مجلة جامعة البعث

سلسلة العلوم الأساسية

مجلة علمية محكمة دورية

المجلد 44 . العدد 17

1443 هـ - 2022 م

الأستاذ الدكتور عبد الباسط الخطيب

رئيس جامعة البعث

المدير المسؤول عن المجلة

أ. د. ناصر سعد الدين	**رئيس هيئة التحرير**
أ. د. درغام سلوم	**رئيس التحرير**

مديرة مكتب مجلة جامعة البعث

بشرى مصطفى

د. محمد هلال	**عضو هيئة التحرير**
د. فهد شريباتي	**عضو هيئة التحرير**
د. معن سلامة	**عضو هيئة التحرير**
د. جمال العلي	**عضو هيئة التحرير**
د. عباد كاسوحة	**عضو هيئة التحرير**
د. محمود عامر	**عضو هيئة التحرير**
د. أحمد الحسن	**عضو هيئة التحرير**
د. سونيا عطية	**عضو هيئة التحرير**
د. ريم ديب	**عضو هيئة التحرير**
د. حسن مشرقي	**عضو هيئة التحرير**
د. هيثم حسن	**عضو هيئة التحرير**
د. نزار عبشي	**عضو هيئة التحرير**

تهدف المجلة إلى نشر البحوث العلمية الأصيلة، ويمكن للراغبين في طلبها الاتصال بالعنوان التالي:

رئيس تحرير مجلة جامعة البعث

سورية . حمص . جامعة البعث . الإدارة المركزية . ص . ب (77)

. هاتف / فاكس : 2138071 31 963 ++

. موقع الإنترنت : www.albaath-univ.edu.sy

. البريد الالكتروني : magazine@ albaath-univ.edu.sy

ISSN: 1022-467X

شروط النشر في مجلة جامعة البعث

الأوراق المطلوبة:

- 2 نسخة ورقية من البحث بدون اسم الباحث / الكلية / الجامعة) + CD / word من البحث منسق حسب شروط المجلة.
- طابع بحث علمي + طابع نقابة معلمين.
- **اذا كان الباحث طالب دراسات عليا:**

يجب إرفاق قرار تسجيل الدكتوراه / ماجستير + كتاب من الدكتور المشرف بموافقته على النشر في المجلة.

- **اذا كان الباحث عضو هيئة تدريسية:**

يجب إرفاق قرار المجلس المختص بإنجاز البحث أو قرار قسم بالموافقة على اعتماده حسب الحال.

- **اذا كان الباحث عضو هيئة تدريسية من خارج جامعة البعث :**

يجب إحضار كتاب من عمادة كليته تثبت أنه عضو بالهيئة التدريسية و على رأس عمله حتى تاريخه.

- **اذا كان الباحث عضواً في الهيئة الفنية :**

يجب إرفاق كتاب يحدد فيه مكان و زمان إجراء البحث ، وما يثبت صفته وأنه على رأس عمله.

- **يتم ترتيب البحث على النحو الآتي بالنسبة لكليات (العلوم الطبية والهندسية والأساسية والتطبيقية):**

عنوان البحث . . ملخص عربي و إنكليزي (كلمات مفتاحية في نهاية الملخصين).

1- مقدمة

2- هدف البحث

3- مواد وطرق البحث

4- النتائج ومناقشتها .

5- الاستنتاجات والتوصيات .

6- المراجع.

- **يتم ترتيب البحث على النحو الآتي بالنسبة لكليات (الآداب – الاقتصاد– التربية – الحقوق – السياحة – التربية الموسيقية وجميع العلوم الإنسانية):**
- عنوان البحث . . ملخص عربي و إنكليزي (كلمات مفتاحية في نهاية الملخصين).

1. مقدمة.
2. مشكلة البحث وأهميته والجديد فيه.
3. أهداف البحث و أسئلته.
4. فرضيات البحث و حدوده.
5. مصطلحات البحث و تعريفاته الإجرائية.
6. الإطار النظري و الدراسات السابقة.
7. منهج البحث و إجراءاته.
8. عرض البحث و المناقشة والتحليل
9. نتائج البحث.
10. مقترحات البحث إن وجدت.
11. قائمة المصادر والمراجع.

7- يجب اعتماد الإعدادات الآتية أثناء طباعة البحث على الكمبيوتر:

أ- قياس الورق 17.5×25 B5.

ب- هوامش الصفحة: أعلى 2.54- أسفل 2.54 – يمين 2.5- يسار 2.5 سم

ت- رأس الصفحة 1.6 / تذييل الصفحة 1.8

ث- نوع الخط وقياسه: العنوان . Monotype Koufi قياس 20

. كتابة النص Simplified Arabic قياس 13 عادي . العناوين الفرعية Simplified Arabic قياس 13 عريض.

ج . يجب مراعاة أن يكون قياس الصور والجداول المدرجة في البحث لا يتعدى 12سم.

8- في حال عدم إجراء البحث وفقاً لما ورد أعلاه من إشارات فإن البحث سيهمل ولا يرد البحث إلى صاحبه.

9- تقديم أي بحث للنشر في المجلة يدل ضمناً على عدم نشره في أي مكان آخر، وفي حال قبول البحث للنشر في مجلة جامعة البعث يجب عدم نشره في أي مجلة أخرى.

10- الناشر غير مسؤول عن محتوى ما ينشر من مادة الموضوعات التي تنشر في المجلة

11- تكتب المراجع ضمن النص على الشكل التالي: [1] ثم رقم الصفحة ويفضل استخدام التهميش الإلكتروني المعمول به في نظام وورد WORD حيث يشير الرقم إلى رقم المرجع الوارد في قائمة المراجع.

تكتب جميع المراجع باللغة الانكليزية (الأحرف الرومانية) وفق التالي:

آ . إذا كان المرجع أجنبياً:

الكنية بالأحرف الكبيرة . الحرف الأول من الاسم تتبعه فاصلة . سنة النشر . وتتبعها معترضة (–) عنوان الكتاب ويوضع تحته خط وتتبعه نقطة . دار النشر وتتبعها فاصلة . الطبعة (ثانية . ثالثة) . بلد النشر وتتبعها فاصلة . عدد صفحات الكتاب وتتبعها نقطة.

وفيما يلي مثال على ذلك:

–MAVRODEANUS, R1986– **Flame Spectroscopy**. Willy, New York, 373p.

ب . إذا كان المرجع بحثاً منشوراً في مجلة باللغة الأجنبية:

. بعد الكنية والاسم وسنة النشر يضاف عنوان البحث وتتبعه فاصلة، اسم المجلد ويوضع تحته خط وتتبعه فاصلة . المجلد والعدد (كتابة مختزلة) وبعدها فاصلة . أرقام الصفحات الخاصة بالبحث ضمن المجلة.

مثال على ذلك:

BUSSE,E 1980 Organic Brain Diseases **Clinical Psychiatry News** , Vol. 4. 20 – 60

ج. إذا كان المرجع أو البحث منشوراً باللغة العربية فيجب تحويله إلى اللغة الإنكليزية و التقيد

بالبنود (أ و ب) ويكتب في نهاية المراجع العربية: (المراجع In Arabic)

رسوم النشر في مجلة جامعة البعث:

1. دفع رسم نشر (20000) ل.س عشرون ألف ليرة سورية عن كل بحث لكل باحث يريد نشره في مجلة جامعة البعث.
2. دفع رسم نشر (50000) ل.س خمسون الف ليرة سورية عن كل بحث للباحثين من الجامعة الخاصة والافتراضية .
3. دفع رسم نشر (200) مئتا دولار أمريكي فقط للباحثين من خارج القطر العربي السوري .
4. دفع مبلغ (3000) ل.س ثلاثة آلاف ليرة سورية رسم موافقة على النشر من كافة الباحثين.

المحتوى

		الصفحة
تفريق مكعب عدد غاوص صحيح إلى ثلاثة مكعبات في $\mathbb{Z}[i]$	نجوى نجوم د.عبد الباسط الخطيب د.محمد نور شمة	30-11
تحضير المركب سيليكات الكالسيوم $CaSiO3$ بطريقة الترسيب المشترك	نغم فاخوري د. إبراهيم أسعد اسماعيل	52-31
دراسة كوانتية نسبوية لتحديد بعض الثوابت الطيفية لبعض الجزيئات ثنائية الذرة باستخدام طريقة تابعية الكثافة (DFT)	د.عادل المخللاتي د.سليمان ديبو نقولا العدره	82-53
التكاملات على سطح الكرة في الفضاء $\Re^n$ بطريقة النواة المولدة	هبه اصلان د. حامد عباس	112-83

تهجين خوارزمية Salp Swarm باستخدام الخوارزمية الجينية لتطوير منهجية جديدة لإيجاد شجرة القرار الأمثلية	هدى حبش د. زكريا زكريا د. عبد الله العمر	130-113
العـــوادم المـــرافقـــة والحـــدود المبـــاشـــرة	هلا مستو د. إيمان لخوجة د. حمزة حاكمي	150-131

تفريق مكعب عدد غاوص صحيح إلى ثلاثة مكعبات في $\mathbb{Z}[i]$

طالبة الدّكتوراه: نجوى أحمد نجّوم – كليّة العلوم – قسم الرّياضيّات

إشـــــــــراف: أ. د. عبد الباسط الخطيب – جبر خطّي – جامعة البعث.

أ. د. محمد نور شمّة – تحليل رياضي – جامعة دمشق.

ملخص البحث

درسنا في هذا البحث مسألة تفريق مكعّب عدد غاوص صحيح إلى ثلاثة مكعّبات في $[i]$ ، وأسمينا الرباعيّات المحقّقة لذلك بالرباعيّات الفيرماويّة.

درسنا الحالة التي تكون فيها الأقسام الحقيقيّة رباعيّة فيرماويّة، وقمنا بتوليد رباعيّات فيرماويّة في $[i]$ انطلاقاً من رباعيّات فيرماويّة في .

قمنا بتعميم التّوليد بوسطاء صحيحة لرباعيّات فيرماويّة في إلى التّوليد بوسطاء غاوص صحيحة لرباعيّات فيرماويّة في $[i]$.

الكلمات المفتاحيّة:

عدد غاوص الصّحيح – رباعيّة فيرماويّة – توليد – وسطاء صحيحة.

A Decomposition a Cube of Gaussian Integer into Three Cubes in $\mathbb{Z}[i]$

Najwa Ahmad Najjom – Faculty of Science – Albaath university

Supervisor: P.Dr. **Abdul Basit Al-Khatib** - Albaath university

P.Dr. **Muhammad Noor Shamma** - Damascus university

Abstract

We study in this paper the problem of decomposition of Gaussian integer cube into three cubes in $\mathbb{Z}[i]$, and call these quadruples by Fermat quadruples. We study the case where the real parts are Fermat quadruples, and generate Fermat quadruple in $\mathbb{Z}[i]$ from another one in $\mathbb{Z}$.

We generalize the generation by integer parameters for Fermat quadruples in $\mathbb{Z}$ to the generation by Gaussian integer Parameters for Fermat quadruples in $\mathbb{Z}[i]$.

Key Words:

Gaussian integer – Fermat Quadruple - generation - integer Parameters .

1.مقدّمة

كتب فيرما على هامش نسخته من طبعة باشيت لأعمال ديوفانتس: «من المستحيل فصل المكعّب إلى مكعّبين، أو قوّة رابعة إلى مجموع قوّتين من الدرجة الرابعة، أو بشكل عام أي قوّة أعلى من الثانية إلى اثنتين من القوى من نفس الدّرجة، لقد اكتشفت إثباتاً رائعاً حقّاً، وهذا الهامش أصغر من أن يحتويه» [1] .

في اللغة الحديثة، هذا يعني: من أجل n أي عدد طبيعي أكبر تماماً من 2 فإنّ معادلة ديوفانتس:

$$x^n + y^n = z^n \ ; \ n > 2 \ (n \in \square)$$

ليس لها حلول مختلفة عن الصّفر في $\square$، حيث يوجد لهذه المعادلة حلول مبتذلة عندما يكون إحدى المتغيّرات الصحيحة يساوي الصفر.

سمّيت هذه المسألة فيما بعد بمبرهنة فيرما الأخيرة، أو حدسيّة (تخمين) فيرما، وقد حدسها بيير فيرما في العام 1637م. وعلى مدى 358 عام من جهود علماء كثر في الرياضيّات في محاولة إثبات هذه المبرهنة والتي باءت بالفشل، إلّا أنّها اعطت تقدّماً كبيراً في نظريّة الأعداد. وبعد سنواتٍ من نضال «أندرو وايلز» في محاولة حل هذا اللغز، الذي صادفه طفلاً وشُغف به على مدى حياته، تمكّن في العام 1995م من إثبات مبرهنة فيرما الأخيرة، والتي تعد أكثر المبرهنات شهرةً في تاريخ الرياضيّات[2].

إذاً لا يمكن تفريق المكعّب إلى مجموع مكعّبين، ولكن يمكن تفريق المكعّب إلى مجموع ثلاثة مكعّبات، وفي نظريّة الأعداد: توجد حلول صحيحة لمعادلة ديوفانتس:

$$x^3 + y^3 + z^3 = t^3$$

وكمثال عن تلك الحلول: $(3,4,5,6)$. في هذا البحث نقوم بدراسة تفريق مكعّب عدد غاوص صحيح إلى مجموع ثلاث مكعّبات في $[i]$ $\square$، أي دراسة المعادلة:

$$z_1^{\,3}+z_2^{\,3}+z_3^{\,3}=z_4^{\,3}$$

في $\mathbb{Z}[i]$، وأسمينا الحلول: رباعيّات فيرماويّة.

2. هدف البحث

يهدف البحث إلى دراسة تفريق مكعّب عدد من $\mathbb{Z}[i]$ إلى مجموع ثلاثة مكعّبات أعداد من $\mathbb{Z}[i]$، ودراسة توليد الرباعيّات الفيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

3. المناقشة و النّتائج

3 – 1: تعاريف أساسيّة:

تعريف1: تُعرّف الرّباعيّة الفيرماويّة في $\mathbb{Z}$ بأنها مجموعة من أربع أعداد صحيحة موجبة (x,y,z,t) تحقق معادلة ديوفانتس : $x^3+y^3+z^3=t^3$.

تعريف2: الرّباعيّة الفيرماويّة الأوليّة في $\mathbb{Z}$ هي رباعيّة فيرماويّة (x,y,z,t) تحقق: $(x,y,z,t)=1$ (أي أنّ x,y,z,t أوليّة فيما بينهما)

تعريف3: تُعرّف مجموعة أعداد غاوص الصحيحة بأنها حلقة جزئيّة من مجموعة الأعداد المركبة المؤلّفة من جميع الأعداد $x+iy$ حيث x,y عددان صحيحان، ويُرمز لها بـ $\mathbb{Z}[i]$ أو $\mathbb{Z}[3]$.

3 – 2: الرّباعيّات الفيرماويّة في $\mathbb{Z}[\mathbf{i}]$

تعريف4: لتكن z_1,z_2,z_3,z_4 أعداد غاوص صحيحة، عندئذٍ نسمّي الرّباعيّة (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، إذا تحقّق الشّرط الآتي:

$$z_1^{\,2}+z_2^{\,2}+z_3^{\,2}=z_4^{\,2} \qquad (1)$$

الآن بفرض $z=x+iy$ عندئذٍ:

$$z^3=(x+iy)^3=\left(x^3-3xy^2\right)+i\left(3x^2y-y^3\right)$$

بفرض (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة فيرماويّة، عندئذٍ فإنّ المعادلة (1) تكون محقّقة. فإذا كانت $z_i=x_i+y_i$ حيث $i\in\{1,2,3,4\}$ (سنفترض ذلك في كل هذه الفقرة) فإنّ العلاقة (1) تكافئ جملة المعادلتين:

$$\begin{aligned}&3\left(x_1{y_1}^2+x_2{y_2}^2+x_3{y_3}^2-x_4{y_4}^2\right)={x_1}^3+{x_2}^3+{x_3}^3-{x_4}^3\\&3\left(y_1{x_1}^2+y_2{x_2}^2+y_3{x_3}^2-y_4{x_4}^2\right)={y_1}^3+{y_2}^3+{y_3}^3-{y_4}^3\end{aligned}\qquad(2)$$

الآن بفرض أنّ: (x_1,x_2,x_3,x_4) رباعيّة فيرماويّة فإنّ:

$${x_1}^2+{x_2}^2+{x_3}^2={x_4}^2\qquad(3)$$

وتصبح جملة المعادلات (2) بالشّكل:

$$\begin{aligned}&x_1{y_1}^2+x_2{y_2}^2+x_3{y_3}^2-x_4{y_4}^2=0\\&3\left(y_1{x_1}^2+y_2{x_2}^2+y_3{x_3}^2-y_4{x_4}^2\right)={y_1}^3+{y_2}^3+{y_3}^3-{y_4}^3\end{aligned}\qquad(4)$$

نلاحظ أنّ جملة المعادلات (4) محقّقة في حالة $y_i=kx_i$ حيث $i\in\{1,2,3,4\}$ و $k\in\mathbb{Z}$، وبالتّالي نخلص إلى النتيجة الآتية:

نتيجة 1

بفرض أنّ الرباعيّة (x_1,x_2,x_3,x_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}$، فإنّ الرباعيّة الآتية:

$$(x_1+iky_1,x_2+iky_2,x_3+iky_3,x_4+iky_4)\,;\,k\in\mathbb{Z}$$

فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

وبنفس الطريقة إذا كانت (y_1,y_2,y_3,y_4) رباعيّة فيرماويّة فإنّ:

$${y_1}^2+{y_2}^2+{y_3}^2={y_4}^2\qquad(5)$$

وتصبح جملة المعادلات (2) بالشّكل:

$$\begin{aligned} &3\left(x_1{y_1}^2+x_2{y_2}^2+x_3{y_3}^2-x_4{y_4}^2\right)={x_1}^3+{x_2}^3+{x_3}^3-{x_4}^3 \\ &y_1{x_1}^2+y_2{x_2}^2+y_3{x_3}^2-y_4{x_4}^2=0 \end{aligned} \qquad (6)$$

نلاحظ أنّ جملة المعادلات (6) محقّقة في حالة $x_i=ky_i$ حيث $i\in\{1,2,3,4\}$ و $k\in\mathbb{Z}$، وبالتّالي نخلص إلى النتيجة الآتية:

نتيجة 2

بفرض أنّ الرباعيّة (y_1,y_2,y_3,y_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}$، فإنّ الرباعيّة الآتية:

$$(kx_1+iy_1,kx_2+iy_2,kx_3+iy_3,kx_4+iy_4)\,;\,k\in\mathbb{Z}$$

فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

ملاحظة 1:

في الحقيقة، عندما تكون $k\in\mathbb{Z}$ تبقى الرباعيّات المتضّمنة في النتيجتين 1 و 2 تحقّق المعادلة (1) وتكون الرباعيّة:

$$(k_1x_1+ik_2y_1,k_1x_2+ik_2y_2,k_1x_3+ik_2y_3,k_1x_4+ik_2y_4)$$

رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$. حيث $k_1,k_2\in\mathbb{Z}$ و $k=\dfrac{k_2}{k_1}$ بما يتوافق مع النتيجة 1، و $k=\dfrac{k_1}{k_2}$ بما يتوافق مع النتيجة 2.

نتيجة3:

بفرض أنّ (a,b,c,d) رباعيّة فيثاغوريّة في $\mathbb{Z}$، وكانت p,q كثيرتي حدود، فإذا كان k عدداً صحيحاً، فإنّ الرباعيّة الآتية:

$\left(p(k)a+iq(k)a\ ,\ p(k)b+iq(k)b\ ,\ p(k)c+iq(k)c\ ,\ p(k)d+iq(k)d\right)$

فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

مثال1:

من أجل الرّباعيّة $(3,4,5,6)$ الفيرماويّة في $\mathbb{Z}$، وكثيرتا الحدود $p(x)=x+1$, $q(x)=x^2$ فإنّ الرباعيّات الآتية:

$$\left(3k+3+3k^2i\ ,\ 4k+4+4k^2i\ ,\ 5k+5+5k^2i\ ,\ 6k+6+6k^2i\right)$$

فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

$k=1$	$(6+3i\ ,\ 8+4i\ ,\ 10+5i\ ,\ 12+6i)$
$k=2$	$(9+12i\ ,\ 12+16i\ ,\ 15+20i\ ,\ 18+24i)$
$k=3$	$(12+27i\ ,\ 16+36i\ ,\ 20+45i\ ,\ 24+54i)$

مبرهنة 1:

بفرض أنّ (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، وبفرض أنّ (x_1,x_2,x_3,x_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}$. إذا كانت:

$$\left(y_i,y_j,y_k\right)=k\left(x_i,x_j,x_k\right)$$

حيث $k\in\mathbb{Z}$ و $i,j,k\in\{1,2,3,4\}$ بحيث $i<j<k$.

عندئذٍ فإنّ: $x_\ell=y_\ell$ حيث: $\ell\in\{1,2,3,4\}\setminus\{i,j,k\}$

الإثبات:

بفرض أنّ: $(y_1,y_2,y_3)=k(x_1,x_2,x_3)$ عندئذٍ بالتعويض في جملة المعادلات (4)، نجد:

$$\begin{aligned} &k^2\left(x_1^3+x_2^3+x_3^3\right)-x_4y_4^2=0\\ &3k\left(x_1^3+x_2^3+x_3^3\right)-3y_4x_4^2=k^3\left(x_1^3+x_2^3+x_3^3\right)-y_4^3 \end{aligned} \qquad (7)$$

وكون: (x_1,x_2,x_3,x_4) فيرماويّة في $\square$، فإنّ المعادلات (7) تُكتب بالشّكل:

$$\begin{aligned} &k^2x_4^3-x_4y_4^2=0\\ &3kx_4^3-3y_4x_4^2=k^3x_4^3-y_4^3 \end{aligned} \qquad (8)$$

وهذه الجملة تكافئ:

$$\begin{aligned} &y_4^2=k^2x_4^2\\ &x_4^3\left(3k-k^3\right)=y_4\left(3x_4^2-y_4^2\right) \end{aligned} \qquad (9)$$

بتعويض الأولى في الثّانية، نجد:

$$kx_4^3\left(3-k^2\right)=y_4x_4^2\left(3-k^2\right)$$

وهي تكافئ ضمن شروط المسالة:

$$y_4=kx_4$$

وبنفس الطريقة نجد:

- إذا كان $(y_1,y_2,y_4)=k(x_1,x_2,x_4)$ فإنّ: $y_3=kx_3$.
- إذا كان $(y_1,y_3,y_4)=k(x_1,x_3,x_4)$ فإنّ: $y_2=kx_2$.

- إذا كان $(y_2,y_3,y_4)=k(x_2,x_3,x_4)$ فإنّ: $y_1=kx_1$. ■

من خلال ما تقدّم تبيّن أنّه إذا كانت (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة ما في $\mathbb{Z}[i]$، ولنفرض أنّ: (x_1,x_2,x_3,x_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}$ ، عندئذٍ فإنّه إذا كان $y_i=kx_i$ حيث $i\in\{1,2,3,4\}$ و $k\in\mathbb{Z}$، فإنّ الرباعيّة (z_1,z_2,z_3,z_4) فيثاغوريّة، ولكن ماذا عن العكس؟

أي هل إذا كانت (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، وكانت: (x_1,x_2,x_3,x_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}$ فإنّ الحل الوحيد للجملة (4) هو: $(y_1,y_2,y_3,y_4)=k(x_1,x_2,x_3,x_4)$؟؟؟

في الحقيقة قمنا بالاختبار الآتي:

بما أنّ $(1,6,8,9)$ رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}$، أخذنا الرّباعيّة:

$(1+ia,6+ib,8+ic,9+id)$ في $\mathbb{Z}[i]$، فإذا كانت الرباعيّة الأخيرة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$ فإنّ الجملة (4) تكافئ:

$$\begin{aligned} &a^2+6b^2+8c^2=9d^2\\ &a^3+b^3+c^3-d^3=3(a+36b+64c-81t)\end{aligned} \qquad (9)$$

وباستخدام لغات البرمجة $(Turbo\ Bascal)$ أجرينا بحثاً عن الأعداد التي تحقّق الجملة الأخيرة فتبيّن أنّ الحلول:

$$(a,b,c,d)\in\{(1,6,8,9),(2,12,16,18),(3,18,24,27),...\}$$

قمنا بإعادة الاختبار من أجل الرباعيّات الفيرماويّة:

$$(3,4,5,6),(3,10,18,19),(4,17,22,25),(7,14,17,20),(11,15,27,29)$$

وفي كل مرّة تكون نتيجة الاختبار أنّه إذا كانت الرباعيّات آنفة الذّكر هي الأقسام الحقيقيّة لرباعيّات فيثاغوريّة في $[i]$ فإنّ الأقسام التخيّليّة ستكون مرتبطة خطيّاً بالأقسام الحقيقيّة. **إلّا أنّنا لا نجزم بصحّة هذا الادّعاء.**

حدسيّة:

بفرض أنّ (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة ما في $[i]$، وبفرض أنّ (x_1,x_2,x_3,x_4) فيرماويّة في . إنّ الشرط اللازم والكافي لتكون (z_1,z_2,z_3,z_4) في $[i]$ هو أن يكون:

$$(y_1,y_2,y_3,y_4)=k\,(x_1,x_2,x_3,x_4)\ ;\ k\in$$

3 – 3: توليد رباعيّات فيرماويّة $\mathbb{Z}[\mathbf{i}]$

لقد تمّت دراسة حلول معادلة ديوفانتس $x^3+y^3+z^3=t^3$ وإيجاد علاقات تولّد الحلول في ، والتي يمكن استبدال هذه المتغيّرات بمتغيّرات من $[i]$ لتوليد رباعيّات فيثاغوريّة في $[i]$.

لقد تمّ إيجاد الحل الكامل لمعادلة ديوفانتس :

$$x^3+y^3+z^3=t^3 \qquad (10)$$

من قبل أويلر وتمّ تبسيطه من قبل بيينيه.[4]

تعريف 5:

نسمّي الحلول الآتية للمعادلة (10) حلولاً مبتذلة:

$$\bullet x=-z,y=t \quad , \quad \bullet y=-z,x=t \quad , \quad \bullet x=-y,z=t$$

مثال2: الرباعيات $(1,3,-1,3),(2,-2,3,3)$ رباعيات فيرماويّة مبتذلة.

مبرهنة2: [4]

إنّ الحلول العامّة غير المبتذلة للمعادلة (10) تعطى بالعلاقات:

$$\begin{aligned} x &= \lambda\left\{1-(a-3b)\left(a^2+3b^2\right)\right\} \\ y &= \lambda\left\{(a+3b)\left(a^2+3b^2\right)-1\right\} \\ z &= \lambda\left\{\left(a^2+3b^2\right)^2-(a+3b)\right\} \\ t &= \lambda\left\{\left(a^2+3b^2\right)^2-(a-3b)\right\} \end{aligned} \qquad (11)$$

حيث λ,a,b أعداد عاديّة، بحيث $\lambda \neq 0$.

وتُعتبر مسألة إيجاد حلول صحيحة للمعادلة (10) أكثر صعوبة، إنّ القيم الصّحيحة لـ a,b و λ في المبرهنة 2 تُعطي حلول صحيحة، ولكنّ لا يوجد تطبيق عكسي، فعلى سبيل المثال: إنّ الرباعيّة الفيرماويّة $(1,12,-9,10)$ تُقابلها القيم:

$$a=\frac{10}{19}, b=-\frac{7}{9}, \lambda=-\frac{361}{42}$$

من جهة أخرى فإنّ الرباعيّة $(9,15,12,18)$ تقابل القيم $a=b=\lambda=1$.

نتيجة4:

يمكن توليد رباعيّات فيثاغوريّة في $\mathbb{Z}[i]$، في ضوء المبرهنة 2 من خلال استخدام العلاقات (11) ولكن بجعل $\lambda=1$ و $a,b \in \mathbb{Z}[i]$ كوننا لا نهتم بالحالة العكسيّة.

أي أنّه بفرض $a,b \in \mathbb{Z}[i]$ فإنّ الرباعيّة (z_1,z_2,z_3,z_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$ حيث:

$$\begin{aligned} z_1 &= 1-(a-3b)\left(a^2+3b^2\right) \quad , \quad z_3 = \left(a^2+3b^2\right)^2-(a+3b) \\ z_2 &= (a+3b)\left(a^2+3b^2\right)-1 \quad , \quad z_4 = \left(a^2+3b^2\right)^2-(a-3b) \end{aligned} \qquad (12)$$

مثال3:

باستخدام العلاقات (12) يمكن توليد رباعيّات فيرماوية بإعطاء قيم لـ a,b. في الجدول أدناه أمثلة لذلك:

$a=i$ $b=1+i$	$(-14+16i\ ,-28+14i\ ,-38-16i\ ,-32-10i)$
$a=1-i$ $b=1+2i$	$(-87-43i\ ,-87-5i\ ,-23-185i\ ,-17-173i)$
$a=1$ $b=i$	$(3-6i\ ,-3-6i\ ,3-3i\ ,3+3i)$

قدّم رامنيوجان حل آخر للمعادلة (10) كتوليد حلول لها، وليس كل الحلول، وذلك من خلال المبرهنة الآتية:

مبرهنة3: $[4]$

بفرض $a,b \in \mathbb{Z}$ فإنّ الرباعيّة (x,y,z,t) المعرّفة فيما يأتي حل للمعادلة (10):

$$\begin{aligned} x &= 3a^2+5ab-5b^2 \quad , \quad z = 5a^2-5ab-3b^2 \\ y &= 4a^2-4ab+6b^2 \quad , \quad t = 6a^2-4ab+4b^2 \end{aligned} \qquad (13)$$

نتيجة5:

يمكن استخدام العلاقات (13) لتوليد رباعيّات فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، وذلك بأخذ a,b من $\mathbb{Z}[i]$.

مثال4:

باستخدام العلاقات (13) يمكن توليد رباعيّات فيرماوية بإعطاء قيم لـ a,b. في الجدول أدناه أمثلة لذلك:

$a=i$ $b=1+i$	$(-8-5i\ ,\ 8i\ ,\ -11i\ ,\ -2+4i)$
$a=1-i$ $b=1+2i$	$(30-21i\ ,\ -30+12i\ ,\ -6-27i\ ,\ -24)$
$a=1$ $b=i$	$(8+5i\ ,\ -2-4i\ ,\ 8-5i\ ,\ 2-4i)$

مبرهنة4: [5]

إن جميع الحلول الصحيحة للمعادلة:

$$x_1^{\,3}+x_2^{\,3}+x_3^{\,3}+x_4^{\,3}=0\ ;\ (x_1,x_2,x_3,x_4)=1$$

تعطى من خلال العلاقة:

$$\begin{aligned}
dx_1 &= \left(a^4+2a^3b+3a^2b^2+2ab^3+b^4\right)+(2a+b)c^3\\
dx_2 &= -\left\{a^4+2a^3b+3a^2b^2+2ab^3+b^4-(a-b)c^3\right\}\\
dx_3 &= c\left(-a^3+b^3+c^3\right)\\
dx_4 &= -\left\{\left(2a^3+3a^2b+3ab^2+b^3\right)c+c^4\right\}
\end{aligned}\qquad (14)$$

حيث a,b,c ثلاثة أعداد صحيحة، و $d\neq 0$ عدد صحيح يتم اختياره بحيث يكون:

$$(x_1,x_2,x_3,x_4)=1$$

نتيجة6:

يمكن توليد رباعيّات فيثاغوريّة في $\mathbb{Z}[i]$، في ضوء المبرهنة 4 من خلال استخدام العلاقات (14) ولكن بجعل $d=1$ و $a,b,c\in\mathbb{Z}[i]$ كوننا لا نهتم بالحالة العكسيّة، أو بكون الرباعيّة فيرماويّة. أي أنّه بفرض $a,b\in\mathbb{Z}[i]$ فإنّ الرباعيّة (z_1,z_2,z_3,z_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$ حيث:

$$\begin{aligned} z_1 &= \left(a^4+2a^3b+3a^2b^2+2ab^3+b^4\right)+\left(2a+b\right)c^3 \\ z_2 &= \left(a-b\right)c^3-\left(a^4+2a^3b+3a^2b^2+2ab^3+b^4\right) \\ z_3 &= c\left(-a^3+b^3+c^3\right) \\ z_4 &= \left(2a^3+3a^2b+3ab^2+b^3\right)c+c^4 \end{aligned} \qquad (15)$$

مثال5:

باستخدام العلاقات (15) يمكن توليد رباعيّات فيرماوية بإعطاء قيم لـ a,b. في الجدول أدناه أمثلة لذلك:

$a=i$ $b=1+i$ $c=1-i$	$(-1-20i\ ,\ 7+14i\ ,\ -3+5i\ ,\ -18+8i)$
$a=2$ $b=1-2i$ $c=2+i$	$(-23+3i\ ,\ 35+63i\ ,\ -47+9i\ ,\ 37-69i)$

مبرهنة5: [5]

إنّ جميع الحلول الصّحيحة الموجبة للمعادلة:

$$x^3+y^3+z^3=t^3 \quad ;(x,y,z,t)=1$$

تعطى من خلال العلاقة:

$$\begin{aligned} dx &= c\left(-a^3-b^3+c^3\right) \\ dy &= -a^4+2a^3b-3a^2b^2+2ab^3-b^4+(a+b)c^3 \\ dz &= a^4-2a^3b+3a^2b^2-2ab^3+b^4+(2a-b)c^3 \\ dt &= c\left\{a^3+(a-b)^3+c^3\right\} \end{aligned} \qquad (16)$$

حيث a,b,c ثلاثة أعداد صحيحة موجبة، و $a>b$، و $c>\sqrt[3]{a^3+b^3}$ و $d\neq 0$ عدد صحيح يتم اختياره بحيث يكون: $(x_1,x_2,x_3,x_4)=1$.

