

OLIV VA O'RTA MAXSUS TA'LIM
VAZIRLIGI

NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI

KIMYO KAFEDRASI

«Modda tuzilishi» fanidan

MA'RUZALAR MATNI



NAMANGAN – 2012

MODDALAR VA MAYDONLARNI TASHKIL QILUVCHI FUNDAMENTAL VA ELEMENTAR ZARRACHALAR

Reja.

1. *Elementar zarrachalar haqida umumiy tushunchalari.*
2. *Elementar zarrachalarning asosiy xarakteristikasi.*
3. *Eng muhim elementar zarrachalar.*

1. Mikrodunyoni o'rganish o'z ichiga uch bosqichni oladi.

2. Atom tuzilishi va unda sodir bo'ladigan jarayonlarni o'rganish.

3. Yadro tuzilishini va yadro ichida sodir bo'ladigan jarayonlarni o'rganish.

Atom yadrolari va atomlarning elektron qobiqlarini tashkil qilgan, yadro aylanishlarida vujudga keladigan zarralarni va ularni tashkil qilgan zarralarni o'rganish.

Elementar zarralar. Hozir bunday zarralar qatoriga elektiron, positron, proton, antiponlar, neytronlar va antineytronlar, neyrino va antineytrionlar, mezonlar, geperonlar, flon va boshqalar kiradi. Bu zaralardan ba'zilar barqaror zarralar hisoblanib, o'z-o'zidan yemirilib boshqa zarralarga aylanmaydi, holbuki ko'pgina elementar zarralar barqaror bo'lib, ma'lum vaqtdan keyin boshqa zarralarga aylanadi. Elementar zarralar mazmuniga ko'ra eng soddalar zarralar ya'ni bu so'z ular bundan ketin boshqa tashkiliy qismlarga ajralmaydi degan ma'noni anglatadi. Haqiqatda esa elementar zarralar elementar emas, balki ular boshqa tur zarralarga aylanishi mumkin. Elektron zarralarning xarakterli xususiyati shuki, ular ikki xil ko'rinishda – zarralar va antizarralar ko'rinishida namayon bo'ladi. Bu muayyan ko'rinishdagi musbat zaryadlangan zarralar bilan bir qatorda ularning manfiy zarralari ham mavjudligida o'z ifodasini topgan. Endi zarralarning asosiy xarakteristikalarini ko'rib o'tamiz.

Tinchlikdagi massa va xususiy energiya. Elementar zarralar har qanday holatda ham massaga ega. Massa erkin zarraning to'la energiyasi w bilan quyidagi munosabatda bog'langan;

$$w^2 = c^2 p^2 + m_0^2 c^4 = m^2 c^4$$

Bunda $m_0 c^2 = 0$ ($v=0$)dagi massa, m esa $p \neq 0$ dagi massa. Yuqoridagi formuladan ko'rinib turibdiki, massa zarralarning to'la energiyasiga bog'liq ekan. Shuning uchun umumiy xolda u doimiy emas. Shu sababli, elementar zarrani m_0 tinchlikdagi massa orqali xarakterlanadi.

Elementlar zarraning ichki energiyasi tinchlikdagi massa orqali quyidagicha bog'langan: $w_0 = m_0 c^2$. Biroq shunday zarrali borki, borki, ularda energiya implus bilan quyidagicha munosabatda bog'langan.

$$W = op$$

Ya'ni $m_0 = 0$. Bunday zarralarga fotonlar va neytrinolar kiradi. Ular tinchlikda massaga ega bo'lmagan sababli vakumda c yorug'lik tezligida xarakatlanadi.

Elektr zaryadi. Hozirgi vaqtda ma'lum bo'lgan zarralarning ko'pchiligi elektr zaryadga ega Bunda hamma vaqt ham musbat zaryadli, ham manfiy zaryadli zarralar (zarra va antizarralar) mavjud ekanligi malum bo'ldi. Elektron zaryadning absolyut qiymati elektron zaryadi e ning absolyut qiymatiga teng. Bu kattalikni odatda elektron zaryadi birligi sifatida qabul qilinadi. Zaryadlangan zarralardan tashqari, zaryadlanmagan zarralar ham bor bo'lib, ular ham zarralar va antizarralar ko'rinishda mavjuddir.

Elementar zarralarning o'zaro ta'sir turlari. Elementar zarralarning aylanish proseslarida namayon bo'ladigan o'zaro ta'sir kuchlarining kattaligiga qarab uch xil o'zaro ta'sir ajratiladi.

- a) kuchli o'zaro ta'sir ;
- b) elektromagnit o'zaro ta'siri
- c) kuchsiz o'zaro ta'sir

Kuchli o'zaro ta'sirlar og'ir zarralar – protonlar, neytronlar, T- mezonlar, K- mezonlar, giperonlar orasida vujudga keladi. Demak kuchli o'zaro ta'sirlashuvchi zarralar oilasi **adronlar** deb ataladi. Kuchli o'zaro ta'sirlar mezonlar vositasida uzatiladi. Ular bilan xarakterlanadigan proseslar juda qisqa ($\approx 10^{-22} - 10^{-24}$ sek).

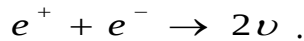
Elektromagnit o'zaro ta'sirlar elektr zaryadlar tufayli vujudga keladi. Ushbu o'zaro ta'sir $10^{-18} - 10^{-20}$ sek davom etadi.

Kuchsiz o'zaro ta'sirlar konstantasi $\approx 10^{-12} - 10^{-13}$

Elektronlar va pozitronlar. Elektronlar moddaning atom tuzilshini o'rganishda topilgan eng birinchi elementar zarralardandir. Elektronlar e^- simvol orqali belgilanadi.

Elektron o'z – o'zidan boshqa xil zarralarga aylanmaydigan barqaror zarradir. Manfiy elektronlar bilan bir qatorda musbat elektronlar -- **pozitronlar** ham mavjudki, ular elektronlarga nisbatan antizarra hisoblanadi. Pozitronning massasi va zaryadi absalut qiymati jihatidan elektronning massa va zaryadiga teng. Pozitron vakumda turg'un biroq modda uzoq vaqt mavjud bo'la olmaydi. Chunki u elektron bilan to'qnashganda elektron va pozitron annigilyatsiyasi hodisasi ro'y beradi. Bu hodisa elektron va pozitron qo'shilganda ular yo'qolib qoladi, ular o'rniga esa ikki yoki undan ko'p foton paydo bo'ladi.

Bu fotonlar o'z navbatida annigilyatsiyalangan elektron va pozitronning massasini va energiyasini olib ketadi. Bu protsess quyidagi sxema bo'yicha tasvirlanadi:



Annigilyatsiyadan so'ng elektron va pozitron mustahkam zarralar juftini hosil qiladi yoki boshqacha aytganda virtual juftini hosil qiladi.

Annigilyatsiyaga teskari hodisa yahi elektron pozitron juftini hosil bo'lishi ham mumkin. Biroq bunga katta energiya kerak bo'ladi

Protonlar va antiprotonlar. Elektron zarralarning eng muhim ikkinchi turi protonlar va antiprotonlardir. Bu elementar zarrachalarda ham annigilyatsiya hodisasi kuzatiladi

Protonning massasi elektronning massasidan 1836,09 marta katta. Proton uchun p va h simvollik belgilar qabul qilingan.

Neytronlar va antineytronlar. Elementar zarralar ichida ikkinchi eng muhimi nuklon – neytrondir. Uning massasi protonning massasiga deyarli, biroq elektr zaryadiga ega emas.

Neytron beqaror zarra bo'lib, u atom yadrosidan ozod bo'lib chiqqandan keyin 1000 sek vaqt o'tishi bilan β – yemirilishga uchraydi: $n \rightarrow p + e + \tilde{\nu}_e$. Neytronga nisbatan antizarra - antineytrondir, uning massasi neytron massasiga teng, zaryadi nol.

нейтрон $\rightleftharpoons$ протон + электрон + антинейтрино

$$n \rightleftharpoons p + \bar{e} (\bar{\beta}) + \bar{\nu}$$

протон $\rightleftharpoons$ нейтрон + позитрон + нейтрино

$$p \rightleftharpoons n + e^+ (\beta^+) + \nu$$

VII. Характеристика некоторых элементарных частиц

Группа	Название	Символ	Масса в единицах массы электрона	Ядерный заряд	Спин	Время жизни в сек
	Фотон	γ	0	0	1	Стабилен
Лейтоны (легкие)	Нейтрино	ν	$< 0,0005$	0	1/2	Стабилен
	Антинейтрино	$\bar{\nu}$	$< 0,0005$	0	1/2	,
	Электрон*	e^-	1	-1	1/2	,
	Позитрон	e^+	1	+1	1/2	,
	Мю-мезоны	μ^+	206,7	+1	1/2	$2,22 \cdot 10^{-6}$
		μ^-	206,7	-1	1/2	$2,22 \cdot 10^{-6}$
Мезоны (промежуточные)	Пи-мезоны	π^0	264,2	0	0	$2,3 \cdot 10^{-16}$
		π^+	273,2	+1	0	$2,56 \cdot 10^{-8}$
		π^-	273,2	-1	0	$2,56 \cdot 10^{-8}$
	Ка-мезоны	K^0	965	0	0	$9,5 \cdot 10^{-11}$
		K^+	966	+1	0	$1,22 \cdot 10^{-8}$
		K^-	966,5	-1	0	$1,22 \cdot 10^{-8}$
Барiony (тяжелые)	Нуклоны ядерные					
	Протон	p	1836,1	+1	1/2	Стабилен
	Антипротон	$\bar{p}$	1836,1	-1	1/2	,
	Нейтрон	n	1838,6	0	1/2	1040
	Антинейтрон	$\bar{n}$	1838,6	0	1/2	1040
Гипероны	Ламбда нуль частица	Λ^0	2182	0	1/2	$2,51 \cdot 10^{-10}$
	Сигма нуль частица	Σ^0	2331	0	1/2	$< 10^{-11}$
	Сигма плюс частица	Σ^+	2327	+1	1/2	$0,8 \cdot 10^{-10}$
	Сигма минус частица	Σ^-	2340	-1	1/2	$1,61 \cdot 10^{-10}$

* Масса электрона равна $0,9108 \cdot 10^{-31}$ г (или $9,108 \cdot 10^{-28}$ г), заряд электрона равен $-1,60206 \cdot 10^{-19}$ кулон (или $4,802 \cdot 10^{-10}$ эл.-ст.ед.), что принимается за единицу заряда и обозначается -1.

Elektromagnit maydon materiyaning o'ziga xos boshqa bir formasidir. Fazoning elektr va magnit kuchlar ta'siri seziladigan qismiga elektromagnit maydon deyiladi. Bu maydon shartli ravishda elektr va magnit maydonlarga bo'linishi mumkin. elektr maydon berilgan sanoq sistemasiga nisbatan tinch turgan elektr zaryad va o'zgaruvchan magnit maydon tomonidan yaratilib, zaryadli zarraga yoki jismga ta'siri orqali seziladi. Magnit maydon esa harakatlanuvchi zaryadlar (tok) va o'zgaruvchan elektr maydon tomonidan hosil qilinib, o'zida harakatlanuvchi zaryadli zarrachaga harakat yo'nalishiga perpendikulyar, tezligiga proporsional bo'lgan kuch bilan ta'siri orqali seziladi. elektr va magnit maydonlar, vaqt o'tishi bilan, o'zgarmagandagina (statsionar holda) bir-biridan ajralgan holda mavjud bo'lishi mumkin.

Vaqt o'tishi bilan o'zgaruvchan elektr va magnit maydonlarni bir-biridan ajratib bo'lmaydi, ular hamma vaqt birgalikda mavjud bo'lib, yagona elektromagnit maydonni tashkil qiladi. elektromagnit maydonni elektr va magnit maydonlarga ajralishi nisbiy bo'lib, sanoq sistemasining tanlanishiga bog'liqdir. O'zgaruvchan elektromagnit maydon o'z manbalaridan ajralgan holda elektromagnit to'lqin ko'rinishida mavjud bo'ladi va bo'shliqda $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m / s}$ tezlik bilan tarqaladi. elektromagnit to'lqinlarning bo'shliqda tarqalish tezligi s hamma yo'nalishlarda bir xil, sanoq sistemasining to'g'ri chiziqli tekis harakatiga bog'liq emas.

Maksvell elektromagnit maydon xossasini o'rganish mobaynida, modomiki o'zgaruvchan magnit maydon elektr maydonni yuzaga keltirar ekan, tabiatda bunga teskari bo'lgan jarayon yo'qmi, ya'ni o'zgaruvchan elektr maydon o'z navbatida, magnit maydonni yuzaga keltirmasmi? – degan masalani qo'ydi. Maksvellning tabiatning birligiga, tabiat qonunlarining o'zaro uyg'unligi va izchilligiga qat'iy ishonchidan kelib chiqadigan bu mulohaza Maksvell gipotezasining asosini tashkil qiladi.

Elektr maydon o'zgarganda magnit maydon hosil bo'lishi. Maksvell tabiatda haqiqatdan ham shunday hodisa ro'y beradi, deb faraz qildi. elektr maydon vaqt o'tishi bilan o'zgargan hamma hollarda u magnit maydonni yuzaga keltiradi. Bu maydonning magnit induksiya chiziqlari elektr maydon kuchlanganligi chiziqlarini, elektr maydon kuchlanganligi chiziqlari o'zgaruvchan magnit maydon chiziqlarini qamrab olgani kabi, qamrab oladi. Lekin endi elektr

maydon kuchlanganligi ortganda $\left(\frac{\nabla E}{\nabla t} > 0 \right)$ paydo bo'layotgan magnit maydonning $\vec{B}$

induksiya vektorining yo'nalishi $\vec{E}$ vektorning yo'nalishi bilan o'ng vintni hosil qiladi.

Elektr maydon kuchlanganligi kamayganda $\left(\frac{\nabla E}{\nabla t} - 0 \right)$ magnitinduksiya vektor $\vec{V}$ ning yo'nalishi $\vec{E}$ vektor yo'nalishi bilan chap vintni hosil qiladi.

Maksvell gipotezasiga binoan magnit maydon, masalan, kondensatorning zaryadsizlanishida faqat o'tkazgichdagi tokdan yuzaga kelmay, balki kondensator qoplamlari o'rtasida mavjud bo'lgan o'zgaruvchi elektr maydondan ham yuzaga keladi. Bunda o'zgaruvchan elektr maydon yuzaga keltiradigan magnit maydon go'yo kondensator qoplamlari orasida o'tkazgichdagi tokka barovar tok o'tgan taqdirda yuzaga keladigan magnit maydonga teng bo'ladi. elektromagnit to'lqinlarning amalda aniqlanishi Maksvell gipotezasining to'g'riligini isbotladi. O'zgaruvchan magnit maydon o'zgaruvchan elektr maydonni hosil qiladi. Bu elektr maydon o'z navbatida o'zgaruvchan magnit maydonni hosil qiladi va hokazo.

MA'RUZA № 2

MODDALARNING QATTIQ, SUYUQ, BUG' (GAZ) XOLATLARI, ULARNING MAVJUD BO'LISH SHARTLARI VA O'ZIGA XOS XUSUSIYATLARI

Reja

1. Moddalarni qattiq agregat holatlari. Amorf va kristall
2. Suyuq kristallar haqida tushuncha va ularning turlari
3. Suyuq kristallarni ahamiyati

Moddalar qattiq, cuyuq va gaz xolatda bo'ladi. Moddaning agregat xolati temperatura va bosimga boqliq. Past temperaturada modda qattiq xolatda bo'ladi, moddaning kristall zarrachalari orasidagi masofa zarrachalarning kattaligiga tengdir. Zarrachalarning o'rtacha

potentsial energiyasi, ularning o'rtacha kinetik energiyasidan katta. Zarrachalar xarakatda juda xam cheklangan. Zarrachalar o'rtasida xarakatlanayotgan kuchlar, ularni to'qri chiziqli xolat yaqinida ushlab turadi. Shuning uchun zarrachalar bu joylarda maksimal darajada ushlanib qoladi.

Kristallar erish natijasida suyuq xolatga kiradi. Suyuq moddaning kristall moddadan farqi shundaki suyuq modda zarrachalari kristall modda joylashgan tartibda joylashmaydi. Molekulalarning aksariyat qismi katta masofada joylashgan. Bu xolatda molekulalarning o'rtacha kinetik energiyasi ularning o'rtacha potentsial energiyasiga teng. qattiq va suyuq xolatlar bir so'z bilan kondensiyon xolat deyiladi. qaynash jarayonida suyuqlik gaz xolatga o'tadi. Bu xolatda zarrachalar o'zlarining o'lchamlaridan ancha katta masofada joylashadi. Zarrachalar erkin xarakatlana oladi.

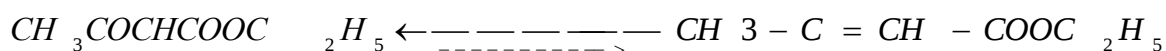
Agar molekulalar qattiq xolatda yaxlit agregatni xosil qilsa, suyuq xolatda ko'p sonli yirik va mustaxkam agregatlarni xosil qiladi.

Gaz xolati esa 2 - 5 molekulalarda tashkil topgan zarrachalar xolatida bo'ladi. Gaz zarrachalarning o'rtacha kinetik energiyasi ularning o'rtacha potentsial energiyasidan ancha katta.

Shunday qilib aloxida olingan moddaning xolat va xususiyati bosim va temperatura orqali aniqlanadi. Agar bosim katta bo'lmasa, temperatura etarli darajada baland bo'lsa, modda gaz xolatda bo'ladi, past temperaturada u qattiq xolatda bo'ladi, o'rtacha temperaturada esa suyuq xolatda bo'ladi.

QATTIQ XOLAT

Juda past temperaturalarda aksariyat moddalar qattiq xolatda bo'ladi. Bu agregat xolatda zarrachalar orasidagi masofani zarrachalar o'lchamlari bilan taqqoslasa bo'ladi. O'rtacha tortishish potentsial energiyasi zarrachalarning o'rtacha kinetik energiyasidan ko'proq:



U –potentsial energiya; $\frac{mv^2}{2}$ -kinetik enargiya.

Zarrachalar o'rtasida ta'sir qilayotgan tortishuv kuchi ularni muvozanat masofasi yaqinida ushlab turadi. Potentsial chuqurlik sayoz, uncha chuqur emas. Qattiq xolatdagi moddaning shaklini kuch vositasida o'zgartirish juda qiyin masala. Fazoviy xolatlari bo'yicha qattiq moddalar amorf xolatda (shisha, ko'pchilik polimerlar) va kristal xolatda bo'lishi mumkin. Qattiq amorf moddaning tuzilishi suyuqliklarning ustki molekulyar tuzilishiga o'xshaydi. Oddiy sharoitda Hg va Ga ($t_s=30^0$) dan boshqa barcha metallar tipik kristall qattiq moddalardir. Metaldagi atomning eng asosiy xili klassik garmonik tebranishdir. Bu xarakat uch o'lchamli bo'ladi.

Bir mol–atom metalning o'rtacha kinetik energiyasi $3RT=1.8$ kk bo'lsa, uning yashirin bug'lanish energiyasi Z (Cs)=19 kkal/mol-atom Z (W)=210 kkal/mol-atom. Demak, $1 RT$ dan ancha katta. Shu sababdan aksariyat metallar juda yuqori suyuqlanish temperaturasiga ega.

Metalning har bir atomidan bittadan elektron erkin ravishda metalning mazkur bo'g'lari bo'yicha xarakatda bo'ladi. Metal erkin elektronlar vositasida bog'lanib turgan atom qoldiqlaridan tashkil topgan sistemadir.

Metallar yuqori issiqlik o'tkazuvchanlik va elektr o'tkazuvchanlikka egalari. Bu xolni Videman – Frans qonuni yaxshi ifodalaydi:

$$\frac{\lambda}{H} = RT$$

bu erda λ - issiqlik o'tkazuvchanlik; H-elektr urkazuvchanlik.

Ko'rinib turibdiki, T kamaysa N ortadi. Bu o'ta o'tkazuvchanlikka olib keladi.

Qattiq jismlar tuzilishi, tarkibi, ularni tashkil qilgan zarralari orasidagi o'zaro ta'sir kuchlari mexanik, elektr magnit, optik va boshqa xossalari jihatidan turli guruxlarga bo'linadi.

Qattiq jismlar ularning tashkil qilgan zarralarning joylashish tartibiga asoslanib kristall va amorf jismlar guruxiga ajraladi.

Amorf jismlarni tashkil qilgan atomlarning joylashishida qat'iy bir tartib yo'q, ammo kristall jismlarni tashkil qilgan atom (ion, molekula)lar joylashishida muayyan tartib mavjud. Ma'lum yo'nalishlarda har qanday ikki qo'shni atom oralig'i bir xil shuning uchun ham kristall holatdagi qattiq jismlarning fazalari o'zgarishi (suyuqlanish qotish) qat'iy muayyan temperaturada va bosimlarda sodir bo'ladi.

SUYUQ XOLAT

Bu oraliq xolatdir. Past temperaturada, ya'ni suyuqlanish temperaturasiga yaqin xollarda suyuqliklarning xossalari qattiq xolat xossalariga yaqin bo'ladi (tartiblilik, zichlik, elektr o'tkazuvchanlik, siqiluvchanlik). Qaynash temperaturasi yaqinida suyuqliklar bug'larga o'xshaydi. Suyuqliklarda metallardagi muvozanat xolati yaqinidagi tebranma xarakat modda zarrachalarining translyatsion (sakrab bo'sh joyga o'tish) xarakat bilan almashadi. Ozod yo'l uzunligi molekula o'lchamiga (diametr) teng. Ozod yo'l uzunligi effektiv gazokinetiv ko'tarilish bilan kattalashib boradi.

Suyuqliklar uchun kritik temperatua xos. Kritik temperatura deb - shunday temperaturaga aytiladiki, $T \geq T_K$ bo'lganda modda xech qanday bosim ostida suyuq xolatga o'tkazib bo'lmaydi. $T < T_K$ bo'lganda moddaning suyuq xolati bilan bug' (gaz) xolati o'rtasida chegara yo'qolib, u bir fazali sistemaga aylanadi.

$T < T_K$ bo'lgan xollar uchun suyuqliklar siqiluvchanlik xossasiga ega. U adiabatik va izotermik bo'lishi mumkin. Adiabatik siqilish paytida entropiya o'zgarmaydi, chunki sistemaning konfiguratsiyasi o'zgarmay qoladi. Siqilish faqat masofalar kamayish xisobiga ro'y beradi. Izotermik siqiluvchanlik $\beta_v > \beta_s$, chunki bu xolda zarrachalarning xolat o'zgarishi imkoniyati xam mavjud.

Biz yuqorida aytib o'tdik. Kristall tuzulishli moddalar aniq suyuqlanish temperaturasiga ega bo'ladi. Lekin shunday kristall tuzulishli moddalar ham borki, ular ma'lum temperatura oralig'ida xira suyuqlanma holatiga o'tib, undan so'ng temperaturaning ma'lum qiymatida tiniq suyuqlanmaga aylanadilar.

Suyuq kristallar oraliq (mezamorf) fazalar bo'lib, anizotropiya (kristalllarga xos) va oquvchanlik (suyuqliklarga xos) xossaga ega suyuq kristallarning molekulari cho'ziq shaklga ega bo'lib, ular orasida mavjud bo'ladigan yonlama bog'lanishlar molekularni parallel yo'naltiradi, chekkalama bog'lanishlar esa ularni zanjirsimon joylashtiradi.

Suyuq kristallarning **nematik, smektik, xolisterik** turlari mavjud.

1. **Nematik** (yunoncha "Nema"-in) suyuq kristallarda molekular o'qlari bir-biriga nisbatan ixtiyoriy ravishda siljigan bo'ladi. Moddada molekular chiziqlar bo'ylab joylashgan, optik o'qlari bitta va musbat. Nematiklarga elektr va magnit maydon ta'sirida nematki suyuq kristall para-azoksianizolning qovushqoqligi kuchli darajada o'zgaradi.
2. **Smektik** (yunoncha "Smegma"-sovun) suyuq kristallarda molekular faqat o'zaro parallel yo'nalgan bo'libgina qolmay balki, bir molekula qalinligida yassi qatlamlar hosil qiladi. Masalan: sovun pufagining tashqi va ichki sirtlari smektik qatlamlardan iborat. Sirt qatlamlaridagi sovun molekularining o'zaro tortishishi pufakning barqarorligi uchun zarur bo'lgan sirtiy taranglikni hosil qiladi.
3. **Xolisterik** suyuq kristallar nomining kelib chiqishiga sabab tarkibida xolesterin bo'lgan birikmalarning suyuq kristall fazalarini hosil qilishidir.

