

دراسة الكثافة الالكترونية في الاوربيتال (d و s) لعنصر الهافنيوم (Hf) باستخدام تقنية استطرارة كومبتون

محمد نزار محمد

قسم تربية الضلوعية، المديرية العامة لتربية صلاح الدين، وزارة التربية، العراق

This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)<https://doi.org/10.54153/sjpas.2023.v5i2.601>

الخلاصة:

معلومات البحث:

تأريخ الاستلام: 2023/06/26

تاريخ التعديل: 2023/07/30

تأريخ القبول: 2023/08/06

تاريخ النشر: 2023/12/30

الكلمات المفتاحية:

استطرارة كومبتون، نموذج اعادة معايرة

الذرة، نموذج الذرة الحر

معلومات المؤلف

الايمل: moh.nz.2023@gmail.com

الموبايل: 07800018430

في هذا البحث تم دراسة وحساب كثافة منحنى كومبتون (Compton Profile) لعنصر الهافنيوم (Hf) ذات العدد الذري (Z=72)، إذ اجريت الحسابات النظرية المختلفة للترتيبات العشرية للغلافين الاخيرين ($5d^{2+x}-6s^{2-x}$) إذ ان [x تتراوح بين (0 → 2)] وذلك باعتماد نموذج اعادة معايرة الذرة الحرة (-Renormalized Free Atom, RFA) وبعد ذلك تم مقارنة النتائج التي حصلنا عليها والتي تمثل شكل منحنى كومبتون (Compton Profile) $J(P_z)$ مع نتائج القياسات العملية المتوفرة وكذلك تم مقارنة هذه النتائج مع البيانات المعتمدة لنموذج الذرة الحر (Free Atom, FA) وبيانات (Density Functional With Generalised Gradient Approximation, DF-GGA) ووجد ان افضل ترتيب الكتروني للعنصر هو ($5d^{3.2}-6s^{0.8}$) و متوافق بشكل جيد عند المقارنة مع القيم العملية المتوفرة.

المقدمة:

تم اختيار عنصر الهافنيوم لدراستنا النظرية باستخدام نموذج اعادة معايرة الذرة الحرة وذلك لتوفر نتائج قياس عملية له إذ يمكن من هذه النتائج المقارنة مع حساباتنا النظرية باستخدام نموذج (RFA). الهافنيوم (Hf) ينتمي الى المجموعة الرابعة (IVB) من الجدول الدوري، وهو عنصر معدني أبيض رمادي ثقيل ولا يوجد بصورة حرة وإنما يكون مترابط بصورة دائمية مع عنصر الزركونيوم المتوفر بكثرة في الطبيعة. يستخدم عنصر الهافنيوم بشكل اساسي كعامل تقوية ثانوي في السبائك الفائقة للنيكل عند ارتفاع درجة حرارتها. والجدول 1 يبين بعض الخصائص الفيزيائية لهذا العنصر [1].

الجدول 1: بعض الخصائص الفيزيائية لعنصر الهافنيوم (Hf) [1].

خواص فيزيائية			
الخاصية	الكمية	الخاصية	الكمية
الكتلة الذرية	178.49 غ/مول	الكثافة	13.31 غ/سم ³
التوزيع الالكتروني	5d ² 6s ²	المقاومة الكهربائية	3.31x10 ⁻⁷ اوم.متر

ان استطرارة الموجات الكهرومغناطيسية مع الجسيمات المشحونة تسمى ب(ظاهرة كومبتون) والتي يمكنها ان تعطينا معلومات مهمة حول التركيب الالكتروني للعناصر والسبائك والمركبات بمعنى اخر ان تجارب استطرارة كومبتون تزودنا بمعلومات حول الزخم الالكتروني للعينة قيد الدراسة، ان استطرارة كومبتون هي عملية أساسية أولية لتفاعلات الإشعاع مع المادة. تم اكتشافها لأول

مرة عام 1923 [2]. الاستطارة الغير مرنة (استطارة كومبتون) للأشعة السينية واشعة كما بواسطة الالكترونات ترتبط ارتباطاً وثيقاً بتوزيعات كثافة الالكترون (*electron density distributions*) [3]. تعد استطارة كومبتون واحدة من اهم الظواهر التي تتلقى اهتماما واسعا من قبل الباحثين , وذلك لان هذه التقنية هي طريقة جيدة لدراسة الصفات والخصائص الفيزيائية للعناصر المختلفة وان الذي ساعد على زيادة الاهتمام بهذه الظاهرة هو التطور اللافت الذي حصل في طرق قياسها ومنها تطور التقنية التي يمكن بواسطتها انتاج الاشعة السينية (*X-Ray*) إذ ان حيود هذه الاشعة يستعمل لغرض معرفة الخواص الفيزيائية للمواد [4-5] وايجاد طرق حديثة لتحليل النتائج بحيث ادت هذه العوامل الى وصول نسبة الخطأ الى اقل من (1%) في هذه النتائج. وان المعلومة الاساسية التي يمكن الحصول عليها من هذه التقنية هي زخم الالكترون في العينة المستخدمة وبالآتي تعد وسيلة مباشرة لحساب الدوال الموجية للالكترونات في العينة [6].

