكمي للعزم الزاوي المداري لمركبات السبينور العلوية [42].

$U(r_i)$ : هو الكمون المتضمن لأفعال الحجب للالكترونات، و يؤخذ في العديد من التطبيقات على أنه كمون هارتري - فوك لتشكيلات متتالية. حيث يبسط هذا الاختيار توسع مسألة  $N$  جسم ذلك لأن العديد من الحدود في السلاسل سوف تزول تماما. و مع ذلك فإن كمون هارتري- فوك غير محلي و يعقد توليد الدوال الموجية الشعاعية من الرتبة صفر [42].

**2.1.III الجانب العملي**

يتكون برنامج Hullac من ستة برامج ضمنية و هي : COLION، COLEX، RELAC، ANGLAR، PHOTION و COLRAD حيث نتائج الحساب تكون عبر مراحل مختلفة خلال هذه البرامج [42].

ANGLAR: يقرأ هذا البرنامج: اسم الذرة، مجموعة التشكيلات الغير نسبية و مجموعة الآليات الذرية ثم ينشئ إثر ذلك: قائمة التشكيلات النسبية، مستويات البنية الدقيقة مع الأعداد الكمية الموافقة لها، و كذلك قائمة التكاملات الضرورية للهاميلتون و الآليات المطلوبة، و بما أن ANGLAR هو أول برنامج في سلسلة البرامج الضمنية فإن مدخلات هذا البرنامج تعطي توجيهات للبرامج اللاحقة [42].

RELAC: يقرأ قائمة التشكيلات و المستويات من ANGLAR. و يمكن أن يختصر العديد من الكمونات، والتي يقلل كل منها طاقات مجموعة التشكيلات المعطاة. و باستعمال المدارات القطرية المتحصل عليها بواسطة الكمون المختصر و المعاملات الزاوية المعطاة من ANGLAR فإن مصفوفة الهاميلتون تبنى و تقطر وفق الطاقات و الدوال الموجية للتشكيلة النسبية المختلطة [42].

يقوم البرنامج بعد ذلك بحساب احتمالات الانتقال الإشعاعي المطلوبة، كما يحسب الدوال الموجية المستمرة و يستعملها لتقدير معاملات التأين التلقائي.

COLEX: يحسب المقاطع الفعالة للإثارة بالتصادم من خلال مجموعة من البرامج COLEX 1، COLEX 2، COLEX 3 التي تحسب التكاملات Q التصادمية و قوة التصادم  $\Omega(x)$ .

COLION: يحسب قوى التصادم للتأين بالتصادم لمجموعة من الطاقات.

PHOTION: يحسب المقاطع الفعالة للتأين الضوئي لمجموعة من الطاقات.

COLRAD: يجمع كل المعاملات و يحل معادلات المعاملات للنموذج التصادمي الإشعاعي.

تكمّن قوة برنامج Hullac في قدرته على معالجة مسائل طويلة تتضمن المئات من المستويات و في بعض الأحيان الملايين من المقاطع الفعالة للآليات المختلفة [42].

**2.III برنامج Cowan**

يدخل برنامج Cowan ضمن برامج الفيزياء الذرية النظرية "Theoretical Atomic Physics" (TAPS). إن الهدف من تطوير هذا البرنامج هو تسهيل العمل وإنتاج ملفات معطيات بإمكانها التعامل مع البرامج الأخرى بسهولة. يحسب برنامج Cowan الدوال الموجية، مستويات الطاقة، قوة الهزاز، قوة التصادم، المقاطع الفعالة للتأين الضوئي والعديد من الكميات الأخرى للأيونات والتشكيلات [39].

يحسب هذا البرنامج الدوال الموجية متعددة التشكيلات لهارترى - فوك متضمنا التصحيحات النسبية وشعاع ازدواج العزم الزاوي، و يعد هذا البرنامج هو أساس برامج الفيزياء الذرية النظرية [39].

### 1.2.III الجانب النظري

يعتمد برنامج Cowan على حل معادلة شرودينجر لذرة متعددة الالكترونات في تقريب امتداد متعدد التشكيلات مع معالجة التصحيحات النسبية من خلال نظرية الاضطراب. تستعمل الحلول الخاصة لتقدير احتمالات الانتقال الإشعاعي لثنائي القطب الكهربائي، رباعي القطب الكهربائي و ثنائي القطب المغناطيسي و كذلك المقاطع الفعالة للتصادم الإلكتروني و معاملات المتوسط الماكسويلي في تقريب بورن للموجة المستوية. و يعطى الهاميلتون  $H$  لذرة متعددة الالكترونات بالشكل التالي [39]:

$$H = H_{kin} + H_{e-nuc} + H_{e-e} + H_{s-o} \quad (III-6)$$

$$= -\sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2z_0}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i$$

حيث:  $r_i$  هي بعد الإلكترون  $i$  عن النواة و  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$  هي المسافة بين الإلكترون  $i$  و  $j$ .

$$\xi_i(R) = \frac{\alpha^2}{2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right\rangle$$

النتيجة عن النواة و بقية الإلكترونات.

إن دالة الموجة متعددة الالكترونات تعطى بدلالة سبينورات باولي وحيدة الالكترون  $\phi_i(\vec{x})$  والتي بدورها تفصل إلى أجزاء: قطرية، زاوية و لفية بالشكل التالي [39]:

$$\phi_i(\vec{x}) = \frac{1}{r} P_{n_i, l_i}(r) Y_{l_i, m_i}(\theta, \phi) \chi_{m_i}(\sigma) \quad (III-7)$$

حيث تعطى الدوال الموجية ضد التناظرية من خلال محدد سلاتر.

و تكون الدالة القطرية  $P_{n_i, l_i}(r)$  عبارة عن حل المعادلة التالية [43]:

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) \right] P_i(r) = \epsilon_i P_i(r) \quad (III-8)$$

حيث:  $V^i$  هو الكمون المركزي الذي يؤثر على الإلكترون  $i$ . و يعطى الكمون المختصر تبايريا.

### 2.2.III الجانب العملي

يتكون برنامج Cowan من ثلاث برامج ضمنية وهي: RCN، RCN2 و RCG [39].

RCN: يحسب الدوال الموجية القطرية وحيدة التشكيلة.

RCN2: يحسب التكاملات القطرية متعددة التشكيلة، تكاملات ثنائي القطب و تكاملات Bessel.

RCG : يحسب احتمالات الانتقال و قوى التصادم .

يوجد في RCN اختيار بين أربعة تقريبات لطريقة هارترى- فوك و هي : هارترى (H)، هارترى- فوك - سلاتر (HFS)، هارترى بالإضافة إلى التبادل الإحصائي (HX)، هارترى - سلاتر (HS). و تعتبر طريقة (HX) فعالة حسابيا [39].

### 3.III برنامج ATOM

يستعمل هذا البرنامج لحساب الدوال القطرية و الخصائص التصادمية و الإشعاعية للذرات المتعادلة و الأيونات الموجبة بما فيها: قوى الهزاز، احتمالات الانتقال، المعاملات و المقاطع الفعالة للتأين، التصادم و إعادة التشكيل بأنواعه، بمعنى خصائص التفاعلات بين الفوتونات و الإلكترونات. و تستعمل عدة تقريبات في برنامج ATOM من بينها: بورن، كولوم - بورن بالتبادل، طريقة K-matrix، تمثيل الموجة الجزئية. هذا البرنامج مكتوب في لغة FORTRAN-77 [20].

#### 1.3.III الجانب النظري

تحسب احتمالات الانتقال و المقاطع الفعالة لمختلف الآليات الذرية في برنامج ATOM من خلال نظرية الاضطراب من الرتبة الأولى. و تمثل دالة الموجة الكلية بتركيب خطي ضد تناظري للدوال الموجية وحيدة الإلكترون  $\psi(r)$  حيث تكتب بالشكل التالي [20]:

$$\psi(r) = \frac{1}{r} P(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \chi_{m_s}(\sigma) \quad \text{(III-9)}$$

و يعطى المقطع الفعال لعدد كبير معطى  $\kappa$  لإلكترونات الصدم على شكل جداء الأجزاء الزاوية و القطرية بالشكل التالي:

$$W = \sum_{\kappa} Q_{\kappa} R_{\kappa} \quad \text{(III-10)}$$

حيث :

$Q_{\kappa}$ : معاملات زاوية.

$R_{\kappa}$ : تكاملات قطرية، و تتعلق بالدوال الموجية القطرية للإلكترونات في الحالات الابتدائية و النهائية.

#### 2.3.III الجانب العملي

يعتمد هذا البرنامج على ملف A.TRN (Atomic Transitions) الذي يحتوي على معلومات وسائط الإدخال التي تتمثل في:  $Z_n, n_i, l_i, z$  و مجالات الحرارة  $\beta$  ل- $\sigma$  و  $\langle v \sigma \rangle$ ، و يحوي مفتاح المهمة ستة أرقام إضافة إلى الحرف B. يتضمن ملف A.LIB (Atomic energy LIBrary) معلومات حول طاقات الحالات  $n_i, l_i$  [20].

يقرأ البرنامج التحتي subr. GENER المعلومات من الملف A.TRN و يحسب الدوال الموجية القطرية  $P_{nl}(r)$  باستعمال subr. Core، RFU و ENLIB. يعتمد البرنامج بعد حساب الدوال  $P(r)$  للحالات الابتدائية و النهائية على المفتاح المعطى للمهمة من أجل حساب مختلف الخصائص الإشعاعية و التصادمية للذرات و الأيونات، حيث تحسب المقاطع الفعالة لمختلف الآليات و من خلالها تحسب المعاملات  $\langle \nu \sigma \rangle$ . ثم ترسل النتائج النهائية إلى الملف (Atomic Data) A.DAT و تخزن في الملف A.BNK [20].

يختص برنامج ATOM في حساب الدوال الموجية القطرية و الخصائص التصادمية و الإشعاعية للذرات و الأيونات التي شحنتها النووية  $Z_n \leq 99$  و العدد الكمي الرئيسي لها  $n \leq 9$  [20].

