

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI  
OLIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIALAR VAZIRLIGI**

**NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI**

**Kimyo kaferdrasi**

**“KVANT KIMYO”**

fanidan

**O' Q U V – U S L U B I Y  
M A J M U A**



<b>Bilim sohasi:</b>	<b>100 000 - Gumanitar</b>
<b>Ta'lim sohasi:</b>	<b>140 000 - Tabiiy Fanlar</b>
<b>Ta'lim yo'nalishi:</b>	<b>5140500 - Kimyo</b>

**Namangan-2023**

O'quv uslubiy majmua O'R OO'MTV tomonidan № BD 5140600-3.04. raqami bilan 2023 yil 28 avgustdagi 144- sonli buyrug'i bilan tasdiqlangan fan dasturi asosida ishlab chiqilgan.

**Tuzuvchilar:**           **S.Mamajanov** – kimyo fanlari nomzodi, dotsent

**Taqrizchilar:**               **Sh.Abdullayev** - kimyo fanlari doktori, professor

**Y.Toshmatov** - kimyo fanlari nomzodi, dotsent.

O'quv uslubiy majmua Namangan davlat universiteti Kengashininig 2019 yil "  
" \_\_\_\_\_ dagi " " - son yig'ilishida ko'rib chiqilgan va foydalanishga tavsiya  
etilgan.

## MUNDARIJA

<b>№</b>	<b>Mavzular</b>	<b>Bet</b>
1.	Oquv materiallari.....	
1.1.	Ma’ruza mavzulari.....	
1.2.	Laboratoriya mashg’ulotlari mavzulari.....	
1.3.	Mustaqil ta’lim mashg’ulotlari mavzulari.....	
1.4.	Mustaqil ish uchun masalalar to’plami.....	
1.5.	Glossariy .....	
2.	Ilovalar.....	
2.1.	O’quv fan dasturi .....	
2.2.	Ishchi o’quv fan dasturi.....	
2.3.	Baxolash mezonlari.....	
2.4.	Testlar.....	
2.5.	Tarqatma materiallar.....	

# ЎҚУВ МАТЕРИАЛЛАРИ МАЪРУЗАЛАР МАТНИ

## МАЪРУЗА № 1

### АТОМ ТЎҒРИСИДАГИ ТАСАВВУРЛАРНИНГ РИВОЖЛАНИШИ

#### РЕЖА:

1. Атом тўғрисидаги тасаввурлар.
2. Электроннинг кашф этилиши. Радиоактивлик.
3. Атом тузилиш назариялари. Абсолют қора жисмнинг нурланиши.
4. Квант назарияси. Фотоеффе́кт. Водород атоми спектри.
5. Корпускуляр-тўлқин дуализми.

*Мавзуга оид таянч иборалар:* Атом, электрон, радиоактивлик, атом тузилиш, абсолют қора жисмнинг нурланиши, квант назарияси, фотоеффе́кт, водород атоми спектри, корпускуляр-тўлқин дуализми.

ХИХ аср давомида физиклар томонидан электр токини ўрганилиши атом бўлиниши мумкинлигининг асосий экспериментал омили бўлди. 1874 йилда ирланд олими Жорж Жонстон Стоуни электр токи атомлар билан боғланган элементар зарядлардан иборат деган ғояни олдинга сурди ва бу элементар заряд катталигини хисоблаб чиқди; 1891 йилда эса Стоуни унга электрон деб ном берди.

Зарядланган газ ва вакуумда электр зарядларни тадқиқ қилишни 1859 йилда немис физиги Юлиус Плюккер бошлаган, ундан кейин бу ишларлар давоми сифатида, 1869-1875 йилларда Гитторф ва Уильям Крукс катоддан анодгача тарқалувчи, кўринмас *катод нурларини* очдилар. Табиатда катод нурлари, тўғри чизик бўйлаб тарқалади ва анод томонида шиша айланаси бўйлаб флюоресценция хосил қилади, катод нурлари табиати узоқ вақт аниқ бўлмаган; немис физиклари тўлқинсимон инглизлар эса корпускуляр ҳолатда деб тақлиф қилишган.

1895 йилда француз физики Жан Батист Перрен электромагнит майдонида катод нурлари ўз йўналишини ўзгартиришини кузатган, у ўз таркибида манфий зарядланган зарра хоссасини намоён қилишини кўрсатиб берган. Ниҳоят, 1897 йилда инглиз Жозеф Жон Томсон и немис физиги Эмиль Вихерт бир биридан беҳабар равишда электрон зарядини унинг массасига нисбатини аниқлашган, оқибатда унинг заррача эканлигини исботлашган. Уларнинг натижаларига кўра электроннинг массаси водород атоми массасининг  $1/4000$  дан  $1/2000$  гача бўлган қисмига тенг; яна шуни айтиш керакки, электрон массаси орқали унинг тезлигини (электроннинг аниқ заряди

қийматини 1917 йилда инглиз физиги Роберт Эндрюс Милликен топган) ҳам аниқлашга эришилди.

Катод нурларининг ўрганилиши бошқа қатор муҳим кашфиётларга сабаб бўлди. 1895 йилда Вильгельм Конрад Рентген катод нурларини антикатод билан тўқнашиши натижасида янги тур нурланиш–X нури (рентген нури) аниқлади. Табиатда рентген нурлари келиб чиқиши тўғрисида ҳар хил фаразлар мавжуд, яъни X–нури ультрабинафша нурлари табиатига эга, ёки унинг корпускуляр табиати каби таклифлар билдирилган. Оқибатда X–нурининг тўлқинсимон табиатини 1913 йилда Макс Теодор . Феликс фон Лауэ кристаллардаги дифракция ходисасини кузатиши натижасида исботлади.

Антуан Анри Беккерель уран тузининг флюоресценция нурланишини ўргангандан кейин, шу ҳақидаги ўзидан олдинги айтилган фаразларни текшириб, француз математиги Анри Пуанкаре X – нури катод нури билан алоқаси йўқ, деган хулосага келди. Беккерел ёзма ишларида айтадики, сульфат уранилга қуёш нури таъсир эттирилганда унда нурланиш ходисаси кузатилади, фотопластинканинг қора қоғозида из қолдиради. Бир неча кундан кейин, уран тузлари фотопластинкада из қолдиришини, ҳаттоки қуёш ёруғлиги бўлмаганда ҳам уларда доимо нурланиш содир бўлишини кузатди. Яна шуни таъкидлаш лозимки, 1858 йилда француз олими Ньепс де Сен-Виктор ўз тадқиқотларида кумуш тузларидан нитрат уранил олиш жараёнларида бу ходисани кузатди, лекин унинг ишлари ўша вақтларда унча катта қизиқиш уйғотмади.

1897-1898 йилларда француз физиклари Пьер Кюри ва Мария Склодовская-Кюрилар уран атоми уран нурланишини содир қилишини аниқладилар, бу ходиса ураннинг қайси бирикмаси бўлишидан қатъий назар содир бўлади. 1898 йилда Кюрининг умр йилдоши бу ходиса яна бошқа бир элемент – торийда кузатилишини аниқлаган. Улар шу йилдан бошлаб, богем смолали алданмаси рудасини ўрганиш натижасида, унинг тоза уранга нисбатан кучли нурланиш (Кюрининг умр йилдоши *радиоактивлик* терминни таклиф этди) содир қилишини аниқлашди. Уларнинг ишлари натижаси яна икки янги радиоактив элемент – полоний ва радий очилишга сабаб бўлди.