نتيجة7:

يمكن توليد رباعيّات فيثاغوريّة في $\mathbb{Z}[i]$، في ضوء المبرهنة 5 من خلال استخدام العلاقات (16) ولكن بجعل $d=1$ و $a,b,c\in\mathbb{Z}[i]$ وبغضّ النظر عن الشروط المقيّدة لـ a,b,c كوننا لا نهتم بالحالة العكسيّة، أو بكون الرباعيّة فيرماويّة أوليّة، وبغضّ النظر عن الإشارة.

أي أنّه بفرض $a,b\in\mathbb{Z}[i]$ فإنّ الرباعيّة (z_1,z_2,z_3,z_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$ حيث:

$$\begin{aligned} z_1 &= c\left(-a^3-b^3+c^3\right) \\ z_2 &= -a^4+2a^3b-3a^2b^2+2ab^3-b^4+(a+b)c^3 \\ z_3 &= a^4-2a^3b+3a^2b^2-2ab^3+b^4+(2a-b)c^3 \\ z_4 &= c\left\{a^3+(a-b)^3+c^3\right\} \end{aligned} \qquad (17)$$

مثال6:

باستخدام العلاقات (17) يمكن توليد رباعيّات فيرماوية بإعطاء قيم لـ a,b. في الجدول أدناه أمثلة لذلك:

$a=i$ $b=1+i$ $c=1-i$	$(-3-3i\ ,\ 3-6i\ ,\ 3\ ,\ -6)$
$a=2$ $b=1-2i$ $c=2+i$	$(1+23i\ ,\ 27+29i\ ,\ -15+37i\ ,\ -11+17i)$

مبرهنة 6:$[6]$

بفرض $a,b\in\square$ فإنّ الرباعيّة (x,y,z,t) المعرّفة فيما يأتي حل للمعادلة (10):

$$\begin{aligned} x&=a^4-2ab^3 \quad , \quad z=2a^3b-b^4 \\ y&=a^3b+b^4 \quad , \quad t=a^4+ab^3 \end{aligned} \qquad (18)$$

نتيجة8:

يمكن استخدام العلاقات (18) لتوليد رباعيّات فيرماويّة في $[i]\square$، وذلك بأخذ a,b من $[i]\square$.■

تُعتبر العلاقات (18) الأبسط في توليد رباعيّات فيرماويّة.

مثال7:

باستخدام العلاقات (18) يمكن توليد رباعيّات فيرماوية بإعطاء قيم لـ a,b. في الجدول أدناه أمثلة لذلك:

$a=i$ $b=1$	$(1-2i\ ,1-i\ ,-1-2i\ ,1+i)$
$a=1-i$ $b=1+2i$	$(22-18i\ ,-5-30i\ ,11+12i\ ,-17+9i)$

ملاحظة 2:

كما أوضحنا أنّ العلاقات (12)، (13)، (15)، (17)، (18) تولّد رباعيّات فيرماويّة في $[i]$ إذا كانت الوسطاء أعداد غاوص صحيحة. ويمكن استخدام هذه العلاقات لاشتقاق مولّدات أخرى لرباعيّات فيرماويّة، بأن نجعل الوسطاء في كل منها غير مستقلّة.

لتوضيح الأمر لنأخذ على سبيل المثال العلاقات (18) التي تتبع لوسيطين مستقلّين a,b، فإذا اخترنا $b=2a+i$ لحصلنا على العلاقات:

$$\begin{aligned} x &= \left(12a^2-15a^4\right)+\left(2a-24a^3\right)i \\ y &= \left(18a^4-24a^2+1\right)+\left(33a^3-8a\right)i \\ z &= \left(24a^2-12a^4-1\right)+\left(8a-30a^3\right)i \\ t &= \left(9a^4-6a^2\right)+\left(12a^3-a\right)i \end{aligned} \qquad (19)$$

مثال8:

من أجل $a=1$ نحصل على الرباعيّة الفيرماويّة:

$$.(-3-22i,\ -5+25i,\ 11-22i,\ 3+11i)$$

ومن أجل $a=i$ نحصل على الرباعيّة الفيرماويّة:

$$.(-53,\ 84,\ -75,\ 28)$$

4- النتائج:

توصّلنا إلى صحّة ما يأتي:

أوّلاً: بفرض أنّ (a,b,c,d) رباعيّة فيثاغوريّة في $\mathbb{Z}$، وكانت p,q كثيرتي حدود، فإذا كان k عدداً صحيحاً، فإنّ الرباعيّة الآتية:

$$\left(p(k)a+iq(k)a\ ,\ p(k)b+iq(k)b\ ,\ p(k)c+iq(k)c\ ,\ p(k)d+iq(k)d\right)$$

فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$.

ثانياً: أثبتنا صحّة المبرهنة الآتية:

بفرض أنّ (z_1,z_2,z_3,z_4) رباعيّة فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، وبفرض أنّ (x_1,x_2,x_3,x_4) فيرماويّة في $\mathbb{Z}$. إذا كانت:

$$\left(y_i,y_j,y_k\right)=k\left(x_i,x_j,x_k\right)$$

حيث $k\in\mathbb{Z}$ و $i,j,k\in\{1,2,3,4\}$ بحيث $i<j<k$.

عندئذٍ فإنّ: $x_\ell=y_\ell$ حيث: $\ell\in\{1,2,3,4\}\setminus\{i,j,k\}$

ثالثاً: قمنا باستخدام حلول معادلة ديوفانتس $x^3+y^3+z^3=t^3$ في $\mathbb{Z}$ لتوليد رباعيّات فيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$ وذلك باستخدام العلاقات:

$$(19),(18),(17),(15),(13),(12)$$

5- الاستنتاجات والتّوصيات.

من خلال فقرة توليد الرباعيّات الفيرماويّة في $\mathbb{Z}[i]$، الحلول الكاملة لمعادلة ديوفانتس:

$$z_1{}^3+z_2{}^3+z_3{}^3=z_4{}^3$$

في مجموعة أعداد غاوص الصّحيحة $\mathbb{Z}[i]$. أي إيجاد توليد لكل الرباعيّات الفيرماويّة بحيث تكون المسألة العكسيّة ممكنة.

6. المراجع

1. Fermat,s Last Theorem for Amateurs, P. Ribenboim. Springer (1999), 16-17
2. Modular elliptic curves and Fermat's Last Theorem, A. J. Wiles. Annals of Mathematics, 141 (1995), 443-551
3. The Gaussian integers, K. Conrad, Accessed, May, (2016)
4. An introduction to the theory of numbers, Fifth edition, G.H. Hardy and E.M. Wright, Oxford University Press, London, (1979), 199 - 200
5. On Equal Sums of Cubes, A. Choudhry, R. Mountain, Journal Of Mathematics ,Volume 28, Number 4, (1998)
6. Introduction to number theory, Hua Loo Keng, Springer-Verlag, Berlin, (1982), 290

تحضير المركب سيليكات الكالسيوم $CaSiO_3$ بطريقة الترسيب المشترك

نغم فاخوري*، إبراهيم أسعد اسماعيل**

ملخص البحث

تم في هذا البحث تحضير الجملة ($CaSiO_3$) بطريقة الترسيب المشتركوذلك انطلاقاً من أملاح كلوريد الكالسيوم $CaCl_2$ وكلوريد السيليكون $SiCl_4$ في وسط قلوي من هدروكسيد الصوديوم NaOH، حيث تم مزج الهدروكسيدين المتشكلين. تم فصل الراسب بالترشيح وجفف عند الدرجة (105 °C) ثم رمد عند درجات حرارة مختلفة تراوحت بين(500-1100 °C). تم تحليل العينات الناتجة باستخدام تقنية التحليل الحراري التفاضلي (DTA) ومطيافية انعراج الأشعة السينية (XRD) بالاضافة لمطيافية الأشعة تحت الحمراء (FT-IR). تبين من خلال الدراسة مايلي:

يتشكل مركب سيليكات الكالسيوم عند درجة حرارة (720 °C) وفق النمط البلوري ثلاثي الميل ويبقى ثابت حرارياً حتى الدرجة (1100 °C) .

كلمات مفتاحية: ترسيب مشترك، سيليكات الكالسيوم، $CaSiO_3$، أكسيد مختلط.

*) طالبةدكتوراه في الكيمياء اللاعضوية –قسم الكيمياء – كلية العلوم– جامعة البعث– حمص– سوريا.

**) أستاذ الكيمياء اللاعضوية في قسم الكيمياء – كلية العلوم– جامعة البعث– حمص– سوريا.

Preparing of Calcium silicate $CaSiO_3$by coprecepitation method

Nagham Fakhouri*, Ibraheem Ismaeel**

Abstract

In this paper, the mixed oxide $CaSiO_3$ was synthesized by co-precipitation method from calcium chloride ($CaCl_2$) and silicon tetra chloride ($SiCl_4$), in basic medium of NaOH.

The formed precipitation was separated by filtration, and dried at (105 °C), and incinerated at different temperatures ranged between (500-1100 °C). The obtained samples were analyzed using X-ray diffraction (XRD), (DTA) and (IR). The obtained results shows:

The mixed oxide $CaSiO_3$ formed at (720 °C) by triclinic crystal phase, and still thermally stable untill (1000 °C).

Keywords:co-precipitation method, Calcium silicate, $CaSiO_3$, mixed oxide.

***)** PHD student, Department of chemistry-Faculty of science-Al-baath university Homs-Syria.

**) professor of inorganic chemistry,Department of chemistry-Faculty of science-Al-baath university Homs-Syria.

1- مقدمة:

تعد الأكاسيد المعدنية عنصراً هاماًفي مختلف تطبيقات الحياة اليومية وخاصة التطبيقات الالكترونية القائمة في أساسها على الموصلات والموصلات الفائقة اضافة للحساسات والمستشعرات. ومع الحاجة المستديمة لتطور الأجهزة فقد دعت الحاجة الى تطوير أكاسيد مختلطة تتألف من أكسيدين أو أكثر وقد أظهرت هذه الأكاسيد ميزات فريدة تفوق الميزات الخاصة بكل أكسيد لوحده. فقد استخدمت في صناعة الدارات الالكترونية الدقيقة والحساسات الغازية والضوئية وخلايا الوقود، إضافة لمواد الطلاء والحماية من التآكل والعوامل الخارجية[1].

عرفت الأكاسيد المختلطة منذ القدم وتم استخدامها بشكل واسع منذ بداية العام1800 بعد الميلاد في الصناعات الخزفية والفخارية، وذلك لما تمتعت به من ثبات في اللون ومقاومة الحرارة. حيث تستخدم في هذه الصناعات أفران تصل لدرجات حرارة مرتفعة جداً، ومعظم المواد الكيميائية والملونات الطبيعية تتخرب في ذلك المجال. واكثر المعادن استخداماً هي المعادن الانتقالية ويتلون الاكسيد المختلط تبعاً للمعدن المستخدم وطريقة التحضير والبنية الناتجة. وجميع الأكاسيد المختلطة تحضر بعملية التكليس لمزيج من الاملاح المعدنية أو أكاسيدها ضمن مجال من درجات الحرارة يتراوح بين (300 °C- 1300 °C). وهذه المعالجة هي السبب الرئيسي وراء الثبات الكبير للبنية وعدم تأثرها بالعوامل المختلفة (حموض أو أسس) إضافة الى الثبات الكيميائي والحراري[2].

وتعد أكاسيد السيليكات من أكثر المواد انتشاراً على سطح الأرض وتتميز بثبات كيميائي كبير اضافة لشفافية عالية جعلت منها مركز اهتمام الكثير من الابحاث والصناعات مثل صناعة الزجاج والكوارتز والخلايا الضوئية والحساسات الضوئية والغازية وغيرها من التطبيقات اضافة لصناعة معالجات الأجهزة الالكترونية الدقيقة وداراتها التكاملية والمعروفة باسم (IC).

ومما يزيد أهمية هذه المركبات السيليكاتية دخولها في تركيب الكثير من الأحجار الكريمة الطبيعية بل انها المكون الأساسي فيها ويبين الجدول التالي بعض الأحجار الكريمة وتركيبها الكيميائي[3]:

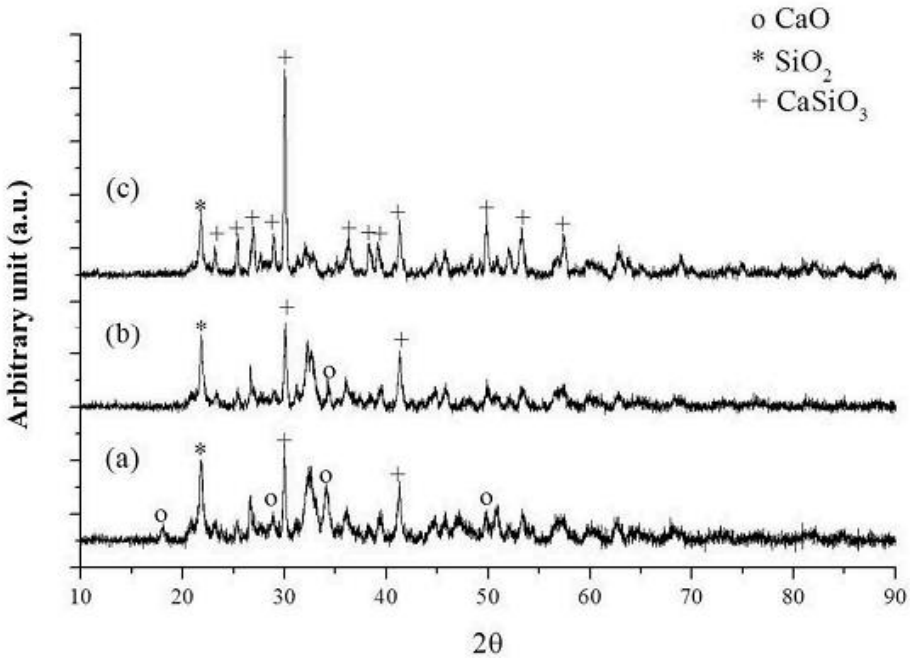
الجدول (1) التركيب الكيميائي لبعض الأحجار الكريمة والفلزات الوجودة في الطبيعة

الحجر الكريم	التركيب الكيميائي	الحجر الكريم	التركيب الكيميائي
Andalusite	Al_2SiO_5	**Feldspar**	$KAlSi_3O_8$
Beryl	$Be_3Al_2Si_6O_{18}$	**Pyrope**	$Mg_3Al_2Si_3O_{12}$
Sphene	$CaTiSiO_5$	**Almandine**	$Fe_3Al_2Si_3O_{12}$
Diopside	$MgCaSi_2O_6$	**Spessartine**	$Mn_3A_{l2}Si_3O_{12}$
Grossular	$Ca_3Al_2Si_3O_{12}$	**Jadeite**	$NaAlSi_2O_6$
Andradite	$Ca_3Fe_2Si_3O_{12}$	**Kyanite**	Al_2SiO_5
Uvarovite	$Ca_3Cr_2Si_3O_{12}$	**Rhodonite**	$MnSiO_3$
Zircon	$ZrSiO_4$	**Spodumene**	$LiAlSi_2O_6$

تستخدم سيليكات الكالسيوم بشكل كبير في صناعة الزجاج المقسى والسيراميك والزجاج المقاوم للصدمات وزجاج السيارات غير القابل للكسر وقد اهتم الباحثون بتحضيرها بطرائق مختلفة، فقد تم تحضيرها بطريقة الاصطناع الصلب انطلاقاً من كربونات الكالسيوم والتي تم الحصول عليها من أصداف الحلزونات والتي تتكون من (90%) من كربونات الكالسيوم. حيث جمعت الأصداف وغسلت وجففت ثم طحنت ونخلت لتشكل مسحوق ناعم يرمد عند درجة حرارة (800 ^oC) لمدة ساعتين. أما بالنسبة للسيليكا فقد تم استخدام رماد قشور الأرز الذي يتكون من (80 %)سيليكا (SiO_2) والمجفف لمدة (24 hr) عند درجة حرارة(100 ^oC).

ثم يجمع مزيج المادتين السابقتين بنسبة وزنية (1:1) وتوضع في المطحنة الكروية ويستمر الطحن والتحريك لمدة (8 hr). بعدها يرمد المزيج عند درجات حرارة (800-1000 ºC) لمدة ساعتين.

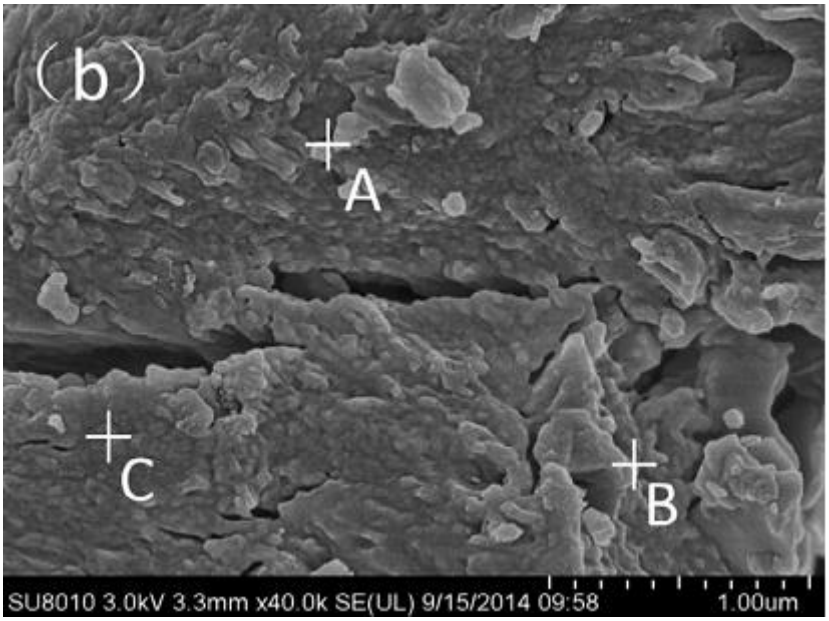
تم توصيف المركب الناتج سيليكات الكالسيوم باستخدام تقنيات (XRD, IR) ويبين الشكل التالي مخطط (XRD) للعينات المرمدة عند درجات الحرارة المختلفة [4]:



الشكل (1) مخطط XRD لسيليكات الكالسيوم المرمدة عند درجات حرارة مختلفة 800 (a) ºC, (b) 900 ºC, (c) 1000 ºC

وكذلك تم تحضير سيليكات الكالسيوم من خلال استخدام قشور بيض الدجاج كمصدر للكالسيوم حيث تتألف بشكل رئيسي من كربونات الكالسيوم. أخذت قشور البيض وغسلت بالماء لازالة المواد العضوية المتبقية والغبار وجففت عند الدرجة (105 ºC) لمدة 24) (hr ثم طحنت. وتمت عملية تحضير سيليكات الكالسيوم من خلال أخذ (5gr) من مسحوق قشور البيض وتضاف لـ (50 mL) من محلول سيليكات الصوديوم المحضر

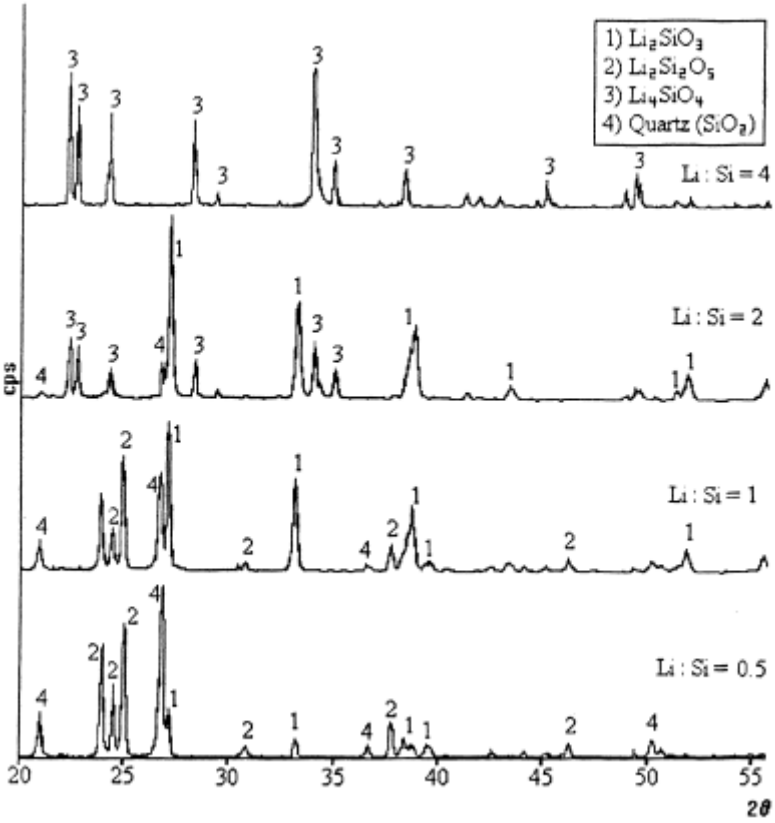
بتراكيز مختلفة (0, 0.2, 0.4, 0.6, 1M) بعد ضبط قيمة (pH=8)، ويتم تحريك المرزيج لمدة (4 hr) ثم يجفف عند درجة حرارة (100 ºC) لمدة (24 hr) وبعدها يكلس عند درجة حرارة (800 ºC) لمدة (4 hr). وقد تم توصيف المركب الناتج باستخدام تقنيات(XRD, SEM, IR) واستخدم كحفاز في عملية تحويل زيت النخيل لوقود حيوي وأبدى فعالية كبيرة، ويبين الشكل التالي صور المجهر الالكتروني للعينات المحضرة [5]:



الشكل (2) صورة المجهر الماسح الالكتروني لعينة محضرة من سيليكات الكالسيوم

كذلك حضرت سيليكات الليثيوم بالطرائق الثلاث (اصطناع صلب، الترسيب، Sol-gel) وبنسب مولية مختلفة (Li:Si=0.5, 1, 2, 4)، فبطريقة الاصطناع الصلب مزجت كربونات الليثيوم مع (SiO_2) وبعد المزج الميكانيكي تم الترميد لمدة (4 hr) عند درجة حرارة (900 ºC). وبطريقة الترسيب فقد اضيف (SiO_2) للماء وأضيف محلول هدروكسيد الليثيوم ببطئ ومع استمرار التحريك عند درجة حرارة (70 ºC) حتى الجفاف يتم ترميد الناتج لمدة (4 hr) عند درجة حرارة (900 ºC). وبطريقة solgel تم التحضير انطلاقاً من رباعي ايتوكسي السيلان مع ميتوكسي الليثيوم بوسط من ايزوبروبيل الكحول وبالتحريك عند درجة حرارة (70 ºC) يتم اضافة حمض الآزوت (pH=2) يساعد على

تشكيل الجل الذي يعتق لمدة يوم واحد ثم يجفف عند درجة الحرارة (110 ºC) ثم يرمد الناتج لمدة (4 hr) عند درجة حرارة (900 ºC). وقد تم توصيف المتجات باستخدام تقنيات (XRD, IR, SEM). والشكل التالي يبين مخططات (XRD) للعينات المحضرة بالاصطناع الصلب [6].



الشكل (3) مخطط XRD لسيليكات الليثيومالمحضرة بنسب مولية مختلفة بطريقة الاصطناع الصلب

كذلك حضرت سيليكات الليثيوم بطريقة الاصطناع الصلب بين أكسيد السيليكون غير المتبلور مع كربونات الليثيوم، وتم الترميد عند درجات حرارة (700, 800, 900 ºC)

لمدة (4hr) وبنسب مولية مختلفة (Li:Si= 0.5, 1, 2, 4)، وأظهر التحليل التفاضلي الحراري امكانية حصول التفاعلات التالية [7]:

$$Li_2CO_3 + SiO_2 \xrightarrow{515-565\,^{\circ}C} Li_2SiO_3 + CO_2$$

$$Li_2CO_3 + SiO_2 \xrightarrow{565-754\,^{\circ}C} Li_2SiO_3 + CO_2$$

$$Li_2CO_3 + Li_2SiO_3 \xrightarrow{565-754\,^{\circ}C} Li_4SiO_4 + CO_2$$

وحضرت سيليكات الكالسيوم المطعمة بأكسيد الزنك باستخدام طريقة (Sol-Gel) وذلك انطلاقاً من رباعي ايتوكسي السيلان ($Si(OC_2H_5)_4$) ونترات الكالسيوم ونترات الزنك بوجود حمض الآزوت، وتهدف هذه الطريقة لتحضير محلول متجانس لهذه المواد يترك ليجف بحرارة المخبر لمدة (14) يوم ثم يجفف عند درجة حرارة ($110\ ^oC$) لمدة (24 hr) وبعد ذلك يوضع في فرن عند درجة حرارة ($700\ ^oC$) لمدة ثلاث ساعات وقد تم توصيف المركب الناتج باستخدام تقنيات [8](IR, SEM, DTA).

2- مشكلة البحث:

تعد سيليكات الكالسيوم من المركبات الهامة في الصناعة، إلا أنه من الصعب الحصول عليها وتحضيرها باستخدام الطرائق العادية مثل (الهدروحرارية والاصطناع الصلب) بسبب درجات الحرارة العالية اللازمة للتحضير.

3- أهمية وهدف البحث:

تكمن أهمية البحث في استخدام طريقة الترسيب المشترك في تحضير الجملة المذكورة حيث تعطي مردود عالي وبنية بلورية منتظمة وأكثر تجانساً.

نهدف من هذا البحث الى تحضير مركب سيليكات الكالسيوم ودراسة تأثير درجة الحرارة على الجملة أثناء عملية التحضير اضافة لدراسة البنية البلورية للمركب الناتج.

4- الجزء العملي:

4-1- التجهيزات والأدوات المستخدمة:

- ميزان تحليلي بدقة تصل إلى 0.0001 gr
- أدوات زجاجية مختلفة.
- بوتقات خزفية تتحمل درجات حرارة عالية.
- مجفف لتجفيف العينات من انتاج شركة(memmert).
- مرمدة لحرق العينات وهي ومن نوع (Carbolite) يصل مجالها حتى الدرجة 1100 ^{o}C.
- جهاز انعراج الأشعة السينية للمساحيق X-Ray Powder Diffractometer من طراز Philips-PW-1840.
- هاون خزفي لطحن العينات للحصول على مسحوق ناعم قدر الإمكان.
- كلوريد الكالسيوم($CaCl_2$) من انتاج شركة (Riedel deHaen) نقاوة (97%)
- كلوريد السيليكون($SiCl_4$)من انتاج شركة (Riedel deHaen) نقاوة (98%)
- هدروكسيد الصوديوم (NaOH) من انتاج شركة (Riedel deHaen) نقاوة (99.5%)

4-2- طريقة العمل:

بداية تم حساب أوزان المواد الأولية المستخدمة في الاصطناع انطلاقاً من النسبة الاستيكيومترية للمعادلة التالية:

$$CaCl_2 + SiCl_4 + 6NaOH \longrightarrow CaSiO_3 + 6NaCl + 3H_2O$$

ومنها نجد أن النسبة المولية المستخدمة Ca:Si=1.

بعد حساب أوزان المواد الأولية التي تم استخدامها في عملية التحضير وبدقة، تم تحضير المحاليل المائية لهذه المواد واللازمة لعملية الاصطناع، والجدول التالي يبين التركيز المولي لكل مادة أولية مستخدمة والوزن مقدراً بالغرام للمادة الصلبة والحجم مقدراً بـ (mL) للمادة السائلة. بالاضافة الى حجم الماء المقطر الواجب اضافته أثناء عملية التحضير.

المادة	NaOH	$SiCl_4$	$CaCl_2$
التركيز المحضر	0.6 M	0.1 M	0.1 M
الكمية المأخوذة	2.4 gr	1.2 mL	1.11 gr
الحجم النهائي	100 mL	100 mL	100 mL

بعد ذلك تم اضافة كل من محلولي كلوريد الكالسيوم وكلوريد السيليكون قطرة قطرة وفي الوقت ذاته الى المحلول المائي لهدروكسيد الصوديوم مع التحريك السريع والتسخين حتى الدرجة (50 ^oC) مع المحافظة على درجة الحرارة ثابتة.

بعد الانتهاء من عملية اضافة كامل محلولي الملحين السابقين الى المحلول المائي لهدروكسيد الصوديوم تم ايقاف التسخين مع استمرارالتحريك لمدةساعتينللحصول على أعلى نسبة من التجانس.

وبعد ذلك تم اضافة الماء المقطر للراسب المتشكل وتغطيته وتركه لمدة يوم كامل في درجة حرارة الغرفة لضمان استقرار الراسب.

في خطوة لاحقة تم ترشيح الراسب الناتج وغسله بالماء المقطر للتخلصمنايوناتالكلوروالتيتمالتأكدمناختفائهاباستخداممحلولنتراتالفضة،يؤخذالراسبويجففعندد رجةحرارة (105 ^oC) لمدةساعتين.

وأخيراً بعد الانتهاء من عملية التجفيف يتم ترميد الراسب عند دجات حرارة مختلفة ليتم بعد ذلك دراسة احتمالية تشكل المركب ($CaSiO_3$).

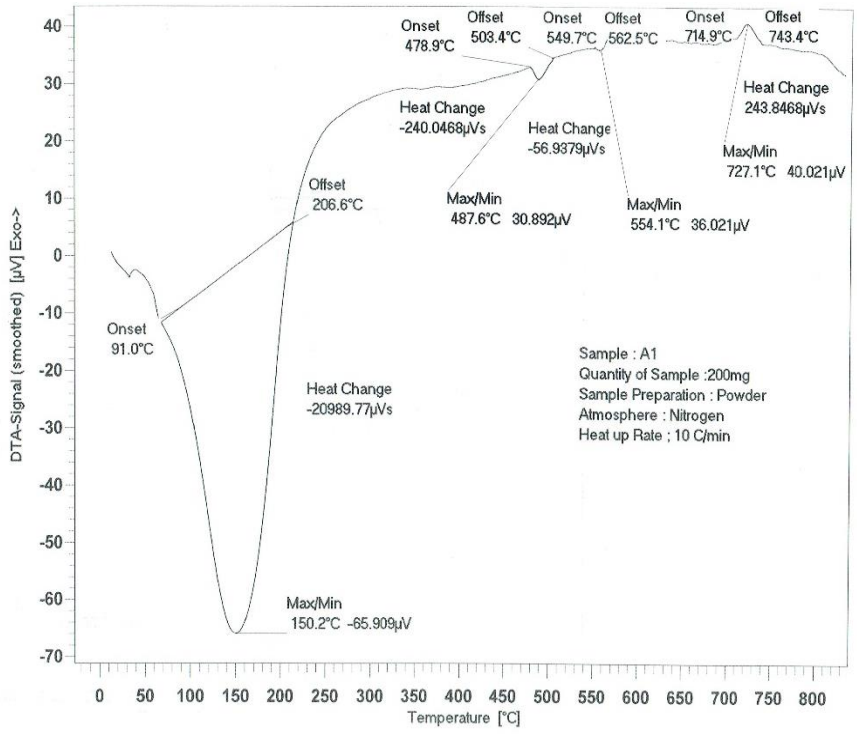
بعدذلكتمتوصيفالعيناتالمحضرةباستخدامتقنياتIR, XRD, DTA.

5- النتائج والمناقشة:

5-1- دراسة منحني التحليل الحراري التفاضلي DTA:

يبينالمنحنيالمبين في الشكل (4)السلوكالحراريللمركبحيثتمالمسحضمنمجاللدرجاتالحرارة(0-800 ^oC) وتظهر فيه قمةامتصاص عريضة عند الدرجة (150.2 ^oC) وتعودلخسارةالماءالفيزيائي (الرطوبة)،أماالقمةالثانيةوالتي تظهر عند عندالدرجة (487.6 ^oC) فتعود لفقدان الماء التبلور من داخل الشبكة البلورية وهي قمة ماصة للحرارة أيضاً.

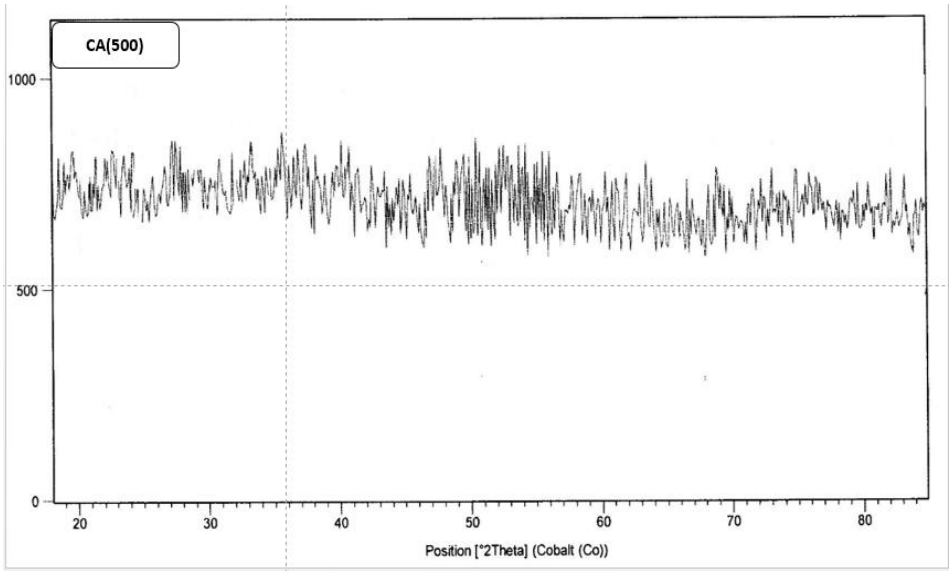
وتظهر في المنحني قمة امتصاص عند الدرجة (554.1 ^oC) وهي تعود لتبلور الأكاسيد الأولية. وتظهر بعدها قمة ناشرة للحرارة عند الدرجة (727.1 ^oC) تعود لتشكل المركب المطلوب. ولتأكيد هذه النتائج قمنا دراسة مخططات (XRD) للمركب المحضر عند درجات حرارة مختلفة (500-1000 ^oC).