### 4.III برنامج MZ

يهدف برنامج MZ (Méthode de développement en Z) إلى حساب الطاقات الذرية، احتمالات الانتقالات، التأين التلقائي، الانتقالات الإشعاعية و الشدات النسبية للخطوط ذات الإثارة المضاعفة. يستعمل هذا البرنامج نظرية الاضطراب مع دوال الأساس لشييه الهيدروجين، بمعنى طريقة النشر بالوسيط  $1/Z$  حيث  $Z$  هي الشحنة النووية للأيون. إن هذه الطريقة هي الأكثر فعالية للأيونات المتعددة الشحن ذات عدد إلكترونات  $N \ll Z$ . حيث:

تمر طريقة النشر لـ  $Z$  عبر ثلاث مراحل [20]:

- حساب معاملات النشر لـ  $Z$  باستعمال دوال كولوم.
- حساب الخصائص الذرية باستعمال هذه المعاملات.
- حساب التصحيحات النسبية من الدرجة العالية، التصحيحات الإشعاعية وبعض التصحيحات التجريبية الممكنة.

### 1.4.III الجانب النظري

يقسم النظام الذري إلى مجموعة الإلكترونات الخارجية  $\gamma_n$  و مجموعة الإلكترونات القلبية  $\gamma_c$  و تكتب حالة النظام بالشكل التالي [20]:

$$aJ = \gamma_c (L_c S_c) \gamma_n (L_n S_n) L S J \quad (III-11)$$

تعطى مصفوفة الطاقة E بالعبارة التالية [20]:

$$E(aJ, a'J) = [E_N + E_R] \delta(SL, S'L') + E_S + E_x \delta(a, a') \quad (III-12)$$

حيث توافق المصفوفات:  $E_N$ ،  $E_R$ ،  $E_S$  الطاقة الغير نسبية، الجزء اللفي المستقل و الجزء اللفي المستقل لبرايت باولي على الترتيب. و يدل الحد  $E_x$  على التصحيح شبه التجريبي الإضافي.

### 2.4.III الجانب العملي

يستدعي البرنامج إيجاد ملفين للمعلومات M.BAS و M.INF.

M.INF: يتضمن هذا الملف المعلومات المطلوبة لحساب عناصر المصفوفة للطاقة و الانتقالات.

M.BAS: يتكون من جزأين، الأول خاص بقيم وسائط المسألة المعطاة أما الثاني فيتضمن الحالات المعتمدة في الدراسة.

بإجراء تنفيذ البرنامج تعطى النتائج في ملف إخراج يسمى M.DAT [20].

### 5.III برنامج MCHF

يهدف برنامج MCHF (Multi Configuration Hartree Fock) إلى حساب مستويات الطاقة و الدوال الموجية الموافقة في الحالات الأيونية و الذرية من خلال متعدد التشكيلات لهارترى-فوك (LS) أو في تقريب برايت-باولي (LSJ) [40]. و يحدد هذا البرنامج الدوال القطرية التي تعرف مدارات حالات التشكيلة في تمديد الدالة الموجية الغير نسبية لنظام متعدد الإلكترونات. و يقتصر على حساب الطاقات و احتمالات الانتقال إما عن طريق نموذج LS الغير نسبي أو من خلال النموذج النسبي LSJ لبراييت-باولي. و يعتبر فعالا في دراسة الترابطات و في المسائل التي تكون فيها الأفعال النسبية صغيرة يمكن تضمين التصحيحات النسبية من خلال تقريب برايت - باولي [43].

### 1.5.III الجانب النظري

إن أي خاصية ذرية هي عبارة عن القيمة المتوقعة لمؤثرها إذ تعطى وفق الشكل التالي:

$$\langle property \rangle = \langle \psi_f | OP | \psi_i \rangle \quad (III-13)$$

تتطلب حسابات متعدد التشكيلات اختيار مجموعة حالات التشكيلة التي تحدد نشر دالة الموجة، و تصف دالة الموجة الكلية جملة متعددة الإلكترونات تسمى  $\gamma$  والتي تعطى بالشكل التالي [43]:

$$\psi = \sum_{i=1}^m c_i \Phi(\gamma_i LS) \quad (III-14)$$

حيث  $\Phi(\gamma LS)$  هي دالة الحالة للتشكيلة و تعطى من أجل نظام يحوي N إلكترون بالشكل التالي:

$$\Phi(\gamma_i LS) = A \left\{ \left\{ \prod_{j=1}^N R(n_j l_j; r_j) \right\} \left| l_1, l_2, \dots, l_N \right\rangle \gamma_i LS \right\} \quad (III-15)$$

و هي جداء منظم و ضد تناظري للعامل القطري و العامل اللفي-الزاوي.

و بتعويض (III-14) في (III-13) ينتج:

$$\langle property \rangle = \sum_{i,i'} c_i c_{i'} \langle \gamma_i LS | OP | \gamma_i LS \rangle \quad (III-16)$$

### 2.5.III الجانب العملي

يتكون برنامج MCHF لحساب البنية الذرية من مجموعة من البرامج و المرفقات و المكتبات حيث ينجز كل برنامج حساب خاص للبنية الذرية. ويمكن تصنيف هذه البرامج إلى ثلاث مجموعات [43]:

Angular: و يتكون من MLTPOL، BREIT، NONH.

Radial: و يحتوي MCHF88، CI، LSTR، LSJTR.

General: و يتضمن GENCL.

GENCL: يولد هذا البرنامج مختلف التشكيلات و الازدواج المتعلقة بها إما من خلال قوائم، استبدالات معطاة أو من بعض القواعد العامة. و هو برنامج جيد في النمط تفاعلي و يتوفر على مساعدات أولية [43].

NONH: ينجز التكاملات الزاوية للمؤثرات الغير نسبية مع إمكانية عدم تعامد المدارات. تصنف مجموعة التكاملات بحيث يمكن كتابة الطاقة بدلالة قائمة واحدة للتكاملات [43].

MCHF88: يحسب الدوال القطرية و معاملات النشر من أجل نشر الدوال الموجية متعددة التشكيلات لهارتري-فوك.

MLTPOL: ينجز التكاملات الزاوية لمؤثرات انتقال واحد أو عدة انتقالات.

BREIT: يحسب التكاملات الزاوية من أجل مؤثرات برايت باولي المختارة. و يشترط أن تكون المدارات متعامدة.

CI: يحسب هذا البرنامج القيم الخاصة و الأشعة الخاصة لمصفوفة التفاعل في التقريب الغير نسبي أو في تقريب برايت-باولي.

LSJTR: يحسب هذا البرنامج معطيات طول الانتقال في صياغة برايت-باولي النسبية [43].

### 6.III برنامج Superstructure

أنشأ و طور برنامج Superstructure من طرف "Eissner et al" (1969) [44]. ويهدف إلى حساب خصائص البنية الذرية من خلال إيجاد طاقات الحالات الشريطية في الازدواج LS و الازدواج المتوسط (intermediate coupling) بالإضافة إلى المعطيات الذرية الإشعاعية المرفقة بهذه الحالات [45]. يسمح هذا البرنامج بحساب معاملات الازدواج بين الحدود و كذلك المعلومات الإشعاعية للانتقالات التي تتم عبر مراحل [44].

تعطى معادلة شرودينجر لجملة متعددة الإلكترونات بالشكل التالي [24]:

$$H\psi(\bar{x}_1 \dots \bar{x}_N) = E\psi(\bar{x}_1 \dots \bar{x}_N) \quad (\text{III-17})$$

حيث يكتب الهاميلتون  $H$  بالشكل:

$$H = -\sum_{i=1}^N \left( \frac{\nabla_i^2}{2} + V_i(r_i) \right) + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (\text{III-18})$$

يستعمل برنامج Superstructure الكمونات المتوسطة الإحصائية من أجل حساب الدوال الموجية وحيدة الإلكترون. يحاكي هذا الكمون بالنسبة للإلكترون جذب النواة و متوسط التنافر لبقية الإلكترونات. و يكتب الهاميلتون  $H_0$  بالشكل [24]:

$$H_0 = -\sum_{i=1}^N \left( \frac{\nabla_i^2}{2} + V_i(r_i) \right) \quad (\text{III-19})$$

حيث :

$V_i(r_i)$  هو الكمون المركزي الذي يؤثر على الإلكترون  $i$ .

نعرف :  $Z_i(r_i) = r_i V_i(r_i)$  حيث  $Z_i(r_i)$  هي الشحنة التي تواجه الإلكترون.

المعادلة (III-19) تحقق استقلالية الإلكترونات فيما بينها. و بالتالي يمكن كتابة المؤثر  $H_0$  على شكل جمع مؤثرات بالشكل التالي [24]:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_i(\bar{x}_i) \quad (\text{III-20})$$

حيث:

$$h_i(\bar{x}_i) = -\frac{\nabla_i^2}{2} - V_i(r_i) \quad (\text{III-21})$$

$h_i$ : يوافق معادلة شرودينجر متعددة الإلكترونات حيث من أجل دالة موجية خاصة  $\varphi_i(\bar{x}_i)$  [24]:

$$h_i \varphi_i(\bar{x}_i) = \varepsilon_i \varphi_i(\bar{x}_i) \quad (\text{III-22})$$

$\bar{x}_i = (\bar{r}_i, \sigma_i)$  تمثل الإحداثيات الفضائية  $\bar{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$  و متغير السبين  $\sigma_i = \pm \frac{1}{2}$ .

و يمكن الحصول على الدالة القطرية  $P_{n_i l_i}(r_i)$  بعد فصل دالة الموجة  $\varphi_i(\bar{x}_i)$  إلى جزء قطري، جزء زاوي و جزء لفي من خلال الحل العددي للمعادلة التالية:

$$\left( \frac{d^2}{dr_i^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r_i^2} + 2V_i(r_i) + 2\varepsilon_{n_i l_i} \right) P_{n_i l_i}(r_i) = 0 \quad (\text{III-23})$$

تكتب دالة الموجة متعددة الإلكترونات الموافقة للتشكيل C على شكل محدد سلاتر، أما طاقة التشكيل C

$$\text{للمؤثر } H_0 \text{ فتعطى بالعلاقة: } E_0^C = \sum_{i=1}^N \varepsilon_{n_i l_i}$$

بكتابة مؤثر الطاقة H بالشكل:  $H = H_0 + W$

حيث W هو اضطراب يكتب بالشكل التالي:

$$W = \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} - \sum_i \left( \frac{Z}{r_i} - V_i(r_i) \right) \quad (\text{III-24})$$

بتطبيق نظرية الاضطراب من الرتبة الأولى يتم الحصول على التصحيح في الطاقة للتشكيل  $C_0$  من خلال دالة الموجة من الرتبة صفر. تتضمن دالة الموجة متعددة التشكيلات مزيج لمجموعة من التشكيلات، ويستدعي الحصول على الدوال الموجية الخاصة متعددة التشكيلات تقطير المؤثر H الغير نسبي باستغلال الأزواج LS. يعتمد برنامج Superstructure على إجراء التصحيحات النسبية بعد تقطير المصفوفة الغير نسبية للطاقة في تقريب برايت - باولي. و يكتب المؤثر  $H_{BP}$  بالشكل التالي :

$$H_{BP} = H_{NR} + W_R \quad (\text{III-25})$$

باستعمال الدوال الموجية متعددة التشكيلات الناتجة، يحسب برنامج Superstructure كل الاحتمالات الإشعاعية (ثنائي القطب الكهربائي، ثنائي القطب المغناطيسي، رباعي القطب الكهربائي) بين الحدود (الجزء الغير نسبي)، و بين الحدود (الجزء النسبي). و من أجل حساب التصادم إلكترون - أيون، يحسب هذا البرنامج من أجل كل مستوي خاص معاملات الحدود المختلطة (معامل حد الأزواج).