1899 йилда инглиз физики Эрнест Резерфорд бир жинсли бўлмаган уран нурланишини аниқлади: бу ходиса магнит майдонида қуйидагича бўлинади, улар икки таркибий қисмга бўлиш мумкин, умумий зарралар тўдаси мусбат ва манфий зарралардан ташқил топган бўлади. Пол Виллар 1900 йилда яна битта типни, яъни нурнинг магнит майдонида оғмаслигини аниқлади. Резерфорд бу нурланишларни грек алфавитининг бош ҳарфлари билан, яъни: *альфа-нури*, *бета-нури* ва *гамма-нури* деб белгилашни таклиф қилди. Беккерел магнит майдонида  $\beta$  – нурининг шу йўналиш ва шу катталиқ билан оғишини кўрсатди, бу катод нурига ўхшашган ва тадқиқотлар шуни кўрсатдики, бу зарралар ўзини

электронлар тўдасидай намоён этади.

1900 йилда Резерфорд торий бирикмалари тўхтовсиз равишда майдаланиб радиоактив газ (радон) ажратишини, бу каби моддалар тадқиқотлар бошланғич махсулотларнинг радиоактив бўлакча(чиқинди)лари эканлигини аниқлади. 1903 йилда Уильям Рамзай биринчи бўлиб инерт газларни очди, Фредерик Содди эса радийнинг  $\alpha$  – парчаланишида гелий хосил бўлишини исботлади. Шу йилда Э. Резерфорд ва Ф. Содди радиоактив парчаланиш назариясига асос солдилар, улар ўз ишларида шуларни кўрсатдиларки, уран, торий ва актиний радиоактив элементлар оиласининг бошланғич элементлари ҳисобланади, уларнинг махсулотлари парчаланганда охириги махсулот сифатида кўрғошин хосил бўлади. П. Кюри радиоактив элементларнинг муҳим характеристик белгиси сифатида ярим емирилиш даври терминини таклиф қилди.

1914 йилда физиклар ва кимёгарлар даврий жадвалдаги элементлар ҳолатни аниқлаш йўллариини излай бошладилар, инглиз физиги Генри Гвин Жефрис Мозли даврий жадвалдаги элементлар асосидан олинган частота характеристик рентген нурланиши тўғри чизиқ бўйича даврий жадвалдаги элемент атом номерига мос келишини аниқлади. Мозли қонуни элементлар характеристик катталиклариини тажрибада тўғрилигини тасдиқлайди, даврий жадвалдаги радиоактив изотоплар тартибланиш қатори уларнинг атом массалари ошиб бориши билан мос келади. Айнан элементлар атом номери бўйича жойлашишида кимёвий элементлар классификациясида атоми мусбат заряди асосий белги эканлигини голланд олими Антониус ван ден Брук ўз илмий ишлари билан тасдиқлаган. 1920 йилда инглиз физики Жеймс Чедвик тажрибада мис, қумуш ва платинанинг ядро зарядини аниқлаган, унинг олган қийматлари 29.3, 46.3 ва 77.4 га мос келади, амалиётда эса уларнинг атом номери: 29, 47 ва 78 га мос келади.

XX асрнинг 20-йилларидан кейин кимёвий элемент тушунчаси ўзгара бошлади, бу айниқса Роберт Бойл ишларида яққол кўринди. Ўша вақтлари элемент бўлинмайдиган атомлардан иборат таркибий қисм деган айният мавжуд эди, Роберт Бойл эса элемент - атомлар атрофида ядро заряди бир хил зарралар тўпламидан иборат таркибий қисм деган тушунча киритилди. 1919 йилда Резерфорд биринчи бўлиб сунъий ядро реакциясини ўтказди, азот ва кислородни  $\alpha$ -зарраси билан бомбардировка қилди ва тажриба йўли билан протон мавжудлигини исботлади, у 1920 йилда нейтрон (1931 йилда Чедвик тажрибада исботлаган) мавжудлиги ҳақида ўз гипотезасини яратди.

### **Атомнинг тузилиш модели**

Атомнинг биринчи тузилиш модели XX аср бошларида таклиф этилган. 1901 йилда Жан Перрен атомнинг ядро-планетар моделини таклиф қилган. Бу

моделнинг батафсил тузилишини 1904 йилда япон физики Хантаро Нагаоки аниқлаган. Нагаоки моделида атом Сатурн сайёрасига ўхшатишган; планета ролини мусбат зарядланган шар бажаради ва атом хажмининг асосий қисмини ташқил қилади, электронлар эса Сатурн атрофида йўлдошларга ўхшаб, атрофида ҳалқа ҳосил қилиб жойлаган дейилади. Анча кенгроқ тузилишлардан бири *атомнинг кекс моделида* олинган.

Уильям Томсон (лорд Кельвин) атом бу қуюқ мусбат зарядланган материядан яъни тартиб билан тақсимланган электронлардан иборат деган тушунчани илгари сурди. У. Томсон фикрича оддий атом яъни водород атоми - марказида электрон жойлашган мусбат зарядланган шардир. Бу моделни Ж. Ж. Томсон мукамал ўрганиб, мусбат зарядланган шар марказида жойлашган электрон бир йўналишли концентрик халқани ҳосил қилади деб ҳисоблади ва рентген нурларининг сочилишини айнан электронлар сочилиш маркази деган асосда атомдаги электронлар сонини ҳисобловчи усулни таклиф қилди. Ўтказилган тажрибалар элементлар атомидаги электронлар сони тақрибан атом масса катталигининг яримига тенглигини кўрсатди.

Ж. Ж. Томсон биринчи бўлиб элементлар хусусиятини даврийлиги билан атомлар тузилишини боғлашга уриниб кўрди, унинг тахминича атомдаги электронлар сони элементдан элементга ўтётганда тўхтовсиз ортиб боради.

1906-1909 йилларда Ганс Гейгер, Эрнст Марсден ва Эрнест Резерфорд Томсон моделини тажрибада аниқлашга уриниб кўришди, бунда улар ўзларининг машҳур бўлган олтин фольгада  $\alpha$ -зарра сочилиш тажрибасини қўллашди. Улар электрон ўрнига  $\alpha$ -зарралардан фойдаланишди, бунда  $\alpha$ -зарраларнинг массаси катта бўлганлиги учун ( электронлар массасидан 7350 марта ката) электронлар билан тўқнашганда сезиларли даражада қайтмайди ва фақат атомнинг мусбат қисмидаги тўқнашувларни регистрация қилади. Бунда улар  $\alpha$ -зарралар манбаи сифатида радийни олишиб, юпка олтин фольгадаги заррачалар сочилишни эса қоронғу хонада жойлаштирилган рух сульфидли экрандаги сцинтиляциячакнаш орқали регистрация қилишди.

Ўтказилган тажрибалар кутилган натижаларнинг тескарисини берди. Яъни  $\alpha$ -зарраларнинг кўп қисми олтин фольгадан тақрибан тўғри траекторияларда ўтди, аммо шу билан бир қаторда баъзи бир  $\alpha$ -зарралар катта бурчак остида қайтганлиги ҳам кузатилди, бу ҳолат атомда жуда зич жойлашган мусбат зарядлар борлигидан далолат берарди. 1911 йилда Резерфорд бу ўтказилган тажриба натижаларига асосланиб, ўзинг атомнинг ядро моделини таклиф қилди бунга кўра атомнинг марказида мусбат зарядланган яъни ҳажми атом ўлчамлари билан таққосланганда жуда кичкина ядро, унинг атрофида эса электронлар айланади, уларнинг сони элементнинг атом массасининг тақрибин ярмига тенг.

