

UOT 539.19

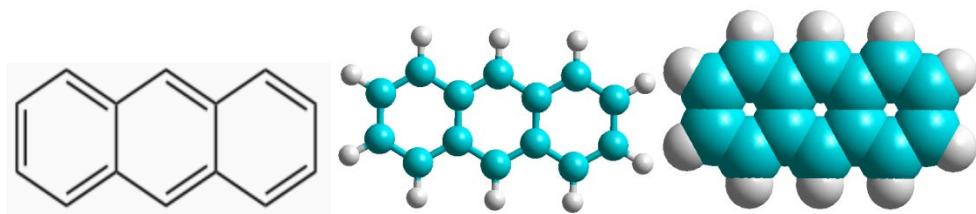
**ANTRASEN MOLEKULUNUN SİMMETRİKLƏŞDİRİLMİŞ
MOLEKULAR ORBITALLARININ VƏ ENERJİ SƏVİYYƏLƏRİNİN
QRUP NƏZƏRİYYƏSİNDƏN İSTİFADƏ EDİLMƏKLƏ TAPILMASI****M.R.VAHABOVA, F.B.ABDULOV, A.Q.HƏSƏNOV***Bakı Dövlət Universiteti**fikret_azeri@box.az*

Təqdim olunan işdə π -elektronlu yaxınlaşmada qrup nəzəriyyəsiindən istifadə olunaraq D_{2h} nöqtəvi qrupuna mənsub antrasen molekulunun simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitalları və enerji səviyyələri tapılmışdır. Bunun üçün π orbitalların çevrilmələrinə baxılmış və gətirilə bilən təsvir qurulmuşdur. Molekul üçün gətirən matris qurulmuş və elementləri hesablanmışdır. $C^{13}H$ oxşarlıq çevrilməsi vasitəsilə molekulun enerji səviyyələri müəyyən olunmuşdur.

Açar sözlər: Antrasen, D_{2h} nöqtəvi qrupu, gətirilə bilən təsvir, gətirilə bilməyən təsvir, gətirən matris

Molekulların fiziki və kimyəvi xassələrinin müasir nəzəriyyəsi çoxelektronlu sistemlərin müxtəlif metodlarla tədqiq olunmasına imkan verən kvant mexanikasının əsasında qurulmuşdur. Belə ki, kvant mexanikasından istifadə etməklə müxtəlif fiziki kəmiyyətləri təyin etmək mümkündür. Bu məqsədlə Şredinger tənliyi həll edilməli və dalğa funksiyası tapılmalıdır. Lakin çoxmərkəzli çoxelektronlu sistemlər üçün Şredinger tənliyi mürəkkəbdir və dəqiq həll edilmir. Bunun üçün müəyyən fiziki model əsasında qurulmuş müxtəlif yaxınlaşma metodlarından istifadə olunur. Əgər molekulyar sistemlər heç olmasa öz tarazlıq fəza konfigurasiyasında bu və ya digər simmetriya xassələrinə malikdirsə, onda qrup nəzəriyyəsiindən istifadə etmək mümkün olur ki, bu halda Şredinger tənliyini həll etmədən molekulyar orbitalları və enerji səviyyələrini təyin etmək mümkün olur.

Təqdim olunan işdə MO LCAO metodunun [1] sadə variantı olan Hükkel metodu əsasında qrup nəzəriyyəsiindən istifadə etməklə antrasen molekulunun simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitalları və enerji səviyyələri tapılmışdır. Antrasen molekulunun həndəsi quruluşu aşağıdakı kimidir [2]:



Şək. 1. Antrasen molekulu

Molekul YOZ müstəvisində yerləşmiş, X oxu şəkil müstəvisinə perpendikulyar olaraq yönəlib. Koordinat başlanğıcı molekulun kütlə mərkəzində yerləşdirilmişdir. $C_{14}H_{10}$ - antrasen molekulu D_{2h} nöqtəvi qrupuna [3,4] mənsubdur. D_{2h} nöqtəvi qrupunun elementləri aşağıdakı kimidir:

I - vahid element

$C_2(x)$ - x oxu ətrafında 180° dönmə

$C_2(y)$ - y oxu ətrafında 180° dönmə

$C_2(z)$ - z oxu ətrafında 180° dönmə

i - inversiya əməliyyatı

σ_{xy} - xoy müstəvisində əksolma

σ_{xz} - xoz müstəvisində əksolma

σ_{yz} - yoz müstəvisində əksolma

Bazis funksiyalar kimi π -orbitallar götürülmüş və D_{2h} qrupunun elementlərinə uyğun bazis funksiyaların çevrilmələrinə baxılmışdır. Simmetriya çevrilmələrinin nəticəsi cədvəl 1-də verilmişdir.