الشكل (4) مخطط التحليل الحراري التفاضلي لمركب سيليكات الكالسيوم المحضر بطريقة الترسيب المشترك

5-2- مخطط (XRD) للعينات المحضرة عند درجة حرارة (500 °C):

يبين الشكل التالي مخطط انعراج الأشعة السينة للعينة التي تم حرقها عند درجة حرارة (500 °C):



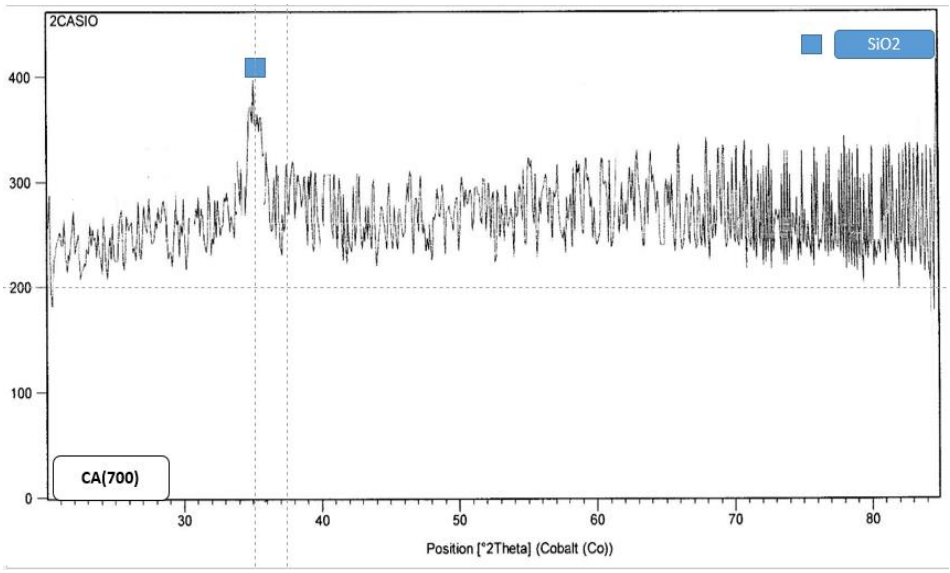
الشكل (5) مخطط (XRD)لمركب سيليكات الكالسيوم المحضرعند الدرجة (500 °C)

نلاحظ من الشكل السابق عدم وجود قمم في المخطط مما يدل على عدم تشكل المركب وعدم وجود الأكاسيد الأولية بشكل بلوري.

5-3- مخطط (XRD) للعينات المحضرة عند درجة حرارة (700 °C):

قمنا بتسجيل مخطط (XRD) لعينة من مركب سيليكات الكالسيوم المرمدة عند الدرجة (700 °C) لمدة (4 hr) ويبين الشكل (6) المخطط الناتج.

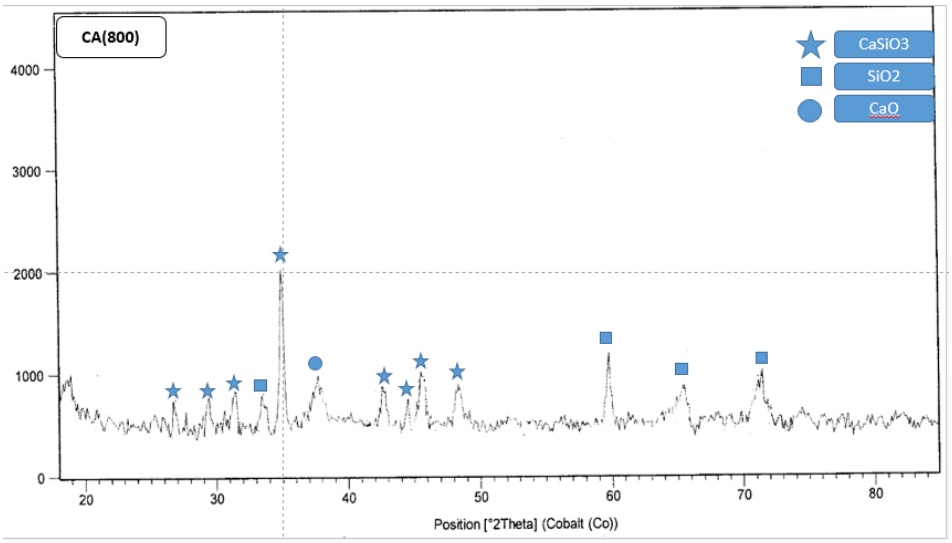
يلاحظ من المخطط ظهور قمة واحدة عن القيمة ($2\theta=35.2^{o}$) وهي تعود لأكسيد السيليكون (SiO_2) وفق البطاقة المرجعية رقم (45-1374) وهو ما أكده مخطط (DTA) بظهور قمة ماصة للحرارة عند الدرجة (554.1 °C) وبالتالي يمكننا الجزم بأن هذه القمة تعود لتبلور أكسيد السيليكون.



الشكل (6) مخطط (XRD)لمركب سيليكات الكالسيوم المحضرعند الدرجة (700 °C)

4-5- مخطط (XRD) للعينات المحضرة عند درجة حرارة (800 °C):

برفع حرارة ترميد العينات للدرجة (800 °C) يظهر لدينا المخطط التالي:



الشكل (7) مخطط (XRD)لمركب سيليكات الكالسيوم المحضرعند الدرجة (800 °C)

وفيه نلاحظ انخفاض التشويش بشكل كبير مما يدل عدم عدم وجود اطوار غير بلورية وفيه يظهر قمم عائدة للأكاسيد الأولية اضافة لظهور قمم عائدة لمركب سيليكات الكالسيوم توافق البطاقات المرجعية

$(CaO:37\text{-}1497)(SiO_2:46\text{-}1441)(CaSiO_3:96\text{-}900\text{-}5778\ )$

ويبين الجدول التالي قيمة زوايا الانعراج وشدة كل منها:

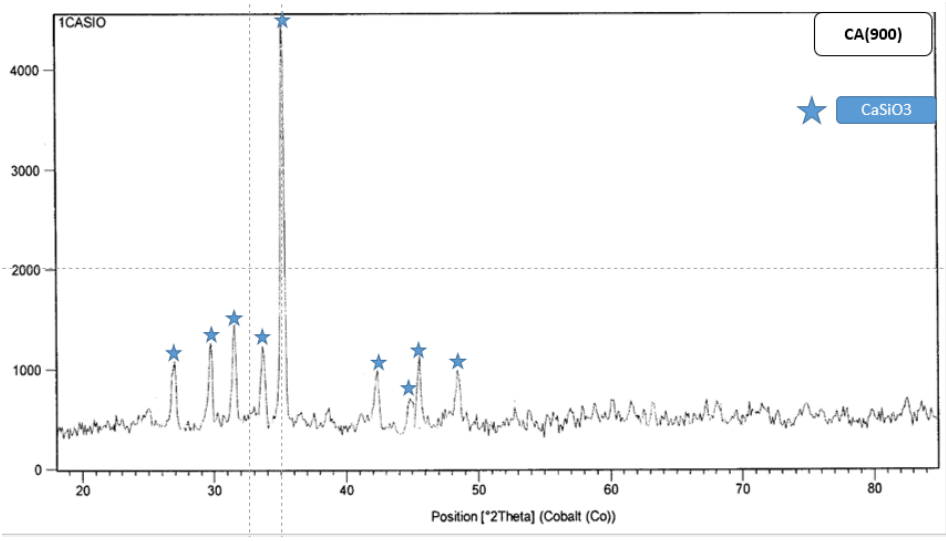
الجدول (2) زوايا الانعراج وشداتها للعينات المرمدة عند الدرجة (800 ºC)

المركب	Pos. [°2Th]	Rel. Int. [%]	Hkl
$CaSiO_3$	26.931	35	400
$CaSiO_3$	29.359	40	002
$CaSiO_3$	31.199	46	202
SiO_2	33.200	35	211
$CaSiO_3$	34.948	100	320
CaO	37.569	50	111
$CaSiO_3$	42.253	45	402
$CaSiO_3$	44.723	33	412
$CaSiO_3$	45.593	53	601
$CaSiO_3$	48.310	44	521
SiO_2	59.467	64	024
SiO_2	65.200	49	323
SiO_2	71.219	55	324

المخطط السابق يدل على عدم اكتمال عملية التحضير وقد يكون ذلك بسبب انخفاض وقت الترميد.

5-5- مخطط (XRD) للعينات المحضرة عند درجة حرارة (900 °C):

أما برفع حرارة ترميد العينات للدرجة (900 ºC) يظهر لدينا المخطط التالي:



الشكل (8) مخطط (XRD)لمركب سيليكات الكالسيوم المحضرعند الدرجة (900 ºC)

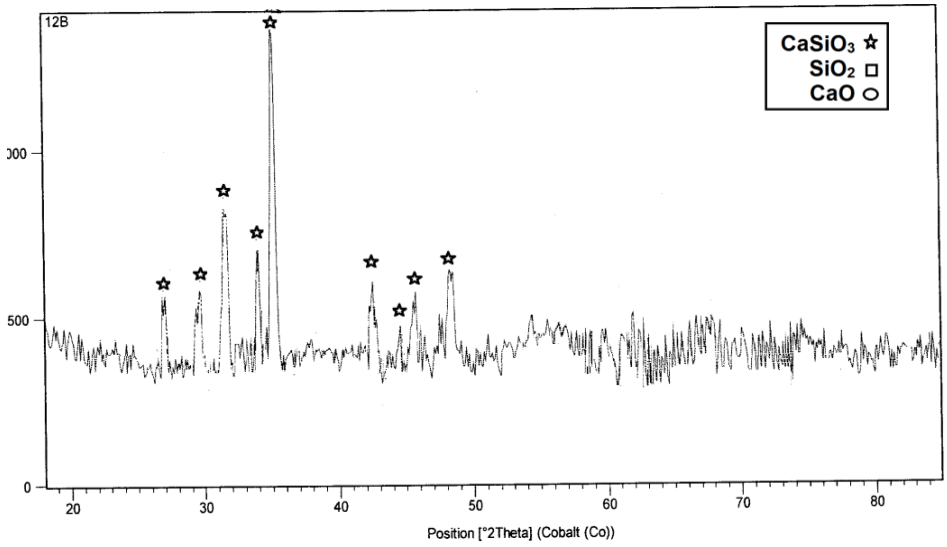
وفيه نلاحظ اختفاء القمم العائدة للأكاسيد الأولية وظهور القمم العائدة لمركب سيليكات الكالسيوم بشكل أكثر حدة ويبين الجدول التالي قيمة زوايا الانعراج وشدة كل منها:

الجدول (3) زوايا الانعراج وشداتها للعينات المرمدة عند الدرجة (900 ºC)

المركب	Pos. [°2Th]	Rel. Int. [%]	Hkl
$CaSiO_3$	26.943	24	400
$CaSiO_3$	29.452	29	002
$CaSiO_3$	31.276	32	200
$CaSiO_3$	33.649	28	202
$CaSiO_3$	34.956	100	320
$CaSiO_3$	42.261	22	402
$CaSiO_3$	44.756	12	412
$CaSiO_3$	45.685	25	601
$CaSiO_3$	48.304	23	521

5-6- مخطط (XRD) للعينات المحضرة عند درجة حرارة (1100 °C):

وبالترميد عند درجة حرارة (1100 °C) نحصل على المخطط التالي:



الشكل (9) مخطط (XRD)لمركب سيليكات الكالسيوم المحضرعند الدرجة (1100 °C)

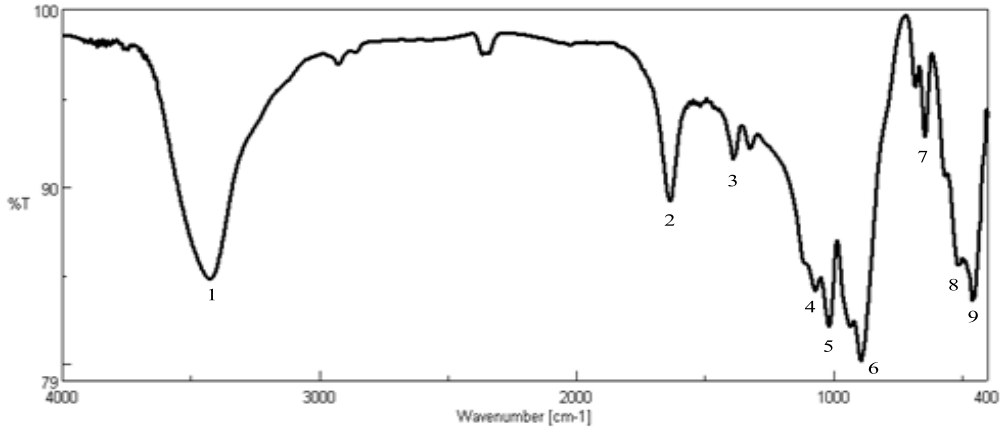
يلاحظ إذا قارنا هذا المخطط مع المخطط السابق نلاحظ التطابق الكبير بينهما من حيث حدة القمم المتشكلة ووضوحها وهذا يدل على الثبات الحراري للمركب عند هذه الدرجة من الحرارة. ويبين الجدول التالي قيم زوايا الانعراج وشدتها والمركب الذي تنتمي اليه:

الجدول (4) زوايا الانعراج وشداتها للعينات المرمدة عند الدرجة (1100 °C)

المركب	Pos. [°2Th]	Rel. Int. [%]	Hkl
$CaSiO_3$	26.810	15	400
$CaSiO_3$	29.211	18	002
$CaSiO_3$	31.345	53	200
$CaSiO_3$	33.301	37	202
$CaSiO_3$	34.899	100	320
$CaSiO_3$	42.199	25	402
$CaSiO_3$	44.689	9	302
$CaSiO_3$	45.611	24	601
$CaSiO_3$	48.200	31	521

5-7- دراسة مطيافية (IR) لمركب سيليكات الكالسيوم:

تم تسجيل طيف (IR) للجملة المحضرة والمرمدة عند درجة الحرارة(^oC 1100) والتي تظهر بشكل نقي وفق مخططات (XRD) ويبين الشكل التالي الطيف الناتج:



الشكل (10) طيف الأشعة تحت الحمراء لمركب سيليكات الكالسيوم المتشكل عند الدرجة 900) ^oC)

ويبين الجدول التالي عصابات الامتصاص في الطيف والأعداد الموجية الموافقة لكل منها:

الجدول (5) عصابات الامتصاص في طيف (IR) لمركب سيليكات الكالسيوم

عصابة الإمتصاص	نمط الأهتزاز		العدد الموجي cm^{-1}
1	امتطاط غير متناظر للرابطة	OH	3427
2	امتطاط حني لجزيئات الماء المتبلورة	Ca-O-Si	1636
3, 4	امتطاط غير متناظر للرابطة Si-O في	SiO_4	1390, 1327
5	امتطاط غير متناظر للرابطة Si-O في	Si_2O_7	1067, 1017
6	امتطاط غير متناظر للرابطة Si-O في	Si_3O_9	892
7	امتطاط غير متناظر للرابطة	Si-O-Si	645
8, 9	امتطاط غير متناظر للرابطة	Ca-O	458, 515

ويتأكد لنا من عصابة الامتصاص للرابطة (Ca-O-Si) دخول الكالسيوم في البنية البلورية للسيليكا، وهو ما يتطابق مع مخطط (XRD) للعينة المحضرة.

5-8- دراسة البنية البلورية لمركب سيليكات الكاسيوم:

بعد مقارنة قمم انعراج الأشعة السينية فيالمخطط المبين في الشكل (8)(والذي تكون فيه جميع القمم عائدة للمركب المطلوب) مع القيم المرجعية للمركب. تبين أن نمط التبلور ثلاثي الميل. حيث لا يمكن معرفة نمط التبلور إلا باستخدام جهاز انعراج الأشعة السينية أحادي البلورة monocrystal وهذه التقنية غير متوفرة.

وتعطى العلاقة التي تربط ثوابت الشبكة البلورية مع قرائن ميلر بالعلاقة التالية:

$$\frac{1}{d^2}=\frac{1}{V^2}(S_{11}h^2+S_{22}k^2+S_{33}l^2+2S_{12}hk+2S_{23}kl+2S_{13}hl)$$

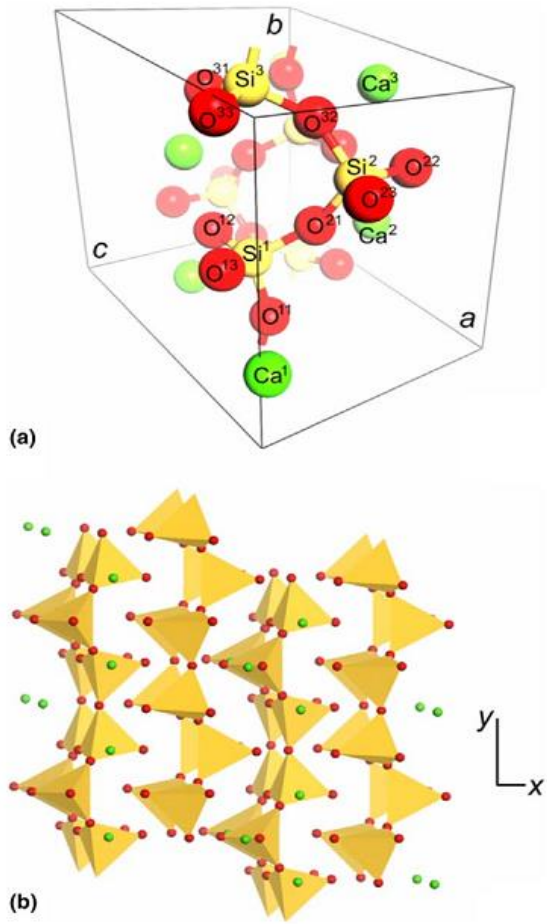
حيث أنَّ:

$$S_{11}=b^2c^2\sin^2\alpha$$
$$S_{22}=a^2c^2\sin^2\beta$$
$$S_{33}=a^2b^2\sin^2\gamma$$

$$S_{12}=abc^2(\cos\alpha\cos\beta-\cos\gamma)$$
$$S_{23}=a^2bc(\cos\beta\cos\gamma-\cos\alpha)$$
$$S_{13}=ab^2c(\cos\gamma\cos\alpha-\cos\beta)$$

ومن المعلوم أنه لا يمكن حساب أي من ثوابت الشبكة البلورية لهذا النمط بالاعتماد على مخططات (XRD) وحدها لذا اكتفينا بالمقارنة مع البطاقة المرجعية ومن خلال التطابق أمكننا اعتماد الثوابت الموجودة في البطاقة.

وبالتالي يمكننا توضيح البنية البلورية وفق الشكل التالي:



الشكل (11) البنية البلورية لمركب سيليكات الكالسيوم وفق النمط البلوري ثلاثي الميل

نلاحظ من الشكل السابق تموضع ذرات السيليكون في مركز رباعايات الوجوه وهو ما أثبته طيف (IR) للمركب المحضر.

6- الخلاصة والتوصيات:

1- تم في هذا البحث تحضير المركب سيليكات الكالسيوم بطريقة الترسيب المشترك انطلاقاً من أملاح كلوريد الكالسيوم وكلوريد السيليكون.

2- تم دراسة تحضير المركب عند درجات حرارة مختلفة ضمن مجال (500- 1000 °C) وكانت الدرجة المناسبة للتحضير (720 °C) وهو ما ظهر بمخطط (DTA) وأكدته مخططات (XRD).

3- تم اثبات هوية الجملة بالاعتماد على مخططات XRD للعينات ومقارنتها مع البطاقات المرجعية المذكورة في المراجع المعتمدة.

4- نوصي بدراسة تحضير مركبات سيليكاتية للعديد من المعادن نظراً للتطبيقات الهامة لها.

المراجع:

1. Fernandez-Garcia M, Martinez-Arias A, Hanson JC, Rodriguez JA. Nanostructured oxides in chemistry: characterization and properties. Chemical Reviews. 2004 Sep 8;104(9):4063-104.
2. Buxbaum G, editor. Industrial inorganic pigments. John Wiley & Sons; 2008 Jul 11.
3. Roberts WL, Rapp GR, Weber J, Rapp GR. Encyclopedia of minerals. New York: Van Nostrand Reinhold; 1990.
4. Phuttawong R, Chantaramee N, Pookmanee P, Puntharod R. Synthesis and Characterization of Calcium Silicate from Rice Husk Ash and Shell of Snail Pomacea Canaliculata by Solid State Reaction. Adv Mater Res. 2015;1103:1–7.
5. Chen G, Shan R, Li S, Shi J. A biomimetic silicification approach to synthesize CaO – SiO 2 catalyst for the transesterification of palm oil into biodiesel. FUEL [Internet]. 2015;(March):1–8. Available from: http://dx.doi.org/10.1016/j.fuel.2015.02.109
6. Pfeiffer H, Bosch P, Bulbulian S. Synthesis of lithium silicates. J Nucl Mater. 1998;257:309–17.
7. Tang T, Zhang Z, Meng J, Luo D. Synthesis and characterization of lithium silicate powders. Fusion Eng Des. 2009;84:2124–30.
8. Wajda A, Goldmann WH, Detsch R, Boccaccini AR. Influence of zinc ions on structure , bioactivity , biocompatibility and antibacterial potential of melt-derived and gel-derived glasses from CaO- SiO 2 system. J Non Cryst Solids [Internet]. 2019;511(September 2018):86–99. Available from: https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2018.12.040

دراسة كوانتية نسبوية لتحديد بعض الثوابت الطيفية لبعض الجزيئات ثنائية الذرة باستخدام طريقة تابعية الكثافة (DFT)

د. عادل المخللاتي (*)، د. سليمان ديبو (**)، نقولا العدره (***)
(*) عضو هيئة تدريسية في قسم الفيزياء، جامعة البعث
(**) عضو هيئة تدريسية في قسم الفيزياء، جامعة البعث
(***) طالب ماجستير، قسم الفيزياء، جامعة البعث

الملخص:

تم في هذا البحث دراسة كل من فلوريد الفضة AgF وبروميد الفضة AgBr باستخدام برنامج ديراك22 (DIRAC22). حيث اعتمد البحث على ثلاث محاور رئيسية، أولاً كانت الطريقة المعتمدة هي طريقة تابعية الكثافة (DFT). ثانياً تم اختيار مجموعة قاعدة نسبوية، dyall.cv3z، وهذا لأجل جميع التابعيات المستخدمة. ثالثاً، تم استخدام هاملتوني ديراك–كولوم النسبوي. تقوم طريقة DFT على ميكانيك الكم وتستخدم في الفيزياء والكيمياء وعلوم المواد بشكلٍ عام لدراسة البنية الإلكترونية، وبالأخص السوية الأرضية للأنظمة متعددة الجسيمات، عن طريق تابعيات مختلفة بناءً على مجموعة قاعدة مختارة.

تم اجراء الحسابات المتعلقة بالثوابت الطيفية، وهي طول الرابطة المتوازن r_e، التواتر التوافقي ω_e والتواتر اللاتوافقي $x_e\omega_e$، للجزيئات ثنائية الذرة المختارة بالاعتماد على برنامج ديراك22 (DIRAC22) بمساعدة برنامج إضافي (TWOFIT) لاستقراء قيم الثوابت الطيفية بالاعتماد على قيم الطاقة الناتجة. وقد وجدنا أنه لوصف كل من AgBr

و AgF فإن التابعية CAMB3LYP تشكل طريقة جيدة بشكلٍ عام لأجل طول الرابطة المتوازن r_e و التواتر التوافقي ω_e، فيما شكلت التابعية LDA تابعية ممتازة لوصف التواتر اللاتوافقي. حيث استطعنا تحسين قيم الثوابت الطيفية المدروسة بعد الاعتماد على هاملتوني ديراك–كولوم النسبوي الحاوي على التأثيرات السبينية–المدارية بشكلها اللاضطرابي.

كلمات مفتاحية: ميكانيك الكم النسبوي، الثوابت الطيفية، نظرية تابعية الكثافة DFT، التأثيرات السبينية–المدارية.

A relativistic quantum study to determine some spectroscopic constants for the diatomic molecules Silver Bromide (AgBr) and Silver Fluoride (AgF) using density functional theory (DFT)

Summary:

In this research, we studied both silver fluoride (AgF) and silver bromide (AgBr) using DIRAC22 program. This research is based on three points. In the first, we have used density functional theory (DFT). The second, we have selected [dyall.cv3z] relativistic basis set for all the functional that had been used in this research. The third, we have used Dirac-Coulomb hamiltonian. Density functional theory is a quantum mechanical theory that it is uses in physics, chemistry, and material science in general to study the electronic structure, and the ground state for the many-body systems in specific, by various types of functional based on specific basis set.

We used DIRAC22 with aid of another program in DIRAC package called TWOFIT for the calculations of the spectroscopic constants, which are the equilibrium bond length r_e, harmonic frequency ω_e and anharmonic frequency $x_e\omega_e$. We have found that to describe both AgF and AgBr, CAMB3LYP make a good method in general to describe both the equilibrium bond length r_e and the harmonic frequency ω_e,

where LDA functional made an excellent description for the anharmonic frequency $x_e\omega_e$.

Furthermore, we were able to improve the spectroscopic constants values using the relativistic Dirac-Coulomb hamiltonian that have the spin-orbit interaction term in the non-perturbative form.

Keywords:

relativistic quantum mechanics, spectroscopic constants, density functional theory (DFT), spin-orbit effects.

مقدمة:

ظهرت نظرية ميكانيك الكم في بدايات القرن الماضي بناءً على أعمال كل من شرودنغر[1] (Schrödinger)، هايزنبرغ[2] (Heisenberg)، جوردن (Jordan) وبورن[3] (Born). لكن تم تطوير هذه النظرية بشكل مستقل عن نظرية النسبية الخاصة لآينشتاين[4]، بالتالي لم يتضمن الشكل الأول للنظرية الكوانتية أي تأثيرات نسبوية. حيث كان الفشل الأول لهذه النظرية الكوانتية اللانسبوية هو عدم توافقها مع التجربة عند تطبيقها على الإلكترونات المشحونة النقطية. ظهر هذا الفشل من حقيقة أنَ عدد الحالات المستقرة للإلكترون يساوي ضعف العدد التي أعطته النظرية، فيما يعرف بظاهرة الازدواجية[1] (duplexity). وللتغلب على هذه المسألة قدم كل من غودسميت (Goudsmit) وولينبيك[5] (Uhlenbeck) فكرة العزم المداري السبيني المساوٍ لنصف كوانتا وعزم مغناطيسي مساوٍ لواحدة مغنطون بور. هذا أدى إلى تطوير ميكانيك جديد يتضمن العزم المداري السبيني على يد كل من باولي[6] (Pauli) وداروين[7] (Darwin) لتفسير القيم التجريبية لكن دون تقديم تفسير واضح عن منشأه. ثم في عام 1928، أثبت ديراك أنَ هذه النظريات السابقة لم تكن كاملة مبرراً فشلها بأنها لم تأخذ التأثيرات النسبوية بالاعتبار، بحيث بيّن ديراك أنَّ العزم المداري السبيني، المسبب لظاهرة الازدواجية، ناتج عن التأثيرات النسبوية لميكانيك الكم[8]. نجح ديراك فيما بعد بتفسير الطاقة السالبة التي نتجت عن نظريته عن طريق التنبؤ بوجود جسيم مضاد للإلكترون[9] دعي بالبوزيترون.

[1] يشار إلى ظاهرة الازدواجية بظهور خطين طيفيين للطاقة ناتجين عن الانقسام السبيني أثناء التحليل الطيفي للعنصر المدروس.

بسبب أهمية التأثيرات النسبوية على ميكانيك الكم، تم الأخذ بهذه التأثيرات في الفيزياء الكوانتية، والتي أدت، على سبيل المثال، إلى تفسير اللون الأصفر للذهب ودرجة انصهار الزئبق المنخفضة. بالإضافة إلى أنها أعطت طرق أفضل وأكثر دقة لتحديد الخصائص الطيفية للجزيئات[10].

تنتج التأثيرات النسبوية في الكيمياء نتيجةً للسرعة العالية للإلكترونات عندما تتحرك بالقرب من النوى الثقيلة. بالطبع يمكن وصف هذه التأثيرات عن طريق معادلة ديراك أو أي تقريبات أخرى. إنَّ الزيادة في الكتلة الناشئة عن الحركة النسبوية تسبب استقرار طاقي وانكماش قطري. تكون هذه التأثيرات جلية لأجل المدارات s و p . هذا الانكماش يؤدي إلى حجب أقوى للجذب النووي، وبالتالي، إلى عدم استقرار وتوسيع للمدارات dو f. يمكن لهذه التأثيرات تفسير بعض التشابهات والاختلافات ما بين الصف الخامس والسادس من الجدول الدوري. وأحد أشهر الأمثلة هو الاختلاف ما بين الفضة والذهب. في حال غياب التأثيرات النسبوية، ستتشابه طاقة المدارات 5d و 6s للذهب مع طاقة المدارات 4d و 5s للفضة، في حين لن يكون هذا الحال عند ادخال التأثيرات النسبوية[11]. فالانكماش النسبوي[2] للطبقة 6s يفسر قصر وقوة الرابطة التساهمية، بالإضافة لكبر كمون التأين والألفة الإلكترونية للذهب. كما ينتج اللون الأصفر للذهب عن التأثيرات النسبوية، حيث يُعزى للانتقالات من 5d إلى مستوى فيرمي التي تحدث لأجل 2.3 eV تقريبا[12].

من المعلوم أنَ تغير طول الرابطة يؤثر على قيمة الثوابت الطيفية. وبما انَ طول الرابطة يتبع للتأثيرات النسبوية فإن الثوابت الطيفية تتبع للتأثيرات النسبوية. حيث وجد أنَ التأثير النسبوي، في معظم الحالات، على أطوال الروابط الكيميائية يكون ذو تأثير

[2] انكماش حجم المدار بسبب التأثيرات النسبوية.

انكماشي[13]. مع العلم أنَ انكماش طول الرابطة لا يستدعي دائماً انكماش المدارات[13].

الدراسة المرجعية:

في عام 1994، قامَ راميرز–سوليس (Ramirez-Solis) و سكامبز[14] (Schamps) بدراسة السوية الأرضية $X\ ^1\Sigma$ لمركب فلوريد الفضة AgF باستخدام طرق ab initio للحقل المتناسق ذاتياً (SCF) بوجود كمون كاذب (pseudopotential) ذو تشكيلين (two-configuration) وهذا بعد تنفيذ حسابات التأثير المتبادل التشكيلي متعدد التداخل (multireference configuration interaction) لمولر–بليسيت (Moller-Plesset). وفي عام 1997، قدّم كل من لايردال (Laerdahl)، ساو (Saue) و فايجري[15] (Faegri) برنامج حاسوبي لحساب تصحيح الطاقة MP2 لأجل تابع ديراك–هارتري–فوك الموجي ذو المركبات الأربعة. حيث طبق كل من الباحثين السابقين طريقة MP2 النسبوية على السوية الأرضية لـ CuF، AgF وAuF. ثم في عام 1998، قامَ كل من إلياس (Ilias)، فوردك (Furdik) و أوربان[16] (Urban)، باستخدام طريقة العناقيد المقترنة (coupled cluster) CCSD(T) بعد ادخال التأثيرات النسبوية عن طريق تقريب دوغلاس–كرول–هيس ذو المركبة الواحدة الغير الزوجية (no pair). وفي ذات العام، 1998، قام الباحث وولين[17] (Wullen) بتطبيق التقريب النسبوي من المرتبة الصفرية (ZORA) لأجل حسابات تابعية الكثافة الجزيئية على كل من CuF، AgF و AuF. وهذا بعد ادخال نموذج كموني لإقصاء المشاكل الناتجة عن الاعتمادية على المعيار للتقريبات الاعتيادية، وعدم الثباتية بالنسبة للطاقة. دعيت هذه الطريقة الجديدة بـ ZORA(MP). حيث تمت مقارنة التأثيرات النسبوية والارتباط لسلسلة FM (M=Cu,

(Ag, Au مع التأثيرات ذاتها لسلسلة AlM. كانت الفروقات في خصائص الرابطة والخصائص الجزيئية ما بين السلسلتين ناتجة بشكل رئيسي عن التأثيرات النسبوية. وفي عام 2000، قام كل من راميرز–سوليس (Ramirez-Solis) و داوداي[18] (Daudey) بدراسة الخصائص الطيفية لجزيء AgF باستخدام حسابات CASSCF (الفضاء الكامل الفعال للحقل المتناسق ذاتياً) بالإضافة لـ CASPT2 (الفضاء الكامل الفعال الاضطرابي من المرتبة الثانية)، وهذا باستخدام كمون النواة الفعال النسبوي لـ 19 إلكترون فعال لأجل الفضة لأجل مجموعات قاعدة غاوصية كبيرة لكلا الذرتين. بصرف النظر عن الاهتمام بهاليدات الفضة لاستخداماتها في الفوتوغرافي، لم تتواجد دراسات عديدة عليها. وهذا عائد إلى الطبيعة المعقدة للتأثيرات المتبادلة الفيزيائية لهذه الأنظمة، مثل تلك الناتجة عن تهجين المدارات $4d$ للفضة مع المدارات p لأنيونات (أيونات بشحنة سالبة) الهاليدات. عادةً ما يشار إلى هذا التهجين بـ الرابطة التساهمية الجزئية[19] (partial covalency).