Резерфорд атом модели ҳам қаршиликлардан иборат эди, чунки классик электродинамика қонунлари асосида ядро атрофида айланадиган электронлар электромагнит нурланишни тўхтовсиз чиқариши натижасида ўз энергиясини йўқотади. Бунинг натижасида электронлар орбитаси радиуси тезлик билан камайиши лозим эди ва бу тахминлар атомнинг яшаш вақти жуда қисқалиги кўрсатарди. Шу билан бир қаторда, Резерфорд модели 1913 йилда Дания физики Нильс Хенрик Давид Борнинг принципиал янги назариясини яратишнинг асоси бўлиб хизмат қилди.

Квант гипотезасига бўйсунадиган Бор модели 1900 йилда немис физики Макс Карл Эрнст Людвиг Планкни эътиборини тортди.

Планк жисм ўзидан нурланишни порциялар кўринишида частотага пропорционал равишда чиқаради деган постулотни илгари сурди. Квант гипотезасини фотоэффект ҳодисасини тушунтиришда қўллади, натижада Альберт Эйнштейн 1905 йилда ёругликнинг фотон назариясини таклиф қилди. Яна бир таклифлардан бири атомнинг Бор модели учун 1885 йилда швейцариялик олим Иоганн Якоб Бальмер, 1906 йилда америкалик физик Теодор Лайман ва 1909 йилда немис физиги Фридрих Пашеннинг водород атомининг спектрал чизиқлар серияси бўлиб чиқди. Бу сериялар (кўринадиган, ультрабинафша, инфрақизил соҳасидаги спектрлар) частотаси бутун сонлар квадратининг қийматига тескари пропорционал бўлган оддий қонуниятга бўйсунди.

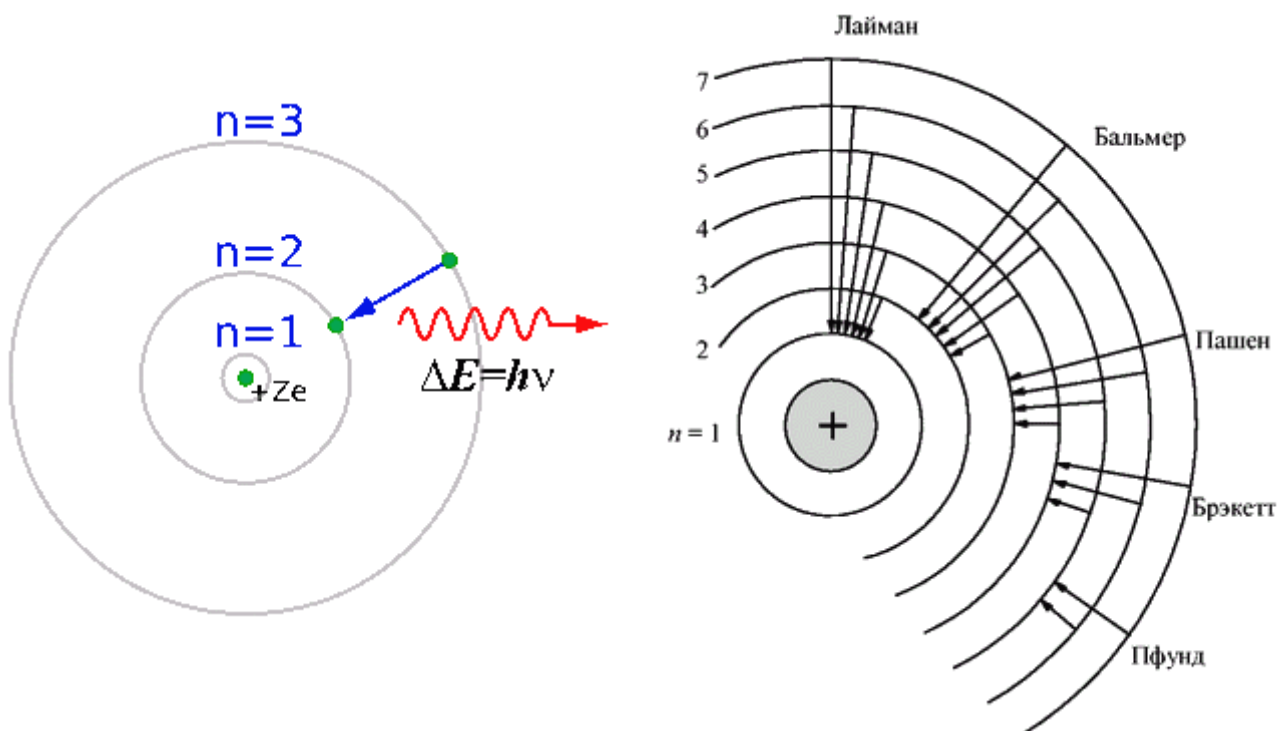
$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots$$

бу ерда  $R=1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  Ридберг доимийси

Бор планетар моделнинг барқарорлигини ва шу билан бир қаторда квант назариясининг ҳолатлари асосидаги спектрал натижалар, бир қанча постулатларни тўғрилаб, атом моделида квант чегараларни тушунтирди. Бор постулатлари кўра ядро атрофида электрон энергия йўқотмасдан айнан рухсат этилган («стационар») орбита бўйлаб айлана олади. Ядрога яқин орбита «турғун» (деярли барқарор) атомнинг ҳолатига тўғри келади. Атомга квант энергия юборилганда электрон деярли йўқотилган орбитага ўтади.

Тескари яъни «уйғотилган» ҳолатдан «турғун» ҳолатга ўтиш квант нурланишини чиқариш билан боғлиқдир.





Спектр асосидаги берилган ҳисоблашлар электронлар орбитасининг радиуси  $1^2:2^2:3^2:\dots:n^2$  га боғлиқ. Яъни электронларнинг айланиш ҳаракатидаги моментлар миқдори тўлиқ саналувчи асосий квант сонларига (орбиталар сонига) пропорционалдир. Электронлар сонининг максимал имконияти ҳар бир сатҳда асосий квант сонининг иккиланганига тенг; бу сон даврий жадвалдаги ўтиш элементларини миқдорига тенг. Шундай қилиб Бор модели, атомдаги электронлар қобиғи тузилиши элементни даврий хусусияти билан бевосита боғлиқдир.

Водород атоми учун спектрал ҳисоблашлар Бор модели асосида тажриба билан таққосланганда яхши натижа берди, аммо бошқа элементлар учун тажриба натижаларидан сезиларли даражада фарқ кузатилди. 1916 йилда немис физики Арнольд Иоганн Вильгельм Зоммерфельд Бор моделини тўлдириб, электрон айлана ҳаракатидан фарқли эллипс орбиталар ҳолатида ҳам ҳаракатланади деб тахмин қилди. Шу асосида тахминан бир хил сатҳдаги энергиялар Бош квант сонига тенг бўлган орбиталар сонининг ҳолатига мос келади. Зоммерфельд орбитал квант сони (эллипслар шаклини аниқловчи) ва тезликнинг электронлар массасига боғлиқлик моделини қўшди.