Xolesteriklar aralash-smektik, nematik turdagi tuzilishga ega. Bunday kristallarda molekular smektiklardagidek parallel qatlamlar tashkil qiladi, ammo har bir qatlamda molekular o'qlari, qatlamga nematik holidagidek paralleldir.

Xolesterik suyuq kristallar yorug'lik nuri ta'sir ettirilganda uni qaytarish xossasiga ega bo'lib, bu xususiyat qavat-qavat joylashgan 500-5000 ta molekular qatlamidan kelib chiqadi. Bunday suyuq kristallar tuzilishi uchun zanjirli, molekulari turli yo'nalishdagi qatlamlarning markaziy o'q atrofida bir tomonga burilib joylashishi tufayli hosil bo'lgan spiraldan iboratdir. Spiraldagi har bir burilish "qadam" deyiladi. SHu tuzilish sababli suyuq kristallar yorug'lik nurlarini turlicha qaytaradi.

Bu kristallar temperaturaga ham sezgir bo'lib, kichik temperatura o'zgarishini aniqlashga yordam beradi. Chunki ulardagi turli rangning o'zgarishi (energiya o'zgarishi) temperatura o'zgarishi bilan bog'liq bo'lib, u 0,1⁰S dan 40⁰S gacha bo'lgan oraliqda ro'y beradi. Xolesterik kristallarning temperatura o'zgarishi sohasi 3⁰S atrofida bo'lgani uchun bu moddalar yordamida teri sirtini termografik o'rganish mumkin. Qon tomirlarida tiqin (tromblar) hosil bo'lishini aniqlash mumkin. Qon tomirida tromba hosil bo'lsa, qon tomirining shu erida temperatura yuqori bo'lgani uchun, teriga surtilgan suyuq kristall ko'k rangga kiradi. Shunday usul bilan ko'krak bezi raklari, metall buyumlardagi juda kichik kamchiliklar, metallarni payvandlashda yo'l qo'yilgan xatoliklar ham aniqlanadi.

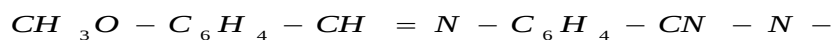
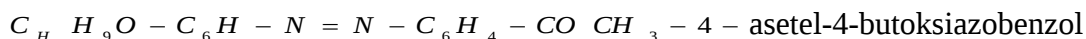
Termometrlarda xolesterik suyuq kristallar ishlatilganda temperaturaga qarab turli rangdagi raqamlarning paydo bo'lishi ham shunga asoslangan.

Raqamli soatlar va mikrokal'kulyatorlarning ekranlarida nematik tuzilishli kristallar ishlatiladi. Nematik kristallar oquvchan, lekin molekulari yuqori qutblanganligi sababli, ular qayta orientatsiyalanish uchun juda kam elektr maydoni etarli bo'ladi. Energiyaning ozgina o'zgarishi molekular orientatsiyasini o'zgartiradi va bu ular optik xossasining o'zgarishiga olib kelib, ekrandagi informatsiya raqamlar ko'rinishida paydo bo'ladi.

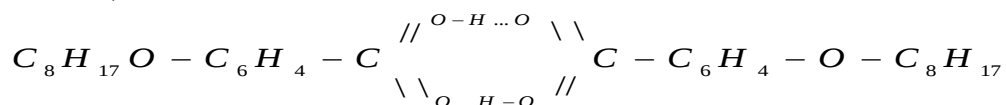
Raqamlar o'zgarishi kvarts kristallar orqali amalga oshiriladi. Chunki ularda oz energiya ta'sirida 1 sekundda 32768 marta tuzilish o'zgarishi ro'y beradi. Kvartsli soatlarda harakatlantiruvchi mexanizm yo'q, shunisi bilan ular oddiy mexanik soatlardan ustun turadi.

Yuqoridagi ma'lumotlardan ko'rinish turibdiki, suyuq kristallar hozirgi zamonda o'ta sezgir va aniq o'lchov asboblari (tarozi, soatlar, boshqa jihozlar), radiotexnika, elektronika sanoatida juda keng qo'llanilayotgan muhim kimyoviy moddalardir.

Eng ko'p qo'llanilgan suyuq kristallar:



(4-metoksibenziliden)-4-sianofenilamin



Para-okliloksibenzol kislotasining dimeri

GAZ XOLATI

Gaz xolat eng oddiy xolat bo'lib, Mendeleev-Klapeyron tenglamasi uning xolat tenglamasi1dir. Real sistemalar uchun $pV = nRT$ urniga $(p + \frac{a}{V^2})(V - B) = nRT$ degan ifoda -

Van der Vaals tenglamasidan foydalanamiz. $\frac{a}{V^2}$ - ichki bosim deyiladi, B - esa molekularning xususiy xajmi V_0 , bilan $B=4N_0V_0$ ifodasi orqali bog'langan.

GAZLARGA OID QONUNLAR

1. Avogadro qonuni. Bir xil xarorat va bosimda teng xajmli turli gazlarning molekulari soni uzaro teng buladi. Xarorat **T=273K**, **P =101,325kPa** bulgan sharoitni normal sharoit (n.sh.) deyiladi. Normal sharoitda xar kanday gazsimon moddaning 1 mol mikdori 22,4 l xajmni egallaydi va bu molyar xajmi deyiladi. $V_0= 22,4 \text{ л/моль}$ yoziladi.

Gazsimon moddaning xajmi va mikdori uning tarkibidagi zarracha (molekula, atom)lar soniga bevosita boglikdir. qar kanday moddaning 1 mol mikdori tarkibida $6,02 \cdot 10^{23}$ ta zarracha (molekula, atom, ion) buladi. Bu Avagadro soni deyilib, $N=6,02 \cdot 10^{23}$ xolida yoziladi.

Nisbiy zichlik deb bir gaz nisbiy molekulyar massasini ikkinchisining nisbatiga aytiladi:

$$D = \frac{M_1}{M_2}. \text{ Asosan, gazlarning vodorodga va qavoga nisbatan zichligi aniqlanadi: } D_{H_2} = \frac{M_1}{2}$$

$D_x = \frac{M_1}{29}$. Vodorodga yoki qavoga nisbatan zichligi ma'lum gazning nisbiy molekulyar massasi

quyidagicha aniqlanadi: $M_{газ} = D_{газ} \cdot M_{габ}$

Gazlarning o'rtacha zichligini aniqlash uchun uning nisbiy molekulyar massasini molyar qajimga bo'lish kerak: $\rho = \frac{M}{22,4}$ г/л. Gazlarning nisbiy zichligidan foydalanib, ularning molekulyar

massalari xisoblanadi: $M_{газ} = D_{газ} \cdot M_{габ}$

O'rtacha zichligi ma'lum gazning nisbiy molekulyar massasi quyidagicha topiladi- $M = \rho \cdot 22,4$

Hajmiy nisbatlar qonunining ifodasi quyidagicha: gaz moddalar orasidagi reaksiyada gaz moddalar qajmlari nisbati o'zaro kichikroq butun sonlar nisbati kabi bo'ladi. Masalan, ushbu reaksiyada: $2CO + O_2 = 2CO_2$ gazlar nisbati 2:1:2 kabi.

Hajmiy nisbatlar qonuni gaz moddalar orasidagi reaksiyalar tenglamasi asosida qisoblashlar amalga oshirish uchun qo'llaniladi. Bunda gaz moddalar oldidagi koeffitsientlar to'qridan-to'qri qajm sifatida olinadi.

2. Boyl — Mariott qonuni. Uzgarmas xaroratda ma'lum mikdor gazning bosimi uning xajmiga teskari proportsionaldir.

$$V_1 / V_2 = P_2 / P_1 \quad \text{ёки} \quad PV = \text{const}$$

3. Gey—Lyussak qonuni. Uzgarmas bosimda gazning xajmi uning absalyut xaroratiga tugri proportsionaldir.

$$V_1 / T_1 = V_2 / T_2 \quad \text{ёки} \quad V/T = \text{const}$$

Uzgarmas xajmda gazning bosimi absolyut xaroratiga tugri proportsionaldir.

$$P_1 / T_2 = P_2 / T_1 \quad \text{ёки} \quad P/T = \text{const}$$

4. Mendeleev — Klapayron tenglamasi: Gazsimon moddalarning mol mikdori —n, xajmi —V, massasi —m, molekulyar massasi —M, xarorati —T urtasida uzaro boglanish bor. Bu boglanish Mendeleev — Klapayron va gazlarning umumlashgan xolat tenglamalari orkali ifodalanadi. Xar kanday sharoitda 1 mol gaz uchun: $PV = nRT$ bo'ladi. R — universal gaz doimiysi, 8,314 J/mol·grad. Bu formulada $n = m / M$ bo'lsa, Asosan turli sharoitdagi gazlar bosimi yoki xajmini normal sharoitga yoki aksincha xisoblashlarni bajarishga tuqri keladi. Bu vaqtda gazlarning umumlashgan xolat tenglamasidan foydalaniladi.

$$P_0 V_0 / T_0 = PV / T.$$

PLAZMA XOLATI.

Plazma xolat moddaning juda yuqori temperatura uchun xos bo'lgan xolatidir. Termoyadro reaksiyalari modda plazma xolatda bo'lgandagina ro'y beradi.

NAZORAT SAVOLLARI

Nima sababdan metallar turli xil agregat xolatda namoyon bo'ladi.

Kanday sharoitda modda qattiq xolatda bo'ladi.

Nima sababdan metallar juda yuqori tempraturada suyuqlanadi.

Modda (xolatda) kanday sharoitda suyuq xolatda bo'ladi.

Gazning xolat tenglamasi kanday tempraturaga bog'liq.

Plazma nima.

TAYANCH IBORALAR

Molekula.

Videman Frants qonuni.

modda xolati.

Kritik teperatura.

Atomlar.

Adiabatik siqilivchanlik.

Agregat xolat.

Izotermik siqiluvchanlik

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

МАЪРУЗА № 3

MODDALARNING MOLEKULAR VA KRISTALKIMYOVIY TUZILISHGA EGA BO'LISHINING ULARDAGI KIMYOVIY BOG'LARNING TURIGA BOG'LIQLIGI

ELEKTRON ORBITALLAR GIBRIDLANISHI va VALETN BOG'LAR YO'NALISHI REJA:

Bog'lanish tartibi. Bog'ning energiyasi. Bog' uzunligi. Valent burchagi. Bog'ning ionlik darajasi va kimyoviy bog'langan atomlarning effektiv zaryadi. Kimyoviy bog'ning asosiy xususiyatlari va kimyoviy bog'ning hosil bo'lish mexanizmi. Vodorod molekulasida hosil bo'lish mexanizmining kvantomexanik talqini. Kimyoviy bog'lanishning asosiy tiplari. Valent bog'lanishlar nazariyasi. Donor-aktsentor mexanizmi bo'yicha bog' hosil bo'lishi.

Kimyoviy bog'lanishning eng muhim tavsiflaridan biri boglanish energiyasidir. Bu energiya kimyoviy bog'lanishni barqarorligini belgilaydi. O'zaro bog'langan atomlar orasidagi bog'ni o'zish uchun kerak bo'lgan energiya miqdoriga bog'lanish energiyasi deyiladi (Ye). Uning o'lchami $Ye = kkal/mol$, kal/mol , kJ/mol .

2-atomli molekularlar uchun bog'lanish energiyasi, shu molekulani atomlarga disotsialash energiyasiga teng bo'ladi:

$$\begin{aligned} \text{Masalan: } H_2 &= 2H & E &= 435 \text{ kJ/mol} \\ F_2 &= 2F & Ye &= 151 \text{ kJ/mol} \\ N_2 &= 2N & Ye &= 940 \text{ kJ/mol} \end{aligned}$$

Abn yoki AnB tipidagi ko'p atomli molekularlar uchun bog'lanish energiyasi:

$$Abn = A + nB$$

$$E_{ABn} = \frac{D}{n}; \quad H_2O = 2H + O \quad E = 928 \text{ kJ/mol}$$

N-o bog'lanish kuchi bir xil bo'lganligi uchun o'rtacha bog'lanish energiyasi

$$E_{OH} = \frac{D}{n} = \frac{928}{2} = 464 \text{ kJ/mol}$$

Bog'lanish uzunligi, bog'lanish energiyasi va valentliklar burchagi kabi kattaliklar shu moddaning boshqa xossalari shu moddaning elektron zichligining xarakteriga to'g'ridan-to'g'ri bog'liqdir. Kimyoviy bog'lanish asosan valent elektronlari ishtirokida amalga oshadi. 3-elementlarning tashqi ns-qavatchada joylashgan elektronlari, s-elementlarda esa tashqi ns va np qavatchalarda joylashgan elektronlar, d-elementlarda, tashqi ns - va tashqarida tchkt n-1 d qavatchalardagi, f-elementlarda esa ns va n-2f qavatchalarda joylashgan elektronlari valent elektronlari deyiladi.

s-elementlar o'zgarmas doimiy valentlikni, p,d va f-elementlar esa o'zgaruvchan valentlikni namoyon qiladilar. Demak kimyoviy bog'lanish paytida elektronlarning qayta taqsimlanishi sodir bo'ladi. Buning natijasida elektronlar bir atom yoki molekuladan ikkinchisiga

o'tadi yoki elektron ziyaligi biridan ikkinchisiga tomon siljishi mumkin. atom yoki molekullarning elektron berishi yoki qabul qilib olishi natijasida hosil bo'ladigan zarrachalar ionlar deyiladi. Ionlar musbat (+) va manfiy (-) zaryadli bo'ladi. Modda tarkibida musbat va manfiy ionlar o'zaro bog'langan va ($n+ = n- = 0$) molekula elektroneytral bo'ladi. To'yinmagan valentlikga ega bo'lgan zarrachalar erkin radikallar deyiladi. Erkin radikallar molekullarning parchalaridir: -CN, -OH, -CH₃, -NH₂, -HS, Cl⁺, O⁺ . .

Bizga ilgaridan ma'lum ediki (7-ma'ruzaga qarang) elementlarning metallik va metalmaslik xossalarini taqqoslash uchun Melliken va Poling elektromnfiylikni nisbiy qiymatlaridan foydalanishni taklif etgan edi.

Buning uchun litiyning elektromanfiyligini shurtli ravishda 1 ga teng deb qabul qilingan. Davrlarda chapdan o'ngga o'tgan sari elektromanfiylik qiymati ortib boradi. Guruhlarda esa yuqoridan pastga tugan sari kamayib boradi. Masalan: II davr va VII – guruh uchun E.M. qiymatlarini o'zgarishini ko'raylik:

II davr:	Li,	Be,	B,	C,	N,	O,	F
	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,1
VIII guruh:	F,	Cl,	Br,	I			
	4,1	3,0	2,5	2,6			

Kimyoviy bog'lanish xarakteri o'zaro birikuvchi elementlarning nisbiy elektromanfiyliklari ayirmasiga bog'liq bo'ladi. Agar ikki elementning nisbiy elektromanfiyliklari orasidagi ayirma katta bo'lsa (1,5 dan to 3,3 gacha) bu elementlar orasida ionli bog'lanish hosil bo'ladi, agar bu ayirma unchalik kichik bo'lmasa (1,5 ga yaqin) qutbli bog'lanish, agar juda kichik bo'lsa kovalent (qutbsiz) bog'lanish yuzaga keladi.

SHunday qilib kimyoviy bog'lanish deb ikki yoki undan ortiq atomlarning kimyoviy barqaror ko'p atomli sistema hosil qilishi va unda bog'langan atomlarning elektron bulutlarning qayta taqsimlanishiga aytiladi.

Ion bog'lanish. Ion bog'lanishning tabiati, strukturasi va ion bog'lanishdagi birikmalarning xossalari kimyoviy bog'lanishning elektrostatik nazariyasi asosida tushuntiriladi. Bu nazariyaga muvofiq atomning elektron berishi yoki qabul qilishi natijasida hosil bo'lgan qarama-qarshi zaryadlangan ionlar elektrostatik kuchlar vositasida o'zaro tortishib barqaror sistemani hosil qiladi. Elementlarning oddiy ionlarga aylanish qobiliyati, ular atomlarining elektron strukturalaridan kelib chiqadi.

Bu qobiliyatni ionlanish energiyasining qiymati va atomlarning elektronlarga moyilligiga qarab baholash mumkin.

Ionlanish energiyasi kam bo'lgan ishqoriy va ishqoriy-er metallari bilan elektronga moyilligi juda katta bo'lgan VII-guruhning p-elementlari osonlik bilan oddiy ionlar hosil qiladi.

Masalan: NaCl-ning hosil bo'lishi mexanizmini ko'raylik:

Qarama-qarshi zaryadlangan ionlar orasidagi elektrostatik tortishuv hisobiga hosil bo'ladigan kimyoviy birikmalar ion yoki geteropolyar birikmalar deyiladi. Ion birikmalar hosil bo'lishidagi kimyoviy bog'lanish ion yoki elektrovalent bog'lanish deyiladi. Ion bog'lanish qarama-qarshi zaryadlangan ionlararo o'zaro ta'sir natijasida hosil bo'ladi.

Ion bog'lanish yo'qoluvchanlik va to'yinuvchanlik xossalarini namoyon qilmaydi. Har bir ionli zaryadlangan shar deb tasavvur qilsak, ionning kuch maydoni fazoda hamma yo'nalishlar bo'yicha tekis tarqaladi.

SHuning har bir ion o'ziga qarama-qarshi zaryadli boshqa ionli har qanday yo'nalishda ham bir tekisda tartib oladi.

Bu hodisaga ion bog'lanishning yo'naluvchanlik hodisasini namoyon qilmasligi deyiladi.

Bundan tashqari qarama-qarshi zaryadlangan ikki ion o'zaro birikkan bo'lsa ham, ularning kuch maydonlari to'liq yoyishga bo'lmaydi. shuning uchun har bir ion yana boshqa zaryadlarni o'ziga tortaveradi. 2ta qarama-qarshi ionlar maydonida elektr kuchlarning taqsimlanishi bu hodisa ion bog'lanishni to'yinmaslik xususiyatini bildiradi. Ion bog'lanish yo'naluvchanlik va to'yinuvchanlik xossalariga ega bo'lganligidan, har qaysi ion atrofida maksimal miqdorda qarama-qarshi zaryadli ionlar bo'ladi. Ayni musbat yoki manfiy ion atrofida joylanishi mumkin bo'lgan ionlarning soni, shu ionlar radiuslarining bir-biriga nisbatan katta-kichikligiga bog'liq. Masalan: ion radiuslarining nisbatan 0,41-0,73 gacha bo'lsa oktaedrik koordinatsiya, 0,73-1,37 gacha bo'lsa kub koordinatsiya bo'ladi.

Na⁺(I_{Na}⁺=0,98 AO) va Cl⁻(I_{Cl}⁻=1,81 AO), ionlar nisbati:

$$\frac{I_{No}}{I_{Cl}} = \frac{0,98}{1,81} = 0,54 \text{ AO}$$

oktaedrik koordinatsiya, yoki

Cl+(Ics=1,65 AO), Cl-(ICl=1,81 AO), ionlar nisbati:

$$\frac{I_{Cs}}{I_{Cl}} = \frac{1,65}{1,81} = 0,91 \text{ AO}$$

kub koordinatsiya bo'ladi.

SHu sababli navbatdagi sharoitda ion bog'lanishli birikmalar kristall moddalardir. Kristall NaCl+ yoki CsCl holida yakka-yakka mavjud bo'lmasdan, o'zaro birlashgan, juda ko'p ionlardan tashkil topgan gigant molekularlar NaCl_m yoki CsCl_m holida mavjud bo'ladi. Ion bog'lanishli birikmalar qiyin suyuqlanadi, ya'ni suyuqlanish temperaturalari ancha yuqori (NaCl – $t_c = 800^\circ\text{C}$; KCl – $t_c=768^\circ\text{C}$) va ularning suyuqlanmalari hamda suvdagi eritmalari elektr tokini yaxshi o'tkazadi. Shu sababli ularga kuchli elektrolitlar deyiladi.

HAZORAT SAVOLLARI.

1. Кандай атомлар мураккаб атомлар дейилади?
2. Алмашинув энергияси қачон пайдо булади?
3. Модданинг хусусиятлари уни ташкил этувчи атомлар структурасига боғлиқми?
4. Мураккаб атомларнинг электрон структураси қандай аниқланади?
5. Нима учун мураккаб атомлар электрон қаватларни урганишда водородсимон атомлар назариясидан фойдаланилади.
6. Электрон қаватлар деганда нимани тушунаси?
7. Атомда электронлар ҳолатини аниқлашда қандай квант сонларда фойдаланиш электронларда узаро алоқасига боғлиқ?

ТАЯНЧ ИБОРАЛАР:

1. Симметрик майдон.
2. Электрон ҳолатлар.
3. Мураккаб атомлар.
4. Электрон қаватлар.
5. Орбитал квант сони.
6. Боғланиш энергияси.
7. Ёнгил атомлар.
8. Огир атомлар.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Ёулчибоев А.А. Квант кимёдан ўқув қўлланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Ёулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машғулоти бўйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М Курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

MA'RUZA № 4

KOVALYENT BOG' TAVSIFLANISHI. BOG' ENYERGIYASI VA UZUNLIGI

Kovalent bog'lanish. H_2 , O_2 , N_2 , Cl_2 kabi molekularlarning va ko'pchilik anorganik hamda organik moddalarning tuzilishini tushintirish uchun 1916 yilda Lyuis (SSHA) tomonidan kovalent bog'lanish nazariyasi yaratildi. Lyuis nazariyasiga muvofiq, molekulada atomlar, har ikkala atom uchun taluqli bo'lgan umumiy elektron tufti orqali bog'langan bo'ladi. Atom tomonidan elektron tuftlarni hosil qilish uchun sarf bo'lgan elektronlar juftli soni bog'langan atomlarning valentligini bildiradi (Lentmyur). Struktura formuladagi valentlik birligini bildiruvchi chiziqcha (-) elektron juftni anglatadi. Ko'pgina molekulada tashqi qavatdagi umumiy elektronlar bilan, hosil bo'lgan elektronlar jufti birgalikda barqaror duplet (2)

yoki oktet (8) elektronli konfiguratsiya hosil qiladi. Atomlar orasida Lyuis sxemasi bo'yicha hosil bo'ladigan kimyoviy bog'lanish kovalent bog'lanish deyiladi.

Kovalent – bu teng valentli demakdir. Kovalent bog'lanish birikuvchi atomlarning tabiatiga qarab 2-ga bo'linadi.

1. Kovalent qutubsiz; 2. Kovalent qutubli.

1. Bir xil ikki atom orasida elektronlar juftli hisobiga hosil bo'ladigan bog'lanishga qutubsiz kovalent bog'lanish deyiladi.

Masalan: $H + H \rightarrow H:H$, $H-H$, $:Cl+Cl: \rightarrow :Cl:Cl:$, $Cl-Cl$

$O + O \rightarrow O:O$, $O=O$, $N+N \rightarrow N::N$, $N=N$

Lyuis fikricha molekular gomoyadroli va geteroyadroli bo'lishi mumkin.

Masalan H_2 elektronlarining to'liq xossasi borligi uchun elektron harakati natijasida $H + H$ – yoki $H - H +$ bo'lishi mumkin. shuning uchun ularning simmetrik o'rinlaridan effektiv (real) zaryadini atomlarda nolga teng deb olib bunday bog'lanishni qutubsiz (gomeopolyar) deb ataydi. $H + Cl$ – da H 1S1 va Cl 3S23Px2 3Py23Pz1 juftlashmagan elektronlar umumiy juft hosil qiladi. Bunda effektiv zaryad $H + Cl$ – bo'ladi. HCl molekulasida dipol bo'lib bog'lanish qutubli bo'ladi. Bir xil bo'lmagan 3 atom orasidagi elektronlar juftli hisobiga hosil bo'lgan bog'lanish qutbli kovalent bog'lanish deyiladi.

