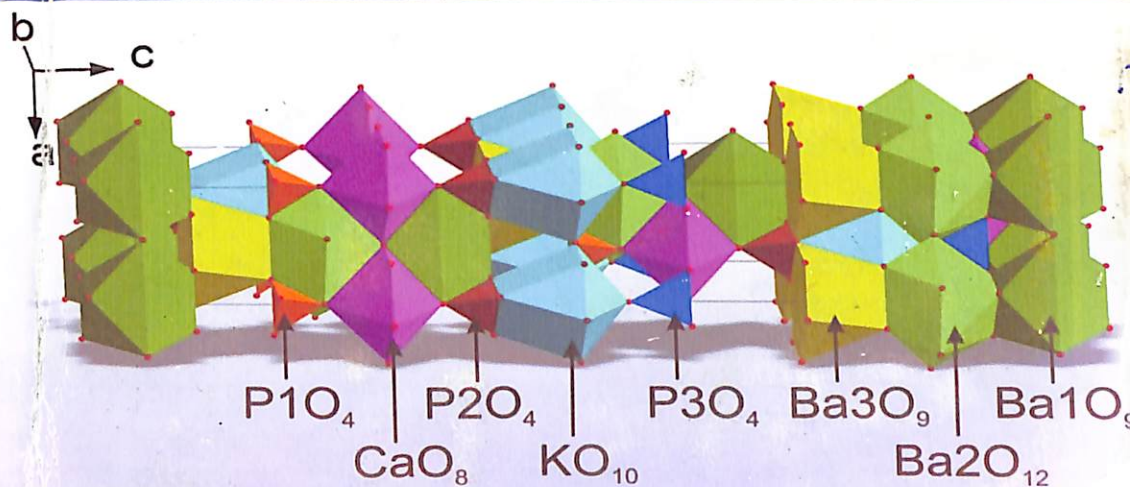
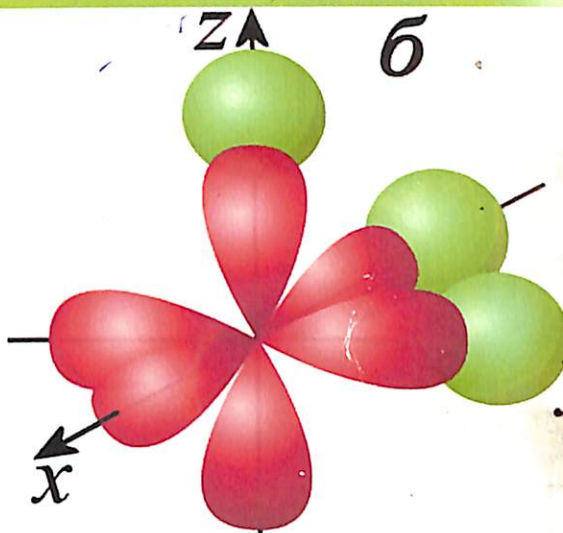
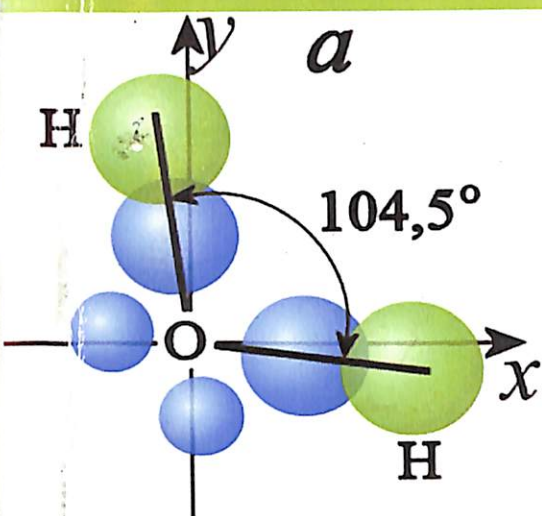


Q. Xalilov, N. Muhamadiyev

MODDA TUZILISHI



Kitob quyidagi ko'rsatilgan
muddatda topshirilishi shart

Oldingi foydalanishlar
miqdori

--	--

‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA
O‘RTA MAXSUS TA‘LIM VAZIRLIGI

SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETI

Q. Xalilov, N. Muxamadiyev

MODDA TUZILISHI

(5140500 – Kimyo bakalavri ta'lim yo'nalishi
talabalari uchun darslik)

Samarqand - 2019

Q. Xalilov, N. Muxamadiyev. Modda tuzilishi. – Samarqand, 2019.
– 272 bet.

UO'K 541.5:541.65/.654:541.67
KBK

Darslik 5140500 - Kimyo bakalavri ta'lim yo'nalishida ta'lim oladigan talabalari uchun mo'ljallangan. Darslikda atom tuzilishi, molekula tuzilishi, kimyoviy bog'lanish, molekulararo ta'sirlar, moddalarning optik, elektrik va magnit xossalari, moddalar tuzilishida simmetriya, kondensirlangan sistemalar tuzilishi, moddalar tuzilishini o'rganish usullari bo'yicha materiallar, nazorat savollari, testlar, glossariy va foydalanishga tavsiya etilgan adabiyotlar ro'yxati berilgan.

Darslik Samarqand davlat universiteti kengashining qarori (4-son, 28.11.2019) bilan nashr etishga tavsiya etilgan.

Taqrizchilar: kimyo fanlari doktori, professor X. Akbarov
texnika fanlari doktori, professor A. Nasimov

ISBN – 978-9943-6179-4-0

© Q. Xalilov, N. Muxamadiyev, 2019.
© SamDU nashriyoti, 2019.

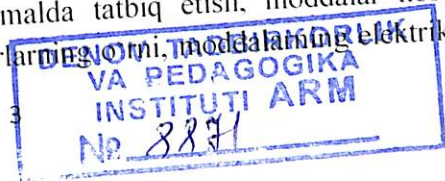
SO'Z BOSHI

Moddalar haqidagi ta'limot tabiatshunoslikning eng murakkab sohalaridandir. U fizikaning zamonaviy yutuqlarini va modda strukturasi yoki zarrachalarning ma'lum o'zaro ta'sirlari bilan bog'liq bo'lgan u yoki bu hodisalarni ifodalash yoki tahlil qilish imkonini beradigan matematik apparatni qo'llaydi. Natijada modda tuzilishi va xossasi o'rtasidagi o'zaro bog'liqliklarni aniqlash imkoniyati paydo bo'ladi. Bu esa "struktura-xossa" o'zaro bog'liqligidan foydalanib, modda strukturasi asosida uning xossasini bashoratlash yoki modda xossasi asosida uning strukturasi shakllantirish imkoniyatini beradi. Boshqacha so'z bilan aytganda "rejalashtirilgan sintez" ni amalga oshirishga olib keladi.

Universitetlarda va pedagogik institutlarda kimyoviy kurslarni o'rganish atom-molekulyar ta'limotni, kimyoviy bog' tabiatini hamda kimyoviy reaksiyalar sodir bo'lishini harakatlantiruvchi sabablarni tushunish talab etiladi. Shuning uchun ham zamonaviy kimyogar mutaxassislar tayyorlashda "Modda tuzilishi" fanining o'rni beqiyos bo'lib, 5140500-kimyo bakalavr ta'limi yo'nalishi o'quv rejasining "Umumkasbiy fanlar" bo'limidan joy olgan. Demak, atom-molekulyar ta'limot nazariyalarini o'rganish, balki ularni dolzarb nazariy va amaliy kimyo muammolarini yechishda amaliy qo'llashni bilish ham talab etiladi. Shu bois darslikda molekula tuzilishi nazariyalaridan kelib chiqqan holda molekularning elektrik, magnit xossalari, energetik holatlar va xususiyatlar ularning tuzilishiga bog'liqligi asosida bayon etishga harakat qilingan.

Moddalarning xossalari ularning tuzilishiga bog'liqligi va shu asosda makrosistemalar xususiyatlarini ham molekular tuzilishi yoki moddalar xossalari bilan o'zaro bog'liqligi, oldindan bashoratlash mumkinligi masalalari ko'rsatilgan.

Ma'lumki, o'quv kursining maqsadi talabalarda modda tuzilishi, atomlardan molekularning va molekularlardan moddalarning hosil bo'lishi, kimyoviy bog' nazariyalari asosida aniq moddalarda kimyoviy bog' parametrlarini hisoblashni amalda tatbiq etish, moddalar hosil bo'lishda kovalentmas o'zaro ta'sirlar



optik va magnit xossalari, moddalar tuzilishida simmetriya elementlari, kimyoviy masalalarni yechishda tadqiqot usullari, jumladan spektroskopik hamda rentgen difraksion tahlil usullarini qo'llash ko'nikmalarini shakllantirishdan iborat. Shu bilan bir qatorda o'quv kursining vazifasi: molekulyar orbitalar va energiyalarni hisoblash, molekulyar spektroskopiya nazariyalari va molekulalar tuzilishini o'rganishda spektroskopik usullar imkoniyatlaridan foydalanishni o'rgatishdan iborat.

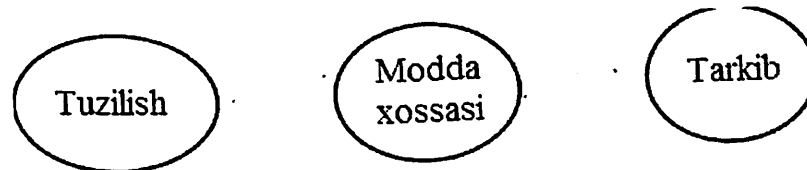
Mualliflar "Modda tuzilishi" darsligining mazmuni, uning sifati bo'yicha bergan maslahatlari uchun O'zbekiston Milliy universitet fizik va kolloid kimyo kafedrasi mudiri prof. X.I. Akbarovga, Samarqand davlat universiteti professori A.M. Nasimovga, texnik ishlarni amalga oshirishda yaqindan yordam bergan A. Zufarov va Sh. Sheraliyevaga o'z minnatdorchiligini bildiradi.

Darslik haqida bildirilgan har qanday fikr va darslik sifatini yaxshilashga qaratilgan takliflar mualliflar tomonidan minnatdorchilik bilan qabul qilinadi (Manzil: Samarqand, Universitet xiyoboni, 15, Fizikaviy va kolloid kimyo kafedrasi, E-mail: m_nurali@mail.ru).

KIRISH

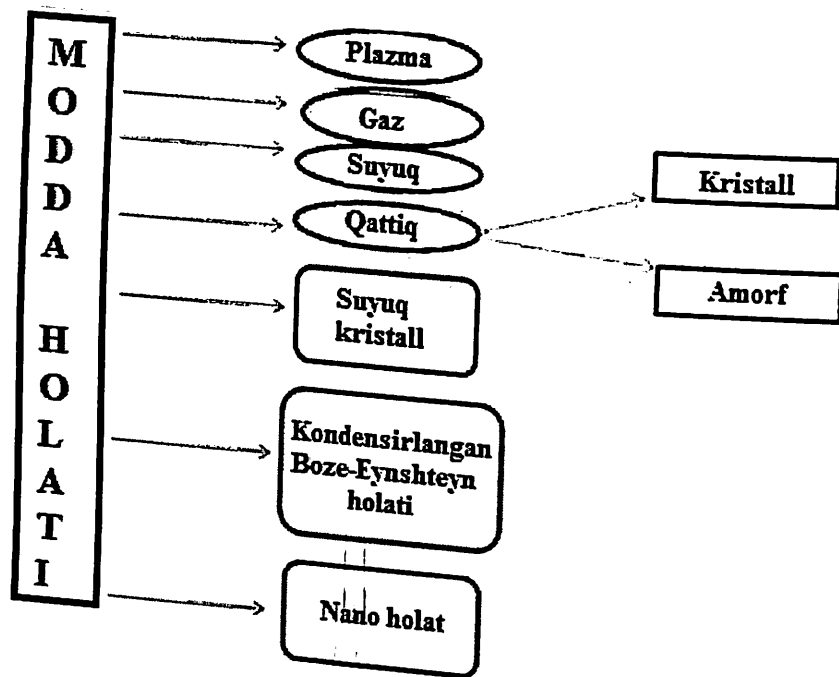
Hozirgi davrda informatsion (kommunikatsion) jamiyatga o'tish jarayoni sodir bo'lmoqda. Bu jarayon XX asrning to'rtinchi choragidan, ya'ni moddalar tuzilishining yangi "ko'p tizimli" konsepsiyasiga asos solinishidan boshlanib, hozirgacha shiddat bilan rivojlanmoqda. Bugungi kunga kelib, mazkur jarayon ijtimoiy hayotning barcha jabhalariga, xususan ta'lim sohasiga ham o'z ta'sirini o'tkazmoqda. Klassik fanlar o'rniga yangi nanofanlar, xususan nanofizika, nanokimyo, nanobiologiya, nanotexnologiya kabi fanlar vujudga keldi. Mazkur fanlarni oliy o'quv yurtlarida, litsey, kollej va umumta'lim maktablarida keng qamrovli o'tish zamonaviy ta'lim sistemasining dolzarb masalalaridan biriga aylandi.

Ma'lumki, modda tarkibi, tuzilishi va xossasi o'rtasida uzviy bog'lanish mavjud bo'lib (1-rasm), bunda moddaning agregat holati uni tashkil etgan moddiy nuqtalar (struktur elementlar, ob'ektlar) o'lchami, soni va fazoviy joylashuvi muhim rol o'ynaydi (2-rasm).



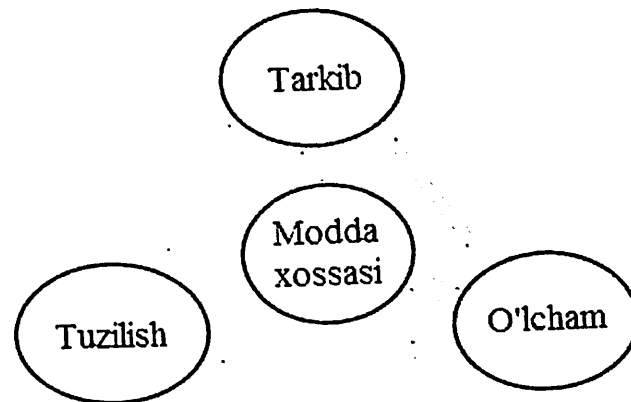
1-rasm. Modda xossasining klassik tasnifi

Dialektika va sinergetikaning miqdoriy o'zgarishlarning sifat o'zgarishlariga o'tish qonuniga asosan modda tizimida moddiy nuqta (molekula, atom, ion) miqdori yoki sonining o'zgarishi (Avogadro sonidan $6,02 \cdot 10^{23}$) bittaga oshishi yoki aksincha kamayishi) modda xossasining yetarli darajada o'zgarishiga sabab bo'ladi. Natijada turli-tuman ajoyib xossalarga ega bo'lgan turli materiallarni olish imkoniyatlari vujudga keladi.



2-rasm. Modda holatlari

Modda tuzilishining ko'p tizimli konsepsiyasi moddani muvozanatdagi muayyan termodinamik sistemadan tashkil topganligi va ushbu sistemada mikro-, mezo(nano) – hamda makroskopik ob'ektlar birga mavjud bo'la olishi va o'zaro ta'sir qilib turishini e'tiborga oladi. Mezo (nano) holat makro va mikro (kvant) holatlar qo'shilishi uyg'unligida mavjud bo'ladi. Nano ob'ektlar multizarralar strukturasi-ga ega bo'lib, muayyan o'ziga xos fizik-kimyoviy xossalarga ega. Multizarralar moddaning nanotizimini shakllantiradi. Ta'kidlash joizki, nanoholatda moddalar, materiallar turli fizik-kimyoviy hamda informatsion xususiyatlarni namoyon etadi. Ularning tuzilishi molekula va atomlarning kvant tuzilishidan hamda moddalarning klassik fazaviy (agregat) tuzilishidan farq qiladi. Ular oraliq holatni, ya'ni mezo holatni egallab, o'ziga xos xususiyatlarni namoyon etadi. Ular bo'ysunadigan energetik qonunlar klassik va kvant qonuniyatlar o'rtasida oraliq holatni egallab, jarayonlarning uyg'unlashuvi asosida shakllanadi (3-rasm).



3-rasm. Modda xossasining zamonaviy tasnifi

XX asrning o'rtalari va ikkinchi yarmida fizikaning materiyaning tuzilishi o'rganishga bag'ishlangan bo'limlarida juda g'aroyib natijalar olindi. Bu eng avvalo ko'p sonli yangi subatom zarrachalarining kashf etilishida ko'rina boshladi. Ular odatda elementar zarrachalar deb atalsada, ularning barchasi ham elementar emas. Ularning ko'pchiligi yanada elementar bo'lgan zarrachalardan tashkil topgan. Subatom zarrachalar haqiqatdan ham ko'p shaklidir. Ularga atomning yadrosini tashkil etuvchi protonlar, neytronlar, hamda yadroning atrofida aylanadigan elektronlardir. Biroq shunday zarrachalar borki, amalda bizning atrofimizdagi moddalarda uchramaydi. Ularning yashash davrlari juda kichik bo'lib, sekundning juda kichik ulushlarini tashkil etadi. Shunday juda kam vaqt ichida ular oddiy zarrachalarga parchalanadi. Bunday qisqa vaqt yashaydigan zarrachalar ajablanarli darajada ko'p, ularning soni bir necha yuzdan iborat. O'tgan asrning 60-70 yillarida fiziklar yangi kashf etilgan zarrachalarning turlari va o'zgachaligi bilan o'z fikrlaridan adashib ketar darajaga yetdilar. Buning oxiri yo'qday tuyulardi. Bu zarrachalarning nega kerakligini g'oyatda tushunarli emas. Bunday elementar zarrachalar materiyaning tartibsiz yoki tasodifiy bo'laklar hisoblanadi? Balki ularning koinotning strukturasi o'rganish kalitidir? Fizikaning keyingi o'n yilliklaridagi rivojlanishi shunday strukturaning mavjudligini shubhasiz isbotlaydi. XX asrning fizika har bir elementar zarrachaning ahamiyatini tushuna boshladi. Subatom

zarrachalarga chuqur va ratsional tartib xosdir. Bunday tartib negizidagi fundamental fizikaviy ta'sirlashuvlar yotadi.

Mikroskopik ob'yektlar dinamikasi kvant nazariyasi qonuniyatlar bilan ifodalansa, mezo ob'jekt dinamikasi esa kvant nazariyasi bilan klassik qonuniyatlarning o'zaro uyg'unligidan foydalanishni nazard tutadi. Nanoholatlarda nanozarrachalar va klasterlarning o'lchami nanometrlarda ($1 \text{ nm} = 10^{-9} \text{ m}$) o'lchanadi.

Nanozarralar hosil bo'lish jarayonida oldin klasterlarning hosil bo'lishi, keyin esa ularning yiriklashishi ta'kidlanmoqda. Bunday o'lchamlardagi nanozarrachalarda "o'lcham"li effektlar (turli o'lchamli nanozarrachalar va ulardagi atomlar sonining o'zgarishi) vujudga kelib, nanozarrachalarda o'ta yuqori faollik (aktivlanish) namoyon bo'ladi. Atomlar turi, soni va fazoviy joylashish tartibini o'zgartirish orqali fizik-kimyoviy xossalari turlicha bo'lgan moddalar, materiallar hosil qilinmoqda. Bir modda nanozarrachalardagi xossalari $1-10 \text{ nm}$, $10-100 \text{ nm}$ qalinlik yoki hajviy o'lchamlarda shu modda makrozarrachalari xususiyatlariga nisbatan "o'lchamli effekt" lar hisobida tubdan farq qilishi kuzatilmoqda. Nanozarrachalar katta kimyoviy faollik namoyon etadi. Mazkur faollikni nanozarrachalarga bitta atom yoki molekula qo'shib o'zgartirish mumkin. Bu zarralar uchun turli kimyoviy effektlar, ayniqsa "o'lchamli effekti" xos bo'ladi. Ayniqsa o'lchami 1 nm dan kichik bo'lgan nanozarrachalar uchun juda qiziq ma'lumotlar olingan. Mazkur zarrachalar juda katta kimyoviy faollikka ega bo'lishi hisobidan ortiqcha energiyaga ega. Ular faollik energiyasiz agregatsiya (birlashish) jarayoniga kirishadi va zarrachalarning soni ularning o'lchamiga nisbatan muhimroq rol o'ynay boshlaydi. Shu bois nanozarra fundamental xossalari o'rganishda zarra xossalari uning o'lchamiga (atomlar soniga) qarab o'zgarishiga, ya'ni ichki o'lchamli effektlarga e'tibor qaratilmoqda. Kimyoda ichki o'lchamli effektlari zarra strukturasi o'zgarishi va sirt ta'sirida elektronlar lokallashtirish oshishida yuzaga keladi. Sirt yuzasining xossasi esa zarralarning barqarorligi va reaksiya qobiliyatiga ta'sir ko'rsatadi. Ma'lumki, nanozarralarda atomlarning aksariyat qismi nanozarra sirti yuzasida bo'lib, ularning soni zarra o'lchamining kichrayishi bilan oshadi. Nazariy va amaliy izlanishlar

huni ko'rsatmoqdaki, sistemaning holati va reaksiya qobiliyatini aniqlaydigan parametrlardan biri termodinamik parametrlar bilan bir atorda nanozarra o'lchamidir. Nanozarra o'lchami temperaturaga kvivalent faktor sifatida qaralmoqda. Zarra faolligiga zarralar o'rtasidagi masofa ham ta'sir etadi. Nanokimyoning asosiy masalalaridan yana biri bu zarra o'lchamining uning kimyoviy faolligiga ta'siridir. Kimyodagi o'lchami effektlar-bu shunday jarayonlarki, unda nanozarradagi atomlar yoki molekular sonining farqida reaksiya qobiliyat va kimyoviy xossalarning sifat jihatidan o'zgarishida namoyon bo'ladi. Ta'kidlash lozimki, nanozarra o'lchamining kichrayishi bilan faza tushunchasi o'z mohiyatida mavhumlashadi, ya'ni gomogen va geterogen fazalar, amorf va kristall holatlar, metallar va metallmaslar o'rtasidagi farq kamayadi, ularni ajratish qiyinlashadi.

Klassik kimyoda modda xossasi uning tarkibi va tuzilishi bilan izohlansa, ko'p tizimli sistemada modda xossasi uning tarkibi ko'p darajali (tizimli) tuzilishi va moddiy nuqtalarning fazoviy joylashuvdagi o'zaro ta'sirlar orqali izohlanmoqda (3-rasm). Kimyoda mavjud bo'lgan "tarkib-xossa", "struktura-xossa" kabi tushunchalar, nanokimyoda "o'lcham-xossa", "o'lcham", "o'z-o'zini tashkillashtirish" kabi tushunchalar bilan to'ldirilmoqda. "Klaster", "nanozarra", "nanotrubka (naycha)", "nanosistema", "nanomaterial", "nanotexnologiya", "nanokimyoy", "o'lchamli effektlar" kabi terminlar vujudga keldi.

Hozirgi paytda Mendeleev davriy sistemasidagi kimyoviy elementlarning nanozarralari o'rganilmoqda. Xususan, nanomateriallar yaratishda davriy sistemadagi II-III-IV davrlardagi III-IV-V guruh P elementlari asosida uchta triplet: B, C, N va Al, Si, P hamda Ga, Ge, As elementlardan olinayotgan nanomateriallar sabab bo'lmoqda. Ya'ni, 5-10 yil ichida nanokimyoning nanotexnologiyadagi o'rni kengayib, kelajakda yangi-yangi moddalar holatidagi materiallarni olish va amalda qo'llash keng qamrovli jarayonga aylanadi. Bu borada yangi mutaxassislarni, ayniqsa nanokimyogarlarni tayyorlash hozirgi zamon oliy o'quv yurtlarining dolzarb masalalaridan biriga aylanadi. Shuning uchun ham rivojlangan mamlakatlar ta'lim tizimida nanosoha mutaxassislarni tayyorlashga katta e'tibor qaratilmoqda.

Modda tuzilishi tarixini o'rganishni quyidagi davrlarga ajratish mumkin:

1. Alkimyodan oldingi davr.

Eramizning III asrigacha. Bu davrda moddalar tuzilishini o'rganish bilimlarning nazariy hamda amaliy tomonlari bir-biriga bog'lanish bilan bog'lanmagan holda rivojlandi. Moddalar xossasining kelib chiqishini antiq tabiat filosofiyasi (naturfilosofiya) ko'rib chiqar edi. Moddalar bilan amaliy tajribalarni o'tkazish kimyo hunarmandchiligining asosi edi.

2. Alkimyo davri: III-XVII asrlar.

Alkimyo davri o'z navbatida uch davrni qamrab olgan, ya'ni Aleksandriya (yunon-misr), arab va yevropa alkimyosi. Bu davr asosan falsafa toshini, ya'ni metallarni qimmatbaho toshga aylantirish imkonini beradigan toshni qidirish davridir. Bu davrda amaliy kimyo shakllanib borib, modda to'g'risidagi bilimlar zahirasi yig'ildi, elementlar to'g'risidagi astrologiya va falsafiy qarashlarga asoslangan alkimyoviy nazariya hamda mos holda mistik falsafa shakllandi. Bu boradagi ishlarni amalga oshirishda ulug' mutafakkirlardan bo'lgan Jafar as-Sodiq (700-765), Ar Roziy, Abu Ali ibn Sino, Abu Rayhon Beruniy, Al Xorazmiy kabilarning hissalari beqiyosdir.



Abu Bakr ar-Roziy
(854-925)



Abu Rayxon Beruniy
(973-1050)



Abu Ali ibn-Sino
(980-1037)

Shuni alohida qayd etish kerakki, Jafar as-Sodiqning sayi harakatlari bilan kimyo fanini o'rganishga va hunarmandchilikning yo'nalishi sifatida alohida e'tibor qaratilib, arab olamida ko'plab kimyoviy laboratoriyalar tashkillashtirilgan. Mazkur laboratoriyalarda yangi moddalarni sintez va

tabiiy birikmalarni analiz qilish bo'yicha ishlar bajarilib, kimyo hunarmandchilikdan fanga aylantirildi.

3. Shakllanish davri (XVII-XVIII asrlar).

Bu davrga kelib kimyo alohida fan sifatida shakllandi, elementlarga nisbatan alkimyoviy va tabiiy falsafiy qarashlarga barham berildi. Moddalar tuzilishi va xossalari to'g'risidagi amaliy bilimlar kengayishi bilan bir qatorda nazariy ilmiy qarashlar, tadqiqot usullari ishlab chiqila boshlandi. Kimyoda jismlar tarkibini amaliy o'rganuvchi fan sifatida revolutsion jarayon sodir bo'ldi deyilsa mubolag'a bo'lmaydi.

4. Miqdoriy qonuniyatlar, atom-molekulyar ta'limot davri (1789-1860).

Miqdoriy qonuniyatlar davrida-stexiometrik qonunlar kashf qilinib, atom-molekulyar ta'limot shakllandi. Bu davrda kimyo aniq fan sifatida shakllandi, ya'ni faqatgina kuzatishlar olib boradigan emas, balki amaliy o'lchovlar o'tkazadigan fanga aylandi.

5. Klassik kimyo davri (1860 - XIX asr oxiri).

Klassik kimyo davri fanning shiddatli rivojlanishi bilan xarakterlanadi. Bu davrda elementlarning davriy sistemasi kashf etildi; molekular tuzilishi va valentlik nazariyasi yaratildi, stereokimyo, kimyoviy termodinamika va kimyoviy kinetika qonuniyatlari kashf etildi. Anorganik va organik kimyoviy sintezda muvaffaqiyatlarga erishildi. Moddalar xossalari to'g'risidagi bilimlarning oshishi sababli kimyoning differentsiatsiyalanishi boshlandi.

6. Zamonaviy davr (XX asrdan boshlab hozirgacha).

XX asr boshida fizika fanida revolutsiya sodir bo'ldi. Nyuton mexanikasiga asoslangan materiya bilimlari o'rnini kvant mexanikasi ta'limoti va nisbiylik nazariyasi egalladi. Atomning parchalanishi, ya'ni murakkab zarracha ekanligi va kvant mexanikasining (to'lqin mexanikasining) yaratilishi kimyoviy tushunchalarga yangicha mazmun bag'ishladi. XX asr boshlaridagi fizika fanining yutuqlari elementlar va ular birikmalari xossalari izohlashga hamda atomlararo kimyoviy bog'lanishlar nazariyasini yaratishga imkon berdi. Tubdan yangi fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining paydo bo'lishi moddalar tarkibi, tuzilishi

va reaksiya xossalari o'rganish va bashorlashda ulkan yutuqlarga erishilgan, ikkinchisi katta ansambllar tarkibiga kiruvchi jismlarning qo'lga kiritishga imkoniyat yaratdi. Xususan, biokimyoda XX asrning birinchi yarmida DNK va RNK tuzilishini aniqlash hamda tirik organizmlar hujayralarining faoliyat mexanizmlarini o'rganishga katta qadam bo'ldi. Bu esa evolyutsion kimyo, ya'ni atomlar va molekullardan tirik organizmlarning o'z-o'zidan shakllanib chiqishi (biokimyo, molekulyar biologiya, nanokimyo, supramolekulyar kimyo va h.z.) paydo bo'lishiga olib keldi.

Modda tuzilishi to'g'risidagi tasavvurlar, qarashlar qadimgi olimlarning tadqiqotlarida o'z aksini topdi. Xususan, M.Faradey, P.Gassendi, Robert Boyl, M.V.Lomonosov, D.Dalton, Lavuaze, Yakob Berselius, S.Arrenius, L.Bolsman olimlar izlanishlari dunyoning borliqning mexanik tuzilishi manzarasiga chek qo'ydi. Bu borada modda tuzilishining atom-molekulyar ta'limoti yaratilishi muhim qadam bo'ldi.

Dj. Maksvell "Molekulalarning guruhlar bo'yicha turli tezliklar farqi tufayli taqsimlanishning statistik qonuniyati"ni yaratdi. Mazkur qonun molekulalar har xil tezliklar bo'yicha taqsimlanishi ehtimollikini aniqlaydi va muayyan tasodifiy jarayonlar sodir bo'lishiga ruxsat beradi.



Maykl Faradey
(22.09.1791-25.08.1867)



Jozef Jon Tomson
(18.12.1856-30.08.1940)



Antuan Anri Bekkerel
(15.12.1852-25.08.1908)

Dunyoning mexanik manzarasi tasavvuriga binoan, borliqdagi sodir bo'ladigan jarayonlarda tasodiflarga o'rin yo'qdir. Maksvell qonunining ochilishi bilan fanda dinamik va statik qonuniyatlar to'g'risidagi tushunchalar kiritildi. Birinchisi alohida jismlar harakatini mutlaq holatda

aniqlansa, ikkinchisi katta ansambllar tarkibiga kiruvchi jismlarning harakat ehtimollikini aniqlaydi. Shunday qilib, statistik qonuniyatlar harakatini mikrodarajada aniqlaydi. Termodinamika qonunlari, ergiyaning saqlanish qonunining kashf etilishi modda tuzilishi va odasini o'rganishga katta qadam bo'ldi.

A. Eynshteyn va de Broyl g'oyalari tayanib, adekvat bo'lmagan or modeliga bog'liq bo'lmagan holda Ervin Shredinger elektronlarning to'liq harakatini kvant nazariyasiga bog'lashga harakat qilgan. U kvant nazariyasini klassik fizikaga yaqinlashtirmoqchi bo'ladi, lekin bu birinchi urinish (1925 y) omadsizlikka uchraydi, chunki elektronlar tezligi orug'lik nuri tezligiga yaqin deb qabul qilingan edi. Bundan tashqari Shredinger elektronga xos bo'lgan alohida xossani, ya'ni spinni e'tiborga olmaganligi sabab bo'lgan edi. E.Shredinger keyingi ikkinchi urinishda (1926 y.) elektronlarning tezligi kichik qiymatli ekanligini e'tiborga olib materiyani matematik tenglamasini to'liq funksiyasi qiymatlarida ifodalashiga muvassar bo'ldi. Shredinger o'zining nazariyasini to'liq mexanikasi deb nomladi. To'liq tenglamasining yechimi eksperimental kuzatishlar bilan mos kelib kvant nazariyasining keyingi rivojlanishiga katta ta'sir ko'rsatdi. Hozirgi paytda to'liq funksiyasi mikrosistemalarni kvant mexanik ifodalashning asosida bo'lib, xuddi klassik mexanikada Gamilton tenglamalari singari qiyoslanadi.

Biroz ilgariroq Verner Geyzenberg, Maks Born va Paskual Iordan kvant nazariyasining boshqa variantini, ya'ni matritsali mexanikani e'lon qilishdi. Matritsali mexanikada kvant hodisalari kuzatiladigan kattaliklar qiymatlari jadvallari orqali ifodalanadi. Mazkur jadvallar ma'lum tartibli matematik ko'paytuvchilar, ya'ni matritsalar deb nomlanib, ma'lum qoidalarga asoslanib ular bilan turli matematik operatsiyalarni bajarish mumkin. Matritsali mexanika ham eksperimental natijalardagi kuzatuvlar bilan kelushuvga erishish imkonini berardi, lekin to'liq mexanikadan farqli o'laroq fazoviy koorrdinatalar yoki vaqtga nisbatan hech qanday aniq ma'lumotlarni qamrab olmagan edi.



Nils Bor
(07.11.1885-18.11.1962)



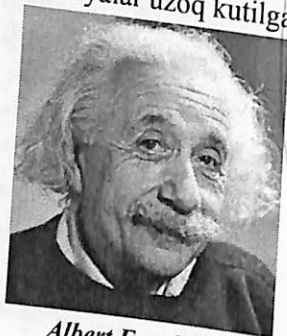
Ernest Rezerford
(30.08.1871-19.10.1937)



Verner Geyzenberg
(5.12.1901-1.02.1976)

Geyzenberg eksperimentalda aniqlanadigan xossalar foydasi uchun qandaydir oddiy ko'rgazmali tasavvurlar yoki modellardan voz kechishni talab qilar edi. Uning tasavvuricha mikrodunyo Plank doimiysini o'ziga xos roli sababli mikrodunyoga nisbatan umuman boshqach tuzilishga egadir.

Shredinger to'liq mexanikasi va matritsali mexanika matematik jihatdan o'zaro ekvivalent ekanligini ko'rsatdi. Bugungi kunda umumiy nom kvant mexanikasi nomi bilan ma'lum bo'lgan mazkur ikki nazariyalar uzoq kutilgan kvant hodisalarining umumiy asosini ifodaladi.



Albert Eynshteyn
(14.03.1879-18.04.1955)



Lui De Broyl
(15.08.1892-19.03.1987)



Van der Vaals
(23.11.1837-8.03.1923)

Ko'p fiziklar matematik apparati ancha tanish hamda tushunchalari "fizikaviy" ancha vaqt o'tmay, Geyzenberg va Shredinger kvant mexanikasini yaratganlaridan keyin, Polb Dirak ancha umumiy nazariyani taklif etdi. Mazkur nazariyada Eynshteynning maxsus nisbiylik nazariyasining elementlari to'liq tenglamasi bilan

vofiqlashtirildi. Dirak tenglamasi erkin tezlikda harakatlanayotgan zarrachalar uchun qo'llaniladi. Elektronning spin va magnit xossalari uchun qanday qo'shimchalarsiz Dirak tenglamasidan qaraladi. Undan tashqari Dirak nazariyasi antizarrachalarning ham, ya'ni elektr zaryadi elektron va protonga teskari bo'lgan pozitron va antiprotonlar mavjudligini (borligini) bashorat qildi.

Kvant mexanikasining tarixi 1900 yil 14- dekabrda, ya'ni **Maks Plank** tomonidan jism temperaturasi bilan uning chiqargan nurlanishi orasidagi nisbatni nazariy keltirib chiqarilishi taklif etilgandan boshlangan.



Mariya Kyuri
(7.11.1867-4.07.1934)



Maks Plank
(4.04.1858-1.10.1947)



Ervin Shredinger
(12.08.1887-4.01.1961)

Mazkur nisbat barcha hayratda qoldirgan bo'lishiga qaramasdan, uning ba'zi tomonlari, jumladan klassik fizika qonuniyatlariga qarshi bo'lganligi uchun ancha vaqt tushunarsiz bo'lib qoldi.

1905 yilda **Albert Eynshteyn** fotoelektrik hodisaning (metallar sirtiga ultrabinafsha nurlar tushganda elektronlarning sochilishi) ba'zi tomonlarini tushuntirish uchun kvant nazariyasidan foydalandi.

Oradan sakkiz yil o'tgandan keyin kvant nazariyasini atomda qo'llab, alanga yoki elektr yoyi ta'sirida qo'zg'atilgan atomlardan chiqadigan to'liqning chastotasini tushuntirdi. **Ernest Rezerford** musbat elektrik zaryadga ega bo'lgan yadroda atomning massasi to'planganligini va yadro atrofi nisbatan katta masofada manfiy zaryadga ega bo'lgan elektronlar bilan o'ralganligini, ya'ni atom elektroneytral zarracha ekanligini ko'rsatdi.



Wolfgang Pauli
(25.04.1900-15.12.1958)



Fridrix Hund
(4.02.1896-31.03.1997)



Vilgelm Rentgen
(27.03.1845-10.02.1923)



Dmitriy Mendeleev
(8.02.1834-2.02.1907)



Aleksandr Butlerov
(15.09.1828-17.08.1886)



Sobir Yunusov
(18.03.1909-29.11.1995)

Nils Bor elektronlar faqat turlicha energetik sathlarga mos keluvchi muayyan diskret orbitalarda bo'lishi mumkinligini taklif etdi. Elektronning bir energetik sathdan boshqa kam energiyali sathga o'tish foton chiqarish bilan amalga oshadi, uning energiyasi ikki orbital o'rtasidagi energiya farqiga teng. Plank nazariyasiga ko'ra chastota foto energiyasiga proporsional.



Georgiy Vulf
(22.06.1863-25.12.1925)



Uilyam Lorens Bregg
(31.03.1890-1.07.1971)



Xideki Yukava
(23.01.1907-8.09.1981)

Shunday qilib, Nils Borning atom modeli modda va atom strukturasi chiqariladigan nurlanishlari uchun xarakterli spektrning turli chiziqlari o'rtasidagi bog'liqlikni o'rnatdi. Erishilgan muvaffaqiyatlarga qaramasdan Borning atom modeli nazariya va tajribaviy natijalar farqidan qutilish uchun modifikatsiyalashni talab qildi.

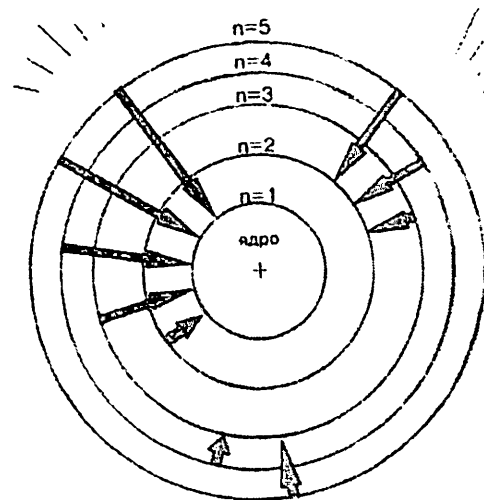
Shu bilan bir qatorda kvant nazariyasi ko'plab kvant masalalarini qizimli yechish imkonini bermadi. Lekin shu narsa yaqqol ko'rindiki, klassik fizika tezlanish bilan harakatlanayotgan elektron elektromagnit to'lqinlari nurlanishida energiya yo'qotib yadroga qulamasligini tushuntirishga qodir emasligi ma'lum bo'ldi.

Kvant nazariyasining yangi o'ziga xos xususiyati 1924 filda **Lui de Broyl** tomonidan olg'a surilgan materiyaning to'lqin xarakteri haqidagi radikal gipoteza paydo bo'ldi. Unga ko'ra agar elektromagnit to'lqinlar, masalan, yorug'lik ayrim hollarda o'zini zarracha sifatida (buni Eynshteyn ko'rsatgan), ayrim hollarda zarrachalar, masalan elektron ba'zi hollarda o'zini to'lqin sifatida namoyon qiladi. Shunday qilib mikroolamda klassik zarracha va klassik to'lqin o'rtasidagi farq yo'qoldi. De Broyl ta'rifida zarrachaga mos keladigan chastota xuddi foton kabi (yorug'lik zarrachasi) uning energiyasi bilan bog'liq. Lekin de Broyl taklif etgan matematik ifoda zarracha to'lqin uzunlik, massasi va uning tezligi (impulsi) o'rtasidagi nisbatga ekvivalent. Elektronlar to'lqinlarining mavjudligi tajribaviy yo'l bilan 1927 yil **K. J. Devisson, L.X. Jermer va J.P. Tomsonlar** tomonidan isbotlandi. O'z navbatida ushbu kashfiyot 1933 yilda **Ernst Ruska** tomonidan elektron mikroskopni yaratilishiga olib keldi.

Moddalar tuzilishini o'rganishga O'zbekistondan yetishib chiqqan olimlar ham salmoqli hissa qo'shishgan. Ular jumlasiga alkaloidlar strukturasi aniqlash bo'yicha tadqiqotlar olib borgan akademik O.S.Sodiqov, akademik S.Yu. Yunusov, baxtli yulda 30 yil davomida tadqiq etgan

akademik X.Usmonov, fluororganik polimerlar kimyo bilan shug'ullandi
prof. A.Yulchibayev, kompleks birikmalar tuzilishini tadqiq etdi
akademik N.A.Parpiyev va boshqalarni kiritish mumkin.

I. BOB ATOM TUZILISHI



1.1. Atom tuzilishi modellari

Atom – kimyoviy elementning mustaqil mavjud bo'lgan eng kichkina zarrachasi bo'lib, uning xossalarini namoyon etadi. Atom elektroneytral sistema bo'lib, musbat zaryadlangan yadro va manfiy zaryadlangan elektronlardan tashkil topgan.

Atom tuzilishi uning elektron qobiqlari strukturasi, molekularining hosil bo'lish sabablari va tuzilishi, kristallar va moddalar xossalari hamda ularning boshqa moddaga aylanish, o'zgarish xususiyatlarini tushuntiradi.

Moddalar tuzilishini o'rganish ularning xossalari va o'zgarishlari to'g'risidagi bilimlarimizni yanada kengaytirishga olib keladi.

Uzoq yillar davomida bo'linmas, elementar deb hisoblangan proton, neytron kabi zarrachalar ham murakkab va bo'linuvchan ekanligi aniqlandi.

D.I.Mendeleev tomonidan kimyoviy elementlar davriy sistemasining kashf etilishi elementlar kimyoviy xossalari davriy ravishda o'zgarishini va atom tuzilishining murakkablik g'oyasini isbotladi.

Ma'lumki, 1897 yili J.Tomson elektron zaryadining (e^-) u massasiga (m_e) nisbati (e/m_e) katod nuri tabiatiga, gazning kimy tarkibi va tajriba sharoitiga bog'liq emasligini aniqladi. Bu hodisa s ko'rsatdiki, elektron muayyan zarracha bo'lib, barcha elementlar strukturaviy birligini tashkil etadi.

1909 yili R.E.Malliken elektronning zaryad qiymatini o'lchadi. Unga ko'ra $q_e = 1,602 \cdot 10^{-19}$ kulon.

Elektron massasi esa $m_e = 9,1091 \cdot 10^{-31}$ kg ga teng.

1895 yil V. Rentgen moddaga katod nurlarini ta'sir ettirib, qi to'liqinli elektromagnit tebranishlarni (nurlanishni) kashf qildi. Maz nurlanish keyinchalik *rentgen nurlari* deb ataldi.

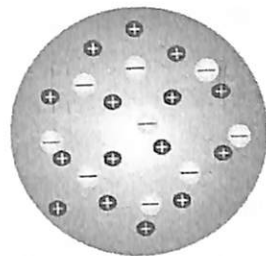
A.Bekkerel (1896y.) tomonidan tarkibida uran bo'lgan minerallarda radioaktivlik hodisasining ochilishi, keyinchalik esa Per Kyuri va Mar Kyurilar tomonidan (1898 y) toriy, radiy va poloniy elementlarining kashf etilishi atom tuzilishining murakkabligini isbotladi. M.Kyuri, Kyuri va E.Rezerfordlarning keyingi izlanishlari radioaktiv nurlanish elektronlarning zaryadi miqdori jihatdan bir-biriga teng bo'lganligi uchun β - va γ -nurlardan iborat ekanligini tasdiqladi.

Gamma γ -nurlanish rentgen nurlaridan ham kichik to'liq uzunligiga ega bo'lgan elektromagnit nurlanish, betta β - nurlanish elektronlar oqimi va α - nurlanish esa geliy atomi ionlarining (He) oqimi ekanligi isbotlandi.

Atom elektroneytral zarracha bo'lganligi sababli, u elektronlardan tashqari musbat zaryadlangan qismdan ham iborat ekanligi izohlanib, bu qism *yadro* deb ta'riflandi.

Ma'lumki, atom tuzilishining birinchi "planetar modeli" rus olimi professor B.N.Checherin tomonidan taklif etilganiga qaramasdan kashfiyot xalqaro miqyosda e'lon qilinmagan.

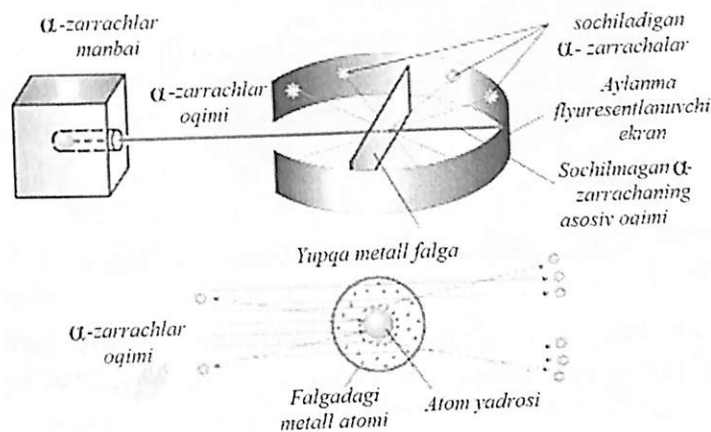
1903 yili J. Tomson atom tuzilishi modelini taklif etgan. Unga ko'ra atom - bu musbat zaryadlangan "quyqa" da uni kompensatsiyalovchi manfiy zaryadlangan elektronlardan iborat. Bunda elektronlar butun hajm bo'yicha taqsimlangan (1-rasm).



1-rasm. Atom tuzilishining Tomson modeli

Lekin Tomson model "planetar model"ni inkor etadi.

1911 yili Rezerford α -zarrachalarining metall folgasi orqali o'tish rayonini kuzatish asosida atom tuzilishining "planetar" gipotezasini yaratdi (2-rasm). Unga ko'ra "atom massasining asosiy qismini tashkil etuvchi musbat zaryadli yadro atrofida elektronlar aylanadi. Yadro va elektronlarning zaryadi miqdori jihatdan bir-biriga teng bo'lganligi uchun atom elektroneytraldir". Mazkur kashfiyot qilingan paytda atomlardagi elektronlar soni va holati noma'lum edi.



2-rasm. Rezerford tajribasi sxemasi

1913 yili Rentgen nurlari xususiyati va spektrini anod moddasi tabiatiga bog'liqligini o'rgangan G.Mozle o'zining ishlariga asosan atomlardagi elektronlar soni to'g'risidagi savolga javob berib, quyidagi qonunni aniqladi: **Rentgen spektrlari tebranish chastotasi kvadrat ildizi**

qiymati davriy sistemadagi element tartib raqamining ch funksiyasidir.

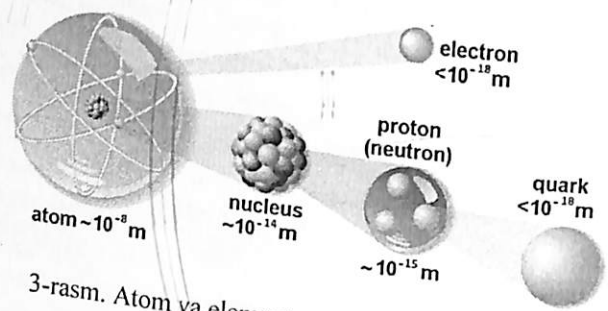
Ushbu qonuniyatni quyidagi matematik tenglama ko'rinis ifodalash mumkin:

$$v = a(z - b)^2 \text{ bundan } Z = \frac{\sqrt{v}}{\sqrt{a}} + b, \quad (1)$$

bunda v - tebranish chastotasi, Z - yadro zaryadi, a - Ridberg domning qiymati $a = 3,29 \cdot 10^{15} \text{s}^{-1}$ ga teng bo'lgan kattalik, b - ekranlanish konstantasi.

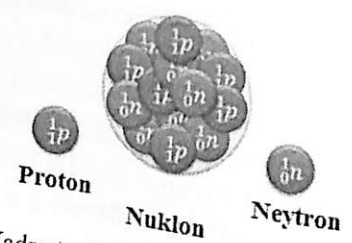
Mozle qonunining mukammal ma'nosini davriy sistema izohlaydi, ya'ni elementning tartib raqami nafaqat uning davriy sistemadagi o'rni, balki atom zaryadi qiymatini ham ifodalaydi.

Atom massasining asosiy ulushi yadroda joylashgan bo'lib, yadroning o'lchami 10^{-15}m ga, atom o'lchami esa 10^{-13}m ga to'g'ri keladi (3-rasm).



3-rasm. Atom va elementar zarrachalar o'lchamlari

Yadro murakkab tuzilishga ega. Yadroning asosiy zarrachalari nuklonlar bo'lib, ular protonlar ($\frac{1}{1}p$) va neytronlar ($\frac{1}{0}n$) dan iborat (4-rasm).



4-rasm. Yadro tuzilishining proton-neytronli modeli

Protonning zaryadi musbat bo'lib, uning zaryadi birga teng; neytron elektroneytral bo'lib, uning zaryadi nolga teng.

Yadro tarkibiga kiruvchi, lekin massa qiymati nuklonlar va elektronlar oralig'ida bo'lgan zarrachalarga mezonlar, bazonlar, umumiy da esa kvarklar deb aytiladi.

1.2. Atom tuzilishining kvant mexanik modeli

Kvant mexanikasi va kimyosining rivojlanishi bilan bir qatorda atomni tuzilishini izohlash bo'yicha izlanishlar ham bajarildi.

Mikrodunyoda sodir bo'ladigan jarayonlarni kvant mexanikasi tushirib berish uchun kvant mexanikasining postulatlarini yigirmanchi asrning o'rtalarida M.Plankning ilmiy ishlarida asoslangan. 1900 yil M.Plank energiyaning yutilishi yoki nurlanishi qat'iy diskret, ya'ni kvantlangan holatda sodir bo'lishini izohlaydi. Ushbu energiyaning qiymati (E) nurlanish chastotasi (ν) to'g'ri proporsional, ya'ni:

$$E = h\nu, \quad (2)$$

bu formuladagi h - Plank doimiysi uchun esa quyidagi ko'rinishda yoziladi:

$$E = nh\nu, \quad (n=1,2,3,4,\dots) \quad (3)$$

bu formuladagi n - proporsionallik koeffitsiyenti yoki Plank doimiysi deb ataladi. Uning qiymati $h = 6,6256 \cdot 10^{-34} \text{ j} \cdot \text{s}$ ga teng.

Plank doimiysining qiymati har bir kvantga mos keladigan energiyani ifodalaydi. Shuning uchun ham energiyaning katta qiymatlarida uning diskretligi namoyon bo'lmaydi, chunki kvant sonlarining o'zgarishi juda kichik qiymatda bo'ladi.

M.Plank g'oyasi kvantlarning eksperimental tasdig'i bo'lmaganligi sababli vaqtinchalik unutildi. Oradan besh yil o'tib, A.Eynshteyn eksperimentda kuzatilgan "fotoelektrik effekt" hodisasini tushuntirish uchun Plank gipotezasidan foydalandi. A.Eynshteynga ko'ra "har qanday nurlanish, shu jumladan, yorug'lik nuri ham diskret zarrachalar - kvant nurlanish, ya'ni fotonlardan iborat" degan postulatni ilgari surdi. Fotonning tinch holatdagi massasi nolga teng bo'lib, harakat tezligi esa yorug'likning vakuumdagi tezligiga teng.

Eynshteyn mazkur yondashuv asosida metallar yuzasi muayyan sharoitlarda yorug'lik oqimi bilan nurlantirilganda elektronlar ajralib chiqadi (fotoeffekt) tushuntirdi.

N.Bor Rezorfordning atom modelini izohlashda kvant mexanika nazariyasini qo'lladi. Bunda elektronlar yadro atrofida aylanganda klassik mexanika qonuniyatlariga bo'ysinmaydi deb hisoblaydi. Shuning uchun ham elektronning yadro atrofidagi harakatini ifodalashda N.Bor o'z postulatlarini taklif etdi.

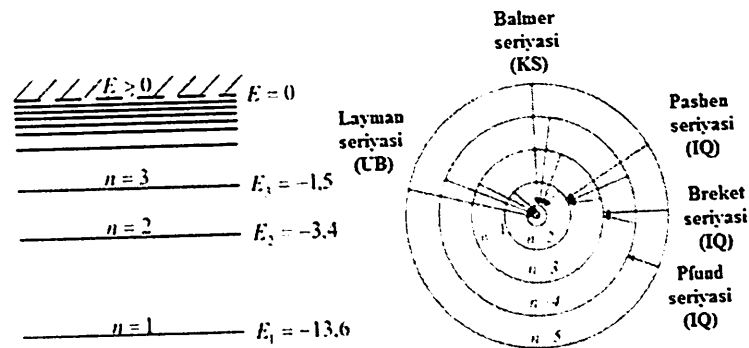
N.Bor postulatlarini:

- elektron yadro atrofida har qanday orbita bo'ylab harakat qiladi balki minimal energiyali, ya'ni ruxsat berilgan orbita bo'ylab harakat qiladi. Bu orbitada elektron o'z energiyasini yo'qotmaydi (yutmaydi yoki chiqarmaydi);
- har qanday elektron atomda bir holatdan boshqa holatga o'tishi mumkin. Bunda muayyan miqdorda energiya yutiladi yoki chiqariladi.

Bor nazariyasining eksperimental asosi bo'lib atomlarning spektrini hosil qilishi bo'ldi. Har bir spektr nurning muayyan diapazonini, ya'ni to'liq uzunligini (yoki chastotasini) ifodalaydi. Elementlarning atomlari aniq to'liq uzunlikdagi nurlarni yutadi yoki nurlantiradi. Bu esa N.Bor nazariyasining yutug'idir. Bor atom spektrlari chiziqlari bilan elektronlarning atomdagi energiyasi o'rtasidagi o'zaro bog'liqlik aniqladi.

Bor atomdagi elektron har qanday qiymatli energiyani emas, balki muayyan qiymatli energiyani qabul qilishini taklif etdi. Energiyaning qiymatini Bor diskret yoki kvant qiymat deb nomladi. Energiyaning muayyan qiymatini xarakterlovchi kattaliklar kvant sonlar deb nomlandi. Elektron bir energetik sathdan boshqasiga sakrab o'tishi jarayonida ma'lum kvant energiyasini yutishi yoki nurlantirishi mumkin. Elektronning eng quyi energetik holati "asosiy" yoki "turg'un holat", eng yuqori energetik holat esa "qo'zg'algan" ("hayajonlangan") holat deyiladi. Elektronning yuqori energetik holatga o'tishi atomning qo'zg'algan holatga o'tishi deb ifodalanadi. N.Bor vodorod atomi elektronini uchun elektron energiyasi va elektronning yadrogacha

fasini, ya'ni vodorod atomi radiusini hisoblashga muvaffaq bo'ldi. Elektronlar vodorod atomi spektrlari ko'rsatkichlariga mos keldi (5-rasm).



5-rasm. Vodorod atomining spektral seriyalari

Bor o'z modelini takomillashtirib, elektronlarning atomda energetik qobiq (qavatlar) bo'ylab taqsimlanishi va ularning sonlarini hisoblash taklifini ham kiritdi. Unga ko'ra:

$$N = 2n^2, \quad (4)$$

bu yerda n -elektron qobiq raqami.

Keyinchalik Arnold Zammerfeld elektronning yadro atrofida aylana bo'ylab emas, balki elliptik trayektoriyada harakatlanishi to'g'risidagi modelini taklif etdi.

Bor modeli birinchidan vodoroddan og'ir elementlar atomlari spektrlarining ayrim xususiyatlarini izohlab bera olmadi (Bor modeli faqat vodorod atomi spektrini tushuntirib bera oldi), ikkinchidan esa elektronlarning yadro atrofida muayyan burchak ostida aylana bo'ylab harakatlanishi o'zining tajribaviy tasdig'ini topmadi. Elektronning yadro atrofidagi harakatini klassik mexanika apparati yordamida izohlashda to'liq natijalarga erishilmadi. Shuning uchun ham elektronning yadro atrofidagi harakatini izohlashga yangi yondashuv talab etildi.

1925-1926 yillar subatomlar bilan boradigan jarayonlar tabiatini tushunish uchun yangicha yondashuv vujudga keldi. Unga ko'ra elektron orbitasi degan klassik tasavvurlardan voz kechildi. Yangi davr, ya'ni atom

tuzilishi to'g'risidagi kvant mexanikasining asosi bo'lgan kvant mexanikasi davri boshlandi.

To'liq mexanikasini shakllanishida muhim qadam 1925 yilda de Broyl tomonidan yaratilgan zarrachalarning dualistik tabiatini to'g'risidagi ta'limot bo'ldi.

M.Plank (1900). Nur energiyasi uzluksiz emas, balki ma'lum ulushlar bilan diskret yutiladi va nurlanadi, degan g'oyani ilgari shakllantiradi. Bundan yorug'lik nuri (foton) uchun:

$$E = h \cdot \nu, \quad (5)$$

bunda h – Plank doimiysi, uning qiymati $h = 4 \cdot 10^{-15} \text{ eV} \cdot \text{s} = 6,62 \cdot 10^{-34} \text{ Dj} \cdot \text{s}$; ν – yorug'lik nurining chastotasi.

Energiyaning umumiy miqdori:

$$E = n \cdot h \cdot \nu, \quad (6)$$

bunda $n = 1, 2, 3 \dots$ sonlarni qabul qiladi.

Kvant nazariyasi nurning yutilish va nurlanishi bilan bog'liq bo'lgan jarayonlarni izohlab berdi, lekin nurning tarqalishida sodir bo'ladigan jarayonlarni, ya'ni difraksiya, interferensiya, refraksiya (qutblanish) hodisalarini tushuntirib bera olmadi. Bu hodisalar nurning to'liq tabiatini bilan bog'liq.

Kvant mexanikasi nazariyasiga ko'ra, nur dualistik (qo'sh), ya'ni zarracha va to'liq tabiatiga ega.

Ma'lumki, energiya to'liq chastotasi va zarracha massasi orqali ifodalanadi, ya'ni:

$$E = h \cdot \nu \quad (7)$$

$$E = mc^2 \quad (8)$$

Tenglamalar chap tomonlari bir-biriga tengligini hisobga olsak, u holda:

$$h \cdot \nu = m \cdot c^2$$

tenglamaning har ikkala tomoni s ga bo'linsa, u holda:

$$\frac{h \cdot \nu}{c} = \frac{m \cdot c^2}{c}$$

yoki

$$\frac{h \cdot \nu}{c} = m \cdot c.$$

$$\frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda} \quad (9)$$

ni inobatga olinsa

$$\frac{h}{\lambda} = m \cdot c$$

$$\lambda = \frac{h}{mc}, \quad (10)$$

$$\lambda = \frac{h}{mv}, \quad (11)$$

shu zarrachalar uchun

bu formulada ν – zarracha tezligi.

Shunday qilib, Lui de-Broyl kvant mexanikasining asosiy nazariyasini yaratdi. Keyinchalik Geyzenberg, Shredinger, Dirak bu nazariyani mukammallashtirdi.

1.3. Geyzenbergning noaniqlik tamoyili

Bu prinsipga muvofiq, bir vaqtning o'zida zarraning aniq joylashuv holatini (koordinatasini) va impulsini aniqlash mumkin emas. Koordinata qancha aniq bo'lsa impuls shuncha noaniq va aksincha, impuls qancha aniq bo'lsa, koordinata shuncha noaniq bo'ladi.

Noaniqlik prinsipining ifodasi:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar, \quad (12)$$

yoki

$$\Delta x \cdot \Delta \vartheta_x \geq \frac{\hbar}{m}; \quad (13)$$

chunki $P = m \cdot \vartheta$.

Δx – ko'rilayotgan vaqtda zarracha holatidagi noaniqlik; Δp_x – vaqtning o'zida zarraning impulsining noaniqlik qiymatlaridagi x koordinatasini bo'ylab noaniqlik. Noaniqlik prinsipi elektronning atomdagi harakatini to'g'ri izohlashga yordam beradi.

1.4. To'liqin funksiyasi. Shredinger tenglamasi

Oldin qayd etilganidek, atom hodisalarini izohlash uchun mexanikasini yaratishda 1925-1926 yillarda E. Shredinger, V. Geyzenberg, M. Born va boshqalar tomonidan rivojlantirilgan umiy kvant mexanikasi deb aytilgan yondoshuv keng qo'llanishga ega bo'ldi. Mikroobyektlarni kvant-mexanik ifodalash uchun $U(r, t)$ funksiyasining ko'rinishi yoziladi va (17) tenglama Ψ ga bir nechta variatlari mavjud, lekin ular ichida Shredinger to'liqin funksiyasini Ψ topish uchun berilgan aniq masala oddiyligi va ko'rgazmaliligi bilan boshqa kvant-mexanik yondoshuvlardan farq qiladi.

1. Kvant mexanikasida berilgan zarrachaning holati to'liqin funksiyasi deb ataladigan funksiya bilan beriladi. Bu funksiya haqiqatan ham kompleks bo'lishi mumkin, u o'zining nisbatan oddiyligi va ko'rinib qolmaydiganligi undan kelib chiqadigan xulosalarning tajribada olingan jihatlardan kvant mexanikasining boshqa ko'rinishlariga qaraganda ajratilgan. M. Bornga ko'ra to'liqin funksiyasi modulining kvadrati zarrachaning hajm chegarasida dV aniqlanishidan topiladi, ya'ni:

$$dW = |\Psi|^2 dV, \quad (14)$$

yoki, boshqacha aytganda, $|\Psi|^2$ zarrachaning fazoning berilgan joydagi zichligini (hajm birligiga taalluqli ehtimoliyat) ifodalay beradi, ya'ni:

$$|\Psi|^2 = \frac{dW}{dV}.$$

(14) ifodadan barcha fazo bo'yicha olingan integral birga teng bo'lishi kerak:

$$\int_{\infty} dW = \int |\Psi|^2 dV = 1. \quad (15)$$

Haqiqatda mazkur integral cheksiz fazoning biror nuqtasidagi zarrachaning bo'lish ehtimolini aniqlaydi, ya'ni ishonchli voqeani ehtimoli birga teng (15) shartga *normallashtirish sharti* deyiladi.

2. To'liqin funksiyaning $\Psi(r, t)$ ko'rinishi Shredinger tenglamasida olinadi va quyidagi ko'rinishga ega bo'ladi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad (16)$$

bu m -zarracha massasi, \hbar - Plank doimiysi, $U = U(r, t)$ - zarrachaning potensial energiyasi, ∇^2 - Laplas operatori:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2}. \quad (17)$$

Zarracha to'liqin funksiyasini Ψ topish uchun berilgan aniq masala $U(r, t)$ funksiyasining ko'rinishi yoziladi va (17) tenglama Ψ ga to'liqin yechiladi. Boshqacha aytganda Ψ - funksiyaning ko'rinishi U bilan bog'liq bo'ladi.

Shredinger tenglamasi xuddi Nyutonning ikkinchi qonuni klassik mexanikaning asosiy tenglamasi kabi kvant mexanikaning asosiy tenglamasidir. Shredinger tenglamasi boshqa nisbatlardan keltirib chiqarilmaydi va uni asosiy dastlabki holat deb qarash kerak, uning qo'llanilishi undan kelib chiqadigan xulosalarning tajribada olingan natijalar bilan mos kelishi orqali isbotlanadi. M. Bornning so'zlariga ko'ra "...Shredinger tenglamasini qat'iy mantiqan chiqarish mumkin emas; unga olib boruvchi formal qadamlar mohiyati jihatidan shunchaki qat'iy topishmoqdir".

3. Agar zarracha harakatlanadigan kuch maydoni statsionar bo'lsa, ya'ni agar zarrachaning potensial energiya U , unga mos ravishda to'liq energiyasi E vaqtga bog'liq bo'lmasa, faqat koordinatalar funksiyasi bo'lsa: $U = U(x, y, z) \neq f(t)$, $E = \text{const}$, u holda Shredinger tenglamasining (17) yechimini Ψ ikki ko'paytuvchi sifatida ifodalash mumkin. Ulardan biri faqat koordinatalarga, boshqasi esa faqat vaqtga bog'liq bo'ladi:

$$\Psi(x, y, z, t) = \psi(x, y, z) \cdot e^{-\frac{i}{\hbar} Et}, \quad (18)$$

bunda E - zarrachaning to'liq energiyasi.

Haqiqatda (18) ni (17) ga qo'yib, quyidagi ifoda olinadi:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi e^{-\frac{i}{\hbar} Et} + U\psi e^{-\frac{i}{\hbar} Et} = i\hbar \left(-\frac{i}{\hbar} E\right) \psi e^{-\frac{i}{\hbar} Et}. \quad (19)$$

Umumiy ko'paytuvchiga $e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$, qisqartirib, $\psi(x, y, z)$ funksiyani aniqlovchi differensial tenglamaga kelimiz:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + U\psi = E\psi. \quad (20)$$

(20) tenglamaga stasionar holat uchun Shredinger tenglamasi deyiladi.

4. Ta'kidlash kerakki, har qanday stasionar masala uchun $U \neq U_0$ Shredinger vaqtli tenglamasining (17) ham yozish va yechish muvaffaqiyatli. Ushbu holatda (18) ga (17) dagi o'zgaruvchilarni ajratishni o'z ichiga olgan qo'yish va (19) tenglamani yechish yordamida to'liq funksiyasi $\Psi(x, y, z)$ ni faqatgina $\psi(x, y, z)$ ni faqatgina $\exp(-\frac{iEt}{\hbar})$ ko'paytirish orqali topiladi.

Boshqacha aytganda, koordinataga bog'liq bo'lgan $\psi(x, y, z)$ stasionar holat masalasi uchun tenglamani faqat vaqtinchalik ko'paytuvchiga ko'paytirish kerak; ko'paytirish natijasi $\Psi(x, y, z, t)$ masalaning yechimi bo'ladi.

5. To'liq funksiyasi bir tomondan ehtimoliy ma'noga ega bo'lganligi, boshqa tomondan esa Shredinger tenglamasining yechimi ya'ni 2-tartibli differensial tenglama bo'lganligi uchun unga standart sharoit deb ataladigan aniqlik beriladi:

- to'liq funksiyasi Ψ chegarali, uzluksiz, bir ma'noli bo'lishi kerak;
- hosila $\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \frac{\partial \Psi}{\partial z}$ uzluksiz bo'lishi kerak;
- to'liq funksiya kvadrat integrallanadigan, ya'ni integral $\int |\Psi|^2 dV$ chegarali bo'lishi kerak.

6. Ko'pgina holatlarda Shredingerning stasionar tenglamasi (20) bilan ishlashga to'g'ri keladi. Ushbu tenglamaning tuzilishi shundaki, bitta (ya'ni zarrachalar energiyasi) istalgan qiymatlarida emas, balki bitta tanlangan qiymatlarida stasionar sharoitni qanoatlantiruvchi yechim mavjud ega. Ushbu qiymatlarning har qaysisi bitta (ifodalash bo'lmagan) yoki bir nechta miqdor k to'liq funksiyalarga (k - "ifodali" marta) mos keladi.

1.5. Shredinger tenglamasini vodorod (vodorodga o'xshash atomlar) uchun yechish

Vodorod atomi uchun Shredinger tenglamasi. Vodorod atomi va bitta elektronidan iborat vodorodga o'xshash atomlar uchun Shredinger tenglamasining barcha hadlari eslatib o'tildi. Kulon energiya operatori quyidagiga teng:

$$\hat{V}(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (21)$$

Ushbu holatda gamiltonian quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}, \quad (22)$$

Shredingerning stasionar tenglamasi esa quyidagicha yoziladi:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\Psi(x, y, z) = E\Psi(x, y, z). \quad (23)$$

O'zgaruvchilarni ajratish. Shredinger tenglamasini yechishning qulay usuli dekart koordinat sistemasidan qutbliqa o'tkazishdir: x, y, z o'zgaruvchilarga masofa r va ikki burchak θ va φ kiritiladi.

Sferik va dekart koordinatalari o'rtasidagi bog'liqlik rasmda ko'rsatilgan, bir koordinat sistemasidan boshqasiga o'tish formulalari quyidagi ko'rinishga ega:

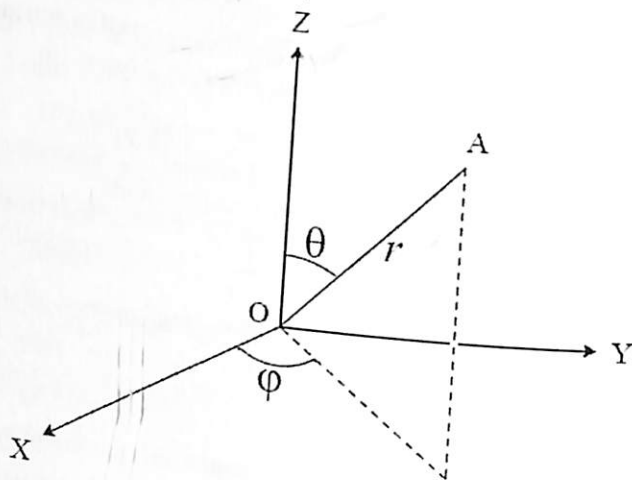
$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\varphi; 0 \leq r < \infty; r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}; \\ y &= r \sin\theta \sin\varphi; 0 \leq \varphi \leq \pi; \theta = \arccos(z/r); \\ z &= r \cos\theta; 0 \leq \theta \leq 2\pi; \varphi = \arctg(y/x); \\ dv &= dx \cdot dy \cdot dz = r^2 \sin\theta \cdot dr \cdot d\theta \cdot d\varphi. \end{aligned}$$

Sferik koordinatalarida Laplas operatori quyidagi ko'rinishga ega bo'ladi:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (24)$$

U holda Shredinger tenglamasi quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) \Psi = 0.$$



6-rasm. Dekart va sferik koordinat sistemalari o'rtasidagi bog'liqlik

O'zgaruvchilarni ajratish uchun to'liq funksiyasini radial burchak tashkil etuvchilarining ko'paytmasi ko'rinishida ifodalaymiz

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r) \cdot \Theta(\theta) \cdot \Phi(\varphi), \quad (26)$$

$$\frac{\Theta \Phi}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{R \Phi}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{R \Theta}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} + \frac{2m_e}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) R \Theta \Phi = 0. \quad (27)$$

Ushbu tenglama $r^2/R\Theta\Phi$ ga ko'paytirilib quyidagi olinadi:

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) = \frac{1}{\Theta \cdot \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) - \frac{1}{\Phi \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \quad (28)$$

Tenglamaning chap tomoni faqat r o'zgaruvchiga, o'ng tomoni esa θ va φ burchak o'zgaruvchilarga bog'lik. O'z-o'zidan tenglamaning

o'ng qismi doimiy C kattalikka teng. Bu esa Shredinger tenglamasining o'ng qismini ajratish imkonini beradi:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left(E + \frac{Ze^2}{r} \right) R - CR = 0. \quad (29)$$

θ va φ o'zgaruvchilar tenglamaning o'ng tomonini $\sin^2 \theta$ ga baytirish orqali ajratiladi:

$$\frac{1}{\Theta \cdot \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{F \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2} = -C, \quad (30)$$

$$\frac{\sin \theta}{\Theta \cdot \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + C \sin^2 \theta = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}.$$

Shunga o'xshash tenglamaning bir-biriga bog'liq bo'lmagan chap o'ng qismlari o'zgarmas songa teng, uni m^2 bilan belgilaymiz. Bunda na ikkita tenglama olinadi, ular qulay holda quyidagicha yoziladi:

$$\frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + m^2 = 0, \quad (31)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{d\Theta}{d\theta} \right) + \left(C - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \Theta = 0. \quad (32)$$

Φ – tenglamaning yechimi. Φ – funksiyaning yechimi quyidagi funksiya ekanligini o'rniga quyish bilan oson tekshirish mumkin:

$$\Phi = A \cdot \exp(\pm im\varphi). \quad (33)$$

Chunki φ burchakning (0 va 2π) teng qiymatlarida funksiya bir xil qiymatga ega bo'lishi kerak. u holda

$$A \cdot \exp(\pm im0) = A \cdot \exp(\pm im2\pi) \text{ va } \exp(\pm im2\pi) = 1. \quad (34)$$

Kompleks sonlar uchun Eyler formulasidan foydalanib:

$$\cos(2\pi m) \pm i \cdot \sin(2\pi m) = 1, \quad (35)$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2$, olinadi.

Shunday qilib, m faqat butun sonlarni qabul qilinadi. A konstantasi Φ funksiyani normirlash sharoitidan topiladi:

$$\int_0^{2\pi} \Phi^* \Phi d\varphi = A^2 \int_0^{2\pi} e^{im\varphi} e^{-im\varphi} d\varphi = A^2 2\pi = 1. \quad (36)$$

Va nihoyat quyidagiga ega bo'lamiz:

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\pm im\varphi). \quad (37)$$

Θ-tenglamaning yechimi. Lejandr polinomialari. Θ-tenglamaning differensial tenglamalar nazariyasida yaxshi tanish. U faqat quyidagilarga bajarilsa yakuniy yechimga ega:

$$C = l(l+1), l = 0, 1, 2, \dots, \dots, \quad (38)$$

$$-l \leq m \leq l,$$

bunda Lejandr funksiyalari yoki polinomialari yechim.

Normirlangan Θ-funksiyasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$\Theta_{lm}(\theta) = \left[\frac{2l+1(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos\theta). \quad (39)$$

$P_l^{|m|}(\cos\theta)$ funksiyaga Lejandrning birlashtirilgan polinomiali deyiladi va quyidagicha aniqlanadi:

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{1}{2^l \cdot l!} [1 - (\cos\theta)^2]^{|m|/2} \frac{d^{l+|m|}}{(d\cos\theta)^{l+|m|}} [(\cos\theta)^2 - 1]^l.$$

Masalan, $l = 2, m = \pm 1$ da

$$\Theta_{2,\pm 1}(\theta) = \left[\frac{5 \cdot 1}{2 \cdot 3!} \right]^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2^2 \cdot 2} \sin\theta \frac{d^3}{(d\cos\theta)^3} [(\cos\theta)^2 - 1]^2 =$$

$$\frac{1}{16} \sqrt{\frac{5}{3}} \sin\theta \frac{d^2}{(d\cos\theta)^2} \{4[(\cos\theta)^2 - 1]\cos\theta\} =$$

$$\frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{3}} \sin\theta \frac{d}{(d\cos\theta)} [3(\cos\theta)^2 - 1] = \frac{1}{2} \sqrt{15} \sin\theta \cdot \cos\theta. \quad (41)$$

$\Theta(\theta)$ va $\Phi(\varphi)$ funksiyalarning ko'paytmasi to'liq funksiyani burchak qismini tashkil etadi, ya'ni:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_{lm}(\varphi). \quad (42)$$

Y_{lm} funksiyaga shar funksiyasi yoki sferik garmonika deyiladi.

$\Theta(\theta)$ va $\Phi(\varphi)$ uchun ifodalarni birlashtirib, funksiyaning burchak qismini umumiy holda quyidagicha yozish mumkin:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \left[\frac{1}{2\pi} \frac{2l+1(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos\theta) \cdot \exp(im\varphi). \quad (43)$$

R-tenglamaning yechimi. Lyagerr polinomialari.

Bor radiusi

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$$

Aligini kiritib, C doimiy o'rniga $l(l+1)$ ni qo'yib, R-tenglamaning yozamiz:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \left[\frac{2E}{a_0 e^2} + \frac{2Z}{a_0 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0. \quad (44)$$

Ushbu tenglama ham differensial tenglamalar nazariyasi va matematik fizikada yaxshi tekshirilgan. Tenglamani yechimini topish uchun sonlarni qabul qiluvchi yana bir parametрни (n) qo'shishni talab qiladi, ya'ni:

$$n = 1, 2, 3, \dots; n \geq l + 1,$$

unda $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.

R-tenglamaning to'liq funksiyaning radial qismi deb ataladigan normirlashni hisobga olingan yechimi quyidagicha yoziladi:

$$R_{nl}(r) = - \left[\frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z}{na_0} \right)^{l+\frac{3}{2}} r^l \exp\left(-\frac{Zr}{na_0}\right) L_{n+l}^{2l+1}(q), \quad (45)$$

unda

$$q = \frac{Zr}{na_0}.$$

$L_{n+l}^{2l+1}(q)$ funksiya Lyagerrning qo'shilgan polinomi deb aytiladi va u Lyagerr polinomi $L_{n+l}(q)$ bilan Rodriganing differensial nisbati bilan bog'langan:

$$L_t''(q) = \frac{d''}{dq''} L_t(q), \quad (46)$$

bunda

$$L_t(q) = \exp(q) \frac{d^t}{dq^t} [q^t \exp(-q)]. \quad (47)$$

Lyagerrning birlashtirilgan polinomialari uchun ba'zi oddiy nisbatlarni keltiramiz:

$$L_t^0(q) = L_t(q); L_t^{t-1}(q) = [(-1)^t q - t] \cdot t!; L_t^t = (-1)^t \cdot t!, \quad (48)$$

ya'ni oxirgi polinom son (q ga bog'liq emas). Turli n va l li Lyagerr

polinomlari o'zaro ortogonal, bu radial funksiyalarning ortogonal bo'lganligini aniqlaydi.

Misol tariqasida $n = 3, l = 2$ holat uchun radial qismni aniqlash uchun ifoda quyidagi ko'rinishni oladi:

$$R_{3,2}(r) = - \left[\frac{(3-2-1)!}{6[(5)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z}{3a_0} \right)^{\frac{7}{2}} \cdot r^2 \cdot \exp\left(-\frac{2Z}{3a_0}\right) \cdot L_5^5(q) - \frac{1}{30} \frac{1}{81} \frac{1}{\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{7}{2}} \cdot r^2 \cdot \exp\left(-\frac{2Z}{3a_0}\right) \cdot L_5^5(q). \quad (49)$$

Birlashgan Lyagerr polinomi:

$$L_5^5 = (-1)^5 \cdot 5! = -120.$$

Bundan yakuniy tenglamaga ega bo'lamiz:

$$R_{3,2}(r) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{7}{2}} \cdot r^2 \cdot \exp\left(-\frac{2Z}{3a_0}\right). \quad (50)$$

Shunday qilib, Shredinger tenglamasi vodorod ($Z = 2, 3$ va boshqalar) uchun yechildi. To'liq funksiyani radial qismlarini yoyib, quyidagi ifodani olamiz:

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\theta) \Phi_m(\varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (51)$$

Masalan, yuqorida qaralgan $n = 3, l = 2, m = \pm 1$ holat uchun:

$$\Psi_{3,2,\pm 1}(r, \theta, \varphi) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{2Z}{3a_0}\right) \frac{1}{2} \sqrt{15} \cdot \sin(\theta) \cos\theta \cdot e^{\pm i\varphi} \cdot \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(\pm i\varphi) = \frac{4}{81\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{7/2} r^2 \exp\left(-\frac{2Z}{3a_0}\right) \frac{1}{2} \sqrt{15} \cdot \sin(\theta) \cos\theta \cdot e^{\pm i\varphi}.$$

$R_{nl}(r)$ funksiya elektrondan yadrogacha bo'lgan masofaga bog'liq bo'ladi va u quyidagi qator xossalarga ega. Jumladan:

1. Lyagerr polinomlari xossalardan kelib chiqqan holda vodorod atomining radial funksiyasi turli n va l larda ortogonal.

2. Fazoda sirtlar borki, ularda $R_{nl}(r)$ funksiya nolga aylangan holda tugunlar deyiladi. Yuqorida qayd etilganidagi elektronning topilishi ehtimoli nolga teng. ($n = 1, l = 0$), ($n = 2, l = 1$), ($n = 3, l = 2$), va h.z. li radial funksiyalar tugunli nuqtalarga ega emas; ($n = 2, l = 0$), ($n = 3, l = 1$), va h.z. li funksiyalar bitta tugun nuqtaga ega; ($n = 3, l = 0$) li funksiya - ikkita tugun nuqtaga ega.