ان تقنية استطارة كومبتون بارعة ومعروفة بشكل جيد في دراسة الخواص الالكترونية للمواد [7] . إذ لاحظ العالم كومبتون انه عند سقوط الاشعة السينية على هدف ما فان هنالك زيادة سوف تحصل في الطول الموجي (λ) للأشعة المستطيرة وان هذه الزيادة التي حصلت في الطول الموجي تعتمد بشكل اساسي على زاوية الاستطارة بدون التأثير على طبيعة مادة الهدف [8].

ان تقنية استطارة كومبتون تستعمل للكشف عن كثافة الزخم للالكترون في الحالة الارضية للعناصر المختلفة [9]، وذلك من قياس زخم وطاقة الجسيمات (الفوتونات) الساقطة والمستطيرة في لحظة اصطدام الفوتون مع الالكترون ومن ذلك يصبح بالإمكان الحصول على المعلومات الاساسية المتعلقة بزخم الحالة الارضية للالكترونات المستطيرة من تطبيق القوانين الخاصة بحفظ الزخم والطاقة , إذ ان هنالك علاقة تربط بشكل وثيق ما بين الزخم الالكتروني وتقنية استطارة كومبتون إذ ان هذه العلاقة تتضمن ان الالكترونات الموجودة في الذرات ليست ساكنة تماما وانما تتحرك بطاقة تتراوح بين عدة الكترون فولت الى الف الكترون فولت [10].

ان تجارب استطارة كومبتون والتي تتضمن قياس توزيع الطاقة للفوتونات المستطيرة التي اصطدمت بالكترونات العينة المدروسة قادرة على قياس توزيع الزخم للالكترون (*electron momentum distribution*) [11-12]. وهنالك عدة طرق لقياس توزيع (كثافة) الزخم الالكتروني (*E.M.D*) إذ يمكن تمييز هذه الطرق من الشعاع الساقط الذي يستطار في العينة ويحلل تجريبيا ومن هذه الطرق هي طريقة الاشعة السينية إذ يمكن من هذه الطريقة الحصول على (*Compton Profile*) للعينة قيد الدراسة والتي تتضمن جهاز يسمى مطياف استطارة كومبتون الذي يستخدم الاشعة السينية والهدف المستخدم هو احد العناصر مثل الذهب او غيره من العناصر الاخرى وان الاشعة الناتجة من هذه العناصر طاققتها تصل الى حوالي (*20Kev*) [13].

ان استطارة كومبتون هي عملية تصادم موجة بالكترون لانها تنطوي على تبادل الطاقة والزخم وقد أعلن كومبتون انه على الرغم من امكانية التنبؤ بموقع ذروة منحنى كومبتون $J(P_z)$ الا ان التوسيع (*Broadening*) الذي حصل في المنحنى كان اكبر من ذلك الذي سببته الزيادة الحاصلة في زاوية الاستطارة لوحدها ويمكن ان يعزى سبب ذلك الى عدم التجانس بين الحزمة الساقطة على مادة الهدف [14] . عند مقارنة تقنية استطارة كومبتون مع التقنيات الاخرى فان هذه التقنية (الطريقة) تعطينا معلومات مهمة حول التركيب الالكتروني (*electronic structure*) للمواد المختلفة [15] . ان الدراسات النظرية لاستطارة كومبتون (منحنى كومبتون) قد استمرت من تطور حسابات التركيب الحزمي (*band structure calculations*) وتقنية حسابات سطح فيرمي (*fermi surface calculations*) التي قد تم استخدامها من اجل دقة الحسابات [16]. ان استطارة كومبتون لها مجموعة من التطبيقات العملية المختلفة منها ما هو سريريا كما في علم الاحياء الاشعاعي والمعالجة الاشعاعية الى التفاعلات النووية الضوئية في الفيزياء النووية وكذلك انتاج الزوج (الكترون-بوزوترون) [17-18-19-20].