### 7.III برنامج CIV3

يولد هذا البرنامج الدوال الموجية لتفاعل التشكيلات و التي تستعمل لاحقا لحساب قوة الهزاز للانتقالات في الأنظمة الذرية. من خلال [41]:

- يتم إعداد مصفوفة الهاميلتون حيث تجرى التكاملات الزاوية باستعمال جبر Racah من خلال برنامج ACQV. و بما أن الدوال القطرية تكتب على شكل جمع لمدارات من نوع سلاتر فالتكاملات تجرى تحليليا.
- بتقطير مصفوفة الهاميلتون يتم الحصول على القيم الخاصة و الأشعة الخاصة.
- يمكن لمعاملات الدوال القطرية أن تتغير عند استعمال قيمة خاصة ( أو تركيب مناسب لعدة قيم خاصة) كدالة يرجى تخفيضها إلى أدنى حد ممكن.

- يمكن تضمين تشكيلات إضافية من أجل تحديد الدوال الموجية لتفاعل التشكيلات لحالتين أو أكثر.
- ويمكن حساب قوى الهزاز للانتقالات بين الحالات.
- يمكن إنجاز الحسابات السابقة لمجموعات أصغر من التشكيلات.

و يتعلق زمن التنفيذ بـ:

- حجم الذرة.
- مدى التقريب المطلوب.
- عدد التشكيلات المعطاة.
- عدد دوال الأساس في كل دالة قطرية [41].

### 8.III برنامج FAC

يعد برنامج FAC (Flexible Atomic Code) من ضمن البرامج المتوفرة لحساب البنية الذرية و المعاملات و المقاطع الفعالة لمختلف الآليات الذرية الأساسية في البلازما بما فيها الإشعاعية و التصادمية. يتمكن هذا البرنامج من إجراء الحساب من أجل العدد الكمي  $n$  الكبير لمستويات الطاقة، الانتقالات الإشعاعية، الإثارة، التأين، إعادة التشكيل الإشعاعي، إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون، إعادة التشكيل لثلاثة أجسام. يعتمد برنامج FAC في حسابه للبنية الذرية على تفاعل التشكيلات النسبية مع أساس الدوال الموجية للجسيمات الحرة [2].

### خاتمة

تناولنا في هذا الفصل مجموعة من برامج حساب البنية الذرية التي تهدف إلى حساب الطاقات و المعاملات و المقاطع الفعالة لمختلف الآليات الذرية الأساسية في البلازما. تمثلت هذه البرامج في: CIV3، Superstructure، MCHF، MZ، ATOM، Cowan، Hullac حيث يكمن الاختلاف بينها في الطرق و التقريبات المعتمدة لإجراء الحساب، و كذلك نوع الذرات و الأيونات المراد دراسة بنيتها الذرية. كما تطرقنا إلى برنامج FAC بشكل مختصر حيث سنقوم في الفصل الرابع بدراسة هذا البرنامج من الجانب النظري ثم إجراء تطبيق على بعض الذرات و الأيونات.



إِلْفَصْلِكُ إِلْسَّ إِلْبَعَّ

تطبيع برنامج FAC على بعض  
الذرات و الأيونات

## مقدمة

يعتبر برنامج FAC [2] من أهم و أحدث برامج حساب المعطيات الذرية الضرورية لدراسة بلازما المختبرات، الفيزياء الفلكية و الانصهار الحراري النووي، نظرا لطواعيته و سهولة استخدامه و الحصول عليه .

سنتطرق في هذا الفصل إلى دراسة هذا البرنامج من الناحية النظرية و التطبيقية أين سنجري تطبيق على حساب بعض المعطيات الذرية للهيدروجين (H I)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) و الحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV). تتمثل هذه المعطيات في الطاقات و الانتقالات الإشعاعية بين المستويات. بعد ذلك سنقوم بمقارنة مختلف النتائج المتحصل عليها من برنامج FAC بنتائج NIST [46-47].

## 1.IV برنامج FAC

طور برنامج FAC (Flexible Atomic Code) من طرف "Ming-Feng Gu" [2] حيث يعتبر مجموعة متكاملة لحساب مختلف الآليات الذرية الإشعاعية و التصادمية بما فيها مستويات الطاقة ، معاملات الانتقالات الإشعاعية ، الإثارة بالتصادم و التأين بالتصادم ، التأين الضوئي ، التأين التلقائي ، إعادة التشكيل الإشعاعي و إعادة التشكيل ثنائي الإلكترون ، كما يتضمن هذا البرنامج نموذج تصادمي إشعاعي لتكوين أطياف البلازما تحت شروط فيزيائية مختلفة.

يعتمد حساب البنية الذرية في برنامج FAC على تفاعل التشكيلات النسبية مع أساس الدوال الموحية للجسيمات الحرة حيث تشتق هذه الدوال من الكمون المركزي المحلي الذي يحدد بشكل توافقي ذاتي لتمثيل الحجب الإلكتروني للكمون النووي. تأخذ الأفعال النسبية بعين الاعتبار باستعمال مؤثر ديراك كولوم ، و من خلال تفاعل برايت تعتبر الأفعال الكمية الإلكتروديناميكية "Quantum Electrodynamics" (QED) ذات الرتب العالية في حدود الطاقة الصفرية للتبادل الفوتوني. تعالج الآليات المستمرة في تقريب الموجة المشوهة "Distorted Wave" (DW) [2].

## 1.1.IV الجانب النظري

تعطى مستويات الطاقة لأيون يحوي N إلكترون من خلال تقطير الهاميلتون النسبي H الذي يكتب بالشكل التالي [2]:

$$H = \sum_{i=1}^N H_D(i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (IV-1)$$

حيث  $H_D(i)$  هو مؤثر ديراك لإلكترون وحيد للكمون الناتج عن الشحنة النووية.

يعتبر أساس الحالات  $\Phi_v$  جمع لجداء N من سبينور ديراك لإلكترون وحيد  $\varphi_{nkm}$  حيث:

$$\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix} \quad (IV-2)$$

حيث:  $\chi_{\kappa m}$  دالة للزاوية - السبين.

n: العدد الكمي الرئيسي.

κ: العدد الكمي للعزم الزاوي النسبي .

m: مسقط العزم الزاوي الكلي z .

و تعطى الدوال الموجية بالشكل التالي:

$$\psi = \sum_v b_v \Phi_v \quad (IV-3)$$

حيث  $b_v$  هي معاملات الاختلاط "mixing coefficients" المعطاة من خلال تقطير الهاميلتون الكلي.

و تحقق المركبات  $P_{n\kappa}$ ،  $Q_{n\kappa}$  معادلة ديراك المزدوجة للكمون المركزي المحلي  $V(r)$  التي تكتب بالشكل التالي [2]:

$$\begin{aligned} \left( \frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{n\kappa} &= \alpha \left( \varepsilon_{n\kappa} - V + \frac{2}{\alpha^2} \right) Q_{n\kappa} \\ \left( \frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{n\kappa} &= \alpha (-\varepsilon_{n\kappa} + V) P_{n\kappa} \end{aligned} \quad (IV-4)$$

حيث  $\alpha$ : هو ثابت البنية الدقيقة.

$\varepsilon_{n\kappa}$ : القيم الخاصة للطاقة للمدارات القطرية .

من أجل تبسيط المعادلة (IV-4) يجب إجراء بعض التحويلات:

$$P_a = \xi_a(r) F_a(r)$$

$$\xi_a(r) = \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{2} [\varepsilon_a - V(r)]}$$

$$Q_a = \frac{\alpha^2}{2\xi_a^2} \left( \frac{d}{dr} P_a + \frac{\kappa}{r} P_a \right) \quad (IV-5)$$

باعتبار التحويلات السابقة تصبح المعادلات (IV-4) بالشكل التالي [2]:

$$\frac{d^2}{dr^2} F_a(r) + \left\{ 2[\varepsilon_a - U(r)] - \frac{\kappa(\kappa+1)}{r^2} \right\} F_a(r) = 0 \quad (IV-6)$$

حيث  $U(r)$ : هو الكمون الفعال.

من المناسب إجراء تحويلات أخرى لحل المعادلة (IV-6) أين نضع:  $t = t(r)$

حيث:  $t(r)$  دالة للمسافة القطرية.

$$F_a(r) = \left( \frac{dt}{dr} \right)^{-1/2} G_a(t) \quad (IV-7)$$

بالتالي تكتب المعادلة التفاضلية لـ  $G(t)$  بالشكل التالي [2]:

$$\frac{d^2}{dt^2} G_a(t) = \left( \frac{dt}{dr} \right)^{-2} G_a(t) \left\{ \frac{\kappa(\kappa+1)}{r^2} - 2[\varepsilon_a - U(r)] + \frac{1}{2} \left( \frac{dt}{dr} \right)^{-1} \frac{d^3 t}{dr^3} - \frac{3}{4} \left( \frac{dt}{dr} \right)^{-2} \left( \frac{d^2 t}{dr^2} \right)^2 \right\} \quad (IV-8)$$

و تتم مناقشة حلول هذه المعادلة حسب نوع  $t(r)$ .

نميز نمطين لـ  $t(r)$ :

الأول هو تحويل لوغاريتمي:  $t(r) \propto \ln(r)$  و يستعمل في برنامج MCHF [40]، و الثاني يعطى بالشكل:  $t(r) = c_1 r + c_2 \ln(r)$  و يستعمل في برنامج ATOM [20].

## 2.1.IV الخصائص العملية

يتميز برنامج FAC بخصائص عملية هامة تتمثل في:

- نتائج برنامج FAC موجهة لتخصصات عديدة كالمخابر و تشخيص بلازما الفيزياء الفلكية.
- طوعية و سهولة استخدام البرنامج فهو مفيد للمتخصصين و كذلك للمبتدئين.
- فعال للجهات و التخصصات التي تحتاج إليه.
- FAC هو برنامج حر و الحصول عليه متيسر و مجاني [48].