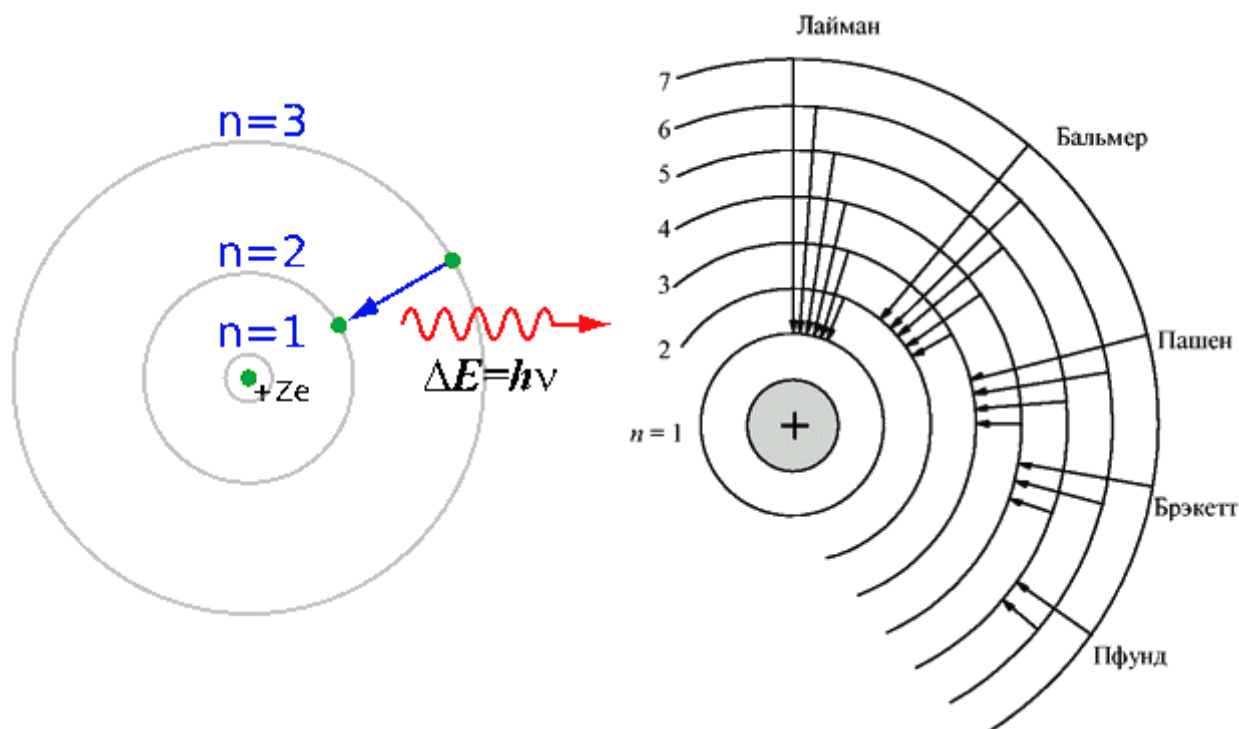
Бу сериялар (ёруғлик, ультрабинафша ва инфрақизил соҳаларда) жуда оддий қонуниятга бўйсунардилар: частоталар бутун сонлар квадратларига тескари пропорционал эди:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots$$

Бу ерда  $R=1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ , Ридберг доимийси.

Бор атомнинг планетар моделининг барқарорлигини ва бу спектрал

натижаларни, атом моделига квант чегараланишлар бир қанча постулатларни олдинга суриб, квант назарияси ёрдамида тушунтириб берди. Бор постулатларига кўра, электрон ядро атрофида фақатгина маълум рухсат берилган (стационар) орбиталар бўйлаб айланади ва уларда электрон нур таратмайди. Ядрога энг яқин орбита атомнинг нормал, яъни энг барқарор холатига тўғри келади. Атомга энергия кванти берилганда, электрон кейинги, узокроқ орбитага ўтади. «Ғалаёнланган» холатдан «нормал»га қайтиб ўтиш нур кванти чиқариш билан боради.



Спектрал маълумотлар асосидаги ҳисоб-китоблар кўрсатишича, электрон орбиталарининг радиуслари  $1^2, 2^2, 3^2, \dots, n^2$  нисбатда бўлади. Бошқача қилиб айтганда, айланаётган электроннинг ҳаракат миқдори моменти Бош квант сон (орбита номери)га пропорционал.

Хар бир қобикдаги электронларнинг максимал мумкин бўлган сони Бош квант сон квадратининг иккиланганига тенг: бу сон эса даврий жадвал даврларидаги элементлар сонига тенг бўлиб чиқди.

Шундай қилиб, Бор модели элементлар хоссаларинг даврийлигининг атомлар электрон қобикларининг тузилиши билан боғлиқлигини аниқлади.

Бор модели асосида спектрал ҳисоблаш водород атоми учун тажриба натижаларига мос келди, лекин бошқа элементлар учун тажрибага зид келди. 1916 й. Арнольд Иоганн Вильгельм Зоммерфельд, электронлар айланадан ташқари, эллиптик орбиталардан ҳам ҳаракатланиши мумкин. Бунда деярли бир хил энергия қаватларга, Бош квант сонга тенг бўлган орбиталар хили тўғри келади. Зоммерфельд моделни (эллипслар шаклини белгиловчи) қўшимча (орбитал) квант сон билан тўлдирди ва электрон массасининг тезлигига

боғлиқлигини кўшиди:

$$\lambda_p T = 2.9 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34} \text{ Дж} \cdot \text{с}$$

Борнинг квантланиш қондасини келтириб чиқарамиз. Бунинг учун Планк ва Эйнштейн тенгламаларини тенглаштирамиз

$$E = h\nu$$

$$E = mc^2$$

$$h\nu = mc^2$$

Бу ердан де-Бройль формуласини чиқарамиз

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

Фақатгина берилган орбитада бутун сон тўлқинлар жойлашиш шarti бажарилгандагина мавжуд бўлган турғун тўлқинларгина барқарор бўлишини ҳисобга олиб,

$$2\pi r_n = n\lambda$$

$$2\pi r_n = \frac{nh}{mv}$$

Водород атомидаги электрон учун Борнинг квантланиш шартини чиқарамиз

$$mvr_n = \frac{nh}{2\pi}$$

$$\text{Бундан, } v = \frac{nh}{2\pi m r_n}$$

Энди, айланаётган электронга таъсир қилувчи барча кучларни, яъни марказдан қочма куч ва электроннинг ядрога тортилиш кулон кучларини тенглаштириб,

$$F = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze \cdot e}{r_n^2} = \frac{mv^2}{r_n}$$

р учун

$$r_n = \frac{Ze \cdot e}{4\pi\epsilon_0 mv^2} = \frac{(2\pi)^2 m^2 \cdot r_n^2 Ze \cdot e}{4\pi\epsilon_0 m \cdot n^2 h^2} = \frac{\pi \cdot m \cdot r_n^2 \cdot Ze^2}{\epsilon_0 \cdot n^2 h^2} \quad \text{оламиз.}$$

Водород атоми учун  $n=1$ ,  $Z=1$ ,  $m$ -электрон массаси ва  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная

$$(m = 9.1 \cdot 10^{-31} \text{ кг} \text{ и } \epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12} \frac{\text{Кл}^2}{\text{Н} \cdot \text{м}^2}), \text{ эканлигини ҳисобга олиб,}$$

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2}{\pi m Z e^2} n^2 = 0.529 \cdot 10^{-11} \text{ м}$$

Шундай қилиб, Борнинг биринчи орбитасининг радиуси 0.529 А га тенг.

Кейинги орбиталар радиуслари  $r_n = n^2 \cdot 0.529 \cdot 10^{-11} \text{ м}$ . каби аниқланади.

Энди берилган орбитадаги электроннинг тўлиқ энергиясини ҳисоблаш

учун, заррачанинг тўлкин ва корпускуляр хусусиятини боғловчи де-Бройль формуласидан фойдаланамиз.