ان منحنى كومبتون $J(P_z)$ مفيد جدا في الطرق التجريبية او شبة التجريبية الهادفة الى دراسة كثافة التوزيع الالكتروني في المواد الصلبة المختلفة [21]. وان شكل منحنى كومبتون يكون حساس لالكترونات التكافؤ في الذرات والتي تترابط لتشكّل الطور المكثف للمواد. ان استطارة كومبتون تعد إحدى التقنيات المعروفة لحساب المقطع العرضي التفاضلي للاستطارة الذي يتناسب بشكل طردي مع منحنى كومبتون $J(P_z)$ للمواد وأن شكل منحنى كومبتون (CP) هو اسقاط بعدين لكثافة الزخم الالكتروني (E.M.D) على طول متجه الاستطارة ويعطى بالعلاقة الآتية: [22].

$$J(P_z) = \iint n(p) dp_x dp_y \quad (1)$$

إذ ان (p_x) و (p_y) تمثل مركبات الزخم في الاتجاهات الكارتيزية (x, y) وان اتجاه z يكون موازي لمتجهات الشعاع الساقط والموجة المستطيرة، $n(p)$ كثافة الزخم الالكتروني.

ان الهدف من الدراسة الحالية هو ايجاد كثافة الزخم الالكتروني $n(p)$ لمنحنى كومبتون (CP) لعنصر الهافنيوم ومعرفة افضل تكوين الكروني باستخدام نموذج اعادة معايرة الذرة الحرة (RFA), ومقارنة النتائج التي استحصلنا عليها نظريا مع القيم العملية المتوفرة.

قسم هذا البحث الى عدة فقرات، في البداية تطرق الى مقدمة نظرية لاستطارة كومبتون إذ تم تقديم ملخص عن تطور مفهوم استطارة كومبتون بعد ذلك تناول الحسابات النظرية المستخدمة في حساب كثافة الزخم الالكتروني للعينة، ايضا مناقشة النتائج والاستنتاجات واخيراً عرض المصادر لهذا البحث.

الحسابات النظرية: حسابات نموذج (RFA):

يقدم نموذج [RFA] [23] حل وسط في حسابات قيم منحنى كومبتون بين حسابات ($band\ structure$) ووصف الذرة الحرة، إذ وفق هذا النموذج فان الذرة لا تعد حرة وانما مقتصرة على خلية واحدة في المواد الصلبة. تم اعتماد نموذج اعادة معايرة الذرة الحرة (RFA) لحساب كثافة الزخم الالكتروني ($E.M.D$) للالكترونات الخارجية (الكترونات التكافؤ) لمنحنى كومبتون $J(P_z)$ لعنصر الهافنيوم (Hf). في دراسات سابقة تم تطبيق هذا النموذج بنجاح لتحقيق استطارة كومبتون على بعض المعادن الارضية النادرة وكذلك عدد قليل من معادن السلسلة الانتقالية الثالثة (5d) [24-25].

الان لحساب منحنى كومبتون المرتبط بكثافة الزخم الالكتروني $n(p)$ كما في المعادلة (1) لعنصر الهافنيوم باستعمال نموذج (RFA). نبدأ من دالة موجه هارترى - فوك ($Hatree - Fock\ wave\ function$) المأخوذة من جداول [26] والتي يتم اقتطاعها الى حد نصف قطر ويكنر - سينتر ($Wigner-Seitz\ radius: R_0$) ويعاد معايرتها الى قيمه واحدة ضمن الشكل الكروي وذلك للحفاظ على تعادل الشحنة [23]. ان دالة الموجه الجديدة $R_{n\ell}(r)$ تعطى بالمعادلة الآتية:

$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} N_{n\ell} R_{n\ell}^{atomic}(r) & r \leq R_0 \\ 0 & r > R_0 \end{cases} \quad (2)$$

إذ ان R_0 نصف قطر ويكنر-سينتر، $N_{n\ell} R_{n\ell}^{atomic}(r)$ دالة الموجه الذرية التي تمتلك اعداد الكم (n, ℓ) والتي تعطى بالمعادلة الآتية:

$$N_{n\ell} = \int_0^{R_0} |R_{n\ell}^{atomic}(r)|^2 r^2 dr \quad (3)$$

ثم يتم استعمال هذه الدالة الموجية الجديدة في الحسابات النظرية. إن تأثير إعادة المعايرة هي الاكبر بالنسبة لإلكترونات الغلاف s وذلك لأنه يكاد ان يحتوي على شحنة (34%) ضمن كرة ويكنر- سينتر ($Wigner-Seitz$) اما إلكترونات الغلاف d فإن هذه النسبة تكون بحدود (87%) ولهذا السبب فإن تأثير عملية المعايرة عليها يكاد يكون غير محسوس.

