الملخص العربى

تتـناول هذه الرسالة : دراسة ميكانيكية كمية لبعض مراكز الليزر فـى العـازلات حيـث تـم إجـراء حسابات ab initio للتركيب الجزيئى الالكـترونى لفحص كل من (i) نشاط الليزر الناشئ عن مركز التشوه F_A علـى سـطح KCl. (ii) نشـاط الليزر الناشئ عن مركز التشوه F_2^+ على أسـطح (LiH, AgBr). (iii) إدمـازية ذرات الهالوجينات على الأسطح المحـتوية والخالـية مـن مراكـز التشوه لكل من (LiH , KCl) كذلك خصائص الإعطاء والإكتساب لكل من (O,O^-) من خلال الإدمزاز على سطح بللـورة KCl. (iv) الحساسـية الفوتوجرافية على سطح AgBr . تم إدخال عناقيد ايونية مختلفة الأحجام فى مجال كولومبى يضاهى بصفة تقريبية مجال مـادلونج لأسطح البللورة العائل وذلك بإستخدام طرق شائعة الإستخدام مثل نظـرية دالة الكثافة (DFT) ونظرية التفاعل التوزيعى (CI-singles) فى الحسابات .

الباب الأول :

يعرض حصراً لبعض الأبحاث السابقة ذات العلاقة بموضوع الرسالة ، نـبذة مختصرة عن مراكز الليزر الملونة ، الحساسية الفوتوجرافية بالإضافة إلى الطرق النظـرية المستخدمة فى الحسابات وهى التفاعـل التوزيعـى (CI-singles) ونظرية دالة الكثافة (DFT) .

الباب الثانى :

يتضمن دراسة نشاط الليزر لمركز التشوة ($I F_A (Rb^+,Cs^+)$ ، $II F_A (Li^+,Na^+)$ وكذلك خصائص الإعطاء والإكتساب لكل من (O,O^-) من خلال الإحمزاز على سطح بللورة KCl ذات التناسق المختزل بإستخدام طرق (CIS , DFT) لحسابات ab initio للتركيب الألكترونى الجزيئى ، وبعض الخواص ذات العلاقة بنشاط الليزر مثل التحمير الإتجاهى للحالة المثارة ، علاقة Glanser – Tompkins و إنتقال طاقة الـ exciton كما يتضمن هذا الباب دراسة تأثيرات مركز التشوة F_A على احمزاز (O,O^-) ودور التزاوج الألكترونى التساهمى فى هذا الإحمزاز .

الباب الثالث :

يشمل دراسة نشاط الليزر لمركز التشوة $F_A(Ga^+ , In^+ , Tl^+)$ واحمذازية ذرات الهالوجين (F,Cl,Br,I,At) على سطح KCl ذات التناسق المختزل بإستخدام طرق (CIS , DFT) لحسابات ab initio للتركيب الألكترونى الجزيئى وبعض الخواص ذات العلاقة بنشاط الليزر مثل التقدير الإتجاهى للحالة المثارة ، علاقة Glanser – Tompkins و إنتقال طاقة الـ exciton كما يتضمن هذا الباب دراسة تأثيرات مركز التشوة F_A على احمزازية ذرات الهالوجينات ودور التزاوج الألكترونى التساهمى.

الباب الرابع :

يشـمل دراسة نشاط الليزر لمركز التشوة F_2^+ وكذلك الحساسية الفوتوغرافـية علـى سـطح AgBr ذات التناسق المختزل بإستخدام طرق (CIS , DFT) لحسابات ab initio للتركيب الجزيئى وبعض الخواص ذات العلاقـة بنشـاط الليـزر مثـل التحميـر الإتجاهى للحالة المثارة ، علاقة Glanser – Tompkins و إنـتقال طاقـة الـ exciton كما يتضمن هذا البـاب عمليـة إظهـار الطـبقة الرقيقة و كذلك إختزال السطح والحركة الدورانية لمركز التشوة F_2^+ .

الباب الخامس :

يشـمل دراسة نشاط الليزر لمركز التشوة F_2^+ وادمصازية ذرات الهالوجيـن (F,Cl,Br) علـى سطح LiH ذات التناسق المختزل بإستخدام طـرق (CIS , DFT) لحسـابات ab initio للتركيب الألكترونى الجزيئى وبعـض الخـواص ذات العلاقـة بنشاط الليزر مثل التقدير الإتجاهى للحالة المـثارة ، علاقـة Glanser – Tompkins و إنتقال طاقة الـ exciton كما يتضـمن هـذا الباب دراسة تأثيرات مركز التشوة F_A على ادمصازية ذرات الهالوجينات ودور التزاوج الألكترونى التساهمى.