## 2.IV حساب المعطيات الذرية

سنقوم في هذا الجزء بتطبيق برنامج FAC على بعض الذرات و الأيونات: الهيدروجين (H I)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) و الحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV) و

ذلك من خلال حساب بعض المعطيات الذرية و التي تتمثل في مستويات الطاقة و الانتقالات الإشعاعية بين المستويات.

#### 1.2.IV الهيدروجين و الأرقون الشبيه بالهيدروجين

يحتوي الهيدروجين و الأيونات الشبيهة به على إلكترون واحد، و سنقوم في هذه الدراسة بحساب مستويات الطاقة و الانتقالات الإشعاعية بين المستويات  $n_1$ ،  $n_2$  و  $n_3$  بتطبيق برنامج FAC (الملحق A) على:

1/ الهيدروجين (H I).

2/ الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII).

نحصل على ملفي إخراج لكل ذرة، الأول ne.lev و هو خاص بالطاقات و الثاني ne.tr خاص بالانتقالات.

#### ❖ مستويات الطاقة

يحتوي ملف الإخراج ne.lev على التشكيلات الإلكترونية الناتجة عن انتقال الإلكترون بين المستويات  $n_1$ ،  $n_2$  و  $n_3$  و قيم الأعداد الكمية  $n$  و  $l$  و طاقات مختلف المستويات (الملحق A) ، من خلال ذلك قمنا باستنتاج الرموز الطيفية و الطاقات الموافقة لها حسب قيمة العدد الكمي  $J$  و الجدول (1-IV) يقدم بعض النتائج المستنتجة من ملفي ne.lev لكل من الهيدروجين و الأرقون الشبيه بالهيدروجين :

جدول (1-IV): مستويات الطاقة لـ H I و Ar XVIII من ملفي ne.lev لبرنامج FAC.

الطاقة (eV) / Ar XVIII	الطاقة (eV) / H I	J	L	n	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	0.00000000E+00	1/2	0	1	$^2S$	$1s^1$
3.31822359E+03	1.01985366E+01	1/2	1	2	$^2P$	$2p^1$
3.32303938E+03	1.01985820E+01	3/2				
3.93438655E+03	1.20872365E+01	1/2	0	3	$^2S$	$3s^1$
3.93576576E+03	1.20872380E+01	3/2	2	3	$^2D$	$3d^1$
3.93623719E+03	1.20872425E+01	5/2				

يعرض هذا الجدول بعض الطاقات للهيدروجين و الأرقون الشبيهه بالهيدروجين الموافقة للتشكيلات الالكترونية المختلفة حيث نلاحظ أن الطاقات بالنسبة للهيدروجين أقل من طاقات الأرقون الشبيهه بالهيدروجين.

❖ الانتقالات

يتكون ملف الإخراج للانتقالات من عدة تكتلات (مجموعات) حيث تحتوي كل منها على : رمز ما تحت المستوى الأقل طاقة و 2J الموافقة له ثم رمز ما تحت المستوى الأعلى طاقة و قيمة 2J الموافقة له ، و كذلك الفرق في الطاقة  $\Delta E$  (eV) ، قوة الهزاز (gf) و معامل الانتقال الإشعاعي A ( $s^{-1}$ ) (الملحق A) ، و بالاعتماد على ذلك استنتجنا الانتقالات بين السويات و الرموز الطيفية الموافقة لما تحت المستويات و قيمة معامل الانتقال بين المستويات . يقدم الجدول (2-IV) بعض النتائج المستنتجة من ملفي ne.tr لكل من الهيدروجين و الأرقون الشبيهه بالهيدروجين :

جدول (2-IV): معاملات الانتقال الإشعاعي لـ H I و Ar XVIII من ملفي ne.tr لبرنامج FAC.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ ) / H I	معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ ) Ar XVIII /
2p - 1s	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	6.269670E+08	6.572125E+13
	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	6.269742E+08	6.596713E+13
3s - 2p	$^2S_{1/2} - ^2P_{1/2}$	2.117317E+06	2.241537E+11
	$^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$	4.235076E+06	4.635949E+11
3d - 2p	$^2D_{3/2} - ^2P_{1/2}$	5.392881E+07	5.703619E+12
	$^2D_{3/2} - ^2P_{3/2}$	1.078542E+07	1.129136E+12
	$^2D_{5/2} - ^2P_{3/2}$	6.471321E+07	6.797847E+12

يعرض هذا الجدول بعض معاملات الانتقال الإشعاعي التي تحصلنا عليها بالنسبة للهيدروجين و الأرقون الشبيهه بالهيدروجين، باعتبار الانتقال بين المستويات n1 ، n2 و n3 حيث بالنسبة لـ:

- الهيدروجين: يمثل الانتقال 2p - 1s (من  $^2P_{3/2}$  إلى  $^2S_{1/2}$ ) أقوى انتقال بالنسبة للحالة المعتمدة قيد الدراسة، و هو يوافق القيمة ( $s^{-1}$ ) 6.269742E+08 لمعامل الانتقال الإشعاعي، أما الانتقال 3s - 2p (من  $^2S_{1/2}$  إلى  $^2P_{1/2}$ ) فيعتبر أقل من سابقه و يوافق القيمة ( $s^{-1}$ ) 2.117317E+06

- الأرقون الشبيه بالهيدروجين: يمثل الانتقال  $2p-1s$  (من  $^2P_{3/2}$  إلى  $^2S_{1/2}$ ) أقوى انتقال و هو يوافق القيمة  $6.572125E+13(s^{-1})$  لمعامل الانتقال الإشعاعي ، أما الانتقال  $3s-2p$  (من  $^2S_{1/2}$  إلى  $^2P_{1/2}$ ) فيعتبر أضعف انتقال بالنسبة للحالة المدروسة و يوافق القيمة  $2.241537E+11 (s^{-1})$

#### 2.2.IV الأيونات الشبيهة بالهليوم

تحتوي الأيونات الشبيهة بالهليوم على إلكترونين، و سنقوم في هذه الدراسة بتطبيق برنامج FAC لحساب مستويات الطاقة و الانتقالات الإشعاعية بين المستويات  $n1$ ،  $n2$  و  $n3$  للكربون الشبيه بالهليوم، و بين المستويات  $n1$ ،  $n2$ ،  $n3$ ،  $n4$  و  $n5$  بالنسبة للحديد الشبيه بالهليوم. نحصل على الملفين  $ne.tr$  و  $ne.lev$  لكل من الكربون و الحديد الشبيهين بالهليوم.

#### 1.2.2.IV الكربون الشبيه بالهليوم

#### ❖ الطاقات

من خلال ملف الإخراج  $ne.lev$  لبرنامج FAC للكربون الشبيه بالهليوم قمنا باستنتاج الرموز الطيفية و الطاقات الموافقة لها حسب قيمة العدد الكمي  $J$ . يقدم الجدول (3-IV) بعض النتائج المستنتجة من ملف  $ne.lev$  للكربون الشبيه بالهليوم :

**جدول (3-IV):** مستويات الطاقة للكربون الشبيه بالهليوم من ملف  $ne.lev$  لبرنامج FAC.

الطاقة (eV)	J	L	N	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	0	0	1	$^1S$	$1s^2$
2.99188082E+02	1	0	2	$^3S$	$1s^12s^1$
3.05857927E+02	0	0	2	$^1S$	
3.04853830E+02	1	1	2	$^3P$	$1s^12p^1$
3.04857905E+02	0				
3.04868369E+02	2				
3.09093616E+02	1	1	3	$^1P$	
3.52347909E+02	1	0	3	$^3S$	$1s^13s^1$
3.54474314E+02	0	0		$^1S$	

يتبين من خلال هذا الجدول أن الحالات الثلاثية (triplet) أقل طاقة من الأحادية (singlet) و هذا واضح بالنسبة للتشكيل  $1s^1 2s^1$ ، حيث طاقة  $^3S$  أقل من طاقة  $^1S$  و كذلك بالنسبة للتشكيل  $1s^1 2p^1$  فمن أجل  $J=1$  نلاحظ أن قيمة الطاقة الموافقة للحالة الثلاثية  $^3P$  أقل من القيمة الموافقة للحالة الأحادية  $^1P$ .

#### ❖ الانتقالات

من خلال ملف الإخراج ne.tr لبرنامج FAC للكربون الشبيه بالهليوم قمنا باستنتاج الانتقالات ، الرموز الطيفية و قيم معامل الانتقال الإشعاعي بين المستويات  $n_1$ ،  $n_2$  و  $n_3$ . يقدم الجدول (4-IV) بعض النتائج المستنتجة من ملف ne.tr للكربون الشبيه بالهليوم:

**جدول (4-IV):** معاملات الانتقال الإشعاعي للكربون الشبيه بالهليوم من ملف ne.tr لبرنامج FAC.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ )
$1s^1 2p^1 - 1s^2$	$^3P_1 - ^1S_0$	2.021866E+07
	$^1P_1 - ^1S_0$	1.073001E+12
$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$	$^3S_1 - ^3P_1$	3.040798E+09
	$^3S_1 - ^3P_0$	1.016401E+09
	$^3S_1 - ^3P_2$	5.066485E+09
	$^1S_0 - ^1P_1$	1.161775E+10
$1s^1 3p^1 - 1s^1 2s^1$	$^3P_1 - ^3S_1$	1.514952E+10
	$^3P_0 - ^3S_1$	1.515314E+10
	$^3P_2 - ^3S_1$	1.513487E+10
	$^1P_1 - ^1S_0$	1.782640E+10
$1s^1 3p^1 - 1s^2$	$^3P_1 - ^1S_0$	6.057327E+06
	$^1P_1 - ^1S_0$	5.045830E+11

يتضح من نتائج الجدول (4-IV) عموماً أن الانتقال بين الحالات الأحادية (singlet-singlet) أقوى من الانتقال بين الحالات الثلاثية (triplet-triplet)، و أقوى انتقال ملاحظ هو الانتقال  $1s^1 2p^1 - 1s^2$  من الحالة الأحادية  $^1P_1$  إلى الحالة الأحادية  $^1S_0$  و يوافق القيمة ( $s^{-1}$ )  $1.073001E+12$  لمعامل الانتقال الإشعاعي حيث ينبغي أن يحقق أي انتقال قواعد الاصطفاء لثنائي القطب الكهربائي ( $\Delta S = 0, \Delta L = \pm 1, \Delta J = 0, \pm 1$ )

و لكن يتبين وجود الانتقال من الحالة الثلاثية  $^3P_1$  إلى الحالة الأحادية  $^1S_0$  (triplet-singlet) و الذي يوافق قيمة معامل الانتقال  $(s^{-1})$   $6.057327E+06$  ، و يعزى ربما إلى الحالات المختلطة نتيجة لتفاعل التشكيلات حيث يمكن لدالة الموجة لـ  $^3P_1$  أن تحتوي على جزء من الدوال الموجية للحالة الأحادية. كما يمكن لهذه الانتقالات أن تحدث بالأخذ بعين الاعتبار رباعي القطب الكهربائي.