في عام 2009، قامَ كل من امارو–استرادا (Amaro-Estrada) و راميرز–سوليس[20] (Ramirez-Solis)، بدراسة أخفض 9 سويات أحادية وثلاثية لمركب برومين الفضة AgBr بما فيها السوية الأرضية بطريقة الفضاء الكامل الفعال المتناسق ذاتياً بوجود 16 إلكترون فعال في 12 مدار ثم عن طريق حسابات تابعية الزوج المقترن الوسطي و CIPT2 بمساعدة مجموعات قاعدة تكافؤية كبيرة. ثم في عام 2016، قام كل من لوفتاجير (Loftager)، غارسيا–فيرينا انديز (Garcia-Ferna ndez)، ارمبورو (Aramburu)، مورينو (Moreno) و غارسيا–لاسترا[21] (Garcia-Lastra)، بإيضاح أهمية استخدام التابعيات الهجينة في حسابات تابعية الكثافة لوصف جزيء AgBr. وفي عام 2022، قام كل من دوردفيتش (Dordevic)، رادينكوفيتش (Radenkovic)، شايك (Shaik) و برايدا[22] (Braida)، بتحليل طبيعة الروابط

الكيميائية للهاليدات المعدنية باستخدام نظرية الروابط التكافؤية (VB) عالية المستوى (high-level).حيث قاموا بتحسين الجزيئات المدروسة على مستوى CCSD بأخذ مجموعات قاعدة مختلفة لكنها مرتبطة بكمونات النواة الفعالة المختلفة (ECPs) للذرات المعدنية.

ميكانيك الكم النسبوي:

يمكننا كتابة معادلة ديراك[8] للإلكترون في حقل كهرومغناطيسي بالشكل:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+e\phi\right)\psi = c\cdot\boldsymbol{\alpha}(-i\hbar\nabla+e\mathbf{A})\psi+\beta mc^2\psi \qquad (1)$$

حيث تمتلك المصفوفات $\boldsymbol{\alpha}$ و β الخواص التالية:

$$\begin{aligned}\alpha_i^2=\beta^2=1\\ \alpha_i\alpha_j=-\alpha_j\alpha_i,\qquad i\neq j\\ \alpha_i\beta=-\beta\alpha_i\end{aligned} \qquad (2)$$

أو، بوضع $\beta\equiv\alpha_0$:

$$\alpha_i\alpha_j+\alpha_j\alpha_i=2\delta_{ij} \qquad (3)$$

المعادلة (3) تُبيّن لنا أنَ جبر α_i هو جبر لا تبادلي، في الحقيقة هو جبر عكس تبادلي (anti−commutator algebra). استطاع ديراك[8] التوصل إلى التمثيل التالي للمصفوفات:

$$\alpha_k = \begin{pmatrix} 0_2 & \sigma_k \\ \sigma_k & 0_2 \end{pmatrix}, \qquad k = 1, 2, 3$$
$$\beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0_2 \\ 0_2 & -I_2 \end{pmatrix} \tag{4}$$

حيث I_2 و 0_2 هي مصفوفة الواحدة (2×2) والمصفوفة الصفرية (2×2)، و σ_k هي مصفوفات باولي. هذا التمثيل للمصفوفات α يدعى بالتمثيل المعياري (standard representation).

من المفيد كتابة تابع ديراك الموجي بدلالة ما يُعرّف بالمركبتين العلويتين والسفليتين كسبينورات−2 (سبينورات باولي):

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \Psi^L(\mathbf{r}, t) \\ \Psi^S(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix} \tag{5}$$

حيث Ψ^L و Ψ^S يطلق عليها المركبات الكبرى والصغرى للدالة الموجية، على الترتيب.

التوازن الحركي:

تم اكتشاف التوازن الحركي عندما فشلت المحاولات المبكرة لحسابات SCF النسبوية في التقارب إلى حالة مرتبطة (bound state). كان جوهر المشكلة هو أنَ المركبات الأربعة للسبينور في الطرق النسبوية كان يمكنها التغيير بشكل مستقل عن بعضها البعض. تم حل هذه المشكلة في النهاية من خلال الحد اللانسبوي للطاقة الحركية، مع ملاحظة أنَ المركبات الكبيرة والصغيرة للسبينور الرباعي ليست مستقلة عن بعضها.

نستطيع التعبير عن شرط التوازن الحركي بالعلاقة التالية:

$$\Psi^S = \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{2mc} \Psi^L \qquad (6)$$

نشير إلى هذا الاقتران بين المركبات باسم **التوازن الحركي** (kinetic balance)[23].

النماذج النووية:

يدرس عادةً التأثير المتبادل بين الإلكترون والنواة كون النواة شحنة نقطية يمكن وصفها عن طريق كمون كولوم. لكن كلما زادت قيمة الشحنة النووية $+Ze$، كلما زاد حجم النوى. هذا يعني عدم كفاءة تمثيل النوى الثقيلة عن طريق نموذج الشحنة النقطية. يتم استبدال هذا النموذج بنماذج تعتمد على توزع الكثافة للنواة.

يعطى كمون كولوم الناتج عن توزع الشحنة $\rho(\boldsymbol{r})$ عند نقطة ما $\mathbf{r}$ بالشكل التالي:

$$V(\mathbf{r}) = \int_{v'} \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|r - r'|} d\mathbf{r}' \qquad (7)$$

لأجل التوزع ρ فإن من أكثر النماذج شيوعاً في حسابات البينة الذرية النسبوية هو نموذج الكرة المشحونة المتجانسة (uniformly charged sphere):

$$\begin{aligned} \rho^{\text{nuc}}(r) &= \rho_0, \qquad r \le r^{\text{nuc}} \\ &= 0, \qquad r > r^{\text{nuc}} \end{aligned} \qquad (8)$$

والذي سيعطي تابع موجي سيأخذ شكل توزع غاوصي داخل النواة.

نظرية تابعية الكثافة:

نشر كلاً من كوهن وشام[24] في عام 1965 ورقة علمية قامت بتحويل نظرية تابعة الكثافة إلى نظرية بنية إلكترونية (electronic structure theory) أكثر عملية. بما أنه من الصعب الحصول على تابعية طاقة حركية مفيدة $T[\rho]$، فقد توصلوا إلى فكرة ذكية، وهي في استخدام نظام من الإلكترونات الوهمية غير المتفاعلة، بحيث تكون كثافة الحالة الأرضية لهذا النظام مشابه للنظام الحقيقي للإلكترونات المتفاعلة. عندها قدّم كل من كوهن وشام معادلة تفاضلية عُرّفت باسمهم:

$$h^{KS}\varphi_i = \varepsilon_i\varphi_i \qquad (9)$$

حيث h^{KS} هو مؤثر كوهن–شام للإلكترون الواحد، المعرف بالشكل التالي:

$$h^{KS} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + V_s(\boldsymbol{r}) \qquad (10)$$

تدعى هذه المدارات بمدارات كوهن–شام. إنَ الطاقة الكلية للنظام المتفاعل تعطى كما يلي:

$$E_0[\rho] = \int \rho(\boldsymbol{r})V_{ne}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} + F[\rho] \qquad (11)$$

لقد اقترح كوهن وشام[24] تقريب لـ $F[\rho]$ يقودهم لشكل مشابه لطريقة هارتري – فوك لكن يحوي على القدر الأكبر من تأثيرات الارتباط والتبادل. حيث عرّفوا $F[\rho]$ بالشكل:

$$F[\rho] \equiv T_S[\rho] + J[\rho] + E_{XC}[\rho] \tag{12}$$

حيث E_{XC} هي طاقة التبادل – الارتباط المعرفة من خلال المعادلة (12) بالشكل:

$$\begin{aligned} E_{XC}[\rho] &\equiv (T[\rho] - T_S[\rho]) + (E_{ee}[\rho] - J[\rho]) \\ &= T_C[\rho] + E_{ncl}[\rho] \end{aligned} \tag{13}$$

هذا يعني أنَ E_{XC} لا تحوي على التأثيرات غير الكلاسيكية لتصحيح التأثير الذاتي، التبادل والارتباط، بل أيضاً جزءً من الطاقة الحركية.

المطيافية الذرية والإلكترونية للجزيئات:

يمكن تمثيل الحركة الدورانية للجزيئات ثنائية الذرة الخطية كحركة دوار صلب مؤلف من كتلتين m_1 و m_2. نستطيع الحصول على علاقة طاقة الدوار الصلب وهذا بعد ادخال كمون الدوار الصلب في معادلة شرودنغر، وعندها نحصل على الطاقة بعد تعديلها لتصبح بواحدة الـ $\mathbf{cm^{-1}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_J = \frac{E_J}{hc} &= \frac{h}{8\pi^2 Ic} J(J+1) \quad \mathbf{cm^{-1}} \\ &= BJ(J+1), \qquad B = \frac{h}{8\pi^2 Ic} \end{aligned} \tag{14}$$

يدعى B بثابت الدوران.

إنَ نموذج الدوار الصلب يعتبر نموذج تقريبي لوصف دوران الجزيء. في الواقع إن جميع الروابط قابلة للامتطاط إلى نفس المدى، حيث تزداد طول الرابطة بزيادة J. فالدوران السريع للجزيء ثنائي الذرة يؤدي إلى نشوء قوة نابذة تؤثر على الذرات بصورة منفردة وتزيحها عن مركز ثقل الجزيء. سيصاحب امتطاط الرابطة قوى ارجاع من الشكل $k(r - r_e)$، التي توازن القوى النابذة المركزية المعطاة بالشكل $\mu r\omega^2$. تعطى الطاقة الكلية للنظام كمجموع الطاقة الحركية والكامنة.

نتوصل إلى قيم الطاقة المسموحة[25] للدوار المرن:

$$\mathcal{E}_J = \frac{E_J}{hc} = BJ(J+1) - DJ^2(J+1)^2 \quad \mathbf{cm^{-1}}$$
$$B = \frac{h}{8\pi^2 Ic}, \qquad D = \frac{4B^3}{\bar{\omega}^2} \qquad \mathbf{cm^{-1}} \tag{15}$$

ولأجل الطاقة الاهتزازية للجزيئات ثنائية الذرة، يمكننا تطبيق نموذج الهزاز التوافقي البسيط[26] على أي جزيء ثنائي الذرة، وهذا لاستنتاج الطاقة الاهتزازية للجزيء. نستطيع تحديد طاقة السويات الاهتزازية التي يمكن أنَ تمثل الطاقة الاهتزازية بصورة تقريبية لأي جزيء ثنائي الذرة بحل معادلة شرودنغر المعروفة. عندها تكون الطاقة الاهتزازية[27] هي:

$$\mathcal{E}_v = \frac{E_v}{hc} = \left(v + \frac{1}{2}\right)\bar{\omega}_{\text{osc}} \quad \mathbf{cm^{-1}} \tag{16}$$

لكن ما تزال العلاقة (16) تقريبية لاهتزاز الجزيء، فحسب هذا التقريب لن يفتكك الجزيء إلى ذراته عند الطاقات العالية، وهو ما يتنافى مع التجربة. ولوصف حد تفكك الرابطة للجزيء ندخل، بالإضافة لنموذج الهزاز التوافقي، نموذج الهزاز اللاتوافقي.

استنتج الباحث مورس[28] (Morse) تابع الطاقة الكامنة للجزيء ثنائي الذرة بتقريب جيد بعلاقة نصف تجريبية، دعيت هذه العلاقة بتابع مورس، وتعطى بالشكل التالي:

$$V = D_e\left[1 - e^{a(r-r_e)}\right]^2 \qquad (17)$$

حيث a ثابت، D_e ثابت التفكك و r_e المسافة المتوازنة (طول الرابطة المتوازنة). باستخدام التابع (17) في معادلة شرودنغر نحصل على الطاقة التالية:

$$\mathcal{E}_v = \left(v + \frac{1}{2}\right)\bar{\omega}_e - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 x_e\bar{\omega}_e \qquad \mathbf{cm^{-1}} \qquad (18)$$

ويعبر عن ثابت الاهتزاز اللاتوافقي بالشكل:

$$x_e\bar{\omega}_e = \frac{ha^2}{8\pi^2 c\mu} \qquad \mathbf{cm^{-1}} \qquad (19)$$

حيث يرتبط هذا الثابت بتفكك الجزيء.

خطوات العمل:

إن جميع الحسابات المدرجة في هذه الدراسة تمت باستخدام برنامج ديراك22 (DIRAC22) [29] والمبنية على هاملتوني ديراك–كولوم ذو المركبات الأربعة بالإضافة لمجموعات القاعدة من النوع الغاوصي غير المقيدة (GTO). يحوي برنامج

ديراك22 على تصحيح للطاقة لتجنب الحسابات الصريحة لتكاملات الإلكترونين الحاوية على توابع القاعدة للمركبة الصغيرة فقط. بالتالي قمنا بالاحتفاظ بهذه التكاملات من خلال التعليمة (DOSSSS). استخدمنا مجموعات قاعدة dyall ثلاثية–زيتا الحاوية على توابع الارتباط للإلكترونات التكافؤية القلبية (core-valence)، والمشارة إليها بـ dyall.cv3z. تم توليد توابع القاعدة للمركبة الصغيرة من توابع القاعدة للمركبة الكبيرة بتطبيق شرط التوازن الحركي المقيّد. استخدمنا نموذج توزع غاوص لأجل توزع الشحنة النووية.

قمنا بإجراء حسابات نظرية تابعية الكثافة (DFT) باستخدام تابعيات مختلفة: LDA [30]، PBE [31]، PBE0 [32]، BLYP [33]، B3LYP [33]، CAMB3LYP [34]. تم أجراء جميع حسابات DFT باستخدام شبكة (grid) فوق دقيقة (ultrafine) لأجل التكاملات العددية وهذا لضمان تقارب نتائج حسابات تابعية التبادل–الارتباط. هذا يعني أنّ تعليمة (ULTRAFINE) في حزمة ديراك22 ستقوم بالتكاملات القطرية باستخدام مخطط أدخله ليناه[35] (Lindh)، بعتبة تقارب مساوية لـ 2×10^{-15}، فيما تم الحصول على التكاملات الزاوية باستخدام مخطط ليبديف (Lebedev) بحيث أنّ $L_{max} = 64$. تم حساب الثوابت الطيفية (r_e، ω_e و $x_e\omega_e$) باستخدام كثيرات حدود من المرتبة الرابعة لأجل 7 نقاط للطاقة لأكثر النظائر وفرةً، وهذا باستخدام برنامج إضافي يُدعى توفيت[36] (TWOFIT) المضمن في برنامج ديراك22، واتضح أنّ القيم الموافقة لكثيرات الحدود من المرتبة الرابعة هي القيم الأقرب للقيم التجريبية.

قمنا بإدراج الثوابت الطيفية المحسوبة، طول الرابطة المتوازنة r_e، التواتر التوافقي ω_e والتواتر اللاتوافقي $x_e\omega_e$ بالنسبة لعدد من التابعيات لأجل مركب بروميد الفضة

(AgBr) وفلوريد الفضة (AgF) ضمن الجدولين (1) و(2) على الترتيب. تمت الحسابات باستخدام طرق SCF، أي هارتري–فوك وكوهن–شام، باستخدام موقع نيست (NIST) كمرجعية للقيم التجريبية. قمنا باستخدام مجموعة القاعدة النسبوية الكبيرة dyall.cv3z لأجل جميع الجزيئات المدروسة.

يظهر لنا الجدول (1) و (2) أطوال الروابط r_e، الثوابت التوافقية ω_e واللاتوافقية $x_e\omega_e$ لـ Ag-Br و Ag-F، على الترتيب، والتي تم الحصول عليها بطريقة تابعية الكثافة DFT لأجل تابعيات مختلفة، وباستخدام مجموعة القاعدة dyall.cv3z، والقيم التجريبية الموافقة بالإضافة لمقارنة مع الدراسات النظرية السابقة.

النتائج والمناقشة:

بروميد الفضة:

نلاحظ أنَ جميع القيم في المرجع[22] أظهرت أطوال روابط أطول بقليل من القيمة التجريبية. حيث قدمت مجموعات القاعدة cc-pVQZ و aug-cc-pVQZ مع حسابات CCSD توافق عالي القيمة مع القيمة التجريبية، حيث نلاحظ انّ الخطأ المطلق المرتكب كان أقل من 0.02 A°. وأنّ القيم المحسوبة باستخدام مجموعة القاعدة def2-TZVP الأبعد من بين مجموعات القاعدة السابقة، بخطأ مطلق مساوٍ لـ 0.02 A°. تم تضمين التأثيرات النسبوية، التأثير المتبادل السبيني–المداري (SO)، في الهاملتوني الفعال في المرجع [20] باستخدام كمونات ستوتغارت (Stuttgart) السبينية–المدارية الفعالة (ESOP)، وهذا بعد استخدام حسابات CASSCF+ACPF و CIPT2. نلاحظ أنه وبعد تضمنين التأثيرات النسبوية (SO)، تم تحسين قيمة كل من طول الرابطة والتواتر اللاتوافقي. حيث كان الخطأ المطلق لأجل طول الرابطة مساوٍ لـ 0.01 A°، ولأجل التواتر اللاتوافقي مساوٍ $0.04\ cm^{-1}$. فيما أعطت هذه الحسابات قيمة بعيدة عن

القيم النظرية السابقة وهذا لأجل التواتر التوافقي، بخطأ مطلق مساوٍ لـ $2.72\ cm^{-1}$. استطعنا باستخدام التابعية PBE0، الحصول على أفضل قيمة لطول الرابطة مقارنتاً بباقي التابعيات المدروسة، حيث كان الخطأ المطلق المرتكب مساوٍ لـ $0.014\ A°$. فيما أعطت التابعية LDA، قيمة بعيدة عن القيمة التجريبية

بخطأ مطلق مساوٍ لـ $0.051\ A°$. قدمت التابعية CAMB3LYP أفضل قيمة للتواتر التوافقي من بين المرجعيات المدروسة بخطأ مطلق مساوٍ لـ $0.844\ cm^{-1}$. وأعطت التابعية LDA أفضل قيمة للتواتر اللاتوافقي بخطأ مطلق مساوٍ لـ $0.017\ A°$.

الجدول (1): الثوابت الطيفية (طول الرابطة r_e، التواتر التوافقي ω_e والتواتر اللاتوافقي $x_e\omega_e$) لجزيء بروميد الفضة AgBr والتي تم الحصول عليها لأجل تابعيات مختلفة باستخدام مجموعة القاعدة الكبيرة dyall.cv3z بالمقارنة مع مرجعيات مختلفة. تم الحصول على القيم التجريبية (r_e، ω_e، $x_e\omega_e$) من موقع NIST.

التابعية	r_e [A°]	ω_e [cm^{-1}]	$x_e\omega_e$ [cm^{-1}]
LDA	2.34209	258.316	**0.696655**
PBE	2.40989	239.144	0.797978
PBE0	**2.4072**	244.227	0.728114
BLYP	2.44394	229.336	0.703732
B3LYP	2.43309	235.918	0.634113
CAMB3LYP	2.4118	**246.876**	0.630104
Ref. [20]	2.406 (2.404)[d]	245 (245)	0.78 (0.72)
Ref. [22]	2.415[a] 2.400[b] 2.393[c]	-	-
Exp. [37]	2.39309	247.7(2)	0.679(5)

a: الحسابات باستخدام مجموعة القاعدة def2-TZVP.
b: الحسابات باستخدام مجموعة القاعدة cc-pVQZ.
c: الحسابات باستخدام مجموعة القاعدة aug-cc-pVQZ.
d: بعد ادخال التأثيرات السبينية-المدارية.

فلوريد الفضة:

أعطى المرجع[14] قيم أعلى من القيم التجريبية لكافة الثوابت الطيفية المدروسة في هذا البحث. حيث لم يتم ادخال التأثير السبيني–المداري في الهاملتوني الإلكتروني. تم استخدام طريقة RECP غير التجريبية (nonempirical) للأخذ بالحسبان إلكترونات

القلب لكلا الذرتين. بالإشارة إلى انّ ECP يحوي على تصحيحات سرعة الكتلة (mass velocity) وداروين النسبوية (Darwin relativistic corrections). كان الخطأ المطلق المرتكب لأجل كل من r_e، ω_e و $x_e\omega_e$ هي $0.017\ A°$، $60.553\ cm^{-1}$ و $0.517\ cm^{-1}$، على الترتيب. باستخدام طريقة مولر–بليسيت الاضطرابية من المرتبة الثانية والنسبوية (R MP2) بارتباط 18 إلكترون[15]، تم الحصول على قيم قريبة جداً من القيم التجريبية بخطأ مطلق مرتكب لأجل r_e مساوٍ لـ $0.0038\ A°$، و $1.553\ cm^{-1}$ لأجل ω_e. بين المرجع [16] أهمية التأثيرات النسبوية من خلال المقارنة ما بين الحسابات النسبوية واللانسبوية. بحيث كانت القيم المحسوبة بطريقة CCSD(T) بعد ادخال التأثيرات النسبوية بطريقة دوغلاس–كرول ذات المركبة الواحدة الغير زوجية (no pair) ذات توافق جيد مع القيمة التجريبية. حدث انخفاض بأطوال الروابط وهو متوقع نتيجةً للانكماش الذي يحدث بسبب التأثيرات النسبوية، بخطأ مطلق مساوٍ لـ $0.02\ A°$. ازدادت قيمة ω_e بنحو $19\ cm^{-1}$ مقارنتاً بالقيمة اللانسبوية، وبخطأ مطلق مساوٍ $8.347\ cm^{-1}$. و $0.447\ cm^{-1}$ لأجل $x_e\omega_e$. بحيث تبين أنّ القيم المحسوبة نظرياً باستخدام هذه الطريقة خُفضت بشكل طفيف مقارنتاً بالقيم التجريبية. تم حساب الثوابت الطيفية لـ AgF باستخدام طريقة جديدة[17] عرفت بـ ZORA(MP)، وهي عبارة عن دمج ما بين التقريب المنتظم من المرتبة الصفرية (ZORA) مع كمون جديد غير معتمد على الكثافة الإلكترونية بشكل صريح، دُعي بـ كمون النموذج (model potential)، اختصاراً بـ MP. النتائج التي تم الحصول عليها لـ r_e كانت على توافق جيد مع القيمة التجريبية بخطأ مطلق مساوٍ لـ $0.026\ A°$. لكن ابتعدت القيمة النظرية للتواتر التوافقي ω_e عن القيمة التجريبية بنحو $30\ cm^{-1}$. باستخدام حسابات

الجدول (2): الثوابت الطيفية (طول الرابطة r_e، التواتر التوافقي ω_e والتواتر اللاتوافقي $x_e\omega_e$) لجزيء فلوريد الفضة AgF والتي تم الحصول عليها لأجل تابعيات مختلفة باستخدام مجموعة القاعدة الكبيرة dyall.cv3z بالمقارنة مع مرجعيات مختلفة. تم الحصول على القيم التجريبية (r_e، ω_e، $x_e\omega_e$) من موقع NIST.

التابعية	r_e [A°]	ω_e [cm^{-1}]	$x_e\omega_e$ [cm^{-1}]
LDA	1.93665	536.663	**2.57467**
PBE	1.99383	475.387	-3.86410
PBE0	1.98576	497.130	-1.38650
BLYP	2.00987	466.953	-6.13434
B3LYP	1.99764	486.580	-3.08724
CAMB3LYP	**1.98351**	**506.853**	-1.28250
Ref. [14]	2.00029	574	3.11
Ref. [15]	2.069[a] 2.033[b] 2.026[c] 2.029[d] 1.987[e] 1.977[f]	472 491 496 491 515 521	-
Ref. [16]	2.004	505.1	3.04
Ref. [17]	2.01	482	-
Ref. [18]	1.9897	504	0.96
Exp. [38]	1.983179	513.447	2.593

a: حسابات باستخدام طرق SCF اللانسبوية.
b: حسابات باستخدام تقريب MP2 (مولر-بليسيت من المرتبة الثانية) اللانسبوي بوجود 18 إلكترون مرتبط.
c: حسابات MP2 اللانسبوية بوجود 26 إلكترون مرتبط.
d: حسابات DHF (ديراك-هاتري-فوك) النسبوية.
e: حسابات MP2 النسبوية بوجود 18 إلكترون مرتبط.
f: حسابات MP2 النسبوية بوجود 26 إلكترون مرتبط.

CASSCF+CASPT2 وطريقة RECP بعد الأخذ بالحسبان ارتباط 19 إلكترون [18]، بالإضافة لإدخال التأثيرات السبينية–المدارية كاضطراب، تم الحصول على قيم جيدة للثوابت الطيفية. كان الخطأ المرتكب في قياس r_e و ω_e هو $0.0065\ A°$ و $9.447\ cm^{-1}$، على الترتيب. لكن ابتعدت القيمة المحسوبة للتواتر اللاتوافقي عن القيمة التجريبية بخطأ مطلق مساوٍ لـ $1.633\ cm^{-1}$.

استطعنا التنبؤ، لأجل جزيء بروميد الفضة AgBr، بأفضل قيمة نظرية لأجل الثابت التوافقي ω_e من خلال التابعية CAMB3LYP مقارنتاً بالدراسات السابقة المعلومة حتى الان [20, 22] وهذا بانحراف معياري مساوٍ لـ 0.596، في حين قدمت الدراسة [20]انحراف معياري مساوٍ لـ 1.923. وبالمقابل استطعنا التنبؤ أيضاً بأفضل قيمة نظرية للثابت اللاتوافقي $x_e\omega_e$ من بين الدراسات الحالية المعلومة [20, 22] عن طريق التابعية LDA وهذا بانحراف معياري مساوٍ لـ 0.012. لكن تمكنت التابعية PBE0 من تقديم أفضل قيمة نظرية لطول الرابطة r_e من بين التابعيات المستخدمة في هذا البحث بانحراف معياري مساوٍ لـ 0.0099. ابتعدت قيم الثوابت الطيفية المحسوبة باستخدام التابعية BLYP عن القيم التجريبية وهذا لأجل جميع نقاط كثيرات الحدود المأخوذة بالاعتبار.

تمكننا، لأجل جزيء AgF، من التنبؤ بقيمة ممتازة لطول الرابطة r_e من خلال التابعية CAMB3LYP والأفضل من بين جميع الدراسات السابقة [18–14] بانحراف معياري مساوٍ لـ 0.0002. وباستخدام ذات التابعية استطعنا الحصول على قيمة جيدة للثابت التوافقي ω_e بانحراف معياري مساوٍ لـ 4.662. وكانت أفضل قيمة نظرية محسوبة للثابت اللاتوافقي من بين الدراسات السابقة [18–14] هي من خلال التابعية LDA

بانحراف معياري مساوٍ لـ 0.0129. بالمقابل أعطت جميع التابعيات الأخرى، PBE، PBE0، BLYP، B3LYP CAMB3LYP قيم خاطئة (سالبة) لأجل الثابت اللاتوافقي، وهذا لأجل جميع نقاط كثيرات الحدود المأخوذة بالاعتبار.

من المعلوم أنّ التابعيات GGA تقوم بزيادة عدم التمركز (delocalize) لكثافة الإلكترون[19]، وهذا ما قد يؤثر على زيادة أطوال الروابط للأيونات الجزيئية بحالتها الطبيعية. لكن نلاحظ أنّ تابعيات GGA المستخدمة في هذا البحث، PBE وBLYP، أعطت نتائج قريبة لأجل طول الرابطة بالمقارنة مع القيمة التجريبية، وكانت PBE0 هي الوصف الأمثل لطول الرابطة في حالة AgBr. فيما تمّ سابقاً[39] ملاحظة جودة وصف PBE0 لطول الرابطة، نُرّجع سبب الانخفاض الكبير في الانحراف المعياري لهذه التابعية في هذا البحث إلى استخدام مجموعة القاعدة النسبوية [dyall.cv3z]، والتي تتضمن التأثيرات النسبوية بعد تحسينها عن طريق هاملتوني ديراك–كولوم[40]، بالإضافة للتعبير عن الطاقة بدلالة هاملتوني ديراك–كولوم، بحيث أدى هذا إلى تخفيض الزيادة في طول الرابطة بسبب ادخال التأثيرات النسبوية الانكماشية للمدارات. في حين تزداد الأخطاء في قياس طول الرابطة عن طريق PBE0 بزيادة القيمة المتوقعة مقارنتاً بالقيمة التجريبية لأجل الهاليدات الكبيرة[41]، لاحظنا انخفاض الأخطاء بزيادة حجم الهاليد. وطالما أنّ هذا النوع من التابعيات، بالإضافة لـ BLYP وB3LYP، تميل إلى زيادة طول الرابطة، كانت التأثيرات النسبوية فعالة بشكل جيد على تخفيض هذه الزيادة. وبما أنّ التأثيرات النسبوية متناسبة مع العدد الذري بشكل طردي، نُرّجع الفعالية القياسية العالية لـ PBE0 على طول الرابطة لـ بروميد الفضة مقارنتاً بـ فلوريد الفضة إلى التأثيرات النسبوية التي من المفترض أنّ تكون فعالة بشكل أكبر على بروميد الفضة. لاحظنا إنّ جميع التابعيات المستخدمة، فيما عدا التابعية المحلية LDA، تقوم بزيادة

القيمة المتوقعة لطول الرابطة وهذا قد يُفسرّ بسبب عدم ادخال التأثيرات المتبادلة للتشتت (dispersive interaction) ضمن هذه التابعيات[41].

بالنظر إلى الجدول (1) و(2)، لم يقدم السلوك بعيد المدى المضمن في التابعية B3LYP وصف أفضل من التابعيات التي لا تحتوي على هذا الوصف، مثل LDA، PBE، PBE0 وBLYP، وهذا متفق مع التشكيك بدقة الحسابات المعتمدة على هذا النوع من التابعيات الحاوي على سلوك بعيد المدى غير الصحيح[17] لوصف السوية الأرضية $X\ ^1\Sigma$ للجزيئات من النوع M^+F^- بسبب طبيعة الرابطة الأيونية لهذه السوية. بالمقابل تم تحسين هذا السلوك عن طريق التابعية CAMB3LYP الحاوية على تأثيرات بعيدة المدى واسهامات التبادل–الارتباط لهاتري–فوك. أظهرت التابعية CAMB3LYP تفوقها على العديد من التابعيات في العديد من الدراسات. بالمقابل ستتشابه حسابات CAMB3LYP مع حسابات B3LYP لأجل مجموعات القاعدة الكبيرة والصغيرة ولكن ستختلف لأجل مجموعات القاعدة المتوسطة الحجم[42]، حيث بالمقارنة مع مجموعات القاعدة رباعية–زيتا وثنائية–زيتا، فإنّ مجموعة القاعدة التي تم استخدامها هنا، ثلاثية–زيتا، تُعتبر مجموعة قاعدة متوسطة الحجم، وهذا قد يكون من أحد الأسباب الذي نتج عنه الاختلاف ما بين قيم B3LYP وCAMB3LYP.

لوحظ سابقاً أنّ التابعيات الهجينة تقوم بزيادة قيمة التواترات المحسوبة[39]، لكن لاحظنا هنا انخفاض هذه القيم لأجل جميع التابعيات فيما عدا التابعية LDA، ومن الممكن تفسير هذا بسبب التأثيرات الانكماشية لطول الرابطة التي ستؤثر بالتالي على التواتر التوافقي.

من الممكن تفسير الإشارة السالبة التي ظهرت لأجل جميع التابعيات السابقة، الجدول (2)، فيما عدا التابعية LDA التي تعتمد على الكثافة الإلكترونية المحلية إلى الطبيعة

غير المحلية التي تتصف فيها هذه التابعيات[43]. تمكنت التابعية LDA من تقديم قيم للثابت اللاتوافقي متوافقة بشكل عالٍ مع القيم التجريبية لأجل كلا الجزيئين.

إنّ ادخال التأثيرات النسبوية سمح بالوصول إلى قيم للثوابت الطيفية أقرب للقيم التجريبية، وهذا بعد استخدام هاملتوني ديراك–كولوم ذو المركبات الأربعة عوضاً عن ادخال التأثيرات النسبوية كاضطراب، بالإضافة لاستخدام مجموعة قاعدة حاوية على التأثيرات النسبوية على المدارات.

المراجع:

[1] E. Schrödinger. An Undulatory Theory of the Mechanics of Atoms and Molecules. *Phys. Rev.*; 28: 1049–1070.

[2] Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Phys. 1925 331* 1925; 33: 879–893.

[3] Fedak WA, Prentis JJ. The 1925 Born and Jordan paper "On quantum mechanics." *Am. J. Phys.* 2009; 77: 128.

[4] Einstein A. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. *Ann. Phys.* 1905; 322: 891–921.

[5] UHLENBECK GE, GOUDSMIT S. Spinning Electrons and the Structure of Spectra. *Nature* 1926; 117: 264–265.

[6] Pauli W. Über den Zusammenhang des Abschlusses der Elektronengruppen im Atom mit der Komplexstruktur der Spektren. *Zeitschrift für Phys.* 1925; 31: 765–783.

[7] Darwin CG. On the magnetic moment of the electron. *Proc. R. Soc. London. Ser. A, Contain. Pap. a Math. Phys. Character* 1928; 120: 621–631.

[8] Paul Adrien Maurice Dirac. The quantum theory of the electron. *Proc. R. Soc. London. Ser. A, Contain. Pap. a Math. Phys. Character* 1928; 117: 610–624.

[9] Dirac PAM. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proc. R. Soc. Lond. A* 1931; 133: 60–72.