Masalan: $H + Cl: \rightarrow H:Cl:$ $H + O \rightarrow H:O:H$

$N + 3H \rightarrow H:N:H$

H

Qutbli kovalent bog'lanishda elektronlar juftli simmetrik joylashmaydi va molekular qarama-qarshi zaryadlarning og'irlik markazlari ham bir nuqtada yetmaydi. Shu sababli bunday molekularni qutubli molekular deyiladi. Ular 2 qutbli bo'lganligi uchun ularga dipollar deyiladi. Dipol deb bir xil q-qiyamatli va har xil zaryadli 1-mavofada joylashgan ionlardan tashkil topgan sistemaga aytiladi. Zaryadning masofaga ko'paytmasi dipol momenti deyiladi $m=q$.

1. Qutubli bog'lanish deb dipol momenti bilan xarakterlanadigan bog'lanishga aytiladi. Qutbsiz bog'lanishda $m=0$ bo'ladi. Qutbli bog'lanishli moddalarning reaksiyaga kirish qobiliyati qutbsiz molekuladan ko'proq bo'ladi. Shunday qilib kovalent bog'lanish juft elektronlar bilan xarakterlanadi. Dipol uzunligi 1 atom o'lchamiday 10-8 sm, zaryadi q 4,8 . 10-10 el. st. birlik. Shuning uchun $m=10-18$ el.st.bir.sm ga teng bo'ladi. Dipol momenti birligi qilib 1D debay qabul qilingan. 1D=3,33.10-30 Kl.m ga teng. m vektor bo'lib, u ham miqdoriy ham yo'nalishga egadir. Uning yo'nalishini shartli ravishda + va – ishoralari bilan belgilanadi.

$mH_2O = 1,83$ D (uglovaya str) CO_2 BeF_2 $m=0$ $NH_3 = 1,48$ D (piramidalnaya str).

Hozirgi zamonda kvant mexanikasi metodlaridan kovalent bog'lanishni tushuntirish uchun valent bog'lanishlar metodi va molekulyar orbitallar metodilari ishlatiladi. Valent bog'lanishlar metodini 1927 yilda Geytler va London (Germaniya) fodorod molekulasida elektronlar zisligi va energiyasini hisoblash yo'li bilan tushuntirishni taklif qildi. Ular $H-H$ oralig'idagi masofa R ni o'zgaruvchan deb ikki elektron oralig'idagi potentsial energiyasini elektronlar funktsiya koeffitsienti sistemasi U deb, ikki elektronli to'liq funktsiyasi J – ni aniqlaydi. Bu tenglamani yechishda sistemaning to'liq energiyasi Y_e ni atomlar oralig'idagi masofaning funktsiyasi deb oladi. Bunda agar elektronlar parallel spinlarda iborat bo'lsa ular yaqinlashganda energiyasi oshadi, shuning uchun molekula hosil bo'lmaydi.

Agar qarama-qarshi spinlar bo'lsa energiya kamayib molekula hosil bo'ladi. Ular orasidagi masofa R_o ga borganda energiya yana oshadi bu R_o – vodorod molekulasidagi yadrolar orsidagi muvozanat masofasidir.

Bu ikki atomli molekulaga tadbqiq qilib tushuntirishda valent bog'lanishlr metodini quyidagi 2 printsip orqali tushuntirish mumkin.

Birinchi printsip: Lokallashgan elektron bulutlari bog'lani hosil qiladi; atom orbitallar bir-birining ustini qoplaydi. Qarama-qarshi spinli elektron orbitallari bir-birini qoplaganda yadro orasidagi atom orbitallari orasidagi eng yuqori elektron bulut zichligi hosil bo'lib yadrolar tortishadigan zaryadlar hosil qiladi va sistema energiyasi kamayib bog' hosil bo'ladi.

Ikkinchi printsip: Atom orbitallarining maksimal qoplanishi natijasida bog' hosil bo'lishi ya'ni, yatom orbitallari qancha kuchli bir-birini qoplasa shuncha kuchli bog'lar hosil bo'ladi. Bog'dan qaysi atom boshqasini ko'proq qoplasa shu yo'nalish bo'ylab hosil bo'ladi.

Valent bog'lanishlar metodida ikkita mexanizm mavjud:

1. H_2 – molekulasida

2. $H+H- - >H_2$

3. $2H-1S$

4.

5. $H:H$ elektron formulasi

6. $H-H$ struktura formulasi

Bunda zaryadlar teng taqsimlangan bo'lib, ikkala elektron ham teng kuchli bo'ladi.

Atomlardan biridagi juft elektronlar hisobiga hosil bo'ladigan bog'lanishlr donor-aktseptor bog'lanishlar deyiladi.

1. H_2

2. $H++H- - - >H_2$

3. $H+1S \text{ o } H-1S_2$

4. aktseptor
donor

5. $H : H$ umumiy juft elektron

6. $H - H$

Ikkala mexanizm ham bir xil natija berdi.

1. $N + 3H - - > NH_3$

2. $N 2S^2 2P^3$

$3H \quad 1S^1$

3. N

H

4. $H : N : H$

H

5. $H - N - H$

H

Demak, kompleks birikmalarda 2 elektronli bog'lanishni valent bog'lanish deyiladi.

N – kovalentligi 3 uni xloga nisbatan elektromanfiyligi $-2,83$, azotning nisbiy elektromanfiyligi esa $3,0$ ga teng.

$H - N - H$

H

Elektromanfiy zaryad summasi nolga teng. kamchiligi H_2 hosil bo'lishi, O_2 paramagnit xossasini tushuntirish.

XeF_6 , $XeOF_4$, XeO_3 qanday bog' hosil bo'lishini tushuntira olmaydi. Valent bog'lanishlar usulining asosiy xollari quyidagilardan iborat.

1. O'zaro birikuvchi atomlar orasidagi bog', tashqi elektron qavatdagi elektronlarda bir qismining umumiy elektron juftlari hosil qilishi natijasida yuzaga keladi. Bunda elektronning spinlari antiparallel (II) bo'lishi kerak va bunday elektronning bulutlari bir-birini qoplab o'zaro birikuvchi atomlar yadrolari orasidagi fazoda taqsimlanadi.

2. O'zaro birikuvchi 2 atom maydonida juftlanmagan umumiy elektronlar zichligi lokallangan, ya'ni elektronlarning bulutlari bir-birini qoplagan bo'lishi kerak. Bu atomlarni biriktiruvchi (bog'lovchi) elektron juftlari miqdori, kimyoviy bog'lanishini miqdor birligini yoki uning valentligini bildiradi.

3. O'zaro birikuvchi atomlarning orasida elektron juftning hosil bo'liida faqat juftlanmagan, bitta yacheykani egallagan tok elektronlarga ishtirok etadi. Bog'lanishda ishtirok etmay qoladigan juft elektronlar-ajralmaydigan (ajralmas) juft deyiladi.

4. 2 atomning tok elektronlari o'zaro bog'lanib elektron juft hosil qilishlari uchun ularning spinlari qarama-qarshi zaryadga ega bo'lishi kerak, yoki elektronlar spinlari albatta antiparallel () bo'lishi kerak.

s, p - va s – bog'lanish.

Lokallashgan elektron bulutlarning valent bog'lanishlar metodi bir vaqatli bog'lanish deb elektron juft hisobiga bog'langan bog'lanishlarga aytiladi. H_2 , HCl , F_2 bunda doimo s - bog'lanish bo'ladi.

s – bog'lanish deb bog'lanish chizig'i orqali bironta ham tekislik tuguni (uzlovoy ploskosti) o'tmaydigan kimyoviy bog'lanishlarga aytiladi. Koordinatalaridan bir – aloqa chizig'i deb ataymiz.

Masalan: x-o'qi qaysi atom orbitallari orasida s - bog' hosil bo'ladi.

Bunda tekislikning yuqorida + + pastda + - perekrvaniya bo'ladi s – py shuning uchun umumiy perekrvaniya =0 bo'lishi uchun s – py o'rnida b – bog'lanish bo'lmaydi. s – bog'lanish molekula strukturasini o'rganishda katta ahamiyatga ega. s – bog'lanishning yo'nalishini valent burchaklari ko'rsatadi.

Agar kimyoviy bog'lanish bittadan ortiqcha juft elektron bilan bog'lansa ularga qush (kratnoy) bog' deyiladi.

Bog'lanish tartibi esa bog' hosil qilgan umumiy elektronlar soni bilan ifodalanadi. Bog'lanish qo'sh bog', o'chlamchi bog' va yuqori bo'lgan. Albatta birinchisi s – bog' p – bog' va ba'zi vaqtlarda s – bog'lanish bilan p – bog'lanish deb – bog'lanish chizig'i orqali bir tekislik tugunidan o'tishi bilan bo'ladigan bog'lanishga aytiladi.

1. N + N
2. 2S22P3
3. N
- N
4. : N : N :
5. N = N bu yerda 1 ta s – bog' va 2 ta p – bog'lanish bo'ladi.

Bulardan tashqari s – bog' bilan bunda bog'lanish chizig'idan 2 ta tekislik tuguni o'tadi. Demak faqat d orbitallar hosil qiladi bu klaster deb nomlanadi ya'ni tarkibida 2 ta metall atomi bo'lgan va ular o'zaro bir-biri bilan valent elektron bog'lanishlariga aytiladi.

Masalan: Re2Cl82 – da Re = Re

1-s

2-p

3-s bog' bilan bog'lanadi

s – bog'lanish

Gibridlanish nazariyasi.

Atomlar bog'lanishida har xil energetik pagonadagi elektronlar qatnashadi.

Masalan: Be 2S22P1, B 2S12P2, C 2S2P3

Bunday vaqtda dastlabki elektron buluti formalri o'zaro o'zgarib yangi boshqa formadagi elektron bulut hosil qiladi. Bunda hosil bo'lgan bog'lar alohida olingan oddiy bog'lardan mustahkam bo'ladi. Bu hodisaga gibridlanish hodisasi deyiladi.

NH3 da < HNH – 3P bog' isobiga 900S burchak hosil bo'lishi kerak lekin 1070 chunki bog'lanish P-P emas balki SP3 – gibridlanish hisobiga vujudga keladi. HOH da esa 90 li burchak o'rniga 105,4 ni hosil qiladi bu yerda SP3 – gibridlanish hosil bo'lishi bilan tushuntiriladi. Gibridlanishning barqaror bo'lishi ularning energetik yaqinligiga va gibridlangan bulutlarning zichligi bog'liq. Atomlar orasida doimo ozmi – ko'pmi qutbli bo'ladi.

Qutblanish natijasida bog' uzilib simmetrik va asimmetrik uzilish bo'lishi mumkin.

H + Cl = H : Cl : -> H + + Cl - ionlar hosil bo'ladi.

MA'RUZA № 5

MOLEKULALARNING GEOMETRIK TUZILISHI. BOG'LARNING VALENT BURCHAGI.

Molekulalarning hajmlari to'g'risidagi dastlabki ma'lumotlar kinetic nazariya asosida olingan bo'lib, bu nazariyaga binoan molekulalar elastic shartlar deb qabul qilinadi. Kinitik energiyaga binoan molekulalar to'qnashish vaqtida o'zaro yaqinlashib keladigan eng kichik masofa ularning diametrlari deb qabul qilinadi. Effektiv radiusni kinetic nazariyasiga binoan topish uchun $V(\text{shar}) = \frac{4}{3} \pi r_0^3$ formuladan foydalanamiz. O'zaro to'qnashayotgan ikkita sfera uchun hajmi 2V (shar) gat eng bo'ladi.

$$2V = 2 \cdot \frac{4}{3} \pi r_0^3 = 2V_0 \text{ Vander – Baals tenglamasiga binoan } v \cdot a N_A V_0 \text{ edi. Bundan}$$

$$V_0 = \frac{V_K}{3} \cdot \frac{V_K}{12 N_A}; \text{ Kritik xolat uchun } V_K=3v; \quad v = \frac{V_K}{3}$$

Demak,

$$V_0 \frac{V_k}{3} \cdot \frac{1}{4 NA} = \frac{V_k}{12 NA}; \quad \frac{4}{3} \pi r_0^3 = \frac{V_k}{12 Na}$$

$$R_0^3 = \frac{Bk}{16 PNA}; \quad r_0 = \frac{PK}{16 \pi NA} \quad r_o = \frac{1}{2} \sqrt[3]{\frac{V_k}{2 \pi N_A}}$$

Demak, r_0 ni topish uchun real moddalarning kritik parametrlaridan biri bo'lgan kritik hajmni topish kifoya.

Bundan tashqari gaz holdagi modda molekularining ozod yo'l uzunligi

$$e = \frac{1}{\sqrt{2 N_1 \pi d^2}}$$

Formulasidan ham foydalanish mumkin. Bu yerda N_1 – hajm birligidagi molekular soni nd^2 – molekularni o'rab turgan va boshqa molekular kirolmaydigan sharning kesmasining yuzasi; d – molekulaning diametri.

$$\text{Gazning yopishqoqligini } \eta = \frac{N_1 m W}{3} \text{ ga teng.} \quad (1)$$

W – gaz molukalalarining o'rtacha tezligi, birinchi formulaga 1 –ning qiymatini qo'yib n-ni 2 ta gaz uchun yozsak

$$\eta = \frac{N_1 m W}{3} \quad \eta_1 = \frac{N_1^2 m_1 W_1 \sqrt{2 \pi d_1^2}}{3} \quad \eta_2 = \frac{N_1^2 m_2 W_2 \sqrt{2 \pi d_2^2}}{3}$$

$$n_2 - \text{ni } n_1 \text{ ga nisbatini topsak } \frac{\eta_2}{\eta_1} = \frac{m_2 W_2 d_2^2}{m_1 W_1 d_1^2}$$

Agar birinchi gal sifatida biror etalon gaz (N_2 , Ar, Kr) olinsa va $m=M/N_A$ dan topilishini e'tiborga olib

$$d_2^2 = \frac{\eta_2 \cdot m_1 W_1^2}{\eta_1 \cdot m_2 W_2} \text{ bo'yicha tekshirilayotgan gaz molekulasi} \text{ kinetic}$$

diametric topiladi. Bu yerda n_1, n_2, W_1, W_2 va a_1 lar tajriba asosida topiladi.

Ba'zi moddalar molekularining effektiv diametrlari

Modda	$D_{\text{eff}} (d_2)_1$	A Modda	$D_{\text{eff}} (d_2)$
He	3.20	N_2	3.80
Ar	3.66	C_7H_{16}	26.7
H_2	2.75	C_8H_{18}	34.9

Kimyoviy bog'larning uzunligi renttsi nurlari va elektron oqimlarining ularning to'liqsimon tabiati tufayli diffraksiyalanishiga asoslashgan. Bunday tajribalarda Bulf –Breg formulasidan foydalaniladi:

$$\eta \lambda = 2 d \sin \theta$$

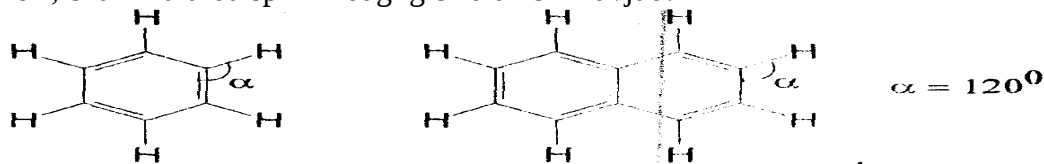
Kvant mexanika kimyoviy kuch (valentlik) yo'nalishga ega ekanligini ko'rsatdi. Bu narsa valent elektronlar egallab turgan atom orbitallarning hiliga bog'liq.

AO: s bog'lanishda tanlangan yo'nalishi yo'q.

p	bog'lanishlar	90°	burchak	ostida	yo'nalish	
sp	"	180°	"	"	"	"
sp^2	"	120°	"	"	"	"
sp^3	"	$109^\circ 20'$	"	"	"	"
$sp^2 d$	"	90°	"	"	"	"
$sp^3 d^2$	"	90°	"	"	"	"

Demak, molekular o'z geometrik tuzilishiga qarab sferik (s), to'g'ri burchakli (p), chiziqlar (sp), planar (sp²), teatdaedri (sp³), planar kvadratik (sp²d), oktaedrik (sp³d²) bo'lishi mumkin. Boshqacha holler ham bo'lishi mumkin.

Bog' hosil qiluvchi elektronlarning qanday AO larni turganligiga qarab molekular turli fazoviy tuzilishga ega bo'ladi. Bunday masalalarni stersoximim o'rganadi. Karro bog'lar bilan bog'langan uglerod atomlari asitilen kabi chiziqli yoki etilen kabi planar molekularni hosil qiladi. Benzod va naftalin molekulari ham plapardir, chunki ularda sp² xilidagi gibridlanish mavjud:



Bunday fazoviy tuzilish o'z navbatida aromatiklikni ta'mirlaydi. n – bog'larini hosil qiluvchi va 2p orbitallarda joylashgan π – elektronlar o'zaro to'la –to'kis qoplanadi. Bunday qoplanishning butun xalqa bo'yicha ro'y berishi aynan aromatiklikni belgilaydi. Siklooktatetraenda n – bog'lari o'zaro fazoda joylashganligi uchun ular qoplasha olmaydi. Aromatiklik ro'yobga chiqolmaydi. Sikloalkanlarda "vanna" va "kreslo"-konformatsiyalarining paydo bo'lishi ham



Bu konformatsiyalar osonlik bilan bir –biriga o'tib turadi. Ammo potensial to'siqning qiymati katta bo'lsa, molekularning kinetic energiya zapasi uni yengib o'tishga yetmaydi va konformatsiyalar o'zaro barqaror bo'ladi.

Таблица 3-7. Средние тройные углы для связей и неподеленных пар, полученные из неэмпирического расчета [66]

Орбиталь	Молекула	Средний тройной угол (°)
S—F	HSF	102,2
	SF ₂	102,4
	SOF ₂	102,9*
S—H	HSF	103,8
	SH ₂	103,3
	SOH ₂	103,3
	SO ₂ H ₂	104,7
S=O	SOH ₂	113,6
	SO ₂ H ₂	113,3
	SOF ₂	113,7*
	SH ₂	114,2
S—F	HSF	114,2
	SOH ₂	114,8
	SF ₂	114,7
	SOF ₂	114,9*
	OH ₂	107,3
O—H	OF ₂	103,5
O—F	OH ₂	111,6
O—E	OF ₂	114,3
N—F	NF ₃	106,9*
N—H	NH ₃	108,0
N—E	NF ₃	115,9*
	NH ₃	113,3
P—F	PF ₃	104,7*
P—H	PH ₃	103,5
P—E	PF ₃	120,2*
	PH ₃	122,4

* Вычисления проведены в базисе *sp*, во всех остальных случаях использован базис *spd*.

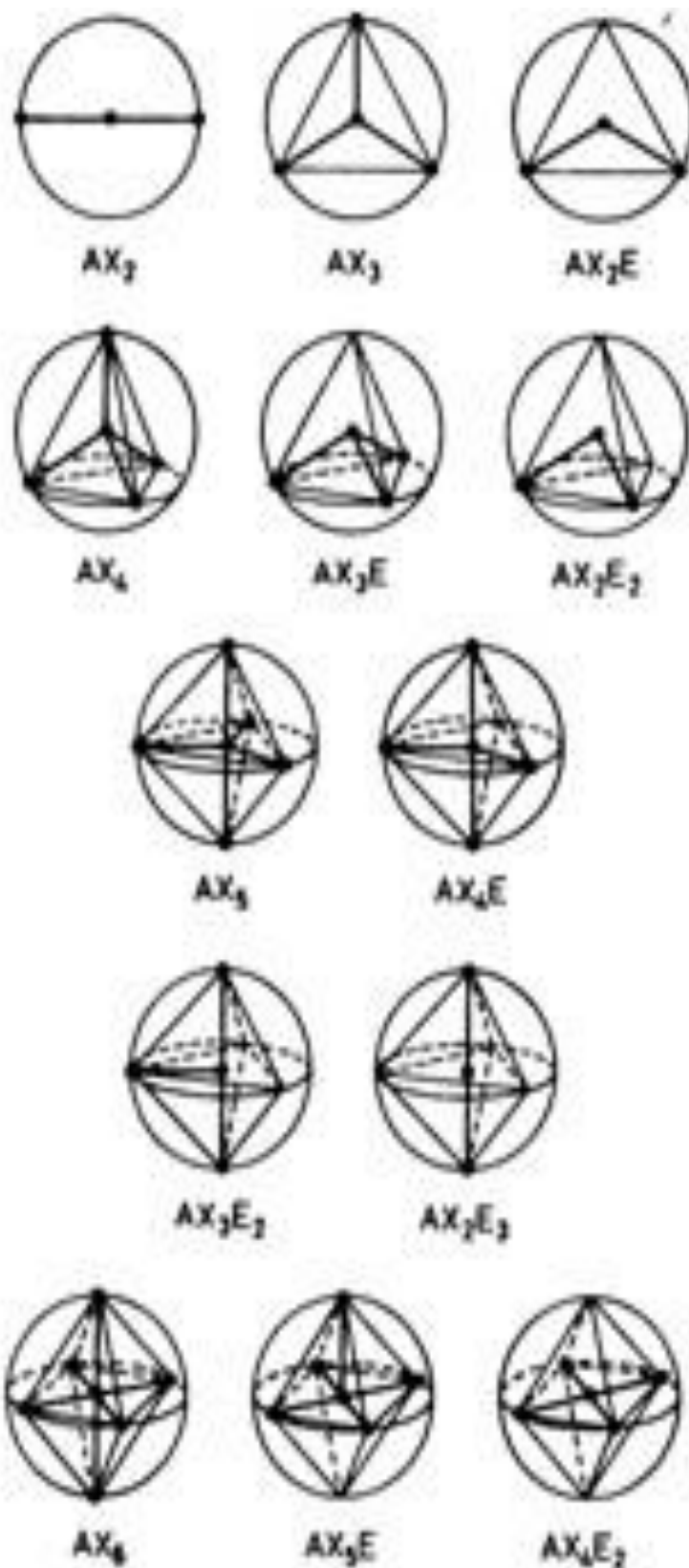


Рис. 3-56.

Получающиеся конфигурации связей, когда центральный атом содержит в валентной оболочке 2, 3, 4, 5 и 6 электронных пар [62]. Воспроизводится с разрешения Р. Гиллеспи.

4	Тетраэдр	4	0	AX_4	Тетраэдр	$CH_4, SiCl_4$
		3	1	AX_3E	Тригональная пирамида	NH_3, PCl_3
		2	2	AX_2E_2	Угловая	H_2O, SCl_2
5	Тригональная бипирамида	5	0	AX_5	Тригональная бипирамида	PCl_5, AsF_5
		4	1	AX_4E	Дисфеноид	SF_4
		3	2	AX_3E_2	Т-образная	ClF_3
		2	3	AX_2E_3	Линейная	XeF_2
6	Октаэдр	6	0	AX_6	Октаэдр	SF_6
		5	1	AX_5E	Квадратная пирамида	BrF_5
		4	2	AX_4E_2	Плоский квадрат	XeF_4

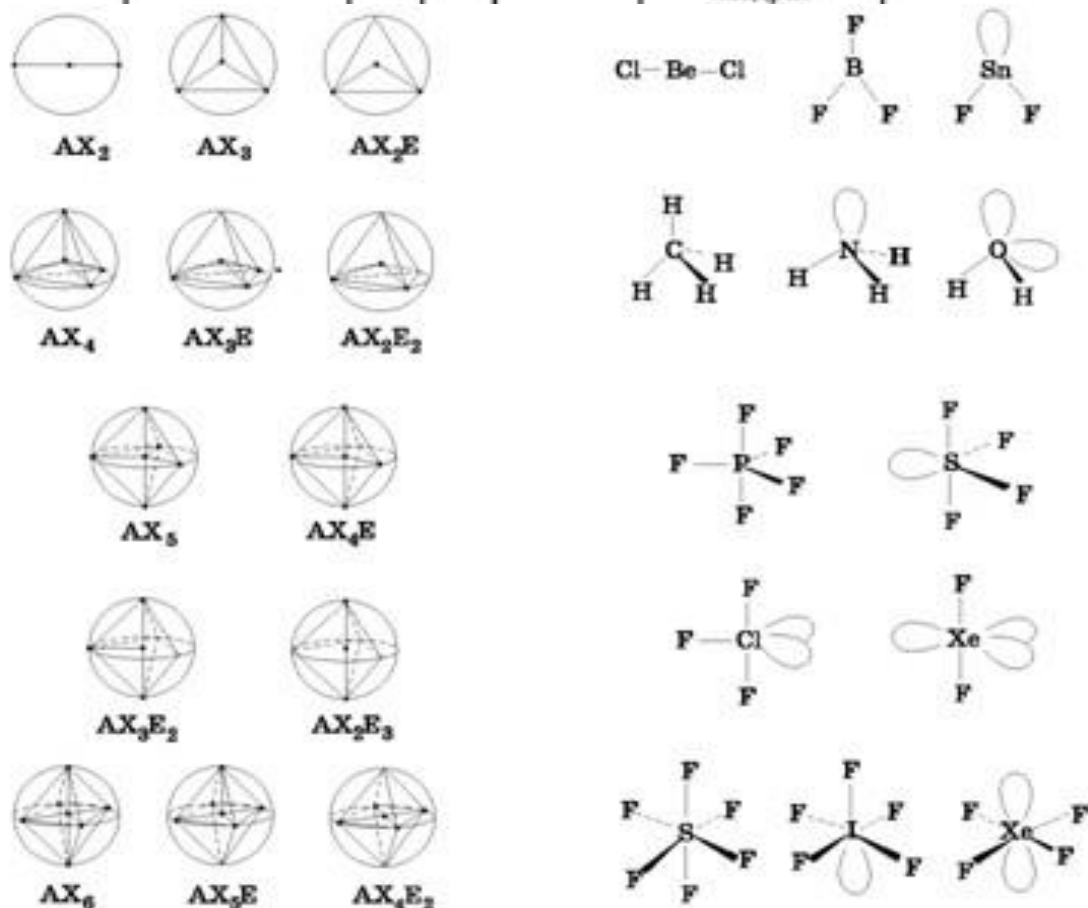


Рис. 15. Зависимость геометрии молекул от расположения атомов и электронных пар на поверхности сферы.