#### 2.2.2.IV الحديد الشبيه بالهليوم

##### ❖ الطاقات

من خلال ملف الإخراج ne.lev لبرنامج FAC للحديد الشبيه بالهليوم قمنا باستنتاج الرموز الطيفية و الطاقات الموافقة لها حسب قيمة العدد الكمي J. يقدم الجدول (5-IV) بعض نتائج الحديد الشبيه بالهليوم:

جدول (5-IV): مستويات الطاقة لـ Fe XXV من ملف ne.lev لبرنامج FAC.

التشكيل	الرمز الطيفي	N	L	J	طاقة المستوي (eV)
$1s^2$	$^1S$	1	0	0	0.00000000E+00
$1s^12s^1$	$^3S$	2	0	1	6.63639552E+03
	$^1S$	2	0	0	6.66918182E+03
$1s^13p^1$	$^3P$	3	1	0	7.87125386E+03
		3	1	1	7.87184692E+03
		3	1	2	7.87621107E+03
	$^1P$	3	1	1	7.88142297E+03
$1s^13d^1$	$^3D$	3	2	2	7.88033559E+03
				1	7.88040985E+03
				3	7.88200339E+03
	$^1D$	3	2	2	7.88229606E+03

يتبين من نتائج الجدول (5-IV) أن الحالات الثلاثية (triplet) أقل طاقة من الأحادية (singlet) و هذا واضح بالنسبة للتشكيلات  $1s^12s^1$ ،  $1s^13p^1$ ،  $1s^13d^1$  حيث طاقة  $^3S$  أقل من طاقة  $^1S$  و كذلك بالنسبة

عموما يلاحظ بأن طاقات التشكيل  $1s^1 3d^1$  أعلى من طاقات التشكيل  $1s^1 3p^1$  و هي بدورها أعلى طاقة من التشكيل  $1s^1 2s^1$ .

❖ الانتقالات

من خلال ملف الإخراج ne.tr لبرنامج FAC للحديد الشبيه بالهليوم قمنا باستنتاج الانتقالات ، الرموز الطيفية و قيم معامل الانتقال الإشعاعي بين المستويات n1، n2 و n3. يقدم الجدول (6-IV) بعض هذه النتائج :

جدول (6-IV): مستويات الطاقة ل Fe XXV من ملف ne.tr لبرنامج FAC.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ )
$1s^1 2p^1 - 1s^2$	$^3P_1 - ^1S_0$	4.281443E+13
	$^1P_1 - ^1S_0$	4.786559E+14
$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$	$^3S_1 - ^3P_1$	9.145722E+11
	$^3S_1 - ^3P_0$	3.394111E+11
	$^3S_1 - ^3P_2$	1.750325E+12
	$^3S_1 - ^1P_1$	9.142449E+10
	$^1S_0 - ^3P_1$	2.342509E+11
	$^1S_0 - ^1P_1$	2.880614E+12
$1s^1 3d^1 - 1s^1 2p^1$	$^3D_2 - ^3P_1$	1.841441E+13
	$^3D_2 - ^3P_2$	4.220714E+12
	$^3D_2 - ^1P_1$	3.178771E+12
	$^3D_1 - ^3P_0$	1.444454E+13
	$^3D_1 - ^3P_1$	9.919081E+12
	$^3D_1 - ^3P_2$	7.074212E+11
	$^3D_1 - ^1P_1$	8.651091E+11
	$^3D_3 - ^3P_2$	2.569760E+13
	$^1D_2 - ^3P_1$	1.607338E+12
	$^1D_2 - ^3P_2$	2.179165E+12
	$^1D_2 - ^1P_1$	2.161359E+13
$1s^1 3p^1 - 1s^2$	$^3P_1 - ^1S_0$	1.278990E+13
	$^1P_1 - ^1S_0$	1.357391E+14

يتضح من خلال هذا الجدول عموماً أن الانتقال بين الحالات الأحادية أقوى من الانتقال بين الحالات الثلاثية حيث أقوى الانتقالات هي:  $1s^1 2p^1 - 1s^2$  و  $1s^1 3p^1 - 1s^2$  من الحالة الأحادية  $1P_1$  إلى الحالة الأحادية  $1S_0$  و يوافق الانتقال  $1s^1 2p^1 - 1s^2$  القيمة  $(s^{-1})$   $4.786559E+14$  لمعامل الانتقال الإشعاعي .

أما أضعف انتقال ملاحظ بالنسبة للحالة المدروسة فهو الانتقال من الحالة الثلاثية  $3P_1$  إلى الحالة الأحادية  $1S_0$  حيث يوافق قيمة معامل الانتقال  $(s^{-1})$   $2.342509E+11$  ، و ينتج هذا الانتقال عن تفاعل التشكيلات حيث يمكن لدالة الموجة ل  $1S_0$  أن تحتوي على جزء من الدوال الموجية للحالة الأحادية.

### 3.IV مقارنة بين نتائج FAC و نتائج NIST

توجد عدة هيئات و مخابر الهدف منها نشر نتائج البحوث العلمية من بينها:

Plasma Laboratory-Weizmann Institute of Science : و هي قاعدة بيانات خاصة بنشر دراسات البلازما [46].

NIST (National Institute of Standards and Technology): قاعدة بيانات هامة لمختلف التخصصات العلمية حيث تقوم بنشر الدراسات ذات النتائج المعتمدة [47].

و سنقارن في هذا الجزء ما توصلنا إليه من خلال برنامج FAC مع النتائج المنشورة لـ NIST.

### 1.3.IV الهيدروجين

#### ❖ الطاقات

يقدم الجدول (7-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمستويات الطاقة لذرة الهيدروجين [47].

جدول (7-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات ذرة الهيدروجين.

الترتيب (%)	الطاقة (ev) NIST	الطاقة (ev) FAC	J	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00263	10.1988055286	10.1985366	1/2	$2P$	$2p^1$
0.00263	10.1988508929	10.1985820	3/2		
0.00221	12.087494224	12.0872365	1/2	$2S$	$3s^1$
0.00221	12.087506341	12.0872380	3/2	$2D$	$3d^1$
0.00221	12.087510821	12.0872425	5/2		

## ❖ معاملات الانتقال الإشعاعي

يقدم الجدول (8-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمعامل الانتقال الإشعاعي لذرة الهيدروجين [47].

جدول (8-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال لذرة الهيدروجين.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال (s <sup>-1</sup> ) FAC/	معامل الانتقال (s <sup>-1</sup> ) NIST /	الارتياب (%)
3p - 2s	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> - <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	2.249580E+07	2.2449E+07	0.208
	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> - <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	2.249483E+07	2.2448E+07	0.209
3d - 2p	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> - <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub>	5.392881E+07	5.3877E+07	0.096
	<sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> - <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	1.078542E+07	1.0775E+07	0.096
	<sup>2</sup> D <sub>5/2</sub> - <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub>	6.471321E+07	6.4651E+07	0.096
2p - 3s	<sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> - <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	2.117317E+06	2.1046E+06	0.6
	<sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> - <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub>	4.235076E+06	4.2097E+06	0.6

بمقارنة بعض النتائج التي توصلنا إليها من خلال برنامج FAC لذرة الهيدروجين بما هو منشور في قاعدة البيانات NIST يتضح أن قيم الطاقة متقاربة جدا حيث الارتياب ضعيف جدا في حدود 0.002% (الجدول (7-IV))، و كذلك بالنسبة لمعاملات الانتقال الإشعاعي فالارتياب لا يتجاوز النسبة 1% (الجدول (8-IV)) هذا ما يدل على مدى التوافق الكبير بين نتائج FAC و NIST لذرة الهيدروجين .

## 2.3.IV الأرقون الشبيه بالهيدروجين

## ❖ الطاقات

يقدم الجدول (9-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمستويات الطاقة للأرقون الشبيه بالهيدروجين [47].

جدول (9-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XIII).

الترتيب (%)	الطاقة (ev)/NIST	الطاقة (ev) /FAC	J	الرمز الطيفي	التشكيل
0.001	3318.3342	3318.37587	1/2	$^2S$	$2s^1$
0.001	3934.29315	3934.34091	1/2	$^2P$	$3p^1$
0.001	3935.72049	3935.76829	3/2		
0.001	3935.717996	3935.76576	3/2	$^2D$	$3d^1$
0.001	3936.189976	3936.23719	5/2		

بمقارنة بعض النتائج التي توصلنا إليها من خلال برنامج FAC للأرقون الشبيه بالهيدروجين بما هو منشور في قاعدة البيانات NIST (الجدول (9-IV)) يتضح أن قيم الطاقة متقاربة جدا حيث الارتفاع ضعيف في حدود 0.001% ، أما بالنسبة لمعاملات الانتقال الإشعاعي فنلاحظ أنه لا تتوفر نتائج منشورة على مستوى NIST للأرقون الشبيه بالهيدروجين.

### 3.3.IV الكربون الشبيه بالهليوم

#### ❖ الطاقات

يقدم الجدول (10-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمستويات الطاقة للكربون الشبيه بالهليوم [47].

جدول (10-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الكربون الشبيه بالهليوم.

الترتيب (%)	الطاقة (ev)/NIST	الطاقة (ev) /FAC	J	الرمز الطيفي	التشكيل
0.0765	298.95951	299.188082	1	$^3S$	$1s^1 2s^1$
0.4841	304.38435	305.857927	0	$^1S$	
0.0539	354.26074	354.451833	1	$^3D$	$1s^1 3d^1$
0.0539	354.26083	354.451907	2		
0.0539	354.2623	354.453225	3		
0.0565	354.28858	354.488629	2	$^1D$	

## ❖ الانتقالات

يقدم الجدول (11-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمعامل الانتقال الإشعاعي للكربون الشبيه بالهليوم [47].

