

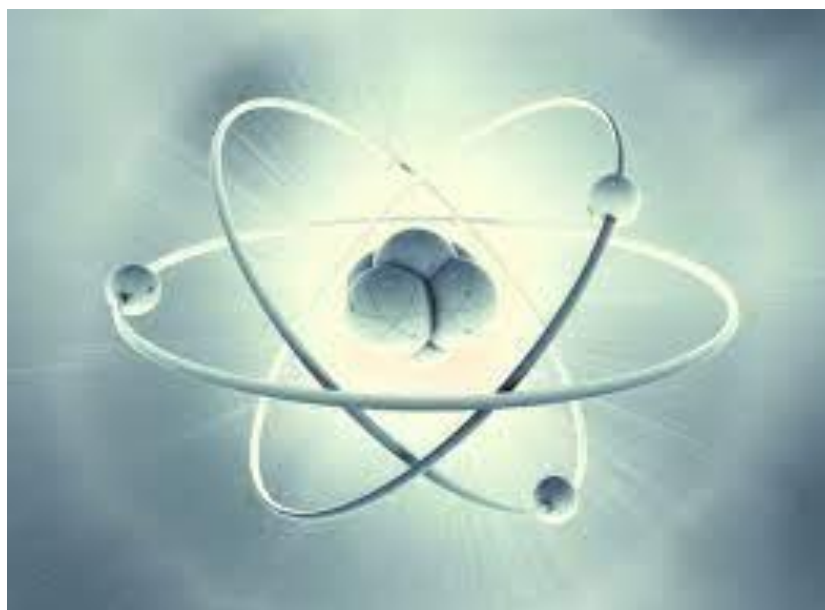
**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA  
MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI**

**GULISTON DAVLAT UNIVERSITETI**

**KIMYO KAFEDRASI**

**KVANT MEXANIKA VA  
KVANT KIMYO**

**fanidan o'quv- metodik majmua**



**GULISTON-2022**

**U.K.Abduraxmanova. «Kvant mexanika va kvant kimyo» fanidan o'quv-metodik majmua. Guliston. 2022.**

O'quv-metodik majmua 70530100- Kimyo bakalavriat ta'lim yo'nalishi bo'yicha tahsil olayotgan talabalarga mo'ljallangan bo'lib, unda Kvant mexanika va kvant kimyo fani predmeti va vazifalari, elementar zarrachalarning xossalari, ularning qonuniyatlari, elektronning to'liqsimon xarakati unga mos keluvchi energiyasini hisoblash imkonini beruvchi Shredinger tenglamasi, Geyzenbergning noaniqlik munosabatlari, Operatorlar algebrasi, Kimyoviy bog'larning kvant mexanik tasnifi, hamda kovalent bog' hosil bo'lishini molekulyar orbitallar usulida izoxlashga doir ma'lumotlar keltirilgan bo'lib, ko'rilgan nazariy muammolarning matematik echimlari keltirilgan.

O'quv-uslubiy majmua zamonaviy pedagogik texnologiya talablariga mos ravishda tayyorlangan bo'lib, unda darsning maqsadi, identiv o'quv maqsadlari, mavzuda ko'rib chiqiladigan muammolar, nazorat savollari va mustaqil ish topshiriqlari keltirilgan.

Taqrizchi: T.M.Boboev - O'zMU Kimyo fakulteti k.f.d., professor

**Guliston davlat universiteti o'quv-metodik Kengashi tomoni («28.08» 2022 yil №1 sonli bayonnoma) dan nashrga tavsiya etilgan.**

## SO'Z BOSHI

Oliy ta'lim muassasalarining 70530100-Kimyó ta'lim yo'nalishlarida «Kvant mexanikasi va kvant kimyosi» fanidan o'quv kursi o'tilishi rejalashtirilgan. Ushbu fan bo'yicha tasdiqlangan namunaviy o'quv dasturi (GulDU, 2022) da keltirilgan adabiyotlarning barchasi XX asrning etmishinchi yillarigacha nashr qilingan bo'lib, keyingi vaqtlarda e'lon qilingan qator manbalardagi ma'lumotlar to'la qamrab olinmagan. Bundan tashqari dasturda tavsiya qilingan adabiyotlar rus tilida yozilgan bo'lib, ulardan foydalanishda talabalar bir qator qiyinchiliklarga duch keladilar.

Shu sababli muallif o'zining Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fani bo'yicha davlat tilidagi qisqacha lektsiyalar kursini, amaliy mashg'ulot va mustaqil ishlarini bajarish tartiblarini o'z ichiga olgan o'quv-metodik majmua yaratishga harakat qildi. O'quv-metodik majmuaga asos qilinib 2003 yilda tayyorlangan « Kvant mexanikasi va kvant kimyosidan ma'ruzalar to'plami» va ishlab chiqilgan « Kvant mexanikasi va kvant kimyosi » fanidan o'quv uslubiy majmuasi, shuningdek « Kvant mexanikasi va kvant kimyosi »dan mustaqil ish topshiriqlarini bajarish uchun uslubiy ko'rsatmalari asos qilib olindi. Ushbu ishlar 2010-2022 yillarda universitetning kimyo ta'lim yo'nalishida sinovdan o'tdi va kamchiliklari tuzatib borildi.

Ma'ruzalar kursi zamonaviy pedagogik texnologiya talablariga mos ravishda qayta ishlanib, unda mavzuga oid muammolar, o'quv maqsadlari, nazorat savollari va mustaqil ish topshiriqlari keltirilgan. Lektsiyalar kursini tayyorlashda shu sohaga oid dissertatsiya ishlari, jurnallardagi ilmiy maqolalar hamda internetdan olingan materiallardan keng foydalanildi. Har bir mavzudan keyin shu masalaga tegishli ilmiy ishlar ro'yxati berilgan bo'lib, talabalar o'zlarini qiziqtirgan savollar bo'yicha qo'shimcha ma'lumotlarni olish mumkin.

Mazkur o'quv-metodik majmua « Kvant mexanikasi va kvant kimyosi » fanidan davlat tilida yaratilgan dastlabki o'quv qo'llanmalaridan biri bo'lgani sababli kamchiliklardan xoli emas, shuning uchun, o'zining mulohaza va foydali maslahatlarini bergan barcha olimlarga muallif o'z minnatdorchiligini bildiradi.

**Manzilimiz:** Guliston shahri, IV mavze. Universitet, «Kimyo» kafedrası

# 1-mavzu: **KIRISH. KVANT NAZARIYA. KVANT MEXANIKASINING TAJRIBAVIY ASOSLARI**

**Mavzuga oid tayanch tushuncha va iboralar:** Kvant, materiya, elementar zarracha, atom, elektron, lakton, adron, yorug'lik kvantlari, fotoeffekt, mikrozarracha, makrosistema.

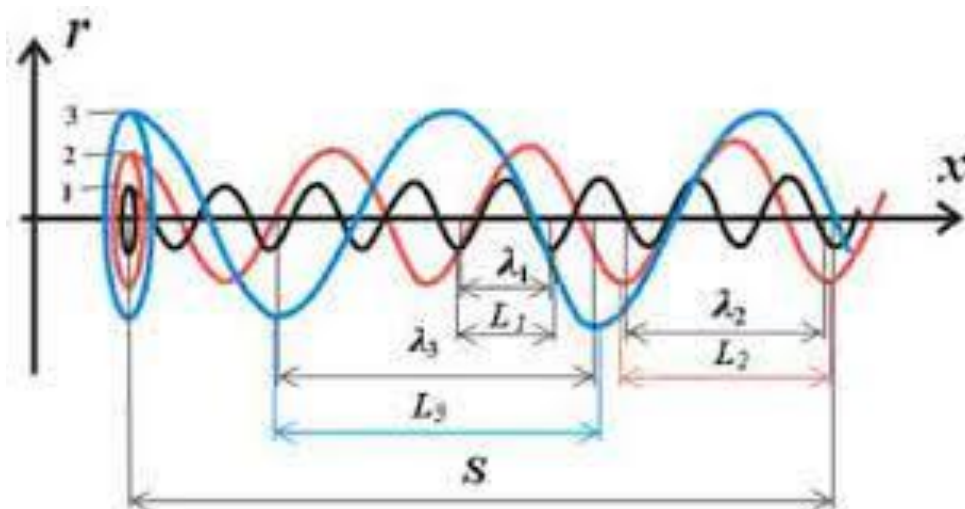
## **REJA:**

1. Kvant mexanikasi va klassik fizika orasidagi bog'liqlik. . Kvant kimyosi haqida umumiy tushuncha;
2. Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari.
3. Kvant nazariya haqida umumiy tushuncha.
4. Rentgen nurlari va Radioaktiv nurlar.

Mikroxodisalar nazariyasi – kvant mexanik nazariya bo'lib, bu nazariyadan mukammalroq, kengroq va chuqurroq nazariya yaratilmagandir.

Faqat shuni aytib o'tish o'rinliki, kvant mexanikasini yorug'lik tezligida harakat qiluvchi zarrachalardan iborat bo'lgan sistemalarga tadbiiq qilib bo'lmaydi, ya'ni relyativistik soxada zarrachalarga tadbiiq etilmaydi.

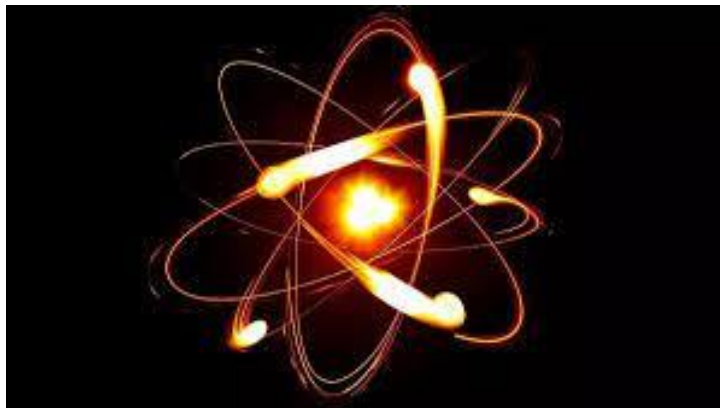
Kvant mexanikasi erkinlik darajasi chegaralangan tugallangan songa ega bo'lgan sistemalar mexanikasidir. Bu qarashda kvant mexanikasi klassik (Nyuton) mexanikasiga o'xshashdir (klassik mexanikaning analogidir). Agarda zarrachalarning harakat tezliklari yorug'lik tezligiga solishtirarli darajada etsa, bunday xolda erkinlik darajalarining biror bir tugallangan songa tengligi xaqida fikr yuritishimiz mumkin bo'lmay qoladi.



**1-rasm. Kvant zarrachalarning xarakat yo'nalishi.**

Yorug'lik tezligida xarakat qilayotgan zarrachalarning xossalarini o'rganayotganda ular xosil qilayotgan elektromagnit maydon tarqalish tezligining (oxirgi tugallangan) kattaligini xisobga olmasdan iloji yo'q. Masalan:  $\Delta t$  vaqt

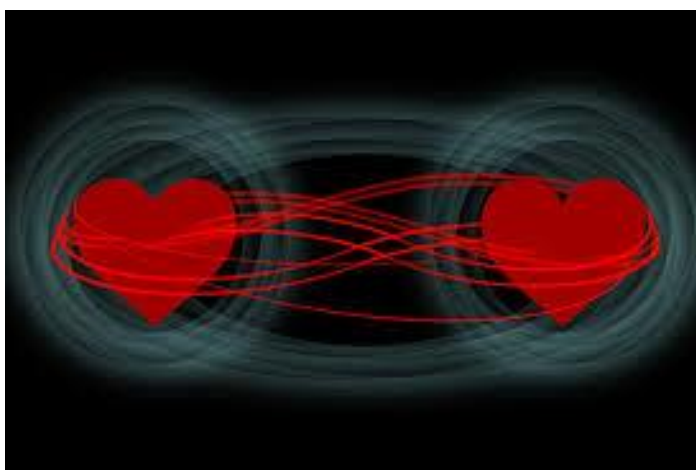
oralig'ida zarrachalar orasidagi  $r_{jk}$  masofa  $\Delta r_{jk}$  ga o'zgarsin deylik, u xolda  $\Delta r_{jk}F\Delta t$  zarrachalarning nisbiy tezligi yorug'lik tezligiga teng bo'lgan shartda, elektromagnit maydonning  $\Delta r_{jk}$  masofaga tarqalishi uchun taxminan shunday vaqt talab qilinadi.



**2-rasm. Xar bir zarracha o'zining ma'lum bir magnit maydonini tashkil qiladi.**

Shuning uchun zarrachalar bilan birgalikda elektromagnit maydonni xam xisobga olishimiz kerak, chunki bu maydon shu zarrachalar tomonidan yaratiladi va ularga ta'sir qiladi. Boshqacha qilib aytganda sistemaga nafaqat xamma zarrachalar kiritilishi kerak (Zarrachalar  $3n$  erkinlik darajasini ( $n$  ta spinga ega bo'lmagan zarrachalar uchun) va  $n$  ta spinga ega bo'lgan zarrachalar uchun  $4N$  erkinlik darajasini beradi), balki elektromagnit maydon xam kiritilishi shart, elektromagnit maydonning xolati esa cheksiz erkinlik darajalari bilan ifodalanadi.

Bu elektromagnit maydon xam kvant nazariyasi asosida ko'rilishi kerak, chunki fotonlar yordamida energiya xam, impuls xam uzatilishi bizga aniq.



**3-pacm. Lahzali aloqa kvant teleportatsiyasining so'nggi yozuvlari.**

Agar fotonlarning yoki zarralarning energiyasi zarralarning xususiy energiyasidan  $m_0s^2$  dan katta bo'lsa, u xolda zarralar paydo bo'lishi va yo'qolishi mumkin. Masalan,  $\hbar\omega \geq 2m_0c^2$  energiyaga ega bo'lgan foton  $\gamma$  yo'q bo'lishi

mumkin va 2 ta zarraga aylanishi mumkin: elektron ( $e^-$ ,  $m_0$ ) va neytron ( $e^+$ ,  $m_0$ ) ga. Aksincha, pozitron va elektron fotonga aylanishi xam mumkin.

Bu aylanish jarayonlarni quyidagicha sxematik ifodalash mumkin:

$$\gamma \leftrightarrow e^+ + e^- \quad (1)$$

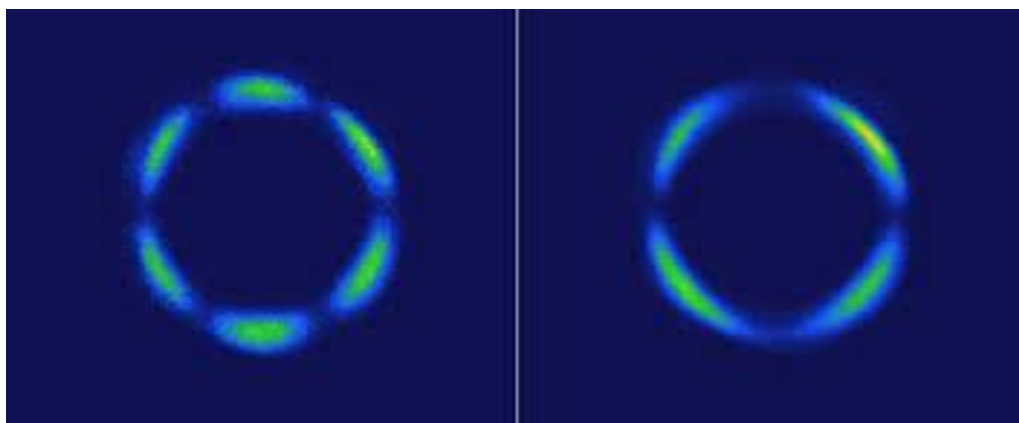
Keltirilgan misolda zarrachalar elektromagnit ta'sir natijasida paydo bo'ladi va yo'qotadi.

Boshqa bir jarayonlar borki, ularda zarrachalarning paydo bo'lishi kuchli o'zaro ta'sir natijalarida sodir bo'ladi. Misol qilib quyidagi reaksiyani keltirish mumkin:

$$\pi^- + p \rightarrow \Lambda + K^0 \quad (2)$$

Bu jarayonda  $\pi^-$  mezon proton bilan to'qnashishi natijasida 2 ta ajoyib, g'aroyib zarralar tug'iladi: geperon  $\Lambda$  va koan  $K^0$ .

Yana bir xol borki, bunda elementar zarralar kuchsiz ta'sirlar yordamida xam bir-biriga aylanadi, bu esa zarralarning radioaktiv parchalanishiga olib keladi.



**4-rasm. Materiyaning tajribalar natijasida aniqlangan yangi holati.**

Masalan: neytron spontan xolda protonga aylanadi, bunda elektron  $e^-$  va antineytrino  $\bar{\nu}_e$  nurlanadi ( $\sim$  belgi bilan antizarra belgilanadi;  $\nu_e$  elektron neytrinosi, myuon neytrinosi  $\nu_\mu$  xam mavjuddir):

$$n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e \quad (3)$$

Yadrolarning radioaktiv, pozitron parchalanish xolida teskari reaksiya xam kuzatilishi mumkin:

$$p \rightarrow n + e^+ + \nu_e \quad (4)$$

Mezonlar xam parchalanishi mumkin, xususan,

$$\mu \rightarrow e^+ + \nu_e + \bar{\nu}_\mu \quad (5)$$

$$\pi^+ \rightarrow \mu + \nu_\mu \quad (6)$$

Keltirilgan sxemalarni solishtirish, masalan (3), neytronni proton va elektrondan iborat bo'lgan murakkab zarrachadan iborat deb xisoblash mumkin

emasligini ko'rsatadi. Xuddi shunday protonni (4) xam neytron va pozitronidan iborat murakkab zarra deb aytish mumkin emasdir. Biz bu erda tayyor zarralarni chiqarib tashlash xodisalari bilan emas, balki yangi zarralarning tug'ilish jarayonlari bilan to'qnashayapmiz:

$$n \Leftrightarrow p$$

o'zaro o'tishlarda  $e^0, e^-, \nu_e, \bar{\nu}_e$  lar tug'ilayapti (bu jarayon xuddi atom tomonidan nurlanayotgan yorug'lik kvanti atomning ichida tayyor xoldi mavjud bo'lmasdan, balki g'alayonlangan qo'zg'algan elektron energiyasining nurlanish energiyasiga aylanishi natijasida yangidan paydo bo'lishi jarayoniga o'xshashdir).

(5.6) reaksiyalarda xam biz mezonlarning tayyo zarralarga parchalanishi bilan emas, balki ularning o'zaro o'tishi, yangi zarrachalarning paydo bo'lishi bilan to'qnashayapmiz.

Bir necha yo'l bilan parchalanayotgan zarralarni misol qilib olsak, bizning yuqoridagi fikrimiz yanada ishonchliroq ko'rinadi. Masalan, bitta  $K^0$  – mezon 5 xil usul bilan parchalanishi mumkin.

$$K^0 \rightarrow 3\pi^0 \text{ 21.5\%}$$

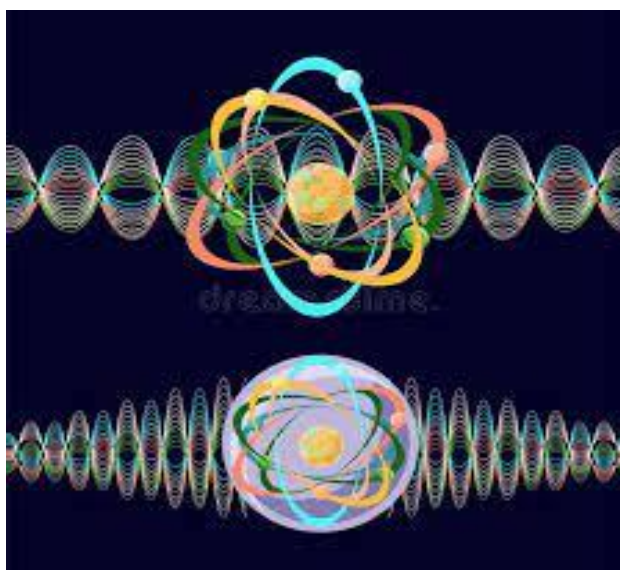
$$K^0 \rightarrow \pi^+ \pi^- \pi^0 \text{ 12.7\%}$$

$$K^0 \rightarrow \pi^\pm \mu^\pm \nu \text{ 28.1\%}$$

$$K^0 \rightarrow \pi^\pm e^\pm \text{ 37.7\%}$$

$$K^0 \rightarrow \pi^+ \pi^- \text{ 0.157\%}$$

Keltirilgan misollarda zarrachalar sistemasining mexanikasiga tegishli (mexanikasi bilan umumiy) bo'lgan xech narsa yo'q zarrachalar sonining o'zi ham va uning talbiati ham tubdan o'zgarayapti. Bu xodisalarda biz aniqlanmagan, topilmagan va cheksiz katta songa ega bo'lgan erkinlik darajali sistemalar bilan ish ko'rmoqdamiz. Bundan sistemalar material zarrachalarning mexanik sistemalariga ko'ra ko'proq maydonlarga qarindoshdir.



**5-rasm. Atom ham zarracha, ham to'lqin xususiyatga ega.**

Xususan, katta energiyaga ega bo'lgan zarrachalar – elektronlar, protonlar, neytronlar, atom yadrolari, atomlar (va boshqalar) bilan fotonlar orasidagi chegara yo'qoladi. Kvant mexanikasi predmetini elektron protonlar (va boshqalar) kabi zarralarning harakatini boshqaruvchi qonuniyatlarni o'rganish tashkil qiladi. aksincha fotonlar esa elektromagnit maydon nazariyasini o'rganuvchi ob'ekt sifatida qaraladi. Bu chegara (foton bilan zarralar orasidagi) shunga asoslanganki, zarralar tinchlik massasiga  $m_0$  ga ega bo'lsa, fotonlar  $m_0$  ga ega emasdir. Shuning uchun zarrachalar ( $m_0$  ga ega bo'lgan) norelyativistik  $E \ll m_0 C^2$  energiyalarda o'zgarish bo'ladi va yangidan paydo bo'la olmaydi.

Aksincha, fotonning tinchlik massasi nolga teng bo'lgani uchun, u xamma xollarda, xar qanday kichik energiyalarda tug'ilishi va yo'qolishi mumkin bo'lgan relyativistik zarrachalardir (tezligi xar doim yorug'lik tezligiga teng).

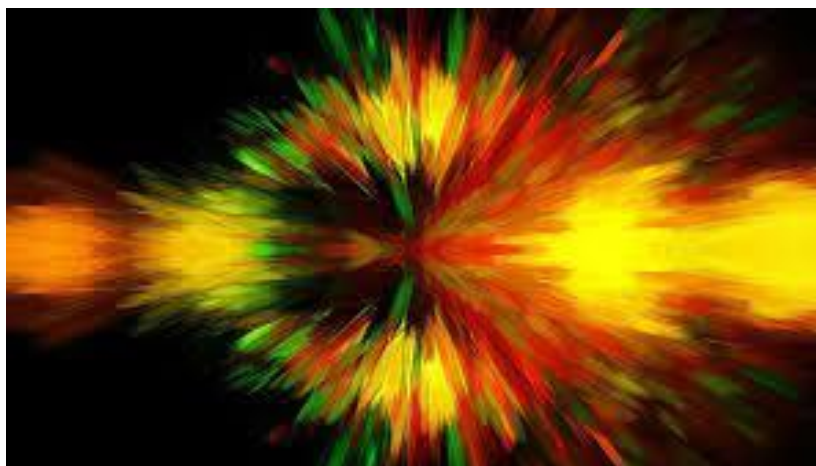
Agar zarrachaning energiyasi uning tinchlik xolatidagi energiyasi bilan solishtirarli darajadabo'lsa, bunday zarrachalar fotonlarga o'xshab tug'ilishi, yo'qolishi va bir-biriga aylanishi mumkin bo'lib qoladi. Shuning uchun yuqori energiyalarda ayni zarrachaning sistemasi haqida emas, balki elektron-pozitron maydoni, mezon maydoni, proton yoki neytron maydonlari xaqida so'z yuritsak maqsadga muvofiq bo'ladi. (fotonlar haqida gapirganimizda, biz elektromagnit maydonning kvant nazariyasini nazarda tutganimiz kabi).

### **Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari**

Kimyo va fizika fanlarining dastlabki rivojlanish davrida eng qiziqarli va ahamiyatga ega bo'lgan muammo nurlanish energiyasining tabiatini o'rganish bo'lgan. XVIII asrning ohirigacha ko'p fiziklarning fikricha ko'zga ko'rinuvchi nur juda kichik zarrachalardan tashkil topgan bo'lib, ular yorug'lik manba'idan o'q singari otilib chiqadi, deb o'ylashgan. Bunday korpuskulyar (zarra) nazariya 1675 yil Isaak Nyuton tomonidan Qirol jamiyatiga qilingan axborotida talif qilingan bo'lib, butun dunyoda tan olingan. Lekin ayrim olimlar Nyuton nuqtai nazari bilan kelishmaganlar. Gyuygens degan olim Nyutondan avvalroq yorug'likning to'lqin nazariyasini taklif qilgan va bu nazariyani Guk quvvatlagan. Ularning fikricha yorug'lik, suv to'lqinlari singari, tebranma harakatga egadir. Lekin 19 asrgacha Nyutonning korpuskulyar nazariyasi hukmronlik qildi.

1800 yil Tomas Yung korpuskulyar nazariyaga qarshi o'zining birinchi ilmiy ishini chop etganda hali yorug'likning tabiatiga qarashlarda xech qanday o'zgarishlar bo'lmagan edi. Bu ishda Yung yorug'likning qaytish va sinish xodisalarini tushuntirishda to'lqin nazariyasining afzalliklarini ko'rsatib bergan edi.





### 6-rasm: Kvant zarrachalarining xarakat.

Keyinchalik 1801 yilda Yung interferentsiya xodisasini va xodisa yordamida Nyuton halqalarini tushuntirib berdi (bundan avvalroq Nyuton bu xodisalarni korpuskulyar nazariya asosida tushuntirib bergan edi). Yung shuni ko'rsatib berdiki, agar monoxromatik yorug'lik manbaining nurlarini diagrammadagi 2 ta teshikka fokuslansa, ekranda bir qator chiziqlar paydo bo'ladi. Bu chiziqlarning joylashishini to'lqin nazariyasi yordamida interferentsiyadan foydalanib oson tushuntirib berish mumkin.

Bu ikki teshikdan nurlar o'tishi bilan ulardan keyin yorug'lik to'lqinlari tarqaladi. Agar biror to'lqinning qirradi (cho'qqisi) ikkinchi to'lqinining cho'qqisi bilan mos kelsa, bunda kuchlanish sodir bo'ladi va ekranda yorug' chiziq paydo bo'ladi. Agar biror to'lqinning cho'qqisi ikkinchi bir to'lqinning ezik qismi bilan mos kelsa yorug'lik susayadi va ekranda qoramtir chiziq paydo bo'ladi.

Bundan ko'rinib turibdiki, agar 2 ta teshikdan o'tayotgan yorug'lik to'lqinlarining bosib o'tgan yo'llaridagi farq butun songa teng bo'lsa, to'lqinlarning fazalari bir-biriga mos keladi va kuchlanish kuzatiladi, aks xolda (farq butun songa teng bo'lmasa) fazalar bir-biriga mos kelmaydi va to'la susayish kuzatiladi. Demak, yorug' chiziqni quyidagi xolda kuzatish mumkin.

$$n\lambda = d \sin \varphi$$

qoramtir chiziqni

$$(n + 1/2)\lambda = d \sin \varphi$$

o'lganda kuzatiladi. Bu erda:

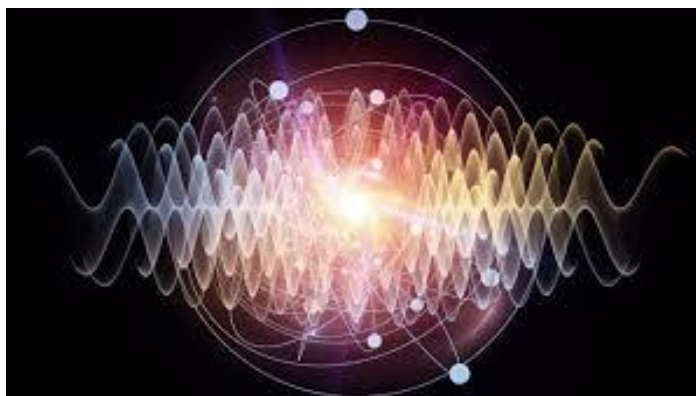
$n$  – butun son;

$\lambda$  - to'lqin uzunligi;

$d$  – teshiklardan o'tayotgan yorug'lik to'lqinlari orasidagi masofa;

$\varphi$  - burchak

Interferentsiya xodisasining ochilishi to'lqin nazariyasining uzil-kesil g'alabasi desak bo'lar edi, lekin Yung korpuskulyar nazariyaning ustidan to'la g'alaba qila olmadi, xatto olim do'stlari tomonidan kulgu bo'ldi. keyinchalik 1815 yilda Frensl yana interferentsiya xodisasini tekshirdi va to'lqin nazariyasini matematik jixatdan isbotlashni boshlab berdi.



**7-rasm. Kvant zarralar xarakatidagi chigalligi(kvantovaya zaputannost) .**

Frenklning ilmiy ishini korpuskulyar nazariya tarafdorlari rad eta olmadilar va Gyugensning to'liq nazariyasi uning o'limidan 100 yildan ko'proq vaqt o'tgandagina tan olindi. 19 asr davomida to'liq nazariyasini isbot qiluvchi yana bir qancha tajriba asosida olingan dalillar paydo bo'ldi va 20 asrning boshiga kelib, olimlar dunyosida yorug'lik to'liq tabiatiga egaligi haqida fikr xech kim tomonidan inkor etilmagan, xuddi bundan 100 yil avval yorug'likning korpuskulyar tabiatga ega ekanligini tan olgani kabi. Shuning uchun 19 asrning oxiriga kelib fiziklar orasida nazariya tugallangan degan fikr xukm suradi.

Fizikaning mexanika va elektrodinamika kabi klassik qismlari tabiatda kuzatilayotgan xamma xodisalarni tushuntira oladi, shuning uchun o'rganish uchun boshqa tekshirilishi kerak bo'lgan yangi ob'ektlar yo'qdek tuyular edi. Shunday bir paytda kutilmagan tajribaviy kashfiyotlar qilindi. 1895 va 1898 yillar oralig'ida Rentgen X – nurlarni, Bekkerl – radioaktivlikni va Tomson – elektronni kashf etdi. Bu kashfiyotlar bilan birgalikda elektromagnit nurlanishning tabiatini to'la tushuntirish xam kirib keldi.

Mutlaqo qora jismning nurlanishini o'rganish bilan birgalikda, yana bir qancha boshqa tajribaviy dalillar yangi nazariyani yaratish kerakligini ko'rsatdi va bu yangi kvant nazariyasining kelib chiqishiga sabab bo'ldi. Hozirgi paytda kvant nazariyasiz fizika va kimyoning hech qanday qismini to'la tasavvur qilish mumkin emasdir.

19-asr fizika va kimyo fanlari asosan nurlanish (Gyuygens, Yung, Frenel) energiyasining tabiatini o'rganib, asr ohiriga kelib yorug'lik to'liq tabiatiga ega degan fikr to'la xukmronlik qilgan (18-asrning oxirida esa yorug'likning korpuskulyat tabiatga ega ekanligi to'la tan olingan edi). Shunday qilib, fiziklar orasida 19-asrning oxirida yorug'lik haqida nazariya tugallangan degan fikr hukm surgan. Fizikaning mexanika va elektrodinamika kabi klassik qismlari tabiatda kuzatilayotgan xamma xodisalarni tushuntira oladi, shuning uchun o'rganishga boshqa tekshirilishi kerak bo'lgan yangi ob'ektlar yo'qdek tuyular edi. Shunday bir paytda 1895 va 1898 yillar oralig'ida Rentgen nurlanish X – nurlarni, Bekkerl – radioaktivlikni va Tomson – elektronni kashf etdi. Mutlaqo qora jismning nurlanishini o'rganish bilan birgalikda, yana bir qancha boshqa tajribaviy dalillar paydo bo'ldiki, bularni to'liq nazariyasi tushuntirib bera olmadi. Xuddi shu

dallillar yangi nazariyani yaratish kerakligini ko'rsatdi. Va bu yangi kvant nazariyasining kelib chiqishiga sabab bo'ldi. Xozirgi paytda kvant nazariyasiz fizika va kimyo qonun va tushunchalarini to'liq tasavvur qilish mumkin emasdir.

**Katod nurlar.** 1895 yil Kruks gazlarda elektr zaryadini tekshirayotgan paytda shisha trubkada shishining yorug'lanishini kuzatadi. Agarda katodning qarshisidagi shishaning ichki devorlarini fosforestsentsiyalanuvchi modda bilan qoplansa, trubkaning shu tomoni qattiq yorug'lanadi. Kruks katod bilan trubkaning devori orasidagi kichik to'siq qo'yganda, yorug'lanish qismida (fosforestsentsiyalanuvchi modda surilgan devorda) to'siqning soyasi paydo bo'ldi. Bundan Kruks shunday hulosaga keldiki, katoddan chiqayotgan nurlar to'plami xuddi yorug'lik nurlari singari to'g'ri chiziq bo'ylab tarqaladi. Lekin yorug'lik nurlaridan farqli o'laroq katod nurlari magnit va elektr mayonlaridan og'ish (chetlanish) hususiyatiga ega bo'lgan. Og'ishning yo'nalishini to'siqning soyasi harakati bo'yicha aniqlanadi va katod manfiy zaryadga ega ekanligi ko'rsatilgan. Kruks bu nurlarni katod nurlari deb atadi va ular o'zini xuddi zarrachalar kabi tutishini demak katod nurlari manfiy zaryadlangan zarrachalar oqimi ekanligini ko'rsatib berdi:

**Elektronning ochilishi.** Tomson katod nurlashrining elektr va magnit maydonlarida og'ishini o'rganayotganda zaryadning massaga nisbati  $eG'm$ , katod trubkasi qanday gaz bilan to'ldirilganidan va qanday elektrodlar ishlatilishidan qat'iy nazar, bir xil qiymatga ega ( $-1.76 \cdot 10^{11} \text{Kl.kg}^{-1}$ ) ekanligini aniqladi va Tomson manfiy zaryadlangan zarrachalar har qanday moddada bor degan xulosa chiqardi va bu zarralar elektron (Grekchadan yantar-qahrabo) deb atadi. Elektr tokini xuddi shu zarrachalarning xarakati natijasida paydo bo'lishi xam aniqlandi.

Tomson asbobining  $eG'm$  nisbatini aniq topish uchun mukammallashtirilishi mass-spektrometr asbobining yaratilishiga olib keldi. Bu asbobda ionlar  $eG'm$  nisbatga qarab bir-biridan ajratiladi.

Elektronning elektr zaryadining qiymatini amerikalik fizik Milliken topgan (1909-1917 yillardagi tajribalar asosida). ( $1.6 \cdot 10^{-19} \text{Kl.}$ ) Bu zaryadni elementar zaryad birligi deb ataladi. Elektron zaryadini va Tomson topgan  $eG'm$  nisbatni bilgan xolda elektronning massasini aniqlash mumkin.  $9.11 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$  yoki vodorod atomi massasining  $1G'1849$  qismini tashkil qiladi.

**Rentgen nurlari** 1895 yil Rentgen katod nurlarini o'rganayotganda yana qandaydir nurlanish turi borligini tasodifan sezib qoldi. Bu nurlar jismlardan o'tish qobiliyatiga ega edi. Bu nurlarni Rentgen X –nurlar deb atadi. Keyinchalik Rentgen tajribalar asosida rentgen nurlarining xosil bo'lish sharoitlarini aniqladi: bu nurlar uchib borayotgan elektronlar katod trubkasining devoriga urilgan va buning natijasida ushlanib qolgan joyda paydo bo'lar ekan. Bu xususiyat aniqlangandan so'ng Rentgen shunday trubka yaratdiki, unda rentgen nurlarini xosil qilish juda xam qulay bo'ladi. Bu trubkalar xozir xam shunday ko'rinishga egadir.

Trubka ichida mavjud bo'lgan musbat ionlar anod bilan katod orasidagi kuchlanish yordamida xarakatga keltiriladi va tezlashgan musbat ionlar katodga urilib, undan elektronlarni urib chiqaradi. Katoddan urib chiqarilgan elektronlar xam mavjud elektr maydonda tezlanib, intensiv katod nurlarni xosil qiladi.

Katod nurlarining katod sirtiga perpendikulyar yo'nalishda uchib chiqish xususiyatini xisobga olib, Rentgen katodga egri formani beradi. Egri formadagi katod elektronlar oqimini kichik bir nuqtaga yig'ishga qodir bo'ldi. Mana shu elektronlar oqimi yo'nalgan joyga maxsus to'siq joylashtiriladi (antikatod AK). Bu antikatodga elektronlar urilib, ushlanadi va rentgen nurlarini paydo qiladi.

Shunday qilib, rentgen nurlarining paydo bo'lish joyi antikatodning sirtidir, u yuqori temperateraga chidamli materialdan qilinadi, chunki antikatodning elektronlar intensiv ravishda bombardirovka qilganda temperatura juda katta bo'lishi mumkin.

Xozirgi zamon trubkalarida qizdiriluvchi katod ishlatiladi. Bunday katoddan uchib chiqqan elektronlarning intensiv oqimi elektr kuchlanish yordamida tezlatiladi. Bu usulda rentgen trubkasida yuqori vakuum kerak, chunki elektronlar antikatodsha xech qanday to'sqinliksiz etib borishi kerak.

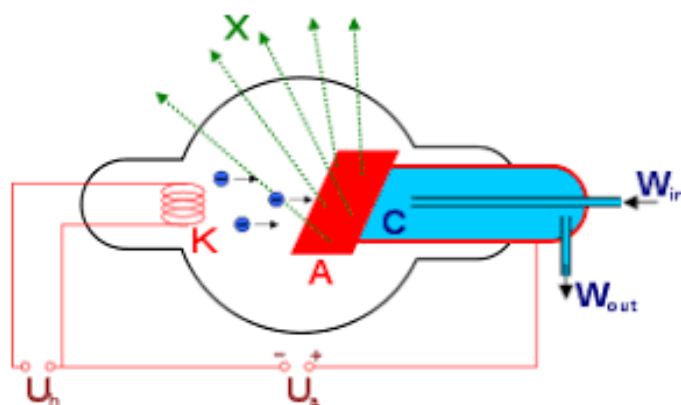
Sovuq katodli trubkalarda musbat ionlar katoddan elektronlarni urib chiqarish uchun etarli darajada kuchlanish berilishi kerak. Lekin bu berilgan kuchlanish elektronlarni xam tezlashtiradi. Shuning uchun bu trubkalarda biz elektronlarning tezligini xoxlagan chegarada o'zgartira olmaymiz.

Qizdiriluvchi katod trubkalarda ionli bombardirovka ortiqcha va xatto zararlidir. Shuning uchun qizdiriluvchi katod trubkalarida yuqori vakuumga erishish kerak. Bunday trubkalarda xoxlagan kuchlanishlarni ishlatish mumkin va keng chegarada elektronlarning tezligini o'zgartirishimiz mumkin, bu esa xosil bo'luvchi rentgen nurlarining moddadan o'tish qobiliyatini xam xoxlagancha o'zgartirish imkoniyatini yaratadi.

