

КОМПЬЮТЕРНЫЙ РАСЧЕТ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ
ПАРАМЕТРОВ СЛЕЙТЕРОВСКИХ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ

Т.Г.АЛИЕВА

Бакинский Государственный Университет

В работе проведен компьютерный расчет экспоненциальных параметров слейтеровских атомных орбиталей и полученные численные значения для основного состояния атомов с порядковым номером $1 \leq Z \leq 36$ представлены в виде таблицы.

Известно, что в настоящее время для проведения квантово-механических расчетов электронной структуры и оптических спектров атомов и молекул методом самосогласованного поля Хартри-Фока-Рутана (метод ССП ХФР) наиболее приемлемым, с физической точки зрения, базисными функциями считаются слейтеровские атомные орбитали, определяемые формулами [1, 2]:

$$\begin{aligned} \chi_{nlm}(\xi, r\theta\varphi) &= R_n(\xi, r) \cdot \begin{cases} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ S_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases} = \\ &= \frac{(2\xi)^{n+1/2}}{\sqrt{(2n)!}} r^{n-1} e^{-\xi r} \cdot \begin{cases} Y_{lm}(\theta, \varphi) \\ S_{lm}(\theta, \varphi) \end{cases}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь n , ℓ , m –главное, орбитальное и магнитное квантовые числа электрона в атоме, соответственно и ℓ -комплексные, $S_{lm}(\theta, \varphi)$ -вещественные сферические функции [3-5]. Экспоненциальный параметр ξ определяется соотношением

$$\xi = \frac{Z - \gamma}{n}, \quad (2)$$

где Z -порядковый номер атома, γ -постоянная экранирования.

Величина γ -должна выбираться так, чтобы наблюдаемые энергии и размеры атомов, наилучшим образом передавались с помощью волновых функций (1). Для определения γ Слейтер установил полуэмпирические правила [1, 2], которые хорошо удовлетворяются лишь для атомов второго

и третьего периодов таблицы Менделеева. Поэтому при больших Z пользоваться правилами Слейтера нецелесообразно.

Кроме правил Слейтера, значения постоянных экранирования γ могут быть найдены также теоретически с помощью метода самосогласованного поля [6, 7], если ξ в функциях Слейтера (1) считается варьируемым параметром. Однако эта процедура является довольно сложной, особенно при больших значениях Z .

Для определения постоянной экранирования γ в [8] предложена также следующая аналитическая формула:

$$\gamma_i = \sum_{j=1}^N \left\{ 1 + \left[\frac{3n_j^2 - \ell_j(\ell_j + 1)}{3n_i^2 - \ell_i(\ell_i + 1)} \right]^2 \right\}^{-3/2} \quad (3)$$

Здесь N - число электронов в атоме, n_k - и ℓ_k - главное и орбитальное квантовые числа k -го электрона, соответственно.

В настоящее время (3) считается наиболее приемлемой формулой для определения параметров ξ_i по соотношению (2). Поэтому табулирование численных значений параметров ξ_i слейтеровских атомных орбиталей (1) представляет определенный практический интерес.

Нами проведены по формулам (2) и (3) компьютерные расчеты параметров ξ_i слейтеровских функций для основных состояний атомов всех элементов периодической системы. В таблице 1 приводятся лишь значения ξ_i для основных состояний атомов с порядковым номером $1 \leq Z \leq 36$.

Таблица 1

Численные значения параметров ξ_i слейтеровских атомных орбиталей (CAO) для атомов с порядковым номером $1 \leq Z \leq 36$, вычисленные по формулам (2) и (3)

CAO Атом	1s	2s	2p	3s	3p	4s	3d	4p
1	2	3	4	5	6	7	8	9
H	1.00000							
He	1.64645							
Li	2.63218	0.58692	0.49011					
Be	3.61791	0.91015	0.85880					
B	4.59419	1.18346	1.35889					
C	5.57046	1.45677	1.68211					
N	6.54674	1.73008	2.00534					
O	7.52301	2.00340	2.32856					
F	8.49928	2.27671	2.65178					