جدول (11-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال للكربون الشبيه بالهليوم.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال FAC/ ( $s^{-1}$ )	معامل الانتقال NIST/ ( $s^{-1}$ )	الارتياب (%)
$1s^1 2p^1 - 1s^2$	$^1P_1 - ^1S_0$	1.073001E+12	8.873E+11	20.9
$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$	$^3S_1 - ^3P_1$	3.040798E+09	2.228E+09	36.5
	$^3S_1 - ^3P_0$	1.016401E+09	7.426E+08	36.9
	$^3S_1 - ^3P_2$	5.066485E+09	3.710E+09	36.6

بمقارنة النتائج التي تحصلنا عليها من خلال برنامج FAC مع نتائج NIST بالنسبة للكربون الشبيه بالهليوم وجدنا أن النتائج متقاربة بالنسبة للطاقات حيث الارتياب في حدود % 0.5 (جدول (10-IV))، أما بالنسبة لمعاملات الانتقال فالنتائج متفاوتة نوعا ما (الجدول (11-IV)).

## 4.3.IV الحديد الشبيه بالهليوم

## ❖ الطاقات

يقدم الجدول (12-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمستويات الطاقة للحديد الشبيه بالهليوم [47].

جدول (12-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لطاقات الحديد الشبيه بالهليوم.

الارتياب (%)	الطاقة/(ev) NIST	الطاقة (ev) FAC	J	الرمز الطيفي	التشكيل
0.001	7863.288	7863.15318	1	$^3S$	$1s^1 3s^1$
0.004	7871.63	7871.99749	0	$^1S$	
0.002	7871.273	7871.25386	0	$^3P$	$1s^1 3p^1$
0.00004	7871.843	7871.84692	1		
0.0005	7876.257	7876.21107	2		
0.003	7881.154	7881.42297	1	$^1P$	

❖ الانتقالات

يقدم الجدول (13-IV) مقارنة بين نتائج FAC و النتائج المنشورة من طرف قاعدة البيانات NIST لمعامل الانتقال الإشعاعي للحديد الشبيه بالهليوم [47].

جدول (13-IV): مقارنة بين نتائج FAC و NIST لمعاملات الانتقال للحديد الشبيه بالهليوم.

الارتياب (%)	معامل الانتقال NIST/( $s^{-1}$ )	معامل الانتقال FAC/( $s^{-1}$ )	الرمز الطيفي	الانتقال
3.13	4.42E+13	4.281443E+13	$^3P_1 - ^1S_0$	$1s^1 2p^1 - 1s^2$
5.1	8.7E+11	9.145722E+11	$^3S_1 - ^3P_1$	$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$
0.15	2.5E+12	2.880614E+12	$^1S_0 - ^1P_1$	
1.38	8.08E+12	8.191649E+12	$^3P_1 - ^3S_1$	$1s^1 3p^1 - 1s^1 2s^1$
3.81	7.75E+12	8.045118E+12	$^1P_1 - ^1S_0$	
0.14	1.5E+13	1.278990E+13	$^3P_1 - ^1S_0$	
9.47	1.24E+14	1.357391E+14	$^1P_1 - ^1S_0$	$1s^1 3p^1 - 1s^2$

بمقارنة بعض النتائج التي توصلنا إليها من خلال برنامج FAC للحديد الشبيه بالهليوم بما هو منشور في قاعدة البيانات لـ NIST يتضح أن قيم الطاقة متقاربة جدا حيث الارتياب ضعيف في حدود 0.005%

(الجدول (IV-12)) ، و كذلك بالنسبة لمعاملات الانتقال الإشعاعي فالارتياح لا يتجاوز النسبة 10% (الجدول (IV-13)) هذا ما يدل على مدى التوافق الكبير بين نتائج FAC و NIST للحديد الشبيه بالهليوم.

#### خاتمة:

قمنا في هذا الفصل بالتعرف على برنامج FAC من الجانب النظري ، كما أجرينا تطبيق لحساب بعض المعطيات الذرية المتمثلة في الطاقات و معاملات الانتقال الإشعاعي لبعض الذرات و الأيونات: الهيدروجين (H)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) والحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV). ثم قارننا ما توصلنا إليه بما هو منشور حسب قاعدة البيانات NIST حيث كانت النتائج متقاربة جدا بالنسبة للطاقات، أما بالنسبة لنتائج معاملات الانتقال الإشعاعي فقد كانت متقاربة بالنسبة للهيدروجين والحديد الشبيه بالهليوم ، و متفاوتة نوعا ما بالنسبة للكربون الشبيه بالهليوم، و في حالة الأرقون الشبيه بالهيدروجين فإن النتائج الخاصة بـ NIST غير متوفرة بخصوص معاملات الانتقال الإشعاعي.



# الخاتمة

تعتبر المعطيات الذرية أدوات هامة بالنسبة للنماذج التي تستعمل إسكان المستويات من أجل دراسة الأطياف و كذلك لمخابر البلازما و الفيزياء الفلكية. و يتطلب الحصول على المعطيات الذرية المعرفة الشاملة بالبنية الذرية حيث يتم حساب بنية الجمل الذرية المختلفة بالاعتماد على ميكانيك الكم .

يعد الهدف الأساسي لهذه المذكرة هو حساب المعطيات الذرية المتمثلة في الطاقات و الانتقالات الإشعاعية لبعض الذرات من خلال التطبيق على برنامج FAC. حيث تطرقنا في هذا العمل إلى حساب البنية الذرية للجمل وحيدة الإلكترون و متعددة الإلكترونات ، فمن أجل ذرة الهيدروجين وجدنا الحل التحليلي من خلال معادلة شرودينجر و معادلة ديراك، أما بالنسبة للذرات متعددة الإلكترونات فحلها المباشر غير ممكن و يستدعي استعمال التقريبات اللازمة، و كذلك اللجوء إلى برامج الحساب في حالة العدد الكمي  $n$  كبير. ثم تطرقنا إلى المعطيات الذرية و المطيافية حيث تمثلت المعطيات في الطاقات ، المقاطع الفعالة و المعاملات لمختلف الآليات الذرية الأساسية بما فيها الإشعاعية و التصادمية وهي مهمة جدا في دراسة بلازما المخابر و الفيزياء الفلكية . كما أن دراسة الأطياف و تشخيص البلازما تتطلب معرفة المقاطع الفعالة و معاملات هذه الآليات . ثم تعرضنا إلى مجموعة من برامج حساب المعطيات الذرية من بينها Hullac، Superstructure، Cowan، CIV3، MZ، MCHF، ATOM و التي تختلف فيما بينها من ناحية طرق الحساب المعتمدة و كيفية الحصول عليها و تثبيتها و التعامل معها. و ركزنا على برنامج FAC نظرا لتميزه بالدقة و الطواعية. و قمنا بتطبيق لحساب بعض المعطيات الذرية المتمثلة في الطاقات و معاملات الانتقال الإشعاعي لبعض الذرات : الهيدروجين ، الأرقون الشبيه بالهيدروجين، الكربون و الحديد الشبيهين بالهليوم حيث تمكننا من التحكم في هذا البرنامج . و بمقارنة نتائجنا بما هو منشور حسب قاعدة البيانات NIST وجدنا أن النتائج متطابقة جدا خاصة بالنسبة للطاقات حيث كان الارتياح بسيط جدا، أما نتائج معاملات الانتقال الإشعاعي فقد كانت جيدة بالنسبة للهيدروجين والحديد الشبيه بالهليوم، و غير متوافقة للكربون الشبيه بالهليوم، أما بالنسبة للأرقون الشبيه بالهيدروجين فلا تتوفر نتائج لـ NIST بخصوص معاملات الانتقال.

و نأمل بأن تكون هناك دراسات مستقبلية شاملة في موضوع حساب المعطيات الذرية المختلفة . و استغلال برامج الحساب لهذا الغرض ، من خلال إجراء تطبيقات على العديد من الذرات لملاحظة مدى قدرة هذه البرامج على الحساب و محاولة التحكم فيها بهدف الحصول على نتائج دقيقة و هامة .



# قائمة المراجع

- [1] H. A. Bethe and E.E. Salpeter, Quantum Mechanics of One and Two Electron Atoms, Dover, 2008, USA.
- [2] M. F. Gu, Can. J. Phys. 86 (2008) 675-689.
- [3] W. Demtröder, Atoms, Molecules and Photons, Springer-Verlag, 2006, Berlin.
- [4] B.H.Bransden and C.J.Joachain, Physics of Atomes and Molecules, Longman Sientific and Technical, 1983, USA.
- [5] P. F. Bernath ,Spectra of Atomes and Molecules, Oxford University Press,1995,USA.
- [6] P.A. Cox, Introduction to Quantum Theory and Atomic Structure, Oxford University Press, 1996, USA.
- [7] I .I. Sobelman, Atomic Spetra and radiative transitions, Springer-Verlag , 1979, Berlin.
- [8] H. Friedrich, Theoretical Atomic physics, Springer-Verlag, 2006, Berlin.
- [9] W. Greiner and J. Reinhardt, Quantum electrodynamics, Springer-Verlag, 1992, Berlin.
- [10] L. I .Schiff, Quantum Mechanics, McGraw-Hill,1949 ,USA.
- [11] Stéphane Boucard, Calcul de haute précision d'énergies de transitions dans les atomes exotiques et les Lithiumoïdes: Corrections relativistes, corrections radiatives, structure hyperfine et interaction avec le cortège électronique résiduel, Thèse de doctorat, Université de Pierre et Marie Curie, 1998, France.
- [12] C.E. Burkhardt and J. J. Leventhal, Topics in Atomic Physics, Springer, 2006 USA.
- [13] B.M. Smirnov, Physics of Atoms and Ions, Springer-Verlag, 2003, New York.
- [14] C.J. Foot, Atomic Physics, Oxford University Press , 2005, New York.
- [15] M.L. Bellac, Physique Quantique, CNRS Édison, 2007,France.
- [16] H. A. Bethe and R. Jackiw, Intermediate Quantum Mechanics, Westview Press, 1986, USA.
- [17]G.K. Woodgate, Elementary Atomic physic, Oxford University Press ,1980,USA.