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

Тўлиқ энергия кинетик ва потенциал энергиялар йиғиндисидан иборат

$$E = T + U$$

Бу ерда потенциал энергия мусбат зарядланган ядро хосил қилган майдондаги манфий зарядланган электроннинг энергиясини ташкил қилади

$$U = qV = -eV = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

Ўрнига қўйиб,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n}$$

Тенгламадан  $v$  нинг қийматини қўйиб,

$$E = \frac{1}{2} \frac{mn^2h^2}{4\pi^2m^2r_n^2} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n} \text{ ни оламиз.}$$

Биринчи бор орбитасининг энергияси учун

$$E = \frac{1}{2} \frac{mn^2h^2\pi^2Z^2e^4}{4\pi^2m^2\epsilon_0^2n^4h^4} - \frac{e^2 \cdot \pi^2m^2Z^2e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_0n^2h^2} = \left(\frac{1}{n^2}\right) \frac{mZ^2e^4}{8\epsilon_0^2h^2} = 13.6 \text{ eV} \text{ хосил бўлади.}$$

Шундай қилиб, қолган стационар орбиталар учун

$$E_n = \frac{13.6 \text{ eV}}{n^2} \text{ бўлади.}$$

### Мутлақо қора жисм нурланиши

2000 йил декабрида дунёдаги илмий жамиятлар янги фан - квант физикасининг вужудга келиши ва янги фундаментал физик катталиқ - Планк доимийсинининг кашф этилиши юз йиллик анъанасини нишонлади. Бунда буюк немис физиги Макс Планкнинг хиссаси жуда катта. У қиздирилган жисмлар томонидан нурланадиган ёруғликнинг спектрал тақсимооти масаласини ечишга муваффақ бўлди, ваҳоланки унеча классик физика буни уддалай олмаган эди. Планк, биринчи бўлиб, осциллятор (тебранма система) энергиясининг квантланиши тўғрисидаги, классик физика принципларига зид бўлган, гипотезани олдинга сурди. Кейинчалик кўп буюк физиклар томонидан ривожлантирилган айнан шу гипотеза эски қарашларнинг қайта кўриб чиқилишига ва бузилиб кетишига туртки бўлди ва квант физикасининг яратилиши билан яқунланди.

Манба чиқарган ёруғлик ўзи билан энергия олиб кетади. Энергияни ёруғлик манбасига етказишнинг кўплаб йўллари мавжуд. Керакли энергияни қиздириш орқали узатиш, яъни иссиқлик узатиш, иссиқлик ёки температура нурланиши дейилади. XIX аср охирида бу турдаги нурланиш физиклар

ўртасида алоҳида қизиқиш уйғотди, чунки иссиқлик нурланиши қиздирилган жисмлар билан термодинамик мувозанатда бўлиши мумкин.

Физиклар, жисмларнинг иссиқлик нурланиши қонуниятларини ўрганиш натижасида термодинамика ва оптика ўртасида ўзаро алоқа ўрнатишга умид боғладилар.

Агар ойнавий аксини берадиган деворли ёпиқ сатхга ҳар хил температурагача қиздирилган бир неча жисм жойлаштирилса, тажриба, вақт ўтиши билан система иссиқлик мувозанати ҳолатига келишини ва бунда барча жисмлар бир хил температурага эга бўлишини кўрсатди. Жисмлар фақат нур энетгиясини чиқариш ёки ютиш орқали ўзаро энергия алмашадилар. Мувозанат ҳолатида ҳар бир жисм томонидан энергияни чиқариш ва ютиш жараёнлари ўзаро кесишади ва жисмлар ўртасидаги фазода нурланиш энергияси зичлиги, фақат жисмларнинг ўрнатилган ҳароратига боғлиқ бўлган маълум қийматга эришади. Бу, маълум температурадаги жисмлар билан термодинамик мувозанатда бўлган нурланиш, мувозанат ёки қора нурланиш деб аталади. Мувозанат нурланиши энергиясининг зичлиги ва унинг спектрал таркиби фақатгина температурага боғлиқдир.

Агар, қиздирилган жисм билан нурланиш ўртасида термодинамик мувозанат ўрнатилган сатхнинг ичига кичик бир тешикдан қаралса, оддий кўз билан жисмларнинг шаклларини ажратиб бўлмайди ва биз фақатгина бутун сатхнинг бир текисдаги нурланишини қайд этишимиз мумкин.

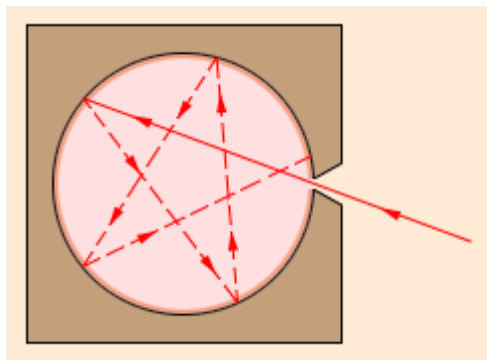
Сатхдаги жисмлардан бири унинг юзасига тушаётган ҳар қандай спектрал таркибдаги нурланиш энергиясини ютиш қобилиятига эга деб фараз қилайлик. Бундай жисм мутлақо қора жисм деб аталади. Берилган температурада, нурланиш билан иссиқлик мувозанатида бўлган абсолют қора жисм хусусий иссиқлик нурланиши, шу жисмни ўраб турган мувозанат нурланиши билан бир хил спектр тузилишига эга бўлиши керак. Акс ҳолда, абсолют қора жисм ва уни ўраб турган нурланиш ўртасида мувозанат ўрнатилмайди. Шунинг учун масала абсолют қора жисм нурланишининг спектр тузилишини ўрганишга олиб келади. Бу масалани ечишни классик физика уддалай олмади.

Мувозанат қарор топиши учун, ҳар бир жисм қанча нур энергияси ютса, шунча чиқариши ҳам керак. Акс ҳолда, мутлақо қора жисм ва уни ўраб турган нурланиш ўртасида мувозанат ўрнатилмайди. Шунинг учун масала, мутлақо қора жисм нурланишининг спектрал тузилишини ўрганишга олиб келинади. Бу масалани ечишни классик физика уддалайолмади.

Мувозанат қарор топиши учун, ҳар бир жисм қанча нурланиш энергиясини ютса, шунча чиқариши ҳам керак. Бу иссиқлик нурланишининг энг асосий қонуниятларидан биридир. Бундан келиб чиқадики, берилган ҳароратда мутлақо қора жисм бирлик сирт юзасидан вақт бирлиги ичида бошқа

хар қандай жисмдан кўра кўпроқ нур чиқаради.

Табиатда мутлақо қора жисмлар учрамайди. Бундай жисмнинг яхши модели, бу ғ юмалорқ ёпиқ сатхдаги кичик тешикча. Сатх ортига тешикдан тушган нур, деворлардан кўп марталаб қайтишдан сўнг уларга деярли тўлиқ ютилади ва тешикча ташқаридан буткул қора бўлиб туюлади. Лекин агарда сатх маълум хароратгача қиздирилган бўлса ва унинг ичида иссиқлик мувознанати ўрнатилган бўлса, сатхнинг тешикчадан чиқарадиган ўз нурланиши - мутлақо қора жисмнинг нурланиши бўлади. Худди шу услуб билан барча тажрибаларда мутлақо қора жисм модели қаралади.



Сатх ичкарасида харорат ортиши билан тешикчадан чиқаётган нурланиш энергияси ортиб боради ва унинг спектрал таркиби ҳам ўзгаради.

### Мутлақо қора жисм модели.

Берилган  $T$  температурада мутлақо қора жисм нурланишида энергиянинг тўлқин узунликлари бўйича тақсимланиши нурланиш қобиляти  $p(\lambda, T)$  билан характерланади. Бу тўлқин узунликнинг бирлик интервалида жисмнинг бирлик сиртидан ажралган нурланиш қувватига тенг.  $p(\lambda, T) \Delta\lambda$  кўпайтма бирлик сатх юзадан тўлқин узунликлар  $\Delta\lambda$  интервалида барча йўналишларда ажралган нурлар қувватини беради. Худди шундай, частоталар бўйича ҳам  $p(\nu, T)$  тақсимотни киритиш мумкин.  $p(\lambda, T)$  (ёки  $p(\nu, T)$ ) функцияни кўпинча спектрал ёритилганлик,

$$R(T) = \int_0^{\infty} r(\lambda, T) d\lambda = \int_0^{\infty} r(\nu, T) d\nu,$$

га тенг бўлган, барча тўлқин узунликларга эга бўлган нурларнинг тўлиқ оқимини эса жисмнинг интеграл ёритилганлиги  $P(T)$  деб аталади.

