УДК 539.19

DOI: 10.17223/00213411/62/5/15

Ф.Г. ПАШАЕВ, А.И. АХМЕДОВ, А.Г. ГАСАНОВ, Д.Б. БАЙРАМОВА, С.Г. РАГИМЗАДЕ, У.Т. АГАЕВА

РАСЧЕТ СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДВУХАТОМНЫХ МОЛЕКУЛ С ОТКРЫТОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБОЛОЧКОЙ

Проведён расчет спектроскопических параметров молекул BeH и CH с открытой электронной оболочкой в базисе слейтеровских функций. Получено аналитическое выражение полной электронной энергии молекул с открытой электронной оболочкой. С помощью метода Хартри – Фока – Рутана была вычислена полная электронная энергия молекулы BeH и CH при семи значениях межъядерного расстояния, включая равновесное межъядерное расстояние. Построена таблица значений полной энергии в зависимости от межъядерного расстояния R . Полная энергия двухатомной молекулы была аппроксимирована в виде многочлена третьей степени от R . Применяя метод наименьших квадратов к данной таблице значений энергии, была получена аналитическая формула полной энергии в зависимости от R для молекул BeH и CH . Аналитическая формула $E(R)$ позволила вычислить спектроскопические параметры ω_e (частота гармонических колебаний), $\omega_e x_e$ (постоянная ангармоничности), B_e (постоянная вращения) и α_e (постоянная взаимодействия колебаний и вращений).

Ключевые слова: спектроскопические параметры, полная энергия, слейтеровские атомные орбитали, детерминантная волновая функция, метод наименьших квадратов.

Известно, что некоторые физические параметры молекул могут быть найдены на основе экспериментальных данных об их геометрических структурах и колебательно-вращательных спектрах, которые в ряде случаев являются недостаточно надежными. Поэтому использование методов квантовой механики при вычислении различных физико-химических параметров, в том числе спектроскопических параметров двухатомных молекул, приобретает большое значение. Теоретическое изучение свойств молекул считается одной из центральных проблем молекулярной физики. Такие исследования, основанные на решениях соответствующих квантово-механических уравнений, позволяют устанавливать свойства молекул, которые трудно, а иногда и невозможно изучать экспериментально. Многие соединения, в том числе радикалы, обладают слишком большой реакционной способностью, поэтому их нельзя изолировать и изучать обычными экспериментальными методами. На основе предварительно вычисленных свойств удалось обнаружить в межзвездном пространстве некоторые радикалы и ионы. Эти частицы обладают очень малым временем жизни в земных лабораторных условиях. Молекулярные свойства таких радикалов можно определить лишь неэмпирическим вычислением. Путем решения уравнения Шредингера для молекул можно определить расположение энергетических уровней, характер распределения электронной плотности и т.д. Однако уравнение Шредингера для молекул точно не решается, его решают приближенными методами. Одним из наиболее плодотворных является метод самосогласованного поля Хартри – Фока – Рутана (ХФР). В этом методе волновая функция молекулы представляется в виде детерминанта, составленного из одноэлектронных молекулярных орбиталей. Молекулярные орбитали ищутся в виде линейной комбинации атомных орбиталей (АО). Коэффициенты АО в молекулярных орбиталях определяются путем решения уравнений ХФР. Тогда средние значения различных физико-химических величин молекулы выражаются через коэффициенты в молекулярных орбиталях и многоцентровые матричные элементы между АО, содержащие соответствующие этим величинам операторы. В литературе расчету спектроскопических параметров двухатомных молекул посвящено много работ [1–4], где в основном исследуются молекулы с замкнутой электронной оболочкой.

В данной работе проводится расчет спектроскопических параметров двухатомных молекул с открытой электронной оболочкой в базисе слейтеровских функций.

Как известно, для вычисления спектроскопических параметров двухатомных молекул требуется аналитическое выражение полной энергии в зависимости от межъядерного расстояния [5]. При квантово-механических расчетах для полной энергии аналитическое выражение не получается. Такие расчеты дают лишь таблицу значений энергии молекулы при различных значениях межъядерного расстояния. Поэтому поставленная задача заключается в нахождении более точного

Уважаемые читатели!

Доступ к полнотекстовой версии журнала
«Известия высших учебных заведений. Физика»
осуществляется на платформе
Научной электронной библиотеки eLIBRARY.RU
на платной основе:

<https://elibrary.ru/contents.asp?titleid=7725>