ان شكل منحنى كومبتون المقترح لعدد من الترتيبات الالكترونية الخاصة بالغلاف (6s) قد تم حسابها باستخدام نموذج (RFA) اما الالكترونات الباقية (5d-6s) فان قيم شكل منحنى كومبتون قد اخذت من جداول [27]. ان القيم النظرية لمنحنى كومبتون $J(P_z)$ للترتيبات المحسوبة قد تم معايرتها ($Normalized$) الى قيمة واحدة وهي (25.9995) والتي تمثل المساحة تحت المنحنى لشكل منحنى كومبتون في منطقة الزخم الواقعة بين (0→7 a.u)

النتائج والمناقشة:

ان النتائج النظرية لمنحنى كومبتون $J(P_z)$ التي تم الحصول عليها بالشكل النهائي بعد كل اجراء الحسابات والتصحيحات عليها قد اعطيت في الجدول 2 تم اختيار ثلاث ترتيبات لمنحنى كومبتون نظريا وهي ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8}$) تم مقارنتها مع نموذج الذرة الحرة (FA) ($5d^2-6s^2$) وكذلك بيانات ($Density\ Functional\ With\ Generalised\ Gradient\ Approximation, DF-GGA$) [22].

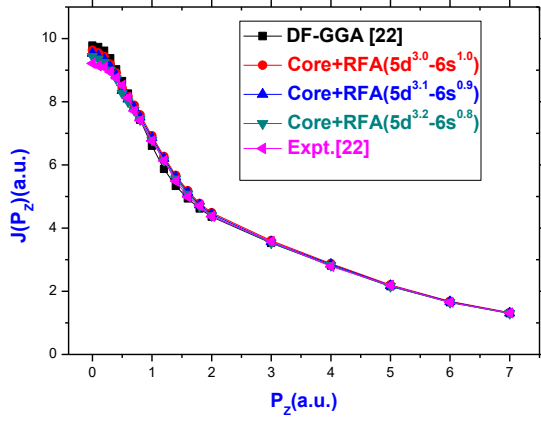
الان نلاحظ في منطقة الزخم العالي ($P_z > 2a.u$) ان كل القيم متساوية بشكل تقريبي وذلك بسبب ان الالكترونات الموجودة في هذه المنطقة هي الكترونات اللب فقط عند مقارنتها مع القيم العملية [22]. في منطقة الزخم ($1.4 < P_z < 2a.u$) نلاحظ ان قيم الترتيبات ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}$) وكذلك قيم (FA) و($DF-GGA$) متقاربة ومتساوية نوعا ما فيما بينها وعند مقارنتها مع القيم العملية [22]. في منطقة الزخم ($0.7 < P_z < 1.4a.u$) نلاحظ ان قيم الترتيب ($5d^{3.2}-6s^{0.8}$) هي الاقرب وتكون متساوية تقريبا عند مقارنتها مع القيم العملية اما قيم الترتيبات ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}$) فتكون مختلفة نوعا ما عند مقارنتها مع القيم العملية اما قيم ($DF-GGA$) فتكون قريبة نوعا ما على عكس قيم (FA) عند المقارنة مع القيم العملية [22].

في منطقة الزخم ($0.5 < P_z < 0.7 \text{ a.u.}$) نلاحظ ان قيم الترتيبات ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8}$) وكذلك قيم ($DF-GGA$) تكون متقاربة ومتساوية نوعا ما على عكس قيم (FA) عند مقارنتها مع القيم العملية [22].

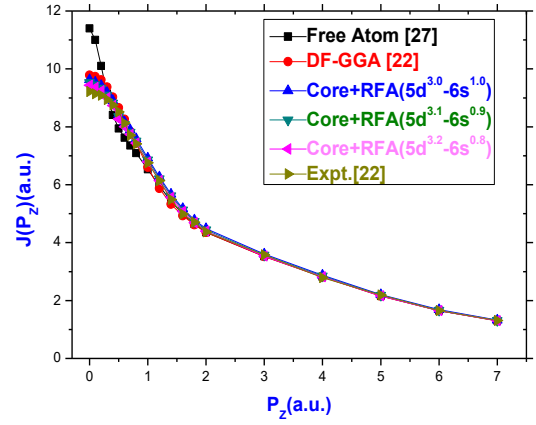
في منطقة الزخم ($P_z=0.4 \text{ a.u.}$) نلاحظ ان قيم الترتيبات ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8}$) وكذلك قيم (FA) تكون متقاربة ومتساوية نوعا ما على عكس قيم ($DF-GGA$) عند مقارنتها مع القيم العملية [22]. في منطقة الزخم ($P_z=0.0 \rightarrow 0.3$) (a.u) نلاحظ ان قيم الترتيبات ($5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8}$) وكذلك قيم ($DF-GGA$) تكون متقاربة ومتساوية نوعا ما على عكس قيم (FA) عند مقارنتها مع القيم العملية [22].