### ***Rentgen nurlarining kelib chiqishi va tabiati***

Rentgen nurlarining xosil qilish usuli shuni ko'rsatib turibdiki, ularning xosil bo'lish tez uchuvchi elektronlarning to'htatilishi bilan bog'liqdir. Uchuvchi elektron elektron elektr va magnit maydonlari bilan o'ralgan, chunki xarakatlanayotgan elektr tokni xosil qiladi. Elektronning to'xtilishi yoki sekinlashtirilishi uning atrofidagi magnit maydonning o'zgarishiga olib keladi. Magnit yoki elektr maydonning o'zgarishi esa, ma'lumki elektromagnit to'lqinlar nurlanishini keltirib chiqaradi. Bu elektromagnit to'lqinlar rentgen nurlari ko'rinishida kuzatiladi.

Rentgen nurlarining to'lqin tabiatiga ega ekanligini aniqlash uchun ularning interferentsiya yoki difraktsiya xossalari tekshrish kerak edi. Bunday tajribani o'tkazish juda og'ir masala edi va bu masalani faqatgina 1912 yil M. Laue difraktsion panjara sifatida tabiiy kristallni ishlatib (tabiiy kristallda atomlar to'g'ri tartibda va kichik masofalarda (bir necha  $A^0$ ) joylashgan bo'lib, rentgen nurlari to'lqin uzunligi bilan solishtirarlidir) xal qildi. Laue tomonidan rentgen nurlarining difraktsiyasi xosil qilinganidan so'ng, bu nurlarning to'lqin tabiati to'g'ridan – to'g'ri isbot qilinda va xattoki kristallarning tuzilishini o'rganish xam mumkin ekanligi ko'rsatildi. (rentgenostruktur analiz metodi). Keyinchalik rentgen nurlarining to'lqin uzunligi xam aniqlandi. Oddiy rentgen trubkasining nurlanish oq yorug'lik nuriga o'xshash bo'lib, xar xil to'lqin uzunligidagi nurlarni tashkil qilishi aniqlandi ( $A^0$  dan kichik to'lqin uzunligiklaridan to bir necha  $A^0$  gacha bo'lgan).



**8-rasm. Rentgen trubkasining nurlanish oq yorug'lik nuriga o'xshash, xar xil to'liq uzunligidagi nurlari.**

Keyinchalik  $1/100$  va  $1/1000 A^0$  to'liq uzunligiga ega bo'lgan nurlar xam xosil qilindi. Rentgen nurlarining to'liq uzunligi kamayishi bilan uning yutilish qobiliyati xam kamayishi aniqlandi. Bunday nurlar qattiq nurlar deb ataldi.

***Radioaktivlik. Radioaktiv nurlarning tabiati***

Radioaktivlik birinchi bo'lib, Anri Bekkerel tomonidan 1896 yil uran tuzlarida tasodifan aniqlandi. Radioaktivlik rentgen nurlarining ochilishidan keyin ochilgan. Radioaktivlik xodisasini ochishda xam, xuddi elektronlarni va rentgen nurlarini ochilishi kabi katod nurlari sabab bo'ldi. Bekkerelning o'ylashicha nurlarning paydo bo'lishi lyumiestsentsiya maxsulotidir va xar qanday lyumiestsentsiyaga xamroxdir, masalan yorug'lik nurlari yordamida xosil qilingan. Shuning uchun lyumiestsentsiyalanuvchi moddalarni yorug'lik nuri bilan nurlatib, qora qog'ozga o'ralgan fotoplastinkani qoraytirdi. Radioaktivlik molekulyar xodisa bo'lmasdan, radioaktiv elementlar atomlarining ichki xossasidir. (Per Kyuri, Mariya Kyuri).

**$\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  - nurlar.**

Magnit maydonda radioaktiv nurlar 3 ga ajraladi, ulardan 2 tasi ( $\alpha$  va  $\beta$ ) qarama-qarshi tomonga og'adi va 1 tasi ( $\gamma$ ) og'ish xususiyatiga ega emas.

$\alpha$  - nurlar, yoki

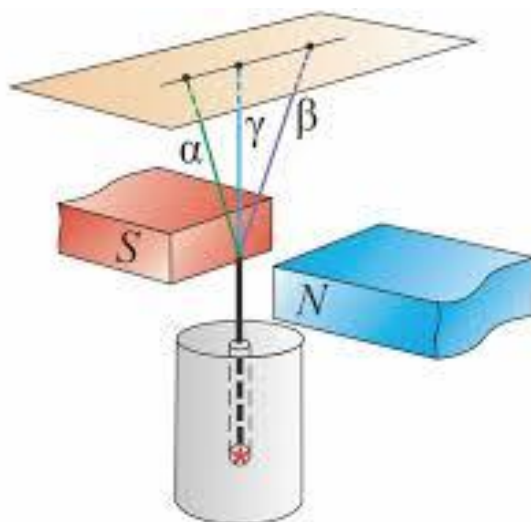
$\alpha$  - zarralar - musbat

$\beta$  - nurlar - manfiy

$\alpha$  - nurlarni magnit maydoni kam og'diradi;

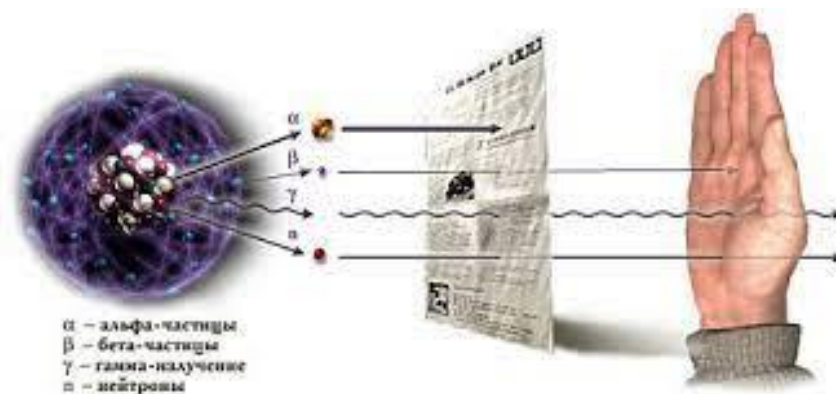
$\beta$  - nurlar ko'proq og'adi

$\alpha$ ,  $\beta$  va  $\gamma$  - nurlarning yutilish qobiliyati xar xildir  $\alpha$  - nurlar qog'oz varag'i bilan to'la yutiladi.



9- rasm.  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  - nurlarning magnit maydonidagi og'ishi.

$\beta$  – nurlar bir necha millimetr bo'lgan  $Al$  da to'la yutiladi,  $\gamma$  - nurlar esa 1 sm bo'lgan  $Al$  dan o'tib ketadi. 1 sm qo'rg'oshin esa  $\gamma$  -nurlarni 2 marta kuchsizlantiradi.



10- rasm.  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  - nurlarning to'siqdan o'tishi.

**$\gamma$ -nurlar.** O'z xossalari jixatidan  $\gamma$  - nurlar rentgen nurlariga o'xshashdir: havoni ionlantiradi, fotoplstinkani qoraytiradi va magnit maydonida og'maydi. Kristalldan o'tayotganda  $\gamma$  nurlar xuddi rentgen nurlari kabi, defraktsiyaga uchraydi. Bir xil qattiq rentgen nurlari  $\gamma$  - nurlaridek moddadan o'tish qobiliyatiga egadir (ulardan qolishmaydi).

Rentgen nurlarining va  $\gamma$  - nurlarning xamma xossalari bir xil bo'lganligi ular bir xil tabiatga ega ekanligini ko'rsatadi. Rentgen nurlari kichik to'lqin uzunligiga ega bo'lgan elektromagnit nurlanish ekanligini bilamiz. Shuning uchun  $\gamma$  - nurlar xam elektromagnit to'lqinlar (undan xam kichik to'lqin uzunligiga ega bo'lgan). Tarqalish tezligi, xamma elektromagnit nurlanish kabi, yorug'lik tezligiga teng 300000 kmG'sek. Rentgen nurlari va  $\gamma$  - nurlar (bir xil to'lqin uzunligiga ega bo'lsa) olinish usulidan tashqari bir-biridan xech qanday farq qilmaydi.

**$\alpha$  va  $\beta$  - nurlar.**  $\alpha$  - nurlar 2 elementar zaryadga teng bo'lgan musbat zaryadga egadir.

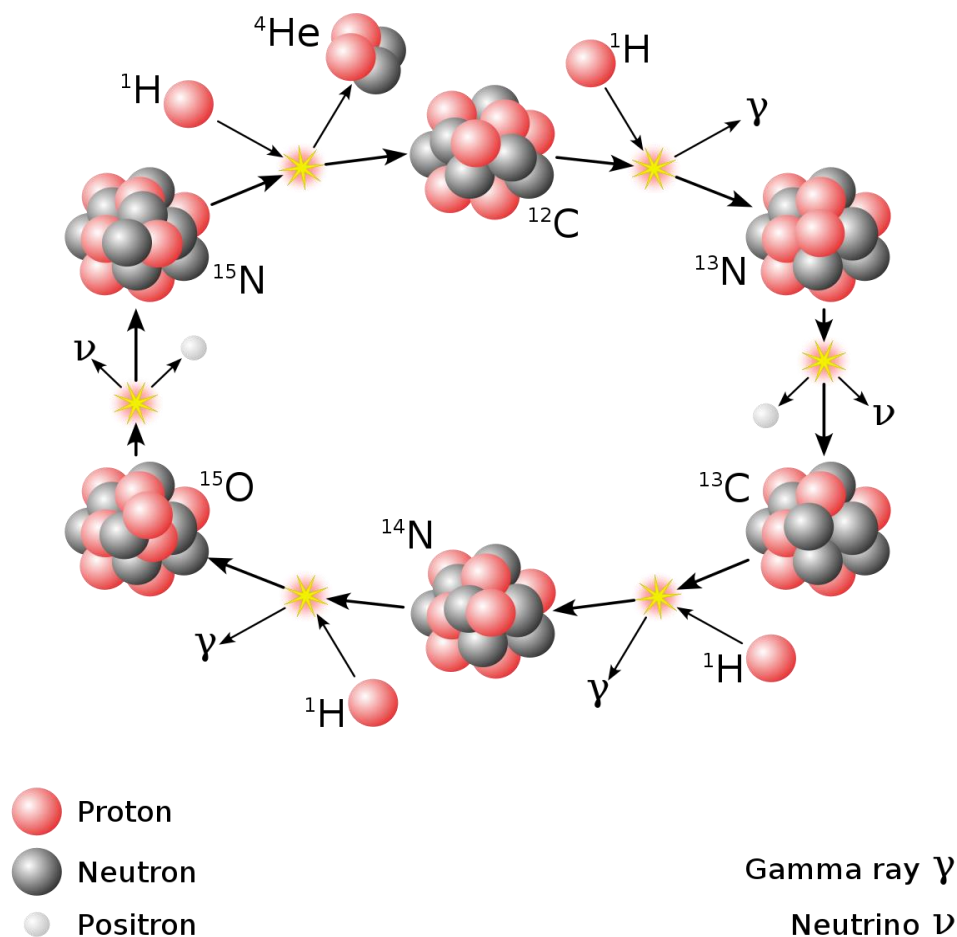
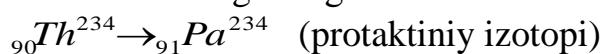
$\beta$  – nurlar manfiy 1 elementar zaryadga ega.

$\beta$  – zarraning massasi elektronning massasi bilan bir xildir.  $\beta$  – zarrachaning zaryadi xam elektronning zaryadi bilan tengdir. Shuning uchun,  $\beta$  – zarrachalar tez harakatlanuvchi elektronlardir (radioaktiv modda atomidan uchib chiqayotgan).  $\beta$  – zarralarning tezligi yorug'lik tezligining 99% ni tashkil qiladi.

$\alpha$  - zarrachalarning massasi 4 aem ga teng. 4 aem ga teng massaga va 2 elementar zaryadga Ne ning atom yadrosi egadir.

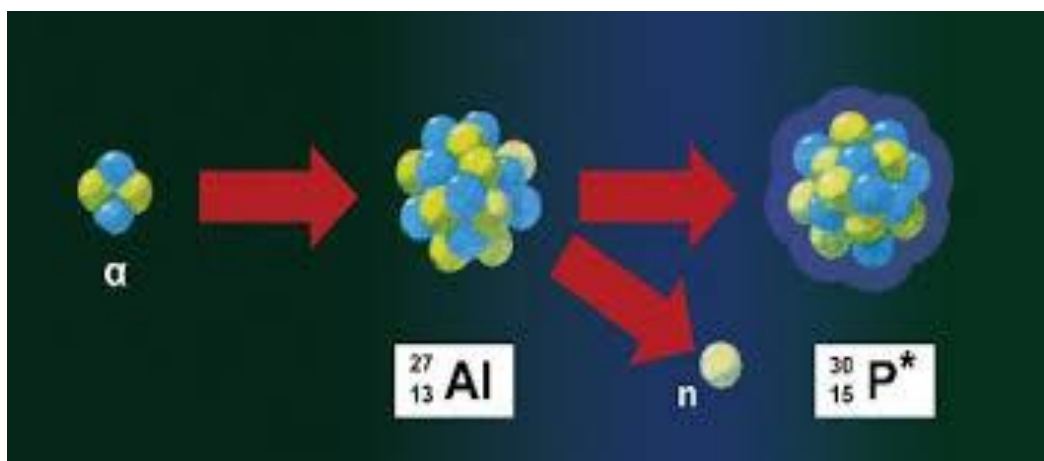
### **Radioaktiv parchalanish**

$\beta$  – elektron yadrodan 1 ta manfiy zaryad olib chiqib ketadi, shuning uchun yadroning massa sonini o'zgartirmaydi. Shuning uchun  $\beta$  – parchalanishi natijasida massa soni o'zgarmasdan tarkib soni birga o'zgaradi:



**11-rasm. Radioaktiv parchalanish.**

$\alpha$  - zarra yadrodan chiqib ketish natijasida radioaktiv atom o'zidan tartib nomeri 2 ga kichik bo'lgan va massasi 4 ga kichik bo'lgan atomga aylanadi.



**12-rasm. Alyuminiy yadrosidan fosfor izotopining xosil bo'lishi.**

### *Ultrabinafsha halokat*

Temir parchasini qizg'ish rang olguncha qizdirib, ularning nurlanishini tushuntirishga harakat qilinganda klassik fizika fiziklarga katta kutilmagan sovg'a taqdim etdi. Ma'lumki, qattiq jismlar qattiq qizdirilgan holatda nur chiqarish qobiliyatiga ega bo'ladilar.

Mukammal yutish va nurlanish xossalari ega bulgan jism chiqargan ideal nurlanish mutlaqo qora jism nurlanishi deyiladi.

Mo'tadil qizdirilgan (a) jismning nurlanishi chastotalarning asosan qizil va infraqizil sohasiga to'g'ri kelgani uchun, jismning nurlanishi qizilga o'xshaydi.

Temperatura ko'tarilgan sari nurlanish intensivligining maksimum katta chastotalar tomon siljiydi va shu sababli nurlanish navbatma-navbat olov rang, sariq va nihoyat, spektrning hamma sohasida etarli darajada energiya nurlanayotgan bo'lsa, oq bo'lib ko'rinadi.

Klassik fizika bu xodisani tushuntira olmadi, chunki uning qonunlari bo'yicha nurlanish intensivligi chastota ortishi bilan uzluksiz ravishda ortib borishi lozim. Tajriba ko'rsatishicha, nurlanish intensivligi, chastota ortishi bilan maksimum qiymatdan o'tyapti. Klassik fizika qonunlari bo'yicha nurlanish spektrlarida ko'k va ultrabinafsha nurlar tajribada kuzatilganga nisbatan ko'proq bo'lishi kerak edi. (max nuqtadan so'ng kamaymasdan, balki ortib borishi kerak edi) va ko'zga hamma qizdirilgan jismlar ko'k bo'lib ko'rinishi kerak edi.

Nazariyaning tajribada kuzatilayotgan dalillarga to'la qarshi kelishi shu zamon fiziklari orasida ultrabinafsha halokat degan nom oldi.

### *Mutlaqo qora jismning nurlanishi*

Mutlaqo qora jism deb shunday bir ob'ektga aytiladiki, u xamma chastotalardagi elektromagnit nurlanishlarni bir xil extimollik bilan chiqaradi yoki yutadi. Yopiq pechkanin kichik bir teshikchasidan (tirqishidan) chiqayotgan nurlanishni o'rganganda bunday pechka juda qattiq qizdirilgan bo'lsa, mutlaqo qora jismga misol bo'la oladi.



Mutlaqo qora jismning nurlanishi energiyasining zichligi ayni bir temperaturada to'liq uzunligi yoki chastotaga bog'liqligini o'rganish bo'yicha o'tkazilgan tajribalar pirovard natijada energiyaning kvantlanishini tan olishga olib keladi.

Energiyaning to'la zichligi  $\rho = 4/C E$  ga teng, bu erda  $S$  – yorug'lik tezligi,  $E$  – energiya (nur sochishning to'liq quvvati).

Chastotalar intervalidagi energiyaning zichligi  $\rho_v$ ;  $\rho_v = 4\pi/C Bv$  ga teng.  $Bv$  – (energiya) mutlaqor qora jismning sirtiga perpendikulyar bo'lgan vaqt birligida chastotaga teng bo'lgan chastotalar intervalida nur sochishning quvvati.  $E$ ,  $Bv$ ,  $\rho$  va  $\rho_v$  kattaliklar temperatura funktsiyasidir.

XIX asrning oxirida ko'p olimlar tajribada olingan bu egri chiziqlarni, ya'ni energiya zichligining taqsimlanish egri chiziqlarini, nazariy tushuntirishga harakat qildilar. 1-bo'lib Stefan-Boltsman qonunining o'rganilishi bo'ldi. Bu qonunni 1879 yilda Stefan taklif qildi va 1884 yilda Boltsman keltirib chiqardi:  $E = \sigma T^4$ . Stefan-Boltsman qonuniga chastota kirmaganligi sababli, bu qonundan foydalanib faqat intensivligi taqsimlanishi egri chizig'i tagidagi yuzani aniqlashimiz mumkin bo'libb ularning formasini aniqlay olmaymiz. Bu kamchilik 1896 yil Vin tomonidan taklif qilingan qonun orqali qisman yo'qotildi:

$$\rho_v = \alpha v^3 \exp(-\beta v/T)$$

$\alpha$  va  $\beta$  - empirik doimiylar.

Vinning siljish qonuni yuqorida aytganimizdek yuqori chastotalarda tajriba bilan mos keladi.

Reley Vinning siljish qonuni keltirib chiqarilayotganda qilingan ayrim xatolarga e'tibor berdi. Bu xatolarni tuzatish va keyinchalik Jins tomonidan Reley olgan natijalariga tuzatishlar kiritishi quyidagi natijaga olib keldi:  $\rho_v = 8\pi v^2 kT/C^3$

$k$  – Boltsman doimiysi. Reley-Jins qonuni quyi chastotalarda tajriba bilan muvofiq keladi.

1900 yilda Maks Plank tajribada olingan energiya taqsimlanishi egri chiziqlarni to'la koniktiruvchi tenglamani keltirib chiqaradi:

$$\rho_v = 8\pi v^2 kT/C^3 (h/\exp(hv^2kT) - 1)$$

Bu tenglama Vin va Reley – Jins tenglamalaridan foydalanib keltirib chiqarilgan, chunki Plank yuqori va quyi chastotalarda energiya taqsimlanish egri chiziqlarining ko'rinishini bilgan edi va Plankning vazifasi egri chiziqni hammasi to'g'ri aks ettiruvchi tenglamani chiqarish edi. Plank doimiysi aniqlangandan so'ng ( $h \approx 6.55 \cdot 10^{-27}$  – Plank topgan son xozirgi  $h \approx 6.626196 \cdot 10^{-27}$  egr.s ga juda xam yaqindir) yuqoridagi tenglama tajribada olingan egri chiziqni to'la izoxlab berdi. Lekin eng asosiy xulosa tenglamani o'zini keltirib chiqarish emas, balki bu tenglamani keltirib chiqarish chastotaning uzluksiz o'zgaruvchi kattalik bo'lishini xulosa qilishni talab qilgandadir. Lekin chastotaning Plank doimiysi bilan ko'paytmasi  $hv$  bizga energiya birligini beradi, bu esa o'z navbatida energiya xam uzlukli (diskret) kvantlangan kattalik bo'lishini taqozo etadi.

Lekin Plank o'zining qilgan ishini oxirigicha tushunib etmagan edi. Boshqa olimlar xam ko'p yillar davomida energiyaning kvantlangan bo'lishining fizik ma'nosi yo'q deb, bu faqatgina masalani xal etishdagi sun'iy matematik usul deb

bilganlar. Lekin Eynshteynning 1905 yildagi fotoelektrik effekt va Debay bilan qilingan qattiq jismlarning issiqlik sig'implari bo'yicha qilgan ishlari bunday fikrlar asossiz ekanligini isbotladi. Mutlaqo qora jismning nurlanishiga umuman bog'liq bo'lmagan xatto bir-biri bilan xam bog'liq bo'lmagan bu xodisalarni tushuntirishda energiyaning kvantlanishi asosida ishlab chiqilgan nazariyalar taklif qilindi.

Agar mutlaqo qora jismda energiya taqsimlanishining egri chizig'ini Plank chastotalar uchun xoxlagan sonlarni qo'yib to'g'irlab qo'ygan va bunday to'g'irlash fizik ma'noga ega bo'lmasdan sun'iy matematik usul deb hisoblashga xuquqimiz bo'lsa, 3 ta bir-biriga bog'lanmagan xodisalarni nazariy tushuntirish uchun energiyaning kvantlanishining talab qilinishi albatta bunda fizik ma'no borligin taqozo etadi. Xozirgi zamon fanida energiyaning kvantlanganligi va Eqhv ga tengligi xech qanday shubxa tug'dirmaydi.

Kvant nazariyasiga ko'ra, nur energiyasi moddalar tomonidan uzluksiz emas, balki ma'lum ulushlar (portsiyalar) xolida yutiladi va chiqariladi.

Nurning yutiladiga eng kichik ulushi:  $\epsilon q hv$  bo'lib, bu miqdor energiya kvanti deyiladi. Yutilgan yoki chiqarilgan nur energiyasining umumiy miqdori:  $E_{qneqnhv}$  bo'ladi, bu erda  $nq1,2,3..$ ;  $v$  – to'lqin chastotasi;  $h$  – Plank doimiysi.

#### **Muxokama uchun savollar:**

1. Kvant mexanikaning klassik mexanika bilan umumiyligi va farqi nimada?
2. Kvant kimyo fani nimani o'rganadi?
3. Katod nurlari qanday paydo bo'ladi?
- 4 Elektron qanday ochilgan?
5. Rentgen qanday tabiatga ega?
6. Rabioaktivlik nima va uning tabiati qanday?
7. Mutlaqo qora jism tushunchasi nima?
8. Vin, Stefan va Reley-Jins qonunlari.

## 2-mavzu: MIKROZARRACHALARNING DUALISTIK TABIATI

**Mavzuga oid tayanch tushuncha va iboralar:** Fotoeffekt, Kompton effekti, elektron spini,

### REJA:

1. Fotoeffekt va uning qonuniyatlari..
2. Kompton effekti.
3. Shtern va Gerlax tajribalari.
4. Elektron spini.

**Fotoeffekt va uning qonuniyatlari** Klassik mexanika muvofiq nur energiyasi uzluksiz ravishda tarqaladi va jismlar uni istalgan ulushda yutadi va chiqaradi deb hisoblanar edi. Ammo qizdirilgan jismlarning, xususan, “mutlaqo qora jismning” nurlanishi va uning ravshanligini chastotalar bo'yicha taqsimlanishiga aloqador bo'lgan tajribaviy natijalar shunga shubxa tug'diradi. Jism nurni qancha kam qaytarsa, u shuncha qoraroq ko'rinadi. Tushgan nurni qaytarmasdan, to'la yutib qoladigan jism bizga mutlaqo qora ko'rinadi. Ichi bo'sh va birgina tirkichga ega bo'lgan idish ana shunday mutlaqo “qora” jismga misol bo'la oladi. Bu teshikdan idish ichiga kirgan nurlar uning ichki devorlariga urilib, shu erda qoladi, ya'ni “mutlaqo qora jism” ideal yutuvchi sistemadir, shu bilan birga u ideal nurlanuvchi jism xam bo'la oladi. Ma'lum temperaturagacha qizdirilgan jism ichida “mutlaqo qora jism” eng ko'p nur tarqatadi. Nurlanish jismning qanday materialdan yasalganligiga bog'liq bo'lmasdan, faqat temperaturagagina bog'liqdir. Bu xol Stefan – Boltsmanning tajribaviy yo'l bilan kashf qilingan qonuniga ko'ra quyidagicha ta'riflanadi: mutlaqo qora jism nurlanishning to'liq energiyasi absolyut temperaturaga ko'tarilgan sari uning 4-darajasiga proportsional ravishda osha boradi, ya'ni

$$E = kT^4$$

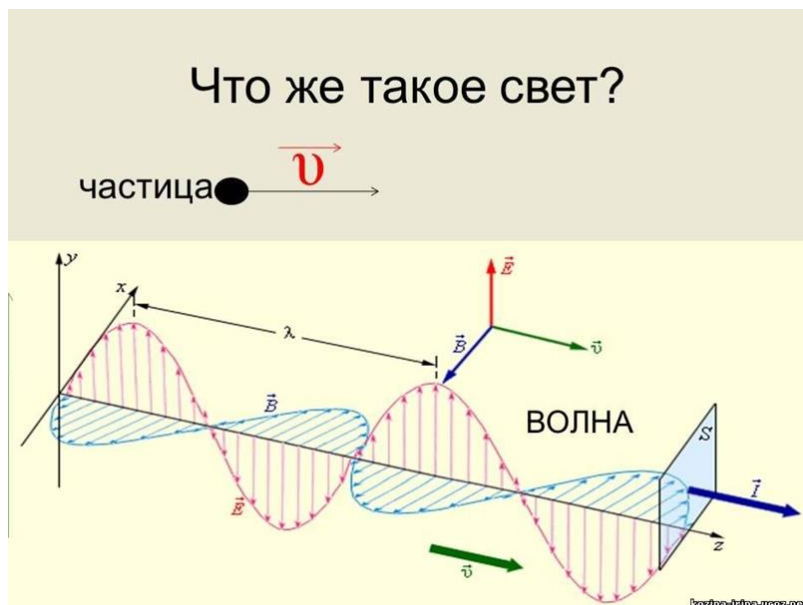
Bu birinchi xususiyat. Ikkinchi xususiyat Vin tomonidan topilgan bo'lib, u Vinning siljish qonuni deb ataladi.

$$T\lambda_{\max} = const .$$

Vinning siljish qonuni  $T\lambda_{\max} = const$  yuqori chastotalarda, ya'ni kichik to'lqin uzunliklarida, tajribada topilgan ma'lumotlar bilan a'lo darajada mos keladi va elektromagnit spektrning qarama-qarshi tomonida tajriba bilan bunday mos kelish kuzatilmaydi.

Fotoeffekt hodisasi 1887 yil Gerts tomonidan kashf qilingan va Stoletov chuqur o'rgangan; yorug'lik ta'sirida metallar sirtidan (yoki yarim o'tkazgichlar) elektron uchib chiqadi. (Fotoeffekt fotoelementlarda ishlatiladi. Bunday fotoelementlar bilan metro stantsiyalariga kirishda ishlatiladigan avtomatlar jihozlangan ular fototonning o'zgarishi natijasida ishlab ketadi). Fotoelektrik effektning eng muxim tomoni shu bo'ladiki, har bir metall uchun yorug'lik shunday bir to'lqin uzunligi (minimal chastota) borki, bu to'lqin uzunligidan

kattaroq (yoki bu chastotadan kichikroq) yorug'lik to'lqinlari metallga ta'sir etganda, ularning intensivligi xar qanday katta (kuchli) bo'lishidan qat'iy nazar, metalldan elektronlar ajralib chiqish hodisasi kuzatilmaydi. Nima uchun eng kuchli intensivlikka ega bo'lgan ko'k yorug'lik nurlarining dastasi elektronlarni oson urib chiqishini klassik fizika asosida tushuntirib bo'lmay qoldi.



**13-rasm. Yorug'lik nuri nima? Zarrachami yoki to'lqin?**

Bu xodisani Eynshteyn 1905 yili Plankning kvantlar gipotezasi asosida mukammal ravishda tushuntirib berdi. Metallarning sirtiga tushayotgan ko'k yorug'lik kvantining energiyasi qizil yorug'lik kvanti energiyasidan kattaroq bo'lishi kerak. Bu yorug'liklarni quyidagicha tasavvur qilishimiz mumkin: quyi chastotaga (yuqori to'lqinuzunligiga) ega bo'lgan qizil yorug'likni tennis shartlariga o'xshatsak, ko'k yorug'lik (yuqori chastotali-to'lqin uzunligi kichik) ni xuddi shu tezlikda uchuvchi po'latdan qilingan sharlar deyishimiz mumkin. Qizil yorug'likning xar bir kvantining energiyasi metallga juda kam ta'sir qiladi va elektronni metallan urib chiqara olmaydi (tennis sharlarining oqimi bajarmagan ishni 1 dona uchib kelayotgan po'lat shar bajaradi).

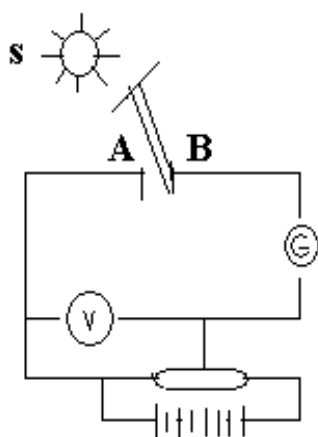


**14-rasm. Zarrachalar to'lqining ko'rinishi.**

1905 yilda Eynshteyn Plankning nur kvantlari g'oyasini yanada rivojlantirib kvantlanish xususiyati umuman yorug'likka tegishli degan fikrni ilgari surdi. Eynshteyn nazariyasiga ko'ra yorug'lik energiyasi  $h\nu$  kvantlardan fotonlardan iboratdir va shu fotonlar tarzida mavjuddir.

Fotonlar (kvantlar  $h\nu$ ) g'oyasining to'g'riligi 20-asr boshlarida yorug'likka tegishli bo'lgan va klassik to'lqin nazariyasi asosida tushuntirib bo'lmaydigan bir qator tajribalar natijalarini to'g'ri tushuntira olganligi bilan isbotlanadi. Masalan Eynshteyn fotoeffekt xodisasini nur energiyasini uning korpuskulyar tabiatini aks ettiruvchi paketning energiyasiga uning aylanishi bilan bog'liqligini ko'rsatdi (rasm) Yuqori vakuum sharoitida bo'lgan A va B metall plastinkalar orasida potentsiallar farqi mavjud bo'lsin. Muhit vakuumdan iborat bo'lgani uchun zanjir uzuq, unda tok yo'q.

#### Fotoeffekt tajribasining sxemasi:



**A** – kollektor  
**B** – emitter  
**G** – galvonometr  
**V** – voltmetr  
**S** – intensivligi va to'liq uzunligi o'zgarmas yorug'lik manbai

Agar ichki sirtiga yorug'lik nuri tushirsak, zanjirda tok paydo bo'lganligini galvonometr **G** ko'rsatadi. Zanjirdagi tokning yo'nalishi plastinkadan ajralib chiqayotgan elektr zaryadlarni manfiy ishoraga ega ekanligini ko'rsatadi. Haqiqatdan xam bular elektronlar edi. Yorug'lik ta'sirida moddadan elektronlarning chiqish hodisasiga fotoeffekt deyiladi. Uni mukammal o'rganish (Stoletov) natijasida quyidagi qonuniyatlar aniqlanadi.

1. Katod monoxromatik nur bilan yoritilgan to'yinish toki, ya'ni ajralib chiqayotgan elektronlarning maksimal soni katodga tushayotgan yorug'likning avshanligiga proporsional.
2. Katodda ajralib chiqayotgan elektronlarning tezligi unga tushayotgan yorug'likning chastotasi ortishi bilan ortadi ammo yorug'lik ravshanligiga bog'liq emas.
3. Xar bir modda uchun mutlaqo aniq maksimal to'lqin uzunligi mavjudki, bu to'lqin uzunlikda fotoeffekt xodisasini hali kuzatsa bo'ladi.
4. Fotoeffekt yorug'lik tushirilgan ondayoq boshlanadi.

Ta'kidlab o'tamizki, fotoeffekt xodisasining Maksvellning elektrodinamika hodisasi asosida izohlab bo'lmadi. Ularga binoan yorug'lik fazoda uzluksiz tarqalgan elektromagnit to'lqinidan iborat bo'lganligidan fotoelektronlar energiyasi nima uchun faqat kichik to'lqin uzunligidagi yorug'likgina elektronlarni uzib chiqaradi degan masalani tushunish mumkin bo'lmadi. Fotoeffektning sababini

Eynshteyn Plankning yorug'lik uzlukli ravishda portsiya – portsiya bo'lib chiqadi degan g'oyasini yanada rivojlantirish asosida izohlab berdi. Yorug'lik energiyasining portsiyasi  $h\nu$  o'z individualligini tarqalish jarayonida xam saqlab qoladi (yutilish va chiqarish jarayonlaridan tashqari). Yorug'lik enegiyasi  $h\nu$  ga teng bo'lgan yorug'lik tezligida xarakat qiluvchi kvantlardan fotonlardan iboratdir va u shu fotonlar tarzida tarqaladi, yutiladi, ya'ni fotonlar tarzida mavjuddir. Portsiyaning bo'laklarga ajralishi mumkin emas, u butunligicha yutilishi mumkin. Yorug'lik portsiyasining energiyasi  $E$  metalldan elektronni uzib chiqarishga va unga kinetik energiya berishga sarflanadi.

$$h\nu = A + \frac{mv^2}{2} \quad \text{bundan} \quad v = \sqrt{\frac{2(h\nu - A)}{m}}$$

Bu erda  $m$ - elektronning massasi:

$V$  – metalldan uzilib chiqayotgan elektronning tezligi.

Eynshteyn fikriga ko'ra, yorug'likning intensivligi yorug'lik oqimidagi kvantlar soniga proporsional, shuning uchun u metalldan uzilib chiquvchi elektronlar sonini belgilaydi. Yuqoridagi tenglamaga muvofiq, elektronlar tezligi ularning atomdan chiqishiga va yorug'lik chastotasiga bog'liq bo'lib, yorug'likning ravshanligiga bog'liq bo'lmaydi. Chiqish ishi esa metallning turiga va metall sirtining xolatiga bog'liq bo'ladi. Eynshteyn tenglamasidan foydalanib Plank doimiysini topish mumkin.  $V > 0$  bo'lgan hol uchun  $A < h\nu_{\min}$  va  $h\nu_{\min} < A$  :  $v_{\min}$  fotoeffektni ta'minlovchi chastota. Plank doimiysini o'zaro bog'liq bo'lmagan har xil yo'l bilan topilgan qiymatlarining bir xil chiqishi moddaning yorug'likni uzlukli ravishda chiqarishi va yutishi haqidagi fikrning to'g'ri ekanligini tasdiqladi.

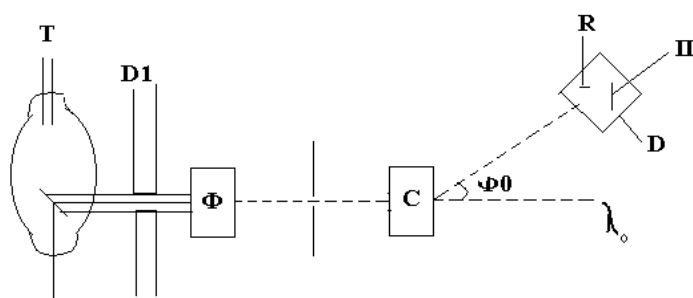
**Kompton effekti** Eynshteyn fotonlar nazariyasi 1924 yilda yana bir tasdiqdan o'tdi. Bu hodisa Kompton effekti deb nom oldi. Bu hodisada fotonlar elektronlar bilan o'zaro ta'sir etib, o'z energiyasining bir qismini elektronlarga uzatadi, buning natijasida fotonning to'lqin uzunligi ortadi va nurlanishning tarqalish yo'nalishi o'zgaradi – nurlanishning sochilishi ro'y beradi.

Bu effekt 1923 yilda amerikalik olim Kompton tomonidan ochilgan.

1912 yilda Laue tomonidan (Maks Laue 1879-1960)-nemets fizigi rentgen nurlarining difraktsiyalanishi bo'yicha olingan natijalar ular elektromagnit to'lqinlaridan iborat ekanligini ko'rsatgan edi. Rentgen nurlarining modda tomonidan sochilishini o'rganish natijasida amerika fizigi Kompton muhim hodisani kashf qildi. Kompton effekti shundan iboratki, rentgen nurlari engil atomlar tomonidan sochilganda ularning to'lqin uzunliklari o'zgaradi.

Klassik elektrodinamikaga binoan rentgen nurlarining sochilishi atomdagi elektronlarning majburiy tebranishining natijasi bo'lib, bu xolda sochilgan nurning chastotasi tushayotgan yorug'liknikiga teng bo'lishi kerak. Kompton o'tkazgan aniq o'lchashlar shuni ko'rsatadiki, sochilgan rentgen nurlari orasida to'lqin uzunligi kattaroq bo'lgan nurlar xam bo'lar ekan, ya'ni birlamchi dasta tarkibida to'lqin uzunligi  $\lambda$  ga teng bo'lgan monoxromatik rentgen nurlarigina bo'lgan xolda, sochilgan nurlar tarkibida to'lqin uzunligi  $\lambda$  bo'lganlari bilan bir qatorda undan kattaroq bo'lgan nurlar xam bo'lar ekan. Kompton tajribasining sxemasi rasmda ko'rsatilgan. Rentgen nurlarining  $D_1$  va  $D_2$  difragmalar yordamida

ajratilgan ingichka dastasining atomlari engil bo'lgan modda (o'mir, parafin va boshqalar) sochib yuboradi. Sochilgan nurlanish spektrograf yordamida o'rganiladi.



**15- rasm. Kompton tajribasining sxemasi**

T – rentgen trubkasi; F – filtr; S – sochuvchi jism; D – spektrometr; P – plastinka; K – kristall;

Spektrometr tajriba vaqtida tebranuvchi K –kristalldan va fotoplastinka P dan tashkil topgan asosiy qismga ega. Rentgen nurlarining ingichka dastasi fotoplastinka oldiga o'rnatilgan kristall orqali o'tkazilgandi, to'g'ri chiziq bo'yicha tarqalgan nurlardan xosil bo'lgan katta markaziy dog' atrofida muntazam ravishda joylashgan kichikroq dog'lar xam xosil qiladi. Bu kichik dog'lar dog'larning paydo bo'lishini rentgen nurlari kristallning tartibli strukturasi difraktsiyalanishi natijasidir deb izohlash mumkin bo'ldi.

