تتشرف كلية الدراسات العليا وكلية العلوم بدعوتكم لحضور

مناقشة رسالة الماجستير

العنوان

الكيمياء الفلكية النَّظرية والمحوسبة: دراسة لجزيء ثلاثي الهيدروجين الموجب (H_3^+) باستخدام نظرية الكمّ المتغيّرة المُدمجة مع طريقة مونتِ كارلو (VQMC)

للطالب

احمد سعيد غانم السعد

المشرف

د. اليخاندرو بيريز باز ، قسم الكيمياء
كلية العلوم

المكان والزمان

الساعة 2.00 مساء
يوم الإثنين، الموافق 15 أبريل 2024
F3 - 043

الملخص

H_3^+ هو أصغر جزيءٍ متعددِ الذرّات بثلاثِ أنوية وإلكترونين، وقد حظي بأهمية كبيرة في الكيمياء الفلكيّة بسبب كثرة وجودِه في الفضاء الخارجيّ، وتفاعلِه العالي، وخواصّه الحمضيّة القويَّة. إضافةً على ذلك،**H_3^+** يشتركُ في العديد من التفاعلات الكيميائية التي تحدث في الأوساط بين النجمية كما أن قدرته الكبيرة على امتصاص الطاقة ساهمت بشكل فعّال في تبريد الكون في بداياته.

الهدف الرئيس من هذه الأطروحة: تقريبُ الطاقة الإلكترونيّة للمستوى الأرضي للجزيء **H_3^+** باستخدام دالَّة موجيَّة بسيطة تتكون من مدار جزيئي مشغول بشكل مضاعف مضروبًا في "عامل جاسترو". يُتيح "عامل جاسترو" تقديم بعض من درجات الترابط بين الإلكترونات واتِّباع ظروف القُرْنَة الخاصَّة باقتران الإلكترون والبروتون.
بهذه الدالَّة الموجيَّة تم اشتقاق تعبيراً للطاقة المحليَّة وتطبيقها باستخدام نظرية " الكمّ المتغيّرة المرتبطة بطريقة مونت كارلو" بالتماشي مع خوارزمية " متروبوليس" ؛ لأخذ العيّنات. علاوةً على ذلك تم كتابة الشيفرة المُحوسَبَة بلغة "بايثون 3.6"، والتي تم اختبارُها على نظام الهزَّاز التَّوافُقي الكُمومي القابل للحل بشكل رياضي.

ختاماً، تم تقديرُ طول الرابطة المُؤدي إلى الاتزان بين كلّ ذرتين هيدروجين متجاورتين في شكل المثلث متساوي الأضلاع، وسيُقدّرُ التردّدُ الطبيعيّ للجزيء في حال تمدّدِ المثلثِ وتقلّصه.

تبلغ قيمة طولُ الرابطة المستخرجَةِ المؤدية لاتزان المثلث متساوي الأضلاع (**Bohr** 1.800) أو (**Å** 0.95) مع تباينٍ بمقدار: (1.8٪) فقط عن القيمة التجريبية البالغة: (**Bohr** 1.833) أو (**Å** 0.97) ، إضافةً إلى ذلك، جرى قياسُ التردّدِ الطبيعيّ المتماثل للجزيء وهو (**cm^{-1}** 3240) مع نسبة خطأ بسيطة تبلغ (1.7%) من القيمة التجريبيّة التي حُصِّلت عند (**cm^{-1}** 3185)، إذ تُعدُّ كِلتا قيمتي طول الرابطة، والتردد، نتائجَ رائعةً مقارنة بجميع الدراسات النظريّة الموجودة للجزيء عند مقارنتها بالبيانات التجريبيّة، أخيراً وليس أخراً، بلغتْ قيمة الطاقة الإلكترونيّة للمستوى الأرضي المستخرجة (**Hartree** -1.256458).

والخلاصة أن النظرية المُطَورَة في هذه الأطروحة تقود إلى نتائجَ واعدةٍ وموثوقةٍ وقابلةٍ للتكرار، نسبةً لبساطة الدالَّة الموجيَّة المطبَّقةِ.

مفاهيم البحث الرئيسية: الكيمياء الفلكيّة، **H_3^+** ، الكيمياء النظريّة/المُحوسَبة، كيمياء الكم، نظرية الكمّ المتغيّرة، طرق مونتِ كارلو، تقنيات متروبوليس لأخذ العيّنات.