

УДК 539.19

DOI: 10.17223/00213411/63/3/44

Д.Б. БАЙРАМОВА

КИНЕТИЧЕСКАЯ ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНОВ И ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ АТОМОВ С ОТКРЫТОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ОБОЛОЧКОЙ В БАЗИСЕ СЛЕЙТЕРОВСКИХ ФУНКЦИЙ

С помощью метода Хартри – Фока – Рутана была вычислена кинетическая энергия электронов и потенциальная энергия атома азота с открытой электронной оболочкой в базисе слейтеровских функций. Получено также аналитическое выражение для кинетической и потенциальной энергии атома азота с открытой электронной оболочкой. Методом сложения проекции моментов определены двадцать независимых друг от друга детерминантных волновых функций, соответствующих электронной конфигурации $1s^2 2s^2 2p^3$ атома азота. Полученные результаты для достоверности были проверены с помощью теоремы вириала.

Ключевые слова: электронная конфигурация, кинетическая и потенциальная энергия, слейтеровские атомные орбитали, детерминантная волновая функция.

В работе рассматривается вычисление кинетической энергии электронов и потенциальная энергия атомов с открытой электронной оболочкой. Расчеты проводятся для атома азота N . Электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^3$ атома N вырождена и ей соответствуют двадцать независимых друг от друга детерминантных волновых функций. Эти функции отличаются друг от друга квантовыми числами m_l и m_s электронов в незамкнутой электронной оболочке $2p^3$. Не учитывая замкнутые оболочки, детерминантные волновые функции, как в работе [1, 2], можно представить в следующем виде:

$$U = \frac{1}{\sqrt{7!}} \det \{ \dots (21m_l m_s) (21m'_l m'_s) (21m''_l m''_s) \}. \quad (1)$$

Используя способ сложения проекции моментов определены двадцать независимых друг от друга детерминантных волновых функций, соответствующих электронной конфигурации $1s^2 2s^2 2p^3$ атома N . Эти функции представлены в таблице.

Детерминантные волновые функции атома азота

$M_s \setminus M_L$	$-3/2$	$-2/1$	$2/1$	$3/2$
3	-	-	-	-
2	-	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right); U_{10}$	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210\frac{1}{2}\right); U_1$	-
1	-	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{11}$ $\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right); U_{12}$	$\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right); U_2$ $\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right); U_3$	-
0	$\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{20}$	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{13}$ $\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{14}$ $\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{15}$	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(210\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_4$ $\left(211\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right); U_5$ $\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(210\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right); U_6$	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(210\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right); U_{19}$
-1	-	$\left(211-\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{16}$ $\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right); U_{17}$	$\left(211\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_7$ $(210)\left(21-1\frac{1}{2}\right)\left(210-\frac{1}{2}\right); U_8$	-
-2	-	$\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_{18}$	$\left(210-\frac{1}{2}\right)\left(21-1\frac{1}{2}\right)\left(21-1-\frac{1}{2}\right); U_9$	-

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>