To'lqin uzunligining kuzatiluvchi  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$  o'zgarishi sochuvchi jismning materialiga bog'liq emas, ammo sochilish yo'nalishiga bog'liq. Agar sochuvchi moddaga tushuvchi dastaning yo'nalishi bilan sochilgan yorug'lik yo'nalishi orasidagi burchakni  $\theta$  deb belgilasak, to'lqin uzunlik o'zgarishining burchakka bog'lanishini quyidagicha ifodalash mumkin:  $\Delta\lambda = 2K \sin^2 \theta / 2$  bu erda  $K = 0,0241 \text{ \AA}$  tajribaviy yo'l bilan topilgan doimiylik bo'lib, nur to'g'ri burchak ostida sochilgan vaqtida to'lqin uzunligi o'zgarishining kattaligi  $\Delta\lambda$  ni ko'rsatadi. Agar kompton hodisasini rentgen fotonlarining modda atomlari bilan to'qnashish jarayoni deb qaralsa, uning yuqoridagi qayd qilib o'tilgan xususiyatlarining barchasini tushuntirish mumkin. Fotonlar erkin elektronlar bilan to'qnashganda ularning chastotasi o'zgargan xolda sochilishi kuzatiladi, fotonlar bilan to'qnashgan elektronlar esa impuls va energiya oladi va natijada ular ma'lum yo'nalishda xarakatlana boshlaydilar. Bu xolda energiya va impuls saqlanadi:

$$h\nu = h\nu' + \frac{mv^2}{2} \quad \text{Bu erda } h\nu - \text{ tushayotgan fotonning energiyasi,}$$

$h\nu'$  - sochilgan fotonning energiyasi,

$v$  – elektronning to'qnashuvdan keyingi tezligi.

Nazariya bilan tajriba natijalarining mos kelishi rentgen nurining sochilishi kvant xodisasi ekanligini ko'rsatadi. Mazkur nazariyaga binoan xar bir elektron butun kvantni sochadi. Nazariyani tasdiqlovchi tajriba natijalari ko'rsatadiki, fotonlar faqat energiyagagina ega bo'lmasdan, impulsga xam ega. Kristall spektrometr yordamida tipik to'lqin xususiyat – to'lqin uzunligi o'lchangan.

Shunday qilib, o'tkazilgan tajriba yorug'likning xam to'lqin, xam korpuskulyar xossaga ega ekanligini birinchi bor yaqqol namoyon bo'ldi. Bu xol fanda yorug'lik dualizmi deb ataladi, ya'ni yorug'lik real fizikaviy ob'ekt bo'lib, oddiy ma'noda na to'lqin ko'rinishiga, na zarra ko'rinishiga ega. Umuman, to'lqin va zarra bir fizikaviy moxiyatning ikki shaklidir.

Agarda klassik fizika to'g'ri bo'lsa (mikrosistemalar uchun) atomning o'rtacha tebranish energiyasi (tebranish fazoviy bo'lmaganda) teng taqsimlanish printsiptiga asosan  $kT$  ga teng bo'lishi kerak. Har bir atom (masalan metalltdagi  $N$  atomlardan biri) 3 yo'nalishda tebrangani uchun metallning to'la energiyasi  $3N kT$  q ga teng bo'ladi, ( $Nk q R$  ga teng)  $q3RT$ .

Issiqlik sig'imi (masalan, molyar issiqlik sig'imi 1 mol moddani  $1^0$  ga oshirish uchun talab qilingan issiqlik miqdori)  $S_v$  (o'zgarimas xajmdagi issiqlik sig'imi) temperatura bilan namunadagi energiyaning ortishini ko'rsatib turadi:

$$dU = C_v dT$$

Shunday qilib,  $S_v$  ni xisoblab topish uchun  $dU/dT$  xisoblash kerak. Molyar ichki energiya  $U_m q3RT$  deb oldik, shuning uchun klassik fizika  $C_{v,m} q3R$  ekanligini va issiqlik sig'imining temperauraga bog'liq emasligini oldindan ko'rsatib turadi. Bu natija Dyulong va Pti qonun sifatida bizga ma'lum, u tajribaviy natijalar asosida taklif qilingan.

Eynshteyn Dyulong va Pti qonunlarini past temperaturada tekshirib ko'rdi va bu qonun temperatura pasayishi bilan tajribada olingan natijalardan farq qiluvchi natijalar berishini ko'rsatdi.

1 mol metallning to'liq energiyasi uchun Eynshteynning xisoblari quyidagi tenglamani berdi:

$$U_m = 3RT \exp(-hv/kT) / [1 - \exp(-hv/kT)]$$

Bu tenglamani Plank olgan tenglama bilan o'xshashligini aytib o'tish kerak (energiya taqsimlanishining  $v$  ga bog'liq ravishda), issiqlik sig'imini topish uchun bu tenglamani  $T$  temperatura bo'yicha differentsiallashtirish kerak:

$$C_{v,m} = 3RT (hv/kT)^2 \left\{ \exp(-hv/kT) / [1 - \exp(-hv/kT)]^2 \right\}$$

Juda yuqori temperaturada  $kT$  ning qiymatini  $hv$  ning qiymatidan ancha katta bo'ladi, shuning uchun  $\exp(-hv/kT)$  ni  $e^{-x} q1-x$   $Q \dots$  dan foydalanib ochishimiz mumkin va  $(hv/kT)$  bo'yicha 1- tartibli a'zolari qoldiramiz:

$$C_{v,m} = 3R (hv/kT)^2 \left\{ 1 - (hv/kT) + \dots / [1 - 1 + (hv/kT) + \dots]^2 \right\} = 3R,$$

bu esa klassik fizika asosida qilingan xisobga olib keladi.

Past temperaturada  $\exp(-hv/kT)$  nolga tenglashadi va shuning uchun Eynshteynning tenglamasi issiqlik sig'imining past temperaturalarda kamayishi kerakligini sifat jihatdan ko'rsatadi.

Eynshteyn va Plank nazariyalarining yutug'ining fizik sabablari bir xildir: Klassik fizikaga qarama-qarshi atom ostsillyatorlari (mikroostsillyatorlar) energiyaning faqat diskret (uzlukli) miqdorini qabul qilish mumkin. Shunday qilib, juda past temperaturalarda tebrinish uchun kerak bo'lgan energiyani xamma ostsillyatorlarni aktivlantirish uchun ichki energiya etarli darajada bo'ladi va  $3N$



tebranishlarning xammasi kuzatiladi va namunaning xossalari klassik nazariya bo'yicha berilgan issiqlik sig'imiga yaqinlashadi.

Eynshteyn modeli soddalashtirilgandir, chunki xamma atomlar qattiq moddada bir xil chastota bilan tebranadi deb qabul qilingan, aslida esa tebranish chastotalar oralig'ida bo'ladi. Bu tuzatishni Debay o'z formulasida keyinchalik hisobga olgan. Asosiy fikrimiz bo'lmasligi uchun bu masalani chuqur ko'rib o'tirmaymiz.

**Shtern va Gerlax tajribalari.** Bor postulotlari. Birgina atomning energiyasi diskret, kvantlangan qiymatlar qabul qilishi mumkin desak noto'g'ri bo'ladi. Atomning mexanik momenti (harakat miqdori momenti) xam diskret qiymatlarga ega ekanligini Shtern va Gerlaxlar tajribalarida ko'rsatgan. Shtern va Gerlax (1921) atomlarning magnit momentlarini o'lchaganlar. Bu magnit momentlar atom ichidagi oklar natijasidir, chunki bu toklar elektronlarning xarakati bilan keltirib chiqarilgan va shuning uchun atomning magnit momenti bilan aylanish impulsi orasida bog'liqlik bor. Shtern va Gerlaxlar tajribalarining mag'zi shundaki, ular atomlarning kichik tor dastasini yo'nalishi o'zgarmas, bir jinsli bo'lmagan (neodnorodnoe pole) magnit maydonida o'tkazishgan. Agar atom  $\mu$  magnit momentiga ega bo'lsa,  $H$  kuchlanganlikka ega bo'lgan magnit maydonida

$$U = -\mu H = -\mu H \cos \alpha$$

( $\alpha$  - magnit maydonning yo'nalishi bilan atom magnit momenti yo'nalishi orasidagi burchak) ga teng potentsial energiya oladi.

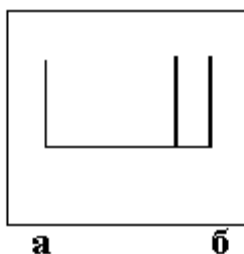
Bir jinsli bo'lmagan maydon tarafidan atomga ta'sir qilayotgan kuch (OZ o'q yo'nalishi bo'yicha o'zgarayotgan maydon)

$$F = -\partial U / \partial Z = \mu(\partial H / \partial Z) \cos \alpha \quad \text{ga teng.}$$

Maydon o'zgarishi (gradient) atomlar dastasiga perpendikulyar yo'naltirilgan edi, shuning uchun  $G'$  kuch atomlarning boshlang'ich xarakatidan chetlashishiga sabab bo'ladi. gar atom magnit momentining xamma orientatsiyalari (yo'nalishlari), ya'ni hohlagan  $\alpha$  burchak, mumkin bo'lganda (klassik fizika tasavvurlaridan kelib chiqqanga o'xshab), unda  $G'$  kuch

$$-\mu \partial H / \partial Z \text{ dan tortib, to } +\mu \partial H / \partial Z \text{ gacha}$$

bo'lgan hamma qiymatlarni qabul qilar edi. Har xil atomlar xar xil chetlashar edi va dastaning (tirqishdan o'tayotgan) ekrandagi ko'rinishi yoyiq bo'lar edi.



Natriy bug'lari dastasining magnit maydonida:  
a- maydon yo'q  
b - magnit maydon bor.

Amalda tirqishning 2 ta aniq tasviri ko'rinadi. (rasm)

Tajribaning bu natijasi shuni ko'rsatadiki, atom magnit momentining faqat 2 ta diskret orientatsiyasi mumkin:  $\cos \alpha = \pm 1$ . Keyingi xisoblashlar shuni ko'rsatdiki, dastalarning chetlashish kattaligiga atom magnit momenti  $\mu$  qiymatiga mos keladi:

$$\mu_B = eh/2mc = 9 \cdot 10^{-21} \text{ эрз} / \text{зс}$$

$e$  – elektron zaryadi:  $m$  – uning massasi:  $s$  – yorug'lik tezligi. Bu qiymat Bor tomonidan birinchi bo'lib xisoblangan (elementar kvant nazariyasi asosida) va Bor magnetoni deyiladi. Bor magnetonini magnit momentining kvanti desa bo'ladi.

Shtern va Gerlaxlar ochgan xodisani fazoviy kvantlanish deb atashadi, chunki magnit maydoni orientatsiyalarining magnit maydoniga nisbatan diskretligi haqida so'z yuritilyapti.

Shtern va Gerlaxlar kuzatgan atom magnit momenti elektronning orbital xarakati natijasi bo'lmasdan (eng avval shunday deb o'ylashgan), balki elektronga xos bo'lgan xususiy magnit momenti natijasidir. Bu fikr Shtern va Gerlaxlarning H va Ag larning normal xolati uchun o'tkazgan birinchi tajribalariga tegishlidir. Umumiy xolda atom magnit momenti elektronlarning orbital harakati xamda, ularning xususiy magnit momenti bilan bog'langandir.

Bu tajribalar o'tkazilgan paytlardan keyin tajribaviy dalillar (atom sistemalarining xolatlarining uzluqliligi) juda xam ko'payib ketdi.

Atom yadrosini o'rganish ayniqsa ko'p dalillar keltirdi. Atom yadrolari xam diskret pog'onalar sistemasiga ega ekanligi ko'rsatildi.

Hozirgi paytda elementar zarrachalarning rezonanslar elementar zarrachalarda xam diskret pog'onalar borligini ko'rsatadi.

**Elektron spini.** Orbital nozik tuzilishga qo'shimcha (1 kvant soni bilan tushuntiriladi) ishqoriy metallar spektri dublet tuzilishga ega ekanligi tajribada ko'rsatilgan. Avval bitta chiziq deb spektr chiziqlari asosida bir-biriga juda yaqin joylashgan 2 ta chiziqlardan iboratdir. Buni Bor – Zommerfeld modeli bilan tushuntirish mumkin emas edi. 1925 yil Yulenk va Gaudsmitlar bu xodisani elektronning orbital xarakatiga qo'shimcha o'z o'qi atrofida aylanishi bilan bog'liq bo'lgan harakat miqdori momentiga ega ekanligi bilan tushuntirdilar va bu aylanishga magnit momenti to'g'ri keladi. Bu yangi kvant soni  $m_s$  olib keladi. Spin harakat miqdori momentining kattaligi birligida  $\pm \frac{1}{2}$  ga teng. Musbat va manfiy qiymatlar uning yo'nalishi bilan bog'langan (yo'nalishning mahsuli). Spinlarning qarama-qarshi yo'nalishi bilan bog'liq bo'lgan energiyaning farqi nisbatan kichik bo'lsa xam. Dublet tuzilishni kuzatishga etarlidir.

1928 yil elektron spiniga kvantmexanik javob topilda. Shredingerning to'lqin tenglamasi norelyativistik edi. To'lqin mexanikasini nisbiylik nazariyasi bilan kelishtirish maqsadida Dirak shunday to'lqin tenglamasini keltirib chiqardiki, bu tenglama spinli elektron xarakat miqdori momentiga olib keldi. Dirak nazariyasiga binoan elektron xuddi shunday (Yulenk va Gaudsmit) xarakat miqdori momentiga va magnit momentiga ega (Yulenk va Gaudsmitning aylanayotgan elektroni kabi). Lekin, elektronning kvant mexanik xossalari matematik xisoblar asosida chiqarilgan bo'lib o'z o'qi atrofida aylanayotgan elektron nuqtai nazaridan keltirib chiqarilmagan.

Shredinger tenglamasi uch o'lchamli fazoda harakat qilayotgan elektronning xolatini yoritadi. Bunda nisbiylik nazariyasi xech xam xisobsha olinmaydi. Agar nisbiylik nazariyasi xisobga Shredinger tenglamasini Dirak tenglamasi bilan

o'zgartirishimiz kerak. Yuqorida aytganimizdek Dirak tenglamasidan elektronda xususiy impuls momenti va demak, xususiy magnit momenti (S) ni spin momenti deb atashadi (yoki spin deyiladi). (to spin inglizchadan: pryast, plesti, krutit (sya), vertet (sya)).

Spin – elektronning ichki erkinlik darajasidir, u faqat kvant xarakterga ega. Klassik mexanikaga o'tishda spin nolga aylanadi va klassik analogga ega emas

Spinni tushunarli bo'lishi uchun o'z o'qi atrofida aylanayotgan zaryadlangan sharga o'xshatishadi. Lekin shuni aytish kerakki, bu juda ham qo'pol o'xshatishdir, chunki elektron xech xam sharga o'xshamaydi.

Spin tushunchasi faqatgina relyativistik kvant nazariyasidan kelib chiqsa xam u norelyativistik kvant nazariyada xam qo'llaniladi. Bunday qo'llash iajribada olingan ko'p faktlarni to'g'ri tushuntiradi (atom spektrlarining nozik spektrlarini, Zeeman effektini va boshqalarni). Zarralarning bunday spinli nazariyasini fenomenologik yoki yarim empirik nazariya deb atashadi. Uning alohida momentlari bilan tanishamiz.

Elektron impulsi spin momenti kvadrati ( $S^2$ ) uchun va uning z o'qiga proeksiyasi z ( $S_z$ ) uchun matematik ko'rinish xuddi orbital momenti kvadrati  $M^2$  va uning proeksiyasi bilan o'xshashdir.

$$\begin{aligned} M^2 &= 1(1+1)h^2 & S^2 &= S(S+1)h^2 \\ (1 &= 0,1,2,\dots) & (S &= +1/2) \\ M_z &= mh & S_z &= m_s h \\ (m &= 0,\pm 1,\dots,\pm 1) & (m_s &= \pm 1/2) \end{aligned}$$

Lekin spin momentining kvant soni (S) orbital kavnt sonidan 1 dan farqli o'laroq faqat 1 ta S q 1/2 qiymat qabul qiladi.

$$S = \sqrt{1/2(1/2+1)h} = \sqrt{3/2}h$$

Demak, elektronning spin momenti yoki, qisqacha, uning spini ( $\sqrt{3/2}h$ ) ga tengdir. Ayrim xollarda elektron to'g'risida spin yarimga teng bo'lgan zarra haqida gapirishadi, bunda kvant soni S ning qiymatini tushunish kerak (elektronning xususiy momenti S ni emas).

Tez-tez uchrab turadigan “elektronning spini Q1G'2 yoki 1/2 ga teng bo'lishi mumkin” yoki “yuqoriga va pastga qaragan spinli elektron” kabi gaplarda alohida to'xtalamiz. Ikkala xolda xam gap elektronning spini xaqida emas (moment manfiy bo'lishi mumkin emas), balki magnit kvant soni  $m_s$  qiymatlari haqida ketayapti: Magnit kvant soni  $m_s$  elektronning spin momentining kvantlanish o'qiga proeksiyasini xarakterlaydi.

1. Alohida ajratilgan atomda elektronlar xarakatining shunday xolatlari borki, bu xolatlarda atom energiya chiqarmaydi (nurlanmaydi). Bu xolatlar statsionar xolatlar deyiladi. Xar qaysi bunday xolat aniq  $E_n$  (n-butun son) energiyaga ega bo'ladi (n-statsionar xolatlarining tartibini nomerini ko'rsatadi).

2. Elektronning bir statsionar xolatdan ( $E_n$  energiyasi katta bo'lgan) ikkinchisiga ( $E_h$  energiyasi kichik bo'lgan) o'tishida monoxromatik nur kvanti chiqarilishi kuzatiladi, uning chastotasi quyidagi shart bilan aniqlanadi:

$$E_n - E_h = h\nu$$

Kvantning energiyasi atomning ikki statsionar xolatlaridagi energiyalarining farqiga aniq teng bo'lgan taqdirdagina bu atom mana shu nurlanish kvantini yutish qobiliyatiga ega bo'ladi.

Bu postulotlarni quyidagicha ta'riflash mumkin:

1. Atomda shunday orbitallar mavjudki, ularda aylanayotganda elektron nurlatmaydi.
2. Nurlanish faqatgina elektron bir statsionar orbitadan ikkinchisiga sakrab o'tgandagina sodir bo'ladi.

Elektron to'liqin xossalari ega. Bu fakt avvalambor frantsuz fizigi Lui De – Broyl tomonidan nazariy aytilgan edi. Xuddi shu yili frantsuz fizigi Lui De – Broyl to'liqin zarra dualizmi faqat fotonlar uchun emas, balki barcha mikrozaralar uchun xam kuchga ega bo'lishi kerak degan g'oyani ilgari surdi. Natijada yorug'likka xam, moddaga ham tegishli bo'lgan to'liqin va korpuskulyar xossalarning sintezi vujudga keldi va ular orasidagi bog'lanish yagona tenglamalar bilan ifodalanadi.

$$E = h\nu = hc/\lambda; p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$$

Agar to'liqin sonini kiritsak:

$$K = 2\pi/\lambda = W/c$$

Impuls uchun

$$p = h/\lambda = h/2\pi \cdot 2\pi/\lambda = hK$$
 tenglamalarni olamiz.

$\lambda$  - to'liqin nazariyasining parametri;

R – korpuskulyar nazariyaning parametri;

R – fotonning xarakat miqdori (impulsi).

Bu tenglama to'liqin nazariyasi kattaligi  $\lambda$  bilan korpuskulyar nazariyaning kattaligi R ni h orqali bog'lar turadi. Elng'ektron va har qanday mikrozaralar uchun

$$\lambda = h/p = h/mv$$

ekanligini De-Broyl ko'rsatib berdi.

Bu tenglama elektronlarning difraktsiyasi (Devisson, Jermer) ochilgandan so'ng tajribaviy dalil oldi.

Bu zarra uchun to'liqin – korpuskulyar dualimdir. Bu munosabat De – Broyl tomonidan xamma zarralarga tadbiq qilindi. Bu munosabatda R impuls bilan xarakat qilayotgan va massasig teng zarrachaga to'g'ri keluvchi to'liqin uzunligi

$$\lambda = h/p = h/mv$$

orqali ifodalanadi.

Bu to'liqin uzunligi zarrachaning De-Broyl to'liqin uzunligi deb ataladi. Zarrachaga to'liqin xususiyatlarininng De-Broylgacha sezilmaganligining sababi uning to'liqin xususiyatlarining juda kichikligidir. Zarraninng to'liqin xususiyatlarini kuzatish uchun o'lchamlari atom masshtabida bo'lgan ob'ektlarini olish kerak.

De-Broyl g'oyasi 1927 yilda Devisson va Jermerlar tomonidan tajribada tasdiqlandi. Kattaligi V ga teng bo'lgan potentsial farqi ta'sirida tezlatilgan xar bir elektronlarning kinetik energiyasi  $T = eV$  bo'ladi.

Agar harakat miqdori  $m_e v = \sqrt{2m_e T}$  ekanligini xisobga olsak, tezlatilgan elektronlarning De-Broyl to'liqin uzunligi quyidagiga teng bo'ladi.:

$$\lambda = h/mv = h/\sqrt{2m_e T}$$

bu erda  $m_e$  elektronning massasi.

V q 100 eV bo'lgan xol uchun De-Broyl to'liqining uzunligi

$$\lambda = hc/\sqrt{2m_e c^2 eV} = 6/6 \cdot 10^{-27} \text{ эрл.сек} \cdot 3 \cdot 10^{10} \text{ см.сек}^{-1} / 25 \cdot 10^5 \text{ эВ} = 1.25 \text{ \AA}$$

bo'ladi. Bu qiymat rentgen nurlarining to'liqin uzunligiga yaqin. Demak, elektronlarning kristalldan difraktsiyalanish masalasining rentgen nurlarining xuddi shu kristallda sochilishi difraktsion manzarasiga o'xshashligining sababi ularning to'liqin tabiati yoki De-Broyl to'liqinlaridan ibratligi ekan. Hozirgi kunda kristallning ichki tuzilishini o'rganishda rentgenografiya bilan bir qatorda elektronlar va neytronlarning difraktsiyalanishiga asoslangan usullar ham keng qo'llaniladi. Shunday qilib, ma'lum tezlik bilan muayyan yo'nalish bo'yicha harakat qilayotgan zarracha o'zida to'liqin xossasini namoyon qiladi. Demak, yorug'lik dualizmi mikrozarralarga xam xosdir. Agar klassik tasavvurga ko'ra to'liqin uzluksiz muhitning tebranma harakati deb qaralsa, kvant tasavvuriga ko'ra to'liqin sifatida zarrachalar tarqaladi va interferentsiyalanadi. Zarracha fazoda xech vaqt biror aniq vaziyatni egallamaydi. U fazoning to'liqin amplitudasi qancha katta bo'lsa, shu nuqtada zarrani uchratish imkoniyati shuncha katta.

Zarrachalarning to'liqin xossalari ularning tarqalish jarayonida ko'plashib ishtirok etayotganligidan emasmikan degan savolni tug'diradi. Bu savoga javob berish uchun sovet olimi Fabrikant 1948 yilda quyidagicha tajriba o'tkazdi. Yakkama – yakkama yo'naltirilgan elektronlar yupqa metall plastinka orqali sochilib fotoplastinkada qayd qilindi. Natijada har bir elektron tartibsiz holda fotoplastinkaning biror bittagina nuqtasida iz qoldirdi.

Tajribada uzoq vaqt davom ettirilganda elektronlarning fotoplastinkada qayd qilingan nuqtalari to'plami taqsimotining ravshanligi maksimum va minimumlarga ega bo'ldi. Zarraning bu xil tabiatini, ya'ni zarra bilan De-Broyl to'liqini o'rtasidagi munosabatlarni qanday tushunmoq kerak.

M. Vorn yorug'lik yoki De-Broyl to'liqinining amplitudasi

$$\psi(r, t) = Ae^{i(\omega t - kr)}$$

ni fazoning biror-bir nuqtasida foton yoki zarrani qayd qilish ehtimolligi deb taklif qildi.

Zarraning qayd qilinishi ehtimolligi  $(A)^2$  ga teng bo'lib, optikada uni yorug'likning ravshanligi deb ataladi. De-Broyl to'liqinining ehtimollik xossasi yuqoridagi tajribadan ochiq ko'rinib turibdi. Xar bir elektronning plastinkadagi o'rni difraktsion manzara shartiga bo'ysunadi, lekin ehtimollik qonuni bilan tavsiflanadi. Plastinkaga kelib tushadigan ayrim elektronlarning o'rni oldindan aniq aytilish mumkin emas. Ammo fotoplastinkaga kelib tushayotgan elektronlar

soni ortishi bilan ularning fotoplastinka bo'ylab taqsimlanish statistikasi qonuniga yaqinlashadi. Klassik mexanikada zarralarning asosiy xossasi uning traektoriyaga ega ekanligidir. Makro zarra fazoning biror nuqtasida o'rnashsa qolgan qismida namoyon bo'lmaydi, aksincha klassik to'lqin optikasida to'lqin fazoning hamma qismida baravariga mavjuddir.

Kvant nazariyasining tasavvuriga binoan zarra fazoning istalgan nuqtasida bo'la oladi, lekin uni har bir nuqtada qayd qilinishi o'z ehtimolligi bilan xarakterlanadi. Shuning uchun elektron, foton va boshqa mikrozarralarning harakatini traektoriya tushunchasi bilan tasvirlash mumkin emas. Ular kvant xarakteristikalaridan tashqari klassik xarakteristikaga ega – aniq zaryadga, massaga va energiyaga egadir.

### **Muxokama uchun savollar:**

1. Fotoeffekt va uning qonuniyatlari
2. Kompton effekti.
3. Issiqlik sig'imi temperaturaga qanday bog'liq?
4. Shtern va Gerlax tajribalari nimani tushuntiradi?
5. Elektronning spini tushunchasi.
6. Devisson va Jermer tajribalari.

### **3-mavzu: GEYZENBERGNING NOANIQLIK MUNOSABATLARI**

**Mavzuga oid tayanch tushuncha va iboralar:** Yorug'lik to'lqini, to'lqinnazariyasi parametri, turg'un to'lqin, sinusoidal to'lqin, impuls, harakat miqdori momenti, korpuskulyar nazariya parametri, Plank doimiysi, chastota, amplituda, koordinata va vaqt.

#### **REJA:**

1. Mikrozarrachalarga maydon kuchlarining ta'siri.

2. Yorug'lik to'liqlarining xossalari o'rganish
3. Yorug'lik to'liqini ma'lum bir vaqtda qaerda (x o'qining qaysi qiymatida) bo'ladi va qanday to'liq soni va uzunligi  $\lambda$  ga ega bo'ladi?

1924 yilda frantsuz fizigi Lui de-Broyl korpuskulyar to'liqin dualizmi faqatgina fotonlar uchun emas, balki barcha mikrozarrahalar uchun taalluqlidir degan g'oyani ilgari surdi.

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

De – Broyl to'liqin uzunligi (to'liqin nazariyasidagi parametr) ni impuls  $P$  q  $mv$  (harakat miqdori momenti – korpuskulyar nazariya parametri) bilan Plank doimiysi orqali bog'ladi.

Lekin de-Broyl g'oyasi kvant mexanikasining yaratilishida faqat boshlang'ich turtki bo'ldi xolos. Bu g'oya mikrozarrahaning xulqi (harakatini) maydon kuchlanganligidan xoli ravishda ko'rgan. Aslida esa hamma material zarrahalar masalan elektron, maydon kuchlarining ta'siri ostida bo'ladi. Bu nuqtai nazardan elektronlar atomda markaziy simmetriyaga ega bo'lgan maydonda harakatlanadi. Bunday maydon uchun potentsial energiya yadrogacha bo'lgan masofagagina bog'liq bo'ladi. Markaziy kuchlar maydonidagi harakat qonuniyatlari atom mexanikasining asosini tashkil qiladi. Atom va molekullarning tuzilishidagi xamma ma'lumotlar ularning elektromagnit nurlanish bilan ta'sirini o'rganish natijasida olingandir. Makroskopik dunyo haqidagi bilimlarimizning ko'pi xam elektromagnit nurlanishga bog'liqdir. Yorug'lik bu elektromagnit nurlanishning bir turi bo'lib, u odamlarga ko'rish qobiliyatini beradi. Radioto'liqlar - elektromagnit nurlanishning boshqa turi. Quyoshdan erga kelayotgan barcha energiya xam elektromagnit nurlanish shaklidir.

Elektromagnit nurlanishni muhokama qilayotganda to'liqin tushunchasidan foydalaniladi. Yorug'lik to'liqinining faqat elektr maydoni (magnit maydon ham bo'lib) xisobga olib, bu yorug'lik to'liqinining elektr maydonining kuchlanganligi uchun (biror bir chastotaga ega bo'lgan) quyidagi tenglamani yozishimiz mumkin (yassi monoxromatik to'liqin uchun):

$$E = E_0 \cos 2\pi\nu\left(t - \frac{x}{c}\right) = E_0 \cos 2\pi(\nu t - kx) \quad (1)$$

Bu erda  $E_0$  – yorug'lik to'liqinining amplitudasi (yorug'likning intensivligi  $E_0^2$ ) bilan belgilanadi,  $t$  – vaqt,  $x$  – tarqalish yo'nalishidagi koordinati,  $s$  – yorug'lik tezligi,  $\nu$  - tebranishlar chastotasi (takroranligi, 1 sekunddagi davriyliklar soni),  $k$  – to'liqin soni, ya'ni 1 sm ga joylashgan to'liqin uzunliklari soni:

$$k = \frac{\nu}{c} = \frac{1}{\lambda}$$

To'liqlar amplituda, chastota va to'liqin uzunligi, va tezlik bilan harakterlanadi, va  $v\lambda$  q  $C$  ga teng.

To'liqlarning va to'liqin harakatlarining har xil tiplari ma'lum.

Masalan, musiqa asboblardagi torlar turg'un to'liqlarni beradi va ular qulog'imizga akustik to'liqlar sifatida eshitiladi.

Shredinger bo'yicha atom sistemasi (zamknutaya), shuning uchun elektronning atomdagi turg'un to'liga o'xshagan (mos keladi).

(1) formulani yozib biz yorug'lik to'lini cheksizlikdan cheksizlikka tarqalib, o'zining cheksiz uzunligida (protyajennost) biron bir chastota  $\nu_1$  to'lin uzunligi  $\lambda$  va amplituda  $E_0$  bilan harakterlanadi deb faraz qildik. Lekin aslida har qanday yorug'lik to'linining fazoda va vaqtda boshlanishi va oxiri bo'ladi: yorug'lik to'lini atom yoki molekula bilan ma'lum bir vaqtda va fazoning ma'lum bir nuqtasida chiqariladi. To'linning chiqarilishi cheksiz davom etmaydi, bir qancha vaqt o'tishi bilan nur manbai o'chadi. Shuning uchun real (haqiqatda) to'lin cheklangan sinusoida shaklida bo'ladi.

Yorug'lik to'linlarining xossalari, ularning uzunligi  $\lambda$  va  $\nu$  chastotasi (takroranligi) spektroskop asbobi yordamida o'rganiladi. Bu asbob garmonik analizator vazifasini bajaradi. Spektroskopning prizmasi har qanday real yorug'lik impulsini (cheklangan sinusoidaga o'xshash impulsni ham) cheksiz sinusoidalarning uzluksiz to'plamiga ajratadi. Bu ajralgan sinusoidalar amplitudalar, to'lin uzunliklari va chastotalari bilan xarakterlanadi.

Agar spektroskopga cheksiz cho'zilgan va ma'lum amplitudaga ega bo'lgan to'lin tushsa, spektrda  $\nu$  chastotaga ega bo'lgan  $\lambda$  dona chiziq xosil bo'ladi. Agar spektroskopga chegaralangan (cheklangan) uzunlikka ega bo'lgan to'lin (impuls - sinusoida) tushsa, spektr har xil intensivlikka ega bo'lgan va chastotalar oralig'ida (intervalida) (har xil chastotalarga ega bo'lgan) chiziqlarning uzluksiz to'plami (paketi) xosil bo'ladi. Demak, cheklangan uzunlikka ega bo'lgan har qanday yorug'lik impulsini xar xil chastota, amplituda va fazalarga ega bo'lgan cheksiz sinusoidalar to'plami bilan ifodalanishi (tavsiflanishi) mumkin va bu sinusoida uzunligiga  $S$  ga teng bo'lgan joyda to'g'ri tasvirni beradi. Impuls  $S$  ning uzunligi qanchalik kichik bo'lsa, bunday ajralgan (razlojivshixsya) sinusoidalar shunchalik ko'p bo'lishi kerak va chastotalar intervali  $\Delta\nu$  (oralig'i) shunchalik keng bo'ladi. (xar xil chastotalarga ega bo'lgan to'linlar ko'p bo'ladi).

Demak, cheksiz sinusoidalarni qo'shish natijasida shunday yorug'lik impulsini xosil qilishimiz mumkinki, uning amplitudasi fazoning ma'lum bir qismida ( $S$  kichik intervalida) noldan farq qiladi.  $S$  uzunlikdagi impulsni hosil qiluvchi monoxromatik, cheksiz to'linlarning soni intervali  $\Delta k$   $S$  bilan quyidagicha bog'langan.

$$S \Delta k = 1 \quad (2)$$

Ya'ni boshqa so'zlar bilan aytganda,  $S$  qancha katta bo'lsa, ( $S \Delta x$ -impuls uzunligi;  $x$  koordinata bo'yicha tarqaluvchi to'lin intervali,  $\Delta k$  intervali shuncha tor bo'ladi. ( $S$  impuls to'lin soni  $\Delta k$  ga teskari proporsional bo'lsa, to'lin uzunligi oralig'i  $\Delta \lambda$  ga to'g'ri proporsionaldir).

(2) tenglamani quyidagicha qayta yozamiz.

$$(3) \quad \Delta x \Delta k = 1$$

Shunday savol tug'iladi: yorug'lik to'lini ayni vaqtda qaerda ( $x$  ning qaysi qiymatida) bo'ladi va qanday to'lin soni  $k$  ga, ya'ni qanday to'lin uzunligiga ega bo'ladi? Bu savolga mutlaqo (absolyut) to'g'ri javob berish mumkin emas. Yorug'lik impulsini qanchalik tor bo'lsa,  $\Delta x$  shunchalik kichik bo'ladi va yorug'lik



impulsining holati shunchalik aniq bo'ladi, lekin shu bilan bir paytda  $k$  (to'lqin soni) qiymatlarining intervali (oralig'i) shunchalik keng bo'ladi. Va buning teskarisi, qanchalik  $k$  va  $\lambda$  lar aniq topilgan bo'lsa,  $\Delta k$  ning intervali shunchalik tor bo'ladi va  $x$  ning intervali shunchalik keng bo'ladi. Buni (ushbu xodisani) uning spetsifik to'lqin bilan tushuntirish mumkin, chunki  $\lambda$  va  $v$  tushunchalari faqatgina cheksiz sinusoidaga tadbiiq qilingandagina aniq ma'noga egadir.

Xuddi (3) tenglamaga o'xshash tenglamani shunga shunga o'xshash bo'lgan mulohazalar yuritib chastota va vaqtga xam chiqarish mumkin: 2 ta tajribani ko'ramiz.

Birinchi tajribada yorug'lik to'lqinining berilgan nuqtadan o'tish vaqtini aniq topmoqchimiz. Bunda gorizontal tarqalayotgan yorug'lik nuriga perpendikulyar ravishda xarakat qilayotgan yorug'lik fotoplastinkada yorug'lik to'lqinini kuzatamiz. Agar to'lqin cheksiz ( $S \rightarrow \infty$ ) bo'lsa, plastinka uzunligida uning sirti bo'yicha qoramtir chiziq xosil bo'ladi (yorug'lik to'lqinning izi va yorug'lik to'lqinining berilgan nuqtadan o'tish vaqti noaniq bo'ladi.) Yorug'lik impulsi  $S$  qanchalik kichik bo'lsa fotoplastinkadagi iz kalta bo'ladi va yorug'lik impulsining o'tish vaqti shunchalik aniq topiladi. Ko'rinib turibdiki vaqtning aniq topilishi faqat cheksiz kichik impuls uchun mumkindir.

Ikkinchi tajribada yorug'lik to'lqining tebranish chastotasini o'lchamoqchimiz. Buning uchun yana yorug'lik nurini spektrograf plizmasidan o'tkazib, o'tayotgan yorug'likni bu gal xarakatsiz turgan fotoplastinkada kuzatamiz. Agar to'lqin cheksiz bo'lsa va faqatgina aniq  $v$  chastotaga ega bo'lsa, fotoplastinkada ingichka spektral chiziq xosil bo'ladi va chastota aniq topilgan bo'ladi. Lekin bu xolda biz to'lqinning utish vaqti xaqida xech narsa deya olmaymiz.

Agar to'lqin impulsi cheklangan bo'lsa, yuqorida aytilgandek, u uzluksiz sinusoidalar to'plamidan iborat bo'ladi va fotoplastinkada ingichka chiziq yo'g'onlashadi. Chastotani aniq topish yo'qoladi, lekin vaqtni aniq topilishi ortadi. Va nixoyat, cheksiz kichik impuls uchun chastotani qiymatidagi noaniqlik cheksiz oshib ketadi, lekin to'lqin o'tishi vaqtini xoxlagancha aniqlik bilan topish mumkin:

$$(4) \quad \Delta v \Delta t = 1$$

Demak, bir vaqtning o'zida chastotani va yorug'lik to'lqinining o'tish vaqtini aniq o'lchash mumkin emas, bunday o'lcham xech qanday ma'noga ega emasdir.

Biz ko'rdikki,  $x$  va  $k$ ,  $t$  va  $v$  larni bir vaqtning o'zida o'lchab bo'lmaslik yorug'likning to'lqin tabiati bilan to'la belgilanadi.

Jismlarning koordinatalari va tezligining qiymatlari xar qanday moment uchun aniq bo'lsa, ular troektoriyaga ega deyiladi. Makrosistemalar uchun bu troektoriyani har doim aniqlash mumkin. Lekin elektron (va mikrozarachalar) to'lqin xossalriga ega bo'lgani uchun unga troektoriya tushunchasini qo'llab bo'lmaydi.

Yorug'lik to'lqinlari uchun yozgan:  $\Delta x \Delta k = 1$

tenglamani de-Broyl formulasini hisobga olib  $\lambda = \frac{h}{mv}$  quyidagicha yozishimiz mumkin: (4)ni o'rniga qiymatini ko'yamiz:

$$(5) \quad m\Delta v\Delta x = \Delta x\Delta p = h$$

Bu erda  $P = mv$  - harakat miqdori momenti yoki x yo'nalishdagi harakatlanuvchi elektronning impulsi  $S = \Delta x = \lambda$  ma'nosi.

Bu tenglama elektron to'lqinida bir vaqtning o'zida koordanata va tezlik (yoki impuls) ning aniq qiymatlarini topishi mumkin emasligini ko'rsatadi. Koordinataning qiymati aniq bo'lsa, ( $\Delta x \neq 0$ ), impuls hech qanday qiymatga ega bo'lmaydi  $\left(\Delta p = \frac{h}{\Delta x} \rightarrow \infty\right)$  va teskarisi.

Xuddi shunday usul bilan  $\Delta n\Delta t = 1$  tenglamadan va  $E = h\nu$  va  $\nu = \frac{E}{h}$  ni xisobga olib,

$$(6) \quad \Delta E\Delta t = h$$

tenglamani keltirib chiqaramiz.

(5) va (6) tenglamalar, birinchi bor Geyzenburg tomonidan topilgan bo'lib, noaniqlik munosabatlari deyiladi. Bu kvant mexanikasining asosiy printsiplari xisoblanadi. Verner Geyzenburg (1901-1976 yillar).

(6) munosabat zarra energiyasini  $\Delta E$  aniqlik bilan o'lchash uchun kamida  $\Delta t = \frac{h}{\Delta E}$  vaqt o'tishini ko'rsatadi. Bu munosabatga binoan, agar o'lchash uchun ketgan vaqtni o'lchash aniqligi  $\Delta t$  kichik bo'lsa, sistema energiyasini o'lchashdagi noaniqlik kattaroq bo'ladi.

