التفاعلات المغناطيسية بين الكترونات المدار f

اسم الطالب

أمل بنت عبد الوهاب أبو حجر

اسم المشرف

خورشيد اطهر صديقي

مستخلص

اعتماد الخواص في نطاق وحدة نانو يتيح فرصة للتجربة مع المواد . جزيء الفوليرين C_{60} يملك الحجم المناسب والاستقرار الكيميائي اللازم لاستضافة مجموعة كبيرة من الذرات . لقد تم تركيب الفوليرين المشوب (endohedrally doped fullerene) في الماضي. وهذه الهياكل مهمة لفهم سلوك الذرات في غلاف f شاغر. إن منهجية الدراسة النظرية لسلوك أيونات عناصر الأتربةالنادرة ينبغي أن تكون بمثابة المبدأ التوجيهي ل لباحثين التجريبيين والباحثين النظريين على كلى السواء . الفوليرين المشوب بأي من عناصر الأتربةالنادرة يتخذ تماثل المجموعة النقطية لذوات الوجوه العشرون. و قد نوقش في هذه الرسالة استخدام نظرية المجموعات لمعالجة الكترونات الغلاف f في المجال البلوري العشريني الوجوه القوي. و تم استخدام نظرية الاضطراب للأجسام المتعددة و ذلك لحساب تفاعلات التبادل بين أزواج من أيونات الأتربة النادرة المكونة من الكترونين في الغلاف f . لقد تم التوصل

إلى أن تشويب الفوليرين المشوب بأي من عناصر الأتربةالنادرة يؤدي إلى انتظام مغناطيسي . و اتضح أن العدودة الحضيضية للأزواج غير مغناطيسية. المستويات الإلكترونية المزدوجة بتفاعلات التبادل من هذه الأزواج تتيح فرصة لفهم السلوك البصري لهذه الأنظمة . إن ازدواج الحالات التذبذبية والإلكترونية يقدم إمكانية تواجد أطياف رامان. و وجود خط ثنائي عرضي في العدودة الحضيضية صدرة يشير إلى تناقص في التماثل من المجموعة النقطية لذوات الوجوه العشرون إلى مجموعة أدنى ذات تماثل أقل ذو بعدين و غير القابل للاختزال. ومن المعتقد أن هذه الدراسات سوف تؤدي إلى فهم أفضل لسلوك الفوليرين (endohedral fullerene) البصري والمغناطيسي.