إهـــــداء

إلى والدي

أطال الله عمرهما

إلى زوجي

حباً وإعتزازاً

إلى أخي

تقديراً وإحتراماً

إلى إبني

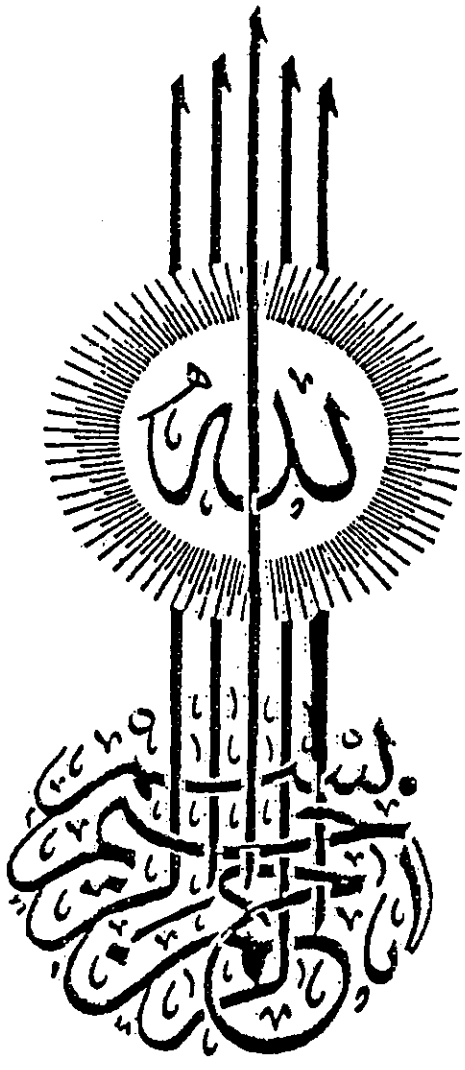
فخراً وإمتناناً

هيئة الإشراف

عنوان الرسالة : دراسة ميكانيكية كمية لبعض مراكز الليزر فى العازلات

إسم الباحث : صفاء عبدالعال عبدالرازق

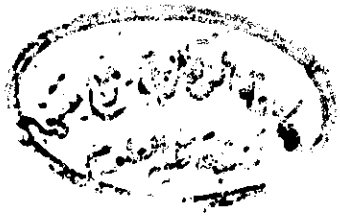
م	الأسم	الوظيفة	التوقيع
١	أ.د/ أحمد سعيد شلبى	أستاذ الكيمياء النظرية بكلية العلوم جامعة الزقازيق فرع بنها.	
٢	د/ تماضر فريد العيسوى	أستاذ الكيمياء الفيزيائية المساعد بكلية العلوم جامعة الزقازيق فرع بنها.	
٣	د/مرفت محمود عاصم	مدرس الكيمياء النظرية بكلية العلوم جامعة الزقازيق فرع بنها.	
٤	د/عاطف محمد المهدى	مدرس الفيزياء النظرية بكلية التربية جامعة عين شمس.	



قالوا سبحانك لا علم لنا الا ما علمتنا إنك
أنت العليم الحكيم

صدق الله العظيم

دراسة ميكانيكية كمية لبعض مراكز الليزر فى العازلات



دراسة

مقدمة إلى

قسم الكيمياء–كلية العلوم–جامعة الزقازيق (فرع بنها)

للحصول على درجة دكتوراه الفلسفة فى العلوم (الكيمياء)

من الطالبة

صفاء عبدالعال عبدالرازق

المدرس المساعد بقسم الكيمياء

إشراف

الأستاذ الدكتور

أحمد سعيد شلبى

أستاذ الكيمياء النظرية

قسم الكيمياء - كلية العلوم

جامعة الزقازيق (فرع بنها)

الدكتورة

تماضر فريد العيسوى

أستاذ الكيمياء الفيزيائية المساعد

قسم الكيمياء - كلية العلوم

جامعة الزقازيق (فرع بنها)

الدكتورة

مرفت محمود عاصم

مدرس الكيمياء النظرية

قسم الكيمياء - كلية العلوم

جامعة الزقازيق (فرع بنها)

الدكتور

عاطف محمد المهدى

مدرس الفيزياء النظرية

قسم الفيزياء - كلية التربية

جامعة عين شمس

٢٠٠٢