Radial funksiyalarining tugunli sirtlari sferalarni beradi; radial funksiyalarning tugunlari $n - l - 1$ ga tengligiga ishonch hosil qilish mumkin emas (asimptotik nolga erishadigan $r = 0$ va $r = \infty$ nuqtalar bo'lmaganda).

Qayd etish kerakki, vodorod atomi radial funksiyasining tugunlari qanday bo'lgan masofa ortib borishi bilan ma'lum tartibda bo'ladi. Radial tugunlar 0 dan boshlanib, $n - l - 1$ tugasa, ushbu tartibdagi bo'ladi:

$$R_{n,l}(0) < R_{n-1,l}(0) < R_{n,l}(1) < R_{n-1,l}(1) < \dots < R_{n-1,l}(n-l-2) < R_{n,l}(n-l-1).$$

Sferik simmetrik holatda tugunli sirtlarni qaramasa ham bo'ladi. Radial funksiyalarning r o'qi bilan kesishgan nuqtalar bilan chegaralansa bo'ladi.

1. r va $r + dr$ qiymatlar oralig'idagi fazoviy qavatda elektronning bo'lish ehtimoliyati:

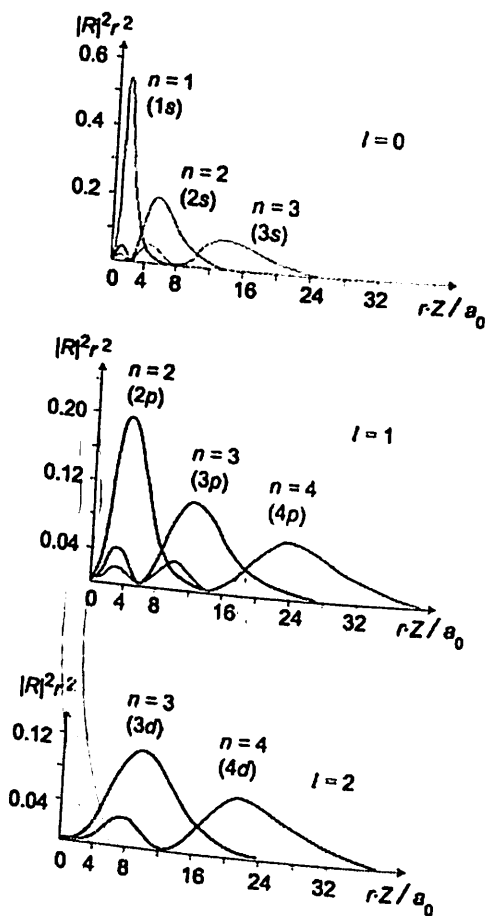
$$P_{n,l}(r) dr = |R_{n,l}(r)|^2 r^2 dr. \quad (52)$$

$P_{n,l}(r)$ funksiya yadrodan r masofadagi dr shar qavatida elektronning bo'lish ehtimoliyati zichligini aniqlaydi va taqsimlanishning radial funksiyasi deyiladi. Vodorod atomi uchun ushbu funksiyalar 7-rasmida ko'rsatilgan.

To'liq funksiyasining radial qismi $R_{nl}(r)$ ni grafik holda ifodalash uchun zichlik ehtimolining radial bog'liqligi holda berilgan (7-rasm). Ushbu funksiyalar maksimumlari yadrogacha nisbatan harakatlanadigan elektronning eng ehtimoliy joylashuviga javob beradi. Shuning uchun ham $P_{n,l}(r)$ ni r bo'yicha hosilasini nolga tenglashtirib, n va l kvant sonlari bilan ifodalanadigan energetik holatda elektronning eng ehtimoliy holatini topish mumkin. Vodorod atomining asosiy holati uchun bu masofa Bor radiusiga (a_0) teng.

Elektronning to'liq zichligi $|\Psi(r, \theta, \varphi)|^2$ bilan radial zichlikning ehtimoliyatini $P_{n,l}(r)$ almashtirib yubormaslik kerak. $|\Psi(r, \theta, \varphi)|^2$ fazodagi berilgan nuqta atrofida elektronning bo'lish ehtimoliyati zichligini, $P_{n,l}(r)$ esa θ va φ burchaklarga bog'liq bo'lmagan holda

yadrodan berilgan r masofadagi dr qalinlikdagi sharq elektronning bo'lish ehtimoliyati zichligini karakterlaydi.



7-rasm. Zichlik ehtimolining radial bog'liqligi

2. Yadro yaqinida elektron-yadro potentsiali maxraj nolga intilgan uchun noaniq bo'lib qoladi. Yadroda to'liq funktsiya chekli bo'lish uchun uning radial qismi asimptotik shartni bajarishi kerak (Kato sharti)

$$\left(\frac{\partial R_{nl}(r)}{\partial r}\right)_{r \rightarrow 0} = \left(\frac{Z}{a_0}\right) R_{nl}(r)|_{r \rightarrow 0}. \quad (53)$$

Ushbu tenglamaga to'liq funktsiyasining radial qismi uchun ifoda kilsa, u holda faqat vodorod atomining n s to'liq funktsiyasi yadroda simumga ega.

3. Bosh kvant soni n oshishi bilan radial funktsiyalar amplituda bo'yicha kamayish bilan yanada katta uzunlikka ega bo'ladi. Yadrodan katta masofalarda radial to'liq funktsiya masofaga quyidagicha bog'liq bo'ladi:

$$R_{nl}(r) \sim \exp[-(2I_1)^{1/2}r], \quad (54)$$





bu yerda I_1 – birinchi ionlanish potentsiali.

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$ kompleks karakterdagi funktsiyalar bo'lganligi uchun $\neq 0$ da ularni grafik holda ifodalash juda qiyin. Baxtga qarshi ushbu funktsiyalarning chiziqli kombinatsiyasiga o'tish mumkin, ularni u yoki holatda ifodalash mumkin (1-jadval, 8-rasm).

1-jadval

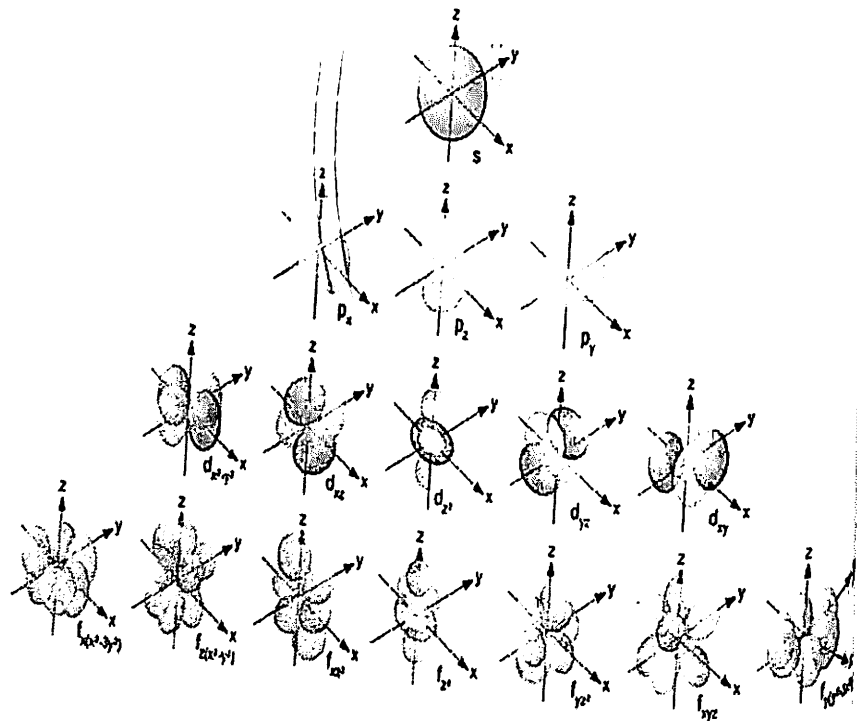
Markaziy maydon hosil qiladigan atom to'liq funktsiyasi haqiqiyning qismi

$\pm m$	$Y_{lm\pm}$	Chiziqli kombinatsiya	Belgilash	Fazodagi orientatsiyasi	
0	0	$\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$	-	s	
1	+1	$\frac{\sqrt{6}}{2\sqrt{2\pi}} \sin\theta \cos\varphi$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1})$	p_x	
1	-1	$\frac{\sqrt{6}}{2\sqrt{2\pi}} \sin\theta \sin\varphi$	$\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{11} - Y_{1-1})$	p_y	
1	0	$\frac{\sqrt{6}}{2\sqrt{2\pi}} \cos\theta$	-	p_z	
2	0	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} (3\cos^2\theta - 1)$	-	d_z^2	

2	+1	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}(\sin 2\theta \cos \varphi)$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1})$	d_{xz}	
2	-1	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}(\sin 2\theta \sin \varphi)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{21} - Y_{2-1})$	d_{yz}	
2	+2	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}(\sin^2 \theta \cos 2\varphi)$	$\frac{1}{\sqrt{2}}(Y_{22} + Y_{2-2})$	$d_{x^2-y^2}$	
2	-2	$\frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}}(\sin^2 \theta \sin 2\varphi)$	$-\frac{i}{\sqrt{2}}(Y_{22} - Y_{2-2})$	d_{xy}	

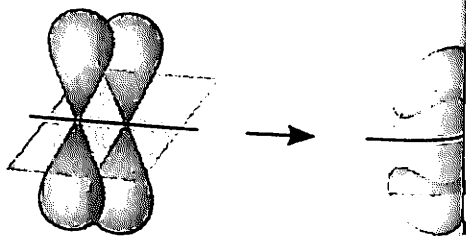
Nazorat savollari

1. Materiya va uning diskret tuzilishga ega ekanligi.
2. Materiyaning yashash shakllari: modda va maydon va ular o'rtasidagi o'zaro bog'lanish.
3. Energiya va massa tushunchalarining ta'rifi.
4. Energiyaga tegishli bo'lgan maydonlarning xillari.
5. Energiya va massa o'rtasidagi bog'lanish.
6. Nisbiylik nazariyasi va Eynshteyn formulasi.
7. Massaning zarrachalarning harakat tezligiga bog'liqligi.
8. Modda tuzilishini o'rganishda elektromagnit maydonning alohida roli.



8-rasm. Atom orbitallarining geometrik ifodasi

II. BOB KIMYOVIY BOG'LANISH



2.1. Kimyoviy bog'lanish

Elementlarning atomlari o'zaro ta'sir etish va birikishi natijasi yangi birikmalar hosil qilishadi. Kimyoviy birikmalar kimyoviy bog'lanishlar hosil bo'lishi natijasida paydo bo'ladi. Natijada yanamurakkab sistemalar, ya'ni ko'p atomli molekular hosil bo'ladi. Murakkab atomli sistemalarga murakkab molekularni, molekular ionlarini, radikalarni hamda turli kompleks birikmalarni misol sifatida keltirish mumkin.

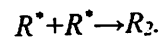
Murakkab, ko'p atomli molekula – elektroneytral sistema bo'lib, o'zaro ta'sir etuvchi yadrolar va elektronlardan iboratdir. Molekula barqaror bo'lib, ularni bo'lish uchun muayyan energiya talab etiladi. Murakkab molekularni oddiy molekularga ham bo'lish mumkin. Masalan, suv bug'larini yoki muzni oddiy molekularni ((H₂O)_n → nH₂O) bo'lish mumkin. Suv molekulari orasidagi bog'lanishni uzish uchun kerak bo'lgan energiya suv molekulasidagi bog'lanishni uzish uchun kerak bo'ladigin energiyadan bir necha barobar kam. Bunda vodorod bog'lanish orqali assotsiatsiyalangan molekulari oddiylariga ajratilishi uchun vodorod bog'i uzilishi kerak.

Molekula, ion, radikal. Elementlar atomlari kimyoviy jarayonlardagi tipdagi zarralarni hosil qilishi mumkin. Ular molekular, ionlar va radikalardir. Molekula - moddaning kimyoviy xossalarini o'zining mujassamlashtirgan, erkin holda mavjud bo'la oluvchi elektroneytral zarracha. Bir, ikki, uch va ko'p atomli molekular mavjud (inert gazlar bir atomli molekular). Yuqori molekulyar birikmalar bir necha molekular atomlardan tashkil topgan.

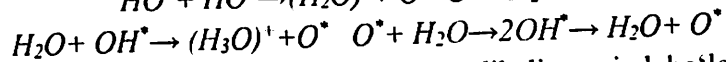
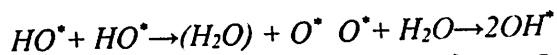
Ion – zaryadlangan zarracha bo'lib, bir yoki bir necha atomlardan elektronlardan iborat bo'lishi mumkin. Elektronlar ko'p bo'lsa anion, ko'p bo'lsa kation bo'ladi.

Erkin radikal deb, to'yinmagan valentlikka ega bo'lgan zarraga radikal deyiladi. Masalan, CH₃, NH₂ yoki R[•]. Radikallar qo'zg'algan holatdagi radikal kabi uzoq vaqt mavjud bo'la olmaydi.

Elementlar muayyan sondagi kimyoviy bog'lanishlar hosil qiladi. Elementga element atomining valentligi deyiladi. Agarda ko'p atomli molekula tarkibidagi biror atom o'zining valentligiga nisbatan kam sondagi kimyoviy bog'lanishlar hosil qilsa, u holda mazkur atom erkin valentlikka ega radikal hosil qiladi, ular o'z navbatida o'zaro yangi kimyoviy bog'lanish hosil qiladi, ya'ni:

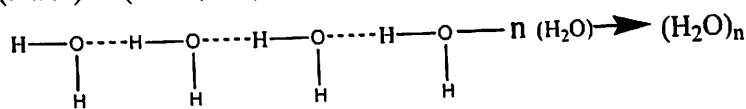
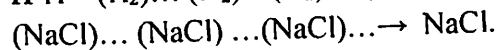
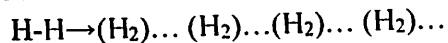


Masalan,



Shuning uchun erkin OH[•] (OH⁻) radikali mavjud bo'lgan holda (H₃O)[•] gidroksoniy ioni mavjud bo'la olmaydi.

Molekularda molekulararo va molekula tarkibidagi atomlararo ta'sir kuchlarni doimiy e'tiborga olish kerak. Bu ta'sir kuchlar nisbati molekula mavjudligini xarakterlaydi. Masalan, H₂, NaCl va H₂O molekulari:

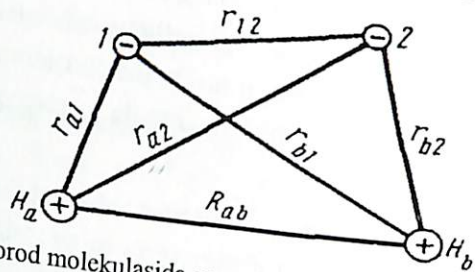


Bog'lanish energiyasi molekula umumiy energiyasining bir qismi bo'lib, molekulaning atomlardan hosil bo'lishini ta'minlaydi. Molekula energiyasining to'liq tenglamasini izohlash juda murakkab bo'lib, soddalashtirilgan 2 xil usuldan foydalaniladi (molekulada elektron buluti zichligining taqsimlanishini topish). Ularga valent bog'lanishlar usuli (Geytler, London tomonidan 1927 yilda yaratilgan, Sleyter va Poling

tomonidan rivojlantirilgan) va molekulyar orbitallar usuli (Malliken, Hund, Xyukkellar tomonidan yaratilgan) deyiladi.

2.2. Valent bog'lanish usuli

Kvant mexanikasi nuqtai nazaridan kimyoviy bog'lanish hosil bo'lish mexanizmini quyidagicha izohlash mumkin (1-rasm).



1-rasm. Vodород molekulasida zaryadlar orasidagi masofa

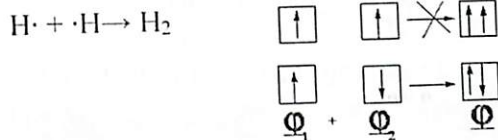
Ushbu sistemaning potensial energiyasi quyidagi formula ifodalanadi:

$$U = \frac{e^2}{R_{ab}} + \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} \quad (1)$$

Ikki atom birikkanda ularning to'liq funksiyalari bir-biriga qo'shiladi, ya'ni atomlar bulutlari fazosida elektron zichligining o'sishini kuzatiladi - ψ^2 ($\psi^1 \cdot \psi^2$) va kovalent bog'lanish sodir bo'ladi. Elektronlar ikki atom o'rtasida teng taqsimlanadi. Elektronlar atom yadrolariga tortilsa, elektronlararo itarish kuchlari ularning qo'shilishiga qo'ymaydi (itarish kuchlari), ya'ni elektronlar spin korrelyatsiyasi mavjud bo'ladi. Agarda elektronlar spinlari qarama-qarshi ($\uparrow\downarrow$) bo'lsa, kimyoviy bog'lanish hosil bo'ladi, agarda parallel bo'lsa, itarilish bo'ladi. Shuning uchun ham kimyoviy bog'lanish hosil bo'lmaydi. kimyoviy bog'lanish hosil bo'lmaydi. Shuning uchun ham kimyoviy bog'lanish hosil bo'lishida "yadro+elektron" o'rtasidagi elektrostatik tortilish kuchlaridan tashqari, elektron spinlarining korrelyatsiyasi ham e'tiborga olinishi kerak. Atomlar yaqinlashsa, to'liq funksiyalari qo'shiladi. Natijada atom orbitallaridan yangi orbital (to'liq funksiyasi) hosil bo'ladi.

O'z navbatida elektron buluti zichligi taqsimlanishini izohlash uchun faqat bir atom to'liq funksiyasi bilan chegaralanmay, qaysi funktsiyalarni e'tiborga olish masalasi paydo bo'ladi. Atomlar cheksiz bir-biriga yaqinlasha olmaydi, elektronlar o'rtasida itarilish kuchlari paydo bo'ladi, molekulada atomlar yadrolari o'rtasidagi masofa o'zining o'zgarishidan qiyamatiga erishsa, muvozanat holati sodir bo'ladi. Atomlar yaqinlashganda potensial energiya yo kamayadi, yoki ortadi. Agar potensial energiya kamaysa, atomlar bir-biriga tortiladi, oshsa itariladi. Muvozanat holatida molekulaning energiyasi (potensial) alohida olingan atomlar potensial energiyalarining yig'indisidan kam bo'ladi. Shunday qilib, kovalent bog'lanish energiyasi muhim ahamiyatga ega bo'lib qoladi.

Kovalent bog'lanish hosil bo'lishini valent bog'lanish usulida izohlashni vodород molekulasini (H_2) hosil bo'lishdan tanishaylik. Ushbu bog'lanishni quyidagicha ifodalash mumkin:



Birinchi atomdagi elektron ikkinchi atomning yadrosiga va aksincha ikkinchi atomdagi elektron birinchi atomning yadrosiga tortilishi, ya'ni "yadro-elektron" korrelyatsiyasi natijasida sistemaning potensial energiyasi kamayadi va barqaror molekula hosil bo'ladi. Shu bilan bir vaqtning o'zida atomlardagi elektronlarning bir-biriga yaqinlashishi natijasida "elektron-elektron" korrelyatsiyasi kuzatiladi. Bu holatda elektronlar elektrostatik qonunlarga asosan bir-biri bilan itarilishib, bog'lanish hosil bo'lishiga to'sqinlik qiladi.

Agar bog'lanish hosil qilishda qatnashadigan elektronlarning spinlari yo'nalishlari bo'yicha parallel kelsa, bog'lanish hosil bo'lmaydi, ya'ni sistemaning energiyasi oshadi. Va aksincha bog'lanish hosil qilishda qatnashadigan elektronlarning spinlari yo'nalishlari bo'yicha antiparallel kelsa, sistemaning umumiy energiyasi kamayadi - bog'lanish hosil bo'lishiga olib keladi, ya'ni:

$$(U_1)\psi_1 + \psi_2(U_2) > \psi^2(U_{min}) \quad (2)$$

Bu sistemaning potensial energiyasi yadro bilan elektron o'rtasidagi tortishish va itarish energiyalari yig'indisi farqidan kelib chiqadi. Bunday mexanikasi nazariyasiga muvofiq bir-biri bilan bog'lanmagan atomlarni yozish mumkin:

$$\psi_1 = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2); \quad \psi_2 = \psi_a(2) \cdot \psi_b(1). \quad (3)$$

Atomlar bir-biri bilan bog'lanish hosil qilishi darajasida yaqinlashsa, elektronlar boshqa atomlarga ham tortiladi va Ψ esa Ψ_2 qo'shilishi natijasida: C_1 va C_2 - o'zgarimas sonlar; H_2 molekulasida simmetrik bo'lgani uchun variatsiya usuli:

$$\psi_+ = \psi_1 + \psi_2 = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) + \psi_a(2) \cdot \psi_b(1),$$

bunda

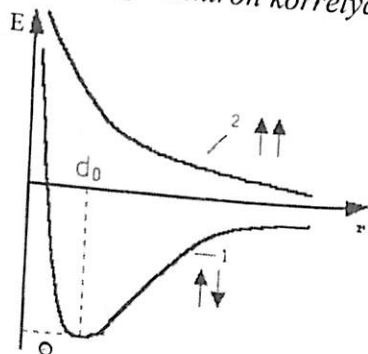
$\psi = \psi_1 \pm \psi_2$ $C_1^2 = C_2^2$; $C_1 = \pm C_2$ simmetrik yoki antisimmetrik funksiya kelib chiqadi, ya'ni:

$$\psi_- = \psi_1 - \psi_2 = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) - \psi_a(2) \cdot \psi_b(1). \quad (4)$$

$$\psi_+ = \psi_1 + \psi_2 = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) + \psi_a(2) \cdot \psi_b(1). \quad (5)$$

Molekula potensial energiyasining o'zgarishi H_2 molekulasida atom yadrolari o'rtasidagi masofa Ψ_+ qiymatida U_{min} qiymatga erishiladi, u $\uparrow\downarrow$ elektronlarga, Ψ_- funksiya esa $\uparrow\uparrow$ spinli elektronga ma'nosiz bo'ladi (2-rasm).

Bir xil spinli elektronlar bir-biridan itarishsa, antispinli elektronlar tortishadi. Bunga spinlar korrelyatsiyasi deyiladi (Pauli prinsipi). Bir xil zaryadli elektronlar bir-birini itaradi. Bunga zaryadlar korrelyatsiyasi deyiladi. Bu ikki korrelyatsiyaga *elektron korrelyatsiyasi* deyiladi.



2-rasm. Ikki atomdan tashkil topgan sistema potensial energiyasining o'zgarishi

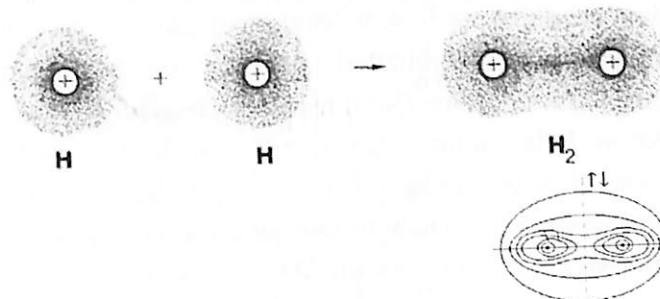
Ma'lumki, to'liq funksiyasi uning modelini kvadrati fizik ma'noga ega. Bundan simmetrik va antisimmetrik funksiyalar uchun quyidagi formulalarni yozish mumkin:

$$\psi = \psi_1 \pm \psi_2 \quad \psi^2 = C_1^2 \psi_1^2 \pm C_2^2 \psi_2^2 \quad (7)$$

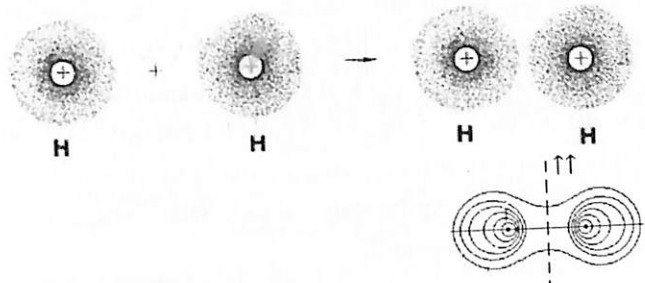
$$\psi_1 = \psi_a(1) \cdot \psi_b(2) \quad \psi_1^2 = \psi_a^2(1) \cdot \psi_b^2(2) \quad (8)$$

$$\psi_2 = \psi_a(2) \cdot \psi_b(1) \quad \psi_2^2 = \psi_a^2(2) \cdot \psi_b^2(1) \quad (9)$$

Yaryad zichligining molekula bo'ylab taqsimlanishini hisoblash uchun ψ^2 ni ko'rsatadiki, agar elektronlarning spini antiparallel bo'lsa ularning taqsimlanishi bir biriga qo'shiladi va 2 atom yadrolari orasida bulut zichligi ortadi, elektronlar bulutlari bir-birini qoplaydi, natijada kimyoviy bog' hosil bo'ladi. Aksincha, elektronlar spini parallel bo'lsa, ikki yadro orasidagi elektronlar buluti zichligi kamayadi, bulutlar biri-birini qoplaymaydi va kimyoviy bog' hosil bo'lmaydi (3- va 4-rasmlar).



3-rasm. Bog' hosil bo'lish holati uchun H_2 molekulasida elektron buluti zichligining ψ_1^2 taqsimlanishi



4-rasm. Itarilish holati uchun H_2 molekulasida elektron buluti zichligining ψ_2^2 taqsimlanishi

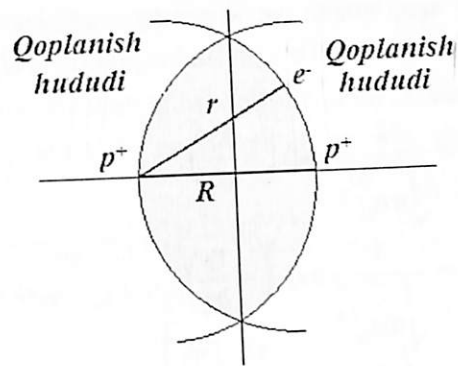
Valent bog'lanish usulining qoidalari quyidagilardan iborat:

1. Yakka bog'lar ikki atomdagi qarama-qarshi spinli elektron bulutidan hosil bo'ladi. Bunda ularning elektron buluti bitta bo'lib qoplaydi va qoplanish hududida bulut zichligi ortadi. Nisbatan sistemaning potensial energiyasi kamayadi, ya'ni bog'lanish kuchli bo'ladi. Elektron bulutlar qanchalik ko'p qoplansa, bog'lanish kuchli bo'ladi va kimyoviy bog' mustahkam bo'ladi.
2. Bu bog'lar to'lqin funksiyasining ko'p qoplanish to'rtinchi darajasi bo'lgan bo'ladi.
3. Atomdagi bir-birini ko'p qoplaydigan orbitallargina kimyoviy bog' hosil qiladi.

2.3. Molekulyar orbitallar usuli

Molekulyar orbitallar usulida molekula ham atom singari tashkil topirilgan bo'ladi. Atom uchun atom orbitallari (AO) mavjud desak, molekula uchun ham molekulyar orbitallar (MO) mavjud deb qabul qilinadi. Atom orbitallarda elektron bitta yadro bilan bog'langan bo'lsa, molekulyar orbitallarda elektron bir necha yadro bilan bog'langan bo'ladi, ya'ni molekulyar orbitallar MO da ham to'lqin funksiyasi o'zining muayyan energiyaga ega bo'ladi, ya'ni: AO – s, p, d, f bo'lsa, MO ham shunday bo'ladi.

MO usulida ham to'lqin funksiyasini xarakterlash uchun MO usulidan foydalaniladi, elektronni xarakterlashda m_s ishlatiladi. MO usulida molekulyar orbitalda ham ko'pi bilan qarama-qarshi spin bilan bog'langan elektron bo'lishi mumkin, ya'ni ($\uparrow\downarrow$). Agar AO maksimal qo'shilish bo'lsa, MO eng mustahkam bo'ladi (5-rasm). Agar AO energiyasi o'zaro bog'lanish bo'lsa, MO energiyasining minimal qiymatga ular yig'indisining yarmiga teng bo'ladi (bunda ichki qobiqdagi elektronlar energiyasi kamayadi, ya'ni bog'lanish kuchli bo'lganligi uchun ishtirok etishmaydi).



5-rasm. Atom orbitallarining qoplanishi

Molekulyar orbitallar. Ikki atomli bir elektronli oddiy ionli molekula H_2^+ ning hosil bo'lishini ko'rib chiqaylik. Bunda elektronning protonga tortilish energiyasining o'zgarishi tahlil qilish kerak. Potensial energiya elektronning yadroga tortilishi va protonlarning o'zaro itarilish energiyalaridan kelib chiqadi, ya'ni:

$$U_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}; \quad (10)$$

$$U_2 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}; \quad (11)$$

$$\Delta U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}, \quad (12)$$

bu yerda R – yadrolararo masofa; r – elektron va yadro o'rtasidagi masofa; ϵ_0 – vakuum dielektr maydon zaryadi.

Agarda $\Delta U < 0$ bo'lsa, U kamayib elektron protonga tortiladi, bog'lanish kuchli bo'ladi. $\Delta U > 0$ bo'lsa, itarish kuchi ortib, bog'lanish kuchli bo'lmaydi. Bog'lanish kuchli bo'lishi elektronning fazodagi holatiga bog'liq bo'ladi. Bog'lanish kuchli bo'lishi yadrolarni bog'lasa, bog'lanish, bog'lamas bog'lanish holati yadrolarni bog'lasa, bog'lanish, bog'lamas bog'lanish holati bo'ladi. Elektron H_2^+ holati to'lqin funksiyasi bilan bog'lanish kuchli bo'ladi. Elektron bulut zichligi bog'lanish hududida bog'lanish kuchli bo'ladi. Agar elektron bulut zichligi bog'lanish hududida bog'lanish kuchli bo'ladi, uning holati ham to'lqin funksiyasi bilan ifodalanadi va bog'lanish kuchli bo'ladi. Bunday to'lqin funksiyasiga bog'lovchi molekulyar orbital deyiladi, aks bog'lanish kuchli bo'ladi. Bunday to'lqin funksiyasiga bog'lovchi molekulyar orbital deyiladi, aks bog'lanish kuchli bo'ladi (6-rasm). H_2^+ ioni bog'lanish kuchli bo'ladi.

uchun Shredinger tenglamasi yechimining yaqinlashtirilgan, modellar bilan topsa bo'ladi. To'lqin funksiyalarini $\psi_{1s}^{(1)}$ va $\psi_{1s}^{(2)}$ holatda ifodalab:

$$\psi_{1s}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right), \quad (13)$$

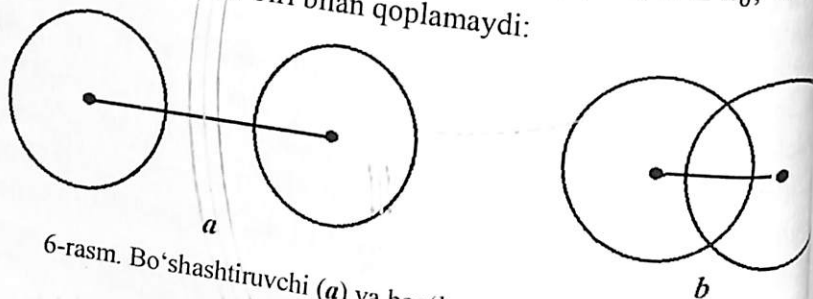
$$\psi_{1s}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} \exp\left(-\frac{r_2}{a_0}\right), \quad (14)$$

shuning uchun vodorod atomi uchun:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{3/2}}} \exp\left(-\frac{r_1}{a_0}\right), \quad (15)$$

bunda r_1 va r_2 elektron bilan yadrolar orasidagi masofa.

Agarda yadrolar bir-biridan uzoq bo'lsa, ya'ni $R \geq a_0$, unda va $\psi_{1s}^{(2)}$ orbitallar bir-biri bilan qoplamaydi:



6-rasm. Bo'shashtiruvchi (a) va bog'lovchi (b) molekulyar orbitallar hosil bo'lishi kerak.

To'lqin funksiyalarining bir-birini qoplanish darajasini miqdor jihatdan qoplash integrali (S) xarakterlaydi:

$$S = \int \|\psi_1 \cdot \psi_2\| dv. \quad (16)$$

Yadrolarning bir-biriga yaqinlashishi natijasida $\psi_{1s}^{(1)}$ va $\psi_{1s}^{(2)}$ to'lqin funksiyalari noldan farq qiluvchi hudud paydo qiladi. Ularning ko'paytmasi ham noldan farq qiladi. Demak, yadrolar bir-biriga yaqinlashganda elektron bulutlar bir-birini qoplab, kimyoviy bog' hosil bo'ladi.

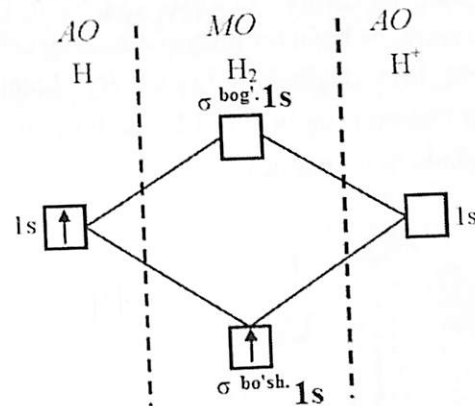
Ya'ni atom orbitallari ($\psi_{1s}^{(1)}$ va $\psi_{1s}^{(2)}$) qo'shilib molekulyar orbitallarga aylanadi (7-rasm).

H_2^+ ioni uchun molekulyar orbitallarni atom orbitallari qo'shilishi va (ajralishi) sifatida ko'paytuvchilar tarzida quyidagicha yozish kin:

$$\psi_{\sigma^*} = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} (\psi_{1s}^{(1)} - \psi_{1s}^{(2)}), \quad (17)$$

adillashtirish shartiga ko'ra,

$$\int |\psi|^2 dV = 1$$



7-rasm. H_2^+ ning molekulyar orbitallar usulida hosil bo'lish diagrammasi

hosil bo'lishi kerak.

$$\int |\psi_{1s}^{(1)} \pm \psi_{1s}^{(2)}|^2 \cdot dV = \int |\psi_{1s}^{(1)}|^2 dV + \int |\psi_{1s}^{(2)}|^2 dV \pm 2 \int \psi_{1s}^{(1)} \cdot \psi_{1s}^{(2)} dV = 2 \pm 2S = 2(1 \pm S) \quad (18)$$

Shuning uchun

$$\psi_{\sigma} = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} \quad (19)$$

$$\psi_{\sigma^*} = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} \quad (20)$$

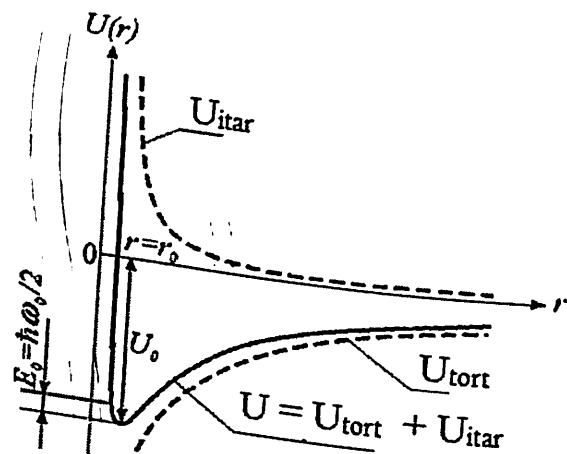
funksiyalarning ko'paytuvchisi ψ_{σ} va ψ_{σ^*} ga teng bo'ladi.

To'liq funksiyalari bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektron bulutlari zichliklari uchun quyidagicha ifoda yoziladi:

$$|\psi_{\sigma}|^2 = \frac{1}{2(1+S)} \{ (\psi_{1s}^{(1)})^2 + (\psi_{1s}^{(2)})^2 + 2\psi_{1s}^{(1)} \cdot \psi_{1s}^{(2)} \},$$

$$|\psi_{\sigma^*}|^2 = \frac{1}{2(1-S)} \{ (\psi_{1s}^{(1)})^2 + (\psi_{1s}^{(2)})^2 - 2\psi_{1s}^{(1)} \cdot \psi_{1s}^{(2)} \},$$

holatida elektron bulutlari (atom orbitallari bulutlari $|\psi_{\sigma}|^2$ qo'shilish natijasida) zichligi bog'lanish hududda $1/2(1-S)$ ko'paytuvchisi bilan hisobiga oshadi. Shuning uchun ψ_{σ^*} holatda molekulyar orbitalni hosil bo'lishda, yadrolar yaqinlashuvidan MO energiyasi ortadi va yangi zarracha hosil bo'lmaydi. Shuning uchun ham bu orbital bo'shashtiruvchi MO deyiladi. Lekin, H_2^+ holatida molekulyar orbital $(1s^1)^+$ bo'ladi, chunki elektron bog'lovchi MO da bo'ladi, ya'ni: $1s^1 + 1s^1 = (1s^1)^+$ bo'ladi. Molekula ioni energiyasi o'zining minimum qiymatiga erishadi.



8-rasm. Potensial energiyaning yadrolar orasidagi masofaga bog'liqlik grafiği
 U -potensial energiya, r -yadrolar orasidagi masofa,
 r_0 -yadrolar orasidagi muvozanat holatdagi masofa,
 E -kimyoviy bog'lanish energiyasi.

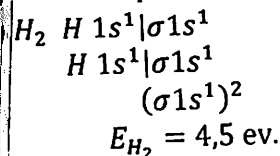
U_{min} -molekulaning eng barqaror holati potensial energiyagaga erishilgani keluvchi R_0 ga yadrolar orasidagi masofa yoki kimyoviy bog'lanish uzunligi deyiladi.

$E(R)$ bog'lanish $E_{H_2^+} = 2,7$ ev chizig'ining chuqurligi kimyoviy bog'lanish energiyasini ifodalaydi, ya'ni:

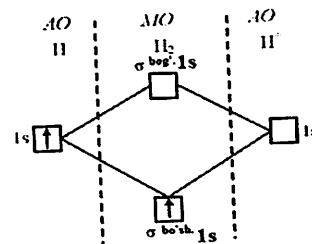
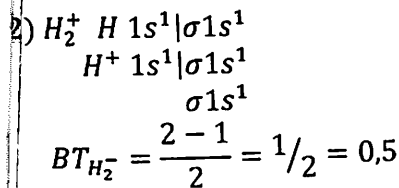
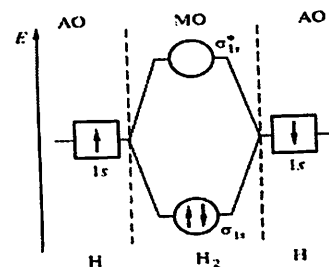
$$E_{H_2^+} = 2,7 \text{ ev}, \quad D_{H-H^+} = 1,06 \text{ A}^0,$$

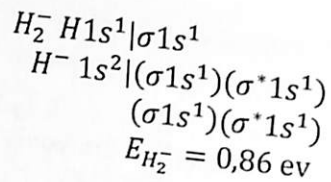
$$E_{H_2} = 4,5 \text{ ev}, \quad E_{H-H^+} = 0,74 \text{ A}^0,$$

molekulani atomlarga parchalash uchun kerak bo'ladigan energiya D_{H-H^+} bo'ladi. Shuning uchun bog'lanish energiyasi kimyoviy bog' uzunligi esa $R_0 = 0,106 \text{ nm} = 1,06 \text{ A}^0$; $E_{H_2} = 4,5 \text{ ev}$, $E_{H_2^-} = 0,83 \text{ ev}$. MO usulida atom orbitallaridan molekulyar orbitallarning hosil bo'lishini aniqlash.

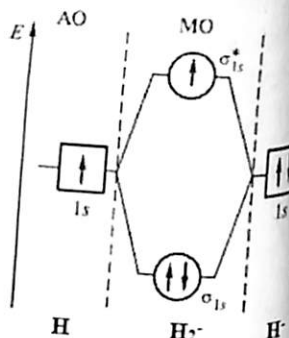


$$BT_{H_2^+} = \frac{2-0}{2} = 1$$





$$BT_{H_2^-} = \frac{1-0}{2} = 0,5$$



Ikki atomli molekullarda orbitallarning energetik qiymati quyidagi tartibda o'zgaradi, ya'ni:

AO s, p, d, f → MO σ, π, δ, φ,

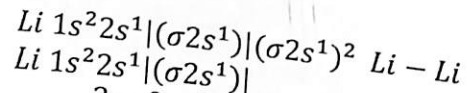
$$\sigma 1s < \sigma^* 1s < \sigma 2s < \sigma^* 2s < \sigma 2p_x < (\pi 2p_x \approx \pi 2p_z) < \sigma^* 2p_x < (\pi^* 2p_y \approx \pi^* 2p_z) < \sigma 2p_x^*$$

Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi orbitallardagi elektronlar soni bo'lsa, ular o'zaro bir-birini neytrallaydi, ya'ni yo'qotadi.

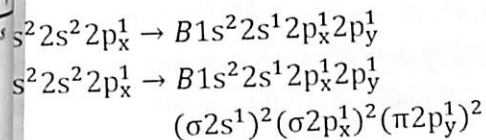
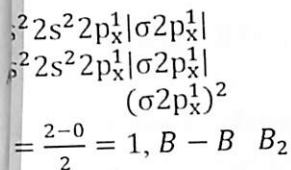
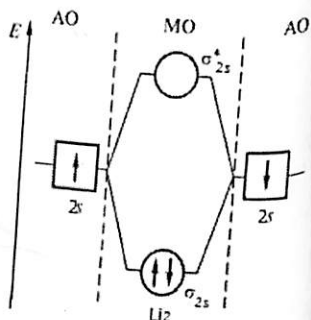
Molekula bog'lanishining mustahkamligi bog'lovchi bo'shashtiruvchi orbitallardagi elektronlar sonining farqi belgilanadi. Elektronlar soni farqining yarim qiymatiga bog'lanish deyiladi:

$$BT = \frac{\sum N_{bog'lovchi} - \sum M_{bo'shashtiruvchi}}{2} \quad (23)$$

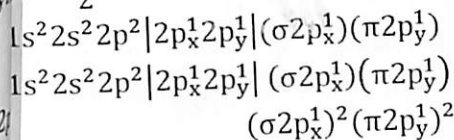
Masalan, BT Li₂ va B₂ molekullari uchun 1 ga, O₂, C₂ uchun 2 ga, N₂ uchun esa 3 ga teng.



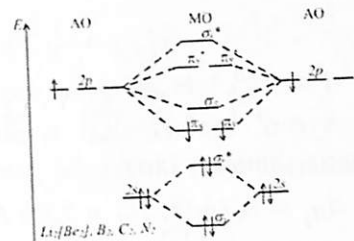
$$BT = \frac{2-0}{2} = 1$$



$$= \frac{6-0}{2} = 3, B^* \equiv B^* \quad B_2^*$$



$$= \frac{4-0}{2} = 2, C = C_2 \quad C_2$$



2.4. Kimyoviy bog'lanishning asosiy xarakteristikallari

Molekulaning asosiy xarakteristikallari sifatida atomlar orasidagi masofa (yadrolar orasidagi masofa), valent burchaklar hamda bog'lanish energiyasi (molekulaning mustahkamligini xarakterlovchi kattalik) izmat qiladi. Kimyoviy bog'lanishning mustahkamligi bu bog'ni uzish uchun sarf bo'ladigan energiyadir.

Bog' uzunligi. Bu yadrolar orasidagi potensial energiyaning minimal qiymati to'g'ri keladigan masofa. Bu muvozanat holatida molekula barqaror bo'lib, undagi atomlar o'rtasidagi tortishish va itarish kuchlari o'zaro teng bo'ladi. Bog' uzunligini atomlar yoki ionlar radiuslari asosida yoki Avogadro soniga asoslanib taxminan hisoblash mumkin. Masalan, suv molekulasining hajmi:

$$v = \frac{18}{6,02 \cdot 10^{23}} = 29,7 \cdot 10^{-24} \text{ sm}^3$$

bundan agar suv molekulasini shar shaklida deb olinsa, uning diametri:

$d_{H_2O} = \sqrt[3]{29,7 \cdot 10^{-24}} = 3 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$
 yoki $d = 3A^{\circ}$, bundan radius esa $r = 1,5A^{\circ}$ bo'ladi.
 Ayrim molekular uchun ushbu usulda hisoblab
 qiymatlari:

$d_{H_2} = 0,74A^{\circ}$; $N_2 = 1,09A^{\circ}$; $O_2 = 1,21A^{\circ}$;
 $d_{HF} = 1,5A^{\circ}$; $H - Cl = 1,28A^{\circ}$; $H - Br = 1,42$; $H - I = 1,5$

Shu bilan bir qatorda kristall panjaradagi atomlar orasidagi
 rentgen difraksiya usulida topiladi. Buning uchun Vuller
 formulasidan foydalaniladi:

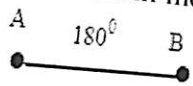
$$d = \frac{n\lambda}{2\sin\theta} \quad (24)$$

Valent burchagi. Valent burchaklar qiymatlari molekulyar
 atomlar tabiati va ular o'rtasidagi kimyoviy bog'lanishlarga bog'liq
 jadval).

Ba'zi birikmalar molekularining tuzilishi va valent burchagi

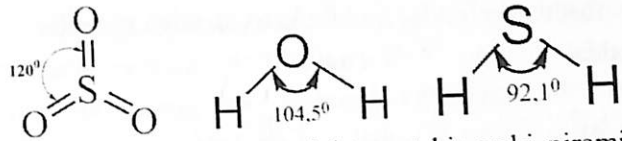
Gibridlanish tipi	Molekulaning geometrik shakli	Valent burchaklari	Misollar
sp	Chiziqli (diagonal)	180°	BeH_2, CO_2, C_2H_2, H_2
sp ²	Uchburchak (trigonal)	120°	$AlH_3, AlF_3, SO_3, CCl_4$
sp ³	Tetraedrik	$109^{\circ}28'$	NO_2, C_2H_4
sp ³ d yoki dsp ³	Kvadrat-piramida yoki trigonal-bipiramida	$>90^{\circ}, <90^{\circ}$ $90^{\circ}, 120^{\circ}$	SiH_4, CCl_4, CH_4, NH_3 SO_4^{2-}, ClO_4^-
d ² sp ³ yoki sp ³ d ²	oktaedrik	90°	$SF_6, AsF_6^-, IO_6^{2-}, SnCl_6^{2-}$

Ikki atomli molekula A_2 yoki AB tipda bo'ladi, ya'ni:



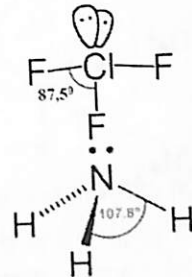
$\angle BAB = 180^{\circ}$, $BaCl_2, ZnBr_2, CO_2, HCN$

Uch atomli molekula AB_2 chiziqli yoki chiziqsiz bo'lishi mumkin.
 masalan:

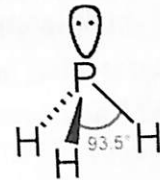


To'rt atomli molekula AB_3 elektron tekis yoki piramida shaklda bo'lishi mumkin, masalan: BF_3 , tekis molekula

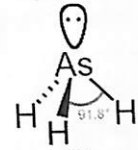
NH_3



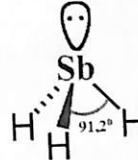
PH_3



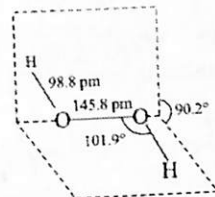
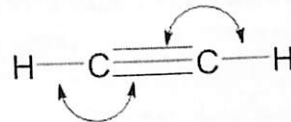
AsH_3



SbH_3



To'rt atomli (AB_3) molekular boshqa shakllarda ham bo'lishi mumkin, masalan:



Besh atomli AB₄ molekula tuzilishiga misollar.

Modda	Tuzilishi	Bog' burchagi
[PdCl ₄] ²⁻		90
SO ₄ ²⁻		109,5
CH ₄		109,5

Olti atomli AB₅ molekula tuzilishiga misollar.

PCl ₅		90 va 120
IF ₅		81,9

Yetti atomli AB₆ molekula tuzilishiga misol.

SF ₆		90
-----------------	--	----

Yetti atomli AB₇ molekula tuzilishiga misol.

IF ₇		72 va 90
-----------------	--	----------

Alifatik organik birikmalarda R_{C-C}=1,54A⁰ ga teng bo'lib, C-C ar orasidagi valent burchak 109,5⁰ ga teng. To'yingan zodorodlar qatorining molekulari egri-bugri strukturaga ega. Masalan, CH₃-CH₂-CH₂-CH₂-CH₃

	109,5
pentan molekulasida d _{C-C} = 1,54 A ⁰ ; d _{C-H} = 1,03 A ⁰ < 109,5 ⁰	

To'yingan siklik ulevodorodlarda esa d_{S-S} va d_{C-H} bog'larining uzunliklari to'yingan ulevodorodlarniki bilan teng, lekin valent burchaklari o'zgargan. Burchaklarning o'zgarmasligi molekula shaklliligining kuchlanishiga olib keladi. Masalan, siklopentan molekulasida barcha burchaklarga ega. Bu molekulada uglerodning 4 ta atomlari bir tekislikda joylashib, bittasi esa taxminan 0,5A⁰ yuqori burchakda joylashadi. Siklogeksan molekulasida esa 2 xil izomer holat kuzatiladi:

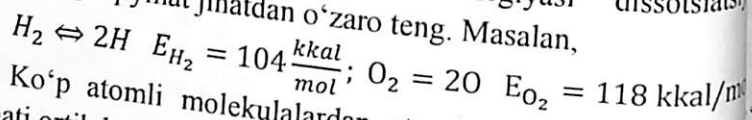
	"Kreslo"
	"Vanna"

"Kreslo" variantining mavjudlik ehtimoli "Vanna" ga qaraganda kattaroq bo'lib, uglerod atomi birikmalari misolida qayd etish mumkinki, bir elementning turli birikmalarida valent burchaklari turlicha bo'lishi mumkin. Valent burchaklari rentgenstrukturali, spektroskopik, elektronografik usullar hamda molekularning dipol momentini o'lchash asosida aniqlanadi.

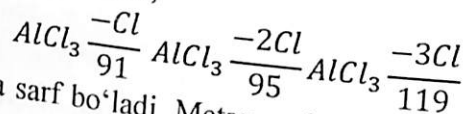
2.5. Bog'lanish energiyasi

Kimyoviy bog'lanishning mustahkamligini shu bog'lanishni uzish uchun sarf bo'ladigan energiya miqdori bilan o'lchash mumkin.

Kimyoviy bog'lanish energiyasini molekula atomlardan hosil uchun zarur bo'ladigan energiyalar yig'indisi sifatida ham bo'ladi. Ta'kidlash joizki, bog'lanishni uzish (parchalash) (yoki bog'lanishni dissotsiatsiyalash energiyasi) doimo musbat ega bo'ladi, hosil bo'lish energiyasi esa manfiy bo'lib, qiymat dissotsiatsiyalash energiyasiga tengdir. Ikki atomli molekular bog'lanish, ya'ni hosil bo'lish energiyasi dissotsiatsiy energiyasiga qiymat jihatdan o'zaro teng. Masalan,



Ko'p atomli molekularlardan atomlarni ajratib olishda qiymati ortib boradi. Masalan,



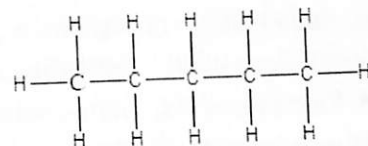
kkal/mol energiya sarf bo'ladi. Metan molekulasida vodorod atom ketma-ket ajratib olish uchun quyidagi miqdorda energiya sarf bo'ladi: $H=102$; $2H=88$; $3H=124$ va $4H=80$ kkal/mol. Lekin bularning o'rtacha arifmetik qiymati bog'lanish energiyasining o'rtacha qiymatiga teng bo'ladi, ya'ni

$$E_{C-H} = \frac{102 + 88 + 124 + 80}{4} = 99 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$$

Ko'p atomli molekularlarda jarayonlarning murakkabligi elektronlar buluti zichligining o'ziga xos taqsimlanishi bilan izohlanadi. Agarda bir bog'lanishni uzish boshqa bog'lanishlarning mustahkamligiga ta'sir etsa, u holda keyingi bog'lanishlarni uzish uchun energiya yoki ko'p yoki kam miqdorda talab etiladi. CH_4 va H_2O molekularida bunda misol keltirish mumkin. Masalan, H_2O uchun, birinchi vodorod atomini uzishda 102 kkal/mol energiya talab etiladi (OH^- ionini mustahkamligi sababli ikkinchi atomning uzishi qiyinlashadi). Agar molekulada turli tipdagi atomlar soni ikkitadan ortiq bo'lsa, holda bog'lanishning o'rtacha energiyasi degan tushuncha bog'lanishni dissotsiatsiyalash energiyasi tushunchasiga mos kelmay qo'yiladi. Molekulada kimyoviy bog'lanishning turli tiplari bo'lsa, u holda ularning har biriga o'zining muayyan qiymatlari to'g'ri kelishi mumkin. Molekulaning umumiy bog'lanish energiyasini molekulaning atomlar

bo'lish energiyasidan topish mumkin. Masalan, pentan molekulasining hosil energiyasini C va H atomlaridan quyidagicha olish mumkin:

$$E_{S_5H_{12}} = 4E_{C-C} + 12E_{C-H}$$



Alifatik uglevodorodlar uchun birlamchi bog'dan "qo'sh" va "uch" bog'larga o'tganda bog'lanish energiyasi oshadi, ya'ni:

$$E_{S-C} = 79,3; \quad d = 1,54 \text{ \AA}; \quad E_{C-C} = 116,4; \quad d = 1,34 \text{ \AA}; \\ E_{C \equiv C} = 196,7; \quad d = 1,20 \text{ \AA}$$

Faqat mos holatlardagi uglerod atomlari uchun ushbu holat kuzatiladi. Bog'lanish tartibining oshishi bilan $E_{bog'}$ oshsada, bu bog'liqlik proporsional emas. Bog' uzunligi oshishi bilan bog'lanish energiyasi kamayadi. Masalan, bog'lanish energiyasining kamayishini C-galogen (Gal-galogen) qatorida ham kuzatish mumkin:

$$C - Gal: \quad CF_4, F = 116,3; \quad CCl_4, Cl = 75,8;$$

$$CBr_4, Br = 63,3; \quad CI_4, I = 47,2 \frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$$

Bog'lanish energiyasining kamayishi S-Gal orasidagi yadrolararo ta'sirning oshishiga bog'liq. Bunday bog'lanishlar organik birikmalarda yaqqol kuzatiladi, chunki ularning soni juda ko'p bo'lib bog'lanish ("-", "=", "≡") turi nisbatan kam, lekin kimyoviy bog'lanishlarning turi esa ko'proq kuzatiladi, ya'ni aralash bog'lanishlar (ion, kovalent, donor-akseptor) uchraydi, organik birikmalarda esa asosan bog'lanishning kovalent turi mavjud.

2.6. σ va π bog'lanishlar

σ - bog'lar yadrolarni o'zaro bog'lash yo'nalishidagi o'q bo'ylab yo'nalgan bo'ladi, boshqacha qilib aytganda simmetriya o'qi kimyoviy bog'lanish o'qi bo'ylab yo'nalgan bo'ladi. Bog'lanishlar orasidagi

burchak atom orbitallarining o'zaro orientatsiyasi bilan. Bilamizki, σ - bog'lar atom orbitallarining bir o'q yo'nalishi o'zaro qoplanishi natijasida hosil bo'ladi. Atom orbitallari gibridlanish holatda bo'lishini inobatga olinadi. Demak, Be (BeCl_2) da sp , B (BCl_3) da sp^2 , C atomida (CH_4) sp^3 gibridlanish mavjud. (PCl_5 da 5 ta d orbitali mavjud. Shuning uchun bu molekulada P atomi dsp^3 gibridlanagan holatda bo'ladi). H_2O , NH_3 , va H_2S esa S atomlari d^2sp^3 gibridlangan holatda bo'ladi). H_2O , NH_3 , va H_2S sp^3 gibridlanish mavjud. Lekin H_2O , NH_3 molekularida simmetrik molekulasiga qaraganda nosimmetrik.

Molekulalar geometrik tuzilishini tushuntirishda 2 xil yo'l mavjud:

1) Ko'p valentli atomda bog'lanishlar konfiguratsiyasi atom valent qobig'idagi bog'lovchi va bog'lanmovchi elektronlari bilan belgilanadi;

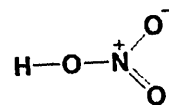
2) Valent orbitallari elektron juftlari bulutlarining orientatsiyasini va elektronlarning o'zaro maksimal itarishlarini aniqlanadi.

Ta'kidlash lozimki, bir atom birdaniga bir necha σ bog'lar hosil bo'lishida ishtirok etishi mumkin. Masalan, Be da 2 ta σ , N da 3 ta σ , C da 4 ta σ bog'lar mavjud.

Kimyoviy bog'lanishda σ bog' bilan birga π bog'lanishlar ham hosil bo'lishi mumkin. Bu holatda π bog'lar σ bog'laridan azimutal (orbital) kvant sonining qiymati noldan farqli bo'ladi, ya'ni $l=1$. Har bir atom 2 ta π bog'lanish hosil bo'lishida ishtirok etadi. Bunda π orbitallar tekisliklari o'zaro perpendikulyar bo'lib joylashadi. Natijada " \equiv ", " \equiv " qo'sh- va uchbog'lar hosil bo'lishi mumkin. Bog'lanishlar hosil bo'lishi molekula geometriyasining o'zgarishiga olib keladi. Masalan, C_2H_4 , C_3H_4 , CO_2 molekularni ko'raylik. CO_2 molekulasida bog'lanishlar uglerod atomlari o'rtasida teng taqsimlangan bo'lib, bog'lanish tartibi faqat butun son bo'lmay, kasr sonlarni ham qabul qilishi mumkin. Shuning uchun ham C_6H_6 da birlamchi bog'lanishlar mavjud bo'lmay, hamma bog'lar o'rtacha bo'ladi. π -orbitallari hosil bo'lishida p -elektronlar ishtirok etadi. Agar bu elektronlar

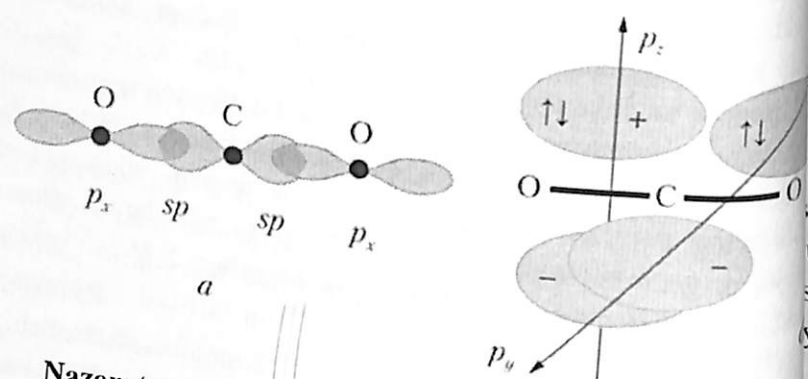
hosil bo'lishida ishtirok etmayotgan bo'lsa va taqsimlanmagan, elektronlar bo'lsa, u holda, masalan, CH_3COOH molekulasidagi "O-H" guruhida π -bog'lanish hosil bo'ladi. "O-H" guruhida esa σ -bog'lanish hosil bo'lib, kislorod atomining juft elektronlari bunda ishtirok etadi.

Agar (O-H) dagi kislorod atomining juft p -elektronlari " π " bog'lari bilan parallel orientatsiya holatida bo'lib qolsa, u holda O=C=O holatida bog'lanish hosil bo'ladi. H_2O , NH_3 , va H_2S molekulari o'rtasida yagona elektronlar buluti, ya'ni C, O=, O-atomlarining p -elektronlari uchta π -orbitalli bog'lar hosil qilishi mumkin. Bunda bog'lanish teng taqsimlanadi: CH_3COOH sirka kislota molekulasida birinchi va ikkinchi kislorod atomlari xuddi C_6H_6 dagi C atomlari kabi o'zaro ekvivalentdir, ya'ni 3 ta π -orbitalli yagona sistemani hosil qiladi. CH_3COO^- da p , π -ta'sirlanish sodir bo'ladi. p , π -ta'sirlanish sodir bo'ladi. p , π -ta'sirlanish asosan kislorod va azot elementlari atomlariga xos. Masalan, 7. N $1s^2 2s^2 2p^3$ konfiguratsiyasida $1s^2 2s^1 2p_x^2, 2p_y^1, 2p_z^1$ ishtirok etgan HNO_3 ning hosilasi nitrometan-ol (CH_3NO_2). Bu molekula tuzilishi jihatdan CH_3COO^- molekulasiga o'xshaydi. NO_2 guruhi bitta N va ikkita O atomlarining (p -elektronlari ishtirokida) molekulyar orbitallarining chiziqli kombinatsiyasidan hosil bo'lib, unda 4 ta elektronlar jufti, ya'ni azot atomining 1 juft p elektronlari va kislorod atomining 3 juft p elektronlari ishtirok etadi:



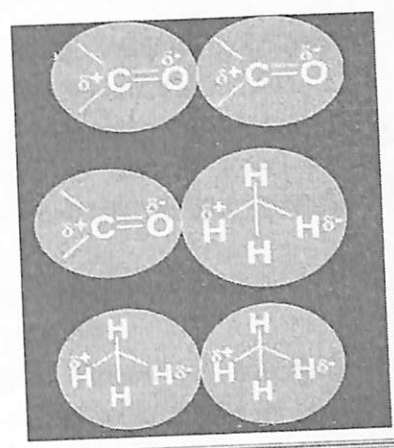
Ko'p markazli molekulyar orbitallarni o'rganish shuni ko'rsatdiki, bunday molekulalarda bog'lovchi, bo'shashtiruvchi orbitallardan tashqari yana bog'lamaydigan orbitallar ham hosil bo'ladi. Mazkur bog'lanmaydigan orbitallardagi elektronlar kimyoviy bog' hosil bo'lishi uchun yoki bo'lmazligiga ta'sir etmaydi. Masalan, HNO_3 molekulasida kislorod atomlari o'rtasida bog'lanish tartibi faqat butun son bo'lmay, kasr sonlarni ham qabul qilishi mumkin. Shuning uchun ham C_6H_6 da birlamchi bog'lanishlar mavjud bo'lib, ularning 3 tasida (1 ta bog'lovchi va 2 ta bog'lamaydigan) 6 ta elektronlar bo'lib, ulardan 1 jufti N^+ dan, 2 jufti kislorod atomlari hamda nitroguruhdagi ikki valentli

kislorod atomlaridan uch juft elektron ishtirok etadi. HNO_3 da N valentli bo'lib, fosfordan farqli o'laroq V valentli bo'la (15. $P 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3 \rightarrow P^* 1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 3p_x^1, 3p_y^1, 3p_z^1$) ta'sirlashuvlar kuzatiladi. $\text{C}=\text{O}$ da (yoki $\text{O}=\text{C}=\text{O}$ da) bu qo'sh bog' p, π ta'sirlashuvlar o'zaro perpendikulyar yo'nalganligi sabab mustahkam bo'lib, bog'lanish energiyasi katta va atomlararo qisqa bo'ladi, ya'ni:



- Nazorat savollari**
1. Kimyoviy bog'lanish turlari.
 2. Kovalent bog'lanishning mohiyati.
 3. Ion bog'lanish.
 4. Elementlar atomlarining nisbiy elektromanfiylik tushunchasi.
 5. Ionlanish potentsiali va elektronga moyillik.
 6. Ion bog'lanishning kovalentlik darajasi.
 7. Metall bog'lanish.
 8. Donor-akseptor bog'lanish.
 9. Valent bog'lanish nazariyasi.
 10. Molekulyar orbitallar nazariyasi.
 11. Bog' xarakteristikallari.
 12. Kristallar tuzilishining turlari: atom, molekulyar, ion va metall kristallar, ularning o'ziga xos xususiyatlari va tuzilishi.

III BOB MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLAR



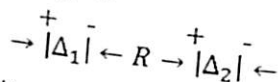
Turli fizikaviy jarayonlarda (kondensatlanish, adsorbsiya va oqib chiqishlar) uzoq masofadan molekular o'rtasidagi tortishishga olib keluvchi molekulyar kuchlar asosiy o'rinni egallashdi. Kimyoviy o'zaro ta'sirlar kuchlari bilan berilgan kuchlar orasidagi farqlar avvalambor quyidagilar:

1. Molekulararo o'zaro ta'sirlar energiyasi kimyoviy bog'lanishlar energiyasiga nisbatan bir tartibga kichik.
2. Kimyoviy moyillik kuchlari o'ziga xos, molekulararo tortishish kuchlari esa universal. Har qanday atomli sistemalar katta masofada tortiladi. Ushbu holatdan barcha gazlar juda past temperaturalarda kondensirlanishi kelib chiqadi.
3. Tuyinuvchanlik xossasini namoyon qiladigan kimyoviy bog'lardan farq qiluvchi asosiy tipdagi molekulyar kuchlar additivlik bilan xarakterlanadi. Bu esa ikki molekula o'rtasidagi o'zaro ta'sir energiyasi uchinchi atomning ishtirokiga bog'liq.
Kimyoviy moyillik kuchlari kovalent va ionliga bo'lingani kabi molekulararo kuchlar uchga bo'linadi:
➤ oriyentatsion kuchlar molekularada mavjud bo'lgan zaryadlarning elektrostatik ta'siri natijasida assimetriklikni namoyon qiladigan molekular o'rtasida yuzaga keladi;

- induksion kuchlar dipol molekula maydonida hosil bo'lgan dipolsiz molekulaning qutblanishi hisobiga paydo bo'ladi;
- dispersion kuchlar molekular elektronlarining o'zaro ta'sir natijasida kelib chiqadi.

3.1. Oriyentatsion va induksion o'zaro ta'sirlar

Oriyentatsion kuchlar o'zining noma'lum molekulalar energetik jihatdan qulay holatda oriyentirlanishi kerak degan tasavvurda keltirilgan. Ikkita dipol molekula keltirilgan. 1-rasmda ularning energiya qulay konfiguratsiyasi keltirilgan.



1-rasm. Ikkita oriyentirlangan dipol molekulalar

Agar temperatura yetarli darajada past bo'lsa, u oriyentirlanish sodir bo'ladi va o'z-o'zidan molekulalar tortishadigan yuqori temperaturalarda aylanish energiyasi o'zaro ta'sir energiyasiga katta bo'lganligi uchun molekulalar oriyentatsiyasi yo'qoladi. Molekulalar bir-biriga tortilmaydi.

Shunday qilib, oriyentatsion molekulyar kuchlar temperatura bog'liq bo'lib, uning ko'tarilishi kuchlarni kamaytiradi.

Juda quyi va juda yuqori temperaturadagi ikkita chegaraviy holatni qaraymiz. Tortishish energiyasi kT dan sezilarli katta bo'lganda o'zaro ta'sir temperaturalarda molekulaning to'liq oriyentirlanishi sodir bo'ladi. holda, masalan, bir-biridan R masofada bir chiziqda joylashgan molekulalarning ta'siri zaryadlar ta'siri singari ifodalanadi (1-rasm).

$$U = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(R + \Delta_2)} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(R + \Delta_1)} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0(R + \Delta_1 + \Delta_2)}$$

bunda Δ_1 va Δ_2 — e kattaligiga teng bo'lgan zaryadlar og'irlik markazlar orasidagi masofa. Δ_1 va Δ_2 masofalar R ga nisbatan kichikligi e'tibor

$$U = -\frac{2R\Delta_1\Delta_2R^2}{4\pi\epsilon_0R^4} \quad (2)$$

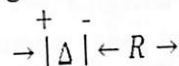
kattaligi proporsionallik koeffitsiyenti, bunda ϵ_0 —dielektrik koeffitsiyenti, $\mu_1 = \Delta_1e$ va $\mu_2 = \Delta_2e$ ekanligi hisobga olinsa, u holda:

$$U = -\frac{2\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_0R^3} \quad (3)$$

bu yerda μ_1 va μ_2 —molekulalarning dipol momentlari.

Olingan tenglamadan ko'rinib turibdiki, past temperaturalarda molekulalar tortishish energiyasi ular orasidagi masofaning kubiga proporsional.

Endi induksion kuchlarni qaraymiz, keyin yana yuqori temperaturalarda oriyentatsion kuchlar ifodasiga qaytamiz. Oddiylik uchun dipol molekula chiziqda yotgan va uning yonida dipol momentni keltirib chiqaruvchi vektor joylashgan holatni tahlil etaylik (2-rasm)



2-rasm. Dipol maydoni kuchlanganligini hisoblash uchun sxema

Dipolmas molekuladan elektr maydoni ta'sirida elektronlarning qutblanishi natijasida yuzaga keladigan dipol molekulaning kiritilgan dipol momenti μ_k quyidagi formula bo'yicha aniqlanadi:

$$\mu_k = \alpha E, \quad (4)$$

bu yerda α —dipolmas molekulaning qutblanuvchanligi; E — R masofada dipol molekula tomonidan yaratiladigan maydon kuchlanganligi.

2-rasmdan ko'rinib turibdiki,

$$E = \frac{e}{4\pi\epsilon_0R^2} - \frac{e}{4\pi\epsilon_0(R + \Delta)^2} = \frac{2\Delta e}{4\pi\epsilon_0R^3} = \frac{2\mu}{4\pi\epsilon_0R^3}, \quad (5)$$

bunda μ —molekulaning dipol momenti. O'z-o'zidan:

$$\mu_H = \frac{2\alpha\mu}{4\pi\epsilon_0R^3}, \quad (6)$$

Kiritilgan momentning μ_H yo'nalinishi, μ yo'nalishiga qarama-qarshi, u holda ularning o'zaro ta'siri quyidagi formula bo'yicha hisoblanishi mumkin:

$$U = -\frac{4\alpha\mu^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} \quad (7)$$

Lekin elektronning qutblanishi ma'lum energiya sarfini talab hisobga olinishi zarur. Ushbu energiyani hisoblash uchun kuchlanganligini noldan boshlab oxirgi E qiymatgacha o'zgartirish kerak. Maydon bilan oriyentirlangan dipol μ ning energiyasi μE ga teng.

Haqiqatda maydon bilan ikki zaryadli dipol μ ning o'zaro energiyasini quyidagi tenglamadan aniqlash mumkin:

$$U_n = eV_1 - eV_2 = e(V_1 - V_2), \quad (8)$$

bunda V_1 va V_2 - musbat va manfiy zaryadlar og'irlik markazidagi joylashgan nuqtalardagi maydon potentsiallari qiymatlari. Lekin $V_2 = -E\Delta$ shunday qilib,

$$U_n = -Ee\Delta = -\mu E. \quad (9)$$

E ning dE ga o'zgarishi μdE energiya sarfini talab etadi. Molekula qutblanishi uchun sarflanadigan umumiy energiya quyidagidek ifodalanadi:

$$\int_0^E \mu dE = \int_0^E \alpha E dE = \frac{\alpha E^2}{2}. \quad (10)$$

(5) formuladan E ning qiymatini qo'yib, qaraladigan energiya quyidagi ifoda olinadi:

$$U_n = \frac{2\alpha\mu^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6}. \quad (11)$$

Shunday qilib, qaraladigan dipollarning o'zaro ta'sir energiyasini ajraladigan energiyaning yarmi elektronning qutblanishiga sarf bo'ladi. Va nihoyat (5) tenglama o'rniga quyidagi tenglama olinadi:

$$U = \frac{2\alpha\mu^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6}. \quad (12)$$

Shunday qilib, induksion o'zaro ta'sir energiyasi temperaturaga bog'liq emas va molekulalar orasidagi masofaning oltinchi darajasi teskari proporsionaldir. Molekulalar induksion o'zaro energiyasining o'rtacha qiymatini olish uchun molekulalarni bog'liq bo'lgan chiziqlar orasidagi turli burchaklar va dipol momentlari yo'nalishi

cha o'rtacha maydon kuchlanganligi E topilishi kerak. Ushbuni o'zaro ta'sir energiyasini hisoblash uchun (12) formulani quyidagi ko'rinishga olib keladi.

$$U_n = -\frac{\alpha\mu^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6}. \quad (13)$$

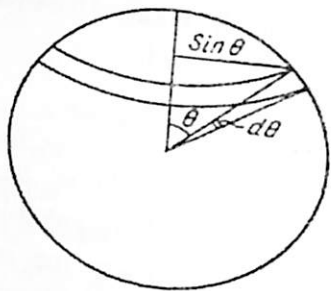
Induksion o'zaro ta'sir energiyasini keltirilgan hisoblashi quyidagi proporsionalligini, ya'ni qutblanuvchanlikning analogini paydo bo'lishini hisoblash uchun maydon yo'nalishi bilan mos keladigan o'qdag molekula momenti proyeksiyasining o'rtacha qiymati topiladi. Moment m proyeksiyasi uchun quyidagi tenglamani yozish mumkin:

$$m = \mu \cos\theta, \quad (14)$$

bu yerda θ - dipol momenti va maydon yo'nalishi o'rtasidagi burchak. m ning o'rtacha qiymatini hisoblash θ va $d\theta$ qiymatlari orasida o'zaro ta'sir energiyasi dipol momenti μ li maydonda ushbu ehtimoliyatda θ burchakka bog'liq. Haqiqatda (14) tenglamaga ko'ra $U = -Em$, (14) formulani hisobga olinsa, $U = -E\mu \cos\theta$ kelib chiqadi.

Shunday qilib, berilgan umumiy ehtimoliyat burchak θ va $d\theta$ orasidagi ehtimoliyatda yotadi, Bolsman qonunini qo'llab, quyidagi ko'rinishdagi formulani yozish mumkin:

$$dW = \frac{1}{2} \sin\theta d\theta \exp\left(\frac{E\mu \cos\theta}{kT}\right). \quad (16)$$



3-rasm. θ va $d\theta$ burchaklar o'rtasida joylashgan geometrik ehtimoliyatning uchun sxema.

\bar{m} ning kattaligi quyidagi tenglikdan topiladi:

$$\bar{m} = \frac{\int_0^\pi \mu \cos\theta \frac{1}{2} \sin\theta \cdot e\left(\frac{E\mu \cos\theta}{kT}\right) d\theta}{\int_0^\pi \frac{1}{2} \sin\theta d\theta} \quad (17)$$

$kT \gg E\mu \cos\theta$ deb hisoblanib, eksponenta qatori yoyiladi va ikkita birinchi hadlar bilan chegaralanib, quyidagi ifoda olinadi:

$$\bar{m} = -\frac{\mu^2 E}{3kT} \quad (18)$$

Shunday qilib, (18) tenglamaga binoan samarali qutblanuvchi momentning kattaligi quyidagi tenglama bilan aniqlanadi:

$$\alpha = \frac{\mu^2}{3kT} \quad (19)$$

Ushbu ifoda induksion o'zaro ta'sir uchun (13) tenglamaga quyidagi tenglama bilan aniqlanadi:

$$U_{or} \approx -\frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 3kT} \cdot \frac{1}{R^6} \quad (20)$$

Amalga oshirilgan hisoblashning taqribiy bitta moment tomonidan yaratilgan maydonning o'rtacha qiymati bilan hamda momentlari o'zaro turli orientatsiyalarning ehtimoliyatini hisoblanmasligi bilan aniqlanadi.

Bunday hisoblash quyidagi tenglamani beradi:

$$U_{or} = -\frac{2}{3} \frac{\mu_1^2 \mu_2^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 kT} \cdot \frac{1}{R^6} \quad (21)$$

shunday qilib, yuqori temperaturalarda orientatsion o'zaro ta'sir raturaga va molekular orasidagi masofaning oltinchi darajasiga i proporsional.

3.2. Dispersion o'zaro ta'sir (London effekti)

Bir-biridan juda katta uzoqlikda joylashgan elektronlar atom ida bo'lgan va molekulyar orbitallarga o'tmagan ikkita vodorod i uchun o'zaro ta'sirning eng oddiy holatini qaraymiz. Har qaysi da manfiy zaryadning og'irlik markazi musbat zaryadning roning) og'irlik markaziga mos keladi. Lekin berilgan har qaysi da atomlar "o'zgaruvchan" dipol momentini namoyon qiladi. Agar u holatlar fazoda aniq tartibda orientirlangan bo'lsa, sistema eng ik energiyani namoyon qiladi. Agar bir atomda elektron yadrodan p tomonda bo'lsa, u holda boshqasida elektronning itarilishini naytirish uchun uning ham chap tomonda bo'lishi qulay.

Shunday qilib, turli atomlarning elektronlari qaysidir darajada akatlanishlari kerak. Bu esa kam itarilishga olib keluvchi turli mlarning elektron konfiguratsiyalarini berilishini bildiradi. Dispersion chlarni orientatsion kuchlarga o'xshash deb qarash mumkin va lduksion kuch uchun (21) formula asosida matematik ifodani taqriban ish mumkin. Ushbu maqsadida (21) formuladagi kT va μ kattaliklarini xshashlarini aniqlash lozim. Bunda bir xil molekularning o'zaro 'siri bilan chegaralanamiz. Dipol molekularning ta'sirlarida riyentatsiyaga halaqit beruvchi issiqlik harakati energiyasini kT arakterlaydi. Elektronning laha momenti orientatsiyasiga ularning inetik energiyasi halaqit beradi. Uning o'lchami kvant mexanikasidan elib chiqib, ionlanish potentsiali bo'lishi mumkin. Shuning uchun (21) englamadagi kT o'rniga γ ni qo'yamiz. Laha dipol momentini "laha nomentlari" doirasidagi kattalikka bog'liq bo'lgan tajribada aniqlanadigan molekula qutblanuvchanligi bilan almashtirilishi maqsadga muvofiq. (19) tenglamaga muvofiq T temperaturada molekula dipoli samarali qutblanuvchanlikka ega, ya'ni:

$$\alpha = \frac{\mu^2}{3kT}$$

Mos ravishda lahza dipol momentli molekula o'q ta'sirlar yig'indisini topib hamda (13), (21) va (23) qutblanuvchanlikka ega. Yuqorida qayd etilganiga ko'ra kamalardagi barcha doimiylarni birlashtirib, molekulalararo ionlanish potentsiali V kiritilgan. Shunday qilib (11) tenglamaga shish energiyasi olinadi:

$$U \approx - \frac{\alpha^2 V}{(4\pi\epsilon_0)^2 R^6} \quad (22)$$

Bir xil atomlar uchun aniq formula quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$U = - \frac{3 \alpha^2 V}{(4\pi\epsilon_0)^2 4R^6} \quad (23)$$

Har xil atomlarning o'zaro ta'siri Londonning quyidagi formulada ifodalanadi:

$$U = - \frac{3 \alpha_1 \alpha_2 V_1 V_2}{2 (4\pi\epsilon_0)^2 (V_1 + V_2) R^6} \quad (24)$$

Dispersion kuchlar temperaturaga bog'liq emas. Ular universal chunki elektron bo'lgan barcha sistemalarda mavjud. Elektrolar "taktda"gi harakati kuchsiz darajada berilgan, ya'ni yuqori energiyaga ega bo'lgan bir molekulaning elektronlari molekuladagi elektronlarning lahza holatini kichik darajada dispers kuchlarning additivligidir. Buning natijasi dispers kuchlarning additivligidir. molekulaning elektronlari qo'shni molekula bir nechta elektronlar holatini hisobga olishi mumkin. Elektronlarning "taktda"gi harakatini buni hisobga olish mumkin emas.

