

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ ОЛИЙ ВА ЎРТА
МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ**

САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

КИМЁ ФАКУЛЬТЕТИ

НООРГАНИК КИМЁ ВА МАТЕРИАЛШУНОСЛИК КАФЕДРАСИ

РЎЙХАТГА ОЛИНДИ

№ _____
2019 й “ ____ ” _____

«ТАСДИҚЛАЙМАН»

Самарқанд давлат университети
ўқув ишлари бўйича
проректори: _____
проф. А.Солеев
_____ 2019 й

Билим соҳаси: 300000 – Ишлаб чиқариш ва таҳлил соҳа
Таълим соҳаси: 320000 – Ишлаб чиқариш технологияси
Таълим йўналиши: 5320100 – Материалшунослик ва янги
материаллар технологияси (кимёвий
материаллар турлари бўйича)

**“КРИСТАЛЛОКИМЁ” фанидан
ЎҚУВ-УСЛУБИЙ МАЖМУА
(Moodle тизими режаси асосида)**

Тузувчи: СамДУ Кимё факултети, Ноорганик кимё ва
материалшунослик кафедраси доценти
Ташпулатов Х.Ш.

Кафедра мудири: доц. Нормурадов З.Н.

Факультет декани: доц. Мусулмонов Н.Х.

САМАРҚАНД – 2019

МУНДАРИЖА:

1. Силлабус (йўналишнинг намунавий ва ишчи ўқув режаси, фаннинг намунавий ва ишчи ўқув дастури	3
2. Ўтилатган фаннинг асосий назарий материали (маърузалар матни)	28
3. Глоссарий	45
4. Фойдаланилган адабиётларнинг электрон шакли.....	47
5. Мавзулар бўйича тақдиротлар, мустақил таълим учун материаллар (илмий мақолалар ва бошқа манбалар).....	48
6. Амалий машғулоти материаллари	49
7. Қўшимча материаллар (видеолар, кейс-стадилар ва бошқалар).....	50

СИЛЛАБУС
(2019/2020 ўқув йили, 1-курслар учун)

Фаннинг қисқача тавсифи				
ОТМнинг номи ва жойлашган манзили:	Самарқанд давлат университети		Манзили: Самарқанд шаҳри, Университет хиябони – 15.	
Кафедра:	Ноорганик кимё ва материалшунослик	Материалшунослик йўналиши		
Таълим соҳаси ва йўналиши:	Таълим соҳаси: 320000 – Ишлаб чиқариш технологияси	Таълим йўналиши: 5320100 – Материалшунослик ва янги материаллар технологияси (кимёвий материаллар турлари бўйича)		
Фанни (курсни) олиб борадиган ўқитувчи тўғрисида маълумот:	Ташпулатов Хуршид Шукурович – доцент., кимё фанлари номзоди		E-mail. xurshiduz@mail.ru	
Дарс машғулоти ўтказишнинг вақти ва жойи:	СамДУ ўқув-услубий бўлими томонидан ишлаб чиқилган жадвал асосида университетнинг ўқув биносида	Курснинг бош-ланиш ва давом этиш муддати: 2-семестр 36 ҳафта	Таълим йўналиши ўқув режасига мувофиқ <i>иккинчи курслар, 2-семестрда</i>	
Дарс графиги:	2-семестри давомида машғулотлар схемаси қўйидагича: ҳар ҳафтада 1 маъруза – 1 жуфтлик (80 минут), ҳар ҳафтада ўқитувчи раҳбарлигида лаборатория машғулоти 2-жуфтлик (240 минут), бир ҳафтада мустақил иш – 4 соат (консультация ва мустақил ишларни топшириш), ҳар ҳафтада 1 соат мустақил иш (аудиториядан ташқарида бажариладиган мустақил иш), бунда маъруза ва амалий машғулотга тайёргарлик кўрилади, мустақил иш топшириқлари бажарилади.			
Индивидуал график асосида профессор-ўқитувчининг талабалар билан ишлаш вақти:	Ҳафтанинг душанба ва чоршанба кунлари соат 14.00 дан - 16.00 гача			
Фанга ажратилган ўқув соатларининг ўқув турлари бўйича тақсимоли	Аудитория соатлари			Мустақил иш: 64
	Маъруза	Семинар	Амалий м-т	
	24	8	20	
Фаннинг бошқа фанлар билан узвий алоқаси	Олий математика, физика, аналитик кимё, география, биология, экология.			

2.10	Материаллар механикаси ва конструкторлик асослари	356		192	68	88	36		кл	164					6	6	
2.11	Технологик жараёнларни автоматлаштириш	100		52	26	26				48							3
2.12	Хаст фаолияти хавфизлиги	100		50	24	26				50							3
2.13	Метрология, стандартлаштириш ва сифатни бошқариш	120		60	30	30				60						4	
2.14	Саноат экологияси	68		34	16		18			34		34					
2.15	Нефть ва газ кимёси	92		50	20	10	20			42		50					
3.00	Ихтисослик фанлари	1136	18%	576	256	108	184	28	1кл	560		2	6	8	11	8	
3.01	Ноорганик материалшунослик	120		60	24	16	20			60						4	
3.02	Композит материаллар	120		68	34	14	20			52					4		
3.03	Материаллар таркиби ва структурасини ўрганиш усуллари	120		60	28		32			60						4	
3.04	Полимер материаллар кимёси	220		120	46	30	44			100							
	IV-семестр	92		52	20	12	20			40			52		4		
	V-семестр	128		68	26	18	24			60							
3.05	Наноматериаллар технологияси	140		68	32	8	28			72							4
3.06	Кристаллокимё	116		52	24	20		8		64			52				
3.07	Танлов фанлари	300		148	68	20	40	20	кл	152		34				3	4
	Кимёвий технологияда компьютер моделлаштириш	70		34	14	20				36		34					
4.00	Қўшимча фанлар	316	5%	136	56	40	20	20		180							8
	ЖАМИ	6318	100%	3276	1264	910	882	220	4кл 2кл	3042	512	506	28	28	28	28	24
	Малака амалиёти	1188										108		108			
	Яқуний давлат аттестацияси	324															
	Аттестациялар	1134									162	162	162	162			
	ЖАМИ	2646															
	УМУМИЙ ЖАМИ	8964															

Изоҳ:

- Ихтисослик фанларининг дастурларини ишлаб чиқишда кадрлар буюртмачиларининг талаблари эътиборга олинди.
- Харбий таъғарлик машғулоти қўшимча фанлар блокнинг соатлари ҳисобига, харбий йигин эса таътид вақти ҳисобига ўтказилади. Харбий таъғарлик ўтказилмайдиган ҳолларда меҳнат бозори ва кадрлар буюртмачиларининг талабларига мосланувчанлиги ва ҳаракатчанлигини таъминлаш учун Илмий кенгашининг қарори билан фойдаланилади.
- Ўқув режа асосида ҳар йили ишчи ўқув режаси тузилади. Бунда талабалар юкмасининг ҳафталик ҳажмини сақлаган ҳолда ўқув фанлари блоки ҳажмини 5 фонзгача, блоклар таркибидаги фанлар ҳажмини 10 фонзгача ўзгартириш ҳуқуқи берилади.
- Талаба билимини баҳолаш рейтинг тизимига мувофиқ ўқув жараёни давомида амалга оширилади.
- Ихтисослик фанларидан давлат аттестациясидан ўтиши белгиланган талабалар битирув малакавий ишни бажариш муддатларидан аттестацияга таъғарлик кўриш учун фойдаланадилар.
- 7-семестрда битирувчи курслар учун қўшимча фанлар ва танлов фанлари соатлари ҳисобидан ҳар ҳафтада 2 соатдан "Амалий хорижий тил" фани ўқитилади.
- "Жисмоний маданият фани таркибида "Валеология асослари" курсидан 10 соат ҳажмда маъруза, 8 соат ҳажмда амалий машғулот ўқитилиши кўзда тутилади.
- Ўқув режага киритиладиган ихтисосликка оид фанларнинг амалий машғулоти ва лаборатория ишлари олий таълим муассасаси ҳамда базавий ташкилот ва корхоналарда ўтказилади.
- Назария ва амалиёт яқитлигини таъминлаш учун талабаларнинг малакавий амалиётлари базавий ташкилот ва корхоналарда ўтказилади.

Ўқув жараёнининг таркибий қисмлари	Ҳафталар сони	Семестр	Давлат аттестацияси
Назарий таълим	117	1-7	Битирув малакавий иш ҳимояси ёки мутахассислик фанларидан синов
Малака амалиёти	22	2, 4, 6, 8	
Аттестациялар	21	1-8	
Яқуний давлат аттестациялари	5	8	
Таътил	38	1-8	
Жами	204		

Ишчи ўқув режа Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг " " _____ 2018 йилдаги № _____ рақамли буйруғи билан тасдиқланган ўқув режа асосида тузилди.

Самарқанд давлат университети ўқув услубий кенгаши томонидан маъқулланган (2019 йил « _____ » _____ сонли баённома). Самарқанд давлат университети Илмий кенгаши томонидан маъқулланган (2019 йил « _____ » _____ сонли баённома).

Самарқанд давлат университети
Ўқув-услубий кенгаши раиси

Кимё факультети декани

Аналитик кимё кафедраси мудири

Физикавий ва коллоид кимё кафедраси мудири

Ноорганик кимё ва

материалшунослик кафедраси мудири

Органик ва биоорганик кимё кафедраси мудири

Н. Мукулмонов

Э. Абдурахманов

Н. Мухаммадиев

З. Нормуродов

З. Самаров

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI

SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI

Ro'yxatga olindi:
№ MD-5A140501

“ ” 2019 yil



Samarqand davlat universiteti rektori:
prof. Ro'f. Xalmuradov

2019 yil

“NOORGANIK BIRIKMALARNING KRISTALL KIMYOSI”

FANINING

FAN DASTURI

Bilim sohasi:	100000	– Gumanitar
Ta'lim sohasi:	140000	– Tabiiy fanlar
Ta'lim yo'nalishi:	5140500	– Kimyo
Ta'lim mutaxassisligi:	5A140501	– Kimyo (noorganik kimyo)

Samarqand – 2019

Fan dasturi Samarqand davlat universiteti Kimyo fakulteti kengashida ko'rib chiqilgan va tavsiya qilingan (2019 yil "6" 06 dagi "10"-sonli bayonnoma).

Fakultet dekani:



dot.N.H.Musulmanov



Fan dasturi samarqand davlat universitetida ishlab chiqildi.

Tuzuvchilar:

- Tashpulatov X.SH - SamDU "Noorganik kimyo va materialshunoslik" kafedrası dotsenti, k.f.n.
- Abduraxmanov.I.E - SamDU "Noorganik kimyo va materialshunoslik" kafedrası katta o'qituvchisi, k.f.n.

Taqrizchilar:

- Ro'zimiradov.O - O'zMU Umumiy va neftgaz kimyo kafedrası professori k.f.d
- Aminov.Z.A - SamVMI "Tabiiy va ilmiy fanlar" kafedrası, dotsent, k.f.n.

Fan dasturi samarqand davlat universiteti o'quv-uslubiy kengashining 2019 yil "03" 07 dagi "10"-sonli bayoni bilan maqullangan).

O'quv-uslubiy kengash raisi:



prof.A.S.Soleev

I. Ўқув фанининг долзарблиги ва олий касбий таълимдаги ўрни

Ушбу фан модданинг структураси (тузилиши) тўғрисидаги умумий қарашларни шакллантирадиган ва кристалл тузилишидаги моддаларнинг муҳим синфлари, кристаллари шакллари аниқлаш, уларнинг қандай физик кимёвий хоссаларни намоён қилиши каби масалаларни қамраб олади. Магистрант томонидан фанни ўзлаштириш орқали олган билимлари дунёнинг замонавий физикавий кўриниши, бизни ўраб турган оламни ва табиат ходисаларини тушунишдаги модданинг тузилиши асосий ўрин тутиши тўғрисидаги хулосаларини мустаҳкамлайди.

“Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фани мутахассислик фанлари блокига киритилган курс ҳисобланиб, 1-курсда ўқитилиши мақсадга мувофиқ. “Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фани табиий фанлар туркумига киради ва Кимё (ноорганик кимё) мутахассислиги бўйича таълим олувчи магистратура таълим йўналишларида ўқитилади. Мазкур фан ноорганик кимё фанининг ривожланиш натижаси ўлароқ, ўз ривожда ноорганик бирикмаларнинг кристалл тузилиши ва хоссаларини ўрганиш учун замин бўлиб хизмат қилади.

II. Ўқув фанининг мақсади ва вазифаси

Фанни ўқитишдан мақсад - магистрантларга кристалл ҳолатдаги моддаларнинг тузилиши тўғрисидаги билимларини шакллантириш, моддаларнинг кимёвий таркиби ва физик хоссаларини уларнинг кристалл тузилиши орасидаги боғлиқликни аниқлаш, кристаллокимё қонунларини ўргатиш ҳамда уларни амалиётга татбиқ этиш кўникмасини ҳосил қилишдан иборат.

Ушбу мақсадга эришиш учун фан магистрантларни назарий билимлар, амалий кўникмалар, кристалл моддаларнинг тузилиши ва уларнинг физик хоссалари, кристалл тузилишдаги моддаларнинг кимёвий боғланиш табиатини аниқлаш ҳамда кристаллокимёвий ходисаларнинг моҳиятини очиб бериш асосида илмий дунёқарашини шакллантириш вазифаларини бажаради.

Фан бўйича билим, кўникма ва малакаларига қуйидаги талаблар қўйилади. **Магистрант:**

- кристаллографиянинг асосий қонунлари, кристаллар симметрияси, атом ва ион радиуслари, кристалл панжара турлари, кристалларнинг рентгенструктуравий анализ, нейтронография ва электронография имкониятлари, симметрия гуруҳларининг фазовий тузилишини график ифодалаш усуллари, бирикмалар тузилишини аниқлаш учун элементар катакчаларнинг параметрлари ҳақида **тасаввурга эга бўлиши;**

- қаттиқ жисмлар синфлари, кристаллография ва кристаллокимёнинг асосий тушунчалари, кристалл панжаралар, симметрия элементлари,

сингония, категория турларини, модда кукунининг рентгенограммасини ола билиш, рентгенструктуравий анализ учун мос келадиган монокристалларни ўстира олиш қонуниятларини **билиши ва улардан фойдалана олиши;**

- реал кристалларнинг кўринишларини турларга ажрата олиш, симметриянинг фазовий гуруҳларини аниқлай олиш, кристалларни олиш усулларини қўллай билиш, кристалдаги боғланиш турини, кристалл панжара текисликлараро масофани, уларнинг интенсивлигини, кристалл панжара бирлиги сонини аниқлай олиш, рентгенструктуравий анализ маълумотлари асосида кристалл панжара турини ва атомлараро масофани (водород боғлари ва Ван-дер-Вальс масофалари) аниқлай олиш **кўникмаларига эга бўлиши керак.**

III. Асосий назарий қисм (маъруза машғулоти)

1-Модул. Кристаллар, кристалл моддалар ва кристаллография тўғрисида тушунча

1-мавзу. “Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фанига кириш

Кристалл модда. Кристаллнинг асосий хоссалари. Кристаллографиянинг асосий қонунлари. Кристаллография. Кристалл модданинг тарқалганлиги. Кристалланиш.

2-мавзу. Кристаллар симметрияси

Симметрия тўғрисида тушунча. Симметрия элементлари. Симметрия хиллари. Симметриянинг 32 хилларини ҳосил қилиш схемаси. Кристалл кўпқирралиликларни шакллари. Кристаллографик символлар.

3-мавзу. Кристалл панжара

Кристалл панжара тушунчаси. Кристалл кўпқирралилик ва кристалл панжараси. Трансляция. Панжаранинг текис панжараси. Бравэнинг 14 хил панжараси. Кристаллкимёвий таҳлил тўғрисида тушунча.

4-мавзу. Е.С.Федоровнинг кристаллар тузилиши ҳақидаги назарияси

Назария тўғрисидаги қисқача маълумотлар. Федоровнинг симметрия гуруҳлари.

5-мавзу. Кристаллкимёнинг асосий тушунчалари

Тоза металлларнинг учта содда кристалл тузилиши. Тузилишнинг битта ячейкасига тўғри келувчи атомлар сони. Кристаллнинг тузилиши ва тузилиш тури. Графит ва олмоснинг тузилиши. Координацион сон ва координацион кўпқирралилик. Координацион сонга кўра тузилишларнинг синфланиши.

6-мавзу. Кристаллар тузилишини аниқловчи факторлар

Хар хил кимёвий боғланиш турларини аниқланиши. Гетеродесмик ва гомодесмик тузилишлар. Ионларнинг эффектив радиуслари. Атом ва ион радиусларини аниқлаш. Атом ва ионларнинг ўлчамларининг координацион сонга боғлиқлиги. Кристаллар тузилишини аниқлайдиган факторлар.

7-мавзу. Кристаллардаги кимёвий боғ табиати

Ион боғланиш. Металл боғланиш. Қолдиқ боғланиш. Ковалент боғланиш. Водород боғланиш. Кимёвий боғланиш турига кўра бирикмаларнинг синфланиши.

8-мавзу. Изоморфизм ва полиморфизм

Очилиш тарихи. Полиморфизм турларини тузилиш бўйича синфланиши. Изоморфизмнинг намоён бўлиши учун зарур бўлган шароитлар.

9-мавзу. Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллар тузилишига боғлиқлиги

Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллардаги кимёвий боғ турига боғлиқлиги. Электр хоссалар. Оптик хоссалар. Металларнинг болғаланувчанлиги. Суюқланиш температураси ва қаттиқлик. Моддаларнинг физик кимёвий хоссаларига водород боғланишининг таъсири. Эрувчанлик.

10-мавзу. Оддий моддалар ва кимёвий бирикмалар кристаллокимёси

Д.И. Менделеевнинг элементлар даврий жадвалидаги кристаллкимёвий қонуниятлар. Соф металларнинг кристалл тузилиши. Кристаллкимёвий натижалар асосида даврий жадвалнинг гуруҳчалари бўйича элементларнинг тақсимланиши.

11-мавзу. Ноорганик бирикмалар кристаллокимёси

Бинар бирикмаларнинг синфланиши ҳақида. Учламчи ва янада мураккаброқ ноорганик бирикмалар. Ион кристаллар тузилиши учун Полинг қондаси. Тетраэдриқ ковалент радиуслар. Кристаллгидратлар тузилиши. Комплекс бирикмалар тузилиши. Клатратлар ва бошқа мураккаб кимёвий бирикмаларнинг тузилиши.

2-Модул. Структуравий кристаллографиянинг асосий тушунчалари ва асосий элементлари

12-мавзу. Трансляция гуруҳлари, кристалл панжараси

Кристалл панжарасининг нуқталари, нуқталар қаторлари ва нуқта турларини индекслари, тескари панжара. Симметрия элементлари ва уларни

аталиши. Очик ва ёпик симметрия операциялари. Нуқтавий ва фазовий симметрия гуруҳлари. Кристалл трансляция ва бошқа симметрия операцияларининг ўзаро таъсири, фазовий гуруҳ симметрияларини классификация схемаси, симметрия класслари. Сингония ва категориялар. Бравэнинг панжара хиллари. Симметриянинг фазовий гуруҳларини (СФГ) график ҳолатда изоҳлаш. СФГ нинг белгиланиши ва нуқталарини тўғри системаси.

13-мавзу. Кристаллокимёвий тузилишнинг синфланиши

Кристалл структураси ва структура хиллари. Мис α -темир (α -Fe), магний (Mg), олмос ва графит структуралари ва уларнинг хиллари. АХ хилдаги бирикмалар структураси. Координацион сон ва «координацион кўп кирра» тўғрисида тушунча. Координацион кўп кирраликнинг айрим ҳоллари (кубсимон, октаэдр, тетраэдр ва бошқалар). Координацион сонлар бўйича структураларни классификация қилиш атом ва молекуляр структура. Кимёвий боғлар бўйича структура хиллари. Ион радиуслар, атом ва ион радиусларини аниқлаш.

14-мавзу. Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси

Рентгеноструктуравий анализнинг (РСА) физикавий асослари. Рентген тўлқинларининг параметрлари ва рентген нурларининг сочилиши. Кристалларини РСА қилинаётганда ҳал қилиниши керак бўлган масалалар. Лауэ шартлари. Дифракцион эффеқтни олиш усуллари. Брэгнинг рентген нурининг кристаллда дифракциясини ўзгача талқини. Рентгенограммаларни идентификация қилиш. Рентгенструктуравий тажрибаларини автоматлаштириш ва тезлаштириш мосламалари.

15-мавзу. Дифракцион усулларни бир-бирига таққослаш ва уларнинг келажаги

Кристалл ва бошқа агрегат ҳолдаги моддаларни структурасини ўрганиш. Рентгенструктуравий анализ, нейтронография ва электронография усулларида фойдаланиш мумкинлиги. Кимёда рентгеноструктуравий анализдан фойдаланишнинг асосий сабаблари.

16-мавзу. Ўзбекистон олимлари томонидан моддаларни структурасини аниқлаш ва уни талқин қилиш соҳаларидаги ишлари

XX-асрнинг 50-йилларидан бошлаб, моддаларни структураларини янги замонавий усуллар (рентген, спектроскопик, термик ва бошқалар) билан тадқиқот ишлари олиб борилмоқда. Бу соҳани ривожлантиришда олимлардан Н.А.Парпиев, Ю.Тошпўлатов, Х.Шарипов, Б.Ибрагимов, Б.Тошхўжаев, О.Ходжаев ва бошқаларнинг ишлари тўғрисидаги маълумотлар.

IV. Амалий машғулотлар бўйича кўрсатма ва тавсиялар

Амалий машғулотлар учун қуйидаги мавзулар тавсия этилади:

1. Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларнинг белгиларини (символларини) аниқлаш.
2. Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.
3. Г.Б.Бокий схемаси оддий модда, $AХ$, $AХ_2$, A_2X_3 бинар ва муҳим уч элементдан иборат модда бирикмаларни структур турлари.
4. Дислокацияни геометрик хусусиятлари. Дислокация турлари.
5. Кристалларнинг ўсиши.
6. Силикатлар кристаллкимёси.
7. Координацион бирикмаларнинг тузилиши.
8. Суюқ кристаллар.
9. Кристалларнинг зичлиги.
10. Д.И.Менделеевнинг элементлар даврий системаси ва кристаллокимёвий қонуниятлари. Оддий моддалар тузилиши.

Амалий машғулотлар мультимедиа қурилмалари билан жиҳозланган аудиторияда бир академ гуруҳга бир ўқитувчи томонидан ўтказилиши лозим. Машғулотлар фаол ва интерактив усуллар ёрдамида ўтилиши, мос равишда муносиб педагогик ва ахборот технологиялар қўлланилиши мақсадга мувофиқ.

V. Лаборатория машғулотлари бўйича кўрсатма ва тавсиялар

Лаборатория машғулотлари учун қуйидаги мавзулар тавсия этилади:

1. Рентген лабораториясида ишлаган вақтида техника хавфсизлигига риоя қилиш тўғрисида. Рентген нурларини ҳаёт учун ниҳоятда хавфли эканлиги. Рентген аппаратлари ва уларда ишлашда ниҳоятда техника хавфсизлиги жуда қаттиқ риоя этиш талаблари.

2. Рентген аппаратлари билан танишиш ва уларда ишлаш техникаси. Рентген аппаратлари - УРС, ДРОН.

3. Моддани рентгенограммасини олиш учун махсус тайёрлаш. Унинг дифрактограммасини олиш. Моддани рентгенограммасини олиш учун уни махсус ховончада майдалаб, сўнг шиша дискига юпка қават ҳолида жойлаштирилиши ва ДРОН-2 аппаратида маълум вақт ичида унинг дифрактограммаси олиниши.

