

MOLEKULLARIN BİRELEKTRONLU XASSƏLƏRİNİN TƏDQIQINDƏ ÖRTMƏ İNTEQRALLARININ ROLU

Demirtaş E.T., Paşayev F.H., Həsənov A.Q.

Bakı Dövlət Universiteti

ecemnurdemirtash@gmail.com

Molekulların müxtəlif xassələrini nəzəri tədqiq etmək üçün molekulun tam dalğa funksiyası məlum olmalıdır. Asılı olmayan elektronlar modelinə əsasən çoxelektronlu sistemlərin, o cümlədən, molekulların tam dalğa funksiyası determinant şəklindədir. Bu funksiya həm antisimmetriya şərtini, həm də Pauli prinsipini ödəyir. Determinant dalğa funksiyasının hər bir elementi birelektronlu dalğa funksiyalarıdır və molekulyar spin orbitalları adlanır. Spin-orbital qarşılıqlı təsiri zəif olduqda molekulyar spin orbitallar U_i molekulyar orbitallar ilə elektronun $U_{m_s}(\sigma)$ spin funksiyalarının hasili şəklində axtarılır.

İşdə molekulların birelektronlu xassələrinin – elektronların nüvələr ilə qarşılıqlı təsir enerjisinin və elektronların kinetik enejisinin hesablanmasında örtmə integrallarının rolu öyrənilmişdir. Determinant dalğa funksiyaları ilə simmetrik skalyar operatorun matris elementlərinin hesablanması teoremindən istifadə etdikdə molekullarda elektronların nüvələr ilə qarşılıqlı təsir enerjisi və elektronların kinetik enerjiləri U_i molekulyar orbitallar daxil olan integrallar ilə ifadə olunur. U_i molekulyar orbitallar molekullar üçün Xatri-Fok-Rutan tənliklərinin həllindən tapılır. Onlar molekuldakı atomların məlum atom orbitallarının xətti kombinasiyası şəklində ifadə olunur. İşdə atom orbitalları kimi eksponensial xarakterli $\chi_{nlm}(\xi, r)$ [1] Sleyter funksiyaları götürülmüşdür. Bu funksiyalar ikiatomlu molekullar halında yaxşı nəticələr verir. Birelektronlu xassələr hesablanarkən integralaltı ifadələrdə $\frac{1}{r}$ və $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \nabla_{\theta, \varphi}^2$ operatorlarının $\chi_{nlm}(\xi, r)$ funksiyalarına təsirləri yaranır. $\frac{1}{r}$ və ∇^2 operatorlarının Sleyter funksiyalarına təsirləri aşağıdakı kimidir: [1]

$$\frac{1}{r} \chi_{nlm}(\xi, r) = \frac{(2\xi)^{n+\frac{1}{2}}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-2} e^{-\xi r} S_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{2\xi}{\sqrt{2n(2n-1)}} (n-1, l, m) \quad (1)$$

$$-\frac{1}{2} \nabla^2 \chi_{nlm}(\xi, r) = -\frac{1}{2} \xi^2 \left[\frac{4(n+l)(n-l-1)}{[2n(2n-1)(2n-2)(2n-3)]^{1/2}} (n-2, l, m) - 2 \left(\frac{2n}{2n-1} \right)^{1/2} (n-1, l, m) + (nlm) \right] \quad (2)$$

(1) və (2) ifadələrindən istifadə etdikdə molekullarda elektronların nüvələr ilə qarşılıqlı təsir enerjisi və elektronların kinetik enerjisi Sleyter atom orbitalları daxil olan örtmə integralları ilə ifadə olunurlar. Bu da qeyd olunan kəmiyyətlərin hesablanmasını sadələşdirir. Örtmə integrallarını hesablamaq üçün ədəbiyyatda mövcud olan analitik ifadələrdən istifadə etmək olar [2,3]. Bu ifadələr əsasında örtmə integrallarını hesablamaq üçün atom orbitallarının baş, orbital və maqnit kvant ədədlərinin qiymətlərini, Sleyter funksiyalarının

eksponensial parametrlərinin qiymətlərini, molekuldakı atom nüvələrinin molekulyar koordinat sistemində Dekart koordinatlarını, atom orbitallarının hansı atoma aid olduğunu bildirən mərkəzin növü parametrlərinin qiymətlərini bilmək tələb olunur.

Ədəbiyyat:

1. Paşayev F.H., Həsənov A.Q. (2013). Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar, Bakı, 123 s.
2. Pashaev F.G., (2009). Use of Filter-Steinborn B and Guseinov auxiliary functions in evaluation of two-center overlap integrals over Slater type orbitals. J. Math. Chem., 45, 884-890.
3. Gasanov A.G., Pashaev F.G. (2016). The computer program for the study of nanoparticles in basis of Slater atomic orbitals. Romanian J. Inform. Sei. Technol., 19 (4), 331-337.