Hisoblashlarning ko'rsatishicha induksion kuchlar oriyentatsion dispersion kuchlarga nisbatan juda kichik. Shuning uchun ularni hisobga olmasa ham bo'ladi. Dipol momentiga ega bo'lmagan molekula uchun dispersion kuch yagona molekulyar kuchdir. Dipol molekula uchun dispersion kuchlar dispersion kuchlar bilan tengdir. Dispersion kuchlarning nisbiy roli odatda elektronlar soni bilan aniqlanadi.

3.3. Itarilish va yig'indi ta'sirlar

Bir xil molekular uchun oriyentatsion, induksion va dispersion o'q ta'sirlar yig'indisini topib hamda (13), (21) va (23) kamalardagi barcha doimiylarni birlashtirib, molekulalararo shish energiyasi olinadi:

$$U_{tor} = - \frac{C}{r^6}, \quad (24)$$

da

$$C = \frac{1}{(4\pi\epsilon_0)^2} \left(\frac{2\mu^4}{3kT} + \alpha\mu^2 + \frac{3\alpha^2 V}{4} \right). \quad (25)$$

Molekulalar o'rtasidagi kichik masofalarda ular elektron bulutlari hali qoplanganida, ya'ni yadro va elektronlarning elektrostatik itarilishi ning o'zaro tortilishidan katta bo'lganida itarish kuchlari ta'siri paydo bo'ladi. Bunday kuchlarning mavjudligini ko'plab faktlar, jumladan yuq va qattiq jismlarning ozga siqilishi ko'rsatadi.

Birinchi yaqinlashuvda molekulalarning itarilish energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanishi mumkin.

$$U_{it} = \frac{B}{r^{12}}, \quad (26)$$

bu yerda B -doimiy (itarilish konstantasi).

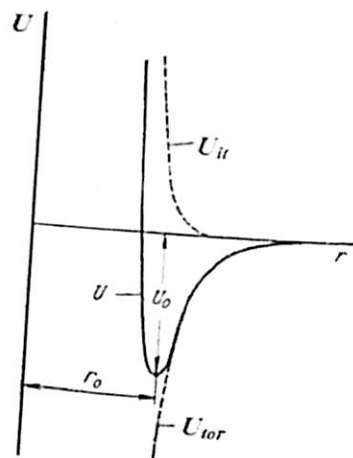
(26) tenglamadan ko'rinib turibdiki, itarilish kuchlari juda kichik masofalarda paydo bo'la boshlaydi va r ning qiymati kamayishi bilan juda tez oshadi. Molekulalar o'rtasidagi o'zaro ta'sirning to'liq energiyasi:

$$U = U_{tor} + U_{it} \quad (27)$$

bu yerda (24) va (26) tenglamalarga muvofiq:

$$U = - \frac{C}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}. \quad (28)$$

Bu tenglamaga Lennard-Jonson formulasi deyiladi. Ushbu bog'liqlik grafik jihatidan 4-rasmda keltirilgan egri chiziqlarga mos keladi.



4-rasm. Molekulalararo ta'sir potensial energiyasining egrilari

Yig'indi egridagi minimum molekulalararo o'zaro ta'sir energiyasi U_0 va molekulalar o'rtasidagi muvozanat masofasi r_0 ni xarakterlaydi.

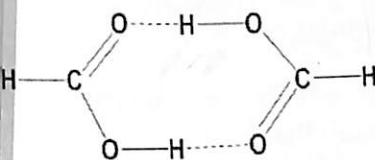
3.4. Vodorod bog'

Molekulyar va kimyoviy kuchlar o'rtasidagi oraliq bog'ga *vodorod bog'* deyiladi. Ba'zi hollarda vodorod atomi valentlikka javob berish kabi bitta atom bilan emas balki ikkita atom bilan bog'lanishi mumkin. Bu bog' vodorod atomidan elektronning siljishi natijasida uning muvozanat masofasi o'zgaradi. Bu bog' vodorod atomidan elektronning siljishi natijasida uning muvozanat masofasi o'zgaradi. Bu bog' vodorod atomidan elektronning siljishi natijasida uning muvozanat masofasi o'zgaradi. Bu bog' vodorod atomidan elektronning siljishi natijasida uning muvozanat masofasi o'zgaradi.

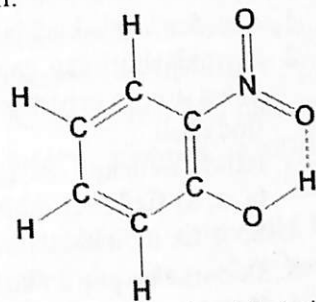
Vodorod bog'ining kuchi sherik atomning elektromanfiyligi qancha katta va uning o'lchami qancha kichik bo'lsa, shuncha kuchli bo'ladi.

ing uchun vodorod bog'i hammadan oldin fluor hamda kislorod, azot va past darajada xlor va oltinugurt birikmalari uchun xarakterli. Molekulalar o'rtasida vodorod bog'ining hosil bo'lishi sharofati bilan er va polimerlar hosil bo'ladi. Jumladan chumoli kislotasi ham suyuq, gazli fazada asosan dimer holida mavjud bo'ladi (5-rasm).

Suv, ammiak, spirtlar va boshqa ko'plab molekulalarning o'zaro ta'sirlanishiga bo'lgan qobiliyati assotsiatsiyalanmagan suyuqliklardan farq qiladi. Dimerning mustahkamligi (masalan, uglevodorodlardan farq qiladi. Dimerning mustahkamligi) "begona" molekulalardagi kislorod bilan har qaysi vodorod atomi o'rtasidagi hosil bo'lgan ikkita vodorod bog' bilan aniqlanadi. Vodorod bog'lar molekulalararo vodorod bog'ga kiradi. Shu bilan bir vaqtda vodorod bog' molekulaning bir qismini boshqasi bilan ta'sirlashtirishda uchraydi, ya'ni ichki molekulyar vodorod bog' kuzatiladi. Masalan, ortonitrofenol molekulasida shunday bog'ning tipik holati kuzatilgan bo'lib, unda vodorod bog' hisobiga ikkinchi halqa hosil bo'ladi. Bunday ichki molekulyar vodorod bog'ning hosil bo'lishi ko'plab organik birikmalar uchun xarakterli.

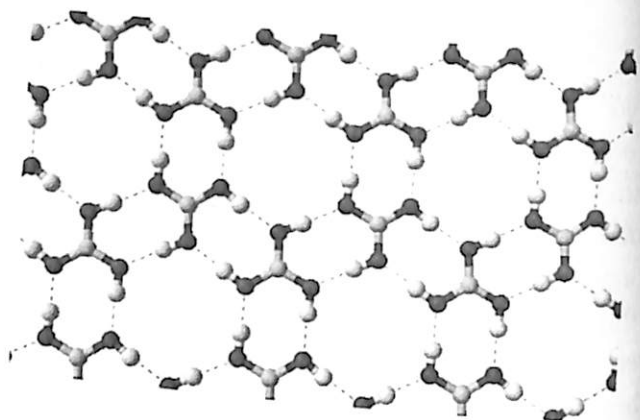


5-rasm. Chumoli kislota dimerining strukturasi



6-rasm. o-nitrofenol molekulasida ichki vodorod bog'

Vodorod bog' qator kristall moddalarning mustahkamligida katta ta'sir ko'rsatadi. Jumladan qattiq borat kislotasi bir-biri bilan vodorod bog' o'ynaydi. Jumladan qattiq borat kislotasi bir-biri bilan vodorod bog' hisobiga bog'langan $B(OH)_3$ molekula qavatlaridan tashkil topgan (7-rasm).



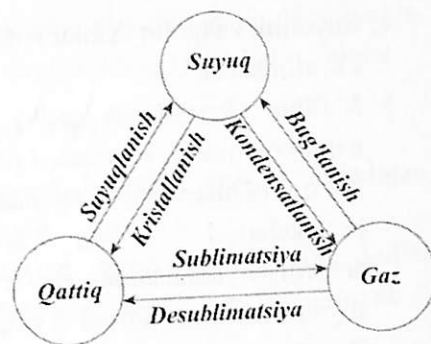
7-rasm. Ortaborat kislota yupqa qavatining strukturasi

Shunday qilib, vodorod bog'i kuchsiz kimyoviy o'zaro ta'viri kiradi. Odatda vodorod bog'ining energiyasi 10 dan 30 kJ/mol oraliqda yotadi.

Nazorat savollari

1. Van der Vaals kuchlari tabiatini izohlang.
2. Siyraklashtirilgan gazlardagi molekulararo ta'sirni dispersiya induksion va oriyentatsion ta'sirlarning additiv yig'indisi sifatida ifodalash.
3. Ichki molekulyar kovalentmas ta'sirlar va molekulararo ta'sirlar fizikaviy tabiatining umumiyliigi.
4. Spesifik molekulararo ta'sirlar.
5. Donor-akseptor ta'sirlar. π -komplekslar.
6. Ko'chuvchan zaryadli komplekslar.

IV. BOB ONDENSIRLANGAN AZALAR TUZILISHI



4.1. Suyuqliklar strukturasi

Qattiq moddalar qaralganda ularning qat'iy tartiblangan mukammal kristall strukturasi, gazlarni o'rganishda esa ideal gazda zarrachaning tartibsiz taqsimlanishi tayanch nuqta hisoblanadi. Suyuqliklar o'rganilganda ularning tuzilishi gaz va qattiq moddalar tuzilishi o'rtasida o'zgarib qaraladi. Gazlarga o'xshab suyuqliklar idish shaklini oladi, va ularda o'zgaruvchanlik kuzatiladi. Lekin suyuqliklar xossalari va tuzilishi bo'yicha qattiq moddalarga yaqin turadi. Bunday xulosaga ularning xossalari o'zgarish orqali erishiladi:

1. Erish jarayoni unchalik katta bo'lmagan hajmining oshishi bilan amalga oshadi, ba'zi moddalar, masalan, muzning erishi bundan mustasno. Odatda hajmning oshishi 10% dan oshmaydi. Bu erishda suyuqlikdagi qo'shni zarrachalar orasidagi masofa kamga (2% dan ko'p emas) o'zgarishini bildiradi. Suyuqlik gazga o'tganida esa hajm keskin o'zgaradi. Masalan, suv bug'ga o'tganida hajm 1000 martaga oshadi.
2. Jismning qattiq holatdan suyuqlikka o'tishida entropiya o'zgarishi bug'lanishda entropiya o'zgarishiga qaraganda juda kichik qiymatga (taxminan 10 martaga) oshadi.
3. Suyuqlik va qattiq jismlarning siqilish koeffitsiyentlari bir-biriga yaqin, gazlarnikiga qaraganda esa bir necha martaga kichik.

4. Suyuqlik va qattiq jismlar sirt tarangligiga ega, gazlarda es

5. Ma'lum sharoitlarda qattiq jismlar kabi suyuqliklar n
namoyon qiladi. Kinotasvirning qayd etishiga uchib borib
suv oqimi bilan to'qnashganda suv tomchi shaklida emas, hachalarning o'rtacha sonini ifodalaydi.
bo'lakchalari holida sochiladi. Suyuqlik ju Ko'pincha $R(r)$ funksiya o'miga atom zichligining radial
deformatsiyalanishidan mo'rt bo'lib qoladi. Masalan, Psimlanishi $\rho(r)$ ishlatiladi, ushbu bog'liqliklar bir-biri bilan quyidagi
suyuqlikda qisqa muddatli tirqish paydo bo'lishi mumkin. patda bog'langan:

Qattiq va suyuq holatlar xossalariining yaqinligi har ikkala
umumiy moddaning kondensirlangan holati termini bilan bir
imkonini beradi.

Suyuqliklarning turli xossalariini to'liq ifodalash uning eng
xarakteristikalarini ifodalovchi bazis funksiyalarga tayanish
Shunday funksiyalarga yaqin tartibni ifodalovchi taqsimlanishini
funksiyasi kiradi. Atomlardan tashkil topgan suyuqlikni q
Shunday suyuqlik ichidan istalgan zarrachaning yadrosi mark
ichki r va tashqisi radiusi $r+dr$ bo'lgan sharli qavatni qaraymiz. Q
tushuvchi atomlarning o'rtacha soni $dn(r)$ hajmiga $4\pi r^2$
atomlarning radial taqsimlanish funksiyasi deb ataladigan r ga
bo'lgan ko'paytuvchiga $R(r)$ proporsionaldir (ba'zi darsliklarda
funksiya $g(r)$ bilan belgilangan):

$$dn(r) = 4\pi r^2 dr R(r). \quad (1)$$

$R(r)$ funksiya ma'nosiga ko'ra koordinata boshida tan
istalgan atomga nisbatan zarracha sonining lokal zichligidir. Atom
masofaga nisbatan yetarli darajadagi katta masofada r atomlar ma
qismining ta'siri sezilmaydi va shuning uchun unga bog'liq bo'li
holda joylashadi. Ushbu holda:

va zarracha soni o'rtacha zichligini ifodalaydi. Atom diametridan
masofada r_0 sharli qavatga bitta ham atom tushmaydi, va shuning
bu yerda $R(r) = 0$. Oraliq sohada $R(r)$ funksiya R_0 qiymati at
oriyentirlanadi va bir nechta minimum va maksimumlarga
Zarrachaning markazi yaqinida ba'zi atomlararo masofa yaqqol nam

di. Suyuqlikda ushbu tartiblangan elementlarning mavjudligi "yaqin
nomini olgan. (1) tenglamadan quyidagi bog'liqlik kelib chiqadi:

$$\frac{dn(r)}{dr} = 4\pi r^2 R(r).$$

bu bog'liqlik shar qavati qalinligi birligiga to'g'ri keladigan
hachalarning o'rtacha sonini ifodalaydi.

Ko'pincha $R(r)$ funksiya o'miga atom zichligining radial
simlanishi $\rho(r)$ ishlatiladi, ushbu bog'liqliklar bir-biri bilan quyidagi
patda bog'langan:

$$g(r) = \frac{\rho(r)}{\rho_0}$$

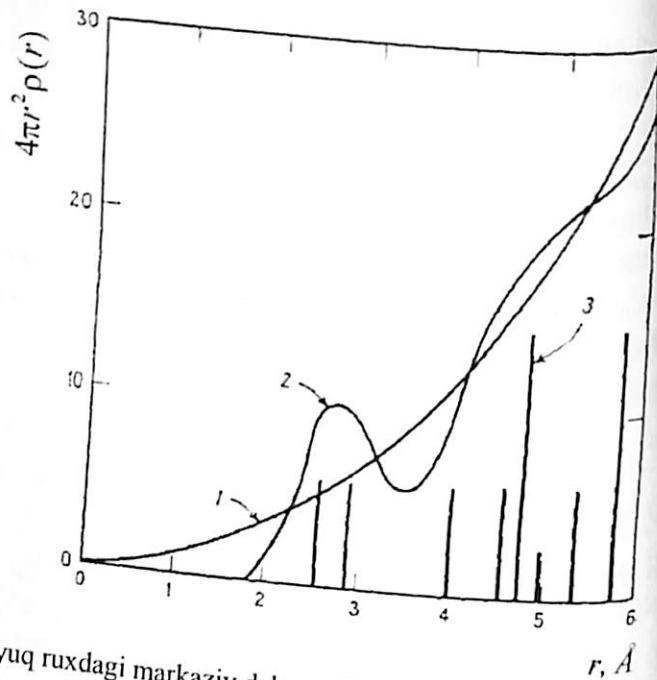
nda ρ_0 -hajm birligidagi zarrachalar soni ($\rho_0 = \frac{N_A}{V}$; N_A -
ogadro soni, V - atomli hajm).

$4\pi r^2 R(r)$ funksiyasining r ga (yoki $4\pi r^2 \rho(r)$ ning r ga)
liqligi grafik ko'rinishida beriladi. 1-rasmda suyuq rux uchun atomli
simlanish ifodalangan. Birinchi maksimumga mos keluvchi cho'qqi
aydoni suyuqlikda o'rtacha koordinatsion songa javob beradi. Radial
simlanish egri chizig'ini yasash uchun kerakli ma'lumotlar rentgen
ular sochilish intensivligi egrisidan olinadi.

4.2. Suyuq metallar

Toza suyuq metallar oddiy suyuqliklarga taaluqli bo'lib, o'zaro
van-der-Vaals kuchlari bilan qisilgan inert gazlardir. Oddiy suyuqliklar
yo'naltirilmagan va to'yinmagan kuchlar ta'sir etadigan sferik simmetrik
zarrachalardan tashkil topgan. Bunday suyuqliklarning molekulari
o'zaro ta'sirining sferik potensialini namoyon qiladi va ularda
gomeoqutbli yoki vodorod bog' holatlari kabi ma'lum yo'nalishda ta'sir
etuvchi o'ziga xos bog'lar aniqlanmaydi.

Toza suyuq metallarda zarrachalar o'rtasidagi bog' jamoalashgan
valent elektronlar bilan amalga oshadi. Bu bog' Van-der-Vaals bog'i kabi
yo'nalmagan va to'yinmagan. Suyuqlanmani tashkil etuvchi metall
ionlari sferik simmetrik, chunki inert gazlarning atom qobiqlari
strukturasiga o'xshab, tashqi elektron qobiq strukturasiga ega.



1-rasm. Suyuq ruxdagi markaziy deb nomlangan istalgan zarrachaning taqsimlanishi: 1-gaz; 2-suyuq; 3-qattiq

Qisilgan inert gazlar va suyuq metallar strukturalarning o'xshashligi metallarning suyuqlanish nuqtasiga nisbatan qizdirishlarda o'z tasdig'ini topishi mumkin. Unchalik yuqori bo'lgan qizdirilishlarda suyuq metallning strukturasi kristall holidagi strukturaga yaqin bo'ladi, shu bilan bir qatorda o'ziga xos bo'lgan xarakter namoyon qiladi.

Suyuq metallar strukturasi o'rganish uchun egilib sochilgan zarrachalar-rentgen fotonlari, elektronlar yoki neytronlardan foydalaniladi. Ularning barchasi atomlar o'rtasidagi masofa tartibidagi to'rtinchi uzunligiga ega. Tekshirishlarda namunaga ushbu zarrachalar konsentrlangan oqimi yo'naltiriladi, olinadigan difraksiyon manzara qayta etiladi. Uning asosida modda tuzilishi haqida xulosa chiqariladi. Suyuq metallarning struktur tahlilida rentgen nurlari eng ko'p qo'llaniladi.

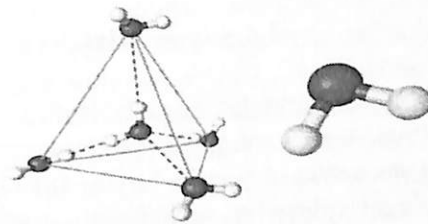
Suyuq metallarda bir atom sochgan rentgen nurlari yaqin qo'ltomonidan sochilgan nurlar bilan interferlanadi. Yaqin qo'shni va orasidagi masofa to'xtovsiz o'zgarib turganligi uchun suyuq kristal

nlari yuqori harakatchanlikni namoyon qiladi. Shuning uchun paydo adigan difraksiyon effekt atomlarning vaqt bo'yicha taqsimlanishi o'rtachasidir. Bunda o'rtacha taqsimlanish hisob boshlanishining anishidagi atomga bog'liq emas. Nurlanishning sochilish intensivligi si asosida atom zichligining radial taqsimlanishi hisoblanadi va ligi tuziladi.

Barcha metallar qattiq holda turli strukturaga ega bo'lishiga amasdan suyuq holda o'xshash tuzilishga ega bo'ladi, atom zichligini ial taqsimlanish $4\pi r^2 \rho(r)$ egrilari taxminan bir xil xarakterga ega ladi (1-rasm). Suyuq metallardagi birinchi koordinatsion sferaning liusi atomlar zich joylashgandagi atomlar o'rtasidagi masofaga teng. nda birinchi koordinatsion son 8-12 oralig'ida yotadi va yuqliklardagi o'zaro ta'sirning o'rtacha radiusi 3 ta atomlararo asofaga teng. Qattiq holda bir-biridan struktura va xossalari bo'yicha riq qiladigan turli metallar suyuq holatga o'tganida atomlar joylashish rakterining o'rtalashishi amalga oshadi va ular suyuqliklarining zilishlarida keskin farq kuzatilmaydi.

4.3. Suyuq suvning tuzilishi

Noorganik kimyo uchun suyuq jismlardan suv eng ko'p qiziqish uyg'otadi. Suv va muzning strukturasi hosil bo'lishida vodorod bog' muhim o'rin egallaydi. 2-rasmda muz strukturasi fragmenti o'rsatilgan.



2-rasm. Muz strukturasi suv molekularining o'rab olinishi. Ushbu strukturada har qaysi kislorod atomi boshqa to'rtta atom bilan tetraedrik bog'langan, ular o'rtasida vodorod atomlari joylashgan; ulardan ikkitasi berilgan kislorod atomi bilan qutbli kovalent bog'lanish orqali.

Ikkita boshqasi esa vodorod bog'i orqali bog'langan, ya'ni 2 ta suv molekulasini tarkibiga kiradi. Zich joylashishdan holi o'laroq tuzilishli struktura yaratiladi. Bundan unchalik katta bo'lmagan zarrachalarning muzning maydalanuvchanligi namoyon bo'ladi. Muz eritilganda zarrachalarning bog'ning bir qismi uziladi (uzilish taxminan 10 % ga); bu zarrachalarning molekularini bir-biriga yaqinlashtiradi, shuning uchun ham suvning qaraganda zichroq. Suvning isitilishi bir tomondan uning kengayishi, ya'ni hajmning ortishiga, ikkinchi tomondan esa vodorod bog'ining uzilishini davom etishiga va natijada struktura hajmining kamayishi olib keladi. Natijada suvning zichligi maksimum orqali (4°C da) o'zgaradi.

D. Bernal va U. Faullerlar ilk bora suvni har tomonlama rentgenstruktur tekshirishlarini o'tkazib, suvda muz strukturasini bo'laklari-"kristall orolchalar" qolishini aniqlashgan. Suyuq suvning molekularining katta qismida xuddi muz strukturasidagidek tartibli strukturalar o'rovi saqlanadi.

Suv molekulasida kristall strukturalarning mavjudligi bir qator dipol momentining katta qiymati suvda namoyon bo'ladi. o'tkazuvchanligini (25°C da 79,5 ga teng) juda yuqori qiymatga ega bo'lib, isbotlaydi. Shunday qilib, suvli muhitda zaryadlangan zarrachalarning o'rtasidagi o'zaro ta'sirlar bo'shliqdagiga qaraganda taxminan 80% kuchsiz. Shuning uchun ham barcha ionli birikmalar suvli eritmada dissotsiatsiyalanadi. Dielektrik o'tkazuvchanligi kichik bo'lgan birikmalar erituvchilardan farqli o'laroq suvli muhitda dissotsiatsiyalanishga to'liq bo'ladi. Suvli eritmalarda ko'plab qutbli bog'langan molekullar ham ionlarga dissotsiatsiyalanadi.

4.4. Suyuq kristallar

Ma'lumki, ko'pgina moddalar suyuq holatda bo'lganda anizotrop bo'lib, ya'ni xossaning yo'nalishga bog'liqlik xossasini namoyon qiladi. Bunday moddalarga **suyuq kristallar** deyiladi. Suyuq kristallarning o'ziga xos strukturalari ularni hosil qilgan zarrachalarini oriyentatsiyani saqlash holida bir-biriga nisbatan siljishi natijasida namoyon bo'ladi.

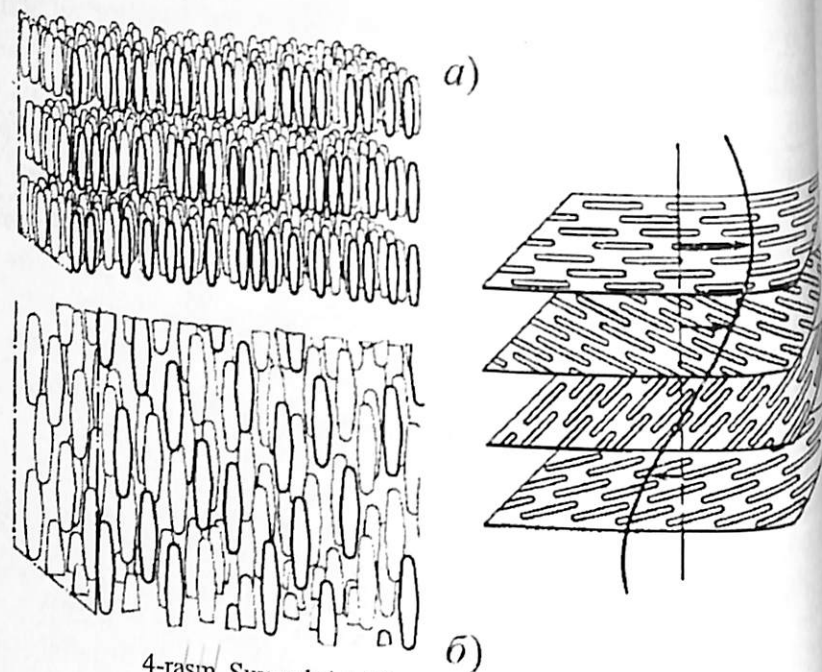
Suyuq kristallarning molekulari uzaytirilgan chiziqli shaklga ega bo'lib, ular suyuq holatda uzoq tartibni saqlaydi (3- va 4-rasmlar).



3-rasm. Suyuq kristallarning turli tiplari:
a-nematik (ipsimon), b-smektik

Zarrachalar shunday joylashadiki, ularning oriyentatsiya o'qi bir yo'nalishdagi ipsimon yoki parallel qavatlarida joylashgan bo'lib, ular o'rtasida zarrachalar harakati tartiblangan. Suyuq kristallarning birinchi tiptagi nematik yoki ipsimon (nomlanish grekcha "igna" yoki "ignasimon kristallar" so'zidan kelib chiqqan, 3a-rasm), ikkinchisi-smektik (nomlanish grekcha "sovunli", chunki ular birinchi marta sovun ichida aniqlangan, 3b-rasm) deyiladi. Xolesterik suyuq kristallar (birinchi marta xolesterinning o'zi suyuq kristall bo'lmagan holda xolesterin hosilalari ichida topilgan). Bunday tipdagi birikmalar optik va termafaol. Suyuq kristall holat masalan, xolesterin atsetat suvda eritilishida kaliy va ammoniy oleatlar, hamda qoidaga ko'ra molekulasini ipsimon strukturaga ega bo'lgan organik tabiatdagi boshqa moddalarning suvda eritilishidan hosil bo'ladi. Ba'zi kristall holidagi moddalarning (liotropik suyuq kristallar) erishidan ham suyuq kristall holat paydo bo'lishi mumkin.

Ko'pgina suyuq kristallar ma'lum temperatura oralig'ida (termotropik): ma'lum temperaturadan pastida qattiq kristall, yuqorisida izotrop suyuqlik holida mavjud bo'ladi. Molekulyar tartiblilik darajasi bo'yicha suyuq kristallar suyuqlik va kristallar o'rtasidagi oraliqdir. Suyuq kristallarning xossalari: optik faol, ikkilamchi nurni sindirishi, temperatura, tashqi elektr va magnit maydoni, mexanik kuchlanish ta'sirida ko'pincha rangini tez o'zgarishi bilan o'zgaradi. Suyuq kristallar rangli displeylarda, termometrlar, harf-sonli indikatorlar va informatsiyani yozuvchi va saqlovchi qurilmalarda juda keng qo'llaniladi.

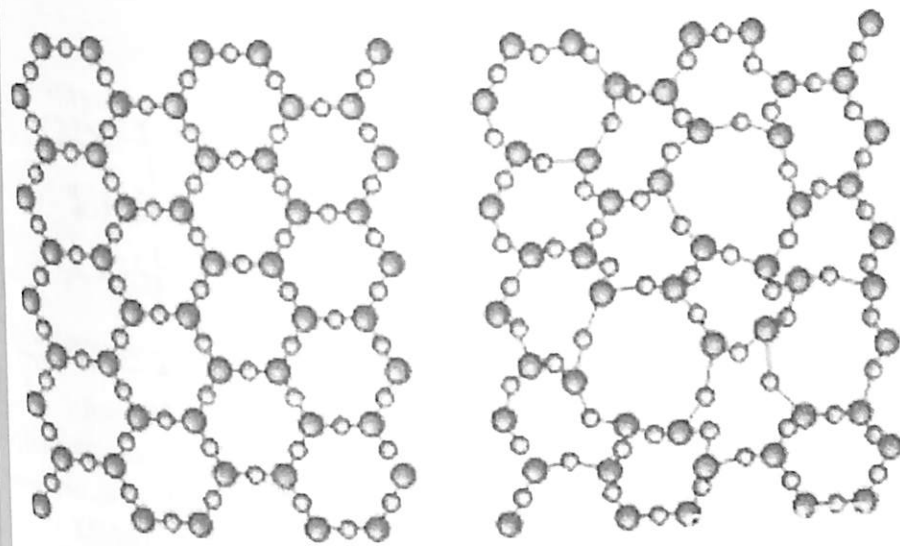


4-rasm. Suyuq kristallik holatlarning struktura tiplari:
a-smektik, b-nematik, s-xolesterik

4.5. Amorf holat

Amorf moddalar makroskopik belgilari bo'yicha qattiq moddalarga taalluqli, lekin kristall panjaraga ega emas (5-rasm).

Ushbu moddalarning farqli tomoni shundan iboratki, ular izotrop xossasini, ya'ni suyuqliklarga o'xshab, modda ichki yo'nalish bo'yicha o'zgarishda berilgan xossalarning bir xil qiymatlarni namoyon qiladi. Strukturasi bo'yicha amorf holati suyuqlikka (ya'ni, yaqin tartibga ega issiqlik harakatining xarakteriga ko'ra kristallga ekvivalent, zarrachalar muvozanatdagi holat atrofida tebranadi, lekin suyuqliklardagi kristall atomlar va molekularning uzluksiz siljishi kuzatilmaydi.

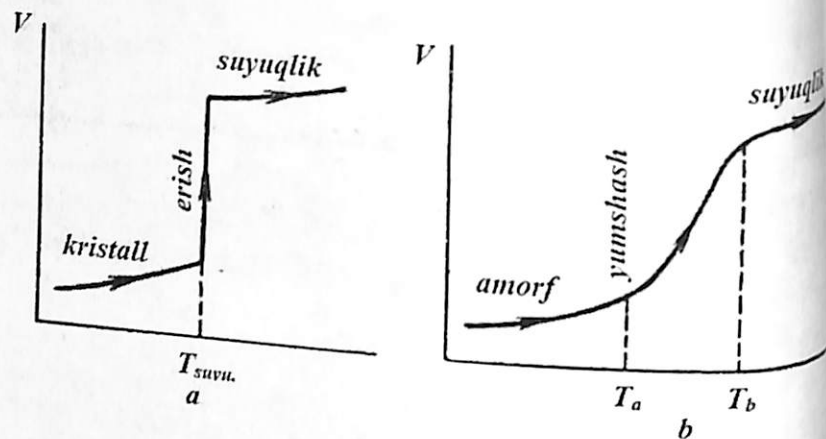


5-rasm. Kristall (a) va amorf (b) holdagi moddalar tuzilishi

Amorf moddaning qattiq holatdan suyuqlikka o'tishi xossaning sakrab o'zgarishi bilan amalga oshmaydi. Agar kristall modda xossasining sakrab o'zgarishi uning suyuqlanish temperaturasi ($T_{suyuq.}$) bilan xarakterlansa, amorf moddada esa yumshash intervali (T_a-T_v) va xossaning uzluksiz o'zgarishi bilan xarakterlanadi. (6a-rasm). Ushbu interval moddaning tabiatiga bog'liq holda o'nlab va yuzlab graduslarni tashkil etish mumkin (6b-rasm).

Ko'pgina hollarda amorf va kristall shakllar-bu bitta moddaning turli holatlaridir (masalan, kristall kvars va kvars shisha). Lekin ko'pgina amorf moddalar jumladan ko'plab organik polimerlar kristallanishga ulgurmaydi. Polimerlar odatiy amorf jismlardan shu bilan farq qiladiki ular mos holdagi suyuqliklardan (monomerlardan) temperaturaning pasayishi natijasida emas, balki molekulaning kimyoviy birikmasidan hosil bo'ladi.

Suyuqliklardan farqli o'laroq, amorf moddalarda qo'shni zarrachalarning o'rin almashinishi amalga oshmaydi. Suyuqlanmalarining yuqori qovushqoqligi molekulaning harakatini va qayta oriyentlanishini og'irlashtiradi. Bu esa qattiq faza zarrachalarining hosil bo'lishiga qarshilik qiladi.



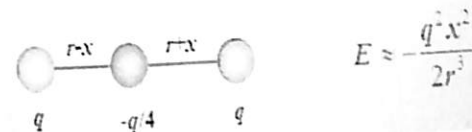
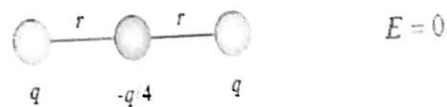
6-rasm. Qizdirishda kristall (a) va amorf (b) moddalar hajmining o'zgarishi

Shuning uchun suyuqliklarning (suyuqlanmalar) tez sovutilishi ular kristall holda emas, balki amorf holda qotadi. Silikatli shisha amorf jism bo'lgani uchun ko'pincha amorf holat shisha hosil bo'lishi ham deyiladi. Agar katta tezlikda sovutilsa kristallanuvchi suyuqlik ham amorf qotishi mumkin. Bundan holatda keyin sovutilishi suyuqlikning qovushqoqligi qisqa vaqt oralig'ida $\sim 10^{12}$ Pa ga yetadi shuning uchun u suyuqdan amorf holatga o'tadi. Sovutish tezligi 10^6 K/s va undan yuqori tezliklarda ba'zi metallar (Ni, Pd) va ko'pgina metallarning qotishmalarini (Mn, Fe, Co, Ni va h.z.) metalloidlari (B, C, P) bilan amorf holatda olish mumkin.

Nazorat savollari

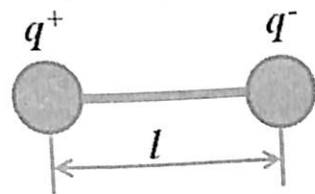
1. Moddalarning qattiq, suyuq, bug' (gaz) holatlari, ularning mavjud bo'lish shart-sharoitlari va o'ziga xos xususiyatlari.
2. Bug' va gaz holatlari o'rtasidagi farq.
3. Kritik temperatura va kritik parametrlar.
4. Moddalarning plazma holati va plazmalarning xillari.
5. Moddalarning kristall va amorf holatlardagi o'ziga xos xususiyatlari.
6. Kristallanishning shart-sharoitlari.
7. Kristallarda uzoq tartibning mavjudligi.
8. Suyuq kristallar to'g'risida tushuncha.

V. BOB MOLEKULANING ELEKTRIK XOSSALARI



Molekula qutblanishida molekulaning bir qismida musbat, ikkinchi qismida manfiy zaryad ustun bo'ladi. Bunday molekula **qutblangan molekula** deyiladi va dipol qiymatga ega.

Miqdoriy jihatdan teng va bir-biridan ma'lum masofada turgan qarama-qarshi ("+" va "-") elektr zaryadlaridan iborat sistema dipol (qutbli) sistema deyiladi. Dipolda "+" va "-" zaryadlar markazi bir-biridan ma'lum masofada joylashadi (1-rasm).



1-rasm. Qutblangan molekula modeli

Zaryad miqdorining ular orasidagi masofaga ko'paytmasiga **dipol momenti** deyiladi:

$$\mu = q \cdot l, \quad (1)$$

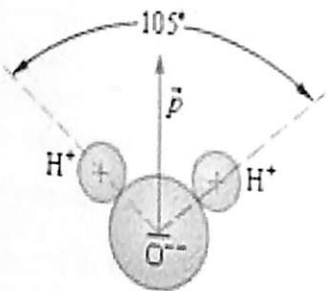
bunda μ -dipol momenti, l -zaryadlar orasidagi masofa, q -samarali zaryad miqdori.

Molekulaning qutbliligi uning dipol momenti qiymati bilan o'lchanadi. Molekuladagi atomlar yadrolari o'rtasidagi masofa taxminan 10^{-10} m (yoki 10^{-8} sm), elektron zaryad qiymati esa $1,6 \cdot 10^{-19}$ Kl ga teng. U holda dipol momenti:

$$\mu = q \cdot l = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ kl} \cdot 10^{-10} \text{ m} = 1,6 \cdot 10^{-29} \text{ kl} \cdot \text{m}.$$

Xalqaro o'lchov birliklari sistemasida (D-Debay):

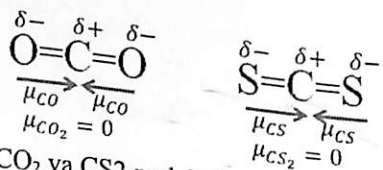
$1D = 10^{-18} \text{ el} \cdot \text{st} = 3,33 \cdot 10^{-30} \text{ Kl} \cdot \text{m} = 333,2 \text{ J}$.
 Masalan, H_2O uchun (2-rasm) $\mu = 1,84 \cdot 10^{-18} \text{ el} \cdot \text{st}$, yoki $1,84 \text{ D}$



2-rasm. Suvning qutblangan molekulasasi

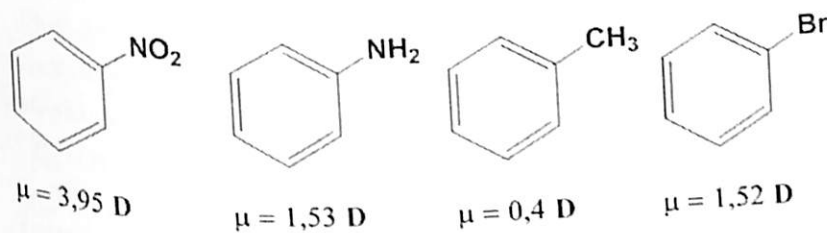
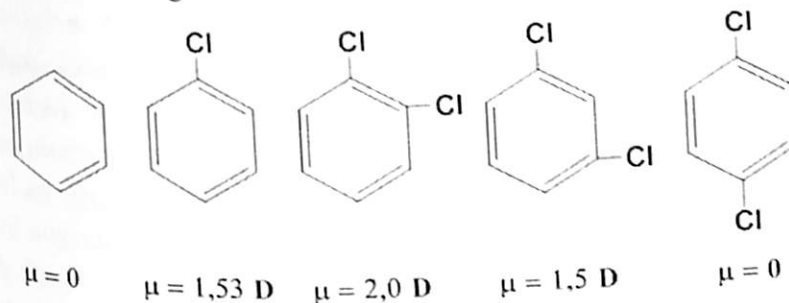
Dipol momenti vektor kattalik bo'lib, shartli ravishda manfiy zaryaddan manfiy zaryadga tomon yo'nalgan deb qabul qilingan. Agar $\mu > 0$ bo'lsa, molekula qutblangan yoki dipollashgan deyiladi. Shuni alohida ta'kidlash joizki, qutbli bog'i bo'lgan har qanday molekula qutblangan bo'lavermaydi. Bunda molekulaning simmetriyasi e'tibor olinishi kerak. Masalan ba'zi molekulalarda (H_2 , O_2 , N_2) $\mu = 0$ bo'lib, turli atomlardan tashkil topgan molekulalarda $\mu > 0$ bo'lib, uning qiymati atomlarning elektromanfiylik qiymatlari orasidagi farqga bogliq (masalan, HCl , HF , HJ).

Ko'p atomli molekulalarda qutbli bog'lanish bo'lgani bilan molekulada simmetriya kuzatilsa, u holda molekula qutbli bo'lmaydi. Masalan, CO_2 va CS_2 molekulalarida $\text{C}=\text{O}$ va $\text{C}=\text{S}$ bog'lari qutbli bo'lishiga qaramasdan molekulalar qutbsizdir. Chunki molekulalarning dipol momentining yo'nalishlari qarama qarshi bo'lganli va simmetriya kuzatilganligi uchun ularda $\mu = 0$ ga teng bo'ladi (3-rasm).

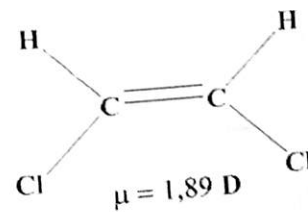
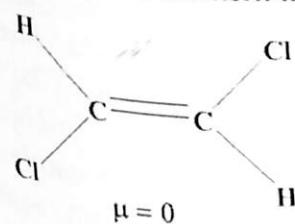


3-rasm. CO_2 va CS_2 molekulalarining dipol momenti

Agar molekulaga boshqa atom yoki atomlar gruppasi (radikallar) kiritilib, uning simmetriyasi buzilsa, unda molekula qutbliligi assimetriya darajasiga qarab o'zgaradi. Masalan:



Sis-va trans-izomerli molekulalarda:



Trans-dixloretilen

Tsis-dixloretilen

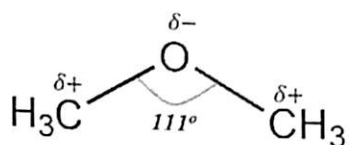
Molekulalarning (dipollarning) shunday joylashishida sistema barqaror, ya'ni muvozanat holatda bo'lib, dipollararo bog'lanishlar vujudga keladi. Bunday bog'lanishlarda sistemaning potensial energiyalari kamayadi. Agar sistemada ion va qutbli molekulalar mavjud bo'lsa, ular orasida ion-dipol bog'lanish vujudga keladi.

Umuman olganda molekulalarning dipol mometi qiymatlari 0 dan $36,6 \cdot 10^{-30} \text{ Kl} \cdot \text{m}$ gacha oraliqda o'zgaradi.

Dipol momenti vektor kattalik bo'lib, molekuladi har bir bog'ning dipol momenti aniqlansa, vektor kattaliklarini qo'shish yoki ayirish

amallaridan foydalanib molekulaning umumiy dipol momentini aniqlash mumkin. Masalan, OH⁻ (1,58 D), CN⁻ (3,49 D); NH⁻² (1,66), CO (2,7 D).

Dipol momentini o'lchash orqali molekulaning o'lchamini, burchaklari, zaryadning molekula ichida taqsimlanishini aniqlash mumkin. Dipol momentini o'lchash orqali molekulaning o'lchamini, burchaklari, zaryadning molekula ichida taqsimlanishini aniqlash mumkin. Masalan, dimetil efir molekulasida (CH₃-O-CH₃) CH₃ va O guruhlari ma'lum burchak ostida joylashgan (4-rasm). Ushbu molekula uchun aniqlangan dipol momentining qiymati $\mu=1,3$ D ga teng. Agar molekula uchun aniqlangan dipol momentining qiymati $\mu=0$ bo'lsa, molekula uchun aniqlangan dipol momentining qiymati $\mu=0$ bo'lar edi. Hisoblashlar natijasida aniqlangan dipol momentining qiymati 111° ga teng. Demak, dimetilefiri (CH₃)₂O molekulasida dipol momentining qiymati 111° ga teng. Demak, dimetilefiri (CH₃)₂O molekulasida dipol momentining qiymati 111° ga teng.



4-rasm. Dimetil efiri molekulasining tuzilishi

Moddalarning elektromagnit xossalari ulardagi elektronlarning "xatti-harakati"ga bog'liq. Atom yoki molekula (statik yoki dinamik) elektr maydoniga kiritilsa, yo'naltirilgan dipol momenti hosil bo'ladi. Elektromagnit maydonga qutblanmagan modda kiritilsa, u qutblanmagan qutblangan modda kiritilsa qutbliligi ortadi. Bu hodisaga qutblanish deyiladi. Maydon ta'sirida vujudga kelgan dipolga induksiyalangan dipol deb ataladi. Molekulaning qutblanishi maydonning kuchlanishiga proporsional:

$$P = a \cdot E, \quad (2)$$

Bunda P -induksiyalangan dipol momenti, a -qutblanuvchanlik koeffitsiyenti; E -elektromagnit maydon kuchlanishi.

(2) formuladan:

$$a = \frac{P}{E} = \frac{e \cdot l}{l^2} = l^3 [m^3, dm^3, sm^3].$$

Klauzius-Mosotte dielektriklarning o'zgarmas elektromagnit maydon qutblanishi o'rganib, quyidagi tenglamani keltirib chiqarishdi:

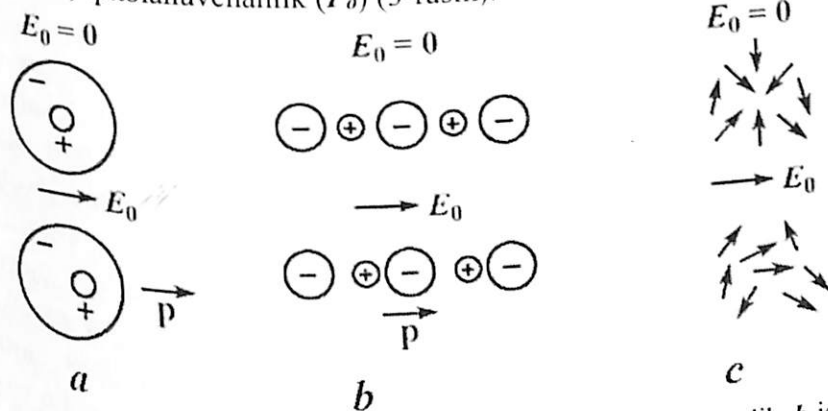
$$P = \frac{D - 1}{D + 2} \cdot \frac{M}{\rho}, \quad (3)$$

bunda P -molekulaning induksiyalangan qutblanishi; D -dielektrik o'tkazuvchanlik, M -moddaning molekulyar massasi, ρ -modda zichligi. Molekula tuzilishi shar shaklida deb olinib, uning hajmi $4/3\pi r^3$ formula bo'yicha hisoblanishi inobatga olinsa va 1 mol modda uchun (3) tenglama quyidagi ko'rinishni oladi:

$$P = \frac{D - 1}{D + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_0 a, \quad (4)$$

bunda N_0 -Avogadro soni; $\pi=3,14$.

Qutblanuvchanlik 3 xil bo'ladi: elektronli qutblanuvchanlik (P_e), ionli (atom yoki yadro) qutblanuvchanlik (P_i) va oriyentatsion (mos joylashish) qutblanuvchanlik (P_o) (3-rasm).



3-rasm. Qutblanuvchanlik turlari: a -elektronli qutblanuvchanlik, b -ionli qutblanuvchanlik, c -oriyentatsion qutblanuvchanlik

Umumiy qutblanuvchanlik qutblanuvchanliklar yig'indisiga teng, ya'ni:

$$P_{um.} = P_e + P_i + P_o. \quad (5)$$

P_e -elektronli qutblanuvchanlik elektronlarning elektromagnit maydoni musbat qutbi tomon siljishini ifodalaydi. Kimyoviy bog' hosil bo'lishida ishtirok etgan elektronlar qutblanganda, bog' ham qutblanadi. π bog' σ bog'iga nisbatan kuchliroq qutblanadi. Elektron qancha bo'sh bog'langan bo'lsa, u shuncha ko'p siljiydi, ya'ni ko'p qutblanadi.

Elektronlar yadrodan uzoqlashsa, qutblanish darajasi *Shuning uchun ham tashqi qobiq elektronlarining qutblanish darajasi* yuqori bo'ladi. $n=1$ bo'lgan (yoki 2,3) bir xil bo'lgan s va p elektronlar bo'lganda p elektronlar s elektronlarga nisbatan oson qutblanadi.

Ionli (atom yoki yadro) qutblanishda atom yadrosi elektron maydonida manfiy qutb tomon siljiydi. Ionli qutblanish faqat molekulyar murakkab ionlarda sodir bo'ladi.

Molekulaning qarama-qarshi zaryadlangan atomlari bir-biriga nisbatan siljib, ular orasidagi masofa ortadi, qutblanmagan molekulyar qutblangan holatga aylanadi. Atom yadrosi elektrondan og'ir bo'lgan molekulyar uchun atom qutblanishining darajasi elektron qutblanishga nisbatan past bo'ladi. Ionli va elektronli qutblanish birgalikda deformatsion ta'sirida bo'lganligi uchun, deformatsion qutblanish deb ham yuritiladi. ya'ni:

$$P_D = P_e + P_a. \quad (6)$$

Oriyentatsion qutblanish (mos joylashish) elektromagnit maydon ta'sirida faqat qutbli molekullarda sodir bo'ladi. Qutbli molekullarda qutblanishi, qutblanmagan molekulaning qutblanishidan farq qutblanishi, qutblanmagan molekulaning qutblanish kuzatiladi. Tabiiy dipoli bo'lgan molekullarda oriyentatsion qutblanish kuzatiladi. Bular ionli, elektronli qutblanish kuzatiladi. Oriyentatsion qutblanish natijasida molekulaning dipollari maydon (qutblangan) molekullarda oriyentatsion qutblanish kuzatiladi. Oriyentatsion qutblanish natijasida molekulaning dipollari maydon kuchlanganligi yo'nalishiga nisbatan parallel joylashadi va molekulyar minimum potensial energiyaga ega bo'ladi. Ta'kidlash jozib qutblanmagan molekullarning qutblanish temperatura o'zgarishi bilan Lekin qutblangan molekullarda qutblanish temperatura o'zgarishi bilan o'zgaradi, ya'ni temperaturaning ko'tarilishi molekulaning qutblanish darajasi kamaytiradi. Oriyentatsion qutblanishni quyidagi tenglama yordamida ifodalash mumkin:

$$P_0 = \frac{4}{9} \cdot \frac{\pi N_A}{RT} \cdot \mu^2, \quad (7)$$

bunda μ -tug'ma dipol momenti; R -Bolsman konstantasi, T -temperatura.

K. Yuqorida ta'kidlaganidek, umumiy qutblanish deformatsion oriyentatsion qutblanishlar yig'indisiga teng, ya'ni

$$P = P_0 + P_D. \quad (8)$$

Qutblangan molekullar uchun Klauzius-Mosotte tenglamasi:

$$P = \frac{D-1}{D+2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A \left(a + \frac{\mu^2}{3RT} \right) = \frac{4}{3} \pi N_A \cdot a + \frac{4}{9} \pi N_A \cdot \frac{\mu^2}{3RT}. \quad (9)$$

(9) tenglamaga Debay tenglamasi deyiladi.

Dielektriklar uchun esa quyidagi ko'rinishga ega:

$$P = \frac{D-1}{D+2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A a \quad (10)$$

Yuqorida qayd etilganlar statik elektr maydonida sodir bo'ladigan hodisalardir. Molekulaning holatiga o'zgaruvchan elektromagnit maydoni ham ta'sir ko'rsatadi. Bunday maydon sifatida yorug'lik nuri ta'sirini misol sifatida keltirish mumkin. Elektromagnit maydon nazariyasiga muvofiq nurning to'lqin uzunligi juda katta bo'lganda:

$$n = \sqrt{D} \text{ yoki } n^2 = D, \quad (11)$$

bunda n -nurning sindirish ko'rsatkichi; D -dielektrik o'tkazuvchanlik.

D ning qiymati Klauzius-Mosotte tenglamasiga qo'yilsa, u holda:

$$R = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A a, \quad (12)$$

bunda R -refraksiya deb ataladi.

Bu tenglamaga Lorens-Lorents tenglamasi deyiladi.

Demak $n^2 = D$ bo'lganda, $P = R$ bo'lishi kerak. Bu tenglama tabiiy dipoli bo'lmagan moddalarga xos. Dipollangan molekullar uchun $D > n^2$ va mos ravishda $P > R$ bo'ladi. Umuman olganda, refraksiya faqat elektronli qutblanishiga teng bo'lib qoladi, ya'ni: $R = P_{el}$.

Molekulyar refraksiya molekuladagi barcha elektronlarning qutblanishini ko'rsatadi. Bu holatda ham R qiymati temperatura va bosimga bog'liq emas.

Demak R moddani xarakterlovchi eng ahamiyatli fizik konstantalarning biri bo'lib, additivlik xossasini nomoyon etadi. Additivlikka ko'ra molekulyar refraksiya shu molekulaning tashkil etuvchi atomlar va tarkibiy qismlari (bog'lar, halqalar) refraksiyalar yig'indisiga teng. Masalan:

CH_4 uchun

$$R_{CH_4} = R_C + 4R_H = 4R_C - H.$$

C_5H_{12} uchun

$$R_{C_5H_{12}} = 4R_{C-S} + 12R_{C-H}$$

Masalan, C-C bog' uchun $R_{C-C}=1,204$; $R_{C-H}=1,654$; $R_{C=C}=4,785$; $R_{O-H}=1,849$ ga teng.

$R_{C_6H_{12}} = 6R_{C-S} + 12R_{C-H} = 6 \cdot 1,204 + 12 \cdot 1,654 = 27,072$ ning amalda o'lachab topilgan qiymati hisoblangan qiymatdan qilib 27,093 ga teng. Bu chetlanish o'lchash amaliyotining (sistematik xatoni) ifodalaydi.

Molekulalar refraksiyasi asosan kimyoviy bog'lar hosil bo'lish ishtirok etuvchi elektronlar tufayli namoyon bo'ladi. Ion qutblantirish va qutblanuvchanlik xususiyati mavjud. Bu xususiyat ionlarning o'lchami, zaryadi va tabiatiga bog'liq. Kation qutblantirish xususiyati kuchli bo'lib, qutblanuvchanlik kuchsiz bo'ladi. (Davriy sistemada bu xususiyat yuqoridan pastga qarab o'zgaradi). Qutblantirish xususiyati anionlarda kuchsiz bo'lib, qutblantirish kuchli bo'ladi. Chunki ularda ion radiusi katta bo'ladi, kationlarda aksincha kichik bo'ladi.

Amaliyotda **solishtirma refraksiya** qiymati o'lchanadi. **Solishtirma refraksiya** bu berilgan modda uchun xarakterli bo'lgan doimiy koeffitsiyent (r) ga aytiladi:

$$f(n) = r \cdot d \quad r = \frac{n}{d} \quad (13)$$

bunda n —sindirish ko'rsatkichi, d —solishtirma og'irlik (zichlik).

Solishtirma refraksiyaning modda molekulyar massasi ko'paytmasi molekulyar refraksiyani beradi:

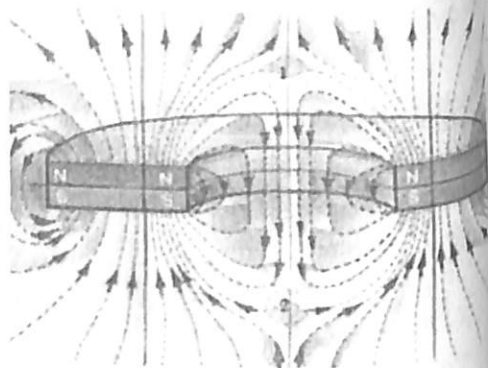
$$R = r \cdot M \quad (14)$$

Refraksiya ko'rsatkichining qiymati temperatura, bosim moddaning agregat holatiga bog'liq emas.

Nazorat savollari

1. Molekulalarning elektr xususiyatlarini izohlang.
2. Elektr dipol momentining paydo bo'lishini klassik mexanika asosida tushuntiring.
3. Qutbsiz va qutbli molekulalarning simmetriyasini izohlang.
4. Dipol moment iva qutblanuvchanlik turlariga izoh bering.
5. Dipol momentining temperaturaga bog'liqligiga izoh bering.
6. Kimyoviy bog'lar va strukturaviy guruhlarning parsial dipol momentlari.
7. Refraksiya va solishtirma refraksiya deb nimaga aytiladi?
8. Refraksiyani additiv sxema bo'yicha hisoblash deganda nimani tushunasiz.
9. Klauzius-Mosotte tenglamasini yozing.
10. Lorens-Lorents va Debay tenglamalarini yozing.

VI. BOB MODDANING MAGNIT XOSSALARI



Magnetokimyo–kimyo bo‘limi bo‘lib, moddaning magnit xossasi va uning molekula tuzilishi bilan bog‘liqligini o‘rganadi. Fan sifatida asrning boshlarida, magnetizmning qonunlari kashf qilinadigan shakllana boshladi.

6.1. Moddalarning magnit xossalari

Magnetizm–materiyaning fundamental xossasidir. Qadimgi doimiy magnit xossali, ya‘ni temir buyumlarni o‘ziga tortish qobiliyati ega bo‘lgan moddalar ma‘lum bo‘lgan.

Kuchli magnit maydoni hosil qilish qobiliyati neytron yulduzlar va kuchliroq maydonga ega bo‘lgan elektromagnitlarni yaratish mumkin. Lekin, magnit maydoni bilan nafaqat doimiy magnetiklar balki boshqa moddalar ham ta‘sir o‘tkazadi. Magnit maydoni modda bilan ta‘sir o‘zining qiymatini vakuumdagiga nisbatan o‘zgartiradi (SI sistemasi).

$$B = \mu\mu_0 H. \quad (1)$$

bunda μ_0 –magnit doimiysi (uning qiymati $4\pi \cdot 10^{-7}$ Gn/m), μ –moddaning magnit o‘tkazuvchanligi, B–magnet induksiyasi (Tl. da), H–magnet maydoni kuchlanganligi (A/m).

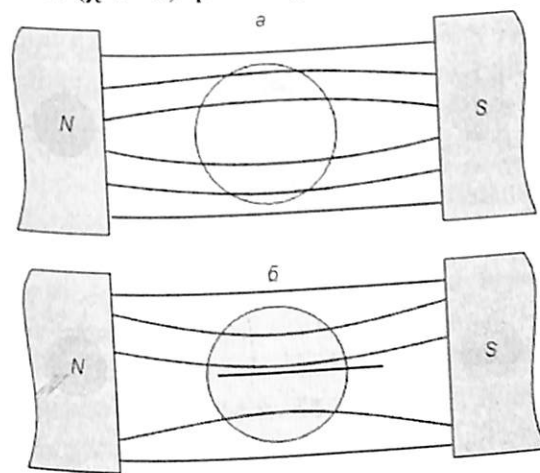
Aksariyat moddalar uchun μ ning qiymati birga yaqin, shuning uchun magnetokimyoda molekula asosiy ob‘yekt bo‘lganligi uchun qiymatidan foydalanish maqsadga muvofiq bo‘lib, u quyidagi tenglamalar orqali aniqlanadi:

$$\chi = \frac{\mu - 1}{4\pi}, \quad (2)$$

χ –magnit qabul qiluvchanlikni ifodalaydi.

χ ni hajm, massa yoki miqdorga nisbatan olish mumkin, u holda mos ravishda hajmiy (o‘lchovsiz) χ_v , solishtirma χ_d (sm^3/g) yoki molyar χ_m (sm^3/mol) magnit qabul qiluvchanlik deyiladi.

(2) formulaga muvofiq vakuumda χ sm nolga teng. χ qiymatiga ko‘ra moddalarni ikki guruhga ajratish mumkin: magnit maydonini kuchaytiruvchilar ($\chi < 0$)–diamagnetiklar, magnit maydonini kuchaytiruvchilar esa ($\chi > 0$)–paramagnetiklar deyiladi (1-rasm).



1-rasm. Turli moddalarning magnit maydonida o‘zini tutishi:
a–diamagnetiklar, b–paramagnetiklar

Tasavvur qilish mumkinki, bunda bir jinsli bo‘lmagan magnit maydonida diamagnetikka uni maydondan itaruvchi kuch ta‘sir etadi. Paramagnetikka esa aksincha, maydonga tortuvchi kuch ta‘sir etadi. Diamagnetiklar, ular aksariyat organik va yuqori molekulyar birikmalar. Paramagnetiklar esa magnetokimyoning asosiy ob‘yektlari hisoblanadi. Diamagnetizm–materiyaning asosiy xossasi bo‘lib, magnit maydoni ta‘sirida elektron qobiqchalardagi to‘ldirilgan elektronlar presessirlanadi. Ma‘lumki, elektr zaryadining har qanday harakati magnit maydonini vujudga keltiradi. Lens qoidasiga muvofiq maydon yo‘nalishi tashqi maydon ta‘sirini kamaytirishga qaratilgan bo‘ladi. Elektronni

(presessirni) aylanma nuqtalar shaklida tasavvur qilish mumkin. Diamagnetizm vodoroddan tashqari barcha moddalarga xos, chunki ularda juftlashgan elektronlar va to'ldirilgan elektron qobiqlar mavjud. Paramagnetizm hodisasi juftlashmagan, ya'ni toq elektronlar mavjud bilan izohlanadi, chunki ularda xususiy magnit (spin) momentlari barqarorlashmagan, juft elektronlarda esa spinlar qarama-qarshi yo'nalganligi uchun ular bir-birini barqarorlashtirgan bo'ladi. Magnit maydonida spinlar maydon yo'nalishi bo'ylab joylashishga intiladi (kuchaytirgan holda). Bu tartib issiqlik harakati tufayli buzilishi mumkin. Shu bois paramagnit qabul qiluvchanlik temperatura-ga bog'liq bo'ladi. Oddiy holatda temperatura qancha past bo'lsa, shuncha χ_m yuqori bo'ladi. Oddiy holat uchun bu qonuniyat Kyuri tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad (3)$$

bunda C-Kyuri konstantasi.

Kyuri-Veys qonuniga muvofiq:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta}. \quad (4)$$

bunda θ ga Veys tuzatgichi deyiladi.

Magnit qabul qiluvchanlikning bu turiga oriyentatsiya paramagnetizm deyiladi, chunki tashqi magnit maydonida elementar magnit momentlari oriyentatsiyalanadi.

Atomda elektronlarning magnit xossalarini ikki usulda izohlash mumkin. Birinchi usulda elektronning xususiy (spin) magnit momentlari orbital (elektronlarning yadro atrofida harakati tufayli sodir bo'ladigan) momentiga ta'sir etmasligi emas, aksincha ta'siri e'tiborga olinadi. Aniqroq aytiladigan bo'lsa, bunday o'zaro spin-orbital ta'sir mavjud, lekin 3d-ionlar uchun uning qiymati kichik. Ulardagi magnit xossalarini talab darajasidagi aniqlik bilan ikki kvant sonlari L (orbital) va S (spin) orqali ifodalash mumkin. Og'ir atomlar uchun bunday yaqinlashuv (hisoblash) noaniq bo'lib qoladi va qo'shimcha, to'liq magnit momentini ifodalaydigan yana bir kvant soni I kiritaladi. Uning solishtirish $|L + S|$ dan $|L - S|$ gacha qiymatlarni qabul qilishi mumkin. Van-Flek energetik orbitallar ulushini magnit maydoni ta'siriga muvofiq

ta'sirlashishni qatorlarga taqsimlash va yig'indi shaklida ifodalash mumkin:

$$E_n = E_n^{(0)} + HE_n^{(1)} + H^2 E_n^{(2)}, \quad (5)$$

bunda H-magnit maydoni kuchlanganligi, $E^{(0)}$ -tashqi maydonga bog'liq bo'lmagan ulush; $E^{(1)}$ -maydonga to'g'ri proporsional bo'lgan ulush va h.k. Bundan ma'lum bo'lishicha, nolinch tartibli energiya kimyoviy bog'larni yozishda muhim bo'lgan spin-orbital ta'sirlashuv orqali aniqlanadi:

$$E^{(0)} = \lambda LS, \quad (6)$$

bunda λ -spin-orbital tashirlashuv konstantasi. Birinchi tartibli energiya, ya'ni juftlashmagan elektron magnit momentining ($\mu = gBS$) magnit maydoni (H) bilan ta'siri:

$$E^{(1)} = gBHS, \quad (7)$$

bunda g-Lande omili bo'lib, aksariyat birikmalar uchun ikkiga teng; B-bor magnetoni, uning qiymati $9,27 \cdot 10^{-19}$ erg/c.

Ta'kidlash joizki, magnit ta'sirlashuvlar energiyasi bu magnit momentlari μ va H vektorlarining skalyar ko'paytmasi. $E^{(2)}$ -ishonchli qabul qilinadigan energetik ulush bo'lib, u elektron tuzilishning nozik xususiyatlariga bog'liq. Bu kattalikni klassik fizika nuqtai-nazaridan tushuntirish murakkab. Magnit ta'sirlashuvning kichik qiymatli darajasiga e'tibor qaratish kerak. Uy temperaturasida magnit maydoni uchun magnit ta'sirlashuv energiyasi molekulaning issiqlik harakati energiyasiga nisbatan uch-to'rt daraja pastdir.

Energetik darajalar bo'yicha magnit momentlari ansambllarining makroskopik magnit qabul qiluvchanlik uchun matematik amallardan so'ng ko'rinishi bo'lgan Bolsman taqsimoti ifodasini quyidagicha yozish mumkin:

$$\chi_M = N_A \frac{\sum_n \left[\frac{(E_n^{(1)})^2}{KT} - 2E_n^{(2)} \right] \exp\left(-\frac{E_n^{(0)}}{KT}\right)}{\sum_n \exp\left(-\frac{E_n^{(0)}}{KT}\right)}, \quad (8)$$

bunda N_A -Avogadro soni, K-Bolsman doimiysi.

Bu Van-Flek tenglamasi bo'lib, magnetokimyoda molekula magnit xossalari bilan tuzilish o'rtasidagi bog'lanishni ifodalaydi.

Agar $E_n^{(0)} = 0$ bo'lsa va $E_n^{(2)}$ e'tiborga olinmasa, u holda natijasi Kyuri qonuniga ega bo'lib (3ga teng), tenglamani yanada mukammal ko'rinishda ifodalash mumkin:

$$\chi = \frac{N_A g^2 B^2}{4KT} \quad (9)$$

Tenglamadan ko'rinib turibdiki, Kyuri qonuni aksariyat paramagnetik birikmalar uchun xos bo'lgan chin spinli magnetizmi ni ifodalaydi. Masalan, mis, temir, nikel va boshqa metallar tuzlari uchun xosdir. Agar

$$E_n^{(1)} = 0 \text{ va } E_n^{(1)} \gg KT \text{ bo'lsa,}$$

u holda Van-Flek tenglamasi soddalashadi:

$$\chi = N(-2E^{(2)}) = N \alpha > 0, \quad (10)$$

bunda $N \alpha$ -temperaturaga bog'liq bo'lmagan paramagnetizm.

Yuqoridagilardan ko'rinib turibdiki, Van-Flek paramagnetizmi kvant hodisasi bo'lib, klassik fizika nuqtai nazaridan tushunarsiz. Bu molekulaning asosiy holatiga "hayajonlangan" energetik darajasi qo'shiluvi deb tasavvur qilish mumkin. Ma'lumki, ko'p moddalar harorat pasaytirilganda o'zlarini paramagnetiklar sifatida namoyon qiladi. Bu muayyan temperaturaga erishilgandan so'ng magnit xossalari keskin o'zgartiradi. Bunga eng yorqin misol ferromagnetiklar nomini olganda metall temirdir. Temir atomining magnit momentlari Kyuri temperaturasidan pastda ($T_c = 770^\circ\text{C}$) spontan magnitlanib, bir qator domenlarga tartiblashadi. Lekin maydon bo'lmaganda makroskopik magnitlanish mavjudga kelmaydi, chunki namuna o'z-o'zidan domenlarga taqsimlanib, nomlanuvchi o'lchami 1 mkm ga yaqin bo'lgan hududlarga taqsimlanadi. Bu hududlar chegarasida elementar magnit momentlari bir xil yo'nalgan bo'lib, lekin turli domenlar magnitlanishi taxminiy orientirlanib, o'rtacha birini kompensatsiyalaydi. Ferromagnit o'tishni chaqiruvchi kuchlar faqat kvant mexanikasi qonuniyatlari yordamida tushuntirish mumkin. Antiferromagnetiklar shunday xarakterlanadiki, ularda spin magnit momentlari antiferromagnit o'tish temperaturasida (Neel harorati T_N) shunday tartiblanishadiki, ular bir-birini kompensatsiyalaydi. Magnit qabul qiluvchanlikning maksimal qiymatiga T_N da erishiladi, undan



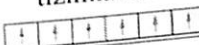
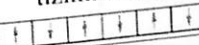
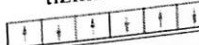
yuqori temperaturada esa χ Kyuri-Veys qonuniga muvofiq kamayadi. Masalan, MnO va KNiF₃ antiferromagnetiklarga misol bo'ladi.

Agar magnit momentlari kompensatsiyasi to'liq bo'lmasa, unday moddalarga ferromagnetiklar deyiladi. Ularga misol Fe₂O₃ va FeCr₂O₄.

Magnit xossasini namoyon qiladigan moddalar asosiy sinflari 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval

Magnit xossasini namoyon qiladigan moddalar asosiy sinflari

Xossa	χ ishorasi	χ kattaligi	χ ning magnit maydoniga bog'liqligi	25°C da muhim vakillarning χ_V qiymatlari	Magnetizmi nima chaqirgan
Diamagnetizm	-	10^{-6} - 10^{-5}	Yo'q	$-0,72 \cdot 10^{-6}$ (suv) $-14 \cdot 10^{-6}$ (vismut)	Juftlashgan elektronlar presessiyasi 
Paramagnetizm	+	10^{-5} - 10^{-2}	Yo'q	$0,15 \cdot 10^{-6}$ (kislород) $14 \cdot 10^{-6}$ (volfram)	Juftlashmagan elektronning xususiy magnit momenti 
Ferromagnetizm	+	10^2 - 10^4	Bor	650 gacha (temir) 8000 gacha ($S_{m1-x}Pr_xCo_5$)	Juftlashmagan elektronning kooperativ tizimlanishi 
Antiferromagnetizm	+	10^{-4} - 10^{-2}	Bor	10^{-2} gacha (MnO)	Ikki sistema juftlashmagan elektron spinlarining antiparallel tizimlanishi 
Ferrimagnetizm	+	10^1 - 10^3	Bor	60 gacha (BaFeO ₄)	Ikki turli sistema juftlashmagan elektron spinlarining antiparallel tizimlanishi 

1-jadvaldagi so'nggi uch sinf birikmalar qattiq jismlar bo'lib, asosiy fiziklar tomonidan o'rganilmoqda. Keyingi o'n yilda fiziklar kimyogarlar yangi magnit materiallar yaratishdi, ularning xossalari to'g'risida batafsil ma'lumotlarni ilmiy manbalardan olish mumkin.

Molekulada juftlashmagan elektron bo'lsa, boshqa juft elektron magnit maydonini kuchsizlantiradi, lekin ular har birining ulushi ikki-uch darajada kam bo'ladi. Juftlashmagan elektronlarining magnit xossalari aniq o'lchash uchun diamagnit tuzatuvchilarni, ayniqsa aksariyat organik molekulalar uchun kiritish kerak bo'ladi. Molekulada atomlar diamagnit qabul qiluvchanligi Paskal-Lanje-Ven additivlik qoidasiga muvofiq ta'biriga qo'shilishidan aniqlanadi. Buning uchun har bir turga ta'biriga bo'lgan atomlar diamagnit qabul qiluvchanliklari molekuladagi markaziy turli atomlar soniga ko'paytiriladi, keyin esa molekula tuzilishidagi "qo'sh" va "uch" bog'lar, aromatik halqalar va h.k.larni e'tiborga olinib konstitutiv tuzatish koeffitsiyentlar kiritiladi.

6.2. Magnit qabul qiluvchanlikni tajribaviy o'lchash

Magnit qabul qiluvchanlikni asosiy eksperimental o'lchash usulida o'tgan asrdayoq yaratilgan edi. Gun usuliga muvofiq (2a-rasm) namunaning massa o'zgarishi magnit maydon bo'lganda va bo'lmagan holatda o'lchanadi, ya'ni:

$$\Delta mg = \frac{1}{2}(\chi - \chi_0)S(H_{max}^2 - H_{min}^2) \quad (11)$$

bunda $\Delta mg = F$ - magnit maydoni gradiyentida moddaga ta'sir etuvchi kuch; χ -moddaning o'lchanadigan magnit qabul qiluvchanligi; S - muhitning magnit qabul qiluvchanligi; S -namunaning sirt yuzasining maydoni; H_{max} , H_{min} -tashqi magnit maydonning maksimal va minimal kuchlanganligi.

Faradey usuliga (2b-rasm) binoan bir jinsli bo'lmagan magnit maydonidagi namunaga ta'sir etadigan kuch o'lchanadi:

$$F = \chi m H_0 \frac{dH}{dz} \quad (12)$$

$\frac{H_0 dH}{dz}$ o'lchov chegarasida doimiy bo'lib qolishi uchun namuna kichik o'lchamda olinadi. Parametrlarning maksimal qiymatiga magnit uskunalar

sterjeni shaklini maxsus tanlash orqali erishiladi. Gui usulining Faradey usulidan asosiy farqi shundan iboratki, birinchi usulda namuna (yo'nalishi) bo'yicha bir jinsli bo'lmagan quvvatlansa, ikkinchi usulda magnit maydoni bo'ylab quvvatlanadi. Kvinke (2v-rasm) usuli faqat suyuqliklar va eritmalar uchun qo'llaniladi. Bu usulda magnit maydoni ta'sirida kapillyardagi suyuqlik ustuni balandligining o'zgarishi o'lchanadi:

$$\Delta h = \frac{H_0^2(\chi - \chi_0)}{2g} \quad (13)$$

Bunda diamagnit suyuqliklar uchun ustun balandligi pasaysa, paramagnit moddalar uchun oshadi.

Viskozometrik usulda magnit maydoni bo'lgan (t_H) va bo'lmagan (t_0) holatlardagi kichik tirqish orqali suyuqlik oqish tezligining vaqti o'lchanadi. Paramagnit suyuqliklar uchun magnit maydonida oqish tezligining vaqti magnit maydoni bo'lmagan holatga nisbatan aksincha bo'ladi.

Ikki holat oqish vaqti farqi magnit qabul qiluvchanlik bilan aniqlanadi:

$$\frac{t_0 - t_H}{t_H} = k\chi, \quad (14)$$

k -kalibirovka konstantasi bo'lib, uning qiymati magnit qabul qiluvchanligi ma'lum bo'lgan suyuqlik asosida o'lchanadi.

Ba'zi keng qo'llaniladigan erituvchilarning hajmiy magnit qabul qiluvchanlik qiymatlari quyidagi jadvalda keltirilgan.

Erituvchi	$\chi_v \cdot 10^6$
Suv	-0,7179
Tetragidrofuran	-0,6389
Toluol	-0,6137
Benzol	-0,6070
Izopropanol	-0,6031
n-oktan	-0,5966
Nitrobenzol	-0,5950
Etanol	-0,5777
Dimetilformamid	-0,5682
Metanol	-0,5227
Atsetonitril	-0,5220
Atseton	-0,4600

Magnit qabul qiluvchanlikni YAMR-spektrometri yordamida o'lchash mumkin. YAMR usulining fizik asoslari maxsus adabiyotda keltirilgan. YAMR-spektrining kimyoviy siljishi kattaligi qiyosan umumiy holatda yadro uchun nafaqat aniqlanadigan elektron spin zichligi o'lchovi bo'lgan ekranlanish konstantasi orqali, balki namunaning magnit qabul qiluvchanligi bilan ham aniqlanadi. Shu to'g'riburchakli paralleliped bo'lgan namuna uchun kimyoviy spin magnit maydonida namunaning oriyentatsiyasi orqali ham aniqlanadi.

$$\delta_1 - \delta_{11} = A\chi + B, \quad (15)$$

bunda A va B konstantalari magnit qabul qiluvchanligi ma'lum bo'lgan ikki suyuqlik (ko'p hollarda suv va atseton) uchun o'lchab aniqlanadi. Ushbu usul Qozon universiteti anorganik kimyo kafedrasida rivojlantirilib, yagona yondashuv hisoblanadi. Mazkur usul ushbu kalibrovkasini diamagnet standartlarga asosan bajarib, keyin paramagnit namunalarda magnit qabul qiluvchanlikni o'lchash beradi. Shunday qilib ko'pchilik moddalarning magnit qabul qiluvchanligi o'lchangan.

Magnit xossalarni o'lchash asosida elektronlarni qanday hisoblash mumkin?

Paramagnitliklar uchun magnit qabul qiluvchanlikning olingan qiymatlari juftlashgan elektronlar soni bilan aniqlanadi:

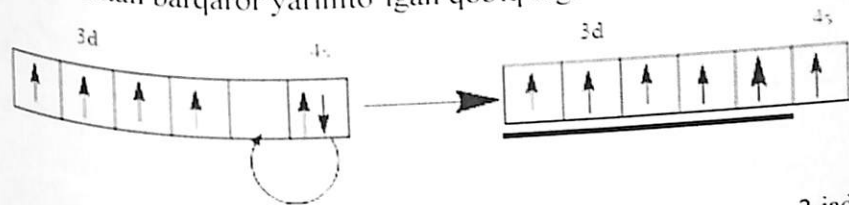
$$\chi_m = \frac{N_A g^2 B^2}{2kT} S(S+1) \quad (16)$$

Shunday qilib spin kvant sonini S aniqlash mumkin va shu asosda juftlashmagan elektronlar sonini ham. Ta'kidlash joizki, real birikmalarda g-faktor "aniq spin" qiymatiga qarab ancha o'zgaradi, ikki qiymatga yuqorida ta'kidlanganidek.