4. Рентгенофазавий анализ методи:

а) дифрактограммани ўлчаш ва ҳисоблаш.

б) Моддаларнинг текисликлараро масофаларини қийматларига асосланиб аниқлаш.

Модданинг олинган рентгенограммаси (дифрактограммасидан 2 θ - бурчагини ҳисобланади. Ҳар бир дифракцияга учраган нурларнинг

интенсивлигини (J) ўлчанади. α - ва J -ларни қийматларига қараб Брэгни $n \lambda = 2d \sin \theta$ формуласи орқали d -(текисликлараро масофа)нинг қиймати топилади. d -нинг қиймати бўйича справочник орқали рентгенограммаси олинган моддани аниқлаш мумкин.

5. Рентгенофазавий анализ натижалари бўйича моддаларни аралашмасини анализ қилиш. Назорат учун берилган моддалар таркибида қандай модда борлигини аниқлаш. Моддалар бўлиши мумкин $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, NaCl , SiO_2 , $\text{CuCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$.

VI. Семинар машғулоти бўйича кўрсатма ва тавсиялар

Семинар машғулоти учун тавсия этиладиган мавзулар:

1. Симметрия турларини систематикаси. Кристалларнинг стереографик проекцияси.
2. Кристаллар тузилишининг Федоров назарияси. Кристалларнинг геометрик назарияси.
3. Изоморфизм ва полиморфизм. Кристалларнинг тузилишини аниқловчи асосий факторлар.
4. Оддий моддалар ва бинар бирикмаларнинг тузилиши.
5. Кристаллардаги кимёвий боғланиш табиати. Кристалл панжара энергияси.
6. Структуравий кристаллографиянинг асосий тушунчалари ва асосий элементлари.
7. Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси
8. Координацион кўп қирраликнинг айрим ҳоллари (кубсимон, октаэдр, тетраэдр ва бошқалар).
9. Лауэ шартлари. Дифракцион эффектни олиш усуллари.
10. Рентгенструктуравий тажрибаларини автоматлаштириш ва тезлаштириш мосламалари.

VII. Мустақил таълим ва мустақил ишлар

Мустақил таълим учун тавсия этиладиган мавзулар:

1. Кристаллар симметрияси. Табиатда илм-фанда ва техникада симметриянинг фундаментал аҳамияти. Кристалларни аниқлаш.
2. Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларни белгиларини (символларини) аниқлаш. Трансляция симметрияси. Трансляция оператори.
3. Кристаллар физикаси. Кристалларни физикавий хусусиятлари.
4. Нуқта гуруҳларини чегараланганлиги. Кюри принципи. Нейман принципи. Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.
5. Кристалларнинг физик хусусиятлари: механик, электрик, магнит ва оптик хусусиятлари.

6. Кристалларнинг таркиби, симметрияси ва структурасини боғлайдиган асосий кристаллокимёвий қонунлар. Грот, Фёдоров, Шубников қонунлари.
7. Кристаллардаги нуқсонлар. Нуқтавий, чизикли ва сирт нуқсонлари
8. Дифракцион расмлар геометрияси. Лауэграмма орқали кристаллографик ўқлар бўйича жойлаштириш. Стереографик проекциялар тузиш.
9. Кристалл ёнларининг тасвири ва ёнлар орасидаги бурчакларни ҳисоблаш. Вульф сеткаси.
10. Кристалларнинг вужудга келиши ва ўсиши.
11. Қаттиқ, аморф ва кристалл моддалар ва уларнинг асосий хоссалари. Кристалл ҳолдаги моддаларнинг шакл тузилиши билан уларни физик-кимёвий хусусиятларини узвий боғлиқлиги.
12. Кристаллография, кристаллофизика ва кристаллокимё фанларини бири-бири билан боғлиқлиги, симметрия элементлари ва симметрия операциялари орқали заррачаларни (атомлар, ионлар ва бошқалар) элементар катакчада жойлаштириш тушунтириш.
13. Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари. Кристалл структураси ва структура хиллари. Кристаллдаги атом ва ион радиусларини аниқлаш. Кристаллардаги кимёвий боғларини табиати.
14. Рентген нурларини табиати ва уларнинг кристаллдаги дифракцияси. Дифракцион эффектни олиш усуллари. Структуравий анализнинг босқичлар.
15. Дифракцион усуллар – рентгенография, электронография ва нейтронография усуллари ўқшашлиги ҳамда фарқлари. Кимёда РСА дан фойдаланишдан асосий мақсад.

Мустақил ўзлаштириладиган мавзулар бўйича магистрантлар томонидан рефератлар тайёрлаш ва уни тақдимот қилиш тавсия этилади.

VIII. Асосий ва қўшимча ўқув адабиётлар ҳамда ахборот манбаалари

Асосий адабиётлар

1. П.М.Зоркий. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: МГУ, 1986.-232 с.
2. Г.Б.Бокий. Кристаллохимия. М.: МГУ, 1971.-357 с.
3. В.С.Урусов. Теоретическая кристаллохимия. М.: МГУ, 1987.–275 с.

Қўшимча адабиётлар

4. Мирзиёев Ш.М. Эркин ва фаровон демократик Ўзбекистон давлатини биргаликда барпо этамиз. Тошкент, “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. - 29 б.
5. Мирзиёев Ш.М. Қонун устуворлиги ва инсон манфаатларини таъминлаш юрт тараққиёти ва ҳалқ фаровонлигининг гарови. “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. - 29 б.

6. Мирзиёев Ш.М. Буюк келажагимизни мард ва олижаноб ҳалқимиз билан бирга курамыш. . “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. -485 б.
7. Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида” ги ПФ-4947-сонли Фармони. Ўзбекистон Республикаси қонун ҳужжатлари тўплами, 2017. 6-сон, 70-модда.
8. Г.М.Кузьмичева. Основные разделы кристаллографии. М.: МИТХТ, 2002.-95с.
9. Е.В.Чупрунов, А.Ф.Хохлов, М.А.Фадеев. Основы кристаллографии. М.:Физматлит., 2004.-500 с.
- 10.П.М.Зоркий. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: МГУ, 1981.-40 с.
- 11.И.Харгиттаи, М.Харгиттаи. Симметрия глазами химика, М.: Мир, 1989.
- 12.М.А.Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Выс.шк., 1989.-192 с.

Интернет сайтлари

13. www.nuuz.uz.
14. www.natlib.uz.
15. www.ziyo.net.uz.
16. www.chemexpress.fatal.ru.
17. <http://www.xumuk.ru>. Сайт о химии для химиков.

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ
САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

Рўйхатга олинди:
№ _____
2019 й. «__» _____

“ТАСДИҚЛАЙМАН”
Ўқув ишлари бўйича проректор
_____ проф. А. Солеев
“__” _____ 2019 йил

КРИСТАЛЛОКИМЁ фанининг

ИШЧИ ЎҚУВ ДАСТУРИ

Билим соҳаси:	300000 – Ишлаб чиқариш ва таҳлил соҳа
Таълим соҳаси:	320000 – Ишлаб чиқариш технологияси
Таълим йўналиши:	5320100 –Материалшунослик ва янги материаллар технологияси (Кимёвий материаллар турлари бўйича)

Фаннинг ишчи ўқув дастури ўқув, ишчи ўқув режа ва ўқув дастурига мувофиқ ишлаб чиқилди.

Тузувчилар:

Ташпулатов Х.Ш. - СамДУ «Ноорганик кимё ва материалшунослик» кафедраси доценти, к.ф.н.

Бурунов А.О. - СамДУ «Ноорганик кимё ва материалшунослик» кафедраси ассистенти

Фаннинг ишчи ўқув дастури «Ноорганик кимё ва материалшунослик» кафедрасининг 2019 йил 29.08 № 1 - сон йиғилишида муҳокамадан ўтган ва Кимё факультети Илмий кенгашида муҳокама қилиш учун тавсия этилган.

Кафедра мудирини



доц. З.Н. Нормуродов

Фаннинг ишчи ўқув дастури Кимё факультети ўқув услубий кенгашида муҳокама этилган ва фойдаланишга тавсия қилинган (2019 йил _____ № _____ - сонли баённома).

Факультет ўқув услубий кенгаши раиси:
Э.А.Рузиев



доц.

Фаннинг ишчи ўқув дастури Кимё факультети Илмий кенгашида муҳокама этилган ва фойдаланишга тавсия қилинган (2019 йил _____

№ _____ - сонли баённома).

Факультет кенгаши раиси
Н.Х.Мусулмонов



доц.

Келишилди:

anned with
imScanner

Ўқув услубий бошқарма бошлиғи

доц. Б.Аликулов

I. Ўқув фанининг долзарблиги ва олий касбий таълимдаги ўрни

Ушбу фан модданинг структураси (тузилиши) тўғрисидаги умумий қарашларни шакллантирадиган ва кристалл тузилишидаги моддаларнинг муҳим синфлари, кристаллари шакллари аниқлаш, уларнинг қандай физик кимёвий хоссаларни намоён қилиши каби масалаларни қамраб олади. Магистрант томонидан фанни ўзлаштириш орқали олган билимлари дунёнинг замонавий физикавий кўриниши, бизни ўраб турган оламни ва табиат ходисаларини тушунишдаги модданинг тузилиши асосий ўрин тутиши тўғрисидаги хулосаларини мустаҳкамлайди.

“Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фани мутахассислик фанлари блокига киритилган курс ҳисобланиб, 1-курсда ўқитилиши мақсадга мувофиқ. “Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фани табиий фанлар туркумига киради ва Кимё (ноорганик кимё) мутахассислиги бўйича таълим олувчи магистратура таълим йўналишларида ўқитилади. Мазкур фан ноорганик кимё фанининг ривожланиш натижаси ўлароқ, ўз ривожда ноорганик бирикмаларнинг кристалл тузилиши ва хоссаларини ўрганиш учун замин бўлиб хизмат қилади.

II. Ўқув фанининг мақсади ва вазифаси

Фанни ўқитишдан мақсад - магистрантларга кристалл ҳолатдаги моддаларнинг тузилиши тўғрисидаги билимларини шакллантириш, моддаларнинг кимёвий таркиби ва физик хоссаларини уларнинг кристалл тузилиши орасидаги боғлиқликни аниқлаш, кристаллокимё қонунларини ўргатиш ҳамда уларни амалиётга татбиқ этиш кўникмасини ҳосил қилишдан иборат.

Ушбу мақсадга эришиш учун фан магистрантларни назарий билимлар, амалий кўникмалар, кристалл моддаларнинг тузилиши ва уларнинг физик хоссалари, кристалл тузилишдаги моддаларнинг кимёвий боғланиш табиатини аниқлаш ҳамда кристаллкимёвий ходисаларнинг моҳиятини очиқ бериш асосида илмий дунёқарашини шакллантириш вазифаларини бажаради.

Фан бўйича билим, кўникма ва малакаларига қуйидаги талаблар қўйилади. **Магистрант:**

- кристаллографиянинг асосий қонунлари, кристаллар симметрияси, атом ва ион радиуслари, кристалл панжара турлари, кристалларнинг рентгенструктуравий анализ, нейтронография ва электронография имкониятлари, симметрия гуруҳларининг фазовий тузилишини график ифодалаш усуллари, бирикмалар тузилишини аниқлаш учун элементар катакчаларнинг параметрлари ҳақида **тасаввурга эга бўлиши;**

- каттиқ жисмлар синфлари, кристаллография ва кристаллкимёнинг асосий тушунчалари, кристалл панжаралар, симметрия элементлари, сингония, категория турларини, модда кукунининг рентгенограммасини

ола билиш, рентгенструктуравий анализ учун мос келадиган монокристалларни ўстира олиш қонуниятларини **билиши ва улардан фойдалана олиши;**

- реал кристалларнинг кўринишларини турларга ажрата олиш, симметриянинг фазовий гуруҳларини аниқлай олиш, кристалларни олиш усулларини қўллай билиш, кристалдаги боғланиш турини, кристалл панжара текисликлараро масофани, уларнинг интенсивлигини, кристалл панжара бирлиги сонини аниқлай олиш, рентгенструктуравий анализ маълумотлари асосида кристалл панжара турини ва атомлараро масофани (водород боғлари ва Ван-дер-Вальс масофалари) аниқлай олиш **кўникмаларига эга бўлиши керак.**

III. Асосий назарий қисм (маъруза машғулоти)

1-Модул. Кристаллар, кристалл моддалар ва кристаллография тўғрисида тушунча

1-мавзу. “Ноорганик бирикмаларнинг кристалл кимёси” фанига кириш

Кристалл модда. Кристаллнинг асосий хоссалари. Кристаллографиянинг асосий қонунлари. Кристаллография. Кристалл модданинг тарқалганлиги. Кристалланиш.

2-мавзу. Кристаллар симметрияси

Симметрия тўғрисида тушунча. Симметрия элементлари. Симметрия хиллари. Симметриянинг 32 хилларини ҳосил қилиш схемаси. Кристалл кўпқирралиликларни шакллари. Кристаллографик символлар.

3-мавзу. Кристалл панжара

Кристалл панжара тушунчаси. Кристалл кўпқирралилик ва кристалл панжараси. Трансляция. Панжаранинг текис панжараси. Бравэнинг 14 хил панжараси. Кристаллкимёвий таҳлил тўғрисида тушунча.

4-мавзу. Е.С.Федоровнинг кристаллар тузилиши ҳақидаги назарияси

Назария тўғрисидаги қисқача маълумотлар. Федоровнинг симметрия гуруҳлари.

5-мавзу. Кристаллкимёнинг асосий тушунчалари

Тоза металлларнинг учта содда кристалл тузилиши. Тузилишнинг битта ячейкасига тўғри келувчи атомлар сони. Кристаллнинг тузилиши ва тузилиш тури. Графит ва олмоснинг тузилиши. Координацион сон ва координацион кўпқирралилик. Координацион сонга кўра тузилишларнинг синфланиши.

6-мавзу. Кристаллар тузилишини аниқловчи факторлар

Хар хил кимёвий боғланиш турларини аниқланиши. Гетеродесмик ва гомодесмик тузилишлар. Ионларнинг эффе́ктив радиуслари. Атом ва ион радиусларини аниқлаш. Атом ва ионларнинг ўлчамларининг координацион сонга боғлиқлиги. Кристаллар тузилишини аниқлайдиган факторлар.

7-мавзу. Кристаллардаги кимёвий боғ табиати

Ион боғланиш. Металл боғланиш. Қолдиқ боғланиш. Ковалент боғланиш. Водород боғланиш. Кимёвий боғланиш турига кўра бирикмаларнинг синфланиши.

8-мавзу. Изоморфизм ва полиморфизм

Очилиш тарихи. Полиморфизм турларини тузилиш бўйича синфланиши. Изоморфизмнинг намоён бўлиши учун зарур бўлган шароитлар.

9-мавзу. Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллар тузилишига боғлиқлиги

Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллардаги кимёвий боғ турига боғлиқлиги. Электр хоссалар. Оптик хоссалар. Металларнинг болғаланувчанлиги. Суюқланиш температураси ва қаттиқлик. Моддаларнинг физик кимёвий хоссаларига водород боғланишнинг таъсири. Эрувчанлик.

10-мавзу. Оддий моддалар ва кимёвий бирикмалар кристаллокимёси

Д.И. Менделеевнинг элементлар даврий жадвалидаги кристаллкимёвий қонуниятлар. Соф металларнинг кристалл тузилиши. Кристаллкимёвий натижалар асосида даврий жадвалнинг гуруҳчалари бўйича элементларнинг тақсимланиши.

11-мавзу. Ноорганик бирикмалар кристаллкимёси

Бинар бирикмаларнинг синфланиши ҳақида. Учламчи ва янада мураккаброқ ноорганик бирикмалар. Ион кристаллар тузилиши учун Полинг қоидаси. Тетраэдрик ковалент радиуслар. Кристаллгидратлар тузилиши. Комплекс бирикмалар тузилиши. Клатратлар ва бошқа мураккаб кимёвий бирикмаларнинг тузилиши.

2-Модул. Структуравий кристаллографиянинг асосий тушунчалари ва асосий элементлари

12-мавзу. Трансляция гуруҳлари, кристалл панжараси

Кристалл панжарасининг нуқталари, нуқталар қаторлари ва нуқта турларини индекслари, тесқари панжара. Симметрия элементлари ва уларни аталиши. Очиқ ва ёпиқ симметрия операциялари. Нуқтавий ва фазовий

симметрия гуруҳлари. Кристалл трансляция ва бошқа симметрия операцияларининг ўзаро таъсири, фазовий гуруҳ симметрияларини классификация схемаси, симметрия класслари. Сингония ва категориялар. Бравэнинг панжара хиллари. Симметриянинг фазовий гуруҳларини (СФГ) график ҳолатда изоҳлаш. СФГ нинг белгиланиши ва нуқталарини тўғри системаси.

13-мавзу. Кристаллокимёвий тузилишнинг синфланиши

Кристалл структураси ва структура хиллари. Мис α -темир (α -Fe), магний (Mg), олмос ва графит структуралари ва уларнинг хиллари. АХ хилдаги бирикмалар структураси. Координацион сон ва «координацион кўп қирра» тўғрисида тушунча. Координацион кўп қирраликнинг айрим ҳоллари (кубсимон, октаэдр, тетраэдр ва бошқалар). Координацион сонлар бўйича структураларни классификация қилиш атом ва молекуляр структура. Кимёвий боғлар бўйича структура хиллари. Ион радиуслар, атом ва ион радиусларини аниқлаш.

14-мавзу. Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси

Рентгеноструктуравий анализнинг (РСА) физикавий асослари. Рентген тўлқинларининг параметрлари ва рентген нурларининг сочилиши. Кристалларини РСА қилинаётганда ҳал қилиниши керак бўлган масалалар. Лауэ шартлари. Дифракцион эффектни олиш усуллари. Брэгнинг рентген нурининг кристаллда дифракциясини ўзгача талқини. Рентгенограммаларни идентификация қилиш. Рентгеноструктуравий тажрибаларини автоматлаштириш ва тезлаштириш мосламалари.

15-мавзу. Дифракцион усулларни бир-бирига таққослаш ва уларнинг келажаги

Кристалл ва бошқа агрегат ҳолдаги моддаларни структурасини ўрганиш. Рентгеноструктуравий анализ, нейтронография ва электронография усулларидан фойдаланиш мумкинлиги. Кимёда рентгеноструктуравий анализдан фойдаланишнинг асосий сабаблари.

16-мавзу. Ўзбекистон олимлари томонидан моддаларни структурасини аниқлаш ва уни талқин қилиш соҳаларидаги ишлари

XX-асрнинг 50-йилларидан бошлаб, моддаларни структураларини янги замонавий усуллар (рентген, спектроскопик, термик ва бошқалар) билан тадқиқот ишлари олиб борилмоқда. Бу соҳани ривожлантиришда олимлардан Н.А.Парпиев, Ю.Тошпўлатов, Х.Шарипов, Б.Ибрагимов, Б.Тошхўжаев, О.Ходжаев ва бошқаларнинг ишлари тўғрисидаги маълумотлар.

**“Кристаллокимё” фанидан машғулотларнинг мавзулар ва соатлар
бўйича тақсимланиши:**

№	Мавзулар номи	Маъруза	Амалий машғулот	Семинар	Жами
1	Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари	2		2	4
2	Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллар тузилишига боғлиқлиги	2	2		4
3	Кристаллардаги кимёвий боғ табиати	2	2	2	6
4	Оддий моддалар ва кимёвий бирикмалар кристаллокимёси.	2	2		4
5	Ноорганик бирикмалар кристаллокимёси. Изоморфизм ва полиморфизм.	2	2		4
6	Кристаллар симметрияси	2	2		4
7	Кристалл панжара	2	2		4
8	Трансляция гуруҳлари, кристалл панжараси	2	2		4
9	Кристаллар тузилишини аниқловчи факторлар	2	2		4
10	Кристалларнинг олиниш усуллари	2		2	4
11	Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси	2	2	2	6
12	Дифракцион усулларни бир-бирига таққослаш ва уларнинг келажаги	2	2		4
Жами		24	20	8	52

“Кристаллокимё” фанидан
2018-2019 ўқув йили учун маъруза машғулотларини ўтказиш бўйича
КАЛЕНДАР ИШ РЕЖАСИ

№	Ўтказиладиган мавзу	Соат	Ўтказилиш санаси	Ижро белгиси	Изоҳ
1	Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари	2	2-семестр		
2	Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллар тузилишига боғлиқлиги	2	2-семестр		
3	Кристаллардаги кимёвий боғ табиати	2	2-семестр		
4	Оддий моддалар ва кимёвий бирикмалар кристаллокимёси.	2	2-семестр		
5	Ноорганик бирикмалар кристаллокимёси. Изоморфизм ва полиморфизм.	2	2-семестр		
6	Кристаллар симметрияси	2	2-семестр		
7	Кристалл панжара	2	2-семестр		
8	Трансляция гуруҳлари, кристалл панжараси	2	2-семестр		
9	Кристаллар тузилишини аниқловчи факторлар	2	2-семестр		
10	Кристалларнинг олиниш усуллари	2	2-семестр		
11	Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси	2	2-семестр		
12	Дифракцион усулларни бир-бирига таққослаш ва уларнинг келажаги	2	2-семестр		
	Жами	24			

IV. Амалий машғулотлар бўйича кўрсатма ва тавсиялар

Амалий машғулотлар учун қуйидаги мавзулар тавсия этилади:

11. Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларнинг белгиларини (символларини) аниқлаш.
12. Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.
13. Г.Б.Бокий схемаси оддий модда, $AХ$, $AХ_2$, A_2X_3 бинар ва муҳим уч элементдан иборат модда бирикмаларни структур турлари.
14. Дислокацияни геометрик хусусиятлари. Дислокация турлари.

15. Кристалларнинг ўсиши.
16. Силикатлар кристаллкимёси.
17. Координацион бирикмаларнинг тузилиши.
18. Суюқ кристаллар.
19. Кристалларнинг зичлиги.
20. Д.И. Менделеевнинг элементлар даврий системаси ва кристаллокимёвий қонуниятлари. Оддий моддалар тузилиши.

Амалий машғулотлар мультимедиа қурилмалари билан жиҳозланган аудиторияда бир академ гуруҳга бир ўқитувчи томонидан ўтказилиши лозим. Машғулотлар фаол ва интерактив усуллар ёрдамида ўтилиши, мос равишда муносиб педагогик ва ахборот технологиялар қўлланилиши мақсадга мувофиқ.