Geyzenburgning noaniqlik munosabatiga binoan biz endi fazoning biror nuqtasida zarrani aniq mavjud bo'la olishi to'g'risidagi fikrdan qaytishimiz zarur bo'lib, aksincha mazkur daqiqada uni o'zining de-Broyl to'lqini egallagan fazo bo'lagining istalgan nuqtasida bo'lish ehtimolligi to'g'risida gap yuritishimiz kerak.

Geyzenbergning noaniqlik ifodasiga ko'ra nima uchun tezlanishga ega bo'lgan elektron yadroga yiqilib tushmasligi yoki nur chiqarmasligi sababini ko'rib chiqaylik. Faraz qilaylik, eger elektron yadroga tushib qolsa (2) munosabatga ko'ra uning koordinatining aniqligi ortib ketadi. Elektron yadroga tushgunga qadar  $\frac{h}{mc^2} \sim 10^{-8}$  sm oraliqda lokallashgan bo'lsada, yadroga tushgandan keyin esa  $10^{-13}$  sm masofada lokallashadi. (5) munosabatni qanoatlantirish uchun fazada aniq lokallashgan mikroob'ekt impulsining o'rtacha qiymati katta bo'lishi kerak.

Demak elektronni yadrodan nariroqda ushlab turish uchun kuch sarflamasdan, balki yadroga tushirish uchun kuch sarflashimiz kerak ekan. Shu sababdan atomdagi elektronlar yadroga yiqilmay bemalol uning atrofida to'xtovsiz aylanib turadi.

### **Geyzenbergning noaniqlik munosabatlari**

To'lqin 3 ta kattalik bilan xarakterlanadi: 1 - to'lqin uzunligi, n - chastota va  $v_f$  - fazoviy tezlik. Fotonlar uchun vaakumda fazoviy tezlik yorug'lik tezligiga (s) teng bo'ladi:

$$\lambda v = c \quad (1)$$

Bu tenglamada 2 ta kattalik  $v$  va  $\lambda$  ma'lum bo'lib, ularni tajribadi o'lchab bo'lmaydi. Makrozarrachalarga kelganda ularning korpuskulyar xossasini xarakterlaydigan kattalik  $V$  - tezlik, de - Broyl to'lqin uzunligiga (2)  $\lambda$  teskari proporsional. Zarracha tezligining (2) unga mos bo'lgan to'lqinning tarqalish tezligidan (1) farqi bo'lishi kerak.  $V \neq v_f$  desak unga to'g'ri bo'lmaydi, chunki yorug'lik nurining  $\lambda \rightarrow \infty$  de - Broyl to'lqinining to'lqin uzunligi esa kichikroq bo'ladi. Shuning uchun moddiy zarra fazoviy tezlik o'rniga gruppaviy tezlik ( $V_{gr}$ ) degan tushunchadan foydalanamiz:  $\lambda v = c$ ;  $\lambda v_{gr} = V_{gr} \lambda$ . Agar  $\lambda \rightarrow \infty$  ( $V_{gr} \rightarrow c$ ) bo'lsa,  $v_{gr} \rightarrow c$  ( $V_{gr} \rightarrow c$ ) ga teng bo'ladi. Monoxromatik nur tezligi;  $v_{gr} = c$  de - Broyl to'lqining tarqalish tezligini ifodalaydi. Bunday to'lqin impulsini to'lqin paketi deb ham aytiladi. To'lqin paketi to'lqin uzunliklari yaqinida yotgan bir qancha to'lqinlarni o'zaro bir - biri bilan ta'sirlanishi (ustma - ust taxlanish) natijasida hosil bo'ladi.

Paket markazidagi  $V_{gr}$  tezlik  $v_f$  dan farqlanadi. Fazoviy tezlik bevosita fizikaviy ma'noga ega emas. Agar muhit dispersiyalovchi bo'lmasa, ya'ni to'lqinning fazoviy tezligi uning gruppaviy tezligiga teng bo'ladi:

$v_f = v_{gr}$ . Aks holda  $v_f \neq v_{gr}$  bo'ladi. Paketning kengligi kamayishi bilan gruppaviy tezlik fazoviy tezlikka yaqinlashadi ( $v_{gr} \rightarrow v_f$ ).

Real moddiy zarrachaga mavjudlik chegarasi kichik bo'lgan to'lqin paketi to'g'ri keladi desak bo'ladi. Uning tezligi  $v$  q  $v_{gr}$  ekanligi tajribada tasdiqlangan.

$$\begin{aligned} V &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(h\nu)}{d(h/\lambda)} = \frac{d(h\nu)}{d(h/m \cdot d\nu/d\nu)} \\ &= \frac{h\nu}{h} \cdot \frac{1}{d\nu} = \frac{1}{d\nu/d\nu} = \frac{1}{m} \cdot \frac{dE}{d\nu} = \frac{1}{m} \cdot \frac{d(m\nu^2/2)}{d\nu} = \frac{1}{2} \cdot \frac{d(m\nu^2)}{d\nu} = \frac{1}{2} \cdot \frac{dE}{d\nu} = \frac{1}{2} \cdot \frac{d(m\nu^2)}{d\nu} \end{aligned}$$

Demak, xarakter tezligi -  $v$  ga, massasi  $m$  - ga teng bo'lgan zarrachaning energiyasi kelib chiqdi. Korpuskulyar hususiyat bo'lgan energiya bilan to'lqin protsesslariga xos bo'lgan xususiyat - chastota o'rtasidagi munosabat topildi.

Shunday qilib, biz elektronning korpuskulyar xossalari  $E$  va  $v$  bilan to'lqin xossalari ( $\lambda$ ,  $\nu$ ) o'rtasidagi munosabatni aniqladik. Zarrachaning massasi va zaryadini bilgan holda Plank doimiyligidan quyidagi ifoda vositasi bilan uning uzunlik olchamini aniqlash mumkin:  $r_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m c^2} = 0.53 \cdot 10^{-8} \text{ sm}$ . Bu miqdor Bor nazariyasiga asoslanib topilgan birinchi orbitaning uzunligiga teng. Molekulalardagi atomlar aro masofalar esa  $10^{-8}$  sm atrofida bo'ladi. Demak, makroxodisalar sohasidan makroxodisalar sohasiga o'tish chegarasi  $10^{-8}$  sm atrofida bo'lar ekan.

Korpuskulyar xususiyat bo'lgan impuls  $R = mv$  bilan, to'lqinlarga xos bo'lgan hususiyat 1 o'rtasidagi munosabat quyidagicha topiladi:

$$\begin{aligned} R &= mv = \frac{h}{\lambda} \cdot \frac{h\nu}{h} = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{\lambda} \\ &= \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{\lambda} = \frac{h\nu}{\lambda} \end{aligned}$$

Bu munosabat impuls  $R$  ning vektor kattalik ekanligini ko'rsatadi:

$$\vec{R} = \hbar \cdot \vec{k}$$

Bu tenglamaning chap tomoni mikrosistemalarning korpuskulyar, o'ng tomoni esa to'lqin xossasini ifodalaydi.

Endi mikroobektlar bilan ish ko'rayotgan paytimizda energiya, impuls, impuls momenti tushunchalaridan qanday foydalanish kerakligini ko'rib chiqaylik.

Yassi to'lqinlar to'plami  $X$  o'qi bo'yicha tarqalayotgan bo'lsin, to'lqinlar takrorligi  $\dot{W}$ , vektori esa  $K_x$  intervalda o'zgarayotgan bo'lsin. Agar shu to'lqinlarni bir – birini ustiga “taxlasak”, ular o'zaro tasirlashish, interferentsiyalanish oqibatida natijaviy to'lqin - to'lqin paketini hosil qiladi.

To'lqin paketini fazoda va vaqtda uchratish noaniqligi quyidagi munosabat bilan ifodalanadi:

$$\begin{aligned}\Delta \dot{W} \cdot \Delta t &\geq h \\ \Delta K_x \cdot \Delta x &\geq h\end{aligned}\quad (2)$$

Bu munosabat 1927 yilda Verner Geyzenberg tomonidan aniqlangan bo'lib, u kvant mexanikaning sosiy printsipti xisoblanadi.

Bu munosabatga ko'ra elektronning koordinatini qanchalik aniqroq topmoqchi bo'lsak, uning impulsining  $X$  o'qiga proektsiyasining qiymati shunchalik noaniqlashadi.

Zarraning koordnatasini va impulsini bir vaqtda aniqlash yo'lida vujudga kelgan koordinata – impuls noaniqligi elektronning to'lqinsimon harakati, ya'ni xaqiqatdan ham  $\Delta r$  va  $\Delta x$  sohasida yoyilganligi sababli yuzaga keladi va noaniqlik munosabati (printsipi) deb ataladi. Noaniqlik printsipti, umuman, muayyan o'zgaruvchi fizikaviy kattaliklar juftini bir vaqtda o'lchash aniqligi masalasiga talluqlidir. Noaniqlik printsipti tasiriga tobe bo'lgan fizikaviy kattaliklarning ikkinchi jufti zarra energiyasi va energiyani o'lchash uchun ketgan vaqtda:

$$\Delta E \cdot \Delta t \geq 2\pi h$$

Bu munosabat zarra energiyasini  $E$  aniqlik bilan o'lchash uchun kamida  $\Delta t = \frac{h}{\Delta E}$  vaqt o'tishini ko'rsatadi. Bo'shqacha qilib aytganda, agar sistema qandaydir istalgan o'lchash jarayonida  $\Delta t$  vaqt davomida biror xolatda mavjud bo'lsa, uning bu xolatidagi energiyasi  $\frac{h}{\Delta t} \geq 2\pi$  dan kam bo'lmagan noaniqlik bilan o'lchanadi. (3) munosabatga binoan, agar o'lchash uchun ketgan vaqtni o'lchash noaniqlik kattaroq bo'ladi. Geyzenbergning noaniqlik munosabatiga binoan, biz endi fazaning biror zarrani aniq mavjud bo'la olish to'g'risidagi fikridan qaytishimiz lozim bo'lib, aksincha. Mazkur daqiqada uni o'zining de - Broyl to'lqini egallagan fazo bo'lagining istalgan nuqtasida bo'lish ehtimolligi to'g'risida gap yuritishimiz kerak.

### **Muxokama uchun savollar:**

1. De- Broyl to'lqin uzunligi tushunchasi.
2. To'lqin turlari, turg'un to'lqin, cheklangan sinusoida tushunchalari.
3. Koordinata bilan impuls va energiya bilan vaqt orasidagi munosabatlar qanday?
4. To'lqin paketi tushunchasi.
5. Noaniqlik munosabatlaridan qanday hulosalar chiqarish mumkin?

### **4-mavzu: ShREDINGER TENGLAMASI.**

(Shredinger tenglamasining kelib chiqishi)

**Mavzuga oid tayanch tushuncha va iboralar:** Elektronning xarakati, uning to'liqin funksiyasi, to'liqin funksiyasi echimi, stasionar holat, Shredinger tenglamasi, Laplas operatori, Gamelton operatori.

**REJA:**

1. To'liqin parametrlari nima?
2. Mikrozarrachalarning muvozanat xolatdan siljishidagi xarakat qonuniyatlarini matematik usullarda taxlil qilish
2. Shredinger tenglamasini keltirib chiqarish.
3. Kvant g'oyasining xulosalari.
4. Shredinger tenglamasining bir o'lchamli potentsial chuqurligida xarakat qilayotgan elektronning xarakatiga tadbqiq etish.

Agar zarrachaning harakatini to'liqin uzunligi  $\lambda$  q  $hG'mv$  bo'lgan to'liqinsimon protsess desak, u holda shu to'liqinsimon protsessning tarqalishini harakterlaydigan kattalakni - to'liqin funksiyasi ( $\Psi$ ) va unga mos kelgan chastotani ( $\nu$ ), yani 1 sekunda to'g'ri keluvchi tebranish takrorligini topishimiz mumkin.

Fazada to'liqinsimon xarakat qilayotgan zarrachaning muvozanat holatiga nisbatan siljishi vaqt o'tishi bilan davriy bo'lib, bu siljish garmonik xarakat qonuni bo'yicha, yani sinus yoki kosinus qonuni bo'yicha ifoda etiladi.

To'liqin protsessi quyidagi parametrlar bilan haraktlanadi: to'liqin uzunligi  $\lambda$ , uning amplitudasi  $a$  va chastotasi  $\nu$ .

Bir o'lchamli yo'nalishda, yani faqat  $X$  uki bo'lib tarqalayotgan to'liqinning harakati quyidagi tenglama bilan ifoda etiladi:

$$(1) \quad \Psi = a \cdot \sin(2\pi G' \lambda) \cdot x$$

$\Psi$  ning qiymati tebranayotgan kattalikning 0 dan qanchalik farq qilishini ko'rsatadi va u siljish deb ataladi.  $2\pi x G' \lambda$  - tebranish fazasi deb ataladi. (1) formulani  $x$  bo'yicha 2 marta differentsiallasak quyidagi ifodani olamiz:

$$(2) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - (4\pi^2 G'^2 \lambda^2) \cdot a \sin(2\pi G' \lambda) \cdot x$$

(2) tenglamadagi  $a \sin(2\pi G' \lambda) \cdot x$  ni o'rniga (1) tenglamadagi  $\Psi$  ni qo'ysak

$$(3) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - (4\pi^2 G'^2 \lambda^2) \cdot \Psi$$

De - Broyl tenglamasi bo'yicha  $\lambda = \frac{h}{G'p}$  edi. Bundan  $\lambda^2$  ning shu qiymatini olib borib (3) tenglamaga qo'yamiz:

$$(4) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - 4\pi^2 G'^2 \frac{h^2}{p^2} \cdot \Psi$$

Bu erda  $R$  - zarrachaning impulsi bo'lib, uning klassik mehanikadagi qiymati  $R = mv$  edi. Shu ifodani kvadratga oshirsak va tenglamaning o'ng tomonini 2 ga ko'paytirib xam bo'lsak:

$$R^2 = 2m \cdot mv^2 = 2m E_k$$

$E_k$  - kinetik energiya. Uning o'rniga  $E_k = E - U$  ni qo'ysak  $R^2 = 2m(E - U)$ , bu yerda  $E$  - to'liqin energiya,  $U$  - potentsial energiya.  $R^2$  ning shu qiymatini (4) tenglamaga qo'ysak:

$$(5) \quad \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = - 4\pi^2 G'^2 \frac{h^2}{2m} (E - U) \Psi = - 8\pi^2 m G'^2 \frac{h^2}{2m} (E - U) \Psi$$

Endi (5) tenglamani ikkala tomonini  $- \frac{h^2}{8\pi^2 m}$  ga ko'paytirsak, quyidagi ifodani olamiz:

$$(6) \quad -\hbar^2 \nabla^2 \Psi - m \cdot \Psi = E \Psi$$

Agar to'liq 3 o'lchamli yo'nalishda tarqalayotgan bo'lsa u holda (6) tenglamaga  $\Psi$  ning u va z koordinatorlar bo'yicha differentsialarni ham qo'shib yozmoq kerak::

$$(7) \quad -\hbar^2 \nabla^2 \Psi - m \cdot \Psi = E \Psi$$

Bu tenglama kvant mexanikasining asosiy tenglamasi bo'lib, uni Shredinger tenglamasi deb ataladi. Shredinger tenglamasini soddaroq ko'rinishda yozish uchun  $\Delta$  degan simvol kiritamiz:

$$\Delta(\nabla^2 \Psi - m \cdot \Psi) = E \Psi$$

(nabla) ni Laplas operatori deb ataladi. U holda (7) tenglamani quyidagi ko'rinishda yozish mumkin:

$$-\hbar^2 \nabla^2 \Psi - m \cdot \Psi = E \Psi$$

Yoki

$$(-\hbar^2 \nabla^2 - m) \cdot \Psi = E \Psi$$

Qavs ichidagi ifoda energiya operatori yoki gamilton operatori deb ataladi va uni  $S$  simvoli bilan belgilanadi. Gamilton operatori orqali ifodalasak Shredinger tenglamasi quyidagicha ko'rinishga ega bo'ladi:

$$S \Psi = E \Psi$$

(7) tenglamadagi  $\Psi$  ni to'liq funksiyasi deb ataladi. Kimyoda uni vaqtga bog'liq bo'lmagan qismidan foydalaniladi. Demak, (7) tenglama sistemasining vaqtga bo'g'liq bo'lmagan statsionar holatlardagi to'liq funktsiyasini va energiyani hisoblab topishga imkon beradi. Shuning uchun Shredinger tenglamasini echish - shu tenglamani qanoatlantiridigan to'liq funktsiyasini  $\Psi$  ni topish demakdir.

Funktsiyaning kvadrati  $\Psi^2$  aniq fizik ma'noga ega bo'lib, u zarrachaning fazoning ma'lum bir joyida bo'lish ehtimolligini ko'rsatadi.  $\Psi^2$  ni elementlar hajmiga -  $dv$  ga ko'paytmasi to'liqsimon harakat qilayotgan zarrachalarning shu elementlar hajmida bo'lish ehtimolligini ko'rsatadi.

To'liq funktsiyasi tugallangan, bir qiymatli va uzluksiz bulishi kerak. Tugullangan bulish sharoitining ma'nosi shundan iboratki  $\Psi$  va uning kvadrati  $\Psi^2$  cheksiz fazoda emas, uning ma'lum bir joydagina 0 dan farq qiluvchi qiymatlarga ega bo'lishi kerak, ya'ni mikrozarra, masalan, elektron atomda, molekulada yoki kristalda uchratiladi. Bular esa chegaraga ega bo'lgan sistemalardir.  $\Psi$  funktsiyaning tugallangan bo'lishi uning normalanuvchanligini, ya'ni  $\int \Psi^2 dv = 1$  bo'lishini ta'minlaydi.

To'liq funktsiyasining bir qiymatli bo'lishi shu harakat qilayotgan zarrachani berilgan malum xajm elementida topish ehtimolligi aniq songa teng demakdir. U katta, kichik yoki nolga teng bo'lgan faqat bitta kimyoga ega bo'ladi.

Funktsiyaning uzluksiz bo'lishi bu zarrachaning bo'lish ehtimolligini aniqlab bo'lmaydigan xajm elementning bo'lishi mumkin emas deganidir. Bundan tashqari funktsiyaning qiymati xarakat qilayotgan zarra bo'lmaydigan erlarda 0 ga

aylanishi kerak. Shu sharoitlarga ham javob beradigan (7) tenglamaning echimi Shredinger tenglamasining xususiy funktsiyalari deb ataladi, unga to'g'ri kelgan energiya Gamilton operatorining xususiy qiymati deyiladi.

Shunday qilib kvant g'oyani qanday paydo bo'lganini yakunlab xulosa sifatida quyidagilarni takidlaymiz:

1. Mikroob'ekt xolatlarini belgilovchi fizikaviy kattaklar diskret (uzlukli) qiymatlarni qabul qiladi. Atomlar dunyosida ro'y beraydigan har qanday muammolarning echilishi  $E \geq hv$  va  $\lambda \geq hG' mv$  munosabatlarga asoslangan.

2. Mikroobektlar bir vaqtning o'zida ham zarra ( korpuskula) va ham to'lqin xossalarga ega bo'ladi.

3. Zarralarning holatlari to'lqin funktsiyasi vositasi bilan tavsiflanadi. Erkin xarakat qilayotgan zarraning to'lqin funktsiyasi de – Broyl yassi (ploskaya volna) to'lqinning matematik ifodasidir.

4. Har qanday zarra uchun de - Broyl to'lqini funktsiyasi chekli, bir qiymatlilik shartiga ko'ra  $\Psi$  funktsiya fazoning har bir nuqtasida va vaqtning har qanday daqiqasida aniq, chekli bitta qiymatga ega bo'ladi.  $\Psi$  – funktsiyasi o'zicha hech qanday funktsiyaviy ma'noga ega emas, lekin uning vaqtning ma'lum momentida fazoning biror nuqtasi uchun hisablangan absolyut qiymatining kvadrati esa, vaqtning xuddi shu nuqtasida zarrani qayd qilish ehtimoliga proporsionaldir. Bu esa  $G' \Psi G'^2$  dan butun fazo bo'yicha olingan integralning chekli bo'lishini talab qiladi.

Agar  $\int_0^{\infty} G' \Psi G'^2 dv$  q 0 bo'lsa, umuman zarra hech erda yo'q deganini bildiradi.  $dv$  – fazo elementi

Agar  $\int_{-\infty}^{\infty} G' \Psi G'^2 dv$  q  $\infty$  bo'lsa, zarra bir vaqtning o'zida

fazoning xamma qismida mavjud. Bu hol albatta tajribaga to'g'ri kelmaydigan, fizik manoga ega bo'lmaydigan xoldir.  $G' \Psi G'^2$  dan butun fazo bo'yicha olingan integral chekli bo'lishi kerak, chunki zarra berilgan vaqt momentida fazoning biror nuqtasidagina mavjud.  $G' \Psi G'^2$  ning qiymatini zarraning qayt qilish ehtimoligiga teng deb xisoblash maqsadga muvofiq bo'lib. Tajribani bu xulosani tasdiqlaydi.

Agar  $G' \Psi G'^2$  ning qiymatini berilgan vaqt momentida fazoning berilgan nuqtasida  $\Psi$  funktsiya tavsiflovchi zarraning qayd qilish ehtimoligiga teng deb qarasaq, butun fazo bo'yicha  $G' \Psi G'^2$

dan olingan integral  $\int_{-\infty}^{\infty} G' \Psi G'^2 dv \geq 1$  bo'lishi kerak, chunki

matematika tili bilan aytganda butun fazo bo'ylab zarraning qayd qilish ehtimoligi birga teng. Bu munosabatni qanoatlantiruvchi to'lqin funktsiya normallangan funktsiya deyiladi.

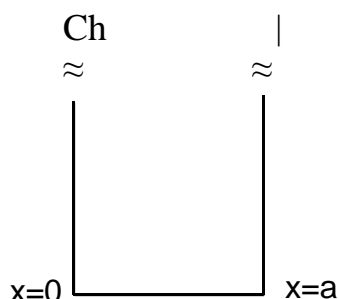
5. Mikrozarachalar klassik manoda aniq traektoriyaga ega emas. Lekin zaryad , massa va xokazo kabi klassik zarra xarakteristikalari makrozarachalarni kvant mexanikada ham xarakterlaydi.

6. Mikrodunyoning o'zgacha xususiyati tajribaning yangi nuqtai nazardan tushunishini taqozo qiladi. Mikrozarra ustida tajriba o'tkazish uning tajribagacha bo'lgan xolatini o'zgartirish demakdir. Zarraning tajribagacha to'lqin funksiyasi tajribadan keyingi to'lqin funksiyasida mutlaqo farq qiladi.

### Shredinger tenglamasining elektronning bir o'lchamli potentsial chuqurligidagi xarakatiga tadbiqu

Shredinger tenglamasini atom molekulalarining tuzilishini o'rganishga tadbiqu etilganda uning echimi juda ham murakkab bo'lib, ko'p qiyinchiliklarga duch keladi. Shuning uchun biz masalani soddaroq holicha, ya'ni potentsial chuqurligida bir tomonga qarab qarab xarakatlanayotgan elektron misolida qarab chiqamiz.

Elektron x uni bo'yicha faqat xq0 va xqa oralig'ida harakat qiladi.

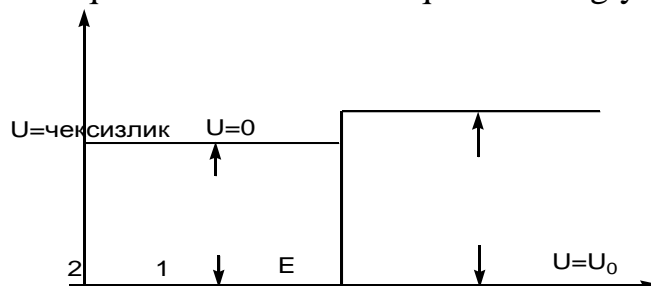


Bir o'lchamli potentsial o'ra (yashik, quti)

Potentsial qutida x ning qiymati o'zgarishi bilan uning potentsial energiyasi U quyidagicha o'zgarishi mumkin:

1.  $-\infty < x < 0$   $U_1$  q  $\infty$
2.  $0 \leq x \leq a$   $U_2$  q  $0$
3.  $a < x < \infty$   $U_3$  q  $\infty$

Demak, shu yashikdan tashqari zarraning potentsial energiyasi cheksiz katta qiymatga ega bo'lar ekan. Ya'ni zarracha  $0 < x < a$  oralig'idan chiqish mumkin emas (shu oraliqdan chiqish uchun cheksiz miqdorda energiya kerak bo'ladi).



Mazkur potentsial o'rada klassik zarraning harakatini ko'raylik. Bu oraliqda zarraga hech qanday tashqi kuch ta'sir qilmaydi. Energiyasi  $U_0$  dan kichik bo'lgan har qanday ixtiyoriy qiymatga ega bo'lishi mumkin. Natijada u potentsial chuqurlikdan chiqib keta olmaydi.



Demak, zarra potentsial quti devoriga etganda qaytadi, so'ngra temkari yo'nalishda qaytadi. Shunday qilib, klassik fizika qonunlariga binoan zarra potentsial quti tashqarisida bo'la olmaydi va uni quti ichidagi nuqtada uchratish ehtimolligi bir hil bo'ladi.

Kvant mexanikaga binoan zarraning potentsial qutidagi xarakati butunlay boshqacha ro'y beradi.

Faqat X o'qi bo'yicha potentsial qutida harakat qilayotgan elektron uchun Shredinger tenglamasini yozsak,

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{dx^2} = E \Psi$$

Bu tenglamani echish uchun shu tenglamani qanoatlantiradigan funktsiyani va energiya E ning qiymatini topish kerak.

(8) tenglamani  $\Psi = A \sin(n\pi x/a)$  bo'lgan funktsiyani qanoatlantiradi. Bu tenglamada n q 1, 2, 3, ... A - doimiy son.

Shu  $\Psi$  funktsiya (9) X bo'yicha 2 marta differentsialab, (8) tenglamaning chap tomoniga olib borib qo'ysak, quyidagi ifodani olamiz:

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{dx^2} (A \sin(n\pi x/a)) = E A \sin(n\pi x/a)$$

Bu ifoda o'z navbatida  $E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} A \sin(n\pi x/a)$  ga teng.

$$E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2} A \sin(n\pi x/a)$$

Shu tenglamada energiya E ning qiymatini topsak  $E = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ma^2}$  bo'ladi (10).

Demak, biz (8) tenglamani qanoatlantiradigan  $\Psi$  funktsiyani va energiyaning qiymatini topdik, ya'ni 1 o'lchamli potentsial qutida harakat qilayotgan elektron uchun Shredinger tenglamasini echdik.

$$n = 1 \text{ da } E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2};$$

$$n = 2 \text{ da } E_2 = 4 E_1; \quad n = 3 \text{ da } E_3 = 9 E_1$$

(10) tenglamadan ko'rinib turibdiki, kvant mehanika qonunlariga bo'ysunadigan zarraning energiyasi har qanday songa teng bo'lmasdan faqat qator aniq qiymatlarga teng bo'lar ekan, chunki n ma'lum bir butun sonlarni qabul qiladi, n ning butun sonlarni qabul qilishi  $\Psi$  funktsiyani potentsial yashikning (qutining) chekkalarida x q 0 va x q a da 0 ga teng bo'lishidan kelib chiqadi.

Shunday qilib, kvant mexanika atom va molekullardagi elektronlardagi diskret energetik pogonlarda (bunday energetik pogonlar borligi ularning spektorlarni o'rganish orqali ham o'rganilgan edi) joylashganligini va energiyaning qiymatini nazariy yo'l bilan aniqlash mumkinligini tushuntirib beradi.

Agar (10) tenglamadagi n ning son qiymatlarini (1, 2, 3, ...) qo'ysak, ularga mos kelgan energetik pogonlarning qiymatini olamiz.



Birgina X o'qi bo'ylab harakat qilayotgan zarraning xarakatini (9) tenglama bilan bir qatorda quyidagi bilan ham ifodalasa bo'ladi.

$$(11) \quad \psi = A \sin(2\pi x / \lambda)$$

(9) va (11) tenglamalardan

$$n\pi x / a = 2\pi x / \lambda$$

bundan  $\lambda = 2a/n$  ni aniqlaymiz.

1 potentsial qutida harakat qilayotgan zarraning to'liq uzunligi  $n=1,2,3,\dots$  bo'lganda  $\lambda = 2a/n; 2a/1; 2a/3, \dots$  bo'ladi  $n$  va  $\lambda$  ning shu qiymatlariga mos kelgan  $\psi$  va  $\psi^2$  funktsiyalarning grafik ko'rinishi rasmda ko'rsatilgan:

(3) tenglamada  $12 G' r_{12}$  ifodaning bo'lishi o'zgaruvchilarni ajratish imkoniyati yo'qligini ko'rsatadi, bu esa o'z navbatida tenglamani aniq echib bo'lmaslikka olib keladi. Bunday hollarda (3) tenglama tahminiy echiladi. Tahminiy echishning usullari ko'p. Shundan eng oddiy (anchoq bo'lsa ham) nolinchiy yaqinlashishidir. Bu usulda elektronlararo ta'sirni hisobga olinmaydi ya'ni

$$(4) \quad 12 G' r_{12} \approx 0$$

Bunda elementlar bir – biriga bog'liq bo'lmaydi va sistemaning (turkumning) to'liq energiyasi alohida olingan elektronlar energiyalariga teng bo'ladi.

$$(5) \quad E = E_1 + E_2$$

Sistemaning to'liq funktsiyasi esa 1 va 2 elektron to'liq funktsiyalarining ko'paytmasiga teng. Chunki ehtimollik nazariyasiga binoan bir – biriga bog'liq bo'lmagan 2 elektronning bir vaqtning o'zida fazoning 2 nuqtasida bo'lish ehtimolliklarining ko'paytmasiga teng.

$$(6) \quad \psi = \psi_1 \psi_2$$

(4) dagi shart bajarilganda (5) va (6) ni (3) ga olib borib qo'ysak, (3) tenglama ikkita bir – biriga bog'liq bo'lmagan bir elektronli sistemaning tenglamasiga aylanadi:

$$\Delta_1^2 \psi_1 + Q_1 \psi_1 = E_1 \psi_1$$

$$\Delta_2^2 \psi_2 + Q_2 \psi_2 = E_2 \psi_2$$

$\psi_1$  va  $\psi_2$  bir elektronli funktsiyalar (vodorodga o'xshagan atomlar xususiy funktsiyalari). Nolinchiy tahminlashda atomning to'liq funktsiyasi bir elektronli to'liq funktsiyalarining ko'paytmasiga, atomning energiyasi esa bir elektronli energiyalarning yig'indisiga teng bo'lar ekan.

(5) formula bo'yicha geliy atomining asosiy xolati uchun energiyani hisoblasak

$$E(\text{He}) = E_1 + E_2 = 2E_{1s}$$

### Muxokama uchun savollar:

1. Shredinger tenglamasi qanday keltirilib chiqarilishi mumkin ?
2. Laplos operatori nimani bildiradi ?
3. Gamilton operatorining manosi qanday ?

## 5-mavzu: KVANT MEXANIKANING MATEMATIK APPARATI

### REJA :

1. Operatorlar tushunchasi va operatorlar ustida bajariladigan amallar
2. Operator ko'paytmasining funktsiyaga ta'siri.
3. Operatorlarning xususiy funktsiyalari va xususiy qiymatlari

Klassik mexanika qonunlarini ifodalash uchun Isaak Nyuton yangi matematik apparat - differentsial va integral xisobni kashf qilgan va ishlab chiqqan edi. Kvant mexanika masallarini hal qilish uchun esa boshqa matematik aparat - operatorlar algebrasidan foydalaniladi.

Operator – matematik amal bo'lib, uning yordamida berilgan  $\psi$  funktsiya yangi -  $f$  funktsiyasi bilan taqqoslanadi. Buning uchun mazkur operator bilan berilgan  $\psi$  funktsiyaga tasir qilish natijasida yangi funktsiya  $f$  kelib chiqadi:  $A\psi$  q  $f$

$A$  – operator bo'lib, uni “ qalpoqcha” ishorali xarf bilan belgilanadi. Masalan,  $X^2$  funktsiyasiga differentsiallashtiruvchi operatori bilan tasir qilsak 2 funktsiyasini olamiz:

$$dG'dx (x^2) q 2 x$$

Ikkinchi misol : Aq dG'dx operatorini  $\psi(x)$  q  $\sin x$  funktsiyaga ta'sirini ko'raylik:

$$A \psi(x) q dG'dx \sin x q \cos x$$

ya'ni  $\psi(x)$  q  $\sin x$  funktsiyasi differentsiallashtiruvchi operatori yordamida  $\cos x$  ga o'tadi.

Operatorlar faqat funktsiyaga ta'sir qiladi. Doimiy kattaliklarga operator ta'sir etmaydi. Lekin operatorlar har qanday funktsiyaga ham ta'sir qilavermaydi. Funktsiya shu operator ta'siriga uchray oladigan bo'lishi kerak. Masalan, agar funktsiya differentsiallashtirilmagan bo'lsa, differentsiallashtiruvchi amalini tadbiiq qilib bo'lmaydi. Shuning uchun operatorni berayotib u ta'sir filayotgan funktsiyani ham ko'rsatish kerak.

### Operator ko'paytmasining funktsiyaga ta'siri

Agar ikkita  $A$  va  $V$  operatorlari bo'lsa, ularning ko'paytmasi  $AV$  funktsiyaga quyidagi qoidaga binoan: oldin  $f$  ga  $V$  operatori ta'sir etib yangi  $f_1$  funktsiyani hosil qiladi., so'ngra  $f$  ga  $A$  operatori ta'sir etib, ikkinchi yangi  $f_2$  ga funktsiyani hosil qiladi.

Masalan:  $AqG'dx; Vqx$ , Shu ikki operator ko'paytmasining funktsiyaga ta'siri quyidagicha:

$$AV f q dG'dx(x f)qfQx dfG'dx$$

A, V ning ta'siri, umumiy holda, AV ning ta'siriga teng emas, lekin ba'zi hususiy xollarda teng bo'lishi ham mumkin. Ikkita bir hil operatorning ko'paytmasi  $A \cdot AqA^2$  ga teng bo'ladi.

Ikkita operator yig'indisining yoki ayirmasining funktsiyaga ta'siri quyidagicha bo'ladi:

$$(A \underline{Q} V) f (x)qA f (x)Q V f (x)$$

Har qanday funktsiyaga ko'paytirilayotgan 0 ham operator, chunki u funktsiyani 0 ga aylantiradi.

Agar  $AVqVA$  (yoki  $AV - VAq0$ ) bo'lsa, u xolda A va V operatorlari **komutativ operatorlar** deb ataladi. Agar  $AV \neq VA$  bo'lsa, A va V operatorlari **nokommutativ operatorlar** deb ataladi.

$AV - VA$  q  $\{A, V\}$  ayirmasini A va V operatorlarining kommutatori deb ataladi.

### Operatorlarning xossalari

Kvant mexanikada ishlatiladigan operatorlar ma'lum xossalarga ega bo'lishi kerak. Chizikli o'z - o'ziga qo'shma (ermit) operatorlari (lineyno'e somosopryajenno'e (ermitovo'e operatoro'))

(Kvant mexanikada ma'lum sinfga mansub bo'lgan operatorlar ishlatiladi, xolos. Bu operatorlar chizikli o'z - o'ziga qo'shma operatorlar deb ataladi.)

Operatorning funktsiyalar yig'indisiga ta'siri natijasi uniing har bir funktsiyaga alohida ta'siri natijalarining yig'indisiga teng bo'lsa, bunday operator chizikli operator deyiladi.

$$L (C_1 f_1 QC_2 f_2)q C_1 L f_1 Q C_2 L f_2 \quad (1)$$

$C_1$  va  $C_2$  - o'zgarmas sonlar;  $f_1$  va  $f_2$  - operator L ta'sir qilishi (operator opredelen) mumkin bo'lgan har qanday funktsiyalar.

Masalan:

1) darajaga ko'tarish operatori  $Aq ( )^2$  chizikli emas

$$(f_1 Q f_2)^2 \neq f_1 Q f_2^2 \text{ va } (s_1 f_1)^2 \neq s_1 f_1^2$$

2) integrallash operatori  $Aq \int ( ) dx$  chizikli, chunki

$$\int (s_1 f_1 Q s_2 f_2) dx q s_1 \int f_1 dx q s_2 \int f_2 dx$$

Operatorlar va ularning xususiy funktsiyalari haqiqiy (moddiy) yoki kompleks bo'lishi mumkin, ya'ni o'zida muhim son 1 ni (iq $\sqrt{-1}$ ) tutishi mumkin.

Lekin bizga ma'lumki, fizik kattaliklar moddiy bo'lishi kerak. Bunday fizik kattaliklarga hususiy qiymati aniq son bo'lgan operatorlar to'g'ri kelishi kerak. Mana shu talab operatorlarga qo'shimcha shart qo'yadi. Ya'ni ular o'z - o'ziga qo'shma (somosopryajenno'y) yoki ermit bo'lishi kerak.

L operatori ermit bo'lishi uchun quyidagi shart bajarilishi kerak:

$$\int f_1^* (x) (L f_2(x)) dx q \int f_2(x) (L f_1(x)) dx \quad (2)$$

(2) tenglamada birdaniga operatorga kompleks qo'shma (\*) belgini qo'shib yozish bilan birga  $f_1$  va  $f_2$  funktsiyalarning o'rinlari almashtirilayotir. Funktsiya va operator ( ) belgining bo'lishi ularda mavhum son I ning borligini ko'rsatib operator va funktsiya oldidagi ishoraning o'zgarishi zarurligini bildiradi: ya'ni i q -

$i_1 f^* q - \int$  va hakazo. Masalan, operatr d G'dx o'z -o'ziga qo'shma (ermit) emas: Agrumeti bir hil X bo'lgan 2 ta funktsiya berilgan bo'lsin:  $f_1(x)$  va  $f_1(x)$  Shu ikki funktsiya ( $x_1$  va  $x_2$ ) oraliqda o'zgarayotgan bo'lsin. Chegara qiymatlarda  $f_1(x_1)$  q  $f_2(x_1)$  q  $f_1(x_2)$  q  $f_{12}(x_2)$  q0 sharti bajariladigan bo'lsa, bu xolda bu quyidagi ikki integralning o'zaro tengligini isbotlash kerak.

$$J_1 q \int f_1^* dG' dx f_2 dx; J_2 q \int f_2^* dG' dx f_1 dx;$$

Agar  $J_1$  q  $J_2$  bo'lmasa dG'dx operatori ermit bo'lmaydi.  $J_2$  ni bo'laklab ntegralalash  $\int u dv$  q  $uv - \int v du$  qoidasiga binoan integrallaymiz ( $f_2$  qu;  $f_1^*$  q v; dG'dx  $f_2 dG'dx$  q du deb belgilaymiz:

$$J_2 = \int_{x_1}^{x_2} f_2 d/dx f_1^* dx = \int_{x_1}^{x_2} f_2 f_1^* - \int_{x_1}^{x_2} f_1^* d/dx f_2 dx f_2 f_1 \int_{x_1}^{x_2} = 0 \text{ bo'lgani uchun}$$

$J_1$  va  $J_2$  integrallari o'zaro ishoralarim bilan farq qilayapti  $J_1 \neq J_2$  shuning uchun dG'dx operatori ermit emas.