- [18] محمد أنور بطل ، الفيزياء الذرية و الجزيئية ، مديرية الكتب الجامعية ، 1989 ، جامعة حلب. سوريا .
- [19] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Quantum Mechanics Non-relativistic Theory , Pergamon Press,1977, USA.
- [20]V. P. Schevelko and L. A. Vainshtein , Atomic Physics for Hot Plasmas, Institute of Physics , Bristol,1993, USA
- [21] G.W. F. Drake, Handbooks of atomic ,molecular, and optical physics, Springer Science+Business Media, 2006,USA.
- [22]D. Salzmman, Atomic Physics in Hot Plasma, Oxford University Press,1998,USA.
- [23] بيلا أ. لينكيل ، ترجمة فاروق عبودي قيصر، الليزر، جامعة الموصل ، العراق ، 1984
- [24] Bruno Robillart , Modélisation de la physique atomique et du transfert radiatif pour le laser X-UV, Thèse de doctorat , Université de PARIS-SUD XI ,2010, France.
- [25] Guedda El Habib, Contribution à l'étude des structures atomiques et processus élémentaires dans les plasmas: Applications aux hydrogénoïdes et aux héliumoïdes, Thèse de doctorat, Université BADJI MOKHTAR , 2006, Annaba.
- [26] Paul Bryans. On the Spectral Emission of Non-Maxwellian Plasmas,Thesis of doctorate, University of Strathclyde , 2005, UK.
- [27] Latifa Bettadj, Recombinaison Radiative des Ions Fortement charge dans des Etats Excite : Polarisation des Raies de Fluorence X , Thèse de doctorat, Université Abou-Bekr Belkaïd , 2010, Tlemcen.
- [28] Frédéric Auchère, Contribution à l'Etude de l'Helium dans la Couronne Solaire Observations du Télescope Spatial EIT, Thèse de doctorat, Université de Paris VI, 2000, France.
- [29] N.R. Badnell, Astronomy and Astrophysics.447(2006) 389-395
- [30] I. Murakami et al., Effect of Recombination on FeXXIII Line Intensities, NIFS-DATA.47, 1998, Japan.
- [31] Aldrovanki et al., Astronomy and Astrophysics.25(1973)137-140.
- [32] Nussbaumer et al., Astronomy and Astrophysics.56(1984)293-312.
- [33] Ella Marion Sciamma, Plasma Spectroscopic Diagnostic Tool Using Collisional-Radiative Models and Its Application to Different Plasma Discharges

for Electron Temperature and Neutral Density Determination, Thesis of doctorate, University of Texas at Austin, 2007, USA.

[34] A. Corney, Atomic and Laser Spectroscopy, Oxford University Press, 1977, New York.

[35] J. Tennyson, Astronomical Spectroscopy, Press Imperial College, 2005, London.

[36] A. Dinglage et al., Plasma Physics, Springer, 2005, Berlin.

[37] H.R. Griem, Principle of Plasma Spectroscopy, Cambridge University Press, 1997, New York.

[38] M. F. Gu, The Astrophysical Journal. 582 (2003) 1241-1250.

[39] Bar-Shalom et al., Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 71 (2001) 169-188.

[40] Abdallah et al., Theoretical Atomic Physics Code Development I CATS: Cowan Atomic Structure Code, Los Alamos National Laboratory, 1988, USA.

[41] Fischer et al., Computer Physics Communications 176 (2007) 559-579.

[42] C. F. Fischer, Computer Physics Communications 64 (1991) 369-398.

[43] Biemont et al., Astronomy and Astrophysics 265 (1992) 850-856.

[44] W. Eissner, Journal de Physique IV .1(1991) 3-13.

[45] A. Hibbert, Computer Physics Communications. 9 (1975) 141-172.

[46] <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/directories/databases>. consulter le 15.05.2013

[47] <http://www.NIST.gov>. consulter le 15.05.2013

[48] M. F. Gu, FAC 1.0.8 Manual.



الملاحق

## الملحق A : برنامج FAC

## 1.A تثبيت FAC

يمكن الحصول على برنامج FAC من خلال الموقع <http://kipac-tree.stanford.edu/fac> ، وهو برنامج مكتوب في لغة Fortran 77 و ANSI C . والعمل ببرنامج FAC في windows يستدعي ضرورة تثبيت Unix أو Cygwin المتوفر على الموقع [www.cygwin.com](http://www.cygwin.com) ثم تنفيذ البرنامج في نافذة Cygwin ليتم الحصول على ملفات الإخراج.

## 2.A أمثلة على ملفات الإدخال و الإخراج لبرنامج FAC

## 1.2.A ملف python لحساب البنية الذرية لـ H I

يحسب هذا البرنامج مستويات الطاقة و الانتقالات بين المستويات المختلفة من  $n=1$  إلى غاية  $n=3$  لذرة الهيدروجين (H I):

```

""" calculation of the energy levels. and radiative transition rates traitant"""

from pfac import fac

fac.SetAtom('H')

fac.Config('1*1', group = 'n1')

fac.Config('2*1', group = 'n2')

fac.Config('3*1', group = 'n3')

fac.ConfigEnergy(0)

fac.OptimizeRadial(['n2'])

fac.ConfigEnergy(1)

fac.Structure('ne.lev.b', ['n1','n2','n3'])

fac.MemENTable('ne.lev.b')

fac.PrintTable('ne.lev.b', 'ne.lev', 1)

fac.TransitionTable('ne.tr.b', ['n1'], ['n2'])

fac.TransitionTable('ne.tr.b', ['n2'], ['n3'])

fac.TransitionTable('ne.tr.b', ['n1'], ['n3'])

fac.PrintTable('ne.tr.b', 'ne.tr', 1)

```

## 2.2.A ملف الإخراج ne.lev للهيدروجين

يتضمن ملف الإخراج (output) لبرنامج python طبيعة العنصر المستعمل (H I)، رموز المستويات (ILEV)، طاقة كل مستوي (ENERGY)، الازدواجية (P)، المستوي n و العدد المداري l من خلال VNL، وكذلك العدد الكمي 2J و التشكيلات الإلكترونية .

FAC 1.0.8

Endian = 0

TSess = 1369320676

Type = 1

Verbose = 1

H Z = 1.0

NBlocks = 1

E0 = 0, -1.35981656E+01

NELE = 1

NLEV = 9

ILEV IBASE ENERGY P VNL 2J

0	-1	0.00000000E+00	0	100	1	1*1	1s1	1s+1(1)1
1	-1	1.01985366E+01	1	201	1	2*1	2p1	2p-1(1)1
2	-1	1.01985755E+01	0	200	1	2*1	2s1	2s+1(1)1
3	-1	1.01985820E+01	1	201	3	2*1	2p1	2p+1(3)3
4	-1	1.20872250E+01	1	301	1	3*1	3p1	3p-1(1)1
5	-1	1.20872365E+01	0	300	1	3*1	3s1	3s+1(1)1
6	-1	1.20872380E+01	0	302	3	3*1	3d1	3d-1(3)3
7	-1	1.20872384E+01	1	301	3	3*1	3p1	3p+1(3)3
8	-1	1.20872425E+01	0	302	5	3*1	3d1	3d+1(5)5

### 3.2.A ملف الإخراج ne.tr للهيدروجين

يتضمن ملف الإخراج ne.tr لبرنامج FAC: طاقات الانتقال، قوى الهزاز (gf)، معاملات الانتقال الإشعاعي بين مختلف ما تحت المستويات. من خلال عدة مجموعات متكونة من أعمدة، حيث تحتوي كل منها على: رمز المستوي،  $2j$  الموافقة له، رمز ما تحت المستوي الآخر،  $2j'$  الموافقة له، طاقة الانتقال  $\Delta E$  (eV)، قوى الهزاز (gf)، و معامل الانتقال الإشعاعي  $A$  ( $s^{-1}$ )

FAC 1.0.8

Endian = 0

TSess = 1369319603

Type = 2

Verbose = 1

H Z = 1.0

NBlocks = 3

NELE = 1

NTRANS = 2

MULTIP = -1

GAUGE = 2

MODE = 1

1 1 0 1 1.019854E+01 2.778367E-01 6.269670E+08 -1.491289E+00

3 3 0 1 1.019858E+01 5.556749E-01 6.269742E+08 -2.109000E+00

NELE = 1

NTRANS = 7

MULTIP = -1

GAUGE = 2

MODE = 1

4 1 2 1 1.888649E+00 2.906828E-01 2.249580E+07 3.544623E+00

5 1 1 1 1.888700E+00 2.735777E-02 2.117317E+06 1.087414E+00

5 1 3 3 1.888655E+00 5.472387E-02 4.235076E+06 -1.537971E+00

6 3 1 1 1.888701E+00 1.393622E+00 5.392881E+07 7.761164E+00  
6 3 3 3 1.888656E+00 2.787289E-01 1.078542E+07 3.470968E+00  
7 3 2 1 1.888663E+00 5.813323E-01 2.249483E+07 5.012692E+00  
8 5 3 3 1.888661E+00 2.508575E+00 6.471321E+07 1.041292E+01

NELE = 1

NTRANS = 2

MULTIP = -1

GAUGE = 2

MODE = 1

4 1 0 1 1.208722E+01 5.298560E-02 1.679540E+08 -5.982072E-01  
7 3 0 1 1.208724E+01 1.059750E-01 1.679604E+08 -8.460075E-01

سنقدم في هذا الملحق نتائج حساب الطاقات التي تحصلنا عليها من خلال برنامج FAC (ne.lev) للذرات و الأيونات التالية: الهيدروجين (H I)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) و الحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV).

مستويات الطاقة من ملف الإخراج ne.lev لبرنامج FAC للهيدروجين .

الطاقة (ev) H I	J	L	n	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	1/2	0	1	$^2S$	$1s^1$
1.01985366E+01	1/2	1	2	$^2P$	$2p^1$
1.01985820E+01	3/2				
1.01985755E+01	1/2	0	2	$^2S$	$2s^1$
1.20872250E+01	1/2	1	3	$^2P$	$3p^1$
1.20872384E+01	3/2				
1.20872365E+01	1/2	0	3	$^2S$	$3s^1$
1.20872380E+01	3/2	2	3	$^2D$	$3d^1$
1.20872425E+01	5/2				

مستويات الطاقة من ملف ne.lev لبرنامج FAC للأرقون الشبيه بالهيدروجين.

الطاقة (ev) / Ar XVIII	J	L	n	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	1/2	0	1	$^2S$	$1s^1$
3.31822359E+03	1/2	1	2	$^2P$	$2p^1$
3.32303938E+03	3/2				
3.31837587E+03	1/2	0	2	$^2S$	$2s^1$
3.93434091E+03	1/2	1	3	$^2P$	$3p^1$
3.93576829E+03	3/2				
3.93438655E+03	1/2	0	3	$^2S$	$3s^1$
3.93576576E+03	3/2	2	3	$^2D$	$3d^1$
3.93623719E+03	5/2				

مستويات الطاقة من ملف ne.lev لبرنامج FAC للكربون الشبيه بالهليوم.