**“Кристаллокимё” фанидан
2018-2019 ўқув йили учун Амалий машғулотларини ўтказиш бўйича
КАЛЕНДАР ИШ РЕЖАСИ**

№	Ўтказиладиган мавзу	Соат	Ўтказилиш санаси	Ижро белгиси	Изоҳ
1	Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларнинг белгиларини (символларини) аниқлаш.	2	2-семестр		
2	Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.	2	2-семестр		
3	Г.Б.Бокий схемаси оддий модда, АХ, АХ ₂ , А ₂ Х ₃ бинар ва муҳим уч элементдан иборат модда бирикмаларни структур турлари.	2	2-семестр		
4	Дислокацияни геометрик хусусиятлари. Дислокация турлари.	2	2-семестр		
5	Кристалларнинг ўсиши.	2	2-семестр		
6	Силикатлар кристаллкимёси.	2	2-семестр		
7	Координацион бирикмаларнинг тузилиши.	2	2-семестр		
8	Суюқ кристаллар	2	2-семестр		
9	Кристалларнинг зичлиги	2	2-семестр		
	Жами	20			

VI. Семинар машғулотлари бўйича кўрсатма ва тавсиялар

Семинар машғулотлари учун тавсия этиладиган мавзулар:

11. Симметрия турларини систематикаси. Кристалларнинг стереографик проекцияси.
12. Кристаллар тузилишининг Федоров назарияси. Кристалларнинг геометрик назарияси.
13. Изоморфизм ва полиморфизм. Кристалларнинг тузилишини аниқловчи асосий факторлар.
14. Оддий моддалар ва бинар бирикмаларнинг тузилиши.
15. Кристаллардаги кимёвий боғланиш табиати. Кристалл панжара энергияси.
16. Структуравий кристаллографиянинг асосий тушунчалари ва асосий элементлари.
17. Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси
18. Координацион кўп кирралиликнинг айрим ҳоллари (кубсимон, октаэдр, тетраэдр ва бошқалар).
19. Лауэ шартлари. Дифракцион эффектни олиш усуллари.
20. Рентгенструктуравий тажрибаларини автоматлаштириш ва тезлаштириш мосламалари.

“Кристаллокимё” фанидан

2018-2019 ўқув йили учун Семинар машғулотларини ўтказиш бўйича КАЛЕНДАР ИШ РЕЖАСИ

№	Ўтказиладиган мавзу	Соат	Ўтказилиш санаси	Ижро белгиси	Изоҳ
1	Симметрия турларини систематикаси. Кристалларнинг стереографик проекцияси.	2	2-семестр		
2	Изоморфизм ва полиморфизм. Кристалларнинг тузилишини аниқловчи асосий факторлар.	2	2-семестр		
3	Кристаллардаги кимёвий боғланиш табиати. Кристалл панжара энергияси.	2	2-семестр		
4	Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси	2	2-семестр		
	Жами	8			

VII. Мустақил таълим ва мустақил ишлар

Мустақил таълим учун тавсия этиладиган мавзулар:

16. Кристаллар симметрияси. Табиатда илм-фанда ва техникада симметриянинг фундаментал аҳамияти. Кристалларни аниқлаш.
17. Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларни белгиларини (символларини) аниқлаш. Трансляция симметрияси. Трансляция оператори.
18. Кристаллар физикаси. Кристалларни физикавий хусусиятлари.
19. Нуқта гуруҳларини чегараланганлиги. Кюри принципи. Нейман принципи. Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.
20. Кристалларнинг физик хусусиятлари: механик, электрик, магнит ва оптик хусусиятлари.
21. Кристалларнинг таркиби, симметрияси ва структурасини боғлайдиган асосий кристаллокимёвий қонунлар. Грот, Фёдоров, Шубников қонунлари.
22. Кристаллардаги нуқсонлар. Нуқтавий, чизикли ва сирт нуқсонлари
23. Дифракцион расмлар геометрияси. Лауэграмма орқали кристаллографик ўқлар бўйича жойлаштириш. Стереографик проэкциялар тузиш.
24. Кристалл ёнларининг тасвири ва ёнлар орасидаги бурчакларни ҳисоблаш. Вульф сеткаси.
25. Кристалларнинг вужудга келиши ва ўсиши.
26. Қаттиқ, аморф ва кристалл моддалар ва уларнинг асосий хоссалари. Кристалл ҳолдаги моддаларнинг шакл тузилиши билан уларни физик-кимёвий хусусиятларини узвий боғлиқлиги.
27. Кристаллография, кристаллофизика ва кристаллокимё фанларини бири-бири билан боғлиқлиги, симметрия элементлари ва симметрия операциялари орқали заррачаларни (атомлар, ионлар ва бошқалар) элементар катакчада жойлашишни тушунтириш.
28. Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари. Кристалл структураси ва структура хиллари. Кристаллдаги атом ва ион радиусларини аниқлаш. Кристаллардаги кимёвий боғларини табиати.
29. Рентген нурларини табиати ва уларнинг кристаллдаги дифракцияси. Дифракцион эффектни олиш усуллари. Структуравий анализнинг босқичлар.
30. Дифракцион усуллар – рентгенография, электронография ва нейтронография усулларини ўхшашлиги ҳамда фарқлари. Кимёда РСА дан фойдаланишдан асосий мақсад.

Мустақил ўзлаштириладиган мавзулар бўйича магистрантлар томонидан рефератлар тайёрлаш ва уни тақдимот қилиш тавсия этилади.

VIII. Асосий ва қўшимча ўқув адабиётлар ҳамда ахборот манбаалари

Асосий адабиётлар

1. П.М.Зоркий. Симметрия молекул и кристаллических структур. М.: МГУ, 1986.-232 с.
2. Г.Б.Бокий. Кристаллохимия. М.: МГУ, 1971.-357 с.
3. В.С.Урусов. Теоретическая кристаллохимия. М.: МГУ, 1987.-275 с.

Қўшимча адабиётлар

4. Мирзиёев Ш.М. Эркин ва фаровон демократик Ўзбекистон давлатини биргаликда барпо этамиз. Тошкент, “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. - 29 б.
5. Мирзиёев Ш.М. Қонун устуворлиги ва инсон манфаатларини таъминлаш юрт тараққиёти ва ҳалқ фаровонлигининг гарови. “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. - 29 б.
6. Мирзиёев Ш.М. Буюк келажакимизни мард ва олижаноб ҳалқимиз билан бирга курашимиз. . “Ўзбекистон” НМИУ, 2017. -485 б.
7. Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги “Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида” ги ПФ-4947-сонли Фармони. Ўзбекистон Республикаси қонун ҳужжатлари тўплами, 2017. 6-сон, 70-модда.
8. Г.М.Кузьмичева. Основные разделы кристаллографии. М.: МИТХТ, 2002.-95с.
9. Е.В.Чупрунов, А.Ф.Хохлов, М.А.Фадеев. Основы кристаллографии. М.:Физматлит., 2004.-500 с.
- 10.П.М.Зоркий. Задачник по кристаллохимии и кристаллографии. М.: МГУ, 1981.-40 с.
- 11.И.Харгитгаи, М.Харгитгаи. Симметрия глазами химика, М.: Мир, 1989.
- 12.М.А.Порай-Кошиц. Основы структурного анализа химических соединений. М.: Выс.шк., 1989.-192 с.

Интернет сайтлари

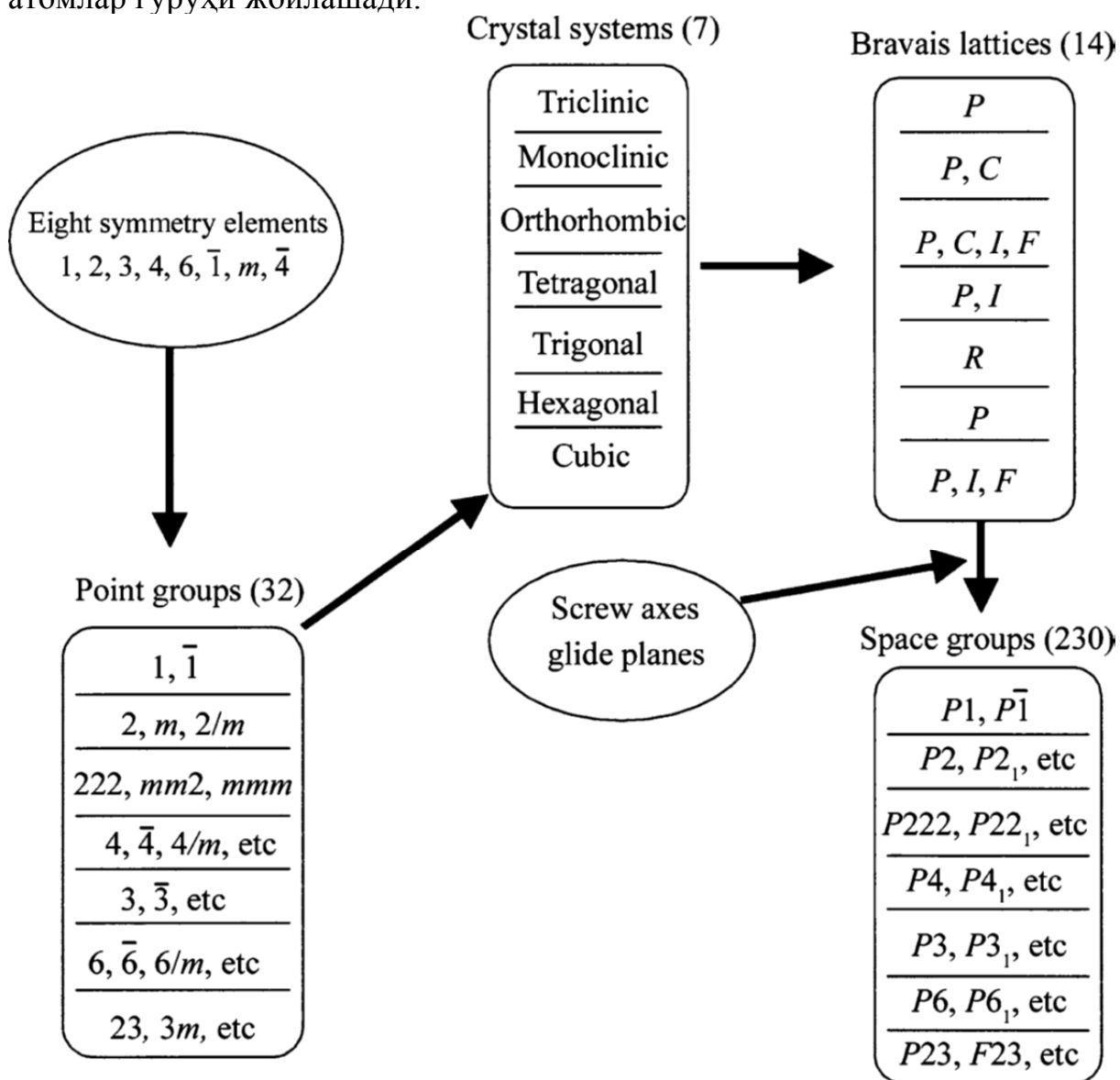
13. www.nuuz.uz.
14. www.natlib.uz.
15. www.ziyo.net.uz.
16. www.chemexpress.fatal.ru.

ЎҚУВ МАТЕРИАЛЛАРИ МАЪРУЗА МАТНИ

КРИСТАЛЛАР ГЕОМЕТРИЯСИ

Кристалл панжара системалари

Кристаллография келиб чиқиши кварц, пирит ва корунд каби табиий минералларнинг ташқи қурилишини ўрганишдан бошланган. Чунки бу минераллар симметриясида тўғрилик кузатилади. Бундай минераллар ҳақидаги маълумотлар геометрия ва гуруҳ назариясини қўллаб системалаштирилган. Кристаллографияси кристаллар қандай қилиб кичик бирликлардан тузилишини ўрганади. Бу бир хил структурал бирлиқларнинг чексиз такрорланишига мос келади ва улар одатда «элементар бирлик» (unit cell) дейилади. Бошқача қилиб айтганда барча кристалларнинг тузилиши кристалл панжара билан тасвирланиши мумкин ва уларда панжара тугунлари атомлар гуруҳи жойлашади.

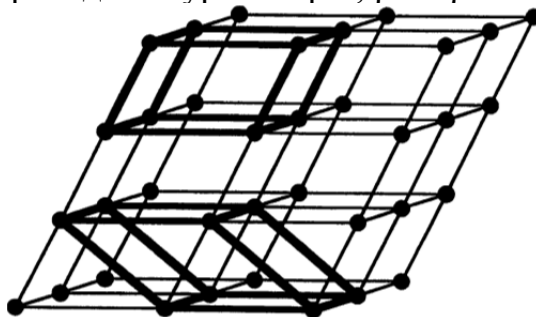


1-расм. Кристалларнинг симметрия элементлари ва уларнинг синфланиши.

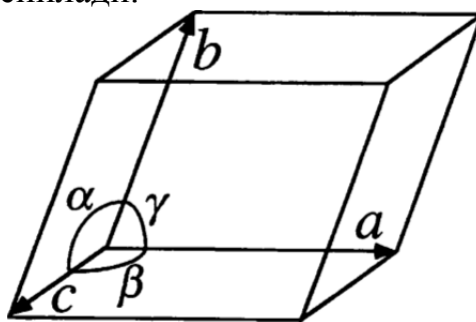
Кристаллар 32 та нуктавий гуруҳларга (point groups) синфланади ва булар 8 хил симметрия элементларига асосланади. 7 хил кристалл системаси 14 хил Браве панжараларига бўлинади. Бу боғлиқлик расмда тасвирланган.

Синфланиш шунингдек нуктавий гуруҳлар ёрдамида фазовий гуруҳларга ҳам кенгайди. Браве панжаралари, буралиш ўқлари (screw axes), силлиқ акс (glide reflection) ҳисобига барчаси бўлиб 230 хил кристалл панжара тури маълум ва ҳар қандай кристалл шуларнинг бирига мансуб бўлади.

Масалан, тугунларни фазода жойлашишидан ҳосил бўлган уч ўлчамли кристалл панжарани олайлик (2-расм). Кристалл панжара тугунларида атомнинг жойи ёки конфигурацияси тугунда ифодаланганда, ҳар бир тугун бир хил жойга эга бўлади. Яъни, тугунлар кичик бирликни такрорлашдан қайта ҳосил қилиниши мумкин. Бу кичик бирликларнинг қайта такрорланиши элементар бирлиги дейилади ва ҳар бир кетма-кетлик 3 хил вектор a , b ва c , улар орасидаги бурчаклар α , β ва γ билан ифодалаш мумкин.



2-расм. Панжара тугунда элементар бирликларини турлича танлаш. a , b ва c векторлар ва улар орасидаги бурчаклар α , β ва γ орасидаги боғлиқлик 3 расмда келтирилган. Бу векторларнинг узунликлари ва бурчаклар ўлчами панжара параметрлари дейилади.



3-расм. Элементар бирлик.

2-расмдан кўриниб турибдики, кристаллда элементар бирликни бир неча хил танлаш мумкин ва энг маъқул йўл барча йўналишлар энг юқори симметрияга эга бўлгандир. Бошқа томондан 3-расмдаги элементар бирликда барча веторлар ва улар орасидаги бурчаклар турлича. Бу расмдаги системага триклин системаси дейилади ва фақатгина бир марталик симметрияга – буралиш инверсиясига $\bar{1}$ эга.

Макроскопик симметрия жараёнлари ёки элементлари 4 та: «акс этиш», «буралиш», «инверсия» ва «буралиш инверсияси». Масалан, кубда бир неча текисликларнинг симметриясини кузатиш мумкин.

Акс этиш симметриясида агар жисмдан бирор текислик ўтказсак, унинг икки томони ўзаро ойнадаги аксини ҳосил қилади. Жисм n -марта буралиш симметриясига эга бўлиш учун $у (360/n)^\circ$ га буралганда яна ўз ҳолатига қайтиши керак. масалан, кубда томонларининг 4- марталиқ, диагонал бўйича 3-марталиқ ва икки қарама-қарши қиррани бўйича 2 марталиқ буралиш симметрияси мавжуд. Буралиш ўқлари 1, 2, 3, 4 ва 6 марталиқ бўлади. Лекин 1 марталиқ буралиш ҳеч қандай симметрия йўқлигини кўрсатади.

Агар жисмда инверсион марказ бўлса, жасмнинг ҳар бир нуқтаси инверсион марказда қарама-қаршиликка эга бўлади. Бу қарама-қарши нуқталар инверсион марказдар тенг масофада жойлашади. Масалан, кубда диагонал бўйича инверсион марказ мавжуд. Умуман олганда, бурилиш-инверсион ўқи учун бир, икки, уч, тўрт ёки олти марталиқ ўқлар мавжуд. Жисм n -марталиқ буралиш-инверсион симметрияга эга бўлиши учун $у (360/n)^\circ$ да ўқ бўйича буралганда яна дастлабки ҳолатини олиш керак.

Кристалл панжара тугунлари тегишли нуқталарни кўйиб ва минимал симметрия элементларини топиш орқали 7 хил кристалл системасини ҳосил қилиш мумкин (1-жадвал).

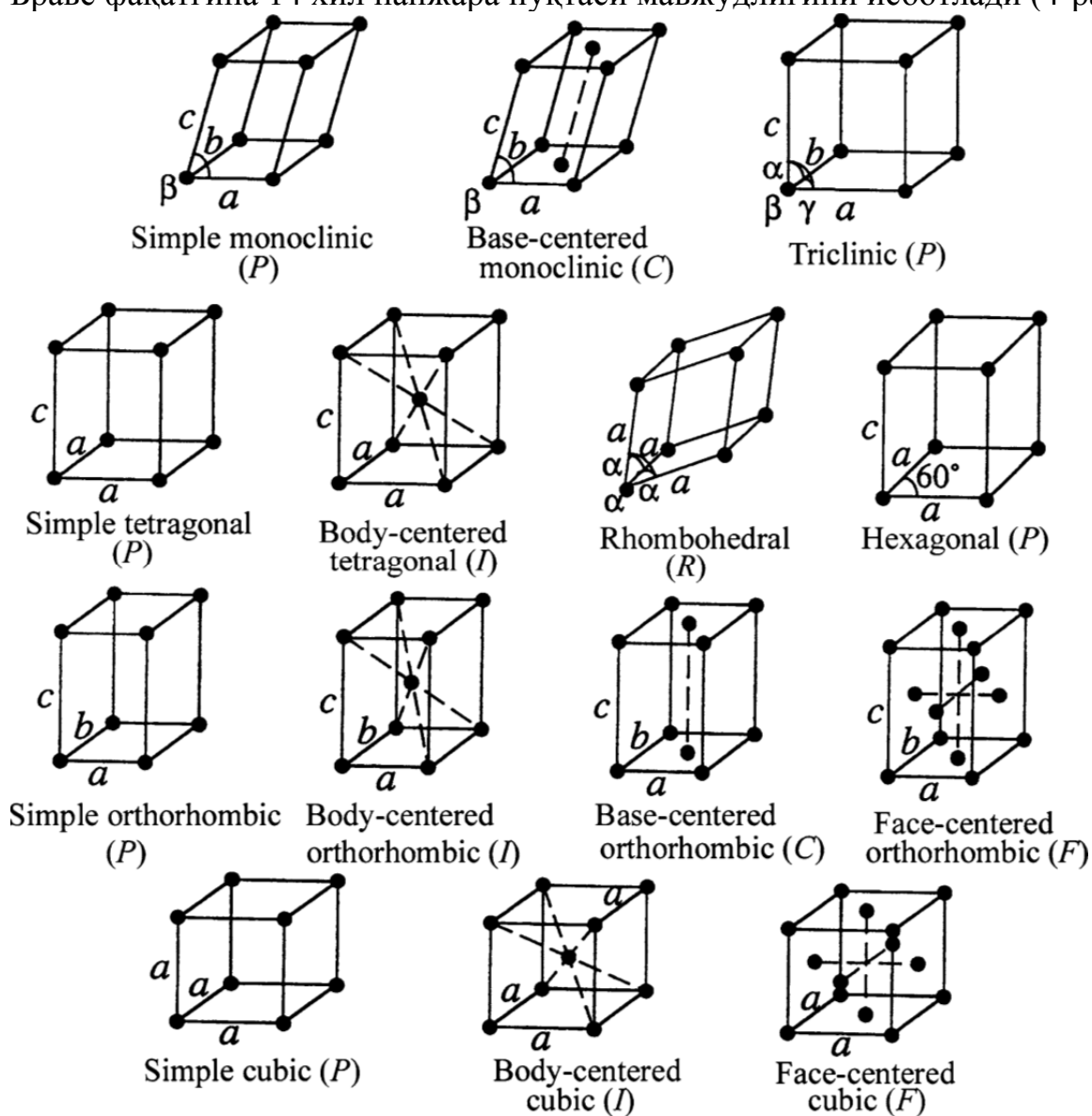
1-жадвал.

7 хил кристалл системаси ва Браве панжаралари

Система	Аксиал узунликлар ва бурчаклар	Браве панжараси	Белгиси
Куб	Учта тенг ўқлар бурчакда $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Оддий Ҳажмий марказлашган Ўқлари марказлашган	P I F
Тетрагонал	Учта ўқлар бурчакда, иккитаси тенг $a=b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Оддий Ҳажмий марказлашган	P I
Орторомбик	Учта тенг бўлмаган ўқлар бурчакда $a \neq b \neq c, \alpha=\beta=\gamma=90^\circ$	Оддий Ҳажмий марказлашган Асоси марказлашган Ўқлари марказлашган	P I C F
Тригонал	Учта тенг ўқлар бурчаклимас $a=b=c, \alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$	Оддий	R
Гексагонал	Иккита тенг бир текисликдаги ўқлар учинчи ўқ бурчакда 120°	Оддий	P

	$a=b \neq c, \alpha=\beta=90^\circ; \gamma=120^\circ$			
Моноклиник	Учта тенг бўлмаган ўқлар, бир жуфти тўғри бурчаклимас	Оддий Асоси марказлашган		P C
	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \gamma = 90^\circ \neq \beta$			
Триклиник	Учта тенг бўлмаган ўқлар ва ҳеч қайсиси тўғри бурчаклимас	Оддий		P
	$a \neq b \neq c, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$			

Шундай қилиб, барча кристалллар фақатгина еттита кристалл системага синфланиши мумкин. Бундан ташқари, ҳар бир нуқта бир хил камровга эга бўлишини бошқа йўллари ҳам мавжуд. Француз физиги Август Браве фақатгина 14 хил панжара нуқтаси мавжудлигини исботлади (4-расм).

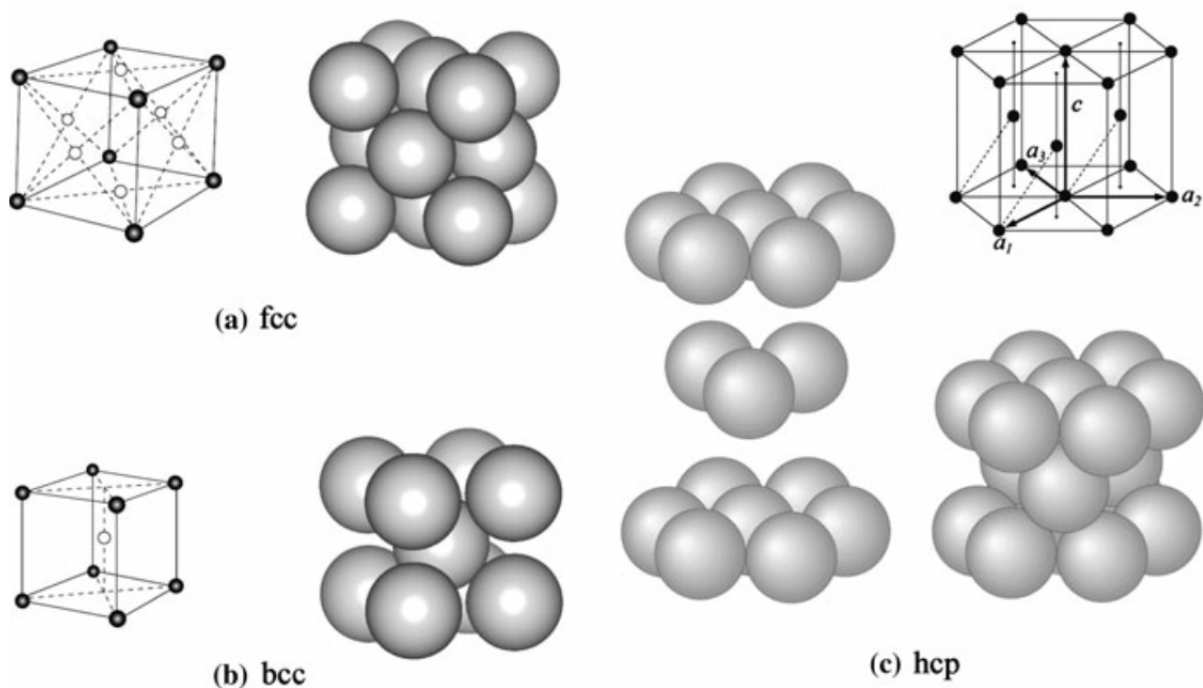


4-расм. 14 хил Браве панжаралари.

