

AÇIQ ELEKTRON TƏBƏQƏLİ İKIATOMLU MOLEKULLARIN SPEKTROSKOPİK PARAMETRLƏRİNİN HESABLANMASI

F. H. Paşayev, A. Q. Həsənov, D. B. Bayramova

Bakı Dövlət Universitet

E-mail: gasanovarzuman@mail.ru, nanomaterials@bsu.az

Molekulların müxtəlif parametrlərini onların həndəsi quruluşu və rəqs-fırlanma spektrlərinə aid təcrübi faktlar əsasında hesablamaq olar. Lakin belə faktlar bir çox hallarda kifayət qədər etibarlı olmurlar. Ona görə də molekulların müxtəlif parametrlərinin kvant mexanikası metodları əsasında nəzəri öyrənilməsinin böyük əhəmiyyəti vardır. İşdə açıq elektron təbəqəli ikiatomlu molekulların spektroskopik parametrlərinin Xartri-Fok-Rutan (XFR) metodu ilə hesablanması məsələsinə baxılır.

Məlumdur ki, ikiatomlu molekulların spektroskopik parametrlərini hesablamaq üçün molekulun potensial funksiyasını, yəni tam elektron enerjisinin nüvələrarası məsafədən asılılığının analitik ifadəsini bilmək lazımdır [1].

Sərbəst elektronlar modelinə əsasən molekulun halı determinant dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Qapalı elektron təbəqəli molekulların halı bir determinant dalğa funksiyası ilə, açıq elektron təbəqəli molekulların halı isə bir neçə determinant dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Hesablamalar HeH , BeN , CH və NH molekulları üçün aparılmışdır. Bu molekulların elektron konfigurasiyaları

$$HeH : 1\sigma^2 2\sigma^2$$

$$BeH : 1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^1$$

$$CH : 1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^1$$

$$NH : 1\sigma^2 2\sigma^2 3\sigma^2 1\pi^2$$

şəklindədir: σ -orbitallarda ən çoxu 2, π -orbitallarda isə ən çoxu 4 elektron yerləşə bilər, yəni qeyd olunan konfigurasiyalar açıq elektron təbəqəlidir. Bu konfigurasiyalar, uyğun olaraq, 2, 2, 4 və 6 determinant dalğa funksiyası ilə təsvir olunur. Determinant dalğa funksiyaları məlum olarsa, molekulların müxtəlif parametrlərini, o cümlədən, spektroskopik parametrlərinin qiymətlərini hesablamaq olar.

İşdə qeyd olunan molekullar üçün XFR tənlikləri həll olunaraq dalğa funksiyaları tapılmış, molekulların tam elektron enerjiləri nüvələrarası məsafənin müxtəlif qiymətlərində hesablanmış və tam elektron enerjisinin nüvələrarası məsafədən asılılıq cədvəli qurulmuşdur. Bu cədvəllərə ən kiçik kvadratlar metodu [2] tətbiq olunmaqla HeH , BeN , CH və NH molekullarının potensial funksiyaları tapılmışdır. Potensial funksiyaların analitik ifadələrindən istifadə etməklə HeH , BeN , CH və NH molekullarının spektroskopik parametrləri - ω_e (harmonik rəqslərin tezliyi), $\omega_e x_e$ (anharmonikli), Be (fırlanma sabiti), α_e (rəqs-fırlanma qarşılıqlı təsir sabiti) və K_e (güc sabiti) hesablanmışdır. Hesablamaların nəticələri aşağıdakı cədvəldə verilmişdir. Cədvəldə həm də qeyd olunan molekulların nüvələrarası tarazlıq məsafəsinin qiymətləri və bu qiymətə uyğun tam elektron enerjisi də verilmişdir.

Cədvəl 1.

HeH, BeH, CH və NH molekullarının spektroskopik parametrlərinin qiymətləri

Molekullar	R_e (a.v.)	E (a.v.)	ω_e (sm^{-1})	$\omega_e x_e$ (sm^{-1})	B_e (sm^{-1})	α_e (sm^{-1})	$10^{-5} K_e$ (dn.sm ⁻¹)
HeH	4,45	-3,349925	1290,856217	3,763679	7,195805	0,000626	0,790230

BeH	2,75	-15,130587	2398,723094	8,778151	17,331694	0,004987	3,072250
CH	2,50	-38,164025	2127,241775	10,450318	35,291708	0,105245	2,478593
NH	2,25	-54,761976	2554,867742	12,646719	173,563046	0,640294	3,615286

ƏDƏBİYYAT

- [1] S. Fraga, B.J. Ransil, Studies of molecular structure, J. Chem. Phys. **35**, 669 (1961).
[2] Д. Мак-Кракен, У. Дорн, Численные методы и программирование на фортране, М., Мир, 584 с., 1977.