ХИХ аср охирига келиб, мутлақо қора жисм нурланиши экспериментал жихатдан яхши ўрганилган эди.

1879 йилда Йозеф Стефан тажрибалар натижаларининг тахлили асосида куйидаги хулосага келди: мутлақо қора жисмнинг интеграл ёритилганлиги  $P(T)$  абсолют температура  $T$  нинг тўртинчи даражасига пропорционалдир:

$$P(T) = \sigma T^4.$$

1884 йилда эса Л. Больцман бу ифодани термодинамик нуқтаи назардан назарий келтириб чиқарди ва бу қонун **Стефан–Больцман қонуни номини олди**.  $\sigma$  катталиқнинг сон миқдор, хозирги замон ўлчашларига биноан

$$\sigma = 5,671 \cdot 10^{-8} \text{ Вт} / (\text{м}^2 \cdot \text{К}^4).$$

ни ташкил этади.

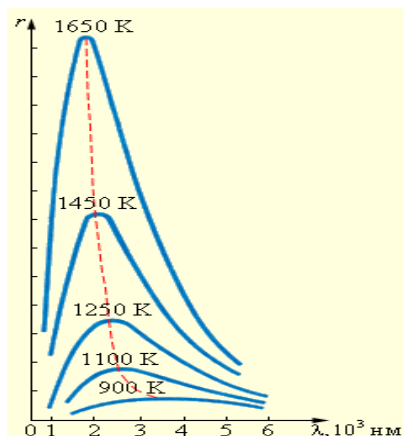
ХИХ асрнинг 90-йиллари охирига келиб, мутлақо қора жисм нурланишининг спектрал тақсимоти тажрибада ўтказилган мукамал ўлчашлар натижасига биноан, температуранинг ҳар бир қийматида  $p(\lambda, T)$  боғлиқлик яққол максимумга эга. Ҳарорат ортиши билан максимум қисқа тўлқин узунликка эга бўлган соҳага сурилади ва бунда  $T$  температуранинг максимумга мос келган  $\lambda_m$  тўлқин узунлигига кўпайтмаси доимий бўлиб қолаверади.

$$\lambda_m T = b \quad \text{ёки} \quad \lambda_m = b / T.$$

Бу ифода сал олдинроқ Вин томонидан термодинамикадан келтириб чиқарилган эди. У Виннинг силжиш қонунини ифодалайди, яъни мутлақо қора жисм нурланишининг максимумга тўғри келган  $\lambda_m$  тўлқин узунлиги  $T$  абсолют температурага тесқари пропорционалдир. Вин доимийсининг қиймати

$$b = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ м} \cdot \text{К}.$$

Лаборатория шароитидаги амалдаги ҳароратда  $p(\lambda, T)$  нурланиш қобилятининг максимуми инфрақизил соҳада жойлашади. Фақат  $T \geq 5 \cdot 10^3 \text{ К}$  да максимум, спектрнинг ёруғлик нурлари соҳасига тўғри келади. Қуёшнинг нурланиш энергиясининг максимуми тахминан 470 нм га (спектрнинг яшил соҳаси) тенг ва бу Қуёшнинг ташқи қаватидаги 6200 К атрофидаги ҳароратга тўғри келади (бунда Қуёшни мутлақо қора жисм деб қарасак, албатта).



### Мутлақо қора жисмнинг турли ҳароратдаги нурланишининг спектрал тақсимоти $p(\lambda, T)$

Термодинамиканинг муваффақиятлари назарий йўл билан Стефан-Больцман ва Вин қонунларини очилиши, термодинамикага асосланиб, мутлақо қора жисм нурланиши  $p(\lambda, T)$  нинг спеткрал тақсимотининг бутун графигини олиш мумкин, деган умидга олиб келди. 1900 йилда бу муаммони машҳур инглиз физиги Д.Релей, ўз мулоҳазаларида термодинамик мувозант ҳолатида

энергияни барча эркин даражалари бўйича бир текисда тақсимланиши тўғрисидаги классик статистик механиканинг теоремасини асос қилиб олиб ечишга уринди. Бу теоремани Релей сиртнинг мувозанатдаги нурланишига қўллади. Кейинроқ бу фикрни Жинс ривожлантирди. Шу йўл билан мутлақо қора жисмнинг нурланиш қобилиятининг унинг  $\lambda$  тўлқин узунлиги ва  $T$  температурасига боғлиқлигини олишга муваффақ бўлди:

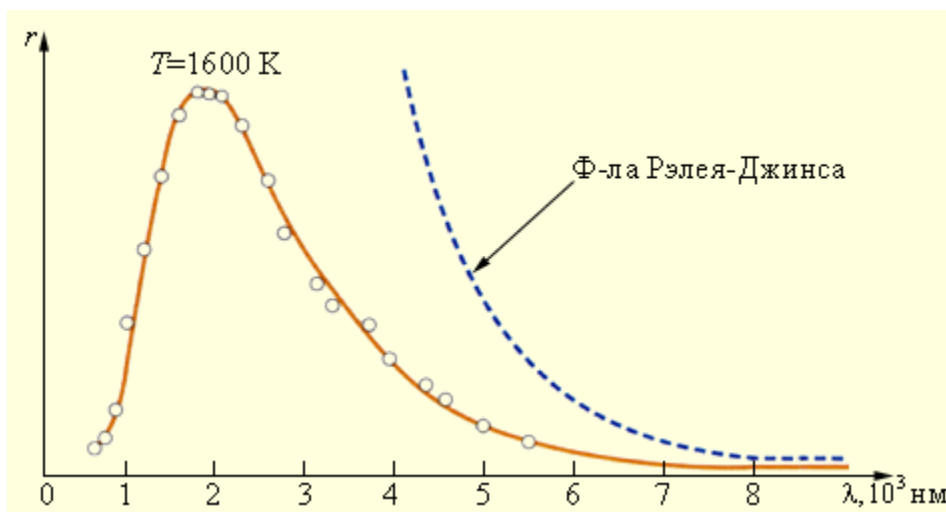
$$p(\lambda, T) = 8\pi k T \lambda^{-4}.$$

Бу муносабат **Релей–Жинс формуласи деб номланади**. У узун тўлқин узунликлар соҳасида тажриба натижаларига мос келади. Бундан ташқари, қора жисм интеграл нурланиши  $P(T)$  чексизга айланиши ва натижада қиздирилган жисм ва нурланиш ўртасидаги мувозанат фақатгина абсолют нул температурада ўрнатилади, деган бемаъни хулоса келиб чиқади.

Шундай қилиб, классик физика нуқтаи назаридан бекаму кўст бўлган хулоса тажриба натижаларига зид келди. Мутлақо қора жисм нурланишининг спектрал тақсимоти масаласини мавжуд назарияларга таяниб хал қилиб бўлмаслиги ойдек равшан бўлди. Бу муаммо, классик физикага ёт бўлган янги фикрлар асосида М.Планк томонидан осонгина хал қилинди.