Paramagnit moddalar uchun χ_m qiymati kichik bo'lib, birikmalarda tuzilishini izohlashda noqulaydir. Shu bois paramagnit qabul qiluvchanlik ko'p hollarda effektiv magnit momenti μ_{eff} bilan xarakterlanadi:

$$\mu_{eff} = \sqrt{\frac{3kT}{N_A B^2} \chi_m} \quad (17).$$

U holda bitta juftlashmagan elektron uchun 298K temperaturada "aniq spin" qiymati $\mu_S = 1,73$ Bor magnetoni (μ_B), ikkitasi uchun-3,46 μ_B va h.k. bo'ladi (2-jadval). Boshqa omillar ulushi, birinchi navbatda spin-orbital o'zaro ta'sirniki g-faktor qiymatlarida o'z aksini namoyon etadi va μ_{eff} ni μ_S dan farqli bo'lib qolishiga olib keladi. Juftlashmagan elektronlar sonini bilish D.I.Mendelev davriy sistemasida elementlarning alohida joylashuvini ayrim xususiyatlarini tushunishga imkon beradi. Masalan, elektron qobiqchalar to'liq yoki yarim to'lgan elementlar yuqori barqarorlikka ega. Nisbiy atom massasining oshishi bilan xrom elementida bu holat sodir bo'ladi. Asosiy holatdagi elementlar elektron konfiguratsiyalarini solishtiraylik: Sc $3d^1 4s^2$, Ti $3d^2 4s^2$, V $3d^2 4s^2$ va keyingi element xrom $3d^4 4s^2$ emas, balki $3d^5 4s^1$, nisbatan barqaror yarimto'lgan qobiq tagidan chizilgan:



2-jadval

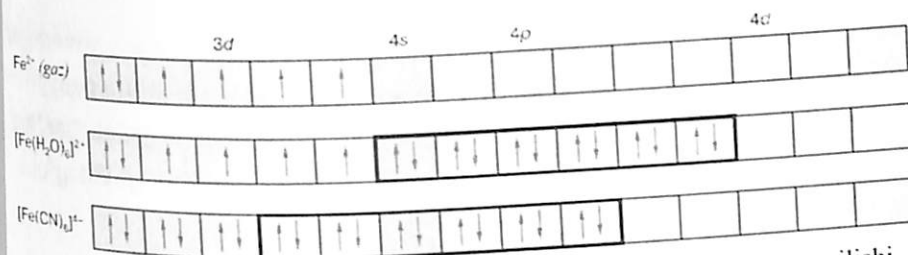
Paramagnit 3d- va 4f- akvaionlar uchun magnit qabul qiluvchanlikning (μ_B) nazariy va amaliy (tajribaviy) qiymatlari

Akvaion	Elektron konfiguratsiya	S spin	μ_S	μ_{eff}
Ti ³⁺	3d ¹	1/2	1,73	1,72
VO ²⁺	3d ¹	1/2	1,73	1,78
V ³⁺	3d ¹	1/2	2,83	2,89
Cr ³⁺	3d ³	3/2	3,87	3,92
Mn ²⁺	3d ⁵	5/2	5,92	5,90
Fe ³⁺	3d ⁵	5/2	5,92	5,89
Fe ²⁺	3d ⁶	2	4,90	5,13
Co ²⁺	3d ⁶	2	3,87	4,97
Ni ²⁺	3d ⁷	3/2	2,83	3,11
Cu ²⁺	3d ⁸	1	1,73	1,83
Ce ³⁺	3d ⁹	1/2	1,73	2,50
Pu ³⁺	4f ¹	1/2	2,83	3,50
Nd ³⁺	4f ³	1	3,87	3,60
Pm ³⁺	4f ⁵	3/2	4,90	~2,80
Sm ³⁺	4f ⁶	2	5,92	1,50
	4f ⁶	5/2		

Eu^{3+}	$4f^6$	3	6,92	3,40
Gd^{3+}	$4f^7$	7/2	7,94	7,90
Tb^{3+}	$4f^8$	3	6,92	9,70
Dy^{3+}	$4f^9$	5/2	5,92	10,50
Ho^{3+}	$4f^{10}$	2	4,90	10,50
Er^{3+}	$4f^{11}$	3/2	3,87	9,50
Tm^{3+}	$4f^{12}$	1	2,83	7,40
Yb^{3+}	$4f^{13}$	1/2	1,73	4,50

Magnit qabul qiluvchanlikni o'ldash asosida xrom atomida to'rt emas, balki oltita juftlashmagan elektronlar borligi aniqlangan. Buning uchun gaz fazada izolyatsiyalangan atomlar bilan o'tkazgichlar magnit xossalari juftlashmagan elektronlar soni bilan bog'lanmaganligi sababli juda nozik, murakkab o'ldashlar bajariladi. Chunki metallarda valent elektronlar aniq bir atomga bog'lanmagan bo'lmay, butun kristall panjara bo'ylab tartibsiz harakatlanadi. O'tkazgichlarning magnit xossalari kvant mexanikasi qonuniyatlariga bog'liq, ya'ni Fermi diamagnitizmi va Landau paramagnitizmi bilan aniqlanadi. Shu bilan bir qatorda, masalan, $5d$ va $4f$ orbitallarining to'lib borish tartibi lantanoidlar qatorida juftlashmagan elektronlar sonini o'zgartirmaydi. Shuning uchun ham to'rtinchi elektron konfiguratsiyalar 60-yillarda kvant mexanik hisoblashlar asosida tuzilgan. Magnitlash qiymatlariga qarab, $4f$ va $4d$ konfiguratsiyalarni farqlab bo'lmaydi. Shunga qaramasdan, magnitokimyoviy tadqiqotlar elektron konfiguratsiyani aniqlashga imkon beradi (d-metallarning birikmalari koordinatsion birikmalari kimyosining asosini tashkil etadi).

Odatda, koordinatsion birikmalar donor-akseptor bog' asosida ligandlarning juft elektronlari akseptor-kompleks hosil qiluvchi markaziy atom yoki ionlarning bo'sh d kvant yacheykalarida joylashishi natijasida hosil bo'ladi. Bunda juftlashmagan elektronlar soni va kompleks hosil qiluvchi ionlarning magnit momenti xuddi gaz holatidagi erkin ionnikidagidek bo'lib qoladi. Bu holat d-metallarning akvakomplekslari uchun, masalan, temir (II) da kuzatilishi mumkin (3-rasm).



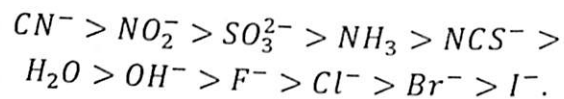
3-rasm. Temir (II) komplekslari tashqi va ichki orbitallarining elektron tuzilishi. Lekin shunday anomal-magnit komplekslar borki, ularning magnit momenti gaz holatdagi ionga nisbatan kichik.

Ularining elektron strukturalarini valent bog'lanishlar usuli doirasida quyidagicha izohlash mumkin. Aksariyat kompleks birikmalarda markaziy atom ionining koordinatsion soni oltiga teng. Oktaedrning tugunlarida oltita ligandlar simmetrik joylashadi. Oltita gibridlangan orbitallar hosil bo'lishi uchun markaziy atom ionining oltita valent orbitallari ishtirok etadi. Elektronlar bulutlari zichligining bunday qayta taqsimlanishiga sp^3d^2 yoki d^2sp^3 gibridlanish deyiladi. Alkanlarda esa uglerod atomi sp^3 gibridlanishida to'rtta sp^3 gibrid bog'lar orbitallari tetraedrning cho'qqilari tomon yo'nalgan bo'ladi. sp^3d^2 gibridlanishda bir xil tartib raqamli s , p , d orbitallar ishtirok etadi, chunki metall ionning ichki qobiqda joylashgan d orbitallar o'z elektronlari bilan to'lgan. Ichki d orbitallarni egallash uchun, ya'ni d^2sp^3 gibridlanish hosil bo'lishi uchun ligandlar metall ichki d qobiqdagi toq elektronlarni juftlashtirib, bo'sh orbitallar hosil qilishiga majburlaydi. Bu vazifani faqatgina kuchli elektromagnit maydonga ega bo'lgan ligandlar, masalan, temir geksatsianoferratdagi sianid ionlari bajara oladi (3-rasm).

Mos ravishda birinchi tip komplekslar, yuqori magnit momentiga ega bo'lganlar tashqi orbitalli komplekslar (sp^3d^2), ikkinchi tipi esa, kuchsiz magnit momentli ichki orbitalli (d^2sp^3) komplekslar deyiladi. Ushbu farq, ya'ni komplekslarda juftlashmagan elektronlar sonini o'zgartirishga olib kelinishi, mos ravishda tashqi va ichki orbitalli komplekslar magnit momentlarini o'zgarishiga sabab bo'lib, mos holatdagi d -orbitallarning energetik teng emasligi sababli sodir bo'ladi.

Odatda mazkur energetik tengsizlikka ligandlar maydonidagi taqsimlanish energiyasi deyiladi va Δ yoki 10 Dq orqali belgillanadi.

Ichki orbitalli komplekslar hosil qilish qobiliyatiga qarab barcha ligandlar (Δ qiymati bo'yicha) spektrokimyoviy qatorga quyidagidek joylashadi:



Shuning uchun ham kompleksning rangi ligandning ushbu qatorga joylashgan o'rniga bog'liq va bu bilan koordinatsion birikmalarning qo'shimcha va magnit xossalari o'rtasidagi bog'liqlikda namoyon bo'ladi.

Shunday qilib, magnit qabul qiluvchanlikni o'lchash asosida kompleksdagi koordinatsion sferaning geometriyasi hamda ionning oksidlanish darajasi to'g'risida fikr yuritish mumkin. Ikkinchi jadvalda 1- va 2- metallar qatori ionlari va ligandlar uchun magnit qabul qiluvchanlik to'g'risidagi ma'lumotlar keltirilgan. Ko'rinib turibdiki, aksariyat hollarda 3d metallar ionlarining magnit xossalari toza μ_s qiyamatlariga mos keladi. Lantanoidlar magnit xossalarini izohlash uchun esa J kvant sonini e'tiborga olgan holda murakkab modelni ko'rib chiqish talab etiladi.

Ma'lumki, amaliyotda sodir bo'ladigan aksariyat muhim kimyoviy reaksiyalar, jumladan, kompleks hosil bo'lish reaksiyalari ham eritmalarda sodir bo'ladi, Shuning uchun d -elementlari ishtirok etadigan kompleks hosil bo'lish jarayonlarida eritmalarning magnit xossalarini ko'rib chiqamiz.

6.3. Eritmalarning magnit qabul qiluvchanligi

Qattiq jismdan eritmaga o'tish jarayonida erituvchi va barcha erigan moddalarning magnit qabul qiluvchanliklarini e'tiborga olish kerak. Oddiy usulda additivlik qoidasiga ko'ra eritmaning barcha komponentlarining ulushi yig'indisi aniqlanadi. Additivlik prinsipi tajribaviy natijalarni umumlashtirish va qayta ishlashda asosiy tamoyillardan biri hisoblanadi. Ba'zi holatlarda bu usulda ham ayrim kamchiliklardan holi emas. Shuning

uchun ham eritmaning magnit qabulqiluvchanligi konsentratsiya hisobga olingan holda alohida komponentlar magnit qabul qiluvchanliklar yig'indisiga teng deb qabul qilingan, ya'ni:

$$\chi_v = \frac{1}{1000} \sum_i c_i \chi_{Mi} \quad (18)$$

bunda c_i -konsentratsiya (mol/l), χ_{Mi} -eritma i komponentining molyar magnit qabul qiluvchiligi, 1/1000 koeffitsiyenti molyar konsentratsiyaga o'tish uchun qo'llaniladi.

Bunda barcha erigan moddalar va erituvchi bo'yicha yig'indi topiladi. Alohida ta'kidlash lozimki, paramagnit va diamagnit moddalarning o'lchanadigan umumiy magnit qabul qiluvchanlikka qo'shadigan ulushi ishora jihatidan qarama-qarshi bo'lib, ularni tashkil etuvchilarga ajratish mumkin, ya'ni:

$$\chi_v(\text{o'lchangan}) = \chi_v(\text{paramagnit}) - \chi_v(\text{diamagnit}). \quad (19)$$

3-jadvaldan ko'rinib turibdiki, ayni bir moddani turli erituvchilarda o'lchangan magnit qabul qiluvchanligi erituvchining tabiatiga bog'liq. Bu holatni erituvchi molekulasini birinchi koordinatsion sferaga kirib borishi hamda kompleks elektron tuzilishining o'zgarishi, ya'ni d -orbitallar energiyasi (Δ) va solvat kompleksning boshqa xossalarini o'zgarishi bilan izohlash mumkin. Shunday qilib, magnitokimyoviy solvatlanishni, yani eriydigan modda bilan erituvchining o'zaro tasirini ham o'rganishga imkoniyat beradi. Yuqorida keltirilgan nazariy materialdan ko'rinib turibdiki, koordinatsion birikmalar eritmalari uchun χ_m va χ_{eff} ni aniqlash, qator struktur parametrlarni (λ , S , Δ) o'rganishga imkon beradi, bu esa o'z navbatida magnitokimyoviy izlanishlar qiymatini oshiradi.

Bir metall ionining turli komplekslari bir-biridan effektiv magnit momenti qiymati bilan farqlanishi mumkin. Masalan, mis(II) da kompleks hosil bo'lishida effektiv magnit momenti oshadi, dimer kompleks hosil bo'lganda esa, kamayadi. Bunga sabab mis(II) ionlari juftlashmagan elektronlarining o'zaro antiferromagnit ta'sirlashuvidir. Mis(II) kompleks birikmalarining magnit xossalari qo'yidagi 4-jadvalda keltirilgan. Ligandlarni ifodalashda koordinatsion kimyoda qo'llaniladigan

qisqartmalardan foydalanilgan. Jumladan, atsetilats
 $CH_3COCH_2COCH_3$ -asas, vino kislotasi $HOOC(CHOH)_2SOOH$ - H₂Ta

Modda	μ_{eff}, μ_B
$[Cu(H_2O)_6]^{2+}$	1,83
$[CuCl_4]^{2-}$	1,88
$[Cu(NH_3)_4]^{2+}$	1,89
$[Cu(asas)_2]^{2-}$	1,95
$[CuH_2Tart]$	1,91
$[Cu_2(Htart)_2]^{2-}$	1,73

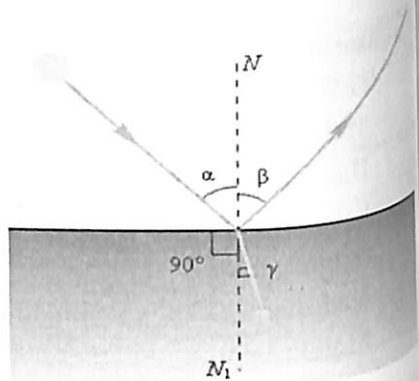
“Magnitli suv” to‘g‘risida, aniqrog‘i, suvli eritmalar haqida qisqartirilgan gapirish mumkin. Distillangan suvda ham qo‘shimchalar, masalan, eritma kislorod bo‘ladi va shuning uchun ham eritma paramagnitdir. Magnit maydoni eritmalarining xossalari ta‘sir etishini zichlik, qovushqoqchilik, elektr o‘tkazuvchanlik, protonlar konsentratsiyasi, magnit qutblanish kabi kattaliklarni o‘lchash asosidagi olingan natijalar tasdiqlaydi. Eritma alohida komponentlari va suv molekullari ansambllari o‘zaro ta‘sir energiyasi kerakli darajada yuqori bo‘lib, eritmada zarrachalar issiqlik harakati energiyasidan katta yoki teng qiymatli bo‘ladi. Eslatish joizki, bitta zarrachaning (molekulaning) magnit ta‘sir energiyasi issiqlik harakati energiyasiga nisbatan kichik. Suv va suv eritmalarida vodorod bog‘lanishning kooperativ xarakterga ega bo‘lishi sababli, ya‘ni muzga o‘xshash suv molekulasi struktur ansambllari hosil bo‘ladi deb hisobga olinsa qayd etilgan ta‘sirlashuv amalga oshirish mumkin. Mazkur ansambllar erigan moddalar ta‘sirida mustahkamlanishi yoki parchalanishi mumkin. Bunday “ansambllar”ning hosil bo‘lishi energiyasini issiqlik harakati energiyasi bilan mos keladi. Magnit maydoni ta‘sirida eritma unga orientatsiyalanib, yangi xossalarga ega bo‘lishi mumkin, lekin Brown harakati yoki temperaturaning ko‘tarilishi bu tartibni ma‘lum vaqt davomida yo‘qqa chiqarishi mumkin.

Demak, diamagnit erituvchida paramagnit moddalarning konsentratsiyasini tanlash asosida magnitlanmagan, ya‘ni o‘rtacha magnit qabul qiluvchanligi nolga teng suyuqlikni tayyorlash mumkin. Bunday eritmalar magnit maydonining tarqalishi vakuumdagidek bo‘ladi. Bunday qiziqarli xossa hozircha texnikada o‘z qo‘llanilishini topa olmagan emas.

Nazorat savollari

1. Molekula tashqi magnit maydonida.
2. Molekulalarning magnit momenti va magnitlanuvchanligi.
3. Diamagnit va paramagnit moddalar.
4. Ferromagnetiklar va aktiferromagnetiklar.
5. Magnit qutblanish.
6. Yadrolar va elektronlarning mexanik va magnit momentlari.
7. Molekulalarning magnit maydoni bilan ta‘sirlashuvi.

VII. BOB MODDANING OPTIK XOSSALARI



7.1. Molekular spektrlari

Molekular spektrlari polosalar to'plamidan iborat bo'lib, ular o'z navbatida bir-biriga yaqin joylashgan spektral chiziqlardan iborat. Azot molekulasining spektral polosasining spektral chiziqdagi tipik ajralishini 1-rasmda keltirilgan. Shuning uchun ham molekulyar spektrlar polosali deb aytiladi.



1-rasm. Azot molekulasining spektral polosasining spektral chiziqdagi ajralishi

Molekula atom singari elektron qobiq holatini o'zgartirib fotoni nurlatadi. Lekin molekula energiyasi faqat elektron konfiguratsiyasining bilangina aniqlanmaydi. Atomlar yadrosi molekula inersiya markaziga nisbatan tebranishi, molekulaning o'zi esa yaxlit holatda aylanish holatida bo'lishi mumkin. Ushbu harakatlar energiyaning umumiy balansiga o'z ulushini qo'shadi.

Birinchi yaqinlashuvda molekula energiyasini quyidagicha ifodalash mumkin:

$$E = E_{el} + E_{tebr} + E_{ayl}, \quad (1)$$

bunda E_{el} — elektron qobiq'i energiyasi. E_{tebr} — molekulaning tebranish energiyasi, E_{ayl} — molekulaning aylanish energiyasi.

Ushbu energiyalarning har qaysisi butun kvant sonlari bilan aniqlanadigan diskret qiymatlar qatorini qabul qilishi mumkin. Kvant garmonik ossillyatori quyidagi energiyaga ega:

$$E_{tebr} = \left(\vartheta + \frac{1}{2} \right) h\omega_0, \quad (2)$$

bunda ϑ — tebranish kvant soni, ω_0 — ossillyatorning xususiy chastotasi.

Klassik fizikada aylanish energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E_{ayl} = \frac{L^2}{2I}, \quad (3)$$

Kvant energiyasi hisobga olingan holda kvant rotatori uchun molekulaning aylanish energiyasi quyidagi qiymatlarni qabul qiladi:

$$E_{ayl} = \frac{J(J+1)h^2}{2I}, \quad (4)$$

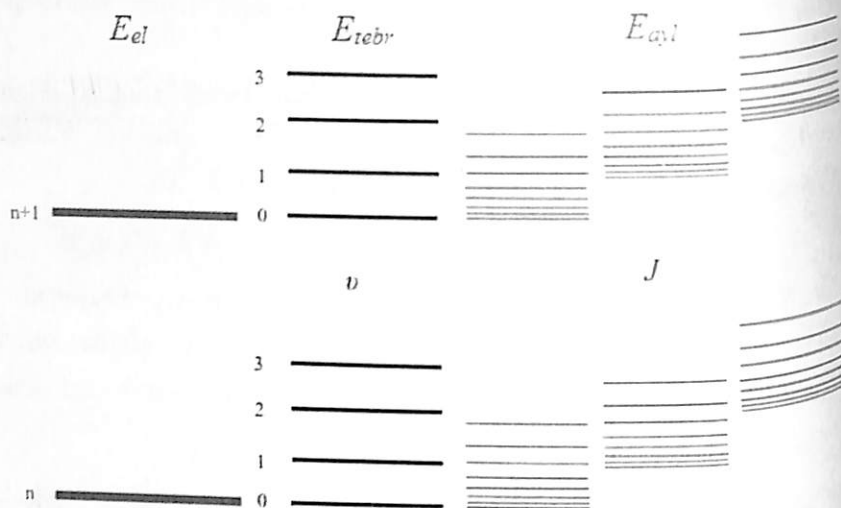
bunda J — aylanish kvant soni, I — molekula inersiya markaziga nisbatan molekulaning inersiya momenti, $h = h/2\pi$.

Tajriba natijalariga ko'ra

$$E_{el} \gg E_{tebr} \gg E_{ayl}. \quad (5)$$

Bu esa yadroning tebranma harakati elektronli darajalarni taqsimlaydi, o'z navbatida aylanma harakat esa tebranishli darajalarni taqsimlaydi (2-rasm).

2-rasmda ikki atomli molekula energetik darajasining sxemasi tuzilgan. Bunda keltirilgan har bir n va $n+1$ bilan belgilangan elektron daraja kvant sonlari $\vartheta = 0, 1, 2, 3$ bo'lgan to'rtta tebranish darajasiga ajralgan. O'z navbatida tebranish darajalari kvant sonlari $J = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ bo'lgan sakkizta aylanish darajalariga taqsimlanadi. Turli energiyalarning darajalari sxemani atroflicha yaxshi tushunish uchun ustunlar bo'yicha joylashtirilgan.



2-rasm. Spektir chiziqlarining energetik taqsimoti

Fotonlar unchalik katta energiyaga ega bo'lmada, elektron konfiguratsiya va tebranish energiyasini o'zgartirmagan holda molekulaning bir aylanish holatidan boshqasiga o'tkazadi. Bunday o'tishlarga mos keladigan spektral chiziqlar to'plami aylanish polosalarini hosil qiladi. Ushbu polosalar spektrning uzoq infraqizil sohasida yotadi.

Katta energiya talab qiladigan tebranish darajalari o'rtasidagi o'tishlar aylanish energiyasining o'zgarishi bilan kuzatilishi mumkin. Ular infraqizil sohada yotuvchi aylanma-tebranma spektral polosalarini hosil qiladi.

Ultrabinafsha va ko'rinish sohalari spektral polosalari elektron darajalar o'rtasidagi o'tishlar hisobiga shakllanadi, elektron va tebranish darajalaridagi o'zgarishlar bilan o'tishlar elektron-tebranish polosalarini shakllantiradi.

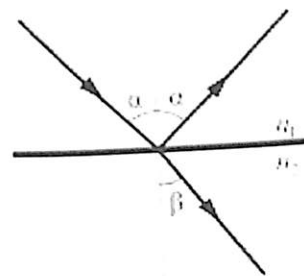
Darajalar o'rtasidagi barcha o'tishlarga ruxsat berilmagan, bunda tanlash qoidasi bajarilishi kerak. O'tishlarda aylanish va tebranish kvant sonlarining o'zgarishi ± 1 ga teng bo'lishi kerak.

Molekulalar spektrlari yetarli darajada murakkab bo'lishiga qaramasdan, molekulaning tuzilishi haqidagi barcha ma'lumotlarni o'zida mujassamlashtirgan.

Yorug'likning kombinatsion sochilishi. Agar moddaga monoxromatik nur tushsa, yorug'likning sochilgan spektrida siljimagan asosiy spektrlardan tashqari yo'ldosh deb ataladigan chastotalari bo'yicha siljigan spektrlar paydo bo'ladi. Yo'ldosh spektrlarning chastotalari tushayotgan nur chastotasi va sochilgan molekula tebranma va aylanma o'tishlari chastotalari kombinatsiyasidir. Ushbu hodisaga yorug'likning kombinatsion sochilishi deyiladi.

7.2. Yorug'likning sinish hodisasi. Sindirish ko'rsatkichi

Agar yorug'lik nuri bir muhitdan boshqasiga o'tsa, u sirt chegarasidan qisman qaytishi (aks etishi) va qisman ikkinchi muhitga o'tishi mumkin. Bu jarayonda u o'z yo'nalishini o'zgartiradi, ya'ni sinish hodisasi kuzatiladi (3-rasm).



3-rasm. Ikki tiniq muhit chegarasidaurning sinishi

Sindirish ko'rsatkichi (n) deb tushayotgan nur burchak (α) sinusining uning sindirish burchak (β) sinusiga nisbatiga aytiladi, ya'ni:

$$n = \frac{\sin(\alpha)}{\sin(\beta)} \quad (6)$$

Yorug'likning to'lqin nazariyasiga muvofiq sindirishning mutlaq ko'rsatkichi—bu vakuumdagi yorug'lik nuri tezligining (s) uning moddada tezligi (ϑ) ga nisbatini ifodalaydi:

$$n = \frac{c}{\vartheta} \quad (7)$$

Bundan nisbiy sindirish ko'rsatkichi (n) ni yorug'lik nurining bir muhitda tarqalish tezliklarini e'tiborga olib, ikki muhitda sindirish muhitda ko'rsatkichlari nisbatida ifodalash mumkin, ya'ni:

$$n = \frac{n_1}{n_2} \quad (8)$$

Amaliyotda suyuq va qattiq moddalar sindirish ko'rsatkichlari havoga nisbatan o'lchanadi. Havoning bo'shliqqa nisbatan sindirish ko'rsatkichi 1,00027 ga teng. Shuning uchun ham amalda sindirish ko'rsatkichi verguldan keyingi uchinchi qiymatgacha aniqlanib o'lchanganligi uchun havoning sindirish ko'rsatkichi 1,000 deb qabul qilingan va havoga nisbatan o'lchangan moddalarning sindirish ko'rsatkichlari oddiy sindirish ko'rsatkichi deb qabul qilingan. Sindirish ko'rsatkichining qiymati modda tabiati, temperatura va yorug'lik nurining to'lqin uzunligiga bog'liq. Shuning uchun sindirish ko'rsatkichini ifodalashda temperatura n ning darajasida, to'lqin uzunligi esa indeks yoziladi (masalan, n_{480}^{25} , bu sindirish ko'rsatkichi 25° va 480 nm to'lqin uzunligida o'lchangan qiymatni ifodalaydi). To'lqin uzunligi qiymatining oshishi bilan sindirish ko'rsatkichining qiymati kamayadi.

Yorug'likning to'lqin nazariyasi sindirish ko'rsatkichi bilan muhitning dielektrik o'tkazuvchanligi (ϵ) o'rtasidagi bog'liqlik quyidagicha ifodalaydi:

$$\epsilon = n^2 \quad (9)$$

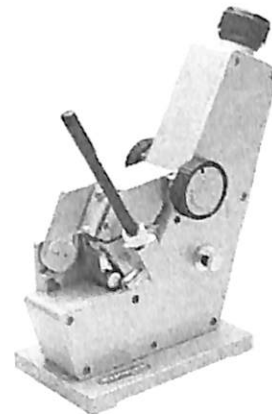
Dielektrik o'tkazuvchanlik molekula qutblanuvchanligi (a) va dipol momentiga (μ) bog'liqligi e'tiborga olinsa, u holda sindirish ko'rsatkichi moddaning tabiati va molekasi tuzilishi xususiyatlarini aks ettirishi tushunish mumkin. Shu bilan bir qatorda sindirish ko'rsatkichi temperatura va eritma tarkibiga ham bog'liq. Temperatura ko'rtirilishi bilan sindirish ko'rsatkichining qiymati pasayadi, chunki eritmaning zichligi kamayadi. Sindirish ko'rsatkichining eritma tarkibiga bog'liqligi oddatda to'g'ri chiziqli tenglama bilan ifodalanadi, ya'ni:

$$n = n_0 + kC \quad (10) \quad \text{bunda } n - \text{eritmaning}$$

sindirish ko'rsatkichi, n_0 -toza erituvchining sindirish ko'rsatkichi, C eritma konsentratsiyasi, k -proporsionallik koeffitsiyenti.

Moddalarni sindirish ko'rsatkichlari asosida tahlil qilish uslubiga **refraktometriya** deb ataladi.

Odatda sindirish ko'rsatkichi spektrning ko'rinish sohasida aniqlanadi. Bunda Abbe refraktometri qo'llaniladi (4-rasm). Uning tuzilishi prizmada nurning sinishiga asoslangan bo'lib, Pulfrich refraktometrida nurning to'liq ichki aks etishning maksimal burchagi o'lchanadi.

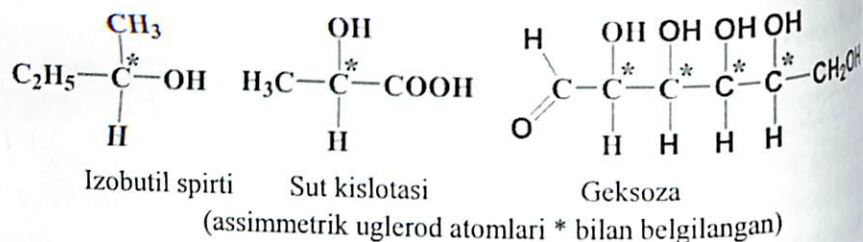


4-rasm. Abbe refraktometri

Refraktometriya kimyoviy reaksiyalar kinetikasini, ko'p komponentli sistemalar tarkibini o'rganishda, hamda sanoat mahsulotlari sifatini (masalan, dorivor moddalar substansiyalarini) nazorat qilishda keng qo'llaniladi.

7.3. Moddalarning optik faolligi va yorug'likning qutblanishi

Ayrim moddalar kimyoviy xossalari bilan farq qilmaydigan bir necha holatlarda, ya'ni optik antipod holatlarda mavjud bo'ladi. Ya. Vant-Goff va Le Bel moddalarda optik antipod holatlar mavjud bo'la olishligini izohlashdi. Ularga ko'ra optik antipod moddalar malekulalari tarkibida assimetrik uglerod atomlarini mavjudligidir. Bunday moddalarga **optik izomerlar** deb ham aytiladi. Optik izomerlarga quyidagi moddalarni misol sifatida keltirish mumkin.



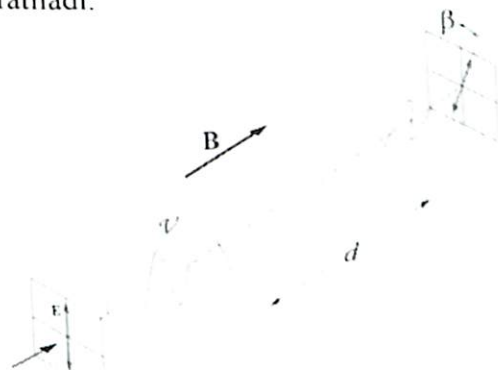
Optik faol moddalar molekularining izomerlari soni asimmetrik uglerod atomi soni (n) ga bog'lik. Asimetrik uglerod atomi soni bi birlikka oshsa, izomerlar soni ikki baravarga oshadi. Umumiy holda izomerlar soni 2^n bo'ladi. Masalan, geksozda izomerlar soni 16 ta chunki molekulada asimmetrik uglerod atomlari soni 4 ta.

Ma'lumki, optik faol moddalar izomerlari molekularining qutblanish tekisligining mavjudligi kuzatilgan. Qutblanish tekisligi deb magnit maydonining tebranishlar tekisligiga aytiladi. Yorug'lik qutblanish tekisligini aylantiruvchi moddalarga optik faol moddalar deyiladi.

7.4. Yorug'likning qutblanishi

Ma'lumki, yorug'lik nuri bir-biriga o'zaro perpendikulyar bo'lgan elektromagnit tebranishlar oqimidan iborat (5-rasm). Bu shuni anglatadiki, elektr va magnit maydonlarining tebranishlari yorug'lik nuri to'liqlinining tarqalish yo'nalishiga perpendikulyar holatda sodir bo'ladi. Mazkur tebranishlar yorug'lik nuri yo'nalish chiziqlari orqali o'tuvchi turli tekisliklarda sodir bo'lishi mumkin. Har xil manbalardan taraluvchi yorug'lik nuri qutbsizdir, ya'ni tebranishlar barcha imkoniyatli tekisliklarda sodir bo'ladi. Agar maydon tebranishlari bitta tekislikda sodir bo'lsa, bunday yorug'lik nuriga qutblangan deb aytiladi. Qutblangan yorug'lik nurini kristallar yordamida olish mumkin. Yorug'likni kristall yordamida optik o'qiga mos kelmaydigan yo'nalish bo'yicha o'tishi natijasida yorug'lik nurining taqsimlanishi, ya'ni ikkita qutblangan nurlarga ajralishi kuzatiladi. Mazkur nurlar bir-biriga nisbatan muayyan burchak

ostida yo'nalgan bo'ladi. Qutblangan yorug'lik nurini olish uchun ushbu nurlardan biri ajratiladi.



5-rasm. Elektromagnit tebranishlar oqimining qutblanishi

Ushbu maqsadda Nikol prizmasi (qutblagichi) deb nomlanuvchi optik sistema qo'llaniladi. Prizma (qutblagichi) sifatida island shpati kristalidan foydalaniladi. Agar olingan qutblangan yorug'lik nuri yo'lida o'z o'qi atrofida 90° ga aylantirilgan ikkinchi prizma (Nikol prizmasi) qo'yilsa, u holda qutblangan yorug'lik nuri kristall orqali o'tmaydi. Shunday qilib, ikkinchi prizma (Nikol prizmasi)–analizator yordamida qutblangan yorug'lik tekisligi yo'nalishini o'zgartirish mumkin.

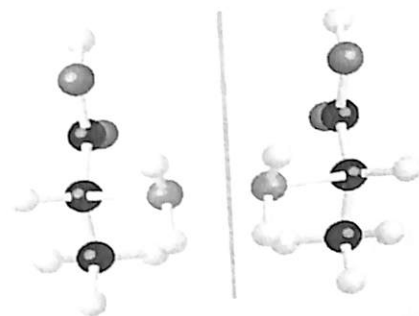
Optik faol moddalarni o'rganishda tadqiq etilayotgan modda ikkita (Nikol) prizmalari oralig'ida joylashtiriladi va qutblangan yorug'lik nuri tekisligining aylanish burchagi aniqlanadi. Qutblangan yorug'lik nuri boshqa izomer modda orqali o'tkazilganda qutblanuvchanlik tekisligining burilish burchagi o'sha qiymat darajasida, faqat boshqa yo'nalishda bo'ladi. Izomerlarning biri o'ngga aylanuvchi (D-izomer), boshqasi chapga aylanuvchi (L-izomer) deb nomlanadi.

Optik faol moddalar 2 guruhga bo'linadi: 1) qattiq moddalar–kristallar (kvars, KClO_3); 2) eritmalar (glyukoza, morfin, uzum kislotasi). Birinchi guruh moddalari mikroskopik texnikada ikkinchi guruh moddalari esa polyarimetrik tahlilda qo'llaniladi.

Nazorat savollari

1. Molekulalar spektrlari deganda nimani tushunasiz ?
2. Spektral polosasining spektral chiziq'larga ajralishini izohlang.
3. Spektr chiziq'larining energetik taqsimoti haqida ma'lumot bering.
4. Molekulalar spektrlari ularning tuzilishi haqida qanday ma'lumotlarni beradi ?
5. Yorug'lik kombinatsion sochilishining mohiyati nimadan iborat ?
6. Sindirish ko'rsatkichiga ta'rif bering.
7. Moddalarning sindirish ko'rsatkichi qanday aniqlanadi.
8. Yorug'likning qutblanishini izohlang.
9. Optik faol moddalarga ta'rif bering.

VIII. BOB MOLEKULAR SISTEMALAR SIMMETRIYASI



8.1. Simmetriya elementlari va operatsiyalar

Simmetriya to'g'risidagi tasavvurlar atomlar va molekulalar tuzilishini o'rganishda muhim nazariy va amaliy ahamiyatga ega. Murakkab molekulalar uchun kvant-mexanik hisoblashlarni, xususan taxminiy hisoblashlarni ham bajarish juda murakkab. Shuning uchun ham mazkur molekulalarni o'rganishda ularning simmetriyasini e'tiborga olish o'ta muhim ahamiyatga ega. Agar molekula fazoda bir-biridan farqlanmaydigan ikki yoki undan ortiq oriyentatsiyalarga ega bo'lsa, uni simmetriya vositalari orqali ifodalash mumkin.

Molekula aylanishi simmetriya operatsiyasi deyilsa, aylanma o'q esa simmetriya elementini xarakterlaydi. Simmetriya elementlariga simmetriya o'qi, simmetriya markazi va simmetriya tekisligi kiradi. Simmetriya elementlariga nisbatan simmetriya operatsiyasi bajariladi. Aksariyat molekulalar muayyan simmetriya turiga ega bo'lib, ularning simmetriya turiga mansubligiga klassifikatsiyalash orqali xossalari oldindan bashoratlash mumkin. Ayrim hollarda simmetriya orqali murakkab sistemalar uchun kvant-mexanik hisoblashlarni bajarish ham mumkin.

Kvant mexanikasi va spektroskopiyada simmetriyaning asosiy prinsiplari qo'llaniladi. Shu bilan bir qatorda molekulalar strukturasi neytronlar, elektronlar va rentgen nurlari difraksiyasi asosida o'rganishda ham simmetriya prinsiplaridan foydalaniladi. Bundan tashqari simmetriya elementlari asosida erkin molekulalarda dipol momentining mavjudligi va uning optik faolligi aniqlanadi. Simmetriyani miqdoriy jihatdan ifodalashda guruhlar nazariyasidan (algebraning bo'limi) foydalaniladi.

- Simmetriyani ifodalash uchun uning 5 ta elementi ishlatiladi:
- mos element yoki mos qayta shakllanish, E belgisi (yoki C_1) bilan ifodalanadi (identiplik operatsiyasiga mos keladi);
 - xususiy aylanma o'q C_n belgisi bilan ifodalanadi (simmetriya o'qi atrofida aylanish operatsiyasi);
 - ko'zgu tekisligi σ belgisi bilan ifodalanadi (simmetriya tekisligida aks etish operatsiyasi);
 - simmetriya markazi yoki inversiya markazi i belgisi bilan ifodalanadi (simmetriya markaziga nisbatan inversiya operatsiyasi);
 - xususiy bo'lmagan aylanma o'q (ko'zgu-aylanma o'qi) S_n belgisi bilan ifodalanadi (xususiy bo'lmagan aylanish operatsiyasi yoki aylanish-ko'zgu).

Kristallarni tahlil qilishda translyatsion (parallel ko'chish) siljishda strukturaviy farqlanmaslik ham qo'shiladi.

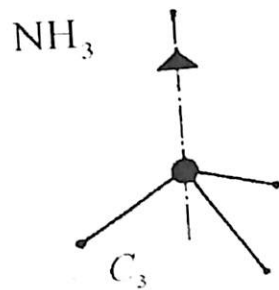
Simmetriya operatsiyalari—bu ob'yekt bilan muayyan harakatlarni bajarish, ya'ni ob'yektni qayta boshlang'ich holatiga olib kelishni ifodalaydigan harakatlardir. Ob'yektga u yoki bu simmetriya operatsiyalarining qo'llanilishi, ob'yektga mos ravishda simmetriya elementlarining mavjudligini xarakterlaydi. Xususan, ob'yektga mazkur simmetriya elementlari bir nechta bo'lishi mumkin. Ob'yektga simmetriya elementlarining yig'indisi uning u yoki bu simmetriya guruhiga taalluqli bo'lishini ifodalaydi.

Yuqorida qayd etilgan simmetriya operatsiyalarini batafsil ko'rib chiqaylik.

1. Identiplik E. Ob'yektning har qanday o'q atrofida 360° ga aylanishi. Mos qayta shakllanish (takrorlash) operatsiyasida molekulada hech qanday o'zgarish sodir bo'lmaydi. Mazkur operatsiya natijasida molekula oriyentatsiyasi nafaqat ekvivalent bo'lib qoladi, balki o'ziga mosligini saqlaydi. Har qanday ob'yekt, hattoki u simmetriyaga ega bo'lmasa ham, o'zidan farq qilmaydi va simmetriyaning mazkur elementiga ega bo'ladi hamda uni klassifikatsiyalash mumkin. Shunday qilib, nosimmetrik ob'yektlar alohida guruhga klassifikatsiyalanishi mumkin. Mazkur operatsiyaning bajarilishiga ehtiyojning zurrati bir necha simmetriya operatsiyalarining kombinatsiyasida guruhlar

nazariyasiga muvofiq izohlanadi. Mazkur operatsiya E yoki C_1 belgisi bilan ifodalanadi.

2. Xususiy aylanma o'q C_n . Agar molekulada tasviriy o'q o'tkazish mumkin bo'lsa va uning atrofida molekulani aylanishi sodir bo'lib, u ilgari ekvivalent holatiga qaytsa, ya'ni oriyentirlansa, u holda molekulada aylanma o'q bor deb aytiladi. Qaysidir o'q atrofida ma'lum burchakka (360°) aylanish karraligi ($360^\circ/n$, bunda n-butun son) dastlabki holat bilan mos kelishini ifodalaydi. Masalan, NH_3 molekulasida vodorod atomlari joylashgan tekislikka perpendikulyar bo'lgan, azot atomi orqali o'tgan o'qni ko'raylik. Mazkur o'q atrofida molekula aylanganda, har 120° da molekula o'zini qayta takrorlaydi, ya'ni ekvivalent oriyentatsiyalanishni ko'rish mumkin (1-rasm).

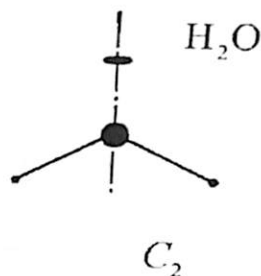


1-rasm. Ammiak molekulasi simmetriyasi

Boshlang'ich holatga nisbatan uchta turli oriyentatsiya holatlarini kuzatish mumkin. Mazkur o'qning tartibi uchga teng bo'ladi, chunki molekula o'zining dastlabki holatiga qaytishi uchun uch marta oriyentatsiyalanadi. Bu o'qqa uchinchi tartibli C_3 o'q deyiladi. Molekulani $\frac{2\pi}{n}$ (120° ga) burchakka aylanishi, ekvivalent operatsiyalarga olib keladi. Dastlabki oriyentatsiya tiklovchi n operatsiyalarga mos qayta shakllanish deb aytiladi. C_3^2 belgisi C_3 o'qi atrofida 240° ga aylanish ifodalanadi. C_3^2 operatsiyasi soat strelkasiga qarshi 120° ga aylanishga ekvivalent bo'lib, C_3^- belgisi bilan ifodalanadi.

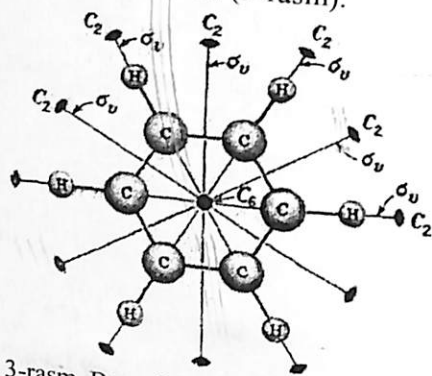
Ta'kidlash joizki, turli holatlar uchun ishoralarning teskari qoidasi qabul qilingan, ya'ni soat strelkasi aylanishiga teskari aylanish "+", strelka bo'ylab aylanish "-" ishora bilan ifodalanadi. Suv molekulasi 180°

($n=2$) ga aylanishida, u o'zining dastlabki konfiguratsiyasini takrorlaydi (2-rasm).



2-rasm. Suv molekulasini simmetriyasi

Bu holatda ikkinchi tartibli C_2 o'q kuzatiladi. Xuddi shunday, benzol molekulasining markazidan o'tayotgan o'q (molekula tekisligiga perpendikulyar) oltinchi tartibli o'qni C_6 ifodalaydi. Demak $n=6$ bo'lsa ($360^\circ/6=60^\circ$), molekulaning olti marta o'z oriyentatsiyasini takrorlanishini ifodalaydi. Shu bilan bir qatorda, benzolda ikkinchi tartibli o'qdan (C_2) oltita o'q ham mavjud (molekula tekisligida bo'lgan). Mazkur o'qlarning 3 tasi qarama-qarshi uglerod atomlari orqali o'tsa, qolgan uch tasi C-C bog'lar o'rtasidan o'tadi (3-rasm).



3-rasm. Benzolning simmetriya o'qlari

Molekulada n tartibli aylanma o'qning bo'lishi n operatsiyalar bo'lishini tushuntiradi: $n=1$ dan ∞ gacha qiymatni qabul qilishi mumkin, ya'ni C_1-C_∞ . Har qanday chiziqli molekulada bitta C_∞ o'qi bo'ladi. $C_n, C_n^2, C_n^3, \dots, C_n^{n-1}, C_n^n$. Bundan kelib chiqib, C_4^2 operatsiyasi C_2 ga, C_6^2 operatsiyasi C_3 ekvivalentdir. C_n^n operatsiyasi esa mos qayta shakllanish

(takrorlanish) operatsiyasidir. Molekulaning yuqori tartibli aylanma o'qi molekulaning bosh o'qi deb aytiladi. Agarda barcha C_n o'qlar bir-biriga ekvivalent bo'lsa, u holda o'qlarning har birini bosh o'q sifatida olish mumkin.

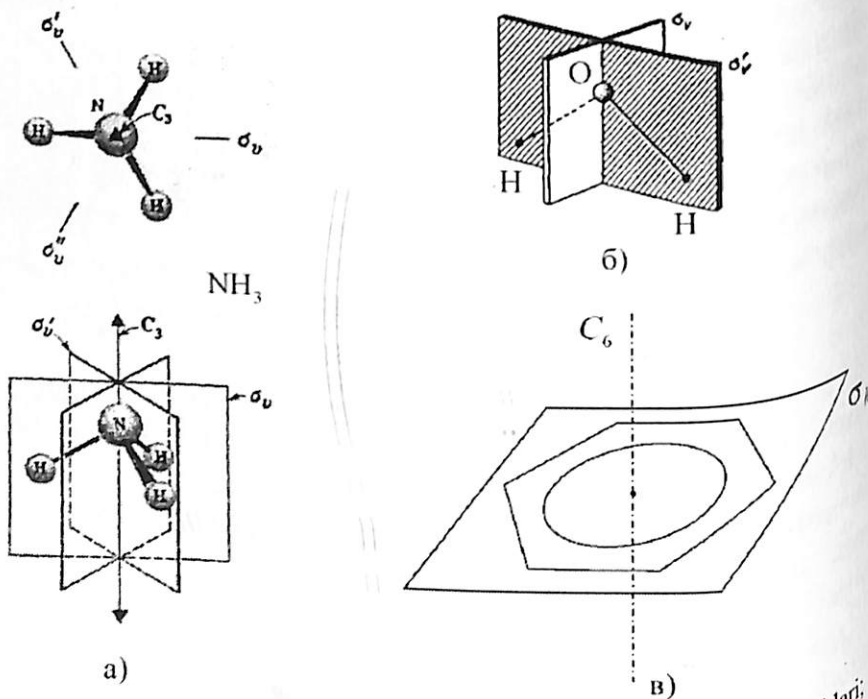
Molekula simmetriya elementlarini dekart koordinatalar sistemasida ko'rib chiqish qulay. Bunda y o'qidan x o'qiga qarab harakat musbat ishorali aylanish bo'ladi. Molekula massasi markazi koordinatalar boshida qo'yiladi. Agar molekulada faqat bitta simmetriya o'qi bo'lsa, u holda mazkur o'q Z o'qiga mos keladi. Agar o'qlar bir nechta bo'lsa, u holda molekula bosh o'qi deb Z o'qiga mos keluvchi o'q tanlanadi. Agar molekula bir nechta yuqori tartibli o'qlarga ega bo'lsa, bosh o'q sifatida molekula bir nechta yuqori tartibli o'qlarga ega bo'lsa, bosh o'q sifatida molekula tekisligida yotgan bo'lsa (masalan, suv molekulasini), x o'qi molekula tekisligiga perpendikulyar bo'lgan o'q tanlanadi. Shunday qilib, sifatida tekislikka perpendikulyar bo'lgan o'q tanlanadi. agar Z -aylanish o'qi bo'lsa, unda aylanish operatsiyalarining (x, y, z) koordinatalari ($-x, -y, -z$) koordinatalarga qayta o'zgarishdan iborat bo'ladi. C_2 operatsiyasini quyidagi holatda tasvirlash mumkin:

$$C_2^1 \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix}.$$

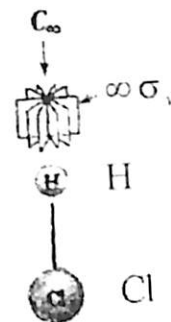
3. Ko'zgu simmetriya tekisligi σ . Agar molekulani ko'zguli aks etuvchi ikki qismga ekvivalent ajratuvchi tekislik bo'lsa, unda molekulada simmetriya elementi mavjud bo'lib, bu elementga ko'zguli simmetriya tekisligi deyiladi. Ko'zguli tekislik molekuladan tashqarida emas, albatta molekula orqali o'tishi kerak. Ko'zguli tekislikdagi molekula (ob'yekt) aksi, o'zining dastlabki shaklidan farq qilmaydi. Ko'zgu tekisligi σ qayta operatsiyasi dastlabki konfiguratsiyani takrorlaydi. Shu bois bunda faqat bitta muayyan operatsiya bo'ladi, ya'ni $\sigma^k = \sigma$ (k -juft emas), chunki $\sigma^k = E$ bo'lganda k -juft sonli bo'ladi. Agar ko'zgu tekisligi bosh simmetriya o'qi orqali o'tsa (vertikal bo'lsa), u holda ko'zgu simmetriya tekisligi σ_v bilan ifodalanadi (4,a,b-rasmlar). Agar ko'zgu simmetriya tekisligi bosh simmetriya o'qiga perpendikulyar bo'lsa, σ_h bilan ifodalanadi (4v-rasm). Agar tekislik vertikal bo'lib, C_2 o'qlari orasidagi burchakni teng qismlarga ajratsa (bosh

o'qqa perpendikulyar bo'lgan), u holda ko'zgu simmetriya tekisligi σ_d (diagonalli yoki diedrik) belgisi bilan ifodalanadi.

Suv molekulasida ikkita o'zaro perpendikulyar bo'lgan σ_v va σ_v' mavjud (4b-rasm). Ammiak molekulasida esa uchta σ_v (4a-rasm) bor. Benzol molekulasida mavjud tekisliklardan tashqari σ_h va oltita σ_v tekisliklarga ega (2-rasm va 4v-rasm). C_∞ o'qlarga ega bo'lgan chiziqli molekular cheksiz ko'p miqdorda σ_v ko'zguli tekisliklarga ega bo'ladi (5-rasm).



4-rasm. Ammiak NH_3 (a) va suv H_2O (b) molekularining kuzgu tekisliklari; benzol (v) molekulasining kuzgu tekisligi

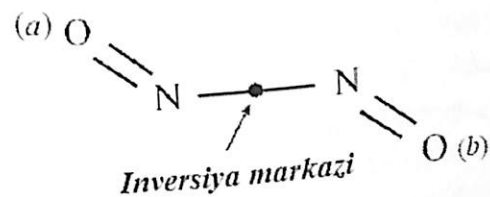


5-rasm. HCl molekulasining tuzilishi

Agar xz ko'zguli tekislik bo'lsa, u holda qayta aks (ko'zgu) operatsiyasi quyidagi holatda yozilishi mumkin:

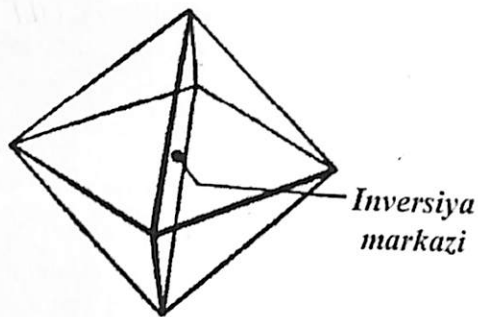
$$\sigma \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ -y \\ z \end{bmatrix}$$

4. Simmetriya markazi i . Ob'yektning har qanday ko'riladigan nuqtalarini simmetriya markazi bilan tutashtiruvchi hamda ushbu to'g'ri chiziqni simmetriya markazidan keyin ham, xuddi shu masofada davom ettiruvchi kesma inversiyani ifodalaydi. Bunda olingan nuqtada ob'yektning ekvivalent elementi bo'lishi kerak. Agar molekuladagi atom ramziy ravishda to'g'ri chiziq bo'ylab harakat qilib, markaz orqali o'tib, xuddi shu masofada o'ziga mos atomni uchratsa, bunday molekulada simmetriya markazi yoki inversiya markazi bor deb qaraladi. Giponitrit ionida (6-rasm) (a) kislorod atomi inversiya markazi orqal harakatlansa, u boshqa (b) kislorod atomi bilan uchrashadi. Xuddi shu hodisa ikkala azot atomlari bilan ham sodir bo'lishi kerak.

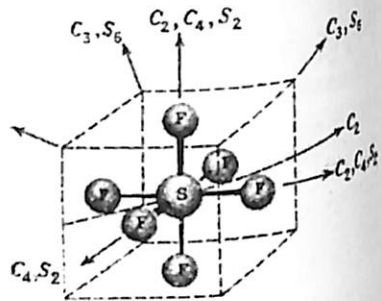


6-rasm. Giponitrit ionining inversiya markazi

Shar, kub, to'g'ri oktaedr (7-rasm) benzol (4, v-rasm), SF₆ (8-rasm), CO₂ shakllari simmetriya markaziga ega bo'lib, H₂O, NH₃, CH₄ (1-, 2-, 9-rasmlar) molekulari esa simmetriya markaziga ega emas.



7-rasm. To'g'ri oktaedrning inversiya markazi



8-rasm. SF₆ molekulasining simmetriyasi

Agar simmetriya markazi koordinatalar sistemasi boshida joylashtirilsa, bunga mos ravishda simmetriya operatsiyasida har bir atom koordinatalarining (x, y, z) boshqa koordinatalarga (-x, -y, -z) o'zgarishi sodir bo'ladi. Shunday qilib, inversiya operatsiyasi:

$$i \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix};$$

ikkilamchi:

$$i \cdot i \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = i \cdot \begin{bmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix};$$

Umuman olganda $i^k = i$ (k - juft), $i^k = E$ (k - toq), ya'ni faqat bitta operatsiya aniq hisoblanadi.

Atomlar markaziy holatdan tashqari markazi simmetriyali juftliklarda bo'lishi kerak.

6. Xususiy aylanmasi bo'lmagan o'q S. Mazkur operatsiya aylanma o'qqa perpendikulyar bo'lgan ko'zgu tekisligi aksidan o'q atrofida aylanishini qamrab olgan yoki aksincha (aylanish-aksiga ekvivalent bo'lgan aks-aylanish) bo'ladi.

Agar mazkur ikki ikki operatsiya natijasida ekvivalent strukturasi hosil bo'lsa, u holda molekula ko'zgu-aylanma o'qqa egaligi to'g'risida

gapiriladi va aksincha, simmetriyaning ushbu elementiga xarakterli bo'lgan operatsiyaga ko'p holda xususiy bo'lmagan aylanish deyiladi. S_n ifodaning quyi n indeksi soat strelkasi bo'ylab 2π/n ga aylanishini ko'rsatadi. Masalan, S₂ ifodasi soat strelkasi bo'ylab 180° ga ikki martali aylanishni ko'rsatadi. Ma'no jihatidan S₂ o'qi i ga ekvivalentdir.

Agar C_n o'qi va unga perpendikulyar bo'lgan σ tekislik mavjud bo'lsa, u holda C_n va S_n ham (9a-rasm) bo'ladi.

Endi, C_n va S_n mavjudligida C_n ga perpendikulyar bo'lgan ko'zgu tekisligi alohida tarzda bo'lolmasligi holatini ko'raylik. 9b-rasmda keltirilgan etan molekulasida C-C bog'i C₃ o'qini aniqlaydi, lekin unga perpendikulyar bo'lgan ko'zgu tekisligi mavjud emas. Agarda molekula C-C bog' atrofida 60° ga aylantirilsa va keyin bu o'qqa perpendikulyar bo'lgan tekislikda aks ettirilsa, ekvivalent konfiguratsiya olinadi. Mos ravishda S₆ o'qi mavjud bo'lib, bir vaqtda C₆ o'qi bo'lmaydi.

Xususiy bo'lmagan toq va juft tartibli aylanma o'qlar farqini ko'rib chiqaylik. Agar n juft bo'lsa, S_n^m quyidagi S_n¹, S_n², S_n³, ..., S_nⁿ to'plamiga olib keladi, bular esa quyidagi ifodalarga C_n¹σ¹, C_n²σ², C_n³σ³, ..., C_nⁿσ ekvivalentdir.

Ta'kidlash joizki, C_nⁿσⁿ ma'nosi-oldin aks etish sodir bo'lsa, keyin aylanish jarayonidir va aksincha, σⁿC_nⁿ bo'lsa oldin aylanish, keyin aks etish jarayonidir. Agar m toq bo'lsa σ^m = σ bo'ladi va m juft bo'lsa, σ^m = E holatini bildiradi. Mazkur yondashuv quyidagi mosliklarga olib keladi:

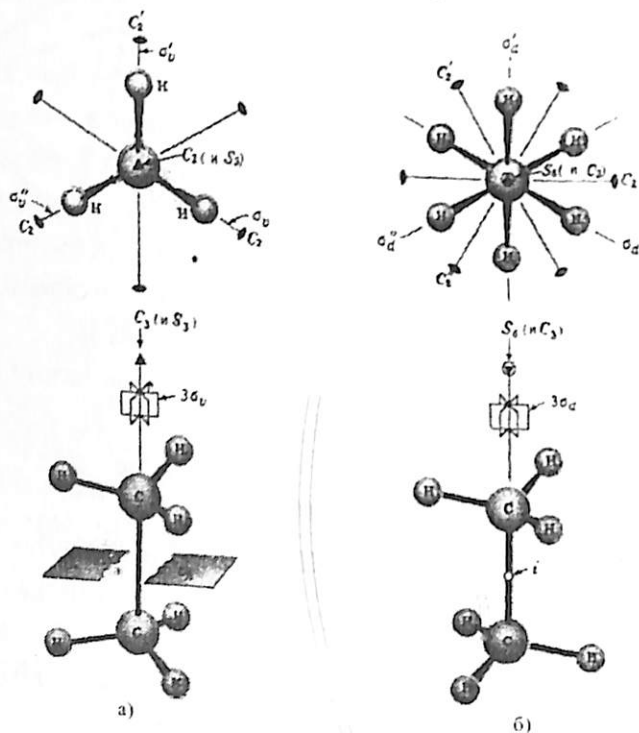
S_nⁿ = C_nⁿE = E va S_n^m = S_n^m Qayd etish lozim bo'ladi, toq tartibli bo'lgan S_n o'qidan doimo C_n/2 borligi kelib chiqadi, chunki S_n² = C_n²σ² = C_n/2. 8-, 9-, 10-rasmlarda S₂, S₄, S₆ aylanma o'qlari mavjud bo'lgan molekullardan misollar keltirilgan.

Chizmalardan ko'rinib turibdiki, SF₆ molekulasida uchta S₂ va S₆ o'qlari mavjud (8-rasm) bo'lsa, metan CH₄ molekulasida uchta S₄ o'qlari (10-rasm) bor. Xususiy aylanma bo'lmagan S₆ o'qi stasionar etan molekulasida (9b-rasm) mavjuddir. Suv (H₂O) va ammiak (NH₃) molekulari esa umuman ko'zgu aylanma o'qlarga ega emas.

Etanning stasionar holatdagi strukturasi (9b-rasm) uchun S₆¹, S₆², S₆³, S₆⁴, S₆⁵, S₆⁶ o'qlar to'plamini ko'rib chiqaylik. S₆¹ va S₆⁵ o'qlarni

boshqa qandaydir usulda ifodalash mumkin emas. $S_6^2 = C_6^2 \sigma^2 = C_3$; $S_6^3 = S_2 = i$ (S_2 o'qi har doim i ga teng); $S_6^4 = S_3^2$; $S_6^5 = E$ holatda ifodalash mumkin. Mazkur holatlar to'liq to'plami odatda quyidagicha ifodalanadi:

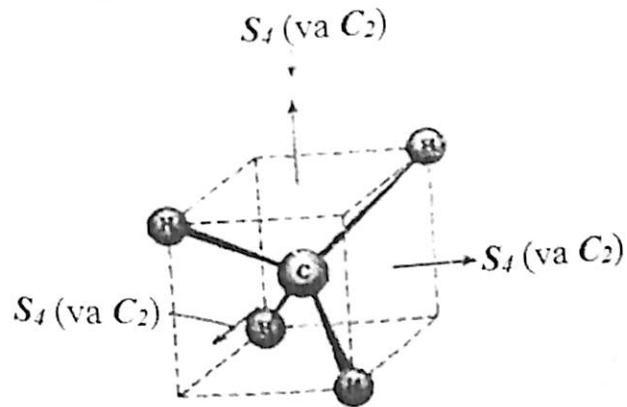
$$S_6 C_3 i C_3^2 S_6^5 E.$$



9-rasm. Etan konfiguratsiyasi
a) soyali (diedral burchak=0,2,4);
b) shaxmatli (diedral burchak=1,3,5).

Agar n toq bo'lsa, S_n^m holat S_n , S_n^2 , S_n^3 , S_n^4 , ... S_n^{2n} ifodalash to'plamiga olib keladi. S_n dagi n toqligi C_n ga mos keladi va unga perpendikulyar bo'lgan σ . Ta'kidlash kerakki, S_n^n operatsiyasi n toq bo'lganda, $C_n^n \sigma^n = C_n \sigma = \sigma$ ga ekvivalent bo'ladi. Misol tariqasida S_3 ni ko'rib chiqaylik. Bu holda hammadan oldin dastlabki konfiguratsiyani ekvivalent takrorlovchisi, (mazkur molekula uchun σ bo'lgani uchun) aks tasviri bo'lishi kerak. Molekulaning S_3^1 ga mos konfiguratsiyani berishi kerak.

Molekulaning S_3^1 simmetriya operatsiyasi C_3 atrofida aylangandan so'ng dastlabki konfiguratsiyaga ekvivalent bo'lishi kerak. Shunday qilib C_3 o'qi haqiqatdan ham mavjuddir. Umuman olganda har qanday S_n operatsiyasi uchun (n toq bo'lganda) C_n ham simmetriya operatsiyasi bo'ladi. Misol tariqasida S_3 o'qi bo'lgan molekula 9a-rasmga keltirilgan. Simmetriya elementlari va operatsiyalarini ko'rib chiqishda qo'llanilgan asosiy tushunchalarni 1-jadvalda umumlashtiramiz.



10-rasm. CH₄ molekulasining simmetriya ko'rinishlari

1-jadval

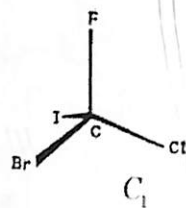
Simmetriya elementlari va operatsiyalari			
Simmetriya operatsiyalari	Simmetriya elementlari	Belgisi	Misol
Bir xil qayta hosil bo'lishi	-	E	Barcha molekularlar
Aks etishi	Tekislik	Σ	H_2O, BF_3
Inversiya	Nuqta (simmetriya markazi)	I	Cl_2B-BCl_2
Xususiy aylanishi	O'q	C_n	NH_3, H_2O
Xususiy aylanishi ($2\pi/n$ ga aylanish bilan o'qqa perpendikulyar tekislikda aks etishi)	O'q va tekislik	S_n	Etan

8.2. Nuqtali guruhlar

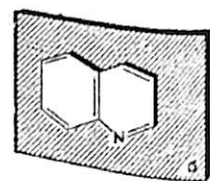
Ob'yektlar (xususan molekular) simmetriyasiga qarab, ya'ni simmetriya elementlariga mos ravishda ularni guruhlariga birlashtirish (umumlashtirish) yo'li bilan klassifikatsiyalanadi. Simmetriya operatsiyalarining mumkin bo'lgan kombinatsiyalariga simmetriyaning nuqtali guruhlari deb aytiladi. Ifodalashning ikki sistemasi mavjud. Shenorlis hamda German-Mogen dual molekularni ko'rib chiqishda qo'llanilsa, German-Mogenning xalqaro fazoviy guruhlar sistemasi asosan kristallar tuzilishini tahlil qilishda qo'llaniladi.

Nuqtali guruhlarda simmetriyaning barcha elementlari koordinatalar boshidan yoki belgilangan nuqtalar orqali o'tadi. Nuqtali guruhlarning ko'p sonli turlari mavjud bo'lib, ularni 10 ta asosiy turlarga ajratish mumkin.

1. C_1 , C_2 , C_i guruhlar (C_1 guruh va C_1 element ifodalari mos keladi). Agarda molekula nosimmetrik bo'lsa, u C_1 guruhga taalluqli (E element) bo'ladi (11-rasm). Agar E elementlari va simmetriya ko'zgu tekisligi σ bo'lsa molekula u holda C_s nuqtali guruhlariga taalluqli (12-rasm) bo'ladi.



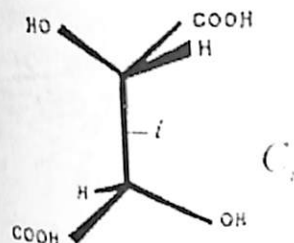
11-rasm. Nosimmetriyaga misol



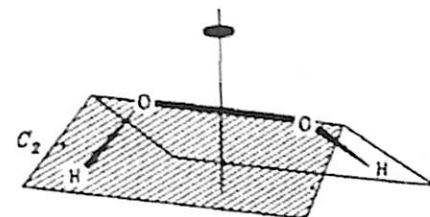
12-rasm. Molekulaning C_s simmetriya guruhi (C_1 guruh)

Agar E va i inversiya C_i guruh bo'lsa, masalan, mezovin kislota (13-rasm).

2. C_n guruhlar ($n > 1$). Mazkur guruh ifodalari elementlar ifodasi bilan mos keladi. Ularni simmetriya E va C_n elementlari hosil qilishadi (masalan vodorod peroksid, 14-rasm).



13-rasm. Mezovino kislota molekulasining simmetriyasi

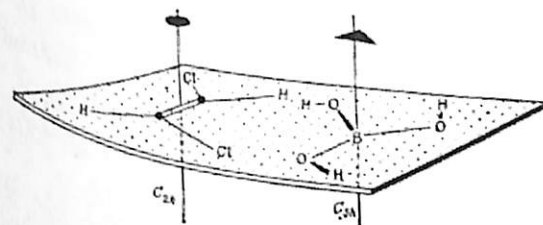


14-rasm. Vodorod peroksid molekulasini (C_2 guruh)

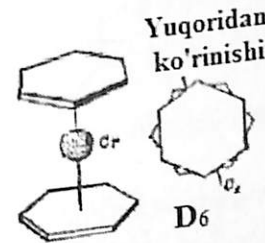
3. C_{nv} ($n > 1$) guruhlar E , C_n elementlari va n vertikal ko'zgu tekisligi σ_v . Suv molekulasini faqat bitta aylanma o'q va ikkita σ_v ($E, S_2, \sigma_v, \sigma_v'$) - C_{2v} guruhiga ega bo'lsa, ammiak molekulasini ($E, S_3, \sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''$ yoki $E, S_3, 3\sigma_v$) - C_{3v} guruhlariga ega.

4. C_{nh} ($n > 1$) guruhlar. E , C_n elementlari va gorizontall ko'zgu tekisligi σ_h aylanma o'q C_n ga perpendikulyar holat. (15-rasm). C_{2h} guruhi avtomatik tarzda I elementiga ega bo'ladi. Konus geometrik shakli $C_{\infty h}$ guruhiga taalluqli bo'lgani uchun, ikki atomli geteroyadrol molekular ham $C_{\infty h}$ guruhga mansubdir.

5. D_n guruhi. E , C_n elementlar va n ta C_2 o'qlar C_n ga perpendikulyar holat. Masalan, 16-rasmda metallsenlar biri bo'lgan molekula D_6 li ob'jekt keltirilgan.

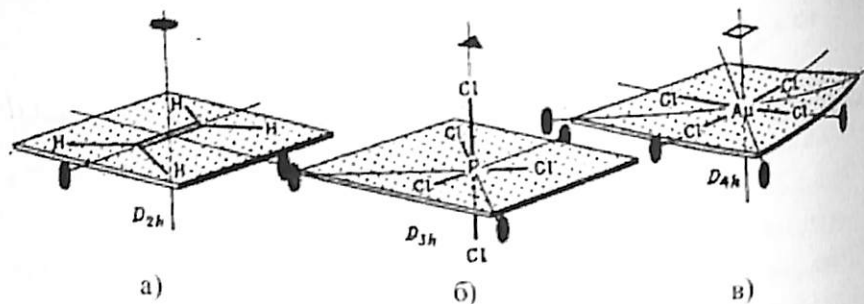


15-rasm. C_{2h} ($C_2H_2Cl_2$) va C_{3h} (H_3BO_3) guruhlar



16-rasm. D_6 simmetriya guruhi

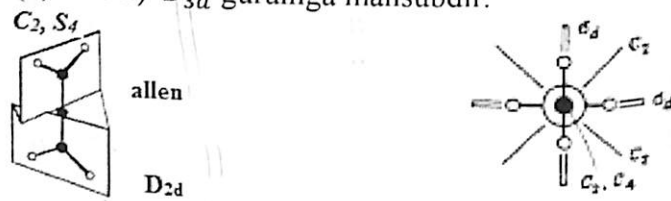
6. D_{nh} guruhlar. Bular D_n plus σ_h guruh bo'lib, ular C_n o'qiga perpendikulyardir (17-rasm). Mazkur guruh n ta vertikal ko'zgu tekisliklarga ega (17-rasm).



17-rasm. D_{nh} simmetriya guruhlari
 a- D_{2h} (etilen molekulasida)
 b- D_{3h} (PCl_5 molekulasida)
 v- D_{2h} ($AuCl_4$ molekulasida)

Guruhda n ta vertikal ko'zguli tekisliklar mavjud. BF_3 tekis molekula D_{6h} ga taalluqli. Silindrning geometrik shakli $D_{\infty h}$ guruhiga mansub bo'lganligi uchun, ikkiatomli gomoyadro molekular $D_{\infty h}$ guruhga taalluqlidir.

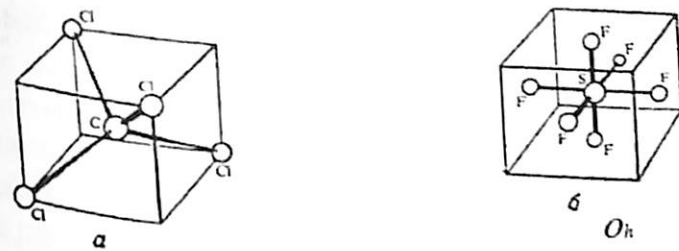
7. D_{nd} guruhlar-bu D_n guruh va plyus σ_d tekisligi bo'lib, unda C_n bosh o'q mavjud bo'lib, birorta ham C_2 perpendikulyar o'qlar mavjud emas (18-rasm). Masalan, etanning shaxmatli stasionar konmarsion molekulasida (8,b-rasm) D_{3d} guruhiga mansubdir.



18-rasm. D_{nh} guruhi molekulariga misol

8. T, O kubik guruhlar va ularning hosilalari (19-rasm). Mazkur guruhlar ob'yektlarida bittadan ortiq bosh simmetriya o'qi mavjud. Masalan CH_4 metan molekulasida to'rtta bir xil ekvivalent, teng qiymatli C_3 o'qlari bor. Kubik shakllarda T, T_n , T_h guruhli tetraedrlar va O, O_h guruhli oktaedrlar ajralib turishadi. T_d guruh-to'g'ri tetraedrlar, O_h guruh-to'g'ri oktaedrlardir. Agarda ob'yekt aylanma tetraedr yoki oktaedr simmetriyaga ega bo'lib, birorta ham σ tekislikka ega bo'lmasa u holda ob'yekt T yoki mos ravishda O guruhlariga taalluqli bo'ladi.

guruhiga T guruhining xarakteristikalariga va I inversiya markaziga ega bo'lgan ob'yektlar kirishadi.



19-rasm. T_d (CCl_4) (a) va O_h (SF_6) (b) guruhli molekular

9. R_3 to'liq aylanish guruhi-sferik ob'yekt. Bu guruhga atomlar mansub bo'lib, birorta ham molekula kirmaydi.

10. S_n guruhlar, ayrim holatlarda bu guruhlar alohida ajratilmaydi. Mazkur guruhlar ob'yektlari S_n simmetriya elementlari mavjudligi bilan xarakterlanadi.

8.3. Molekularni nuqtali guruhlar bo'yicha klassifikatsiyalash tartibi

Ob'yektlarni guruhlariga binoan klassifikatsiyalashni soddalashtirish uchun aksariyat ob'yektlarga (sferik simmetriyasiga ega emas deb qaraladigan) to'g'ri keladigan quyidagi tartibni taklif qilish mumkin:

1. Kub diagonali bo'ylab to'rtta C_3 o'qlari mavjudligiga qarab molekula T yoki O guruhlariga taalluqligini aniqlash.
2. Agar ob'yekt birorta ham C_n o'qiga ega bo'lmasa, lekin: a) tekislik σ - C_s guruh bo'lsa; b) simmetriya markazi i- C_i guruh bo'lsa; v) hech narsa yo'q-guruh C_1 bo'lsa.
3. Agar hech bo'lmaganda bitta C_n bo'lsa, bosh o'q aniqlanadi.
4. Bosh o'q yoki boshqa o'qqa mos keluvchi S_{2n} o'q bo'lsa va simmetriyaning boshqa elementlari bo'lmasa (i dan tashqari), u holda ob'yekt S_m ($m = 2n$) guruhiga taalluqli.
5. Agar oldingi punkt to'g'ri (mos) kelmasa u holda bosh yoki boshqa o'qlarga perpendikulyar bo'lgan C_2 o'qlarni n soni aniqlanadi.

Agar mavjud bo'lsa, ob'yekt D guruhning biriga mansub bo'ladi. Agar σ_h tekislik- D_{nh} guruh bo'lsa, σ_d tekislik- D_{nd} guruh bor bo'lsa, o tekislik yo'q- C_n guruh.

8.4. Simmetriyaning ayrim oddiy xususiyatlari

Dipol momenti vektor kattalik bo'lib, uning qiymati va yo'nalishiga har qanday simmetriya operatsiyalari ta'sir etmaydi. C_n , C_{nv} , C_s , C_i guruhlar taalluqli ob'yektlar xususiy dipol momentiga ega bo'lishi mumkin. Mazkur guruhlarda ob'yektlarni yuqoriga yoki pastga aylantirish (masalan, C_{3h} , D yoki boshqa guruhlarda mavjud bo'lishi) yo'q. Masalan, CO_2 yoki H_2O shunday tuzilishga ega bo'lishi mumkin, mos ravishda simmetriya chiziqli molekula yoki nosimmetrik chiziqli molekula yoki buralgan molekula. Tajribadan ma'lumki, CO_2 ning dipol momenti qiymati nolga teng, shuning uchun molekula chiziqli simmetriyaga ega. Suv molekulasida esa aniq dipol momentiga ega bo'lmaydi, lekin xlorbenzol dipol momentining yo'nalishi molekula markazi va xlor atomi orqali o'tadi.

Optik faollik. Molekula xiralik xossasiga ega bo'lsa, u qutblangan yorug'lik tekisligini aylantirishga qobiliyatli bo'ladi. "Xiralik" termini yunonchadan olingan bo'lib, "qo'l" ma'nosini anglatadi. Xiralik shakllar ikki "ko'zgu-aks" ekvivalent formalarda mavjud bo'ladi, ya'ni enantiomerlar: biri "o'ng" ikkinchisi "chap" deyiladi. Har bir enantiomer o'z juftining ko'zgudagi aksi bo'ladi (agar ular mos ravishda fazoda joylashtirilsa), lekin uni fazoda har qanday ko'chirish bilan moslashtirish mumkin emas. Bu holatni ikki qo'lida kuzatish mumkin, ya'ni ular bir-biriga ko'zgu aksida bo'ladi, lekin bir-birini o'rnini ololmaydi. Xiralik birikmalar suyuq holatda qutblanish tekisligini preparat qalinligiga proporsional ravishda α burchakka buradi. Bunda preparat enantiomerlarni yoki ulardan birini o'zida saqlagan deb nazarda tutiladi.

Agar S_n o'qi bo'lsa, molekula noxiral (axiral) bo'lib, optik faollikka ham ega bo'lmaydi (masalan, C_{nh} guruhi, S_n ni o'zida mujassamlashtirgan).

Agar simmetriya markazi i bo'lsa, ob'yekt optik faol bo'la olmaydi. Ichki erkin aylanish imkoniyati bo'lgan molekullarda ($etan$, H_2O_2) optik faol konformatsiyalar bo'lishi mumkin, lekin ular suyuqliklarda teng miqdorda ishtirok etib, gaz yoki eritmada umuman olganda optik faol bo'la olmaydi.

Orbitallarning simmetrik xossalari. Orbitallarning simmetriyasini izohlashda ψ -funksiyaning ishorasini e'tiborga olish shart. s-orbitallar R_3 guruhiga taalluqli. p-orbitallar perpendikulyar tekislikka asimmetrik bo'lib, i inversiya markaziga ega emas, d-orbitallar esa i inversiya markaziga ega.

8.5. Guruhli ko'paytuvchi, guruhlar xossasi

Simmetriya har qanday ikki operatsiyasining ko'paytmasi ularni ketma-ket qo'llanilishi sifatida aniqlansa, simmetriya operatsiyasi bo'ladi. Shuning uchun ham molekula simmetriyalari bilan amalga oshiriladigan C_2 va σ_v^I operatsiyalarning ko'paytmasi C_{2v} (masalan H_2O) -bu σ_v dir (eslatma: C_2 o'q z o'qi bo'lib, molekula yz tekisligida joylashgan, yz tekisligi σ_v^I tekisligidir:

$$C_2 \cdot \sigma_v^I = \sigma_v$$

Odatda "ko'paytma" terminini simmetriya operatsiyasini izohlashda "kombinatsiya" terminini xarakterlaydi. Operatsiyani yozish tartibi (chapdan o'ngga) ularni bajarishga qarama-qarshi tartibdir. Keltirilgan misolda σ_v^I birinchi bajariladi, keyin esa C_2 operatsiyasi, u mos ravishda σ_v^I operatsiyasi natijalarini takrorlaydi. Umuman olganda, oxirgi natija operatsiyalarni bajarish tartibiga bog'liq bo'ladi, ayrim holatlarda esa bog'liq bo'lmaydi. Agar ikki operatsiyalar natijasi ularni bajarish tartibiga bog'liq bo'lmasa (masalan, $C_2 \sigma_v^I = \sigma_v^I C_2$), u holda simmetriyaning ikki C_2 va σ_v^I elementlari o'zgaradi.

Simmetriya operatsiyalari guruhlar nazariyasi yordamida ko'rib chiqilishi mumkin. Elementlar yig'indisi matematik guruhini hosil qilishi uchun quyidagi shartlar bajarilishi kerak:

1. Har qanday ikki elementlar kombinatsiyasi va har qanday element kvadrati mazkur guruh elementini berishi kerak. Agar C_{2v} nuqtali guruh elementi kvadratga ko'tarilsa yoki mazkur guruh elementlarining mumkin

bo'lgan kombinatsiyalari olinsa, undan yana C_{2v} guruhga taalluqli element hosil bo'ladi. Bunda odatdagi arifmetikadagi ko'paytmadan farqli operatsiyalar kombinatsiyasi ketma-ket bajarilishini unutmashlik kerak.

2. Guruh birorta operatsiyasi barcha boshqalari bilan o'zgarishda bo'lishi kerak va ularni o'zgarishsiz qoldirish lozim. Bunday elementga bir xil o'zgarish xos, ya'ni:

$$E\sigma_2 = \sigma_2 E = \sigma_2.$$

3. Ko'paytirishning assotsiativ qonuni bajarilishi lozim, ya'ni:

$$(XY)Z = X(YZ).$$

Agar birinchi element qolgan ikki elementlar ko'paytmasi bilan $[\sigma_v(C_2 \cdot \sigma_v)]$ kombinatsiyalansa yoki boshlang'ich ikki elementlar ko'paytmasi keyingisi bilan kombinatsiyalansa, [ya'ni $(\sigma_v C_2) \cdot \sigma_v$], u holda uchta element kombinatsiyasi natijasi ham shunday bo'lishi kerak.

4. Har qaysi element guruh elementi bo'lgan qaytar elementga ega bo'lishi kerak. Shunday qilib, simmetriyaning har bir operatsiyasi uchun dastlabki operatsiya natijalarini bartaraf etuvchi operatsiya bo'lishi kerak. Har qanday ko'zgu tekisligi uchun teskari element bo'lib o'xshash ko'zgu tekisligi bo'lishi kerak, ya'ni:

$$\sigma\sigma = E.$$

Xususiy C_n^m aylanish uchun teskari element bo'lib C_n^{n-m} ; $C_n^m C_n^{n-m} = E$ hisoblanadi.