[10] Autschbach J. Perspective: Relativistic effects. *J. Chem. Phys.* 2012; 136: 150902.

[11] Pyykkö P. Theoretical Chemistry of Gold. *Angew. Chemie Int. Ed.* 2004; 43: 4412–4456.

[12] Pyykkö P, Desclaux JP. Relativity and the periodic system of

elements. *Acc. Chem. Res.* 1979; 12: 276–281.

[13] Pyykkö P. Relativistic Effects in Chemistry: More Common Than You Thought. *Annu. Rev. Phys. Chem.* 2012; 63: 45–64.

[14] Ramirez-Solis A, Schamps J. Ab initio study of the three lowest-lying (X 1Σ +, 3Σ+, and 1Σ +) electronic states of AgF. *J. Chem. Phys.* 1995; 102: 4482–4490.

[15] Laerdahl JK, Saue T, Faegri Jr. K. Direct relativistic MP2: properties of ground state CuF, AgF and AuF. *Theor. Chem. Acc.* 1997; 97: 177–184.

[16] Iliaš M, Furdík P, Urban M. Comparative study of electron correlation and relativistic effects in CuF, AgF, and AuF. *J. Phys. Chem. A* 1998; 102: 5263–5268.

[17] Van Wüllen C. Molecular density functional calculations in the regular relativistic approximation: Method, application to coinage metal diatomics, hydrides, fluorides and chlorides, and comparison with first-order relativistic calculations. *J. Chem. Phys.* 1998; 109: 392–399.

[18] Ramírez-Solís A, Daudey JP. The spectroscopy of AgF: CASSCF+CASPT2 calculations on the lowest 3Σ+, 1Σ+, 3Π, 1Π, 3Δ, and 1Δ excited states. *J. Chem. Phys.* 2000; 113: 8580–8588.

[19] Wilson DJ, Sokol AA, French SA, et al. Defect structures in the silver halides. *Phys. Rev. B* 2008; 77: 64115.

[20] Amaro-Estrada JI, Ramírez-Solís A. Ab initio study of the spectroscopy of AgBr: A CASSCF+Averaged Coupled Pair Functional approach to the lowest excited states including spin-orbit couplings. *J. Chem. Phys.*; 131. Epub ahead of print 2009. DOI: 10.1063/1.3239470.

[21] Loftager S, García-Fernández P, Aramburu JA, et al. Stability and Polaronic Motion of Self-Trapped Holes in Silver

Halides: Insight through DFT+U Calculations. *J. Phys. Chem. C* 2016; 120: 8509–8524.

[22] Đorđević S, Radenković S, Shaik S, et al. On the Nature of the Bonding in Coinage Metal Halides. *Molecules* ; 27. Epub ahead of print 2022. DOI: 10.3390/molecules27020490.

[23] Joshua Goings. Kinetic Balance · Joshua Goings, https://joshuagoings.com/2014/04/27/kinetic-balance/ (accessed February 16, 2021).

[24] Kohn W, Sham LJ. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 1965; 140: A1133.

[25] Kakkar R. *Atomic and Molecular Spectroscopy*. Cambridge: Cambridge University Press. Epub ahead of print 2015. DOI: 10.1017/CBO9781107479999.

[26] Handy NC. The calculation of vibrational energy levels by semiclassical and quantum methodology: A review. *Int. Rev. Phys. Chem.* 1989; 8: 275–288.

[27] McHale JL. *Molecular Spectroscopy*. 2nd ed. CRC Press, 2017. Epub ahead of print 2017. DOI: 10.1201/9781315115214.

[28] Morse PM. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels. *Phys. Rev.* 1929; 34: 57–64.

[29] Jensen HJA, Bast R, Gomes ASP, et al. DIRAC22. Epub ahead of print February 8, 2022. DOI: 10.5281/ZENODO.6010450.

[30] Dirac PAM. Note on Exchange Phenomena in the Thomas Atom. *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.* 1930; 26: 376–385.

[31] Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M. Generalized Gradient

Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996; 77: 3865–3868.

[32] Perdew JP, Ernzerhof M, Burke K. Rationale for mixing exact exchange with density functional approximations. *J. Chem. Phys.* 1996; 105: 9982–9985.

[33] Becke AD. Density-functional exchange-energy approximation with correct asymptotic behavior. *Phys. Rev. A* 1988; 38: 3098–3100.

[34] Yanai T, Tew DP, Handy NC. A new hybrid exchange–correlation functional using the Coulomb-attenuating method (CAM-B3LYP). *Chem. Phys. Lett.* 2004; 393: 51–57.

[35] Lindh R, Malmqvist P-Å, Gagliardi L. Molecular integrals by numerical quadrature. I. Radial integration. *Theor. Chem. Acc.* 2001; 106: 178–187.

[36] TWOFIT — DIRAC 21.1 documentation, http://www.diracprogram.org/doc/release-21/tutorials/utils/twofit.html (accessed June 22, 2022).

[37] silver bromide, https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7785231&Units=SI&Mask=1000#Diatomic (accessed June 21, 2022).

[38] silver fluoride, https://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C7775419&Units=SI&Mask=1000#Diatomic (accessed June 22, 2022).

[39] Menconi G, Tozer DJ. Diatomic bond lengths and vibrational frequencies: assessment of recently developed exchange-correlation functionals. *Chem. Phys. Lett.* 2002; 360: 38–46.

[40] Dyall KG. Relativistic double-zeta, triple-zeta, and quadruple-zeta basis sets for the 4d elements Y–Cd. *Theor. Chem. Acc.* 2007; 117: 483–489.

[41] Jensen KP, Roos BO, Ryde U. Performance of density

functionals for first row transition metal systems. *J. Chem. Phys.* 2007; 126: 14103.

[42] Rodrigues-Oliveira AF, M. Ribeiro FW, Cervi G, et al. Evaluation of Common Theoretical Methods for Predicting Infrared Multiphotonic Dissociation Vibrational Spectra of Intramolecular Hydrogen-Bonded Ions. *ACS Omega* 2018; 3: 9075–9085.

[43] Neese F. Efficient and accurate approximations to the molecular spin-orbit coupling operator and their use in molecular g-tensor calculations. *J. Chem. Phys.* 2005; 122: 34107.

التكاملات على سطح الكرة في الفضاء $\Re^n$ بطريقة النواة المولدة

[1] د. حامد عباس [2] هبه زكريا اصلان

جامعة البعث_ كلية العلوم_ قسم الرياضيات

ملخص:

تم في هذه المقالة إيجاد قيم التكاملات على سطح الكرة في الفضاء $\Re^n$ باستخدام طريقة النواة المولدة وذلك بإيجاد القانون التكاملي، الذي نعتمد عليه في عمليات التعامد والتنظيم من أجل إيجاد كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة على سطح الكرة $S_{n-1}^{(r)}$ التي نصف قطرها r ، ومن ثم تشكيل النواة المولدة التي تساعد في إيجاد ثوابت العلاقة التكعيبية والتي تفيد في تشكيل قانون يستخدم لإيجاد قيمة التكاملات المضاعفة لأي دالة في المنطقة $S_{n-1}^{(r)}$.

الكلمات المفتاحية: طريقة النواة المولدة، العلاقة التكعيبية، كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة.

[1] عضو هيئة تدريسية، جامعة البعث_ كلية العلوم_ قسم الرياضيات

[2] طالبة دكتوراة، معيدة موفدة، جامعة البعث_كلية العلوم_قسم الرياضيات

The Integrals On The Sphere In The Space $\Re^n$ By The Generative Kernal Method

[1] Dr, Hamed Abbas [2] Hiba Zakaria Aslan

Albaath University_ Faculty Of Science_ Department f Mathematics

Abstract:

In this article, the values of the integrals in the spherical region in space $\Re^n$ were found by using The Generative Kernal Method by finding the integrative constitution that we adopt in the orthogonal and regular operations in order to find Orthonormal Polynomials on the sphere with radius r, then forming the Generative Kernal that helps in finding the constants of the Cubature Formulae and that is useful in forming a relation that helps in finding the values of the double integrals of any function in $B_n^{(r)}$

Key words: The Generative Kernal Method, Cubature Formulae, Orthonormal Polynomials.

[1] A Faculty member_ Albaath university_faculty of science_ department of mathematics

[2] Doctoral student__ Albaath university_faculty of science_ department of mathematics

1. مقدمة:

اكتشفت طريقة النواة المولدة للمرة الأولى عام 1968على يد العالم ميسوفسكيخ من أجل حساب التكاملات المضاعفة في المناطق التي تمتلك مركز تناظر والتي لا تمتلك مركز تناظر[5,6]، أمّا التطور الهام لطريقة النواة المولدة حصل عليه ميولر عام 1973 [4]، حيث تمكن من إثبات المبرهنات، وأوجد العلاقة التكعيبية بـ $2k+1$ دقة جبرية في حالة المناطق المتناظرة، و $2k$ في حالة المناطق غير المتناظرة [2,3,4]، وفي عام 1975 تمكن غيغل من إيجاد العلاقة التكعيبية من أجل الكرة الواحدية في الفضاء رباعي الأبعاد، إنَّ البحوث الجارية في هذا المجال تدور حول دراسة خواص النواة المولدة وتطبيق هذه الطريقة في مناطق تكاملية أوسع، والحصول على علاقات تكعيبية جديدة معممة يمكن استخدامها من أجل حساب القيمة التقريبية للتكاملات المضاعفة.

2. هدف البحث:

يهدف البحث إلى إيجاد القانون العام للقانون التكاملي الذي سوف نستخدمه في عمليات التعامد والتنظيم في سطح الكرة $S_{n-1}^{(r)}$، وإيجاد الصيغة العامة لكثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة المطلوبة على المنطقة التكاملية المفروضة بـ nمتغير ومن عدة درجات، واستنتاج الصيغة العامة لكل درجة، ثم تشكيل النواة المولدة واستنتاج القانون العام لها، والذي يزداد صعوبة كلما زادت درجة كثيرة الحدود.

3. مواد البحث:

3-1. بعض المبرهنات والتعاريف الهامة [5,6,13]:

قبل عرض طريقة النواة المولدة لتشكيل العلاقات التكعيبية، لابد من توضيح بعض المفاهيم الأساسية:

تعريف 1: العلاقة التكعيبية:

إن العلاقة التكعيبية هي مساواة تقريبية من الشكل:

$$\int_{\Omega} \omega(x) f(x) dx \cong \sum_{j=1}^{N} C_j \ f(x_j) \qquad (1)$$

حيث إن x_j هي نقاط مختلفة مثنى مثنى وتدعى نقاط المكاملة (النقاط التكاملية) أو عقد العلاقة التكعيبية، N عدد النقاط التكاملية و C_j الثوابت الموافقة لتلك النقاط، $f(x)$ الدالة المراد مكاملتها و $\omega(x)$ دالة الوزن زوجية، تحقق:

$$x \in \Omega \Rightarrow -x \in \Omega \quad \& \quad \omega(x) = \omega(-x) \qquad (2)$$

أما Ω فهي المنطقة التكاملية $S_{n-1}^{(r)}$

نقول عن العلاقة التكعيبية (1) إنها تمتلك دقة جبرية d، إذا تحولت إلى مساواة صحيحة، بحيث تكون درجة كثيرة الحدود المُكاملة $f(x)$ لا تتجاوز d

مبرهنة 1:

لنفرض أن $\omega(x)$ تحقق الشرط (2)، و $\Omega = S_{n-1}^{(r)}$ لا تمتلك نقاط داخلية، فإذا كانت العلاقة التكعيبية (1) تمتلك d دقة جبرية حيث $d = 2k$ و k درجة كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة، فإن N عدد عقد العلاقة التكعيبية تحقق المتراجحة:

$$N \geq h = M(n,\kappa) - M(n,\kappa-2) \qquad ;\kappa = \left[\frac{m}{2}\right] \qquad (3)$$

حيث $M(n,\kappa) = \dfrac{(n+\kappa)!}{n!\,\kappa!}$

مبرهنة 2:

لنفرض أن $\omega(x)$ تحقق الشرط (2)، و $\Omega = S_{n-1}^{(r)}$ لا تمتلك نقاط داخلية، بحيث $\omega(x), \Omega$ تحققان الخاصة التناظرية بالنسبة لـ $\theta = (0,0,.....,0)$

فإذا كانت العلاقة التكعيبية (1) تمتلك $d = 2k+1$ دقة جبرية، حيث θ لا تعتبر عقدة من عقد العلاقة التكعيبية، فإن عدد عقد العلاقة التكعيبية تحقق المتراجحة:

$$N \geq 2M(n-1,\kappa) \qquad (4)$$

تلعب كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة دوراً هاماً في تشكيل النواة المولدة في العلاقات التكعيبية لطريقة النواة المولدة، حيث يمكننا الحصول على كثيرات الحدود المتعامدة والنظيمة في المنطقة Ω باستخدام طريقة شميت للتعامد والنظيم، ولنرمز لكثيرات الحدود المتعامدة والنظيمة ذات n متغير بالرمز $F_i(x)$ ، ولنضع:

$$K_k(u,x) = \sum_{i=1}^{\chi} F_i(x) F_i(u) \qquad (5)$$

حيث إن $u = (u_1, u_2, ..., u_n)$ و $\chi = M(n,k) = \dfrac{(n+k)!}{n!k!}$ عدد وحيدات الحد التي درجتها لا تتجاوز k بـ n متغير، تدعى العلاقة (5) بالنواة المولدة .

تعريف 2: النواة المولدة:

هي كثيرة حدود ذات $2n$ متغير تستخدم في العلاقات التكعيبية ذات الدقة الجبرية الزوجية $d = 2k$ كما في (5)، أمّا النواة المولدة للعلاقات التكعيبية ذات الدقة الجبرية الفردية $d = 2k+1$ ، فتُعطى بالعلاقة:

$$\widetilde{K}_k(u,x) = \sum_{i=1}^{\chi'} F_i(x) F_i(u) \qquad (6)$$

حيث إن إشارة الفتحة فوق إشارة المجموع تعني أن عملية الجمع توخذ بـ i التي توافق كثيرة الحدود $F_i(x)$ التي تمتلك نفس الدرجة الزوجية (الفردية) مع k، وتدعى العلاقة (6) بالنواة المولدة وهي كثيرة حدود ذات $2n$ متغير التي درجتها لا تتجاوز k والتي تمتلك نفس الدرجة الزوجية (الفردية) مع k.

لتشكيل العلاقات التكعيبية نستخدم المبرهنتين الآتيتين:

مبرهنة 3: [7] بفرض أن النقاط $u^1,u^2,....,u^{n-1}$ تنتمي إلى سطح المنطقة Ω التي لا تمتلك نقاط داخلية وتحقق الشرط $K_k(u^i,u^j)=b_i\delta_{ij}$ حيث $b_i=K_k(u^i,u^i)$ ويتألف $\bigcap_{i=1}^{n-1}H_i$ مع سطح المنطقة Ωمن النقاط x^s والتي عددها $s=2k^{n-1}$ ،

فإنه توجد العلاقة التكعيبية الدقيقة من أجل كثيرات الحدود التي درجتها لا تتجاوز $2k$

$$\int_{\Omega}\omega(x)f(x)dx\cong\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{b_i}f(u^i)+\sum_{j=1}^{s}C_j\,f(x^j) \qquad (7)$$

مبرهنة 4: [7] بفرض أن كلا من $\omega(x)$ و Ω تحقق خاصة التناظر المركزي و لا تمتلك نقاط داخلية، والنقاط u^i تحقق الشرط $\widetilde{K}_k(u^i,u^j)=b_i\delta_{ij}$ ويتألف $\bigcap_{i=1}^{n-1}H_i$ مع سطح المنطقة Ω من النقاط المختلفة مثنى مثنى والتي عددها $s=2k^{n-1}$، عندئذ يمكن تشكيل العلاقة التكعيبية التي دقتها $2k+1$:

$$\int_{\Omega}\omega(x)f(x)dx\cong\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{2b_i}\left(f(u^i)+f(-u^i)\right)+\sum_{j=1}^{s}C_j\,f(x^j) \qquad (8)$$

3-2. إيجاد القانون التكاملي:

لتكن لدينا $S_{n-1}^{(r)}$ سطح الكرة في الفضاء $\Re^n$ حيث إن:

$S_{n-1}^{(r)}=\left\{x\in\Re^n;{x_1}^2+{x_2}^2+.....+{x_n}^2=r^2\right\}$، r نصف قطر سطح الكرة، ولنوجد قيمة التكامل:

$$P_{\alpha} = \int_{S_n^{(r)}} x^{\alpha} \quad dx \tag{9}$$

حيث إن $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ ، $x = (x_1, x_2, ..., x_n)$. إذا كانت إحدى القوى α_i عدداً فردياً فإن $P_{\alpha} = 0$ ، أمّا إذا كانت القوى α_i أعداد زوجية، فإننا نستطيع كتابتها بالشكل $\alpha_i = 2q_i$ حيث إن $i = 1,2,...,n$ ، فنجد:

$$P_{\alpha} = 2r^{|\alpha|+n} \frac{\prod_{i=1}^{n} \Gamma\left(\frac{\alpha_i + 1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{|\alpha| + n}{2}\right)} \qquad ;|\alpha| = \alpha_1 + \alpha_2 + ... + \alpha_n \tag{10}$$

تم إيجاد قيمة التكامل (9) في الفضاء $\Re^n$ تدريجياً من أجل $n = 1, 2, 3, 4$ ، ثم نعمم الناتج لنحصل على (10).

3-3: إيجاد كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة:

لإيجاد كثيرات الحدود المتعامدة والمنظمة، سوف نعتمد على مبدأ غرام شميث في التعامد والنظيم، لتكن $\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right) = \frac{2r^n \left(\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\right)^n}{\Gamma\left(\frac{n}{2}\right)}$ ، $\gamma = (n+2)(n+4)(n+6)$ ،

فإن:

$$F_0^0 = \frac{1}{\sqrt{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}} \tag{11}$$

$$F_i^1 = \frac{\sqrt{n}}{r} \frac{1}{\sqrt{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}} x_i \quad ;i = 1,2,3,....., n \tag{12}$$

(13)

$$F_{ij}^{2}=\begin{cases}F_{ii}^{2}=\sqrt{\dfrac{(n+1-i)n(n+2)}{2r^{4}(n-i)\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\left[x_i^{2}+\dfrac{1}{n+1-i}\left(\sum_{j=1}^{i-1}x_j^{2}-r^{2}\right)\right] & ;i=j\\ F_{ij}^{2}=\sqrt{\dfrac{n(n+2)}{r^{4}\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\,x_i x_j & ;i\neq j\end{cases}$$

(14)

$$F_{ijk}^{3}=\begin{cases}F_{iij}^{3}=\sqrt{\dfrac{(n+3-i)\gamma}{2(n+2-i)r^{6}\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\left[x_i^{2}+\dfrac{1}{n+3-i}\left(\sum_{s=1}^{i-1}x_s^{2}-r^{2}\right)\right]x_j & ;i<j\\ F_{iii}^{3}=\sqrt{\dfrac{(n+3-i)\gamma}{6r^{6}(n-i)\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\left[x_i^{2}+\dfrac{3}{n+3-i}\left(\sum_{s=1}^{i-1}x_s^{2}-r^{2}\right)\right]x_i & ;i=j=k\\ F_{ijk}^{3}=\sqrt{\dfrac{\gamma}{r^{6}\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\,x_i x_j x_k & ;i\neq j\neq k\\ F_{iij}^{3}=\sqrt{\dfrac{(n+1-i)\gamma}{2(n-i)r^{6}\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}}\left[x_i^{2}+\dfrac{1}{n+1-i}\left(\sum_{t=1}^{i-1}x_t^{2}-r^{2}\right)\right]x_j & ;i>j\end{cases}$$

3-4: إيجاد صيغة النواة المولدة [9,10]:

3-4-1. النواة المولدة لكثيرات الحدود من الدرجة الأولى:

نعوض (12) في (6)، فنجد:

$$\tilde{K}_1(u,x)=\sum_{i=1}^{n}F_i^{1}(u)F_i^{1}(x)=\frac{n}{r^{2}}\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\sum_{i=1}^{n}u_i x_i \qquad (15)$$

وبالتعويض في (7)، حيث إن $\tilde{K}_0(u,x)=\dfrac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}$، نجد:

$$K_1(u,x)=\tilde{K}_1(u,x)+\tilde{K}_0(u,x)=\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}+\frac{n}{r^{2}\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\sum_{i=1}^{n}u_i x_i \qquad (16)$$

3-4-2. النواة المولدة لكثيرات الحدود من الدرجة الثانية:

تعطى النواة المولدة بالصيغة:

$$\tilde{K}_2 = \frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} + \sum_{j=1}^{n} F_j^2(x)F_j^2(u) + \sum_{i\neq j} F_i^2(x)F_j^2(u) \qquad (17)$$

بتعويض كثيرات الحدود من الدرجة الثانية ومن الدرجة الصفرية، نجد:

$$\tilde{K}_2(u,x) = \frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} + N\sum_{j=1}^{n-1}\frac{n+1-j}{n-j}[U_j][X_j] + \sum_{i\neq j} F_i^2(x)F_j^2(u) \quad (18)$$

حيث إن: $$N = \frac{n(n+2)}{2r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}$$

$$X_j = x_j^2 + \frac{1}{n+1-j}\left(\sum_{s=1}^{j-1} x_s^2 - r^2\right) \quad U_j = u_j^2 + \frac{1}{n+1-j}\left(\sum_{s=1}^{j-1} u_s^2 - r^2\right) \qquad (19)$$

يمكن كتابة (18) بالشكل:

$$\begin{aligned}\tilde{K}_2(u,x) &= \frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} + N\sum_{j=1}^{n-1}\frac{n+1-j}{n-j}[U_j]\left[x_j^2 + \frac{1}{n+1-j}\sum_{s=1}^{j-1}x_s^2 - \frac{r^2}{n+1-j}\right] \\ &\quad + \sum_{i\neq j} F_i^2(x)F_j^2(u) \\ &= \frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} + N\sum_{j=1}^{n-1}\frac{n+1-j}{n-j}[U_j]x_j^2 + N\sum_{j=1}^{n-1}\frac{[U_j]}{n-j}\sum_{s=1}^{j-1}x_s^2 \\ &\quad - N\sum_{j=1}^{n-1}\frac{[U_j]}{n-j}r^2 + \sum_{i\neq j} F_i^2(x)F_j^2(u)\end{aligned}$$

$$\tilde{K}_2(u,x) = \frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} + N[S_1 + S_2 + S_3] + \frac{n(n+2)}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\sum_{i\neq j} x_i x_j u_i u_j \qquad (20)$$

لنوجد كلاً من S_1, S_2, S_3:

نخرج في S_1 المجموع ذو الدليل $n-1$، ثم نبدل كل j بـ s فنجد:

$$S_1 = 2U_{n-1}x_{n-1}^2 + \sum_{s=1}^{n-2} \frac{n+1-s}{n-s}[U_s]x_s^2 \qquad (21)$$

نجري في S_2 تبديل في عملية الجمع، فنجد:

$$S_2 = \sum_{s=1}^{n-2} x_s^2 \sum_{j=s+1}^{n-1} \frac{U_j}{n-j} \qquad (22)$$

بجمع (21) و (22)، نجد:

$$S_1 + S_2 = 2U_{n-1}x_{n-1}^2 + \sum_{s=1}^{n-2} x_s^2 .S_4 \qquad (23)$$

حيث إن:

$$S_4 = U_s + \sum_{j=s}^{n-1} \frac{U_j}{n-j} \qquad (24)$$

بتعويض (19) في (24)، نجد:

$$S_4 = u_s^2 + \frac{1}{n+1-s}\left(\sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 - r^2\right) + \sum_{j=s}^{n} \frac{1}{n-j}\left[u_j^2 + \frac{1}{n+1-j}\left(\sum_{t=1}^{j-1} u_t^2 - r^2\right)\right]$$

وبالتالي:

$$S_4 = u_s^2 + \frac{1}{n+1-s}\sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 - \frac{r^2}{n+1-s} + \sum_{j=s}^{n-1}\frac{1}{n-j}u_j^2 + \sum_{j=s}^{n-1}\frac{1}{(n-j)(n+1-j)}\sum_{t=1}^{j-1} u_t^2 - \sum_{j=s}^{n-1}\frac{r^2}{(n-j)(n+1-j)} \quad (25)$$

نجري تبديلاً في ترتيب المجموع في الحد الخامس والذي سنرمز له بالرمز S_5 في (25) فنجد:

$$S_5 = \sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 \sum_{j=s}^{n-1}\frac{1}{(n-j)(n+1-j)} + \sum_{t=s}^{n-2} u_t^2 \sum_{j=t+1}^{n-1}\frac{1}{(n-j)(n+1-j)} \quad (26)$$

أما المجموع في (26) فيمكن كتابته بالصيغة:

$$\sum_{j=s}^{n-1}\frac{1}{(n-j)(n+1-j)} = 1 - \frac{1}{n+1-s}$$
$$\sum_{j=t+1}^{n-1}\frac{1}{(n-j)(n+1-j)} = 1 - \frac{1}{n-t} \quad (27)$$

بتعويض (27) في (26)، نجد:

$$S_5 = \sum_{t=1}^{s-1} u_t^2\left(1 - \frac{1}{n+1-s}\right) + \sum_{t=s}^{n-2} u_t^2\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{n-t}\right) \quad (28)$$

بتعويض (28) في (25)، نجد:

(29)

$$S_4 = u_s^2 + \frac{1}{n+1-s}\sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 - \frac{r^2}{n+1-s} + \sum_{j=s}^{n-1}\frac{1}{n-j}u_j^2 + \sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 - \frac{1}{n+1-s}\sum_{t=1}^{s-1} u_t^2 + \sum_{t=s}^{n-2} u_t^2 - \sum_{t=s}^{n-2}\frac{1}{n-t}u_t^2 - r^2 + \frac{r^2}{n+1-s}$$

بتجميع الحدود، نجد:

$$S_4 = u_s^2 + \sum_{t=1}^{n-1} u_t^2 - r^2 \qquad (31)$$

بتعويض (31) في (23)، نجد:

$$S_1 + S_2 = \sum_{s=1}^{n-1} x_s^2 \left(u_s^2 + \sum_{s=1}^{n-1} u_s^2 - r^2 \right) \qquad (32)$$

لنوجد S_3:

$$-S_3 = \sum_{j=1}^{n-1} \frac{[U_j]}{n-j} r^2 = \sum_{j=1}^{n-1} \frac{r^2}{n-j} \left(u_j^2 + \frac{1}{n+1-j} \left(\sum_{s=1}^{j-1} u_s^2 - r^2 \right) \right)$$
$$= \sum_{j=1}^{n-1} \frac{r^2}{n-j} u_j^2 + \sum_{j=1}^{n-1} \frac{r^2}{(n-j)(n+1-j)} \sum_{s=1}^{j-1} u_s^2 - \sum_{j=1}^{n-1} \frac{r^4}{(n-j)(n+1-j)}$$

وبالتالي:

$$-S_3 = r^2 \sum_{s=1}^{n-1} u_s^2 - r^4 \left(\frac{n-1}{n} \right) \qquad (33)$$

بجمع (32) و (33)، نجد:

$$S_1 + S_2 + S_3 = \sum_{s=1}^{n-1} x_s^2 \left(u_s^2 + \sum_{t=1}^{n-1} u_t^2 - r^2 \right) - r^2 \sum_{s=1}^{n-1} \left(u_s^2 + x_s^2 \right) + r^4 \left(\frac{n-1}{n} \right)$$

بالتعويض في (20)، نجد:

$$\tilde{K}_2(u,x)=\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}+N\left[S_1+S_2+S_3\right]+\frac{n(n+2)}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\sum_{i\neq j}x_ix_ju_iu_j$$

$$=\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}+\frac{n(n+2)}{2r^4\mu\left(S_n^{(r)}\right)}\left[\begin{array}{l}\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2\\-r^2\left(\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\right)+r^4\left(\frac{n-1}{n}\right)\end{array}\right]$$

$$+\frac{n(n+2)}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\sum_{i\neq j}x_ix_ju_iu_j$$

يمكن كتابة العلاقة الأخيرة بالشكل:

(34)

$$\tilde{K}_2(u,x)=\frac{n}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left\{\begin{array}{l}r^4\,\frac{n+1}{2}+(n+2)\sum_{i\neq j}x_ix_ju_iu_j+\\\frac{(n+2)}{2}\left[\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2-r^2\left(\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\right)\right]\end{array}\right\}$$

ولإيجاد $K_2(u,x)$:

(35)

$$K_2(u,x)=\tilde{K}_2(u,x)+\tilde{K}_1(u,x)$$

$$=\frac{n}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left\{\begin{array}{l}r^4\,\frac{n+1}{2}+(n+2)\sum_{i\neq j}x_ix_ju_iu_j+r^2\sum_{j=1}^{n}u_jx_j\\\frac{(n+2)}{2}\left[\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2-r^2\left(\sum_{s=1}^{n-1}u_s^2+\sum_{s=1}^{n-1}x_s^2\right)\right]\end{array}\right\}$$

لنفرض أنّ $(u_1,u_2,.....,u_n)\in S_{n-1}^{(r)}$ وبالتالي فإنّ $\sum_{s=1}^{n}u_s^2=r^2$، نعوض في (34) و (35)، فنجد الصيغة النهائية لـ $\tilde{K}_2(u,x)$ هي:

$$\tilde{K}_2(u,x)=\frac{n(n+2)}{2r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left(\sum_{s=1}^{n}x_su_s+\frac{r^2}{\sqrt{n+2}}\right)\left(\sum_{s=1}^{n}x_su_s-\frac{r^2}{\sqrt{n+2}}\right) \qquad (36)$$

وبالتالي فإن الصيغة النهائية لـ $K_2(u,x)$ هي:

$$K_2(u,x)=\frac{n}{r^4\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left\{\frac{n+2}{2}\left(\sum_{s=1}^{n}x_su_s\right)^2+r^2\sum_{s=1}^{n}x_su_s-\frac{r^4}{2}\right\} \qquad (37)$$

3-4-3. النواة المولدة لكثيرات الحدود من الدرجة الثالثة:

باتباع نفس الخطوات في الفقرة 3-4-2، نجد إن:

$$\tilde{K}_3(u,x)=\frac{n(n+2)(n+4)}{6r^6\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left[\left(\sum_{i=1}^{n}u_ix_i\right)^3-\frac{3r^4}{n+4}\sum_{i=1}^{n}u_ix_i\right] \qquad (38)$$

$$K_3(u,x)=\frac{n(n+2)(n+4)}{6r^6\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}\left[\begin{array}{l}\left(\sum_{i=1}^{n}u_ix_i\right)^3+\frac{3r^2}{n+4}\left(\sum_{i=1}^{n}u_ix_i\right)^2\\-\frac{3r^4}{n+4}\sum_{i=1}^{n}u_ix_i-\frac{3r^6}{(n+2)(n+4)}\end{array}\right] \qquad (39)$$

4. النتائج ومناقشتها [1,8,11,12]:

4-1. تشكيل العلاقة التكعيبية للنواة المولدة $K_1(u,x)$ و $\tilde{K}_1(u,x)$:

4-1-1. تشكيل العلاقة التكعيبية للنواة المولدة $\tilde{K}_1(u,x)$:

لنوجد العلاقات التكعيبية من أجل الدقة الجبرية $d=2k+1=3$ نختار النقطة $u^1=(r,0,0,.....,0)$ و نعوض في (15) فنحصل على المستوي:

$$H_1 := \frac{n}{r^2}\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} r x_1 = 0$$

نختار من $H_1 \cap S_{n-1}^{(r)}$ نقطة u^2، من معادلة المستوي السابقة لدينا $x_1=0$ نعوض في المساواة $x_1^2+x_2^2=r^2$ فنجد أن $x_2=r$ أي أن $u^2=(0,r,0,.....,0)$ والتي بدورها تعين المستوي H_2

$$H_2 := \frac{n}{r^2}\frac{1}{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)} r\, x_2 = 0$$

نختار من $S_{n-1}^{(r)} \bigcap (H_1 \bigcap H_2)$ نقطة u^3، من معادلة المستوي الأول والثاني $x_1=x_2=0$ بالتعويض في المساواة $x_1^2+x_2^2+x_3^2=r^2$ نجد أن $u^3=(0,0,r,0,.....,0)$ وهكذا..... فنجد أن $S_{n-1}^{(r)} \bigcap (H_1 \bigcap H_2 \bigcap ... \bigcap H_{n-1})$ هو النقطة $x=(0,0,0,.....,\pm r)$، عدد النقاط التكاملية يساوي $2n$ والحد الأدنى لعدد هذه النقاط هو $N \geq 2M(n-1,k)=2M(n-1,1)=2n$، نعوض في العلاقة التكعيبية (8) حيث

$$\frac{1}{2b_i}=\left[2\tilde{K}_1(u^i,u^i)\right]^{-1}=\left[2\frac{n}{r^2\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}r^2\right]^{-1}=\frac{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}{2n}$$

من أجل الدالة $f(x)=1$ ، نجد أن: $C=\dfrac{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}{2n}$

3-4-1-2. العلاقة التكعيبية للنواة المولدة $K_1(u,x)$:

لنوجد العلاقة التكعيبية من أجل $d=2k=2$ ، نختار النقطة $u^1=(r,0,0,.....,0)$ نعوض في (16) فنحصل على المستوي:

$$H_1 := 1+\frac{n}{r}x_1 = 0$$

وباتباع الخطوات نفسها في الفقرة الأخيرة، نجد $u^2=\left(-\frac{r}{n},\frac{r}{n}\sqrt{(n+1)(n-1)},0,.....,0\right)$ والتي بدورها تعين المستوي

$$H_2 := 1-\frac{1}{r}x_1+\frac{1}{r}\sqrt{(n+1)(n-1)}\,x_2 = 0$$

وبإيجاد $u^3=\left(\frac{-r}{n},\frac{-r}{n}\sqrt{\frac{n+1}{n-1}},r\sqrt{\frac{(n-2)(n+1)}{n(n-1)}},0,0,.....,0\right)$ والتي تعين المستوي

$$H_3 := 1-\frac{1}{r}x_1-\frac{1}{r}\sqrt{\frac{(n+1)}{(n-1)}}\,x_2+\frac{1}{r}\sqrt{\frac{n(n-2)(n+1)}{n-1}}\;x_3 = 0$$

وبالتالي بشكل عام، نختار من $S_{n-1}^{(r)}\cap(H_1\cap H_2\cap H_3\cap.....\cap H_i)$ النقطة u^i والتي تعطى بالشكل:

$$u^i=\left(\begin{array}{l}\frac{-r}{n},\frac{-r}{n}\sqrt{\frac{n+1}{n-1}},-r\sqrt{\frac{(n+1)}{n(n-1)(n-2)}},.....,\\ -r\sqrt{\frac{(n+1)}{n(n+3-(i-1))(n+2-(i-1))}}\;,r\sqrt{\frac{(n+1)(n-i+1)}{n(n+2-i)}},0.....,0\end{array}\right)$$

وبالتالي فإن $S_{n-1}^{(r)}\cap(H_1\cap H_2\cap H_3\cap.....\cap H_{n-1})$ يتألف من نقطتين هما:

$$x^{1,2}=\left(\frac{-r}{n},\frac{-r}{n}\sqrt{\frac{n+1}{n-1}},-r\sqrt{\frac{(n+1)}{n(n-1)(n-2)}},.....,-r\sqrt{\frac{(n+1)}{12n}},\pm r\sqrt{\frac{(n+1)}{2n}}\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي $n+1$ والحد الأدنى لعدد هذه النقاط هو $N\geq n+1$ ، نعوض في العلاقة التكعيبية (7)، حيث $\frac{1}{b_i}=\left[K_1\left(u^i,u^i\right)\right]^{-1}=\frac{\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)}{n+1}$ ، ولنحسب قيمة الثابت C من أجل الدالة $f(x)=1$:

$$C\,f(x)=\int_{S_{n-1}^{(r)}}1\,dx-\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{b_i}\left[f\left(u^i\right)\right]=\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)\frac{n}{n+1}\Rightarrow C=\mu\left(S_{n-1}^{(r)}\right)\frac{n}{n+1}$$

4-2. تشكيل العلاقة التكعيبية للنواة المولدة $K_2(u,x)$ و $\widetilde{K}_2(u,x)$:

4-2-1. تشكيل العلاقات التكعيبية من أجل $\widetilde{K}_2(u,x)$:

- لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (36)، ومن أجل الدقة الجبرية $d=2k+1=5$ ومن أجل $n=2,$ ، نعوض في (36)، فنجد:

$$\widetilde{K}_2(u,x)=\frac{4}{r^4\mu\left(S_2^{(r)}\right)}\left(x_1u_1+x_2u_2+\frac{r^2}{2}\right)\left(x_1u_1+x_2u_2-\frac{r^2}{2}\right)$$

لنأخذ النقطة $u^1=(r,0)$ ، نعوض في العلاقة الأخيرة، فنحصل على معادلة السطح:

$$H_1:\left(rx_1+\frac{r^2}{2}\right)\left(rx_1-\frac{r^2}{2}\right)=0$$

يتكون التقاطع $H_1\cap S_1^{(r)}$ من $s=2k^{n-1}=2(2)=4$ أربع نقاط، هي:

$$x^1=\left(\frac{r}{2},\frac{\sqrt{3}r}{2}\right),\ x^2=\left(\frac{r}{2},\frac{-\sqrt{3}r}{2}\right)$$
$$x^3=\left(\frac{-r}{2},\frac{\sqrt{3}r}{2}\right),\ x^4=\left(\frac{-r}{2},\frac{-\sqrt{3}r}{2}\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي 6 والحد الأدنى لعدد هذه النقاط $N\geq 2M(n-1,k)=2M\left(1,\left[\frac{d}{2}\right]\right)=6$ ، تقع النقاط جميعها على سطح الدائرة $x^2+y^2=r^2$ فلها الثابت نفسه، نعوض في العلاقة التكعيبية (8)حيث:

$$\frac{1}{2b_i}=\left[2K_k(u^i,u^i)\right]^{-1}=\left[\frac{8}{r^4\mu(S_1^{(r)})}\left(r^2+\frac{r^2}{2}\right)\left(r^2-\frac{r^2}{2}\right)\right]^{-1}=\frac{r^2\pi}{3}$$

لايجاد الثوابت C_1,C_2,C_3,C_4 نختار الدوال الآتية:

$$f_1=\left(x+\frac{r}{2}\right)\left(y+\frac{\sqrt{3}r}{2}\right)\qquad f_2=\left(x+\frac{r}{2}\right)\left(y-\frac{\sqrt{3}r}{2}\right)$$
$$f_3=\left(x-\frac{r}{2}\right)\left(y+\frac{\sqrt{3}r}{2}\right)\qquad f_4=\left(x-\frac{r}{2}\right)\left(y-\frac{\sqrt{3}r}{2}\right)$$

نحصل على الثابت C_1 بتعويض الدالة f_1 في العلاقة التكعيبية حيث إن الدالة f_1 تنعدم في النقاط x^i ماعدا العقدة x^1 ، ونوجد بقية الثوابت من أجل بقية الدوال على التتالي، فنحصل على ثوابت العلاقة التكعيبية كما في الجدول الآتي:

x^i	C_i
x^1,x^2,x^3,x^4	$\frac{\pi r^2}{3}$

الجدول (1): ثوابت العلاقة التكعيبية (8) من أجل $\widetilde{K}_2(u,x)$ و $n=2$.

●● لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (36)، ومن أجل الدقة الجبرية $d=2k+1=5$ ومن أجل $n=3,$ ، نعوض في (36)، فنجد:

$$\tilde{K}_2(u,x)=\frac{15}{2r^4\mu\left(S_n^{(r)}\right)}\left(x_1u_1+x_2u_2+x_3u_3+\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)\left(x_1u_1+x_2u_2+x_3u_3-\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)$$

باتباع نفس الخطوات في الفقرة الأخيرة، نجد أن $u^1=(r,0,0)$ ومعادلة سطحها هي

$H_1:\left(rx_1+\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)\left(rx_1-\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)=0$ ، و $u^2=\left(\frac{r}{\sqrt{5}},\sqrt{\frac{4}{5}}\,r,0\right)$ والتي تعيين السطح

$H_2:\left(\frac{r}{\sqrt{5}}x_1+\sqrt{\frac{4}{5}}\,r\,x_2+\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)\left(\frac{r}{\sqrt{5}}x_1+\sqrt{\frac{4}{5}}\,r\,x_2-\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)=0$ ، عدد نقاط التقاطع

$S_2^{(r)}\bigcap(H_1\bigcap H_2)$ هو $s=2k^{n-1}=2(2)^2=8$ هو النقاط الآتية:

$$x^1=\left(\frac{1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{-1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}\,r\right)\,,x^2=\left(\frac{1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{-1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,-\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}\,r\right)$$

$$x^3=\left(\frac{1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{10}}\,r\right)\,,x^4=\left(\frac{1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,-\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{10}}\,r\right)$$

$$x^5=\left(\frac{-1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{-1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}\,r\right)\,x^6=\left(\frac{-1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{-1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,-\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}\,r\right)$$

$$x^7=\left(\frac{-1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{10}}\,r\right)\,x^8=\left(\frac{-1}{\sqrt{5}}r\,,\frac{1-\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\,,-\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{10}}\,r\right)$$

عدد النقاط التكاملية هو 12 والحد الأدنى لعدد النقاط هو $N\geq 2M(n-1,k)=2M\left(2,\left[\frac{d}{2}\right]\right)=12$ وبالتالي تقع النقاط جميعها على سطح

الكرة $x^2+y^2+z^2=r^2$ فلها الثابت نفسه، حيث إن:

$\frac{1}{2b_i}=\left[\frac{15}{r^4\mu\left(S_3^{(r)}\right)}\left(r^2+\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)\left(r^2-\frac{r^2}{\sqrt{5}}\right)\right]^{-1}=\frac{r^3\pi}{3}$ ، و لإيجاد الثابت C_1

نختار الدالة $f_1=\left(x+\frac{r}{\sqrt{5}}\right)\left(y+\frac{-1+\sqrt{5}}{2\sqrt{5}}r\right)\left(z+\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{10}}r\right)$ التي تنعدم في النقاط x^i ماعدا العقدة x^1، ونوجد بقية الثوابت بنفس الأسلوب، فنحصل على ثوابت العلاقة التكعيبية كما في الجدول الآتي:

C_i	x^i
$\frac{2-\sqrt{5}}{3}r^3\pi$	x^1,x^2
$\frac{\sqrt{5}}{3}r^3\pi$	x^3,x^4
$\frac{-\sqrt{5}}{3}r^3\pi$	x^5,x^6
$\frac{2+\sqrt{5}}{3}r^3\pi$	x^7,x^8

الجدول (2): ثوابت العلاقة التكعيبية (8) من أجل $\widetilde{K}_2(u,x)$ و $n=3$.

4-2-2. تشكيل العلاقات التكعيبية من أجل $K_2(u,x)$:

- لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (37)، ومن أجل الدقة الجبرية $d=2k=4$ ومن أجل $n=2,$ ، نعوض في (37)، فنجد:

$$K_2(u,x)=\frac{2}{r^4\mu\left(S_2^{(r)}\right)}\left(x_1u_1+x_2u_2+\frac{\sqrt{5}-1}{4}r^2\right)\left(x_1u_1+x_2u_2+\frac{-\sqrt{5}-1}{4}r^2\right)$$

لنأخذ النقطة $u^1=(r,0)$ التي تعين

$$H_1:\left(rx_1+\frac{\sqrt{5}-1}{4}r^2\right)\left(rx_1-\frac{\sqrt{5}+1}{4}r^2\right)=0$$

عدد نقاط التقاطع $H_1\cap S_1^{(r)}$ هو $s=2k^{n-1}=4$ ، وهي:

$$x^1=\left(\frac{1-\sqrt{5}}{4}r\ ,\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{8}}r\right)\ ,\ x^2=\left(\frac{1-\sqrt{5}}{4}r\ ,-\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{8}}r\right)$$

$$x^3=\left(\frac{1+\sqrt{5}}{4}r\ ,\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{8}}r\right)\ ,\ x^4=\left(\frac{1+\sqrt{5}}{4}r\ ,-\sqrt{\frac{5-\sqrt{5}}{8}}r\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي 5 والحد الأدنى لعدد هذه النقاط هو $N\geq M(n,k)-M(n,k-2)=5$ ، تقع النقاط جميعها على سطح الدائرة $x^2+y^2=r^2$ ، نعوض في العلاقة التكعيبية الآتية، حيث $\frac{1}{b_i}=\left[K_k(u^i,u^i)\right]^{-1}=\left[\frac{2}{r^4\mu(S_1^{(r)})}\frac{r^4}{4}\right]^{-1}=4r^2\pi$ ، ولايجاد الثابت C_1 نختار الدالة الآتية:

$$f_1=\left(x+\frac{-1-\sqrt{5}}{4}r\right)\left(y+\sqrt{\frac{5+\sqrt{5}}{8}}r\right)$$ فنحصل على الثابت C_1 حيث إن الدالة f_1 تنعدم في النقاط x^i ماعدا العقدة x_1 ، ونوجد بقية الثوابت من أجل بقية الدوال على التتالي، فنحصل على ثوابت العلاقة التكعيبية كما في الجدول الآتي:

x^i	C_i
x^1,x^2	$\frac{7\sqrt{5}-5}{10}\pi r^2$
x^3,x^4	$\frac{-7\sqrt{5}-5}{10}\pi r^2$

الجدول (3): ثوابت العلاقة التكعيبية (7) من أجل $K_2(u,x)$ و $n=2$.

•• لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (37)، ومن أجل الدقة الجبرية $d = 2k = 4$ ومن أجل $n = 3$، نعوض في (37)، فنجد:

$$K_2(u,x) = \frac{15}{2r^4 \mu\left(S_2^{(r)}\right)} \left(\sum_{i=1}^{3} x_i u_i + \frac{\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right) \left(\sum_{i=1}^{3} x_i u_i + \frac{-\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right)$$

لنأخذ النقطة $u^1 = (r,0,0)$ التي تعين السطح

$$H_1 : \left(r x_1 + \frac{\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right) \left(r x_1 + \frac{-\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right) = 0$$

وبالتالي فإن $u^2 = \left(\frac{\sqrt{6}-1}{5} r, \frac{\sqrt{18+2\sqrt{6}}}{5} r, 0 \right)$ والتي تعين السطح:

$$H_2 : \left(\frac{\sqrt{6}-1}{5} r\, x_1 + \frac{\sqrt{18+2\sqrt{6}}}{5} r x_2 + \frac{\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right)$$
$$\left(\frac{\sqrt{6}-1}{5} r\, x_1 + \frac{\sqrt{18+2\sqrt{6}}}{5} r x_2 + \frac{-\sqrt{6}+1}{5} r^2 \right) = 0$$

عدد نـــقاط التقاطع $S_2^{(r)} \bigcap (H_1 \bigcap H_2)$ هو $s = 2k^{n-1} = 8$ ، ونـــقاط التقاطـــع:

$$x^1=\left(\frac{-1+\sqrt{6}}{5}r,\frac{-12+7\sqrt{6}}{5\sqrt{18+2\sqrt{6}}}r,\sqrt{\frac{-9+24\sqrt{6}}{5\left(9+\sqrt{6}\right)}}r\right)$$

$$x^2=\left(\frac{-1+\sqrt{6}}{5}r,\frac{-12+7\sqrt{6}}{5\sqrt{18+2\sqrt{6}}}r,-\sqrt{\frac{-9+24\sqrt{6}}{5\left(9+\sqrt{6}\right)}}r\right)$$

$$x^3=\left(\frac{-1+\sqrt{6}}{5}r,\frac{-12-3\sqrt{6}}{5\sqrt{18+2\sqrt{6}}}r,\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

$$x^4=\left(\frac{-1+\sqrt{6}}{5}r,\frac{-12-3\sqrt{6}}{5\sqrt{18+2\sqrt{6}}}r,-\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

$$x^5=\left(-\frac{1+\sqrt{6}}{5}r,\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r,\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

$$x^6=\left(-\frac{1+\sqrt{6}}{5}r,-\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r,\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

$$x^7=\left(-\frac{1+\sqrt{6}}{5}r,\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r,-\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

$$x^8=\left(-\frac{1+\sqrt{6}}{5}r,-\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r,-\sqrt{\frac{3}{9+\sqrt{6}}}r\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي 10 والحد الأدنى لعدد هذه النقاط هو $N\geq M(n,k)-M(n,k-2)=10$ ، و حيث $\frac{1}{b_i}=\left[K_k\left(u^i,u^i\right)\right]^{-1}=\frac{4r^3\pi}{9}$ ،

لإيجاد الثابت C_1 نختار الدالة

$$f_1=\left(x+\frac{1+\sqrt{6}}{5}r\right)\left(y+\frac{12+3\sqrt{6}}{5\sqrt{18+2\sqrt{6}}}r\right)\left(z+\sqrt{\frac{-9+24\sqrt{6}}{5\left(9+\sqrt{6}\right)}}r\right)$$ ، وبنفس الأسلوب نختار بقية الدوال، فنحصل على ثوابت العلاقة التكعيبية كما في الجدول الآتي:

x^i	C_i
x^1, x^2	$\frac{8+3\sqrt{6}}{36}\pi r^3$
$x^3, x^4, ..., x^8$	$\frac{16-\sqrt{6}}{36}\pi r^3$

الجدول (4): ثوابت العلاقة التكعيبية (7) من أجل $K_2(u,x)$ و $n=3$.

4-3. تشكيل العلاقة التكعيبية للنواة المولدة $\widetilde{K}_3(u,x)$:

• لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (38)، ومن أجل الدقة الجبرية $d=2k+1=7$ ومن أجل $n=2,$، نعوض في (38)، فنجد:

$$\widetilde{K}_3(u,x)=\frac{8}{r^6\mu\left(S_1^{(r)}\right)}(x_1u_1+x_2u)\left(x_1u_1+x_2u_2+\frac{r^2}{\sqrt{2}}\right)\left(x_1u_1+x_2u_2-\frac{r^2}{\sqrt{2}}\right)$$

لنأخذ النقطة $u^1=(r,0)$ فنحصل على معادلة السطح:

$$H_1:(rx_1)\left(rx_1+\frac{r^2}{\sqrt{2}}\right)\left(rx_1-\frac{r^2}{\sqrt{2}}\right)=0$$

عدد نقاط التقاطع $H_1\cap S_1^{(r)}$ هو $s=2k^{n-1}=6$ ، هي:

$$x^1=(0,r) \qquad x^2=(0,-r) \qquad x^3=\left(\frac{r}{\sqrt{2}},\frac{r}{\sqrt{2}}\right)$$

$$x^4=\left(\frac{r}{\sqrt{2}},-\frac{r}{\sqrt{2}}\right),\ x^5=\left(-\frac{r}{\sqrt{2}},\frac{r}{\sqrt{2}}\right) \quad x^6=\left(-\frac{r}{\sqrt{2}},-\frac{r}{\sqrt{2}}\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي 8 والحد الأدنى لعدد هذه النقاط $N \geq 2M(n-1,k)=8$ ، حيث: $\frac{1}{2b_i}=\left[2K_k(u^i,u^i)\right]^{-1}=\frac{r^2\pi}{4}$ ، وبما أن العلاقة التكعيبية (8) صحيحة من أجل الدوال حتى الدرجة السابعة، لإيجاد C_1 نختار الدالة $\left(x^2-\frac{r^2}{2}\right)(y+r)$، وبنفس الأسلوب نختار بقية الدوال، فنحصل على الثوابت:

x^i	C_i
$x^1, x^2, ..., x^6$	$\frac{1}{4}\pi r^2$

الجدول (5): ثوابت العلاقة التكعيبية (8) من أجل $\widetilde{K}_3(u,x)$ و $n=2$.

●● لنشكل العلاقة التكعيبية من أجل النواة المولدة في (38)، ومن أجل الدقة الجبرية $d=2k+1=7$ ومن أجل $n=3$، نعوض في (38)، فنجد:

$$\widetilde{K}_3(u,x)=\frac{35}{2r^6\mu(S_3^{(r)})}\left(\sum_{i=1}^{3}x_iu_i\right)\left(\sum_{i=1}^{3}x_iu_i+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)\left(\sum_{i=1}^{3}x_iu_i-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)$$

لنأخذ النقطة $u^1=(r,0,0)$ فنحصل على معادلة السطح:

$$H_1:(rx_1)\left(rx_1+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)\left(rx_1-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)=0$$

وبالتالي فإن $u^2=(0,r,0)$ والتي تعين السطح

$$H_2:(rx_2)\left(rx_2+\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)\left(rx_2-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r^2\right)=0$$

عدد نقاط التقاطع $H_1\cap H_2\cap S_2^{(r)}$ ب $s=2k^{n-1}=18$ نقطة، هي:

$$x^{1,2}=(0,0,\pm r),\ x^{3,4}=\left(0,-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{2}{\sqrt{7}}r\right),\ x^{5,6}=\left(0,\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{2}{\sqrt{7}}r\right)$$

$$x^{7,8}=\left(-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,0,\pm\frac{2}{\sqrt{7}}r\right),\ x^{9,10}=\left(-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{1}{\sqrt{7}}r\right)$$

$$x^{11,12}=\left(-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{1}{\sqrt{7}}r\right),\ x^{13,14}=\left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,0,\pm\frac{2}{\sqrt{7}}r\right)$$

$$x^{15,16}=\left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,-\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{1}{\sqrt{7}}r\right),\ x^{17,18}=\left(\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\frac{\sqrt{3}}{\sqrt{7}}r,\pm\frac{1}{\sqrt{7}}r\right)$$

عدد النقاط التكاملية يساوي 20 والحد الأدنى لعدد هذه النقاط $N\geq 2M(n-1,k)=20$ ، حيث: $\frac{1}{2b_i}=\left[2\tilde{K}_3(u^i,u^i)\right]^{-1}=\frac{r^3\pi}{20}$ ، وبما أن العلاقة التكعيبية (8) صحيحة من أجل الدوال حتى الدرجة السابعة، لإيجاد C_1 نختار الدالة $(z+r)\left(x^2-\frac{3}{7}r^2\right)\left(y^2-\frac{3}{7}r^2\right)$، وبنفس الأسلوب نختار بقية الدوال، فنجد قيم الثوابت:

x^i	C_i
x^1,x^2	$\frac{106}{135}\pi r^3$
x^3,x^4,x^5,x^6	$\frac{-77}{288}\pi r^3$
x^7,x^8,x^{13},x^{14}	$\frac{-91}{288}\pi r^3$
$x^{9,10,11,12,15,\ldots,18}$	$\frac{203}{540}\pi r^3$

الجدول (7): ثوابت العلاقة التكعيبية (8) من أجل $\tilde{K}_3(u,x)$ و $n=3$

5. الاستنتاجات والتوصيات:

من خلال ماسبق، نجد أنه من المفيد زيادة درجة كثيرات الحدود للحصول على علاقة تكعيبية ذات دقة جبرية أعلى، ويمكن تعميم صيغة النواة المولدة من أجل أي درجة كثيرة حدود للحصول عليها دون استنتاج وهذا ما يتم العمل عليه ودراسته، ونوصي بالعمل على دراسة طريقة النواة المولدة في مناطق تكاملية جديدة، والعمل على دراستها في فضاءات أخرى.

6. قائمة المراجع:

[1]. G. PETROVA. 2004- Cubature Formulae For Spheres, Simplices And Balls. Taxas A&M University., Journal Of Computational And Applied Mathematics. 162,483-496.

[2]. H. M. Moller, 1976- Cubature Formulae mit minimaler Knotenzahl, Numer. Math., 35, pp.185-200.

[3] H. M. Moller, 1979- Lower bounds for the number of nodes in cubature formulae, Numerical Integration, Internat. Ser. Numer. Math. Vol. 45, G. Hammerlin, ed., Birkhauser, Basel.

[4] H.M. Moller, 1973-POLYNOMIALS AND CUBATURE FORMULAE, Ph.D. Thesis, Univ. Dortmund.

[5]. I.P. MYSOVSKIKH. 1969-Cubature Formulae And Orthogonal Polynomials. Zh. Vychisl. Mat. I Mat. Fiz., 9(2): 419-425.

[6]. I.P. MYSOVSKIKH. 1969-The Construction Of Interpolation Cubature Formulae With The Least Number Of Nodes. Tr. II. Respubl. Konf. Mat. Belorussii, Pages 42-48. 1969. (Russian), ZB 194. 18703.

[7]. I.P. MYSOVSKIKH. 1981- Interpolation Cubature Formulas. Moskva: "Nauka". 336p., Moscow-Leningrad.

[8]. I.P. MYSOVSKIKH. 1985- Cubature Formulas In The Case Of Central Symmetry. Netody Vychisl., 14:35. (Russian), MR 90f:65035, ZB 754.41028.

[9].I.P. MYSOVSKIKH. 1995-Representation Of The Reproducing Kernels Of A Ball. Metody Vychisl., 17:145-152.

[10]. I.P. MYSOVSKIKH. 1996-A representation Of The Reproducing Kernels Of A Shpere. Zh. Vychisl. Mat. I mat. Fiz., 36(3):28-34, (Russian), Comput. Maths math. Phys. 36(3), 303-308(English).

[11]. KH. A. ABBAS and I.P. MYSOVSKIKH. 1991-On The Method Of Reproducing Kernel For Constructing Cubature Formulae. Vestnik Leninger. Univ., Ser. I, 22(4): 3-11. (Russian).

[12]. R. COOLS, I.P. MYSOVSKIKH, and H.J. Schmid. 2001-Cubature Formulae And Orthogonal Polynomials . J. Comput. Apply. Math., 127:121-152.

[13]. عباس، اصلان، 2022– التكاملات في المناطق الكروية في الفضاء $\Re^n$ بطريقة النواة المولدة، مجلة جامعة البعث.44.

تهجين خوارزمية *Salp Swarm* باستخدام الخوارزمية الجينية لتطوير منهجية جديدة لإيجاد شجرة القرار الأمثلية

الطالبة: هدى علي حبش

جامعة البعث – كلية العلوم – قسم الرياضيات

المشرف: د. زكريا زكريا – المشرف المشارك: د. عبد الله العمر

الملخص

تكمن أهمية نظم دعم اتخاذ القرار الناتجة عن تطوُّر تقنية المعلومات في تركيزها على توفير الدعم المناسب لتحسين جودة القرار، واعتمادها على تَوَفُّر المعلومات الكافية وملاءمة النماذج لتحليل المشكلة.

في بحثٍ سابق تمَّت دراسة أشجار القرار وطرق بنائها وتطويرها، وتمَّ اقتراح خوارزمية هجينة تَزِيد من موثوقية النتائج التي نحصل عليها عن طريق الوصول إلى شجرة القرار المثالية التي تتفوَّق على المنهجيات السابقة. وفي هذا البحث سنتابع العمل على هذا الموضوع واستنتاج خوارزمية هجينة عن طريق دمج الخوارزمية الجينية مع خوارزمية Salp Swarm (سرب الهلاميات البرميلية).

قمنا في هذا البحث بدمج خوارزمية Salp Swarm والخوارزمية الجينية لبناء أشجار قرار أمثلية، وقد أظهرت النتائج تَحَسُّن شجرة القرار التي حصلنا عليها من الخوارزمية الهجينة عن الخوارزميتين كلٍّ على حدة وفق معايير الأداء الخاصة بأشجار القرار والتي سنتحدث عنها بالتفصيل في هذا البحث.

الكلمات المفتاحية:

نظم دعم اتخاذ القرار، تحسين جودة القرار، الخوارزمية الجينية، شجرة القرار، خوارزمية Salp swarm.

Hybridization of the Salp Swarm algorithm using Genetic algorithm to develop a new methodology for finding the optimal decision tree

Huda Ali Habash

ALBaath University – College of Science – Mathematics department

Abstract:

Decision support systems (DSS) are considered the resultant of the significant advancement in information technology. As these systems provides the suitable support to improve the quality of human decision and depends on the availability of sufficient information as well as fitting the models to analyze the problem.

In earlier research we have studied decision trees along with different methods to build and develop, besides, we have proposed a hybrid approach that increased the quality of the results we got by reaching the optimal decision tree that outperformed the earlier methodologies.

In this research we go on with our efforts to develop a new hybrid algorithm that merges genetic algorithms with Salp swarm optimization approach.

In this research, we combined the Salp Swarm algorithm and the genetic algorithm to build optimal decision trees, and the results showed that the decision tree we obtained from the hybrid algorithm improved over the two algorithms separately according to the performance criteria of decision trees, which we will talk about in detail in this research.

Keywords:

Decision support systems, decision making improvement, genetic algorithms, decision tree, Salp swarm optimization

1. مقدمة:

تعتبر قواعد البيانات اليوم من المجالات الهامة والمستخدمة بشكل واسع في هذا العصر.. عصر المعلوماتية. ومع ازدياد قواعد البيانات وضخامة محتوياتها كان لابد من ظهور أدوات وخوارزميات تساعد في التنقيب في البيانات وإعطاء المستخدم المعلومات المفيدة منها.

تُعتبر نظم دعم اتخاذ القرار الذكية من تطبيقات الذكاء الصنعي، فهي تساعد على اتخاذ القرار في كافة المجالات، الاقتصادية والزراعية وفي مجال الطقس وغيرها... [1].

في الواقع تُعتبَر أشجار القرار من أهم خوارزميات بناء نظم دعم اتخاذ القرار، والتي تعتبر من أهم أدوات تحليل القرار التي تساعد على اتخاذ القرار بالتوازي مع النماذج الاحتمالية وخوارزميات الاختيار [2].

ذكاء السرب (Swarm Intelligence) هو مصطلح يصف السلوك الجماعي للنظم سواء كانت طبيعية أم صناعية. وقد قدمه جيراردو بيني (Gerardo Beni) وجينغ وانغ (Jing wang) في عام 1989 في سياق النظم الروبوتية [3].

بدأت الأبحاث في هذه الخوارزميات مع بداية التسعينات من القرن الماضي، فبدأت بمحاكاة الكائنات الحية الأقل ذكاءً والتي لها إمكانيّات محدودة كالنمل والطيور والأسماك والتي تُبدي سلوكاً جماعياً شديد الذكاء [4].

ومن الجدير بالذكر أنَّ عملية إيجاد الشجرة الأفضل التي تُناسِب البيانات هي عملية NP (Nondeterministic Polynomial) والتي لا تُحَل بزمن نموذجي [5]، وتنقسم بدورها إلى NP Hard و NP Complete، وإنَّ موضوع بحثنا هذا يندرج تحت قسم NP Complete، لذلك فإنَّ النتائج التي سنحصل عليها ومقارنتها مع الطرق السابقة ستبين فعالية هذه الطريقة ودقة نتائجها تؤكد أفضليتها على الخوارزميات الأُخرى.

سنعرض في هذا البحث تفاصيل المنهجية المُتَّبَعَة ونوضح نتائجها على مجموعة بيانات حقيقية حيث تُظهِر المقارنة تَحَسُّن نتائج هذه الطريقة عن نتائج الطرق السابقة في مجال

بناء أشجار القرار. كما سنقارن في نهاية البحث نتائج الخوارزمية الحالية مع الخوارزميات المستخدمة سابقاً ومع الخوارزمية الهجينة في بحثي السابق [19].

وسنبين الهدف من البحث، كما سنعرض باختصار الدراسات السابقة والطرق المقترحة في مجال بناء أشجار القرار، ثمَّ سنطرح مشكلة البحث، وما هي المنهجية التي تمَّ اقتراحها لدمج الخوارزميتين Salp Swarm و Genetic، ثمَّ نعرض النتائج التي حصلنا عليها من الخوارزمية الهجينة والتي تبين تَفَوُّق الخوارزمية الجديدة المقترحة على الخوارزميات الأُخرى.

2. هدف البحث:

يهدف هذا البحث إلى تعديل خوارزمية الهلاميات البرميلية Salp Swarm ودمجها مع الخوارزمية الجينية Genetic Algorithm لتطوير طريقة جديدة يمكن من خلالها إيجاد شجرة القرار الأفضل المرتبطة بمجموعة بيانات وبحيث تكون شجرة القرار المُستَنتَجَة ذات قدرة أعلى من أشجار القرار المبنية بالطرق التقليدية الأُخرى، وبالتالي يكون الهدف هو الوصول إلى شجرة القرار المثالية التي تُضاهي بقدراتها المنهجيات المتبعة سابقاً.

3. الدراسات السابقة:

- تم اقتراح المبدأ الاساسي للخوارزمية الجينية (Genetic Algorithm) عام 1975 من قبل العالم هولاند، وذلك وفقاً لنظرية دارون والتي تعتمد على مبدأ البقاء للأصلح. بحيث تعمل الخوارزمية اعتماداً على مبدأ أن الأفراد الذين هم أكثر عرضة للبقاء على قيد الحياة لفترة أطول هم الأشخاص الأفضل من حيث سماتهم الوراثية [6].

على مدى أجيال عديدة، تنتشر هذه المادة الوراثية الملائِمة لعدد متزايد من الأفراد، حيث يمثِّل كل فرد –في الخوارزمية الجينية، بمعنى آخر كل "كروموسوم" Chromosome ينتمي إلى المجتمع– حلاً محتملاً للمشكلة، وتمر الخوارزمية

الجينية بعدة مراحل من أجل أداء وظيفتها، هذه المراحل هي: التهيئة والتقييم والاختيار والعبور (التزاوج) والطفرة [7].

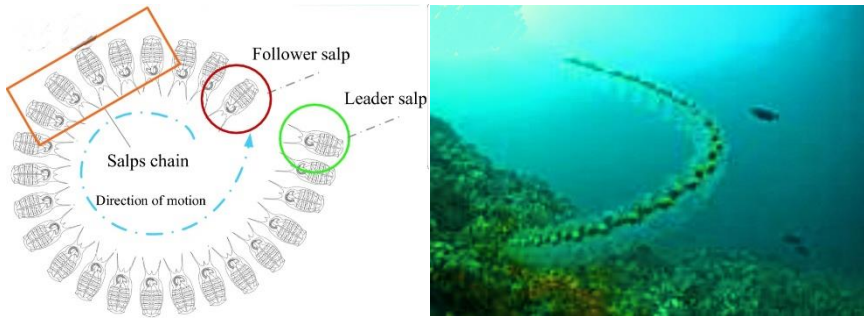
- في عام 1995 اقترح العالم الإيطالي ماركو دوريغو Marco Dorigo خوارزمية أمثلية مستعمرة النمل Ant Colony Optimization (ACO)، التي تُحاكي مستعمرات النمل [8] (والتي تمَّ تطوير منهجية معتمِدة عليها وتمَّ استخدامها والحديث عنها مفصلاً في بحثي السابق) [19].
- كما اقترح كلاً من العالمين Russell Eberhart و James Kenndy الخوارزمية Particle Swarm Optimization (PSO) والتي تعتمد بشكل رئيسي على محاكاة أسراب الطيور [9].
- الخوارزميتان ACO و PSO كانتا بداية لفرع جديد من فروع الذكاء الاصطناعي، هو ذكاء السرب SI (Swarm Intelligence) [10].
- تُعَدّ خوارزمية Salp Swarm واحدة من الخوارزميات الهامة التي أُقتُرِحَت والتي تحاكي تقنيات ذكاء الأسراب أو القطعان [11].
- يظهر ذكاء السرب عادة في مجتمعات من العملاء المحدودين والذين يتفاعلون مع بعضهم البعض ومع بيئتهم. وعلى الرغم من وجود متحكِّم مركزي يملي على الأفراد كيف يتصرفون. تؤدي التفاعلات المحلية، والعشوائية عموماً، بينهم إلى ظهور سلوك كلي ذكي غير ملحوظ على مستوى الأفراد [12].
- ومن الأمثلة الطبيعية على هذه الظاهرة مستعمرات النمل وأسراب الطيور وقطعان الماشية ونمو البكتريا وأفواج الأسماك [13].
- تعود خلفية هذه الخوارزميات إلى مصطلح الحياة الصنعية A–life (Artificial Life)، الذي يدرس نظماً من صنع الانسان وتملك خصائص الحياة الأساسية، مثل نمذجة حركة الطيور أو النمل في بناء المستعمرات، ويتفرَّع عن هذا المصطلح فرعان أساسيان:

– الدراسات المهتمة بتقنيات الحوسبة والمساعدة في نمذجة الظواهر البيولوجية.

