الملخص العربي

تقدم هذه الرسالة دراسة ميكانيكية كميه لبعض مراكز الليزر الملونة من نوع F^+ علي أسطح أكاسيد الاسترانشيوم والكالسيوم . تم إجراء حسابات ab initio للتركيب الجزيئي الالكتروني لفحص كل من (i) نشاط الليزر الناشئ عن مركز التشوه F^+ (ii) التدمير الاتجاهي للحاله المثاره الاسترخائيه (iii) علاقة Glanser-Tompkins (iv) انتقال طاقة exciton(v) ادمزاز الهالوجينات (F, Cl, Br) علي الاسطح المحتويه والخاليه من مراكز التشوه. تم ادخال عناقيد أيونيه مختلفه الاحجام فى مجال كولومبي يضاهي مجال ماديلونج لاسطح البلوره العائل كما تم استخدام طرق شائعة الاستخدام (CIS and DFT)في الحسابات.

تتكون الرسالة من ثلاثة أبواب تم جدولتها كالتالي:

البـــاب الأول :

يعرض حصرا لبعض الأبحاث السابقة ذات العلاقة بموضوع الرسالة ، نبذات مختصره عن مراكز الليزر الملونة بالإضافة الي الطرق النظرية المستخدمة في الحسابات وهي التفاعل التوزيعي (CI-singles) ونظريه دالة الكثافة (DFT) .

البـــاب الثاني :

يشمل دراسة نشاط الليزر لمركز التشوه F^+ وادمزاز ذرات الهالوجينات (F, Cl, Br) علي أسطح SrO ذات التناسق المختزل باستخدام طرق CIS and DFT لحسابات ab initio للتركيب الالكتروني الجزيئي. وبعض الخواص مثل التدمير الاتجاهي للحالة المثاره، علاقة Glanser-Tompkins وانتقال طاقة ال exciton . كما يتضمن هذا الباب دراسة

تأثيرات مركز التشوه F^+ علي ادمزاز ذرات الهالوجين ودور التزاوج الالكتروني التساهمي في هذا الادمزاز.

البـــــاب الثالث :

يشمل دراسة نشاط الليزر لمركز التشوه F^+ وادمزاز ذرات الهالوجين (F, Cl, Br) علي أسطح CaO ذات التناسق المختزل باستخدام طـــرق CIS and DFT لحســـابات ab initio للتركيب الالكتروني الجزيئي وبعض الخواص ذات العلاقة بنشاط الليزر F^+ والتـــي سبق دراستها في الباب الثاني. كما يتضمن هذا الباب دراسة تأثيرات مركز التشوه F^+ علي ادمزاز ذرات الهالوجين (F, Cl, Br) ودور التزاوج الالكتروني التساهمى في هذا الادمـزاز. كما تم إيضاح أهم الفروق بين نشاط الليزر وخواص الادمزاز السطحي بيـــن هـــذه البلـــوره CaO وبلورة SrO التي سبق دراستها في الباب الثاني.