Agar A element teskari B elementga ega bo'lsa, u holda $AB=BA=E$ bo'ladi. Agar B element A ga qarama-qarshi bo'lsa, u holda A ham B ga qarama-qarshi bo'ladi. Umuman, A elementga teskari elementni A^{-1} ko'rinishda yozish mumkin. C_3 elementiga teskari element C_3^2 bo'ladi, ya'ni:

$$C_3 C_3^2 = C_3^2 C_3 = E$$

Guruhli ko'paytma jadvaliga barcha kombinatsiyalar jadvali deyiladi. Oddiy ko'paytma qoidaga binoan kommutativ bo'lmagani uchun muayyan aniq ko'paytma tartibiga rioya qilinishi kerak. Odatda, operatsiyani quyidagi tartibda bajarish qabul qilingan:

Vetrikal ustun elementi gorizontaal qator elementiga ko'paytiriladi, ya'ni ko'paytuvchi CR shaklida yozilsa, unda C vertikal ustunga, R

gorizontaal qatorga taalluqli bo'ladi. Masalan, 2-jadvalda C_{3v} guruh uchun guruhli ko'paytma ifodalari keltirilgan.

S_{3v} nuqtali guruh uchun ko'paytuvchi jadvali

R \ C	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
E	E	C_3	C_3^2	σ_v	σ_v'	σ_v''
C_3	C_3	C_3^2	E	σ_v''	σ_v	σ_v'
C_3^2	C_3^2	E	C_3	σ_v	σ_v'	σ_v''
σ_v	σ_v	σ_v'	σ_v''	E	C_3	C_3^2
σ_v'	σ_v'	σ_v''	σ_v	C_3^2	E	C_3
σ_v''	σ_v''	σ_v	σ_v'	C_3	C_3	E

8.6. Transformatsiyalarning matritsali berilishi. Simmetriya operatsiyalarining xossalari

Sonlar yoki belgilarning to'g'ri burchakli shaklda joylashuvi quyidagi umumiy ko'rinishga ega:

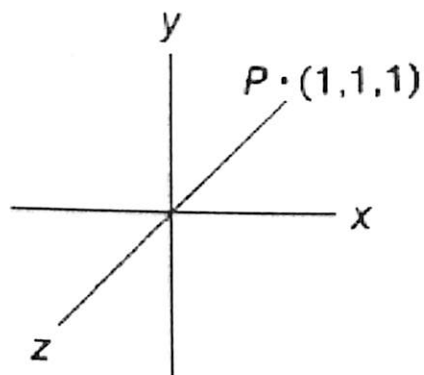
$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}.$$

Kvadrat qavslar yuqoridagi yozuv tartibi determinant emas, balki matritsa ekanligini ifodalaydi. Agar matritsada ustunlar soni qatorlar soniga teng bo'lsa, kvadrat matritsa deb aytiladi. Kvadrat matritsaning a_{11}, a_{22}, a_{33} elementiga diagonal elementlar, boshqalariga esa nodiagonal elementlar deyiladi.

Agar kvadrat matritsaning har bir diagonal elementi birga teng bo'lsa-yu, nodiagonal elementlar nol bo'lsa, bunday matritsaga birlamchi matritsa deyiladi. Kvadrat matritsaning muhim xarakteristikasi, izi yoki xarakteri diagonal elementlarining yig'indisidan iborat. Matritsalar algebrasidan foydalanib, matritsalarini qo'shish, ayirish, bo'lish va ko'paytirish mumkin.

Ilgari ta'kidlanganidek, E, σ , I, C_n , S_n ob'yektlar simmetriyasini ifodalaydi. Mazkur operatsiyalarining har birini matritsa orqali ifodalash mumkin.

x, y, z koordinatalari 1 ga teng bo'lgan P nuqtani (20-rasm) hamda mazkur o'qlarga nuqtaning mos ravishdagi proyeksiyasini ko'rib chiqaylik.



20-rasm. Dekart koordinatalar sistemasidagi nuqta

Mazkur nuqtaga nisbatan mos qayta shakllantirish koordinatalarning yangi ko'rsatkichlar to'plamiga olib keladi, u esa daslabkisidan hech qanday farq qilmaydi.

Mazkur operatsiyani quyidagi matritsa ifodalaydi:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X \\ Y \\ Z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{bmatrix}$$

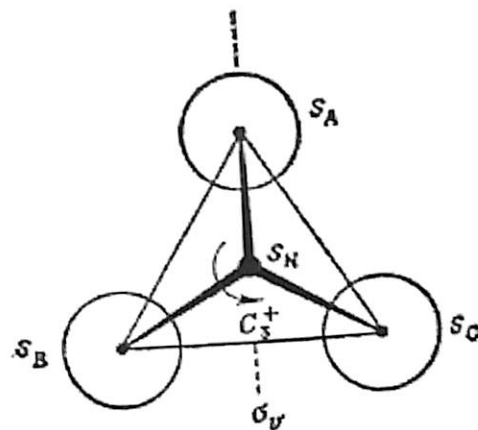
Matritsalar ko'paytmasi quyidagini beradi:

$$X = X'$$

$$Y = Y'$$

$$Z = Z'$$

Ushbu birlamchi matritsa bir xil qayta hosil qilish deb aytiladi. Markaziy S_N atomli va uchta S_A, S_B, S_C atomlari bo'lgan C_{3v} molekulani ko'rib chiqaylik (21-rasm).



21-rasm. Molekulaning simmetriya guruhleri C_{3v}

Operatsiyada:

$$\sigma_v(S_N, S_A, S_S, S_B) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C).$$

Bunday transformatsiyani matritsali ko'paytmadan foydalanib, ifodalash mumkin, ya'ni shunday $D(\sigma_v)$ matritsani topish mumkin-ki, u:

$$\sigma_v(S_N, S_A, S_S, S_B) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$D(\sigma_v)$ matritsaga σ_v operatsiyani ifodasi deyiladi. C_3^- operatsiyasi ifodasining $D(C_3^-)$ matritsasi:

$$(S_N, S_C, S_A, S_B) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

C_3^+ operatsiyasi ifodasi – $D(C_3^+)$ matritsa:

$$(S_N, S_B, S_C, S_A) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

E ifodasi:

$$D(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$D(\sigma_v')$ uchun:

$$(S_N, S_C, S_B, S_A) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$D(\sigma_v'')$ uchun:

$$(S_N, S_B, S_A, S_C) \leftarrow (S_N, S_A, S_B, S_C) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$D(\sigma_v) \cdot D(C_3^+)$ ko'paytmasi uchun:

$$D(\sigma_v) \cdot D(C_3^+) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} = D(\sigma_v')$$

$D(\sigma_v') = D(\sigma_v) \cdot D(C_3^+)$ ifoda $\sigma_v' = \sigma_v \cdot C_3^+$ ga mos keladi.

Guruhli ko'paytirishlarning to'liq jadvalini matritsali berilishlarni algebraik ko'paytirish bilan hosil qilinadi.

Olti matritsadan iborat to'plam C_{3v} guruhi va 2-jadvalning matritsali ifodalanishini algebraik tuzish mumkin. (S_N, S_A, S_C, S_B) elementlarga bazis deb aytiladi (ushbu holatda u to'rt o'lchamli bo'lib, to'rt o'lchamli matritsaga olib keladi, metan uchun (T_d guruh) bazis to'rt o'lchamli).

Berilgan misolda matritsali ifodalashning diagonal elementlari qo'shilsa, quyidagi hosil bo'ladi:

$$\begin{matrix} D(E) & D(C_3^+) & D(C_3^-) & D(\sigma_v) & D(\sigma_v') & D(\sigma_v'') \\ x = 4 & 1 & 1 & 2 & 2 & 2 \end{matrix}$$

Simmetriya operatsiyalari matritsali ifodalarining diagonal elementlari yig'indisi ushbu operatsiyaning χ xarakteri deyiladi. Bir xil χ li operatsiyalar bir sinfga mansub bo'lishadi. Operatsiya $\chi(g_i)$ xarakteri bazisga bog'liq bo'ladi. Turli sinflar xarakteri bir xil bo'lishi mumkin, u holda

Yakka S_N atomni bazis sifatida olish mumkin, u holda simmetriyaning har qanday operatsiyasi $S_N \leftarrow S_N$ ifodaga moslashadi va har qanday operatsiyaning ifodasi $S_N = S_N \cdot 1$ tarzida yoziladi, bunda 1 ni ifodalar xarakteri $\chi=1$ bo'lgan matritsa sifatida ko'rish mumkin.

Mazkur ifoda noinformativ bo'lib, guruhlarning ishonchsiz ifodasi deb aytiladi.

8.7. Keltirilmaydigan ifodalar

C_{3v} guruhi simmetriya operatsiyalari matritsali tasavvurlari blok-diagonal shakliga ega ya'ni, butun matritsa kichik blokli matritsalariga, ya'ni bloklar orasidagi diagonalsiz elementlarga taqsimlanishi mumkin:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

Simmetriya operatsiyalari hech qachon S_N ni bazisning boshqa funksiyalari S_A, S_B, S_C bilan aralashmaydi, ya'ni mazkur bazisda markaziy atom simmetriyada alohida rol o'ynaydi. To'rt o'lchamli tasavvur bir-biriga bog'liq bo'lmagan ikki bazisga taqsimlanishi mumkin (biri bitta a'zo bilan, boshqasi uch a'zo bilan). Ular $D^{(1)}$ va $D^{(3)}$ orqali ifodalanadi hamda $D^{(4)}$ almashtirishadi.

$D^{(1)}$ ishonchsiz tasavvuri (tasviri) keyinchalik bunday holatda keltirilishi mumkin bo'lmay, keltirilmaydigan tasvir (tasavvur) hisoblanadi. Uch o'lchamli tasvir:

$$\begin{matrix} D(E) & D(C_3^+) & D(C_3^-) & D(\sigma_v) & D(\sigma_v') & D(\sigma_v'') \\ x = 3 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{matrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Keltirilmaydigan ifodalar quyidagicha belgilanadi:

A-bir o'lchamli; E-ikki o'lchamli (identitlik bilan adashtirmaslik kerak); T-uch o'lchamli; B-bir o'lchamli ifodalar, ularning xarakteri 1 ga teng bo'lib, C_n operatsiyasiga mos, bunda C_n -simmetriyaning bosh o'qi.

Barcha keltirilmaydigan guruhlarining ifodalari mumkin bo'lgan xarakterlar ro'yxati xarakterlar jadvali deb nomlanadi. Jadvallar ko'pchilik guruhlar uchun tuzilgan bo'lib, ulardan to'g'ri foydalanish talab etiladi, chunki ular qiziqarli ma'lumotlar manbai bo'lib xizmat qilishi mumkin.

Xarakterlar jadvalidagi har bir sonlar operatsiya uchun matritsalar xarakterini namoyon etadi. $|x|$ matritsa uchun xarakter va matritsa mos keladi. Har bir keltirilmaydigan ifoda uchun o'zining qatori bo'ladi.

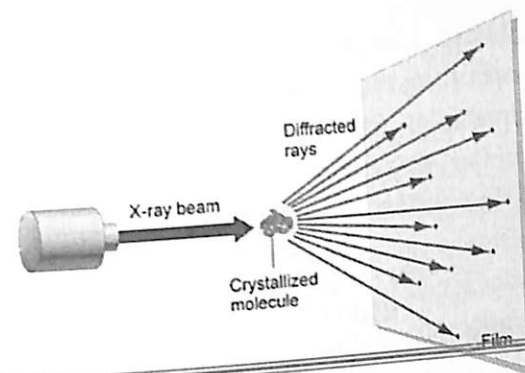
Guruhlar nazariyasi teoremasiga muvofiq: keltirilmaydigan ifodalar soni sinflar soniga teng.

Keltirilmaydigan ifodalar soni nisbatan kam bo'ladi. Xarakterlar jadvalida koordinatalar va ularning kvadrat holatlari qayta shakllantirishi keltirilmaydigan ifodalar jadvalga qo'shilishi mumkin va shuningdek x, y, z o'qlarga nisbatan aylanish ham qo'shimcha ma'lumot bo'ladi.

Nazorat savollari

1. Simmetriya elementlari haqida tushuncha bering (xalqaro belgilar, simmetriya formulasi bo'yicha belgilashlar, stereografik proyeksiyada tavirlash).
2. Simmetriya o'qining bo'lmasligi nimani izohlaydi?
3. Simmetriya elementlari o'zaro qanday ta'sirda bo'ladi?
4. Simmetriya elementlarini qo'shish deganda nima tushuniladi?
5. Simmetriya formulasi. Ekvivalent, noekvivalent simmetriya elementlari haqida tushuncha bering.
6. Simmetriya elementlarini matritsa holida berilishiga tushuncha bering.
7. Simmetriya sinflari qanday aniqlanadi.
8. Simmetriyaning nuqtali guruhlariga izoh bering.
9. Simmetriyaning fazoviy guruhlariga izoh bering.
10. Berilgan modda uchun simmetriya elementlarini aniqlang: NH_3 , H_2O , H_2O_2 , $Cl_2CH-CHCl_2$, CH_3-CH_3 .

IX. BOB MODDA TUZILISHINI O'RGANISH USULLARI



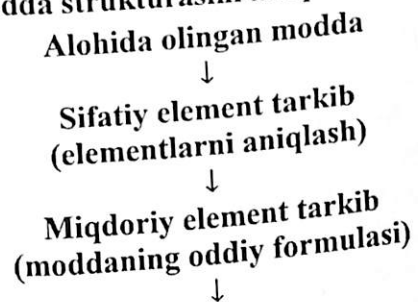
9.1. Molekulalar tuzilishini aniqlashning spektral usullari

Har bir modda muayyan sharoitda (bosim va temperaturada) doimiy fizikaviy kattaliklar bilan xarakterlanadi.

Toza moddalarni olishga qiziqish zamonaviy fan va texnikaning alohida fizik-kimyoviy xossalarga ega bo'lgan moddalarga ehtiyojining mavjudligidan kelib chiqmoqda. Bu xossalarga suyuqlanish temperaturasi, qaynash temperaturasi, zichlik (moddalarning nisbiy zichligi), sindirish ko'rsatkichi kabi parametrlarni misol sifatida ko'rsatish mumkin.

Shuning uchun ham modda tuzilishini aniqlash muhim ahamiyat kasb etadi. Umumiy holda noma'lum modda strukturasi aniqlashni quyidagi sxema bo'yicha amalga oshirish mumkin:

Noma'lum modda strukturasi aniqlash sxemasi:



Molekulyar massani aniqlash (molekulyar yoki brutto-formula)

Strukturani aniqlash (kimyoviy, fazoviy va elektron tuzilish)

Kimyoviy tadqiqot usullar

- funksional tahlil
- noma'lum hosila sintezi
- destruksiya

Fizikaviy tadqiqot usullari

- adsorbsion spektroskopiya: UB-va ko'rinish sohasi spektrlari, IQ-spektroskopiya, qisqa to'lqinli spektroskopiya, elektron paramagnit rezonansi (EPR), yadro magnit rezonansi (YAMR);
- Difraksion usullar: rentgenografiya, elektronografiya, gamma spektroskopiya;
- mass-spektrometriya;
- dielkometriya, polyarimetriya va h.z.
- kvant-kimyoviy usullar.

Kimyoviy tadqiqot usullari yordamida modda tarkibi va strukturasi aniqlash "Analitik kimyo" kursida qarab chiqilganligi uchun, ularga to'xtalib o'tirish maqsadga muvofiq emas. Shuning uchun ham mazkur bobda asosiy e'tibor tadqiqotning fizikaviy usullariga qaratishni lozim topdik.

Spektral usullarning umumiy xarakteristikasi, klassifikatsiyasi, energetik xarakteristikasi. Moddalar tuzilishi va xossalari o'rganish va spektral usullardan kompleks foydalanishni ko'zda tutadi. Moddalarni o'rganishda adsorbsion spektroskopiya, yadro magnit rezonansi keng qo'llaniladi. Spektral usullar bilan bir qatorda mass-spektroskopiya ham keng qo'llaniladi. Ushbu usullar moddaning elektron bilan ta'siridan ulaning ionga aylantirishga asoslangan.

Kimyo muammolarini hal qilishda spektral tahlil usullarining o'rni beqiyos, chunki bu usullar moddalar tuzilishi va xossalari o'rganish

identifikatsiyalashda juda muhim ahamiyat kasb etadi. Masalan, modda tarkibidagi funksional guruhlar va tutash bog'larni aniqlashda, fazoviy (sis-, trans-) izomerlarni farqlashda, ichki- va molekulararo ta'sirlarni o'rganishda alohida ahamiyatga ega. Tekshirishlar o'tkazish uchun moddalardan juda oz miqdorda namuna (odatda bir necha milligramm) talab etilib, qisqa vaqtda tahlil o'tkazish mumkin. Shu bilan bir qatorda fizik-kimyoviy tadqiqotlar kimyoviy reaksiyalarning kinetikasini o'rganish va jarayonlarning borishini nazorat qilish hamda aralashma tarkibini aniqlash imkonini beradi.

Moddaga elektromagnit nurlar ta'siri asosidagi spektral usullar tahlilda keng qo'llanilmoqda. Bunda yutilish spektrlari muhim bo'lib, quyidagilarni keltirish mumkin:

➤ Ultrabinafsha (UB) va ko'rinish sohasi spektroskopiyasi. Bu spektrlarda molekuladagi elektronlarni qo'zg'atish uchun kerak bo'ladigan yutilish energiyasi (spektroskopiyaning bu turiga elektron spektroskopiya deyiladi);

➤ Infraqizil (IQ) diapazonda, molekulaning tebranma holatini o'zgartirish uchun kerak bo'ladigan energiya yutiladi (IQ-spektroskopiya tebranma spektroskopiya deb ham aytiladi);

➤ Radiochastotali nurlanish diapazoni, bunda energiya yadrolar spinlari oriyentatsiyasini o'zgartirish uchun sarflanadi (YAMR - yadromagnit rezonansi spektroskopiyasi).

Ultrabinafsha va ko'rinadigan diapazonda yutilish spektrlari elektronlarning qo'zg'alishi bilan bog'liq. Bunda elektron yutilish spektrlari to'g'risida gapiriladi.

Yutilish spektri—bu aniqlanadigan modda orqali elektromagnit nurlanishni o'tishida to'lqin uzunliklar (yoki chastotalar)ning intensivlik bo'yicha taqsimlanishidir. Amalda yutilish spektrlari quyidagicha hosil bo'ladi. Tadqiq etilayotgan modda namunasi nur manbai va nurni qabul qiluvchi o'rtasida joylashtiriladi. Manbadan ma'lum to'lqin uzunlikka (yoki o'zgaruvchan) ega bo'lgan nur namunaga yuboriladi. Qabul qiluvchi (detektor) namuna orqali o'tgan nur intensivligini o'lchaydi hamda yozish qurilmasi orqali uni qayd etadi.

Elektron spektrlar modda tomonidan ultrabinafsha ($\lambda=200\div 400$ nm) va ko'rinadigan ($\lambda=400\div 800$ nm) diapazondagi nurlarni yutilishi

natijasida hosil bo'ladi. Bu spektrlar o'rtasida prinsipial farq bo'lmay, faqat insonning ko'zi $\lambda=200\div 400$ nm diapazonni ko'rish qobiliyatiga ega, unda modda rangli ko'rinadi. UB-nurlanish yetarli darajadagi kuchli nurlanish hisoblanib, ular ta'sirida molekullarning qo'zg'alishi sodir bo'ladi, ya'ni elektronlarning yuqori energetik holatga o'tishi hamda molekulada elektron bulutining qayta taqsimlanishi sodir bo'ladi.

Modda bilan elektromagnit nurlanishning o'zaro ta'sir mexanizmi turli elektromagnit diapazonlarda turlicha bo'lib, hamma holatlarda ham molekula tomonidan energiyaning ma'lum miqdori yutiladi (absorbsion spektroskopiya). Bunda molekula bir energetik holatdan boshqasiga o'tadi. Yutilish spektrining intensivligi yutilish va dastlabki spektrlar intensivliklari farqidan topiladi. Yutilish spektrlari koordinatalar sistemasida ifodalanadi, ya'ni absissa o'qi bo'ylab nurning to'lqin uzunligi (λ) yoki chastotasi (ν) qo'yilsa, ordinata o'qi bo'ylab yutilish (o'tkazish) intensivligi yoki optik zichlik qiymatlari qo'yiladi.

Ma'lumki, molekullar tuzilishi kimyoviy va fizikaviy usullarda aniqlanadi. Kimyoviy usullar analitik va organik kimyo usullarida olib boriladi. Bunda ko'p vaqt, reaktiv va mehnat talab etiladi.

Fizik usullarda ham asosan ikki guruhga bo'linadi:

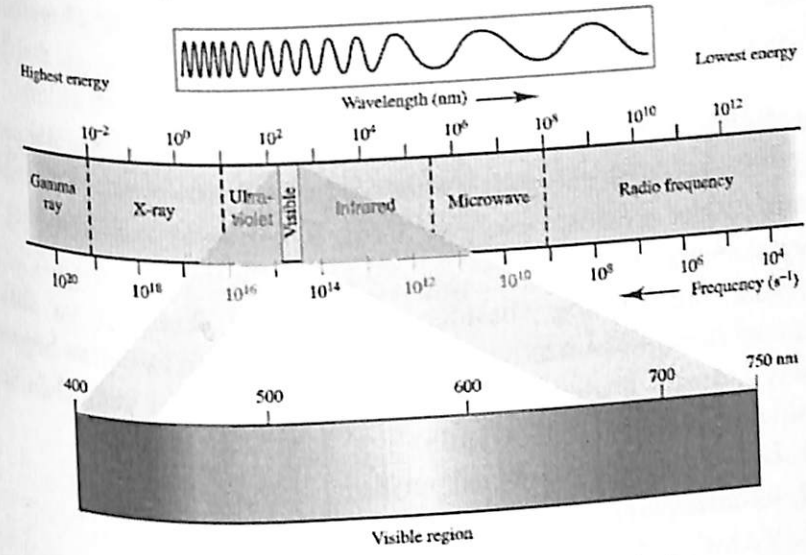
- 1) molekullar tuzilishini ularning additiv xossalari (molyar hajm, molekulyar refraksiya va h.k.) asoslanib aniqlash.
- 2) molekullar tuzilishini ularning optik, elektromagnit va boshqa fizik xossalari asosida aniqlash.

Fizik usullar yordamida moddalar tuzilishining kimyoviy usullar yordamida tekshirish mutlaqo mumkin bo'lmagan xususiyatlari aniqlanadi, masalan, konformatsiya, konfiguratsiya, kimyoviy bog' tabiati va h.k.

Fizik usullarda o'rganilayotgan modda bilan unga ta'sir etilayotgan maydon (energiya, nur) o'rtasidagi o'zaro ta'sir effektlari e'tiborga olinadi.

Fizikaviy (elektr, magnit, elektromagnit) maydonning moddaga tushadigan turli chastotali (energiyali) nurlar (rentgen, ultrabinafshe, ko'rinuvchi, infraqizil, radioto'lqinlar) yoki zarrachalar (elektron, neytron) oqimi bilan o'zaro ta'siri o'rganiladi. Hozirgi vaqtda fizik

usullardan spektral usullar keng qo'llaniladi. Bu usullar moddaga elektromagnit nurlarining ta'siri bilan bog'liq. Ushbu ta'sirni 1-rasm va 1-jadvalda quyidagicha ifodalash mumkin.



1-rasm. Elektromagnit nurlanishlar shkalasi

1-jadval

Spektr sohasi	Ba'zi elektromagnit nurlanishlar	
	Soha chegarasi	
	To'lqin uzunligi, m	Kvantlar energiyasi, j/mol
Gamma-nurlanish	$10^{-13}-10^{-10}$	$10^{12}-10^9$
Rentgen nurlanishi	$10^{-10}-10^{-8}$	10^9-10^7
UB-nurlanish	$10^{-8}-4\cdot 10^{-7}$	$10^7-3\cdot 10^5$
Ko'rinish sahasi	$4\cdot 10^{-7}-8\cdot 10^{-7}$	$3\cdot 10^5-1,5\cdot 10^5$
IQ-nurlanish	$8\cdot 10^{-7}-10^{-3}$	$1,5\cdot 10^5-10^2$
Radioto'lqinlar	>1	$<0,1$

Bu usullarning har birida molekula ma'lum miqdordagi energiyani yutadi va bir energetik holatdan boshqa energetik holatga o'tadi. Odatda spektrlar uch xil bo'ladi: nurlanish, yutilish, sochilish. Spektr chiziqlari (chiqarish spektrlarida) yoki polosalarining (birinchi navbatda yutilish spektrlari) intensivligi boshlang'ich sathdagi (chiqarish spektrlarida

energiyasi yuqori, yutilish spektrlarida esa energiyasi past bo'lgan sathlar) molekular (atomlar) soniga to'g'ri proporsionaldir.

Termik muvozanatda ($T = \text{const.}$) molekularning energetik sathlar bo'yicha taqsimlanishi Bolsman taqsimotiga ko'ra aniqlanadi. Unga ko'ra

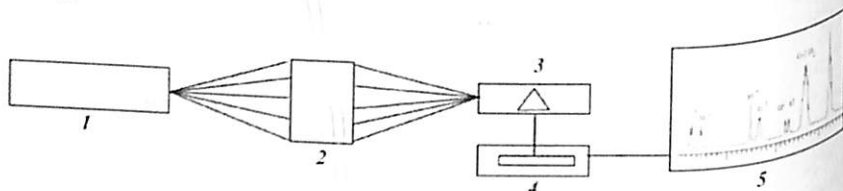
$$\frac{N_2}{N_1} = \frac{g_2}{g_1} e^{-\frac{\Delta E}{RT}},$$

bunda N_1 va N_2 -mos ravishda yuqori va quyi sathlardagi molekular soni; g_1 va g_2 -mos ravishda energetik sathlarning vazniy ko'paytuvchilari; ΔE -energetik sathlar orasidagi energiya farqi; R -universal gaz doimiysi; T -absolyut temperatura.

Spektr polosasining chastotasi, intensivligi, kengligi va shakli moddaning xossalari hamda molekularning turli kattaliklari bilan bog'liq. Fizikaviy tadqiqot usullari ichida kimyoviy masalalarni yechishda eng ko'p ishlatiladiganlari quyidagilardir:

1. Elektron yutilish spektroskopiyasi;
2. IQ-infraqizil nurlarni yutilish spektroskopiyasi;
3. YAMR-yadro magnit rezonansi spektroskopiyasi;
4. Mass-spektrometriya.

Ular yordamida spektrlarni olishning umumiy sxemasi 2-rasmida keltirilgan.



2-rasm. UB-, IQ-, YAMR-spektrlarni olishning umumiy sxemasi: 1-uzluksiz spektrli nurlanish manbai, 2-kyuveta bo'limi, 3-monoxromator, 4- qabul qilgach, 5-qayd etuvchi qurilma

9.2. Elektron spektroskopiya

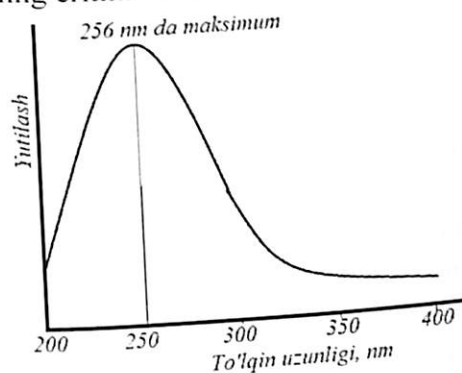
Elektron spektroskopiya, ya'ni UB va ko'zga ko'rinadigan sohada spektroskopiya spektrining yaqin UB (200-400 nm) va ko'zga ko'rinadigan (400-800 nm) sohalaridagi nurlarini yutilishi bilan bog'liq. UB nur modda eritmasidan o'tkazilganda uning intensivligining pasayishi

sodir bo'ladi. Bu pasayish, ya'ni nurning yutilishi yoki yutilish spektri maxsus asboblarda o'lchanadi. Buning uchun kvarsli spektrograf ishlatiladi, chunki kvars shisha UB nurlarni yutadi. Yutilish spektri fotoplyonkaga qayd etiladi yoki maxsus asboblarda yozib olinadi. Yutilish spektrlariga absorpsion egri chiziqlari deyiladi. Bunday spektrlar yordamida moddaning sifat va miqdoriy tarkibi o'rganiladi.

UB-spektroskopiyasida absorpsion egri chiziqlar tuzish uchun absissa o'qiga to'lqin uzunligi (λ) va ordinata o'qiga nur intevsivligi farqi (E) qo'yiladi, ya'ni:

$$E = -\log \frac{I}{I_0},$$

bunda I va I_0 -nurning eritmadan oldin va o'tgandan keyingi intensivligi.



3-rasm. UB-spektrga misol

UB-spektrlarni o'rganish natijasida molekularidagi atomlarning elektron holatini tasavvur hosil qilishga, molekular tuzilishi haqida ma'lumot olish mumkin.

UB-va KS-spektroskopiyasi 200-760 nm diapazonida joylashganligi tufayli u eng oson qo'zg'aladigan π -elektronlar (va umumlashgan elektron juftining) ko'chishini ko'rsatadi. Umumlashmagan elektron yoki π -elektronlarga ega bo'lgan atomlar guruhi mazkur modda spektrining ma'lum sohalarida yutiladi. Shunday atomlar guruhiga xromofor guruhlar deb ataladi. Ba'zi xromofor guruhlar va ularning yutish maksimumlari misol sifatida quyidagi 2-jadvalda keltirilgan.

Xromoforlar	Qanday elektronlar qo'zg'aladi	Yutilish maksimumi, nm	Sohaning intensivligi
$>C=C<$	π - elektronlar	~175-200	kuchli
$>C=O$	a) π -elektronlar b) kislorodning erkin elektron jufti	~180-195 ~270-295	kuchli kuchli
$-N=N-$	azotning erkin elektronlar jufti	~340-370	kuchsiz
$-\ddot{O}-H$	kislorodning erkin elektronlar jufti	~185	o'rtacha kuchli
$-\ddot{N}H_2$	azotning erkin elektronlar jufti	~275	o'rtacha kuchli

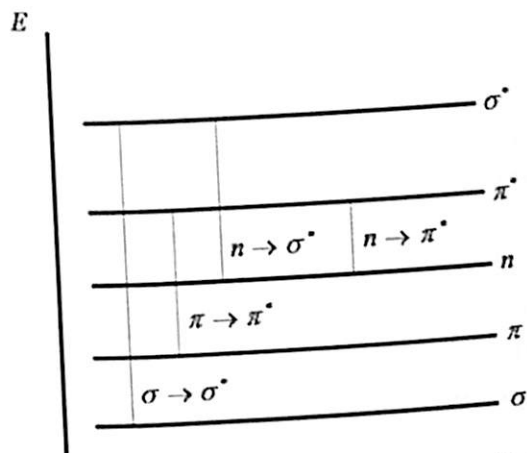
Har bir xromofor yutilish maksimumining holati shu xromofor qanday guruh bilan bog'langanligiga qarab ma'lum chegarada o'zgarishi mumkin. Agarda yutilish spektri uzun to'liqin uzunliklari tomon siljisa *gipsoxrom siljish* deyiladi.

Spektrning UB va ko'rinuvchi qismlarida joylashgan yutilish spektrlari molekulaning elektron holatlari o'rtasidagi o'tishlar hisobida hosil bo'lganligi uchun *elektron yutilish spektrlari* deyiladi.

Elektron yutilish spektrlarini tahlil qilish molekulyar orbitallar usuli asos qilib olingan. Bu nazariya molekulaning asosiy elektron holatdan qo'zg'algan holatga o'tishni, valent elektronni band molekulyar orbitaldan bo'sh molekulyar orbitalga o'tishi orqali bog'laydi.

Bu holda molekulyar orbitallarning 3 ta tipiga, ya'ni σ , π va δ larga to'rt xil elektron o'tishlari mos keladi: $\sigma \rightarrow \sigma^*$, $\pi \rightarrow \pi^*$, $\delta \rightarrow \sigma^*$, $\delta \rightarrow \pi^*$ (4-rasm).

Yutilish polosasining intensivligi molekula dipol momentining o'zgarishi bilan xarakterlanadi. Qo'zg'algan paytda moddaning dipol momenti qancha ko'p o'zgarsa spektr polosasining intensivligi ham shuncha katta bo'ladi. Agar moddaning asosiy va qo'zg'algan holatlarini ifodalovchi to'liqin funksiyalari ma'lum bo'lsa, u hola ushbu holatga tegishli bo'lgan dipol momentini hisoblash mumkin. Tanlash qoidasiga ko'ra turli xil spin holatlariga ega bo'lgan energetik sathlar orasidagi o'tishlar taqiqlanadi.



4-rasm. Molekula orbitallarida elektron o'tishlar

UB-spektroskopiyadan turli maqsadlarda foydalanish mumkin, jumladan:

1. Sintez qilingan modda bilan mavjud toza moddaning bir xil yoki bir xil emasligini isbotlashda. Buning uchun har ikki moddaning bir xil sharoitda olingan spektrlari taqqoslanadi.
2. Molekulada vodorod bog'lanishning mavjudligini aniqlashda.
3. Yutilish intensivligi (E_0) yoki optik zichlik (D) modda konsentrat-siyasiga proporsional bo'lganligi uchun UB-spektroskopiya yordamida miqdoriy tahlil o'tkazishda.

9.3. Infraqizil-spektrlar

Moddaga elektromagnit nurlanish ($h\nu$) ta'sir ettirilganda molekulaning energiyasi ortadi va modda qo'zg'algan holatga o'tadi. Modda optik spektr sohasiga muvofiq keladigan energiyani yutsa, uning aylanma, tebranma harakati va valent elektronlarining energiyasi ortadi. Normal holatda modda molekulalarida aylanma-tebranma harakat mavjud bo'lib, bunga normal harakat energiyasi deyiladi. Qo'zg'algan holatda bu harakatlarning energiyasi ortadi. Berilgan energiyaga ($h\nu$) hamda modda tabiatiga qarab aylanma va tebranma harakat kuchayishi kamroq yoki

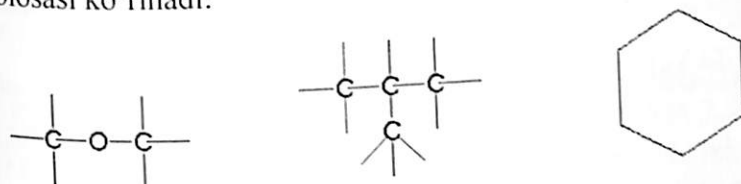
ko'proq bo'lishi mumkin. Molekula normal holatdan "qo'zg'algan", "hayajonlangan" holatga o'tadi. Molekulada bu aylanma va tebranma energiya pog'onalari bir nechta deb qaraladi. Nur energiyasi ta'sirida molekula o'tishi mumkin bo'lgan aylanma va tebranma holatlar bir nechta. Molekulaning aylanma energiyasini oshirish uchun bir oz energiya yetarli. Bu energiya optik spektrning uzoq infraqizil (ya'ni λ katta bo'lgan soha) nur sohasiga muvofiq keladi. Bu spektrlar unchalik ahamiyatli emas. Molekulaning tebranma energiyasini oshirish uchun (uni λ qisqa bo'lgan) yaqin infraqizil sohada yotuvchi nur tushiriladi.

Yorug'likning elektromagnit nazariyasi shuni ko'rsatadiki, molekula faqatgina o'zining muvozanat holati atrofida tebranganda dipol momenti hosil qiluvchi molekulalargina yorug'lik nurini yutishi (yoki chiqarishi) mumkin. Tebranganda molekulaning dipol momenti o'zgarmasa bunday molekula nurni yutmaydi ham, chiqarmadi ham. Agar ikki atomli molekula simmetrik bo'lsa, (H_2 , O_2 , N_2 , F_2 , Cl_2) uning dipol momenti bo'lmaydi va u yorug'likning infraqizil qismida tegishli bo'lgan nurlarni yutmaydi va chiqarmaydi. Shuning uchun ham ularning IQ-spektrlari bo'lmaydi. Demak, har xil atomlardan tashkil topgan asimetrik molekulalar IQ-spektrlarga ega bo'ladi. Molekula qanday chastotada tebransa, xuddi shunday chastotadagi infraqizil yorug'lik nurlarini yutadi. Uch va undan ko'p atomli molekulalarda tebranishlar soni turlicha va ko'p bo'ladi. Har bir tebranish o'z yo'nalishi bo'ylab harakatda bo'ladi. ya'ni molekulaning erkinlik darajasi qiymati katta bo'ladi. Molekula tebranganda o'zi yagona holatda va molekulani tashkil etgan alohida atomlar guruhi turlicha holatlarda tebranishi mumkin. Shuning uchun molekula tebranishini ikkiga, ya'ni molekula skeletining va funksional guruhlarning tebranishlariga ajratish mumkin.

Molekulaning skeleti tebranganda uning hamma atomlari tebranishda bir xilda qatnashadi, funksional guruhlari tebranganda esa molekulaning ma'lum guruh atomlari harakatlanadi. Skelet tebranishlari yaxlit molekula uchun xos bo'lib, ular spektrlarda chastotaning 800-1500 sm^{-1} sohasida maksimumga ega bo'ladi.

Odatda molekula skeleti tebranishlarining chastotasi 1400-1700 sm^{-1} oralig'ida bo'ladi va molekuladagi chiziqli hamda tarmoqlangan zanjirli

tuzilishga tegishlidir. Masalan, quyidagi har bir skelet bir nechta tebranish turiga ega va ularga mos ravishda spektrning infraqizil sohasida bir nechta yutilish polosasi ko'rinadi:



Funksional guruhning tebranish chastotasi umuman olganda molekulaning tuzilishiga bog'liq emas va ko'pincha ularning chastotalari skelet tebranishlari chastotasidan ancha katta yoki kichik sohada joylashadi.

Molekula va uning atomlari aylanma hamda tebranma harakat qilishi mumkin. Shunga mos ravishda tebranma va aylanma harakat spektrlari hosil bo'ladi. Shuning uchun ham har qaysi molekulaning, atom guruhlarning o'ziga xos tebranma va aylanma harakat spektrlari mavjud bo'ladi. Energiyaning o'zgarishi bilan boradigan jarayonlar ko'p bo'lgani uchun, molekulaning spektri ayrim chiziqlardan emas, balki ular guruh chiziqlardan iborat bo'ladi.

Aylanma harakat spektri uzoq infraqizil va mikroto'lqin sohalarini, ya'ni $\lambda=0,3 \div 6 \cdot 10^{-4}$ m va $\nu=1 \cdot 10^3 \div 5 \cdot 10^{11}$ sm^{-1} ni o'z ichiga oladi. Aylanma harakat energiyasini yadro yoki nur maydonida dipol momenti bo'lgan molekulalargina yutishi mumkin. Aylanma harakat spektri yordamida yadrolararo masofani topish mumkin. Aylanma harakat bilan bir qatorda tebranma harakat ham sodir bo'ladi. Tebranma harakatdagi energiyaning o'zgarishi aylanma harakatdagiga qaraganda taxminan 10 marta ko'p bo'ladi. Bu energiya o'zgarishlari yaqindagi infraqizil sohaga to'g'ri keladi. Tebranma harakat spektri yordamida atomning molekuladagi tebranma chastotasi va molekulaning dissotsiyanish energiyasini aniqlash mumkin. Aylanma va tebranma harakatlar bir vaqtda sodir bo'lgani uchun sof tebranma harakat spektrini hosil qilib bo'lmaydi, ya'ni tebranma-aylanma harakat spektri hosil bo'ladi. Tebranma harakat chastotasining kuchayishi molekulaning dissotsiatsiyanishiga sabab bo'ladi. Agar molekulaga berilayotgan

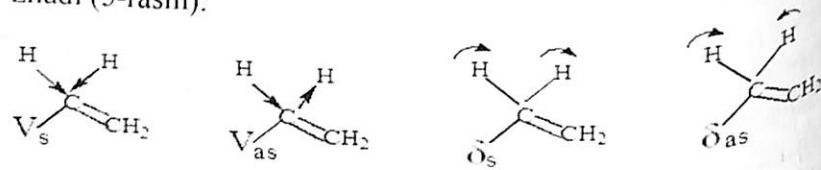
energiya dissotsialanish energiyasidan katta bo'lsa, uzluksiz spektr hosil bo'ladi, chunki ortiqcha energiya atomlarning ilgari lanma harakatini tezlatishga sarf bo'ladi, bu ilgari lanma harakat kvantlangan holatda bo'ladi.

Ta'kidlash joizki, tebranish natijasida molekulaning dipol momenti davriy o'zgarib tursagina molekula spektrning IQ-sohasida nur yutadi.

Ion va kovalent bog'li har qanday organik va anorganik modda molekulasining atomlari mustahkam tuzilishiga ega emas, chunki molekuladagi atomlar doimiy tebranma harakatda bo'ladi. Ikki atomli molekulalar yadrodagi masofaning o'zgarishiga qarab, faqat bir xil chiziqli bog' bo'ylab harakat qiladi. Murakkab tuzilishga ega bo'lgan molekulalar faqat chiziqli bog' bo'ylab emas, balki valent burchaklarining o'zgarishi bilan ham tebranadi. Shunga ko'ra molekulaning tebranishi ikki katta guruhga ajratiladi:

- 1) Valent tebranishlar;
- 2) Deformatsion tebranishlar.

Bog' uzunligining o'zgarishi bilan harakatlanadigan tebranishlar *valent tebranishlar* deyiladi va ν harfi bilan belgilanadi. Valent burchaklarining o'zgarishi bilan harakatlanadigan tebranishlarga *deformatsion tebranishlar* deyiladi va δ -harfi bilan belgilanadi. Normal deformatsion tebranishlar odatda *normal tebranishlar* deb ataladi. Normal tebranishlar o'z harakatiga ko'ra simmetrik (s) va assimetrik (as) tebranishlarga bo'linadi. Masalan, simmetrik valent tebranishlarda ν_s hamma C-H bog'lar bir vaqtda qisqarib, bir vaqtda cho'ziladi. Assimetrik tebranishlarda esa ν_{as} bitta C-H bog' qisqarsa, boshqasi cho'ziladi (5-rasm):



5-rasm. Tebranishlar turlari

Valent va deformatsion tebranishlar molekulada ma'lum kvantlangan chastotada uzluksiz ravishda bo'ladi. Agar molekulaga xuddi shu chastotaga ega bo'lgan $h\nu$ ta'sir ettirilsa, energiya yutiladi va spektrogrammada yutilish sohalari ko'rinadi. Yutilish sohalari

spektrogrammada to'liq uzunligi yoki chastota shaklida ko'rinadi (3-jadval).

3-jadval

Turli sinf organika birikmalarning molekulyar gruppalari valent tebranishlarining xarakteristik chastotalari

Bog' yoki atomlar guruhi	Birikmalar	Chastota, ν , sm^{-1}	Sohalarning intensivligi va xarakteri
$\begin{array}{c} \\ -C-H \\ \end{array}$	Alkanlar	2850-2960	kuchli
$\begin{array}{c} \\ =C-H \\ \end{array}$	Alkenlar	3010-3100	o'rtacha
$\begin{array}{c} \\ \equiv S-H \\ \end{array}$	Alkinlar	3300	kuchli
$\begin{array}{c} \quad \\ -C-C- \\ \quad \end{array}$	Alkanlar	600-1500	Kuchsiz
$\begin{array}{c} \quad \\ -C=C- \\ \quad \end{array}$	Alkenlar	1620-1680	o'zgaruvchan
$\begin{array}{c} \quad \\ -C \equiv C- \\ \quad \end{array}$	Alkinlar	2100-2260	o'zgaruvchan
$\begin{array}{c} \\ -C \equiv \\ \end{array}$	Nitrillar	2200-2300	o'zgaruvchan
$\begin{array}{c} \\ -C-O- \\ \end{array}$	Spirtlar, oddiy efirlar, kislotalar, murakkab efir	1000-1300	Kuchli
$\begin{array}{c} H \\ \\ -C=O \end{array}$	Aldegidlar	1720-1740	kuchli

Har bir funksional grupp spektri polosasi maksimal yutilishi chastotasiga shu gruppaning xarakterli chastotasi deyiladi. Ma'lum moddaning va noma'lum moddaning xarakterli chastotalari solishtirilib, noma'lum modda tarkibi to'g'risida fikr yuritiladi. Ta'kidlash joizki, tebranish spektrlari chastotasi (ν) molekuladagi bir-biriga nisbatan tebranayotgan atomlar yoki guruhlar o'rtasidagi bog'ning mustahkamligiga, shuningdek, shu atom va guruhlarining massasiga bog'liq. (Masalan, C-H, O-H, N-H tebranishlar $\nu=3600-2800 \text{ sm}^{-1}$) Agar H atomi R yoki G bilan almashtirilsa, yutilish maksimumi qisqa chastotali soha tomon siljiydi.

Odatda modda qattiq holatda bo'lsa, uning molekularining tebranish chastotasi gaz holatdagi molekularning tebranish chastotasidan kichik bo'ladi, ya'ni:

$$\nu_{\text{gaz}} > \nu_{\text{suyuq}} > \nu_{\text{eritma}} > \nu_{\text{qattiq}}$$

Masalan, $\nu_{\text{HCl}}^{\text{gaz}} > \nu_{\text{HCl}}^{\text{suyuq}} > \nu_{\text{HCl}}^{\text{qattiq}}$ bo'ladi. HCl gazdan suyuqqa o'tsa tebranish chastotasi 100 cm^{-1} ga, suyuqdan qattiq g'olatga o'tsa, yana 20 cm^{-1} ga kamayadi.

Demak, tebranish molekularining dipol momentini o'zgarishiga olib kelsa, IQ spektr hosil bo'ladi. Shuning uchun ko'proq qutblangan bog'lanishning (molekularning) tebranishidan hosil bo'lgan IQ spektr polosasining intensivligi yuqoriroq bo'ladi deb xulosa qilinadi. Masalan, IQ spektrining ba'zi funksional gruppalariga tegishli polosasining intensivliklari quyidagicha o'zgaradi:

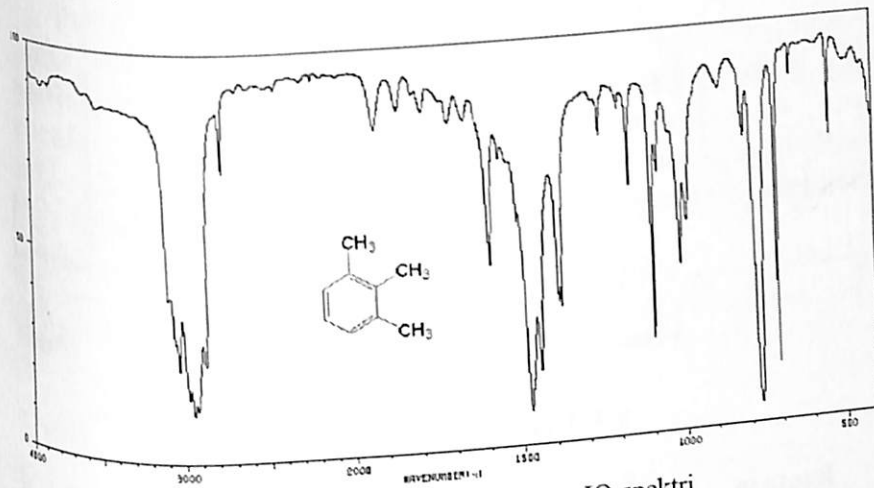
$$I_{>\text{C}=\text{O}} > I_{\text{C}=\text{N}-} > I_{>\text{C}=\text{C}} \quad I_{-\text{OH}} > I_{>\text{NH}} > I_{>\text{CH}}$$

Shuning uchun ham asosan ion kristall panjarasini tebranishidan hosil bo'lgan IQ polosalarning intensivligi katta bo'ladi.

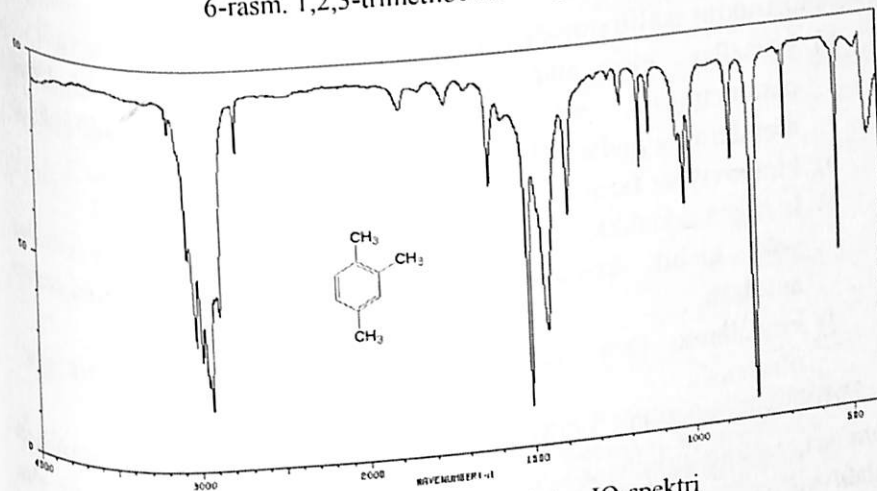
IQ-spektroskopiya kimyoda keng qo'llanilmoqda, jumladan: bilan taqqoslashda.

1. Sintez qilingan modda spektrini uning asl nusxasi bilan taqqoslashda.
 2. Spektrdagi xarakterli chastotalarga qarab, birikmada tegishli funksional guruhlar yoki bog'lar borligi haqida fikr yuritishda.
 3. Yutilish intensivligining modda konsentratsiyasiga bog'liqligidan foydalanib, miqdoriy tahlil o'tkazishda.
 4. Ichki molekulyar va molekulararo ta'sirlanishini o'rganishda, masalan, vodorod bog'lanishning mavjudligini aniqlashda.
 5. Turli bog'lar bo'lgan izomerlarni aniqlashda (masalan, $\text{C}_2\text{H}_6\text{O} \rightarrow \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ etil spirti yoki $\text{CH}_3\text{-O-CH}_3$ dimetil efirni aniqlashda. $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ da $-\text{O-H}$ bog'i yutilish polyasi chastotasi aniqlanadi).
 6. Molekula konfiguratsiyasi va konformatsiyasi to'g'risida xulosa chiqarishda (sis- va trans- izomer holatini aniqlashda).
 7. Erkin radikallar va ulardagi atomlararo masofalarni aniqlashda.
- Yuqorida qayd etilgan usullardan tashqari EPR, YAMR, PMR va mass-spektroskopiya usullari ham mavjud.

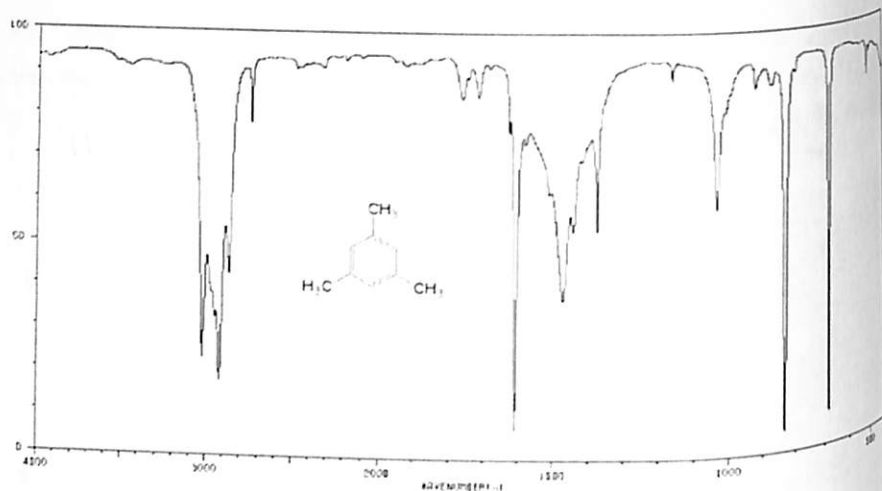
IQ-spektroskopiya, masalan, trimetilbenzolning o-, m-, p- izomerlarini ularning qaynash temperaturasi ($T_{\text{qay}} = 169^\circ\text{C}$) bir xil bo'lishiga qaramasdan oson farqlash mumkin (6,7,8-rasmlar).



6-rasm. 1,2,3-trimetilbenzolning IQ-spektri



7-rasm. 1,2,4-trimetilbenzolning IQ-spektri



8-rasm. 1,3,5-trimetilbenzolning IQ-spektri

9.4. Rentgenstruktur tahlil

Rentgen nurlarning difraksiyasi hodisiga asoslangan rentgenostruktur tahlili quyidagi vazifani yechish imkoniyatini beradi:

- kristallar elementar yacheykasi tipini, uning shaklini, parametrlarini, yacheykadagi atomlar sonini, yacheykada atomlarning joylashishini aniqlash;
- kimyoviy va fazaviy tartibini aniqlash;
- berilgan tekislikka nisbatan polikristall namunada monokristallar yoki kichik kristallar konglomeratlarining oriyentatsiyasini aniqlash;
- kristallarda turli shakldagi defektlarni (yetishmovchiliklarni) o'rganish.

Rentgenostruktur tahlil qo'yilgan vazifalar va qo'llanilish sohalariga qarab turlicha uslubiy yondoshuvlar va asbob-uskunalarni, shu bilan bir qatorda Difraksion manzarani olish va qayd etish uchun qurilmalarni talab etadi.

Quyida rentgenstruktur tahlilning asoslari bayon etiladi.

Rentgen nurlanish. Rentgen nurlari to'lqin uzunligi 10^{-14} dan 10^{-7} m gacha bo'lgan elektromagnit nurlanishdir. Rentgen nurlanish shartli ravishda yumshoq ($\lambda > 2 \cdot 10^{-10}$ m) va qattiqqa ($\lambda < 2 \cdot 10^{-10}$ m) bo'linadi.

Eng ko'p tarqalgan rentgen nurlarining manbasi-rentgen nayi, unda elektr maydonida tezlashtirilgan elektronlar metalli anodni bombardimon qiladi (9-rasm).

Rentgen nurlarining spektrlari. Ikki xildagi rentgen spektrlari mavjud: uzluksiz va chiziqli. Uzluksiz spektrni tez elektronlar chiqaradi, anoddagi modda atomlari bilan ta'sirlashishida ularning lahza ichida to'xtashilishi natijada to'xtatilishning nurlanishning intensiv barcha to'lqin uzunligi bo'yicha qisqa to'lqin chegarasigacha λ_0 taqsimlanadi. Unda fotonlar hujum qiladigan (bombardirovka qiladigan) elektronlar energiyasiga:

$$h\nu = cV,$$

chunki

$$\lambda\nu = s$$

u holda

$$\lambda = sh/ve$$

yoki

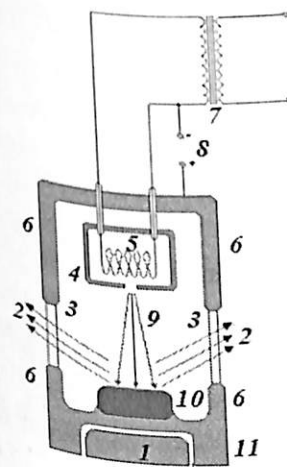
$$\lambda_0 = (12,41/v) \cdot 10^{-7} \text{ m}$$

bunda e-elektron zaryadi, KI;

V-rentgen nayidagi kuchlanish, B;

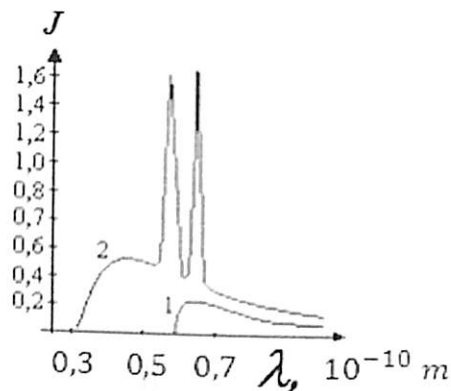
c-yorug'lik tezligi, m/s;

h-Plank doimiysi, dJ·s.



9-rasm. Rentgen nayining sxemasi:
1-anodni suvli sovutish tizimi; 2-
rentgen nurlari oqimi;
3-chiqaruvchi oyna; 4-katod; 5-katod
spiral; 6-nayning korpusi;
7-qizdiruvchi transformator; 8-yuqori
kuchlanish manbasi;
9-elektronlar oqimi; 10-anod; 11-misli
asos

Rentgen nayida kuchlanish oshishi bilan uzluksiz spektrning intensivligi oshadi, uning chegarasi esa qisqa to'liqlar tomon siljiydi. Ba'zi aniqlashlarda anodning berilgan material uchun tezlanishi kuchlanishda uzluksiz spektr fonida chiziqli spektr paydo bo'ladi. Ushbu spektr chizig'ining intensivligi uzluksiz spektr intensivligidan ancha ustun turadi (10 rasm).



10-rasm. Molibdenning rentgen nurlanish spektri kuchlanish: 1-18 kV, 2-35 kV.

Chiziqli spektr elektronlar bilan anod moddasi atomning tez to'qnashishida uning ionlanishidan keyin paydo bo'ladi. Bunda ichki elektron qavatlardan (K, L, M, N) biridan elektron chiqadi va ionlashgan atom uyg'ongan holatga o'tadi, lekin 10^{-16} - 10^{-15} s da elektronning biror tashqi qavatdan ozod ichki qavatga qaytishi natijasida atom barqaror holatga qaytadi (11-rasm). Qavatlar o'rtasida imkoniy o'tishlar tanlash qoidasidan aniqlanadi:

$$\Delta n \neq 0, \Delta l \pm 1, \Delta j = 0, \pm 1, j = |l + s|$$

bunda n - bosh kvant soni;

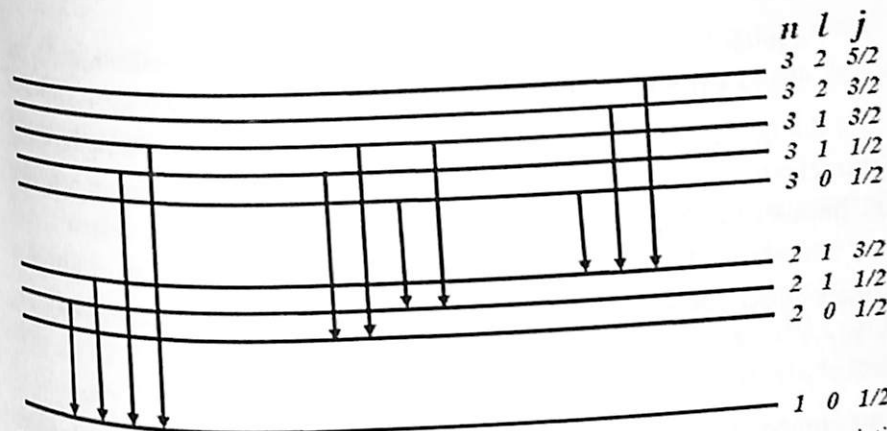
l - orbital kvant soni;

s - spin kvant soni;

j - ichki kvant soni.

Shunday qilib xarakteristik nurlanish spektrlari bir necha chiziqlar K, L, M, N seriyasidan tashkil topgan. Eng qisqa to'liqli K seriya to'rtta chiziqdan ($\alpha_1, \alpha_2, \beta_1, \beta_2$) tashkil topgan.

Xarakteristik spektrning har qaysi seriyasi aniq potentsiallar farqida uyg'onadi (uyg'onish potentsiali).



11-rasm. Energetik darajalar diagrammasi va chiqarish K-seriyalar va xarakteristik nurlanish L-seriyalariga olib keluvchi ular orasidagi elektronlarning o'tishi

Rentgen fazoviy analizda monoxromatik rentgen nurlari qo'llaniladi. Buning uchun rentgen nayidan chiqadigan nurlar keraksiz komponentlar va uzluksiz spektr fonini susaytiruvchi maxsus filtr orqali o'tkaziladi.

Rentgen nurlarining modda bilan ta'sirlashuvi. Modda orqali o'tgan rentgen nurlari qisman yutiladi. Moddaga kelib tushadigan nur oqimi intensivligi I_0 bilan u orqali o'tgan nur intensivligi I o'rtasidagi nisbat quyidagi formula bilan ifodalanadi:

$$I = I_0 \exp(-\mu \cdot x),$$

bunda μ - yutilish koeffitsiyenti; x - yutuvchi qavat qalinligi.

Yutilish koeffitsiyenti moddaning tabiati, uning zichligi va nurlanishining to'liq uzunligiga bog'liq.

Rentgen nurlari modda orqali o'tganda quyidagi ikki jarayon natijasida o'zining bir qism energiyasini yo'qotadi:

1. Haqiqiy atomli yutilish nurni yutadigan modda atomlaridan elektronlarni uzib olish va ularga kinetik energiya berilishi bilan bog'liq. Atomlardan uzib olingan elektronlarga fotoelektronlar deyiladi.
2. Rentgen nurlanishning sochilishi bilan, ya'ni uning tarqalish yo'nalishining o'zgarishi bilan bog'liq. Ushbu jarayon o'z

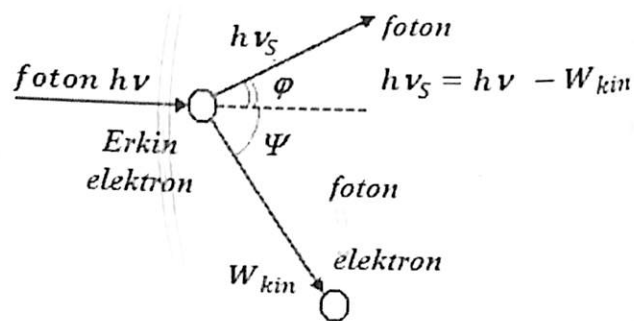
navbatida kogerentli (to'liqin uzunligini o'zgartirmasdan) va kogerentlimas (to'liqin uzunligi o'zgarishi bilan) ga bo'linadi.

Rentgen nurlarining sochilishi faqat elektronlar bilan amalga oshadi. Erkin elektronlar asosan kogerentlimas sochilishini –Kampton effekti chaqiradi (12-rasm).

Bunda sochilgan nurlarning to'liqin uzunligi birlamchiga nisbatan katta, chunki sochilgan nurning energiyasi birlamchiga nisbatan kichik, ya'ni:

$$h\nu_s = h\nu - W_{kin}, \quad \lambda_s > \lambda.$$

Bog'langan elektronlar, ya'ni atomlardagi elektronlar rentgen nurlarining kogerentli va kogerentlimas sochilishini chaqiradi. Kogerentli sochilishining paydo bo'lishi mexanizmini quyidagicha ifodalash mumkin.



12-rasm. Fotonning erkin elektronlar bilan ta'sirlashuvi (Kompton effekti)

Rentgen nurlari sochiluvchi modda atomlarining majburiy tebranishini chaqiradi, o'z navbatida ularning o'zi shunday to'liqin uzunlikdagi ikkilamchi sochiladigan nurlanishining markazi bo'ladi.

Kogerentlimas sochilish asosan rentgen nurlari tarkibida yengil atomlar bo'lgan moddalar orqali o'tganda kuzatiladi. Element yengil oshishi bilan elektronning yadro bilan bog'lanish mustahkamligi oshadi va shuning uchun kogerentlimas sochilishiga to'g'ri keladigan nurning energiyasining ulushi kamayadi. Misda sochilishidan nurlanish asosan to'liqin uzunligi o'zgarmagan nurlardan tashkil topgan.

Kogerentlimas nurlanish rentgen tahlili uchun yaroqsiz, chunki interferlanmaydi. Bu nurlanish difraksion manzarani bermagan holda kogerentli nurlanish intensivligini kamaytiradi, chunki:

$$I = I_{kog} - I_{kogmas}.$$

Bundan tashqari kogerentlimas nurlanish rentgenogrammada keraksiz fonni keltirib chiqaradi.

Rentgen nurlari difraksiyasi. Qattiq jismlarning rentgenostrukturli tahlilining nazariy va tajribaviy asoslariga 1912 yilda Laue tomonidan tamal toshi qo'yilgan. Ushbu usulning asosida kristall orqali o'tganda rentgen nurlarining difraksiyasi yotadi.

Kristallda atom qat'iy davriylikda bir-biridan 10^{-10} m tartibdagi masofada joylashganligi uchun Laue kristallarni $\lambda \approx 10^{-10}$ m bilan rentgen nurlanishi uchun difraksion panjara tabiatiga ega deb taklif etdi.

Kristallda rentgen nurlari difraksiyasi kristallda rentgen nurlanishning dastlabki oqimiga aniq burchak ostida chetlangan (difraksiyalangan) nurlardan tashkil topgan kogerent sochilishida paydo bo'ladigan ikkilamchi to'liqinlar o'rtasidagi fazoviy kogerentlik bilan izohlanadi. Ikkilamchi to'liqinlar bir qancha yo'nalishlarda bir fazoda bo'lgan holda to'planadi, natijada intensiv difraksion nur refleksi yaratiladi.

Laue tomonidan ishlab chiqilgan kristallarda rentgen nurlari difraksiyasi nazariyasi nurlanish to'liqin uzunligining kristall elementar yacheykasi a, b, c parametrlari nurlarning tushadigan $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ va difraksiyalangan α, β, γ burchaklarini rentgen nurlari difraksiyasini paydo bo'lishi uchun Laue shartlari deb ataladigan nisbatlar bilan bog'laydi:

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda$$

$$b(\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda$$

$$c(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda$$

bunda h, k, l - tekislikning Miller indekslari;

a, b, c - kristall panjara davrlari;

$\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ - kristall o'qi bilan tushadigan nurning hosil qilgan burchaklari;

α, β, γ - kristall o'qi bilan sochilgan nurning hosil qilgan burchaklari.

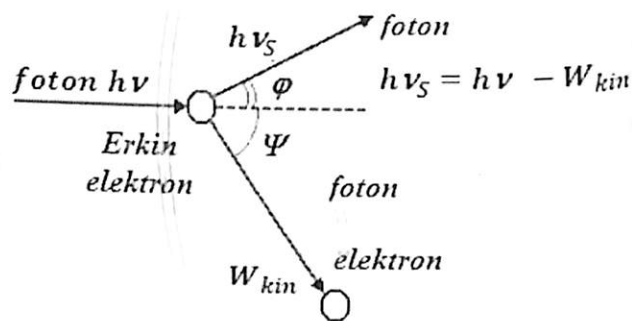
navbatida kogerentli (to'liq uzunligini o'zgartirmasdan) va kogerentlimas (to'liq uzunligi o'zgarishi bilan) ga bo'linadi.

Rentgen nurlarining sochilishi faqat elektronlar bilan amalga oshadi. Erkin elektronlar asosan kongerentlimas sochilishini –Kampton effekti chaqiradi (12-rasm).

Bunda sochilgan nurlarning to'liq uzunligi birlamchiga nisbatan katta, chunki sochilgan nurning energiyasi birlamchiga nisbatan kichik, ya'ni:

$$h\nu_s = h\nu - W_{kin}, \quad \lambda_s > \lambda.$$

Bog'langan elektronlar, ya'ni atomlardagi elektronlar rentgen nurlarining kogerentli va kogerentlimas sochilishini chaqiradi. Kogerentli sochilishining paydo bo'lishi mexanizmini quyidagicha ifodalash mumkin.



12-rasm. Fotonning erkin elektronlar bilan ta'sirlashuvi (Kompton effekti)

Rentgen nurlari sochiluvchi modda atomlarining majburiy tebranishini chaqiradi, o'z navbatida ularning o'zi shunday to'liq uzunlikdagi ikkilamchi sochiladigan nurlanishining markazi bo'ladi.

Kongerentlimas sochilish asosan rentgen nurlari tarkibida yengil atomlar bo'lgan moddalar orqali o'tganda kuzatiladi. Element atomlari oshishi bilan elektronning yadro bilan bog'lanish mustahkamligi oshadi va shuning uchun kongerentlimas sochilishiga to'g'ri keladigan nurlarning energiyasining ulushi kamayadi. Misda sochilishidan nurlanish asosan to'liq uzunligi o'zgarmagan nurlardan tashkil topgan.

Kongerentlimas nurlanish rentgen tahlili uchun yaroqsiz, chunki interferlanmaydi. Bu nurlanish difraksion manzarani bermagan holda kogerentli nurlanish intensivligini kamaytiradi, chunki:

$$I = I_{kog} - I_{kogmas}.$$

Bundan tashqari kogerentlimas nurlanish rentgenogrammada keraksiz fonni keltirib chiqaradi.

Rentgen nurlari difraksiyasi. Qattiq jismlarning rentgenostrukturali tahlilining nazariy va tajribaviy asoslariga 1912 yilda Laue tomonidan tamal toshi qo'yilgan. Ushbu usulning asosida kristall orqali o'tganda rentgen nurlarining difraksiyasi yotadi.

Kristallda atom qat'iy davriylikda bir-biridan 10^{-10} m tartibdagi masofada joylashganligi uchun Laue kristallarni $\lambda \approx 10^{-10}$ m bilan rentgen nurlanishi uchun difraksion panjara tabiatiga ega deb taklif etdi.

Kristallda rentgen nurlari difraksiyasi kristallda rentgen nurlanishning dastlabki oqimiga aniq burchak ostida chetlangan (difraksiyalangan) nurlardan tashkil topgan kogerent sochilishida paydo bo'ladigan ikkilamchi to'liqlar o'rtasidagi fazoviy kogerentlik bilan izohlanadi. Ikkilamchi to'liqlar bir qancha yo'nalishlarda bir fazoda bo'lgan holda to'planadi, natijada intensiv difraksion nur refleksi yaratiladi.

Laue tomonidan ishlab chiqilgan kristallarda rentgen nurlari difraksiyasi nazariyasi nurlanish to'liq uzunligining kristall elementar yacheykasi a, b, c parametrlari nurlarning tushadigan $\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ va difraksiyalangan α, β, γ burchaklarini rentgen nurlari difraksiyasini paydo bo'lishi uchun Laue shartlari deb ataladigan nisbatlar bilan bog'laydi:

$$a(\cos\alpha - \cos\alpha_0) = h\lambda$$

$$b(\cos\beta - \cos\beta_0) = k\lambda$$

$$c(\cos\gamma - \cos\gamma_0) = l\lambda$$

bunda h, k, l - tekislikning Miller indekslari;

a, b, c - kristall panjara davrlari;

$\alpha_0, \beta_0, \gamma_0$ - kristall o'qi bilan tushadigan nurning hosil qilgan burchaklari;

α, β, γ - kristall o'qi bilan sochilgan nurning hosil qilgan burchaklari.

Rentgen nurlarning difraksiyasi 1912 yilda Laue va uning xodimlari tomonidan tajribaviy aniqlangan va rentgen nurlarining to'liq tabiatiga egaligining isbotidir.

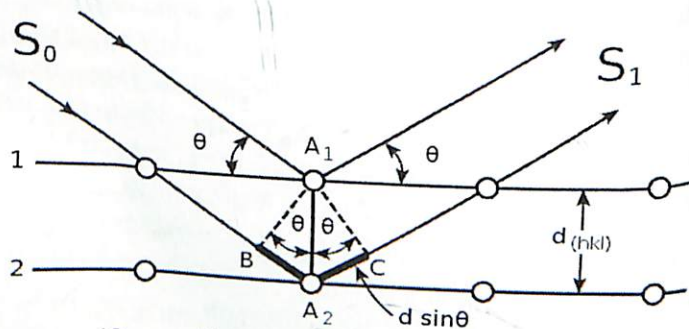
1913 yilda ingliz fizigi U.L. Bregg va rus olimi G.V. Vulf bir-biriga bog'liq bo'lmagan holda, agar difraksion oqim kristallografik tekisligi tizimidan kelib tushgan nurning aksi deb qaralsa, kristall panjaradan difraksion manzarani oddiy usulda hisoblashni amalga oshirish mumkin ko'rsatishgan.

Vulf-Bregg sharoitini keltirib chiqarish. Quyidagi ixchamlashtirishlarni qabul qilgan holda difraksion manzarani paydo bo'lishining geometrik shartlarini qaraymiz:

1. Kristallga tushuvchi rentgen nurlari qat'iy parallel va monoxromatik;
2. Kristall panjara o'lchamli;
3. Kristall atomlari harakatsiz;
4. Kristall ideal strukturaga ega;

Kristall rentgen nurlarini yutmaydi.

Bir-biridan d_{hkl} masofada turgan tekisliklar (hkl) oilasiga θ burchak ostida monoxromatik rentgen nurlari tushgan bo'lsin. Nurlar kristallning nafaqat sirtida sochiladi, ichiga ham o'tadi. Uning ichida ham tekisliklar joylashgan, ya'ni rentgen nurlari kristallning ichiga o'tadi (13-rasm).



13-rasm. Vulf-Bregg formulasini keltirib chiqarish
Bunda nurning tushish burchagi qaytish burchagiga teng. To'liq uzunligi λ bo'lgan qaytgan monoxromatik nur (refleks) faqat qaytish aniq

burchak ostida parallel kristallografik tekisliklar ma'lumotlar paketi bilan qaytadi; boshqa holatlarda o'chirish o'rinli.

5-ramda tushadigan nurlar OO' oqimi. Rasmdan ko'rinib turibdiki, har qaysi keyingi nur oldingisiga nisbatan $2 \cdot x$ yo'lni bosib o'tishi kerak. Bunda

$$x = d_{hkl} \cdot \sin \theta.$$

Chunki tushadigan front bilan qaytgan frontlar o'rtasidagi barcha nurlar turli yo'llarni bosib o'tadi va qaytish frontida ular interferlanishi kerak, agar barcha nurlarning natijaviy amplitudasi noldan farqli bo'lsagina, u holda qaytish refleksi hosil bo'lishi mumkin. Bu shunday holatda amalga oshadiki, kuchini tekisliklardan qaytgan nurlar orasidagi yurish farqi to'liq uzunligining butun son martasi bo'ladi, ya'ni:

$$2 \cdot x = n \cdot \lambda,$$

bunda

$$2d_{hkl} \sin \theta = n \lambda, \quad (1)$$

bu Vulf-Bregg shartidir, bunda

d_{hkl} - tekisliklar o'rtasidagi masofa;

h, k, l - tekisliklarning Miller indekslari;

θ - siljish burchagi;

n - qaytish tartibi, butun musbat son.

Vulf-Bregg sharti elektronlar, neytronlar nurlanishi difraksiyasida; davriy strukturalarda radio va optik diapazondagi elektromagnit nurlanishlarda, hamda tovush difraksiyasida to'g'ri qoladi.

Vulf-Bregg formulasidan difraksion maksimumlar burchagini θ tajribaviy o'lchab, rentgen nurlanishning to'liq uzunligini bilgan holda tekisliklar o'rtasidagi masofani d_{hkl} hisoblab topish mumkin. Chunki har tekisliklar o'rtasidagi masofani d_{hkl} hisoblab topish mumkin. Chunki har qaysi faza o'zining kristall panjarasiga ega, ushbu panjaralarni hosil qiluvchi atomlar tekisliklari oilasi esa faqat ushbu panjara uchun xarakterli tekisliklararo masofalar to'plami bilan o'zini namoyon qiladi. Shuning uchun ham tekshirilayotgan namuna (ob'yekt) dagi tekisliklararo masofani xarakterlash va fazoli tarkibini aniqlash imkonini beradi.

Difraksion manzara fotoplastinkada qayd etilishi mumkin. Uning ko'rinishi ob'yekt strukturasi va tajribaviy usulga bog'liq.

9.5. Rentgenstruktur tahlilni o'tkazish usullari

Rentgenstruktur tahlilda asosan uchta usul qo'llaniladi:

1. Laue usuli. Ushbu usulda uzluksiz spektrli nurlanish oqimi turg'un monokristallga tushadi. Difraksion manzara qo'zg'almas fotoplyonkada qayd etiladi.
2. Monokristallni aylantirish usuli. Ushbu usulda monoxromatik nurlanish oqimi kristallik yo'nalish atrofida aylanadigan kristallga tushadi. Difraksion manzara qo'zg'almas fotoplyonkada qayd etiladi.
3. Kukunlar yoki polikristallar usuli.

Ushbu usulda nurning monoxromatografik oqimi ishlatiladi. Namuna kristallik kukun, plyonka yoki polikristallik agregatdan tashkil topgan. Kukunlar usuli texnik materiallarni tekshirishda asosiy usuldir va amaliyotda keng qo'llaniladi.

Turli vazifalar va rentgenstruktur tahlilning qo'llanilish sohalari turlicha uslubiy yondashuvlar va apparatlarni, jumladan difraksion manzarani qayd etish qurilmalarini talab etadi.

Qo'llanilayotgan rentgen fazali tahlil usullari ikki xil apparaturaga suyanadi: reflekslarni fotoplyonkaga tasvirini tushirishni va hisoblagichlarni (masalan, Geyger-Myuller tipidagi) qo'llovchi.

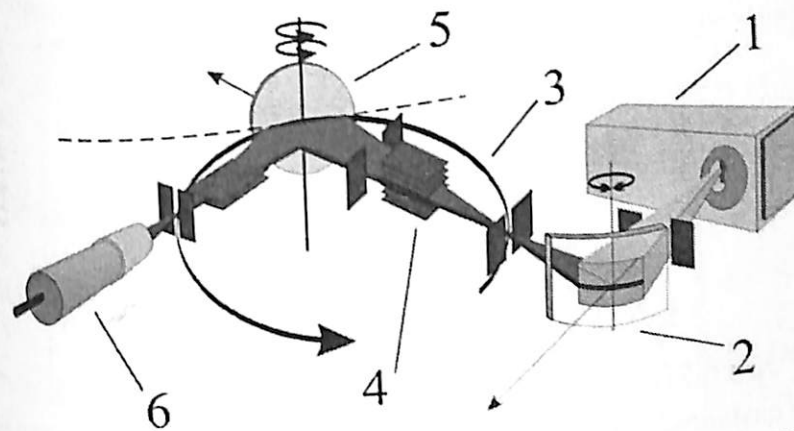
Ilmiy-tadqiqot laboratoriyalari amaliyotida ionli yoki difraksion maksimumlarni qayd etishning usullaridan foydalanuvchi rentgen difraktometrlari keng qo'llaniladi.

Difraktometrning tuzilishi va ishlash prinsipi. Zamonaviy difraktometr kristall ob'yektda difragirlangan rentgen oqimi intensivligi va yo'nalishini o'lchash uchun asbob berilgan nurlanish yo'nalishida difraksiyalangan intensivlikni foizning o'nlab ulushlarida va difraksiya burchagini minutning o'nlab ulushlarigacha o'lchash imkonini beradi.

Rentgen difraktometri (14-rasm) rentgen nurlanish manbai (1), monoxromator (2), goniometr (3) - unda tekshiriladigan namuna joylashtiriladi, tirqish (4), namuna (5), stabilashtirilgan tok manbai bilan nurlanish hisoblagichi va o'lchovni qayd etish qurilmasi - detektordan (6) iborat.

Difraktometr potentsiometrning diagrammasida yoki son chop etadigan qurilmada difraksion manzara avtomatik qayd etiladi.

Rentgen nurlanish manbai rentgen nayi va uning ishlash rejimini stabillovchi va to'g'rilovchi generatorli yuqori voltli yumshoq xarakterli nurlanish beradigan qurilmadan iborat. Anod materiali sifatida tartib raqami $z = 24 \div 29$ bo'lgan metall tanlanadi. Bunday metall sifatida ko'pincha misli anod ishlatiladi. U boshqa nurlanishlardan holi bo'lgan monoxromatik nurlanish beradi. Chunki anod juda toza misdan tayyorlanadi. Odatda K seriyali nurlanishlar ishlatiladi. Buning uchun maxsus filtrlar qo'llaniladi. Cu K_α nurlanishning to'lqin uzunligi $\lambda = 0,154116$ nm.



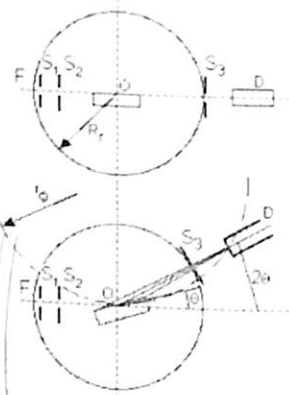
14-rasm. Bregg-Brentan bo'yicha fokuslangan difraktometrning rentgen sxemasi:
1-rentgen nayi, 2-monoxromator,
3-goniometr, 4-tirqish, 5-gamuna, 6-detektor

Goniometr-asbob, u yordamida tekshiriladigan namunada rentgen nurlanishning difragirlanish yo'nalishi va difraksiya paydo bo'lishida namunaning holati bir vaqtning o'zida qayd etiladi.

