

**ÇOXELEKTRONLU ATOMLARIN ELEKTROSTATİK POTENSİALI VƏ  
ELEKTRON SİXLİĞİNİN RADİAL PAYLANMASI**

**S.Ə.AXUNDOV, F.H.PAŞAYEV, H.S.AXUNDOV, A.Q.HƏSƏNOV**

*Bakı Dövlət Universiteti*  
*ahasanov2003@hotmail.com*

*İşdə Puasson tənliyindən istifadə edərək çoxelektronlu atomların ( $Z > 20$ ) elektrostatik potensialı və elektron sıxlığının radial paylanması üçün analitik ifadələr alınmışdır. Bu ifadələr əsasında sərhəd şərtləri araşdırılmış və xüsusi hal kimi sıra nömrəsi  $Z=20$  və  $40$  atomlar üçün kompyuter hesablamaları aparılmışdır. Bu hesablamalar əsasında çoxelektronlu atomların elektron sıxlığının yaratdığı elektrostatik potensial və elektron sıxlığının radial paylanmasının, onların fərqlərinin və nisbətinin qrafikləri qurulmuşdur.*

Elektronoqrafiyada quruluş amplitudunun nəzəri hesablanması üçün atomun elektrostatik potensialının analitik ifadəsi məlum olmalıdır. Bu məqsədlə atomun ( $Z > 20$ ) elektrostatik potensialının Tomas-Fermi tənliyinin müəyyən sərhəd şərtləri ilə həllindən alınan riyazi ifadələrindən atom və quruluş amplitudunu hesablamaq üçün seçim aparılır. Elektron şüası üçün seçim meyarı atom amplitudunun ədədi qiymətləri olan ümum məlum cədvəldir [1]. Bu cədvəl yarımpirik riyazi ifadə əsasında tərtib olunmuşdur. Buna baxmayaraq nazik təbəqələrin quruluşunun müasir elektronoqrafik tətbiqində bu cədvəldən istifadə olunur. İşdə atomun elektrostatik potensialının Tomas-Fermi [2] tənliyinin həllindən alınmış

$$\varphi_{1a}(Z, r) = \frac{Ze}{r} \Phi_1(x) \quad (1)$$

riyazi ifadəsi və Tomas-Fermi tənliyinə ekvivalent olan Eyler-Laqranj tənliyinin həllindən [3] alınmış

$$\varphi_{2a}(Z, r) = \frac{Ze}{r} \Phi_2(x) \quad (2)$$

ifadələrindən istifadə etməklə atomun elektron sıxlığının yaratdığı potensial üçün analitik ifadə alınmışdır. (1) və (2)-dəki  $\Phi_1(x)$  və  $\Phi_2(x)$  funksiyaları aşağıdakı kimi aşkar analitik ifadələrə malikdirlər [2, 3]:

$$\Phi_1(x) = \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-\lambda_i x} \quad (3)$$

$$\Phi_2(x) = \sum_{n=1}^3 a_n e^{-b_n x} \quad (4)$$

Burada  $x = \frac{r}{a_0}$  və  $a_0 = 0,529 \text{ \AA}$  -hidrogen atomunda birinci Bor orbitinin radiusudur.  $a_n$  -müəyyən sabit ədədlərdir.  $\gamma_i, \lambda_i, b_n$  -Z -dən asılı dəyişənlərdir.

$$\gamma_{j,i} := \sum_{n=0}^4 c_{j,n} \cdot (\ln(Z_i))^n \quad \lambda_{j,i} := \sum_{n=0}^4 d_{j,n} \cdot (\ln(Z_i))^n$$

$$c := \begin{pmatrix} 0.01266712 & -0.0261047 & 0.0214184 & -0.00235686 & 0.0000210672 \\ 0.0580612 & 0.0293077 & 0.0857135 & -0.0223372 & 0.00164675 \\ 0.927968 & -0.00164643 & -0.107685 & 0.0247998 & -0.00167822 \end{pmatrix}$$