### Operatorning xususiy funktsiyalari va qiymatlari

Nolga aynan teng bo'lmagan funktsiyaga t'asir etganda ba'zi hollarda yangi funktsiya hosil bo'lish o'rniga dastlabki funktsiyaning o'zi o'zgarimasdan qolishi mumkin. Farq shundaki u biron o'zgarimas songa ko'paytirilgan bo'ladi. Masalan: u  $q e^a f$  funktsiyaga L qd G'dx operatorining ta'sirini ko'raylik:

$$d G' dx e^{ax} q a e^{ax}$$

Bu erda a -o'zgarimas son. Umumiy holda

$$L f q L f \quad (1)$$

Bu erda L - operator. L q L operatorning hususiy qiymati deyilib, u f funktsiya va operator hiligi bog'liq bo'lgan son. (3) tenglamani qanoatlantiruvchi f funktsiyasi L operatorining hususiy funktsiyasi deyiladi.

Har qanday funktsiya va har qanday qiymatlar uchun ham (3) tenglik bajarilavermaydi. Masalan: L qdG'dx operatori u  $q e^{ax}$  funktsiyaga ta'sir qilayotganda L q 2 q j hol uchungina(3) shart bajariladi.  $u q e^x$  funktsiya esa ning qanday qiymatga ega bo'lishidan qat'iy nazar (3) tenglamani qanoatlantirmaydi. Chunki dG'dx operator ta'sirida butunlay boshqacha yangi funktsiya xosil bo'ladi: u q  $x e^x$

Ba'zi hollarda L ning bitta emas bir nechta qiymtlari ham (3) ni qanoatlantiradi. L ning har qanday qiymatlari uchun yuqoridagi tenglama (3) nolga teng bo'lmagan echimga ega bo'lsa, u holda xususiy qiymatlarning to'plami (majmuasi) ni hususiy qiymatlarning operatori deb ataladi.

### O'z - o'ziga qo'shma operator to'g'risidagi postulat

Klassik fizikadagi har qanday dinamik o'zgaruvchiga(koordinata, impuls, energiya, ...) kvant mehanikada chiziqli o'z- o'ziga qshma operator to'g'ri keladi. Masalan:  $E \rightarrow N$

$$\text{Impulsga } R_x \rightarrow i\hbar \partial G' \partial x$$

Operator deganda matematik amal tushunilib, uning ta'siida x,y,z, ... o'zgaruvchilarga ega bo'lgan biron bir funktsiyadan, huddi shu o'zgaruvchiga bog'liq bo'lgan boshqa funktsiya keltirilib chiqariladi.

6. Holatlarning superpozitsiya printsiipi.

Bu printsip operatorning chiziqli bo'lish hususiyatidan kelib chiqadi. Agar zarracha  $\psi_1$  va  $\psi_2$  holatlarda joylashishi mumkin bo'lsa, u holda ushbu zarracha

$$\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$$

holatda ham joylashishi ham mumkin. Bu erda  $s_1$  va  $s_2$  – doimiy sonlar.  $\psi_1$  va  $\psi_2$  va to'liq funktsiyasiga ega bo'lgan holatlarning chiziqli kombinatsiyasidan  $\psi$  holat keltirilib chiqariladi. Xyukkelning MO usulini o'rganayotganimizda ushbu mavzuda to'xtab o'tamiz.

### **Ko'p elektronli atomlar. geliy atomi uchun Shredinger tenglamasi. Nolinchi yaqinlashish usuli**

**Dars maqsadi:** Talabalarga ko'p elektronli atomlar, masalan, geliy atomi uchun Shredinger tenglamasining tadbqiqi hamda to'liq funktsiyasi va unga muvofiq keluvchi energiyani hisoblashning nolinchi yaqinlashish usuli haqida tushuncha berishdan iborat.

#### **Identiv o'quv maqsadlari:**

1. Ko'p elektronli atomlar, masalan, geliy atomi uchun Shredinger tenglamasini tadbqiqi eta oladi.
2. To'liq funktsiyasi va unga muvofiq keluvchi energiyani hisoblashning nolinchi yaqinlashish usulini tushunadi.

Vodoroddan boshqa hamma elementlarning atomi ko'p elektronli atom deyiladi. Ularning fizik va kimyoviy a hossalari elektronlarning yadro bilan tortilib turish energiyasiga va elektorn qobig'larning tuzilishiga bog'liq . Ko'p elektronli atomlarda elektron bulutning qanday tarqalganligini, uning energiyasi va boshqa fizik xarakteristikalarining Shredinger tenglamasini echib aniqlash mumkin. Lekin ko'p elektronli sistemalar (turkumlar) uchun Shredinger tenglamasini aniq echib bo'lmaydi (lekin tajribaga yaqin, mos kelgan natijalar olishi mumkin)

Kup elektronli atomlarning eng oddiyi bo'lgan geliyning Ne tuzilishini qarab chiqamiz. Geliydagi elektronlarning bulutining zichligi va hossalri  $\psi$  to'liq funktsiyasi oqali aniqlanadi.  $\Psi$  funktsiyasini va atomning to'liq energiyasini Shredinger tenglamasini echish orqali topish mumkin. Ne atomida 2 ta elektron bo'lganligi uchun Shredinger tenglamasi quyidagicha yoziladi:

$$(1) \Delta^2 \psi + Q \Delta^2 \psi + Q 8\pi^2 mG'h^2 (E-U) \psi = 0$$

Laplas operatorlaridagi 1 va 2 simvollar  $\psi$  funktsiyasini differentsiallashni birinchi va ikkinchi elektronlarning koordinatalari bo'yicha bajarilganligini ko'rsatadi. Potentsial energiya

$$(2) U = -\frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_1} - \frac{Z^2 e^2}{4\pi\epsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}}$$

bunda birinchi va ikkinchi ifoda 1 va 2 elektronlarning yadroga tortilish energiyasi, uchinchi ifoda esa elektronlarning o'zaro itarilish energiyasidir. (2) ni (1) tenglamaga qo'ysak

$$(3) \Delta_1^2 \psi Q \Delta_2^2 \psi Q 8\pi^2 m G' h^2 q EQz l^2 G' r_2 - l^2 G' r_{12} \psi q 0$$

(3) tenglamada  $l^2 G' r_{12}$  ifodaning bo'lishi o'zgaruvchanlarni ajratish imkoniyati yo'qligini ko'rsatadi, bu esa o'z navbatida tenglamani aniq echib bo'lmazlikka olib keladi. Bunday hollarda (3) tenglama tahminiy echiladi. Tahminiy echishining usullari ko'p. Shundan eng oddiyisi (ancha noaniq bo'lsa ham) nolinchiy yaqinlashishdir. Bu usulda elektronlararo tasirni hisobga olinmaydi, ya'ni

$$(4) L^2 G' r_{12} q 0$$

Bunda elektronlar bir – biriga bog'liq bo'lmaydi va sistemaning (to'rkumning) to'liq energiyasi alohida olingan elektronlar energiyalarining yig'indisiga teng bo'ladi:

$$(5) E q E_1 Q E_2$$

Sistemaning to'liq funktsiyasi esa 1 va 2 elektronlar to'lqin funktsiyasining ko'paytmasiga teng. Chunki ehtimollik nazariyasiga binoan bir – biriga bo'g'liq bo'lmagan bir elektronli sistemaning tenglamasiga aylanadi:

$$\Delta_1^2 \psi_1 Q 8\pi^2 m G' h^2 q (E_1 Q l^2 G' r_1) \psi_1 q 0$$

$$\Delta_2^2 \psi_2 Q 8\pi^2 m G' h^2 q (E_2 Q l^2 G' r_2) \psi_2 q 0$$

$\psi_1$  va  $\psi_2$  bir elektronli to'lqin funktsiyalar (vodorodga o'xshash atomlarning hususiy funktsiyalari). Nolinchiy tahminlashda atomning to'lqin funktsiyasi bir elektronli to'lqin funktsiyalarning ko'paytmasiga, atomning energiyasi esa bir elektronli energiyalarning yig'indisiga teng bo'lar ekan.

(5) formula bo'yicha geliy atomining asosiy holati uchun energiyani hisoblasak

$$E(\text{He}) q E_1 Q E_2 q 2E_{1s}$$

$2E_{1s}$  vodorodsimon atomning ( $\text{Ne}^Q$  - ioni) asosiy holatdagi elektronning energiyasi.

Shu yo'l bilan Ne atomi uchun hisoblangan energiyaning qiymati tajribada topilganidan anchagina farq qiladi. Bunga sabab elektronlarning o'zaro itarilish kuchini hisobga olinmaganligidir.

Hozirgi vaqtda masalani tahminiy echishning ko'pgina metodlari ishlab chiqarilgan. Shulardan eng anig'i Angliyalik olim Xartri va sovet fizigi Fok tomonidan taklif etilgan metoddir.

### Muxokama uchun savollar:

1. Ko'p elektronli atomlarning energiyasini aniqlash usullari.
2. Nolinchiy yaqinlashishi usuli.
3. Xartri – Fok usuli

## 6-mavzu: KOVALENT BOG'NING KVANT MEHANIK NAZARIYASI

Ajratilgan vaqt-2 soat

**Mavzuga oid tayanch tushuncha va iboralar:** kovalent bog', nolinchi yaqinlashish, o'zgaruvchan parametrlar, variatsion usul, kvant mexanik nazariya Kulon integrali, almashinish integrali. qoplash integrali, simmetrik va antisimmetrik funktsiyalarining energiyasi.

### REJA:

1. Vodorod molekulasida hosil bo'lishida nolinchi yaqinlashishining o'zgaruvchan parametrlari.
2. Molekula hosil bo'lishini variatsion usulda asoslash.
3. Simmetrik va antisimmetrik funktsiyalarining energiyasi.

Kvant mexanikaning asosiy tenglamasi bo'lgan Shredinger tenglamasi kashf etilgandan keyin, ya'ni 1927 yilda Geytler va London vodorod molekulasidagi kimyoviy bog'ni kvant mexanikasi yordamida tushuntirdilar. Ularning bu ishi kimyoviy problemlarni kvant mexanika yordamida hal etishda dastlabki qadam bo'lib, kvant kimyoning keyingi rivojlanishida katta rol o'ynadi.

Nima uchun N atomlari alohida – alohida yurmasdan 2 tasi o'zaro qo'shib molekula hosil qiladi? Ular bir - birlari bilan qanday bog'langan? Bu savollarga javob berish uchun molekulaning to'liq energiyasini topishimiz kerak, chunki atomlarni bog'lab turadigan vosita energiyadir.

Molekula mikrozarralardan iborat sistema bo'lganligi uchun uning energiyasini Shredinger tenglamasi yordamida aniqlash mumkin:

$$-\hbar^2 \nabla^2 \psi + U(\mathbf{r}) \psi = E \psi \quad (1)$$

Demak, vazifa potentsial energiyasini topish va shu tenglamani qanoatlantiradigan to'liq funktsiyasini  $\psi$  ni tuzishdan iborat. So'ngra  $U$  va  $\psi$  larni (1) ga qo'yib  $E$  ni topishimiz mumkin.

Lekin Shredinger tenglamasini o'zaro ta'sirlashayotgan 3 ta zarracha uchun aniq echilgan. (N atomi,  $\text{Ne}^Q$  va  $\text{N}^Q_2$ ).

O'zaro ta'sirlashayotgan zarrachalarning soni 4 ta va undan ortiq bo'lsa (1) tenglamaning aniq echimi bo'lmaydi. Vodorod molekulasida 4 ta zarracha bo'lgani uchun Geytler va London bu molekula uchun Shredinger tenglamasiing tahminiy echimini topdilar.

Takribiy echish yo'llaridan biri nolinchi yaqinlashishidir. Bu yaqinlashishida  $\text{N}_2$  ni o'zaro ta'sir qilmayotgan yonma – yon turgan 2 ta atomdan iborat deb faraz qilinadi. Bunday molekulaning potentsial energiyasi alohida olingan 1 – chi va 2 -chi atomlar potentsial energiyalarning yig'indisiga teng:

$$(2) U_{\text{H}_2} \text{ q } \phi_a(1) \phi_v(2)$$

Ma'lumki,  $\psi$  funktsiyasi emas, balki uning kvadrati fizik ma'noga ega. Shuning chun  $\psi_{\text{N}_2}^2$  bir vaqtda 1 – elektronni a yadrosi yaqinida, 2 – elektronni esa v yadrosi yaqinida bo'lish ehtimolligini ko'rsatadi.



(2) va (3) ni (1) ga qo'yib, tenglamani echsak, nolinchii yaqinlashishidagi vodorod molekulasiining energiyasini aniqlashimiz mumkin:

$$(4) E_{N_2} q - 4\pi^2 m e^4 G^2 h^2$$

$m$  – elektronning massasi,  $e$  – zaryadi,  $h$  – Plank doimiysi.

1 va 2 elektronning bir – biridan farqi bo'lmanagani uchun ularning o'rinlarini almashtiramiz, ya'ni 1 – elektron  $v$  yadro, 2- elektron esa  $a$  yadro atrofida aylanib yuribdi deb hisoblaymiz. Shu g'olat uchun molekulaning to'qin funktsiyasi quytdagicha bo'ladi:

$$(5) \psi_{N_2} q - \varphi_v(1) \varphi_a(2)$$

Bu funktsiya ham molekulaning funktsiyasi bo'la oladi.  $G' \psi_{N_2} G'^2$  esa bir vaqtning o'zida 1- elektronning  $v$  yadrosi, 2- elektronning  $a$  yadrosi yaqinida bo'lishi ehtimoligini ko'rsatadi. (5) funktsiyaga mos kelgan energiyaning qiymati

$$(6) E_{N_2} q - 4\pi^2 m e^4 G^2 h^2$$

(4) va (6) tenglamalarda ko'rinib turibdiki, ayniy holatlari uchun (3) va (5) funktsiyalar uchun energiyaning qiymati bir hil. 2 ta xolatga bir hil energiya to'g'ri kelsa, bkn day holatlarni ayniy (vrojdennie sostochniya) xolatlar deyiladi.

Kvant mehanikasi ko'rsatadiki, ayniy xolatlar uchun (3) va (5) funktsiyalardan tashqari shu funktsiyalarning chiziqli kombinatsiyalari ham molekulaning to'lqin funktsiyasi bo'la oladi

$$(6) \psi_{N_2} q s_1 \varphi_a(1) \varphi_v(2) Q s_2 \varphi_v(1) \varphi_a(2)$$

$s_1$  va  $s_2$  - o'zgaruvchan parametrlar bo'lib,  $N_2$  uchun  $s_1 q \pm s_2$  bo'ladi. Demak,  $s_1$  va  $s_2$  ning qiymatiga qarab to'lqin qunktsiyasi 2 hil bo'lishi mumkin. Agar  $s_1 q \pm s_2$  bo'lsa, u holda (7) tenglama quyidagicha bo'ladi:

$$(7) \psi_Q(1,2) q c_1 \varphi_a(1) \varphi_v(2) - c_1 \varphi_v(1) \varphi_a q [ \varphi_a(1) \varphi_v(2) Q \varphi_v(1) \varphi_v(2) ]$$

Agar  $s_1 q .s_2$  bo'lsa, u holda

$$(8) \psi_{-}(1,2) q s_1 [ \varphi_a(1) \varphi_v(2) - \varphi_v(1) \varphi_a(2) ]$$

(9) tenglamadan ko'rinib turibdiki, elektronlarning o'rinlarini almashtirib qo'yilsa, funktsiya ishorasi o'zgarmaydi, ya'ni

$$\psi_Q(1,2) q \psi_Q(2,1)$$

Aksincha, huddi shunday o'rin almashtirilgan vaqtda (9) tenglamadan ko'rinib turibdiki, funktsiyaning ishorasi o'zgaradi, ya'ni

$$\psi_{-}(1,2) q .\psi_{-}(2,1)$$

$\psi_Q(1,2)$ ni simetrik to'liqin funktsiyasi deyiladi.

$\psi_{-}(2)$ ni antisimmetrik funktsiyasi deyiladi. Keyinga yaqinlashishi (nolinchi emas).

Endi  $N_2$  molekulasidagi potentsal energiyani hisoblaymiz, ya'ni turli atomlarga tegishli elektronlar va yadrolarning o'zaro ta'sirini hisobga olaylik. U holda 4 ta zarrachadan iborat bo'lgan  $N_2$  ning potentsial energiyasi 6 ta qismdan iborat bo'ladi:

$$(10) U = \frac{1}{2} G' a_1 - \frac{1}{2} G' r_{v2} - \frac{1}{2} G' r_{a2} - \frac{1}{2} G' r_{v1} + \frac{1}{2} G' r_{12} + \frac{1}{2} G' R_{av}$$

–  $\frac{1}{2} G' r_{a1}$  – birinchi elektronning a yadrosi yaqinida bo'lgandagi potentsial energiyasi;

–  $\frac{1}{2} G' r_{v2}$  – ikkinchi elektronning v yadrosi bo'lgandagi potentsial energiyasi.

(10) tenglamaning qolgan 4 ta xadi elektron va yadrolarning o'zaro ta'sirlashgandagi potentsial energiyasini tashkil qiladi. (10) tenglamadagi energiyaning 4 tasi

tortishish va 2 tasi itarilish potentsial energiyasidir. Bundan ko'rinib turibdiki, bunday holatda sistemaning potentsial energiyasi nolinchi yaqinlashishga qaraganda kichikroq qiymatga ega bo'ladi. Bu esa o'z navbatida sistemaning to'liq energiyasi – E ning kamayishiga olib keladi.

Zarrachaning o'zaro ta'sirini hisobga olganimizda bunday sistemalar uchun Shredinger tenglamasini to'liq qanoatlantiradigan  $\psi$  – funktsiyasini topish ancha qiyin. Shuning uchun haqiqiy  $\psi_0$  va  $E_0$  ga yaqin bo'lgan  $\psi$  va E larni tarkibi topiladi Tarkibiy hisoblash metodlaridan biri variatsion usul bo'lib, uning printsiplari quyidagicha:

Shredinger tenglamasini Gamilton operatori orqali yozsak:

$$(11) N\psi = E\psi$$

Shu tenglamani 2 tomonini  $\psi$  ga ko'paytiramiz:

$$(12) \psi N\psi = E\psi^2$$

Bundan

$$(12) E = \frac{\int \psi N\psi}{\int \psi^2}$$

Agar  $\psi$  funktsiyaning ifodasi ma'lum bo'lganda edi, uShredinger tenglamasining echimi bo'lib, (13) tenglama E ning qiymatini bergan bo'lar edi (fazoning hoholagan nuqtasi uchun). Lekin  $\psi$  funktsiyaning aniq ifodasi ma'lum emas. Bu noaniqliklarni butun fazo bo'ylab ( $-\infty$  dan  $Q$   $\infty$  gacha) integrallash natijasida yo'qotish mumkin:

$$(13) E = \int \psi H\psi dv / \int \psi^2 dv$$

bu erda  $dv$  - hajm elementi

$\psi$  – funktsiya normallanuvchi bo'lgani uchun, (14) tenglamaning maxraji 1 ga teng bo'ladi, ya'ni  $\int \psi^2 dv = 1$ , u holda

$$(14) E \int \psi H \psi dv$$

Agar to'liq funktsiyasiga yaqin bo'lgan  $\psi$  - funktsiyasini tuza olsak, u holda (14) va (15) tenglamalar orqali molekulaning asosiy xarakteri stkasi bo'lgan elektronni, yuqorida aytganimizdek, variatsion, usul bilan tanlanadi.

Variatsion usulda tanlangan  $\psi$  -funktsiya orqali (14) yoki (15) tenglama bilan hisoblanadigan energiya  $E$  ning qiymati qanchalik kiyachik bo'lsa, bu energiya ham shunchalik haqiqiy eneriyaning  $E_0$  ning qiymatiga yaqin bo'ladi va tanlangan to'liq funktsiyasi esa, haqiqiy funktsiyaga yaqin bo'ladi.

$$(1) E \int \psi H \psi dv = G \int \psi^2 dv$$

Formuladan foydalanamiz.

Atomlardagi molekula hosil bo'lganda ular o'z konfiguratsiyalarini ma'lum darajada saqlab turadi, atom orbitallardagi elektronlarning spinlari juftlanishi hisobiga atomlar o'zaro bo'g'lanib keladi. Molekulaning to'liq funktsiyasi alohida, indivudal atomlarning to'liq funktsiyalarining ko'paytmasi sifatida tuziladi. Bu qoida superpozitsiya printsipi deyiladi. Superpozitsiya printsipiga ko'ra, molekulaning real holatini ifodalovchi to'liq funktsiyasi alohida ayniy holatlar to'liq funktsiyalarining chiziqli kombinatsiya sifatida tuziladi:

$$(2) \psi = c_1 \phi_a + c_2 \phi_b$$

Ushbu tenglamadagi  $s_1, s_2$  har bir holatining molekula umumiy holatiga qo'shgan hissasi ko'rsatuvchi o'zgaruvchan ko'effitsentlar bo'lib, vodorod molekulasiga uchun  $s_1 = \pm s_2$  bo'ladi. Ko'effitsentlar tanlashdagi birinchi qoida shundan iboratki, bu qiymatlar to'liq funktsiyaning normallanish shartiga muvofiq kelsin, ya'ni to'liq funktsiya  $\int \psi^2 dv = 1$  shartni qanoatlantirishi lozim. Demak,  $s_1$  va  $s_2$  ning qiymatiga qarab to'liq funktsiyasi 2 hil bo'lishi mumkin. Agar  $s_1 = \pm s_2$  bo'lsa,  $\psi_Q(1,2)$  (8 tenglama) bo'ladi.  $\psi_Q(1,2)$   $Q \psi_Q(2,1)$  simmetrik funktsiya.

Agar  $s_1 \neq \pm s_2$  bo'lsa,  $\psi_{(1,2)}$  (9 tenglama) ga teng bo'ladi.  $\psi_{(1,2)}$   $Q \psi_{(2,1)}$  antisimmetrik funktsiya.

Bu uchal tarkibiy bo'lgani uchun  $E$  ga yaqin bo'lgan energiyani molekulaning to'liq energiyasi deb qabul qilinadi.

Variatsion usuldan foydalanib, molekulaning real holatini ifodalovchi to'liq funktsiyasini alohida to'liq funktsiyalarining chiziqli kombinatsiyasi sifatida tuzib (2), (1) tenglamaga qo'yamiz va ko'p elektronli sistemalarning energiyasini hisoblab topamiz:

$$(3) \int (s_1 \phi_1 + c_2 \phi_2) N (s_1 \phi_1 + c_2 \phi_2) dv = G \int (s_1 \phi_1 + c_2 \phi_2)^2 dv = c_1^2 \int \phi_1 N \phi_1 dv + c_2^2 \int \phi_2 N \phi_2 dv + 2 c_1 c_2 \int \phi_1 N \phi_2 dv$$

(3) tenglamani soddalashtirish uchun belgilar kiritamiz:

Gamilton operatorini tutuvchi integrallarni  $\alpha$  va  $\beta$  bilan, tutamaydganlarni  $S$  bilan belgilab, belgilar pastiga integral ostida qanday funktsiyalar turganinni ko'rsatamiz:

$$\int \phi_1^2 dv = 1; \int \phi_2^2 dv = 1 - \text{normallanuvchi funktsiya};$$

$\int \varphi_1 \varphi_2 dv$  qS<sub>12</sub>;  $\int \varphi_1 \varphi_2 dv$  qS<sub>21</sub>; -qoplash integrallari;  
 $\int \varphi_1 N \varphi_1 dv$  qα<sub>1</sub>;  $\int \varphi_2 N \varphi_2 dv$  qα<sub>2</sub>; -kulon integrallari;  
 $\int \varphi_1 N \varphi_2 dv$  qβ<sub>1</sub>;  $\int \varphi_2 N \varphi_1 dv$  qβ<sub>2</sub>; -almashinish integrallari.

Shu belgilarni (3) tenglamaga qo'ysak

$$(4) E q c_1^2 \alpha_1 Q c_1 c_2 \beta_1 Q c_1 c_2 \beta_2 Q_2 G' c_1^2 Q c_1 c_2 S_{12} Q s_2^2$$

α<sub>1</sub>q α<sub>2</sub>q α va S<sub>12</sub> S<sub>21</sub> bo'lgani uchun

$$(5) E q c_1^2 \alpha_1 Q 2c_1 c_2 \beta Q c_2^2 \alpha_2 G' c_1^2 Q 2c_1 c_2 S_{12} Q s_2^2$$

Energiyani (5) tenglama bo'yicha aniqlash uchun variatsion usuldan foydalanamiz. Bu usul bo'yicha c<sub>1</sub> va c<sub>2</sub> koifitsientlarini shunday tanlash kerakki, uni (8) simmetrik funktsiyaga qo'ygan vaqtdagi to'lqin funktsiya energiyaning minimal qiymatiga to'g'ri kelsin. Ekstramumlik shatriga binoan energiyaning c<sub>1</sub> va c<sub>2</sub> lar bo'yicha olingan hosilasi nolga teng bo'lsagina, ya'ni  $\partial EG' / \partial s_1 q = 0$ ;  $\partial EG' / \partial s_2 q = 0$ ; bo'lganda energiya minimum bo'ladi.

(5) tenglamani c<sub>1</sub> va c<sub>2</sub> bo'yicha alohida differentsiallaymiz;

$$(\partial EG' / \partial s_1) s_2 q 2c_1 \alpha Q 2c_2 \beta - E(2c_1 Q 2c_2 S_{12}) q (\alpha - E) s_1 Q (\beta - E S_{12}) c_2 q = 0$$

$$(\partial EG' / \partial s_2) s_1 q 2c_2 \alpha Q 2c_1 \beta - (2c_2 Q 2c_1 S_{12}) q (\beta - E S_{12}) s_2 Q (\alpha - E) c_2 q = 0$$

**Kulon integrali, almashinish integrali va qoplash integrali. simmetrik va antisimmetrik funktsiyalarining energiyasi**

Kulon integrali (S) har bir elektronning o'z yadrosi bilan elektrostatik ta'sir energiyasini ko'rsatadi va  $C = \int \psi_1 H \psi_1 dv$  formulaga ko'ra xisoblanadi. (3) formulaga binoan Kulon integrali

$$\tilde{N} = \int \varphi_a(1) \varphi_b(2) H \varphi_a(1) \varphi_b(2) dv \text{ ga teng}$$

Demak, S ikkita atom elektronlarini o'zaro almashtirilmagan xolatdagi elektronlar energiyasini ifodalaydi. Kulon integrali molekula energiyasining 10 foizini tashkil qiladi. Shuning uchun 1-elektronning B yadrosiga, 2-elektronning A yadrosiga tortilishi vodorod molekulasi xosil bo'lishida asosiy omil bo'la olmaydi.

Almashinish yoki rezonans integrali (A) elektronlarning yadrolar orasida almashinishi bilan bog'liq bo'lgan ta'sir energiyasini xarakterlaydi. Almashinish integrali A quyidagicha formuladan topiladi:

$$A = \int \psi_1 H \psi_2 dv \text{ yoki } A = \int \varphi_a(1) \varphi_b(2) H \varphi_a(1) \varphi_b(2) dv$$

Bir laxzada a atomga tegishli elektron 2-laxzada v atomga tegishli bo'lib qoladi. 2-elektron xususida xam xuddi shunday deyish mumkin. Bunday almashinish elektronlarning bir-biridan farqi yo'qligi uchun sezilmaydi, lekin bu almashinish tufayli molekula barqaror bo'ladi. Bu energiya almashinish energiyasi deyiladi va u tortishish energiyasi bo'lgani uchun ishorasi manfiy bo'ladi. Shuning uchun almashinish energiyasi tufayli molekulaning umumiy energiyasi kamayadi va u molekulaning barqarorligiga asosiy xissa qo'shadi.

Almashinish integrali elektronlarning bog'lanayotgan atomlar o'rtasida lokallanganligini, ularning ikkala yadro uchun xam umumiylikni aks ettiradi.

Qoplash integrali (S) elektron bulutlarining bir-birini qoplash natijasida sistema energiyasini qanchalik kamayishini ko'rsatadi. Qoplash integralining 1 ga teng bo'lishi, qoplashning maksimaligini ko'rsatadi. Sq0 bo'lsa, bu orbitallar bir-

birini qoplamayapti degan so'z. Qoplash sodir bo'lgan uning qoplash darajasigi qarab qoplash integralining qiymati 0-1 oraliqda o'zgaradi. Qoplash integrali

$$(11) S = \int \varphi_a(1)\varphi_b(2)H\varphi_a(1)\varphi_b(2)dv$$

Ushbu tenglamadan ikkala elektron yadroga xam tegishli ekanligi ko'rinib turibdi.

(7-,8-) tenglamalarda  $\beta = A < 0$ ;  $\alpha = C < 0$ ;  $S < 0-1$ , lekin  $|\alpha| > |\beta|$  bo'lgani uchun (7) tenglamada kasr surati manfiy, maxraji esa musbatga teng. Demak,  $C + A/1 + S^2 < 0$  va  $E_+ = 2E_0$  bo'ladi.

Antiparallel spinli elektronlar bir-biriga yaqinlashganda ular juftlashadi, ya'ni kimyoviy bog' xosil bo'ladi. Natijada sistemaning energiyasi aloxida olingan atomlarning energiyalari yig'indisidan kam bo'ladi.

To'lqin funktsiya assimetrik bo'lganda esa kasr surati musbat bo'lgani uchun  $|\alpha| > |\beta|$  va nisbat noldan katta bo'ladi.

Demak,  $\psi_Q$  funktsiyasi sistemaning barqaror xolatiga,  $\psi_+$  funktsiyasi esa beqaror xolatiga to'g'ri keladi.

Simmetrik funktsiya uchun:

$$(16) E_+ = 2E_0 + K + A/1 + S^2$$

Antisimmetrik funktsiya uchun:

$$(17) E_- = 2E_0 + K - A/1 - S^2$$

kelib chiqadi.

Bu erda:

$2E_0$  - normal xolatdagi ikkita H atomining energiyasi;

K - Kulon integrali bo'lib, xar bir elektronning o'z yadrosi bilan elektronlarning va yadrolarning o'zaro elektrostatik ta'sir energiyasini ko'rsatadi.

$$\alpha_1 = K = \int \varphi_1 H \varphi_1 dv; \quad \alpha_2 = K = \int \varphi_2 H \varphi_2 dv;$$

A - almashinish (obmenno'y) integrali bo'lib, elektronlarning yadro o'rtasida almashinish bilan bog'liq bo'lgan ta'sir energiyasini ko'rsatadi:

$$\beta_{11} = A = \int \varphi_1 H \varphi_2 dv; \quad \beta_{22} = A = \int \varphi_2 H \varphi_1 dv;$$

S - qoplash integrali (perekro'vanie) deyilib, elektron bulutlarning bir-birini qanchalik qoplash natijasida sistema energiyasini kamayishini ko'rsatadi:

$$S_{12} = \int \varphi_1 \varphi_2 dv; \quad S_{21} = \int \varphi_2 \varphi_1 dv;$$

(16) va (17) da  $K < 0$ ,  $A < 0$ ,  $S < 0$ , lekin  $G'KG' < G'AG'$  bo'lgani uchun

$$K + A/1 + S^2 < 0 \quad K - A/1 - S^2 > 0 \text{ bo'ladi.}$$

Shuning uchun (16) da  $E_Q < 2E_0$  (17) da  $E_Q > 2E_0$  bo'ladi.

Energiyaning normal xolidagi 2 ta vodorod atomining energiyasidan kichik bo'lgan qiymati molekulani xosil bo'lishiga olib keladi. Demak, O'q funktsiyasi sistemaning barqaror holatiga, O'q funktsiyasi esa, sistemaning beqaror holatiga to'g'ri kelar ekan. Nima uchun 1 va 2 holatlar vujudga keladi? Elektron spinga ega, shuning uchun  $E_{\min}$  ga mos kelgan masofa  $r_0$  kimyoviy bog' xosil qilgandagi atomlar orasidagi muvozanat oralig'i kimyoviy bog' hosil bo'lishida sistemaning energiyasi kamayadi. Masofa uzoq (atomlar orasidagi) bo'lganda tortishish kuchlari ta'sirida (manfiy potentsial energiya) atomlar yaqinlashadi va juda

yaqinlashganda itarilish kuchlari ta'sir qilib, energiya ortib ketadi va kimyoviy bog'  $E_{\min}$  qiymatiga ega bo'lganda  $r_0$  muvozanat masofadagini tashkil topadi.

Geytler va London yuqorida bayon qilingan usul yordamida vodorodning energiyasi va atomlar orasidagi muvozanatning muvozanat masofasi uchun quyidagi qiymatlarni oldilar.

$$E = 3.14\epsilon B; \quad r_0 = 0.869A^0$$

Tajribada esa  $E = 3.14\epsilon B; r_0 = 0.869A^0$  ekanligi aniqlangan. Geytler va London xisoblari tajribada aniqlanganda anchagina farq qilsa ham, lekin kimyoviy bog'ni kvant mexanik tushuntirishda va kimyo fanining keyingi rivojlanishida katta bosqich bo'ladi.

1960 yili Kolos va Rutan degan olimlar to'lqin funktsiyasi uchun 50 haddan iborat funktsiya tuzib, Geytler va London asosida  $N_2$  energiyasi va  $G^*G^*$  hisoblaganlarida tajribaga juda ham yaqin qiymatlarni oldilar.

#### Savollar:

1. Vodorod molekulasini hosil bo'lishini nolinchida yaqinlashish usulida Izoxlash
2. Variatsion usulning ho'llanilishi.
3. Kulon integrali. Almashinish integrali. Qoplash integrali
4. Assimetrik va simmetrik funktsiyalarning energiyasi nimaga teng va yadrolar orasidagi masofaga qanday bog'langan.

### 7-ma'ruza: MOLEKULYAR ORBITALLAR METODI. XYUKKEL METODI

#### REJA:

1. Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi orbitallar;
2. Xyukkel metodi. r-bog'ning tartibi, r-elektron zichlik.
3. Molekulyar orbitallar energiyalarini xisoblash.
4. Variatsion usul.

MO larni ifodalaganda ularning qaysi AO asosida hosil bo'lganligini ko'rsatish uchun uning ifodasi yoniga AO ifodasi qo'shib yoziladi. Masalan,  $1S$  AO dan hosil bo'lgan bog'lovchi  $\delta MO$   $\delta 1S$  ko'rinishida, bo'shashtiruvchi esa  $\delta^*1S$  ko'rinishida yoziladi.

Ikki atomli gomoyadroli molekularlarning spektrlarini o'rganish natijasida ularning MO lari o'z energiyasiga qarab quyidagi qatorga joylashganligi aniqlangan.

$(\delta 1S) < (\delta^x 1S) < (\delta 2S) < (\delta^x 2S) < (\pi 2p_x) < (\pi 2p_y = \pi 2p_z) < (\pi^* 2p_y = \pi^* 2p_z) < (\pi^* 2p_x)$   
 $\pi 2p_x$  va  $\pi 2p_y$  orbitallardagi elektronlari bir-biriga juda yaqin. Ba'zi molekularlarda esa, (masalan,  $B_2$ ,  $C_2$ ,  $N_2$ )  $\pi^x 2p_x$  pog'ona  $\pi 2p_y$  pog'onadan yuqorida joylashgan. Bunga sabab elementga xos bo'lgan Mendeleev sonining (tartib nomerining) ortishi bilan  $2S$  – va  $2p_x$  – elektronlar energiyasining o'zgarish qonuniyatidir. B, C, va N atomlaridagi  $2S$  va  $2p_x$  elektronlarning energiyalari bir-biriga yaqin. Shuning uchun  $\pi^* 2p_x$  orbitalning to'lqin funktsiyasiga  $2S$  – atom orbitalning ham anchagina

qismi kiradi. Natijada  $\pi^*2p_x$  – MO ning energiyasi  $\pi2p_y$  va  $\pi2p_x$  – MO ga qaraganda yuqori bo'ladi.

Turli element atomlarida hosil bo'lgan geteroyadroning molekularning MO lari esa energiyasining ortib borishi quyidagicha joylashgan:

$$(\delta 1S) < (\delta^x 1S) < (\delta 2S) < (\delta^x 2S) < (\pi 2p_y = \pi 2p_z) < (\pi 2p_y) < (\pi^* 2p_y = \pi^* 2p_z) < (\pi^* 2p_x)$$

MOU bo'yicha kimyoviy bog'ni tushuntirishda molekula hosil bo'lishda ishtirok etgan atomlardagi elektronlarni yuqorida keltirilgan MO larga joylashtiriladi. So'ngra bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlarning farqida effektiv bog'lovchi elektronlarning soni aniqlanadi. Agar u noldan katta qiymatga ega bo'lsa, molekula hosil bo'ladi. Effektiv bog'lovchi elektronlarning soni qancha ko'p bo'lsa, molekula shunchalik mustahkam bo'ladi.

Misollar:

1.  $H_2^+$  molekulasi. Bu molekulada bitta elektron bo'lib, uning asosiy holatdagi elektron konfiguratsiyasi  $H_2^+ [\delta \quad 1S]$ . Yagona elektron bog'lovchi orbitalga joylashadi. Kimyoviy bog'ning energiyasi  $E_D = 2.65\text{eB}$ , yadrolar orasidagi masofa  $r_e(H_2^+) = 1.06\text{A}$ .

2.  $H_2$  molekulasi. Asosiy holatdagi elektron konfiguratsiyasi  $H_2 [(\delta \quad 1S)^2]$  bo'lib molekuladagi ikkita elektron bog'lovchi orbitallarga joylashadi.  $E_D = 4.48\text{eB}$ ,  $r_e(H_2) = 0.741\text{A}$

3.  $He_2^+$  molekulasi. Asosiy holatdagi elektron konfiguratsiyasi  $He_2^+ [(\delta 1S)^2 \cdot (\delta^* 1S)]$  bo'lib, uning 3 elektronidan 2 tasi bog'lovchi va 1 tasi bo'shashtiruvchi MO da joylashgan. Yuqorida aytilgan qoidaga asosan bunday molekula mavjud.  $E_D = 3.68\text{eB}$ .

4.  $He_2$  molekulasi. Uning elektron konfiguratsiyasi  $He_2 [(\delta 1S)^2 \cdot (\delta^* 1S)]$ .  $He_2$  molekulasining 4 ta elektronining 2 tasi bog'lovchi va 2 tasi bo'shashtiruvchi MOda joylashgan bo'lgani uchun bunday molekula mavjud bo'la olmaydi. Haqiqatdan ham tajribada bunday molekula borligi aniqlangan emas.

5. Li molekulasi. Uning elektron konfiguratsiyasi  $Li_2 [(\delta 1S)^2 (\delta^* 1S)^2 (\delta 2S)^2]$ . 6 ta elektronning 4 tasi AOlarning K – qavatidan hosil bo'lib, ichki  $\delta \quad 1S$  orbitallarda joylashgan. Bu elektronlar joylashgan MOlar kimyoviy bog' hosil qilishda deyarli qatnashmaydilar. Shuning uchun bu 4 ta elektronlar molekulada atomdagi K – elektronlar xususiyatini saqlab qoladi. Shuni e'tiborga olib,  $Li_2$  ning elektron konfiguratsiyasini quyidagicha yozish mumkin:  $Li_2 [KK(\delta 2S)^2]$ .

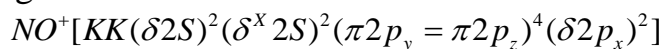
Bundan ko'rinib turibdiki, molekulasida kimyoviy bog' bog'lovchi MO da joylashgan elektronlar jufti hisobiga hosil bo'ladi.  $E_D = 1.026\text{eB}$   $r_e(Li_2) = 2.67\text{A}$ .

6. CO molekulasi. Bu molekula 14 ta elektron bo'lib, ular MO larda quyidagicha joylashgan.

$$CO [KK(\delta 2S)^2 (\delta^x 2S)^2 (\pi 2p_y = \pi 2p_z)^4 (\delta 2p_x)^2]$$

Bularda 6 ta effektiv bog'lovchi elektronlar bor. Bog' uchinchi tartibli.  $E_D = 256\text{kkal/ моль}$ .