Qurilmada (15-rasm) tekshiriladigan namuna θ va hisoblagich D goniometrda joylashtiriladi, uning kinematik sxemasi namuna va hisoblagichni birgalikda 1:2 tezlik nisbatida aylanishini ta'minlaydi. Burchagining hisobi konusli proyeksiyon shkala yordamida amalga oshiriladi. Goniometrning tirqish tizimi kiruvchi S_1 , S_2 va

chiquvchi S_3 tirqish qurilmalaridan tashkil topgan. Ular birlamchi va qaytgan oqimni talab qilingan shakl va o'lchamda kesish imkonini beradi.

Yassi namuna goniometrning O markaziga shunday mahkamlanadiki, bunda namunaning ishchi yuzasi goniometr tekisligiga perpendikulyar bo'lishi kerak. Goniometrning tekisligida birlamchi oqim o'qi va aylana radiusi yotadi hamda uning atrofida hisoblagich siljiydi (harakatlanadi).



15-rasm. Difraktometning rentgen optik sxemasi

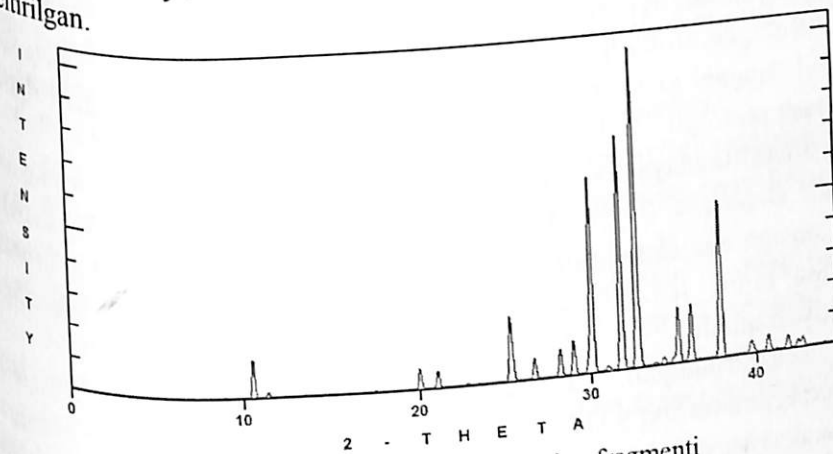
Vulf-Bregg qonuniga ko'ra tushadigan, qaytadigan va normal nurlar qaytaruvchi sirt bilan bir xil tekislikda yotadi. Shuning uchun agar namuna sirti va birlamchi nur oqimi orasidagi burchak bregg burchagiga teng bo'lsa, u holda birlamchi oqimga nisbatan 2θ burchak ostida joylashtirilgan hisoblagichga goniometr tekisligiga perpendikulyar va namuna ishchi sirtiga parallel bo'lgan sirdan qaytgan nurlar tushadi. Difraksion manzarani barcha burchaklarda qayd etish uchun namunani goniometr o'qi atrofida to'xtovsiz aylantirish kerak. Kichik intensivli difraksion akslanishlarni ishonchli qayd etish uchun rentgenstruktur tahlil texnikasida difraksiyalangan oqimni fokuslashning maxsus usuli qo'llaniladi. Ba'zi difraktometrlarda Bregg-Brentano usuli bo'yicha fokuslash qo'llaniladi (15-rasm). Buning uchun rentgen nayi fokusining proyeksiyasi va hisoblagich tirqishi S_3 radiusi r_f bo'lgan aylana (aylanani fokuslash) joylashtiriladi, bunda namuna sirti fokuslash

aylanasi bilan mos kelishi kerak. Agar rentgen nurlari fokuslash aylanasidagi nuqtadan uzoqlashsa va namunaga tushsa, u holda aynan bir oilaga mansub tekisliklarda bo'lgan namunalarning turli joylarida difragirlangan namuna sirtiga parallel barcha nurlar yana kesishadi va berilgan aylana qayd etiladi. Hisoblagichning fokuslash shartini saqlash uchun burchak tezligi ω bilan aylanishda 2ω tezlikda aylatirilishi kerak.

Difraksion chiziqlarni qayd etish ikki usulida amalga oshiriladi:

1. Namuna va hisoblagichni to'xtovsiz siljitishda;
2. Diskret burchaklarda namuna va hisoblagichni nuqta bo'yicha ketma-ket aylantirishda.

Uzlüksiz yozuvda olingan tipik difraktogramma 16-rasmda keltirilgan.



16-rasm. Tipik rentgenogrammaning fragmenti

Qurilmaning avtomatik ishlashini hisoblagichdan kelgan ma'lumotlarni qayta ishlashni o'lchash-qayd etish qurilmasi ta'minlaydi. Zamonaviy rentgen difraktometrlar, agar ular EHM tomonidan boshqarilayotgan bo'lsa, u holda samaradorlik juda yuqori bo'ladi. Boshqaruvchi EHMLar tajriba natijalarini dastlabki qayta ishlash uchun va ba'zi hollarda struktur tahlilda yakuniy xulosa chiqarish uchun qo'llaniladi.

Difraktometrni boshqarish va ma'lumotlarni uzatish EHMdan chiqqan kanallar orqali amalga oshiriladi. Boshqaruvchi buyruqlar: rentgen nurlanishi damperini qo'shish va o'chirish, goniometr dvigatelini

ishga tushirish va to'xtatish, qayta hisoblagich qurilmasini ishga tushirish va to'xtatish, ushbu holatda berilgan EHM vaqtida to'plangan hisoblagichning burchak holati qiymati va impulslar sonini so'rashdir. So'rash natijalari EHMga yuboriladi. Har bir difraksion qaytishdagi ma'lumotlar saqlaydigan qurilmada yoziladi va nom berilgan alohida ma'lumotlar fayli sifatida saqlanadi. Ushbu nom bilan saqlanadigan tajribaviy ma'lumotlar keyingi hisoblash uchun dastlabki ma'lumotlar hisoblanadi.

Fazali rentgenostruktur tahlil. Rentgenofazali tahlil deb tekshiriladigan namunada fazalarning borligini aniqlash, ularni identifikatsiyalash (sifatiiy tahlil), fazaning miqdorini aniqlashga (miqdoriy tahlil) aytiladi.

Rentgendifraktogrammadan namuna qaysi kimyoviy birikmalardan tashkil topganligi va ushbu birikmalarning kristall modifikatsiyalarini aniqlash mumkin.

Identifikatsiya-tekisliklararo masofalar ma'lumotlari bo'yicha qaysi modda ekanligini o'rnatish. Usul har qaysi kristall faza o'zining kristall panjarasiga ega ekanligiga asoslangan. O'z navbatida har qaysi kristall panjara uning uchun xarakterli tekisliklararo (qavatlararo) masofani namoyon qiladi.

Tekshiriladigan moddaning fazaviy tarkibini aniqlash difraktogramma bo'yicha qator qavatlararo masofaning hisoblangan qiymatlari va difraktogrammadagi mos chiziqlar nisbiy intensivliklarini ma'lumotnomalarda keltirilgan jadvaldagi ma'lumotlarni solishtirish orqali amalga oshiriladi. Ular mos kelganda moddaning to'g'ri aniqlanganligi va uning kristall modifikatsiyasi haqida xulosaga kelinadi.

Rentgendifraktogramma bo'yicha moddani identifikatsiyalash. Qavatlararo masofa qaytaligini rentgendifraktogramma bo'yicha aniqlash tamoyili Vulf-Bregg formulasidan kelib chiqadi:

$$2d_{hkl}\sin\theta = n\lambda,$$

bunda

$$\frac{d_{hkl}}{n} = \frac{\lambda}{2\sin\theta}.$$

Difraktogramma olingan rentgen nurlanishning to'liq uzunligi λ ma'lum bo'lganligi uchun qavatlararo masofani aniq masalasi difraktogramma barcha chiziqlari uchun θ burchakni aniqlashga olib keladi. Vulf-Bregg formulasidan d_{hkl} emas, balki d_{hkl}/n aniqlanadi. Chunki aynan bitta atomlar qavatlaridan difraktogramma bo'yicha bir nechta tartibi n bo'yicha farq qiladigan aks etishlarni olish mumkin:

$$\frac{d_{hkl}}{n} = d_{nhnknl},$$

ya'ni:

$$\frac{d_{111}}{2} = d_{222}, \quad \frac{d_{111}}{3} = d_{333}$$

ekanligini hisobga olish kerak.

Tekshirilayotgan namuna rentgendifraktogrammasining hisobi quyidagicha amalga oshiriladi:

1. Eng kichik burchakdan boshlab chiziqlar raqamlanadi;
2. O'n ballik shkala bo'yicha chiziqlarning intensivligi aniqlanadi;
3. Kerakli aniqlikdagi intensivlikdagi maksimumga mos keladigan burchaklar aniqlanadi;
4. Eng katta intensivlikka ega bo'lgan chiziqlardan boshlab barcha intensivlik maksimumlari uchun burchak θ qiymati bo'yicha $\sin\theta$ kattalıkları hisoblanadi.

Agar namuna bir fazali bo'lsa, u holda ushbu fazani aniqlash oddiy masalan;

Tajribaviy d_m qiymatlarni ma'lumotnomalarda keltirilgan jadval ma'lumotlari bilan solishtirish eng kuchli chiziqlardan boshlanadi. Agar taxminan qilingan modda intensiv aks etishlarning 3-4 tasi difraktogrammada bo'lmasa, u holda d/n olingan qiymatlarini ma'lumotnomadagisi bilan boshqa fazalar uchun solishtirish kerak. Tajribaviy va ma'lumotnomalardan d/n qiymatlarining va nisbiy intensivliklarining mos kelishi yakdillik bilan namunada faza borligini identifikatsiyalaydi.

Lekin tajriba xatosi va tekshirilayotgan moddaning o'ziga mosligiga bog'liq holda tajribada olingan natijalar ma'lumotnomada keltirilgan ma'lumotnomadan farq qilishi mumkin. Bu ko'pincha nisbiy intensivlikni

aniqlashda kuzatiladi. Bunda burchak θ qancha katta bo'lsa, shuncha d/n tajriba va jadval ma'lumotlari aniq mos keladi, chunki d ni aniqlashning nisbiy xatosi burchakni θ aniqlash xatosi bilan quyidagi nisbatda bog'langan:

$$\frac{\Delta d}{d} = S \cdot \operatorname{tg} \theta \Delta \theta.$$

Usulning sezgirligi ko'pincha kristall tuzilishdagi defektlar bilan aniqlanadi va kristallitlar o'lchamiga bog'liq. Ushbu omillar difraksiya chiziqlarini yo'g'onlashishiga mos ravishda θ ni o'lchash aniqligini pasayishiga olib keladi. Chunki nozik chiziqlarga qaraganda yoyilgan chiziqlarni topish murakkab. Agar namuna ko'p fazali bo'lsa, fazani aniqlash ancha qiyinlashadi. Ko'p fazali aralashma rentgendifraktogrammasi fazalarda chiziqlar intensivligi tizimdagi fazalar miqdorlariga proporsional bo'lgan alohida fazalar difraktogrammalarining ustma-ust tushishidir. Shunga qaramasdan berilgan faza uchun chiziqlar intensivliklari nisbatlari ular aralashmada bo'lganda ham saqlanadi. Aralashma tarkibidagi miqdori juda kam bo'lgan faza difraktogrammasida asosiy bo'lgan chiziqlar bilan yonmayon bir nechta intensiv chiziqlar ko'rinishida paydo bo'lishi mumkin. Namuna tarkibida ishtirok etgan fazaning har biriga mos d/n qatori ajratiladi va ularni identifikatsiyasi namunaning fazaviy tarkibini identifikatsiyalash imkoniyatini beradi.

Turli kubik panjaralar uchun reflekslarni ajratish. Kubik singoniyali kristallar uchun qavatlararo masofa qiymati d bilan panjara davriyligi a va qavatning Miller indeksi o'rtasida quyidagi bog'liqlik mavjud:

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

U holda Vulf-Bregg shartini quyidagicha yozish mumkin:

$$\operatorname{Sin} \theta = \frac{n\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a}.$$

Bundan indekslar kvadratlarining yig'indisi $(h^2 + k^2 + l^2)$ qancha katta bo'lsa, aks etish burchagi shuncha katta bo'ladi. O'z-o'zidan rentgendifraktogrammada interferlangan chiziqlar aks etiladigan qavat indeksleri kvadratleri yig'indisining ortib borish tartibida joylashadi.

Bundan kelib chiqqan holda polikristall difraktogrammasida interferlangan chiziqlarning joylashishi navbatini ko'rsatuvchi jadvalni tuzish mumkin.

Yuqoridagi formulaga nisbatdan foydalangan holda difraktogrammadagi chiziqlarning maksimal imkoniy sonini oson aniqlash mumkin. $\operatorname{Sin} \theta \leq 1$ bo'lganligi uchun rentgendifraktogrammada chiziqlar paydo bo'lishi mumkin, ular uchun:

$$\frac{n\lambda \sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}{2a} \leq 1.$$

Oddiy elementar yacheykali kristallar rentgen nurlarini sochganda difraktogrammada 4-jadvalda ko'rsatilgan qator chiziqlar paydo bo'ladi. Lekin yarim o'tkazgichlar va metallar nisbatan murakkab kristall panjaralarni hosil qiladi. Ular olmosga o'xshash hajmiy markazlashgan va h.k. kristall panjaralar hosil qiladi. Bunday panjaralarda ba'zi atom qavatlari paydo bo'ladi. Natijada rentgendifraktogrammada ba'zi chiziqlar yo'qoladi. Chunki bunday atomlar qavatlari uchun Vulf-Bregg sharti bajarilmaydi. 4-jadvalda turli kubik panjaralar uchun tekislikdan reflekslarni aniqlash haqidagi ma'lumotlar keltirilgan. Difraktogrammada paydo bo'lishi mumkin bo'lgan reflekslar miqdori kristall panjara tipini aniqlaydi:

- oddiy-barchasi;
- hajmiy markazlashgan—agar $(h^2 + k^2 + l^2) = 2m$ bo'lsa, bunda m butun son;
- qirralari markazlashgan—agar h, k, l larning barchasi juft yoki barchasi toq bo'lsa;
- olmosli—agar h, k, l barchasi juft yoki barchasi toq yoki $(h+k+l)$ yig'indisi 4 ga bo'linsa.

4-jadval

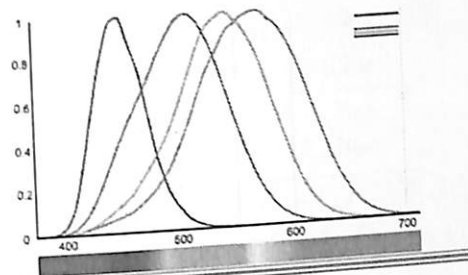
Aks etish ruxsat etilgan tekislik indeksleri (h, k, l)				
Kubik panjara tiplari				
Oddiy	Hajmiy markazlashgan	Qirralari markazlashgan	Olmos tipi	ZnS tipi
100	-	-	-	-
110	-	-	-	-
111	110	-	111	111
200	-	111	-	200
	200	200		

210	-	-	-	-
220	220	220	220	220
221	-	-	-	-
300	-	-	-	-
310	310	-	-	-
311	-	311	311	311
222	222	222	-	222
320	-	-	-	-
321	321	-	-	-
400	400	400	400	400
410	-	-	-	-
330	330	-	-	-
331	-	331	331	331
420	420	420	-	420

Nazorat savollari

1. Molekulalarning elektron-tebranma-aylanma holatlari.
2. Molekulalarning optik spektroskopiyasi.
3. Molekulalarning optik sohadagi energetik pog'onalari.
4. Molekulaning to'liq energiyasi uning elektron, tebranma va aylanma harakat energiyalarining yig'indisi ekanligi.
5. Energetik pog'onalarning nisbiy joylashishi.
6. Molekulalarning aylanma harakati.
7. Aylanma harakat qilayotgan ikki atomli molekulani klassik mexanika asosida qattiq rotator sifatida tushuntirish.
8. Aylanma harakat spektri va aylanma energetik pog'onalar sistemasini.
9. Aylanma harakat qilayotgan ko'p atomli molekulalarning harakat miqdori momenti va kinetik energiyasini klassik mexanika asosida ifodalash

X. BOB AMALIY MASHG'ULOTLAR



1-amaliy mashg'ulot Atomlar va molekular tuzilishi

Mashg'ulotning maqsadi-atomlarning asosiy modellarini ko'rib chiqish, atom tuzilishining kvant-kimyoviy tomonlari va Bor nazariyasining matematik ifodasini o'rganish.

Mashg'ulotning rejasi:

1. Atom tuzilishi modellari va atom tuzilishining kvant-kimyoviy tavsifi.
2. Molekula geometriyasining elektron orbitallarning gibridlanish turiga va modda xossasining molekula geometriyasiga bog'liqligini o'rganish.
3. Organik va anorganik moddalar hamda uglerodning allotropik modifikatsiyalari uchun gibridlanishning universallik xarakterini o'rganish.

Masalalar

1. To'lqin uzunligi $\lambda=7,5 \cdot 10^{-7}$ m bo'lgan yorug'lik nurining kvant energiyasini aniqlang.
2. To'lqin uzunligi $\lambda=5,7 \cdot 10^{-7}$ m bo'lgan yorug'lik nurining kvant energiyasini aniqlang.
3. Vodorod atomi 3-energetik darajadagi elektronning energiyasini (eV) hisoblang.
4. Bor modeliga asosan elektronning yadrodan uzoqlashish radiusi $2,116 \cdot 10^{-10}$ m bo'lsa, uning mazkur orbitadagi aylanish tezligini hisoblang.
5. Elektronning to'lqin uzunligi $\lambda=0,242 \cdot 10^{-7}$ m, uning harakat tezligini aniqlang.

6. Elektronning harakat tezligi $v=2,2 \cdot 10^{10}$ m/s bo'lsa, uning to'liq uzunligini toping.
7. Foton massasi elektron massasiga ($m=9,108 \cdot 10^{-31}$ kg) teng bo'lsa, uning to'liq uzunligini toping.
8. Neytron massasi $1,675 \cdot 10^{-27}$ kg, harakat tezligi $v=4 \cdot 10^2$ m/s bo'lsa, De-Broyl to'liq uzunligini toping.
9. Massasi $m=6,644 \cdot 10^{-27}$ kg, to'liq uzunligi $\lambda=2 \cdot 10^{-12}$ m bo'lgan zarrachaning harakat tezligini aniqlang.
10. Harakat tezligi 500 m/s bo'lgan geliy va fluor molekularining De-Broyl to'liq uzunligini toping.
11. Natriy atomi bug'lari to'liq uzunligi $\lambda=4340 \cdot 10^{-10}$ m bo'lgan fotonlarni yutsa, atomdagi elektronning qo'zg'alish (hayajonlanish) energiyasini (eV) hisoblang.
12. Qo'zg'almagan (hayajonlanmagan) vodorod atomi to'liq uzunligi $\lambda=1500 \cdot 10^{-10}$ m bo'lgan nur bilan nurlanish uchun atomga qanday energiya (eV) ta'sir ettirilishi kerak?
13. Elektron formulasi $1s^2 2s^2 2p^3$ bo'lgan atomning normal holati uchun elektronlarning n, l, m_l, m_s kvant sonlari qiymatlarini aniqlang.
Elektron raqami 1 2 3 4 5 6 7

n						
l						
m_l						
m_s						
14. Sc, Ti, V atomlarida qancha bo'sh d-orbitallar mavjud? Mazkur elementlar atomlarining elektron formulalarini yozing.
15. Tartib raqamlari 59, 60, 90, 93 bo'lgan elementlar atomlaridagi bo'sh f orbitallar sonini aniqlang. Gund qoidasiga asosan elektronlarning orbitallarda taqsimlanishini ifodalang.
16. Atomning sirtqi qobig'idagi elektronning energetik holati quyidagi qiymatdagi kvant sonlari bilan ifodalanadi: $n=3; l=0; m_l=0$. Qaysi elementlar atomlari mazkur elektronlarga ega? Mazkur elementlar atomlarining elektron formulalarini yozing.
17. Natriy, xrom, yevropiy, temir, argon elementlari atomlarining elektron formulalarini yozing.

18. Marganes, azot, kislorod, kremniy, kobalt atomlarining quyi energetik holati uchun orbitallarda elektronlarning taqsimlanishini Hund qoidasiga muvofiq yozing.
19. Uglorod atomi uchun ikki elektron holati mavjud: $1s^2 2s^2 2p^2$ va $1s^2 2s^2 2p^3$. Atomning bu holatlari qanday nomlanadi? Birinchi holatdan ikkinchi holatga qanday o'tishi mumkin?
20. Quyidagi elektron formulalar qaysi elementlar atomlariga javob beradi:
 - a) $1s^2 2s^2 2p^3$;
 - b) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$;
 - c) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^1$;
 - d) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 5d^1 6s^2$.
21. Hund qoidasiga muvofiq fosfor, alyuminiy, kremniy, oltingugurt, nikel atomlarining yuqori energetik holatiga javob beradigan elektronlarning orbitallar bo'yicha taqsimotini yozing.
22. Tartib raqamlari 12, 20, 38, 48, 82 bo'lgan elementlar atomlarining elektron konfiguratsiyalarini yozing.
23. Tartib raqamlari 21, 35, 37, 73, 58 bo'lgan elementlar atomlarining quyi energetik holatlari uchun Hund qoidasiga muvofiq orbitallar bo'ylab elektronlar taqsimlanishini yozing.
24. a) litiy, berilliy, bor, uglorod; b) azot, kislorod, fluor, neon atomlarining elektronlari uchun barcha kvant sonlarining qiymatlarini yozing.
25. Xlor atomining elektron konfiguratsiyasini yozing va undagi juft va toq elektronlar sonini aniqlang.

2-amaliy mashg'ulot Molekulalar geometriyasi

Mashg'ulotning maqsadi-Valent orbitallar elektron juftlarini siljitish (VOEJS) nazariyasi asosida molekulalar geometriyasini aniqlashni o'rganish hamda molekulalar geometriyasini ifodalaydigan xarakteristikalarni aniqlash.

Mashg'ulotning rejas:

1. Molekula geometriyasini ifodalovchi asosiy xarakteristikalar.
2. Gillesping elektron juftlarni siljitish nazariyasi.
3. Molekulalar va ionlarning geometrik shaklini aniqlash algoritmi.

Nazariy qism

Valent orbitallar elektron juftlarini siljitish (VOEJS) nazariyasi kimyoda molekulalar geometriyasini tushuntirish va bashoratlashda qo'llaniladigan yondoshuvlardan biridir.

Mazkur nazariyaga muvofiq molekula doimo (energiya minimumi prinsipiga asosan) tashqi elektron juftlarining bir-birini siljitish (itarish) holati minimal bo'lgan shaklni egallaydi. 1940 yili N. Sidjvik va G Pauli elektron juftlarining bir-birini siljitish (itarish) modelini taklif etdi. Mazkur g'oya keyinchalik 1957 yili R.Gillespi va R.Nayxol tomonidan rivojlantirildi. Ushbu yondashuvning asosiy g'oyalari ayrim o'tmovchi elementlar birikmalari uchun quyidagilardan iborat:

1. Ko'p valentli atom (yoki ion) bog'lari konfiguratsiyasi faqat markaziy atom valent qobiqlaridagi bog'lovchi va bog'lamaydigan (bog'lanishda ishtirok etmaydigan) elektron juftlari soni bilan ifodalanadi.
2. Valent orbitallardagi elektron juftliklari bulutlari oriyentatsiyasi ularni to'ldiruvchi elektronlarning o'zaro maksimal siljitish (itarish) bilan aniqlanadi.

2-jadvalda keltirilgan q qiymatlari soni bog'lovchi va bog'lanishda ishtirok etmaydigan elektron juftlarini, ya'ni taqsimlanmagan elektron juftlari sonini ifodalaydi.

Gillespi bog'lovchi elektron juftlarini ifodalash uchun X bog'lanishda ishtirok etmaydiganlarni Ye bilan belgilanishni taklif

etdi. Ushbu ifodalashni e'tiborga olib molekulalar geometriyasi konfiguratsiyasini umumiy holda AX_mE_n tarzda yozish mumkin.

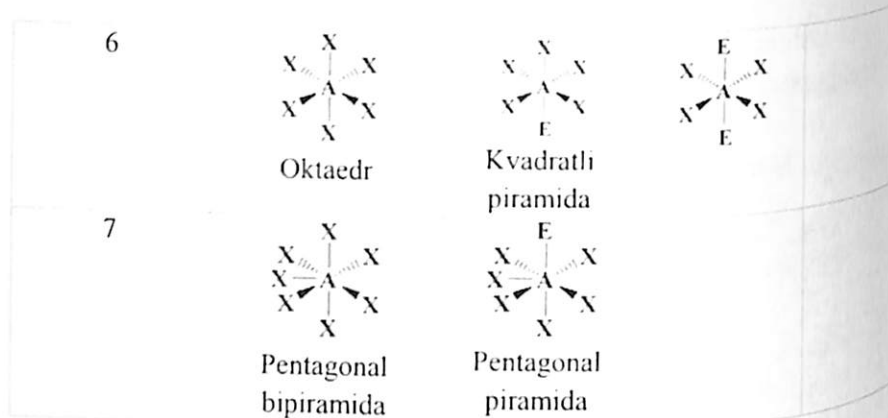
2-jadval

Markaziy atom (A) bog'lari konfiguratsiyasining valent orbitallardagi elektron juftliklari soni (q) ga bog'liqligi

q	Konfiguratsiya
2	Chiziqli
3	Teng tomonli uchburchak
4	Tetraedr
5	Trigonal bipiramida (geksaedr)
6	Oktaedr (tetragonal bipiramida)
7	Qo'shimcha cho'qqili oktaedr
8	Kvadratli antiprizma
9	Uchta qo'shimcha cho'qqili kvadrat antiprizma
11	Cho'qqisiz ikasaedr
12	Ikasaedr

Karrali bog'larsiz AX_mE_n tipidagi molekula strukturalarining geometriyasi

Elektron juftlarning umumiy soni	Erkin juftlar geometriyasi	1 erkin juft	2 erkin juft	3 erkin juft
2	X—A—X Chiziqli			
3	X—A—X Tengtomonlama uchburchak	E X—A—X Siljigan		
4	X X—A—X Tetraedr	E X—A—X Trigonal piramida	E E X—A—X Siljigan	
5	X X—A—X Trigonal bipiramida	E X—A—X	E E E X—A—X	E X—A—X E E

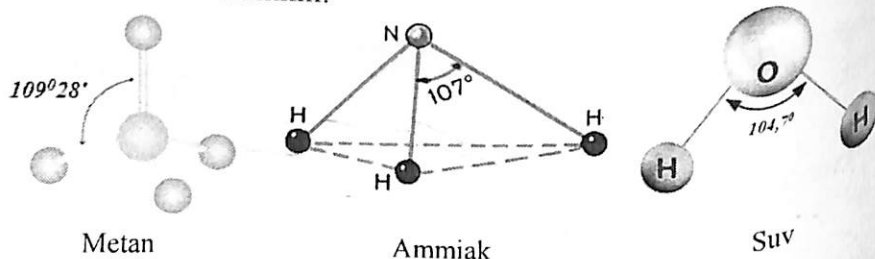


VOEJS nazariyasiga zamonoviy qo'shimchalar:

1. Birlamchi bog' hosil bo'lishida ishtirok etayotgan elektronlarga nisbatan taqsimlanmagan elektron juftlari fazoda kattaroq hajmi egallaydi. Elektron juftliklarning bir-birini itarish (siljitish) kuchi quyidagi tartibda kamayib boradi:

taqsimlanmagan juftlik-taqsimlanmagan juftlik (Ye-Ye) > taqsimlanmagan juftlik-bog'lovchi juftlik (Ye-X) > bog'lovchi juftlik-bog'lovchi juftlik (X-X).

Bunday mulohaza oddiy argumentlardan kelib chiqadi, ya'ni taqsimlanmagan elektron juftlik faqat bitta atom musbat zaryad doirasida bo'lib, ancha harakatchandir. Ikkita atom o'rtasida (atomlar ta'sir doirasida) bo'lgan elektron juftlik nisbatan kamroq harakatchandir. Bunday holatlardan shunday xulosa qilish mumkinki, izoelektronli valent orbitalda bir xil sonli elektron juftlari bo'lgan molekullarda taqsimlanmagan juftlik bog'lovchi juftliklarga nisbatan atom atrofida ko'proq fazoviy hududni egallaydi. Bu holat esa o'z navbatida bog'ning valent burchaklari qiymatini kamaytiradi. Buni quyidagi qator moddalari misolida kuzatish mumkin:



2. Bog' hosil bo'lishida ishtirok etayotgan elektron juftlikning fazoviy hajmi ligandning elektromanfiyligi oshishi bilan kamayadi.

Elektromanfiyligi kattaroq bo'lgan ligand bog'lovchi juftlik elektron bulutini kuchliroq tortadi, ya'ni elektron bulutining zichligini qushimcha ravishda qisilgan tarzda tasavvur qilish mumkin. Mazkur elektron juftlik markaziy atomdan uzoqroqda joylashib, boshqa juftliklarning kamroq ta'sirida bo'ladi. Mazkur jarayon shunga olib keladiki, markaziy atomning kuchliroq elektromanfiylikka ega bo'lgan ligandlar bilan hosil qilgan valent burchaklar eng kichik qiymatga ega bo'ladi.

3. Kimyoviy bog'lar hosil bo'lishida ishtirok etayotgan bitta elektron juftlikka nisbatan ikkita yoki uchta elektron juftliklarning fazoviy hajmi kattaroq bo'ladi. Mazkur qoida karrali bog'lari bo'lgan molekullar geometrik tuzilishini izohlashda asosiy yondashuv bo'lib hisoblanadi.

Molekulada markaziy atom bog'lari konfiguratsiyasini aniqlashda δ bog'lar hosil bo'lishida ishtirok etayotgan elektron juftliklar hamda taqsimlanmagan juftliklarni ajratib olish yondashuvi barcha molekullar uchun qo'llaniladi. π bog'lanish elektronlari ushbu jarayonlar bosqichlarida e'tiborga olinmaydi.

Molekulalar va ionlar geometrik shakllarni aniqlash algoritmi.

1. Birikmadagi markaziy atom aniqlanadi va uning atrofida joylashgan atomlar soniga qarab, birikmadagi δ bog'lar soni topiladi.
2. Markaziy atomning normal va hayajonlangan (qo'zg'algan) holatdagi elektron va elektronografik formulasi yoziladi.
3. Normal holatdagi markaziy atomni o'rab olgan atomning elektron va elektronografik formulasi yoziladi.
4. Markaziy atom elektron bulutlarining gibridlanish tipi topiladi.
5. Molekula yoki ionning geometrik shakli tasvirlanadi hamda δ bog'lar belgilanadi.

3-amaliy mashg'ulot

Kimyoviy bog'lanish. Valent bog'lanish (VB) hamda molekulyar orbitallar (MO) usullari

Mashg'ulotning maqsadi: turli molekullardagi bog'lanish turlarini aniqlashni o'rganish, gomo-va geteroyadroli molekullar uchun VB va MO atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasini (AOCHK) o'rganish, oddiy moddalarda bog' tartibini aniqlash.

Mashg'ulotning rejasi:

1. Kimyoviy bog'lanish turlari.
2. Valent bog'lanishlar usuli.
3. Atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasiga (AOCHK) asoslangan molekulyar orbitallar usuli (MO)

Masalalar:

1. Birikayotgan atomlar elektromanfiyliklari farqiga asosan bog'larning ionlanish darajasini aniqlash. Quyidagi qatorda qaysi bog'lar ion bog'lanishga yaqin: Cs-Cl, Ca=S, Ba=F₂?
2. Birikayotgan atomlar elektromanfiyliklari farqiga qarab bog' tabiatini o'rganish. Qaysi bog' qutbliroq: H-N, H-S, H-Te, H-Li? Qaysi atomga qarab elektron bulutlar siljigan?
3. Quyidagi qatorda ionlanish darajasi qanday o'zgaradi: HF, HCl, HBr, HI.
4. Qaysi birikmada bog' ion bog'lanishga yaqinroq: LiF, BeF₂, BF₃, CF₄?
5. Valent bog'lanishlar usuliga asosan BF₃ va BF₄⁻ ioni molekullarining elektron tuzilishini izohlang.
6. O₂, O₂⁻, O₂⁺ molekullari (zarrachalari) uchun molekulyar orbitallarni yozing, bog' tartibini aniqlang hamda bog' energiyasi o'sishi tartibida zarrachalar molekullarini joylashtiring. Magnitlanish xossasini izohlang.
7. H₂ molekulasini hosil bo'lish yoki bo'lmasligini, paramagnit yoki diamagnitligini izohlang. Hosil bo'lsa, energetik diagrammani tasvirlang.

8. Muvozanatdagi atomlararo masofani H₂ d=0,741·10⁻⁸ sm va H₂ d=2,672·10⁻⁸ sm qanday izohlash mumkin?
9. BN molekulasining energetik diagrammasini tasvirlang. bog' tartibini aniqlang, magnitlanish xossasini izohlang (N atomining elektromanfiyligi B ga nisbatan katta).
10. BO, CN va CO⁻ zarrachalarning molekulyar orbitallarini yozing, bog' karraligini aniqlang.
11. BN, BO va CO molekullari elektron tuzilishiga asosan bog' energiyasi oshishi tartibida joylashtiring. Quyidagi qatorda bog' uzunligi, dissotsiatsiyalanish energiyasi hamda magnit xossalari qanday o'zgaradi: O₂⁻², O₂, O₂⁺.

4-amaliy mashg'ulot

Molekullar simmetriyasi elementlari va dipol momenti

“Molekullar simmetriyasi” mavzusi molekullar tuzilishini matematika usullar asosida o'rganishini nazarda tutadi.

“Simmetriya nuqtali guruhlar va molekulaning dipol momenti”ni aniqlash mavzusi bo'yicha amaliy mashg'ulotni o'tkazishda uslubiy ko'rsatmalar asosida kvant-kimyoviy HyperChem yoki SPARTAN dasturlaridan foydalanish mumkin.

Mashg'ulotning maqsadi: Simmetriya elementlarini o'rganish, kvant-kimyoviy usullar asosida simmetriya nuqtali guruhni aniqlash va dipol momentini hisoblash.

Asbob-uskunalar: Kompyuterlar, videoprojektr, Hyper Chem yoki SPARTAN dasturlari.

Nazariy qism

Dipol momenti muhim molekulyar konstanta bo'lib, molekullarning elektrik simmetriyasini izohlaydi. Dipol momentining qiymati (μ) quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

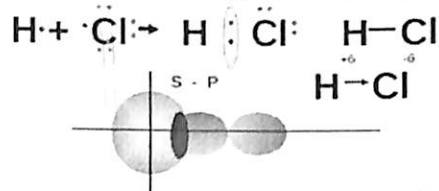
$$\mu = q \cdot l,$$

bunda l -radius vektor kattalik bo'lib, manfiy zaryad markazidan musbat zaryad markaziga yo'nalishini ifodalaydi. q -har bir zaryadning mutlaq qiymati.

Kimyoviy adabiyotlarda zaryad qiymati sifatida dipol momenti teskari vektor yo'nalishining qiymati qabul qilingan.

CGSE sistemasida dipol momenti qiymati $\mu = 4,8 \cdot 10^{-10}$ elektro statik o'lchov birligida ham o'lchash qabul qilingan, ya'ni $1D = 1,10^{-18}$ el.st.o'lchov birligi. SI sistemada esa $1D = 3,34 \cdot 10^{-30}$ kJ·m.

Dipol momentining hosil bo'lishiga bir necha omillar sabab bo'ladi. Avvalambor molekulani tashkil etgan atomlar tabiatidagi farq. Molekuladagi atomlar bir xil tipda bo'lsa, u holda $\mu = 0$ ga teng bo'ladi. Agar molekuladagi atomlar turli tipda bo'lsa, ularning elektromanfiyliklari farqi sababli μ ning qiymati noldan farq qiladi, ya'ni molekulada elektronlar bulutining simmetriyasi hosil bo'ladi. Molekuladagi atomlarning turli gibridlanish holatida bo'lishi ham dipol momentini hosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Masalan, $H-Cl$ bog'i uchun, vodorod atomining $1s$ orbitali va xlor atomining $3p$ orbitali ishtirokida elektron bulutlari qoplanishdan hosil bo'lgan bog' buluti zichligining markaz og'irligi vodorod tomon Δl ga siljishi natijasida, qo'shimcha tarzda gomeopolyar dipol momenti hosil bo'ladi, ya'ni uning sxemasi:



Dipol momentlarini aniqlash usullari qutbli molekullarni yo'naltirilgan elektr maydonida oriyentatsion effektini aniqlashga asoslangan.

1923 yil Tompson ko'p atomli molekullarning dipol momenti qiymati ularni tashkil etgan atomlar dipol momentlari yoki kimyoviy bog'lar dipol momentlari vektor yig'indisi sifatida qarash mumkinligini ko'rsatdi. Unga ko'ra n ta bog'i bo'lgan molekullar uchun:

$$\mu = \sum_{n=1} \mu_i$$

bunda μ_i -i bog'ning dipol momenti.

Kimyoviy bog'lar yoki guruhlar dipol momentlari nazariy usul yordamida kvant-kimyoviy hisoblanadi yoki eksperimental usullar yordamida, ya'ni yutilish spektrlari tebranish intensivliklari asosida yoki ayrim simmetrik molekullar dipol momentlarini vektor yig'indisi bilan aniqlanadi. Agar molekula tekis bo'lmasa, u holda mos ravishdagi tekislikda vektorlar proyeksiyasini aniqlash talab qilinadi.

Agar ayrim birikmalar molekullari eritma yoki gaz fazasida muvozanatli aralashma holatida bir necha molekulyar shakllarda, ya'ni tautomerlar, konformerlar, monomerlar va dimerlar holatida bo'lsa, u holda eksperimental aniqlanadigan dipol momentining o'rtacha qiymati hisoblanadi.

Topshiriqlar

1. Sianid kislotaning simmetriya nuqtali guruhini aniqlang va molekula dipol momentini hisoblang.
2. Kvant-kimyoviy hisoblashlar dasturi asosida sianid kislota molekulasining simmetriyasi va dipol momentini aniqlang:

HyperChem dasturida:

- a. Sianid kislota molekulasini tuzing.
- b. Molekulani strukturasi maqbullashtiring.
- v. Dipol momenti vektorining aks tasvirini tuzing.
- d. log-fayl oching, hisoblash natijalarini yozing va undan simmetriya nuqtali guruhi hamda dipol momenti qiymatini toping.

Spartan dasturida:

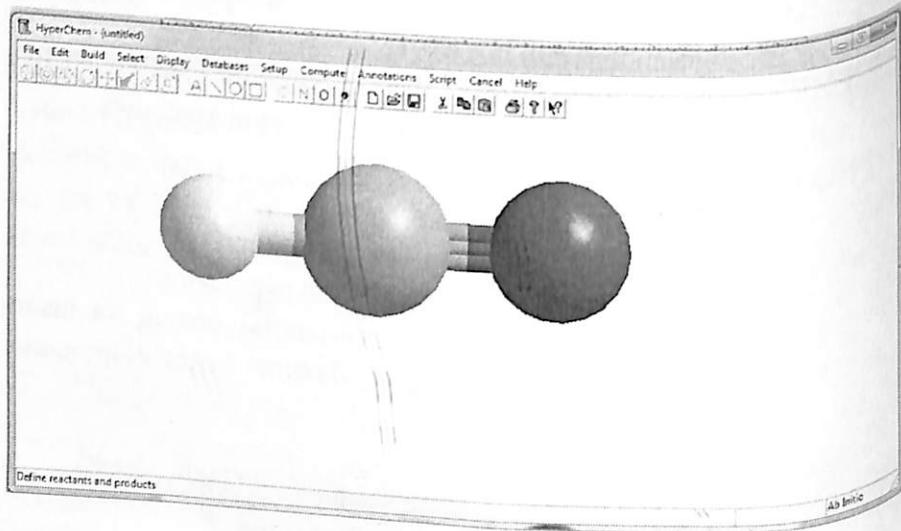
- a. Sianid kislota molekulasini tuzing.
- b. Molekula strukturasi maqbullashtiring.
- v. Molekulaning hisoblangan xossasidan dipol momenti hamda simmetriya nuqtali guruhi qiymatlarini ko'rsating.
- d. Dipol momenti vektorining aks tasvirini tuzing.

3. Foydalanilgan algoritm asosida quyidagi molekullar uchun hisoblashlarni bajaring: $SO_2, SO_3, SF_6, CH_3 - CHFCl$.

HyperChem va Spartan dasturlari asosidagi hisoblangan qiymatlarni mustaqil hisoblashlar asosidagi qiymatlar bilan solishtiring hamda ma'lumotnomadagi ko'rsatkichlar bilan solishtiring.

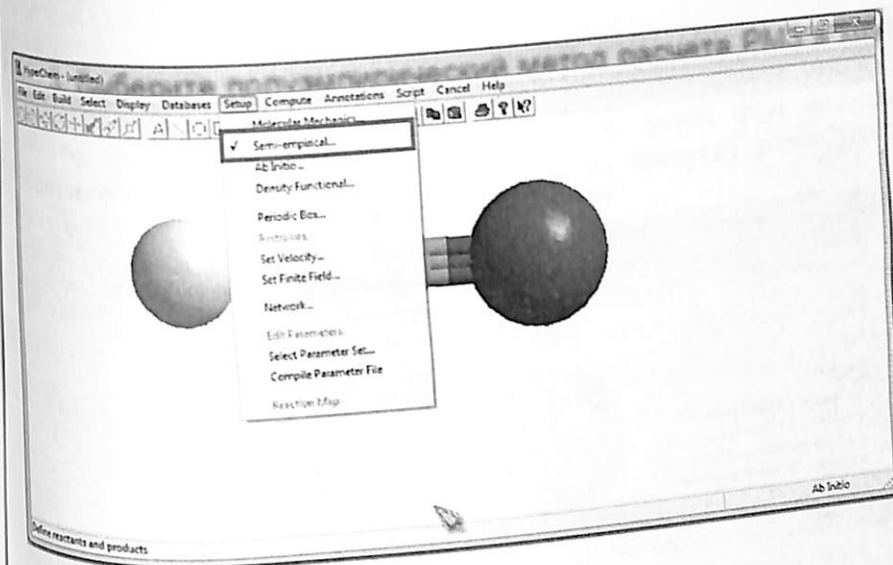
Amaliy mashg'ulotlarda olingan natijalarning mosligi asosida hisoblashlarning aniq usuli va dasturini tanlang.

Mashg'ulotning bajarilishi. Hyper Chem dasturini ishga tushiring. Dasturning ishchi oynasida sianid kislota molekulasini tuzing. Buning uchun uglerod atomini tanlang, ishchi sahifida etan molekulasini tuzing. So'ngra uglerod atomlaridan birini azot atomi bilan almashtiring, **Draw with Nitrogen** bilan valentliklarni to'g'ri belgilang va kimyoviy bog'larni valentliklar asosida ifodalang. Vodorod atomlarini qo'shib, sianid kislota molekulasini standart bog' uzunliklariga mos ravishda tuzing. Buning uchun Build menyusidagi AddHD MODELBuild punktidan foydalaning.

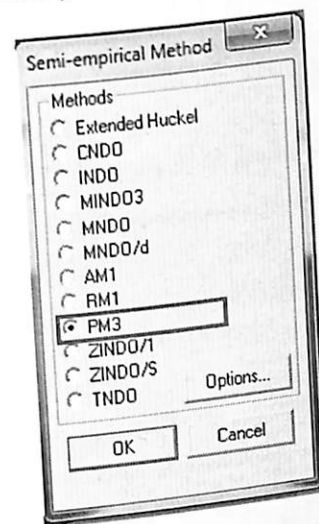


1-rasm. Standart qiymatlar bilan sianid kislota modeli

3. Setup menyusidan hisoblashning RM3 yarimempirik usulini tanlang.

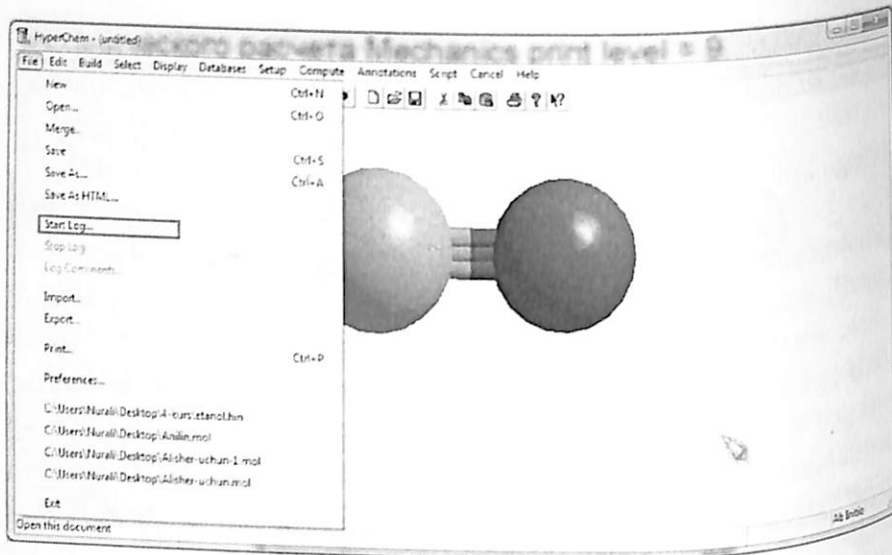


2-rasm. PM3 yarim empirik usulini o'rnatish

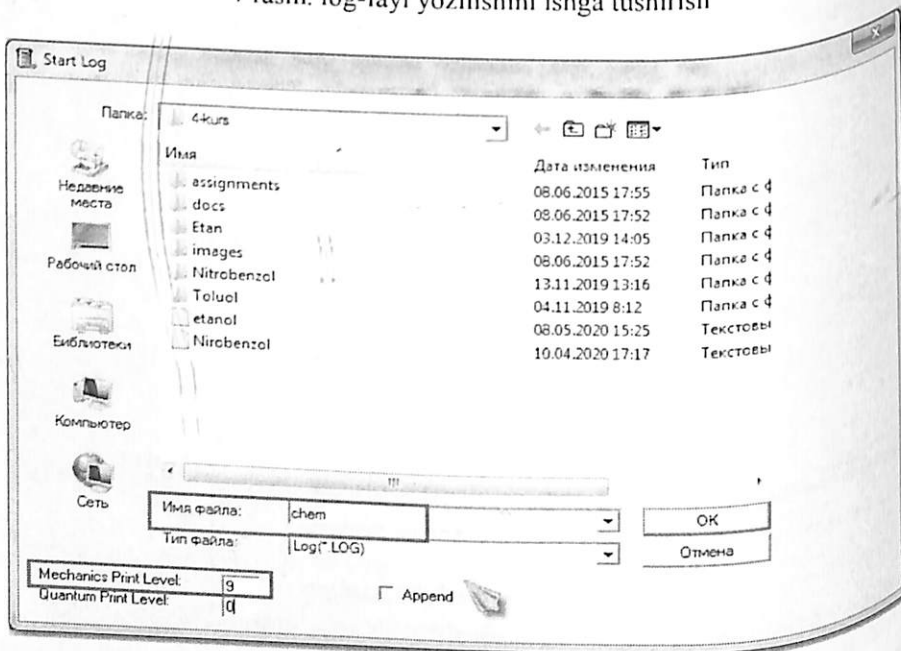


3-rasm. RM3 usulini tanlash

4. log-fayl hisoblash protokolini ishga tushirish. File menyusidan StartLog ni tanlang. Faylga nom bering va molekulyar-mexanik hisoblash protokolini yozishning to'liq darajasini o'rnatish. Mechanics print level=9.

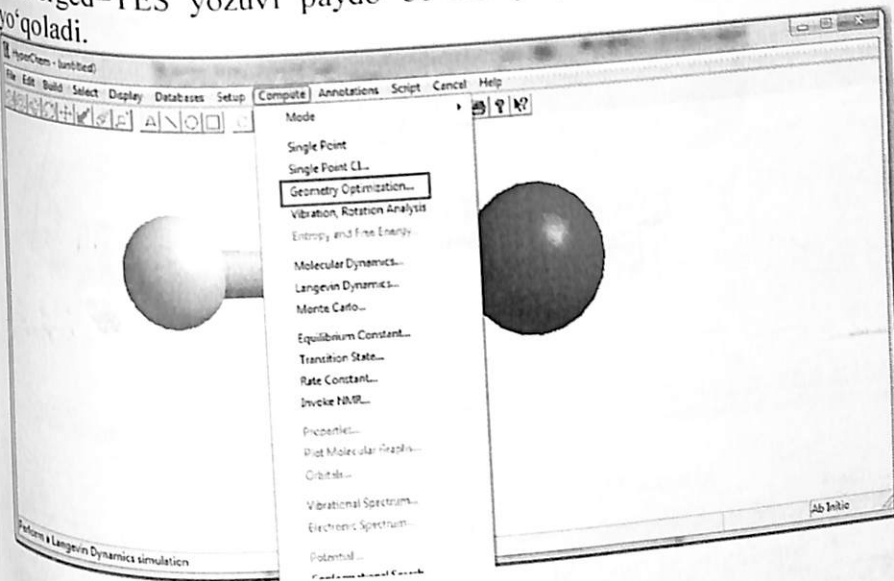


4-rasm. log-fayl yozilishini ishga tushirish

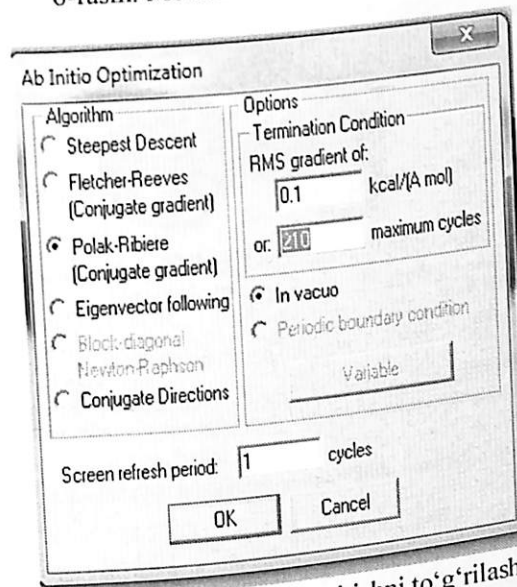


5-rasm. Faylni saqlash va hisoblash protokoli yozilishining to'liqlik darajasini o'rnatish

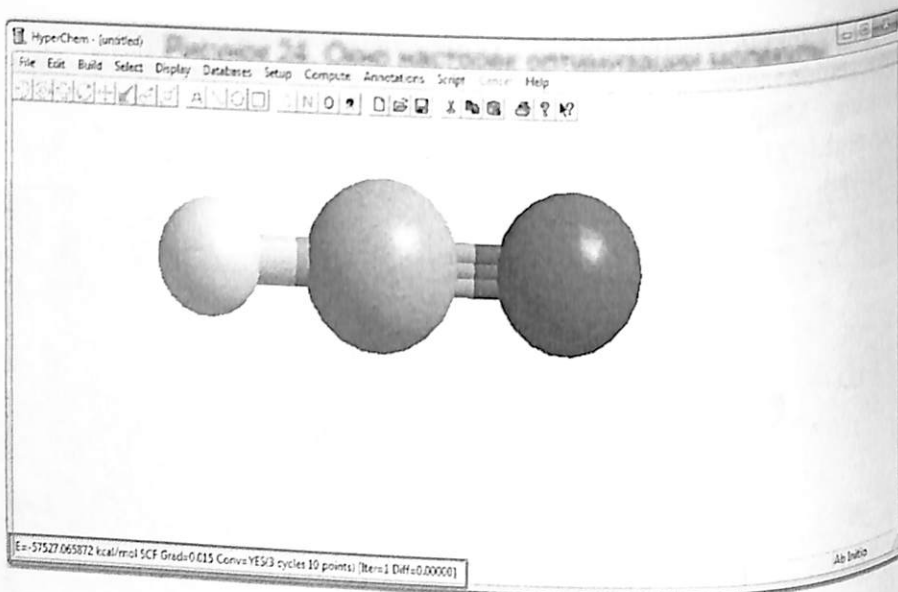
5. Molekula geometriyasini maqbullashtirishni hisoblang. Optimization menyusidan geometriyani maqbullashtirish jarayonini ishga tushiring. Maqbullashtirish jarayoni tugagandan keyin quyi qatorda Converged=YES yozuvi paydo bo'ladi yuqori menyuni himoyalash yo'qoladi.



6-rasm. Molekulani maqbullashtirish

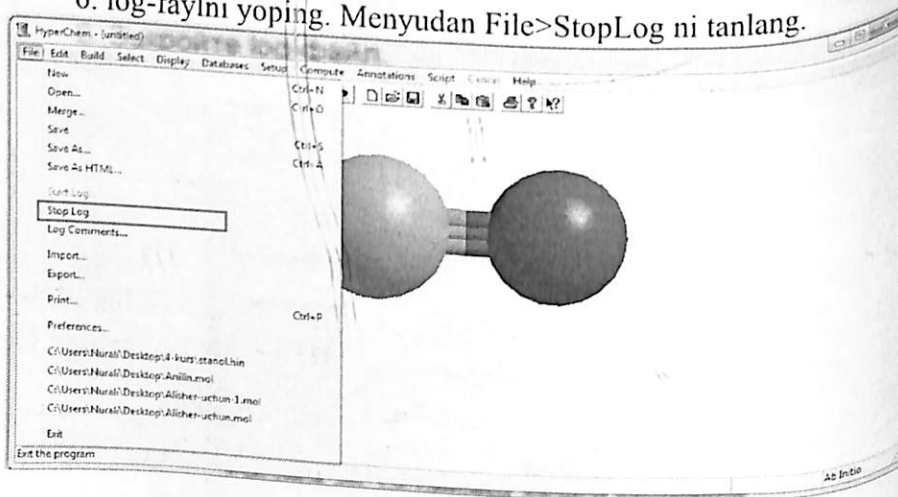


7-rasm. Molekulani maqbullashtirishni to'g'rilash oynasi



8-rasm. Maqbullashtirilgan molekula energiyasi

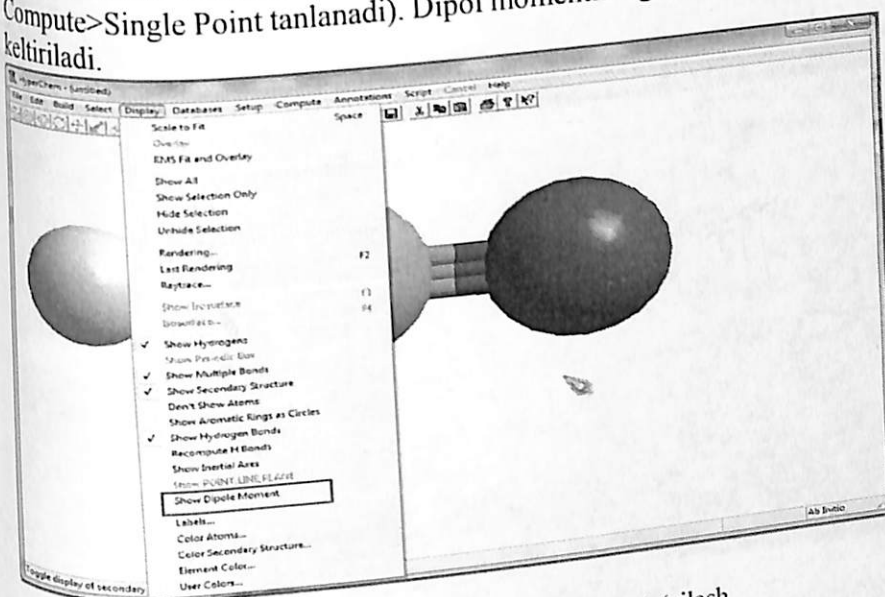
6. log-faylni yoping. Menyudan File>StopLog ni tanlang.



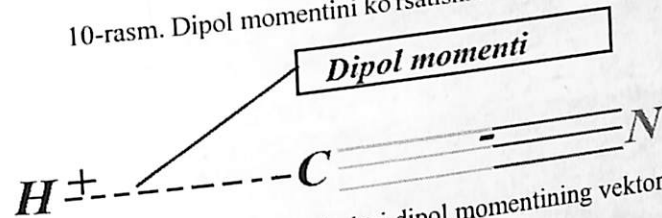
9-rasm. log-faylni yozishni to'xtatish

7. Yarimempirik usulida hisoblash natijalarning interpretatsiyasi. Dipol momentini hisoblang va uning vektor yo'nalishini tasvirlang. Menyudan Display>Show dipole moment tanlab, dipol momenti

vektorini tasvirlashni qo'shing. Agar berilgan buyruq bajarilmasa (kul rang), u holda molekulanı hisoblash qayta talab etiladi (menyudan Compute>Single Point tanlanadi). Dipol momentining qiymati log-faylda keltiriladi.



10-rasm. Dipol momentini ko'rsatishni to'g'rilash



11-rasm. Sianid kislota molekulası dipol momentining vektorı

Maqbullashtirilgan molekula uchun dipol momentining qiymati log-fayl ning oxirida joylashgan (28-rasm). Barcha qiymatlar Debay (D) birligida berilgan.

	x	y	z	Total
Dipole (Debyes)	-0.000	-1.538	-0.000	1.538
Point-Chg.	0.000	-1.158	-0.000	1.158
sp Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
pd Hybrid	0.000	-2.696	-0.000	2.696
Sum				

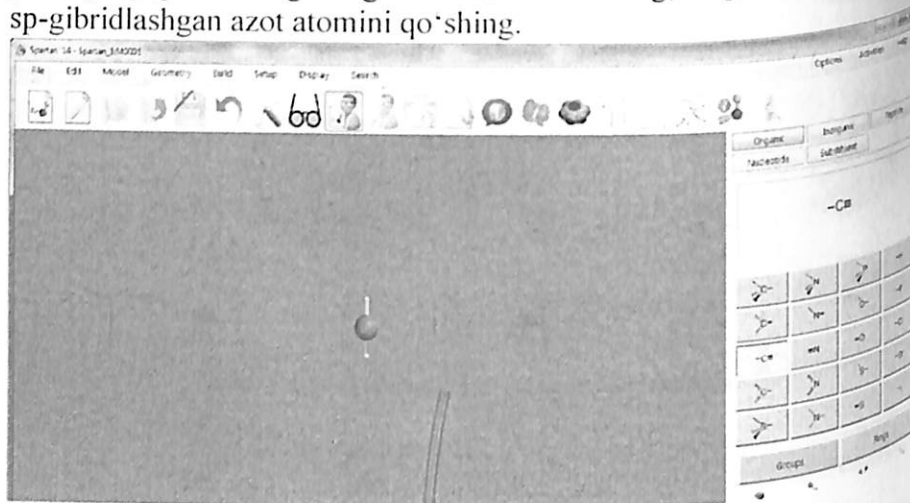
12-rasm. log-faylidan bo'lak
Simmetriyaning nuqtali guruhi log-fayli da molekulaning energetik xarakteristikalaridan keyin Molecular Point Group bandida berilgan.

MOLECULAR POINT GROUP

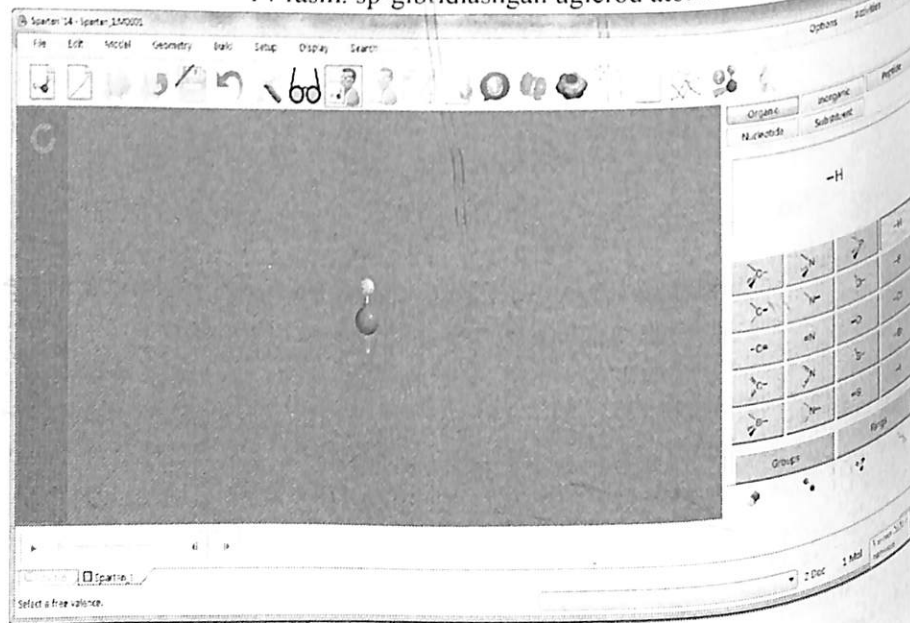
C_{2v}

13-rasm. Sianid kislota simmetriyasining nuqtali guruhi

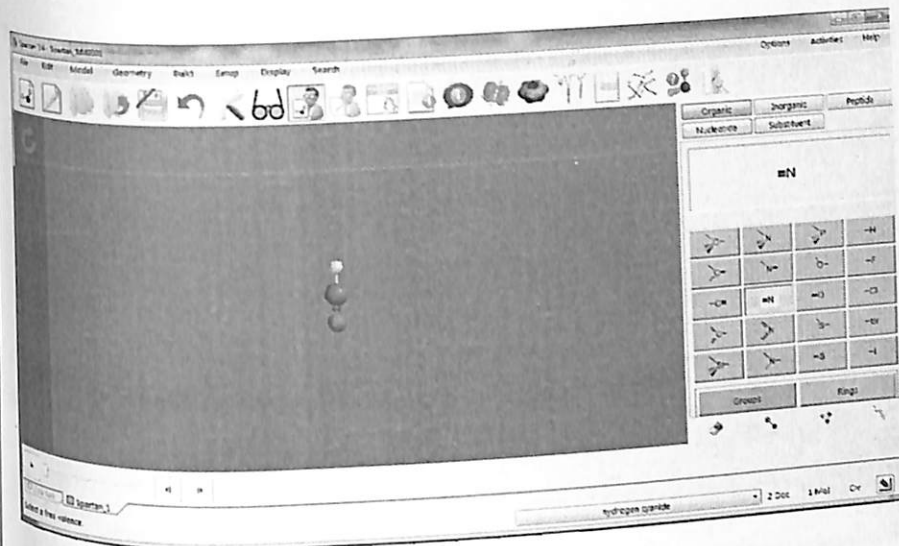
1. Spartan dasturini ishga tushiring. Sianid kislota molekulasini yasang. sp-gibridlashgan uglerod atomini tanlang, unga vodorod atomi sp-gibridlashgan azot atomini qo'shing.



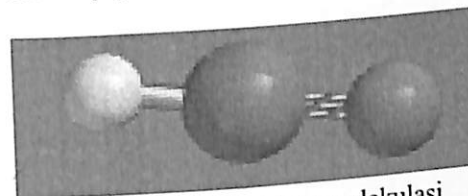
14-rasm. sp-gibridlashgan uglerod atomi



15-rasm. Vodorod atomini qo'shish

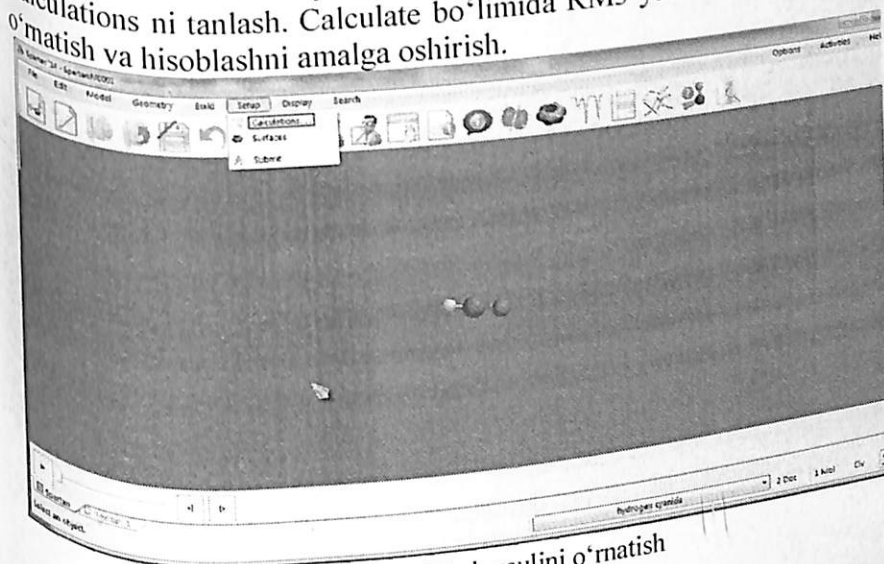


16-rasm. sp-gibridlashgan azot atomini qo'shish

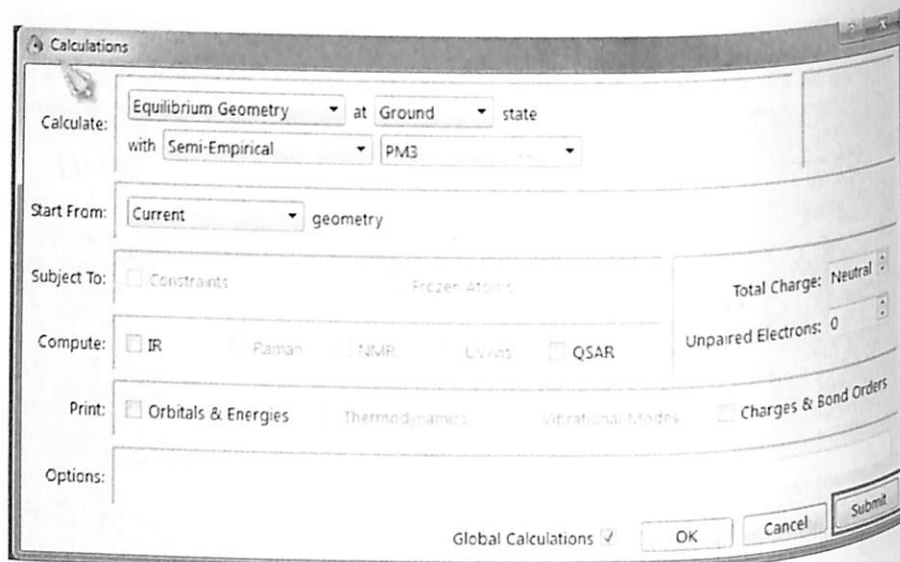


17-rasm. Sianid kislota molekulasi

2. Molekulani maqbullashtirishni o'tkazish. Setup menyusidan Calculations ni tanlash. Calculate bo'limida RM3 yarimempirik usulini o'rnatish va hisoblashni amalga oshirish.

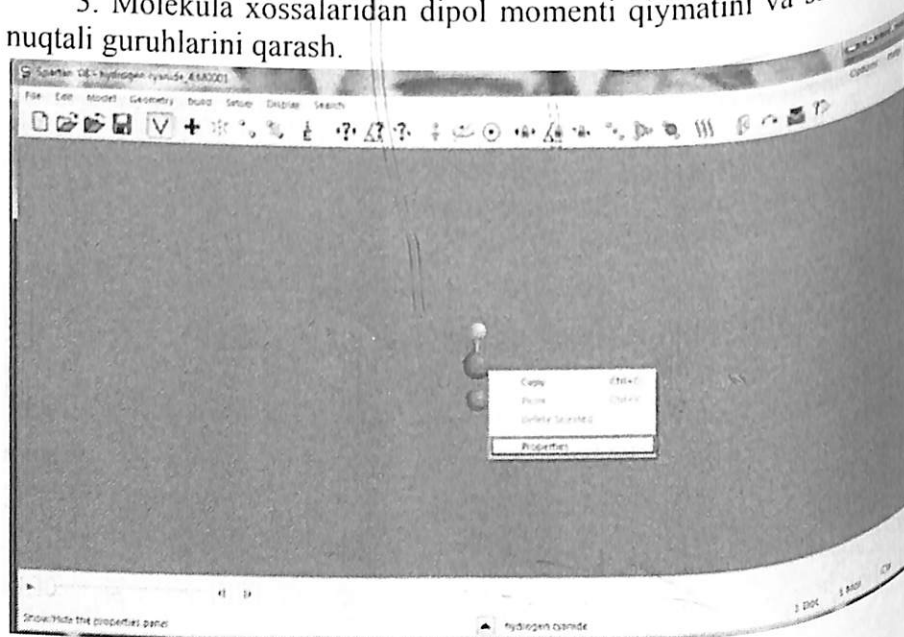


18-rasm. Hisoblash usulini o'rnatish

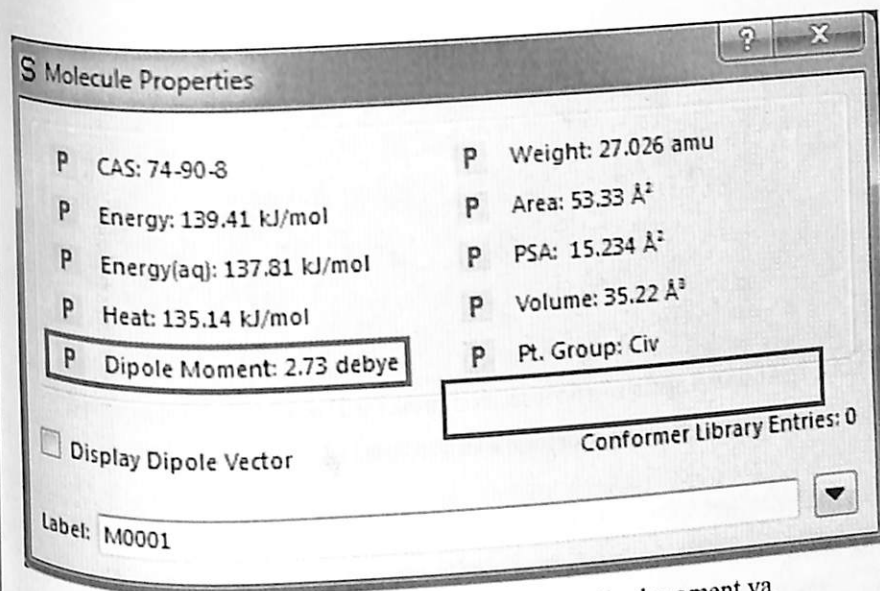


19-rasm. RM3 yarimempirik hisoblash usulini tanlash va hisoblashga o'tish

3. Molekula xossalariidan dipol momenti qiymatini va simmetriya nuqtali guruhlarini qarash.

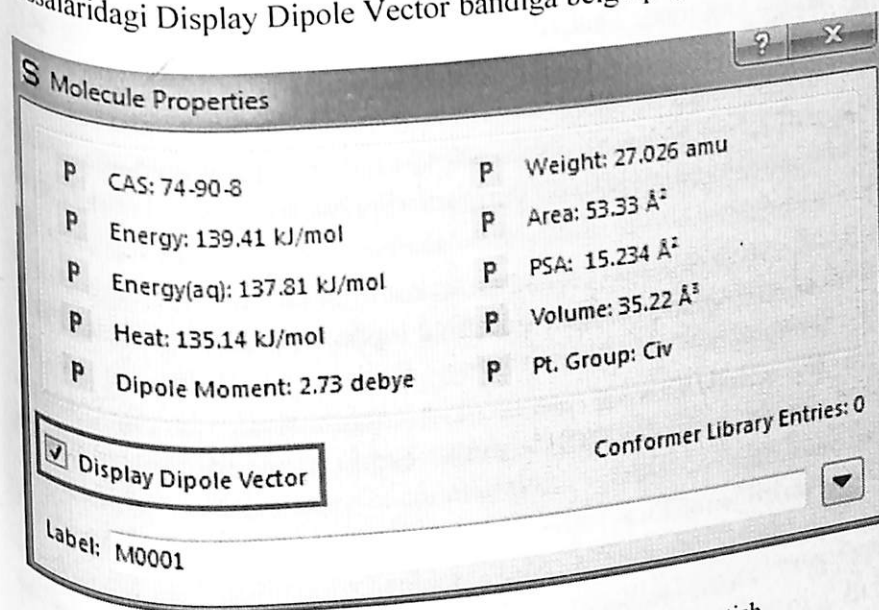


20-rasm. Molekula xossalariini qarash

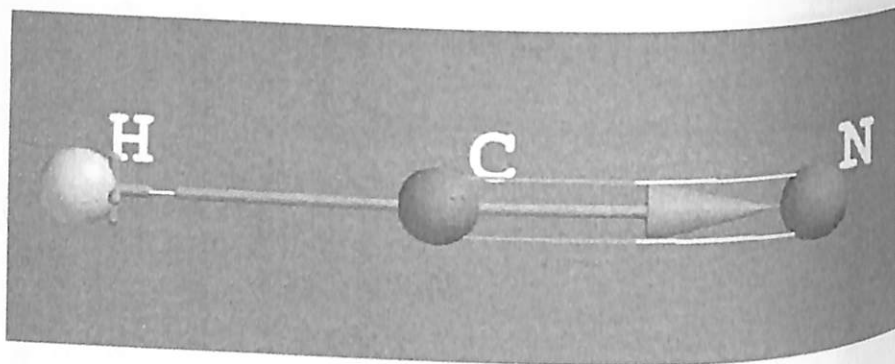


21-rasm. Molecule Properties maydoni: dipol moment va simmetriya nuqtali guruhi

4. Dipol momenti vektorini ifodalashni to'g'rilash. Molekula xossalariidagi Display Dipole Vector bandiga belgi qo'yish.



22-rasm. Dipol momenti vektorini tasvirlashni tuzatish



23-rasm. Sianid kislota molekulasini dipol momentining vektori

Masalalar

1. NH_3 molekulasini uchun elementlar tahlili va simmetriya operatsiyalari tahlilini o'tkazing.
2. Molekulyar orbitallar usulida SO_2 molekulasining muvozanatdagi geometrik konfiguratsiyasini aniqlang. Simmetriyaning nuqtali guruhini aniqlang va simmetriya elementlarini izohlang.
3. NO_3^- ionining muvozanatdagi geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.
4. NH_3 molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.
5. PF_5 molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.
6. IF_5 molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.
7. Benzol molekulasini perpendikulyar og'irlik markazidan o'tgan simmetriya o'qning tartibini aniqlang.
8. $CHF = CHF$ molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.

9. $CHFCIBr$ molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.
10. CH_4 molekulasining geometrik konfiguratsiyasini aniqlang hamda simmetriyaning nuqtali guruhini topib, simmetriya elementlarini izohlang.

5-amaliy mashg'ulot

Simmetriya elementlari asosida molekulaning qutbliligi hamda izomerlarni aniqlash

Mashg'ulotning maqsadi: Simmetriya elementlari asosida molekulaning qutbliligi va izomerlarini hamda uning elektrik xossalarini aniqlash.

Mashg'ulotning rejasi:

1. Qutbli va qutbsiz molekullar.
 2. Molekulaning dipol momenti va simmetriyasi.
 3. Molekulaning dipol momenti va izomeriya.
- Molekullar ikki tipga taqsimlanishi mumkin. Ayrim molekullarda musbat va manfiy zaryadlar og'irlik markazlari bir-biriga mos kelsa, ya'ni bir markazda yo'nalgan bo'lsa, boshqalarida bir-biriga nisbatan ma'lum masofada joylashgan bo'ladi. Birinchi tip molekullarga *qutbsiz*, ikkinchi tip molekullarga *qutbli molekullar* deyiladi. Biroq qutbsiz molekula doimiy tashqi elektr maydoniga joylashtirilsa yoki qo'shni ion, molekulaning ta'sir doirasiga tushsa, yengil harakatchan elektronlar siljishi kuzatiladi va natijada yo'naltirilgan (indutsirlangan) *dipol momenti* paydo bo'ladi.

Molekula tarkibiga kirgan atomlarda ham siljish kuzatiladi. Elektr maydonida elektronlar, atomlarning siljishi, molekulaning oriyentatsiyalanishiga *qutblanish* deyiladi. Qutblanish qiymati molekulaning qutblanuvchanlikka moyilligini-qutblanuvchanlik *a* qiymati bilan xarakterlanadi. Odatda qutbli molekullar elektr maydonida oriyentirlanadi. Bu jarayon birikmalar uchun suyuq va gaz fazali holatlarida temperaturaga bog'liq bo'ladi. Modda gaz yoki suyuq (erigan)

holatda bo'lsa, qutbli molekular oriyentatsiyasi molekularning issiqlik harakati natijasida o'zgaradi. Shuning uchun umumiy qutblanish molekular oriyentatsiyasiga bog'liq qutblanish temperatura oshishi bilan kamayadi.

Mazkur tabiatdagi moddalarning molekulyar qutblanishi eritma va gaz holatlar uchun Debay formulasi (tenglamasi) orqali hisoblash mumkin:

$$P = a + \frac{b}{T}$$

bunda a -doimiy bo'lib, b -qiymati quyidagi ifodadan aniqlanadi:

$$b = \frac{4\pi}{3} N \frac{\mu^2}{3K}$$

bunda N -Avagadro soni; K -doimiy koeffitsiyent; μ -qutbli molekularning elektrik momenti (dipol momenti).

Elektronlar siljishi qiymatini dipol elektr momenti qiymati xarakterlaydi.

Dipol momenti tushunchasi barcha molekularni molekulada musbat va manfiy zaryadlar taqsimlanishi hamda ularning elektrik xossalriga qarab ikki guruhga ajratadi.

1. Qutbli molekular—musbat va manfiy zaryadlar markazi molekulada yadrolarning muvozanatli konfiguratsiyasiga mos kelmaydi va $\mu > 0$ bo'lib, ular qutbli elektrik xossaga ega bo'lishadi.

Qutbli molekularlarda doimiy (xususiy) dipol momenti

$$\mu = q \cdot l,$$

bo'lib, l -musbat va manfiy zaryadlar markazlari orasidagi masofa, q -zaryadlar qiymat ko'rsatkichi.

2. Qutbsiz molekular—musbat va manfiy zaryadlar markazi mos keladi va molekularning doimiy (xususiy) dipol momenti qiymati nolga teng bo'ladi, ya'ni: $\mu = 0$.

Bunday molekularlarga:

1. Bir atomli gazlar: He, Ne, Ar, Kr, Xe va K, Na bug'lari.
2. A-A tipidagi ikki atomli simmetrik molekular: H₂, N₂, O₂, Cl₂.
3. B-(A)_n-B tipidagi chiziqli simmetrik uch yoki to'rt atomli molekular: CO₂ (O=C=O), CS₂ (S=S=S), C₂H₂ (H-C≡C-H).

4. AB₄ tipdagi tetraedrik molekular: CH₄, CCl₄, SiCl₄, SnI₄.

Dipol momenti qiymati nolga teng bo'lmagan molekular:

1. Nosimmetrik A-B tipdagi ikki atomli molekular:

Molekula	μ (D)
CO	0,10
HCl	1,03
HBr	0,78
HI	0,38

2. Nosimmetrik B-A-C tipdagi uch atomli molekular:

O=C=S	0,65 D
H-C≡N	2,60 D

3. Chiziqli bo'lmagan B-A-B tipdagi molekular:

H ₂ O	1,84 D
H ₂ S	0,93 D
SO ₂	1,61 D

4. AB₃ tipdagi molekular:

NH ₃	1,46 D
PH ₃	0,55 D
AsH ₃	0,15 D
SbCl ₃	4,00 D

Dipol momenti va molekular simmetriyasi

Molekularning elektrik dipol momentga ega ekanligi uning simmetriyasi bilan bog'liq.