$$d := \begin{pmatrix} 164.564 & -152.192 & 62.3879 & -11.5005 & 0.808424 \\ 11.3060 & -6.31902 & 2.02526 & -0.370738 & 0.0261151 \\ 1.48219 & -0.0557601 & 0.0164387 & -0.00439703 & 0.000997275 \end{pmatrix}$$

$$a_0 := 0.5057 \quad a_1 := 0.4109 \quad a_2 := 0.0835$$

$$b_{0,i} := 0.395 \cdot (Z_i)^{\frac{1}{3}} \quad b_{1,i} := 2.076 \cdot (Z_i)^{\frac{1}{3}} \quad b_{2,i} := 3.757 \cdot (Z_i)^{\frac{1}{3}}$$

(3) və (4)-dən istifadə etsək görünər ki,  $x=0$  olduqda  $\frac{\varphi_{1a}}{\varphi_{2a}}$  nisbəti vahidə

bərabər olur, bu da  $\varphi_{2a}$  -nin  $\varphi_{1a}$  -ya riyazi ekvivalent olduğunu göstərir.

Məlumdur ki, Puasson tənliyi kürəvi simmetriyaya malik və sıra nömrəsi  $Z$  olan ixtiyari atom üçün aşağıdakı kimi ifadə olunur [1]:

$$\nabla^2 \varphi_a(Z, r) = -4\pi[\rho_n(Z, r) - \rho_e(Z, r)]. \quad (5)$$

Aydındır ki, atomun  $\varphi_a(Z, r)$  elektrostatik potensialını

$$\varphi_a(Z, r) = \varphi_n(Z, r) - \varphi_e(Z, r) \quad (6)$$

kimi yazmaq olar. Onda (5) tənliyini

$$\nabla^2 \varphi_n(Z, r) + 4\pi\rho_n(Z, r) = \nabla^2 \varphi_e(Z, r) + 4\pi\rho_e(Z, r) \quad (7)$$

şəklinə salmaq olar. Bu tənlikdə  $\varphi_n(Z, r)$  atom nüvəsinin ondan  $r$  məsafədə yaratdığı potensialdır (başqa sözlə desək  $Ze$  nöqtəvi yükünün ondan  $r$  məsafədə yaratdığı elektrostatik potensialdır). Yəni  $\varphi_n(z, r) = \frac{Ze}{r}$ .  $\nabla^2$  operatorunun sferik

koordinatlardakı ifadəsi ilə  $\frac{Ze}{r}$  -ə təsir edərək  $\nabla^2 \varphi_n(z, r) = 0$  alarıq.  $\rho_n(Z, e) = 0$

olur.  $r = 0$  nöqtəsi praktik olaraq izolə oluna bilər. Ona görə də (7) tənliyi

$$\nabla^2 \varphi_e(Z, r) + 4\pi\rho_e(Z, r) = 0 \quad (8)$$

şəklində yazıla bilər. (6), (1) və (2)-dən istifadə etməklə (8) tənliyinin həllərini

aşağıdakı kimi axtaraq:

$$\varphi_{1e}(Z, r) = \frac{Ze}{r} [1 - \Phi_1(x)] \quad (9)$$

$$\varphi_{2e}(Z, r) = \frac{Ze}{r} [1 - \Phi_2(x)]. \quad (10)$$

(3) və (4) -ü (9) və (10) -da nəzərə alaq:

$$\varphi_{1e}(Z, r) = \frac{Ze}{r} \left[ 1 - \sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-\lambda_i x} \right] \quad (11)$$

$$\varphi_{2e}(Z, r) = \frac{Ze}{r} \left[ 1 - \sum_{n=1}^3 a_n e^{-b_n x} \right]. \quad (12)$$

$\varphi_{1e}(Z, r)$  və  $\varphi_{2e}(Z, r)$  potensialları  $r \rightarrow 0$  və  $r \rightarrow \infty$  sərhəd şərtlərini ödəyən həllərdir. Doğrudan da  $r \rightarrow 0$   $\sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-\lambda_i x} \rightarrow 1$  və  $\sum_{n=1}^3 a_n e^{-b_n x} \rightarrow 1$  (çünki