P , F , I ва ҳ.к. белгилар куйидаги шарт асосида берилган. Агар элементар бирликда фақатгина битта панжара нуқтаси бўлса, у примитив

(оддий) панжара дейлади ва P билан белгиланади. Лекин тригонал системани R билан белгилаймиз. Бошқа белгилашлар айна панжара учун биттадан ортиқ панжара нуқтаси мос келганда қўлланилади. Ёки фақатгина панжара қирраларида нуқталари бўлганлари оддий, пандара юзининг ичида ва сиртида қўшимча нуқталари бўлган панжаралар оддий бўлмаган кристалларга бўлиниши мумкин. I ва F ҳажмий марказлашган ва ёқлари марказлашган кристалларга мос келади. A , B ва C асоси марказлашган кристалларни билдириб, C a ва b ўқлардан ҳосил бўлган юзга нисбатан олинганлигини билдиради.

Турли моддалардаги атомларнинг турлича тақисмланиши улар кристалл тузилишида даврийлик борлигини кўрсатади. Шубҳасиз, бу қўлланмада барчасини қамраб олиш имкони йўқ. Даврий системанинг кўпчилик қисми металллар ташкил қилади ва уларнинг 70% и оддий тузилишга эга ва юқори симметриялидир. Масалан, ҳажмий марказлашган куб (bcc), ёқлари марказлашган куб (fcc) ва гексагонд зич тахламли (hcp) кристаллар шулар жумласидандир (5-расм).



5-расм. Металларнинг кристалл тузилиши.

Кристалларни боғ табиатига кўра 3 та синфга: металл, ион ва ковалент тузилишли кристалларга бўлиш мумкин. Металл кристалларда катта сондаги эркин электронлар (ўтказиш соҳасидаги ва валент) мавжуд бўлиб, улар фақатгина битта атомга тегишли бўлмасдан умумий системага тегишли бўлади. Ўтказиш соҳасидаги электронлар ҳисобига бўлган боқ унчалик кучли эмас. Масалан, ишқорий металллардаги атомлараро масофа сезиларли катта. Бу эса кучсиз боғ ва оддий тузилишга олиб келади. Ион тузилишли кристалларда эса мусбат ва манфий зарядли ионлар бўлиб, улар электростатик кучлар таъсирида боғланган.

Ион тузилишли кристалларда ионларнинг жойлашиши электростатик итарилишни сусайтириб, тортишишни кучайтиради. Кўп ҳолларда манфий

зарядланган анионлар катта ўлчамга эга бўлиб, зич тахланади. Улар бевосита боғланмаслиги учун орадаги бўш жойларни кичик ўлчамли катионлар эгаллайди. Шунинг учун кристалл тузилиш ва ўлчам нисбати орасида боғлиқлик бор. Масалан, ион радиус орасидаги нисбат r_c/r_a (r_c – катион радиуси, r_a – анион радиуси) 0,225 бўлса, тетраэдрик тузилишли ва координацион сон 4 га, агар 0,414 га тенг бўлса, октаэдрик тузилишли ва координацион сон 6 га тенг бўлади.

Ковалент тузилишли кристалларди кучли йўналувчанлик мавжқд ва уларга кремний ва германийни мисол қилиш мумкин. Бу кристаллар олмоссимон тузилишли бўлиб, тетраэдрик шаклги эга.

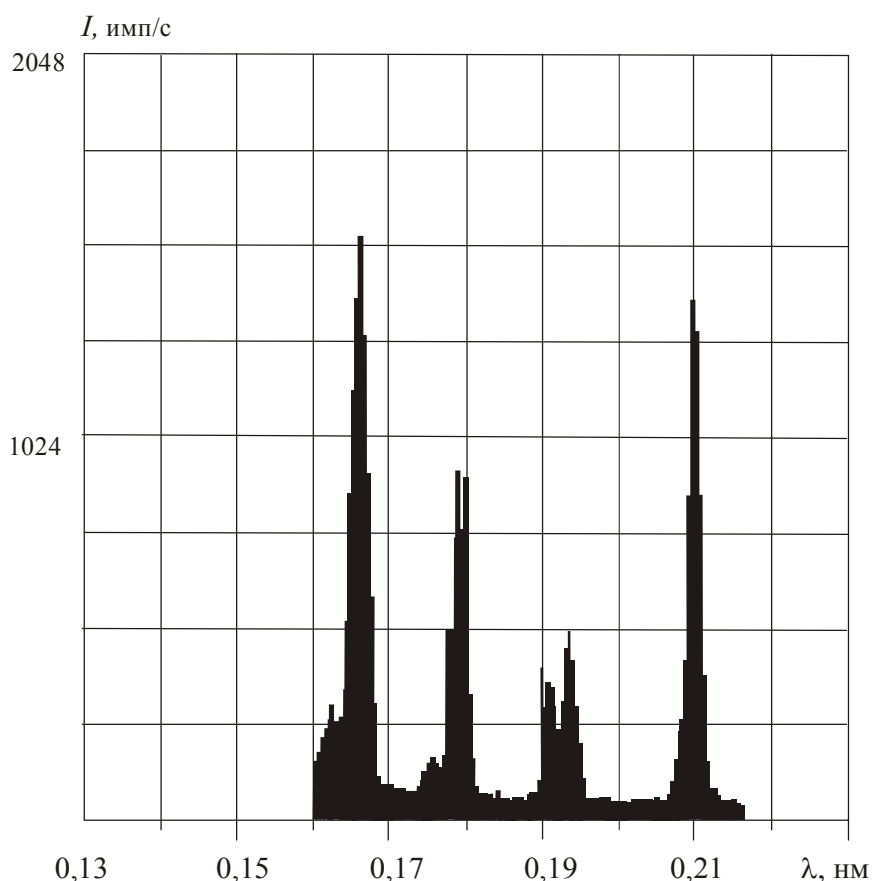
РЕНТГЕН СПЕКТРОСКОПИЯ УСУЛИ

Намуна томонидан чиқарилган (рентген эмиссион анализ, қисқача - РЭА ва рентген флуоресцент анализ, қисқача - РФА ларда) ёки намунадан ўтган (рентген абсорбцион анализ, қисқача-РАА да) рентген нурлари интенсивлигининг энергия (ёки тўлқин узунлиги) бўйича тақсимланишига рентген спектри дейилади.

Рентген спектроскопияси усуллари атомларнинг ички (2.1в,г - расм) электронларини бир ҳолатдан бошқа ҳолатга ўтишига асосланган. Бундай ўтишлар атом томонидан битта ёки бир нечта электронларни чиқариш (ионлаштириш) билан боғлиқ. Шунинг учун, рентген спектроскопияси усулларида атом томонидан чиқарилаётган ёки ютилаётган электромагнит нурларни яъни фотонларни, уларнинг энергияси (тўлқин узунлиги, частотаси) бўйича тақсимланишини қайд қилиш мумкин.

Атомга катта энергияга эга бўлган электронлар дастаси ёки рентген нурлари билан таъсир этиш натижасида унинг ички электронларидан бири уриб чиқарилган бўлсин. Ҳосил бўлган бўш жой юқори қаватлардаги электронлардан бирининг ўтиши натижасида тўлдирилади. Ўтиш натижасида бу жараёнда қатнашаётган энергетик сатҳлар орасидаги фарқга тенг бўлган энергия ҳосил бўлади. Бу энергия рентген квантлари кўринишида чиқарилади ёки қаватлардаги бошқа электронга берилади (Оже эффект).

Одатда рентген чиқариш спектрларида чизиқлар сони кам бўлади. Қуйидаги расмда (7.3 - расм) металл қотишмасининг рентген флуоресцент спектри кўрсатилган.



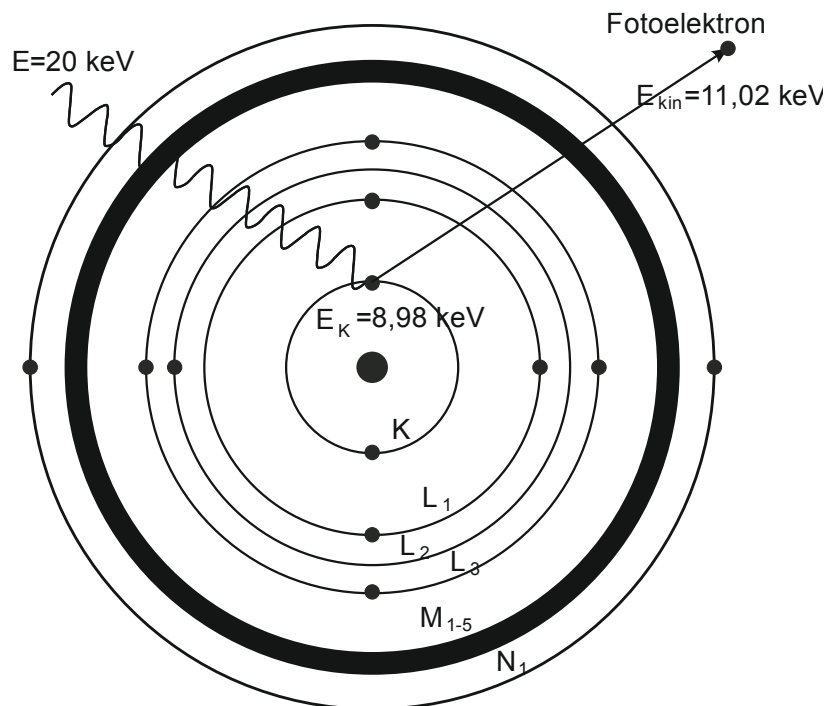
7.3-расм. Металл қотишмасининг рентген флуоресцент спектри.

Қаттиқ жисм атомларининг электронларидан ноэластик сочилиш натижасида ҳосил бўлган рентген нурланишининг квантлари, эмиссион рентген спектрининг фониға тегишли сигналларни ҳосил қилади. Атомнинг ички электрон сатҳлари орасида электрон ўтишлар бўлганда, рентген нурлари чиқади. Рентген спектрларининг нисбатан оддийлиги, эҳтимолияти катта бўлган электрон ўтишлар сонининг чекланганлиги билан боғланган.

Рентген спектри учун атамалар мажмуи

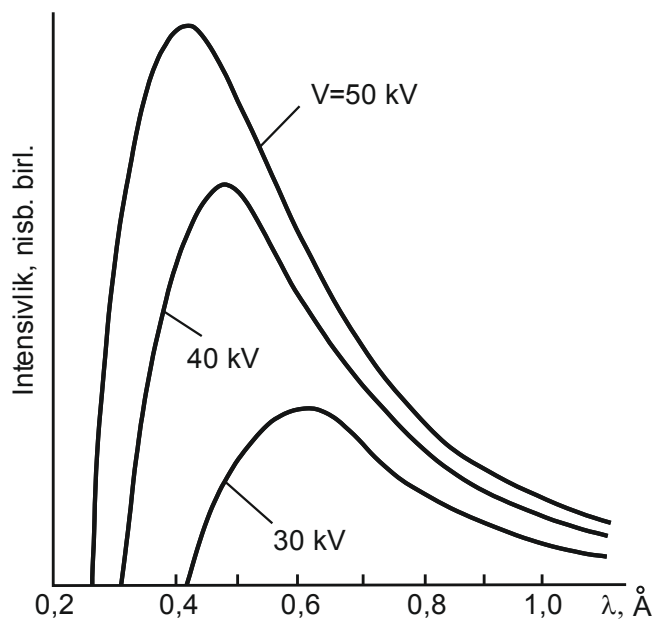
Рентген спектридаги чизиқларни белгилаш учун рентген кванти ҳосил бўлиш механизмини кўрсатувчи символларнинг бирикмаси ишлатилади. Масалан, $MgK_{\alpha 1}$, бу ерда Mg - элементнинг симболи, K - атомни кўзғатиш вақтида ионланган электрон сатҳ бош квант сонининг индекси, кейинчалик худди шу сатҳға релаксация натижасида юқорирок турган сатҳдан электрон ўтади, α - электрон ўтиш натижасида бош квант сон (n) ўзгаришининг қийматини кўрсатади. $\Delta n = 1(\alpha)$, $\Delta n = 2(\beta)$, $\Delta n = 3(\gamma)$ 1, 2, 3 - электрон сатҳчанинг номери. Рентген спектрида α - чизиқнинг интенсивлиги максимал бўлади, бунинг сабаби $\Delta n = 1$ бўлганда электрон ўтишлар имкониятининг (эҳтимолиятининг) энг катта бўлишидир. Рентген нурлари чиқарилганда ва ютилганда содир бўладиган электрон ўтишларнинг схемаси ҳамда бунинг

натijasida hosil b'uluvchi spektр chiziqларининг белгиланиши 7.4 - расмда келтирилган.



Energiyasi 20 keV bo'lgan rentgen fotonining misning K-elektroni tomonidan yutilishi

7.4 - расм. Рентген чиқариш спектрларининг hosil b'улиши.

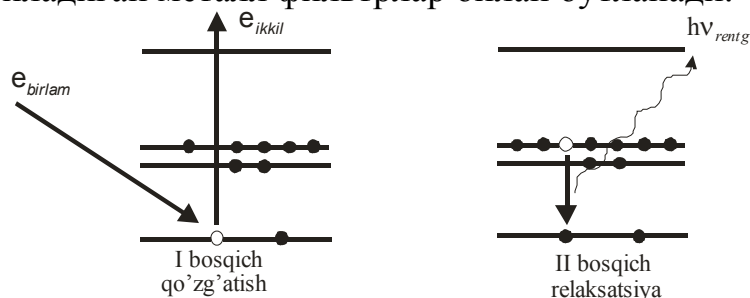


Tormozlanishda chiqadigan rentgen nurlanishining spekt

Спектрни кўзгатиш манбалари

Рентген эмиссион (чиқариш) (РЭА), рентген абсорбцион (ютилиш) (РАА) ва рентген флуоресцент (РФА) усулларида спектрни ҳосил қилиш учун рентген трубкаси ишлатилади. Термоэмиссион катод ва яхши иссиқлик ўтказиш қобилиятига эга бўлган қийин эрувчи материалдан (W, Mo, Cu ва бошқалар) қилинган совутиладиган аноддан иборат электродлар рентген трубкасининг асосий элементлари ҳисобланади. Трубканинг ҳавоси сўриб олиниб юқори вакуум ҳосил қилинади. Кучланганлиги 20-60 кВ бўлган электр майдонида тезлаштириладиган термоэлектронлар анод юзасига келиб урилади. Анод материали орқали электронлар ўтганда, уларнинг боғланган ва эркин электронлардан эластик ва ноэластик сочилиши содир бўлади. Бирламчи электроннинг сочилиш жараёни унинг энергиясини камайишига, ҳаракатининг секинлашишига яъни, тормозланишига олиб келади.

Атомнинг электромагнит майдонида тезланиш билан ҳаракат қилаётган зарядланган заррача (электрон) ўзидан узлуксиз электромагнит рентген нурланиш (тормозланиш натижасида нурланиш) спектрини чиқаради. Агар, ноэластик сочилиш жараёнида бирламчи электроннинг боғланган электронга берган энергияси, тегишли электрон сатҳни ионлаштириш энергиясидан катта бўлса, бу ҳолда шу энергия сатҳида жойлашган электроннинг уриб чиқарилиши содир бўлади ва бу ҳодисага электрон зарб орқали ионлаштириш дейилади. Агар бирламчи электроннинг энергияси ионлаш энергисидан 3 - 4 марта катта бўлса, бундай жараённинг содир бўлиш эҳтимоли энг катта бўлиши тажрибада аниқланган. Бу маълумот рентген трубкасининг тегишли ишчи параметрларини танлашда ҳисобга олинади. Ионланган атомни турғун ҳолатга қайтиши яъни релаксацияси икки хил йўл билан амалга ошади, биринчиси характеристик рентген нуруни (квантини) чиқариш (7.5- расмга қаранг) ва иккинчиси оже-электронни чиқариш орқали. Шундай қилиб, рентген трубкасининг чиқариш спектри - бу тормозланганда чиқадиган узлуксиз ва характеристик нурланишларнинг бирикмасидир. Одатда рентген трубкалари, чиқариш спектрининг у ёки бу қисмини ажратиб олиш учун ишлатиладиган металл филтёрлар билан бутланади.



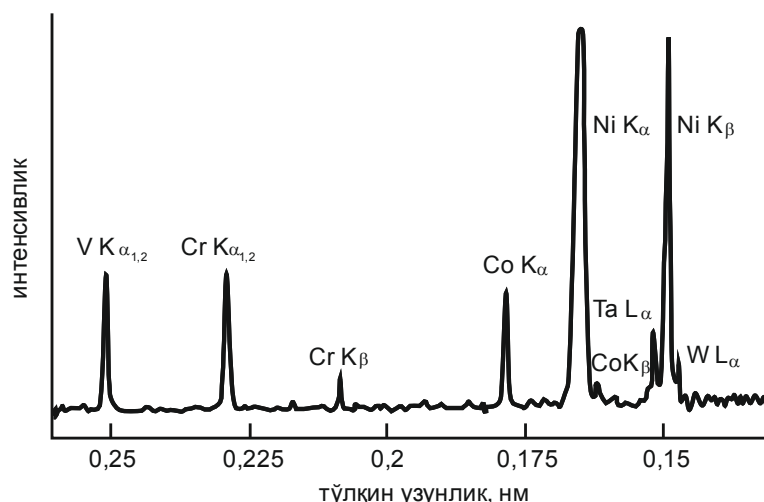
7.5-расм. Рентген нури ҳосил бўлишининг модели.

РЭА да текширилаётган намуна рентген трубкасининг анодига ўрнатилади. Намунани электронлар билан бомбардимон қилиш натижасида унинг юзасидан рентген нурлари чиқа бошлайди. РАА ва РФА усулларида

спектрни кўзғатиш учун рентген трубки чиқараётган бирламчи рентген нурлари ишлатилади. РАА усулида ишлатиладиган рентген нурларининг монохроматиклик даражаси юқори бўлиши керак.

Электронзондли рентген спектрал микроанализ усули (РСМА) РЭА нинг кўриниши ҳисобланади. Бу усулда рентген спектрини кўзғатиш учун бир хил энергияга эга бўлган электронлар дастаси (дастанинг энергияси 10 - 30 кэВ диаметри 1 - 2 мкм) ёки ўлчами 10x10 дан то 50x500 мкм майдонда ўзгартириладиган электрон даста-растр ишлатилади. Биринчи ҳолда, нуқтавий анализ, иккинчи ҳолда эса, юзанинг қисмини анализ қилиш амалга оширилади. Шундай қилиб, РСМА локал анализ усули ҳисобланади (локал - маълум бир жойни анализ қилиш). Бу усулда кўзғатиш манбаи сифатида электрон пушка ишлатилади. Электрон пушка авто ёки термоэмиссион катод ҳамда тезлатувчи ва фокусловчи электростатик ёки магнит линзалардан ташкил топган системадан иборат бўлиб юқори вакуум шароитида ишлайди.

Рентген чиқариш спектрлари ёрдамида анализ



Сифат анализи. Атом электрон сатҳлари энергияларининг фарқи ΔE ҳар бир элемент учун хусусий бўлганлиги учун уларнинг рентген спектридаги чизиғининг жойига, яъни тўлқин узунлигига қараб элементни топиш мумкин. Эмиссион рентген спектридаги (РЭА, РФА) чизиқнинг ўрнини Мозли конунидан фойдаланиб баҳолаш (топиш) мумкин

$$\Delta E = h\nu \cong \frac{2\pi^2 m_e e^4 (Z - \sigma)^2}{h^2} \left(\frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{n_1^2} \right) \quad (7.1)$$

бу ерда ν - рентген спектридаги чизиқнинг частотаси, m_e - электроннинг массаси, e - электроннинг заряди, h - Планк доимийси, Z - элементнинг атом номери, σ - экранланганлик доимийси, n_0 ва n_1 - бошланғич ва охириги ҳолатларнинг бош квант сонлари.

Рентген нурининг частотаси ва тўлқин узунлиги қуйидагича боғланган.

$$\frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} \quad (7.2)$$

λ - рентген нурунинг тўлқин узунлиги, c - ёруғликнинг вакуумдаги тезлиги.

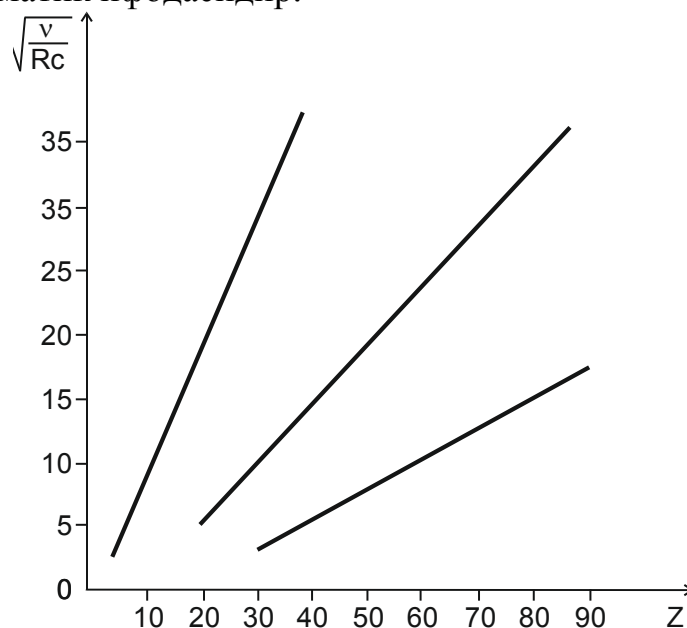
Маълумки

$$\frac{m_e e^4 2\pi^2}{h^3 c} = R \quad (7.3)$$

ифода Ридберг доимийсига тенг. (7.2) ва (7.3) ифодаларни ҳисобга олиб (7.1) ни қуйидагича ўзгартириб ёзиш мумкин.

$$\frac{1}{\lambda} = RZ^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad (7.4)$$

Тажрибада олинadиган рентген нурунинг тўлқин узунлигига тескари бўлган катталиқ (яъни ν/c) тегишли электрон ўтишнинг турига ва атом номерининг квадрaтига тўғри пропорционал бўлади. Бу боғланиш Мозли қонунининг матемaтик ифодасидир.



Тегишли электрон ўтишга мос келувчи (масалан, $L \rightarrow K$, $M \rightarrow K$ ва ҳоказо) рентген нурунинг тўлқин узунлигини (7.4) орқали аниқлаб намунанинг таркибига кирувчи элементларни атом номерларини топиш мумкин, яъни сифат анализи ўтказиш мумкин. Масалан, намунанинг спектрида тўлқин узунликлари 0,2102 ва 0,2106 нм бўлган $K_{\alpha 1}$ ва $K_{\alpha 2}$ спектр чизиқлар бўлса, тўлқин узунликлари бўйича тузилган жадвалдан (7.1-жадвал) бу чизиқларни тартиб номери 25 бўлган атом, яъни марганец чиқараётганлиги маълум бўлади.