الطاقة (ev) / C IV	J	L	n	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	0	0	1	$^1S$	$1s^2$
2.99188082E+02	1	0	2	$^3S$	$1s^1 2s^1$
3.05857927E+02	0	0	2	$^1S$	
3.04853830E+02	1	1	2	$^3P$	$1s^1 2p^1$
3.04857905E+02	0				
3.04868369E+02	2				
3.09093616E+02	1	1	2	$^1P$	
3.52347909E+02	1	0	3	$^3S$	$1s^1 3s^1$
3.54474314E+02	0	0	3	$^1S$	
3.53886447E+02	1	1	3	$^3P$	$1s^1 3p^1$
3.53887896E+02	0				
3.53890377E+02	2				
3.55357593E+02	1			$^1P$	
3.54451833E+02	1	2	3	$^3D$	$1s^1 3d^1$
3.54451907E+02	2				
3.54453225E+02	3				
3.54488629E+02	2			$^1D$	

مستويات الطاقة من ملف الإخراج ne.lev لبرنامج FAC للحديد الشبيه بالهليوم.

الطاقة (eV) Fe XXV	J	L	n	الرمز الطيفي	التشكيل
0.00000000E+00	0	0	1	$^1S$	$1s^2$
6.63639552E+03	1	0	2	$^3S$	$1s^1 2s^1$
6.66918182E+03	0	0	2	$^1S$	
6.66566233E+03	0	1	2	$^3P$	$1s^1 2p^1$
6.66769836E+03	1				
6.68234963E+03	2				
6.70115883E+03	1			$^1P$	
7.86315318E+03	1	0	3	$^3S$	$1s^1 3s^1$
7.87199749E+03	0	0	3	$^1S$	
7.87125386E+03	0	1	3	$^3P$	$1s^1 3p^1$
7.87184692E+03	1	1	3		
7.87621107E+03	2	1	3		
7.88142297E+03	1	1	3	$^1P$	
7.88033559E+03	2	2	3	$^3D$	$1s^1 3d^1$
7.88040985E+03	1				
7.88200339E+03	3				
7.88229606E+03	2			$^1D$	

الملحق C: معاملات الانتقال الإشعاعي

سنقدم في هذا الملحق نتائج حساب معاملات الانتقال الإشعاعي التي تحصلنا عليها من خلال برنامج FAC (ne.tr) للذرات و الأيونات التالية: الهيدروجين (H I)، الأرقون الشبيه بالهيدروجين (Ar XVIII)، الكربون الشبيه بالهليوم (C V) و الحديد الشبيه بالهليوم (Fe XXV).

معاملات الانتقال الإشعاعي للهيدروجين من ملف ne.tr لبرنامج FAC.

الانتقال	الرمز الطيفي	معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ ) H I /
$2p - 1s$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	6.269670E+08
	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	6.269742E+08
$3p - 2s$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	2.249580E+07
	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	2.249483E+07
$3s - 2p$	$^2S_{1/2} - ^2P_{1/2}$	2.117317E+06
	$^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$	4.235076E+06
$3d - 2p$	$^2D_{3/2} - ^2P_{1/2}$	5.392881E+07
	$^2D_{3/2} - ^2P_{3/2}$	1.078542E+07
	$^2D_{5/2} - ^2P_{3/2}$	6.471321E+07
$3p - 1s$	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	1.679540E+08
	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	1.679604E+08

معاملات الانتقال الإشعاعي للأرقون الشبيه بالهيدروجين من ملف ne.tr لبرنامج FAC.

معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ )	الرمز الطيفي	الانتقال
Ar XVIII		
6.572125E+13	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	$2p - 1s$
6.596713E+13	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	
2.383550E+12	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	$3p - 2s$
2.349956E+12	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	
2.241537E+11	$^2S_{1/2} - ^2P_{1/2}$	$3s - 2p$
4.635949E+11	$^2S_{1/2} - ^2P_{3/2}$	
5.703619E+12	$^2D_{3/2} - ^2P_{1/2}$	$3d - 2p$
1.129136E+12	$^2D_{3/2} - ^2P_{3/2}$	
6.797847E+12	$^2D_{5/2} - ^2P_{3/2}$	
1.743615E+13	$^2P_{1/2} - ^2S_{1/2}$	$3p - 1s$
1.765497E+13	$^2P_{3/2} - ^2S_{1/2}$	

معاملات الانتقال الإشعاعي للكربون الشبيه بالهليوم من ملف ne.tr لبرنامج FAC.

معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ ) C IV/	الرمز الطيفي	الانتقال
2.021866E+07	$^3P_1 - ^1S_0$	$1s^1 2p^1 - 1s^2$
1.073001E+12	$^1P_1 - ^1S_0$	
3.040798E+09	$^3S_1 - ^3P_1$	$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$
1.016401E+09	$^3S_1 - ^3P_0$	
5.066485E+09	$^3S_1 - ^3P_2$	
1.161775E+10	$^1S_0 - ^1P_1$	
1.514952E+10	$^3P_1 - ^3S_1$	$1s^1 3p^1 - 1s^1 2s^1$
1.515314E+10	$^3P_0 - ^3S_1$	
1.513487E+10	$^3P_2 - ^3S_1$	
1.782640E+10	$^1P_1 - ^1S_0$	
1.822877E+10	$^3D_1 - ^3P_1$	$1s^1 3d^1 - 1s^1 2p^1$
2.430655E+10	$^3D_1 - ^3P_0$	
1.214440E+09	$^3D_1 - ^3P_2$	
3.274222E+10	$^3D_2 - ^3P_1$	
1.090225E+10	$^3D_2 - ^3P_2$	
9.516182E+07	$^3D_1 - ^1P_1$	
4.373117E+10	$^3D_3 - ^3P_2$	
7.081059E+07	$^1D_2 - ^3P_1$	
2.919502E+07	$^1D_2 - ^3P_2$	
4.141148E+10	$^1D_2 - ^1P_1$	
6.057327E+06	$^3P_1 - ^1S_0$	$1s^1 3p^1 - 1s^2$
5.045830E+11	$^1P_1 - ^1S_0$	

معاملات الانتقال الإشعاعي من ملف ne.tr لبرنامج FAC للحديد الشبيه بالهليوم..

معامل الانتقال الإشعاعي ( $s^{-1}$ ) Fe XXV/	الرمز الطيفي	الانتقال
4.281443E+13	$^3P_1 - ^1S_0$	$1s^1 2p^1 - 1s^2$
4.786559E+14	$^1P_1 - ^1S_0$	
9.145722E+11	$^3S_1 - ^3P_1$	$1s^1 3s^1 - 1s^1 2p^1$
3.394111E+11	$^3S_1 - ^3P_0$	
1.750325E+12	$^3S_1 - ^3P_2$	
9.142449E+10	$^3S_1 - ^1P_1$	
2.342509E+11	$^1S_0 - ^3P_1$	
2.880614E+12	$^1S_0 - ^1P_1$	
8.191649E+12	$^3P_1 - ^3S_1$	$1s^1 3p^1 - 1s^1 2s^1$
9.025126E+12	$^3P_0 - ^3S_1$	
8.281271E+11	$^3P_1 - ^1S_0$	
8.774823E+12	$^3P_2 - ^3S_1$	
7.604878E+11	$^1P_1 - ^3S_1$	
8.045118E+12	$^1P_1 - ^1S_0$	
1.841441E+13	$^3D_2 - ^3P_1$	$1s^1 3d^1 - 1s^1 2p^1$
4.220714E+12	$^3D_2 - ^3P_2$	
3.178771E+12	$^3D_2 - ^1P_1$	
1.444454E+13	$^3D_1 - ^3P_0$	
9.919081E+12	$^3D_1 - ^3P_1$	
7.074212E+11	$^3D_1 - ^3P_2$	
8.651091E+11	$^3D_1 - ^1P_1$	
2.569760E+13	$^3D_3 - ^3P_2$	
1.607338E+12	$^1D_2 - ^3P_1$	
2.179165E+12	$^1D_2 - ^3P_2$	

## ملخص

يهدف هذا العمل إلى حساب المعطيات الذرية لبعض الذرات بالتطبيق على برنامج FAC. تطرقنا أولاً إلى حساب البنية الذرية للجمل وحيدة الإلكترون و متعددة الإلكترونات ثم تعرفنا على المعطيات الذرية لمختلف الآليات الذرية الأساسية في البلازما. كما درسنا بعض البرامج المتوفرة لحساب البنية و المعطيات الذرية و أخيراً قمنا بالتطبيق على برنامج FAC لحساب الطاقات و الانتقالات الإشعاعية لبعض الذرات و الأيونات: الهيدروجين، الأرقون الشبيه بالهيدروجين، الكربون الشبيه بالهيليوم، الحديد الشبيه بالهيليوم. و بمقارنة نتائجنا مع النتائج المنشورة لـ NIST وجدنا تطابقاً كبيراً بينهما .

**كلمات مفتاحية:** البنية الذرية، المعطيات الذرية، الآليات الذرية الأساسية، برامج الحساب، برنامج FAC.

## Résumé

Ce travail vise à calculer les données atomiques pour certains atomes avec le code FAC. Nous avons introduit premièrement le calcul de structure atomique pour les systèmes à un seul électron et à N électrons. Puis nous avons montré les données atomiques des différents processus atomiques élémentaires dans le plasma. Nous avons étudié encore certains codes de calcul pour les structures et données atomiques. Enfin, nous avons appliqué le code FAC pour calculer les énergies et les transitions radiatives d'atomes et ions : hydrogène, Argone hydrogénéoïde, Carbone héliumoïde et Fer héliumoïde. les résultats de calcul sont en très bon accord avec ceux publiés par NIST.

**Mots-clés:** structure atomique, données atomiques, processus atomiques élémentaires, codes de calcul, code FAC.

## Abstract

The main purpose of this work is to calculate the atomic data for some atoms with FAC code. First we started with atomic structure calculation for one-electron and many-electron atoms. Then we introduced the atomic data of elementary atomic processes in the plasma. We also presented some calculation codes. Finally, we applied FAC code to calculate energies and radiative transitions for atoms and ions : hydrogen, Argon hydrogenlike, Carbon helium like and Iron helium like. Moreover, our calculation results agree with those published by NIST.

**Keywords:** atomic structure, atomic data, elementary atomic processes, codes, FAC code.