6 – MA'RUZA.

*SIMMETRIYA TEKISLIGI, SIMMETRIYA O'QI, SIMMETRIYA MARKAZI VA SIMMETRIYA OPERASİYALARI.

Kristall oddiy shakllari ochik va yopik bulishi mumkin.

Monoedr- fakat bir kristall yoni (mono-yunoncha bir, edr-kristall yoni) dan iborat sodda shakl.

Diedr - ikkita (di-ikki) bir-birga teng uxshash, uzaro kesishadigan yonlardan iborat sodda shakl.

Pinakoid - ikkita bir-biriga teng uxshash parallel yonlardan tashkil topgan (pinaks- yunoncha suz bulib taxta demakdir) sodda shakl.

Prizmalar - parallel kirralar xosil kilib, kesishadigan uch va undan ortik uxshash xamda teng yonlardan tuzilgan sodda shakllardir. Prizmalar uch yonli, turtyonli, oltiyonli buladi. Bunda birinchisi trigonal prizma, ikkinchisi- yonlari orasidagi burchak 900 bulsa, tetragonal prizma va yonlari orasidagi burchak 900 bulmasa –rombik prizma, shu prizmani yonlari bilan asosi orasidagi burchagi 900 ga teng bulmasa, monoklin prizma, olti yonli uchinchisi geksogonal

prizma deyiladi. Prizmalarning xar kaysi yoni urtasidan kichik kirra buyicha ajralgan-ikkilangan bulishi mumkin. Bunday prizmalarni atashda yonlarini kursatadigan songa «di» old kushimchasi kushiladi. Ikkilangan yonlardan iborat uch yonli prizma ditrigonal prizma, turtta ikkilangan yonlardan tuzilgan prizma ditetragonal prizma, oltita ikkilangan yonlardan iborat prizma digeksagonal prizma deyiladi.

Piramidalar-kirralari bir nuqtada kesishadigan uch va undan ortik teng va uxshash yonlardan tashkil topgan sodda shakllardir. Piramidalar xam prizmalarga uxshash bir necha xil buladi:

a) trigonal (uch yonli) piramida; b) tetragonal (turtta yonli) piramida; v) geksagonal (olti yonli) piramida; g) ditrigonal piramida; d) ditetragonal piramida; j) digeksagonal piramida, rombik piramida ochik shakllardir.

Yopik sodda shakllar fakat bir xil yonlar bilan cheklangan bulib ular quyidagilardir: dipiramidalar-asoslari bilan kushilgan teng va uxshash ikki piramidadan iborat sodda shakllardir: a) trigonal piramida; b) tetragonal dipiramida; v) geksagonal dipiramida; d) rombik dipiramida va yonlari ikkilangan bulsa, e) ditrigonal dipiramida; j) ditetragonal dipiramida; i) digeksagonal dipiramida.

Tetraedrlar bir-biriga teng, uxshash bulgan turtta uchburchakli yondan tuzilgan sodda shakl. Tetraedrlarning xar kaysi yoni teng tomonli uchburchak shaklida bulsa, kubik tetraedr teng yonli uchburchak kiyofasida bulsa, tetragonal tetraedr, turli tomonli uchburchaklardan iborat bulsa, rombik tetraedr deyiladi. Kubik tetraedr fakat kubik singoniya kristall shakllariga mansubdir. Shuningdek rombik tetraedr rombik singoniya kristall shakllariga, tetragonal tetraedr esa tetragonal singoniya kristalllariga xos shakllardir.

Romboedr-oltita uxshash va teng romb kurinishdagi yon bilan cheklangan shakl bulib, kiyshik kubni eslatadi. Kub shakli kirralarini simdan yasab, karama-karshi uchlaridan chuzilsa, shunday shakl xosil buladi.

Skalenoedrlar tetragonal xamda ditrigonalidir. Tetragonal tetraedrlarning xar kaysi yonlarini urtasidan kichik kirra kilib, xosil kilib, simmetriya tekisligi buyicha bulinishi-ikkilanishidan tetragonal skalenoedr, romboedr yonlarining shunga uxshash ikkilanishidan ditrigonal skalenoedr vujudga keladi. Demak, tetragonal skalenoedr, sakkiz yonga, ditrigonal skalenoedr esa un ikki yonga ega buladi.

Trapetsoedrlar dipiramidalarga uxshash, lekin simmetriya tekisliklari utkazishini tasavvur etib bulmaydigan shakllardir. Ular xam ikki piramidaning asoslari bilan kushilishidan xosil buladi. Birok bunda birinchi piramidaning kirrasi ikkinchi piramidaning kirrasiga mos emas, balki yoniga tugri keladi, ya'ni birinchi piramida ikkinchisiga nisbatan birmuncha burilgan, burilish burchagi elementar burchakning yarmidan kichikdir.

Trapetsiedrlarning trigonal-olti yonli, trigonal dipiramidaga uxshash, tetragonal sakkiz yonli, tetragonal dipiramidaga uxshash, geksagonal un ikki yonli, geksagonal dipiramidaga uxshash xillari uchraydi. Bundan tashkari, ular enantimorf shakllar bulganligi uchun chap va ung kiyofada kurinadi.

Yukorida keltirilgan sodda shakllarning avval ta'riflangan beshtasi monoedr, diedr, pinakoidlar xamda rombik prizma, rombik piramida va rombik dipiramida simmetrik darajasi past bulgan tabaka kristallari uchun xosdir. Ular va ulardan keyingi xamma shakllar (kubik tetraedrdan tashkari) simmetriklik darajasi urtacha tabaka kristallari uchun xos shakllardir. Kubik singoniya sodda shakllarining tashki kiyofasi yukori darajali mavjud simmetriya uklari bilan belgilanadi. Kristallarning xar kaysi yoni shu singoniyada mavjud bir necha simmetriya uki atrofida takrorlanadi. Shuning uchun simmetriyalik darajasi yukori-kubik singoniyaga mansub kristallar uziga xos shakllarga ega. Ularni shu singoniyaning uzidagina kurish muki. Kubik singoniyada quyidagi sodda shakllar kuriladi:

tetraedr-teng, uxshash turtta teng tomonli uchburchakli yonlardan iborat shakl;

oktaedr-teng va uxshash sakkizta teng tomonli uchburchak yondan tuzilgan shakl. Bu yonlarning teng tomonli uchburchak kurinishida bulishi bilan tetragonal dipiramidadan fark kiladi. Tetragonal dipiramida esa sakkizta teng yonli uchburchak kiyofasidagi yonlardan iborat shakl edi.

Kub-geksaedrning murakkablashishidan xosil buladigan shakllar:

Tetragaksaedr-kubning xar kaysi tugri turtburchak kurinishdagi yonlarning xar biri turtlangan, ya'ni kichik kirralar bilan turtta uchburchaklikka bulingan.

Rombododekaedr-un ikkita romb kurinishidagi uxshash va teng yonlardan iborat shakl.

Pentagon dodekaedr-uxshash, teng un ikkita beshburchakli yonlardan tuzilgan shakl.
Didokaedr pentagon dodekaedrning xar kaysi yonlarining ikkilanishidan xosil bulgan shakl.
Tetraedr va uning murakkablanishidan iborat shakllar.

Trigon tritetraedr-tetraedrda ucburchak kurinishdagi yonlarning xar birining uchlanishi, ya'ni kichik kirralar bilan uchta ucburchaklikka ajralishidan xosil bulgan shakl.

Tetragon tritetraedr-bunda xam tetraedr yonlarining xar biri uchlangan, ya'ni kichik kirralar bilan uchta turtburchakka ajralgandir.

Pentagon tritetraedr-bunisida xam tetraedrning yonlari uchlangan, yonlarining xar biri uchtdan beshburchaklikka ajralgandir. U xam enantimorf shakl bulib, chap va ung kurinishlarda uchraydi.

Geksatetraedr-tetraedr yonlarining xar biri oltitadan, ya'ni oltita ucburchaklarga ajralgandir.

Oktaedr va uning murakkablanishidan iborat shakllar:

Trigontrioktaedr-oktaedrning ucburchaklik kurinishidagi xar bir yoni uchta ucburchaklikka ajratilgan, ya'ni uchlangandir.

Tetragontrioktaedr-bunda xam oktaedrning yonlari uchlangan, ya'ni uchta turtburchakliklarga ajralgan, bu xam yigirma turt yonli shakldir.

Pentagontrioktaedr-oktaedrning yonlari uchlangan-uchta besh burchaklikka ajralgan enantimorf shakldir. Shuning uchun chap va ung kurinishlari xam mavjud.

Geksaoktaedr-oktaedr yonlarining oltilanishi-kichik kirralar bilan oltita ucburchakliklarga ajralishidan xosil bulgan shakl.

Ba'zan, kristall yonlari chizikchalar bilan koplangan bulib, simmetriya vositalarinin aniklashda ularni xam e'tiborga olish kerak. Kubik singoniya kristallari yonlaridagi chizikchalarning xillari rasmda kursatilgandek, bular boshka-boshka sinflarga mansubdir.

Cimmetrik kurinishi va (klass) singoniyalar.

Kristallografiyada 47 oddiy shakllar ma'lum, ularning barchasi 32 simmetriya turi asosida jiddiy matematika uslublari bilan isbotlangan. Xar bir oddiy shakllar uzlariga xos kiyofaga simmetriya elementlariga va boshka xususiyatlariga ega.

Simmetriya kurinishlarining uxshashligiga karab ajratilgan gruppalari-singoniya (uxshash burchakli demakdir) deb ataladi. Shu bilan birga, xar kaysi singoniya uziga xos kristall shakllari va kristallarni tashkil etuvchi fazoviy panjara elementar yacheykasining kiyofasi bilan xam boshka singoniya kristallaridan fark kiladi. Singoniyalarning xammasi ettita bulib, ularning nomi fazoviy panjara-elementar yacheykasining-elementar paralleopepetlarning geometrik xususiyatlariga asoslanadi. Kuyida shu sinogiyalarning nomlari sanab utiladi.

Triklin singoniya. Nomi grekcha tri-uch va klin-kiyshik degan suzlardan tashkil topgan, chunki bu singoniya kristallarining elementar yacheykasi paralleopipedlarida kirralar orasidagi burchaklarning uchtasi xam tugri emas(900 ga teng emas).

Monoklin singoniya (grekcha-mono-bir). Elementar yacheykasi kirralari orasidagi buchakning ikkitasi tugri (900 li), uchinchi esa 900 ga teng emas.

Rombik singoniya. Bu singoniya kristallarining kupchiligida ikkinchi darajali simmetriya ukiga tik olingan kundalang kesimi romb kurinishda bulganligi uchun shunday nom berilgan.

Trigonal singoniya.

Tetragonal singoniya.

Geksagonal singoniya.

Bu sungi uch singoinyaning nomi shu singoniya kristallarining uziga xos simmetriyalik darajasiga karab berilgan.

Kubik singoniya. Bu singoniya kristallarining elementar yacheykasi kub shaklida buladi.

Yukorida sanab utilgan sinogniyalar simmetriklik darajasiga karab kuyidagicha uchta kategoriyaga: I simmetriklik darajasi past bulgan kategoriya: II simmetriklik darajasi urtacha va III simmetriklik darajasi yukori bulgan kategoriyalarga bulinadi.

Shenflis belgilarida C_1 , C_2 , C_3 , C_5 , va C_6 kabi yozilgan ishoralar simmetriya kurinishlarda (kursatilgan darajali) bittadan kutblanmagan simmetriya uklari borligini bildiradi. Shu uklarga perpendikulyar yunalgan simmetriya tekisligi (gorizontal) mavjud bulsa, u shu belgilarga kushib C_{2h} ; C_{3h} ; C_{4h} ; C_{6h} kabi yoziladi. Natijada usha simmetriya ukclariga parallel yunalgan simmetriya tekisliklari kuyidagicha kushimcha σ (vertikal) indeksi bilan belgilanadi va S_{2v} ; C_{3v} ; C_{4v} ; va C_{6v} kurinish kabi yoziladi. Monoklin singoniyadagi uksiz diedrik simmetriya C_s kurinish shaklida ifodalangan. Bundagi σ (spigelaxe-kuzgu) simmetriya tekisligi borligini

kursatadi. Kutiblangan simmetriya uklari va unga perpendikulyar yunalgan ikkinchi darajali uklarning soni quyidagicha yoziladi: D/Dieder- ikki yondan iborat degan ma'no anglatuvchi nemischa suz bosh xarfi (D2; D3; D4; D6;). Rombik singoniyadagi D2 simmetriya kurinishi ba'zan V shaklida yoziladi. Shu belgilarga h xarfining kushib yozilishi bu klasslarda xam singoniya tekisligi, xam ikkinchi darajali simmetriya uklari mavjudligini anglatadi. Rombik singoniyadagi D2h ba'zan Vh kabi kursatiladi.

Tetragonal-skalenoedrik va ditrigonal skalenoedrik klasslari D2d (yoki Vd) xam D3d ishoralari bilan kursatiladi. Bunda simmetriya tekisligini simmetriya ukiga nisbatan xolati (d-diagonal) xisobga olingan 2 va 3 darajali (inversion) simmetriya ukli simmetriya kurinishlari S4 va S6 shaklida tasvirlangan.

Shuningdek, romboedrik simmetriya kurinishi boshkacha-3i kurinishida ifodalanishi xam mumkin, chunki bunda simmetriya markazi bilan xarakterlanadigan spin akoidal simmetriya kurinishi Ci shaklida yoziladi. Kubik singoniya simmetriya kurinishlari belgilarida T (tetraedr) O (oktaedr) xarflari ishtirok etadi va zarur urinlarda ularga jadvalda kursatilganidek h va d xarvlari kushib yoziladi.

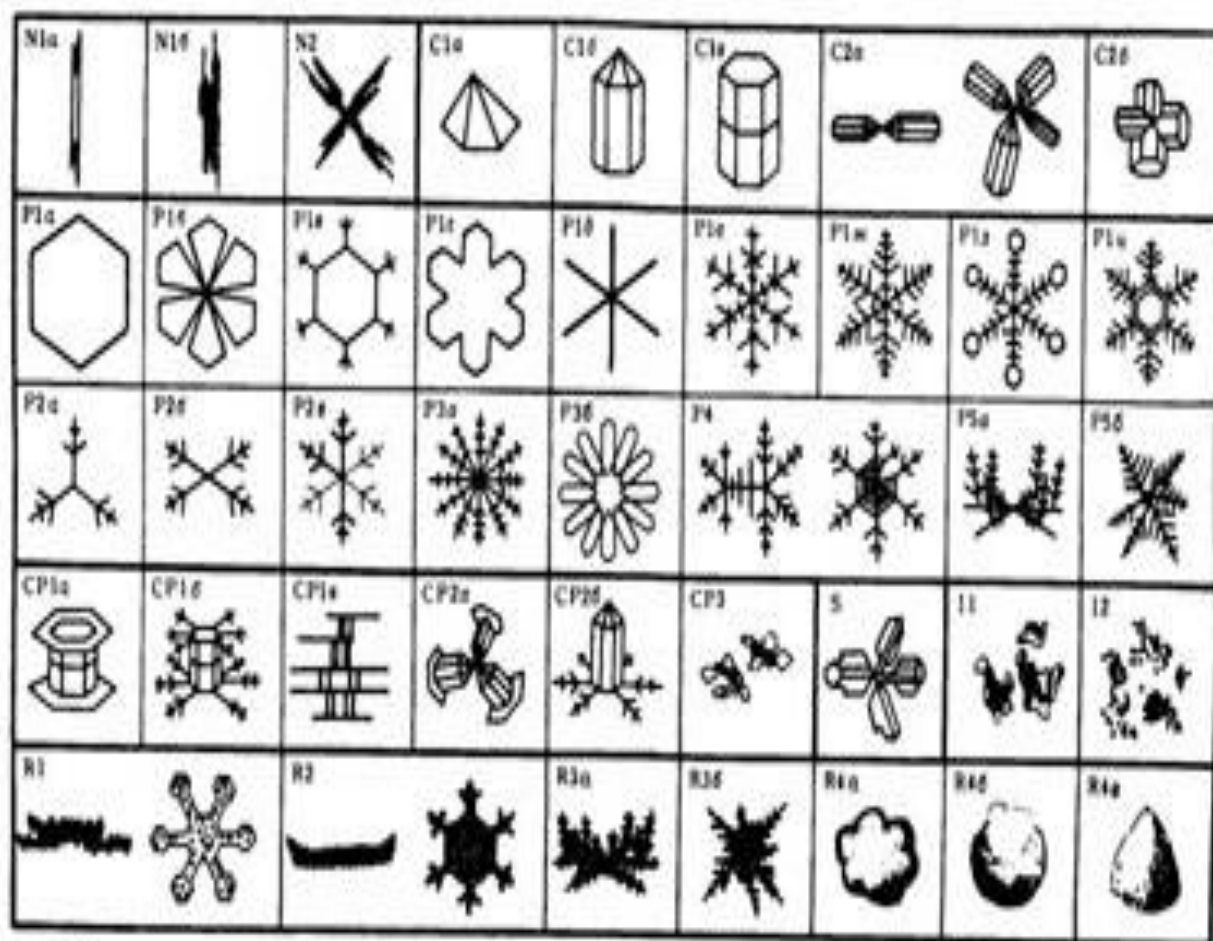


Рис. 2-41.

Общая классификация снежинок по Накайя [16]. Воспроизводится с разрешения.

ТАБЛИЦА 4

Таблица 32 видов симметрии

Категория	Сингония	Виды симметрии						
		примитивный	центральный	плоскостный	осевой	плоскоосевый	инверсионно-примитивный	инверсионно-плоскостный
Низшая	Триклинная	1 L_1	2 C					
	Моноклинная			3 P	4 L_2	5 L_2PC		
	Ромбическая			6 L_2^2P	7 $3L_2$	8 $3L_2^2PC$		
Средняя	Тригональная	9 L_3	10 L_3C	11 L_3^2P	12 $L_3^2L_2$	13 $L_3^2L_2^2PC$		
	Тетрагональная	14 L_4	15 L_4^2PC	16 L_4^2P	17 $L_4^2L_2$	18 $L_4^2L_2^2PC$	19 L_4^2	20 $L_4^2L_2^2P$
	Гексагональная	21 L_6	22 L_6^2PC	23 L_6^2P	24 $L_6^2L_2$	25 $L_6^2L_2^2PC$	26 $L_6^2=L_3^2P$	27 $L_6^2L_2^2P = L_3^2L_2^2P$
Высшая	Кубическая	28 $4L_3^23L_2$	29 $4L_3^23L_2^2PC$	30 $4L_3^23L_2^2P$	31 $3L_4^24L_2^2L_3$	32 $3L_4^24L_2^2L_3^2PC$		

Примечание. Инверсионные оси третьего порядка в таблице не указаны. Они присутствуют в 10- и 13-м видах симметрии. В кубической сингонии инверсионные оси вообще не указаны. В тексте и в остальных таблицах наименование видов симметрии дано по В. С. Федорову.

Molekulalardagi atomlarning joylashishi ma'lum simmetriyaga ega. Mazkur sistemaning simmetriya xilini bilish molekulaning fazoviy buzilishini, turli (optik, elektrik va boshqalar..) xossalari aniqlash, analiz qilish va oldindan aytib berish uchun xizmat qiladi. Simmetriya elementlarini aniqlash to'g'risidagi gap yuritilayotgan paytda molekularni nuqtaviy kattaliklarga ega bo'lgan sistema deb qaralishi mumkin.

Simmetriya operatsiyasi deb, shunday matematik operatsiyaga aytiladiki, uni amalga oshirish natijasida molekulaning konfiguratsiyasi van a xususiyatlari o'zgaradi. Asosiy simmetrik operatsiyalariga aylantirish, aks ettirish kiradi.

Simmetriya tekisligi deb, molekula bu ntekislikda aks ettirilganda uning holati o'zgarmay qoladigan tekislikka aytiladi. Masalan, suv molekulasida bitta simmetriya tekisligiga ega. Eten molekulasida esa bir –biriga perpendikulyar bo'lgan ikkita simmetriya tekisligiga ega. Simmetriya tekisligi σ –orqali belgilanadi.

Simmetriya elementining ikkinchi hili – aylanish o'qidir. Aylanishning simmetriya o'qi deb molekulani φ burchakda burganda u o'zini dastlabki xolatiga qaytishini ta'mirlovchi chiziqlikka aytiladi. Simmetriya o'qi har hil bo'ladi. O'qining har biriga molekulani 360° ga aylantirganda u necha marta o'z dastlari holatiga ayniy holatga o'tishini ko'rsatadi. Suv molekulasida ikkinchi tartibli simmetriya o'qiga ega. Simmetriya o'qi C xarfi bilan ifodalanadi, indeks sifatida uning tartibi ko'rsatiladi. C_n – n – chi tartibli simmetriya o'qi. Suv uchun $n=360/180=2$. ammiak molekulasida uchun $n=3$ ga teng: $360/180=3$ va h.k. NH_3 molekulasida C_3 dan tashqari yana 3 ta simmetriya tekisligi bo'lib, ular NH bog'lari va qarama – qarshi tomondagi katetning yarmi orqali o'tadi.

Uchinchi xil simmetriya element – simmetriya markazidir. Material nuqtalar sistemasining simmetriya markazi deb barcha nuqtalarni aks ettirgan paytda sistemaning holati dastlabki holatga o'xshash bo'lishini ta'minlaydigan nuqtaga aytiladi.

Trans -1,2 – dixloretilenning simmetriya markazi bor, dis 1,2 – dixloretilen esa simmetriya markaziga ega emas.

Cimmetriya markazi i harfi bilan ko'rsatiladi. Molekulada bo'lishi mumkin bo'lgan simmetriya elementlaridan yana biri “burib aks ettirish” simmetriya elementidir. Buning uchun molekulani avval ma'lum φ burchagiga buramiz va so'ngi struktura elementlarini ma'lum tekislikda aks ettiramiz.

MA'RUZA № 7

MOLEKULALARNING ELEKTR XUSUSIYATLARI ULARNING MUSBAT ZARYADLANGAN YADROLAR VA MANFIY ZARYADLANGAN ELEKTRONLARDAN TASHKIL TOPGANLIGI

Reja:

Elektrik xususiyatlarning namayon bo'lishi.

Molekulalarning qutblanuvchanligi.

Molekulalararo ta'sir turlari.