Agarda molekula simmetriya tekisligi δ , simmetriya o'qi C_n , simmetriya markazi i va oynali burama o'q S_n ga ega bo'lsa, molekula simmetriya o'qi atrofida buralganda mazkur tekislikda aks etishida μ o'zining mutloq qiymatini va fazoviy yo'nalishini o'zgartirmasligi kerak. Agarda μ tekislikda (δ) bo'lib, C_n o'qi bo'ylab yo'nalgan bo'lsa, oynali burama o'q S_n atrofida aylanganda simmetriya markazi i dagi aks tasviri nolga teng bo'lsa, uning qiymati o'zgarishi mumkin.

Dipol momenti va molekula izomeriyasi

Izomeriya turiga bog'liq bo'lmagan holda izomer molekullar muvozanatli geometrik konfiguratsiya hamda geometrik konfiguratsiya simmetriyasi bilan farqlanadi.

Ayrim izomerlar shunday simmetriyaga ega bo'ladiki, ularning xususiy momenti nolga teng bo'ladi. Boshqalarda esa (izomerlarda) shunday simmetriya bo'lishi mumkin, ularning xususiy momenti nol dan farq qiladi. Shunday qilib, molekullar dipol momentlarini o'lchash *cis*- va *trans*- izomerlarni identifikatsiyalash uchun xizmat qilishi mumkin.

Masalalar

1. Ammiak molekulasida dipol momenti masofasi (uzunligi) $3 \cdot 10^{-9}$ sm. ga teng bo'lsa, molekulaning dipol momentini hisoblang.
2. Suv molekulasining dipol momenti 1,84 D ga teng bo'lsa, qutbli suv molekulasida dipol uzunligini toping.
3. Qutbli C-Cl molekulasining dipol momenti $\mu = 2,05$ D ga teng bo'lsa, dipol vektori uzunligini aniqlang hamda qutbli guruh yo'nalishini ko'rsating.
4. Chiziqli bo'lmagan FNO molekulasining dipol momentini aniqlang.
5. BF_3 piramidal molekulaning dipol momentini aniqlang.
6. Quyidagi moddalar molekularining dipol momentini hisoblang: CHCl_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, CH_3COCH_3 , $\text{C}_2\text{H}_5\text{OC}_2\text{H}_5$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{Br}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}$, $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$.

6-amaliy mashg'ulot Molyar refraksiyani hisoblash

Mashg'ulotning maqsadi: moddaning molyar refraksiya, sindirish ko'rsatkichi qiymatlarini hisoblash.

Mashg'ulotning rejasi:

1. Qutblanish turlari.
2. Molyar refraksiyani hisoblash.

Nazariy qism

Qutbli molekullarning qutblanuvchanligi oriyentatsion, atom va elektron qutblanishlar yig'indisidan tashkil topgan, ya'ni:

$$\Pi = \Pi_{or} + \Pi_{at} + \Pi_{el}.$$

Atom va elektron qutblanishlar yig'indisi deformatsion Π_d qutblanishini ifodalaydi:

$$\Pi = \Pi_{or} + \Pi_d$$

Atom va elektron qutblanish temperaturaga bog'liq emas. Oriyentatsion qutblanish esa temperatura oshishi bilan kamayadi.

Qutbsiz molekula elektr maydonida qutblanadi, ya'ni molekula zaryadlarining bir-biriga nisbatan siljishi kuzatiladi. Bu hodisaga **qutblanish** deyiladi. Zarrachada (molekulada) inditsirlangan (yo'naltirilgan) dipol momenti μ_i hosil bo'ladi:

$$\mu_{ind} = q \cdot r.$$

Kuchsiz maydonlar uchun inditsirlangan dipol momenti maydon kuchlanganligiga E proporsional bo'ladi, ya'ni:

$$\mu_{ind} = a \cdot E.$$

Proporsionallik koeffitsiyentiga qutblanuvchanlik (a) deyiladi. Molekullarning umumiy qutblanuvchanligi:

$$a = a_{el} + a_{at} + a_{or}.$$

Dielektriklarning qutblanishi dielektrik doimiylik bilan bog'langan, ya'ni:

$$P = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} \cdot \frac{M}{\rho},$$

bunda P -to'liq molyar qutblanish, ϵ -nisbiy dielektrik doimiylik, ρ -zichlik, M -molekulyar massa.

Zarracha deformatsiyasi bilan bog'liq qutblanuvchanlikka **deformatsion qutblanuvchanlik** deyiladi. U elektron buluti va yadroning oldingi holatiga nisbatan siljishini hamda atom guruhlarining siljishini ifodalaydi:

$$a_d = a_{el} + a_{at}.$$

Mazkur tenglama siyraklashtirilgan gazlar hamda kuchsiz qutbli yoki qutbsiz suyuqliklar uchun qo'llaniladi. Yuqori dielektrik ko'rsatkichga ega suyuqliklar uchun esa qo'llanilmaydi.

Elektron qutblanuvchanlik *molyar refraksiya* deb ham aytiladi:

$$R = \frac{n^2 - 1}{n^2 + 1} \cdot \frac{M}{\rho} = \frac{4}{3} \pi N_A \cdot a_{et}$$

Qutblanuvchanlik tashqi maydon chastotasiga ham bog'liq bo'ladi. Agar ushbu tebranish chastotasi $\sim 10^{10}$ Gs (to'lqin uzunligi $\lambda \sim 1$ sm) bo'lsa, qutbli molekular oriyentatsiyalanishga ulgurmaydi, P_r yo'qoladi, chastota 10^{13} Gs ($\lambda \sim 10^{-4}$ sm) yoki yuqori bo'lsa, P_{at} yo'qolib, P_e qoladi.

Molekular strukturasi aniqlashda ularning dipol momentlarini o'lchash juda katta amaliy ahamiyat kasb etadi. Dipol momenti qiymatlariga asosan eritmalar xossalari, eruvchanlik, ideal gazlar va eritmalar qonunlaridan chetlanishlar hamda reaksiya tezligiga erituvchilar ta'sirini izohlash mumkin. Shu bilan birga molekulada elektr zaryadlarining taqsimlanishi va kimyoviy bog'larning kovalentligini baholash mumkin.

Masalalar

1. $T=293$ K da $a\%$ li A modda eritmasining B erituvchidagi zichligi d , sindirish ko'rsatkichi n ga teng. Agar 293 K da B erituvchining zichligi d_0 , sindirish ko'rsatkichi n_0 ga teng bo'lsa, A moddaning molyar refraksiyasini jadvallarda keltirilgan ma'lumotlardan foydalanib hisoblang. Masalalarni yechish uchun ma'lumotlarni jadvaldan oling.

Variant №	$a, \%$	A	B	$d \cdot 10^{-3}$	n_0
1	20	HCl	CH ₃ OH	0,915	1,374
2	31	HCl	H ₂ O	1,157	1,407
3	30	HCl	H ₂ O	1,220	1,370
4	40	H ₂ SO ₄	H ₂ O	1,293	1,367
5	17	HClO ₂	H ₂ O	1,129	1,362
6	35	LiBr	H ₂ O	1,174	1,414
7	24,5	LiCl	H ₂ O	1,187	1,377
8	12,5	NaCl	H ₂ O	1,116	1,352
9	9	Na ₂ SO ₄	CH ₃ COOC ₂ H ₅	1,075	1,345
10	50	K ₂ SO ₄	H ₂ O	1,487	1,476
11	44	SnCl ₄	C ₃ H ₇ OH	1,121	1,400
12	90	CO(NH ₂) ₂	H ₂ O	1,866	1,503
13	22	C ₂ H ₄ Br ₂	H ₂ O	1,128	1,365

14	29	CCl ₃ COOLi	C ₆ H ₆	1,038	1,353
15	50	CH ₃ COOH	C ₆ H ₆	0,947	1,434
16	50	CH ₃ COOH	H ₂ O	0,839	1,428
17	45	CH ₃ COCH ₃	H ₂ O	1,255	1,395
18	42	CCl ₃ COOH	H ₂ O	1,295	1,397
19	52	CCl ₃ COONa	<i>o</i> -C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	1,075	1,580
20	25	CSNC ₃ H ₅	N ₂ O	0,968	1,551

Masalani yechish uchun ma'lumotlarni quyidagi jadvaldan oling

B	$d_0 \cdot 10^{-3}$, kg/m ³	n_0	B	$d_0 \cdot 10^{-3}$, kg/m ³	n_0
H ₂ O	1,000	1,333	CSNC ₃ H ₅	1,019	0
CH ₃ OH	1,329	1,329	C ₅ H ₁₀ NH	0,863	1,461
C ₂ H ₅ OH	0,808	1,364	C ₆ H ₆	0,885	1,504
H ₃ COOC ₂ H ₅	0,903	1,375	C ₆ H ₅ CH ₃	0,867	1,497
CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	0,807	1,386	<i>o</i> -C ₆ H ₄ (CH ₃) ₂	0,881	1,505

2. Uglarod to'rt xloridning sindirish ko'rsatkichi $n_D^{20} = 1,4573$, 20°C da zichligi $d = 1,595$ g·sm⁻³ va molekulyar massasi 153,84 ga teng bo'lsa, CCl₄ uchun molyar refraksiyani hisoblang.
3. Suv bug'i va suyuq holatdagi suv molekulasi molyar refraksiyasini hisoblang hamda solishtirma qiyoslang. Suv bug'ining 20°C va 1 atm. bosimdagi sindirish ko'rsatkichi 1,000241 ga teng. Mazkur sharoitdagi suv bug'ining zichligi 0,749 g·l⁻¹.
4. Geksanning molyar refraksiyasi 29,908 sm³·mol⁻¹ ga teng bo'lsa, CH₂ uchun refraksiya qiymati 4,618 sm³·mol⁻¹ ga teng ekanligini e'tiborga olib, vodorod atomining atom refraksiyasini hisoblang.
5. $t=20^\circ\text{C}$ da trimetilkarbinolning (CH₃)₃COH atom refraksiyasidan sindirish n_D^{20} ko'rsatkichini hisoblang. Uning zichligi 0,7864 g·sm⁻³ ga, o'lgangan sindirish ko'rsatkichi qiymati $n_D^{20} = 1,3878$ ga teng.
6. Natriy chiziqlari (D) uchun $t=20^\circ\text{C}$ da suyuq xloroformning molyar refraksiyasi 21,25 sm³·mol⁻¹ ga teng bo'lsa, bug' holatdagi xloroformning sindirish ko'rsatkichini hisoblang. $t=20^\circ\text{C}$, $P=1$ atm

bosimda o'lgangan sindirish ko'rsatkichining qiymati 1,00137 ga teng.

7. Gaz holatidagi xlorning 273 K va $P=1$ atm. ($1,01 \cdot 10^5$ n/m²) bosimdagi o'lgangan sindirish ko'rsatkichi $n = 1,000773$ ga teng. Molyar refraksiyani aniqlang va ushbu qiymatni Van-der-Vaals tenglamasidagi b koeffitsiyent bilan solishtiring.

7-amaliy mashg'ulot Magnit momenti va molekulaning magnitlanishi

Mashg'ulotning maqsadi: Molekulaning magnit xossasi, magnitlanish va moddalar klassifikatsiyasi.

Mashg'ulotning rejasi:

1. Magnitlanish xossalari asosiy xarakteristikalarini.
2. Magnitlanish va moddalar klassifikatsiyasi.

Atomlar yadrolari va elektronlar aniq elektr zaryadiga ega bo'lganligi sababli muayyan magnit momentiga ham ega bo'lishi mumkin. Xususan, yadro uchun uning qiymati elektron qiymatiga nisbatan uch darajada past bo'ladi.

Molekula zaryadlangan zarrachalardan iborat sistema bo'lib, magnit momenti vektori bilan xarakterlanadi. Magnit momenti birinchi navbatda elektronlarning orbital va spin kvant sonlari bilan bog'liq.

Tashqi maydonning ta'sir kuchlari bo'lmaganda alohida molekulalar magnit momentlarining xaotik (tartibsiz) orientatsiyasi sababli jismning umumiy magnit momenti yig'indisi nolga teng bo'ladi. Tashqi maydonning ta'sir kuchlari natijasida molekulalar magnit momentlari bir yo'nalishli orientatsiyalanadi va buning oqibatida modda magnitlanadi hamda uning magnit momenti yig'indisi qiymati noldan farqlanadi.

Magnitlanadigan moddalarni ularning hajm birligidagi magnit momenti bilan ifodalash tabiiydir. Mazkur qiymat magnitlanish vektori deb nomlanadi va J bilan belgilanadi. Magnitlanish vektori maydon kuchlanishi H bilan bog'liq bo'lib, quyidagi nisbatda ifodalanadi:

$$J = X_M \cdot H,$$

bunda X_M - moddaning magnitlanishga moyilligini ifodalaydigan qiymat, o'lchamsiz kattalik; J va H bir o'lchamli kattaliklar.

Ko'p hollarda X_M ning hajmiy birligi o'rniga kilomolyar X_{KM} birlik (bir kilomol moddaga nisbatan olingan) kattaligi (oddiy kimyoviy moddalar uchun - kiloatom) qo'llaniladi. Mazkur kattaliklar o'rtasida quyidagi nisbiy bog'lanish mavjud:

$$X_{KM} = X_M \cdot X_{KM},$$

bunda X_{KM} - kilomol moddaning hajmi, m³/kmol.

Magnitlanishga moyillikning ishorasi va qiymatiga qarab barcha moddalar uch guruhga taqsimlanadi:

1. Diamagnetiklar - ular uchun X_M qiymati manfiy bo'lib, mutlaq darajasi kichik, ya'ni $X_K \sim -10^{-8} \div -10^{-7}$ m³/kmol;
2. Paramagnetiklar - ular uchun ham X_M qiymati katta bo'lmay, musbat ishorali, ya'ni $X_K \sim 10^{-7} \div 10^{-6}$ m³/kmol;
3. Ferromagnetiklar - ular uchun X_M qiymatining ishorasi musbat bo'lib, darajasining qiymati nisbatan katta, ya'ni $X_K \sim 10^{-3}$ m³/kmol. ga teng.

Dia- va paramagnetiklardan farqli ravishda ($X_M = \text{const}$) ferromagnetiklarning magnitlanishga moyilligi magnit maydoni kuchlanishi funksiyasi bo'lib hisoblanadi.

Shunday qilib, magnitlanish vektori J maydon kuchlanishi H bilan mos kelishi (para- va ferromagnetiklar uchun) yoki mos kelmasligi, ya'ni teskari tomonga (diamagnetiklar uchun) yo'nalgan bo'lishi mumkin. Moddaning magnit maydonidagi holatini izohlash uchun magnitlanish induksiyasi B deb nomlanadigan parametrdan foydalanish maqsadga muvofiq. Mazkur kattalik tokka magnit maydonining kuch ta'sirini xarakterlaydi va mos ravishda elektr maydoni kuchlanishining E analogi bo'lib hisoblanadi, ya'ni zaryadga elektr maydonining kuchli ta'sirini xarakterlaydi. Magnitlanish induksiyasi vakuumdagi magnit maydoni kuchlanishi bilan quyidagi nisbat orqali ifodalanadi:

$$H = \frac{B}{\mu_0},$$

bunda μ_0 - magnit doimiyligi bo'lib, uning qiymati $4\pi \cdot 10^{-7}$ Gn/m ga teng.

Moddada maydonni izohlash uchun quyidagi ifodadan foydalanish mumkin:

$$H = \frac{B}{\mu_0} - J.$$

Mazkur tenglamaga J qiymati oldingi ifodadan olib qo'yilsa, u holda:

$$H = \frac{B}{\mu_0} - X_M H$$

bundan

$$H = \frac{B}{\mu_0(1 + X_M)}$$

hosil bo'ladi.

Ushbu $\mu_0(1 + X_M)$ o'lchovsiz kattalikka moddaning nisbiy qabul qiluvchanligi deyiladi.

Ta'kidlash kerakki, Gauss sistemasida $\mu = 1 + 4\pi X_M$ ga teng. Demak, atomlarning magnit momenti μ_m noldan farq qilsa, modda paramagnitdir.

Paramagnit moddalarning magnit X_M qabul qiluvchanligi

$$\mu_m B_y \leq KT$$

holatda Lanjeven nazariyasiga asosan quyidagicha yoziladi:

$$X_M = \mu_0 n \frac{\mu_m^2}{3KT},$$

bunda n - zarrachalar konsentratsiyasi; K - Bolsman doimiysi.

$$X_M = \mu_0 \frac{\rho N_A \mu_m^2}{m3KT}$$

ifodani yozish mumkin.

P.Kyuri aniqlagan qonunga muvofiq moddaning paramagnit qabul qiluvchanligi:

$$X_M = \frac{C}{T},$$

S - Kyuri doimiysi, u modda tabiatiga bog'liq.

Yuqoridagi tenglamalar ifodalaridan foydalanib Kyuri domiyiligi ifodasini yozish mumkin:

$$C = \mu_0 \frac{\rho N_A \mu_m^2}{m3K}.$$

Tenglamadan ko'rinib turibdiki, paramagnitlik effektiga elektronlarning o'z o'qi airofidagi harakat miqdorini ifodalovchi spin magnit momenti μ_s katta ulush qo'shadi. μ_s qiymat darajasi spin kvant soniga S bog'liq:

$$\mu_s = 2\mu_B \sqrt{g(s+1)},$$

bunda μ_B - Bor magnetoni bo'lib, uning qiymati

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$$

bilan ifodalanadi.

n - juftlashmagan elektronlari ($S=1/2$ spinli) mavjud bo'lgan atom yoki ion uchun spin magnit momenti 2 ga teng bo'ladi.

Shuni ta'kidlash lozimki, magnit momenti juftlashmagan elektronlar soniga proporsional ravishda o'zgarmaydi.

Past temperaturalarda, ya'ni Kyuri temperaturasida paramagnit qattiq holatdagi moddada fazoviy o'tish sodir bo'lib, u ferromagnit holatga o'tadi (katta hududlarda spinlar parallel ravishda oriyentlanadi) yoki antiferromagnit holatga (Neel temperaturasida spinlar takrorlanishi natijasida) o'tadi.

8-amaliy mashg'ulot

Molekulalarning energetik holati

Moddalar energiyasini hisoblash usullari

Mashg'ulotning maqsadi: Molekulalarning energetik holatini aniqlash, energiya turlari, bog' energiyasi yoki ionizatsiya energiyasiga muvofiq kimyoviy reaksiyalar issiqligini hisoblash.

Mashg'ulotning rejasi

1. Kvant mexanikasining klassik nazariyasi nuqtai nazaridan molekulalarning energetik holatini aniqlash.
2. Energiya turlari va hosil bo'lish issiqligi, bog' energiyasiga asosan energiya turlari aniqlash va ularni hisoblash usullari.

Masalalar

1. KCl ning kristall panjara konstantasi $3,16 \cdot 10^{-10}$ m ga teng. Sr^{2+} ning samarali radiusi $r_{Cl} = 1,811 \cdot 10^{-10}$ m ga teng bo'lsa, K^+ ning samarali radiusini hisoblang.
2. Suv molekulasida vodorod-vodorod va kislorod - kislorod bog'larning energiyasi mos ravishda 435,9 va 498,7 kJ/mol bo'lsa, kislorod-vodorod bog' energiyasini aniqlang (2 mol vodorod yonganda 483,68 kJ issiqlik ajralib chiqadi).
3. C-C, C≡C, Cl-Cl, C-Cl bog'lar energiyalari mos ravishda -347,3; -823,1; -242,3; va -345,2 kJ/mol bo'lsa, quyidagi reaksiya uchun $C_2H_2 + 2Cl-Cl \rightarrow HCCl_2-CCl_2H$ entalpiya o'zgarishini hisoblang.
4. HCl molekulasining standart hosil bo'lish energiyasi 92,3 kJ/mol hamda H-H va Cl-Cl bog'lar energiyasi mos ravishda -435,9 va -242,3 kJ/molga teng bo'lsa, H-Cl molekulasida uchun s-p kovalent bog' energiyasini hisoblang.
5. Azot-azot, kislorod-kislorod va azot-kislorod bog'larda karrali bog'lar energiyasi mos ravishda: -945,6; -498,7; -631,0 kJ/mol bo'lsa, azot (II) oksidi hosil bo'lish jarayoni uchun entalpiya o'zgarishini hisoblang.
6. Gaz holatdagi uglerod va vodoroddan C_2H_6 standart hosil bo'lish issiqligi: -2815,0 kJ/mol, C-H bog'i (8 bog') energiyasi esa -411,3 kJ/mol bo'lsa, C-C bog' energiyasini hisoblang.
7. Agarda H-H, C-H va C=C bog' energiyalari mos ravishda -435,9; -587,8 kJ/mol bo'lsa, etilenning oddiy moddalardan standart hosil bo'lish issiqligini aniqlang (Grafitni bug'lanish issiqligi +715,88 kJ/molga teng).
8. H_2Te va H_2Te birikmalar uchun standart entalpiya hosil bo'lish issiqliklari mos ravishda 85,77 va 154,39 kJ/molga teng bo'lsa, H-Te va H-Te o'rtacha bog' energiyalarini hisoblang. H_2 ning dissotsiatsiya energiyasi 435,9 kJ/molga teng.
9. HI molekulasining dissotsiatsiya energiyasi 298,4 kJ/molga teng. Ultrabinafsha nurlari ($\lambda = 2 \cdot 10^{-7}$ m) bilan HI molekulasini elementlarga parchalash mumkinmi? $2 \cdot 10^{-3}$ g HI ni parchalash uchun qancha energiya sarflash kerakligini aniqlang.

10. Agar N_2 va H_2 molekularining dissotsiatsiyalanish energiyalari mos ravishda 945,6 va 435,9 kJ/molga teng bo'lsa, $1/2N_2 + 3/2H_2 = NH_3$ 46,19 kJ/mol reaksiya natijasida hosil bo'lgan ammiak molekulasidagi N-H bog'ning o'rtacha energiyasini aniqlang.
11. Agar C-H bog' energiyasi -402,9 kJ/mol ga teng bo'lsa, oddiy moddalardan asetilenning standart hosil bo'lish issiqligi 226,75 kJ/mol bo'lsa, asetilen molekulasidagi C≡S (σ va 2π) karrali bog' energiyalarini hisoblang. Grafritning bug'lanish issiqligi +715,88 kJ/molga teng bo'lsa, H_2 ning dissotsiatsiya energiyasi 435,9 kJ/molga teng.
12. Berilgan $6C_{(g)} + 6H_{(g)} = C_6H_6_{(g)}$ reaksiyaning entalpiyasini
a) moddalarning hosil bo'lish entalpiyalariga asosan,
b) bog'lar energiyalariga asosan (C_6H_6 molekulasidagi qo'sh bog'lar belgilanganligiga muvofiq).

9-amaliy mashg'ulot Ikki va ko'p atomli molekularning elektron-tebranma-aylanma holatlari

Molekulalar elektron tuzilishi nazariyasini aniq va qisqa izohlash oson emas. Shu bois asosiy tushuncha va qoidalar, ko'rsatkichlar bilan chegaralanamiz. Hund qoidasiga muvofiq ikki atomli molekular elektron termlari kuchli elektr maydonida molekula birikuvchi yadrolarning chiziq bo'ylab yo'nalishida hosil bo'ladigan "birikkan" atomlar termlariga xosdir. Birikkan atom uchun Ressel-Saunders bog'ida kuchli elektr maydoni elektronlarning natijaviy orbital momentiga, ya'ni orbital kvant soni l bilan ifodalanadigan kattalikka olib keladi. Mazkur holat maydonga nisbatan shunday oriyentrlanadiki, uning energiyasi m_l kvant soni bilan aniqlanadi va $l, l-1, l-2, \dots, -l$. Bu holatdan kelib chiqib, molekulyar aylanishli ta'sirni e'tiborga olmaslik, xuddi Shtark effektidagidek, teng va qarama-qarshi ishorali qiymatga ega bo'lgan m_l termlari bir xil energiyaga ega bo'ladi. Shu sababli m_l faqat l qiymatlarini

qabul qiladi, ya'ni $-1, -2, \dots, 0$. Xususan, $m_l > 0$ termlar bir xil energiyali ikki bir-biriga mos keluvchi termlardan iboratdir.

Molekula uchun m_l kvant soni A kvant soni bilan almashtiriladi. A molekulyar holat tipini aniqlashda eng muhim hisoblanadi va atom azimuntal kvant soniga l mos keladi, lekin unga ekvivalent emas. Xuddi atom holat uchun $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ yoki s, p, d, f ifodalanganidek, molekulyar termlar ham $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ qiymatlari mos ravishda $\sigma, \pi, \delta, \phi$ ifodalar bilan belgilanadi. Birikkan atomning natijaviy sonini S maydon ta'sirida $m_s = S, S-1, S-2, \dots, -S$ komponentalarga taqsimlanadi.

Molekula uchun mazkur m_s kvant soni σ kvant soni bilan almashtiriladi. Multipletlik xuddi atomlardagidek $2S+1$ ga teng. U energetik darajalar soni bo'lib, unda spinga muvofiq termlar taqsimlanishini ifodalaydi.

Atom uchun Ressel-Saunders bog'iga o'xshab, molekulada yadro o'qiga nisbatan natijaviy elektron momenti bo'lgan λ hamda spin komponentasini ifodalovchi S kvant soni o'zaro kombinatsiyalanadi va natijaviy kvant sonini hosil qiladi. Mazkur son ω bilan belgilanib (atomdagi L singari) $\omega = \lambda + \sigma$ qiymatlarni qabul qiladi. 2P_3 belgining yuqori chap tomonida multipletlikni ($2S+1$) ifodalaydigan λ qiymati yozilsa, pastki o'ng tomonida σ qiymati yoziladi. Masalan, ifodasi multipletlik 3 ekanligini (trilet $S=1$) hamda $\lambda = 1$ va $\omega = 2$ va mos ravishda $\sigma = +1$.

Atom termlar uchun to'liq multipletlik faqat $L \geq S$ shartida bajariladi. $\lambda = 0$ (ya'ni σ holat) bo'lgan molekular uchun term ham birlamchi bo'ladi (aylanish e'tiborga olinmaydi). Aslida molekula aylanish ta'sirida kam taqsimlanish holati sodir bo'ladi. Boshqa molekulyar termlar uchun multipletlik to'liq bajariladi.

Tripletni namoyon qiluvchi holat juda kam uchraydi, hattoki $S > \lambda$ bo'lganda ham to'liq multipletlik aniqlanadi.

Atomning asosiy holat termini aniqlash tartibi.

1. Atomning to'lmagan elektron qobiqlari konfiguratsiyasi yoziladi.
2. Hund qoidalariga muvofiq mos kvant yacheykalarda elektronlar taqsimoti S va L ning maksimal qiymatlariga asosan yoziladi, ya'ni kvant yacheykasida m qiymatli maksimal elektronlar soni yoziladi.

3. Juftlashmagan elektronlarning m kvant sonlari yig'indisi M_l qiymatini hosil qiladi.
4. Juftlashmagan elektronlar soniga qarab termning multipletligi aniqlanadi.
5. Hundning uchinchi qoidasiga asosan J kvant soni aniqlanadi.

Masalalar

1. Mg, P, S va Cl atomlari asosiy holatlarining termlarini aniqlang.
2. Kislorod va xrom atomlari asosiy holatlarining termlarini aniqlang.

10-amaliy mashg'ulot

Ikki va ko'p atomli molekularning elektron-tebranma-aylanma spektrlari

Molekulyar spektrlar atom spektrlarga nisbatan ko'p qirrali va murakkabdir. Bunga sabab molekularlarda qo'shimcha erkinlik darajalari mavjud bo'lib, ular elektronlarning yadro atrofidagi harakatlari hamda yadrolarning o'zlaridagi muvozanat holatga nisbatan mavjud tebranishlar va molekularning bir butun sistema sifatidagi aylanma harakatlardir. Yadrolar molekulada chiziqli, tekisliklida (ikki o'lchamli) yoki uch o'lchamli fazada konfiguratsiyalar hosil qiladi.

N ta atomdan tashkil topgan tekis yoki uch o'lchamli molekula $3N-6$ tebranma va uchta aylanma erkinlik darajasi, chiziqlisi esa $3N-5$ tebranma va ikkita aylanma erkinlik darajasiga ega. Shunday qilib, molekula elektron energiyadan tashqari tebranma va aylanma ichki energiyalarga hamda yangi energetik darajalarga ega.

Molekulalarda elektronlarning ko'p sondagi hayajonlangan energetik darajalari mavjud bo'lib, ular o'rtasidagi elektron o'tishlar tebranma va aylanma energetik o'zgarishlar bilan sodir bo'ladi. Natijada molekularning elektron spektrlari muayyan darajada murakkablashadi, Ya'ni:

- 1) Elektron o'tishlar aksariyat holatda bir-birini qoplaydi;
- 2) Tebranma o'tishlar uchun tanlash qoidasi rioya qilinmaydi;

3) Ruxsat etilgan aylanma $\Delta J = 0, \pm 1$ o'tishlar uchun tanlash qoidasi saqlanib qoladi.

Elektronlar spektrlari tebranma chiziqlar seriyalaridan iborat bo'lib, har bir seriyada o'nlab yoki yuzlab aylanma chiziqlardan tashkil topadi. Molekulyar spektrlarda, qoidaga ko'ra infraqizil, ko'rish va ultrabinafsha sohalarida bir necha elektron o'tishlar kuzatiladi. Masalan, yod molekulasi spektrida 30 ga yaqin elektron o'tishlar mavjud.

Lazer nurlarining kashf qilinishi molekullarning elektron spektrlarini o'rganishni yangi darajaga olib chiqdi. Keng sohada qayta qo'llanilishi imkoniyatlari yuqori bo'lgan sezgir intensiv lazer nurlari spektroskopiyasi molekulyar konstantalar va sirt potentsiallarini aniq o'rganishda samarali usul sifatida o'zini namoyon qildi.

Aylanma molekulyar spektrlar

Molekula aylanma harakat energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E_{ayl} = \frac{\hbar^2}{(8\pi^2 J) \cdot j(j+1)} \quad (1)$$

bunda J - inersiya momenti, $\text{kg} \cdot \text{m}^2$; \hbar - Plank doimiysi; j - aylanma kvant soni - 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 va h.z.; E_{ayl} - aylanma harakat energiyasi, j.

Aylanma harakatda molekula parametrlari o'zgarmasdan qoladi deb qabul qilinsa, ya'ni $J = \text{const}$ bo'lsa, u holda (1) tenglama quyidagi tenglamada quyidagi ko'rinishda ifodalanadi:

$$E_{ayl} = B j(j+1), \quad (2)$$

bunda

$$B = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 J}$$

Agarda sistema j^I aylanma kvant sonli holatdan j^{II} aylanma kvant sonli holatga o'tsa, u holda

$$\Delta E_{ayl} = E_{ayl}^{II} - E_{ayl}^I = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 J} [j^{II}(j^{II}+1) - j^I(j^I+1)] \quad (3)$$

Tanlash qoidasiga muvofiq $\Delta j = \pm 1$ bo'lishi mumkin, u holda yutilish spektrida $\Delta j = \pm 1; \dots j^{II} - j^I = 1$ bo'ladi va

$$\Delta E_{ayl} = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 J} [(j^I+1)(j^I+2) - j^I(j^I+1)] = \frac{\hbar^2}{4\pi^2 J} (j^I+1) \quad (4)$$

Aylanma harakat tezligini oshirishga sarflanadigan energiya ΔE_{ayl} , moddaga tushayotgan yorug'lik oqimi kvantlaridan yutiladi va natijada moddadan o'tgan yorug'lik spektrida bir qator yutilish maksimumiga mos keluvchi yorug'lik nuri kvanti energiyasini molekula aylanma harakat energiyasi o'zgarishiga tenglashtirish mumkin:

$$\Delta E_{ayl} = \hbar C \omega \quad (5)$$

bunda

$$\omega = \frac{\Delta E_{ayl}}{\hbar C} = \frac{\hbar}{4\pi^2 C J} (j^I+1) \quad (6)$$

$$\omega = B^I (j^I+1) \quad (7)$$

bunda $B^I = \frac{\hbar}{4\pi^2 C J}$ - aylanma doimiylik, M^{-1} .

Inersiya momenti J - massalarning (m) aylanma o'qlar masofasi (r) ko'paytmasi kvadratining yig'indisiga teng, ya'ni:

$$J = \sum_i^l m_i r_i^2$$

Nosimmetrik ikki atomli molekula uchun:

$$J = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2$$

Erkin aylanma harakatlanishda:

$$m_1 r_1^2 = m_2 r_2^2$$

bo'lib, $r_1 + r_2 = r_0$ orqali ifodalansa, u holda:

$$r_1 = \frac{r_0 m_2}{m_1 + m_2}; \quad r_2 = \frac{r_0 m_1}{m_1 + m_2} \quad (9)$$

$$J = \mu r_0^2$$

r_0 - bog' uzunligi yoki atomlar massasi markazlari orasidagi masofa, μ - keltirilgan massa bo'lib, uni atom og'irliklar orqali ifodalash mumkin:

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} = \frac{a_1 a_2}{a_1 + a_2} \cdot \frac{\mu_0}{16} \quad (11)$$

a_1 va a_2 - atom og'irliklar; μ_0 - kislorod atomi massasi, kg ; $m_0/16 = 1,66 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$.

(7) va (10) tenglamalardan:

$$J = \frac{\hbar}{4\pi^2 B^I C} = \mu \cdot r_0^2 \quad r_0 = \sqrt{\frac{J}{\mu}} = \sqrt{\frac{\hbar}{4\pi^2 B^I C \mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{\hbar}{B^I C \mu}} \quad (12)$$

B' qiymatini qo'shni yutilish maksimumlari to'liq sonlari farqidan (aniqlash) mumkin:

$$\omega_1 = B'(j+1); \quad \omega_2 = B' \cdot j \quad \Delta\omega = \omega_1 - \omega_2 = B' \quad (13)$$

Molekula doimiy dipol momentiga ega bo'lsa, aylanma harakat qo'zg'alishi tufayli yorug'lik nurining yutilishi kuzatilishi mumkin.

Tebranma molekulyar spektrlar

Ikki atomli molekularning kichik amplitudadagi tebranishlarini taxminan quyidagi tenglama orqali ifodalash mumkin:

$$F = -f(r - r_0) \quad (14)$$

bunda F - tortishish kuchi, H ; f - proporsionallik koeffitsiyenti yoki kuch doimiyliigi, N/M ; r_0 - atomlar orasidagi masofa, m .

(14) tenglama katta amplitudali tebranishlarni qoniqarli ifodalay olmaydi. Shu bois bu holatlar uchun Morze tenglamasini qo'llash maqsadga muvofiqdir:

$$U_r = D\{1 - e^{-\alpha(r-r_0)}\}^2 \quad (15)$$

bunda U_r - tebranma harakatning potensial energiyasi, D ; D - α -doimiy kattaliklar;

$$Da^2 = 2\pi^2\mu \cdot \omega_0^2 e^2, \quad j \cdot m^{-2}$$

$$a^2 = \frac{8\pi^2\mu\omega_0 x c}{h} \cdot M^{-2} \quad (16)$$

$$\omega_0 = \frac{v_0}{c} M^{-1} \quad (17)$$

bunda μ - keltirilgan massa, kg ; ω_0 - to'liq soni, ya'ni atomlar tebranish chastotasining v_0 yorug'lik nuri tezligiga nisbati; h - Plank doimiysi, x - antigarmonik koeffitsiyent.

Kvant mexanikasi qonunlariga asosan tebranma harakat to'liq energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalash mumkin:

$$E_{teb} = \left(v + \frac{1}{2}\right) h v_0 - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 h v_0 X \quad (18)$$

bunda E_{teb} - molekuladagi atomlar yoki atomlar guruhining tebranma harakat energiyasi, D ; v - tebranma kvant soni, noldan boshlab butun sonlarni qabul qiladi; v_0 - molekuladagi atomlar yoki atomlar guruhi tebranishlar chastotasi, sek^{-1} , G ; X - antigarmonik koeffitsiyenti.

Molekuladagi atomlar xususiy tebranish chastotasini v_0 to'liq soniga v_0/s almashtirib tenglamani quyidagi ko'rinishda ifodalash mumkin:

$$E_{teb} = \left(v + \frac{1}{2}\right) h \omega_0 - \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 h \omega_0 X \quad (19)$$

Yorug'lik nuri yutilishi natijasida molekuladagi atomlarning tebranma harakati (v_0) energiyasi ma'lum qiymati oshadi. Mazkur qiymat ruxsat berilgan kvant darajalari farqi bilan aniqlanadi:

$$\Delta E_{teb} = E_2 - E_1 \quad (20)$$

Aylanma harakat energiyasi o'zgaradi deb qabul qilingan holatda, ΔE_{teb} energiyaning o'zgarishini molekula tomonidan yutilgan yorug'lik energiyasiga tenglashtirish mumkin. Yorug'lik nurining katta kvant qiymatli energiyasi yutilishi hisobida tebranish amplitudasi keskin oshishi molekulaning dissotsiatsiyalanishiga olib keladi. Bu holat spektrda o'z aksini namoyon etadi, ya'ni diskret ko'rinishga ega bo'lgan alohida yutilish (polosalari) chiziqlari umumiy yutilish spektrlariga aylanadi. (Har bir tebranma darajaga muayyan aylanma darajalar spektrlari mos keladi). Tebranma harakat tenglamasini (18) differensiallab, dE/dV hosilani nolga tenglashtirish asosida tebranma kvant soni maksimal qiymatini aniqlash mumkin:

$$\frac{dE}{dv} = h v_0 - 2 \left(v + \frac{1}{2}\right) h v_0 X \quad (21)$$

$$v_{max} = \frac{1 - X}{2X}$$

Tebranma harakat energiyasi tenglamasida mumkin bo'lgan maksimal tebranma kvant sonini V o'rniga qo'yib, tebranma harakat energiyasining maksimal qiymatini olishimiz mumkin:

$$\varepsilon_{max} = \frac{h c \omega_0}{4X} \quad (22)$$

v_{max} kichik bo'lgan tebranma kvant soni qiymatini qo'yib, har qanday tebranma kvant darajasiga mos keluvchi tebranma harakat energiyasini $\omega_1 = \omega_0(1 - 2X)$ topish mumkin. Energiyalar farqi bu yutilgan yorug'lik kvanti energiyasidir. Antigarmonik koeffitsiyent va xususiy tebranish chastotasi (to'liq soni) eksperimental usulda asosiy yutilish spektriga asosan aniqlanadi.

Agarda, asosiy yutilish spektri uchun bo'lsa, birinchi holat (oberton) uchun

$$\omega_2 = 2\omega_0(1 - 3x). \quad (23)$$

ikkinchi holat (oberton) uchun esa

$$\omega_3 = 3\omega_0(1 - 4x) \text{ bo'ladi,}$$

bunda, ω_1 -asosiy yutilish spektrining to'liq soni;

ω_2 - birinchi obertonning (holatning) to'liq soni;

ω_3 - ikkinchi obertonning (holatning) to'liq soni;

ω_0 -molekuladagi atomlarning tebranish chastotasi.

Masalalar

- Noma'lum bo'lgan HX moddaning aylanma yutilish spektrining uzoq IQ spektr diapazonida to'liq soni 13649,4; 15355,6 va 17061,8 m^{-1} bo'lgan yutilish spektr chiziqlari kuzatildi. Yadrolar orasidagi muvozanatdagi masofa $r_e = 1,414 \cdot 10^{-10}$ m. Noma'lum bo'lgan X atom massasini aniqlang.
- HCl spektrining uzoq IQ diapazonida yutilish nurlarining to'liq soni quyidagi bo'lgan natijalar kuzatildi:

No	1	2	3	4	5	6	7
ν, m^{-1}	8538,4	10673,0	12807,6	14942,2	17076,8	19211,4	21346,6

Inersiya momentining o'rtacha qiymatini hamda yadrolararo masofani aniqlang.

- $^{19}\text{F} \ ^{79}\text{Br}$ molekulasi aylanma yutilish spektri to'liq chizig'i sonini hisoblang. (Molekulaning $j=1$ darajadan aylanma kvant darajasi $j=2$ ga o'tishi mos kelishi hamda muvozanatdagi yadrolararo masofa $r_e = 1,7555 \cdot 10^{-10}$ m ga teng).
- Aylanma kvant darajasi $j=1$ bo'lgan hamda muvozanatdagi yadrolararo masofa $r_e = 1,7555 \cdot 10^{-10}$ m ga teng holat uchun $^{19}\text{F} \ ^{79}\text{Br}$ molekulasi aylanma harakat energiyasini aniqlang.
- Molekularining aylanma kvant darajasi $j = 6$ dan $j = 7$ ga o'tishiga xos bo'lgan holatlar uchun $^1\text{H}^{35}\text{Cl}$ va $^1\text{H}^{37}\text{Cl}$ molekulalarining aylanma spektrlaridagi yutilish chiziqlari (spektrlari) to'liq soni

qancha qiymatga farq qiladi? Ikki molekula uchun muvozanatdagi yadrolararo masofa mos ravishda $r_e = 1,2746 \cdot 10^{-10}$ m ga teng.

6. $^1\text{H}^{127}\text{I}$ [M] molekulasini uchun muvozanatdagi yadrolararo masofa $r_e = 1,609 \cdot 10^{-10}$ m ga teng. Molekulaning inersiya momentini hisoblang.

11-amaliy mashg'ulot Molekulararo ta'sir

Mashg'ulotning maqsadi: Molekulararo o'zaro ta'sir turlarini ajrata bilish, rentgenogrammalarga asosan hisoblashlarga muvofiq kristall panjaralar tipini aniqlash.

Mashg'ulot rejasi.

- Molekulararo o'zaro ta'sir turlari.
- Masalalar yechish.

Nazariy qism

Molekulararo o'zaro ta'sir - bu yangi kimyoviy bog'lar hosil bo'lishiga yoki parchalanishiga olib kelmaydigan molekulalar o'rtasidagi o'zaro elektrik ta'sirlaridan iborat.

Van-der-Vaals kuchlari molekulalararo barcha tortishish va itarish kuchlarini qamrab olgan. Mazkur ta'sir kuchlar ideal gazni real gazdan farqini aniqlaydi, suyuqliklarning (mavjudligini) hamda molekulyar kristallarning mavjudligini izohlaydi. Moddalarning strukturaviy va spektral hamda boshqa xossalari mazkur kuchlar tabiatiga bog'liq.

Van-der-Vaals ta'sir kuchlarining tabiatini, asosini bir molekula yadrosi va elektronlarining ikkinchi molekula yadrosi va elektronlari bilan o'zaro kulon ta'sir kuchlari tashkil etadi. Muayyan masofada molekulalararo o'zaro tortishish va itarish kuchlari bir-birini barqarorlashtirishadi, natijada barqaror sistema vujudga keladi.

Van-der-Vaals ta'sir kuchlari kimyoviy bog'larga nisbatan ancha beqaror kuchsizdir. Masalan, xlor molekulasi (Cl_2) bir-biriga biriga bog'lovchi kuchlar ($\text{Cl}-\text{Cl}$) xlor molekulalarini (Cl_2) bir-biriga o'zaro tortishish kuchlaridan o'n baravar ortiqdir. Lekin, xlor

molekulalari o'rtasidagi mavjud bo'lgan kuchsiz tortishuv ta'sir kuchlarsiz suyuq va qattiq holatdagi xlorini olishning imkoniyati bo'lmaydi.

Van-der-Vaals ta'sir kuchlari uch turga bo'linadi: oriyentatsion, induksion, dispersion.

Oriyentatsion o'zaro ta'sir. Musbat va manfiy zaryadlar massa markazi mos kelmaydigan qutbli molekulalar, masalan HCl, H₂O, NH₃ bir-biriga nisbatan oriyentirlanadi, ya'ni qarama-qarshi zaryadlar bilan moslashadi. Natijada, zaryadlar o'rtasida kulon tortishish kuchlari vujudga keladi.



Ikki qutbli molekula (dipol) o'rtasidagi o'zaro tortishish energiyasi, Keezom energiyasi, tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$E_q = \frac{-2\mu_1\mu_2}{4\pi\epsilon_0 r^3}$$

bunda μ_1 va μ_2 o'zaro ta'sir etayotgan qutbli molekularning diol momentlari, r -molekulalararo masofa.

Qutbli molekulalar o'rtasidagi o'zaro tortishuv ta'sir energiyasi molekulaning issiqlik energiyasidan yuqori bo'lsa, molekula barqarorlashadi. Bu holat suyuq va qattiq holatdagi moddalarda kuzatiladi. Dipol-dipol ta'sirlashuv qutbli, polyar suyuqliklarda namoyon bo'ladi (H₂O, HF va h.k.)

Induksion ta'sirlashuv. Qutblangan molekula bilan qutblanmagan molekula o'rtasida ham o'zaro ta'sir kuchlari iujudga keladi, ya'ni qutblangan molekula qutblanmagan molekulani induksiyalaydi (qutblantiradi). Doimiy dipol momentiga ega bo'lgan molekula qutbsiz molekulada zaryadlar taqsimotini vujudga keltiradi, indutsiraydi.



Qutblanmagan molekula qutblanadi va molekulalar o'rtasida o'zaro tortishish ta'sirlanishi sodir bo'ladi. Doimiy dipol va yo'naltirilgan dipol molekulalar o'rtasidagi ta'sir energiyasi, ya'ni Debay energiyasi quyidagi ifoda bilan aniqlanadi:

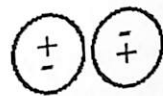
$$E_D = -\frac{2\mu_{yom}^2 \cdot a}{r^6}$$

bunda μ_{yom} - yo'naltirilgan dipol momenti; a - qutblanuvchanlik koeffitsiyenti.

Odatda doimiy va yo'naltirilgan dipollarning o'zaro tortishuvi juda kuchsiz bo'lib, bu holat aksariyat molekulalarning qutblanuvchanlik koeffitsiyenti qiymati kichikligi bilan izohlanadi. Mazkur ta'sir dipollar o'rtasidagi masofa juda kichik bo'lganda namoyon bo'ladi, masalan qutbli birikmalarning qutbsiz erituvchilardagi eritmalarida kuzatiladi.

Dispersion o'zaro ta'sirlar

Qutbsiz molekulalar o'rtasida ham o'zaro tortishuv ta'sir kuchlari vujudga kelishi mumkin. Bir molekula elektronlari ikkinchi molekula yadrosi bilan o'zaro ta'sirlanishi mumkin. Natijada qisqa vaqtli tortishuvlar sodir bo'ladi:



Mazkur tortishuv ta'sir kuchlarining energiyasi (London energiyasi) quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E_L = -2\mu_L^2 \theta^2 / r^6$$

London tortishuv o'zaro ta'sir kuchlari juda qisqa vaqtli qisqa ta'sirli bo'lib, qutbsiz molekulalar (atomlar) o'rtasida sodir bo'ladi. Ular juda kuchsiz bo'lib, molekulalararo o'zaro ta'sir kuchlarning eng kuchsizidir. Lekin ular universal bo'lib, har qanday molekulalar o'rtasida vujudga keladi.

Molekulalararo o'zaro itarish

Agar molekulalar doimo bir-biriga tortishishganda, ular o'zaro qo'shib, ketishardi. Vaholanki, juda kichik masofalarda ularning

elektronlari bir-birini itarishadi. Mazkur itarishning energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E = \frac{k}{r^n},$$

bunda k - itarish doimiyligi (konstantasi); n - butun sonlarni qabul qiluvchi kattalik.

Molekulalararo o'zaro itarish ta'sir kuchlari juda ham kichik masofalarda sodir bo'ladi.

Doimiy o'zgarmas temperaturada molekulalararo o'zaro ta'sir (tortishish va itarish) kuchlari Lennard-Djonson tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$E_{um} = \frac{-a}{r^6} + \frac{b}{r^{12}}.$$

Mazkur tenglama "6-12 potensial" nomi bilan harekterlanadi: $-a/r^6$ tortishish energiyasiga proporsional kattalik; b/r^{12} itarish energiyasiga proporsional.

GLOSSARIY

Absolyut harorat – Selsiy shkalasi bo'yicha - 273°C va absolyut holdan boshlab hisoblanagan harorat. Absolyut harorat $T = 273^\circ + t$, t – selsiy shkalasi bo'yicha harorat.

Absorbat – absorbsiya jarayonida absorbentga yutilayotgan modda.

Absorbat – adsorbent yuzasiga yutiluvchi modda.

Absorbent – absorbsiya jarayonida absorbatni yutivchi modda.

Absorbsiya – modda zarrachalarining (molekula, atom, ionlarning) ikkinchi modda hajmiga, ichiga yutilishi.

Avogramm – bir gramm – molekula yoki bir gramm – atomdagi zarrachalar (molekula, atom, ion) soni $6,02 \cdot 10^{23}$ ga teng bo'lib, bu songa Avogadro (N_A) soni deyiladi.

Adsorbent – adsorblovchi, ya'ni yutivchi modda.

Adsorbktiv – adsorbsiyalanuvchi, ya'ni yutiluvchi modda.

Adsorbsiya – modda zarrachalarining (molekula, atom, ion) ikkinchi modda yuzasiga (sirtiga) yutilishi.

Akva... – suvning litincha nomi.

Akvakompleks – ligand vazifasini suv bajaradigan kompleks birikmalar.

Aktivlanish – atom yoki molekulalarga energiya berib aktiv holda o'tkazish jarayoni.

Allotropiya – biror kimyoviy elementning bir necha oddiy moddalar hosil qilishi. Ular reaksiyada kirish qobiliyatlari hamda fizikaviy xossalari va strukturik tuzilishlari bilan farqlanadi.

Amorf – qattiq material yoki moddaning davriy kristallik struktura hosil qilmaslik tushuniladi. Shisha rezina va boshqa ko'pgina plastiklar amorf moddalar hisoblanadi.

Amorf moddalar – aniq suyuqlanish haroratiga ega bo'lmagan moddalar. Ularga silikat shisha, tabiiy va sun'iy smolalar, yelim va boshqalar misol bo'ladi.

Amorf holat – moddalarning qattiq holati bo'lib, unda izotropiya xossasi mavjud. Bu holatda moddiy nuqtalar (molekula, atom, ion) tartibsiz joylashgan, davriylik qonuni kuzatilmaydi.

Angestrem, A° - uzunlik o'lchov birligi. $1^\circ = 0,1\text{mm} = 10^{-8}$. Zarrachalar aro masofa yoki kimyoviy bog' uzunligi angestrem bilan o'lchanadi.

elektronlari bir-birini itarishadi. Mazkur itarishning energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E = \frac{k}{r^n},$$

bunda k - itarish doimiyligi (konstantasi); n - butun sonlarni qabul qiluvchi kattalik.

Molekulalararo o'zaro itarish ta'sir kuchlari juda ham kichik masofalarda sodir bo'ladi.

Doimiy o'zgarmas temperaturada molekulalararo o'zaro ta'sir (tortishish va itarish) kuchlari Lennard-Djonson tenglamasi bilan ifodalanadi:

$$E_{um} = \frac{-a}{r^6} + \frac{b}{r^{12}}.$$

Mazkur tenglama "6-12 potensial" nomi bilan harekterlanadi: $-a/r^6$ tortishish energiyasiga proporsional kattalik; b/r^{12} itarish energiyasiga proporsional.

GLOSSARIY

Absolyut harorat – Selsiy shkalasi bo'yicha - 273°C va absolyut holdan boshlab hisoblanagan harorat. Absolyut harorat $T = 273^\circ + t$, t – selsiy shkalasi bo'yicha harorat.

Absorbat – adsorbent yuzasiga yutiluvchi modda.

Absorbent – adsorbent yuzasiga yutiluvchi modda.

Absorbtsiya – adsorbent yuzasiga yutiluvchi modda.

Avogramm – bir gramm – molekula yoki bir gramm – atomdagi zarrachalar (molekula, atom, ion) soni $6,02 \cdot 10^{23}$ ga teng bo'lib, bu songa Avogadro (N_A) soni deyiladi.

Adsorbent – adsorblovchi, ya'ni yutivchi modda.

Adsorbktiv – adsorbtsiyalanuvchi, ya'ni yutiluvchi modda.

Adsorbtsiya – modda zarrachalarining (molekula, atom, ion) ikkinchi modda yuzasiga (sirtiga) yutilishi.

Akva... – suvning litincha nomi.

Akvakompleks – ligand vazifasini suv bajaradigan kompleks birikmalar.

Aktivlanish – atom yoki molekularga energiya berib aktiv holda o'tkazish jarayoni.

Allotropiya – biror kimyoviy elementning bir necha oddiy moddalar hosil qilishi. Ular reaksiyada kirish qobiliyatlari hamda fizikaviy xossalari va strukturik tuzilishlari bilan farqlanadi.

Amorf – qattiq material yoki moddaning davriy kristallik struktura hosil qilmaslik tushuniladi. Shisha rezina va boshqa ko'pgina plastiklar amorf moddalar hisoblanadi.

Amorf moddalar – aniq suyuqlanish haroratiga ega bo'lmagan moddalar. Ularga silikat shisha, tabiiy va sun'iy smolalar, yelim va boshqalar misol bo'ladi.

Amorf holat – moddalarning qattiq holati bo'lib, unda izotropiya xossasi mavjud. Bu holatda moddiy nuqtalar (molekula, atom, ion) tartibsiz joylashgan, davriylik qonuni kuzatilmaydi.

Angestrem, A° - uzunlik o'lchov birligi. $1^\circ = 0,1\text{mm} = 10^{-8}$. Zarrachalar aro masofa yoki kimyoviy bog' uzunligi angestrem bilan o'lchanadi.

Atom – kimyoviy elementning eng kichik elektroneytral zarrachasi bo'lib, elementning hamma xossalari namoyon etadi.

Atom massa – atom massasi birliklarida ifodalangan atomning massasi.

Aerozol – dispers muhit gaz yoki gazlar aralashmasidan va dispers fazasi 10^{-7} – 10^{-5} sm bo'lgan zarrachalardan iborat dispers sistema.

Belgi – material yoki moddalar guruhi uchun umumiy bo'lgan farq qiluvchi xususiyat.

Birikma – ikki yoki undan ortiq elementdan tarkib topgan modda.

Bug' – moddaning gazga o'xshash holatidir. Moddaning harorati kritik haroratdan past bo'lganda gazlarni bug' deb atash mumkin. Gaz bilan bug' holatlari taqqoslanganda, ikkala holat ham moddaning gaz holati bo'lib hisoblanadi, ammo kritik haroratdan past bo'lsa bo'g' hosil bo'ladi va yuqori bosimda suyuqlikka o'tishi mumkin.

Bug'lanish – moddaning qaynash haroratidan past haroratda bug'ga aylanishi. Masalan, nafialin uy haroratida bug'lanadi.

Bo'lak – biror narsaning alohida qismi, masalan: material yoki moddaning alohida bir bo'lagi.

Bo'lakchalar – qattiq material yoki moddaning mayda zarrachasi, bo'lakchalar bo'lakdan kichik, granoladan katta bo'ladi.

Valentlik – element atomi yoki o'ziga vodorodning yoki boshqa bir valentli elementning nechta atomni biriktira olishi yoki nechta atomga almashina olishni ko'rsatadigan son. Atom tuzilishi nuqtai nazaridan valentlik atomning ma'lum sondagi elektronlarni berish yoki biriktirib olish qobiliyati. Ionli birikmalarda element valentligi biriktirib olgan yoki bergan elektronlar soni bilan aniqlanadi.

Viskozimetriya (viskozimetr) – suyuqliklar va gazlarning qovushqoqligini o'lchaydigan usul (asbob).

Vodorod bog'lanish – vodorod protonlari hisobida hosil bo'ladigan bog'lanish.

Gaz – moddaning agregat holatlaridan biri bo'lib, uning zarrachalari o'zaro molekulyar kuchlar bilan bog'langan va butun kerakli hajmini to'ldiradi hamda xaotik ravishda harakat qiladi.

Gaz doimiysi – ideal gazning holat tenglamasiga kiruvchi fizikaviy o'zgarish kattalik (R), uning qiymati $8,314$ j/kmol ga teng. Fizik ma'nosi – 1 mol gaz 1 gradusga qizdirilganda bajarilgan ish.

Gel – kolloid eritmalarda kolloid zarrachalar o'zlari bilan o'z miqdordagi erituvchi bilan cho'kkanda hosil bo'lgan iviq cho'kma.

Geterogen sistema – ikki yoki undan ortiq fazalardan tarkib topgan sistema.

Gigroskopik modda – moddaning suv bug'larini yutish qobiliyati.

Gidrid – vodorodning metallar bilan hosil qilgan birikmasi. Hidridlar qattiq, kristallik holatda bo'lib, suyuqlanmalari elektrolizi paytida vodorod anionlari anodga tomon boradi.

Gidrozoil – kolloid sistemaning, ya'ni zolning suyuq fazasi suv bo'lsa, bunday zol gidrozoil'dir.

Gomogen sistema – bir xil fazadan tarkib topgan sistema, uning komponentlari orasida sirt chegarasi bo'lmaydi.

Gram-atom – moddaning atom massasiga son jihatdan teng qilib grammlarda olingan miqdori.

Gramm-molekula – moddaning molekulyar massasiga teng qilib grammlarda olingan miqdori.

Gramm-ekvivalent – moddaning ekvivalentiga son jihatdan teng qilib grammlarda olingan miqdori.

Granola (-don) – qattiq modda yoki materialning mayda zarrachasi bo'lib, bir necha donalardan tarkib topgan bo'ladi.

Deyteriy – vodorodning massa soni ikkiga teng bo'lgan barqaror izotopi – $^2\text{H(D)}$.

Densimetr – suyuqliklar va kattiq moddalarning nisbiy zichligini o'lchaydigan asbob.

Desorbsiya – adsorbsiyaga teskari bo'lgan jarayon, ya'ni adsorbent yuzasiga yutilgan moddaning qaytadan ajralib chiqishi.

Deformatsiya – jismning hajmi yoki shakl ko'rinishining o'zgarishi.

Dipol – qutbli molekula.

Dipol momenti – qutbli molekulaning qutblilik darajasini ifodalaydigan kattalik (μ).

Dipol uzunligi (l) – ikki zaryad elektr markazlari, ya'ni qutblar orasidagi masofa: $\mu = l \cdot e$, e – effektiv zaryad miqdori.

Dispers sistema – bir jinsli (dispers) muhitdagi biror moddaning ko'p sonli mayda zarrachalaridan (dispers faza) iborat geterogen sistemaga aytiladi. Dispers sistemalarda fazalar sirt chegaralar bilan ajralgan bo'ladi.

Disperslik – dispers sistemalardagi biror modda zarrachalarining o'lchamlari (disperslik darajasi) tavsifi. Disperslik barcha zarrachalar umumiy sirtining jami hajmiga nisbati bilan ifodalanadi.

Diffuziya – molekular tartibsiz harakati natijasida bir modda zarrachalarining boshqa bir modda zarrachalari orasida tarqalishi.

Dielektrik – elektr tokini o'tkazmaydigan jismlar. Dielektriklar – qattiq, suyuq va gazsimon bo'lishi mumkin.

Jism – fazodagi alohida narsa, materiya egallagan yoki yopiq sirt bilan chegaralangan qism.

Zaryad – yadro zaryadi bu atomning zaryadi musbat zaryad bo'lib, uning soni elementning davriy sistemadagi tartib raqamiga teng; elektron zaryadi – $4,8 \cdot 10^{-10}$ absolyut elektrostatik birlikka yoki $1,6 \cdot 10^{-19}$ kulonga teng.

Zol – zarrachalar bir-biri bilan strukturaviy bog'lanmagan suyuq faza oralig'idagi yuqori dispersli kolloid sistema.

Ideal gaz – gazning ideallashtirilgan modeli. Ideal gazda zarrachalar (atomlar, molekularlar) orasida o'zaro ta'sir kuchi hisobga olmaslik darajada kichik deb hisoblanadi.

Ideal kristall – cheksiz kattalikdagi kristallarning ideallashtirilgan modeli. Uning zarrachalari (atomlari) muayyan tartibda joylashgan bo'ladi. Real kristallarda esa har xil nuqsonlar bo'ladi.

Ideal suyuqlik – suyuqlikning ideallashtirilgan modeli. Real suyuqlikdan farqli ravishda u yopishqoqlik va issiqlik o'tkazuvchanlik xususiyatiga ega emas.

Izomeriya – moddalarning sifat miqdor tarkiblari hamda molekulyar massalari bir xil bo'lib, fizik va kimyoviy xossalari, tuzilishining turlicha bo'lishi.

Izotermik jarayon – o'zgarmas haroratda boradigan jarayon.

Izotop – kimyoviy xossalari bir xil, atom massalari har xil bo'lgan element atomi. Izotop atomlari yadrosidagi neytronlar soni har xil, protonlar soni esa o'zgarmas.

Izoxorik jarayon – o'zgarmas hajmda boradigan jarayon.

Izoelektrik nuqta – elektrolit eritmasida ishtirok etuvchi kation va anionlar sonining bir – biriga tengligini belgilovchi neytral holat.

Izoelektrik sistema – geterogen sistema fazalarining elektrik potensial ayirmalari nolga teng bo'lgan sistema.

Intensiv xususiyat – material yoki moddaning miqdoriga bog'liq bo'lgan xususiyat. Bu xossalardan foydalanib biron material yoki modda namunalarning miqdorini aniqlash mumkin. Masalan: massa, hajm.

Ion – elektronlar yo'kotgan yoki biriktirib olgan zaryadli atom, molekula yoki atom guruhlari. Ion zaryadi elektronlar zaryadiga karralidir.

Karat – 1). Massaning ulush birligi. Metrik karat = $200 \text{ mg} = 2 \cdot 10^{-4} \text{ kg}$. 2). Qotishmalardagi oltin miqdorining o'lchovi, qotishma massasining 1/24 qismiga teng. Sof oltin 24 karratga mos keladi.

Kation (lar) – musbat zaryadli ion (lar), atom yoki atomlar guruhi. Elektr toki ta'sirida katodga tomon harakatlanadi.

Kvant – diskret kattalik, qiymat.

Kvant sonlari – kvant sistemalari (atom yadrosi, atom molekularlar va boshqalar) hamda ayrim elementar zarrachalarni ifodalovi fizikaviy miqdorlarning mumkin bo'lgan diskret qiymatlarni aniqlovchi butun yoki kasr sonlar.

Qotish – suyuqlikni sovitib qattiq holatga o'tkazish jarayoni. Bu tushuncha uy haroratida qattiq holatda bo'lgan material yoki moddalarga nisbatan qo'llaniladi.

Kimyoviy element – yadro zaryadlari bir xil bo'lgan atomlar majmui.

Koloriya – issiqlik miqdorining xalqaro birliklar sistemasiga kirmagan o'lchov birligi $1 \text{ kal} = 4,1840 \text{ j}$.

Komponent – sistemaning mustaqil tarkibiy qismi.

Kondensatsiya – sovitish yoki bosimni oshirish, yoki har ikkala jarayonni birga qo'llab bo'g'ni suyuqlikka aylantirish. Bu termin moddalar va materiallar uy haroratida bo'lgan vaqtda ishlatiladi.

Konsentratsiya – hajmi yoki og'irlik birligidagi modda miqdori.

Kristall panjara – kristalda molekularlar, atomlar yoki ionlarning real fazoviy davriy joylanishi. Molekularlar, atomlar, ionlar joylashgan nuqtalar kristall panjaraning tugunlari deyiladi.

Kristal modda – muayyan shakl va aniq suyuqlanish haroratiga hamda real tuzilishga ega bo'lgan qattiq modda.

Kristallografiya – moddaning kristall holati haqidagi fan. Kristallarning tuzilishi, hosil bo'lishi, simmetriyasi va xossalari o'rganadi.

Kristallokimyo – kristallarning tuzilishi va xossalari ularning kimyoviy tarkibiga bog'liqligini o'rganadi.

Kritik massa – parchalanuvchi moddaning minimal massasi; o'z-o'zidan davom etib turuvchi zanjir reaksiyalarni ta'minlaydi, energiyaga aylanadigan massa.

Kritik nuqta – holat diagrammalarida moddaning kritik holatini ifodalovchi nuqta.

Kritik temperatura – suyuqlik bilan uning bo'g'i o'rtasidagi chegara va farq yo'qoladigan holatga xos temperatura.

Kritik hajm – kritik holatdagi moddaning solishtirma hajmi.

Kritik harorat – moddaning solishtirma hajmi.

Kritik holat – o'zaro muvoznvtda birgalikda mavjud bo'lgan ikki faza holati; bu holatda fazalar o'z xossalari jihatidan bir xil bo'lib qoladi; kritik holatda harorat, bosim va solishtirma hajmlar kritik qiymatlarga ega bo'ladi.

Kukun - qattiq material yoki moddaning juda mayda zarrachalaridan iborat qismi, ko'z bilan ilg'ash qiyin.

Qaynatilgan suv – ma'lum vaqtda qaynagan suv bo'lib, unda erigan havo bo'lmaydi.

Qaynash nuqtasi (harorati) – suyuqlikning bug'ga aylangan paytidagi harorati. Qaynash haroratida suyuqlikning to'yingan bug' bosimi atmosfera bosimiga teng bo'ladi. Atmosfera bosimi qancha past bo'lsa, suyuqlikning qaynash harorati shuncha past bo'ladi.

G'ovak – qattiq materialning mayda g'ovak tirqish (teshikcha) lardan iborat bo'lgan va ulardan oquvchan moddalar o'tishi mumkinligini bildiradi.

Qisilish – sovitish yo'li bilan gazni suyuqlikka aylantirish.

Ligand – kompleks birikmalarining asasiy tarkibiy qismini; komplekslar strukturasi kompleks hosil qilishda elektron juftlar uchun donor vazifasini o'taydi.

Magik yadrolar – sehrli yadrolar ularga protonlar yoki neytronlarning soni sehrli sonlar (2, 8, 20, 28, 50, 82, 126) ga teng bo'lgan atom yadrolari. Ular o'zlarining yuqori barqarorligi va tabiatda keng tarqalganligi bilan elementlar davriy sistemasida joylashgan qo'shni yadrolardan farq qiladi.

Og'irlik – material yoki moddaning yerga tortilish kuchini tavsiflaydigan xossasi. Predmet yoki biror bir moddaning yerga tortilish kuchi – bu uning massasidir.

Massa – materiyaning fizikaviy kattaliklaridan biri bo'lib, uning inert va gravitatsiya xususiyatlarini belgilaydi. Atom massa – atom birikmalarida ifodallangan atom massasi; molekulyar massa – molekula massasining atom birikmalarida ifodalanishi.

Metallografiya – metall va qotishmalar strukturasi haqidagi fan. Metall strukturasi hosil bo'lish qonuniyatlarini tadqiq qiladi, uning makrostrukturasi va mikrostrukturasi, atom kristall tuzilishi, strukturasi mexanik, elektr, magnit va boshqa xossalarga ta'sirini o'rganadi.

Modda, material va birikma tushunchalari o'rtasidagi farq quyidagilar: modda o'ziga xos kimyoviy tarkib va xossaga ega bo'lib uning tuzilishi murakkabroq bo'ladi; material o'ziga xos kimyoviy tarkib va xossaga ega bo'lib, ba'zi bir sohalarda o'zgaradi, birikma o'ziga xos kimyoviy tarkibga, ma'lum tuzilishga va kimyoviy formulaga egadir.

Modda tuzilishida qo'llaniladigan ayrim fizik – kimyoviy tushunchalarning izohi

Moddani hosil qilgan elementlar bir-biri bilan ma'lum nisbatda birikkan bo'ladi va ularni formulalar orqali ifodalash mumkin.

Molekula – muayyan moddaning fizik – kimyoviy xossalari namoyon etuvchi elektroneytral kichik zarracha.

Moment (dipol momenti) – molekulaning elektr xossasini xarakterlovchi, zaryadlangan qutbli zarrachalar sistemasi bo'lgan vektor kattalik.

Muzlatish – uy haroratidan past haroratlarda suyuq holatdan qattiq holatga o'tish.

Muzlash (nuqtasi) harorati – suyuq moddaning qattiq holatga o'tish harorati.

Neytron – atom yadrosi tarkibida kiruvchi, massasi proton massasiga qariyb teng bo'lgan zaryadsiz neytral zarracha.

Nisbiy zichlik – material yoki modda zichligining suvning zichligiga nisbati. Nisbiy zichlik o'lchamsiz kattalik.

Nuklid – proton va neytron juftligining nomi.

Oksi... – moddalarni nomlashda molekula tarkibida gidroksil guruh borligini ifodalovchi old qo'shimcha.

Okso guruh - -O-, ko'p yadroli ba'zi kompleks birikmalardagi bir necha koordinatsion sohalarning markaziy atomlari o'zaro -O- ko'prik orqali bog'langan bo'ladi, bu ko'prik okso – guruh hisoblanadi.

Oktet – atomning elektron qavatidagi elektronlar soni 8 va 18 bo'lsa, bunday tuzilish mustahkam konfiguratsiya deyiladi. 8 elektronli elektron qavat – oktet deyiladi.

Pemza – g'ovak, yengil vulkanik tog' jinsi bo'lib, suvga cho'kmaydi, betonlarni to'ldirgich sifatida ishlatiladi, sementga qo'shiladi.

Plastiklik – qattiq modda yoki materialning kuch ta'sirida ko'rinishini o'zgartirib, bu kuchni olgandan so'ng o'z holatiga qaytmasligi.

Pozitron (ye^+) – massasi $9,109 \cdot 10^{-28}$ g, ya'ni elektron massasiga teng; zaryadi +1 ga (1,602 kulon) teng bo'lib, nihoyatda beqaror (havoda sekundning milliondan bir ulushiga tura oladi) elementar zarracha.

Polikristallar – bir-biriga nisbatan tartibsiz holdagi ko'p mayda kristall zarrachalardan tashkil topgan agregatlar. Ko'pchilik qattiq texnologik materiallar polikristallardan iborat.

Polimorfizm – modda kristallik tuzilishining sharoitga qarab o'zgarishi, ba'zi moddalarning turli strukturali bir necha kristall holatlarda bo'lish hodisasi.

Porsial bosim – ideal gazlar aralashmasidagi ayrim olingan gaz xossasiga to'g'ri keladigan bosim, zarracha bosimi, ta'siri.

Postulat – berilgan ta'rifni isbotsiz tastiqlash.

Protiy – 1H vodorod izotopi.

Radius – aylana yoki sferaning biror nuqtasini markaz bilan tutashiruvchi kesma; Atom radiusi – oddiy moddaning kristall panjarasidagi ikki atom markazlari orasidagi yarim qisqa masafa.

Real gaz – ideal gazdan o'z zarralari (atomlari, molekulari) orasidagi o'zaro ta'sir mavjudligi bilan farq qiladigan gazlar.

Rentgen nurlari – to'lqin uzunligi 10^{-5} - 10^2 nm bo'lgan elektromagnit nurlanishi.

Radikal – juftlashmagan elektronlari bo'lgan molekula, atom yoki ion.

Sorbat – sorbsiya jarayonida sorbentlarga yutilgan kimyoviy birikmalar yoki moddalar aralashmasi.

Sorbent – sorbsiya jarayonida sorbatni shimib qoluvchi kimyoviy birikma yoki moddalar aralashmasi.

Sorbsiya – adsorbsiyaga qarang.

Spektr – nur, muayyan to'lqin o'zunligi, chastotasi, intensivlik va energiyaga ega bo'lgan nur, nurlanish, yutilish va sochilish spektrlari mavjud.

Spektral tahlil – moddalar elementlar va birikmalarni (oddiy va murakkab) ularning spektrlarini (nurlanish, yutilish) tekshirish orqali tahlil qilish.

Sublimatsiya – moddaning qattiq holatdan suyuqlanmasdan to'g'ridan-to'g'ri gaz holatiga o'tishi. Bu jarayon o'lchamli nuqta haroratidan past haroratda sodir bo'ladi.

Suyuqlanish (nuqtasi) harorati – qattiq moddaning suyuqlikka aylangandagi harorati. Suyuqlanish haroratida moddaning qattiq va suyuq holatlari bir vaqtning o'zida mavjud bo'ladi, suyuqlanish harorati tushunchasi xona haroratida qattiq holatda bo'lgan moddalarga ta'lluqli.

Temperatura (harorat) – sistemaning termodinamik muvozanat holatini, zarrachalar energiyasini ifodolovchi fizik kattalik.

Termodinamik xossalar – faqat harorat, bosim (yoki hajm) va konsentratsiyaga bog'liq bo'lgan xossalar.

Termodinamika – energiya energetik jarayonlar, issiqlik energiyasi bilan mexanik energiyani bir-biriga aylanishini o'rganadi.

Termokimy – kimyoning bir bo'limi bo'lib, kimyoviy reaksiyalar jarayonida ajralib chiqqan yoki yutilgan issiqliklarning miqdorini va ular bilan bog'liq bo'lgan xossalarini o'rganadi.

Termoyadro reaksiyalari – yuqori haroratlarda yengil yadrolarning og'iroq yadrolarga aylanish reaksiyalari, jarayoonda juda ko'p energiya ajraladi. Quyosh va boshqa yulduzlar energiyalarining asosiy manbai termoyadroviy reaksiyalardir.

Tuman – o'ta to'yingan bug'larning kondensatsiya natijasida hosil bo'ladigan tomchi holdagi suyuq dispers fazali aerozollar.

Faza – kimyoviy tarkibi va fizikaviy xossalari bo'yicha termodinamik sistemaning bir jinsli bo'lgan qismi yoki termodinamik muvozanatda bo'lgan gomogen sistema;

Ferrit – temir-uglerodli qotishmalarning temirdagi qattiq etuvchilaridan biri, uglerod va legirlovchi elementlarning temirdagi qattiq eritmasi.

Ferromagnit moddalar – paramagnitizm xossasi sezilarli bo'lgan moddalar.

Ferromagnitizm – modda (ferromagnetik) mikroskopik hajmlarining magnit jihatdan tartibli holati; bunda atomlar (ionlar) ning magnit momentlari parallel va bunday ormentirlangan bo'ladi.

Flyuid – oquvchi muhit.

Formula – simvollarning tuzish kombinatsiyasi. Grafik formula – molekula, ion, radikallarda elektron bulut zichligini grafik ko'rinishda tasvirlash.

Fotokolorimetriya (fotokolorimetr) – fotometrik o'lchashlarni amalga oshiradigan usul (asbob).

Fotokimyoviy reaksiya – yorug'lik nuri ta'sirida boradigan kimyoviy jarayon.

Fotoliz – kimyoviy birikmalarning yorug'lik nuri ta'siridan parchalanishi.

Fotopolimerizatsiya – nur ta'siridan polimerning hosil bo'lish jarayoni.

Fraksiya – aralashmaning o'rtacha xususiyatlaridan farq qiluvchi, undan ajratib olingan bir qismi.

Freonlar – to'yingan fluoroglevodorodlar va ularning hosilalari, tarkibida xlor yoki brom ham bo'lishi mumkin bo'lgan birikmalar.

Xemosorbsiya – sorbat molekullari bilan sorbentlar orasida boradigan kimyoviy birikishli adsorbsiya jarayoni.

Xossa – material yoki moddalarning ma'lum belgi va xususiyatlari bo'lib, ularni miqdoriy o'lchash mumkin emas, lekin hisoblashlar yo'li bilan ifodalash (muayyan kattaliklar orqali) mumkin.

Xromatografiya – aralashmalarni ajratish va tahlil qilish usuli.

Hid – material yoki moddaning shunday xossasiki, u sezgi organlari orqali bilinadi.

Holatning (fazaning) o'zgarishi – moddaning fizikaviy o'zgarishi bo'lib, uning bir fizikaviy (fazali) holatdan ikkinchi holatga (fazaga) o'tishi tushiniladi. Holat (faza) o'zgarishi odatda holat parametrlari (harorat, bosim, hajm) o'zgarganda sodir bo'ladi.

Sellofan – viskozadan olinadigan polimer material.

Sement – kalsiyning silikati alyuminatidir; asosiy tarkibi; Ca_2SiO_4 , Ca_3SiO_5 va $Ca_3(AlO_3)_2$. Sement tarkibiga temir (III) – oksidi ham kiradi. Portlant sement va boksit sement turlari bor.

Sementit – temir-uglerod qotishmasining strukturaviy tarkibiy qismlaridan biri bo'dib, u Fe_3C tarkibli temir karbididir.

Ekvivalent – biror narsaning o'rnini bosa oladigan yoki uning iffodasi bo'lib xizmat qiladigan teng qiymatli narsa yoki miqdor.

Ekstensiv xossalr – material yoki moddaning miqdoriga bog'liq bo'lgan xossalr; bu xususiyatlardan foydalanib material yoki moddalarni identifikatsiyalash mumkin.

Ekstragent – ekstraksiya uchun qo'llaniladigan selektiv erituvchi.

Elastiklik – qattiq modda yoki materialning kuch ta'sirida o'zini ko'rinishini o'zgartirib, kuchni olgandan keyin yana o'z holida qaytishi.

Elektr toki – elektronlarning tartibli oqimi bo'lib, tok manbaining katodidan tomon harakatlanadi.

Elektron (e^-) – turg'un elementar zarracha bo'lib, manfiy zaryadga ega. Massasi taxminan $9,11 \cdot 10^{-28}$ g.

Elyuat – elyuentda taqsimlangan xromatografik usulda tekshiriladigan modda yoki moddalar aralashmasi.

Elyuent – xromatografik tahlilda sorbentga nisbatan harakatlanadigan suyuq yoki gaz holidagi faza.

Energiya – moddalarning tashqi kuchga qarshi bajarish qobiliyati. Materiya zarrachalari harakatining turli shakllarini ifodalovchi umumiy o'lchov. Kinetik, potensial, aylanma, tebranma, ilgariylanma va h.k. energiya turlari bor.

Entalpiya – sistema holatining bir qiymatli termodinamik funksiyasi, H bilan belgilanadi va $H = U + PV$ tenglama bilan ifodalanadi.

Entropiya – S bilan belgilanadi va sistema holatining termodinamik funksiyasi yoki sistemaning tartibsizlik o'lchovi. Entropiya $S = Q/T$ tenglamasi yoki $S = K \ln W$ bilan ifodalanadi.

Effuziya – gazlarning juda mayda tirqishlardan sekinlik bilan tarqalishi.

Yadro – strukturaning (atomning) markaziy qismi.

Yadro energiyasi – yadroviy reaksiyalarning borishida chiqargan energiya. Yadro energiyasidan foydalanib og'ir yadrolarning bo'linish zanjir reaksiyalari va yengil yadrolarning termoyadroviy sintez reaksiyalarigi asoslangan.

Yarim tiniq (yarim shaffof) – bu atama qattiq yoki yumshoq material yoki moddani Tavsiflab, o'zidan nurni kam o'tkazishini ifodalaydi, masalan: yarim shaffof oyna, yarim shaffof shoyi.

Fotokolorimetriya (fotokolorimetr) – fotometrik o'lchashlarni amalga oshiradigan usul (asbob).

Fotokimyoviy reaksiya – yorug'lik nuri ta'sirida boradigan kimyoviy jarayon.

Fotoliz – kimyoviy birikmalarning yorug'lik nuri ta'siridan parchalanishi.

Fotopolimerizatsiya – nur ta'siridan polimerning hosil bo'lish jarayoni.

Fraksiya – aralashmaning o'rtacha xususiyatlaridan farq qiluvchi, undan ajratib olingan bir qismi.

Freonlar – to'yingan fluoroglevodorodlar va ularning hosilalari, tarkibida xlor yoki brom ham bo'lishi mumkin bo'lgan birikmalar.

Xemosorbsiya – sorbat molekullari bilan sorbentlar orasida boradigan kimyoviy birikishli adsorbsiya jarayoni.