1	2	3	4	5	6	7	8	9
Ne	9.47556	2.55002	2.97501					
Na	10.47421	3.01652	3.45406	0.85418	1.04910			
Mg	11.47286	3.48303	3.93311	1.06966				
Al	12.47117	3.94251	4.40750	1.27131	1.38244			
Si	13.46948	4.40200	4.88188	1.47295	1.59793			
P	14.46779	4.86148	5.35627	1.67460	1.81341			
S	15.46610	5.32096	5.83066	1.87625	2.02889			
Cl	16.46441	5.78045	6.30504	2.07789	2.24437			
Ar	17.46272	6.23993	6.77943	2.27954	2.45986			
K	18.46247	6.73280	7.27519	2.57359	2.76033	1.01146		
Ca	19.46223	7.22567	7.77095	2.86765	3.06081	1.17307		
Sc	20.45940	7.66460	8.23121	3.03704	3.24450	1.23082	3.71557	
Ti	21.45657	8.10354	8.69148	3.20643	3.42819	1.28858	3.93105	
V	22.45374	8.54248	9.15174	3.37582	3.61187	1.34634	4.14653	
Cr	23.44833	8.92748	9.57651	3.42055	3.67877	1.30024	4.26563	
Mn	24.44809	9.42035	10.07227	3.71460	3.97925	1.46185	4.57749	
Fe	25.44526	9.85929	10.53254	3.88399	4.16294	1.51961	4.79298	
Co	26.44243	10.29822	10.99280	4.05338	4.34663	1.57737	5.00846	
Ni	27.43960	10.73716	11.45307	4.22277	4.53031	1.63512	5.22394	
Cu	28.43419	11.12217	11.87784	4.26750	4.59721	1.58902	5.34304	
Zn	29.43395	11.61503	12.37560	4.56156	4.89769	1.75064	5.65491	
Ga	30.43367	12.10699	12.86880	4.85165	5.19473	1.90655	5.96436	2.01482
Ge	31.43339	12.59895	13.36401	5.14175	5.49177	2.06246	6.27382	2.17644
As	32.43312	13.09091	13.85922	5.43185	5.78881	2.21838	6.58328	2.33805
Se	33.43284	13.58287	14.35442	5.72195	6.08585	2.37429	6.89274	2.49966
Br	34.43257	14.07482	14.84963	6.01204	6.38289	2.53020	7.20220	2.66187
Kr	35.43229	14.56678	15.34484	6.30214	6.67993	2.68612	7.51166	2.82288

ЛИТЕРАТУРА

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М., ВШ, 1979, 407 с.
2. Slater J.C. Phys. Rev. 1930, v. 36, p. 57-64.
3. Варшавич Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Л., Наука, 1975, 439 с.
4. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и производных. М., ФМ, 1971, 1108 с.
5. Məsimov E.Ə., Mürsəlov T.M. Atom fizikası, Bakı, 2002, 912 s.
6. Roothaan C.C.J. Rev. Mod. Phys. 1951, v. 23, p. 69-89.
7. Ransil B.J. Rev. Mod. Phys. 1960, v. 32, p. 239-259.
8. Bessis N. and Bessis G. J. Chem. Phys. 1981, v. 74(6), p. 3628-3631.

**SLEYTER ATOM ORBİTALLARININ EKSPONENSİAL
PARAMETRLƏRİNİN KOMPÜTERLƏ HESABLANMASI**

T.H.ƏLİYEVƏ

ANNOTASIYA

İşdə Sleyter atom orbitallarının eksponensial parametrləri kompüterlə hesablanmış və sıra nömrəsi $1 \leq Z \leq 36$ olan atomların əsas halları üçün onların qiymətlər cədvəli verilmişdir.

**COMPUTER CALCULATION OF EXPONENTIAL
PARAMETERS OF SLATER TYPE ATOMIC ORBITALS**

T.H.ALIYEVA

ABSTRACT

In work is carried out the computer calculation of exponential parameters of Slater type atomic orbitals and the received numerical meanings for the basic state of atoms with a serial number $1 \leq Z \leq 36$ are submitted as the table.