

Çok Elektronlu Atomlar

Öz Uygun Alan (Self-Consistent Field, SCF) Yöntemi

Bu yöntem *Hartree-Fock öz uygun alan (SCF) yöntemi* olarak bilinmektedir.

Bu yönteme göre, N elektronlu bir atomda incelenecek elektron dışında kalan N-1 elektron ile çekirdeğin ortaklaşa küresel simetrik bir elektrik alanı oluşturdukları varsayılmaktadır.

Öz uygun alan adı verilen bu elektriksel alanda seçilen elektronun hareketi kuantum mekaniksel olarak incelenmektedir.

İlk çözümden bulunan dalga fonksiyonları yardımıyla ilk alınana göre daha doğru bir öz uygun alan bulunarak işlemler yinelenmektedir.

Çözümlere elektron dağılımlarını gösteren dalga fonksiyonları ve öz uygun alan değişmeye dek devam edilir.

Bu yoldan bulunan kuramsal sonuçlar ile XRD ve elektron difraksiyonundan bulunan deneysel sonuçların uyuşması elektronlar arasındaki itme potansiyel enerjilerini tümüyle ihmal eden SCF varsayımının doğru olduğunu göstermektedir.

Slater Yöntemi

Bu yönteme göre, Z gerçek çekirdek yükü ve σ *perdeleme sabiti* olmak üzere her elektron için farklı olan Z_e etkin çekirdek yükü kullanılarak aşağıdaki bağıntıdan bulunur.

$$Z_e = Z - \sigma$$

Çok elektronlu bir atomdaki elektrona çekirdeğin etkisinin diğer elektronlar tarafından azaltılmasının bir ölçüsü olan perdeleme sabiti aşağıda sıralanan yarı deneysel *Slater kuralları* uyarında belirlenmektedir.

1. Baş kuantum sayısı incelenen elektronun baş kuantum sayısından büyük olan elektronların perdeleme sabitine katkısı yoktur.
2. Bir s orbitalinde bulunan bir elektronun diğer bir s orbitalinde bulunan elektronun perdeleme sabitine katkısı 0,30; baş kuantum sayıları aynı olan diğer tüm elektronların birbirlerinin perdeleme sabitlerine katkısı ise 0,35'dir.

3. İncelenen elektronun baş kuantum sayısından bir küçük baş kuantum sayısına sahip elektron tabakasındaki her elektronun perdeleme sabitine katkısı s ve p orbital gruplarında bulunanlar için 0,85, d ve f orbital gruplarında bulunanlar için ise 1,00'dir.
4. İncelenen elektronun baş kuantum sayısından iki ve daha küçük baş kuantum sayısına sahip elektron tabakalarındaki her elektronun perdeleme sabitine katkısı 1,00'dir.

Benzer şekilde genellikle tam sayı olmayan n_e **etkin baş kuantum sayısı** hesaplanmaktadır.

Hidrojen atomu ve benzeri iyonlar için bulunan dalga fonksiyonlarında gerçek çekirdek yükü yerine etkin çekirdek yükü, gerçek baş kuantum sayısı yerine etkin baş kuantum sayısı alınarak **Slater orbitalleri** adı verilen normalize edilmemiş dalga fonksiyonları aşağıdaki genel formüle göre yazılır.

$$\Psi_{n_e, l, m_l} = r^{-n_e-1} e^{-\frac{Z_{nl}}{n_e} r} Y_l^{m_l}(\theta, \phi)$$

Kartezyen koordinatlar ile küresel kutupsal koordinatlar arasındaki

$$x = r \sin \theta \cos \phi$$

$$y = r \sin \theta \sin \phi$$

$$z = r \cos \theta$$

eşitlikleri kullanılarak normalize edilmemiş bazı Slater orbitalleri için dalga fonksiyonları bulunur.