7. NO<sup>Q</sup> molekulasida. Bu molekulada ham 14 ta elektron bo'lib, uning elektron konfiguratsiyasi quyidagicha bo'ladi:

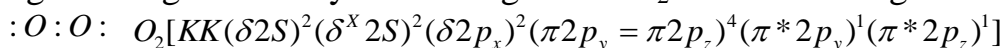


Ortiqcha bog'lovchi elektronlarning soni 6 ga teng. Bog'ning tartibi uchlamchi (N≡O<sup>Q</sup>).  $E_D = 251 \text{ kkal/mol}$ .

6- va 7- misollardagi CO va NO<sup>Q</sup> molekularlar bir xil elektron konfiguratsiyaga ega bo'lganligi uchun ularni izoelektron molekularlar deb ataladi. Bunday molekularlar mustahkamligi bir-biriga yaqin bo'lgan kimyoviy bog' hosil qiladilar, chunki bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlarning farqi ikkalasida ham bir xil. Yuqoridagi 6- va 7- misollardan ko'rinib turibdiki, ularning dissotsilanish energiyalari haqiqatdan bir-biriga yaqin.  $E_{CO} = 256 \text{ kkal/mol}$ .  $E_{NO} = 251 \text{ kkal/mol}$ .

Yana misol:

Kislorod molekulasida O<sub>2</sub> valent bog'lar usuli bo'yicha O=O bo'lishi kerak edi. Lekin O<sub>2</sub> molekulasida juftalashmagan elektronlar bor. Buni O<sub>2</sub> ning paramagnit xossaga ega ekanligini isbotlaydi. Shuning uchun O<sub>2</sub> molekulasining tuzilishi

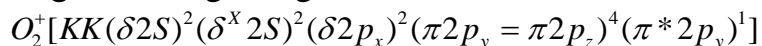


K – qavatsiz

Bo'shashtiruvchi elektronlar – 4ta

Bog'lovchi – 8 ta

Demak, bog'ning tartibi 2 ga teng: O=O.



Bo'shashtiruvchi elektronlar – 3 ta

Bog'lovchi – 8 ta

Elektron bo'shashtiruvchi MOdan chiqib ketadi, shuning uchun O<sub>2</sub><sup>+</sup> da bog' mustahkamroq.

O<sub>2</sub> da  $E_D = 118 \text{ kkal/mol}$ .

O<sub>2</sub><sup>+</sup> da  $E_D = 153 \text{ kkal/mol}$ .

## **XYUKKEL USULI. REZONANS NAZARIYASI. π - BOG'NING**

### **TARTIBI. π - ELEKTRON ZICHLIK. OZOD VALENTLIK INDEKSI.**

Keyingi yillarda organik reaksiyalarni tushuntirishda, biokimyo va molekulyar biologiya sohalarida 1931 yilda Xyukkel tomonidan qilingan atom orbitallarning chiziqli kombinatsiyasidan iborat bo'lgan molekulyar orbitallar usuli keng qo'llanilmoqda. Xyukkel metodi keyingi ishlab chiqilgan xamma kvant kimyoviy usullarning asosida yotadi va shuning uchun Xyukkel metodini o'rganib olgan talaba mustaqil ravishda boshqa usullarni ham o'zlashtirib olishi mumkin.

Oldingi mavzulardan birida rezonans nazariyasi (ya'ni valent bog'lar usulining variantlaridan biri bo'lib, valent sxemalarining ustma-ustligi usuli deyiladi) dan foydalanib, delokallashgan π-bog'lar sistemasida harakat qilayotgan elektronni bir o'lchamli potentsial o'ra modeli yordamida ko'rib chiqish mumkin degan fikrni aytgan edik (masalan, benzol molekulasida π - elektronlar delokallashgan bo'lib, Dyuar va Kekule struktura formulalari (5 ta tip) dan foydalanib bu usul bilan (rezonans nazariyasi orqali) benzoldagi kimyoviy bog'lar



kvant mexanik hisoblangan). Lekin bu usul juda qo'pdir. Bundan tashqari bu usul yordamida faqat elektronlarning energiya pog'onalari (urovni energii) aniqlanadi va elektron zichlik va bog'ning mustahkamligi haqida fikr yuritishga imkoniyat bermaydi.

Xyukkel usul rezonans nazariyasidan ancha ko'p ma'lumot beradi. Xyukkel usulini ishlatish jarayonida 3 ta tushuncha vujudga keladi. Bu tushunchalar zamonaviy organik kimyoda juda ham katta ahamiyatga ega bo'lgan tushunchalardir:

- 1)  $\pi$  - bog'ning tartibi;
- 2)  $\pi$  - elektron zichligi;
- 3) Ozod valentlik indeksi.

Keyingi ma'ruzalarda bu tushunchalarda batafsil to'xtaymiz. Xozirgi biz Xyukkel usuli yordamida delokallashgan  $\pi$  - bog'i hosil qilgan elektronlarning to'lqin funktsiyasi va energiyasini aniqlashni ko'rib chiqamiz.

Xyukkel usulini eng oddiy molekula – etilen  $CH_2 = CH_2$  molekulasigi tadbiqini ko'ramiz.

Etilen molekulasida 12 ta valent elektronlari bor. Shulardan 10 tasi  $\delta$  - bog'ni hosil qiladi. Biz bu bog'larni e'tiborga olmaymiz va shuning uchun ularni tekshirmaymiz. Unda  $\pi$  - bog'ni hosil qilgan 2 ta p – elektroni ham bor. Biz ana shuni tekshiramiz. Bu 2 elektronlarning har biri uchun molekulyar orbitallar usulining talaba bo'yicha uglerod atomlarining p – elektronlarining to'lqin funktsiyalaridan  $\varphi_1$  va  $\varphi_2$  lardan tuziladi.

Demak, molekulyar orbitalni 2 ta  $p_z$  – atom orbitallarning chiqish kombinatsiyasi sifatida bayon qilish mumkin:

$$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 \quad (1)$$

$c_1$  va  $c_2$  koeffitsientlarini topish uchun avval aytganimizdek, asriy tenglamalar sistemasini (turkumini) tuzamiz va asriy determinantni 0 ga tenglab olamiz.

Etilen molekulasida uchun E va  $\psi$  ni topish uchun xuddi oldingi lektsiyada keltirib chiqarilgan asriy tenglamalarni keltirib chiqaramiz:

$$\begin{aligned} (H_{11} - ES_{11})C_1 + (H_{12} - ES_{12})C_2 &= 0 \\ (H_{21} - ES_{21})C_1 + (H_{22} - ES_{22})C_2 &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Bu erda  $S_{11} = \int \varphi_1^2 dv = 1$ ;  $S_{22} = \int \varphi_2^2 dv = 1$ ; normallanuvchi integrallar;

$H_{11} = H_{12} = \int \varphi_1 H^2 \varphi_2 dv$  - almashinish integrali; rezonans integrallari;

$S_{11} = S_{21} = \int \varphi_1 \varphi_2 dv$  - qoplash integrallari;

$H_{11} = \int \varphi_1 H \varphi_1 dv$ ;  $H_{22} = \int \varphi_2 H \varphi_2 dv$ ; - kulon integrallari.

Kulon va rezonans integrallariga Gamilton operatori kiradi, normallanuvchi va qoplash integrallariga esa kirmaydi. Kulon integralida 2 ta bir xil funktsiyalar bo'lsa, rezonans integralida har xil funktsiyalar bo'lsa, qoplash integralida har xil funktsiyalar borligi bilan farq qiladi.

Xyukkel usulida kvant mexanik hisoblarni soddalashtirish uchun qoplash integrallarini ( $S_{12}$  va  $S_{21}$ ) qiymatlarini 0 ga teng deb olinadi. U holda

normallanuvchi integrallarning ( $S_{11}$  va  $S_{22}$ ) birga tengligini hisobga olib (2) tenglamani quyidagicha yozishimiz mumkin.

$$\begin{aligned} (H_{11} - E)C_1 + H_{12}C_2 &= 0 \\ H_{21}C_1 + (H_{22} - E)C_2 &= 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Odatda Kulon integrallarini ( $H_{11}$  va  $H_{22}$  larni)  $\alpha$  bilan va almashinish ( $H_{21}$  va  $H_{12}$  larni) integrallarini  $\beta$  - harflari bilan belgilanadi. U xolda (3) tenglama quyidagi ko'rinishga o'tadi:

$$\begin{aligned} (\alpha - E)C_1 + \beta C_2 &= 0 \\ \beta C_1 + (\alpha - E)C_2 &= 0 \end{aligned} \quad (4)$$

(4) tenglamani  $\beta$  ga bo'lsak va  $\alpha - EG'\beta$  q x (5) deb bilsak, asriy tenglamalar sistemasini shunday yozish mumkin:

$$\begin{aligned} xC_1 + C_2 &= 0 \\ C_1 + xC_2 &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

(6) tenglamalar determinantini 0 ga tenglasak:

$$\begin{vmatrix} x & 1 \\ 1 & x \end{vmatrix} = x^2 - 1 = 0 \quad (7)$$

(7) tenglamadan  $x$  q  $\pm 1$ ;  $x_1$  q -1 va  $x_2$  q 1 larni

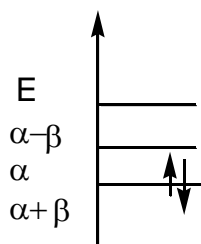
(5) tenglamaga qo'ysak, elektronlarning energiyasini aniqlash uchun 2 ta ifoda olamiz:

$$E_1 = \alpha + \beta \quad (8)$$

$$E_2 = \alpha - \beta \quad (9)$$

Biz etilen molekulasida  $\pi$  - bog'ini hosil qilayotgan elektronlar energiyasi uchun 2 xil qiymat topdik. Almashinish integrali  $\beta$  manfiy qiymatga ega. Shuning uchun  $E_1 < E_2$  bo'ladi.

Ya'ni (8) tenglama bog'lovchi orbitallarni (9) tenglama esa, bo'shashtiruvchi orbitallarning energiyasini ko'rsatadi. Qo'zg'almagan etilen  $CH_2 = CH_2$  molekulasida biz tekshirayotgan 2 ta elektron energiyasi kam bo'lgan xollarda, ya'ni bog'lovchi orbitallarda joylashgan bo'ladi. Bu xolat sxematik shaklda rasmda ko'rsatilgan



расм. этилен молекуласидаги  $\pi$  - электронларнинг энергетик погоналари

Endi  $C_1$  va  $C_2$  koeffitsientlarni topamiz.

1) bog'lovchi orbital uchun  $X$  q -1 edi. (6) tenglamadagi  $X$  ni o'rniga shuni qo'ysak  $C_1$  q  $C_2$  yoki  $C_1$  G'  $C_2$  q 1 (10) bo'ladi.

(10) tenglama koeffitsientlarning nisbatini beradi xolos.  $C_1$  va  $C_2$  larning absolyut qiymatlarini topish uchun normallik shartidan foydalanamiz:

$$\int \psi^2 dv = \int (c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2)^2 dv = 1 \quad (11)$$

Qavslarni ochsak quyidagi formulani olamiz:

$$C_1^2 \int \varphi_1^2 dv + 2c_1c_2 \int \varphi_1\varphi_2 dv + c_2^2 \int \varphi_2^2 dv = 1$$

$\varphi_1$  va  $\varphi_2$  atomlarning to'liqin funksiyasi bo'lib, ular normallanuvchi bo'lgani uchun birinchi va oxirgi integrallar 1 ga teng. Ikkinchi qoplash integrali bo'lib, uning qiymati Xyukkel metodida 0 ga teng deb olinadi. U xolda quyidagi ifodani olamiz:

$$C_1^2 + C_2^2 = 1 \quad (12)$$

(12) dagi  $C_2$  o'rniga (10) ga asosan  $C_1$  ni qo'ysak:  $2C_1^2 = 1$ ;  $C_1 = 1/\sqrt{2}$  hosil bo'ladi va bog'lovchi orbitalning to'liqin fun

### **Xyukkel usulini butadien molekulasiga tadbig'i. Atom orbitallarning chiziqli kombinatsiyasi Asriy tenglamalar sistemasi. Asriy determinant**

Butadien  $CH_2 = CH - CH - CH_2$ . Butadienda 4 ta  $\pi$  – elektronlar bor. Bu 4 ta elektronlarning har birida ikkitadan p – orbitallari bor. Ularni  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3, \varphi_4$ , atom orbitallari bilan belgilaymiz. Shu atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasidan molekulyar orbital hosil qilinadi:

$$\psi = c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3 + c_4\varphi_4 \quad (1)$$

Vazifa  $c_1, c_2, c_3, c_4$  koeffitsientlarni har bir orbital uchun energiya  $E$  ni topishdan iborat.

Molekulyar orbitalga mos kelgan energiyani quyidagi tenglamadan aniqlaymiz:

$$E = \int \psi H \psi dv / \int \psi^2 dv \quad (2)$$

Yuqorida ko'rganimiz kabi (1) tenglamadagi koeffitsientlarni variatsion usul yordamida aniqlaymiz. Koeffitsientlarning qiymati shunday bo'lishi kerakki, ular orqali ifodalangan to'liqin funksiyaga mos kelgan energiyaning qiymati minimum bo'lsin.

(2) tenglamaning maxrajiga (1) dagi qiymatni qo'ysak,

$$\begin{aligned} \int \psi^2 dv = \int (c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + c_3\varphi_3 + c_4\varphi_4)^2 dv = c_1^2 \int \varphi_1^2 dv + c_2^2 \int \varphi_2^2 dv + c_3^2 \int \varphi_3^2 dv + c_4^2 \int \varphi_4^2 dv + \\ + c_1c_2 \int \varphi_1\varphi_2 dv + c_1c_3 \int \varphi_1\varphi_3 dv + c_1c_4 \int \varphi_1\varphi_4 dv + c_2c_1 \int \varphi_2\varphi_1 dv + c_2c_3 \int \varphi_2\varphi_3 dv + c_2c_4 \int \varphi_2\varphi_4 dv + \\ + c_3c_1 \int \varphi_3\varphi_1 dv + c_3c_2 \int \varphi_3\varphi_2 dv + c_3c_4 \int \varphi_3\varphi_4 dv + c_4c_1 \int \varphi_4\varphi_1 dv + c_4c_2 \int \varphi_4\varphi_2 dv + c_4c_3 \int \varphi_4\varphi_3 dv \end{aligned} \quad (3)$$

Normallanish shartiga binoan 4 ta atom orbitalining qiymati 1 ga teng bo'ladi:

$$\int \varphi_1^2 dv = \int \varphi_2^2 dv = \int \varphi_3^2 dv = \int \varphi_4^2 dv \quad (4)$$

qoplash integrallari uchun 2 xil belgilash kiritamiz:

1. ikkita qo'shni uglerod atomlari uchun:

$$S_{12} = S_{21} = S_{23} = S_{12} = S_{34} = S_{43} = S \quad (5)$$

2. qo'shni bo'lmagan 2 ta atom uchun:

$$S_{13} = S_{31} = S_{24} = S_{42} = S_{14} = S_{41} = 0 \quad (6)$$

U holda (3) tenglamani quyidagicha yozish mumkin:

$$\int \psi^2 dv = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 + 2(c_1c_2 + c_2c_3 + c_3c_4)S \quad (7)$$

Xyukkel usuli Sq0 ((5) dagi qoplash integrallari) deb qabul qilinadi. Unda (7) tenglama quyidagi ko'rinishni oladi:

$$\int \psi^2 dv = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 1 \quad (8)$$

Endi (2) formula suratini ishlaymiz:

$$\int \psi H \psi dv = \int (c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + c_3 \varphi_3 + c_4 \varphi_4) H ((c_1 \varphi_1 + c_2 \varphi_2 + c_3 \varphi_3 + c_4 \varphi_4) dv \quad (9)$$

(9) dagi ko'paytirish amalini 2 tipdagi integrallarini olamiz:

$$1. \int \varphi_1 H \varphi_1 dv = \int \varphi_2 H \varphi_2 dv = \int \varphi_3 H \varphi_3 dv = \int \varphi_4 H \varphi_4 dv = \alpha \quad (10)$$

$$2. \int \varphi_1 H \varphi_2 dv = \beta_{12} = \int \varphi_2 H \varphi_1 dv = \beta_{21} \quad (11)$$

(11) tipdagi integrallar 6 ta bo'lib, ular bir-birlariga teng:

$$\beta_{12} = \beta_{21} = \beta_{23} = \beta_{32} = \beta_{34} = \beta_{43} = \beta \quad (12)$$

Qo'shni bo'lmagan atomlar uchun almashinish (rezonans) integrallarini nolga teng deb olamiz:

$$\beta_{13} = \beta_{31} = \beta_{24} = \beta_{42} = \beta_{14} = \beta_{41} = 0 \quad (13)$$

Shularni e'tiborga olib, (9) dagi  $\int \psi H \psi dv$  ifoda uchun quyidagini yozish mumkin:

$$\int \psi H \psi dv = (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2) \alpha + 2(c_1 c_2 + c_2 c_3 + c_3 c_4) \beta \quad (14)$$

(8) va (14) larni Shredinger tenglamasiga (2) ga qo'ysak:

$$E(c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2) = (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2) \alpha + 2(c_1 c_2 + c_2 c_3 + c_3 c_4) \beta \quad (15)$$

(15) tenglamani  $S_1$  bo'yicha differentsiallasak:

$$\partial E / \partial c (c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2) + 2c_1 E = 2c_1 \alpha + 2c_2 \beta \quad (16)$$

(ko'paytmaning differentsiali bo'lgani uchun, (15) tenglamaning chap tomonida avval E dan  $C_1$  bo'yicha keyin qavs ichidagi koeffitsientlardan  $C_1$  bo'yicha hosila olib qo'shib yozamiz).  $\partial E / \partial c_1 = 0$  bo'lgani uchun (16) tenglama quyidagiga o'zgaradi:

$$2c_1 E = 2c_1 \alpha + 2c_2 \beta \quad (17)$$

yoki 2 ga bo'lib yuborib:

$$c_1(\alpha - E) + c_2 \beta = 0 \quad (17a)$$

(15) tenglamani  $C_2$  bo'yicha differentsiallaymiz va quyidagi natijani olamiz:

$$2c_2 E = 2c_2 \alpha + 2c_1 \beta + 2c_3 \beta$$

yoki

$$c_1 \beta + c_2(\alpha - E) + c_3 \beta = 0 \quad (18)$$

(15) tenglamani  $C_3$  va  $C_4$  bo'yicha differentsiallasak quyidagi natijani olamiz:

$$c_2 \beta + c_3(\alpha - E) + c_4 \beta = 0 \quad (19)$$

$$c_3 \beta + c_4(\alpha - E) = 0 \quad (20)$$

(17), (18), (19) va (20) tenglamalarni birgalikda yozib 4 xil tenglamalar sistemasini (asriy) hosil qilamiz:

$$\begin{aligned}
c_1(\alpha - E) + c_2\beta &= 0 \\
c_1\beta + c_2(\alpha - E) + c_3\beta &= 0 \\
c_2\beta + c_3(\alpha - E) + c_4\beta &= 0 \\
c_3\beta + c_4(\alpha - E) &= 0
\end{aligned}
\tag{21}$$

Agar trivial bo'lmagan echim bo'lsa, u holda (21) asriy tenglamalar sistemasining determinanti nolga teng bo'lishi kerak:

22

Determinantning hamma hadlarini  $\beta$  ga bo'lib chiqamiz:

23

$\alpha - E$  ga bo'lib chiqamiz:

24

Bu determinantni echish uchun 1 qatordagi har bir elementni shu elementga mos kelgan minorga ko'paytiramiz va hosil bo'lgan ko'paytmalarni algebraik yig'indisini olamiz. Bunda toq elementlar uchun (1- va 3- elementlar) algebraik yig'indisining ishorasi musbat bo'ladi, juft elementlar uchun (2- va 4-elementlar) manfiy bo'ladi.

Tanlab olingan element bo'yicha (1-qatordagi) determinantni qatoriga va ustunlar bo'yicha o'chirish orqali keltirib chiqarilgan determinantni minor deb ataladi.

Shunga binoan:

25

3-tartibla determinantni hosil qildik. Bu determinantlarning 0 ga ko'paytirilganlari 0 ga aylanib ketadi. Qolgan 2 ta 3-tartibla determinantni qoida bo'yicha ochishimiz mumkin yoki uni 2-tartibli determinantlarga keltirib olishimiz mumkin. Bu determinantlarni 2-tartibliga keltirib va 0 ga teng hadlarini tashlab yozsak, quyidagilar hosil bo'ladi:

RRRRRRR      93-B

Demak

26

demak, asriy determinant (24) quyidagi ko'rinishga ega:

FFFFF

yoki

va bu kvadrat tenglamalarning ildizlari

28

(23) tenglamada  $\alpha - EG'\beta$  q x deb belgilagan edik. Bundan energiyaning qiymatini topsak

$$E = \alpha - xG'\beta \quad (29)$$

bo'ladi. (29) ga X ning topilgan qiymatlarini qo'ysak, energiyaning 4 xil qiymatini olamiz:

$$\begin{aligned} E_1 &= \alpha + 1.618\beta \\ E_2 &= \alpha + 0.618\beta \\ E_3 &= \alpha - 0.618\beta \\ E_4 &= \alpha - 1.618\beta \end{aligned} \quad (30)$$

Almashinish integralining ( $\beta$ ) qiymati manfiy bo'lgani uchun energiyaning eng kam bo'lgan qiymati  $E_1$ , undan keyin  $E_2$  va h.k. bo'ladi:

$$W = 2(E_1 + E_2) = 4\alpha + 4.472\beta \quad (31)$$

Endi (1) tenglamadan  $C_1, C_2, C_3, C_4$  koeffitsientlarni topamiz. Buning uchun normallashtirish shartidan foydalanamiz:

$$\int \psi^2 dv = 1 \quad (32)$$

(32) da  $\psi^2$  ning o'rniga 4 ta atom orbitallarining to'liq funktsiyalarining chiziqli kombinatsiyalarini qo'yib, integralni echganimizda yuqorida (8) bunday ifodani olgan edik:

$$\int \psi^2 dv = c_1^2 + c_2^2 + c_3^2 + c_4^2 = 1 \quad (33)$$

Bundan tashqari bizda koeffitsientlarni energiya bilan bog'lovchi 4 ta asriy tenglamalar sistemasi (21) ham bor. Shu asriy tenglamalar yordamida  $C_1, C_2, C_3, C_4$  lar orasidagi munosabatlarni topaylik.

Energiyasi eng kam bo'lgan orbital  $E_1$  uchun

$$E_1 = \alpha - 1.618\beta \quad (34) \text{ edi.}$$

(34) dagi E ning qiymatini (21) dagi asriy tenglamaga qo'ysak:

$$\begin{aligned} c_1 &= 1.618c_1 \\ c_1 + c_3 &= 1.618c_2 \\ c_2 + c_4 &= 1.618c_3 \\ c_3 &= 1.618c_4 \end{aligned} \quad (35)$$

kelib chiqadi.

(35) tenglamalar sistemasidan  $c_1, c_2, c_3, c_4$  (36) ni olamiz.

Bu qiymatlarni normalninish integraliga (33) olib borib qo'ysak:

$$c_1^2 + (1.618)^2 c_1^2 + (1.618)^2 c_1^2 + c_1^2 = 1$$

yoki

$$2(c_1^2 + 1.618^2 c_1^2) = 1$$

$$c_1^2(1 + 1.618^2 c_1^2) = 1/2$$

$$c_1^2(1/2(1 + 1.618^2)) = 1/7.236$$

(37)

$$C_1 = 0.3717$$

$$C_2 = 1.618C_1 = 0.6015$$

$$C_3 = C_4 = 0.3717$$

$$C_3 = C_2 = 0.6015$$

Topilgan  $C_1, C_2, C_3, C_4$  koeffitsientlarni (1) formulaga qo'ysak, energiyasi  $E_1$  bo'lgan MO ning ifodasini olamiz:

$$\Psi_1 \text{ q } 0.3717\varphi_1 \text{ Q } 0.6015\varphi_2 \text{ Q } 0.6015\varphi_3 \text{ Q } 0.3717\varphi_4 \quad (38)$$

Xuddi shu yo'sinda  $E_2, E_3, E_4$  lar uchun mos kelgan koeffitsientlarni hisoblash mumkin.

Butadien molekulasidagi  $\pi$  – elektronlarning MO va ularning energiyasi.

| Energiya, E                                     | MO, $\Psi_i$   |
|---|--|
| $E_1 \text{ q } \alpha \text{ Q } 1.6180 \beta$ | $\Psi_1 \text{ q } 0.3717\varphi_1 \text{ Q } 0.6015\varphi_2 \text{ Q } 0.6015\varphi_3 \text{ Q } 0.3717\varphi_4$ |
| $E_2 \text{ q } \alpha \text{ Q } 1.6180 \beta$ | $\Psi_2 \text{ q } 0.6015\varphi_1 \text{ Q } 0.3717\varphi_2 - 0.3717\varphi_3 - 0.6015\varphi_4$                   |
| $E_3 \text{ q } \alpha - 1.6180 \beta$          | $\Psi_3 \text{ q } 0.6015\varphi_1 - 0.3717\varphi_2 - 0.3717\varphi_3 \text{ Q } 0.6015\varphi_4$                   |
| $E_4 \text{ q } \alpha - 1.6180 \beta$          | $\Psi_4 \text{ q } 0.3717\varphi_1 - 0.6015\varphi_2 \text{ Q } 0.6015\varphi_3 - 0.3717\varphi_4$                   |

Shunday qilib, butadien molekulasidagi 4 ta  $\pi$  – elektronlarning joylashishi mumkin bo'lgan 4 ta energetik pog'onalarni va shu energiyalarga mos kelgan to'lqin funktsiyalarining ifodasini topdik.

Molekulaning asosiy holatida 4 ta  $\pi$  – elektron energiyasi nisbatan kichik bo'lgan  $E_1$  va  $E_2$  pog'onalarga 2 tadan bo'lib joylashadi.

### **Ozod valentlik indeksi. $\pi$ – bog'ning tartibi. $\pi$ – elektron zichlik.**

1. Ozod valentlik indeksi 0 ga teng bo'lsa, atom yangi bog' hosil qila olmaydi.

$N_{\max}$  – bog'larning maksimal soni. C atom uchun  $N_{\max} = 4.732$

$N_{\max}$  – berilgan atomdagi bog'lar tartibining yig'indisi.

$\delta$  - bog'ning tartibi 1 ga teng.

$\pi$  – bog'ning tartibi hisoblab topiladi.

2.  $\pi$  – bog'ning tartibi. (Molekulyar diagrammada kimyoviy bog' chiziqlariga ko'ndalang qilib chiziladi).

$\pi$  – bog'ning tartibi ortishi bilan atomlararo masofa kamayadi, demak kimyoviy bog' mustahkamlanadi.

a)  $\pi$  – bog'ning chala tartibi

$$P_{rs}^{(i)} = C_{ir} C_{is}$$

i – MO nomeri;

r va s atomlar ifodasi.

b)  $\pi$  – bog'ning to'liq tartibi

$$P_{rs} = \sum_{i=1}^m 2C_{ir} C_{is} = \sum_{i=1}^m 2p_{rs}^i$$

m – elektronlari bilan to'lgan eng yuqori MO ning nomeri.

$\delta$  - bog'ni ham hisobga olsak:  $P = 1 + p_{rs}$

3.  $\pi$  – elektron zichlik (atomlarning yoniga yozilgan raqamlar)

$$q_r = \sum_{i=1}^m 2C_{ir}^2$$

i – MO nomeri;

r – uglerod atomining nomeri.

$\pi$  – elektron zichlik 0 ga teng bo'lgan uglerod atomi elektroneytraldir.  $\pi$  – elektron zichlik qanchalik katta songa teng bo'lsa, elektronlar shunchalik ushbu atom tomon siljigan bo'ladi.  $\pi$  – elektronlar ionlar bilan ataka qilinadi.

Gomolitik reaksiyada elektron zichlik asosiy rol o'ynaydi. Masalan, butadienda hamma uglerod atomlardagi elektron zichlik 1 ga teng. Shuning uchun elektrofil va nukleofil reagentlarning ta'siriga hamma uglerod atomlari ham bir xil uchraydi. Ozod radikallar (gomolitik reaksiyalarda erkin radikallash (-zaryadlanmagan ishtirok etadi) ta'sir etganda asosiy ahamiyatni elektron zichlik emas, balki ozod valentlik indeksi kasb etadi.

### Ozod valentlik indeksi

Agar biron bir atomning ozod valentlik indeksi 0 ga teng bo'lsa, u holda shu atom yangi bog' hosil qila olmaydi. Ozod valentlik indeksi – F ni quyidagi tenglamadan topiladi:

$$F = N_{\max} - N_r$$

$N_{\max}$  – mazkur atom hosil qilishi mumkin bo'lgan bog'larning maksimal soni;

$N_r$  – berilgan atomdagi bog'lar tartibining yig'indisi.



Moffit ko'rsatishicha C atomi uchun  $N_{\max}$  q  $3Q\sqrt{3}q4.732$  ga teng.  $N_r$  ni hisoblash uchun  $\delta$  va  $\pi$  bog'larining sonini aniqlash tartibini esa yuqorida ko'rsatilgan usulda hisoblanadi. Shu ikkala bog'larning yig'indisi  $N_r$  ni beradi.

### Butadien

Butadiendagi 1-uglerod atomi 3ta  $\delta$  va 1ta  $\pi$  – bog'i hosil qilgan. Shuning uchun 1-uglerodning umumiy bog'lar tartibi:  $N_q0.894Q3\cdot1.0q4.341$

Molekula simmetrik bo'lgani uchun  $N_1qN_4$ ;  $N_2qN_3$ .

Shu natijalardan foydalanib, butadien uchun  $F_1$ ,  $F_2$ ,  $F_3$ ,  $F_4$  ni hisoblash mumkin:

$$F_1qF_4 q 4.732 - 3.894 q 0.838$$

$$F_2qF_3 q 4.732 - 4.341 q 0.391$$

### $\pi$ – bog'ining tartibi

Klassik organik kimyoda bog'ning tartibini butun songa teng deb hisoblanadi. Lekin nazariy hisoblashlar bog'ning tartibi kasr ham bo'lishini ko'rsatdi.

Bog'ning chala tartibi:

$$P_{rs}^i = C_{ir} C_{is}$$

Qo'shni bo'lmagan atomlar elektronlarining bog'ning tartibiga qo'shgan hissasi 0 ga teng bo'ladi.

Agar i – MO da 2 ta elektron joylashgan bo'lsa, u xolda qo'shni C atomlarining  $\pi$  – bog'ining to'liq tartibi quyidagicha ifodalanadi:

$$P_{rs} = \sum_{i=1}^m 2C_{ir} C_{is} = \sum_{i=1}^m 2p_{rs}^i$$

$m$  – elektronlar bilan to'lgan eng yuqori MO ning nomeri,

$p_{rs}$  –  $\pi$  – bog'ning to'liq tartibi;

$P_{rs}^{(i)}$  –  $\pi$  – bog'ning partsial yoki chala tartibi.

Agar r va s atomlar o'rtasidagi  $\delta$  – bog'ini ham hisobga olsak, u xolda bog'ning to'liq tartibi – P quyidagicha aniqlanadi:

$$P = 1 + P_{rs}$$

r va s atomlar o'rtasida elektronlarning bo'lish ehtimolligi qanchalik katta bo'lsa, qoplash kuchayishi natijasida ularning bulutlari shunchalik ko'p bir-birini qoplaydi, natijada  $C_r$  va  $C_s$  atomlar orasidagi bog' shunchalik mustahkam bo'ladi.

Demak,  $\varphi_r$  va  $\varphi_s$  AO lardagi  $C_{ir}$  va  $C_{is}$  koeffitsientlarning ko'paytmasi  $C_{ir} C_{is}$  bog'ning mustahkamligining o'lchovi bo'la olar ekan.

### $\pi$ bog'ning tartibini hisoblashga doir masalalar

## 1. Etilen.

$$E_1 = \alpha + \beta; \quad \psi_1 = 1/\sqrt{2}(\phi_1 + \phi_2) \quad \text{bog'lovchi MO}$$
$$E_1 = \alpha - \beta; \quad \psi_2 = 1/\sqrt{2}(\phi_1 - \phi_2) \quad \text{bo'shashtiruvchi MO.}$$

1. bog'lovchi MO uchun:

$$\pi q_1 \sqrt{2} - \text{bog'ning tartibi: } P_{rs}^i = C_{ir} C_{is} = 1\sqrt{2}1\sqrt{2} = 1/2$$

$$\text{to'liq } \pi - \text{bog'ning tartibi: } P_{rs} = 2 \cdot 1/2 = 1$$

$$\text{to'liq bog'ning tartibi: } P = 1 + P_{rs} = 1 + 1 = 2$$

2. bo'shashtiruvchi MO uchun: partial (chala)

$$P_{rs}^i = 1/\sqrt{2}(-1/\sqrt{2}) = -1/2$$

$$P = 1 + P_{rs} = 1 - 1 = 0$$

$C_{ir}$   $C_{is}$  ning musbat qiymati  $\pi$  bog'ni mustahkamlaydi, manfiy esa uni kuchsizlantiradi.

## $\pi$ – elektron zichlikni hisoblashga doir misollar

### 1. Butadien.

Butadienda asosiy holatda 2 ta MO ning xar birida 2 tadan  $\pi$  – elektronlar bor.

$$E_1 = \alpha + 1.6180\beta \quad \phi_1 = 0.3717\phi_1 + 0.6015\phi_2 + 0.6015\phi_3 + 0.3717\phi_4$$

$$E_2 = \alpha + 1.6180\beta \quad \phi_2 = 0.6015\phi_1 + 0.3717\phi_2 - 0.3717\phi_3 + 0.6015\phi_4$$

$$q_r = \sum_{i=1}^m 2C_{ir}^2$$

i – MO ning nomeri;

r – uglerod atomining nomeri;

$$1 - \text{uglerod atomi uchun } q_1 = 2(C_{11}^2 + C_{21}^2) = 2(0.37017^2 + 0.6015^2) = 1$$

2, 3 va 4 atomlardagi zaryadlar ham 1 ga tengligini osonlik bilan topish mumkin. Xuddi shunday hisoblashlar orqali boshqa polienlarda ham hamma uglerod atomlaridagi  $\pi$  elektron zichlikning 1 ga teng ekanligi aniqlangan.

### 2. Benzol.

Benzolning asosiy xolatida  $\pi$  – elektronlar 3 ta MO da ( $\phi_1, \phi_2, \phi_3$ ) joylashgan.

|          | $C_{i1}$ | $C_{i2}$ | $C_{i3}$ | $C_{i4}$ | $C_{i5}$ | $C_{i6}$ |
|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| $\phi_1$ | 0.409    | 0.409    | 0.409    | 0.409    | 0.409    | 0.409    |
| $\phi_2$ | 0.576    | 0.288    | -0.288   | -0.576   | -0.288   | 0.288    |
| $\phi_3$ | 0        | 0.5      | 0.5      | 0        | -0.5     | -0.5     |

1 - uglerod atomi uchun:

$$C_{11} = 1/\sqrt{6} = 0.409; \quad C_{21} = 2/\sqrt{12} = 0.576; \quad C_{31} = 0$$

$$q_1 = 2(0.409^2 + 0.576^2) = 1$$

2-uglerod atomi uchun:

$$C_{12} = 1/\sqrt{6} = 0.409; \quad C_{22} = 1/\sqrt{12} = 0.288; \quad C_{32} = 1/4 = 0.5$$

$$q_2 = 2(0.409^2 + 0.288^2 + 0.5^2) = 1$$

3-uglerod atomi uchun:

$$C_{12} = 1/\sqrt{6} = 0.409; \quad C_{22} = 1/\sqrt{12} = 0.288; \quad C_{32} = 1/4 = 0.5$$

$$q_2 = 2(0.409^2 + 0.288^2 + 0.5^2) = 1$$

Qolgan C atomi uchun ham  $\pi$  elektron zichlik 1 ga teng chiqadi. Naftalinda ham C atomlari uchun  $\pi$  elektronning zichligi 1 ga teng bo'ladi.

### 3. Piridin.

Piridin molekulasida 6 ta elektron bor. MO usuli yordamida shu elektronlar uchun  $E$ ,  $\phi$  va  $C_i$  larni topish mumkin. Piridindagi 6 ta  $\pi$  elektronlar energiyasi  $E_1$ ,  $E_2$  va  $E_3$  bo'lgan 3 ta MO da joylashadi:

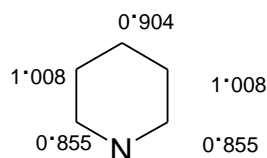
$$E_1 = \alpha + 2.2784\beta; \quad \psi_1 = 0.646\phi_1 + 0.412\phi_2 + 0.295\phi_3 + 0.259\phi_4 + 0.295\phi_5 + 0.413\phi_6$$

$$E_2 = \alpha + 1.3714\beta; \quad \psi_2 = 0.5174\phi_1 + 0.0824\phi_2 + 0.409\phi_3 + 0.6214\phi_4 + 0.409\phi_5 + 0.082\phi_6$$

$$E_3 = \alpha + \beta; \quad \psi_3 = 1/\sqrt{4}(\phi_2 + \phi_3 - \phi_5 - \phi_6)$$

Piridinda 1 ta geteroatom bo'lgani uchun  $\pi$  elektron zichligi bir xil taqsimlanmagan. Elektromanfiyligi C ga qaraganda yuqori bo'lgan N atomi  $\pi$  elektronlarni o'ziga kuchliroq tortib turadi.  $\psi_1$ ,  $\psi_2$ ,  $\psi_3$  ifodalardan foydalanib, piridin molekulasidagi  $\pi$  elektron zichlikning taqsimlanishini aniqlashimiz mumkin.

$$N \text{ atomi uchun: } q_1 q_2 (0.646^2 + 0.5174^2) q_1 1.370$$



1.370

Sxematik tarzda ko'rinish

$$q_1 = 2(0.413^2 + 0.0824^2 + 0.5^2) = 0.855 = q_6$$

$$q_2 = 2(0.295^2 + 0.409^2 + 0.5^2) = 1.008 = q_5$$

$$q_3 = 2(0.259^2 + 0.621^2) = 0.904 = q_4$$

Savollar:

1. Xyukkel usulining butadien molekulasiga tadbir'i.
2. MO ning tuzilishi qanday amalga oshiriladi?
3. Noma'lum koeffitsientlar variatsion usulda qanday topiladi?
4. Ozod valentlik indeksi,  $\pi$  – bog'ning tartibi,  $\pi$  elektron zichlik tushunchalari.
5. Benzol va piridin molekulasida  $\pi$  elektron zichlikning taqsimlanishini tushuntiring.

**MUSTAQIL O'QISH UCHUN MATERIALLAR**

**Kimyoviy bog'ning kvant mexanik nazariyasi. valentlik nazariyasi. elektromanfiylik va ionlanish potentsiali.**

Kimyoviy bog'ni tushuntirmoqchi bo'lgan gipotezalardan birinchisi 19-asrning boshlarida Bergman (shvetsiya) va Bertolle (frantsiya) degan olimlar tomonidan taklif qilingan gipotezadir. Bu olimlar kimyoviy bog'ni butun dunyo tortishish qonuni asosida tushuntirishni taklif qildilar  $f = m_1 m_2 / r^2$ . Bu formuladan ko'rinib turibdiki, agar kimyoviy bog'ning xosil bo'lishi butun dunyo tortishish qonuniga bo'ysunganda massalari katta bo'lgan atomlar o'rtasidagi bog' koagulyatsiyali bo'lishi kerak, ya'ni Hg<sub>2</sub>O dagi bog' H<sub>2</sub>O dagidan mustahkam bo'lishi kerak, Chunki, Hg atomi H atomidan 200 marta og'ir. Lekin tajribada buning teskarisi bo'lib chiqdi.