Vodorod bog'lar

Klatrat birikmalar

Moddalarda kimyoviy bog'lardan tashqari molekulalararo ta'sir xam mavjuddir. Bu xildagi ta'sir sababli moddalar sovutilganda kondensatsiyalanadi va suyuq, so'ngra esa qattiq xolga o'tadi. Moddaning bug'lanish vaqtida yo'tgan yashirin bug'lanish energiyasi xosil bo'layotgan bug'ning bajarishi uchun kerak bo'lgan kengayish energiyasidan katta bo'lishi qattiq modda suyuqlanayotganda issiqlikning yutilishi ana shu ta'sirlar tufayli bo'layotganligini ochiq oydin ko'rsatadi. Molekulalararo ta'sir 3 xil bo'ladi:

Orientatsion ta'sir (Keezam 1921 yil)

Induktsion ta'sir (Debay kuchlari 1920 yil)

Dispersion ta'sir (London 1930 y)

Orientatsion ta'sir molekulalarda doimiy dipol momenti mavjudligi bilan bog'liq. Bir xil dipollar

uchun energiyasi $U = -\frac{2}{3} \frac{\mu_0^4}{kTr^6} \mu_0$ -molekulaning dipol momenti.

Agar 2 xil dipollar ta'sir qilayotgan bo'lsa $U = -\frac{2\mu_2^2\mu_2^2}{3kTr^6}$

$E_2 < E_1$ bo'lganligi uchun dipollar o'zaro mos ravishda orientatsiyalanib, o'z energiyasini kamaytiradi, sistema barqarorlashadi.

Induktsion ta'sir, Uni ba'zan polyarizatsion ta'sir deb xam yuritiladi.

$$U = -\frac{\alpha\mu_0^2}{r^6}$$

Misol: atseton va benzol aralashmasini ko'raylik. Atseton qutbli modda $\mu_0 \neq 0$. Benzol qutbsiz, simmetrik tuzilishga ega bo'lgan birikmadir.

Ko'rinib turibdiki $E_2 < E_1$ dan. Shuning uchun induktsion ta'sir moddalarning aralashmasi xosil bo'lishiga olib keladi. Eng oxirgi formulada α -qutblanayotgan molekulaning qutblanuvchanligi. Bizning misolimizda α benzolga taalluqli.

Qutblovchi molekula – atseton doimiy dipol momentini qiymati.

Dispersion ta'sir (London kuchlari) xar qanday molekulalarga hos. U elektronning molekuladagi yadrolar yaqinida aylanishi bilan bog'liq.

$$U_{\text{двеч}} = -0,68 \frac{he \alpha \frac{3}{2} \sqrt{n}}{2 \pi m^2 r^6}$$

n-molekuladagi elektronlar soni, e-elektronlarning zaryadi, $\pi\pi$ -molekulaning elektron qutblanuvchanligi, m-elektronning massasi, r-ta'sir qilishayotgan molekulalar orasidagi masofa. 1930 yillarda London sferik elektr maydoniga ega bo'lgan geliy misolida dispersion ta'sir energiyasi uchun quyidagi formulani berdi:

$$U_{\text{двеч}} = - \frac{3 \alpha^2 h v_0}{4 r^6}$$

Bu erdan $h v_0$ xar bir atom va molekulaga xos bo'lgan energiya $v_0 = 10^{15}$ ЦИКЛОВ/СЕК. London kuchlari molekulalar yoki atomlar juftlarida xosil bo'ladi va bu kuchlar sistema uchun additivlik xossasiga ega.

$$U_{\text{y.m}} = - \frac{A}{r^6}; A = \left(\frac{2 \mu_0^4}{3 R T} + \alpha \mu^2 + 0.68 \frac{he \alpha \sqrt{n}}{2 \pi m^2} \right); U_{\text{y.m}} < 0$$

Demak bu kuchlarning xammasi tortilish kuchlari, ular attatsion ta'sir deyiladi. agar molekulalar o'zaro yaqinlashganda itarilish kuchlarining paydo bo'lishini xisobga olsak, uni $\square U_{\text{umap}} = \frac{B}{r^{12}}$ deb qabul qilamiz. Shtor-Renulsiv ta'sir deyiladi. Renulsiv ta'sir tortilish energiyasiga qaraganda masofa o'zgarishiga kuchlirog' bog'liqdir.

Moddalarning elektr xususiyati asosida ularning musbat va manfiy zaryadlangan zarrachalardan tashkil topganligi yotadi. Xamma atomlar va molekulalar ionlanish qobiliyatiga ega. Ionlanish potentsiali deb normal xolatda turgan elektroneytral atomidan bitta (birinchi) elektronni uzib chiqib ketish uchun kerak bo'lgan va elektron voltlar (eV) da o'lchanadigan energiyaga aytiladi. Metallarning ionlanish potentsiali metalmaslarnikidan kichik bo'ladi. Shuning uchun ular kuchli qaytaruvchilar xisobnadilar.

Atomlar manfiy zaryadlangan xolga xam o'tishi mumkin. Buning uchun ular bitta ortiqcha elektronni qo'shib olishlari kerak. Shunday jarayon vaqtida ajralib chiqadigan energiyaga ushbu atomning elektronga moyilligi deyiladi. Biror elektromagnitning atomi uchun bu ikkita kattalikning yig'indisi elektromafiylik deyiladi. Va u x (ksi) xarfi orqali ifodalanadi. $X(Li) = 5.61 \text{ eV}$ elektromanfiylikning birligi deb qabul qilingan. Shunga binoan.

$$x(A) = \frac{|(A) + E(A)|}{5.61} \quad \text{formulasi bo'yicha topiladi.}$$

Ionlanishni amalga oshirishning qator usullari ma'lum. Termik ionlanish, elektr maydon ta'sirida va elektron to'lqinlanishi tufayli ionlanish, fotonlanish va boshqalar.

MOLEKULALARNING QUTUBLANUVCHANLIGI.

Agar elektr kondensator plastinkalari orasiga biror dielektrik kiritilsa, plastinkalarning elektr sig'imi ϵ marta ortadi. $C = \epsilon C_0$ $\epsilon(\text{Havo}) = 1$, $\epsilon(\text{He}) = 1,05$, $\epsilon(\text{H}_2\text{O}) = 79.5$, $\epsilon(\text{HCN}) = 95.0$ va x.k. Kondensator plastinkalari o'rtasida vakuum bo'lganda ($\epsilon = 1$) maydon kuchlanishiligi ϵ_0 deylik. Agar plastinkalar orasiga biz tekshirayotgan modda kiritilsa va uning dielektrik doimiyligi ϵ (epislon) ga teng bo'lsa, kondesator plastinkalari orasidagi elektr kuchlanishlik ϵ marta kamayadi, ya'ni $\epsilon = \epsilon_0 / \epsilon$ bo'ladi. Bunda $\epsilon_0 = \epsilon \epsilon (1)$

Maydon kuchlanishligi $\pi 0$ moddaning ushbu maydon ta'sirida qutblanishi $\vec{P}$ xisobiga kamayadi va bu kamayish dielektriklar nazariyasiga binoan $4\pi \vec{P}$ ni tashqil qiladi. Demak, ϵ ni ϵ_0 ga tenglash uchun unga $4\pi p$ ni qo'yish kerak:

$$\epsilon_0 = \sigma + 4\pi \vec{P} \quad (2)$$

$$(1) \text{ va } (2) \text{ dan } \epsilon E = E + 4\pi \vec{P}; \quad \vec{P} = \frac{\epsilon - 1}{4\pi} E \quad (3)$$

Moddaning umumiy (makroskopik) qutblanishi $\vec{P}$ ayrim molekulalarning qutblanishining yigindisidan iborat: $\vec{P} = N_1 \vec{P}_0$. Bu eda $N_1 \cdot 1\text{cm}^3$ xajmdagi moddani tashkil qiluvchi molekulalar soni P_0 –xar bir molekulaning qutblanish qiymati. Kondensator plastinkalari orasidagi istalgan bitta molekulaga tashqi π maydongina ta'sir qilib qolmasdan, balki molekulamizni o'rab turgan ichki lokal molekulyar maydon xam ta'sir qiladi. Qo'shni molekulalar tashqi elektr maydoni ta'sirida orientatsiyalangan xolda bo'lganligi uchun ular tashqi maydonga o'z xissasi bilan qo'shiladi. Shuning uchun tanlab olingan molekulalarga ta'sir qilayotgan effektiv maydon $\epsilon_{\phi\phi} > \epsilon$. Nazariy xisoblashlar yo'li bilan aniqlanganki

$$A_{\phi\phi} = A + \frac{4\pi}{3} \vec{P} \quad \pi 4)$$

Nazariyaga binoan bitta molekulaning qutblanishi P_0 uning qutblanuvchanligi α va unga ta'sir qilayotgan elektr maydonining kuchlanishligiga to'g'ri propartsional.

$$\vec{P}_0 = \alpha E \quad (5)$$

α - intensivlik faktori;
 E – ekstensivlik faktori.

$$\text{Bizning misolda } A_{\phi\phi} = A + \frac{4\pi}{3} \vec{P}$$

Demak

$$\vec{P}_0 = \alpha E = \alpha \left(E + \frac{4\pi}{3} \vec{P} \right) \quad (6)$$

Bu erdagi $\vec{P} = \frac{A-1}{4\pi} A$ edi. $\vec{P}$ va $\vec{P}_0$ o'rtasida quyidagi bog'lanish mavjud edi.

$$\vec{P} = N_1 \vec{P}_0; \quad \vec{P}_0 = \frac{\vec{P}}{N_1} = \frac{E-1}{4\pi} E \cdot \frac{1}{N_1} = \frac{E-1}{4\pi N_1} E \quad (7)$$

Demak (6) ga binoan (7) va (3) ni xisobga olgan xolda yoza olamiz:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_1} \frac{E-1}{4\pi} E &= \alpha \left(E + \frac{4\pi}{3} \vec{P} \right) = \alpha \left(E + \frac{4\pi}{3} \cdot \frac{E-1}{4\pi} E \right) = \alpha \left(1 + \frac{E-1}{3} \right) E \\ &== \alpha E \left(\frac{E+2}{3} \right); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{N_1} \cdot \frac{E-1}{4\pi} &= (E+2) \frac{\alpha}{3} \\ \frac{E-1}{E+2} &= \frac{4\pi N_1 \alpha}{3} \quad (8) \end{aligned}$$

1 sm³ xajmda N_1 ta molekula bor bo'lsa $V_{\text{mol}} = M/d$ xajmda N_A ta molekula bor bo'ladi.

$$N_1 \frac{M}{d} = N_A : N_1 = N_A \frac{d}{M}$$

Demak

$$\frac{E-1}{E+2} = \frac{4\pi}{3} \frac{N_A d}{M} \alpha \quad \text{ёки} \quad \frac{E-1M}{E+2d} = \frac{4\pi N_A}{3} \alpha \quad (9)$$

(9) – Klauzius-Mosotti tenglamasi deyiladi. Unda $\alpha=f(1/d)$ chiqadi. Demak, temperatura ortgan sari d kamayganligi tufayli moddaning qutblanuvchanligi α ortadi. Qutblanuvchanlik modda zichligiga teskari proportsional va dielektrik doimiylikka bog'liq, chunki $\frac{E-1}{E+2}$ birga teng emas. Keltirib chiqarilgan va yuqorida aytganimizdek Klauzius-Mosotti nomi bilan yuritiladigan tenglama moddalarning elektr maydonidagi xolatining tekshirish, qilish yo'li bilan aniqlanar ekan.

NAZORAT SAVOLLAR.

Moddalarning elektr xususiyatlari nimadan iborat.
Nima sababdan bacha atom va molekulalar ionlanish kobiliyatiga ega.
Kachon atom manfiy zayadlangan xolatga o'tadi.
Elektromanfylik nima.
Kanday sharoitda malekulalar qutblanadi.
Qutblanish jarayoni kanday namoyon bo'ladi.
molekulalarning eektrik xususiyatlarini o'rganish nima uchun Klauzius Mosotti tenglamasidan foydalaniladi.

TAYANCH IBORALAR.

Molekular elektonlari energiyasi.
Dipol momenti.
Bog'lanish energiyasi.
Molekula simmetriyasi.
Molekular tebranma energiyasi.
Elekton xolatlar.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

MA'RUZA № 8

TASHQI ELEKTR MAYDONIDA MOLEKULALARNING ORIENTASION, ATOM VA ELEKTRON QUTBLANUVCHANLIGI.

Reja:

Moddalarining qutblanuvchanligi
Atom qutblanishi.

Moddalarining qutblanuvchanligi α uch qismatdan iborat:

Tashqi maydon ta'sirida molekullardagi elektronlarning yadroga nisbatan muvozanat xolatidan siljish. Bunday qutblanish induktsiyalangan dipol momentining paydo bo'lishiga olib keladi. $\mu_{\text{инд}} = \alpha_{\text{эл}} A$; $\alpha_{\text{эл}} \neq f(T)$ ya'ni temperaturaga deyarli bog'liq emas, ya'ni ular juda engil zarrachalar bo'lganliklari uchun $T = 0^0\text{K}$ ga yaqin temperaturadayoq, ular juda tez xarakat qiladi.

ATOM QUTBLANUVCHANLIK.

Elektr maydoni vositasida elektronlarning qutblanishi yadrolarning bir-biriga nisbatan, siljishiga olib keladi.

Doimiy dipol momenti (μ_0) ga ega bo'lgan molekulaning tashqi maydonda ma'lum yo'nalishga ega bo'lib joylashishi orientatsion qutblanuvchaelik π or ga bog'liq. Demak, $\alpha_{\text{ym}} = \alpha_{\text{эл}} + \alpha_{\text{op}}$ $\alpha_{\text{op}} = f(T)$ (1)

(1)-ni Klauzis-Mosotti formulasiga olib borib kuysak $\frac{E - 1}{E + 2} \frac{M}{\alpha} = \frac{4\pi N_A}{3} (\alpha_{\text{эл}} + \alpha_{\text{ac}} + \alpha_{\text{op}}) = P$

P - umumiy qutblanish

$\frac{4\pi N_A}{3} \alpha_{\text{am}} - P_{\text{атом}} ; \frac{4\pi A}{3} \alpha_{\text{op}}$ ba $\frac{4\pi A}{3} \alpha_{\text{эл}} = R(\text{рефракция})$ deb belgilaylik.

Yorug'likning eletromagnit nazariyasiga binoan $A = n^2$ (Maksvell formulasi)

$\frac{n^2 - 1}{n^2 + 2} \frac{M}{d} = R$ Lorens- Lorentz formulasi deyiladi.

Elektr maydoni sifatida yorug'likdan foydalanayotgan bo'lsak bunday maydonning chastotasi $\gamma = 10^{15}$ ga teng. Bunday maydonda na atomlarning, na molekulaning qutblanishi ro'y bera oladi. Chunki ularning massasi elektronnikidan minglarcha marta katta.

Shuning uchun bunday maydonda faqat elektronlarning qutblanishigina, ya'ni refraksiya kuzatiladi.

ATOM QUTBLANISHI.

Atom qutblanish atomlar va atom strukturalarining tebranishi natijasida ro'y beradi. Buning uchun chastotasi nisbatan uncha katta bo'lmagan IK nurlardan foydalaniladi. Lekin umuman P_{at} qiymat jixatidan uncha katta emas. Klauzius-Mosotti formulasidan P ning o'lchov birligi xajm ekanligi ko'rib turibdi. Shunga binoan o'lchashlar o'tkazilganda:

$P_{\text{at}}(\text{geksan}) = 0,26 \text{ sm}^3/\text{mol}$ $P_{\text{at}}(\text{suv}) = 3,2 \text{ cm}^3/\text{mol}$

ekanligi aniqlangan. ($P_0 = \alpha E$; $\alpha = P_0/E = \frac{cl}{\frac{c}{l^2}} = l^3$ (xajm)

Ammo xloranil deb ataluvchi modda uchun $P_{\text{at}} = 15 \text{ cm}^3/\text{mol}$ chiqqan. Bu erda qutbli xossaga ega bo'lgan C=O qutbli gruppachalar deformatsion tebranma xarakatga kuchli darajada molik deb qaraladi.

Ko'pchilik moddalar uchun $\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 2} \frac{M}{d} > \frac{n^2 + 1}{n^2 + 2} \frac{MM}{d} = P_{\text{эл}} = R$ dan buning sababi $\vec{P}$ ga $\vec{P}_{\text{op}}$ va P_{at} larning sezilarli xissa qo'shishidadir.

Doimiy ega bo'lgan molekularlar uchun Debay $\alpha_{\text{ф}}$ bilan μ_0 o'rtasida quyidagicha bog'lanish borligini ko'rsatdi.

$\alpha_{\text{op}} = \frac{\mu_0^2}{3RT}$; $\mu_0 = e l_0$ — qutbli molekulaning doimiy dinol momenti. $K = R/N$ — Bolsman

doimiyliqi.

Bundan T-absolyut temperatura, K

$$\frac{\varepsilon - 1M}{\varepsilon + 2\alpha} = \frac{4\pi N_A}{3} \left(\alpha_{am} + \alpha_{\text{эл}} + \frac{\mu_0^2}{3KT} \right) \text{ Klazius-Mosotti-Debay formulasi.}$$

Bu formuladan foydalanib μ_0 ni topish mumkin. chunki, chunki $\mu_0=0$ bo'lgan xollar uchun $P=f(T)$.

Dipol momentini analitik usulda topish K-M-D formulasini ikki xil (T_1 va T_2) temperaturalar uchun yozamiz:

$$P_1 = \frac{4}{3}\pi N \left(\alpha_{\text{эл}} + \alpha_{am} + \frac{\mu_0^2}{3KT_1} \right) \quad P_2 = \frac{4}{3}\pi N \left(\alpha_{\text{эл}} + \alpha_{am} + \frac{\mu_0^2}{3KT_2} \right)$$

$$P_2 - P_1 = \mu_0^2 \left(\frac{1}{3KT_2} - \frac{1}{3KT_1} \right) \frac{4}{3}\pi N \quad \mu_0^2 = \frac{3(P_2 - P_1)}{4\pi N_A \left(\frac{1}{3KT_2} - \frac{1}{3KT_1} \right)}$$

$$\mu_0^2 = \sqrt[3]{\frac{KT_1 T_2 (P_2 - P_1)}{4\pi N (T_1 - T_2)}}$$

analitik usul tez bajarilsa xam, T ning atigi ikkita qiymati uchun xisoblanganligi sababli aniqlik aytarliq darajada yuqori bo'lmaydi.

Dipol momentini grafik usulda topish bunday kamchilikdan ancha xoli bo'ladi.

$$P = \frac{3}{4}\pi N \left(\underbrace{\alpha_{am} + \alpha_{\text{эл}}}_{\alpha_o} + \frac{\mu_{03}^2}{3KT} \right) = \underbrace{\frac{3}{4}\pi \alpha_o}_A + \underbrace{\frac{3}{4}\frac{\pi N}{3KT}\mu_0^2}_B$$

$$B = \frac{\Delta P}{\Delta \left(\frac{1}{T} \right)} = \frac{4\pi N}{33K}\mu_0^2 \quad \mu_0 = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{K}{\pi N}}$$

afikdan ko'rinadiki nazariya bilan mos ravishda qutbsiz moddalarning qutblanuvchanligi temperaturaga bog'liq emas. Chunki ularda temperatura ta'siri kuchli ravishda berilgan. $P_\phi=0$

Temperaturaga bog'liq, temperatura ortishi bilan kamayadi. Buni nazariy izoxlash mumkin.

Qutbli moddalarning qutblanishi qutbsiznikidan P_{or} xisobiga kattaroq bo'ladi.

Qutblanish tabiiyki moddaning agregat xolatiga bog'liq.

Misollar

	$P_{(газ)}$	$P_{(суюқ)}$
CH_3COOCH_3	176	63
CH_3I	77	42
$C_2H_5OCH_3$	62	52

Moddalarni suyuq agregat xolatda tekshirayotganda to'g'ri natija olish uchun ularni qutbsiz erituvchilarda eritib, eritma suyuq eritmalari uchun P ni o'lchab so'ngra C-1 gacha ekstropolyatsiya qilish mumkin.

Turli moddalarning refraksiyasini topish - molekulalarining elektron qobig'ining tuzilishi va o'ziga xos tomonlarini chuqurroq o'rganishga yordam beradi.

Refraksiya temperaturaga bog'liq emas. Agar $1 \cdot 10^{-24} \text{ cm}^3 = 1R$ deb shartli ravishda belgilasak: H_2O uchun $0^\circ C - 37,15R$; $20^\circ C - 3,715R$. Refraksiya atom sistemalarining tuzilishiga va atomlarning radisiga bog'liq.

H-0.67	He-0.20	Li-12.0 10^{-24}CM^3
Is	Is ²	Is ² 2s
J-4.961	Xe-4.15	Cs-42.0 10^{-24}CM^3
H ₂ -0.81	J ₂ -16.3	

$R(\text{H}_2) < 2R(\text{H})$ yoki $R(\text{I}_2) > 2R(\text{I})$

Demak molekullarda elektronlar atomdagiga qaraganda mustaxkamrok bog'langan. J₂ molekulasi xosil bo'lishi elektronlarning xarakatchanligini oshiradi va moddalarda metallik xususiyati paydo bo'ladi.

Izoelektron qator uchun refraksiya:

1-kator электрон -10	Ne-1.0	HF-1.9	H ₂ O-3.715	NH ₃ -5.67
2-kator-18 электрон	Ar-4.2	HCL-6.7	H ₂ S-9.57	PH ₃ -11.7

Asl gazlarning refraksiyasi minimal, chunki elektronlar birgina markaz ta'siri doirasida. Ko'p markazli molekullar (H₂O, H₂S, NH₃) da refraksiya kattaroq, chunki elektronlarning siljiy olish qobiliyati kuchliroq.

REFRAKSIYANING ADDITIVLIGI VA EKZALTATSIYASI.

Refraksiyaning additivligi uni molekullarning tuzilishi o'rganishda ishlatishga yo'l ochadi. Refraksiyani molekuladagi atomlarning yoki bog'larning refraksiyasini additivligi ayniqsa ion bog'iga ega bo'lgan moddalar uchun yaxshi natijalar beradi, chunki ionlarda elektronlarning xolati aniq kationdan to'la-to'kis anion xisobiga o'tgan bo'ladi. Tabiiy ionlarning refraksiyasi kationlarnikidan ancha katta bo'ladi:

		O ²⁻ -2.74	S ²⁻ -8.94	Se ²⁻ -11.4	Fe ²⁻ -16.1
H ⁻	F ⁻	CL ⁻	Br ⁻	I ⁻	
10.18	0.96	3.60	5.0	7.60	H ₂ O-3.715
Na ⁺	Li ⁺	K ⁺	Rb ⁺	Cs ⁺	H ₃ O ⁺ -3.04
0.19	0.03	0.89	1.50	2.60	NH ₃ -6.67
Be ²⁺	Mg ²⁺	Ca ²⁺	Sr ²⁺	Ba ²⁺	NH ₄ ⁺ -4.2
0.008	0.10	0.55	1.02	1.86	

Gomeopolyar qutbsiz va qutbli brikmalarga o'tgan paytda refraksiyani atomga emas, kimyoviy bog'ga nisbatan ifoda qilish to'g'riroq bo'ladi, chunki bu xollarda atomlarning qaysi tartibda bog'langanligiga qarab ularning o'zaro ta'siri to'g'ridan-to'g'ri xisobga olinadi. Masalan, dimetil efir bilan etil spirti o'zaro izomer. Lekin molekullarning tuzilishi xar-xil ---- CH₃-O-CH₃ va CH₃-CH₂-OH. Aniq ko'rinib turibdiki, masalan O atomining «qo'shilishi» 2 ta molekulada 2 xil.

Bog'larning refraksiyasi:

C-H 1.705	C≡C 60.25	C-F 1.60
N-H 1.88	N-C 1.54	C-CL 6.57
C-C 1.209	O-C 1.51	C-I 14.51
C=C 4.15	O=C 3.38	

Refraksiyadan faqat molekullarning tuzilishigina emas ulardan kimyoviy bog'larning tabiatni aniqlashda ham foydalanish mumkin.

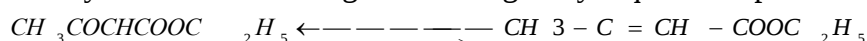
Aytaylik CO₂ molekulasi C⁺⁴ va 2O⁻² ionidan tuzilgan bo'lsin: O⁻²=C⁺⁴=O⁻². U xolda $R(\text{CO}_2) = 0.0034 + 2 \cdot 9.88 = 19.76$ bo'lishi kerak. Tajribada 6,71 topildi. Demak bog'lar ionli emas,

kovalent qutbli bog'lardir. Refraksiya bog'ning mustakamligidan dalolat beradi: refraksiya qanchalik katta bo'lsa, bog' shunchalik nomustaxkam bo'ladi.