Cədvəl 1

Bazis funksiyaların çevrilməsi

Bazis funksiyaları		Simmetriya elementləri							
		I	$C_2(x)$	$C_2(y)$	$C_2(z)$	i	σ_{xy}	σ_{xz}	σ_{yz}
$C_1(2P_x)$	χ_1	χ_1	χ_5	$-\chi_4$	$-\chi_8$	$-\chi_5$	χ_4	χ_8	$-\chi_1$
$C_2(2P_x)$	χ_2	χ_2	χ_6	$-\chi_3$	$-\chi_7$	$-\chi_6$	χ_3	χ_7	$-\chi_2$
$C_3(2P_x)$	χ_3	χ_3	χ_7	$-\chi_2$	$-\chi_6$	$-\chi_7$	χ_2	χ_6	$-\chi_3$
$C_4(2P_x)$	χ_4	χ_4	χ_8	$-\chi_1$	$-\chi_5$	$-\chi_8$	χ_1	χ_5	$-\chi_4$
$C_5(2P_x)$	χ_5	χ_5	χ_1	$-\chi_8$	$-\chi_4$	$-\chi_1$	χ_8	χ_4	$-\chi_5$
$C_6(2P_x)$	χ_6	χ_6	χ_2	$-\chi_7$	$-\chi_3$	$-\chi_2$	χ_7	χ_3	$-\chi_6$
$C_7(2P_x)$	χ_7	χ_7	χ_3	$-\chi_6$	$-\chi_2$	$-\chi_3$	χ_6	χ_2	$-\chi_7$
$C_8(2P_x)$	χ_8	χ_8	χ_4	$-\chi_5$	$-\chi_1$	$-\chi_4$	χ_5	χ_1	$-\chi_8$
$C_9(2P_x)$	χ_9	χ_9	χ_{10}	$-\chi_{10}$	$-\chi_9$	$-\chi_{10}$	χ_{10}	χ_9	$-\chi_9$
$C_{10}(2P_x)$	χ_{10}	χ_{10}	χ_9	$-\chi_9$	$-\chi_{10}$	$-\chi_9$	χ_9	χ_{10}	$-\chi_{10}$
$C_{11}(2P_x)$	χ_{11}	χ_{11}	χ_{13}	$-\chi_{12}$	$-\chi_{14}$	$-\chi_{13}$	χ_{12}	χ_{14}	$-\chi_{11}$
$C_{12}(2P_x)$	χ_{12}	χ_{12}	χ_{14}	$-\chi_{11}$	$-\chi_{13}$	$-\chi_{14}$	χ_{11}	χ_{13}	$-\chi_{12}$
$C_{13}(2P_x)$	χ_{13}	χ_{13}	χ_{11}	$-\chi_{14}$	$-\chi_{12}$	$-\chi_{11}$	χ_{14}	χ_{12}	$-\chi_{13}$
$C_{14}(2P_x)$	χ_{14}	χ_{14}	χ_{12}	$-\chi_{13}$	$-\chi_{11}$	$-\chi_{12}$	χ_{13}	χ_{11}	$-\chi_{14}$

Çevrilmələrə uyğun matrislərin xarakterləri hesablanmış və nəticələr cədvəl 2-də verilmişdir.

Cədvəl 2

Çevrilmələrə uyğun matrislərin xarakterləri

	I	C ₂ (x)	C ₂ (y)	C ₂ (z)	i	σ _{xy}	σ _{xz}	σ _{yz}
χ(Γ / g)	14	0	0	-2	0	0	2	-14

$$m_i = \frac{1}{N} \sum_g \chi^+(\Gamma_i / g) \chi(\Gamma / g) \quad (1)$$

(1) düsturundan istifadə etməklə simmetriya çevrilmələri nəticəsində qurulmuş və 14 tərtibli matrislər toplusundan ibarət olan gətirilə bilən Γ(g) təsvirinin gətirilə bilməyən təsvirlərlə ifadə olunan düz cəmi hesablanmışdır:

$$\Gamma = 3A_{1u} + 3B_{1g} + 4B_{2g} + 4B_{3u}$$

Bundan istifadə edərək antrasen molekulu üçün gətirən matris qurulmuş və məlum düsturlarla elementləri hesablanmışdır. Gətirən matrisin sütunlarındakı elementlər uyğun simmetriyaya malik olan molekulyar orbitalların MO LCAO metoduna əsasən $U_i = \sum_q c_{qi} \chi_q$ düsturundakı χ_q atom orbitallarının C_{qi}