Xossa – material yoki moddalarning ma'lum belgi va xususiyatlari bo'lib, ularni miqdoriy o'lchash mumkin emas, lekin hisoblashlar yo'li bilan ifodalash (muayyan kattaliklar orqali) mumkin.

Xromatografiya – aralashmalarni ajratish va tahlil qilish usuli.

Hid – material yoki moddaning shunday xossasiki, u sezgi organlari orqali bilinadi.

Holatning (fazaning) o'zgarishi – moddaning fizikaviy o'zgarishi bo'lib, uning bir fizikaviy (fazali) holatdan ikkinchi holatga (fazaga) o'tishi tushiniladi. Holat (faza) o'zgarishi odatda holat parametrlari (harorat, bosim, hajm) o'zgarganda sodir bo'ladi.

Sellofan – viskozadan olinadigan polimer material.

Sement – kalsiyning silikati alyuminatidir; asosiy tarkibi; Ca_2SiO_4 , Ca_3SiO_5 va $\text{Ca}_3(\text{AlO}_3)_2$. Sement tarkibiga temir (III) – oksidi ham kiradi. Portland sement va boksit sement turlari bor.

Sementit – temir-uglerod qotishmasining strukturaviy tarkibiy qismlaridan biri bo'lib, u Fe_3C tarkibli temir karbiddir.

Ekivalent – biror narsaning o'rnini bosa oladigan yoki uning iffodasi bo'lib xizmat qiladigan teng qiymatli narsa yoki miqdor.

Ekstensiv xossalar – material yoki moddaning miqdoriga bog'liq bo'lgan xossalar; bu xususiyatlardan foydalanib material yoki moddalarni identifikatsiyalash mumkin.

Ekstragent – ekstraksiya uchun qo'llaniladigan selektiv erituvchi.

Elastiklik – qattiq modda yoki materialning kuch ta'sirida o'zini ko'rinishini o'zgartirib, kuchni olgandan keyin yana o'z holida qaytishi.

Elektr toki – elektronlarning tartibli oqimi bo'lib, tok manbainig katodidan tomon harakatlanadi.

Elektron (e^-) – turg'un elementar zarracha bo'lib, manfiy zaryadga ega. Massasi taxminan $9,11 \cdot 10^{-28}$ g.

Elyuat–elyuentda taqsimlangan xromatografik usulda tekshiriladigan modda yoki moddalar aralashmasi.

Elyuent–xromatografik tahlilda sorbentga nisbatan harakatlanadigan suyuq yoki gaz holidagi faza.

Energiya – moddalarning tashqi kuchga qarshi bajarish qobiliyati. Materiya zarrachalari harakatining turli shakllarini ifodalovchi umumiy o'lchov. Kinetik, potensial, aylanma, tebranma, ilgariylanma va h.k. energiya turlari bor.

Entalpiya – sistema holatining bir qiymatli termodinamik funksiyasi, H bilan belgilanadi va $H = U + PV$ tenglama bilan ifodalanadi.

Entropiya – S bilan belgilanadi va sistema holatining termodinamik funksiyasi yoki sistemaning tartibsizlik o'lchovi. Entropiya $S = Q/T$ tenglamasi yoki $S = k \ln W$ bilan ifodalanadi.

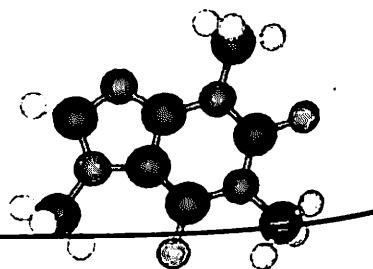
Effuziya – gazlarning juda mayda tirqishlardan sekinlik bilan tarqalishi.

Yadro – strukturaning (atomning) markaziy qismi.

Yadro energiyasi – yadroviy reaksiyalarning borishida chiqargan energiya. Yadro energiyasidan foydalanib og'ir yadrolarning bo'linish zanjir reaksiyalari va yengil yadrolarning termoyadroviy sintez reaksiyalarigi asoslangan.

Yarim tiniq (yarim shaffof) – bu atama qattiq yoki yumshoq material yoki moddani Tavsiflab, o'zidan nurni kam o'tkazishini ifodalaydi, masalan: yarim shaffof oyna, yarim shaffof shoyi.

TESTLAR



1. Atom qanday zarrachalardan tashkil topgan?

- A. proton, neytron, elektron.
- B. proton elektron, alfa zarrach
- C. betta-zarrachalar va alfa zarrachalar.
- D. pozitron, elektron, neytron.

2. Elektron orbital deb nimaga aytiladi?

- A. Elektronlarning yadro atrofida aylanish trayektoriyasi.
- B. Elektron bilan yadro orasidagi masofa.
- C. Elektron va protonlar soni.
- D. Tashqi qavatdagi elektronlar soni.

3. s va p –elektron orbitallarini fazoviy shakli.

- A. s-sferik shaklda, p-gantelsimon shakld
- B. s-ko`shaloq gantelsimon shaklda, p-sferik shakld
- C. s-sferik shaklda, p-ko`shaloq gantelsimon shakld
- D. s-hajmiy sakkiz shaklda, p-gantelsimon shakld

4. Elektron orbitallarning gibridlanishi.

- A. Turli orbitallarning o`zaro qo`shilib «oraliq» orbitallar hosil bo`lishi
- B. Elektronlarning yadro atrofida aylanish trayektoriyasi
- C. Elektron va protonlar qo`shilishi
- D. Elektron bilan yadro orasidagi ta`sir

5. Diagonal yoki sp –gibridlanish.

- A. bitta s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi.
- B. bitta s va ikkita p-orbitallarning qo`shilishi
- C. bitta s va uchta p-orbitallarning qo`shilishi
- D. ikkita s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi.

6. Trigonal yoki sp² –gibridlanish.

- A. bitta s va ikkita p-orbitallarning qo`shilishi.
- B. bitta s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi.
- C. bitta s va uchta p-orbitallarning qo`shilishi.

D. ikkita s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi.

7. sp³ –gibridlanish va fazodagi shakli.

- A. bitta s va uchta p-orbitallarning qo`shilishi, tetraedr.
- B. bitta s va ikkita p-orbitallarning qo`shilishi, to`rt burchak.
- C. bitta s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi, uchburchak.
- D. ikkita s va bitta p-orbitallarning qo`shilishi, to`g`ri chiziq.

8. sp³d gibridlanishning fazodagi shakli.

- A. Trigonal bipiramid
- B. Uchburchak.
- C. Oktaedr
- D. Chiziqli.

9. sp³d² gibrid molekulaning shakli.

- A. Oktaedr.
- B. Uchburchak.
- C. Chiziqli.
- D. Trigonal bipiramida

10. sp³d³ gibridlanishdagi gibridlangan bulutlar soni va shakli.

- A. 7 ta va yetti uchli qo`shimchali oktaedr.
- B. Oktaedr.
- C. Uchburchak.
- D. Trigonal bipiramida

11. Kimyoviy bog` energiyasi va o`lchami.

- A. Bog`ning uzilishi uchun zarur bo`lgan energiya, Kj/mol, Kkal/mol.
- B. elekromanfiylik, Kkal/mol
- C. ionlanish energiyasi, Kj/mol
- D. Bog` hosil bo`lish enegiyasi, vatt.

12. Kovalent bog` uzunligi va o`lchami

- A. Molekuladagi atomlar yadrolari orasidagi masofa, nm.
- B. Proton va neytronlar orasidagi masofa, sm.
- C. Atomlar orasidagi masofa, m.
- D. Yadro va elektronlar orasidagi masofa, nm.

13. Valent burchak nima?

- A. Molekuladagi atomlar yadrolarini birlashtiruvchi to`g`ri chiziqlar orasidagi burchak.
- B. Atomdan bitta elektronni cheksiz uzoqlashtirish uchun zarur energiy
- C. Molekuladagi atomlar yadrolari orasidagi masofa, Nm.
- D. Yadro va elektronlar orasidagi masof

14. Ionlanish potentsiali.

- A. Atomdan bitta elektronni cheksiz uzoqlashtirish uchun zarur energiy

B. Miqdorlari bir-biriga teng, ikkita qarama-qarshi zaryaddan hosil bo'lgan sistem

C. Zaryadlar miqdorining ular orasidagi masofaga ko'paytmasi.

D. Yadro va elektronlar orasidagi masofa

15. Dipol deb nimaga aytiladi.

A. Miqdorlari bir-biriga teng, ikkita qarama-qarshi zaryaddan hosil bo'lgan sistem

B. Zaryadlar miqdorining ular orasidagi masofaga ko'paytmasi.

C. Atomdan bitta elektronni cheksiz uzoqlashtirish uchun zarur energiy

D. Yadro va elektronlar orasidagi masofa

16. Dipol momenti.

A. Zaryadlar miqdorining ular orasidagi masofaga ko'paytmasi.

B. Miqdorlari bir-biriga teng, ikkita qarama-qarshi zaryaddan hosil bo'lgan system.

C. Atomdan bitta elektronni cheksiz uzoqlashtirish uchun zarur energy.

D. Molekulaning biroz cho'zilishi.

17. Dipol momentining birligi.

A. Debay.

B. Joule.

C. Elektron volt/mol.

D. Nyuton m².

18. Qutblanuvchanlik.

A. Qutbli molekulaning elektr maydini ta'sirida tartibli joylashishi.

B. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish.

C. Molekulaning biroz cho'zilishi.

D. Molekulaning doimiy dipolini uzunligi ortib molekulaning biroz cho'zilishi.

19. Oriyentatsion qutblanish.

A. Molekulaning doimiy dipolini uzunligi ortib molekulaning biroz cho'zilishi.

B. Qutbli molekulaning elektr maydini ta'sirida tartibli joylashishi

C. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish.

D. Molekulaning biroz cho'zilishi.

20. Deformatsion yoki induksion qutblanish.

A. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish.

B. Molekulaning doimiy dipolini uzunligi ortib molekulaning biroz cho'zilishi.

C. Qutbli molekulaning elektr maydini ta'sirida tartibli joylashishi

D. Molekulaning biroz cho'zilishi.

21. σ - bog'lar hosil bo'lishi.

A. Elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.

B. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish.

C. Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.

D. d-orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.

22. π - bog'ning hosil bo'lishi.

A. Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.

B. Elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.

C. d-orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.

D. s-elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.

23. Metan molekulasida shakli va valent burchagi.

A. Tetraedr, 109,28°

B. Trigonal pramida, 120°

C. Tetraedr, 90°

D. Uchburchak, 120°

24. Molekulyar orbitallar metodi.

A. Molekuladagi jami elektronlar harakat qiladigan sohaning shakli va energiyasini aniqlash.

B. Atomlarning orbitallar shakli.

C. Molekuladagi atom orbitallar soni.

D. Atomlarning orbitallarda joylashishi.

25. Azot (N₂) molekulasida molekulyar orbitallarning elektron konfiguratsiyasini aniqlang.

A. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2$

B. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1 (\pi_{2pz}^*)^1$

C. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^2$

D. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1$

26. Kislorod (O₂) molekulasida molekulyar orbitallarning elektron konfiguratsiyasini ko'rsating.

A. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1 (\pi_{2pz}^*)^1$

B. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2$

C. $(\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^2$

$$D. (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1$$

27. CO molekulasida molekulyar orbitallarning elektron konfiguratsiyasi.

$$A. (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\pi_{2py}^*)^1 (\pi_{2pz}^*)^1 (\sigma_{2px}^*)^1$$

$$B. (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2$$

$$C. (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1 (\pi_{2pz}^*)^1$$

$$D. (\sigma_{2s})^2 (\sigma_{2s}^*)^2 (\pi_{2py})^2 (\pi_{2pz})^2 (\sigma_{2px})^2 (\pi_{2py}^*)^1$$

28. Oktaedrik komplekslarning gibridlanishi.

A. sp^3d^2 gibridlanish.

B. sp^3d^1 gibridlanish.

C. spd^3 gibridlanish.

D. sp^3 gibridlanish.

29. Van-der-Vals kuchlari.

A. Molekulyar tuzilishga ega moddalarda molekulararo tortishish kuchlari.

B. Ionlar orasidagi elektrostatik kuchlar.

C. Kovalent bog'larning hosil bo'lishi.

D. Metall qotishmalari hosil bo'lishi.

30. Elektronlarning kvant sonlarini ko'rsating.

A. n, l, m_l , m

B. π , σ ,

C. s, p, d, f.

D. p, n, e.

31. Koordinatsion bog'li molekularni ko'rsating.

A. $CuSO_4 \cdot 5H_2O$, $K_2[Fe(CN)_6]$.

B. $CuSO_4$

C. $CaSO_4$

D. Na_2SO_4

32. Moddalarning agregat holatlari nimalarga bog'liq?

A. Bog' hosil qilmaydigan elektronlar.

B. Bog'lovchi va ajratuvchi elektronlar ayirmasining yarmig

C. Atomlarning hosil bo'lishida bog' hosil qiluvchi elektronlar.

D. Molekulalar orasidagi vander valls kuchlarig

33. Molekulyar orbitallar usulida bog' tartibi nimaga teng?

A. Bog'lovchi va ajratuvchi elektronlar ayirmasining yarmig

B. Bog'lovchi va ajratuvchi elektronlar ayirmasiga

C. Bog'lovchi va ajratuvchi elektronlar soniga

D. Bog'lovchi va ajratuvchi elektronlar yig'indisining yarmig

34. Molekulyar orbitallar usulida bog'lovchi elektronlar.

A. Molekula hosil bo'lishida bog' hosil qiluvchi elektronlar.

B. Atomlarning hosil bo'lishida bog' hosil qiluvchi elektronlar.

C. Bog' hosil qilmaydigan elektronlar.

D. Atomlarning elektronlari.

35. Molekulyar orbitallar usulida ajratuvchi elektronlar.

A. Bog' hosil qilmaydigan elektronlar.

B. Atomlarning hosil bo'lishida bog' hosil qiluvchi elektronlar.

C. Molekula hosil bo'lishida bog' hosil qiluvchi elektronlar.

D. Molekulaning ichki tuzilishi.

36. Molekulaning simmetriya elementlari.

A. Simmetriya markazi, simmetriya o'qi, simmetriya tekisligi.

B. Molekulaning ichki tuzilishi.

C. Simmetriya nuqtasi, Simmetriya markazi.

D. Molekuladagi shakllar.

37. Molekulaning simmetriya markazi.

A. Kristall molekulaning har bir nuqtasi aksini qarama-qarshi tomonga qaytarib ko'chirib takrorlab beradi.

B. Molekula shaklining o'xshash nuqtalari teng burchaklardan keyin butun songa teng marta o'q atrofida takrorlanadi.

C. Molekula shaklining teng va o'xshash, birinchi yarmi ikkinchi yarmining ko'zgudagi aksi kabi ikki qismga ajratadi

D. Molekulaning ichki tuzilishi.

38. Molekulaning simmetriya o'qi.

A. Molekula shaklining o'xshash nuqtalari teng burchaklardan keyin butun songa teng marta o'q atrofida takrorlanadi.

B. Tarkibi va massasi xar xil tuzilishi va xossalari har xil bo'lgan molekular.

C. Kristall molekulaning har bir nuqtasi aksini qarama-qarshi tomonga qaytarib ko'chirib takrorlab beradi.

D. Molekula shaklining teng va o'xshash, birinchi yarmi ikkinchi yarmining ko'zgudagi aksi kabi ikki qismga ajratadi

39. Molekulaning simmetriya tekisligi.

A. Molekula shaklining teng va o'xshash, birinchi yarmi ikkinchi yarmining ko'zgudagi aksi kabi ikki qismga ajratadi.

B. Molekula shaklining o'xshash nuqtalari teng burchaklardan keyin butun songa teng marta o'q atrofida takrorlanadi.

C. Kristall molekulaning har bir nuqtasi aksini qarama-Samarqand tomonga qaytarib ko'chirib takrorlab beradi

D. Tarkibi va massasi har xil tuzilishi va xossalari har xil bo'lgan molekulalar.

40. Izomeriya nima?

A. Tarkibi va massasi bir xil tuzilishi va xossalari har xil bo'lgan molekulalar.

B. Tarkibi va massasi har xil tuzilishi va xossalari har xil bo'lgan molekulalar.

C. Tarkibi va massasi bir xil tuzilishi va xossalari bir xil bo'lgan molekulalar.

D. Molekulaning "sis" va "trans" holatda bo'lishi.

41. Stereo izomeriya.

A. Molekulaning "sis" va "trans" holatda bo'lishi.

B. Tarkibi va massasi bir xil tuzilishi va xossalari har xil bo'lgan molekulalar.

C. Tarkibi va massasi har xil tuzilishi va xossalari bir xil bo'lgan moddalar.

D. Tarkibi har xil tuzilishi va xossalari bir xil bo'lgan molekulalar.

42. Molekulaning magnit momenti.

A. Molekuladagi elektronlarning orbital va magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

B. Protonlar va neytronlarning magnit momentidan iborat

C. Molekuladagi elektronlarning orbital va magnit spinlaridan iborat

D. Molekuladagi magnit spin sonlarining geometriyasidan iborat

43. Molekuladagi yadro magnit momentlari.

A. Protonlar va neytronlarning magnit momenti.

B. Molekuladagi elektronlarning orbital va magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

C. Molekuladagi spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

D. Molekuladagi magnit spin sonlarining geometriyasidan iborat

44. Elektronlarning magnit momenti.

A. Atomdagi elektronlarning harakati orbital magnit maydonni tashkil qiladi.

B. Molekuladagi magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

C. Molekuladagi elektronlarning orbital yig'indisidan iborat

D. Molekuladagi elektronlarning orbital va magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

45. EPR spektrlari.

A. Atomdagi elektronlarning harakati orbital magnit maydonni tashkil qiladi.

B. Molekuladagi magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

C. Yadro atrofidagi magnit maydon rezonans holatlarini xarakterlaydi.

D. Fazoning istalgan nuqtasida bitta qiymatga ega, chekli va uzluksiz bo'lishi.

46. YaMR spektrlari.

A. Yadro atrofidagi magnit maydon rezonans holatlarini xarakterlaydi.

B. Fazoning istalgan nuqtasida bitta qiymatga ega, chekli va uzluksiz bo'lishi.

C. Atomdagi prtonlarning harakati orbital magnit maydonni tashkil qiladi.

D. Atomdagi elektronlarning harakati orbital magnit maydonni tashkil qiladi.

47. Rezonans shartlari.

A. Yonma-yon joylashgan qo'shbog', qoshbog' va getero atomning umumlashgan jufti buluti bilan ta'sirlanishi.

B. Fazoning istalgan nuqtasida bitta qiymatga ega, chekli va uzluksiz bo'lishi.

C. Yadro atrofidagi magnit maydon rezonans holatlarini xarakterlaydi.

D. Molekulaning biroz cho'zilishi

48. Elektron to'liq funksiyalari.

A. Yadro atrofidagi magnit maydon rezonans holatlarini xarakterlaydi.

B. Atomdagi elektronlarning harakati orbital magnit maydonni tashkil qiladi.

C. Molekuladagi magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat

D. Fazoning istalgan nuqtasida bitta qiymatga ega, chekli va uzluksiz bo'lishi.

49. Garmonik yaqinlashuv va tebranma holatlar.

A. Molekulaning ilgarilanma va aylanma, atomlarning tebranma, elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

B. Molekulaning ilgarilanma elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

C. Molekulaning aylanma, atomlarning tebranma ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

D. Molekula elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

50. Tebranma holatlarning energiyasi.

- A. Har xil sondagi valent elektronlarga ega bo'lgan molekularlar.
- B. O'zgaruvchan valent elektronlarga ega bo'lgan molekularlar.
- C. Bir xil sondagi valent elektronlarga ega bo'lgan molekularlar.
- D. Har xil elektronlarga ega bo'lgan molekularlar.

51. Molekulaning inersiyasi.

- A. Molekuladagi spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat.
- B. Molekuladagi elektronlarning orbital va magnit spin sonlarining geometrik yig'indisidan iborat.
- C. Protonlar va neytronlarning magnit momenti.
- D. Har xil elektronlarga ega bo'lgan molekularlar.

52. Elipsoidaning simmetriyasi.

- A. Simmetriya o'qi atrofida 90° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.
- B. Simmetriya o'qi atrofida 60° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.
- C. Simmetriya o'qi atrofida 360° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.
- D. Simmetriya o'qi atrofida 120° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.

53. Molekulalarning dissotsiyalanish energiyasi.

- A. Molekula elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- B. Molekulaning ilgarilanma elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- C. Molekulaning ilgarilanma va aylanma, atomlarning tebranma, elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- D. Molekulaning aylanma, atomlarning tebranma ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

54. Molekula konformatsiyasi.

- A. Molekula qicmlarining oddiy bog' atrofida aylanishi.
- B. Simmetriya o'qi atrofida 360° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.
- C. Molekula qicmlarining aylanishi.
- D. Molekula atoslarining aylanishi.

55. Simmetriya o'qining darajasi.

- A. Simmetriya o'qi atrofida 360° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.

B. Simmetriya o'qi atrofida 60° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.

C. Simmetriya o'qi atrofida 90° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.

D. Simmetriya o'qi atrofida 120° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.

56. Benzol molekulasida simmetriya o'qi darajasi.

- A. 6.
- B. 3.
- C. 4.
- D. 5.

57. Vodород peroksid molekulasida simmetriya o'qi darajasi.

- A. 2.
- B. 4.
- C. 6.
- D. 3.

58. Moddaning ichki energiyasi.

- A. Molekulaning ilgarilanma va aylanma, atomlarning tebranma, elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- B. Molekulaning ilgarilanma elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- C. Molekulaning aylanma, atomlarning tebranma ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.
- D. Molekula elektronlarning yadro bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladi.

59. YaMR – spektroskopiya orqali moddalarning aromatikligini aniqlash.

- A. Benzol xalqasi YaMR spektrida bitta pik beradi, chunki 6 ta vodород atomi ham ekvivalentdir.
- B. Benzol xalqasi YaMR spektrida bitta pik beradi, chunki 6 ta vodород atomi ham noekvivalentdir.
- C. Benzol xalqasi YaMR spektrida xar xil pik beradi, chunki 6 ta vodород atomi ham ekvivalentdir.
- D. Aromatik xalqasi YaMR spektrida pik beramaydi, chunki 6 ta vodород atomi ham ekvivalentdir.

60. Etan molekulasidagi (C – H) bog'idagi gibridlanish turi.

- A. $sp^3 - s$
- B. sp^2
- C. sp^3d
- D. $sp^2 - s$

61. Etilen molekulasidagi (C – H) bog`idagi gibridlanish turi.

- A. $sp^2 - s$
- B. $sp^3 - s$
- C. sp^2
- D. sp^3d

62. Asetilen molekulasidagi (C – H) bog`idagi gibridlanish turi.

- A. $sp - s$
- B. sp^3d
- C. sp^3
- D. sd

63. Etandagi (C – C) bog`idagi gibridlanish.

- A. $sp^3 - sp^3$
- B. sp^3d
- C. sp^3
- D. sp

64. Etilendagi (C – C) bog`idagi gibridlanish.

- A. $sp^2 - sp^2$
- B. $sp^3 - sp^3$
- C. $sp^3 - sd$
- D. $sp^3d - sp^3$

65. Asetilendagi (C – C) bog`idagi gibridlanish turi.

- A. $sp - sp$
- B. $sp^3 - sp^3$
- C. $sp - sp^3$
- D. $sp^2 - sp^3$

66. Izoelektrik strukturalar.

- A. Bir xil sondagi valent elektronlarga ega bo`lgan molekularlar.
- B. O`zgaruvchan valent elektronlarga ega bo`lgan molekularlar
- C. Har xil sondagi valent elektronlarga ega bo`lgan molekularlar
- D. Har xil elektronlarga ega bo`lgan molekularlar

67. $sp^3 - sp^3 - sp$ gibridlanish tartibida C – C bog` uzunligi qanday o`zgaradi.

- A. Kamayib boradi.
- B. Ortib boradi
- C. Ortib keyin kamayadi.
- D. O`zgarmaydi.

68. $sp^3 - sp^2 - sp$ gibridlanish tartibida C – C bog` energiyasi qanday o`zgaradi.

- A. Ortib boradi.

B. O`zgarmaydi.

C. Ortib keyin kamayadi.

D. Kamayib boradi.

69. Benzol molekulasidagi valent bog`lar orasidagi burchak.

- A. 120°
- B. 90°
- C. 180°
- D. $109^\circ 28'$

70. π -elektron zichligi.

A. Molekuladagi elektrofil va nukleofil zarracha hujumiga qulay atomlarni ko`rsatadi.

B. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o`ziga tortadi.

C. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo`ladi.

D. Molekulalarda toq sonli elektronlari bo`lgan elementlar kiradi.

71. Moddaning magnitlik xususiyati nimaga bog`liq?

A. Magnitlik xususiyat elektronlar joylashishi bilan bog`liq.

B. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o`ziga tortadi.

C. Bir xil sondagi valent elektronlarga ega bo`lgan molekularlar

D. Har xil sondagi valent elektronlarga ega bo`lgan molekularlar

72. Diamagnetik moddalar.

A. Molekuladagi atom yoki ionlarning magnit momenti nolga teng bo`ladi.

B. Magnitga tortiluvchi moddalar

C. Molekulalarda toq sonli elektronlari bo`lgan elementlar kiradi.

D. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo`ladi.

73. Paramagnetik moddalar.

A. Molekulalarda toq sonli elektronlari bo`lgan elementlar kiradi.

B. Molekuladagi atom yoki ionlarning magnit momenti nolga teng bo`ladi.

C. Magnitga totilmaydigan moddalar.

D. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo`ladi.

74. Molekulaning doimiy qutbliligi.

A. Molekulaning erkin holatdagi elektron siljishidan hosil bo`ladi.

B. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o`ziga tortadi.

C. Molekuladagi atomlarning o`zaro ta`siri natijasida vujudga keladigan elektron zichligining taqsimlanishi

D. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo`ladi.

75. Molekulaning dinamik qutblanishi.

A. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo`ladi.

B. Molekuladagi atomlarning o'zaro ta'siri natijasida vujudga keladigan elektron zichligining taqsimlanishi

C. Molekulaning erkin holatdagi elektron siljishidan hosil bo'ladi.

D. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

76. Induktiv effekt.

A. Molekuladagi atomlarning o'zaro ta'siri natijasida vujudga keladigan elektron zichligining taqsimlanishi.

B. Elektron siljish boshqa atom yoki molekula ta'sirida, reaksiya vaqtida vujudga keladi.

C. Molekulaning erkin holatdagi elektron siljishidan hosil bo'ladi.

D. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo'ladi.

77. Induktomer effekt.

A. Elektron siljish boshqa atom yoki molekula ta'sirida, reaksiya vaqtida vujudga keladi.

B. Molekulaning erkin holatdagi elektron siljishidan hosil bo'ladi.

C. Molekulaga ikkinchi bir zarracha yaqinlashganda hosil bo'ladi.

D. Molekuladagi atomlarning o'zaro ta'siri natijasida vujudga keladigan elektron zichligining taqsimlanishi.

78. Musbat induktiv effekt.

A. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

B. O'rinbosar o'zining umumlashmagan elektron juftini berib tutashishga qo'shilishi.

C. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

D. Molekuladagi qo'sh bog'larning oddiy bog' bilan tortishishi.

79. Manfiy induktiv effekt.

A. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

B. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

C. O'rinbosar o'zining umumlashmagan elektron juftini berib tutashishga qo'shilishi.

D. Molekuladagi qo'sh bog'larning oddiy bog' bilan tortishishi.

80. Mezomer yoki rezonans effekt.

A. Molekuladagi qo'sh bog'larning oddiy bog' bilan tortishishi.

B. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

C. O'rinbosar o'zining umumlashmagan elektron juftini berib tutashishga qo'shilishi.

D. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

81. Musbat mezomer effekt.

A. O'rinbosar o'zining umumlashmagan elektron juftini berib tutashishga qo'shilishi.

B. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

C. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

D. Molekuladagi qo'sh bog'larning oddiy bog' bilan tortishishi.

82. Manfiy mezomer effekt.

A. O'rinbosar tutashishda elektron juftini tortib oladi.

B. Molekuladagi qo'sh bog'larning oddiy bog' bilan tortishishi.

C. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

D. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

83. Delokallanish nima?

A. Umumlashgan yoki umumlashmagan elektron juftning ikki yoki bir necha bog' o'rtasida taqsimlanishi.

B. Atom va guruhlar elektron bulutini o'zidan uglerod atomiga siljitadi.

C. O'rinbosar tutashishda elektron juftini tortib oladi.

D. Atom yoki guruh elektron bulutlarni o'ziga tortadi.

84. Spektral analiz usullari ga asoslangan.

1. analiz qilinadigan modda yutadigan va chiqaradigan elektromagnit nurlanish intensivligini o'lchashga.

2. qo'rinish va yaqin ultrabinafsha sohasi spektrlarida moddaning elektromagnit nurlanishni yutilishini o'lchashga.

3. moddaning qaytish spektrlarini tadqiq etiga.

4. moddaning elektromagnit nurlanish bilan o'zaro ta'sirlashishiga.

85. Musbat mezomer effekt beruvchi o'rinbosarlar.

A. J, Br, Cl, F, NH₂, OR, OH

B. SO₂, SO₃H₂, NO₂, -COOH, -CN.

C. J, Br, OR, OH, SO₂, SO₃H₂, NO₂.

D. J, Br, OR, OH, SO₂, SO₃.

86. Manfiy mezomer effekt beruvchi o'rinbosarlar.

A. SO₂, SO₃H₂, NO₂, -COOH, -CN.

B. J, Br, Cl, F, NH₂, OR, OH

C. Br, Cl, F, OR, OH

D. J, Br, Cl, F, OR, OH

87. Deformatsion yoki induksion qutblanish.

- A. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish.
- B. Molekulaning biroz cho'zilishi.
- C. Molekulaning doimiy dipolini uzunligi ortib molekulaning biroz cho'zilishi.
- D. Qutbli molekulaning elektr maydini ta'sirida tartibli joylashishi

88. σ - bog'lar hosil bo'lishi.

- A. Elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.
- B. Yadro va elektronlarning siljishidan vujudga keladigan qutblanish
- C. Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.
- D. d-Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.

89. π - bog'ning hosil bo'lishi.

- A. Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.
- B. Elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.
- C. d-Orbitallarning qoplanishi yadrolarni birlashtiruvchi to'g'ri chiziqqa perpendikulyar yo'nalishda bo'ladi.
- D. s-Elektron orbitallar molekula hosil qilayotgan atom yadrolari bilan to'g'ri chiziq bo'yicha qoplanadi.

90. Metan molekulasi shakli va valent burchagi.

- A. Tetraedr, $109,28^\circ$
- B. Tetraedr, 90°
- C. Trigonal pramida, 120°
- D. Uchburchak, 120°

91. Molekulyar orbitallar metodi.

- A. Molekuladagi jami elektronlar harakat qiladigan sohaning shakli va energiyasini aniqlash.
- B. Atomlarning orbitallarda joylashishi.
- C. Atomlarning orbitallar shakli.
- D. Molekuladagi atom orbitallar soni.

92. Molekula konformatsiyasi.

- A. Molekula qismlarining oddiy bog' atrofida aylanishi.
- B. Simmetriya o'qi atrofida 360° aylantirilgandagi o'xshash nuqtalar soni.
- C. Molekula qismlarining aylanishi.

D. Molekula atoslarining aylanishi.

93. Elektronlarning zaryad zichligi.

- A. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi.
- B. Atom yoki molekulaning muayyan nuqtasidagi elektron zaryad miqdori.
- C. Atomning o'z valentliklaridan tola foydalanilgan yoki foydalanilmaganini ko'rsatadi.
- D. Ion boglanishlar soni.

94. Atomdagi effektiv zaryad

- A. Atom yoki molekulaning muayyan nuqtasidagi elektron zaryad miqdori.
- B. Kompleks birikmalar.
- C. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi.
- D. Ion boglanishlar soni.

95. Erkin valentlik indeksi.

- A. Atomning o'z valentliklaridan tola foydalanilgan yoki foydalanilmaganini ko'rsatadi.
- B. Kompleks birikmalar.
- C. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi
- D. Atom yoki molekulaning muayyan nuqtasidagi elektron zaryad miqdori

96. Kovalentlik nima?

- A. Bog' hosil qilishda element bergan elektronlar soni.
- B. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi
- C. Ion boglanishlar soni.
- D. Atomlarning koordinatsion soni

97. Koordinatsion bog' hosil qiluvchi birikmalar

- A. Kompleks birikmalar.
- B. Ionli birikmalar
- C. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi
- D. Oddiy moddalar.

98. Simmetrik molekulalardagi Van-der-Vaals kuchlari.

- A. Dispersion kuchlar hissasiga to'g'ri keladi
- B. Kompleks birikmalar

- C. Valent bog'lar nazariyasi va molekulyar orbitallar metodi
D. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi

99. Kimyoviy bog'ning kvant nazariyasi.

- A. Valent bog'lar nazariyasi va molekulyar orbitallar metodi.
B. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi
C. Dispersion kuchlar hissasiga to'g'ri keladi
D. Kompleks birikmalar

100. Molekulyar parametrlar.

- A. Molekuladagi σ va π -elektronlar zichligi taqsimlanishi, bog' tartibi, erkin valentlik indeksi, qutblanuvchanlik.
B. Valent bog'lar nazariyasi va molekulyar orbitallar metodi
C. Dispersion kuchlar hissasiga to'g'ri keladi
D. Atom atrofidagi manfiy zaryad miqdori bilan yadro zaryadlari yig'indisi.

101. Atom-absorbsion analiz asoslangan.

- A. yutilish spektrlarini tadqiq etishga
B. chiqarish spektrlarini tadqiq etishga
C. katodi metallardan yasalgan maxsus lampani qo'llashga
D. alanga yordamida moddani amorf holatga o'tkazish talab etilmaydi

102. Atom-absorbsion analiz analizi uchun qo'llaniladi.

- A. engil metallar
B. og'ir metallar
C. faol metallar
D. passiv metallmaslar

103. Atom-emission analiz asoslangan.

- A. chiqarish spektrlarini tadqiq etishga
B. yutilish spektrlarini tadqiq etishga
C. katodi metallardan yasalgan maxsus lampani qo'llashga
D. alanga yordamida moddani amorf holatga o'tkazish talab etilmaydi

104. Alangali fotometriya -

- A. atom-absorbsion analiz turi
B. atom-emission analiz turi.
C. faol metallar analizida qo'llaniladi.
D. metallmaslar analizida qo'llaniladi.

105. Molekulyar spektroskopiya asoslangan.

- A. molekulaning yutilish spektrini olish va uni analiziga
B. molekulaning chiqarish spektrini olish va uni analiziga

- C. molekula tomonidan radio- va mikroto'lqin nurlanishlarni yutilish spektrlarini analiziga
D. molekula emissiya spektrlarini analiziga

106. Fotoelektrokolorimetrik analiz ...

- A. monoxromatografik nurlanishni qo'llashni talab etadi.
B. moddaning ko'rinish nurlanishi ta'sirida oksidlanishi yoki qaytarilish xossasiga asoslangan.
C. analiz qilinadigan moddani rangli holatda olinishi talab qilinadi.
D. tiniqmas va o'tarangli eritmalar konsentratsiyasini aniqlashga imkon beradi.

107. UB - spektroskopiya...

- A. valent elektronlar o'tishini tekshiradi.
B. molekular tomonidan UB - nurlanishni yutilishiga asoslangan.
C. molekular tomonidan UB - nurlanishni chiqarilishiga asoslangan.
D. atomlarning UB - nurlanish bilan ta'sirlanishiga asoslangan.

108. IQ - spektroskopiya...

- A. molekular tomonidan IQ - nurlanishni yutilishiga asoslangan.
B. molekulyar tebranishlarni tadqiq etishni nazarda tutadi.
C. H_2 , N_2 , O_2 molekularlarini tekshirishga imkon beradi.
D. elektromagnit nurlanishning ko'rinish sohasini qo'llaydi.

109. Refraktometriya asoslangan.

- A. sindirish ko'rsatkichini aniqlashga
B. qutblangan yorug'lik aylanish burchagini o'lchashga
C. magnit maydonida zarrachalar chetlanishini o'lchashga
D. atomlar yadrolarining magnit maydoni bilan tasirlanishiga

110. YAMR usuli ...

- A. atomlar yadrolarining magnit maydoni bilan tasirlanishiga asoslangan.
B. modda analizi uchun yadrosida juftlashmagan protonlari bo'lgan atomlar qo'llaniladi.
C. Moddalarning optik faolligini o'lchashga imkon beradi.
D. YAMR jarayonida modda lyuminessensiyasi spektrlarini analiz qilishga asoslangan.

111. EPR - spektroskopiyasi ...

- A. juftlashmagan elektronlari bo'lgan molekular strukturasi va moddalar konsentratsiyasini aniqlashga imkon beradi.
B. tashqi elektronlarning o'zgaruvchan magnit maydoni bilan ta'sirlanishiga asoslangan.

C. rentgen nurlari oqimida joylashtirilgan atomlarning magnit rezonansini qo'llaydi

D. atomlar yadrolari rezonansi hodisasiga asoslangan.

112. Lyuminessensiya...

A. fosforessensiyaning bir ko'rinishi.

B. UB-nurlar ta'sirida yoritilish xossasini namoyon qiladigan moddalar analizi uchun qo'llaniladi.

C. analiz qilinadigan moddalarning nurlarni yutilish intensivligini aniqlash uchun qo'llaniladi.

D. yuqori chastotali magnit maydonida joylashtirilgan moddalar konsentratsiyasini aniqlashga imkon beradi.

I-1. Ba'zi fundamental fizik kattaliklar

Absolyut nol temperatura	$t = -273,15^{\circ}\text{C}$
Massaning atom birligi	$1 \text{ m.a.b.} = 1,6605655 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Gravitatsion doimiy	$G = 6,672 \cdot 10^{-11} \text{ H.m}^2/\text{kg}^2$
α -zarracha zaryadi	$q = 2e = 3,204 \cdot 10^{-19} \text{ Kl}$
Elektronning kompton to'lqin uzunligi	$\lambda_c = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
Magnit doimiysi	$\mu_0 = 12,5663706144 \cdot 10^{-7} \text{ Gn/m}$
Protonning magnit momenti	$\mu_p = 1,4106171 \cdot 10^{-26} \text{ j/Tl}$
Elektronning magnit momenti	$\mu_e = 9,28483 \cdot 10^{-24} \text{ j/Tl}$
α -zarracha massasi	$m_\alpha = 6,644 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Neytronning tinch turgandagi massasi	$m_n = 1,6749543 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Protonning tinch turgandagi massasi	$m_p = 1,6726485 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronning tinch turgandagi massasi	$m_e = 9,109534 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ridberg doimiysi	$R_n = 1,097 \cdot 10^7 \text{ 1/m}$
N.sh.da 1 mol ideal gaz hajmi	$V_0 = 22,41383 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol}$
Erkin tushish tezlanishi	$g = 9,81 \text{ m/s}^2$
Normal sharoit: atmosfera bosimi	$p_0 = 101325 \text{ N/m}^2$
Temperatura	$T = 273 \text{ K}$
Avogadro doimiysi	$N_A = 6,022045 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Bolsman doimiysi	$k = 1,380662 \cdot 10^{-23} \text{ j/K}$
Vin doimiysi	$b = 2,90 \cdot 10^{-3} \text{ m.K}$
Plank doimiysi	$h = 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$
Stefan-Bolsman doimiysi	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/(m}^2\text{K}^4)$
Faradeya doimiysi	$F = 96,48456 \cdot 10^3 \text{ Kl/mol}$

C. rentgen nurlari oqimida joylashtirilgan atomlarning magnit rezonansini qo'llaydi

D. atomlar yadrolari rezonansi hodisasiga asoslangan.

112. Lyuminessensiya...

A. fosforessensiyaning bir ko'rinishi.

B. UB-nurlar ta'sirida yoritilish xossasini namoyon qiladigan moddalar analizi uchun qo'llaniladi.

C. analiz qilinadigan moddalarning nurlarni yutilish intensivligini aniqlash uchun qo'llaniladi.

D. yuqori chastotali magnit maydonida joylashtirilgan moddalar konsentratsiyasini aniqlashga imkon beradi.

I-1. Ba'zi fundamental fizik kattaliklar

Absolyut nol temperatura	$t = -273,15^{\circ}\text{C}$
Massaning atom birligi	$1 \text{ m.a.b.} = 1,6605655 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Gravitatsion doimiy	$G = 6,672 \cdot 10^{-11} \text{ H.m}^2/\text{kg}^2$
α -zarracha zaryadi	$q = 2e = 3,204 \cdot 10^{-19} \text{ Kl}$
Elektronning kompton to'lqin uzunligi	$\lambda_c = 2,43 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
Magnit doimiysi	$\mu_0 = 12,5663706144 \cdot 10^{-7} \text{ Gn/m}$
Protonning magnit momenti	$\mu_p = 1,4106171 \cdot 10^{-26} \text{ j/Tl}$
Elektronning magnit momenti	$\mu_e = 9,28483 \cdot 10^{-24} \text{ j/Tl}$
α -zarracha massasi	$m_\alpha = 6,644 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Neytronning tinch turgandagi massasi	$m_n = 1,6749543 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Protonning tinch turgandagi massasi	$m_p = 1,6726485 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Elektronning tinch turgandagi massasi	$m_e = 9,109534 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
Ridberg doimiysi	$R_n = 1,097 \cdot 10^7 \text{ 1/m}$
N.sh.da 1 mol ideal gaz hajmi	$V_0 = 22,41383 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol}$
Erkin tushish tezlanishi	$g = 9,81 \text{ m/s}^2$
Normal sharoit: atmosfera bosimi	$p_0 = 101325 \text{ N/m}^2$
Temperatura	$T = 273 \text{ K}$
Avogadro doimiysi	$N_A = 6,022045 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
Bolsman doimiysi	$k = 1,380662 \cdot 10^{-23} \text{ j/K}$
Vin doimiysi	$b = 2,90 \cdot 10^{-3} \text{ m.K}$
Plank doimiysi	$h = 6,626176 \cdot 10^{-34} \text{ j.s}$
Stefan-Bolsman doimiysi	$\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ Vt}/(\text{m}^2 \cdot \text{K}^4)$
Faradeya doimiysi	$F = 96,48456 \cdot 10^3 \text{ Kl/mol}$

Vakuumda yorug'lik tezligi	$c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$
Universal gaz doimiysi	$R = 8,31441 \text{ j/(mol} \cdot \text{K)}$
Elementar zaryad	$e = 1,6021892 \cdot 10^{-19} \text{ Kl}$
Elektronning solishtirma zaryadi	$e/m = 1,76 \cdot 10^{11} \text{ Kl/kg}$
Elektrik doimiy	$\epsilon_0 = 8,85418783 \cdot 10^{-12} \text{ F/m}$
Elektron-volt	$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ j}$
Suvning solishtirma issiqlik sig'imi	$C = 4,19 \cdot 10^3 \text{ j/(kg} \cdot \text{K)}$
Muzning solishtirma erish issiqligi	$\lambda = 333,7 \cdot 10^3 \text{ j/kg}$
Suvning parlanish solishtirima issiqligi	$r = 2,256 \cdot 10^6 \text{ Dj/kg}$

1-2. Molekula xarakteristikalarini HyperChem dasturida hisoblash

Ishning maqsadi; *Hyper Chem* dasturi yordamida molekulaning singlet holatida *MM+* malekulyar mexanik usulida hamda *MNDO* usulida yarimempirik kvant-kimyoviy hisoblashlarni o'tkazish va olingan natijalarning kimyoviy nuqtai nazaridan tahlili.

Ishning bajarilish tartibi.

1. Hyper Chem dasturini ishga tushurish.

Buning uchun "ПУСК" bosilib, menyudan HyperChem Professional papkasi ochladi va undan HyperChem Professional fayli ishga tushiriladi.

2. Berilgan ko'p atomli molekulani yasash.

Buning uchun dasturning ishchi oynasiga o'qituvchi tomonidan taklif etilgan geteroseklik molekula atomlarini quyidagi qoidaga rioya etgan holda joylashtiring. Oldin uglerod atomlari (aromatik halqa, aramatik zanjirlar) undan keyin esa navbati bilan boshqa guruh atomlari (vodorod atomlaridan tashqari) qo'yiladi. Atomlar oynaga soat strelkasi bo'yicha kiritiladi. Atomlarning nomerlanishi kampiyuter tomonidan avtomatik ravishda bajariladi. Molekula tuzulishini dastur oynasiga kiritishni osonlashtirish uchun uni redin qog'oziga chizib ko'ring.

Hyuper Chem dasturining grafik qobiq vositasida molekulani yasash oldingi ishlarda keltirilgan.

3. Vodorod atomlarini qo'shish va molekula boshlang'ich geometriyasini model tuzuvchi yordamida maqbullashtirish.

Tuzulgan model avtomatik ravishda vodorod atomlari qo'shilishi bilan elementlarning valentligi va atomlar o'rtasidagi o'rnatilgan bog' tartibiga mos ravishda qayta tuzuladi. Chizmaning noto'g'ri bajarilganligini va molekula geometriyasini nisbatan to'g'ri tuzush hamda atomlararo masofa va valent bog'larini to'g'irlash uchun *Build* menyusidan *Add& Model* build buyrug'ni tanlanadi. Bunda ikki o'lchamli sxema uch o'lchamli aylantirilishi mumkin. Agar Vodorod atomlari oynada aks ettirilmasa, u holda *Display* menyusidan *Show hydrogens* ontsiyasini bekor qilish kerak.

Hyuper Chem dasturidagi natijalarini *.hin kengaytmasi bilan alohida nomda (masalan, netrobenzol.hin) saqlang.

4. Hisob protokolining (bayonnomasi) log faylini ishga tushurish.

File menyusidan *Star Log Hu* tanlang. Faylga nom beriladi va molikulyar mexanik hisoblash bayonnomasini yozishning to'liqlik darajasi *Mechanics print level=9* o'rnatiladi.

5. Molekulani hisoblash.

Birinchi usul: Molekulyar-mexanika usulida molekula geometriyasini maqbullashtirish.

Setup minyusidan molekulyar-mexanika usuli (*MM+*)(*Molecular Mechanics*) tanlanadi; ranlangan tuynukchaga *MM+* o'rnatiladi. Geometriyani maqbullashtirish jarayoni *Compute* menyusidan *Geometry Optimizaton* orqali ishga tushuriladi.

Maqbullashtirish jarayoni tugaganda dastur ishchi oynasining pastki qatorida "*Converged=YES*" yozuvi paydo bo'ladi va yuqori yo'qoladi.

Har qanday hisoblashlar tanlangan usulda bajarilib bo'lganidan keyin va yangi hisoblashlarga kirishishdan oldin olingan natijalar fizik-kimyoviy nuqtai nazardan interpretatsiya qilinadi.

6. Molekulyar mexanik usulda hisoblash natijalarining interpretatsiyasi

6.1. Molekula tuzilishining tahlili

Molekulyar koordinatalarni hisoblash (bog' uzunligi, istalgan atomlar orasidagi masofa, valent va qirra burchaklari). Molekula geometriyasini kvant-kimyoviy *MNDO* yarimempirik usulda maqbullashtirishga kirishishdan oldin molekulaning geometrik xarakteristikalarini (bog' uzunligi va valent burchagi), *MM+* molekulyar mexanika usuli yordamida amalga oshirish davomida aniqlab borish maqsadga muvofiq.

Hyuper Chemda geometriya molekulasini o'lchash [] da yozilgan. Sizga berilgan birikma uchun 3ta atomlararo masofa va 3 ta valent burchagini belgilab oling. Barcha aniqlangan bog' uzunligi

($^{\circ}A^{\circ}$, da) va valent burchagi (grad) bo'yicha ma'lumotlarni holat qatoridan olib umumiy jadvalga solishtirish uchun yozing.

Molekula geometryasi bo'yicha *MM+*, *MNDO* usullari yordamida xissoblangan natijalarni tajriba natijalari (kimyoviy sxemalar yoki Internetdan olingan) bilan solishtiring. Olib borilgan xissoblashlarning aniqligi haqida xulosa chiqaring.

1-jadval

Nitrobenzol molekulasining jadval tuzilishi

O'lchanadigan xarakteristika	MM+ hisoblash	MNDO hisoblash	Tajriba
02-N1	1,177	1,212	1,229
C ₅ -C ₇	1,343	1,405	1,385
C ₆ -H ₁₁	1,103	1,091	1,095
C ₄ -C ₅ -C ₆	118,2	119,27	118,1
C ₅ -C ₆ -C ₇	121,0	120,46	120,3
01-N2-03	117,5	120,09	123,2

Jadvaldagi malumotlardan qayd etish mumkinki, *MNDO* usulida hisoblash aniqligi bog' uzunligi uchun $\sim 0,04A^{\circ}$ ni, valent burchagi uchun esa $\sim 3-4^{\circ}$ ni tashkil etadi.

Olingan manzarani molekulaning ko'rinishi bilan *Edit* menyusidagi *Cope image (F9)* qo'llab nusxasini oling. Olingan tasvir nusxasi buferiga joylashtiriladi. Uni har qanday matnli yoki grafik muxarrir (*redactor*)ga olib qo'yish mumkin. Nusxasi olingan tasvirni mos nom bilan (masalan netrobenzol) o'zingizning ishchi papkangizda saqlang.

Molekuladagi elementlar va ularning nomerlarini ishchi oynada ko'rish uchun *Display* menyusidan *Labels* keyin esa *Number* yoki *Symbop* tanlanadi.

Molekulani uch o'lchamli fazoda ifodalash uchun *Display* menyusidan *Rendering* parametri tanlanadi.

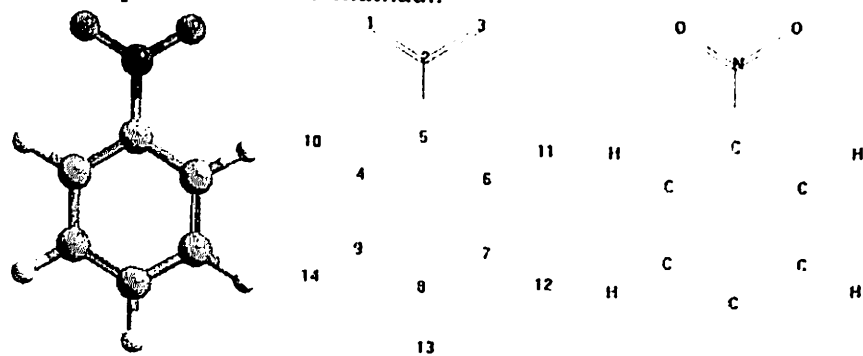
7. log faylni yopish.

File menyusidan *Stop Log* ni tanlang. Shu bilan *MM+* usuli uchun interpretatsiya tugaydi va shuning uchun *MNDO* usulida hisoblashga o'tish mumkun.

Hisoblash natjalarini *.hit kengaytmasida alohida nom bilan (masalan, *nitrobenzol-MM+.hit*) ishchi papkangizda saqlang.

Hisoblash pratakoli *log-faylni* ishga tushuring.

File menyusidan *Start Log* tanlanadi. Faylga nom beriladi va kvant-kimyoviy hisoblashlar pratakolini yozishning to'liq darajasi *Quantum print level=9* o'rnatiladi.



Rendering - Balls va Cylinders molekulaning umumiy ko'rinishi

Atomlari nomerlangan molekulaning umumiy ko'rinishi

Atomlari bilgilar qo'yilgan molekulaning umumiy ko'rinishi

1-rasm. Nitrobenzol misolida molekulaning ko'rinishi

8. Molekulani hisoblash

Ikkinchi usul: Molekula geometriyasini maqbullashtirish va electron tuzulishini *MNDO* yarimempirik usulda hisoblash.

Setup menyusidan *Semi-empirical* tanlanadi; oynaga *MNDO* o'rnatiladi (III va undan yuqori davr elementlari uchun *MNDO* o'rnatiladi). Zarur bo'lganda *Options* tugmasi yordamida mos ravishda zaryad asosiy (*Lowest*) yoki birinch uyg'onish holati (*Next Lovest*) o'rnatiladi.

Compute menyusidan *Geometry Optimizotion* buyrug'i tanlanib geometriyani maqbullashtirish ishga tushiriladi. Oynaning pastida *Conv= YES* yozuvi paydo bo'lishi bilan hisoblash jarayoni tugaydi va yuqori bilakirovkasi yo'qoladi.

9. Yarimeperik usulda hisoblash natijalarining interpretatsiyasi

9.1 Molekula tuzilishining tahlili

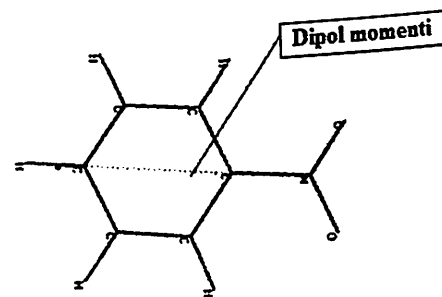
Molikuliyar koordinatalarni hisoblash (bog' uzunligi, istalgan atomlar orasidagi masofa, valent va karralar burchaklari).

Molekulaning geometrik parametirlari bilan javobni to'ldirishni davom ettiring.

Keyingi intirpretatsiya (9.2-9.10 bandlar) faqat *MNDO* usuli uchun bajariladi. Chunki bu bandlar elektiron tuzilishiga taaluqli.

9.2 Dipol momentini hisoblash va uning vektori yo'nalishini ifodalash.

Display menyusidan *Show dipole moment* tanlanib, dipol momenti vektorining ifodalanishi qo'shiladi. Agar ushbu buyruq bajarilmasa (seriy rang) uholda qaytadan molekulani hisoblashga buyruq beriladi. (*Compiute menyusidan Single Point*). Dipol momenti modulining qiymatlari *log-faylda* keltiriladi.



log-fayli fragmentidan misol

	x	y	z	Total
Dipole (Debyes)				4.764
Point-Chg.	4.134	-2.368	-0.000	0.483
sp Hybrid	0.419	-0.240	-0.000	0.000
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	5.247
Sum	4.553	-2.608	-0.000	

Barcha qiymatlar Debay (D) birligida berilgan

2-rasm. Dipol momentini hisoblashga doir misollar

Dipol moment yo'nalishini yaqiroq qarash uchun molikulani aylantirish instrumenti yordamida aylantirish yoki ko'rish masshtabini kattalashtirish lozim.

Keyingi topshiriqlarni bajarish uchun *Edit=Copy imoge(F9)* foydalanib xossa grafik ifodasi yoki molekula parametrlarini mos nom bilan ishchi papkada saqlash uchun nusxa olinadi.

9.3 Eruvchanlikni baholash.

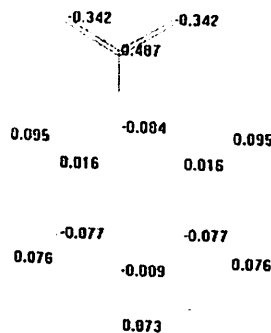
Eruvchanlikni baholash molekula elektrik dipol momentini ma'lum erituvchilarning dipol momentlari (masalan, $MCH_2O=1,83D$, $M(CH_3OH)=1,69D$ bilan solishtirish orqali amalga oshiriladi.

Dipol momentlarining yaqinligiga qarab moddaning qutubli yoki qutubsiz erituvchilarda erishi haqida xulosa qilinadi.

Nitrobenzolni eruvchanligini baholashga misol Nitrobenzol dipol momentining qiymati 5,25 D. Demak berilgan modda kuchli qutubli erituvchilarda eriydi yoki o'zi erituvchidir. Chunki molekula katta dipol momentiga ega yani boshqa misol sifatida $CClF_3$ molekulasiga qaraladigan bo'lsa uning elektirik dipol mjmenti 0,27 D gateng. Demak molekula mos ravishda kuchsiz qutubli erituvchilarda eriydi.

9.4 Atomlarning samarali zaryadlari, elektirostatik potinsial xaritasi va to'liq zaryadlar zichliklarini hisoblash.

Atomlarning samarali zaryadlarini ekrandagi tasvirini chiqarish uchun *Display* menyusidan *Labels* va keyin esa *Change* buyruqlari tanlanadi.



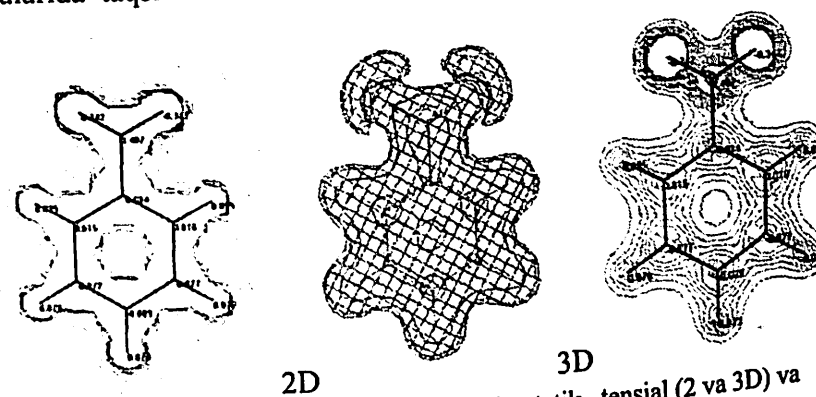
3-rasm. Nitrobenzol molekulasida tashkil etuvchi atomlarning samarali zaryadi

Atomjar atrofida zaryadlarning kuzatilgan taqsimlanish benzolidagi Vodorodning aktseptor o'rinbosarga almashgandan keying ta'sirini ko'rsatadi.

Elektostatik potinsial taqsimotining tuzulishi va toqlashmagan elektron juftlarini ko'rish.

Buning uchun *Compute* menyusidan *Plot Molecular graphs* tanlanadi. Oynada *Electrostatic potential* tanlanadi va ifodalash usuli *3D* yoki *2D* o'rnatiladi.

Keltirilgan rasm eliktrostatik potinsialning musbat va manfiy sohalarida taqsimlanishini ko'rsatadi.



4-rasm. Nitrobenzol molekulasida elektirostatik tensial (2 va 3D) va zaryadning to'liq zichligini rasmiylashtirishga misol

Eliktirostatik potinsialning musbat zaryadi yashil rang bilan ifodalanadi. Kislarod atomidagi tenglashmagan elektron jufti soxasida elektostatik potinsial manfiy. U serin rangida ifodalanadi. Bu esa, masalan, molekulaning erituvchi bilan o'zaro ta'siri hamda fikirlash imkoniyatini beradi. Ma'lumki kationlar manfiy anionlar esa musbat potinsial sohasiga intiladi. Masalan anilin ($C_6H_5NH_2$) va nitroanilin ($NH_2-C_6H_4-NO_2$) solishtirilganida birinchi holatda azotda toqlashmagan elektron jufti ko'rinadi, nitroanilin holatida esa electron juftining xalqa ichiga nisbatan tortilgan bo'ladi. Shundan keyin *Compute* menyusidan yana bir marta *Plot Molecular graphs* tanlanadi. Muloqot oynasida *Total Charge density* va ifodalash usuli *2D* yoki *3D* o'rnatiladi.

Oynadagi tasvir mos nom bilan ishchi papkada saqlanadi.

Molekulyar potentsiallar taqsimoti rejimidan chiqish uchun sichqonchani o'ng tugmasi bo'sh joyga bosiladi.

9.5 Energetik sathlar diagrammalarini tuzush, yuqori band (YUBMO) va quyi bo'sh (QVMO) malikulyar orbitalarini grafik ifodalash.

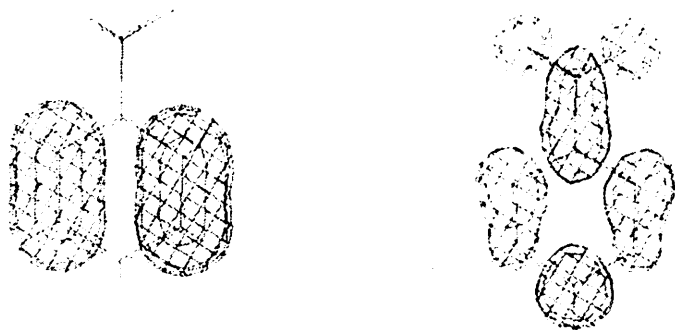
Energetik diagrammani olish uchun *Compute* menyusidan *Orbitals* tanlanadi.

Empirikmas (*ab initio*) hisoblashlardan farqli o'laroq bunda barcha elektron tizimlar hisobga olinadi, yarimempirik usullarda (masalan, *MNDO*) valent yaqinlashuvi qo'llaniladi. Masalan F atomini ifodalashda 9 ta elektronidan faqat 7 tasi hisobga olinadi. Nitrobenzoldagi N, O va C atomlari uchun *MNDO* usulida hisoblanganda 1s elektronlar hisobga olinadi.

To'lgan orbitalar nafaqat rang (to'lganlari yashil bo'shlari sariq) bilan balki *Labels* (ν) belgisini qo'yishi bilan ham ajratiladi.

Olingan molekulyar orbitalarning grafik ifodasini olish uchun oynada *Orbitals* buyrug'idan MO ning kerakli nomeri (*Number*) tanlanadi. Bunda energetik daraja qizil rangga kiradi. Shundan keyin tasvirning *2D* yoki *3D* oynasi o'rnatiladi, *Plot* va *OK* bosiladi.

YuBMO energiyasi (№23) = -10,312 eB QVMO energiyasi (№24) = -1,221 eB.



5-rasm Nitrobenzol MO xarakteristikasi va 2D fazodagi chegaralari

YUTMO va *QTMO* da AO ning ulushlari (Nitrobenzol uchun *Eigenvectors* va *Eigenvalues*(*ev*) seksiya fragmentlari) qiymatlari no'lga bo'lmaganlari berilgan (jadvalning haqiqiy o'lchami ancha katta).

Mol Orbital			23VZMO	24 NBMO
Eigenvalue			-10.312	-1.221
Tip orbitali	Atom	Nomer		
Pz	N	2	-0.00000	-0.30188
Pz	O	1	-0.00134	0.21777
Pz	O	3	0.00128	0.21781
Pz	C	4	0.49900	0.36765
Pz	C	5	0.00010	-0.46746
Pz	C	6	-0.49892	0.36775
Pz	C	7	-0.50111	0.18258
Pz	C	8	-0.00013	-0.50831

Atom orbitalarida koeffitsientlarning musbat qiymatlari MO da bog'lovchi ulushni manfiy qiymatlari esa bo'shashtiruvchi ulushni beradi.

9.7. Malikulaning nukleofil va elektrofil (donor-akseptor) xossalarini aniqlash

Ushbuni tanlash *QVMO* energiyasining qiymati bo'yicha amalga oshiriladi: Agar ishora "+" bo'lsa- molekula nukleofil; ishora "-" bo'lsa, eliktirofil.

Nitrobenzol molekulasi nukleofil va elektrofil xossalarini aniqlash misolida tushuntiramiz.

QVMO energiyasi = -1,221 ekv

KMBO energiyasi manfiy, mos ravishda nitrobenzol- eliktirofil. Kimyoviy reaksiyalarda nukleofil elektronni bajonidil beradi, elektrofil esa bajonidil qabul qiladi. Agar *QVMO* da elitron enirgiyasi musbat bo'lsa, bu degani bu joyda eliktironning bo'lishi energetik jihatdan foydasiz, ya'ni uyg'otilishidan unga tushgan energiya molekulani tark etishi mumkin. Shunday qilib, $E_{QVMO} < 0$ da molekula eliktironlarband bo'lmagan orbitaliga tushgan "begona" electron unda qoladi. Chunki bu energetik jihatdan qulay, ya'ni molekula eliktironlar

donori bo'ladi. Shuning uchun ham ikki molekuladan kompleks hosil bo'lishida birinchi molekuladan ikkinchi molekulaga o'tkazilishining yetarli shartidir.

$$E_{QVMO} 1 > 0, E_{QVMO} 2 < 0$$

9.8. Molekulaning qattiqligi va yumshoqligini aniqlash

Molekulaning uyg'onish potentsiali quyidagi formula bilan aniqlanadi.

$$\Delta E = E_{QVMO} - E_{YUBMO}$$

Molekulaning qattiqligi quyidagi formula bilan hisoblanadi:

$$\eta = (E_{QVMO} - E_{YUBMO})/2.$$

Molekulaning yumshoqligi uning qattoqligi bilan quyidagi nisbat orqali bog'langan:

$$S = 1/(2\eta), \text{ ya'ni } S = 1/(E_{QVMO} - E_{YUBMO}).$$

Agar *YUBMO* bilan *QVMO* o'rtasidagi energetik tirqish 1 ekv dan oshsa reagent qattiq, agar *YUBMO* bilan *QVMO* o'rtasidagi energetik tirqish 1 ekv dan kichik bo'lsa reagent yumshoq hisoblanadi.

Nitrobenzol molekulasi qattiqligi yoki yumshoqligini aniqlash.

Nitrobenzol molekulasida *YUBMO* va *QVMO* lar holatlari orasidagi farq > 1 ekv shuning uchun xam nitrobenzol molekulasida qattiq elektrofildir.

Molekula qattiqligining miqdoriy qiymati.

$$\eta = (E_{QVMO} - E_{YUBMO})/2 = (-1,221 + 10,312)/2 = 4,545 \text{ eB.}$$

9.9. Molekulaning reaksiyon markazlari holatini hisoblash

Qattiq reagentlardagi asosi reaksiyon markazlarning holatlari taxminan atomlardagi zaryadlar bilan aniqlanadi. Buning uchun Malliken bo'yicha tekshirilayotgan molekula atomlarida zaryadlar taqsimoti keltirilishi lozim. Zaryadlar kattaligi va ishoralari asosida kimyoviy reaksiyada hujum qilinadigan yo'nalishning eng kata ehtimoli haqida xulosa qilinadi.

Yumshoq reagentlarda reaksiyon markazlarning holati elektiron zichliklar chegarasidan aniqlanadi. A atomdagi elektiron zichlik chegarasi quyidagi formula bilan hisoblanadi.

$$f_A = 2 \sum_{\mu \in A} c_{i\mu}^2 \quad (1)$$

bunda $C_{i\mu}$ - A atomda markazlashgan AO bo'yicha *MO* nukleofilda *YUBMO* yoki elektrofilda (*QVMO*) ning chegaraviy bo'lishi koeffitsientlari.

f_A kattaligini hisoblash va ular asosida eng ehtimoli katta bo'lgan hujum yo'nalishi haqida xulosaga kelish mumkin.

Muqobil reaksiyon markazga reagent hujumining yo'nalishini baholash uchun ulardagi zaryad kattaligi (zaryad nazorati), *YUBMO* yoki *QVMO* dagi (orbital nazorati) AO koeffitsientlarining kattaligi va ishoralaridan foydalaniladi.

Reaksiyon markaz holatini aniqlashga misol.

Qattiq reagent sifatida nitrobenzol molekulasi reaksiyon qobiliyati atomlardagi zaryadlar bilan aniqlanadi.

Atomlardan maksimal zaryadlarning taqsimlanishi quyidagicha:

O3	-0,342
O2	-0,342
N1	0,487

Maksimal manfiy zaryad kislarod atomlarida.

Xulosa: kislarod atomlari elektrofil hujumining eng ehtimoli markazlari.

Turli moddalarning reaksiyon qobiliyatlarini solishtirish uchun chegaraviy orbitallar energiyalarining E_{YUBMO} va E_{QVMO} qiymatlari va ishoralarini bilish juda muhim. Qator aromatik va geterosiklik birikmalarda nukleofil va elektofil almashinish reaksiyalarida zaryad nazorati qo'llaniladi.

9.10. Tanlangan molekula spektrini modellashtirish va eng ravshan tebranishning xarakteristikalarini aniqlash.

Strukturasi *MM+*, *MNDO* usullarida tekshirilganidan keyin tekshirilayotgan molekuladagi atomlarning tebranishlari atomlarning koordinatalaridan foydalanib hisoblanadi.

Tebranish spektrini hisoblash *Compute* menyusidan *Vibration, Rotation HU* tanlash orqali amalga oshiriladi. Hisoblash oynaning

quyi qismida *Calculating Vibrational Spectrum...* yoki 100 % yozuvi paydo bo'lishi bilan tugaydi

Tanlangan tebranish spektrini hisoblash vaqti elektiron struktura va muvozanatdagi geometriyani aniqlash kabi molekula tuzulishining murakkabligiga bog'liq.

Tanlangan spektrni modellashtirish natijalarini ko'rish *Compute* menyusidan *Vibrationpal Spectrum HU* tanlash orqali amalga oshiriladi. Keyin *Vibrationpal Spectrum* oynasida 3-4 ta eng yorqin normal tebranishlarni tanlang va faol chiziqning nomeri, va chastotasi va yorqinligini qayd eting.

Chastota (sm da) qiymati *log-fayl* final qismida keltiriladi (misolga qo'shing va *Apply* tugmasini bosing. *Menyudagi Cancel* buyrug'ini biln tebranish to'xtatiladi.

Barcha chastotalar musbatmi?

Manfiy chastotali tebranishlarni tashkil etadi.

Nitrobenzol uchun model IQ-spektiriga misol (log-fayldan fragment)

===== IR Spectrum =====

31 Normal Mode Frequency 1827.60 cm⁻¹ Intensity 285.13387

...

28 Normal Mode Frequency 1605.93 Intensity 221.70650

...

11 Normal Mode Frequency 726.64 cm⁻¹ Intensity 102.257

...

Daslabki ikkita qiymat NO va CN bog'larning valent tebranishlariga, uchinchi guruhi esa molekulaning deformatsion tebranishiga taaluqli.

9.11. Molekulaning energetik xarakteristikalarini log-fayldan qo'shimcha keltirish.

Nitrobenzol uchun misol

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -35381.2387025 (kcal/mol)

Binding Energy = -1503.6380795 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -33877.6006230 (kcal/mol)

Electronic Energy = -150210.5977513 (kcal/mol)

Core-Core Interaction = 114829.3590488 (kcal/mol)
Heat of Formation = 14.3299205 (kcal/mol)
Gradient = 0.0952986 (kcal/mol/Ang)

Log-faylni yopish

10.log-faylni yopish.

File menyusidan *Stop Log HU* tanlang.

Natijalarni *Hypen Chem* programmaning *hin-faylida* ishchi papkada alohida nom (masalan, *netobenzol - MNDO. Hin*) bilan saqlang.

11.Hisobotni *Word* yoki *OpenOffice r* muharririda tayyorlash.

Yuqorida ko'rsatilgan misolga o'xshab, *MM+* va *MNDO* usullarida quyida keltirilganlarning biri uchun molekula geometrik, elektiron tuzulishi, spektral xarakteristikalarini va reaksiyon qobilyatlarini hisoblang.

I-3.Molekula dipol momentini hisoblash

Ishning maqsadi. Molekulada zard taqsimotni nisbatan aniq hisoblovchi poluempirik hisobusulini tanlash.

Ishni bajarishga kirishish uchun nazorat savollari.

1. Kavnt-kimyoviy hisoblashlarning qaysi ikki sinfi Sizga ma'lum?
 2. Hisoblashlarning qaysi poluempirik usullari Sizga ma'lum? Ularning qisqartmasini (abbreviaturisini) izohlang.
 3. Nolinchi differensial qoplash nima?
 4. Tajribaning qanday sharoitlari poluempirik hisob usullarini imitirlaydi?
 5. Molekulaning dipol momentini qaysi formula bo'yicha hisoblash mumkin?
 6. Fazoning turli yo'nalishlari bo'yicha molekulaning dipol momenti qiymatlari turlichami?
- Ishning bajarilishi.*

1. Taklif etilgan (o'qituvchi tomonidan berilgan) molekulaning poluempirik usullar doirasida maqbullashtiring (maqullashtirish usuli o'qituvchi tomonidan ko'rsatiladi).

2. *out fayldagi ma'lumotlardan dipol momentining umumiy kattaliklarini aniqlang.

DIPOLE	X	Y	Z	TOTAL
POINT-CHG.	-1.362	2.161	0.000	2.554
HYBRID	-0.196	0.311	0.000	0.367
SUM	-1.559	2.471	-0.001	2.922

3. Bu kattaliklarning qanday tashkil etuvchilardan iborat ekanligini aniqlang.

4. Hisoblangan dipol momentining tajribada aniqlangan qiymatlar bilan mos kelishini aniqlang (tajriba natijalarini Гордон А., Форд Р. Спутник химика. – М.: Мир, 1976. – 511 с. dan olish mumkin).

5. Tajriba natijalariga mos kelishi yoki kelmasligidan foydalanib, qaysi hisoblash usuli aniq ekanligini aniqlang.

ADABIYOTLAR

1. Ихтиёрова Г.А., Юльчибаев А.А. Модда тузилиши. Ўқув кўлланма –Тошкент: Турон замин зиё, 2015, 168 б.
2. Юльчибаев А.А., Ихтиёрова Г.А. Модда тузилиши. Ўқув-услубий кўлланма –Тошкент, 2013.
3. Юльчибаев А.А. Модда тузилиши. –Тошкент, Университет, 2011, 132 б.
4. Muhamadiyev N. Q. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalari matematik modellash. – Toshkent: Cho'lpon nimidagi NMIU, 2016, 264 b.
5. Волькенштейн М.В. Строение и физические свойства молекул.- Москва-Ленинград: Изд. АН. 1955.,638 с.
6. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миньяев Р.М. Теория строения молекул.-Москва: Высшая школа, 1979, 407 с.
7. Кондратьев В.Н. Структура атомов и молекул.-Москва: Госиздат физматлитературы, 1959. 524 с.
8. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. –Москва: Гардарики, 1999.,390 с.
9. Юльчибаев А.А. Модда тузилиши курсидан маърузалар матни. –Тошкент, ЎзМУ, 1999, 66 б.
10. Гиллеспи Р. Геометрия молекул.-Москва: «Мир», 1975, 278с.
11. Леше А. Физика молекул.-Москва: «Мир», 1987, 228 с.
12. Бутиков Е.И. и др.Физика. Строение и свойства вещества 3 т. “М.Физматлит” 2004 г. 336 с.

Интернет сайтлари

13. www.md.samdu.uz
14. www.ziyonet.uz
15. <http://chem.msu.ru/>
16. www.chemport.ru
17. www.subscribe.ru.
18. www.chemexpress.fatal.ru.

MUNDARIJA

SO'Z BOSHI	3		
KIRISH	5		
II. BOB. ATOM TUZILISHI	19		
1.1. Atom tuzilishi modellari	19		
1.2. Atom tuzilishining kvantmexanik modeli	23		
1.3. Geyzenbergning noaniqlik tamoyili	27		
1.4. To'liq funksiyasi. Shredinger tenglamasi	28		
1.5. Shredinger tenglamasini vodorod (vodorodga o'xshash atomlar) uchun yechish	31		
III. BOB. KIMYOVIY BOG'LANISH	42		
2.1. Kimyoviy bog'lanish	42		
2.2. Valent bog'lanish usuli	44		
2.3. Molekulyar orbitallar usuli	48		
2.4. Kimyoviy bog'lanishning asosiy xarakteristikalar	55		
2.5. Bog'lanish energiyasi	59		
2.6. σ va π bog'lanishlar	61		
IV. BOB. MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLAR	65		
3.1. Oriyentatsion va induksion o'zaro ta'sirlar	66		
3.2. Dispersion o'zaro ta'sir (London effekti)	71		
3.3. Itarilish va yig'indi ta'sirlar	73		
3.4. Vodorod bog'	74		
V. BOB. KONDENSIRLANGAN FAZALAR TUZILISHI	77		
4.1. Suyuqliklar strukturasi	77		
4.2. Suyuq metallar	79		
4.3. Suyuq suvning tuzilishi	81		
4.4. Suyuq kristallar	82		
4.5. Amorf holat	84		
VI. BOB. MOLEKULANING ELEKTRIK XOSSALARI	87		
VII. BOB. MODDANING MAGNIT XOSSALARI	96		
6.1. Moddalarning magnit xossalari	96		
6.2. Magnit qabul qiluvchanlikni tajribaviy o'lchash	102		
6.3. Eritmalarning magnit qabul qiluvchanligi	108		
VIII. BOB. MODDANING OPTIK XOSSALARI	112		
7.1. Molekulalar spektrlari	112		
7.2. Yorug'likning sinish hodisasi. Sindirish ko'rsatkichi	115		
7.3. Moddalarning optik faolligi va yorug'likning qutblanishi	117		
7.4. Yorug'likning qutblanishi	118		
IX. BOB. MOLEKULALARARO O'ZARO TA'SIRLAR	121		
8.1. Simmetriya elementlari va operatsiyalar	121		
8.2. Nuqtali guruhlar			132
8.3. Molekulalarni nuqtali guruhlar bo'yicha klassifikatsiyalash			135
Tartibi			136
8.4. Simmetriyaning ayrim oddiy xususiyatlari			137
8.5. Guruhli ko'paytuvchi, guruhlar xossasi			139
8.6. Transformatsiyalarning matritsali berilishi. Simmetriya operatsiyalarining xossalari			143
8.7. Keltirilmaydigan ifodalar			145
X. BOB. MODDALAR TUZILISHINI O'RGANISH			
USULLARI			
9.1. Molekulalar tuzilishini aniqlashning spektral usullari			145
9.2. Elektron spektroskopiyasi			150
9.3. Infraqizil – spektrlar			153
9.4. Rentgenstruktur tahlil			160
9.5. Rentgenstruktur tahlilni o'tkazish usullari			168
XI. BOB. AMALIY MASHG'ULOTLAR			
1-amaliy mashg'ulot. Atomlar va molekular tuzilishi			177
2-amaliy mashg'ulot. Molekulalar geometriyasi			177
3-amaliy mashg'ulot. Kimyoviy bog'lanish. Valent bog'lanish hamda molekulyar orbitallar usullari			180
4-amaliy mashg'ulot. Molekulalar simmetriyasi elementlari va dipol momenti			184
5-amaliy mashg'ulot. Simmetriya elementlari asosida molekulaning qutbliligi hamda izomerlarni aniqlash			185
6-amaliy mashg'ulot. Molyar refraksiyani hisoblash			199
7-amaliy mashg'ulot. Magnit momenti va molekulaning Magnitlanishi			202
8-amaliy mashg'ulot. Molekulalarning energetik holati. Moddalar energiyasini hisoblash usullari			206
9-amaliy mashg'ulot. Ikki va ko'p atomli molekulalarning elektron-tebranma-aylanma holatlari			209
10-amaliy mashg'ulot. Ikki va ko'p atomli molekulalarning elektron-tebranma-aylanma spektrlari			211
11-amaliy mashg'ulot. Molekulalararo ta'sir			213
GLOSSARIY			219
TESTLAR			223
ILOVA			234
I-1. Ba'zi fundamental fizik kattaliklar			253
I-2. Molekula xarakteristikalarini HyperChem dasturida hisoblash			253
I-3. Molekula dipol momentini hisoblash			255
ADABIYOTLAR			267
			269

Q. Xalilov, N. Muhamadiyev

MODDA TUZILISHI

(5140500 – Kimyo bakalavri ta'lim yo'nalishi
talabalari uchun darslik)

Muharrir
Musahhah
Texnik muharrir

J. Bozorova
L. Xoshimov
N. Isroilov

2019 yil 25 dekabrda tahririy-nashriyot bo'limiga qabul qilindi.
2020 yil 15 iyunda bosishga ruxsat etildi.
Qog'oz bichimi 60x84^{1/8}. "Times new roman" garniturasini. Offset qog'ozini.
Shartli bosma tabog'i – 15,8
Adadi 205 nusxa. Buyurtma № 223.

ISBN – 978-9943-6179-4-0

SamDU tahririy-nashriyot bo'limida chop etildi.
140104, Samarqand sh., Universitet xiyoboni, 15.



ISBN 978-9943-6179-4-0



9 789943 617940