الجدول 2: يبين النتائج المحسوبة نظريا لمنحنى كومبتون $J(p_z)$ لعنصر الهافنيوم (Hf) ومقارنتها مع القيم العملية [22], كل الكميات المقاسة هي بوحدات (atomic units) كل النتائج تم معايرتها الى (25.9995) الكترونات.

P_z (a.u.)	$J(p_z)$ (e/a.u.)					
	Free atom ($5d^2-6s^2$) [27]	$DF-GGA$ [22]	Theory(RFA)			Expt. [22]
			Core +RFA $5d^{3.0} - 6s^{1.0}$	Core +RFA $5d^{3.1} - 6s^{0.9}$	Core RFA+ $5d^{3.2} - 6s^{0.8}$	
0.0	11.4	9.781	9.627	9.531	9.435	9.214±0.021
0.1	11	9.731	9.545	9.45	9.355	9.139
0.2	10.1	9.619	9.432	9.338	9.245	9.088
0.3	9.14	9.374	9.189	9.097	9.006	8.943
0.4	8.41	9.026	8.909	8.82	8.732	8.758
0.5	7.94	8.658	8.438	8.354	8.27	8.517
0.6	7.62	8.259	8.165	8.083	8.002	8.123
0.7	7.35	7.837	7.89	7.812	7.733	7.706
0.8	7.09	7.431	7.586	7.51	7.435	7.411
1.0	6.53	6.605	6.923	6.854	6.785	6.765±0.017
1.2	5.96	5.87	6.268	6.205	6.143	6.139
1.4	5.43	5.329	5.672	5.615	5.559	5.488
1.6	4.99	4.932	5.179	5.127	5.076	4.984
1.8	4.64	4.619	4.781	4.734	4.686	4.706
2	4.36	4.356	4.486	4.441	4.396	4.371±0.012
3	3.53	3.523	3.604	3.568	3.532	3.58±0.011
4	2.82	2.812	2.877	2.848	2.819	2.788±0.009
5	2.16	2.157	2.203	2.181	2.159	2.186±0.007
6	1.65	1.649	1.683	1.666	1.649	1.647±0.006
7	1.3	1.299	1.326	1.312	1.301	1.311±0.005



الشكل 2: مقارنة قيم منحني كومبتون $J(P_z)$ النظرية (RFA,DF-GGA) والعملية [22] لعنصر الهافنيوم (Hf) كل النتائج تم معايرتها الى (25.9995) الكترونات.



الشكل 1: مقارنة قيم منحني كومبتون $J(P_z)$ النظرية والعملية [22] لعنصر الهافنيوم (Hf) كل النتائج تم معايرتها الى (25.9995) الكترونات.

في الشكل 1 الذي يبين المقارنة بين القيم (الحسابات) النظرية لشكل منحني كومبتون $J(P_z)$ للترتيبات التي تم استخراجها باعتماد نموذج (RFA) وقيم (FA,DF-GGA) مع القيم العملية المعتمدة والمعدة في الجدول 1 إذ نلاحظ بشكل أفضل المساواة والاختلافات في القيم النظرية المستخرجة من النماذج الثلاثة وهي (RFA,FA,DF-GGA) مع القيم العملية إذ نلاحظ ان قيم النموذجين (RFA,DF-GGA) هي الاقرب نوعا ما الى القيم العملية بالمقارنة مع نموذج الذرة الحر (FA) في منطقة الزخم $(P_z=0 \rightarrow 0.3a.u.)$.

اما في الشكل 2 الذي يبين المقارنة بين القيم (الحسابات) النظرية لشكل منحني كومبتون $J(P_z)$ للترتيبات التي تم استخراجها باعتماد نموذج (RFA) وقيم (DF-GGA) فقط مع القيم العملية المعتمدة والمعدة في الجدول 1 إذ نلاحظ بشكل أفضل المساواة في القيم النظرية المستخرجة من النموذجين وهي (RFA,DF-GGA) مع القيم العملية المعتمدة.