Баъзи элементларнинг рентген флуоресцент анализда ишлатиладиган аналитик чизиқлари қуйидаги жадвалда келтирилган.

7.1-жадвал. Элементларнинг рентген флуоресцент усулда ишлатиладиган аналитик чизиқлари.

Атом номери	элемент	$K_{\alpha 1}$, нм	$K_{\alpha 2}$, нм
13	Алюминий	0,8339	0,8340
14	Кремний	0,7125	0,7128
15	Фосфор	0,6154	0,6157
16	Олтингугурт	0,5372	0,5375
17	Хлор	0,4727	0,4730
18	Аргон	0,4191	0,4194
19	Калий	0,3741	0,3744
20	Калций	0,3358	0,3361
21	Скандий	0,3031	0,3034
22	Титан	0,2748	0,2752
23	Ванадий	0,2503	0,2507
24	Хром	0,2289	0,2293
25	Марганец	0,2102	0,2106
26	Темир	0,1936	0,1940
27	Кобальт	0,1789	0,1793
28	Никель	0,1658	0,1662

Рентген флуоресцент усул билан сифат анализи ўтказганда рентген трубкадан чиқаётган полихроматик (ҳар хил тўлқин узунликка эга бўлган нурлар) нурларнинг энергияси анализ қилинаётган намунанинг таркибига кирувчи элементларнинг K - электронларини уриб чиқариш учун керак бўладиган энергиядан катта ёки унга тенг бўлиши зарур. Шундай ҳолда иккиламчи рентген нурларининг спектри юқоридаги жадвалда келтирилган характеристик рентген чизиқларига эга бўлади.

Ютилиш чегарасининг жойи ҳам ҳар бир элемент учун характерлидир. Шунинг учун, намунадан ўтган ютилиш четларини чегараловчи иккита тўлқин узунликдаги нурларнинг интенсивликларини ўлчаш РАА да элементнинг нима эканлигини аниқлаш учун етарлидир. Бу усуллар билан аниқлаш чегаралари қуйидагича; РСМА да $-0,001$ % масс. ва РФА да $-(0,1 - 1,0)$ мкг/г.

Микдорий анализ. РЭАда микдорий анализ даражалаш графиги усули орқали ўтказилади. Анализ ўтказиш учун битта солиштириладиган стандарт намуна етарлидир. Намунанинг сифат ва микдорий таркиби тўғрисидаги [тажрибага боғлиқ бўлмаган маълумотлардан фойдаланиб] тегишли энергияга эга бўлган электронлар атомнинг тегишли сатҳидаги электронлар билан тўқнашганда рентген нури чиқиш эҳтимолини, бу рентген нури намунанинг бошқа атом томонидан ютилиш эҳтимолиятини ва бошқа омилларни ҳисобга олувчи назарий тузатишлар киритилади. Микдорий аниқлаш оралиғи $0,01 - 100$ % масс. гача. Микроанализ натижаларининг нисбий стандарт четланиши $0,15 - 0,2$.

Усулнинг қўлланилиши ва унинг имкониятлари

РЭА қаттиқ намуналарда бир вақтда кўп элементли сифат ва миқдор анализлари ўтказиш имкониятини беради. Энергия бўйича спектрга ажратувчи спектрометрлар орқали Na дан то урангача бўлган ихтиёрий элементни аниқлаш мумкин, тўлқин узунлигига қараб ажратадиган спектрометр орқали эса бордан то урангача бўлган ихтиёрий элементни аниқлаш мумкин. Енгил матрицадаги элемент қанча оғир бўлса, унинг аниқлаш мумкин бўлган концентрациясини шунча камайтириш мумкин.

Рентген флуоресцент анализ

Бу усулда намунага трубкадан чиқаётган бирламчи рентген нурлари таъсир эттирилади. Бунинг натижасида намуна ўзидан рентген нурлари чиқара бошлайди. Бу иккиламчи рентген нурлари намунанинг сифат ва миқдорий таркибига боғлиқ бўлади.

Трубкадан келаётган бирламчи рентген фотонлари атом ядросига энг яқин жойлашган орбиталдан, яъни К - қатламда жойлашган электронларни уриб чиқараётган бўлсин. Ҳосил бўлган бўш жойларга ядродан узоқроқ турган L, M ва бошқа қатламларда жойлашган электронлар ўтади (7.5-расмга қаранг). Бу ўтишлар натижасида иккиламчи рентген нурланишлари ҳосил бўлади.

Юқорида айтганимиздек К - сатҳда тугайдиган ҳамма ўтишлар К - чизиқларнинг пайдо бўлишига олиб келади. Қайси энергетик сатҳдан (L ёки M - қатламдан) электронни ўтишига қараб ҳосил бўлган чизиқлар K_{α} - ёки K_{β} - деб белгиланади. Энергияси юқори бўлган сатҳлардан L - қатламга электронни ўтиши натижасида L - чизиқлар ҳосил бўлади. Улар мос равишда L_{α} - (M - қатламдан ўтганда) ёки L_{β} (N - қатламдан ўтганда) символлари билан белгиланади.

Рентген флуоресцент усули билан миқдорий анализ ўтказиш учун характеристик рентген чизиқларининг интенсивлигини ўлчаш керак.

Атомнинг юқори энергетик сатҳларидан асосий сатҳнинг бўш жойига электрон ўтганда, ҳар доим ҳам рентген нурлари ҳосил бўлавермайди. Рентген нурлари чиқмайдиган ўтишлар ҳам учраб туради, хусусан, келаётган рентген нурларининг энергияси ташқи валент электронларни қўзғатишга ва уриб чиқаришга сарфланса. Характеристик рентген нурларининг ҳосил бўлишига олиб келувчи ўтишлар сони n_i нинг умумий ўтишлар сонига нисбатига флуоресценциянинг чиқиши (W) дейилади. У, қуйидаги яримэмпирик тенгламага кўра элемент атом номерининг ортиши билан кўпаяди.

$$W = \frac{Z^4}{Z^4 + 32.2^4} \quad (7.5)$$

Масалан, кислороднинг К-чизиқлари учун флуоресценциянинг чиқиши 0,08% бўлган ҳолда мис учун у 0,40% га тенг. Енгил элементларни аниқлаш

учун рентген флуоресцент усулнинг сезгирлиги камдир. Шунинг учун у, атом номери ($Z \leq 13$) ўн учдан катта бўлган элементларни аниқлаш учун ишлатилади.

Миқдорий анализ қилинаётган модданинг характеристик рентген нурланишининг интенсивлиги қуйидаги омилларга боғлиқ:

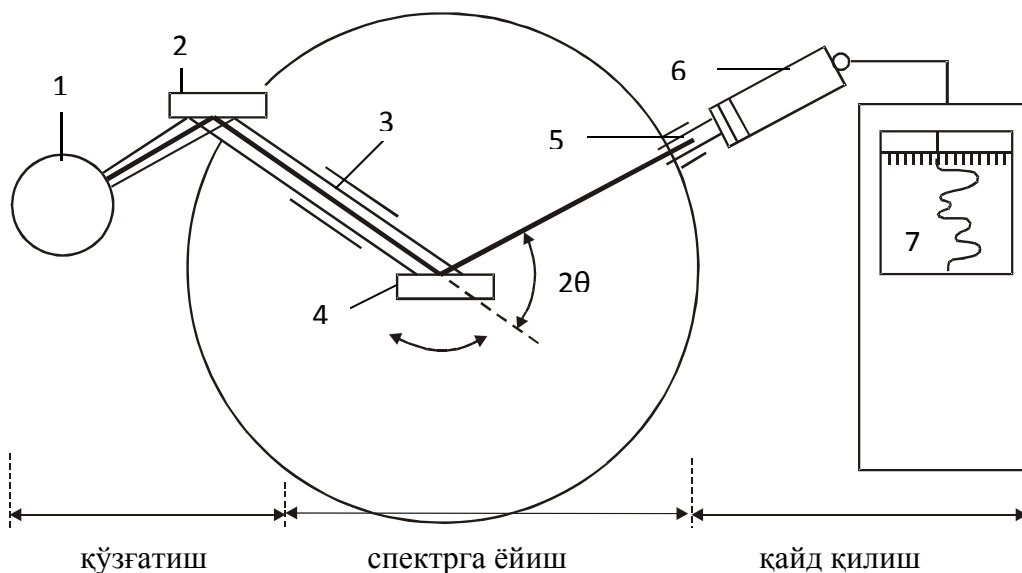
Рентген трубкадан чиқаётган бирламчи рентген нурларининг интенсивлигига ва унинг тўлқин узунликлари бўйича тақсимланишига.

Аниқланаётган элементнинг намунадаги концентрациясига яъни унинг атомларини умумий миқдорига.

Намуна қатламининг қалинлигига. Плёнка ҳолидаги намунанинг қалинлиги ортган сари аниқланаётган атомларнинг миқдори ортади ва қўзғатилган атомлар чиқараётган рентген нурларининг интенсивлиги ҳам кўпаяди. Демак, қандайдир чегарагача интенсивлик қалинликка пропорционал бўлади. Лекин намунанинг қалинлиги маълум бир чегаравий қийматга етгандан сўнг, уни оширган билан интенсивлик ўзгармасдан қолади. Бу ҳодиса, ҳосил бўлган характеристик нурларни намуна ичида ютилиши билан тушунтирилади.

Намунани асосини ташкил этувчи модданинг характериға, яъни ҳамроҳ элементларнинг миқдорига ва табиатиға боғлиқ. Буларнинг ҳаммаси биргаликда матрица эффекти дейилади. Бирламчи рентген нурларининг бир қисми ҳамроҳ элементлар, яъни матрица томонидан ютилади.

Рентген флуоресцент анализ ўтказадиган асбобнинг принципиал схемаси 7.6 - расмда келтирилган.



7.6 - расм. Рентген флуоресцент анализ ўтказиладиган асбобнинг принципиал чизмаси. I - атомни қўзғатувчи қисм; II - рентген нурларини спектраға ёёувчи қисм; III - спектрни қайд қилувчи қисм; 1 - рентген трубкаси, 2 - намуна, 3, 5 - коллиматорлар, 4 - кристалл-анализатор, 6 - сигнални қабул қилувчи детектор, 7 - компьютер.

Рентген трубкасидан 1 чиқаётган бирламчи рентген нурлари 2 намунага тушиб унинг таркибига кирувчи атомларни кўзгатади. Кўзгалган атомлар ўзидан иккиламчи характеристик рентген нурлари чиқара бошлайди. Намунанинг юзасидан қайтаётган тўлқин узунлиги ҳар хил бўлган рентген нурлари уларни ичидан қатъий параллел бўлган қисмини ажратиб олиш учун 3 коллиматор ва ўзаро параллел молибден пластинкалардан иборат система орқали ўтказилади. Нурларнинг параллел бўлмаган ёйилиб кетаётган қисми трубкаларнинг ички юзаси томонидан ютилади. Намунадан келаётган нурлар 4 кристалл-анализатор томонидан спектрга ёйилади яъни, тўлқин узунликлари бўйича тақсимланади. Нурларни кристалдан қайтиш бурчаги θ тушиш бурчагига тенг. Лекин, бундай бурчак билан тўлқин узунлиги λ Брег тенгламаси орқали боғланган нурларгина қайтади.

$$\lambda = 2d \sin \theta \quad (7.6)$$

Бу ерда d - кристалл-анализатор панжарасидаги атом текисликлари орасидаги масофа.

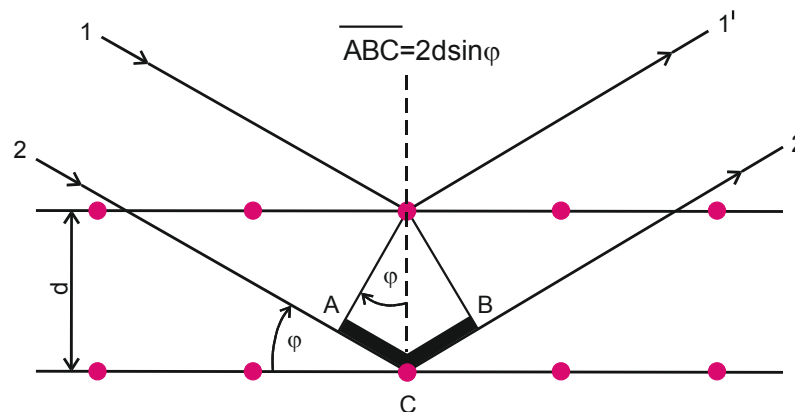
Кристалл-анализаторни айлантириб θ бурчакни ўзгартириш орқали тўлқин узунлиги турлича бўлган қайтган нурларни қайд қилиш мумкин.

Кристалл-анализатор сифатида турли моддаларнинг кристаллари ишлатилади. Уларнинг баъзилари атом текисликлари орасидаги масофалари кўрсатилган ҳолда 2.3 - жадвалда келтирилган.

7.2 - жадвал. Рентген флуоресцент анализда қўлланиладиган кристалл-анализаторлар.

Кристалл	2d, нм	Кристалл	2d, нм
Кварц	0,1624	Этилендиаминдитартрат	0,8803
Топаз	0,2712	Аммоний фосфат	1,064
Литий фтор	0,4026	Калий гидрофталат	2,640

Агар кристалл-анализатор сифатида литий фтор ишлатилса ($2d = 0.4026$ нм) ҳамда θ бурчак 0 дан то 80° гача бурилса, бу ҳолда қайтган нурларнинг тўлқин узунлиги 0,068 - 0,394 нм ораликка тўғри келишини (7.6) формула орқали осон ҳисоблаш мумкин. Шу ораликка мос келувчи К - спектр чизиқлари ёрдамида атом номерлари 19 дан то 42 гача яъни, калийдан то молибденгача ($K_{\alpha 1} = 0.0709$ нм) (2.2 - жадвалга қаранг) бўлган атомларни сифат ва миқдорий анализ қилиш мумкин. Этилендиаминдитартрат билан эса атом номерлари кичкина бўлган атомларни масалан, алюминийни аниқлаш мумкин.



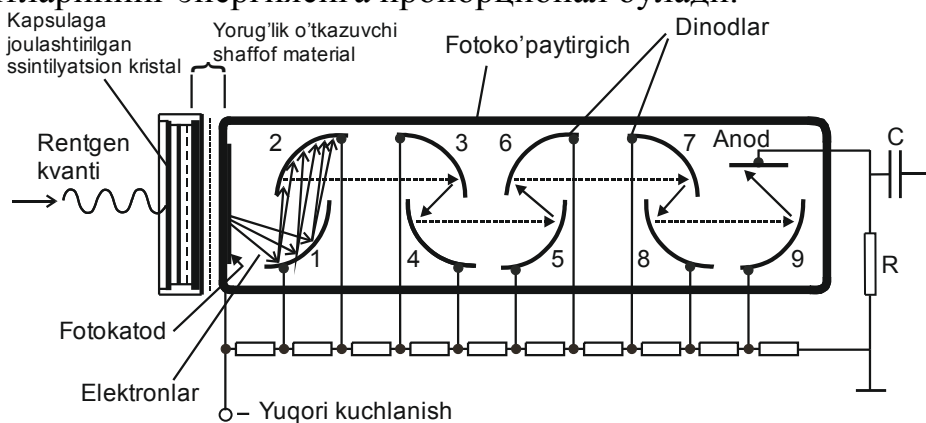
Кристалл-анализатордан қайтаётган монохроматик нурлар коллиматордан ўтиб сигнал қабул қилувчи 6 қурилмага тушади ва ундан 7 компьютерга узатилади. Сигнал қабул қилувчи қурилма сифатида Гейгер ҳисоблагичи, пропорционал ёки сцинтилляцион ҳисоблагичлар ишлатилади. Сцинтилляцион ҳисоблагич, таллий қўшиш орқали фаоллиги оширилган калий йод кристаллфосфорддан иборат бўлиб, унинг вазифаси рентген нурларини чакнаб кўзга кўринадиган ёруғликка айлантиришдан иборат. Ёруғлик ўз навбатида электр сигналига айлантириб кучайтирилади ҳамда фойдаланиш учун компьютерга узатилади.

Рентген нурларини қайд қилиш.

Рентген нурларини ўлчашда уларнинг атом ва молекулаларни ионлаштириш хоссасасидан, яъни энергия узатиш орқали улардан электронни чиқариб юборишдан фойдаланилади. Рентген нурларини қайд қилиш учун мўлжалланган бир қатор материалларда, рентген нурларининг таъсири остида импульслар ҳосил бўлади. Бу импульсларнинг амплитудаси таъсир қилувчи рентген квантларининг энергиясига пропорционал бўлади. Импульсларнинг амплитудасини қайд этиш орқали рентген квантларининг энергияси ҳақида маълумот олиш мумкин. Бирлик вақт орасида масалан, бир секундда ҳосил бўлган импульслар сони (имп/с = импульс секунд ёки кимп/с=килоимпульс секунд) интенсивлик деб аталади ва у биринчи яқинлашишда намунадаги нур чиқараётган элементнинг концентрациясига пропорционал бўлади. Замонавий рентген флуоресцент спектрометрларда асосан икки турдаги детекторлар –газпропорционал ва сцинтилляцион ҳисоблагичлар ишлатилади.

Рентген флуоресцент анализда қўлланиладиган сцинтилляцион ҳисоблагич (инглизча- scintillation counter), таллий аралашмаси билан легирланган (металга бошқа металл қўшиб унинг физик – кимёвий хоссаларини яхшилаш) йодид натрийнинг кристалларидан иборат бўлади. РФА да ишлатиладиган ҳамма юқори энергияли рентген квантларини ютиш учун, кристалнинг қалинлиги етарли даражада катта қилиб тайёрланади. Кристалга кираётган рентген квантларининг энергияси аста – секин кристалнинг атомларига берилади, улар эса ўз навбатида ёруғлик чиқаради. Бундай ёруғлик квантлари биргаликда ёруғлик чакнашини ҳосил қилади. Ёруғлик чакнашларининг энергияси эса кристалга берилган ёруғлик

квантларининг энергиясига пропорционал бўлади. Ҳосил бўлган ёруғлик нурлари фотокатодга тушиб унинг сиртидан электронларни уриб чиқаради. Бу электронлар фотокўпайтиргич ёрдамида тезлаштирилади ва динодлар тўплами ёрдамида иккиламчи электронларни ҳосил қилади. Электронлар “кўчки”си натижасида кўпайтиргичнинг чиқишида ўлчанадиган сигнал ҳосил қилинади (- расм). Ҳосил бўлган кучланиш импульсларининг амплитудаси, худди газпропорционал ҳисоблагичдаги каби, қайд қилинаётган рентген квантларининг энергиясига пропорционал бўлади.



Сsillyatsion hisoblagich va foto ko'paytirgich

Ҳозирги вақтда тўлиқ автоматлашган ва компьютерга уланган рентген флуоресцент анализ ўтказувчи асбоблар ҳам тез, ҳам етарли даражада аниқ ишлайди. Рентген флуоресцент анализ усули намунанинг таркибидаги алоҳида элементларнинг миқдори 0,001 дан то бир неча ўн фоизгача бўлганда аниқлаш имконини беради. Бошқа физикавий усуллар каби бу усул ҳам нисбий ҳисобланади яъни, анализ кимёвий таркиби маълум бўлган эталонлар ёрдамида бажарилади. Бу усул билан қаттиқ, суяқ ва газ ҳолатидаги моддаларни анализ қилиш мумкин.

Характеристик рентген спектрлари нисбатан оддий бўлиб, улар К, L, M ва N қобиклари орасидаги ўтишлар ҳисобига ҳосил бўлади.

Характеристик рентген нурларини чиқариш квантмеханик танлаш қоидаларига бўйсинади. Электроннинг бир қобикдан иккинчи қобикқа ўтиши қуйидаги шартларни қаноатлантириши керак: $\Delta l > 0$, $\Delta l = \pm 1$ ва $\Delta j = 0$. Бундай ўтишлар натижасида ҳосил бўлган чизиқларга рухсат этилган ёки диаграмм чизиқлар дейилади. Тақиқланган ўтишларга мос келувчи чизиқларнинг интенсивлиги жуда кичик бўлади. “Сателлит” деб аталувчи чизиқлар эса икки ёки ундан кўп бўш жойга эга бўлган атомлардаги ўтишларга тегишли бўлади.

$$j_1 = (l + \frac{1}{2}) \quad j_2 = (l - \frac{1}{2})$$

ГЛОССАРИЙ

РСА ва РФА усуллари – рентген нурлари кристаллдан ўтаётганда дифракцияга учраши ходисасидан фойдаланиб кристалларни элементар катакчаларида жойлашган атомларини координатларини, уларнинг орасидаги масофани ва улар орасидаги валент бурчаклар қийматларини аниқлашга асосланган.

Рентген нурларининг дифракцияси – рентген нури кристаллдан ўтаётганда дифракцияга учраши ходисаси, умуман олганда оддий нурларини монохроматик оқимини, бир хил масофадаги тешиклардан иборат бўлган пластинкага юборилганда улар пластинка орасида маълум (танланган) йўналишлар бўйича тарқалишига ўхшайди. Маълумки, кристалл даврий атом структурасига эгадир. Агар тўлқин узунлиги атомлараро масофага тўғри келадиган нурни кристаллдан ўтказилса, дифракция (нурни атомлардан сочилиши) ходисаси кузатилади.

Рентген нури кристаллдан ўтаётганда дифракцияга учрашиш ходисасини 1912 йилда М.Лауэ ва уни шогирдлари аниқлаган.

Рентген нури 1985 йилда В.К. Рентген томонидан кашф қилинган.

Трансляция – кристалл структурасини элементларини паралел сурилишидир.

Кристалл панжара – кристалл ҳолатидаги моддаларда материал заррачаларини уч (3) йўналиш бўйича (қатъий даврлик асосида) жойлашишини ифодалайдиган тушунча.

Элементар катакча – кристалл моддани ҳамма ходисаларини ўз ичида мужассамлаштирадиган кристалл панжарани энг кичик бўлакчаси.

Симметрик шакл (фигура) – симметрик шаклда унинг айрим қисмларини симметрик йўли билан бир-бирини бутунлай қайтара олиш ёки ўрнини эгаллаш мумкин.

Симметрия элементлари – ҳар қандай симметрик ўзгаришни бажарадиган геометрик обрезлардир. Улар орқали кристаллни симметриясини тўлиқ аниқлаш мумкин.

Ёпиқ ва очик симметрия операциялари – симметрик ҳаракат (операция) агар фазонинг чекланган бўлаги учун тадбиқ қилинса, уларни ёпиқ симметрия операциялари дейилади. Симметрик ҳаракатлар агар чексиз размерга эга бўлган шаклларга хос бўлса, бунда уларни очик симметрия операциялари дейилади.

Бравэ панжараларининг хиллари – кристалл панжарасининг сингонияларини назарга олиб элементар катакчада тугунларни ҳар хил марказлашиши (жойлашиши) натижасида панжаралар 14 хил бўлиши мумкин. Буларни Бравэ панжаралари деб атоалади.

Кристалл структураси ва структура хиллари – кристалл структураси – фазода материал заррачаларни (атом, ион, молекула) конкрет жойлашишини тушунилади. Агар атомлараро масофаларни билиш эмас, балки кристалл структурасидаги атомларни гуруҳини қандай жойлашиши ўзини билиш керак бўлса, буларни структура хиллари (тип) деб аталади.

Координацион сон – кристалл панжарасидаги хар қандай атомнинг координацион сони – уни яқинида жойлашган заррачалар (атомлар, ионлар) сонига тенг бўлади.

Кристаллдаги кимёвий боғлар хиллари – заррачаларнинг ўзаро таъсири бўйича ион, ковалент, металл ва молекулалар аро боғлар билан боғланган бўлади.