Refraksiya modda tuzilishini aniqlashda xam qo'l keladi. Aytaylik analiz natijasida moddaning empirik formulasi C_6H_6 ga to'g'ri keladi. Bunday tarkibga

1. Divinilatsetelin- $CH_2=CH-C\equiv C-CH\equiv CH_2$

2. Bezol C_6H_6 to'g'ri kelishi mumkin. Xisoblaymiz $R(ДВА)=27.36$ $K(бензол)=26,37$. $R(тажриба)=26,19$ olingan natija benzol uchun olingan qiymatga yaqin, demak modda benzol. Keto-enol tautometriyada xar bir shakldagi moddaning molyar qismini topish:



CO

Muvozanat konstantasi $K_{\vartheta - \kappa} = \frac{N_{\vartheta}}{N_{\kappa}}$ N - molyar qism

$$R_{(аралашма)} = R_k N_k + R_3 N_3 = 32,00 = 31,68x + 32,75(1-x)$$

Tenglamani x ga nisbatan echib, N_k va $N_3=(1-N_k)$ ni so'ngra $K_{k-elementar}$ topish mumkin.

REFRAKSIYANING EKZALTATSIYASI.

Ekzaltatsiya deb $\Delta R = R_{тажриба} - R_{адд}$ ga aytiladi. Ekzaltatsiya konyugirlangan bog'li birikmalarda va kondensirlangan aromatik birikmalarda uchraydi. Undan tashqari egzaltatsiya molekula izomerlarining tuzilishiga bog'liq. Agar qo'shbog'lar konyugirlanmagan bo'lsa, egzaltatsiya bo'lmaydi.

Ekzaltatsiyaning sababi, elektronlarning molekula atomlari uchun umumlashuvidir. Bu delokalizatsiyaga olib keladi va xarakatchanlik, qutblanuvchanlikni oshiradi.

NAZORAT SAVOLLAR.

Induktsiyalar dipol momenti kanday paydo bo'lgan?

Atomning qutblanishiga elektr maydoni ta'sir qiladimi?

Nima uchun molekulaning qutblanuvchanligiga Klauzius Mosotti formulasi tadbik etilgan?

Kachon atom qutblanadi?

Qutblanishga temperaturining kanday ta'siri bor?

Qutblanish moddaning agregat xolatiga bog'liqlikmi?

TAYANCH IBORALAR.

Molekulaga tashki elektr ta'sir

Kovalent bog'lanish

Atom qutblanuvchanlik

Agregat xolat.

Dipol momenti

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

MA'RUZA № 9

*MOLEKULA TASHQI MAGNIT MAYDONIDA.

Reja:

Yadroning mexanik ahamiyati.

Turli xil shakldagi yadrolar.

Mexanik moment bilan spin kvant soni orasidagi bog'liqlik.

Magnit dipol momenti.

Atomlarning yadrolari massa va zaryadidan tashqari yana uchinchi bir kattalik-mexanik moment bilan xarakterlanadilar. Zaryad va massa - yadroning nuqtaviy xossaligidir. Ular yadroning geometriyasiga bog'liq emas. Mexanik moment esa yadroning katta-kichikligi bilan massaning fazoda yadro xajmidagi yadro doirasida taksimlanish bilan bog'liq. Massa va zaryad yadroning atrof-muxit bilan kuchli ta'sirlashuvda namoyon bo'lsa, mexanik moment esa kuchsiz ta'sirlarda namoyon bo'ladi.

Atomlarning yadrolari protonlar va neytronlardan iborat. Bu zarralarning har biri $\frac{1}{2}$ ga teng bo'lgan spin kvant soniga ega. Yadroning umumiy spini uni tashkil qiluvchi zarrachalar spinlarining algebraik yigindisiga teng. Agar elementar zarrachalar spinlari juftlashgan bo'lsa, summalari nol ga teng bo'ladi, ya'ni yadro summa spinga ega bo'lmaydi. Bunday holda musbat zaryad yadroda simmetrik taqsimlangan bo'lib, yadroning kvadrupol momenti eQ nolga teng bo'ladi. Bu erda e-elektrostatik birligi, Q-zaryad taqsimlanishining sferik holidan chetlanish darajasi o'lchami.

Yuqorida aytganimizdek yadroning spin kvant soni $J=0$ bo'lsa Q ham nolga teng bo'ladi: $J=0 \rightarrow Q=0$

TURLI SHAKLDAGI YADROLAR.

Demak, yadroning musbat zaryadi tashqi magnit maydoni yo'nalishiga parallel o'q bo'yicha ko'proq taqsimlangan bo'lsa, $Q>0$ agar H ga perpendikulyar yo'nalishda kuchliroq (ko'proq) taqsimlangan bo'lsa, $Q<0$ bo'ladi. Shunday hollar ham borki, yadroda hamma zarralarning summa spini $J=1/2$ ga teng bo'lishi mumkin. Bunda zaryadning taqsimlanishi sferik bo'lishiga qaramay. ($eQ=0$), yadro magnit momentiga ega bo'lib qoladi. $J>1$ bo'lsa yadro spinga ya'ni mexanik momentga ega va bunday yadroda proton zaryadining taqsimlanishi sferik bo'lmasligi mumkin. $Q<0$ bo'lishi proton zaryadi maydon yo'nalishi bo'ylab tanlanganligini ko'rsatadi.

(2). Proton va neytronlarning soni juft qiymatga ega bo'lgan yadrolar a-tipga kiradilar ($J=0$, $eQ=0$).

Yadro spinini topish uchun quyidagi jadvaldan foydalansa bo'ladi.

Нпротон	Ннейтрон	A(Нпротон+Ннейтрон)	J
Жуфт (ўзаро компенс)	жуфт (ўзаро компенс)	Жуфт (хаммаси жуфтлашган)	0
тоқ ()	жуфт (ўзаро компенс)	тоқ ()	$J=1/2$ (яримлик сон)
Жуфт (ўзаро компенс)	Тоқ ()	тоқ ()	$J=(2n+1)/2$ Ярим
тоқ ()	тоқ ()	Жуфт(иккиласи паралел)(ўзаро компенциялашган)	J-бутун сон

Faqat 4 chi holdagina – butun son qiymatlarga ega bo'lyapti YaMR spekri $J=1/2$ bo'lgan yadrolar uchun ko'proq tekshiriladi. $J=0$ bo'lgan yadrolar uchun uni tekshirish mumkin emas, chunki bunday yadrolarning mexanik momenti bo'lmaydi. $J>1$ bo'lgan yadrolar (3,4 hollar) uchun YaMR-spektr ayrim hollarda kuzatiladi.

1-xil yadroli atomlariga	$^{16}\text{O}, \text{Mg}, \text{Si}, \text{S}$ larнинг yadrolari kiraadi.
2-xil yadroli atomlariga	$^{19}\text{F}(9+10)$ ning yadrosi kiraadi.
3-xil yadroli atomlariga	$^9\text{Be}(4+5), ^{13}\text{C}(6+7), ^{17}\text{O}(8+9)$ larнинг yadrolari kiraadi
4-xil yadroli atomlariga	$^{10}\text{B}(5+5), ^{14}\text{N}(7+7)$ larнинг yadrolari kiraadi.

Yadroning mexanik momenti P yadro spin kvant soni J bilan quyidagicha bog'langan:

$$P = \frac{h}{2\pi} \sqrt{J(J+1)}$$

J -kvant soni yadroning spini deyiladi. Elektronning spin kvant soni $-1/2$ dan $+1/2$ gacha o'zgaradi. Yadrolarda J 0 dan boshlab 6 gacha o'zgaradi. Yadrolar bitta elektrondan farq qiladigan holda bir necha nuklonlardan iborat bo'lishi mumkin, chunki yadro murakkab sistema. Atrof muhitdan holi holda to'rgan π izolyatsilangan) sistema uchun harakat miqdorining to'liq momenti yo'nalish bo'yicha ham qiymati bo'yicha ham o'zgarmay saqlanadi. Agar o'z simmetriyasiga ega bo'lgan tashqi magnit maydoniga kiritilsa, ko'pchilik hollarda mexanik momentning tashqi magnit maydon yo'nalishi atrofida harakati, aylanishi ya'ni protsessiyalanishi ro'y beradi. Kvantlanish qoidalariga binoan P ning Z (H_0) o'qiga proektsiyasi P_z uzluksiz qiymatlar qatorini qabul qiladi.

$$P_z = \frac{h}{2\pi} M$$

M -magnit kvant soni deyiladi. Berilgan J uchun J dan $-J$ gacha bo'lgan $(2J+1)$ ta qiymatlarni qabul qiladi. Spini J butun son qiymatlariga ega bo'lgan yadrolar uchun M ning hamma qiymatlari butun sonlar. Umumiy soni toq $(2J+1)$ bo'lganligidan M ning qiymatlari orasida 0 ga tengi ham bo'ladi, ya'ni ($P_z = h M = h$).

Yadroning mexanik momenti yadro massasiga bog'liq emas, faqat uning spiniga bog'liq.

$$P = h \sqrt{J(J+1)}$$

Shu sababdan, ^{19}F , ^{31}P , ^1H larning uchchalasi bir xil mexanik momentga ega. ^{12}S , ^{16}O lar spinga ega emas. Shuning uchun ular magnit momentidan mahrumdirlar. Ular magnit xossasiga ega emaslar.

Aksincha yadrolari butun bo'lmagan spinga ega bo'lsa M ham kasr sonlarni qabo'l qiladi. Holatlarning π proektsiyalar) umumiy soni juft va P ning z o'qiga proektsiyasi P_z -hech vaqt 0 ga teng bo'lmaydi.

Yadro zaryadlangan zarracha bo'lganligi uchun o'z o'qi atrofida aylanishi zaryadning aylana bo'ylab harakatiga olib keladi. Rasmiy qaraganda bu elektr toki degan so'z. Aylanma tok solenoidni yaratadi, u esa o'z navbatida magnit maydonini hosil qiladi.

Aylanayotgan yadroni o'qi spinning o'qiga mos bo'lgan magnitga deb qarash mumkinki, uning magnit dipol momenti π ga teng.

Tashki magnit maydoni bilan yadroning magnit dipol momenti π o'rtasida o'zaro ta'sir vujudga kelib, uning energiyasi $E = -\vec{\mu} \cdot \vec{H}_0 \cos \Theta$ ga teng. bu erdagi Θ protsessiya burchagi deyiladi.

Vodorod atomining yadrosi uchun $J=1/2$, holda $P = \frac{h}{2\pi} \sqrt{J(J+1)}$ dan

$$P = \frac{h}{2\pi} \sqrt{\frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1)} = \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{h}{2\pi}, \quad J=1/2 \text{ uchun } M \text{ ning qiymati atiga } 2 \text{ ta: } \pm 1/2$$

Undan $p_z = +\frac{1}{2}h$ yoki $p_z = -\frac{1}{2}h$ ekanligi kelib chiqadi.

$$\frac{p_z}{p} = \cos \Theta : \cos \Theta = \frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \text{ bundan } \Theta_1 = 54^\circ 44' \text{ , } \Theta_2 = 125^\circ 16'$$

$$E = -\mu H_0 \cos \Theta : E_1 = -\mu H_0 \frac{1}{\sqrt{3}} = -\frac{1}{\sqrt{3}} \mu H_0 \quad E_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \mu H_0$$

$$\Delta E = E_2 - E_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \mu H_0 - \left(-\frac{1}{\sqrt{3}} \mu H_0\right) = \frac{2}{\sqrt{3}} \mu H_0 = h\nu$$

Bu erda $h\nu$ tashki maydondan o'z yo'nalishini o'zgartirish uchun yadro spini tomonidan qabul qilingan.

$$\text{Energiya } \nu = \frac{2\mu H_0}{\sqrt{3}h}$$

ν -esa yutilgan kvantning chastotasi.

Bu radioto'lqinlarining sohasiga to'ri keladi. Shuning uchun YaMR va EPR usullari radiospektroskopiya usul deyiladi.

NAZORAT SAVOLLARI.

Yadroning mexanik momenti yadro geometriyasiga bog'liqmi?

Yadro spini kanday ma'noni bildiradi?

Yadroning deyarli uning tuzilishiga ta'sir qiladimi?

Mexanik moment bilan spin kvant soni orasida kanday bolanish mavjud?

Nima uchun mexanik moment yadro massasiga bog'liq emas.

TAYANCH IBORALAR.

Molekula geometriyasi.

Elektron xolatlar.

Molekula magnit momenti.

Kovalent bog'lanish.

Molekula simmetriyasi.

Molekula tebranma energiyasi.

YaMR spektri.

Elektron xolatlar.

Geometrik parametrlar.

Molekulaga tashki elektron ta'sir.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.

6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

MA'RUZA № 10

MOLEKULALARNING O'RTACHA ENERGETIK XOSSALARI.

Reja:

Lyuminesentsiya orkali energiya ajralishi.
Lyuminesentsiyaning o'ziga xos xususiyatlari.
Nur chiqarish vaqtida ro'y beradigan elementar jarayonlar.

Makroskopik sistemalar, ya'ni jismlar qizdirilgan paytda ular faqat issiqlig'ini tortmasdan undan tashqari yana lyuminesentsiya spektri bilan yoritiluvchi yorug'lik energiyasini ham ajratib chiqarishi mumkin. Lyuminesentsiyaning ro'yobga chiqarish uchun energiya zapasi mazkur temperaturaga mos keluvchi issiqlik zapasidan kattaroq bo'lgan tashqi energiya manba bilan luminesentsiyalana oluvchi jismga ta'sir qilish kerak.

Tashqi energetik ta'sir quyidagilardan biron-tasi bo'lishi mumkin:

Ionlar turtkisi vositasida energiya berish.

Mexanik ta'sir qilish bilan energiya berish.

Elektronlar turtkisi vositaida energiya berish.

Rentgen nurlari va radiatsiyadan foydalanib energiya berish.

Yorug'lik bilan ta'sir qilib energiya berish.

Kimyoviy hodisalar tufayli energiya berish.

Elektr hodisalari vaqtida chiqadigan energiyadan foydalanish.

Lyuminesentsiyaning o'ziga xos tomoni shundan iboratki, sistemaga energiya berish bilan π ayniqsa nooptik qo'z/atish hollarida) uning nur chiqarishi boshlanguncha qandaydir oraliq hodisalar amalga oshirishidir, ro'y berishidir.

Nur chiqarishning davomiyligi nuqtai nazaridan flyuorestsentsiya-qisqa davr mobaynida nurlanishni va fosforestsentsiya-uzoq davom etuvchi nurlanish.

Nur chiqarish vaqtida ro'y beradigan elementar jarayonlarning mexanizmiga asoslangan va eng jazmon π ratsional) klassifikatsiya Vavilov tomonidan berilgan edi.

To'satdan (spontan) nurlanish (Lyuminesentsiyaning)

Majburiy nurlanish.

Rekombinatsion nurlanish.

Rezonans nurlanish.

1. Favqulotda (to'satdan) nurlanishda aksariyat hollarda nur chiqarmaydigan o'tish ro'y beradi, so'ngra bu energetik pog'onadan nurlanish ro'y beradi. Lyuminesentsiyaning bu turi bug' holda turgan yoki erigan holda bo'lgan murakkab molekulali moddalarga xosdir (1-hol)

2. Majburiy o'tish vaqtida modda tashqaridan energiya qabul qilganidan keyin o'z-o'zicha metastabil (beqaror) holda o'tadi. Metastabil holatda turgan bunday sistemaga qo'shimcha tebranma energiya berilsa π bu energiya lyaminoforming ichki energiyasi hisobiga yoki yorug'likning infraqizil sohasidagi kvantni tashqaridan berish hisobiga) u nurlanish pog'onasiga o'tadi va lyuminechtsentsiya spektrini chiqaradi (2-hol).

NAZORAT SAVOLLARI.

Lyuminesentsiya spektri qachon paydo bo'ladi?

qanday tashqi energetik ta'sir bo'lishi mumkin?
Lyuminesentsiyaning qanday o'ziga xos xususiyatlari bor?
Nur chiqarish vaqtida ro'y beradigan qanday elementar jarayonlar mavjud?

TAYANCH IBORALAR

Lyuminesentsiya.
Tashqi energetik ta'sir.
Elektron xolatlar.
Nur.
Nurlanish.
Energetik po/onalar.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

MA'RUZA № 11

MOLEKULALARNING OPTIK SOXADAGI ENERGETIK POG'ANALARI

Reja:

Molekuladagi xarakatning ko'rinishlari va molekulyar spektrlarning xillari.
Molekulalarning aylanma xarakat spektrlari.

MOLEKULALARDAGI XARAKTNING KO'RINISHLAI VA MOLEKULYAR SPEKTRLARNING XILLARI.

Molekulalar atomlarga qarama-qarshi ularoq ikki yoki undan ortiq atomlardan tashkil topganligi uchun ularning xarakati atomlardagidan murakkabrok bo'ladi:

Elektronlarning molekuladagi xolatini o'zlashtirishga olib keluvchi elektrondir.

Yadrolarning nisbiy joylanishining davriy o'zgarishi bilan bog'liq bo'lgan tebranma xarakat.

FAZOVIIY YO'NALISH (ORIENTATSIYA) NING DAVRIY O'ZGARISHI BILAN BOG'LIQ BO'LGAN TEBRAMA XARAKAT.

Molekulada yaxlit bir sistema sifatida o'zining fazoviy yo'nalishini davriy ravishda o'zgartirib turadi. Bunday xarakatga aylanma xarakat deyiladi.

Atomlarning optik spektri chiziqli tuzilishga molekulaniki esa yo'lli tuzilishga ega. Molekulaning energiyasi yigindisiga teng deb xisoblash mumkin, chunki o'zaro ta'sir xisobga olingudek bo'lsa, masala juda murakkablashib ketadi. Rasmda ikki atomli molekulaning energetik pog'onalari sxematik ravishda keltirilgan:

V- tebranma kvant soni

J – aylanish kvant soni

e – elektron energetik pog'onalar

V – tebranma energetik pog'onalar

j – aylanma energetik pog'onalar

Bu pog'onalar to'plami o'rtasida tuli tuman o'tishlar ro'y berganligi uchun molekulaning optik spektri IQ – soxasidan boshlab qabul qilish yoki chiqarish tufayli sodir bo'ladi.

$$\Delta E_{\text{айл}} < \Delta E_{\text{теб}} < \Delta E_{\text{эл}}$$

Agar molekulada xam aylanma, xam tebranma va xam o'tish ro'y berayotgan bo'lsa, bunday o'tishlar majmuasiga to'g'ri kelgan spektrga to'liq o'tish spektri deyiladi. Murakkab molekulalarning to'liq spektrlarini taxlili qilish ancha qiyin. Bunday xollarda optik spektr skalyar xarakteristik guruxlarning bor yoki yo'qligi, ko'p yoki kamligi to'g'risida ma'lumot berish bilan chegaralanadi.

MOLEKULALARNING AYLANMA XARAKAT SPEKTLARI.

Aylanish vaqtida yadrolar o'rtasida masofa o'zgarmay qoladi. Desak, aylanayotgan molekulani ozod o'qli qattiq rotator deb qarash mumkin.

Bunday rotatorning energiyasini Shredinger tenglamasi vositasida topish mumkin:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U) \psi(x) = 0$$

Ozod qattiq rotator uchun potentsial energiya $U=0$ (tashqi ta'sir yo'q); $W-U=T$ dan $W=T$. Bu erda T-kinetik energiya, W-umumiy energiya;

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{P^2}{2m};$$

Aylanma xarakat uchun impulsning kvadrati P^2 emas, impuls momentining kvadrati muxim ahamiyatga ega.

$pr=mvr$; $p^2 r^2 = m^2 v^2 r^2 = m^2$ massa o'rnida esa inertsia momenti qo'llaniladi. Demak, $2m$ o'rniga $2I_0 = 2\mu r_0^2$ qo'yilishi o'rinlidir. Shunday qilib

$$W = T = \frac{nr^2}{2I_0} \text{ kelib chiqadi.}$$

Qattiq rotator uchun Shredinger tenglamasi vositasida uni echish yo'li bilan umumiy energiya W uchun $W=hB_0I(I+1)$ ifoda topilgan.

Demak, aylanma xarakat energiyasi kvantlangan ekan. U aylanish kvant soni deyiladi, u 0,1,2 kabi butun son qiymatlariga ega bo'ladi.

W larni tenglaylik: $hB_0I(I+1)=nr^2/2I_0$; $nr^2=h^2I_0B_0I(I+1)$

Demak W kvantlanganidek nr xam kvantlangandir.

$W_{\text{айл}}/h$ ni aylanma term deyiladi; $W_{\text{айл}}/h=B_0I(I+1)=T_{\text{айл}}$

I	1	2	3	4	5	$v_{\text{айл}}=T_{\text{айл}}-T_{\text{айл}}=B_0[I(I+1)-I(I+1)]$
$T_{\text{айл}}$		0	$2B_0$	$6B_0$	$12B_0$	$20B_0$
						$30B_0$

I uchun tanlash qoidasi ± 1 ga teng ya'ni $\Delta I=\pm 1$.

Agar I urniga I+1 ni qo'ysak (I-pastki pog'onaning aylanish kvant soni).

$$V=B_0[(I+1)(I+2)-I(I+1)]=B_0(I^2+3I+2-I^2-I)=2B_0(I+1)$$

$$V_{I \rightarrow I+1}=2B_0$$

$$V=2B_0(I+1)=2B_0 \text{ grafik xolda ko'rsatsak: } V_{I \rightarrow I+2}=2B_0$$

Demak aylanma o'tishlar spektri bir-biridan teng ($2B_0$) masofada joylashgan chiziqlardan

iborat $B_0 = \frac{h}{8\pi I_0} = \frac{h}{8\pi \mu r_0^2}$ ekanligini esga olsak, bu tenglamadan $r_0^2 = \frac{h}{8\pi \mu B_0}$; $r_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{h}{\pi \mu B_0}}$

bu ifodadan foydalanib, aylanma o'tishlar spektrlari vositasida qattiq rotatorning atomlarining yadrolari o'rtasidagi masofa r_0 ni xisoblab topamiz.

Umuman olganda aylanayotgan 2 atomli molekulani qattiq rotator deb bo'lmaydi. Uning atom yadrolari orasidagi masofa aylaish kvant soni ortib borishi bilan o'zgaradi - ortadi. Bu esa aylanma pog'onalar energiyasiga olib keladi.

$$W_{\text{айл}}=hB_0I(I+1) \text{ o'rniga } W=hcBI(I+1)-DI^2(I+1)hc$$

Formulasidan foydalanish maqsadga muvofiqdir, aylanma xarakat molekula xarakatlaridan energiyani eng kam talab qilganlaridan bo'lganligi uchun juda past temperaturalarda birinchi

bo'lib vujudga keladi. U molekula kristallarida xam molekullarning aylanish sifatida namoyon bo'ladi.

Aylanma xarakat energiyasi $E_{ayl} \ll E_{tebr}$ bo'lganligi uchun tebranma va aylanma xarakat qilayotgan molekulaning energiyasi bo'lgan E_m ni E_m ga teng deb qabul qilishimiz mumkin. Bu xolda biz tebranma xarakat spektriga tegishli, aloqador qonuniyatlar bilan to'g'ridan to'g'ri tanishish imkoniyatiga ega bo'lamiz. Tebranma xarakat qilayotgan 2 atomli molekulaning energiyasini nazariy ravishda Shredinger tenglamasini echish yo'li bilan topsa bo'ladi.

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi\mu}{h^2} [W - U(x, y, z)] \psi_{(x, y, z)} = 0$$

w-to'liq energiya; u(x,y,z)- potentsial energiya; w- u(x,y,z)=T-kinetik energiya, ya'ni tebranma xarakat energiyasi. Tekshirish uchun chiziqli, masalan 2 atomli molekulani olgan bo'lsak, tebranish faqat x- o'qi buyicha ro'y beradi, u xolda Shredinger tenglamasi

ko'rinishida yoziladi.

X-ning o'rniga atomlar orasidagi masofani ifodalovchi r ni o'zgaruvchi sifatida olishimiz mumkin:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U(x)) \psi_{(x)} = 0$$

Agar $\frac{r_i - r_0}{r_0} = p \ll 1$ deb belgilasak, P-atomlar orasidagi masofalar orasidagi nisbiy o'zgarishi.