والان لإيجاد أفضل ترتيب الكتروني من الترتيبات المختارة في الحسابات النظرية (RFA) لابد من ايجاد مجموع مربع الفرق بين القيم النظرية للترتيبات العشرية $(5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8})$ والقيم العملية من تطبيق العلاقة الآتية:

$$\left(\sum_0^7 (J_{theo}(p_z) - J_{exp}(p_z)) \right)^2 = \sum_0^7 |\Delta J(p_z)|^2 \quad (4)$$

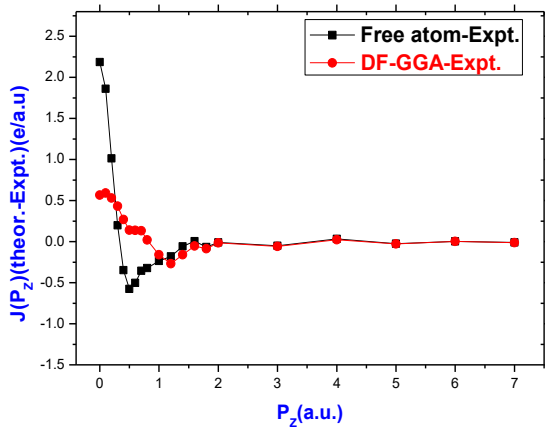
إذ ان: $J_{theo}(p_z), J_{exp}(p_z)$ قيم منحني كومبتون العملية و النظرية على التوالي وبعد الرجوع الى المعادلة 4 تم ايجاد الفروقات للترتيبات النظرية المأخوذة $(5d^{3.0}-6s^{1.0}, 5d^{3.1}-6s^{0.9}, 5d^{3.2}-6s^{0.8})$ وكانت النتائج كما في الجدول 3 .

الجدول 3: مقدار الفروقات بين قيم الحسابات النظرية (RFA) والقياسات العملية لعنصر الهافنيوم (Hf).

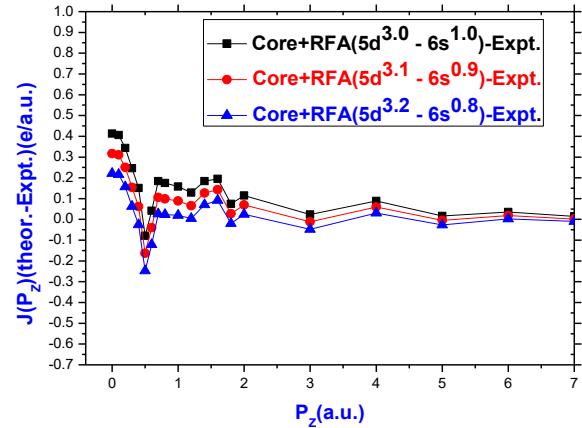
ت	الترتيب الالكتروني	مقدار الفرق
1	RFA(5d ^{3.2} - 6s ^{0.8})	2.8876
2	RFA(5d ^{3.1} - 6s ^{0.9})	2.8999
3	RFA(5d ^{3.0} - 6s ^{1.0})	2.9198

من الجدول 3 نلاحظ ان افضل ترتيب الكتروني هو $(RFA(5d^{3.2} - 6s^{0.8}))$ وذلك لأنه يمتلك اقل قيمة لمجموع مربع الفرق بين القيم النظرية والقيم العملية وبذلك يكون هو الترتيب الالكتروني الافضل والادق لعنصر الهافنيوم (Hf) و الشكل 3 يبين رسم القيم الناتجة من هذه العملية ونلاحظ من الشكل 3 ان قيم الترتيبين الالكترونيين $(RFA(5d^{3.1} - 6s^{0.9}))$ و $(RFA(5d^{3.2} - 6s^{0.8}))$ هما الاقرب الى النتائج العملية من الترتيب الالكتروني $(RFA(5d^{3.0} - 6s^{1.0}))$ إذ ان قيم هذه الترتيبات تترواح في

المناطق الموجبة والسالبة لقيم الزخم ($P_z=0.5 \rightarrow 1.4$) بعدها تصبح الفروق متناظرة ومتقاربة ضمن المنطقة ($P_z=1.4 \rightarrow 7$) والشكل 4 يبين رسم مقارنة الفروق بين القيم العملية والنظرية (المحسوبة) لنموذج (FA,DF-GGA) فقط, إذ نلاحظ بشكل واضح ان الفرق كبير جدا لنموذج الذرة الحر مع النتائج العملية المعتمدة.



الشكل 4 : رسم مقارنة الفروق بين القيم العملية [22] والنظرية (المحسوبة) لنموذج (FA,DF-GGA) فقط لعنصر الهافنيوم (Hf), كل النتائج تم معايرتها الى (25.9995) الكترونات.