Рентген нурунинг параметрлари – хар қандай электромагнит тўлқин (шу жумладан рентген нури ҳам) 4 та параметр орқали ифодаланади: (йўналиш (S) , тўлқин узунлиги (λ) , амплитудаси (E_0) ва бошланғич фазаси (δ)).

Дифракцион эффектни олиш усуллари – полихроматик усул, порошок (кукун) усули, монокристалларни айлантриш усули.

Структуравий анализни биринчи босқичи – текширилаётган моддани кристалл панжарасининг параметрларини ва симметриясини аниқлаш.

Структуравий анализни иккинчи босқичи – элементар катакчадаги жойлашган ҳамма атомларни координаталарини аниқлаш йўли билан модда структурасини аниқлаш.

РЕФЕРАТ МАВЗУЛАРИ

1. Кристалл ва кристалл ҳолдаги моддалар.
2. Структуравий кристаллографиянинг асосий тушунчалари ва элементлари.
3. Кристалл панжаралар, элементар катакча ва уларнинг асосий параметрлари.
4. Симметрия элементлари, очик ва ёпик симметрия операциялари.
5. Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари.
6. Кристаллдаги кимёвий боғларнинг табиати ва улар орқали кристалларни классификация қилиш.
7. Рентген нурларининг кристаллдаги дифракцияси.
8. Дифракцион эффеќтни олиш усуллари.
9. Рентгенфазавий усулдан фойдаланиб ноорганик моддаларни аниқлаш.
10. Кимёда рентгенструктуравий анализдан фойдаланишнинг асосий маќсади.

МУСТАҚИЛ ТАЪЛИМ УЧУН САВОЛЛАР

Қаттиқ, амморф ва кристалл моддалар ва уларнинг асосий хоссалари.

Кристалл ҳолдаги моддаларнинг шакл тузилиши билан уларни физик-кимёвий хусусиятларини узвий боғлиқлиги.

Кристаллография, кристаллофизика ва кристаллокимё фанларини бири-бири билан боғлиқлиги.

Симметрия элементлари.

Симметрия операциялари орқали заррачаларни (атомлар, ионлар ва бошқалар) элементар катакчада жойлашишни тушунтириш.

Кристаллокимёнинг асосий тушунчалари.

Кристалл структураси ва структура хиллари.

Кристаллдаги атом ва ион радиусларини аниқлаш.

Кристаллардаги кимёвий боғларини табиати.

Рентген нурларини табиати ва уларнинг кристаллдаги дифракцияси.

Дифракцион эффектни олиш усуллари.

Структуравий анализнинг босқичлар.

Дифракцион усуллар – рентгенография, электронография ва нейтронография усулларини ўхшашлиги ҳамда фарқлари.

Кимёда РСА дан фойдаланишдан асосий мақсад.

АМАЛИЙ МАШҒУЛОТ МАТЕРИАЛЛАРИ

1. Кристалл кўп қирралигини қирралар ва томонларнинг белгиларини (символларини) аниқлаш.
2. Скаляр, вектор ва тензор катталиклари орқали кристалларни физикавий хусусиятларини ифода қилиш.
3. Г.Б.Бокий схемаси оддий модда, $AХ$, $AХ_2$, A_2X_3 бинар ва муҳим уч элементдан иборат модда бирикмаларни структур турлари.
4. Дислокацияни геометрик хусусиятлари. Дислокация турлари.
5. Кристалларнинг ўсиши.
6. Силикатлар кристаллкимёси.
7. Координацион бирикмаларнинг тузилиши.
8. Суюқ кристаллар.
9. Кристалларнинг зичлиги.
10. Д.И.Менделеевнинг элементлар даврий системаси ва кристаллокимёвий қонуниятлари. Оддий моддалар тузилиши.

ОРАЛИҚ ВА ЯКУНИЙ НАЗОРАТ САВОЛЛАРИ

1. Кристалл модда.
2. Кристаллнинг асосий хоссалари.
3. Кристаллографиянинг асосий қонунлари.
4. Кристаллография.
5. Кристалл модданинг тарқалганлиги.
6. Кристалланиш.
7. Симметрия тўғрисида тушунча.
8. Симметрия элементлари.
9. Симметрия хиллари.
10. Симметриянинг 32 хилларини ҳосил қилиш схемаси.
11. Кристалл кўпқирралиликларни шакллари.
12. Кристаллографик символлар.
13. Кристалл панжара тушунчаси.
14. Кристалл кўпқирралилик ва кристалл панжараси.
15. Трансляция.
16. Панжаранинг текис панжараси.
17. Бравэнинг 14 хил панжараси.
18. Кристаллкимёвий таҳлил тўғрисида тушунча.
19. Назария тўғрисидаги қисқача маълумотлар.
20. Федоровнинг симметрия гуруҳлари.
21. Тоza металлларнинг учта содда кристалл тузилиши.
22. Тузилишнинг битта ячейкасига тўғри келувчи атомлар сони.
23. Кристаллнинг тузилиши ва тузилиш тури.
24. Графит ва олмоснинг тузилиши.
25. Координацион сон ва координацион кўпқирралилик.
26. Координацион сонга кўра тузилишларнинг синфланиши.
27. Хар хил кимёвий боғланиш турларини аниқланиши.
28. Гетеродесмик ва гомодесмик тузилишлар.
29. Ионларнинг эффектив радиуслари.
30. Атом ва ион радиусларини аниқлаш.
31. Атом ва ионларнинг ўлчамларининг координацион сонга боғлиқлиги.
32. Кристалллар тузилишини аниқлайдиган факторлар.
33. Ион боғланиш.
34. Металл боғланиш.
35. Қолдиқ боғланиш.
36. Ковалент боғланиш.
37. Водород боғланиш.
38. Кимёвий боғланиш турига кўра бирикмаларнинг синфланиши.
39. Полиморфизм турларини тузилиш бўйича синфланиши.
40. Изоморфизмнинг намоён бўлиши учун зарур бўлган шароитлар.
41. Қаттиқ моддаларнинг физик кимёвий хоссаларини кристаллардаги кимёвий боғ турига боғлиқлиги.
42. Электр хоссалар.

43. Оптик хоссалар.
44. Металларнинг болғаланувчанлиги.
45. Сууюқланиш температураси ва қаттиқлик.
46. Моддаларнинг физик кимёвий хоссаларига водород боғланишнинг таъсири.
47. Эрувчанлик.
48. Д.И. Менделеевнинг элементлар даврий жадвалидаги кристаллкимёвий қонуниятлар.
49. Соф металларнинг кристалл тузилиши.
50. Кристаллкимёвий натижалар асосида даврий жадвалнинг гуруҳчалари бўйича элементларнинг тақсимланиши.
51. Бинар бирикмаларнинг синфланиши ҳақида.
52. Учламчи ва янада мураккаброқ ноорганик бирикмалар.
53. Ион кристаллар тузилиши учун Полинг қоидаси.
54. Тетраэдрик ковалент радиуслар.
55. Кристаллгидратлар тузилиши.
56. Комплекс бирикмалар тузилиши.
57. Клатратлар ва бошқа мураккаб кимёвий бирикмаларнинг тузилиши.
58. Кристалл панжарасининг нуқталари, нуқталар қаторлари ва нуқта турларини индекслари, тескари панжара.
59. Симметрия элементлари ва уларни аталиши.
60. Очiq ва ёпиқ симметрия операциялари.
61. Нуқтавий ва фазовий симметрия гуруҳлари.
62. Кристалл трансляция ва бошқа симметрия операцияларининг ўзаро таъсири, фазовий гуруҳ симметрияларини классификация схемаси, симметрия класслари.
63. Сингония ва категориялар.
64. Бравэнинг панжара хиллари.
65. Симметриянинг фазовий гуруҳларини (СФГ) график ҳолатда изоҳлаш. СФГ нинг белгиланиши ва нуқталарини тўғри системаси.
66. Кристалл структураси ва структура хиллари.
67. Мис α -темир (α -Fe), магний (Mg), олмос ва графит структуралари ва уларнинг хиллари.
68. АХ хилдаги бирикмалар структураси.
69. Координацион сон ва «координацион кўп қирра» тўғрисида тушунча.
70. Координацион кўп қирраликнинг айрим ҳоллари (кубсимон, октаэдр, тетраэдр ва бошқалар).
71. Координацион сонлар бўйича структураларни классификация қилиш атом ва молекуляр структура.
72. Кимёвий боғлар бўйича структура хиллари.
73. Ион радиуслар, атом ва ион радиусларини аниқлаш.
74. Рентгеноструктуравий анализнинг (РСА) физикавий асослари.
75. Рентген тўлқинларининг параметрлари ва рентген нурларининг сочилиши.

- 76.Кристалларини РСА қилинаётганда ҳал қилиниши керак бўлган масалалар.
- 77.Лауэ шартлари.
- 78.Дифракцион эффектни олиш усуллари.
- 79.Брэгнинг рентген нурунинг кристаллда дифракциясини ўзгача талқини.
- 80.Рентгенограммаларни идентификация қилиш.
- 81.Рентгенструктуравий тажрибаларини автоматлаштириш ва тезлаштириш мосламалари.
- 82.Кристалл ва бошқа агрегат ҳолдаги моддаларни структурасини ўрганиш.
- 83.Рентгенструктуравий анализ, нейтронография ва электронография усулларидан фойдаланиш мумкинлиги.
- 84.Кимёда рентгенструктуравий анализдан фойдаланишнинг асосий сабаблари.

Difraksion usullar

Tashpulatov X.Sh.

Reja

- ▶ Rentgen nurlari
- ▶ Difraksiyaning nazariy asoslari
- ▶ Rentgen diffraktometriyasi
- ▶ Keng burchak rentgen diffraksiyasi va sochilishi



Kirish

- ▶ Rentgen diffraksiyasi materialning kristall tuzishini aniqlashda ishlatiladigan eng effektiv usul hisoblanadi.
- ▶ Difraksion usullar yordamida modda kimyoviy elementlari bilan emas, kristall tuzilishidan kleib chiqib aniqlanadi.
- ▶ Difraksion usullar rentgen diffraksiyasi, elektron diffraksiyasi va neytron diffraksiyasiga bo'linadi.
- ▶ Rentgen diffraksiyasi usullari spektroskopik va fotografik sinflarga bo'linadi.
- ▶ Spektroskopik usul kukun rentgen diffraktometriyasi yoki rentgen diffraktometriya (XRD) deyiladi.

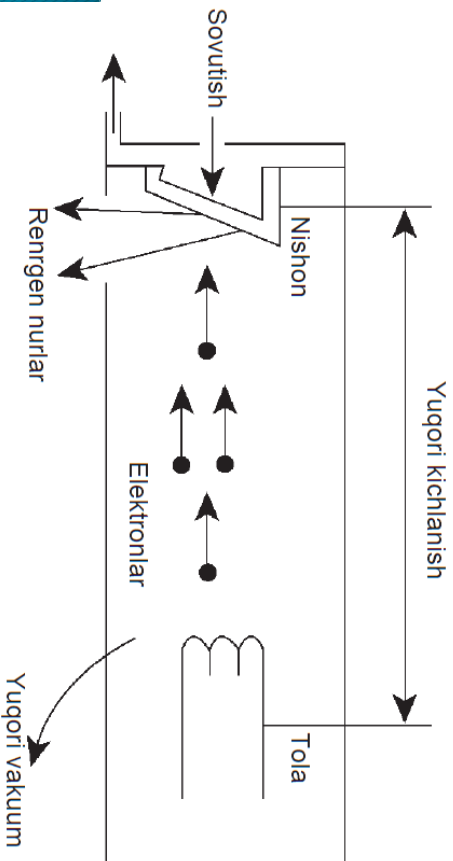
Rentgen nurlari

- ▶ Rentgen nurlari qisqa to'liqin uzunlikdagi energiyasi katta nurlar hisoblanadi.
- ▶ Ular yuqori kuchlanish ta'sirida tezlashgan katta tezlikdagi elektronlarning metal nishonga tegishidan hosil bo'ladi.
- ▶ Elektronlarning nishonga urilganda keskin sekinlashishi elektronning kinetik energiyasi rentgen nurlariga aylanishiga sabab bo'ladi.
- ▶ Rentgen nuri to'liqin uzunligi va kuchlanish quyidagicha bog'langan:

$$\lambda = \frac{1.2398 \times 10^3}{V} \text{ (nm)} \quad [1]$$

Rentgen nurlari

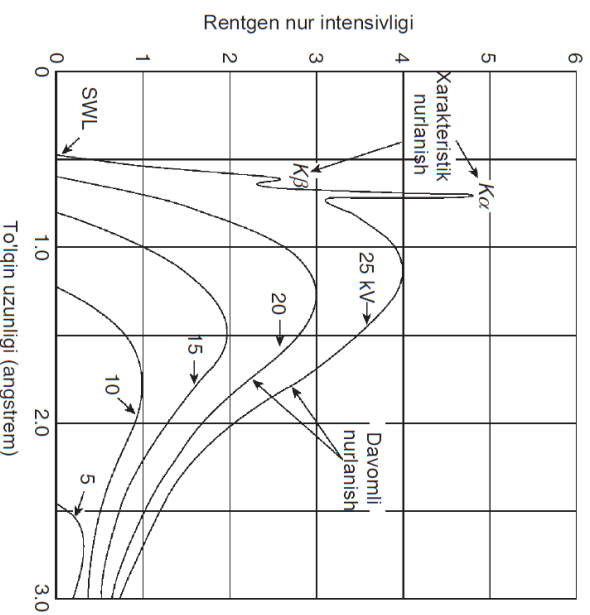
- ▶ Rentgen nurlarini hosil qilish uchun rentgen trubkasi ishlatiladi:



Rentgen nurlari

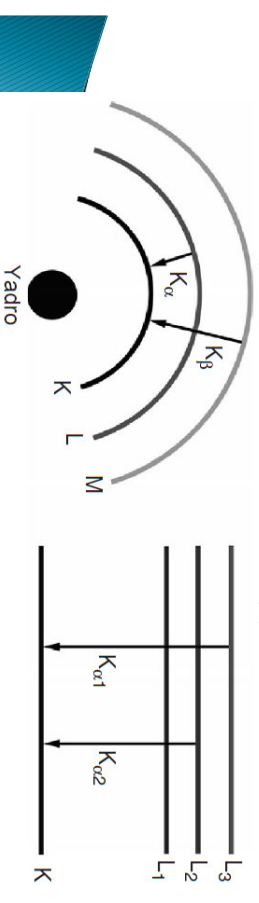
- ▶ Nishon bilan elektronning ta'siridan rentgen nurlari hosil bo'ladi.
- ▶ Rentgen nurlari trubkadan chiqishi uchun oyna bo'ladi.
- ▶ Bunda elektronlarning ko'pchilik kinetik energiyasi issiqlikka aylanganidan (<1% rentgen nurlari hosil bo'ladi) doimiy sovitish kerak.
- ▶ Trubkada minimum to'liqin uzunlikka ega rentgen nurlardan davomli rentgen nurlarigacha (oq renten nurlar) hosil bo'ladi.
- ▶ Minimal to'liqin uzunlik uchun talab etiladigan kuchlanish [1] tenglama bilan topiladi.
- ▶ Masalan, $\lambda=0,062$ nm rentgen nuri uchun 20kV kuchlanish kerak.

Rentgen nurlari



Rentgen nurlari

- ▶ Davomli rentgen nurlari orasida keskin intensiv maksimumlar bo'lib, ular xarakteristik rentgen nurlari deyiladi.
- ▶ Xarakteristik rentgen nurlar quyidagicha hosil bo'ladi:
- ▶ Katta energiyali elektron atom ichki qavatidan elektrooni tashqi qavatlardan birha qo'zg'otganda, uning o'rni bo'sh qoladi. Shu joyga tashqi qavatdan elektron o'tganda o'zidan rentgen nurlari shaklida energiya chiqaradi.



Rentgen nurlari

- ▶ Masalan, K qavatdagi bo'sh joy L qavat elektroni bilan to'lsa, K_{α} , M qavat elektroni bilan to'lsa, K_{β} nurlar deyiladi.
- ▶ K_{α} nurlar intensivligi K_{β} nurlarnikidan katta bo'ladi.
- ▶ K_{α} da 2 ta xarakteristik chiziq bor: $K_{\alpha 1}$ va $K_{\alpha 2}$.
- ▶ Diffraksiyada $K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$ va K_{β} xarakteristik rentgen nurlar ishlatiladi.
- ▶ $K_{\alpha 1}$ va $K_{\alpha 2}$ to'liqin uzunligi orasidagi faqr juda kichik va ular $K_{\alpha 1}$ dubleti deyiladi.

- ▶ Masalan **Cu** anod uchun ▶

$$\lambda_{K_{\alpha 1}} = 0.15406 \text{ nm}$$

$$\lambda_{K_{\alpha 2}} = 0.15444 \text{ nm}$$

$$\lambda_{K_{\beta}} = 0.13922 \text{ nm}$$

Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ Rentgen nurlari elektromagnit nurlar bo'lib, ular 0,1 nm tartibda bo'ladi.
- ▶ Rentgen nurlari diffraksiyasi *interferensiya* hodisasiga asoslangan: *fazalar mos kelasa konstruktiv, mos kelmasa destruktiv interferensiya* bo'ladi.
- ▶ Tushayotgan nurlar kristallografik tekislik tomonidan *diffraksiyaladi* va qaytgan to'liqinlar quyidagi bog'liqlik bajarisa fazalari mos tushgan bo'ladi:

$$n\lambda = 2d \sin \theta \quad [2]$$

- ▶ Bu tenglamaga Breg tenglamasi deyiladi.

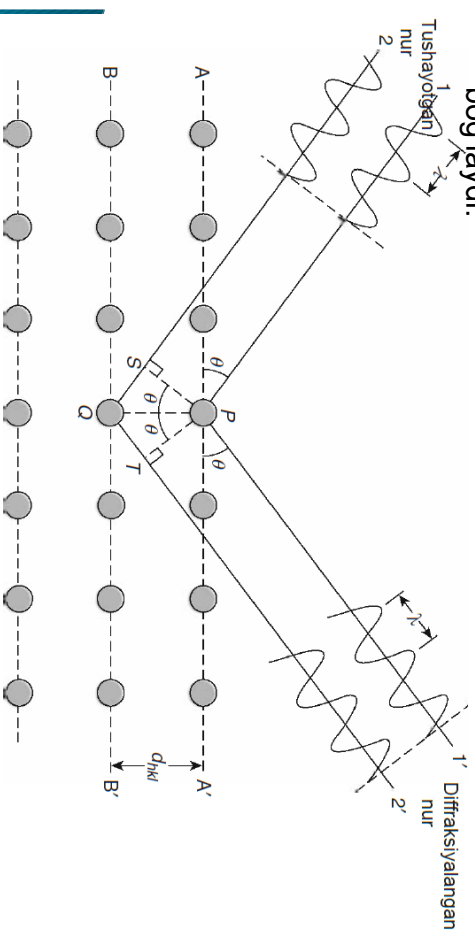
Rentgen nurlari

Anod materillarning xarakteristik rentgen nurlari

Anod Material	Tartib raqami	K_{α} (nm)	Kritik qo'zgotish Potentiali (keV)	Optimal kuchlanish (kV)
Cr	24	0.22291	5.99	40
Fe	26	0.1937	7.11	40
Cu	29	0.1542	8.98	45
Mo	42	0.0710	20.00	80

Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ Breg tenglamasi rentgen nuri to'liqin uzunligi, atomlararo masofa va konstruktiv *interferensiya diffraksiya burchagini* bog'laydi.



Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ Tenglamadagi n refleksiya tartibi deyiladi 1,2,3... bo'lishi mumkin.
- ▶ Diffraksiya usulidan foydalanib materialning kristall tuzilishini aniqlash mumkin.

- ▶ Masalan, kubsimon kristall panjara parametri (a) bilan tekisliklararo masofa quyidagicha bog'langan:

$$d_{hkl} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}$$

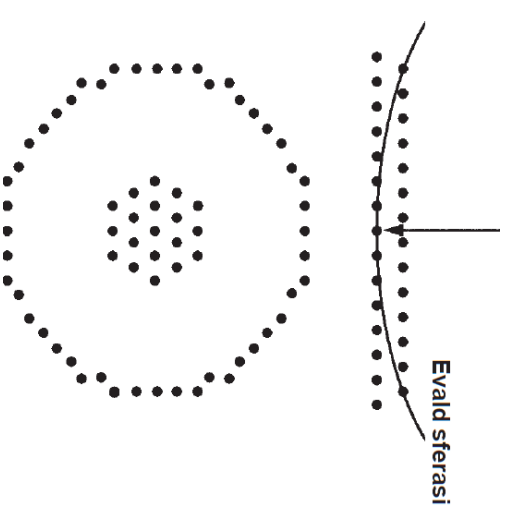
- ▶ Miller indekslari (hkl) o'zaro d_{hkl} masofadagi parallel tekisliklar qatorini bildiradi.



Diffraksiyaning nazariy asoslari

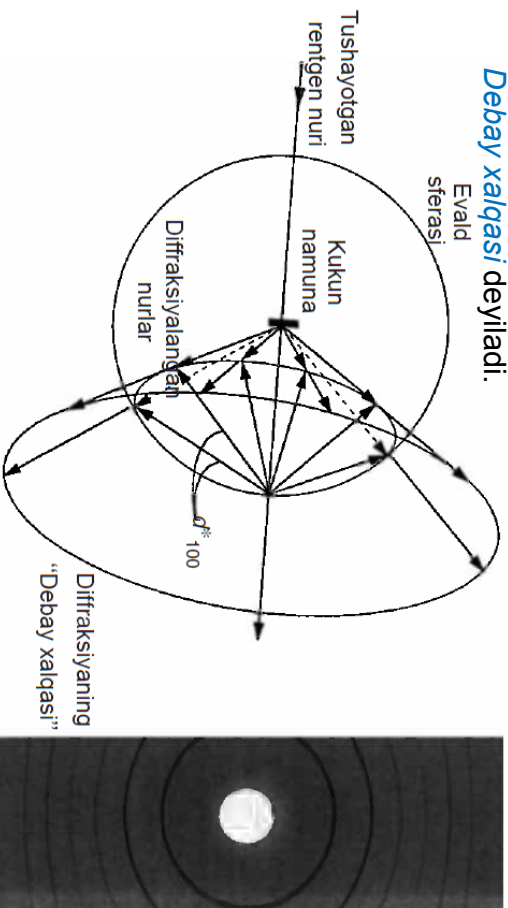
- ▶ Yakka kristaldan diffraksiya namunasi **Evald sferasi** yordamida tasvirlanadi.

- ▶ TEM yordamida olingan tasvirda Evald sferasi **yassi** ko'rinadi.



Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ *Kukundan (polikristaldan)* olingan diffraksiya namunasida **Debay xalqasi** deyiladi.



Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ Diffraksiya intensivligi Breg sharti bajarilsa ham tekisliklar orasida farq qilishi mumkin.
- ▶ Kristaldan diffraksiyalanayotgan rentgen nurlar kristaldagi alohida atomlardagi elektronlar tomonidan sochiladi.
- ▶ Elektron tomonidan sochilayotgan rentgen nuri intensivligi quyidagi tenglama bilan topiladi:

$$I(2\theta) = \frac{I_0}{r^2} K \frac{1 + \cos^2(2\theta)}{2}$$

- ▶ Bu yerda I_0 - tushayotgan nur intensivligi, r - elektrondan detektorgacha masofa, K atom xossalari bog'liq konstanta.