- الدراسات المهتمة بالظواهر البيولوجية وكيفية توظيفها الصحيح في حل المشكلات الحاسوبية، مثل الخوارزميات الجينية والشبكات العصبونية [14].

4. مشكلة البحث:

تتحرك أسماك Salp (الهلاميات البرميلية) في البحر بشكل خط مستقيم، ويوجد قائد للمجموعة، ويتبعه بقيّة أفراد السرب [13]، كما هو موضح في الشكل(1).



الشكل(1)

تعتمد خوارزمية Salp Swarm على هذه الفكرة، حيث يتجه القائد باتجاه الحل الأمثل –الأفضل حتى الآن– وتتبعه العناصر الأخرى، ولكن تقوم بحركات عشوائية أثناء الحركة، ويتم استخدام هذه المُحاكاة بحيث يتم إجراء مسح لفضاء الحالات بشكل جيد، وبهذا نكون قد تحركنا باتجاه الحل الأفضل، ويكون احتمال إيجاده أكبر، وبهذه العملية يكون قد تحسن الحل [15].

وبما أن الخوارزمية الجينية تساهم في تحسين الحل أيضاً، لذلك يمكن إجراء تزاوج بين الحلول التي حصلنا عليها من خوارزمية Salp Swarm ، وبهذا نحصل على الحل الأفضل بشكل أسرع.

بعد ذلك نختار أحد الحلول المثلى التي حصلنا عليها ونجعله القائد الجديد، ونُعيد جعل بقية الحلول (أفراد السرب) يتبعونه، وهكذا. وبهذا نحصل على الحل الأفضل بشكل أسرع وأكثر دقة.

لدينا سرب من الهلاميات البرميلية (والتي هي هنا أشجار القرار أو العينات (Sample) والصفات (Attributes) في البيانات الجدولية التي سيتم تدريب النظام الخبير عليها) ينتشر في منطقة محددة بغرض البحث عن الطعام (البحث عن شجرة القرار المُثلَى التي نبحث عنها). وينتشر الطعام في هذه المنطقة عشوائياً، بالإضافة إلى أن الهلاميات لا تعلم مواضع الطعام على نحو واضح. فما هي الطريقة المُثلَى للبحث عن الطعام؟

تبدأ العناصر رحلة البحث من مناطق عشوائية، ومع كل إعادة تقترب العناصر من الحل الأمثل والأكثر دقَّة (المنطقة الممتلئة بالطعام).

إنَّ خوارزمية Salp Swarm (SS) والخوارزمية الجينية GA (Genetic Algorithm) تنحدر من سلالة الخوارزميات التطورية، إذ تمتلك الخوارزميتان بعض نقاط التشابه مثل توليد تجمعات عشوائية وحساب قيمة الملاءمة وتُحَدّث الخوارزميتان وفقاً لتقنيات عشوائية [16].

بينما توجد نقاط اختلاف بينهما، إذ أنَّ خوارزمية SS لا تمتلك معاملات التزاوج والطفرة التي تمتلكها GA. وبهذا نكون قد استفدنا من ميزات كلا الخوارزميتين معاً.

5. المنهجية المقترحة:

1.5. آلية تقييم شجرة القرار:

تتميَّز أشجار القرار عن بعضها بعدة معايير، هي:

(a) معايير قياس الأداء المرتبطة بالبيانات [6]، (حيث الأعلى هو الأفضل) (مثل: الدقة P (Precision)، الاستعادة R (Recall)، ومعيار f_1، حيث f_1 هو المتوسط التوافقي للدقة P والاستعادة R، ويُحسب بالعلاقة:

$$f_1 = \frac{1}{\frac{\frac{1}{P}+\frac{1}{R}}{2}} = \frac{2PR}{P+R} \quad \text{..... (1)}$$

(والمتوسط التوافقي هو أحد المتوسطات (مقاييس النزعة المركزية) وهو المقابل للمتوسط الحسابي)

(b) ارتفاع الشجرة h (حيث الأقل هو الأفضل).

(c) عدد الأوراق L (حيث الأقل هو الأفضل).

لذلك، ومن أجل الحصول على جودة الشجرة، سنستخدم الجمع الموزون Weighted Sum [17] للقيم السابقة. فإذا كان لدينا شجرة ارتفاعها الأقصى h وارتفاعها الحقيقي d وعدد أوراقها L. وعند حساب معامل f_1 (العلاقة (1)) كانت قيمته f. عندئذٍ تكون جودة هذه الشجرة G، وهي:

$$G = a * f + b * \frac{h-d}{h} + c * \frac{2^{h-1}-L}{2^{h-1}} \quad \text{..... (2)}$$

حيث a و b و c هي قيم اختيارية تعطي أفضلية لكل معيار (يمكن وضعها حسب خبير أو حسب حاجة المستخدم)، وتحقق الشرط $a+b+c=1$ ، ويفضل استخدام قيمة عالية لـ a لأن الأهمية هي للدقة.

سوف نستخدم التابع السابق G لقياس دقة شجرة القرار هنا أيضاً.

2.5. آلية العمل:

سيكون لدينا مجموعة من البيانات الجدولية، يُمَثِّل كلّ سطرٍ عنصراً من البيانات يسمى عينة (Sample). وتُمَثِّل الأعمدة –باستثناء العمود الأخير– الصِّفات (Attributes)،

بحيث يُعَبِّر كل عمود عن صفة للعينات، ويسمَّى العمود الأخير الهدف (Target)، ويُمَثِّل القرار المرتبط بكل عنصر عينة.

نريد بناء نموذج لشجرة القرار اعتماداً على هذه البيانات الموجودة بحيث تَعكِس هذه الشجرة ارتباط الهدف مع الخصائص بأحسن طريقة ممكنة، وتُحقِّق شروط الشجرة الأمثلية التي تحدثنا عنها سابقاً، وتكون قابلة للتعميم. أي أنَّ المسألة هي مسألة تعلُّم آلي (Machine Learning).

كل سمكة Salp (هلامية برميلية) تُمَثِّل حلاً عشوائياً، والذي يُمَثِّل جزءاً من شجرة قرار.

في البداية لدينا أشجار القرار المبدئية والتي هي هنا حلول، سنطبق الآن الخوارزمية الجينية بإجراء التزواج بين الحلول التي حصلنا عليها ونعيد هذه العملية أربعة أو خمسة أجيال حتى نحصل على حل جيد.

لاستخدام الخوارزمية الجينية يجب أن نقوم بتمثيل كل شجرة بسلسلة من الأرقام، ويجب أن تكون هذه السلاسل ذات نفس الطول لكي تعمل الخوارزمية الجينية.

لتمثيل الشجرة على شكل سلسلة نقوم بما يلي:

نُرقم الصفات (Attributes) بدءاً من 0 . الرمز الأول ضمن السلسلة هو رقم الصفة المرتبطة بالجذر.

من أجل كل شجرة فرعية نقوم بحذف الجذر وترقيم الصفات المتبقية من جديد وإعادة العملية.

يكون التمثيل النهائي هو دمج لتمثيل الجذر مع تمثيل الشجرة اليمنى ومن ثمَّ الشجرة اليسرى.

$$R(t)=\begin{cases} empty & t=empty \\ R(root)+R(left)+R(right) & otherwise \end{cases}$$

ولكن باعتبار أنَّ أشجار القرار تختلف بأعماقها وبُنيتها فإنَّ الطريقة السابقة لن تقوم بتوليد سلاسل ذات طول متساوي ولا يمكن أصلاً إعادة فك تشفيرها. لذلك سنقوم بما يلي:

نعتبر كل أشجار القرار هي أشجار كاملة (Perfect) [18]، أي أننا سنُضيف عقداً غير ضرورية للأوراق لتتوسع الأشجار ويصبح عدد العقد متساوي في كل الأشجار. مع ملاحظة أنَّ هذه الإضافة لن تتسبَّب في تغيير بنية الشجرة الحقيقية، لأنَّ الوصول إلى ورقة في شجرة القرار عندما لايتم استخدام كامل الصفات هو مُكافِئ لاستخدام أي صفة من هذه الصفات بعد هذه الورقة.

أصبح التمثيل لكل الأشجار متساوي الطول وأصبح التمثيل قابلاً للعكس، لأنَّ كل عقدة تُمَثَّل بدليل محدد، وهو ضِعف دليل الأب. (نظرية معروفة بتمثيل الأشجار الكاملة) [18].

بما أنَّ كل الأشجار أصبحت مُمثَّلة بشكل سلسلة من الأرقام وتُمَثِّل هذه السلاسل الكروموسومات في الخوارزمية الجينية، فيمكن تطبيق الخوارزمية الجينية التقليدية (من اختيار Selection وتزاوج Crossover وطفرة Mutation) ونُعِيدها حتى نصل للتقارب.

للاستفادة من الخوارزميتين معاً حيث تساعدنا خوارزمية Salp على التوليد العشوائي للأشجار بشكل يميل إلى الصحة، و تساعدنا الخوارزمية الجينية على تحسين الأشجار الموجودة، سنقوم بتكرار توليد الأشجار وتزاوجها بشكل متتالي للاستفادة من خصائص الخوارزميتين، حيث نقوم بتوليد مجموعة من الأشجار بشكل عشوائي بطريقة خوارزمية

Salp ثم نقوم بتحسين هذه الأشجار التي قمنا بتوليدها باستخدام الخوارزمية الجينية، وبعد عدد كافٍ من الدورات نقوم باختيار أفضل شجرة (حسب G). ونُعِيد العملية السابقة عدداً كافياً من المرات للوصول لأفضل شجرة.

من الجدير بالذكر أنَّنا استخدمنا الإجراءات التالية في خوارزميتنا:

(1) بالنسبة لتحريك الشجرة: نلاحظ أنه في خوارزمية SS فإن الهلاميات تتحرك سواء باتجاه العنصر الذي يسبقها أو باتجاه عشوائي، فهي تغيّر مكانها باستمرار.

وهنا فإن الهلامية تمثِّل شجرة، فكيف يمكن تحريك الشجرة؟

والجواب هو أننا نختار أحد العقد ونُغَيّرها بشكل عشوائي فنكون قد حرّكنا الشجرة في فضاء الأشجار لدينا، أي تمثِّل كل شجرة بمتجه، أبعاده هو عدد العقد، وكل محور هو عقدة، فعدد المحاور هو عدد العقد، والاحداثيات هي أرقام الصفات Attribute، لذا فالشجرة تُمَثَّل بنقطة، بحسب عدد العقد، في فضاء ذو n بُعداً.

(2) التطابق بين شجرتين: نقارن بين شجرتين من اليسار، وكلما كان التطابق أكثر كلما ازداد تطابق الشجرتين.

(3) تحريك (تقريب) شجرة باتجاه شجرة: إذا كان الجذرين مختلفين فإننا نجعلهما متماثلين، وقد استطعتُ في بحثي السابق[19] كتابة الشجرة على شكل متجه، أي أننا استطعنا تمثيل الشجرة رياضياً، ونستطيع من خلال هذا التمثيل الرياضي فعل كلا أمرين: تحريك شجرة بالنسبة لشجرة أخرى، وتحريك شجرة بشكل عشوائي، بالإضافة إلى تنفيذ الخوارزمية الجينية على ذلك التمثيل الرياضي.

ولتوضيح ذلك: لنفرض الشجرة $T(c_1\, c_2\, \ldots\, c_n)$

حيث: $n=2^{h+1}-1$

h ارتفاع الشجرة المطلوب

لتحريك الشجرة بشكل عشوائي نختار أحد c_i ونُغَيِّرُهُ، علماً أنَّ مجال كل c_i متغير، وحيث:

$$c_i < n - \log_2 i$$

حيث نختار رقماً عشوائياً من مجالها، وبهذا نكون قد حركنا الشجرة بشكل عشوائي. (وهذه الطريقة تمَّ تطبيقها في بحثي السابق في خاصية الطفرة (Mutation) الخاص بالخوارزمية الجينية).

أما بالنسبة لتحريك شجرة باتجاه شجرة أُخرى فإننا نبحث عن أصغر i غير متطابقة في الشجرتين ونجعلهما متماثلتين.

فيما يلي نوجز خوارزميتنا المقترحة بالخوارزمية التالية:

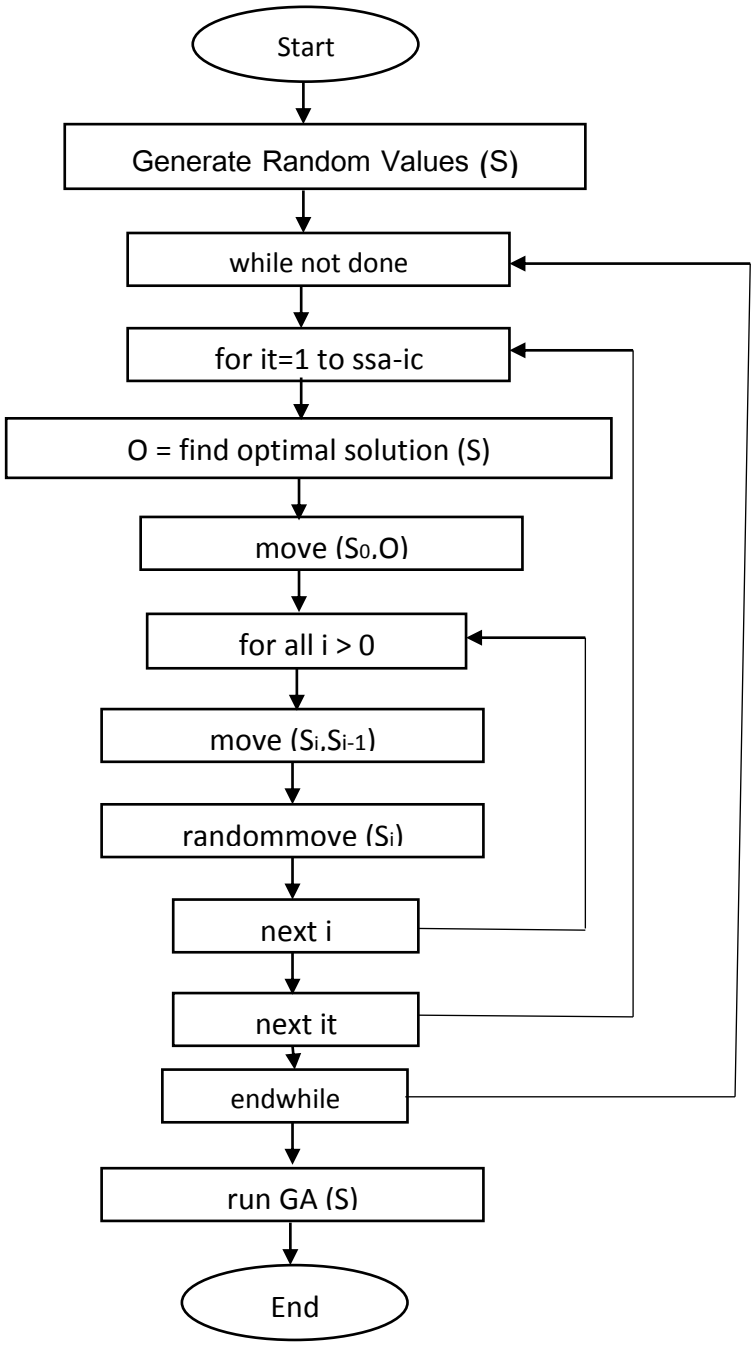
S set of size n= salp swarm count

Generate random values (S)

while not done

$$\begin{bmatrix} for\ it=1\ \ to\ \ ssa-ic \\ \begin{bmatrix} \\ \\ \\ O = find\ optimal\ solution\ (S) \\ move\ (S_0, O) \\ for\ all\ i>0 \\ \begin{bmatrix} move\ (S_i, S_{i-1}) \\ random\ move\ (S_i) \end{bmatrix} \\ \\ run\ GA\ (S) \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

يبين الشكل التالي المخطط التدفقي للخوارزمية الهجينة المقترحة:

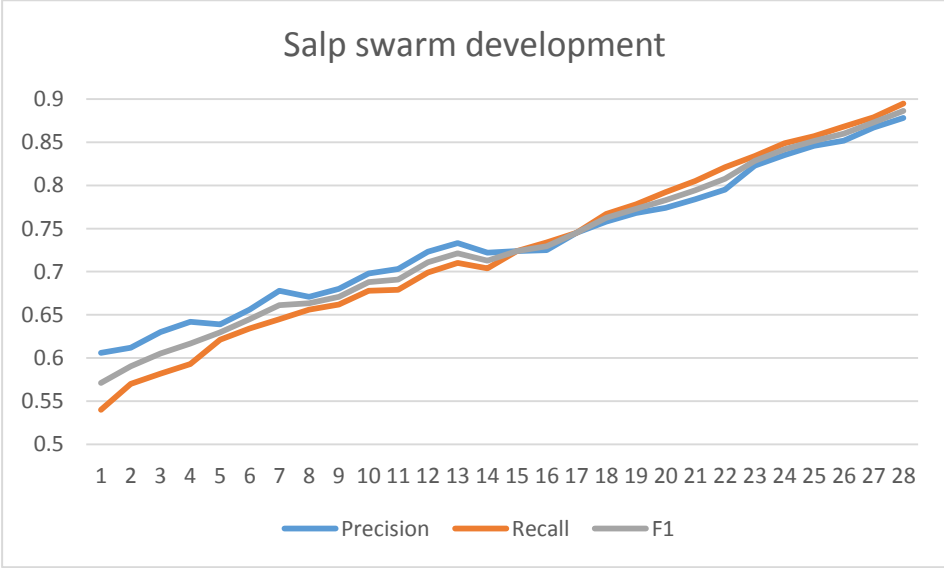


6. النتائج ومناقشتها:

قُمنا بتطبيق الخوارزمية السابقة باستخدام لغة بايثون وبرمجتها. لتجريب الخوارزمية السابقة حصلنا على مجموعة بيانات مرتبطة بأمراض القلب، الهدف منها تحديد ما إذا كان المريض المُحَدَّد بالصفات المطروحة مُرَشَّحاً للإصابة بقصور قلبي أم لا بحسب صفات طبية، مثل السن والضغط والتوتر الشرياني، ...

قمنا بتحويل كل البيانات إلى بيانات ثنائية (الضغط (مرتفع/ منخفض) – الجنس (ذكر/ أنثى)– العمر (كبير/ صغير) ...)، قمنا بتشغيل البرنامج وحصلنا على نتائج ممتازة.

يعرض الشكل (2) مخطَّط تَعَلُّم الخوارزمية ويُوَضِّح معايير القياس.



الشكل (2)

في الشكل (2)، كل خط يمثل إحدى الخوارزميات أثناء تنفيذ الخوارزمية خلال عدد الدورات. نلاحظ أنه على الرغم من تحسن الثقة في البداية في الخوارزمية الهجينة

المقترحة إلا أنها لم تكن الأعلى، لكن بعد فترة أصبحت الثقة في خوارزميتنا هي الأعلى وتفوقت على الخوارزميات الأخرى.

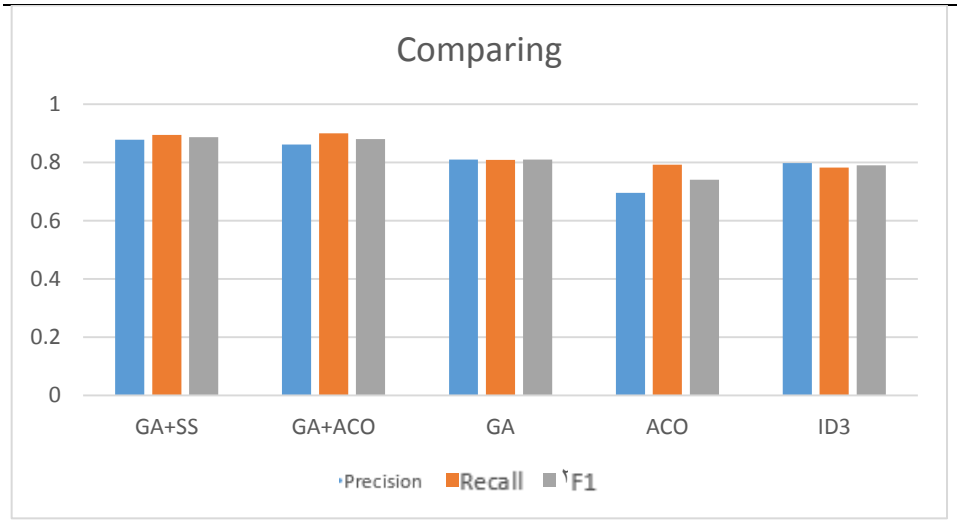
يعرض الجدول (1) النتائج المتعلِّقة بالشجرة المُستَقرَأة.

الجدول (1)

Method	Precision	Recall	F1 score	Leaf count	Height
GA+SS	0.878	0.895	0.8864185	8	4
GA+ACO	0.86122	0.8999	0.88013523	8	4
GA	0.81023	0.8092	0.809714672	9	4
ACO	0.69543	0.7923	0.74071127	10	4
ID3	0.79833	0.7822	0.790182693	8	4

تدل القيم المذكورة في الجدول (1) على فعَّالية الخوارزمية المقترحة.

لتوضيح كفاءة الخوارزمية المقترحة يجب مقارنتها مع المنهجيات السابقة، لذلك قمنا بتطبيق ID3 وخوارزمية Salp Swarm والخوارزمية الجينية كلاً على حدة، وتمت المقارنة معهم وفق معايير الأداء المقترحة. بالإضافة إلى مقارنتها بالخوارزمية المُقتَرَحة في بحثي السابق، فوجدنا النتائج الموضحة بالشكل (3):



الشكل (3)

كما ذكرنا سابقاً، يعرض الشكل (3) نتائج تطبيق عدة خوارزميات على نفس مجموعة البيانات التي قمنا بالتجريب عليها، من حيث معايير قياس الأداء المُرتَبِطة بالبيانات، ويُظهِر تفوُّق الخوارزمية المُطَوَّرة الجديدة بشكل ملحوظ وفق كل المعايير. نستنتج مما سبق أن الخوارزمية المُقتَرَحَة فعالة وأعطتنا نتائج أفضل.

7. الاستنتاجات والتوصيات:

عرضنا في هذه الورقة البحثية منهجية هجينة تمَّ فيها دمج خصائص خوارزمية Salp Swarm في توليد أشجار قرار واختيار الجيد منها عن طريق مسح لفضاء الحالات واختيار الأفضل، وخصائص الخوارزمية الجينية في وراثة الأجزاء الجيدة. وأظهرنا النتائج التي حصلنا عليها وتمَّت مقارنتها مع الخوارزميات السابقة كلاً على حدة، وكما يبدو من النتائج أن الخوارزمية الهجينة المُقتَرَحَة جيدة وفعَّالة. ويجب اختبارها على نتائج أُخرى وتطويرها أكثر ربَّما بدمجها مع تقنيات أُخرى لخوارزميات أُخرى أيضاً.

8. المراجع:

1. Z. Bandar, H. Al-Attar, K. Crockett, 2010- Genetic Algorithms For Decision Tree Induction.

2. S. Rzheutskaya, A. Rzheutskiy, R. R. Salikhova, 2020- Applying a genetic algorithm to build a classification tree.

3. Sousa T., Silva A., and Neves A.,2011- Particle Swarm based Data Mining Algorithms for classification tasks, Parallel Computing.

4. R. C. Eberhart and Y. Shi, 2018- Tracking and optimizing dynamic systems with particle swarms.

5. Eberhart, R. C. and Shi, 2001- Particle swarm optimization: developments, applications and resources. Proc. congress on evolutionary computation 2001 IEEE service center.

6.V. Tandon, 2000- Closing the gap between CAD/CAM and optimized CNC end milling.

7. A. Carlisle and G. Dozier, 2001- An off-the-shelf PSO, Proceedings of the Workshop on Particle Swarm Optimization.

8. Dorigo M, Birattari M, Stutzle T., 2006- Ant colony optimization – IEEE Journals & Magazine [Internet].

9. Holden N. P. and Freitas A. A., 2007- A Hybrid Pso/Aco Algorithm for Classification, GECCO Workshop on Particle Swarms.

10. Gambardella L, Dorigo M., 2000- An Ant Colony System Hybridized with a New Local Search for the Sequntial Ordering Problem| INFORMS Journal on Computing [Internet].

11. D. Oliva, R. Ibrahim, 2019- Improved salp swarm algorithm based on particle swarm optimization for feature selection.

12. H. Faris, S. Mirialili, 2018- An efficient binary swarm algorithm with crossover scheme for feature selection problems.

13. G. Sayed, G. Khoriba, 2018- A novel chaotic salp swarm algorithm for global optimization and feature selection.

14. J. Kennedy, K. C. Eberhart and Y. Shi, 2019- Swarm intelligence.

15. Springer, 2020- Article Slap Swarm Algorithm: a comprehensive survey.

16. H. Liu, G. Zhou, 2009- Minimum Spanning Tree Problem Research Based on Genetic Algorithm.

17. Saimanvitha, 2021- Weighted Sum Method, Multi Criteria Decision Making.

18. Sahiti Kappagantula, 2015- How To Create A Perfect Dicision Tree? .

19. H. Habash,2021- تطوير منهجية جديدة لبناء شجرة القرار باستخدام طريقة هجينة تعتمد على الخوارزمية الجينية وخوارزمية النمل.

العـــوادم المـــرافقـــة والحـــدود المبـــاشـــرة

إيمان الخوجة[1] حمزة حاكمي[2] هلا حسن مستو[3]

الملخص

نعلم أن المودولات الجزئية لمودول ما تلعب دوراً مهماً في دراسة المودول ذاته ومعرفة بعضاً من خصائصه وخصائص حلقة الإندومورفيزمات له. في هذه الورقة العلمية درسنا الدور الذي تلعبه العوادم والعوادم المرافقة للمودولات الجزئية لمودول ما وذلك عندما تكون حدوداً مباشرةً. حيث أثبتنا أن حلقة الإندومورفيزمات لمودول ما تكون منتظمة عندما وفقط عندما يكون عادم النواة لأي تشاكل لهذا المودول والعادم المرافق للصورة المباشرة لأي تشاكل لهذا المودول حدوداً مباشرة في حلقة الإندومورفيزمات.

كما أثبتنا أن حلقة الإندومورفيزمات لمودول ما تكون شبه جامدة وأن أساس جاكبسون لها يساوي الصفر عندما وفقط عندما يكون عادم النواة لأي تشاكل لهذا المودول والعادم المرافق للصورة المباشرة لأي تشاكل لهذا المودول تحوي حدوداً مباشرة في حلقة الإندومورفيزمات.

إضافة لذلك، أثبتنا أن حلقة الإندومورفيزمات لمودول نصف إسقاطي تكون منتظمة عندما وفقط عندما يكون العادم المرافق للصورة المباشرة لأي تشاكل لهذا المودول حداً مباشراً في حلقة الإندومورفيزمات. كما أن حلقة الإندومورفيزمات لمودول نصف أفقي تكون منتظمة عندما وفقط عندما يكون العادم لنواة أي تشاكل لهذا المودول حداً مباشراً في حلقة الإندومورفيزمات.

الكلمات المفتاحية. الحلقة المنتظمة، الحلقة شبه الجامدة، العادم، العادم المرافق، المودول نصف الإسقاطي (نصف الأفقي).

رقم التصنيف العالمي للعام 2020: 16D10, 16D40, 16D80, 16D99.

[1] أستاذ مساعد قسم الرياضيات كلية العلوم جامعة البعث.

[2] أستاذ قسم الرياضيات كلية العلوم جامعة دمشق.

[3] طالب دراسات عليا قسم الرياضيات كلية العلوم جامعة البعث.

A DUAL AHHILILATORS AND DIRECT SUMMANDS

Eaman Al-Khouja[1] **Hamza Hakmi**[2] **Halla Hassan Msto**[3]

Abstract

The submodules of some module played an important role in studying the module itself and knowing some of its properties and the properties of its endomorphism ring.

In this scientific paper we study the role which play the annihilator and dual annihilator of submodules of some module, that when there are direct summands.

We proved the endomorphism ring of some module is regular if and only if the annihilator of the kernel and the dual annihilator of image every endomorphism of this module, are direct summands in it.

Also, we proved that the endomorphism ring of some module is semi-potent with zero Jacobson radical if and only if the annihilator of kernel and the dual annihilator of image every endomorphism contains direct summands of it is.

Furthermore, we proved that the endomorphism ring of semi-projective module is regular if and only if the dual annihilator of image every endomorphism is direct summands in it.

In addition to that, we proved that the endomorphism ring of semi-injective module is regular if and only if the annihilator of kernel every endomorphism is direct summands in it.

Key Words: Regular ring, Semi-potent ring, Annihilator, Dual annihilator, Semi-projective module, Semi-injective module.

2020 **Mathematical Subject Classification:** 16D10,16D40,16D80,16D99.

[1] Professor, Department of Mathematics Al-Baath University.

[2] Professor, Department of Mathematics Damascus University.

[3] Department of Mathematics Al-Baath University.

المقـــــدمـــــة.

منذ ظهور مفهوم المودول لعبت المودولات الجزئية فيه دوراً مهماً في تحديد طبيعة وخواص هذا المودول. فضلاً عن ذلك، إن لبعض المودولات الجزئية لمودول ما دوراً كبيراً في تحديد طبيعة وخصائص حلقة الإندومورفيزمات لهذا المودول.

فعلى سبيل المثال، إذا كانت جميع المودولات الجزئية لمودول ما حدوداً مباشرة، فإن هذا المودول يكون نصف بسيط وتكون حلقة الإندومورفيزمات له منتظمة، [1]. أيضاً إذا كانت (المودولات الجزئية) الصورة المباشرة والنواة لأي تشاكل لمودول ما، حدوداً مباشرة فإن حلقة الإندومورفيزمات لهذا المودول تكون منتظمة، [3]. كذلك إذا كانت (المودولات الجزئية) الصورة المباشرة والنواة لأي تشاكل لمودول ما، تحوي حداً مباشراً فإن حلقة الإندومورفيزمات لهذا المودول تكون شبه جامدة وأساس جاكبسون لها معدوم، [5].

في هذه الورقة العلمية درسنا تأثير العوادم والعوادم المرافقة للمودولات الجزئية لمودول ما في حلقة الإندومورفيزمات لمودول ما وذلك عندما تكون هذه العوادم ومرافقاتها حدوداً مباشرة. وقد تبين لنا أن العوادم والعوادم المرافقة للمودولات الجزئية لمودول ما لها ذات التأثير الذي تقوم به المودولات الجزئية وذلك في حالة كون المودولات الجزئية حدوداً مباشرة أو تحوي حدوداً مباشرة مغايرة للصفر أو تكون محتواه في حدود مباشرة تختلف عن المودول ذاته.

فعلى سبيل المثال، أثبتنا أن حلقة الإندومورفيزمات لمودول ما تكون منتظمة عندما وفقط عندما يكون عادم النواة لأي تشاكل لهذا المودول والعادم المرافق للصورة المباشرة لأي تشاكل لهذا المودول حدوداً مباشرة في حلقة الإندومورفيزمات.

فضلاً عن ذلك، أوجدنا عدداً من الشروط اللازمة والكافية كي تكون حلقة الإندومورفيزمات لمودول ما منتظمة، شبه جامدة من خلال العوادم والعوادم المرافقة لبعض المودولات الجزئية للمودول.

الهـــدف مـــن البحـــــث.

نعلم أن المودولات الجزئية لمودول ما تلعب دوراً مهماً في دراسة المودول ذاته. إن الهدف من هذا البحث هو معرفة الدور الذي تلعبه العوادم والعوادم المرافقة للمودولات الجزئية لمودول ما. وقد تبين لنا أن العوادم والعوادم المرافقة للمودولات الجزئية لمودول ما لها ذات التأثير الذي تقوم به المودولات الجزئية وذلك في حالة كون المودولات الجزئية حدوداً مباشرة أو تحوي حدوداً مباشرة مغايرة للصفر أو تكون محتواة في حدود مباشرة تختلف عن المودول ذاته.

1 – الـــدراســـــة المـــرجعيـــــة.

جميع الحلقات R التي سندرسها هي حلقات واحدية فيها $1 \neq 0$ والمودولات فوق هذه الحلقات هي مودولات يمينية لأجل أي مودول M فوق R سنرمز لحلقة الإندومورفيزمات للمودول M بالشكل $S = End_R(M)$.

1−1. نسمي تقاطع جميع المثاليات اليسارية (اليمينية) الأعظمية في الحلقة R بأساس جاكبسون للحلقة R ونرمز له $J(R)$، [8].