الشكل 3 : رسم مقارنة الفروق بين القيم العملية [22] والنظرية (المحسوبة) لنموذج (RFA) فقط لعنصر الهافنيوم (Hf) كل النتائج تم معايرتها الى (25.9995) الكترونات.

الاستنتاجات:

ان الترتيب الالكتروني $RFA(5d^{3.2} - 6s^{0.8})$ لعنصر الهافنيوم (Hf) المحسوب باستخدام طريقة (RFA) بعد مقارنته بالقيم العملية المعتمدة وبيانات ($DF-GGA$) كان الافضل من بين الترتيبات العشرية المختارة .

شكر وتقدير: اتقدم بالشكر الجزيل الى رئيس واعضاء الهيئة التدريسية في قسم الفيزياء /كلية التربية-جامعة سامراء لقاء مساعدتهم الكريمة في هذا العمل.

References

- Nielsen, R. H. (2000). Hafnium and hafnium compounds. *Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology*. doi.org/10.1002/0471238961.0801061414090512.a01.pub2
- Mendonça, J. T., & Haas, F. (2023). Compton scattering of plasmons. *Physica Scripta*, 98(6), 065603. doi.org/10.1088/1402-4896/acd14d
- Aguiar, J. C., Di Rocco, H. O., & Mitnik, D. (2013). Experimental Compton profiles of Be, Al and Ti and comparisons to generalized gradient approximation calculations. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 74(10), 1341-1348. doi.org/10.1016/j.jpcs.2013.04.018
- Fathi, S. J. (2021). Properties and Electrical of Nano composite (Ni_{1-x}Sr_xFe₁₂O₁₉) prepared by sol-gel. *Samarra Journal of Pure and Applied Science*, 3(4), 134-147. doi.org/10.54153/sjpas.2021.v3i4.303
- Darweesh, S. Y., Jumaa, I. H., & ALYAR, H. (2023). Effect of Repeated Additions of Silica Nanoparticles on the Physical Properties of Nickel. *Samarra Journal of Pure and Applied Science*, 5(2), 104-117. doi.org/10.54153/sjpas.2023.v5i2.481
- Cooper, M. J. (1985). Compton scattering and electron momentum determination. *Reports on Progress in Physics*, 48(4), 415. doi.org/10.1088/0034-4885/48/4/001
- Sahariya, Jagrati, and B. L. Ahuja. (2012) Electronic structure of Ni₂TiAl: Theoretical aspects and Compton scattering measurement. *Physica B: Condensed Matter* 407.21: 4182-4185: doi.org/10.1016/j.physb.2012.07.001