Планк, қиздирилган жисм томонидан электромагнит энергияни чиқариш ва ютиш жараёнлари, классик физикада қабул қилингандай, узлуксиз эмас, балки бўлаклар, квантлар билан содир бўлади, деган хулосага келди. Квант – жисм чиқарган ёхуд ютган энергиянинг энг кичик бўлаги. Планк назариясига биноан, квантнинг энергияси  $\varepsilon$  ёруғликнинг частотасига тўғри пропорционал бўлади:

$$E = \hbar \nu,$$



**Мутлақо қора жисм  $T = 1600$  К да нурланиш энергиясининг тўлқин узунликлари бўйича тақсимоти**



## **$\rho(\lambda, T)$ учун тажриба натижалари ва Релей–Жинс формуласи графикларини солиштириш.**

бу ерда,  $h$  – **Планк доимийси**,  $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$  Дж·с. Планк доимийси – бу универсал константа бўлиб, Эйнштейнинг нисбийлик назариясида ёруғлик тезлиги қандай катта ахамиятга эга бўлса, у ҳам квант физикасида шундай ахамиятга эгадир.

Жисмлар томонидан электромагнит нурлар ютилиши ва чиқарилиши жараёнларининг узлукли ҳаракати тўғрисидаги гипотезага таяниб, Планк мутлақо қора жисм нурлари спектри формуласини чиқарди. Планк формуласини, мутлақо қора жисм нурланиш спектрида энергияни тўлқин узунликлар  $\lambda$  эмас, балки частоталар  $\nu$  бўйича тақсимланишини ифодаловчи формула кўринишида ёзиш қулайроқ.

$$\rho(\nu, T) = \frac{2\pi\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{e^{h\nu/kT} - 1}$$

Бу ерда  $c$  – ёруғлик тезлиги,  $h$  – Планк доимийси,  $k$  – Больцман доимийси,  $T$  – абсолют температура.

Планк формуласи қора жисм нурланишининг спектрал тақсимотини ҳар қандай частотада яхши тасвирлайди. У тажриба натижаларига ҳам мос келади. Планк формуласидан Стефан–Больцман ва Вин қонунларини келтириб чиқариш мумкин.  $h\nu \ll kT$  да Планк формуласи Релей–Жинс формуласига ўтади.

Қора жисм нурланиши муаммосининг ечилиши физикада янги даврни бошлаб берди. Албатта, классик тасавурлардан воз кечиш осон кечмади ва хаттоки, Планкнинг ўзи ҳам, буюк кашфиётни яратиб, йиллар давомида энергияни квантланишини классик физика нуқтаи назаридан талқин қилишга самарасиз ҳаракат қилди.

### **МАЪРУЗА № 2**

#### **“КВАНТ КИМЁ” ЗАМОНАВИЙ КИМЁНИНГ НАЗАРИЙ АСОСИ**

##### **РЕЖА:**

1. Квант механикаси асослари. Квант механиканинг асосий постулотлари. Квант ҳолатлар ва тўлқин функцияси.
2. Тўлқин функциясининг асосий хоссалари. Кузатилаётган физикавий катталиқ операторлари.
3. Ўртача қиймат ва кузатилиш дисперсияси. Координата, имплус операторлари, импулс моменти, кинетик ва потенциал энергиялар.

**Мавзуга оид таянч иборалар:** Квант механикаси асослари. Квант механиканинг асосий постулотлари. Квант ҳолатлар ва тўлқин функцияси,

тўлқин функциясининг асосий хоссалари. Кузатилаётган физикавий катталиқ операторлари, ўртача қиймат ва кузатилиш дисперсияси. Координата, имплус операторлари, импулс моменти, кинетик ва потенциал энергиялар.

Квант механикаси умуман олганда классик механика тушунчаларидан фарқли, ҳаракатлар ҳақидаги тушунчалар асосида содир бўладиган атом ҳодисаларига боғлиқдир.

Квант механикасида зарралар траекторияси тушунчаси бўлмайди (яъни координаталар аниқ қийматлари ва физик объектлар тезлиги мажмуи).

Бу ҳол Гейзенберг томонидан аниқланган, квант механикасининг асосий қоидаларидан бири - ноаниқлик қоидаси (ёки ноаниқ нисбат ) деб аталадиган қоидага мос маънони англатади.

Ноаниқлик қоидасининг жуда кўп қўлланиладиган математик ифодаларидан бири қуйидагича кўринишда бўлиб:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2$$

Бу ерда  $\Delta p$  ва  $\Delta x$  ноаниқликлар  $p = mv$  ўртача квадрат импулс оғиши ва улар ўртача қиймати координаталарини англатади.

Физикавий тушунтиришлар мазкур ўзаро боғланишдан иборат, зарралар координата ва импулси бир вақтда аниқ қийматга эга бундай ҳолатлар бўлмайди. Ноаниқлик ўлчамини  $\hbar$  Планк доимийси белгилайди.

Квант механикасидаги классик механика талаблари билан солиштирилган ҳаракат ҳақидаги физик тушунчалар радикаль ўзгаришлари табиий равишда шунчалик назарий математик аппарат радикаль ўзгаришлардир. Бу боғлиқликда дастлаб квант механикасидаги ҳолатга қандай тарзда тавсиф бериш мумкин деган савол пайдо бўлади.

Гарчи  $q$  – квант системалар координаталар мажмуаси,  $dq$  – бу координаталар дифференциал кўпайтмаси бўлса ҳам, конфигурацияли фазовий элементлар ҳажми деб аталади.

Бир хил зарралар учун  $q = x, y, z$ , а  $dq = dx \cdot dy \cdot dz = dV$  – оддий фазовий элемент ҳажми

Квант механикаси математик аппарат асосий қоидалари тасдиқ бўлган система ҳолати бўлиши мумкин деб тавсифланган аниқ (умуман айтганда, комплекс ҳолда) функция координатаси  $\Psi(q)$ , системалар тўлқин функцияси деб аталади. У биринчи марта квант механикасига 1926 йилда Шредингер томонидан киритилган.

Шундай қилиб, тўлқин функция квант системалари ҳолатидаги функциядир. Тўлқин функция ёрдами билан ҳолат тавсифи статистик бўлади, эҳтимоллик билан табиати: тўлқин функция модули квадрати тўлқин функцияга боғлиқ ҳолда шу катталиқ эҳтимоллик қийматини беради.

Масалан,  $x, y, z$  координаталар билан фазо нуктасидаги  $t$  вақт моментиде  $|\Psi(x, y, z, t)|^2$  эҳтимоллик билан зарраларни топиш.

Зарраларни топиш эҳтимоллик мажмуи баъзи бир фазо чегарали соҳаларда эҳтимоллик зичлиги деб аталади.

Масалан, мактаб кимё курсидан маълумки, атом ёки молекула орбиталлари учун жавобгар бўлган электрон булутлар математик нуктаи назардан эҳтимоллик зичлик функциясини яъни  $|\Psi|^2$  билдиради.

Тўлқин функцияси фақатгина фазодаги микрообъектларни топиш эҳтимоллиги тақсимотини тавсифлабгина қолмай, балки максимал тўлиқ олишга, квант механикаси қонунлари билан исталган физик катталиклар ҳақидаги маълумотларни биргаликда, бу микрообъектларни табиатини аниқлашга имкон беради. Буни куйида кўрсатилгандек кўринишда бўлади.