əmsalları ilə üst-üstə düşür [5]. Bundan istifadə edərək antrasen molekulu üçün molekulyar orbitallar qurulmuşdur. Antrasen molekulu qrup nəzəriyyəsi metodundan istifadə edilməklə tapılmış simmetrikləşdirilmiş molekulyar orbitalları aşağıdakı kimidir:

$$\begin{aligned} U_1 &= \frac{1}{2}(\chi_1 - \chi_4 + \chi_5 - \chi_8) & U_2 &= \frac{1}{2}(\chi_2 - \chi_3 + \chi_6 - \chi_7) \\ U_3 &= \frac{1}{2}(\chi_{11} - \chi_{12} + \chi_{13} - \chi_{14}) & U_4 &= \frac{1}{2}(\chi_1 + \chi_4 - \chi_5 - \chi_8) \\ U_5 &= \frac{1}{2}(\chi_2 + \chi_3 - \chi_6 - \chi_7) & U_6 &= \frac{1}{2}(\chi_{11} + \chi_{12} - \chi_{13} - \chi_{14}) \\ U_7 &= \frac{1}{2}(\chi_1 - \chi_4 - \chi_5 + \chi_8) & U_8 &= \frac{1}{2}(\chi_2 - \chi_3 - \chi_6 + \chi_7) \\ U_9 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_9 - \chi_{10}) & U_{10} &= \frac{1}{2}(\chi_{11} - \chi_{12} - \chi_{13} + \chi_{14}) \\ U_{11} &= \frac{1}{2}(\chi_1 + \chi_4 + \chi_5 + \chi_8) & U_{12} &= \frac{1}{2}(\chi_2 + \chi_3 + \chi_6 + \chi_7) \\ U_{13} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_9 + \chi_{10}) & U_{14} &= \frac{1}{2}(\chi_{11} + \chi_{12} + \chi_{13} + \chi_{14}) \end{aligned}$$

χ_q atom orbitalları [1,5] aşağıdakı ifadə ilə təyin olunur:

Burada n,l,m- kvant ədədləri, ξ -eksponensial parametr, $S_{lm}(\theta, \varphi)$ - həqiqi sferik funksiyasıdır. Antrasen molekulu π -elektron enerji səviyyələrini tapmaq üçün Hückel metoduna əsasən qurulmuş Hamilton operatorunu C

gətirən matrisi vasitəsilə $C^{-1}HC$ oxşarlıq çevrilməsinə uğratmaq lazımdır. C gətirən matrisi unitar matris olduğundan o aşağıdakı şərti ödəyir:

$$C^{-1} = C^+$$

$C^{-1}HC$ oxşarlıq çevrilməsinin nəticəsi cədvəl 3-də verilmişdir.

Cədvəl 3

$C^{-1}HC$ oxşarlıq çevrilməsi

1A _{1u}	2A _{1u}	3A _{1u}	1B _{1g}	2B _{1g}	3B _{1g}	1B _{2g}	2B _{2g}	3B _{2g}	4B _{2g}	1B _{3u}	2B _{3u}	3B _{3u}	4B _{3u}
α	β	β			0								
β	$\alpha - \beta$					0							
β		$\alpha - \beta$											
			α	β	$-\beta$								
			β	$\alpha + \beta$									
			$-\beta$		$\alpha + \beta$								
						α	β		$-\beta$				
						β	$\alpha - \beta$						
								α	$-\sqrt{2}\beta$				
						$-\beta$		$-\sqrt{2}\beta$	$\alpha - \beta$				
										α	β		β
										β	$\alpha + \beta$		
												α	$\sqrt{2}\beta$
										β		$\sqrt{2}\beta$	$\alpha + \beta$

Skalyar kəmiyyətin operatorunun matris elementləri yalnız eyni gətirilə bilməyən təsvirə uyğun funksiyalar üçün sıfırdan fərqlidir:

$$\int \psi_m^{(i)} \cdot \hat{H} \psi_l^{(j)} = const \cdot \delta_{ij}$$

Burada $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, i=j \\ 0, i \neq j \end{cases}$, \hat{H} - operator, i, j -müxtəlif ($i \neq j$) və ya eyni ($i = j$) gətirilə bilməyən təsvirlərə aiddirlər. m, l dalğa funksiyaların nümərəsidir.

