

دراسة دبلوم عالي في كلية التربية للعلوم الصرفة تناقش حسابات هارثري – فوك لطول أصرة الحالة الأرضية ل H-H والطاقة باستخدام الماتلاب

جرت في كلية التربية للعلوم الصرفة في جامعة بابل المناقشة العلنية لبحث; دبلوم عالي في اختصاص الفيزياء للطالب سعد مرزة حمزة; والموسوم: (حسابات هارثري – فوك لطول أصرة الحالة الأرضية ل H-H; والطاقة باستخدام الماتلاب) بإشراف الأستاذ الدكتور فؤاد عطية مجيد.

; &

تضمن البحث توظيف; نظرية هارثري – فوك ومصفوفة التمثيل; لمعادلات روثان (Roothaan) مع تقريب بورن – اوپنهايمر (Born Oppenheimer) والحد الغير نسبي , لتقدير الطاقة الكلية لنظام هيدروجين – هيدروجين (H-H) ذرتين هيدروجين; مع أطوال أصرة مختلفة باستعمال المدار من نوع سليتر (Slater) بوجود أربع دوال كاوسية (caussian) الأساس (STO-4G) لكل مدار مكاني. ولغرض المقارنة فان طاقة هارثري – فوك حسبت باستعمال مجموعة مختلفة من الدوال الأساس وهي STO-4G-6, 4-31G, 31G; لقيم; وهي 1, 2, 3. تم حساب مستوى طاقة فوك (Fock energy level) لكل خطوة تقارب للتأكد من أن الحسابات الحالية دقيقة وواقعية . كما تم حساب احتمالية الكثافة للإلكترونات ورسمت مع المسافة بين الجزيئات في حالة الترابط. أستنتج الباحث بان الحسابات الحالية يمكن أن تستعمل كنواة لبنية قوية للنظرية الالكترونية او كهيكل عظمي للبدء في تطوير برنامج حاسوبي لحل نظرية أكثر تعقيدا من البداية (ab initio) وباستعمال نفس مجموعة الأساس .

; &

آلاء الطائي : إعلام كلية التربية للعلوم الصرفة