2 - dan massalarning tortishish koagulyatsiyasi katta masofalarda ham ta'sir qilaveradi. Kimyoviy kuchning ta'sir sferasi angstrelar bilan o'lchanadi.

3 - dan massalarning tortishish koagulyatsiyasi to'yinuvchan emas, kimyoviy bog' esa to'yinuvchan va yo'nalishga ega. Masalan, vodorod atomining ikkitasi ta'sirlashib, N<sub>2</sub> hosil qiladi. Bu molekula esa o'ziga 3 atomni biriktirmaydi va biriktira olmaydi.

Nihoyat, kimyoviy koagulyatsiya spetsifik xususiyatga ega. Ya'ni ma'lum elementlarning atomlari ma'lum element atomlaridan bilan birikada. Masalan, Na atomi Cl atomi bilan koagulyatsiyali bog' hosil qiladi, Li, bilan hech qanday bog' hosil qilmaydi. Yuqorida aytilganlardan tashqari kimyoviy bog'ning energiyasi temperaturaga bog'liq.

Massalar ta'siri qonunidan N<sub>2</sub> ning energiyasini hisoblasak:

$$f = m_{H_2} / r_0^2 = 2.5 \cdot 10^{-47} \text{ } \rho p \rho; m_H = 1.7 \cdot 10^{-27} \text{ } \rho; r_0 = 0.74 \text{ } \text{A}$$

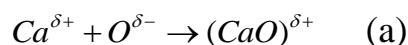
Tajribada topilgani esa

$$f = 6.7 \cdot 10^{-12} \text{ } \rho p \rho$$

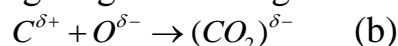
Demak, Bergman bilan Bertollening gipotezasi kimyoviy bog'ni tushuntirib bera olmadi.

BU gipoteza 1820 yilda shved olimi Bertselius elektrokimyoviy nazariyani taklif etdi. Bu nazariyaga binoan har bir elementning atomi 2 ta – musbat va manfiy qutbdan iboratdir. Xar bir atomda yoki musbat yoki manfiy zaryad ko'proq bo'ladi. Masalan, metallarning atomlari esa ortiqcha manfiy zaryadga ega. Birikish vaqtida ular bilan bir-birlari bilan elektrokimyoviy koagulyatsiya hisobiga tortishib turadilar.

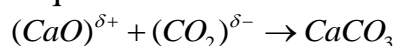
Bu nazariyaga binoan CaCO<sub>3</sub> ning hosil bo'lishini quyidagicha tushuntirish mumkin:



bu erda kimyoviy bog' xosil bo'ladi va Bertseliusning fikricha Sa ning elektr musbatligi O nikidan yuqori bo'lganligi uchun ozgina musbat zaryad ortib qoladi.

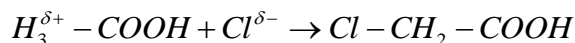


bu erda esa ozgina manfiy zaryad ortib qoladi. Endi (a) bilan (b) birikib neytral CaCO<sub>3</sub> molekulasini hosil qiladi:



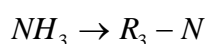
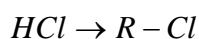
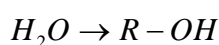
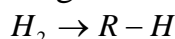
Bertseliusning nazariyasi o'z vaqtida oksidlar, asoslar, kislotalar va tuzlarning hosil bo'lishini sxematik tushuntira olgan bo'lsa xam, ko'pgina savollarga javob bera olmadi.

Masalan.



Reaksiyasida qanday qilib musbat zaryadlangan N o'rnini manfiy zaryadlangan Cl olayotganini tushuntira olmadi.

Shundan so'ng o'tgan asrning 40 – yillarida frantsuz olimlari Dyuma va Jerer tiplar nazariyasini ilgari surdilar. Ular kimyoviy moddalarning molekularini ma'lum tiplarga ajratish mumkin deb ta'kidladilar. Ularning aytishicha hamma murakkab moddalar va H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, HCl, va NH<sub>3</sub> kabi molekularidagi H atomining o'rniga boshqa atomlarning radikallarning almashinishi natijasida xosil bo'ladi.

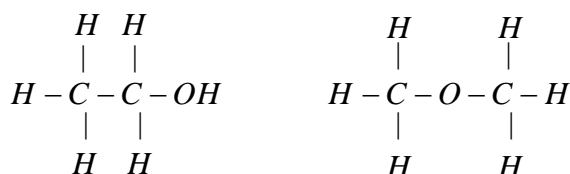


Lekin hamma ma'lum bo'lgan moddalar uchun bunday tiplarni topish mumkin bo'lmadi. Shuning uchun bu nazariya ham oldingi nazariyalar kabi kimyoviy bog' hosil bo'lishini tushuntirib bera olmadi.

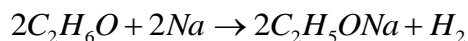
Butlerov o'zining kimyoviy tuzilish nazariyasini yaratdi:

1. Atomlar molekularida ma'lum bir tartibda joylashgan.
2. Atomlarning birikishi ularning valentliklariga mos bo'ladi
3. Moddalarning xossalari ularning tarkibiga kirgan atomlarning faqat tabiati va miqdoriga bog'liq bo'lmasdan, ularning qay tartibda joylashganligiga xam bog'liqdir, ya'ni kimyoviy tuzilishga bog'liqdir.

Bu nazariyaga asosan molekularning ichki strukturasi o'rganish mumkin edi. Masalan, C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>O formulasiga elementlarning valentliklarini xisobga olgan holda 2 xil struktura yozish mumkin.



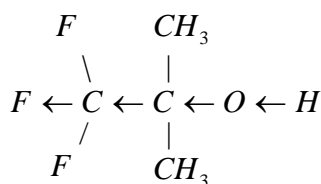
Etil spirtigaxos bo'lgan kimyoviy reaksiyalarni o'rganish orqali, masalan, spirtga Na metalli ta'sir ettirib ON gruppasidagi N ning o'rniga Na ni almashtirishni kuzatish orqali



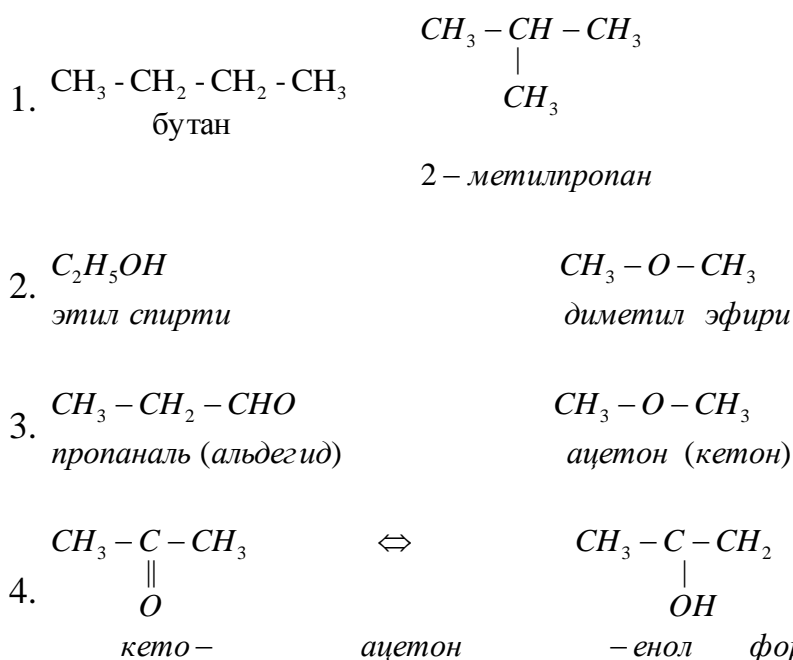
yuqoridagi tarkibga ega bo'lgan modda uchun formulalarning birinchisi, ya'ni etil spirtiniki mos kelishini aniqlay olamiz.

Bu nazariya fanga molekuladagi atomlarning o'zaro ta'siri haqidagi juda muhim tushunchani kiritdi. Molekulada bir-biri bilan bog'lanmagan atomlarning molekuladagi o'zaro ta'sirini induksion effekt deb ataladi. Bu effekt ko'p xollarda sezilarli bo'ladi. Masalan, uchlamchi butil spirtidagi bitta SN<sub>3</sub> gruppasidagi vodorodlarni G' bilan almashtirsak, Spirt kislota xossasini namoyon qiladi. Bunga

sabab elektronga moyilligi koagulyatsiyali bo'lgan G' atomlarning elektronlarni o'zi tomon tortishidir:



Butlerovning kimyoviy tuzilish nazariyasi fanda 1823 yilda Libix va Veler tomonidan ochilgan izomeriya hodisasini ham to'g'ri tushuntirib berdi. Bu hodisaning ma'nosi shundan iboratki. Bir xil tarkibga ega bo'lgan birikmalar turlicha kimyoviy tuzilishga ega bo'ladilar. Shuning uchun ham ularning xossalari turlicha. Masalan:



Molekuladagi atomlar bir-biri bilan kimyoviy moyillik asosida bog'lanadi degan fikrni xam butlerov aytgan edi. Lekin u molekulaning qanday hosil bo'lishini va moyillikning fizik ma'nosi nimadan iborat ekanligini tushuntirib bera olmadi (elektron xali ochilmagan, atom tuzilishi noma'lum bo'lgan, kvant nazariyasi haqida gap ham yo'q edi.)

### Valentlik nazariyasi

Atomlarning o'zaro bog'lanishini valentlik nazariyasi tushuntiradi. Bu nazariya o'z navbatida atomning elektron tuzilishiga asoslangan. Kimyoviy bog'ning hosil bo'lishida asosiy rolni elektronlar o'ynaydi. Shu sababdan 1897 yilda Tomson valentlikning elektron nazariyasini tuzishga kirishdi. Unng fikricha molekulalarning paydo bo'lishi atomdagi kabi molekulalarda xam elektronlarning yadrolar atrofida ma'lum tartibda joylashishiga bog'liq. Bu fikr haqiqatda to'g'ri edi.

Tomsonning bu ishini Lyuis, Lengmyur, Irving va Kossel degan olimlar rivojlantirdilar.

Lyuis nazariyasiga muvofiq atomlar o'rtasidagi kimyoviy bog' ular elektronlarining umumlashib juftlashishi hisobiga paydo bo'ladi. Juftlashgan

elektronlar lokallashgan – turg'un (statik) xolatida bo'ladi deb qaraladi. Bunda 1 atomning elektroni boshqa atomga o'tmaydi, lekin 2 ta atomga barobar ta'sir qilib, ularni bir-biriga tortib turadi. Metan  $\text{SN}_4$  misolida ko'rsak xar bir vodorod atom atrofida 2 tadan elektron, S atrofida esa 8 tadan elektron mavjud bo'ladi (har bir atom atrofida inert gazlarning elektron tuzilishi kabi barqaror sistemalarni hosil qiladi).

Lyuis nazariyasi ba'zi molekulalardagi kimyoviy bog'ning hosil bo'lishini tushuntira olsa ham, lekin u umumiy nazariya bo'la olmaydi. Chunki Lyuis nazariyasi elektronlarni bog'lanayotgan atomlar o'rtasida lokallashgan holda bo'ladi deb faraz qildi, ya'ni molekulani dinamik sistema emas, balki statik sistema deb faraz deb qaraydi. Bu albatta noto'g'ri, chunki elektronlar mikrozarracha bo'lib dualistik tabiatiga ega bo'lganligi uchun ular lokallashgan, bog'langan holda tura olmaydilar.

2-dan kimyoda shunday molekulalar ham kashf qilindiki, ularda kimyoviy bog' juftlashmagan yakka elektronlar hisobiga hosil bo'ladi:  $G'G'$

Bunday molekulalarni Lyuis nazariyasi mutlaqo tushuntira olmadi. Kimyoviy bog'ning hosil bo'lishini faqat kvant mexanikasi to'g'ri tushuntiradi. Xozirgi vaqtda kimyoviy bog'ning tabiati masalasi deyarli hal qilingan: kimyoviy bog' asosan elektrik tabiatiga ega. Molekulada yadrolar va elektronlarning o'zaro grovatatsion va magnit kuchlari elektrik kuchga qaraganda juda ham kichik qiymatga egadirlar va molekula hosil bo'lishida biror sezilarli hissa qo'sha olmaydilar.

### **Elementlarning elektromanfiyligi va uning kimyoviy bog' hosil bo'lishidagi roli**

Elektromanfiylik kimyoviy bog' hosil bo'layotganda mazkur atomning elektronini o'ziga tortishiga intilishini ko'rsatadi. Elektron elektromanfiyligi yuqori bo'lgan element tomon siljiydi.

$$\chi = 1/2(J + E)$$

$\chi$  - elektromanfiylik; J – ionlanish potentsiali, neytral atomdan 1 ta elektronni tortib olish uchun sarf bo'lgan energiyani ko'rsatadi; E – elektronga moyillik bo'lib, elektronning atomga kelib birikkanda ajralib chiqadigan energiyaning miqdorini ko'rsatadi. Bog' hosil qilayotgan A va B atomlarning elektronmanfiyliklarini  $\chi_A$  va  $\chi_B$  bilan belgilasak, u holda  $\chi_A$  q  $\chi_B$  da kovalent bog';  $\chi_A \neq \chi_B$  da esa qutbli yoki ionli bog' hosil bo'ladi.

Elektromanfiylikning o'lchov birligi qilib Malikken Li atomining elektronmanfiyligini olgan va uni 1 birlikka teng deb qabul qilgan. Poling esa F atomini taklif qilgan. Poling sistemasida F ning elektromanfiyligi 4 ga teng deb qabul qilingan. Boshqa elementlarning elektromanfiyligi shunga nisbatan hisoblanganda sistema davriy xarakterga ega bo'lib qoladi.

Li – 1.0 Na – 0.9 K – 0.8 Rb – 0.8 Cs – 0.7 Be – 1.5 Mg – 1.2 Ca – 1.0  
Sr – 1.0 Ba – 0.9 F – 4.0 Cl – 3.0 Br – 2.8 I – 2.5

**Savollar:**

1. Kimyoviy bog'ni tushuntiruvchi qanday gepotezalarni bilasiz?
2. Butlerovning kimyoviy tuzilish nazariyasi.
3. Valentlik nazariyasi.
4. Elementlarning elektromanfiylik tushunchasi.

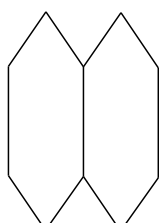
## MOLEKULYaR ORBITALLAR VA MOLEKULYaR DIAGRAMMALAR. MOLEKULYaR DIAGRAMMALAR VA REAKTsION QOBILIYaT

Molekulalarning kvant kimyoviy hisoblarning asosiy natijalari molekulyar diagrammalar tariqasida ifodalanadi.

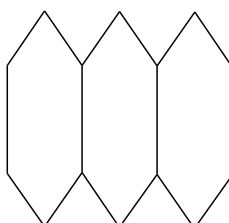
Bunday diagrammalarni aromatik uglevodorodlar misolida ko'rib chiqamiz.



Benzol



Naftalin



Antratsin

1-rasmdagi molekulalardagi strelkalar oxirida yozilgan raqamlar, shu strelkalar qaysi atomdan chiqarilgan bo'lsa, shu atomning ozod valentlik indekslarini ifodalaydi. Agar atomning ozod valentlik indeksi 0 ga teng bo'lsa, bu atom hech qanday yangi kimyoviy bog' hosil qila olmasligini bildiradi.

Benzolda uglerodning hamma atomlari bir-biriga to'la ekvivalentdir. Bu shuni bildiradiki, benzoldagi 6 ta uglerod atomlarining ozod valentlik indeksi 0.399 ga tengligini ko'rsatadi.

Naftalin molekulasida uglerod atomlari ekvivalent emas:  $\alpha$  - holatdagi atom  $\beta$  - holatdagi atomdan farqlanadi.

Naftalin  $\alpha$  - holatda joylashgan hamma atomlarning MO usuli bilan topilgan ozod valentlik indekslarining qiymati 0.452 ga tengligi aniqlandi;  $\beta$  - atomlariniki esa 0.404 ga teng bo'lib chiqdi. Ko'priksimon uglerod atomlari  $\alpha$ - va  $\beta$ - holatdagi atomlardan sezilarli farq qiladi va ko'priksimon uglerod atomlari uchun ozod valentlik indeksining qiymati 0.104 ga tengligi aniqlandi. Bu sonlarni solishtirish natijasida  $\alpha$  - holatdagi uglerod atomlarining reaksiyaga kirishish qobiliyati (yangi kimyoviy bog' hosil qilish qobiliyati) boshqa uglerod atomlariga nisbatan yuqori ekanligi haqida xulosa chiqarishimiz mumkin.

Antratsen molekulasida 9 - holatda joylashgan uglerod atomi 1, 2 holatlarda joylashgan uglerod atomlaridan va ko'priksimon uglerod atomlaridan ancha farq qiladi. Molekulyar diagrammadan ko'rinib turibdiki, hamma 4 tip uglerod atomlari antratsenda ozod valentlik indeksleri bilan farq qiladi.

Molekulyar diagrammada kimyoviy bog' chiziqlariga ko'ndalang qilib yozilgan raqamlar  $\pi$  - elektronlar yordamida hosil bo'lgan bog'ning tartibini bildiradi, yoki  $\pi$  - bog'ning tartibini ko'rsatadi. Molekulalarda  $\pi$  - bog'lardan



tashqari  $\delta$  - elektronlar hosil qilgan  $\delta$  - bog'lar ham mavjuddir. Masalan, benzol molekulasida hamma 6 ta uglerod – uglerod bog'lari  $\pi$  – bog'lar bo'yicha 0.667 ga teng bo'lgan tartibga ega va  $\delta$  - bog'lar bo'yicha C – C bog'larning tartibi 1.00 ga teng. Bog'ning umumiy tartibi 1.667 ga teng bo'ladi. Poling bo'yicha hisoblangan benzol uchun bog' tartibi 1.5 ga teng, lekin rezonans nazariyasida hisoblangan bog' tartibining tushunchasi o'zgacharoq ta'rifga egadir. Shuning uchun bu raqam 1.0667 MO usuli qo'pol deganini bildirmaydi.

Piridin uchun ozod valentlik indeksleri ko'rsatilmagan, atomlarning yoniga yozilgan raqamlar shu atomdagi  $\pi$  elektronlar zichligini bildiradi.  $\pi$  elektron zichligi 1.00 ga teng bo'lgan uglerod atomini elektroneytral deb hisoblash lozim, chunki aromatik xalqadagi xar bir uglerod atomi butun musbat zaryadga deb qabul qilingan. 2- va 3- holatlarda joylashgan C atomlarining  $\pi$  elektron zichligi 0.849 va 0.947 larga teng. Bu qiymatlarni 1 dan ayirib 2 va 3 atomlardagi natijaviy elektr zaryadining miqdorini olamiz;  $0.151e^{-2}$  – uglerod atomi uchun va (musbat)  $0.053e^{-3}$  – uglerod atomi uchun (elektron zaryadi birligida  $eq4.8 \cdot 10^{-10}$  el.st.birlik).

Xuddi shunday N atomi uchun xisoblasak, natijaviy elektr zaryadining miqdorini -0.586 ga teng bo'ladi. Demak, elektronlar N atomi tomon siljigan bo'lib, N atomi elektron zichligi 1 dan katta bo'ladi.

Yuqorida ko'rib chiqilgan kattaliklar, ya'ni  $\pi$  – elektron zichlik, ozod valentlik indeksi va bog' tartibi, aromatik birikmalarning va oralatma bog'li (soedineniy s soprejeno'mi svyazami) birikmalarning katta ahamiyatga ega bo'lgan xarakteristikalaridir. Raqamlar ustma-ust tushmasligi uchun bu xarakteristikalarni alohida diagrammalarda ifodalash qulaydir.

Qulaylik uchun tropolon molekulasidagi 0 atomlari ekvivalent deb qabul qilinib hisoblangan, aslida esa bu noto'g'ri.

$\pi$  – elektronlarning taqsimlanishi natijasida hosil bo'lgan dipol momenti kislorod atomlari tomoniga yo'nalgan strelka bilan ko'rsatilgan. Bu diagrammada  $\pi$  – bog'larning tartibi emas, balki atomlararo masofa keltirilgan, chunki C – C bog'lar orasidagi atomlararo masofa  $\pi$  – bog'ining tartibi bilan chambarchas bog'langandir. Shuning uchun  $\pi$  – bog'ini tartibini bilgan holda atomlararo masofani hisoblab chiqish unchalik qiyin ish emasdir.

Yuqorida ta'kidlaganimizdek, bog'ning tartibi atomlararo masofa bilan uzviy bog'langan va  $\pi$  – bog'ning tartibi ortishi bilan atomlararo masofa kamayadi. Bu ikki kattaliklar uchun biridan ikkinchisiga o'tishni ifodalovchi oddiy tenglamalar mavjud.

Biz benzol molekulasidagi C – C bog'larning hammasi 1.667 ga teng bo'lgan tartibga ega ekanligini ko'rgan edik. Naftalinda esa C – C bog'larning tartibi 1.518 – 1.725 gacha o'zgarsa, antratsenda 1.485 – 1.738 gacha o'zgaradi. Demak, benzol molekulasida to'g'ri 6 ta burchakdan tashkil topgan deb bo'lmaydi va C – C bog'lar orasida masofalar ham turlicha bo'lishi kerak. Bu oldindan aytilgan (MO usuli yordamida) xulosani isbot qilish uchun juda ham aniq o'lchangan natijalar kerak. Robertson (1950 yil) birinchi bo'lib rentgen analiz usuli bilan naftalin va antratsendagi C – C bog'larning atomlararo masofalarini aniq topdi;

### **Antratsen molekulasidagi atomlararo masofalar**

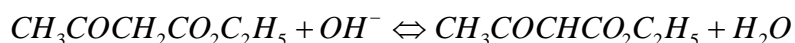
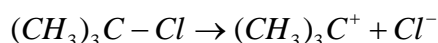
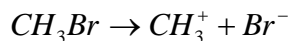
| bogʻ | atomlararo masofa, $\overset{0}{A}$ |       |          |
|------|-------------------------------------|-------|----------|
|      | rentgen nurlari –<br>gdifrakts.     | MO    | $\Delta$ |
| A    | 1.368                               | 1.382 | 0.014    |
| B    | 1.436                               | 1.420 | 0.016    |
| C    | 1.399                               | 1.406 | 0.007    |
| D    | 1.428                               | 1.430 | 0.002    |
| E    | 1.419                               | 1.410 | 0.009    |

MO usuli bilan hisoblangan va tajribada aniqlangan kattaliklar orasidag farq juda kichik. Olingan bunday natija nazariyaning ham, tajribaviy asboblarni yaratish boʻyicha harakatlarning ham katta yutugʻidir.

### Molekulyar diagrammalar va reaksiyon qobiliyati

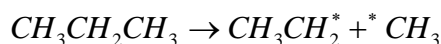
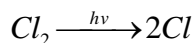
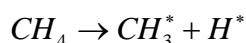
Koulsonning klassifikatsiyasi boʻyicha organik birikmlarning reaksiyalari 2 ta asosiy gruppaga boʻlinadi:

1. Geterotsiklik oʻrin olish (zamenenie) reaksiyalari. (Taʼsir natijasida bogʻ uzilib, bogʻni xosil qilib turgan elektron jufti 1 ta atom yoki gruppada qolsa, shu atom yoki grupa manfiy zaryadlanadi. Molekulaning qolgan qismi esa musbat zaryadlanadi. Musbat zaryadlanib qolgan uglerod atomli zarracha karbokation va manfiy zaryadlangan zarracha karboanion deyiladi).



*sirkaetil efir, 3-oksobutan kislotasining etil efiri*

2. Gomologik oʻrin olish reaksiyalari. (Bogʻni hosil qilib turgan elektron juft simmetrik uzilsa, yaʼni har qaysi atom yoki gruppada bittadan elektron qolsa, bu hol bogʻning gomologik parchalanishi deyiladi). Gomolitik uzilish natijasida erkin radikallar hosil boʻladi. Bunday atomlar va atomlarning gruppalari juftlashmagan elektronlarni oʻzida tutadi.



Organik kimyoning elektron nazariyasiga binoan, geterolitik oʻrin olish “elektrofil” yoki “nukleofil” reagentlarining taʼsirida boʻladi.

Elektrofil reagentlar deb, elektron zichlik yuqori boʻlgan soha (manfiy zaryadi zarrachani) bilan taʼsirlashuvchi (ataka qiluvchi) reagentlarga aytiladi (yaʼni elektronga moyilligi boʻlgan reagentlar);  $NO_2^+$  - nitroniy kationi;  $SO_3^-$  - oltingugurt (VI)-oksid.

$NO_2^+$  - nitroniy kationi;  $SO_3$  - oltingugurt (VI)-oksid.

Nukleofil reagentlar deb, qutbli bog'ning musbat zaryadlangan qismi bilan ta'sir etuvchi reagentlarga aytiladi. Nukleofil yadroga moyilligi bo'lgan reagentdir.

Misol,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{CN}^-$  va bo'linmagan juft elektronlarga (nepodelennaya para elektronov) ega bo'lgan atomlarni tutuvchi moddalar (ya'ni  $\text{NH}_3$ ) nukleofildir.

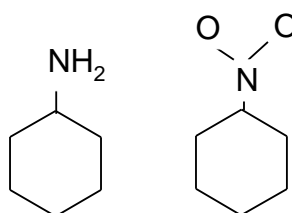
Demak, nukleofil bog'ning musbat zaryadlangan ( $\delta^+$ ) oxirini va elektrofil bog'ning manfiy zaryadlangan ( $\delta^-$ ) oxirini ataka qilar ekan.

Gomolitik reaksiyalarda zaryadlangan erkin radikallar ishtirok etadi. Masalan,  $\text{C}_6\text{H}_5\cdot$  yoki  $\text{OH}\cdot$

1) Geterolitik reaksiyalarning tipik misoli bo'lib aromatik birikmalarni nitrallash reaksiyasini keltirish mumkin. Bunda aktiv agent bo'lib  $\text{NO}_2^+$  nitroniy ioni xizmat qiladi. Ma'lumki,  $\text{C}_6\text{H}_5\text{X}$  ( $\text{X}$  q  $\text{CH}_3$ ,  $\text{F}$ ,  $\text{Cl}$ ,  $\text{OH}$  yoki  $\text{NH}_2$ ) tipidagi molekullarda o'rin olish asosan orto – va para – holatlarda sodir bo'ladi.

Quyidagi rasmda ko'rsatilgan molekulyar diagrammada ko'rsatilishiga anilinda ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{NH}_2$ ) orto – va para – holatlar  $\pi$  – elektronlar bilan boyigan, nitrobenzolda ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{NO}_2$ ) esa eng ko'p elektron zichlik meta – holatdan (xalqadagi elektron zichliklar) kuzatiladi.

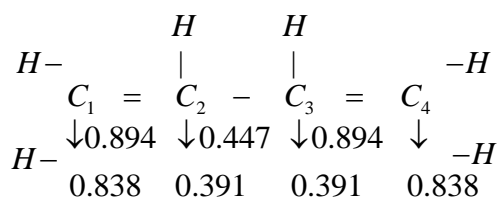
1\*91



Anilin va nitrobenzol molekullaridagi  $\pi$  – elektron zichlik taqsimlanishi.

Shuning uchun, musbat zaryadlangan nitroniy  $\text{NO}_2^+$  ioni anilinda orto – va para – holatlarni xujum qilishini va nitrobenzol bilan ta'sirlashganda meta – xolatni xujum qilishini oson tushunish mumkin. Shunday qilib, molekulyar diagramma geterolitik o'rin olish reaksiyasida qaysi bir atom 1-bo'lib reagent ta'siriga uchrashini ko'rsatib berar ekan.

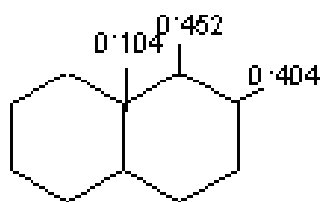
2) gomolitik reaksiyaning misoli bo'lib butadien molekulasidagi o'rin olish reaksiyasi xizmat qilishi mumkin.



Nazariy hisoblar shuni ko'rsatadiki (MO usuli bilan qilingan), hamma uglerod atomlaridagi elektron zichlik 1 ga teng ekan. Shuning uchun elektrofil va nukleofil reagentlarning ta'siriga (ionlar xujumiga) hamma uglerod atomlari ham bir xil uchraydi deyish mumkin.

Ozod radikallar (zaryadlanmagan zarrachalar) ta'sir etganda butunlay boshqacha bo'ladi.

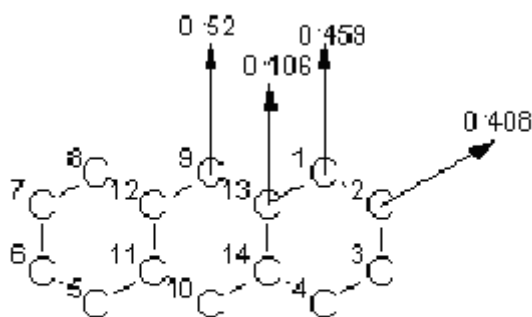
Bunday tipdagi reaksiyalar uchun elektron zichlik emas, balki ozod valentlik indeksi asosiy ahamiyatga ega bo'ladi. Butadien molekulasidagi 1 va 4-atomlarning ozod valentlik indekslari 2, 3 atomlarnikidan katta bo'ladi. Erkin radikallar 1-navbatda ozod valentlik indekslari katta bo'lgan atomlarni xujum qiladi. Shuning uchun chetda joylashgan C atomlari zaryadlanmagan zarralar bilan o'rtadagilarga nisbatan osonroq ta'sirlashadi. Xuddi shunday naftalin molekulasidagi  $\alpha$  – va  $\beta$  – holatlarning har xil reaksiyon qobiliyatini ham tushuntirish mumkin.



naftalin

Nihoyat, bitta molekulada birdaniga 2 ta markaz xujum qilinishi mumkin. Bu holda shu 2 ta markazning ozod valentlik indekslarining yig'indisi eng katta bo'lgan atomlar bo'yicha gomolitik reaksiyalarning yo'nalishini ko'rsatish mumkin. Masalan, antratsen molekulasida 9- va 10-hoatlardagi C atomlarning ozod valentlik indekslarining yig'indisi 0.520 Q 0.520 q 1.040 ga teng.

1- va 4- hoatlardagi C atomlarniki esa 0.459 Q 0.459 q 0.918 ga teng. Shuning uchun ikkilamchi gomolitik xujum uchun eng nozik joy 9- va 10-hoatlarda bo'ladi.



antratsen

### Muxokama uchun savollar:

1. Molekulyar diagrammalar tushunchasi.
2. Molekulyar diagrammalar yordamida reaksiyon qobiliyatini tushuntirish.

## GLOSSARIY

| Termin           | Termino'            | Terminology      | O'zbek tilidagi sharhi  |
|------------------|---------------------|------------------|---|
| Atom             | Atom                | Atom             | kimyoviy elementning odiy va murakkab moddalar molekulasi tarkibiga kiruvchi eng kichik zarracha. Ikkinchi ta'rifi musbat zaryadlangan yadro bilan bitta yoki bir necha elektronlardan tarkib topgan elektroneytral zarracha. |
| Molekula         | Molekula            | Molekule         | muayyan moddaning kimyoviy xossalari o'zida saqlab qoladigan eng kichik zarracha.   |
| Kimyoviy element | Ximicheskiy element | Chemical element | atomlarning har qaysi alohida turi. (yadro zaryadlari teng bo'lgan – atomlar turi).   |
| Modda            | vehestvo            | substance        | o'z massasiga ega bo'lgan va elementar zarrachalardan tashkil topgan materiyaning bir bo'lagi   |
| Izotop           | Izotop              | Isotope          | atom massalari bilan farq qiladigan kimyoviy elementning turli xil ko'rinishi.  |
| Nuklid           | Nuklid              | nuclide          | ayni sondagi protong va neytronlar bilan ifodalangan atomlar turi   |
| Massa defekti    |                     | mass defect      | yadro massasining yadrodagi protonlar   |

|                          |                         |                              |   |
|--------------------------|-------------------------|------------------------------|---|
|                          | Defekt massa            |                              | va neytronlar massalarining yig'indisidan kichiklik farqi   |
| Yarim emirilish davri    | Vremya poluraspada      | half-destroyed               | atomni yashash davrini tavsiflab, ayni elementning ayni vaqtdagi bor qismini yarmini parchalanishga zarur bo'lgan vaqt  |
| Termoyadroli reaksiyalar | Termoyadernο'e reaktsii | thermonuclear reaction       | atom yadrolaridan murakkabroq yadrolarni hosil bo'lish reaksiyalari.  |
| $\alpha$ -parchalanish   | $\alpha$ – raspada      | $\alpha$ - half-             | atom yadrolarining radioaktiv parchalanishi natijasida $\alpha$ -zarracha ajralib chiqadi. natijada yadroning zaryadi 2 ga, massasi 4 birlikka kamayadi. $\alpha$ -parchalanish tunnel effekt mexanizmiga binoan ro'y beradi: ajralib chiqishi kerak bo'lgan $\alpha$ -zarrachaning energiyasi yadroning potentsial to'sig'idan qiymatidan kichik bo'lishiga qaramay uni «engib» o'tadi.                          |
| $\alpha$ – zarracha      | $\alpha$ – chastitsa    | $\alpha$ - particle          | geliy Ne atomining yadrosi 4, 2 ta proton va 2 ta neytrondan tashkil topgan.  |
| Atom yoki ion radiusi    | Atom ili ionnaya radius | The radius of an atom or ion | yadro markazidan atom yoki ionning eng oxirgi elektronini orbital radiusi.  |
| Atom massasi             | Atomnaya massa          | atomic mass                  | kimyoviy element atomining atomning massa birligida ifodalangan o'rtacha qiymati.   |
| Atom massa birligi       | Edinitsa atomnaya mass  | Atomic mass unit             | uglerodning $^{12}_6\text{S}$ izotopi atomning 1G'12 qismi  |
| Gravitatsiya             | Gravitatsiya            | gravitationally              | jismlar o'rtasidagi universal tortishuv ta'siri. Gravitatsion tortishuv ta'sirlashuvchi zarrachalarning to'liq energiyalarining ko'paytmasiga to'g'ri proporsional. tortishuv kuchi zarrachalarning xossasiga bog'liq deyish to'g'ri emas, chunki massasi 0 ga teng bo'lgan foton Quyoshning gravitatsion maydoni tomonidan o'z yo'lidan chetlashadi.   |
| Interferentsiya          | Interferentsiya         | Interferentsiya              | bitta manbadan har xil yo'llar orqali tarqalayotgan to'lqinlarning o'zaro ta'sirlashuvi tebranish fazalari o'zaro mos bo'lgan joylarda bu ikki to'lqin bir-birini kuchaytiradi-amplitudalar qo'shiladi. Fazalar bir-biriga o'zaro teskari joylarda to'lqinlar kuchsizlanadi, amplitudasi pasayib ketadi. Bu hodisa molekulalar va kristallarning ichki fazaviy tuzilishini va geometrik parametrlarini aniqlashda |

|                                 |                                     |  |   |
|---------------------------------|-------------------------------------|--|---|
| Ionlanish energiyasi            | Ionizatsionnaya energiya            | the ionization energy                      | qo'llaniladi. Elektronografiya elektronlar oqimini kristall yoki molekula bilan ta'sirlashish natijasida difraktsiya va interferentsiyaga uchrash hodisalariga asoslangan qo'zg'algan holatdagi atomdan elektronni chiqarish uchun zarur bo'lgan eng kichik energiya. |
| Kvant                           | Kvant                               | quantum                                    | elektromagnit yoki boshqa xil qandaydir maydon energiyasini bo'lagi, tashkiliy qismi, birligidir.   |
| Kvant sonlari                   | Kvantovoe chislo                    | quantum numbers                            | Mikrozarrachalarning holatini yoki ularning xossalari-momenti, zaryadi va boshqalarni xarakterlaydi, belgilaydi   |
| To'lqin funktsiyasi             | Volnovaya funktsiya                 | wave function                              | kvant mexanikada eng asosiy kattalik bo'lib, u sistemaning holatini ifodalaydi va fizikaning kattaliklarning eng ehtimol va o'rtacha qiymatlarini topishga imkon beradi.  |
| Elektron bulutlari              | Elektronnaya oblako                 | electronic clouds                          | shu erda elektronni bo'lish ehtimolligini aniqlaydi   |
| Elektronga moyillik             | Elektrootritsatelno st              | electron trends                            | neytral atomga elektron birikib, uni manfiy zaryadlangan ionga aylanishidagi energetik effekt.  |
| Elektromanfiylik                | Elektrootritsatelno st              | Elektromanfiylik                           | ayni elementning atomini birikmalarda boshqa element atomiga nisbatan elektron zichlikni o'zi tomon tortish xususiyati.   |
| Kimyoviy bog'lanish             | Ximichechkaya svyaz                 | chemical link                              | bog'lanuvchi zarrachalarning elektron bulutlarini qoplanishi va sistemaning to'la energiyasini kamayishi bilan boradigan jarayon  |
| Kimyoviy bog'ning tavsiflari    | Xarakteristika ximichechkaya svyazi | The chemical characteristics of the garden | kimyoviy bog'lanish energiyasi va geometrik parametrlari  |
| Bog'ning geometrik parametrlari | Geometricheskaya parametro' svyazi  | Geometric parameters of the garden         | kimyoviy bog'ning uzunligi, molekuladagi bog'lanish burchagi.   |
| Bog'ning energiyasi             | Energiya svyaza                     | binding energy                             | bog'ni alohida atomlardan hosil qilinganida yutilgan energiya miqdori bilan yoki bog'ni uzish uchun sarf qilingan ish miqdori bilan aniqlanadi.   |
| Bog'ning uzunligi               | Dlina svyaza                        | bond length                                | molekuladagi atomlar yadrolari markazlari orasidagi masofa.   |
| Gipervalentlik                  | Gipervalentnost                     | hypervalent                                | birgina atom atrofida bo'lsa ham, sakkiztadan ko'p elektron bo'lishini talab etadigan zarrachalar gipervalent zarrachalar deb ataladi   |
| Effektiv zaryad                 | Zaryad effektivnosti                | effective charge                           | atomning manfiy zaryadlari va yadroning musbat zaryadlarining   |