Diffraksiyaning nazariy asoslari

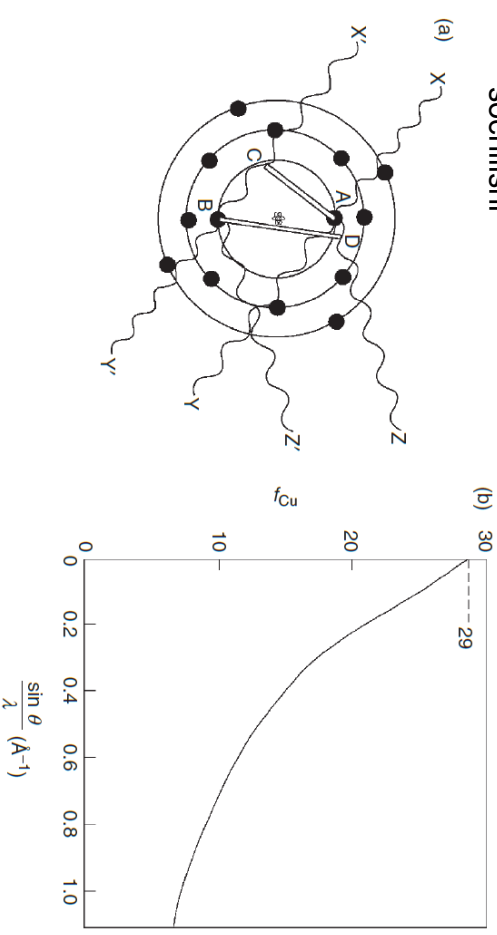
- ▶ Tenglamadagi oxirgi qism intensivlikning burchak effektini ko'rsatadi va *poljarizatsiya faktori* deyiladi.
- ▶ Atom tomonidan sochilayotgan umumiy intensivlik atomdagi har bir elektron uchun sochilish intensivligidan kichik bo'ladi. Bunga sabab yadro atrofiga elektronlarning joylashishiga bog'liq ravishda *destruktiv interferensiya* manjud.
- ▶ Atom sochish faktori quyidagicha topiladi:

$$f = \frac{1}{1 \text{ ta atom tomonidan sochilgan to'lqin amplitudasi}} \frac{1}{1 \text{ ta elektron tomonidan sochilgan to'lqin amplitudasi}}$$



Diffraksiyaning nazariy asoslari

- ▶ Rentgen nurlarining atomdagi elektronlar tomonidan sochilishi

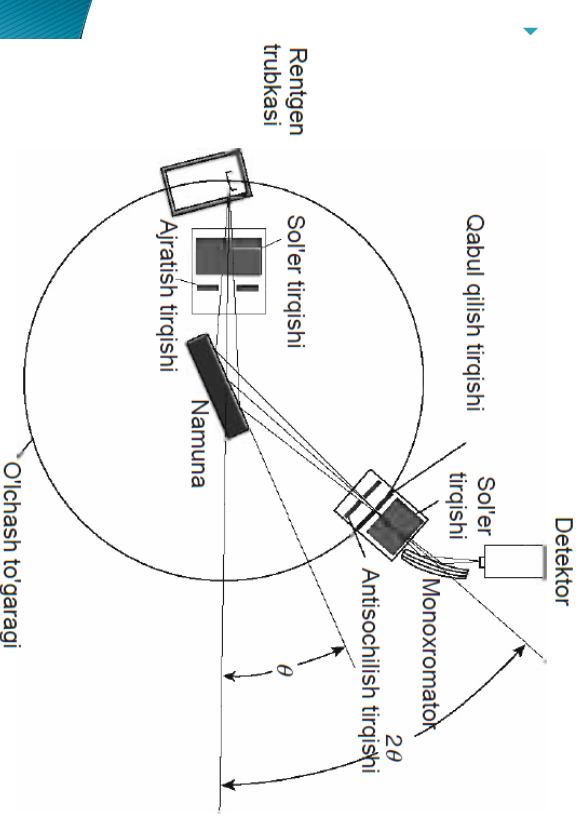


Rentgen diffraktometriyasi

- ▶ Rentgen diffraktometri materialning xossalari ni o'rganishda eng keng qo'llanadi.
- ▶ Dastlab kukunni aniqlash uchun ishlatilgani rentgen kukun diffraktometri deb atalgan.
- ▶ Rentgen diffraktometrida bitta to'qin uzunlikdagi rentgen nurlar polikristall namunani aniqlashda ishlatiladi.
- ▶ Rentgen nuri tushayotgan burchakni doimiy o'zgartirib, diffraksiya intensivligi o'lchanadi va spektr olinadi.
- ▶ Diffraktometriya yordamida kristall tuzilish va sifat 60 000 dan ortiq diffraksiya spektrlari bazasi bilan solishtirish orqali aniqlanadi.



Rentgen diffraktometriyasi



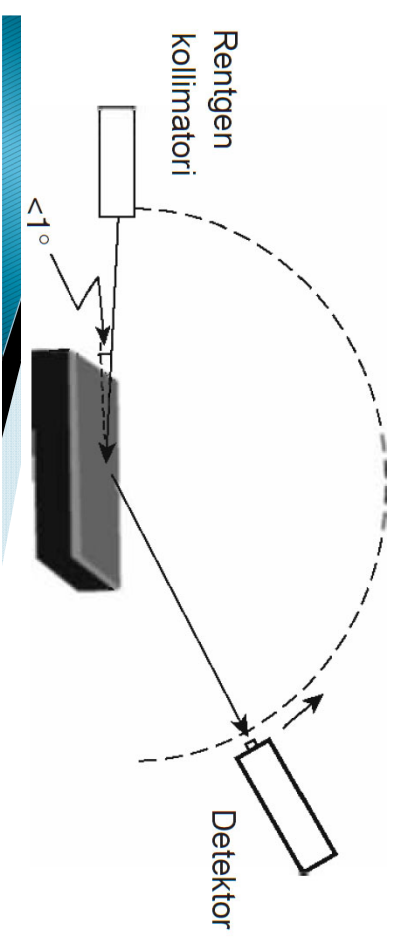
Rentgen diffraktometriyasi

- ▶ Rentgen trubkasida hosil bo'lgan rentgen nurlar ularni kollimatrovchi maxsus tirgishdan (*Sol'er tirgishi*) o'tadi.
- ▶ Ayratish tirgishidan o'tgan nurlar namunaga uriladi.
- ▶ Namuna tekis shakldagi namuna stolida turadi va diffraksiyalangan rentgen nurlari qabul qilish tirgishida to'lanib detektorga o'tadi.
- ▶ Diffraksiyalangan rentgen nurlari detektor tomonidan qabul qilinishidan oldin monoxromator filtr orqali o'tishi kerak ▶ u K_{α} nurlardan boshqa nurlarni yo'qotadi va fon signalini pasaytiradi..



Rentgen diffraktometriyasi

▶



Rentgen diffraktometriyasi

▶



Rentgen diffraktometriyasi

▶



Rentgen diffraktometriyasi



▶ 1-qism tugadi.



Qattiq moddalarning tuzilishi

Tashpulatov X.Sh.

Kristall va amorf holat

- ▶ Moddalar 4 xil agregat holda bo'ladi: gaz, suyuq, qattiq va plazma.
- ▶ Qattiq moddalar tuzilishi jihatidan 2 ga bo'linadi: kristall va amorf holat.
- ▶ Amorf tuzilishli moddalarda qattiq modda zarrachalari ma'lum bir tartibda joylashmaydi. Masalan: shisha, rezina, ko'mir va h.k.
- ▶ Kristall tuzilishli moddalarda zarrachalar ma'lum bir tartib bilan joylashadi va bunga kristall panjara deyiladi.

3

Reja

- ▶ Kristall va amorf holat
- ▶ Kristall panjara turlari
- ▶ Kristallar sistemasi
- ▶ Brave kristal panjaralari
- ▶ Rentgen spektroskopiyasi

2

Kristall va amorf holat

- ▶ Beril (Zumrad tosh) ▶
- ▶ Vulfanit ▼



4

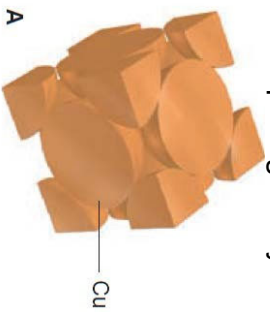
Kristall panjara turlari

- ▶ Kristall panjara tugunlaridagi zarrachalarning tabiatiga ko'ra kristall moddalar 4 ga bo'linadi:
 - Atom
 - Molekulyar
 - Ion
 - Metal
- ▶ Atom KP moddalarida KP tugunlarida individual atomlar joylashadi. Masalan: B, C, P_{qora}, BN, SiO₂.
- ▶ Xossalari: juda qattiq, mo't, yuqori T_q va T_s ga ega, odatda issiqlik va elektrni yomon o'tkazadi, suvda erimaydi.

5

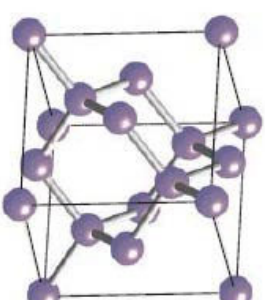
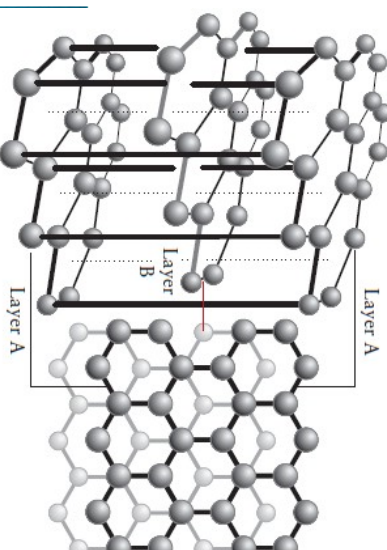
Kristall panjara turlari

- ▶ Metal KP moddalar KP tugunlarida metal kationlari joylashgan bo'ladi. Bu kationlar o'zaro "elektron gaz" orqali bog'angan.
- ▶ Xossalari: turli xil qattqlikda, turli xil T_s va T_q ga ega, elektr va issiqlikni yaxshi o'tkazadi, bolg'alannuvchan, yaltiroq.
- ▶ Ko'pchiligi kub yoki geksagonal zich KP tuzilishga ega



Kristall panjara turlari

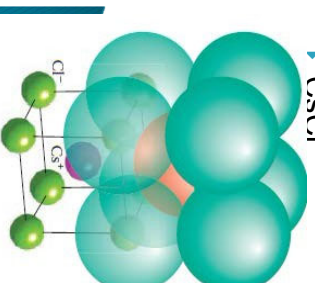
- ▶ Olmosning KP tuzilishi ▶
- ▶ Graftning KP tuzilishi ▶



6

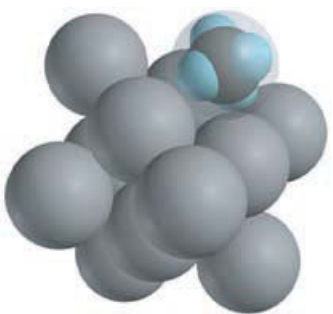
Kristall panjara turlari

- ▶ Ion KP moddalar KP tugunlarida ionlar joylashadi va ular ion bog'lanish orqali bog'langan.
 - ▶ Xossalari: qattiq, mo't, yuqori T_s va T_q ga ega, suvda yaxshi eriydi va eritmasi elektrolit.
 - ▶ Ko'pchiligi kubsimon KP hosil qiladi.
- NaCl
- NaC



Kristall panjara turlari

- ▶ Molekulyar KP li moddalar KP tugunlarida molekular joylashgan bo'ladi.
- ▶ Bog'lanish: dispersion, dipol-dipol va/yoki vodород bog'lanish.
- ▶ Xossalari: past T_S va T_α ga ega, mo'it, issiqlik va elektrni yomon o'tkazadi.



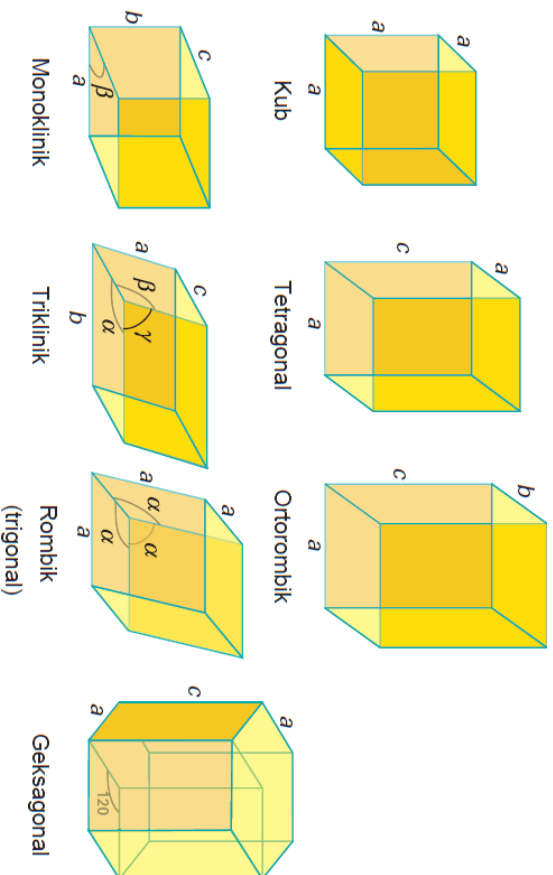
9

Kristallar sistemasi

Sistema	Kristall parametrlari orasidagi bog'liqlik	Panjara birigi aniqlanadi
Triklinik	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$	$abc \alpha \beta \gamma$
Monoklinik	$a \neq b \neq c$ $\alpha \neq \gamma \neq 90^\circ$ $\beta = 90^\circ$	$abc \alpha \gamma$
Ortorombik	$a \neq b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	abc
Rombik	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	α
Tetragonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	$a c$
Gaksagonal	$a = b \neq c$ $\alpha = \beta = 90^\circ$ $\gamma = 120^\circ$	$a c$
Kub	$a = b = c$ $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	a

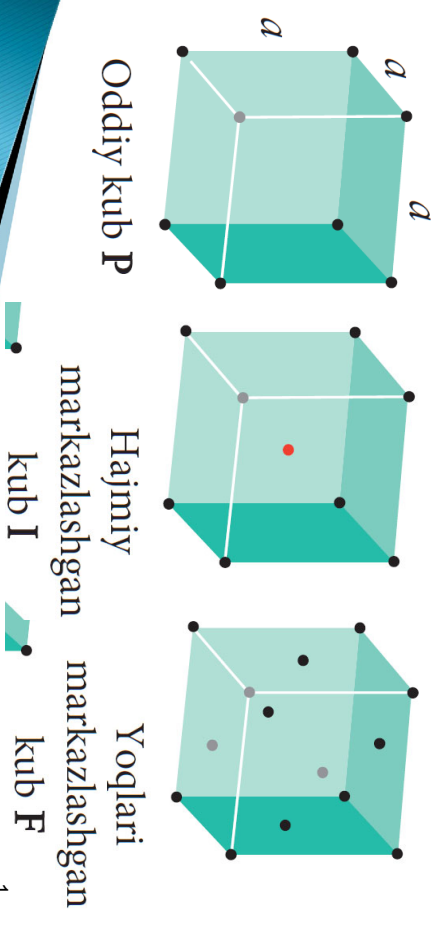
0

Kristallar sistemasi



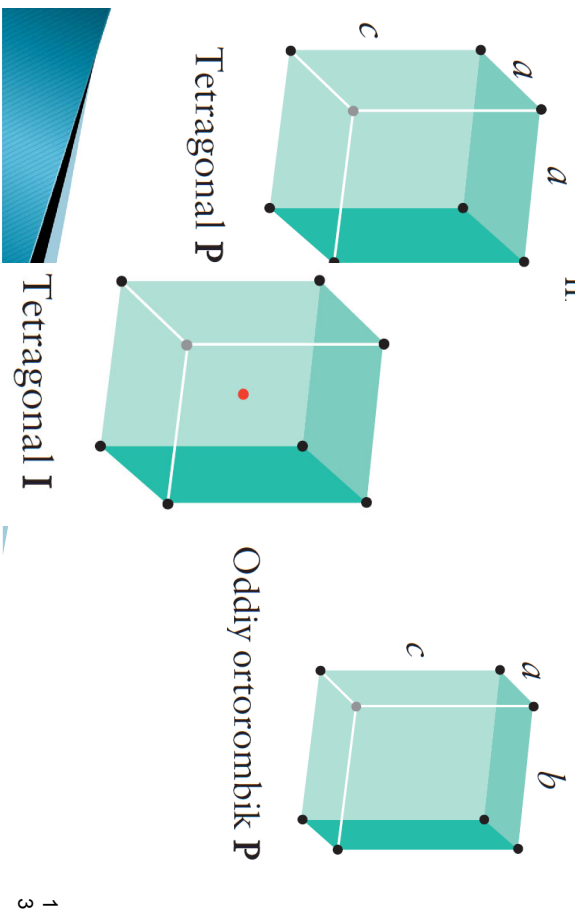
Brave kristall panjaralari

- ▶ 14 ta Brave KP si:



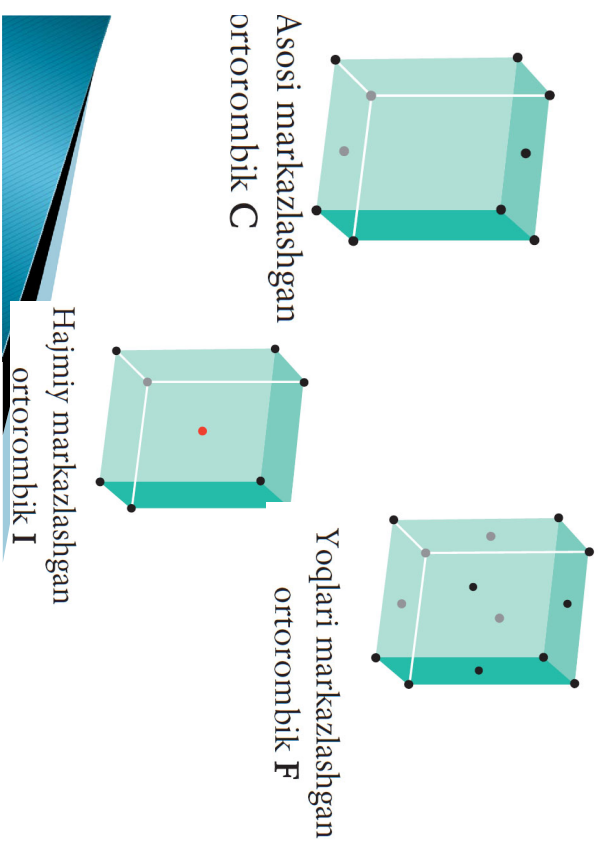
1
2

Brave kristall panjaralari



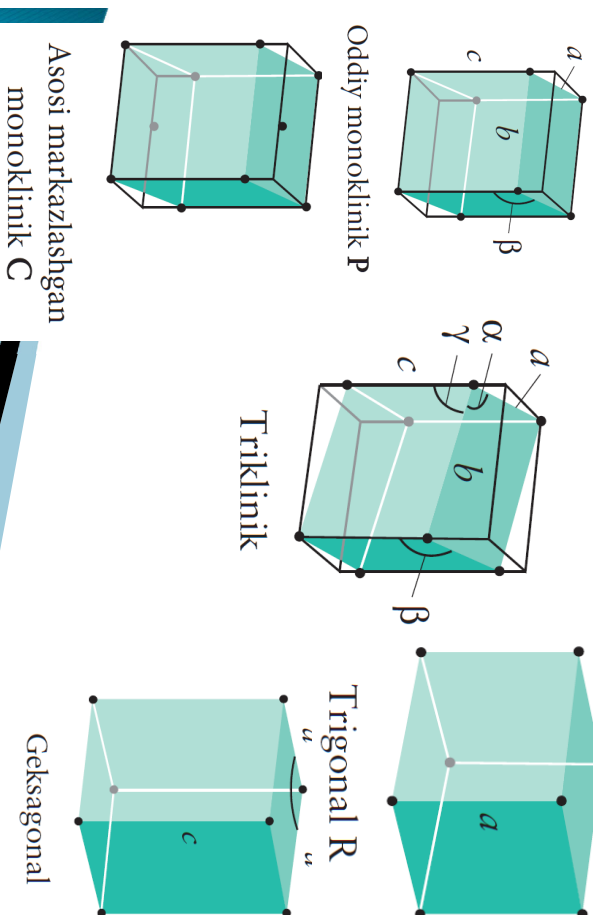
1
3

Brave kristall panjaralari



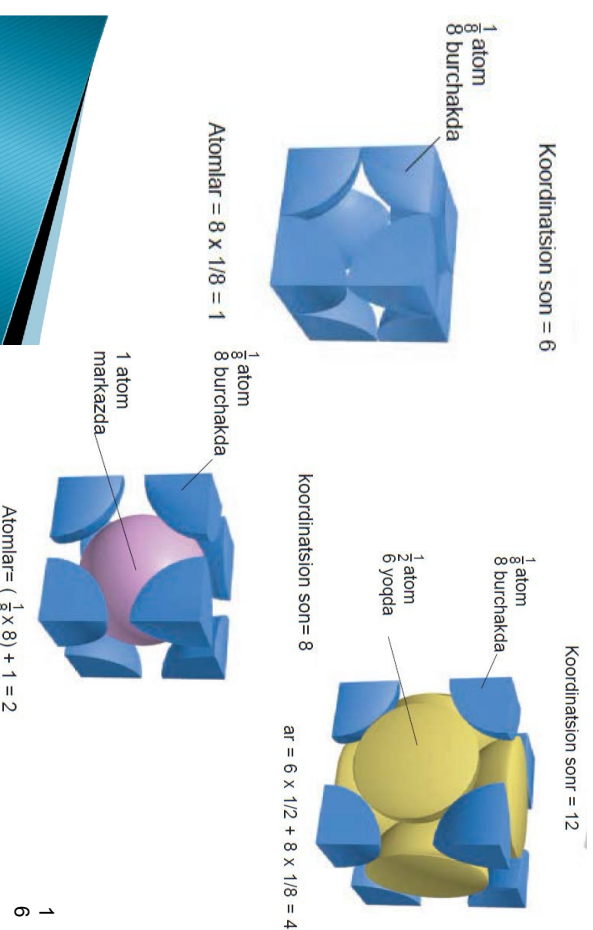
1
4

Brave kristall panjaralari



Asosi markazlashgan monoklinik C

Brave kristall panjaralari



1
6

Kristallardagi atomlarning joylashishi

	Oddiy kub	Hajmiy markazlash-gan kub	Yoqlari markazlash-gan kub
Panjaraga qismidagi atomlar soni	1	2	4
KS	6	8	12
Eng yaqin atomgacha masofa	a	$a\sqrt{3}/2=0.866a$	$a\sqrt{2}/2=0.707a$
Atom radiusi - R	a/2	$a\sqrt{3}/4=0.433a$	$a\sqrt{2}/4=0.354a$
Joylashish ulushi	52.4%	68.0%	74.0%

17

Kristallardagi atomlarning joylashishi

- ▶ Qattiq moddalarning ksirtall tuzilishini bilgan holda uning nazariy zichligini hisoblash mumkin:

$$\rho = \frac{nA}{V_c N_A}$$

- ▶ bu yerda:
- ▶ n – har bir panjara birigidagi atomlar soni
- ▶ A – nisbiy atom massa
- ▶ V_c – panjara birigining hajmi
- ▶ N_A – Avogadro soni

18

Kristallardagi atomlarning joylashishi

- ▶ **Masala:** Misning atom radiusi 0,128 nm ga teng bo'lib, u yoqlari markazlashgan kubsimon KP hosil qiladi. $A=63,5$ g/mol ekanligini bilgan holda, uning nazariy zichligini hisoblang va amaldagisi bilan solishtiring.