U xolda:

$$\frac{d^2 \psi}{dp^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U(p)) \psi_{(p)} = 0$$

Bu diferentsial tenglamani echib W ni topish uchun u(p) ning aniq (konkret) ko'rinishini bilish kerak.

Bunday garmonik otsillyator uchun Shredinger tengmasi echilsa $W = h\nu_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) \ll 1$ ifoda kelib chiqadi.

Bu formula real molekula uchun qo'llanilsa kvant soni u ortib borishi bilan uning energiyasi ortib borib pirovardida X ga teng bo'lishi kerak. Bunday bo'lishi mumkin emas. Real molekula qachondir dissotsiyanishi kerak.

Bundan real ikki atomli molekula garmonik otsillyator deb qabul qilinishi va uning tebranishini sof garmonik deyish noto'g'ri degan xulosa kelib chiqadi. Real molekulaning tebranma xarakati nogarmonik (angarmonik) xaraktdir. Uning potentsial enargiyasi r bilan bog'lovchi eng loyiq formula ifoda Morze funksiyasidir.

$$U(p) = U_e + D(1 - e^{-ap})^2$$

U_e – nolinci (muvozanat xolatda to'rgandagi) tebranish energiyasi (OK ga to'g'ri keladi). D va a lar doimiy sonlar. U (p) ni Shredinger tenglamasiga qo'yib W ni topsak $W_T = h\nu_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right) - h\nu_e X_e \left(\nu + \frac{1}{2} \right)^2$ ifodasi kelib chiqadi.

V – tebranishi kvant soni - 0,1,2,3 bo'lishi mumkin.

X_e – angarmoniklik doimiylixi $X_e \ll 1$ Xeqhwe / 4D

W_e - yadrolarning xususiy tebranishi takrorligi. Agar X_e ni xisobga olmasak ($X_e=0$ deyilsa), (3) –ifoda (1) ga o'tadi.

Morze funktsiyasini tekshirish. 1) $r > a$

$U(\omega) = D$ – disotsiyanish enargiyasi

1) $p=0$ $U(p) = U_0 = U_e$

$p < 0$ ya'ni $r > r_E$ aytaylik $p = -1$. U xolda $U(-1) = U_e + D(1 - e^{-ap}) = U_e + D(1 - e^a)$ $a \gg 1$ demak $(1 - e^{-a})^2 > 1$ (kvadrat bo'lganligi uchun) - $U(-p=-1) > \alpha$

Bu natijalar real molekullar uchun to'g'ri keladigan potentsial energiya egrisi bilan moslashadi. Bu egrini Morze funktsiyasidan foydalanib chizish vaqtida

$$D = \frac{hW_e}{4x_e}; \quad a = \sqrt{\frac{X_e W_e}{\beta_e}}; \quad B_e = \frac{h}{8\pi^2 I_0}$$

empirik doimiyliliklaridan foydalaniladi. D o'rniga tajribada topilgan dissotsiatsiya energiyasi qo'yilsa, potentsial energiya yanada xaqiqiyroq bo'lib chiqadi.

Molekulaning maksimal tebranma energiyasi uning dissotsiatsiyanish energisiga teng bo'ladi, undan katta bo'lishi mumkin emas. Bu xulosa modda va materiallarni termik parchalanishi vaqtida birinchi navbatda eng kuchsiz kimyoviy bog'lar uzilishini tasdiklaydi.

$$(A)W_T = hW_E \left(v + \frac{1}{2} \right) - hW_E V_E \left(v + \frac{1}{2} \right)^2 \quad \text{ni } V=V \quad \text{va } V'=V+I \quad \text{bo'lgan 2 ta pog'ona uchun}$$

yoziq $\Delta W_T = hW_E(V) = W_T(v+1) - W_T(v)$ ni topsak $\Delta W_T = hW_E - 2hW_E X_E(V+1)$ ga teng bo'lib chiqadi. Bu kattalik xar gal V birga ortganda $2hW_E X_E$ ga kamayib boraveradi. Tebranma energetik pog'onalarining ustima-ust tushishi sharti $\Delta W_T(V_{\max}) = 0$ bo'lishi kerak.

Bundan $V_{\max} + 1 = 1/2X_E$ chiqadi. Buni (A) ifodasiga olib borib qo'yib va D o'rniga $D = hW_E/4X_E$ qiymatdan foydalansak, $W_T(\max) = D(1 - X_E^2)$ ifoda kelib chiqadi.

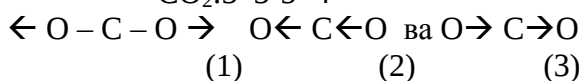
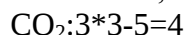
$X_E^2 \ll 1$ bo'lganligi uchun $W_T(V_{\max}) \leq D$ bo'ladi.

(A) ifodasidan nolinch tebranish borligi xam kelib chiqadi.

$$W_T(0) = \frac{hW_E}{2} \left(1 - \frac{X_E}{2} \right)$$

Bu qiymat moddalarning termodinamik, optik va boshqa xossalari tadqiq qilishda qo'llaniladi. Demak, aytishimiz mumkinki nolinch aylanma xarakat energiyasi yo'q - $W_{\text{айл}} = hB_e I(I+1)$; $I=0$ bo'lsa $W_{\text{айл}} = 0$ nolinch tebranish energiyasi esa real xolda mavjud. Murakkab molekulalarning tebranma xarakati yanada murakkab bo'ladi. Tebranish erkinlik darajasi $3N-6$ bo'lganligi uchun (bu erda N - yadrolar soni) tebranishlar soni ancha katta bo'lishi mumkin. 6 ning 3 tasi ilgarilanma xarakat erkinlik darajasi, qolgan 3 tasi aylanma xarakat erkinlik darajasi.

Chiziqli molekulalar (SO_2 , HCN , C_2H_2 va b.) uchun aylanish erkinlik darajasi 2 ga teng. Ularda tebranma xarakatning soni $3N-5$ ifodasidan topiladi. Tebranma xarakatlar simmetrik va nosimmetrik valent tebranish, deformatsion tebranish bo'ladi.



Xoxlagan agregat xolatdagi moddalarni ravshanligi ancha yuqori bo'lgan, chiziqli monoxromatik nur bilan yoritilsa, manbaning spektriga xos bo'lgan V_0 chastotali chiziqdan tashqari (bu chiziqning paydo bo'lishi tushayotgan nurning riley chasiga yoyilish natijasidir), unga nisbatan ikkala tomonga siljigan $v \pm \Delta v$ chastotalik yangi chiziqlar paydo bo'ladi. Mutlaqo yangi bunday chiziqlarning xosil bo'lishi, nurning kombinatsion sochilishi yoki Raman effekti deyiladi.

Eng birinchi tekshirishlardayoq chiziqlar o'rtasidagi farq sochuvchi molekulaning xususiy tebranish takrorlashga mosligi aniqlandi, ya'ni

$$v \pm \Delta v = W$$

Kombinatsion spektarning paydo bo'lishini quyidagi vositada ko'rgazmali tushuntirish mumkin. Energiyaning saqlanish (termodinamikaning birinchi qonuni) qonuniga binoan.

$$M(0) + hv_0 = M(1) + hvp^c \quad M(1) - M(0) = hv_0 - hvp^c = hw$$

Bu tenglamadan $hvp^c = v_0 - w$ kelib chiqadiki undan Stoks chiziqlarini paydo bo'lishini tushuntirish mumkin. Antistoks chiziqlarining xosil bo'lishi quyidagi tenglamadan ayon bo'ladi:

$$hv_0 + M(1) \rightarrow hvp^c + M(0)$$

$M(1) - M(0) = hvp^c - hv_0 = hw \Rightarrow vp^{ac} = v_0 + W$ ya'ni $vp^{ac} > v_0$ dan. Bu tenglamalar energiyaning saqlanish qonuniga binoan yoziladi. $M(0)$ -nurni sochuvchi

moddaning nolinchi tebranma pog'ona turgan π --) molekulasining xolatini ifoda qiladi. M(1) o'sha molekulaning bitta tebranish kvantiga ega bo'lgan xolatini ko'rsatadi. (V-1) Darxaqiqat

$$E_0 = hW \left(\nu + \frac{1}{2} \right) = hW \left(0 + \frac{1}{2} \right) = \frac{1}{2} hW$$

$$E_1 = hW \left(\nu + \frac{1}{2} \right) = hW \left(1 + \frac{1}{2} \right) = \frac{3}{2} hW$$

Demak nurning kombinatsion tarqalish xodisasi nur bilan molekulaning o'ziga xos ta'siri bo'lib birinchi (stoks) xildagi ta'sir natijasida hW energiyasi bilan tebranayotgan yangi xoldagi molekula va ($h\nu^c < h\nu_0$) chastotasi tushayotgan nurnikidan kichik bo'lgan sochilgan kvant xosil bo'ladi. Ikkinchi xolda $h\nu_0$ energiyali tushuvchi kvant $h\nu$ energiya bilan tebranayotgan M(1) xolatdagi molekulaga ta'sir qilib uni yuqoriroq pog'onaga ko'taradi. So'ngra molekula M(0) xolatga tushadi. Natijada yangi kvant chiqadi.

Stoks $h\nu_0 = h\nu^c + hW$ (molekulada qoldi) $\nu_0 < \nu_0^{ac}$ yutildi, chiqdi antistoks

$h\nu_0 + hW$ (molekuladan ajraldi) = $h\nu_p^{ac}$ yutildi chiqarilgan nur energiyasi

Sochilayotgan nurning ravshanligi shunday nurni sochuvchi molekulalarning soniga proporsionalligidan

N_1 - 1-pog'onadagi molekulalarning soni bo'lsin (M(1)xolat)

N_0 - 0-pog'onadagi molekulalarning soni bo'lsin (M(0)xolat)

N_1 va N_0 o'rtasidagi bog'lanish Boltsman formulasiga binoan - $N_1 = N_0 e^{-hW/kT}$ bo'ladi.

N_0 -ni bir birlik deb qabul qilsak, N_1 N_0 dan $e^{-hW/kT}$ marta kichik bo'ladi. $N_0 > N_1$ dan ekan, ya'ni asosiy [M(0)] xolatdagi molekulalarning soni qo'zg'algan [M(1)] xolatdagi molekulalarning sonidan ko'p bo'lar ekan.

Bundan

1) T ortib borishi bilan I_{ac} (antistoks chiziqlarining ravshanligi) ko'payib borishi kerak chunki M(1) xolatdagi molekulalarning soni (N_1) ning ortishi antistoks o'tishlar va unga to'g'ri kelgan chiziqlar sonini ko'paytiradi, demak ravshanligini orttiradi.

2) energiyaning HW ga teng bo'lgan qiymati, ya'ni $\nu = 0$ chi va $\nu = 1$ pog'onalar o'rtasidagi masofa (kvant kattaligi, energiya farki, tebranma o'tish chastotasi) ko'paysa N_0 dan N_1 ga o'tish soni kamayishi, o'tish qiyinlashganligi sababli I_{ac} ning ravshanligi kamayishi kerak.

Hw1<hw2 bo'lganligidan (rasmdan ko'rinib turibdi) (1)chi xil pog'onaning egallanishi darajasi (2)chi xil pog'onani egallanish darajasidan yuqori bo'ladi. Binobarin pastki pog'onaga o'tish serunum bo'ladi.	Hw1<hw2 bo'lganligi uchun M(0) dan M(1)-navbatdagi qo'shni pog'onaga o'tgan molekulalar soni kamroq bo'ladi. Ularning chiqarayotgan chastotasi ν_{ac} ning ravshanligi hw_1 dagiga qaraganda kichikroq bo'ladi.
--	---

Demak temperaturani oshirish yo'li bilan Stoks chiziqlari bilan bir qatorda antistoks chiziqlarini xam kuzatish mumkin. Shu bilan birga o'tishi uchun kichkina kvant talab qiladigan molekulalarning kombinatsion tarqalish spektrida Stoks va antistoks chiziqlari birgalikda namoyon bo'layotgan bir paytda, o'tish uchun katta kvant talab qiluvchi molekulali moddalar uchun faqatgina Stoks chiziqlargina kuzatiladi.

Nurning kombinatsion tarqalishini klassik optika nuqtai nazaridan tushuntirish mumkin.

1. Yorug'likning elektr vektori $\vec{E}$ ta'sirida molekulada tushayotgan nur chastotasiga teng chastota bilan tebranuvchi induktsiyalangan dipol momenti paydo bo'ladi.

$$\vec{E} = E_0 \sin 2\pi\nu_0 t; \quad \mu_{ind} = \alpha \vec{E} = \alpha E_0 \sin 2\pi\nu t - \text{elektronlarining siljish}$$

jarayoni tufayli xosil bo'layotgan kattalik.

Siljiyotgan elektronlarning tebranish chastotasi ν_0 ga teng.

1. Demak induktsiyalangan dipol momenti ν_0 chastota bilan tebranadi. Bu majburiy tebranish nurni releychasiga ($\nu_0 = \nu_p$) sochilishining sababidir.

2. Ammo dinamik bog'langanlik sababli dipolning tebranishi jarayonida yadrolar xam ishtirok etadi. Lekin yadrolar elektronlarga nisbatan ogir bo'lganligi uchun yorug'lik ta'sirida tebranish vaqtida ular elektronlardan birmuncha orkada qoladi. Natijada molekulalarning qutblanuvchanligi avvalgi - boshlangich xolatga nisbatan o'zgaradi. Bu esa o'z navbatida uning tomonidan sochilayotgan nurning chastotasini o'zgartiradi, ya'ni yangi kombinatsion sochilish chiziqlarini vujudga keltiradi.

Agar W deb yadrolarning tebranish chastotasini qabul qilsak, qutblanuvchanlik shu chastotaga bog'liq bo'lgan xolda o'zgaradi. α_0 - yorug'lik ta'sirida elektronlarninggina tebranishi bilan bog'liq bo'lgan, nurning releychasiga yoyilishiga ta'minlovchi qutblanuvchanlik.

$\alpha \sin 2\pi w t$ - qutblanuvchanlikning yadrolarning tebranishi bilan bog'liq bo'lgan o'zgarishi. Qutblanuvchanlik α ana shu ikki xil qutblanuvchanlikning yigindisiga teng.

$$\alpha^0 = \alpha_0 + \alpha^0 \sin 2\pi w t - W \text{ - yadrolarning tebranish chastotasi edi.}$$

$$\begin{aligned} \mu_{ind} &= \alpha E = (\alpha_0 + \alpha^0 \sin 2\pi w t) \alpha_0 \sin 2\pi \nu_0 t = \alpha_0 E_0 \sin 2\pi \nu_0 t + \\ &+ \alpha_0 E_0 \sin 2\pi \nu_0 t \sin 2\pi w t \sin 2\pi \\ t &= \alpha_0 E_0 \sin 2\pi \nu_0 t + \frac{1}{2} \alpha E_0 \cos(\nu_0 - w) 2\pi w t - \frac{1}{2} \alpha^0 E_0 \cos 2\pi(\nu_0 + w) t \\ \sin 2\pi \nu_0 t \sin 2\pi w t \sin 2\pi w t &= \frac{1}{2} [\cos(\nu_0 - w) - \cos(\nu_0 + w)] \end{aligned}$$

Klassik optika yordamida tushuntirish sxematik bo'lib, ν_p^c va ν_p^{ac} chiziqlarining xar xil ravshanlikka ega ekanligini tushuntira olmaydi. Kombinatsion sochilishni kvant mexanikasigina to'la-to'kis tushuntiradi. Kombinatsion tarqalish spektri qutbsiz molekulari birikmalarni, masalan uglevorodlar aralashmalarini, neft maxsulotlarini analiz qilishda asqotadi. Bunday xildagi birikmalar uchun μ ga bog'liq bo'lgan UR spektroskopiya deyarli yaroksizdir.

NAZORAT SAVOLLARI.

Raman effekti nimadan iborat?

Nurning kombinatsion tarqalish xodisasi deganda nimani tushunasiz? Uning natijasida kanda yangi kvant paydo bo'ladi?

Stoks va antistoks chiziqlarini kuzatishda temperaturaning kanda axamiyati bor?

Nurda kombinatsion tarqalishini klassik optika nuqtai nazaridan tushuntirish mumkinmi?

TAYANCH IBORALAR.

Nurning kombinatsion sochilishi

Raman effekti.

Stoks chiziqlari.

Sochilgan kvant.

Klassik optika

qutblanuvchanlik

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йўлчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил

2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.

MARUZA № 12

IKKI ATOMLI MOLEKULANING AYLANMA XOLATLARINI KVANT MEKANIKA ASOSLANIB QATTIQ VA NOQATTIQ TEBRANUVCHI ROTATOR SIFATIDA TAVSIFLASH.

Мolekulalar atomlarga qarama-qarshi ularoq ikki yoki undan ortiq atomlardan tashkil topganligi uchun ularning xarakati atomlardagidan murakkabrok bo'ladi:

Elektronlarning molekuladagi xolatini o'zlashtirishga olib keluvchi elektrondir.

Yadrolarning nisbiy joylanishining davriy o'zgarishi bilan bog'liq bo'lgan tebranma xarakat.

FAZOVIY YO'NALISH (ORIENTATSIYA) NING DAVRIY O'ZGARISHI BILAN BOG'LIQ BO'LGAN TEBRAMA XARAKAT.

Мolekulada yaxlit bir sistema sifatida o'zining fazoviy yo'nalishini davriy ravishda o'zgartirib turadi. Bunday xarakatga aylanma xarakat deyiladi.

Atomlarning optik spektri chiziqli tuzilishga molekulani esa yo'lli tuzilishga ega. Molekulaning energiyasi yigindisiga teng deb xisoblash mumkin, chunki o'zaro ta'sir xisobga olingudek bo'lsa, masala juda murakkablashib ketadi. Rasmda ikki atomli molekulaning energetik pog'onalari sxematik ravishda keltirilgan:

V- tebranma kvant soni

J – aylanish kvant soni

e – elektron energetik pog'onalar

V – tebranma energetik pog'onalar

j – aylanma energetik pog'onalar

Bu pog'onalar to'plami o'rtasida tuli tuman o'tishlar ro'y berganligi uchun molekulaning optik spektri IQ – soxasidan boshlab qabul qilish yoki chiqarish tufayli sodir bo'ladi.

$$\Delta E_{\text{айл}} < \Delta E_{\text{теб}} < \Delta E_{\text{эл}}$$

Agar molekulada xam aylanma, xam tebranma va xam o'tish ro'y berayotgan bo'lsa, bunday o'tishlar majmuasiga to'g'ri kelgan spektrga to'liq o'tish spektri deyiladi. Murakkab molekulalarning to'liq spektrlarini taxlili qilish ancha qiyin. Bunday xollarda optik spektr skalyar xarakteristik guruxlarning bor yoki yo'qligi, ko'p yoki kamligi to'g'risida ma'lumot berish bilan chegaralanadi.

MOLEKULALARNING AYLANMA XARAKAT SPEKTLARI.

Aylanish vaqtida yadrolar o'rtasida masofa o'zgarmay qoladi. Desak, aylanayotgan molekulani ozod o'qli qattiq rotator deb qarash mumkin .

Bunday rotatorning energiyasini Shredinger tenglamasi vositasida topish mumkin:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U) \psi(x) = 0$$

Ozod qattiq rotator uchun potentsial energiya $U=0$ (tashqi ta'sir yo'q); $W-U=T$ dan $W=T$. Bu erda T-kinetik energiya, W-umumiy energiya;

$$T = \frac{mv^2}{2} = \frac{m^2 v^2}{2m} = \frac{p^2}{2m};$$

Aylanma xarakat uchun impulsning kvadrati P^2 emas, impuls momentining kvadrati muxim axamiyatga ega.

$p r = m v r$; $p^2 r^2 = m^2 v^2 r^2 = m^2$ massa o'rnida esa inertsia momenti qo'llaniladi. Demak, $2m$ o'rniga $2I_0 = 2\mu r_0^2$ qo'yilishi o'rinlidir. Shunday qilib $\square w = T = \frac{nr^2}{2I_0}$ kelib chiqadi.

Qattiq rotator uchun Shredinger tenglamasi vositasida uni echish yo'li bilan umumiy energiya W uchun $W = hB_0 I(I+1)$ ifoda topilgan.

Demak, aylanma xarakat energiyasi kvantlangan ekan. U aylanish kvant soni deyiladi, u 0,1,2 kabi butun son qiymatlariga ega bo'ladi.

W larni tenglaylik: $hB_0 I(I+1) = nr^2 / 2I_0$; $nr^2 = h^2 I_0 B_0 I(I+1)$

Demak W kvantlanganidek nr xam kvantlangandir.

W_{ayl}/h ni aylanma term deyiladi; $W_{\text{ayl}}/h = B_0 I(I+1) = T_{\text{ayl}}$

I	1	2	3	4	5	$v_{\text{ayl}} = T_{\text{ayl}} - T_{\text{ayl-1}} = B_0 [I(I+1) - I(I+1)]$
T_{ayl}			0	$2B_0$	$6B_0$	$12B_0$
				$2B_0$	$20B_0$	$30B_0$

I uchun tanlash qoidasi ± 1 ga teng ya'ni $\Delta I = \pm 1$.

Agar I urniga $I+1$ ni qo'ysak (I -pastki pog'onaning aylanish kvant soni).

$V = B_0 [(I+1)(I+2) - I(I+1)] = B_0 (I^2 + 3I + 2 - I^2 - I) = 2B_0 (I+1)$

$V_{I=1} = 2B_0$

$V = 2B_0 (I+1) = 2B_0$ grafik xolda ko'rsatsak: $V_{I=1} = 2B_0$

Demak aylanma o'tishlar spektri bir-biridan teng ($2B_0$) masofada joylashgan chiziqlardan

iborat $B_0 = \frac{h}{8\pi I_0} = \frac{h}{8\pi\mu r_0^2}$ ekaligini esga olsak, bu tenglamadan $r_0^2 = \frac{h}{8\pi\mu B_0}$; $r_0 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{h}{\pi\mu B_0}}$

$\square$ $\square$ bu ifodadan foydalanib, aylanma o'tishlar spektrlari vositasida qattiq rotatorning atomlarining yadrolari o'rtasidagi masofa r_0 ni xisoblab topamiz.

Umuman olganda aylanayotgan 2 atomli molekulani qattiq rotator deb bo'lmaydi. Uning atom yadrolari orasidagi masofa aylash kvant soni ortib borishi bilan o'zgaradi - ortadi. Bu esa aylanma pog'onalar energiyasiga olib keladi.

$W_{\text{ayl}} = hB_0 I(I+1)$ o'rniga $W = hcBI(I+1) - DI^2(I+1)hc$

Formulasidan foydalanish maqsadga muvofiqdir, aylanma xarakat molekula xarakatlaridan energiyani eng kam talab qilganlaridan bo'lganligi uchun juda past temperaturalarda birinchi bo'lib vujudga keladi. U molekula kristallarida xam molekulalarning aylanish sifatida namoyon bo'ladi.

MARUZA № 13

IKKI ATOMLI MOLEKULA TEBRANISHINI KLASSIK MEXANIKAGA BINOAN GARMONIK OSSILLYATOR, KVANT MEXANIKAGA BINOAN GARMONIK OSSILLYATOR SIFATIDA TUSHUNTIRISH.

Aylanma xarakat energiyasi $E_{\text{ayl}} \ll E_{\text{tebr}}$ bo'lganligi uchun tebranma va aylanma xarakat qilayotgan molekulaning energiyasi bo'lgan E_{ma} ni E_{m} ga teng deb qabul qilishimiz mumkin. Bu xolda biz tebranma xarakat spektriga tegishli, aloqador qonuniyatlar bilan to'g'ridan to'g'ri tanishish imkoniyatiga ega bo'lamiz. Tebranma xarakat qilayotgan 2 atomli molekulaning energiyasini nazariy ravishda Shredinger tenglamasini echish yo'li bilan topsa bo'ladi.

$$\nabla^2 \psi + \frac{8\pi\mu}{h^2} [W - U(x, y, z)] \psi_{(x, y, z)} = 0$$

w -to'liq energiya; $u(x, y, z)$ - potentsial energiya; $w - u(x, y, z) = T$ -kinetik energiya, ya'ni tebranma xarakat energiyasi. Tekshirish uchun chiziqli, masalan 2 atomli molekulani olgan bo'lsak, tebranish faqat x - o'qi buyicha ro'y beradi, u xolda Shredirger tenglamasi

ko'rinishida yoziladi.