|                                     |  |                                |  |
|-------------------------------------|--|--------------------------------|--|
| Koalent bog'lanish                  | Koalentnaya svyaz                            | covalent bonds                 | algebraik yig'indisi.  |
| Qutbsiz yoki gomeopolyar bog'lanish | Nepolyarnaya svyaz ili gomeopolyarnaya svyaz | Non-covalent and covalent bond | elektron juftlar hisobiga hosil bo'lgan kimyoviy bog'lanish.   |
| Qutbli koalent bog'lanish           | Polyarnaya koalentnaya svyaz                 | Polar covalent bonds           | bir xil atomlar orasida hosil bo'lgan koalent bog'lanish.  |
| $\delta$ - bog'                     | $\delta$ - svyaz                             | $\delta$ -bond                 | elektromanfeklari o'zaro farq qiladigan elementlarning atomlari orasida sodir bo'lgan kimyoviy bog'lanish  |
| $\pi$ - bog'                        | $\pi$ - svyaz                                | $\pi$ -bond                    | kimyoviy bog' bo'lib, unda atom yadrolarini bog'lovchi chiziq bo'lovchi elektron bulutlarini o'q simmetriyasi hisoblanadi.   |
| $\psi_Q$ -bog'lovchi orbital        | $\psi_Q$ -Svyazivayuhiy orbital              | $\psi_Q$ bonding orbitals      | bog'lovchi elektron bulutlari faqatgina atom yadrolari orqali o'tuvchi simmetriya tekisligiga ega bo'ladi  |
| $\psi_-$ -bo'shashtiruvchi orbital  | $\psi_-$ - bo'shashtiruvchi orbital          | $\psi_-$ antibonding orbital   | yadrolar orasidagi to'lqin funktsiyasi amplitudasining oshishiga sabab bo'luvchi, ishorasi bo'yicha bir xil ikki atom orbitalning interferentsiyasidan hosil bo'lgan orbital.  |
| Bog' tartibi                        | Poryadok svyazi                              | Communication procedure        | tugun yuzasi hosil bo'lishiga olib keluvchi turli qiymatli amplitudalarga ega bo'lgan atom orbitallar interferentsiyasi natijasidan hosil bo'ladi, bu esa tugun yuzalar hosil bo'lishi bilan tasdiqlanadi.   |
| To'lqin uzunligi                    | Dlina volno'                                 | wavelength                     | Bog'lovchi orbitallardagi elektronlar sonidan bo'shashtiruvchi orbitallardagi elektronlar sonini ayirmasi ikkiga bo'lingandagi qiymat (BT). Bu qiymat noldan farqli bo'lsa molekula mavjud bo'ladi.  |
| Interferentsiya                     | Interferentsiya                              | Interference                   | to'lqin jarayonining yonma-yon joylashgan cho'qqilar orasidai masofaga aytiladi.   |
| Atom orbitallarining qoplashishi    | Pokritie elektronno'x orbitaley              | overlap of atomic orbitals     | bitta manbadan har xil yo'llar orqali tarqalayotgan to'lqinlarning o'zaro ta'sirlashuvi tebranish fazalari o'zaro mos bo'lgan joylarda bu ikki to'lqin bir-birini kuchaytiradi-amplitudalar qo'shiladi. Fazalar bir-biriga o'zaro teskari joylarda to'lqinlar kuchsizlanadi, amplitudasi pasayib ketadi. Bu hodisa molekular va kristallarning ichki fazaviy tuzilishini va geometrik parametrlarinianiqlashda qo'llaniladi. |
|                                     |  |                                | yadrolar orasidagi elektron bulutizichligini ortishiga, elektronlar potentsial energiyasining kamayishiga  |



|                           |                                  |                       |   |
|---------------------------|----------------------------------|-----------------------|---|
| Shredinger tenglamasi     | Uravnenie Shredingera            | Schrödinger equation  | va kovalent bog'ini hosil qilishga olib keluvchi, antiparallel spinli elektronlar to'liq funktsiyalarini qo'shilishi elektronlarning atomlardagi holatining ifodasi, $\Psi$ -to'liq funktsiyasini hisoblashga imkon beruvchi kvant mexanikasining asosiy tenglamasi. Uning kvadrati atom elementidagi elektronning bo'lish ehtimolligini ifodalaydi.  |
| Kvant mexanika            | Kvantovaya mexanika              | quantum mechanics     | to'liq funktsiyasini o'z ichiga oladigan tenglama asosida mikroob'ektlarning tashqi maydonlarda sochilishi va harakat qonunlarini aniqlaydi tushuntiradi. Kvant mexanikasining o'ziga xos tomoni-o'lchash natijalariningehtimollik xarakterga ega ekanligini ko'rsatishdan iborat. Shuningdek, fizikaviy parametrlar-energiya harakat miqdori momenti, uning tashqi yo'nalishga proektsiyasi diskret ravishda o'zgarishini ko'rsatishdan iboratdir  |
| Ayniy orbitallar          |                                  | degenerate orbitals   | bir xil energiyali bir pog'ona orbitallari; masalan, <i>r</i> -orbitallar –uch karra, <i>d</i> -orbitallar-besh karra; <i>f</i> - etti karra ayniy orbitallar.  |
| Azot N (lat. Nitrogenium) | Azot N (lat. Nitrogenium)        | Nitrogen              | Atom nomeri 7, atom massasi 14,0; elektron formulasi $[\text{He}]2s^22p^3$ ; D.I.Mendeleev davriy sistemasi ikkinchi davr, beshinchi guruhcha elementi. Normal sharoitda ikki atomli inert rangsiz, mazasiz, hidsiz, Er atmosferasi asosiy komponenti (78,09%) bo'lgan gaz.   |
| Ammiak $\text{NH}_3$      | Ammiak $\text{NH}_3$             | Ammonia $\text{NH}_3$ | Ko'p miqdorda $3\text{H}_2 + \text{N}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$ ; $\Delta N^\circ$ q $-92$ kDj reaksiyasi orqali vodorod va azotdan olinadigan gazzimon modda. Ammiak molekullari bir-biri bilan vodorod bog'i orqali birikkan, shu sababli nisbatan past temperaturada ( $-33,4$ °S) suyuq holatga o'tadi. Ammiak sanoatda sovitish ustanovkalarida, uning suvli eritmalari turli xil kimyoviy sintezlarda; olinadigan ammiakning ko'p qismi nitrat kislotasini va azotli o'g'itlarni olishda ishlatiladi. |
| Bog'lamovchi atom orbital | Nesvyazivayuhiy atomno'y orbital | nonbonding orbital    | ikki elektroni bo'lgan shu sababli almashinish mexanizmi bilan  |

|   |  |                                       |  |
|---|--|---------------------------------------|--|
| Bog'lamovchi molekulyar orbital               | Nesvyazivayuhiy molekulyarno'y orbital | Nonbonding molecular orbital          | bog'lanishda ishtirok etmaydigan, lekin donor-aktseptor mexanizmi bilan bog' hosil qiluvchi orbital.<br>energiyasi dastlabki atom orbital energiyasiga teng bo'lgan molekulyar orbital.  |
| Optik aktivlik                                | Opticheskoy aktivnost                  | optical activity                      | Moddaning kelayotgan nurni aniq bir qiymatda bura olish qobiliyati   |
| Enantiomer molekulalar                        | Enantiomernoe molekulo'                | enantiomeric molecules                | Enantiomer molekulalar bir-biridan tushayotgan nurning burilish yo'nalishi bilan farq qiladi   |
| Ko'zgu – aylanish o'qi                        | Zerkalnaya                             | mirror swivel axis                    | Molekulani 90° da o'z aksi bilan aylanishi   |
| Simmetriya elementi                           | Element simmetrii                      | symmetry elements                     | Aylanish o'qi, inversiya markazi, oynaviy-aylanish o'qi va tekislikdagi oyna aksidan iborat  |
| Chiziqli molekulalar                          | Lineyno'e molekulo'                    | linear molecules                      | Noodatij hodisa bo'lib, molekula o'z o'qi atrofida aylanayotgan payti o'zgarishsiz qoladi. Demak, faqatgina 2 ta kombinatsiya molekulani o'zini orientatsiyasini o'zgarishiga mos keladi |
| Molekulani normal tebranishi                  | Normalnaya vibratsii molekulo'         | the normal vibrations of the molecule | Atomlarning bir – biriga bog'liq bo'lmagan kollektiv harakati  |
| Xiral molekula                                | Xiralno'e molekulo'                    | chiral molecule                       | Grek tilida “qo'l” degan ma'noni bildiradi. O'zini oynadagi aksiga mos kelmaydigan molekula  |
| Enantiomer                                    | Enantiomero'                           | enantiomer                            | Grek tilida “ikki”, “ikkita” ma'nosini bildiradi. Xiral molekula va uning oynadagi aksi  |
| Simmetriyalangan chiziqli kombinatsiya (SChK) | Simmetrichno'e lineyno'e kombinatsii   | a linear combination of symmetric     | Atom orbitalinining ma'lum bir simmetriyadagi kombinatsiyasidan quriladigan molekulyar orbital   |
| Molekulyar tebranish                          | Molekulyarnaya vibratsiya              | molecular vibrations                  | Molekula geometriyasining muvozanatdagi kichik davriy xatoligi   |
| Polyar molekula                               | Polyarnaya molekula                    | polar molecule                        | Doimiy elektrlangan dipol momentiga ega molekula   |
| Anizotropiya                                  | Anizotropiya                           | anisotropy                            | qattiq moddaning fizik xossalarini yo'nalishga bog'liq ravishda turli kattaliklar bilan xarakterlanishidan iborat hodisa. Anizotropiya moddaning kristallik holati belgisi.              |
| Bronza  | Bronza                                 | Bronze                                | Misning turli metallar (qalay, alyuminiy, berilliy, qo'rg'oshin, kadmiy, xrom va b.) bilan qotishmasi. Tegishli bronza qalayli, alyuminiyli  |

|  |                             |                              |   |
|--|-----------------------------|------------------------------|---|
| Izomorfizm                               | Izomorfizm                  | isomorphism                  | berilliyli va b. deb ataladi<br>Atomlar, ionlar yoki molekularning kristallardagi bir-birini almashtirish xususiyati, bunda o'zgaruvchan tarkibli kristallar-almashinish qattiq eritmalari hosil bo'ladi. KCl i KBr, KHPO <sub>4</sub> i KHAsO <sub>4</sub> , MgCO <sub>3</sub> i CaCO <sub>3</sub> va b. izomorf hisoblanadi.  |
| Kristallik panjara                       | Kristallicheskaya reshetka  | crystal cell                 | zarrachalar joylashuvidagi qat'iy takrorlanuvchanlikni namoyon qiluvchi kristallik holat modeli (uzoq tartib). Zarrachalar orasidagi kimyoviy bog'lanish turiga qarab, kristallik panjaralar atom, ion, metallik, molekulyar va qavatsimon panjaralarga bo'linadi.  |
| Mis Cu (lat. Cuprum)                     | Mis Cu (lat. Cuprum)        | Cuprum                       | D.I. Mendeleev davriy sistemasi to'rtinchi davr birinchi guruhchasi elementi; atom nomeri 29; atom massasi 63,546;. elektron formulasi [Ar]4s <sup>1</sup> 3d <sup>10</sup> . Oddiy modda mis-oltinsimon-pushti rangli plastik metall, havoda darhol xarakterli sarg'ish-qizg'ish rangli oksid plenka bilan qoplanadi. Mis yuqori issiqliq va elektro'tkazuvchanlikka ega (elektr o'tkazuvchanlik bo'yicha kumushdan keyin ikkinchi o'rinda). Ikkita stabil izotopga ega. – <sup>63</sup> Cu i <sup>65</sup> Cu |
| Metall bog'lanish                        | <i>Metallicheskiy svyaz</i> | metallic bond                | toza metallar, qotishmalar va intermetall birikmalarga xos bo'lgan nisbatan erkin elektronlar mavjudligi bilan belgilanadigan kimyoviy bog'lanish. Erkin xarakatlanuvchi elektronlar yuqori elektr va issiqlik o'tkazuvchanlikni belgilaydi.  |
| Elementar katakcha                       | Elementarnaya yacheyka      | unit cell                    | bu kristall fragmenti bo'lib burish va akslantirish operatsiyalaridan foydalanilmagan holda, boshqa shunday fragmentlar bilan butun kristallni hosil qiladi.  |
| Binar birikmalar                         | Binarnoe soedinenie         | binary compound              | asosan, ikki elementdan hosil bo'lgan moddalar. Binar birikmalar termini odatda, asosli va kislotali oksidlarga nisbatan qo'llanilmaydi. Bunda tuz hosil qilmovchi oksidlar binar birikmalarga kiritiladi.  |
| Struktura (tuzilish) defektlari Metallar | Defekt struktur Metallo'    | deffekty structure<br>metals | real kristall moddalarda ideal kristallik tuzilishning buzilishi.<br>kondensirlangan holatda aniq bir atom bilan bog'lanmagan erkin elektronga ega oddiy moddalar.  |

|                      |                      |               |   |
|----------------------|----------------------|---------------|---|
| Perovskit            | Perovskit            | perovskite    | tabiiy birikma (mineral) $\text{SrTiO}_3$ .   |
| Plastiklik           | Plastichnost         | plastic       | Metallarning yuk ta'sirida parchalanmagan holda deformatsiyalanish xususiyati   |
| Sfalerit             | Sfalerit             | blende        | Tabiiy birikma (mineral) $\text{ZnS}$   |
| Yarim o'tkazgich     | <b>Poliprovodnik</b> | semiconductor | valent va o'tkazuvchi zonalar orasidagi ingichka ta'qiq (zonalar nazariyasiga asosan) zonali moddalar; ularga kremniy, germaniy, selen, tellur, surma va boshqa birikmalar kiradi, masalan, $\text{GaAs}$ , $\text{InP}$ , $\text{ZnTe}$ va b.  |
| O'tkazgichlar        | <b>provodniki</b>    | conductor     | Elektronlar harakati tufayli elektr tokini o'tkazuvchi moddalar.  |
| Shpinel              | Shpinel              | spinel        | Tabiiy birikma (mineral) $\text{MgO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$   |
| Flyuorit             | Flyuorit             | Fluorite      | Tabiiy birikma (mineral) $\text{CaF}_2$   |
| Anizotropiya         | Anizotropiya         | anisotropy    | qattiq moddaning fizik xossalarini yo'nalishga bog'liq ravishda turli kattaliklar bilan xarakterlanishidan iborat hodisa. Anizotropiya moddaning kristallik holati belgisi.   |
| Bronza               | Bronza               | Bronze        | Misning turli metallar (qalay, alyuminiy, berilliy, qo'rg'oshin, kadmiy, xrom va b.) bilan qotishmasi. Tegishlicha bronza qalayli, alyuminiyli berilliyli va b. deb ataladi   |
| Izomorfizm           | Izomorfizm           | isomorphism   | Atomlar, ionlar yoki molekularning kristallardagi bir-birini almashtirish xususiyati, bunda o'zgaruvchan tarkibli kristallar-almashinish qattiq eritmaları hosil bo'ladi. $\text{KCl}$ i $\text{KBr}$ , $\text{KHPO}_4$ i $\text{KHAsO}_4$ , $\text{MgCO}_3$ i $\text{CaCO}_3$ va b. izomorf hisoblanadi.   |
| Mis Cu (lat. Cuprum) | Mis Cu (lat. Cuprum) | Cuprum        | D.I. Mendeleev davriy sistemasi to'rtinchi davr birinchi guruhchasi elementi; atom nomeri 29; atom massasi 63,546;. elektron formulasi $[\text{Ar}]4s^13d^{10}$ . Oddiy modda mis-oltinsimon-pushti rangli plastik metall, havoda darhol xarakterli sarg'ish-qizg'ish rangli oksid plenka bilan qoplanadi. Mis yuqori issiqlik va elektro'tkazuvchanlikka ega (elektr o'tkazuvchanlik bo'yicha kumushdan keyin ikkinchi o'rinda). Ikkita stabil izotopga ega. – $^{63}\text{Cu}$ i $^{65}\text{Cu}$ |
| Aktseptor            | Aktseptor            | Acceptor      | Donor-aktseptor bo'yicha bog'lanish sodir bo'layotgan vaqtda donor valent elektron jufti bilan bog'lanadigan erkin  |

|                                |                              |                        |  |
|--------------------------------|------------------------------|------------------------|--|
|                                |                              |                        | orbitalga ega bo'lgan zarracha aktseptor deb ataladi. Kislota va asoslar proton nazariyasi bo'yicha proton aktseptorlari sifatida Brensted asoslari hisoblanadi. Kislota va asoslar elektron nazariyasi bo'yicha Lyuis kislotalari elektron aktseptorlari hisoblanadi. Yumshoq va qattiq kislota va asoslar nazariyasi bo'yicha aktseptorlar aktseptorlar qattiq, o'rtacha va yumshoq kislotalarga bo'liradi. Ko'pgina kompleks birikmalarda kompleks hosil qiluvchi aktsetor, ligandlar donor sifatida ishtirok etadi.  |
| Amfolitlar                     | Amfolito'                    | ampholyte              | proton nazariyasi bo'yicha bir sharoitda proton beruvchi va bir sharoitda proton qabul qiluvchi moddalar. Masalan, gidrokarbonat ioni: $\text{NSO}_3^{3-}$ q $\text{SO}_3^{2-}$ Q $\text{N}^Q$ ; $\text{NSO}_3^{3-}$ Q $\text{N}^Q$ q $\text{N}_2\text{SO}_3$ .  |
| Amfoterlik                     | Amfoternost                  | amfoterlik             | Ba'zi birikmalarning reaksiya bo'yicha juftiga bog'lik ravishda ham asos, ham kislota xossalarini namoyon qilish xossasi. Proton nazariyasi bo'yicha bu birikmalar amfolitlar deyiladi. Kislota va asoslar ion nazariyasi bo'yicha amfoterlik faqat asoslar xossasi deb qaraladi: amfoter asoslar nafaqat kislotalar balki, asoslar bilan ham reaksiyaga kirishadi. Ularga: $\text{Be}(\text{OH})_2$ , $\text{Zn}(\text{OH})_2$ , $\text{Al}(\text{OH})_3$ , $\text{Ga}(\text{OH})_3$ , $\text{Sn}(\text{OH})_2$ , $\text{Sn}(\text{OH})_4$ , $\text{Pb}(\text{OH})_2$ , $\text{Pb}(\text{OH})_4$ , $\text{Sb}(\text{OH})_3$ , $\text{Ti}(\text{OH})_4$ , $\text{Cr}(\text{OH})_3$ , $\text{Mn}(\text{OH})_4$ va bir qator boshqalar kiradi. |
| Vodorod ko'rsatkich-rN         | Vodorodno'y pokazatel        | pH value               | son qiymati bilan eritmaning kislotaliligini ifodalovchi, eritmadagi N ionlarining aktivligi o'lchami; qiymati manfiy o'nlik logarifmi sifatida hisoblab topiladi. Toza suvda 25 °C da vodorod ionlari ( $[\text{H}^+]$ ) hamda gidroksid ionlari ( $[\text{OH}^-]$ ) konsentratsiyasi bir xil bo'lib, $10^{-7}$ molG'l ga teng.   |
| Gidroksogurux                  | Gidroksograppa               | gidroksograpp          | <i>ON grappa</i> ; juftlashmagan elektronga ega, shuning uchun radikal hisoblanadi.  |
| Brenstedning proton nazariyasi | Protonnaya teoriya Brensteda | proton theory Bronsted | bu nazariyaga asosan, proton beruvchi (prorton donori) kislota, proton qabul qiluvchi (proton aktseptori) asos   |

|                               |                             |                          |  |
|-------------------------------|-----------------------------|--------------------------|--|
| Oksokislotalar                | Oksokisloto'                | oxsoasid                 | hisoblanadi.; bu nazariya suvsiz eritmalardagi kislota-asoslik o'zaro ta'sirlashuvlarni tushuntirib beradi. Kislrorod tutgan kislotalar $\text{HNO}_3$ , $\text{H}_2\text{SO}_4$ , $\text{HClO}_3$ , $\text{H}_3\text{PO}_4$ , $\text{H}_2\text{SiO}_3$ .                    |
| Oksotuzlar                    | Oksosoli                    | oxsosolt                 | Asosli tuzlardan suv chiqarib yuborilishidan hosil bo'ladigan tuzlar.  |
| Oksoniy                       | Oksoniy                     | hydronium                | $\text{N}_3\text{O}^Q$ kationi. Kislotalar suvli eritmalarida mavjud bo'ladigan vodorod kationining suv bilan ta'sirlashuvidan hosil bo'ladigan ion.   |
| Silikagel                     | Silikagel                   | silica gel               | Ortokremniy kislotasining gelsimon cho'kmasini suvsizlantirib olinadigan g'ovaksimon kremniy oksidi $\text{SiO}_2$ .   |
| Silikatlar                    | Silikato'                   | Silicates                | Kimyoviy yo'l bilan olinadigan (metasilikatlar, ortosilikatlar, disilikatlar) va tabiatda keng (olivin, talk, asbest) tarqalgan kremniy kislotalari tuzlari.   |
| Lyuis kislotasi               | KislotaLyuisa               | Lewis acid               | elektron jufti aktseptori.   |
| Lyuis asosi                   | Osnovanie Lyuisa            | Lewis base               | elektron juft donori   |
| Lyuisning elektron nazariyasi | Elektronnaya teoriya Lyuisa | electron theory of Lewis | bo'yicha juftlashmagan elektron juftga ega modda asos, bo'sh orbitallarga ega bo'lgan modda – kislota deb ataladi. Bu nazariya aktseptor – komplekslarning hosil bo'lishidagi kimyoviy bog' hosil bo'lishidagi kislota-aktseptor-asos o'zaro ta'sirlashuvlarni tushuntiradi. |

## **“Kvant mexanikasi va kvant kimyosi” fani**

### **1.1.Fanning maqsad va vazifalari**

1.1 “Kvant mexanikasi va kvant kimyosi” fanining asosiy maqsadi 5440400-Kimyo ta'lim yo'nalishi bo'yicha tahsil olayotgan talabalarni Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari, Geyzenberg noaniqlik munosabatlari, operatorlarning xususiy qiymati va xususiy funktsiyalarini talabalar ongiga singdirishdan iborat.

1.2. Ushbu fan yakunida talabalar Kvant mexanikasi va kvant kimyosi haqidagi tushunchalar va ularning boshqa fanlar bilan aloqasi va rivojlanish qonuniyatlarini to'liq o'rganadilar.

1.3. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fanini o'rganishda talabalar kimyo fanining boshqa sohalari bo'yicha, jumladan, noorganik kimyo, organik kimyo, analitik kimyo va boshqa sohalari bo'yicha olgan bilim, ko'nikma va malakalaridan foydalanishadi, ularni bir-biriga bog'lashtiradi.

## II. "Kvant mexanikasi va kvant kimyosi" fanining mazmuni

### 2.1 Ma'ruza mavzulari, ko'riladigan masalalar va vaqt

| №  | Mavzular   | Ma'ruzada ko'riladigan masalalar  | Ajratilgan vaqt |
|----|--|---|-----------------|
| 1. | Kirish. Kvant nazariya. Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari | Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fanining maqsad va vazifalari. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi haqida tushunchalar Mikrozaralar. Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari haqida tushuntiriladi.  | 2               |
| 2. | Mikrozarrachalarning dualistik tabiati                           | Yorug'likning modda bilan ta'siri. Fotoeffekt. Eynshteyn nazariyasi. De-Broyl to'lqini. Korpuskulyar to'lqin dualizmi. Shtern va Gerlax tajribalari.  | 2               |
| 3  | Geyzenberg noaniqlik munosabatlari                               | Geyzenbergning noaniqlik munosabatlari va ulardan kelib chiqadigan xulosalar.   | 2               |
| 4. | Shredinger tenglamasi.   | Shredinger tenglamasining kelib chiqishi. Shredinger tenglamasini Gamilton (energiya) operatori orqali ifodalash. Shredinger tenglamasini elektronning bir o'lchamli potentsial chuqurligidagi harakatiga tadbiqu. Ko'p elektronli atomlar. | 4               |
| 5  | Kvant mexanikaning matematik apparati.                           | Operatorlar va ularning turlari. Chiziqli va o'z-o'ziga qo'shma operatorlar. Operatorlarning xususiy qiymati va xususiy funktsiyalari. To'lqin funktsiya. Fizik kattaliklarni ifodalovchi operatorlar.                                      | 2               |
| 6. | Kovalent bog'ning kvant mexanik nazariyasi                       | Kulon integrali. Almashinish integrali. Qoplash integrali. Simmetrik va antisimmetrik funktsiyalarning energiyasi. Valentlik nazariyasi. Atomlarning elektromanfiyligi va uning   | 4               |

|     |  |   |           |
|-----|--|---|-----------|
|     |  | kimyoviy bog' xosil bo'lishdagi roli.   |           |
| 7.  | Molekulyar orbitallar metodi. Xyukkel metodi.                          | Molekulyar orbitallar metodi (Xyukkel metodi). Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi molekulyar orbitallar. Xyukkel metodi. $r$ -bog'ning tartibi, $r$ -elektron zichlik. Ozod valentlik indeksi. Molekulyar orbitallar energiyasini hisoblash. Variatsion usul. | 2         |
| 8   | Atom orbitallardan molekulyar orbitallarning hosil bo'lishi            | Atom orbitallarning chiziqli kombinatsiyasi va molekulyar orbitallning hosil bo'lishi. Variatsion usulda noma'lum koeffitsientlarni aniqlash. Asriy tenglamalar. Asriy determinant.   | 2         |
| 9   | Molekulyar orbitallar metodi yordamida molekula xossalarini ifodalash. | Xyukkel usulining butadien molekulasi va aromatik uglevodorodlarga tadbiqu. Molekulyar orbitallar metodi yordamida molekula xossalarini ifodalash. Molekulalarning $\pi$ -elektron zichligini hisoblash.  | 2         |
| 10. | Reaksiyalarning kvant nazariyasi.                                      | Kimyoviy reaksiyalarning kvant nazariyasi. Reaksiya tezligi. Aktivatsiya energiyasi. Kvant mexanikasi kimyosi fanining boshqa fanlar bilan aloqasi va rivojlanishi.   | 2         |
|     |  | <b>jami</b>   | <b>24</b> |

## 2.2. Amaliy (seminar) mashg'ulotlari

| №  | Mashg'ulot mavzulari   | Vaqt, soat |
|----|--|------------|
| 1. | Kvant mexanikasining tajribaviy asoslari.  | 2          |
| 2. | Mikrozarrachalarning dualistik tabiati De-Broil to'liqini.   | 2          |
| 3. | Geyzenberg noaniqlik munosabatlari. Kvant mexanik operatorlar va ularning xossalari  | 1          |
| 4. | Shredinger tenglamasi. Kvant mexanikasining postulati. Shredinger tenglamasini elektronning bir o'lchamli potentsial chuqurligidagi harakati uchun echimi. | 1          |
| 5. | Kovalent bog'ning kvant mexanik nazariyasi. Vodorod molekulasiidagi kimyoviy bog'ni kvant mexanik tushuntirish.  | 2          |
| 6. | Molekulyar orbitallar metodi. Xyukkel metodi bo'yicha oralatma bog'li molekulalar uchun Shredinger tenglamasini  | 2          |



|             |  |           |
|-------------|--|-----------|
|             | echish.  |           |
| 7.          | Molekulyar orbitallarning hosil bo'lishida atom orbitallar koeffitsientlarini hisoblash. | 2         |
| 8           | Molekulyar orbitallar metodi yordamida molekula xossalarini ifodalash.                   | 2         |
| <b>Jami</b> |  | <b>16</b> |

### 2.3. Talabalar mustaqil ishi

| №           | Topshiriq mavzulari   | Vaqt, soat |
|-------------|---|------------|
| 1.          | Seminar mashg'ulotlarga nazariy jihatdan tayyorgarlik ko'rish   | 6          |
| 2.          | Kimyoviy bog'lanishlar (Ion, kovalent va metall bog'lanishlar) ning hosil bo'lishini kvant mexanik tushuntirish.                        | 6          |
| 3.          | Valent bog'lar metodi. Valentlikning yo'nalishi. Gibridlanish. sp-, sp <sup>2</sup> -, sp <sup>3</sup> -va boshqa gibridlanish turlari. | 6          |
| 4.          | Atomlarning ionlanish potentsiallari va eektronga moyillik. Atomlarni eektromanfiyligi jihatdan xarakterlash.                           | 6          |
| 5.          | Molekulyar orbitallar metodi. Molekulalarning kvant kimyoviy hisoblarini molekulyar diagrammalar tariqasida ifodalash.                  | 6          |
| <b>jami</b> |   | <b>30</b>  |

### III. «Kvant mexanikasi va kvant kimyosi » fanining baholash mezonlari

| tG'r        | Nazorat turlari                   | Soni | Ball | Jami ball |
|-------------|-----------------------------------|------|------|-----------|
| 1.          | JB                                | 5    | 20   | 40        |
| 2.          | OB<br>2.1. Yozma ish              | 2    | 10   | 20        |
| 3.          | YaB<br>3.1.Yozma ish (3 ta savol) | 1    | 40   | 40        |
| <b>Jami</b> |                                   |      |      | 100       |

#### 3.2. «Kvant mexanikasi va kvant kimyosi» fanidan baholash mezoni

- 1.1. Amaliy mashg'ulotda qatnashib, uning topshiriqlarini to'la sifatli bajargan talabaga 1,5-2,0 ball agar to'la bo'lmasa bajarish darajasiga qarab 0,5-1,4 ballgacha beriladi.
- 1.2. Talabaning mustaqil ishlari soni 5 ta bo'lib, rejasi aniq bo'lgan har bir mavzu bo'yicha referat tayyorlanadi:
  - 2.1. Oraliq baholashda talaba 5 ta savolga yozma javob berishi lozim.
    - har bir yozma savolga 2 ball ajratiladi.
    - agar savol mohiyati to'la ochilgan bo'lib, talabaning tanqidiy nuqtai nazari bayon qilingan bo'lsa – 1,8-2 ball
    - savolning mohiyati ochilgan, asosiy faktlar to'g'ri bayon qilgan bo'lsa – 1,4-1,7 ball
    - savolga javob berilgan, ammo, ayrim kamchiliklari bor bo'lsa – 1,0-1,3 ball

- berilgan savolda javoblar chalkash va kamchiliklar ko'proq bo'lsa - 0,6-0,9 ball beriladi
- 3.1. Yakuniy baholash yozma yoki og'zaki o'tkazilib, undan 4 ta savolga javob berishi so'raladi. Har bir savol 10 balgacha baholanadi.
- agar savol mohiyati to'la ochilgan bo'lsa, javoblari to'liq va aniq bo'lsa-9,8-10 ball
  - savolning mohiyati umumiy ochilgan asosiy faktlar to'g'ri bayon etilgan bo'lsa-8,5-9,7 ball
  - savolga javob berilgan, ammo javoblarda kamchiliklar bo'lsa 7,0-8,3 ball
  - savolga javob berishga harakat qilingan, ammo faktlarda chalkashliklar bo'lsa - 5,6 - 6,9 ball beriladi.

Eslatma: Talabani umumiy bali hisoblanganda yaxlitlab olinadi.

### **Fanni o'qitishning kontseptual asoslari**

Bilim olish jarayoni bilan bog'liq ta'lim sifatini belgilovchi holatlar: darsni yuqori ilmiy-pedagogik darajada tashkil etilishi, muammoli mashg'ulotlar o'tkazish, darslarni savol-javob tarzida qiziqarli tashkil qilish, ilg'or pedagogik texnologiyalardan va multimedia qo'llamalardan foydalanish, tinglovchilarni mustaqil fikrlashga undaydigan, o'ylantiradigan muammolarni ular oldiga qo'yish, talabchanlik, tinglovchilar bilan individual ishlash, ijodkorlikka yo'naltirish, erkin muloqotga kirishishga, ilmiy izlanishga jalb qilishva boshqa tadbirlar ta'lim ustuvorligini ta'minlaydi. Ta'lim samaradorligini ishlab chiqishning kontseptsiyasi aniq belgilanish va unga amal qilishi ijobiy natija beradi. Fanni o'qitishning asosiy kontseptual yondoshuvlari quyidagilardan iborat.

**Fanning maqsadi.** "Kvant mexanikasi va kvant kimyosi" fanining asosiy maqsadi 70530100-Kimyoy ta'lim yo'nalishi bo'yicha tahsil olayotgan talabalarni kvant mexanikasining tajribaviy asoslari, Geyzenberg noaniqlik munosabatlari, operatorlarning xususiy qiymati va xususiy funktsiyalarini talabalar ongiga singdirishdan iborat.

**Fanni o'qitishning vazifalari** Ushbu fan yakunida talabalar Kvant mexanikasi va kvant kimyosi haqidagi tushunchalar va ularning boshqa fanlar bilan aloqasi va rivojlanish qonuniyatlarini to'liq o'rganadilar. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fanini o'rganishda talabalar kimyo fanining boshqa sohalari bo'yicha, jumladan, noorganik kimyo, organik kimyo, analitik kimyo va boshqa sohalari bo'yicha olgan bilim, ko'nikma va malakalaridan foydalanishadi, ularni bir-biriga bog'lashtiradi.

**Shaxsga yo'naltirilgan ta'lim.** O'z mohiyatiga ko'ra ta'lim jarayonining barcha ishtirokchilarini to'laqonli rivojlanishlarini ko'zda tutadi. Bu esa ta'limni

loyixalashtirilayotganda, albatta, ma'lum bir ta'lim oluvchining shaxsini emas, avvalo, kelgusidagi mutaxassislik faoliyati bilan bog'liq o'qish masalalaridan kelib chiqqan holda yondoshishga e'tibor qaratishni amalga oshiradi. Har bir talabaning shaxs sifatida kasbiy takomillashuvini ta'minlaydi. Ta'limning markaziga bilim oluvchi qo'yiladi.

**Tizimli yondoshuv.** Ta'lim texnologiyasi tizimning barcha belgilarini o'zida mujassam etmog'i lozim: jarayonning mantiqiyligi, uning barcha bo'g'inlarini o'zaro bog'langanligi, yaxlitligi bilim olish va kasb egallashning mukammal bo'lishiga hissa qo'shadi.

**Faoliyatga yo'naltirilgan yondoshuv.** Shaxsining jarayonli sifatlarini shakllantirishga, ta'lim oluvchining faoliyatini jadallashtirish va intensivlashtirish, o'quv jarayonida barcha qobiliyat va imkoniyatlarni, tashabbuskorlikni ochishga yo'naltirilgan ta'limni ifodalaydi. Egallangan bilimlarning ko'nikma va malakaga aylanishi, amaliyotda tadbiiq etilishiga sharoit yaratadi.

**Dialogik yondoshuv.** Bu yondoshuv o'quv jarayoni ishtirokchilarining psixologik birligi va o'zaro munosabatlarini yaratish zaruriyatini bildiradi. Uning natijasida shaxsning o'z-o'zini faollashtirishi va o'z-o'zini ko'rsata olishi kabi ijodiy faoliyati kuchayadi. O'qituvchi va talabaning hamkorlikdagi ta'limiy faoliyat yuritishiga zamin yaratadi.

**Hamkorlikdagi ta'limni tashkil etish.** Demokratilik, tenglik, ta'lim beruvchi va ta'lim oluvchi o'rtasidagi sub'ektiv munosabatlarda hamkorlikni, maqsad va faoliyat mazmunini shakllantirishga erishilgan natijalarni baholashda birgalikda ishlashni joriy etishga e'tiborni qaratish zarurligini bildiradi. Ta'lim jarayonida "sub'ekt-sub'ekt" munosabatlari tarkib topadi.

**Muammoli ta'lim.** Ta'lim mazmunini muammoli tarzda taqdim qilish orqali ta'lim oluvchi faoliyatini aktivlashtirish usullaridan biri. Bunda ilmiy bilimni ob'ektiv qarama-qarshiligi va uni hal etish usullarini, dialektik mushohadani shakllantirish va rivojlantirishni, amaliy faoliyatga ularni ijodiy tarzda qo'llashni ta'minlaydi. Muammoli savol, vazifa, topshiriq va vaziyatlar yaratish va ularga echim topish jarayonida ongli, ijodiy, mustaqil fikrlashga o'rgatiladi.

**Axborotni taqdim qilishning zamonaviy vositalari va usullarni qo'llash-** hozirgi axborot kommunikatsiya texnologiya vositalari kuchli rivojlangan sharoitda ulardan to'g'ri va samarali foydalanish, axborotlarni tanlash, saralash, saqlash, qayta ifodalash ko'nikmalarini xosil qilinadi. Bunda kompyuter savodxonligi alohida ahamiyat kasb etadi.

**O'qitish metodlari va texnikasi.** Ma'ruza (kirish, mavzuga oid, viziuallash), muammoviy usul, keys-stadi, pinbord, paradokslar, loyixa va amaliy ishlash usullari. Interfaol usullarni mavzu mazmuniga mos holda tanlash va ulardan samarali foydalanishga o'rgatadi.

**O'qitish vositalari:** o'qitishning an'anaviy vositalari (darslik, ma'ruza matni, ko'rgazmali qurollar, xarita va boshqalar) bilan bir qatorda-axborot-kommunikatsiya teznologiya vositalari keng ko'lamda tatbiq etiladi.

**Kommunikatsiya usullari:** tinglovchilar bilan operativ ikki yoqlama (teskari) aloqaga asoslangan bevosita o'zaro munosabatlarning yo'lga qo'yilishi.

**Teskari aloqa usullari va vositalari:** kuzatish, blits-so'rov, joriy, oraliq va yakunlovchi nazorat natijalarini tahlili asosida o'qitish diagnostikasi amalga oshiriladi. Ta'lim jarayonida kafolatlangan natijaga erishish ta'minlanadi.

**Boshqarish usullari va tartibi:** o'quv mashg'uloti bosqichlarini belgilab beruvchi texnologik xarita ko'rinishidagi o'quv mashg'ulotlarini rejalashtirish, qo'yilgan maqsadga erishishda o'qituvchi va tinglovchining birgalikdagi xarakati, nafaqat auditoriya mashg'ulotlari, balki auditoriyadan tashqari mustaqil ishlarning nazorati xam mavjud.

**Monitoring va baholash:** butun kurs davomida ham o'qitishning natijalari reyting tizimi asosida nazorat va taxlil qilib boriladi. Kurs oxirida yozma, og'zaki yoki test topshiriqlari yordamida ta'lim oluvchilarning bilimlari baholanadi.

#### **Adabiyotlar:**

1. X.I.Akbarov Kvant mexanikasi va kvant kimyosi. Ma'ruzalar matni. Toshkent, ToshDU, 2000 y.
2. Meleshina L.M. Kurs kvantovoy mexaniki dlya ximikov. M.: Vo'sshaya shkola, 1980.
3. Zagradnik R., Polok R. Osnovo' kvantovoy ximii. M.: Mir, 1979.
4. Krasnov K.O. Molekulo' i ximicheskaya svyaz. M.: Kimyo, 1984.
5. Minkin I., Simkin P.Ya., Minyaev R.M. Teoriya stroeniya molekul. M.: Kimyo, 1979.
6. Roberts Dj. Rascheto' po metodu MO. M.: Mir, 1970.
7. Levich V.G., Vdovin Yu.A., Myamlin V.A. Kurs teoreticheskoy fiziki. T.2, M., 1971.
8. Xigasi N., Baba R., Rembaum A. Kvantovaya organicheskaya kimyo. M.: Mir, 1967.
9. Bazilevskiy M.A. MMO i reaktivnaya sposobnost organicheskix molekul. M.: Kimyo, 1969.
10. Yulchibaev A.A. Kvant kimyodan o'quv qo'llanma, Toshkent, ToshDU, 1981, 1988, 1989 yillar.
11. Xoshimov G.X., Rasulov R.Ya., Yuldoshev N.X. Kvant mexanika asoslari. Toshkent, O'qituvchi, 1995.
12. Bloxintsev D.I. Osnova kvantovoy mexaniki. M., 1976.

## MUNDARIJA

|  | bet |
|--|-----|
| 1. So'z boshi .....  | 3   |
| 2. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fanining maqsadi<br>va vazifalari .....         | 4   |
| 3. O'quv kursining mazmuni .....   | 5   |
| 4 Fanni o'qitishning kontseptual asoslari .....                                      | 10  |
| 5. Kirish. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi fanining maqsadi va<br>vazifalari ..... | 12  |
| 6. Testlar .....   | 91  |
| 7. Glossariy .....   | 112 |
| 8. Foydalanilgan adabiyotlar .....   | 114 |
| 9. Mundarija .....   | 93  |