- ▶ **Yechish:** Jadvaldagi $R=0.354a$ dan, $V_c=(R/0.354)^3$

$$\rho = \frac{4 \cdot 63,5}{(1,28 \cdot 10^{-8} \text{ sm} \cdot 0,354)^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 8,89 \text{ g/sm}^3$$

- ▶ Amaldagi zichligi: 8,94 g/sm³.

19

Kristallardagi atomlarning joylashishi

- ▶ **Masala:** Misning atom radiusi 0,128 nm ga teng bo'lib, u yoqlari markazlashgan kubsimon KP hosil qiladi. $A=63,5$ g/mol ekanligini bilgan holda, uning nazariy zichligini hisoblang va amaldagisi bilan solishtiring.

- ▶ **Yechish:** Jadvaldagi $R=0.354a$ dan, $V_c=(R/0.354)^3$

$$\rho = \frac{4 \cdot 63,5}{(1,28 \cdot 10^{-9} \text{ sm} / 0,354)^3 \cdot 6,02 \cdot 10^{23}} = 8,89 \text{ g/sm}^3$$

- ▶ Amaldagi zichligi: 8,94 g/sm₃.

20

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ Kukun va yakka kristall rentgen spektroskopiyasi farqlanadi.
- ▶ Kukun rentgen diffraksiyasi asosan fazani ajratish, kristal panjara turi va parametrlarini aniqlashda ishlatiladi.
- ▶ Kukunda juda ko'p kristall zarrachalari mavjud bo'ladi va ulardan diffraksiyalangan nurlar konus hosul qiladi.
- ▶ Kukun diffraktometr nurlarning diffraksiyasini aniqlash uchun elektron detektordan foydalanadi.
- ▶ Detektorni namuna atrofiga skanerlash diffraksiya maksimum/intensivligi va detektor burchagi bog'liqligiga solingan diffraksiya namunasi olishga imkon beradi.

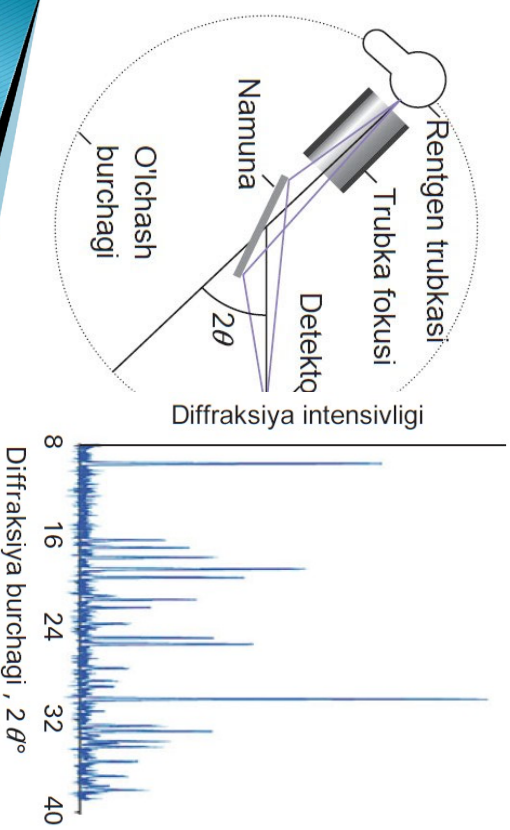
2
5

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ Qaytgan nurlar soni va o'rni kristall panjara parametrlariga, kristall sistemasi va panjara turiga, shuningdek, ma'lumot to'plamayotgan to'liq uzunlikka bog'liq.
- ▶ Intensivliklar esa qanday atomlar borligiga va ularning o'rniga bog'liq.
- ▶ Deyarli har bir kristall modda o'ziga xos kukun diffraksiya namunasi ega.

2
7

Rentgen spektroskopiyasi



6

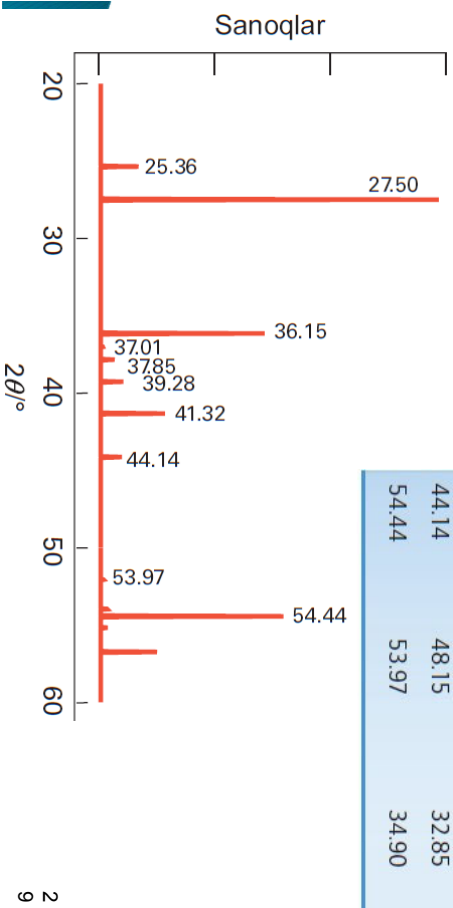
Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ Masala. Titan(IV) oksidi bir necha xil polimorfizm shakliga ega. Ulardan eng muhimlari anataz, rutil va brokvidir. Tajriba natijada bu 3 shakdan olingan eng intensiv 6 ta si diffraksiya burchaklari berilgan. Oq rang sifatida ma'lum bo'lgan TiO_2 kukunidan olingan namunada bulardan uchatasi yoki ba'zisi bo'lishi mumkin. Uning 154 pm rentgen nurlari bilan olingan diffraksiya namunasi keltirilgan. TiO_2 da qaysi polimorf shakli mavjudligini aniqlang.

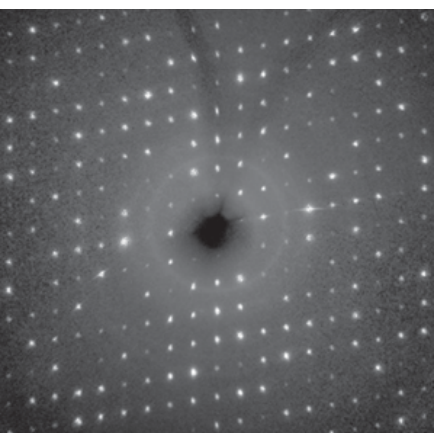
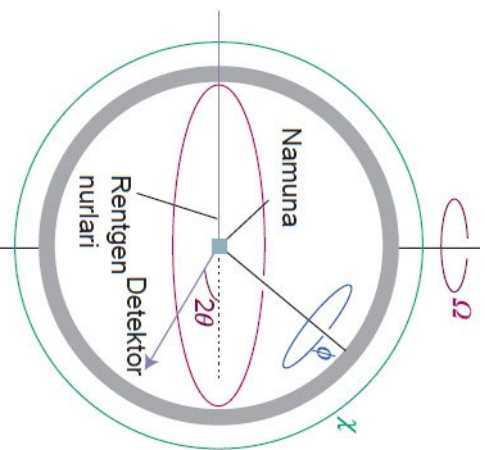
2
8

Rentgen spektroskopiyasi

Rutil	Anataz	Brukit
27.50	25.36	19.34
36.15	37.01	25.36
39.28	37.85	25.71
41.32	38.64	30.83
44.14	48.15	32.85
54.44	53.97	34.90



Rentgen spektroskopiyasi



3

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ Yechish: Biz bunda kuzatilayotgan intensivliklarni jadvaldagiga solishtirib, rang tarkibida asosan rutil borligini topamiz.
- ▶ Yakka kristaldan olingan diffraksiya namunasi strukturani to'la aniqlash imkonini beradi.
- ▶ Bu usul qattiq anorganik moddalarning tuzilishini o'rganishda eng asosiy hisoblanadi.
- ▶ Buning uchun 4 ta aylanalali yoki yuza detektor ishlatiladi.

3

0

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ 4 aylanalai detektorda diffraksiyalangan rentgen nurlari burchaklar funksiyasi sifatida qayd qilinadi.
- ▶ Yuza detektor rentgen nurlarga sezgir fotografik qog'ozda bir vaqtning o'zida bir qancha diffraksiya maksimumlarini yozib olishga imkon beradi.
- ▶ Yakka kristall diffraksiya ma'lumotini tahlil qilish ancha murakkab: minglab diffraksiya intensivliklari va o'rni mavjud.
- ▶ Yakka kristal rentgen diffraksiyasi uchun o'lchamlari 50x50x50 mkm yoki undan katta yakka kristall talab etiladi.

3

2

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ Ko'pchilik atomlarning joylashgan o'rni, jumladan C, O va N yetarli anqilikda topilishi mumkin.
- ▶ Lekin vodorodning aniq o'rini topishning iloji yo'q.
- ▶ Buning uchun neytron diffraksiyasidan foydalaniladi.



3

Rentgen spektroskopiyasi

- ▶ .



3
4

Molekulalar simmetriyasi

Tashpulatov X.Sh.

Reja

- ▶ Simmetriya operatorlari va elementlari
- ▶ Nuqtaviy guruhlar
- ▶ Qutbli molekulalar
- ▶ Xiral molekulalar

2

Simmetriya operatorlari va elementlari

- ▶ Molekulalarning simmetriya xossalari ularning gibridlanishi, tebranish spektrlari va optik xossalarni oldindan aytilish imkonini beradi.
- ▶ Molekulalar simmetriyasiga ko'ra sinflarga bo'linadi.
- ▶ *Simmetriya operatsiyalari* molekulaning konfiguratsiyasini ayni holatiga qaytaradi.
- ▶ Simmetriya operatsiyalari nuqtalar, tekisliklar va chiziqalar ustida olib boriladi va ular *simmetriya elementlari* deyiladi.
- ▶ Simmetriya elementlariga *ko'zgu tekisliklari, buralish nuqtalari, inversiya nuqtalari* va h.k.lar kiradi.

Simmetriya operatorlari va elementlari

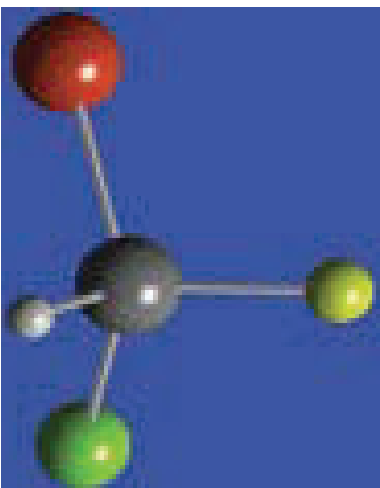
Simmetriya elementi	Simmetriya operatsiyasi	Belgilanishi
n-martalik o'q	Bir xillik	E
Ko'zgu tekisligi	Refleksiya	σ
Inversiya nuqtasi	Inversiya	i
Noto'g'ri buralishning n-martalik o'qi	$360^\circ/n$ da buralishdan so'ng buralish nuqtasiga nisbatan perpendikulyar refleksiya	S_n

3

4

Bir xillik

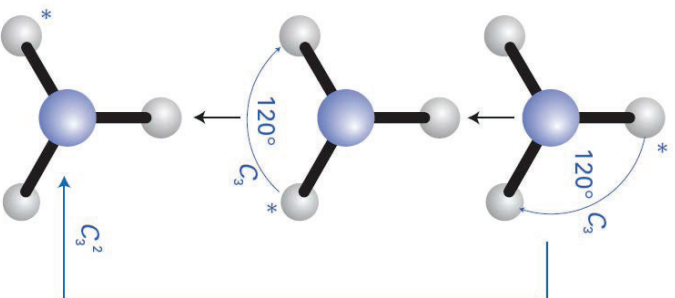
- ▶ Belgilanishi – C_1
- ▶ Barcha molekula bunday simmetriyaga ega. Bu operatsiyada butun molekula o'zgarishsiz qoladi. Masalan



5

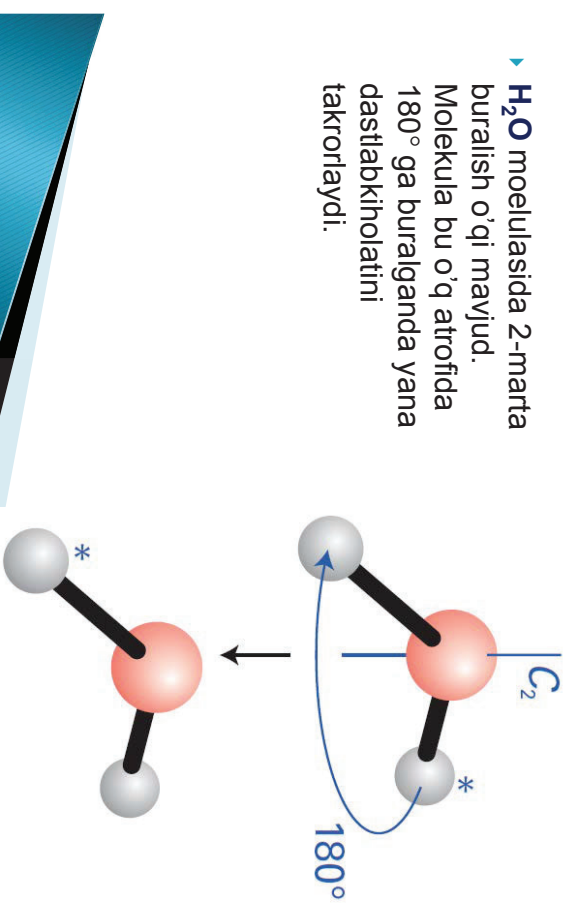
n-marta buralish

- ▶ NH_3 molekulasida C_3 buralish o'qi mavjud 120° ga buralganda yana molekula oldingi holatini egallaydi.
- ▶ Molekulada 2 xil buralish: soat strekasi bo'yicha C_3 va soat strekasi teskari C_3^2 farq qiladi.



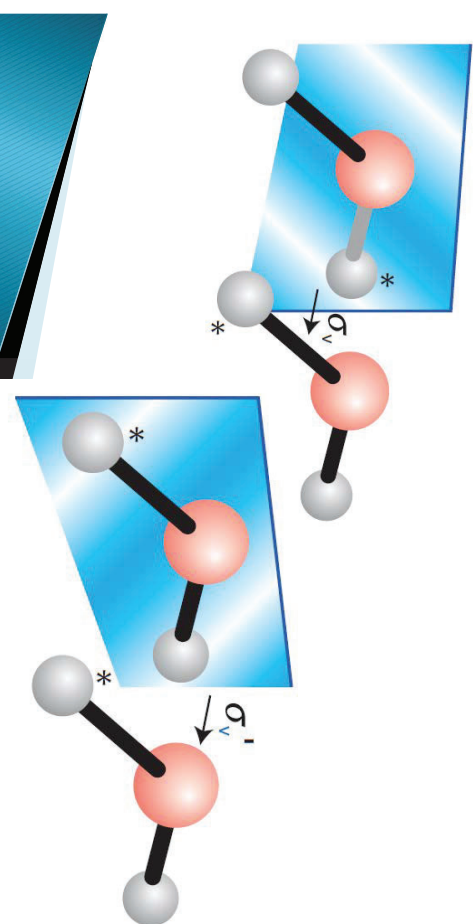
n-marta buralish

- ▶ H_2O molekulasida 2-marta buralish o'qi mavjud. Molekula bu o'q atrofida 180° ga buralganda yana dastlabki holatini takrorlaydi.



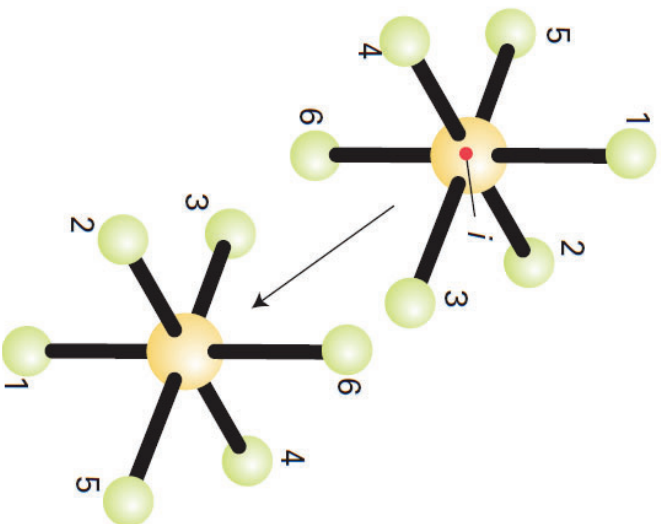
Ko'zgu tekisligi

- ▶ H_2O molekulasida 2 ta ko'zgu tekisligi mavjud. Har ikkalasi C_2 o'q ustida



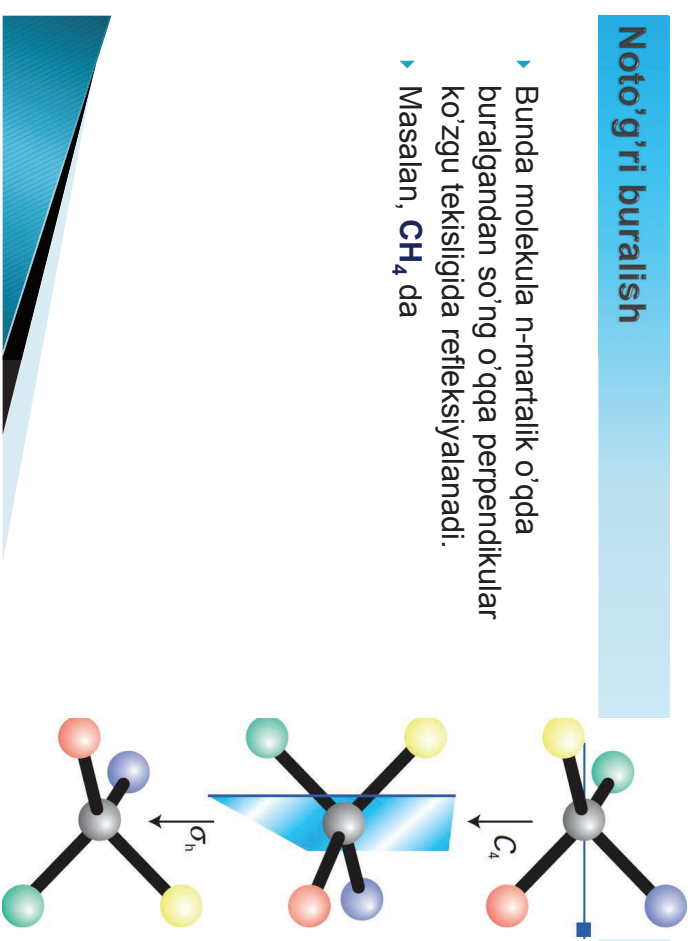
Inversiya

- ▶ Inversiya operatsiyasi inversiya o'qidan molekularning boshqa tomoniga bir xil masofada proyeksiyalaydi.
- ▶ Masalan, SF_6 da.



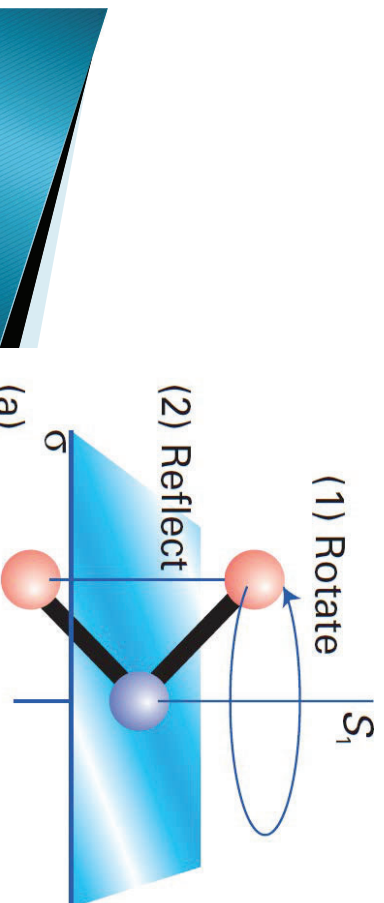
Noto'g'ri buralish

- ▶ Bunda molekula n-martalik o'qda buralgandan so'ng o'qqa perpendikular ko'zgu tekisligida refleksiyanalanadi.
- ▶ Masalan, CH_4 da



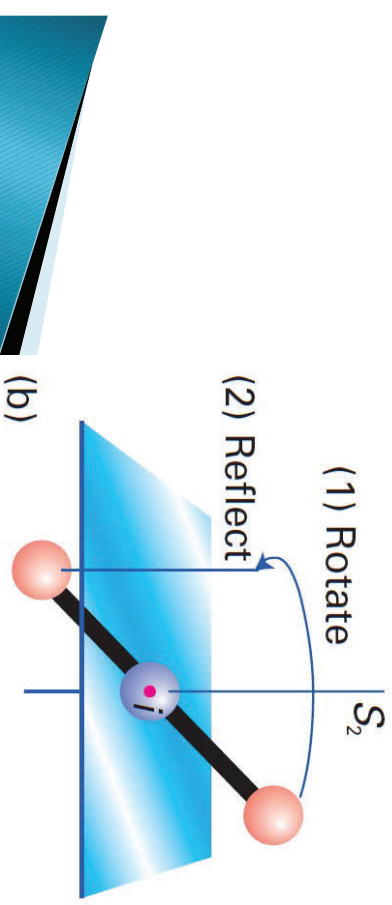
Noto'g'ri buralish

- ▶ Bunday operatsiyadan S_1 ko'zgu tekisligi operatsiyasi bilan bir xil.



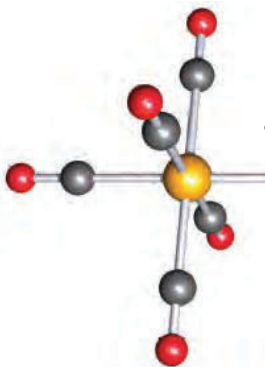
Noto'g'ri buralish

- ▶ Noto'g'ri buralishdan S_2 inversiya markazi bilan bir xil.



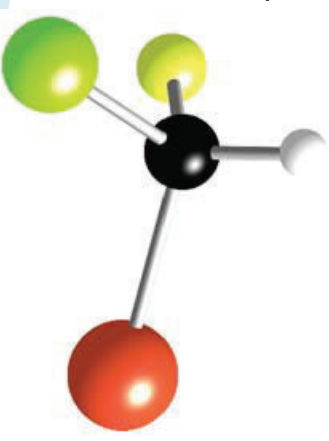
Qutbli molekularlar

- ▶ Qutbli molekula doimiy dipolmomentga ega bo'ladi.
- ▶ Agar molekula inversiya markaziga ega bo'lsa, u qutblanmagan bo'ladi.
- ▶ Molekulaning vertikal ko'zgu tekisligiga perpendikulyar elektrik dipol momenti bo'lmaydi.
- ▶ Molekulaning biror aylanish o'qiga nisbatan perpendikulyar elektrik dipol momenti bo'lmaydi.



Xiral molekularlar

- ▶ Xiral molekula ko'zgdagi o'z aksi bilan mos tushmaydi.
- ▶ Xiral molekula va uning ko'zgdagi jufti o'zaro enantiomer deyiladi.
- ▶ Enantiomerlar optik faol bo'lib, qutblangan bur tekisligini chap yoki o'ng tomonga buradi.
- ▶ Noto'g'ri buralish o'qiga ega molekularlar xiral bo'lolmaydi.



2019