$\sum_{i=1}^3 \gamma_i = 1$  və  $\sum_{n=1}^3 a_n = 1$ ). Onda  $\varphi_{1e}(Z, r) \rightarrow 0$  və  $\varphi_{2e}(Z, r) \rightarrow 0$  olar, başqa sözlə nüvənin yaxın ətrafında elektron sıxlığının yaratdığı elektrostatik potensial sıfıra bərabər olur.  $r \rightarrow \infty$  isə  $\sum_{i=1}^3 \gamma_i e^{-\lambda_i x}$  və  $\sum_{n=1}^3 a_n e^{-b_n x}$  funksiyaları sıfıra yaxınlaşır. Onda

$$\varphi_{1e}(Z, r) \rightarrow \frac{Ze}{r} \quad \text{və} \quad \varphi_{2e}(Z, r) \rightarrow \frac{Ze}{r}.$$

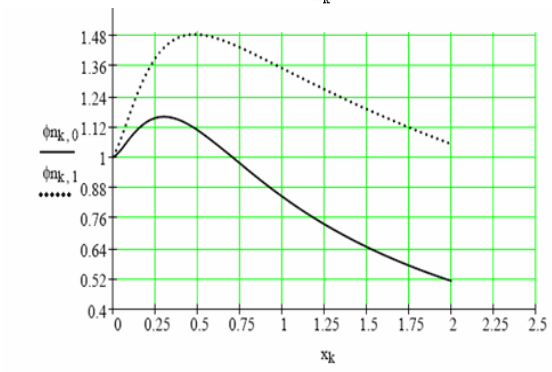
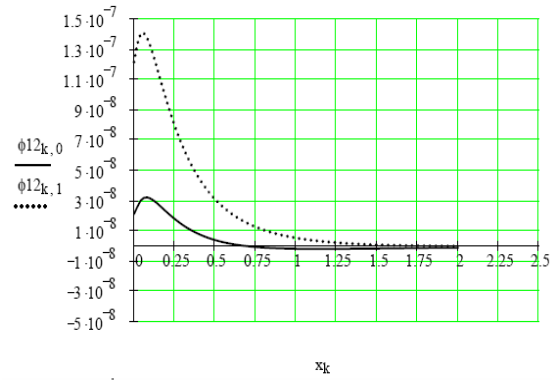
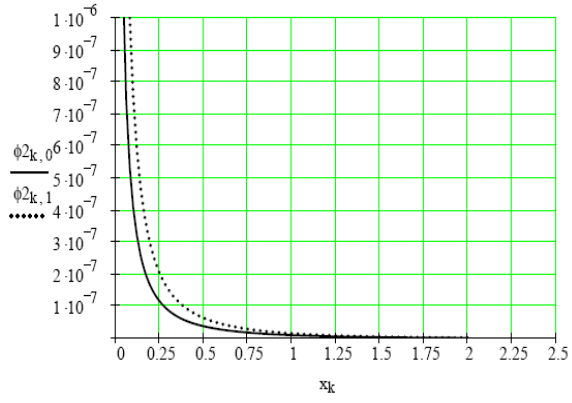
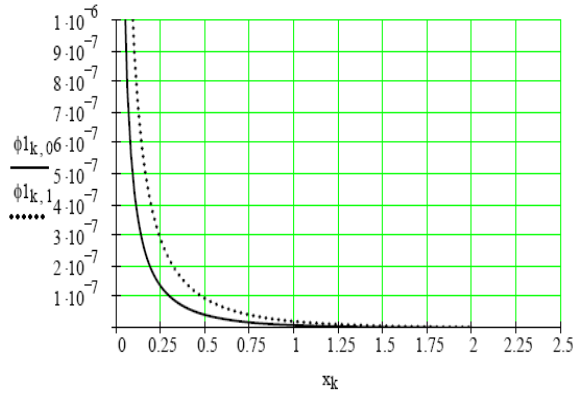
$Z > 20$  olan atomlar üçün (11) və (12) ifadələrini (8) tənliyinin xüsusi həlləri kimi qəbul etsək alarıq:

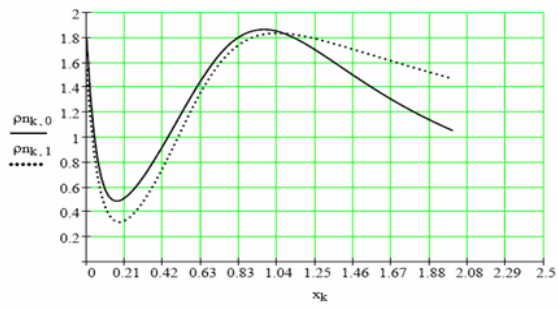
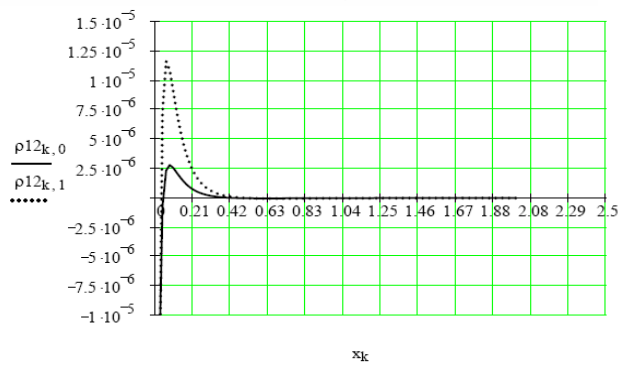
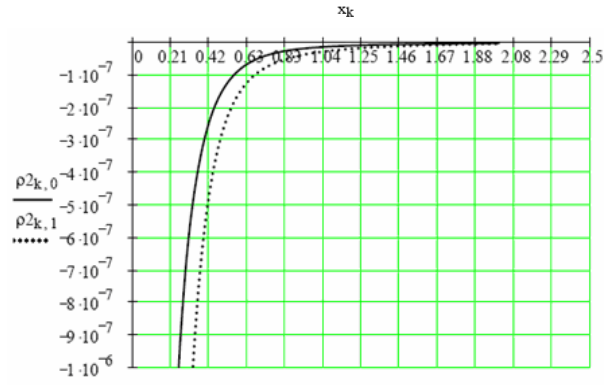
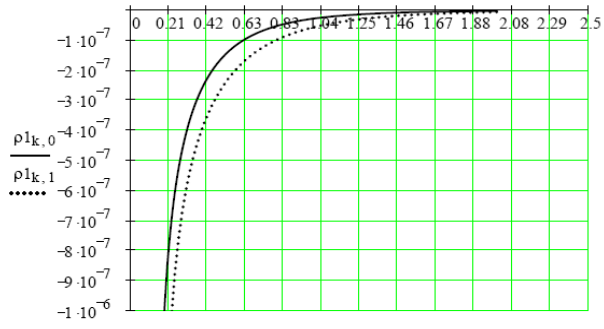
$$\rho_{1e}(Z, x) = \frac{Ze}{4\pi a_0^3 x} \sum_{i=1}^3 \lambda_i^2 \gamma_i e^{-\lambda_i x} \quad (13)$$

$$\rho_{21e}(Z, x) = \frac{Ze}{4\pi a_0^3 x} \sum_{n=1}^3 b_n^2 a_n e^{-b_n x}. \quad (14)$$

Başqa sözlə (11) və (12) (8) tənliyinin xüsusi həlləri olar. Bu şərtlə ki, çoxelektronlu atomun elektron sıxlığı (13) və (14) kimi analitik ifadə olunsun.