X -ning o'rniga atomlar orasidagi masofani ifodalovchi r ni o'zgaruvchi sifatida olishimiz mumkin:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U(x)) \psi(x) = 0$$

Agar $\frac{r_i - r_0}{r_0} = p$ deb belgilasak, P-atomlar orasidagi masofalar orasidagi nisbiy o'zgarishi.

U xolda: $\frac{d^2 \psi}{dp^2} + \frac{8\pi^2 \mu}{h^2} (W - U(p)) \psi(p) = 0$

Bu diferentsial tenglamani echib W ni topish uchun u(p) ning aniq (konkret) ko'rinishini bilish kerak.

Bunday garmonik otsillyator uchun Shredinger tengmasi echilsa $W = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2}\right)$ ifoda kelib chiqadi.

Bu formula real molekula uchun qo'llanilsa kvant soni u ortib borishi bilan uning energiyasi ortib borib pirovardida X ga teng bo'lishi kerak. Bunday bo'lishi mumkin emas. Real molekula qachondir dissotsiylanishi kerak.

Bundan real ikki atomli molekula garmonik otsillyator deb qabul qilinishi va uning tebranishini sof garmonik deyish noto'g'ri degan xulosa kelib chiqadi. Real molekulaning tebranma xarakati nogarmonik (angarmonik) xaraktdir. Uning potentsial energiyasi r bilan bog'lovchi eng loyiq formula ifoda Morze funksiyasidir.

$$U(p) = U_e + D(1 - e^{-ap})^2$$

U_e – nolinch (muvozanat xolatda to'rgandagi) tebranish energiyasi (OK ga to'g'ri keladi). D va a lar doimiy sonlar. U (p) ni Shredinger tenglamasiga qo'yib W ni topsak $W_T = h\nu_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - h\nu_e X_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2$ ifodasi kelib chiqadi.

V – tebranishi kvant soni - 0,1,2,3 bo'lishi mumkin.

X_e – angarmoniklik doimiyligi $X_e \ll 1$ Xeqhwe / 4D

W_e - yadrolarning xususiy tebranishi takrorligi. Agar Xe ni xisobga olmasak ($X_e=0$ deyilsa), (3) –ifoda (1) ga o'tadi.

Morze funktsiyasini tekshirish. 1) $r > a$

$U(\omega) = D$ – disotsiylanish energiyasi

1) $p=0, U(p) = U(0) = U_e$

$p < 0$ ya'ni $r > r_E$ aytaylik $p = -1$. U xolda $U(-1) = U_e + D(1 - e^{-ap}) = U_e + D(1 - e^a)$ $a \gg 1$ demak $(1 - e^{-a})^2 > 1$ (kvadrat bo'lganligi uchun) - $U(-p=-1) \rightarrow \alpha$

Bu natijalar real molekulalar uchun to'g'ri keladigan potentsial energiya egrisi bilan moslashadi.

Bu egrini Morze funktsiyasidan foydalanib chizish vaqtida

$$D = \frac{hW_e}{4X_e}; \quad a = \sqrt{\frac{X_e W_e}{\beta_e}}; \quad B_e = \frac{h}{8\pi^2 I_0}$$

empirik doimiyliliklaridan foydalaniladi. D o'rniga tajribada topilgan dissotsiatsiya energiyasi qo'yilsa, potentsial energiya yanada xaqiqiyroq bo'lib chiqadi.

Molekulaning maksimal tebranma energiyasi uning dissotsiatsiylanish energisiga teng bo'ladi, undan katta bo'lishi mumkin emas. Bu xulosa modda va materiallarni termik parchalanishi vaqtida birinchi navbatda eng kuchsiz kimyoviy bog'lar uzilishini tasdiklaydi.

$$(A) W_T = hW_e \left(v + \frac{1}{2}\right) - hW_e V_e \left(v + \frac{1}{2}\right)^2 \quad \text{ni } V=V \quad \text{va } V'=V+1 \quad \text{bo'lgan 2 ta pog'ona uchun}$$

yoziq $\Delta W_T = hW_e(V) = W_T(v+1) - W_T(v)$ ni topsak $\Delta W_T = hW_e - 2hW_e X_e(V+1)$ ga teng bo'lib chiqadi. Bu kattalik xar gal V birga ortganda $2hW_e X_e$ ga kamayib boraveradi. Tebranma energetik pog'onalarining ustima-ust tushishi sharti $\Delta W_T(V_{\max}) = 0$ bo'lishi kerak.

Bundan $V_{\max} + 1 = 1/2X_e$ chiqadi. Buni (A) ifodasiga olib borib qo'yib va D o'rniga $D = hW_e/4X_e$ qiymatdan foydalansak, $W_T(\max) = D(1 - X_e^2)$ ifoda kelib chiqadi.

$X_e^2 \ll 1$ bo'lganligi uchun $W_T(V_{\max}) \leq D$ bo'ladi.

(A) ifodasidan nolinch tebranish borligi xam kelib chiqadi.

$$W_T(0) = \frac{hW_e}{2} \left(1 - \frac{X_e}{2}\right)$$

Bu qiymat moddalarining termodinamik, optik va boshqa xossalari tadqiq qilishda qo'llaniladi. Demak, aytishimiz mumkinki nolinchii aylanma xarakat energiyasi yo'q - $W_{\text{айл}} = hB_e I(I+1)$; $I=0$ bo'lsa $W_{\text{айл}}=0$ nolinchii tebranish energiyasi esa real xolda mavjud. Murakkab molekulalarning tebranma xarakati yanada murakkab bo'ladi. Tebranish erkinlik darajasi $3N-6$ bo'lganligi uchun (bu erda N - yadrolar soni) tebranishlar soni ancha katta bo'lishi mumkin. 6 ning 3 tasi ilgariylanma xarakat erkinlik darajasi, qolgan 3 tasi aylanma xarakat erkinlik darajasi. Chiziqli molekulalar (SO_2 , HCN , C_2H_2 va b.) uchun aylanish erkinlik darajasi 2 ga teng. Ularda tebranma xarakatning soni $3N-5$ ifodasidan topiladi. Tebranma xarakatlar simmetrik va nosimmetrik valent tebranish, deformatsion tebranish bo'ladi.

ELEKTRON XOLATLAR

Molekulalarning to'liq spektrini ba'zan elektron spektr deb ham yuritiladi, chunki bu spektr molekulasining elementr atomlaridagi kabi bir energetik pog'onadan o'tishda foydalaniladi. Qo'shish elektron pog'onalarining orasi nisbatan uzoq shuningdek unga to'g'ri kelgan kvantining chastotasi o'zgarmaydigan

Elektron o'tish ro'y bergan paytda u bilan birgalikda aylanma va tebranma o'tishlar ham parametrlari - F , B_e , W_e , X_e lar o'zgaradi. Agar uchchala o'tishning o'zaro ta'sir qilishini hisobga olsak v_{ym} topish ancha qiyin bo'ladi. Shuning uchun ayrim chastotalarning additive yig'indisi olinadi.

$$V = \frac{E_e + E_r + E_a}{h} = \frac{E_e + E_r + E_a}{h} = \frac{E_e}{h} + \frac{E_r}{h} + \frac{E_a}{h} = v_e + v_r + v_a$$

Bu takrorliklar o'zaro v_e , v_r , v_a ko'rinishida bog'langan. Agar elektron o'tin ma'lum pog'onalar orqasida ro'y bersa, $v_3 = \text{const}$ deb hisoblash mumkin.

$$v_r = W_e \left(v' + \frac{1}{2} \right) - W_e X_e \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 - W_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + W_e X_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

Elektron o'tish bo'lgan hol uchun v_p bunday o'tish barcha holdan farq qiladi, chunki W_e , X_e lar o'zgaradi.

$V_a = B_0 I(I+1) - B_0 I(I+1)$ $v_a \ll v_e$ bo'lgani uchun uni tushuntirib qoldirsak.

$$v_{\text{тыл}} = v_e + W_e \left(v' + \frac{1}{2} \right) - W_e X_e \left(v' + \frac{1}{2} \right)^2 - W_e \left(v + \frac{1}{2} \right) + W_e X_e \left(v + \frac{1}{2} \right)^2$$

Elektron o'tish vaqtida v istalgancha o'zgarishi mumkin: tanlash qoidasi aniq emas. Molekula istalgan. Pastki tebranma pog'onadan istalgan yuqorigi pog'onaga o'tishi mumkin. To'liq spektrni tahlil qilish uchun uni seriyalarga ajratiladi. Seriyalarga ajratish uchun Delandri sistemasidan foydalaniladi. Bu sistemaga kvant sonlarining qiymati e'tiborga olinadi. (jadval qaralsin).

$v' =$	0	1	2	3	4	
$v=0$	v_{00}	v_{10}	v_{20}	v_{30}	v_{40}	Kundalang seriyalar chastotalari; yutilish sestemasi o'zgaradi. Star fanini misoliga o'xshaydi. Bu seriyalar chiziqlari yutilish spektrida ravshanroq bo'ladi.
1	v_{01}	v_{11}	v_{21}	v_{31}	v_{41}	
2	v_{02}	v_{12}	v_{22}	v_{32}	v_{42}	
3	v_{03}	v_{13}	v_{23}	v_{33}	v_{43}	
4	v_{04}	v_{14}	v_{24}	v_{34}	v_{44}	

Bo'ylanma seriyalar v ; -sonst chastotalari $v - o'zgaradi$ chiqarish spektrida ravshanroq bo'ladi.

Ko'ndalang seriya chiziqlari molekulalar bir xil pastki tebranma energetik pog'onadan har xil yuqorigi pog'onaga ko'tarilganda paydo bo'ladi.

Bo'ylanma seriyalar molekulalar bir xil yuqorigi tebranma energetik pog'onadan har xil pastki pog'onalariga o'tgan paytda hosil bo'ladi.

Diagonal seriyalar chiziqlari uchun pastki pog'onaning ham yuqorigi tebranma energetik pog'onaning ham tebranish kvant sonlari istalgancha bo'lishi mumkin. Ko'ndalang seriya to'plami uchun qizil soya va binafsha kant harakterlidir, qo'shimcha seriyalar chiziqlari uchun binafsha soya va qizil kant harakterlidir.

Atomlardagiga o'xshash molekulardagi elektron o'tishlar ultrabinafsha sohada ro'y beradi. O'tish chastotasi atomlar chastotasiga yaqin. Energiyasi 1eV dan 20eV gacha bo'lgan interval (oraliq) dab o'ladi. Mazkur elektron holat uchun molekulaning to'liq energiyasi atomlar orasidagi masofaga, ya'ni molekula qanday tebranma va qanday aylanma energetik pog'onada turganligiga bog'liq. UF spektroskopiya moddalarini fizikaviy tadqiq qilish uchun imkoniyatlar beradi.

Turli moddalarning refrekziyasini topish ular molekulalarining elektron qobig'ining tuzilishini va o'ziga xos tomonlarini chuqurroq o'rhanishga yordam beradi.

MARUZA № 14

*ELEKTRON XOLATLAR.

Reja:

Molekulalarning to'liq spektrini o'rganish.

To'liq spektrni taxlili qilish uchun seriyalarga ajratilishi

Molekulalarning to'liq spektrni ba'zan elektron spektr deb xam yuritiladi, chunki bu spektr molekuladagi elektronlar atomlardagi kabi bir energetik pog'onadan o'tgan paydo bo'ladi. Qo'shni elektron pog'onalarining orasi nisbatan uzoq, shuning uchun unga to'g'ri kelgan kvantning chastotasi ultrabinafsha soxada bo'ladi. Elektron o'tish ro'y bergan paytda u bilan birgalikda aylanma va tebranma o'tishlar xam paydo bo'ladi. Elektron o'tish vaqtida molekulaning deyarli xamma parametrlari $-\psi$, Be , We , Xe , lar o'zgaradi. Agar uchchala o'tishning o'zaro ta'sir qilishini xisobga olsak V_{um} topish ancha qiyin bo'ladi. Shuning uchun ayrim chostotalarning additiv yigindisi olinadi.

$$V = \frac{E_e + E_T + E_a}{h} - \frac{E_e + E_T + E_a}{h} = \frac{E_e - E_c}{h} + \frac{E_T - E_T}{h} + \frac{E_a - E_a}{h} = v_s + v_T + v_a$$

Bu takrorliklar o'zaro v_s , v_T , v_a ko'rinishida bog'langan. Agar elektron o'tish ma'lum pog'onalar orasida ro'y bersa, $\square v = const$ deb xisoblash mumkin.

$$V_T = We (V + 1/2) - W_e X_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2 - We \left(V + \frac{1}{2} \right) + W_e X_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2$$

Elektron o'tish bo'lgan xol uchun v_T bunday o'tish bo'lmagan xoldan farq qiladi, chunki We , Xe lar o'zgaradi.

$$V_a = B_0 I(I+1) - B_0 I(I+1) \quad v_a \ll v_s \text{ bo'lgani uchun uni tushirib qoldirsak}$$

$$V_{myuk} = V_e + We \left(V + \frac{1}{2} \right) - W_e X_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2 - We \left(V + \frac{1}{2} \right) + W_e X_e \left(V + \frac{1}{2} \right)^2$$

Elektron o'tish vaqtida V istalgancha o'zgarish mumkin: tanlash qoidasi aniq emas. Molekula istalgan pastki tebranma pog'onadan istalgan yuqori pog'onaga o'tishi mumkin. To'liq spektrni taxlil qilish uchun uni seriyalarga ajratiladi. Seriyalarga ajratish uchun Deland sistemadan foydalaniladi. Bu sistemaga asos qilib pastki va yuqorigi energetik pog'onalardagi tebranish kvant sonlarining qiymati e'tiborga olinadi. (jadvalga qaralsin).

Ko'ndalang seriyalar chastotalari; yutilish spektriga xos $v - const$: v' - o'zgaradi.

Start-finish misoliga o'xshaydi. Bu seriyalar chiziqlari yutilish spektrida ravshanroq bo'ladi.

buylanma seriyalar -v'const

chastotali v- o'zgaradi

chiqarish spektrida ravshanroq bo'ladi.

Ko'ndalang seriya chiziqlari molekulalar bir xil pastki tebranma energetik pog'onadan xar xil yuqorigi pog'onaga ko'tarilganda paydo bo'ladi.

Buylanma seriyalar molekulalar bir xil yuqorigi tebranma energetik pog'onadan xar xil pastki pog'onalarga o'tgan paytda xosil bo'ladi.

Diagonal seriyalar chiziqlari uchun pastki pog'onaning xam yuqorigi tebranma energetik pog'onaning xam tebranish kvant sonlari istalgancha bo'lishi mumkin. Ko'ndalang seriya chiziqlari to'plami uchun qizil soya binafsha kvant xarakterlidir. Bo'ylanma seriyalar chiziqlari uchun binafsha soya va qizil kvant xarakterlidir.

Atomlardagina o'xshash molekulalardagi elektron o'tishlar ultrabinafsha soxada ro'y beradi. O'tish chastotasi atomlar chastotasiga yaqin. Energiyasi 1eV dan 20eV gacha bo'lgan interval (oraliq)da bo'ladi. Mazkur elektron xolat uchun molekulaning to'liq energiyasi atomlar orasidagi masofa, ya'ni molekula qanday tebranma va qanday aylanma energetik pog'onada turganligiga bog'liq. UF-spektroskopiya moddalarni fizikaviy tadqiq qilish uchun keng imkoniyatlar beradi.

NAZORAT SAVOLLARI.

Molekulaning to'liq spektri kachon paydo bo'ladi?

Elektron o'tishi uchun π chastotaning o'zgarishi mumkinmi?

Nima uchun seriyalarga ajratish uchun Deland sistemasidan foydalaniladi?

Kanday seriya chiziqlari mavjud, molekulaning xarakati ta'sir qiladimi?

TAYANCH IBORALAR.

To'liq spektr

Ultrabinafsha soxi

Elektron o'tish

Deland sistemi

Seriya chiziqlari

Spektroskopiya

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.

FOYDALANILGAN QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR.

4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.
8. Sodiqov M.Q. "MODDA TUZILISHI" FANIDAN MA'RUZALAR MATNI. QDU. Qarsh,- 2009.
9. Matyoqubov R.M. "MODDA TUZILISHI" FANIDAN MA'RUZALAR MATNI. FarDU. Farg'ona, 2006.

MARUZA № 15

TURLI ELEKTRON, TEBRANMA VA AYLANMA XOLATLADA TURGAN MOLEKULALARNING DIPOL MOMENTLARI VA QUTBLANUVCHANLIGI

Misol: 1,2 -dixloretanni olsak, $C - Cl$ bog'larni dipol momentlari $2,03 D$ ga teng. Molekulani bog'lab turuvchi kimyoviy bog'ni atrofida erkin aylanishida uning dipol momenti

$$\mu = \frac{4}{3} 2,3 D = 2,71 D.$$

Molekulani tsis-shaklida $\varphi=0$ va (III. 31) ga muvofik $\mu = \frac{4}{3} \cdot 2,03 \cdot 1 + 1 = 3,77 D$.

$\varphi=60^\circ$ bo'lsa, uni dipol momenti $\mu = \frac{4}{32} \cdot 2,03 \cdot 1 + \frac{1}{2} = 3,30 D$ ga teng bo'ladi.

Darxaqiqot, agar 1,2 - dixloretanii dipol momentining $298K$ sharoitda eksperimental yo'l bilan o'lchasak, u $1,10D$ ga teng bo'ladi. ushbu molekulani qiymati biron bir xolatiga muvofik kelmaydi. $\cos\varphi$ moddaning temperaturasi bilan bog'liqdir.

1,2 – DIXLORETANDA $\mu(D)$ ni TEMPYERATURAGA (T,K) BOG'LIQLIGI.

17-jadval

T, K	$\mu(D)$	T, K	$\mu(D)$
305	1,12	457	1,48
341	1,21	480	1,48
376	1,32	544	1,54
419	1,40	574	1,55

izomerii boshqasi bilan almashtirish mumkin. Ushbu holatda molekulaning dipol momenti o'rtacha « μ » kimmatga ega bo'ladi va u alohida olingan dipol momentlaridan farq qiladi. Bir gurux atomlar erkin aylananda « φ » qimmati 0 dan 2π gacha o'zgaradi, shuning uchun

kosinusni o'rtacha kimmati nolga teng bo'ladi. Natijada $\mu_M = \frac{4}{3} \mu_{C-x}$.

MOLEKULANING DIPOL MOMENTI VA AYLANMA HARAKATI

Ma'lumki, molekuladagi alohida atomlar yoki atomlar guruxi kimyoviy bog'larni atrofida aylanib turadi, shuning uchun dipol momentini o'lchashda molekuladagi atomlarning aylanishini hisobga olish kerak. Molekulani tashkil etuvchi atomlarning aylanma xarakati dipol momenti kattaligiga ta'sir etadi. Atomlar ichki aylanma xarakat qiladi. Chunki atomlar aylanish natijasida o'zining joyli o'zgartiradi, shuning uchun vektorlarni summasi o'zgaradi.

Misol: xH_2C-Sh_2x – molekulalarini ko'rib chiqamiz.

Trans-izomerda $S-x$ bog'lar bir tekislikda joylashmagan va ular orasidagi burchaklar 180° ni tashkil qiladi, ya'ni ular bir-biri bilan simmetrik joylashgan.

TSis-izomerda esa $S-x$ bog'lar bir tekislikda joylashgan, ammo ular orasidagi burchaklar 180° dan farq qiladi. Shuning uchun tsis-izomer mo'ayyan dipolomentga ega bo'ladi, Ammo *trans-izomer*ning dipol momenti nolga teng. Agar $S-x$ bog'larni dipol momentini vektorlar orqali aniqlab, $S-x$ ni tsis - holatidagi qimmatini topish mumkin.

$$\mu^2 = 2\mu_{C-x}^2 \cdot \sin 0(1 + \cos \varphi) \quad (\text{III.30})$$

Bu erda, «0» $S-S$ va $S-x$ orasidagi burchakli ifodalaydi. Agar «0» burchakni tetraedrining

burchagiga teng deb qabul qilsak, $\sin 100^\circ 28' = \frac{8}{9}$ va $\mu^2 = \frac{16}{9} \cdot \mu_{C-x}^2 (1 + \cos \varphi)$ bo'ladi.

$$\text{Shuning uchun } \mu = \frac{4}{3} \mu_{C-x} \sqrt{1 + \cos \varphi} \quad (\text{III. 31})$$

Aylanish jarayonida bir gurux « SN_2x » boshqa guruxga nisbatan « φ » burchakka burilib, xar xil qiymatlarda bo'lishi mumkin. Agar « SN_2 » guruxning aylanishi erkin bo'lsa, bir aylanma

Aylanma izomeriya nazariyasiga asoslanib, tajribada olingan dipol momentini qimmatni izoxlab berish mumkin. 1,2-Dixloretan molekulasidagi ichki aylanishini hisobga olganimizda mustaxkamrok *trans-izomeriya* hissasi *tsis-izomerga* nisbatan yuqori, chunki temperautra past bo'lganda asosan *trans-izomeri* holida bo'ladi. Shuning uchun « μ_{tsis} » ni qimmatini erkin aylanish xolatda « μ_{trans} »ni qimmatiga nisbatan kamroq bo'ladi.

Ammo temperatura ko'tarilishi bilan *tsis-izomer*ning hissasi ko'payadi, chunki molekula issiqlik energiyasini kabul qiladi va beqaror holatga o'tadi. *TSis-izomer*ning dipol momenti 3,30D ga teng. Tajriba yo'li bilan izomerlarni dipol momentlarini effektiv qimmatini o'lchash mumkin.

$$P_{\text{ориентация}} = C_1 P_1 + C_2 = \frac{4}{3} \pi \cdot N_A \left(C_1 \frac{\mu_1^2}{3kT} + C_2 \frac{\mu_2^2}{3kT} \right) = \frac{4}{9} \cdot \frac{\mu_{\text{эф}}^2}{kT} \cdot N_A \pi$$

Shu erda, S_1 va S_2 trans - va tsis - izomerdagi muvozzanat holatidagi miqdorini ko'rsatadi. *Trans-izomer*ning dipol momenti nolga teng bo'lishi uchun $\mu_{\text{эф}} = \mu_2 S_2$ bo'ladi.

Demak, dipol momenti o'zgaruvchan kattalik bo'lib temperatura bilan bog'liqdir. Bundan foydalanib, kutblanuvchan izomerni o'zgaruvchan kontsentratsiyasini aniqlash mumkin. $S_2 = I - S_1$ izomerlarni ifodalaydi.

$$\text{Muvozzanat konstantasi } K_{(T)} = \frac{C_1}{C_2} = I \cdot \frac{\Delta E}{kT} \quad (\text{III. 32})$$

Shu erda, $\Delta E = kT [\ln(1 - C_2) - \ln C_2]$ dixloretan molekulasi uchun $\Delta E = 4184$ KJ/mol ga teng.

1. Йулчибоев А.А. Квант кимёдан укув кулланма. Тошкент «ТошДУ нашри», 1979 йил
2. Йулчибоев А.А. Квант механика ва квант кимёдан кимё факултетининг талабалари учун семинар машгулотлари буйича методик курсатма. Тошкент ТошДУ нашри, 1989 йил.
3. Мелешина А.М курс квантовой механики для химиков М.Высшая школа, 1989 йил.
4. Загаратник Р. Полок Р. основый квантовый химии. М. «Высшая школа», 1980 год.
5. Яцимирский К. Б. , Яцимирский В. К. Химическая связь. М., 1985 год.
6. Краснов К. Б. Молекулы и химическая связь. М., 1975 год
7. Минкин В. И. Симкин П. Я. Миняев Р. М. Теория строения молекулы М., 1979 год.
8. Sodiqov M.Q. “Modda tuzilishi” fanidan ma’ruzalar matni. QDU. Qarsh, 2009.
9. Matyoqubov R.M. “Modda tuzilishi” fanidan ma’ruzalar matni. FDU. Farg’ona, 2006.
10. Тўхтабоев Н.Х.Модда тузилиши фанидан укув кулланма. Андижон. “Аду”, 2000 йил.
11. Гиллепси Р. Геометрия молекул.-Москва: «Мир», 1975, 278с.
12. Леше А. Физика молекул.-Москва: «Мир», 1987, 228 с.
13. www.chemport.ru.
14. www.subscribe.ru.
15. www.chemexpress.fatal.ru.