Bu matrisin diaqonalı boyunca yerləşən elementlər isə uyğun gətirilə bilməyən təsvirlərə aid olan Hamilton operatorunun məxsusi qiymətləridir.

Antrasen molekulunun π - elektron enerji səviyyələri üçün enerjinin artmasına uyğun ardıcılıqla

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = \alpha + \beta \\ \epsilon_5 = \epsilon_6 = \epsilon_7 = \epsilon_8 = \epsilon_9 = \epsilon_{10} = \alpha \\ \epsilon_{11} = \epsilon_{12} = \epsilon_{13} = \epsilon_{14} = \alpha - \beta \end{aligned}$$

qiymətlərini tapırıq.

Gətirən matrisin ifadəsində sütunların gətirilə bilməyən təsvirlərə uyğunluğuna əsasən bu enerji səviyyələrinin D_{2h} qrupunun baxılan gətirilə bilən təsvirinə daxil olan gətirilə bilməyən təsvirləri üzrə təsnifatı aşağıdakı kimi olar:

$$\begin{aligned} \epsilon_{2B_{1g}} = \epsilon_{3B_{1g}} = \epsilon_{2B_{3u}} = \epsilon_{4B_{3u}} = \alpha + \beta \\ \epsilon_{1A_{1u}} = \epsilon_{1B_{1g}} = \epsilon_{1B_{2g}} = \epsilon_{3B_{2g}} = \epsilon_{1B_{3u}} = \epsilon_{3B_{3u}} = \alpha \end{aligned}$$

$$\varepsilon_{2A_{1u}} = \varepsilon_{2A_{1g}} = \varepsilon_{2B_{2g}} = \varepsilon_{4B_{2g}} = \alpha - \beta$$

ƏDƏBİYYAT

1. Mürsəlov T.M., Qəhrəmanov N.F. Molekul fizikası. SDU-nun mətbəəsi, Sumqayıt, 2006, 346 s.
2. Клар Э. Полициклические углеводороды. М.: Химия, 1971, 456 с.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Физматлит, 2004, 752 с.
4. Поклонский Н.А. Точечные группы симметрии. Минск: БГУ, 2003, 222 с.
5. Vahabova M.R. Qrup nəzəriyyəsi və onun atom-molekul fizikasında tətbiqləri. Bakı: Şirvanəşr, 2009, 200 s.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СИММЕТРИЗОВАННЫХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ОРБИТАЛЕЙ И УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ МОЛЕКУЛЫ АНТРАЦЕНА С ПРИМЕНЕНИЕМ ТЕОРИИ ГРУПП

M.R.VAHABOVA, F.B.ABDULOV, A.G.GASANOV

РЕЗЮМЕ

В представленной работе, с применением теории групп в p – электронном приближении найдены симметризованные молекулярные орбитали и уровни энергии молекулы антрацена, принадлежащей к точечной группе D_{2h} . При этом рассмотрены преобразования p – орбиталей и построены приводимые представления. Рассчитаны элементы приводящих матриц S . С помощью преобразования подобия $C^{-1}HC$ определены уровни энергии рассматриваемой молекулы.

Ключевые слова: антрацен, точечная группа D_{2h} , приводимое представление, неприводимое представление, приводящая матрица.

DETERMINATION OF THE SYMMETRIZED MOLECULAR ORBITALS AND ENERGY LEVELS OF ANTHRACENE MOLECULE BY USE OF GROUP THEORY

M.R.VAHABOVA, F.B.ABDULOV, A.G.GASANOV

SUMMARY

The present work determines the symmetrized molecular orbitals and energy levels of Anthracene molecule which belongs to D_{2h} point group using π electron approach in group theory. For this purpose the transformation of π orbitals has been considered and the reducible representation has been constructed. For the molecule, the resulting matrix has been constructed and the elements of these matrices have been calculated. By using $C^{-1}HC$ similarity transformation the energy levels of these molecules have been determined.

Key words: anthracene, D_{2h} point group, reducible representation, irreducible representation, resulting matrix

Redaksiyaya daxil oldu: 12.08.2012-ci il.

Çapa imzalandı: 20.10.2012-ci il.