Rentgen şüaları ilə quruluş təhlilində elementar özəkdə atom koordinatları atomun elektron sıxlığının maksimal qiymətə malik olduğu nöqtələrdə müəyyən edilir. Bunu nəzərə alaraq işdə (11), (12), (13), və (14) ifadələri əsasında  $\varphi_{1e}(Z, x)$ ,  $\varphi_{2e}(Z, x)$ ,  $\rho_{1e}(Z, x)$  və  $\rho_{2e}(Z, x)$  kəmiyyətləri üçün kompyuter hesablamaları aparılmışdır.  $\varphi_{1e}(Z, x)$  və  $\varphi_{2e}(Z, x)$  potensiallarının, eləcə də  $\rho_{1e}(Z, x)$  və  $\rho_{2e}(Z, x)$  elektron sıxlıqlarının müqayisəli analizini aparmaq üçün  $Z=20$  və  $40$  qiymətləri üçün uyğun qrafiklər qurulmuşdur (qrafiklərdə  $\phi_1 \equiv \varphi_{1e}$ ,  $\phi_2 \equiv \varphi_{2e}$ ,  $\phi_{12} = \varphi_{1e} - \varphi_{2e}$ ,  $\phi_n = \varphi_{1e} / \varphi_{2e}$ ,  $\rho_{12} = \rho_{1e} - \rho_{2e}$ ,  $\rho_n = \rho_{1e} / \rho_{2e}$  işarə olunmuşdur):





(1) və (2) ifadələrinin hər ikisi müəyyən təqribi metodlarla alındığına görə bunlardan hər hansı birinə üstünlük vermək çətinidir. Ancaq quruluş təhlilində intensivliyi qiymətləndirmə metodu – qaralama metodunun özünün xətalı olduğunu nəzərə alsaq, (1) və (2) ifadələrini eynigüclü saymaq olar. Fikrimizcə (4) ifadəsində  $b_n$  -in  $Z$ -dən asılılığı sadə olduğuna görə [4] nəzəri hesablamalarda (2) ifadəsinə üstünlük vermək olar.

#### **ƏDƏBİYYAT**

1. Вайнштейн Б.К. Структурная электронография. М.: АН СССР, 1956, 310 с.
2. Bonham R.A., Strand T.G. Analytical expressions for potentials of neutral Thomas-Fermi-Dirac atoms and for the corresponding atomic scattering factor for X rays and electrons, J. Chemical Phys, 1963, v. 39, № 9, p. 2200-2204.
3. Csavinszky P. Approximate variational solution of the Thomas-Fermi equation for atoms, J. Phys. Rev., 2008, v.166, № 1, p. 53-56.
4. Ахундов И.С., Ахундов С.А., Мурсалов Т.М. Атомные амплитуды для атомов с порядковым номером  $Z=20-90$  // Bakı Universitetinin Xəbərləri. Fizika-riyaziyyat elmləri seriyası, 2003, № 3, s.164-169.

#### **РАДИАЛЬНОЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ И ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ**

**С.А.АХУНДОВ, Ф.Г.ПАШАЕВ, И.С.АХУНДОВ, А.Г.ГАСАНОВ**

#### **РЕЗЮМЕ**

В работе, используя уравнение Пуассона, получены аналитические выражения для радиального распределения электронной плотности и электростатического потенциала многоэлектронных атомом ( $Z > 20$ ). На основе полученных выражений исследованы граничные условия, и как частный случай для атомом с порядковым номером  $Z=20$  и 40, проведены компьютерные вычисления. На основе этих вычислений построены графики электростатического потенциала, созданного электронной плотностью и радиального распределения электронной плотности, их разностей и отношений.

#### **RADIAL DISTRIBUTION OF ELECTRONIC DENSITY AND ELECTROSTATIC POTENTIAL OF MULTIELECTRON ATOMS**

**S.A.AKHUNDOV, F.G.PASHAYEV, H.S.AKHUNDOV, A.G.HASANOV**

#### **SUMMARY**

In the presented paper, analytical expressions for radial distribution of electronic density and electrostatic potential of multielectron atoms ( $Z > 20$ ) are received using Poisson equation. On the basis of the received expressions boundary conditions are investigated and and 40 computer calculations are carried out as a special case for atom with serial number  $Z=20$ . On the basis of these calculations, schedules of the electrostatic potential created on the electronic density and radial distribution of the electronic density, their differences and relations are constructed.