8. Compton, A. H. (1923). The spectrum of scattered X-rays. *Physical Review*, 22(5), 409. doi.org/10.1103/PhysRev.22.409
9. Joshi, Ritu, Jagrati Sahariya, and B. L. Ahuja. (2011) Compton scattering study and electronic properties of vanadium carbide: A validation of hybrid functional. *Physica B: Condensed Matter* 406.10: 2007-2012. doi.org/10.1016/j.physb.2011.03.007
10. Sharma, G., Sharma, V., Mishra, M. C., Dhaka, M. S., & Sharma, B. K. (2011). Electron momentum density distribution in TiCu, *Intermetallics*, 19(5), 666-670. doi.org/10.1016/j.intermet.2011.01.008
11. James, A. D., Sekania, M., Dugdale, S. B., & Chioncel, L. (2021). Magnetic Compton profiles of Ni beyond the one-particle picture: Numerically exact and perturbative solvers of dynamical mean-field theory. *Physical Review B*, 103(11), 115144. doi.org/10.1103/PhysRevB.103.115144
12. Kaliman, Z., K. Pisk, and R. H. Pratt. (2011) Compton scattering from positronium and validity of the impulse approximation. *Physical Review A* 83.5: 053406: doi.org/10.1103/PhysRevA.83.053406
13. Ahuja, B. L., Arora, G., Ahmed, G., Rathor, A., Sharma, V., Kádas, K., & Ahuja, R. (2009). A study of electron momentum density and charge transfer in W–Cu system. *Journal of alloys and compounds*, 467(1-2), 595-599. doi.org/10.1016/j.jallcom.2007.12.067
14. Pazirandeh, Ali, and Maryam Azizi. (2010) Theoretical and experimental analysis of titanium Compton profile using ¹³⁷Cs. *Applied Radiation and Isotopes* 68.9: 1682-1686. doi.org/10.1016/j.apradiso.2010.03.011
15. Heda, N. L., et al. (2010) Electronic properties and Compton profiles of molybdenum dichalcogenides. *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 71.3: 187-193. doi.org/10.1016/j.jpics.2009.11.002
16. Khidzir, S. M., F. Maulida, and W. A. T. Wan Abdullah. (2017) GW approximation study of the Compton profile of ZnSe. *Radiation Effects and Defects in Solids* 172.7-8: 664-677: doi.org/10.1080/10420150.2017.1377714
17. Khalaf, M., & Kaminer, I. (2023). Compton scattering driven by intense quantum light. *Science Advances*, 9(1), eade0932: [doi/10.1126/sciadv.ade0932](https://doi.org/10.1126/sciadv.ade0932)
18. Rathor, A., Arora, G., & Ahuja, B. L. (2008). Band-structure calculations and electron momentum densities of AgCl and AgBr. *physica status solidi (b)*, 245(8), 1563-1570. doi.org/10.1002/pssb.200844050
19. Habs, D., Tajima, T., Schreiber, J., Barty, C. P. J., Fujiwara, M., & Thirolf, P. G. (2009). Vision of nuclear physics with photo-nuclear reactions by laser-driven beams. *The European Physical Journal D*, 55(2), 279. doi.org/10.1140/epjd/e2009-00101-2
20. Gu, Y. J., Jirka, M., Klimo, O., & Weber, S. (2019). Gamma photons and electron-positron pairs from ultra-intense laser-matter interaction: A comparative study of proposed configurations. *Matter and Radiation at Extremes*, 4(6), 064403. doi.org/10.1063/1.5098978
21. Sharma, G., et al. (2011), Compton profile and charge transfer study in intermetallic Ti–Al system. *Intermetallics* 19.8: 1107-1114. doi.org/10.1016/j.intermet.2011.03.004
22. Khera, S., S. Mathur, and B. L. Ahuja. (2007) Electronic structure of hafnium: A Compton profile study. *Pramana* 68: 91-98. doi.org/10.1007/s12043-007-0010-z
23. Berggren, K. F. (1972). Renormalized-Free-Atom Model and the Electron Momentum Distribution in Vanadium. *Physical Review B*, 6(6), 2156.

doi.org/10.1103/PhysRevB.6.2156

24. Ahuja, B. L., & Sharma, M. (2005). The electron momentum distribution in holmium. *Radiation Physics and Chemistry*, 73(3), 131-136.
doi.org/10.1016/j.radphyschem.2004.11.001
25. Malhotra, H., Heda, N. L., & Ahuja, B. L. (2005). Compton profile study of thulium. *physica status solidi (b)*, 242(5), 1036-1042. doi.org/10.1002/pssb.200402139
26. Fischer, C. F. (1972). Average-Energy-of-Configuration Hartree-Fock Result for the Atoms Helium to Radon. *Atomic Data*, 4, 301. [doi.org/10.1016/S0092-640X\(72\)80008-1](https://doi.org/10.1016/S0092-640X(72)80008-1)
27. Biggs, F., Mendelsohn, L. B., & Mann, J. B. (1975). Hartree-Fock Compton profiles for the elements. *Atomic data and nuclear data tables*, 16(3), 201-309.
[doi.org/10.1016/0092-640X\(75\)90030-3](https://doi.org/10.1016/0092-640X(75)90030-3)

Investigation of electronic density in(s,d) orbitals for hafnium (Hf) using compton scattering technique

Mohammed N. Mohammed

Department of Alduluiya Education, Salahdeen Education Directorate, Ministry of Education –IRAQ

Article Information

Received: 26/06/2023

Revised: 30/07/2023

Accepted: 06/08/2023

Published:30/12/2023

Keywords:

*Compton profile,
Renormalized-Free Atom
(RFA) model, free atom
model*

Corresponding Author

E-mail:

moh.nz.2023@gmail.com

Mobile: 07800018430

Abstract

In this paper, the study presents and calculates of the Compton Profile density of the element hafnium (Hf) with an atomic number ($Z = 72$), where different theoretical calculations are made for the decimal arrangements of the last two shells ($5d^{2+x}-6s^{2-x}$) where $[x]$ ranges from Between $(0 \rightarrow 2)$ by adopting the Renormalized-Free Atom (RFA) model, and then the results we obtained, which represent the Compton Profile $J(P_z)$, were compared with the results of the available experimental measurements. Comparing these results with the approved data of the Free Atom model (FA), and the data of (Density Functional with Generalised Gradient Approximation, DF-GGA), and it is found that the best electronic arrangement for the element is ($5d^{3.2}-6s^{0.8}$) and compatible It is good if the comparison is made with the available experimental values.