1−2. نقول عن الحلقة R إنها منتظمة إذا كان لأجل كل عنصر $a \in R$ يوجد عنصر $b \in R$ يحقق $a = aba$، [3].

1−3. نقول عن الحلقة R إنها شبه جامدة إذا كان كل عنصر $a \in R$، $a \notin J(R)$، يوجد عنصر مغاير للصفر $b \in R$ يحقق $b = bab$، [5].

1−4. لتكن R حلقة. نقول عن العنصر $e \in R$ إنه جامد إذا كان $e^2 = e$، [1].

1−5. ليكن M مودولاً و U مودولاً جزئياً في M. إن المجموعة:

$$\ell_S(U) = \{\alpha : \alpha \in S; \alpha(U) = 0\}$$

تشكل مثالياً يسارياً في الحلقة S يسمى العادم للمودول الجزئي U في S، [1].

1−6. ليكن M مودولاً و U مودولاً جزئياً في M. إن المجموعة:

$$D_S(U) = \{\alpha : \alpha \in S; \alpha(M) \subseteq U\}$$

تشكل مثالياً يمينياً في الحلقة S يسمى العادم المرافق للمودول الجزئي U في S، [4].

1-7. ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. نقول عن المودول M إنه نصف إسقاطي إذا كان لأجل $g \in S$ فإن $hom_R(M, Im(g)) = gS$، [9].

1-9. ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. نقول عن المودول M إنه نصف أفقي إذا كان لأجل $g \in S$ فإن $\ell_S(Ker(g)) = Sg$، [2].

تمهيديـــــة 1-1 [1].

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و X, Y مودولين جزئيين في M و $S = End_R(M)$. عندئذ القضايا الآتية صحيحة:

1 - إذا كان $X \subseteq Y$ فإن $\ell_S(Y) \subseteq \ell_S(X)$.

2 - $\ell_S(X+Y) = \ell_S(X) \cap \ell_S(Y)$ وأن $\ell_S(X) + \ell_S(Y) \subseteq \ell_S(X \cap Y)$.

3 - $\ell_S(X) \cap \ell_S(Y) \subseteq \ell_S(X \cap Y)$.

تمهيديـــــة 1-2 [4].

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و X, Y مودولين جزئيين في M و $S = End_R(M)$. عندئذ القضايا الآتية صحيحة:

1- إذا كان $X \subseteq Y$ فإن $D_S(X) \subseteq D_S(Y)$.

2- $D_S(X \cap Y) = D_S(X) \cap D_S(Y)$ وأن $D_S(X) \cap D_S(Y) \subseteq D_S(X+Y)$.

3- $D_S(X) + D_S(Y) \subseteq D_S(X+Y)$.

مبرهنـة 1-3 [7].

ليكن M_R مودولاً وليكن $\alpha \in S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - يوجد $\beta \in S$ بحيث يكون $\alpha = \alpha\beta\alpha$.

2 - كل من $Ker(\alpha), Im(\alpha)$ هو حد مباشر في M.

مبرهنـــة 1-4 [6].

ليكن M مودولاً فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ أياً كان $\alpha, \beta \in S$ فإن القضيتين الآتيتين صحيحتان:

1 - $Im(\alpha - \alpha\beta\alpha) = Im(\alpha) \cap Im(1_N - \alpha\beta)$.

2 - $Ker(\alpha - \alpha\beta\alpha) = Ker(\alpha) + Ker(1_M - \beta\alpha)$.

2 – الـدراســـة البحثيـــة.

تمهيديـــة 2-1.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. إذا كانت الحلقة S منتظمة، عندئذ أياً كان $g \in S$ فإن كلاً من $D_S(Im(g))$ و $\ell_S(Ker(g))$ حد مباشر في S.

البرهـــان.

لنفرض أن الحلقة S منتظمة وليكن $g \in S$، عندئذ يوجد $h \in S$ بحيث $g = ghg$.

لنضع $e = gh$ و $e' = hg$ فنجد أن $e, e' \in S$ عناصر جامدة في S وبحسب التمهيدية (2-1) نجد أن:

$$D_S(Im(g)) = D_S(Im(ghg)) \subseteq D_S(Im(gh)) = D_S(Im(e))$$

$$D_S(Im(e)) = D_S(Im(gh)) \subseteq D_S(Im(g))$$

ومنه نجد أن $eS = D_S(Im(g)) = D_S(Im(e))$، أي إن $D_S(Im(g))$ حد مباشر في S. من جهة أخرى، لما كان $Ker(hg) \subseteq Ker(ghg)$ فإنه بحسب التمهيدية (1-2) نجد أن:

$$\ell_S(Ker(g)) = \ell_S(Ker(ghg)) \subseteq \ell_S(Ker(hg)) = \ell_S(Ker(e'))$$

ولما كان $Ker(g) \subseteq Ker(hg)$ نجد أن:

$$\ell_S(Ker(e')) = \ell_S(Ker(hg)) \subseteq \ell_S(Ker(g))$$

ومنه نجد أن $\ell_S(Ker(e')) = \ell_S(Ker(e))$ وبالتالي فإن:

$$\ell_S(Ker(g)) = \ell_S(Ker(e')) = Se'$$

أي إن $\ell_S(Kerg))$ حد مباشر في S.

مبرهنـــــة 2-2.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - الحلقة S منتظمة.

2 - أياً كان $g \in S$ فإن كلاً من $D_S(Im(g))$ و $\ell_S(Ker(g))$ حد مباشر في S.

البرهـــــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. ينتج مباشرة من التمهيدية (2-1).

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $g \in S$ ولنفرض أن كلاً من $D_S(Im(g))$ و $\ell_S(Ker(g))$ حد مباشر في S، عندئذ يوجد عنصران جامدان $e, e' \in S$ بحيث $D_S(Im(g)) = eS$ وأن $\ell_S(Ker(g)) = Se'$. لما كان $D_S(Im(g)) = eS$ نجد أن $e \in D_S(Im(g))$ ومنه فإن $Im(e) \subseteq Im(g)$. أيضاً لما كان $g \in D_S(Im(g))$ نجد أن $g \in eS$ وبالتالي يوجد $\alpha \in S$ بحيث $g = e\alpha$ ومنه $Im(g) \subseteq Im(e)$ وهكذا فإن $Im(g) = Im(e)$، أي إن $Im(g)$ حد مباشر في M. أيضاً لما كان $\ell_S(Ker(g)) = Se'$ نجد أن $e' \in \ell_S(Ker(g))$ ومنه $e'(Ker(g)) = 0$ وبالتالي يكون $Ker(g) \subseteq Ker(e')$. أيضاً لما كان $g \in \ell_S(Ker(g))$ نجد أن $g \in Se'$ وبالتالي يوجد $\beta \in S$ بحيث إن $g = \beta e'$ ومنه فإن $Ker(e') \subseteq Ker(g)$ وهذا يبين أن $Ker(g) = Ker(e')$ أي إن $Ker(g)$ حد مباشر في M. مما سبق وبحسب المبرهنة (1-3) نجد أن الحلقة S منتظمة.

تمهيديـــــة 2-3.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. إذا كانت الحلقة S شبه جامدة، عندئذ لأجل كل $g \in S$ بحيث إن $g \notin J(S)$ فإن كل من $D_S(Im(g))$ و $\ell_S(Ker(g))$ يحوي حداً مباشراً للحلقة S.

البرهـــــان.

لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة وليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $f \in S$ بحيث $f = fgf$. لنضع $e = gf$ و $e' = fg$ فنجد أن $e, e' \in S$ عنصران جامدان مغايران للصفر في S ولما كان $Im(e) \subseteq Im(g)$ فإنه بحسب

التمهيدية(1−2) نجد أن $D_S(Im(e)) \subseteq D_S(Im(g))$ ومنه فإن $D_S(Im(e)) = eS$ وبالتالي فإن $eS \subseteq D_S(Im(g))$، أي إن $D_S(Im(g))$ يحوي حداً مباشراً للحلقة S. أيضاً لما كان $Ker(g) \subseteq Ker(e')$ نجد بحسب التمهيدية (1−1) أن:

$$\ell_S(Ker(e')) \subseteq \ell_S(Ker(g))$$

ولما كان $\ell_S(Ker(e')) = Se'$ نجد أن $Se' \subseteq \ell_S(Ker(g))$، أي إن $\ell_S(Ker(g))$ يحوي حداً مباشراً للحلقة S.

مبرهنـــــة 2−4.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشروط الآتية متكافئة:

1 − الحلقة S شبه جامدة.

2 − أياً كان $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد عنصر مغاير للصفر $\lambda \in S$ بحيث إن كلاً من $D_S(Im(\lambda g))$ و $\ell_S(Ker(\lambda g))$ هو حد مباشر في S.

3 − أياً كان $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد عنصر مغاير للضفر $\mu \in S$ بحيث إن كلاً من $D_S(Im(g\mu))$ و $\ell_S(Ker(g\mu))$ هو حد مباشر في S.

البرهـــــان.

(1) $\Leftarrow$ (2). لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة وليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\lambda \in S$ بحيث $\lambda = \lambda g \lambda$. لنضع $e = \lambda g$ فنجد أن $e \in S$ عنصر جامد مغاير للصفر في S وأن $\ell_S(Ker(\lambda g)) = \ell_S(Ker(e))$ ولما كان $\ell_S(Ker(e)) = Se$، نجد أن $\ell_S(Ker(\lambda g))$ حد مباشر في S. كما أن:

$$D_S(Im(\lambda g)) = D_S(Im(e))$$

ولما كان $D_S(Im(e)) = eS$ نجد أن $D_S(Im(\lambda g))$ حد مباشر في S.

(2) $\Leftarrow$ (1). ليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ بحسب الفرض يوجد عنصر مغاير للصفر $\lambda \in S$ بحيث إن كلاً من $D_S(Im(\lambda g))$و $\ell_S(Ker(\lambda g))$ حد مباشر في S. ومنه يوجد عنصران جامدان مغايران للصفر $e, e' \in S$بحيث إن $D_S(Im(\lambda g)) = e'S$ وأن $\ell_S(Ker(\lambda g)) = Se$. لما كان $\ell_S(Ker(e)) = Se$ نجد $e \in \ell_S(Ker(\lambda g))$

ومنه فإن $e(Ker(\lambda g))=0$ وبالتالي فإن $Ker(\lambda g)\subseteq Ker(e)$. فضلاً عن ذلك، لما كان $\lambda g\in \ell_S(Ker(\lambda g))$ فإنه يوجد $\alpha\in S$ بحيث $\lambda g=\alpha e$ ومنه فإن:

$$Ker(\lambda g)=Ker(e)$$

أي إن $Ker(\lambda g)$ حد مباشر في M . أيضاً لما كان $D_S(Im(\lambda g))=e'S$ نجد أن $e'\in D_S(Im(\lambda g))$ ومنه فإن $Im(e)\subseteq Im(\lambda g)$. فضلاً عن ذلك، لما كان $\lambda g\in D_S(Im(\lambda g))$ يوجد $\beta\in S$ بحيث $\lambda g=e'\beta$ ومنه $Im(\lambda g)\subseteq Im(e')$ وهكذا نجد $Im(\lambda g)=Im(e')$ ، أي إن $Im(\lambda g)$ حد مباشر في M وبحسب المبرهنة (1−3) فإنه يوجد $f\in S$ بحيث إن $\lambda g=(\lambda g)f(\lambda g)$. لنضع $h=f(\lambda g)f$ فنجد أن $h\in S$ وأن $hgh=(f\lambda gf)g(f\lambda gf)=f(\lambda gf\lambda g)f=f\lambda gf=h$ ومنه نجد أن الحلقة S شبه جامدة. $(1)\Leftrightarrow(3)$. يبرهن بطريقة مشابهة.

مبرهنـــــة 2−5.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S=End_R(M)$. عندئذ الشروط الآتية متكافئة:

1 − الحلقة S شبه جامدة.

2 − لأجل كل $\alpha\in S$ بحيث إن $\alpha\notin J(S)$ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta\in S$ يحقق أن $D_S(Im(\beta))\cap D_S(Im(1-\beta\alpha))=0$.

3 − لأجل كل $\alpha\in S$ بحيث إن $\alpha\notin J(S)$ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta\in S$ يحقق أن $\ell_S(Ker(\beta))\cap \ell_S(Ker(1-\alpha\beta))=0$.

البرهـــــان.

$(1)\Leftarrow(2)$. لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة ولـيكن $\alpha\in S$ بحيث إن $\alpha\notin J(S)$ ، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta\in S$ يحقق أن $\beta=\beta\alpha\beta$. وبحسب المبرهنة (1−4) يكون لدينا $Im(\beta)\cap Im(1-\beta\alpha)=Im(\beta-\beta\alpha\beta)$. ولما كان $\beta=\beta\alpha\beta$ نجد أن $Im(\beta)\cap Im(1-\beta\alpha)=0$. وبحسب التمهيدية (1−2) نجد أن:

$$D_S(Im(\beta))\cap D_S(Im(1-\beta\alpha))=$$
$$=D_S(Im(\beta)\cap Im(1-\beta\alpha))=D_S(0)=0$$

(2)$\Leftarrow$(1). ليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $D_S(Im(\beta)) \cap D_S(Im(1-\beta\alpha)) = 0$

وبحسب التمهيدية (1−2) نجد أن:

$$D_S(Im(\beta) \cap Im(1-\beta\alpha)) =$$
$$= D_S(Im(\beta)) \cap D_S(Im(1-\beta\alpha)) = 0$$

وبالتالي يكون $D_S(Im(\beta) \cap Im(1-\beta\alpha)) = 0$. وبحسب المبرهنة (1−4) نجد أن:

$$Im(\beta) \cap Im(1-\beta\alpha) = Im(\beta - \beta\alpha\beta)$$

ومنه فإن $D_S(Im(\beta - \beta\alpha\beta)) = 0$ ولما كان $\beta - \beta\alpha\beta \in D_S(Im(\beta - \beta\alpha\beta))$ نجد أن $\beta - \beta\alpha\beta = 0$ ومنه فإن $\beta = \beta\alpha\beta$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

(1)$\Leftarrow$(3). لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة وليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $\beta = \beta\alpha\beta$. وبحسب المبرهنة (1−4) يكون لدينا $Ker(\beta - \beta\alpha\beta) = Ker(\beta) + Ker(1-\alpha\beta)$ ولما كان $\beta = \beta\alpha\beta$ نجد أن $Ker(\beta) + Ker(1-\alpha\beta) = Ker(0) = M$ ومنه يكون:

$$\ell_S(Ker(\beta) + Ker(1-\alpha\beta)) = \ell_S(M)$$

وبحسب التمهيدية (1−1) نجد أن $\ell_S(Ker(\beta)) \cap \ell_S(Ker(1-\alpha\beta)) = 0$.

(3)$\Leftarrow$(1). ليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$، عندئذ بحسب الفرض يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $\ell_S(Ker(\beta)) \cap \ell_S(Ker(1-\alpha\beta)) = 0$. وحسب التمهيدية (1−1) نجد أن $\ell_S(Ker(\beta) \cap Ker(1-\alpha\beta)) = 0$ ولما كان حسب المبرهنة (1−4) أن $Ker(\beta - \beta\alpha\beta) = Ker(\beta) + Ker(1-\alpha\beta)$ نجد أن $\ell_S(Ker(\beta - \beta\alpha\beta)) = 0$ ولما كان $\beta - \beta\alpha\beta \in \ell_S(Ker(\beta - \beta\alpha\beta))$ نجد $\beta - \beta\alpha\beta = 0$ ومنه فإن $\beta = \beta\alpha\beta$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

مبرهنـــــة 2-6.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشروط الآتية متكافئة:

1 – الحلقة S شبه جامدة.

2 – لأجل كل $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$ بوجد $\beta \in S$ وأن $\beta \neq 0$ يحقق أن $D_S(Im(1-\alpha\beta))$ حد مباشر في S .

3 – لأجل كل $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$ بوجد $\gamma \in S$ وأن $\gamma \neq 0$ يحقق أن $D_S(Im(1-\gamma\alpha))$ حد مباشر في S .

البرهـــــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة وليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$ ، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $\beta = \beta\alpha\beta$. لنفرض أن $e = \alpha\beta$ فنجد أن $e \in S$ عنصر جامد مغاير للصفر، ومنه فإن $Im(1-\alpha\beta) = Im(1-e)$ حد مباشر للمودول M ومنه نجد أن:

$$D_S(Im(1-\alpha\beta)) = D_S(Im(1-e)) = (1-e)S$$

وهذا يبين أن $D_S(Im(1-\alpha\beta))$ حد مباشر في S .

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$ ، عندئذ بحسب الفرض يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $D_S(Im(1-\alpha\beta))$ حد مباشر في S . ومنه يوجد عنصر جامد مغاير للصفر $e \in S$ بحيث $D_S(Im(1-\alpha\beta)) = eS$. ولما كان $1-\alpha\beta \in D_S(Im(1-\alpha\beta))$ نجد أن $1-\alpha\beta \in eS$ وبالتالي يوجد $\lambda \in S$ بحيث $1-\alpha\beta = e\lambda$ ومنه فإن $e(1-\alpha\beta) = e(e\lambda) = e\lambda = 1-\alpha\beta$ ومنه فإن $1-e = \alpha\beta - e\alpha\beta$ ، أي إن $1-e = \alpha\beta(1-e)$ ومنه $\beta(1-e) = \beta(1-e)\alpha\beta$ وأن $\beta(1-e) = \beta(1-e)\alpha\beta(1-e)$. لنضع $g = \beta(1-e)$ فنجد أن $g \in S$ عنصر مغاير للصفر وأن $g = g\alpha g$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

$(1) \Leftrightarrow (3)$. يبرهن بطريقة مشابهة.

مبرهنـــــة 2-7.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشروط الآتية متكافئة:

1 - الحلقة S شبه جامدة.

2 - لأجـل كـل $\alpha \in S$ بحيـث إن $\alpha \notin J(S)$ بوجـد $\beta \in S$ وأن $\beta \neq 0$ يحقـق أن $\ell_S(Ker(1-\alpha\beta))$ حد مباشر في S.

3 - لأجـل كـل $\alpha \in S$ بحيـث إن $\alpha \notin J(S)$ بوجـد $\gamma \in S$ وأن $\gamma \neq 0$ يحقـق أن $\ell_S(Ker(1-\gamma\alpha))$ حد مباشر في S.

البرهـــــان.

(1) $\Leftarrow$ (2). لنفرض أن الحلقـة S شـبه جامـدة ولـيكن $\alpha \in S$ بحيـث إن $\alpha \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $\beta \in S$ يحقق أن $\beta = \beta\alpha\beta$. لنفرض أن $e = \alpha\beta$ فنجد أن $e \in S$ عنصر جامد مغاير للصفر، ومنه فإن $Ker(1-\alpha\beta) = Ker(1-e)$ حد مباشر للمودول M ومنه فإن $\ell_S(Ker(1-\alpha\beta)) = \ell_S(Ker(1-e))$ ولما كان $1-e \in S$ عنصراً جامداً نجد أن $\ell_S(Ker(1-e)) = Se$ ومنه يكون:

$$\ell_S(Ker(1-\alpha\beta)) = S(1-e)$$

وهذا يبين أن $\ell_S(Ker(1-\alpha\beta))$ حد مباشر في S.

(2) $\Leftarrow$ (1). ليكن $\alpha \in S$ بحيث إن $\alpha \notin J(S)$، عندئذ بحسب الفرض يوجد عنصر مغـاير للصـفر $\beta \in S$ يحقق أن $\ell_S(Ker(1-\alpha\beta))$ حـد مباشـر فـي S. ومنـه يوجـد عنصـر جامـد مغـاير للصـفر $e \in S$ بحيـث $\ell_S(Ker(1-\alpha\beta)) = Se$. ولمـا كـان $1-\alpha\beta \in \ell_S(Ker(1-\alpha\beta))$ نجـد أن $1-\alpha\beta \in Se$ وبالتـالي يوجـد $\lambda \in S$ بحيـث $1-\alpha\beta = \lambda e$ ومنه فإن:

$$e - e\alpha\beta = (\lambda e)e = \lambda e = 1-\alpha\beta$$

وبالتالي يكون $1-e = \alpha\beta - e\alpha\beta$، أي إن $1-e = \alpha\beta(1-e)$ وبالتالي يكون:

$$1-e = (1-e)\alpha\beta(1-e)$$

$$\beta(1-e) = \beta(1-e)\alpha\beta(1-e)$$

لنضع $g = \beta(1-e)$ فنجد أن $g \in S$ عنصر مغاير للصفر وأن $g = g\alpha g$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة. (1) $\Leftrightarrow$ (3). يبرهن بطريقة مشابهة.

تمهيديـــة 2-8.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - المودول M نصف إسقاطي.

2 - لأجل كل $\alpha, \beta \in S$ بحيث $D_S(Im(\alpha)) \subseteq D_S(Im(\beta))$ فإن $\alpha S \subseteq \beta S$.

البرهـــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. لنفرض أن المودول M نصف إسقاطي وليكن $\alpha, \beta \in S$ بحيث إن:

$$D_S(Im(\alpha)) \subseteq D_S(Im(\beta))$$

عندئذ فإن $hom_R(M, Im(\alpha)) \subseteq hom_R(M, Im(\beta))$ ومنه نجد أن $\alpha S \subseteq \beta S$.

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $\alpha : M \to M$ تشاكلاً غامراً للمودول M وليكن $\beta : M \to M$ تشاكلاً للمودول M يحقق $Im(\beta) \subseteq Im(\alpha)$ ، عندئذ حسب التمهيدية (2-1) نجد أن $D_S(Im(\beta)) \subseteq D_S(Im(\alpha))$ وبحسب الفرض نجد أن $\beta S \subseteq \alpha S$ ومنه يوجد عنصر $\lambda \in S$ بحيث $\beta = \alpha\lambda$ وهذا يبين أن المودول M نصف إسقاطي.

مبرهنـــــة 2-9.

ليكن M مودولاً نصف إسقاطياً فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - الحلقة S منتظمة.

2 - لأجل كل $g \in S$ فإن $D_S(Im(g))$ حد مباشر في S .

البرهـــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. ينتج مباشرة من التمهيدية (2-8).

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $g \in S$ ، عندئذ حسب الفرض فإن $D_S(Im(g))$ حد مباشر في S وبالتالي يوجد عنصر جامد $e \in S$ بحيث إن $D_S(Im(g)) = eS$. ولما كان المودول M نصف إسقاطي نجد أن $D_S(Im(g)) = hom_R(M, Im(g)) = gS$ ومنه فإن $eS = gS$ وبالتالي يوجد $\lambda, \mu \in S$ بحيث إن $g = e\lambda, e = g\mu$ ومنه فإن:

$$g = e\lambda = e(e\lambda) = g\mu g$$

وهذا يبين أن الحلقة S منتظمة.

مبرهنـــــة 2-10.

ليكن M مودولاً نصف إسقاطي فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - الحلقة S شبه جامدة.

2 - لأجل كل $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد $\lambda \in S$ بحيث إن $D_S(Im(\lambda g))$ حد مباشر في S وأن $\lambda \neq 0$.

3 - لأجل كل $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد $\mu \in S$ بحيث إن $D_S(Im(g\mu))$ حد مباشر في S وأن $\mu \neq 0$.

البرهـــــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. ينتج مباشرة من التمهيدية (2-3).

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ حسب الفرض يوجد $\lambda \in S$ بحيث إن $D_S(Im(\lambda g))$ حد مباشر في S وأن $\lambda \neq 0$. ومنه يوجد عنصر جامد $e \in S$ بحيث إن $D_S(Im(\lambda g)) = eS$. ولما كان المودول M نصف إسقاطي نجد أن $D_S(Im(\lambda g)) = (\lambda g)S$ ومنه نجد أن $(\lambda g)S = eS$ وبالتالي يوجد $\alpha, \beta \in S$ بحيث إن $e = (\lambda g)\alpha$ وأن $\lambda g = e\beta$ وبالتالي فإن:

$$\lambda g = e\beta = e(e\beta) = (\lambda g)\alpha(\lambda g)$$

لنضع $h = \alpha\lambda g\alpha\lambda$ فنجد أن $h \in S$ وأن:

$$hgh = (\alpha\lambda g\alpha\lambda)g(\alpha\lambda g\alpha\lambda) = \alpha(\lambda g\alpha\lambda g)\alpha\lambda = \alpha\lambda g\alpha\lambda = h$$

وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

$(1) \Leftrightarrow (3)$. يبرهن بطريقة مشابهة.

مبرهنـــــة 2-11.

ليكن M مودولاً نصف إسقاطي فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - الحلقة S شبه جامدة.

2 – لأجل كل $g \in S$ بحيث إن $g \notin J(S)$ فإن $D_S(Im(g))$ يحوي حداً مباشراً مغايراً للصفر للحلقة S.

البرهـــــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة. وليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $f \in S$ يحقق أن $f = fgf$. لنضع $e = gf$ فنجد أن $e \in S$ عنصر جامد مغاير للصفر وأن $Im(e) = Im(gf) \subseteq Im(g)$ وبحسب التمهيدية (2-1) نجد أن $D_S(Im(e)) \subseteq D_S(Im(g))$ ولما كان $e \in S$ عنصراً جامداً مغايراً للصفر ومنه نجد أن $D_S(Im(e)) = eS$ ومنه فإن $eS \subseteq D_S(Im(g))$ وأن eS حد مباشر مغاير للصفر للحلقة S.

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$، عندئذ حسب الفرض يوجد عنصر جامد مغاير للصفر $e \in S$ بحيث إن $eS \subseteq D_S(Im(g))$. ومنه فإن $Im(e) \subseteq Im(g)$ وبالتالي يكون:

$$hom_R(M, Im(e)) \subseteq hom_R(M, Im(g))$$

ولما كان المودول M نصف إسقاطي نجد أن $eS \subseteq gS$ وبالتالي يوجد $\lambda \in S$ بحيث إن $e = g\lambda$ ومنه يكون $e = eg\lambda e$ وأن $\lambda e = (\lambda e)g(\lambda e)$. لنفرض أن $f = \lambda e$ فنجد أن $f \in S$ عنصر مغاير للصفر وأن $f = fgf$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

تمهيديـــة 2-12.

ليكن M مودولاً فوق حلقة R و $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 – المودول M نصف أفقي.

2 – أياً كان $\alpha, \beta \in S$ بحيث $\ell_S(Ker(\alpha)) \subseteq \ell_S(Ker(\beta))$ فإن $S\alpha \subseteq S\beta$.

البرهـــــان.

$(1) \Leftarrow (2)$. لنفرض أن المودول M نصف أفقي وليكن $\alpha, \beta \in S$ بحيث إن:

$$\ell_S(Ker(\alpha)) \subseteq \ell_S(Ker(\beta))$$

عندئذ فإن $S\alpha \subseteq S\beta$.

(2)$\Leftarrow$(1). ليكن $\alpha : M \to M$ تشاكلاً متبايناً للمودول M وليكن $\beta : M \to M$ تشاكلاً آخر للمودول M، عندئذ فإن $Ker(\alpha) \subseteq Ker(\beta)$ وبحسب التمهيدية (1−1) نجد أن $\ell_S(Ker(\alpha)) \subseteq \ell_S(Ker(\beta))$ وبحسب الفرض نجد أن $S\alpha \subseteq S\beta$ ومنه يوجد عنصر $\lambda \in S$ بحيث $\beta = \lambda\alpha$ وهذا يبين أن المودول M نصف أفقي.

مبرهنـــــة 2−13.

ليكن M مودولاً نصف أفقياً فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 − الحلقة S منتظمة.

2 − لأجل كل $g \in S$ فإن $\ell_S(Ker(g))$ حد مباشر في S.

البرهـــان.

(1)$\Leftarrow$(2). ينتج مباشرة من التمهيدية (2−1).

(2)$\Leftarrow$(1). ليكن $g \in S$، عندئذ حسب الفرض فإن $\ell_S(Ker(g))$ حد مباشر في S وبالتالي يوجد عنصر جامد $e \in S$ بحيث إن $\ell_S(Ker(g)) = Se$. ولما كان المودول M نصف أفقي نجد أن $\ell_S(Ker(g)) = Sg$ ومنه فإن $Se = Sg$ وبالتالي يوجد $\lambda, \mu \in S$ بحيث إن $g = \lambda e, e = \mu g$ ومنه فإن $g = \lambda e = (\lambda e)e = g\mu g$ وهذا يبين أن الحلقة S منتظمة.

مبرهنـــــة 2−14.

ليكن M مودولاً نصف أفقي فوق حلقة R وأن $S = End_R(M)$. عندئذ الشروط الآتية متكافئة:

1 − الحلقة S شبه جامدة.

2 − لأجل كل $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد $\lambda \in S$ بحيث إن $\ell_S(Ker(\lambda g))$ حد مباشر في S وأن $\lambda \neq 0$.

3 − لأجل كل $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ يوجد $\mu \in S$ بحيث إن $\ell_S(Ker(g\mu))$ حد مباشر في S وأن $\mu \neq 0$.

البرهـــــان.

$(1)\Leftarrow(2)$. ينتج مباشرة من التمهيدية (2-3).

$(2)\Leftarrow(1)$. ليكن $g\in S$ بحيث $g\notin J(S)$ ، عندئذ حسب الفرض يوجد عنصر $\lambda\in S$ بحيث إن $\ell_S(Ker(\lambda g))$ حد مباشر في S وأن $\lambda\neq 0$. ومنه يوجد عنصر جامد $e\in S$ بحيث إن $\ell_S(Ker(\lambda g))=Se$. ولما كان المودول M نصف أفقي نجد أن $\ell_S(Ker(\lambda g))=S(\lambda g)$ ومنه نجد أن $S(\lambda g)=Se$ وبالتالي يوجد $\alpha,\beta\in S$ بحيث إن $e=\alpha(\lambda g)$ وأن $\lambda g=\beta e$ وبالتالي فإن:

$$\lambda g=\beta e=(\beta e)e=(\lambda g)\alpha(\lambda g)$$

لنضع $h=\lambda g$ فنجد أن $h\in S$ عنصر مغاير للصفر وأن $hgh=h$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

$(1)\Leftrightarrow(3)$. يبرهن بطريقة مشابهة.

مبرهنـــــة 2-15.

ليكن M مودولاً نصف أفقي فوق حلقة R وأن $S=End_R(M)$. عندئذ الشرطان الآتيان متكافئان:

1 - الحلقة S شبه جامدة.

2 - لأجل كل $g\in S$ بحيث إن $g\notin J(S)$ فإن $\ell_S(Ker(g))$ يحوي حداً مباشراً مغايراً للصفر للحلقة S .

البرهـــــان.

$(1)\Leftarrow(2)$. لنفرض أن الحلقة S شبه جامدة. وليكن $g\in S$ بحيث إن $g\notin J(S)$ ، عندئذ يوجد عنصر مغاير للصفر $f\in S$ يحقق أن $f=fgf$. لنضع $e=fg$ فنجد أن $e\in S$ عنصر جامد مغاير للصفر وأن $Ker(g)\subseteq Ker(fg)=Ker(e)$ وبحسب التمهيدية (1-1) نجد أن $\ell_S(Ker(e))\subseteq\ell_S(Ker(g))$ ولما كان $e\in S$ عنصراً جامداً مغايراً للصفر نجد أن $\ell_S(Ker(e))=Se$ ومنه فإن $Se\subseteq\ell_S(Ker(g))$ وأن Se حد مباشر مغاير للصفر للحلقة S .

$(2) \Leftarrow (1)$. ليكن $g \in S$ بحيث $g \notin J(S)$ ، عندئذ حسب الفرض يوجد عنصر جامد مغاير للصفر $e \in S$ بحيث إن $Se \subseteq \ell_S(Ker(g))$. ومنه فإن $Ker(g) \subseteq Ker(e)$ وبالتالي يكون $\ell_S(Ker(e)) \subseteq \ell_S(Ker(g))$ ولما كان المودول M نصف أفقي نجد أن $Se \subseteq Sg$ وبالتالي يوجد $\lambda \in S$ بحيث إن $e = \lambda g$ ومنه يكون $e = e\lambda ge$ وأن $e\lambda = (e\lambda)g(e\lambda)$. لنفرض أن $f = e\lambda$ فنجد أن $f \in S$ عنصر مغاير للصفر وأن $f = fgf$ وهذا يبين أن الحلقة S شبه جامدة.

المـراجـــع العـــلميـــــة.

[1] – Anderson, F. W.and Fuller, K. R., " Rings and Categories of Modules ", New York. Springer (1973).

[2] – Amini, B, and Ershad, M. Sharif, H., " Co-retractable Modules ", J. Aust. Math. Soc., 86,. (2009), 289 – 304.

[3] – Goodearl, K. R., " Von Neumann Regular Rings ", Pitman 1979 .

[4] – Haghany, A., and Vedadi, M.R., " Study of semi-projective retractable modules ", Algebra Colloq., (3) 14 (2007), 489-496.

[5] – Hamza, H. " I_0 – Rings and I_0 – Modules ", Math. J. Okayama Univ. Vol. 40, (1998), p. 91 – 97.

[6] – Hamza, H., " Semi M-Projective and Semi N-Injective Modules ", Kyungpook J. Math. 56 (2016), pp. 83 – 94.

[7] – Kasch, F. " Modules and Rings ", London Math. Soc. Mono. 1982.

[8] – Lambek, J. " Lectures on Rings and Modules ", Blaisdell, Mass. 1966.

[9] – Tansee, H., and Wongwai, S., " A note on Semi-projective Modules ", Kyungpook J. Math. Vol. 42. (2002). 369 – 380.