Ҳолат функцияси (тўлқин функцияси) битта маънога эга деган шартни қаноатлантириши зарур, ҳамма қўлланилган фазода чегаравий ва узлуксиздир. У икки қаррали дифференциал минумумига ўхшаш бўлиши мумкин. Бундан ташқари аниқлашда ҳамма бўлиши мумкин системалар координата қийматлари йиғиндиси керак бўлиб, бу бир хил бирликларда бўлади яъни

$$1 = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \int \Psi^*(\kappa) \Psi(\kappa) d\kappa$$

Бу ерда  $\Psi^*$  – функция бўлиб,  $\Psi$  билан комплекс боғлиқдир. Бу тенглик **нормаланган шарт** деб аталадиган тўлқин функциясини ифодалайди. Танлаш сифатида ҳар доим  $\Psi$  функция доимий коэффицентига мос ҳолда бўлиши мумкин, яъни бошқача айтганда нормаланган бўлади.

### 2.3. Операторлар.

Квант системалар қонунлари тавсифи унинг динамик ўзгарувчиларини (координата, импульс, энергия ва ҳ.к.) аниқлаш мумкинлигини англатади.

Олдинги бўлимда кўрсатилганидек, тўлқин функция квант системалар максимал тўлиқ тавсифини беради, яъни  $\Psi$  қиймати динамик ўзгарувчилар тўпламини ҳисоблашга имкон беради.

Бу эса тўлқин функцияда баъзи бир таъсир кучларига (ингл.- операте) эришилади. Тўлқин функцияда таъсир кучини тавсивлашда квант механикаси математик аппаратининг муҳим тушунчаларидан бири – оператор тушунчасини киритиш лозим бўлади. Операторни аниқлашга ўтамиз.

Бир хил  $f$  функция бошқа функция  $g$  га мос ҳолда қўйилган  $\hat{A}$  оператор қонуният бор. Оператор бўлиши мумкин бўлган таъсир кучини  $f$  функцияга купайтмаси  $g$  функция орқали ифодаланишини аниқлайди.

$$\hat{A}f = g$$

Масалан,  $\hat{A} = d/dx$  и  $f = 5x^2$  бўлсин. Унда

$$\hat{A}f = d/dx(5x^2) = 10x = g$$

1.  $\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  иккала операторнинг йиғиндиси ва айирмаси:

$$(\hat{A} + \hat{C})\phi = \hat{A}\phi + \hat{C}\phi$$

$$(\hat{A} - \hat{C})\phi = \hat{A}\phi - \hat{C}\phi$$

2. Операторлар кўпайтмаси:

$$\hat{A}\hat{C}\phi = \hat{A}(\hat{C}\phi)$$

Масалан,  $\hat{A} = \sin x$ ,  $\hat{C} = d/dx$ ,  $\phi = \sin x$ :

$$\hat{A}\hat{C}\phi = \hat{A}(\hat{C}\phi) = \sin x \cdot d/dx(\sin x) = \sin x \cdot \cos x = 0.5 \sin 2x.$$

3. **Операторлар учун коммутатив қонун ҳар доим ҳам бажарилмайди!**  $\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  иккала операторлардан ташкил топган, оператор деб аталадиган коммутатор кейинги кўриниши:

$$\hat{S} = [\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}.$$

$\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  операторлар коммутиритланади, яъни натижавий оператор  $\hat{S} = 0$

$$[\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} = 0,$$

4. Операторлар учун ассоциатив қонуният бажарилади:

$$\hat{A}(\hat{C}\hat{S}) = (\hat{A}\hat{C})\hat{S}.$$

5.  $n$ -чи даражали оператор  $\hat{A}^n$  н та кетма-кет қабул қилинган  $\hat{A}$  операторлар орқали ифодаланади, масалан:

$$\hat{A}^n \phi = \hat{A}\hat{A}\hat{A}\phi.$$

6.  $e^{\hat{A}}$  оператор экспонента қуйидагича аниқланади:

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \hat{A}^2/2! + \hat{A}^3/3! + \dots$$

7. Квант механикасида муҳим рол ўйнайдиган чизиқли операторлар қуйидаги қоида мос келади:

$$\hat{A}(\phi + \gamma) = \hat{A}\phi + \hat{A}\gamma$$

$$\hat{A}(c\phi) = c\hat{A}\phi$$

$$\hat{A}(c\phi + d\gamma) = c\hat{A}\phi + d\hat{A}\gamma,$$

$c$  ва  $d$  – коэффициентлар. Операторлар дифференцияланган ва квадратга кўтариб чиқилган:

$$d/dx(\phi + \gamma) = d/dx(\phi) + d/dx(\gamma)$$

$$d/dx(c\phi) = c \cdot d/dx(\phi)$$

$$(\phi + \gamma)^2 = \phi^2 + 2\phi\gamma + \gamma^2 \neq \phi^2 + \gamma^2.$$

Шундай қилиб, дифференцияланган операторлар чизиқли, квадрат даражадаги операторлар эса чизиқли бўлмаган операторлардир.

Хусусий функция оператори  $\hat{A}$  шундай  $\phi$  функция бўлиб, бунда  $\hat{A}$  таъсирида доимий сонга кўпайтирилган  $\phi$  функцияга қайта олмайди.

$$\hat{A}\phi = k \cdot \phi,$$

бунда  $k$  –  $\hat{A}$  хусусий оператор қиймати дейилади.

Масалан, майли  $\hat{A} = d^2/dx^2$  ва  $\phi = \sin(bx)$  бўлсин. Унда

$$\hat{A}\phi = d^2/dx^2(\sin(bx)) = b \cdot d/dx(\cos(bx)) = -b^2 \cdot \sin(bx),$$

Яъни  $d^2/dx^2$  хусусий оператор қиймати  $-b^2$  доимийдир.

Хусусий операторлар қиймати орқали динамик ўзгарувчилар квант механикасида ушбу ўзгарувчилар **кутилган натижа қийматини** аниқлайди.

Шу билан бирга хусусий оператор функция ўлчанган физик катталиклар квант системалар тўлқин функцияси бўлиши мумкин. Яъни, агар

$$\hat{A}\Psi = a \cdot \Psi$$

Охирги тенглама шуни тақоза қиладики, тўлқин функция нормаллашган ( $|\Psi|^2$  бирликка тенг интеграл) бўлади. Кўпгина ҳолларда нормаллашган шартлар бажарилса, бошқача йул билан, яъни кутилган физик катталиклар қиймати қуйидаги тенглама орқали ҳисобланади

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^*(q) \hat{A} \Psi(q) dq}{\int \Psi^*(q) \Psi(q) dq}$$

Квант механикасида ўз-ўзидан боғланган (самосопряженные) операторлар жуда муҳим роль ўйнайди, бошқача айтганда улар эрмитовлар дейилади.

Ўзаро боғланган (самосопряженные) ёки эрмитов оператор – ўзаро боғланган ҳаққоний оператордир:

$$\int f^* \hat{A} g dq = \int g (\hat{A}^* f^*) dq,$$

$\hat{A}^*$  бу ерда  $\hat{A}$  дан олинган олдидаги ўзгартирилган белги мавҳум қисмдир

Эрмитов операторлар ажойиб хусусиятга эга бўлиб: улар хусусий қиймати ҳар доим мавжуддир.

Оператор координаталар оддий координата бўлиб, унинг таъсир кучи исталган функцияда  $x$ ,  $y$  ва  $z$  аниқланган координаталарини  $p$  векторга кўпайтмасини ўз ичига олади, яъни

$$\hat{r}f = \vec{r}f$$

или  $\hat{x}f = x \cdot f$ ,  $\hat{y}f = y \cdot f$ ,  $\hat{z}f = z \cdot f$ .

Оператор импульси  $p$  операторлар ва унинг проекциялари орқали (масалан, декарт координата ўқларида) аниқланади:

$$\hat{p} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left( \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

или  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ ,  $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ .

Исталган динамик ўзгарувчилар  $A(p, q)$  функцияси оператор  $\hat{A}(p, q)$  га алмаштирилади. Бу ерда бу функция классик ифодаларидан олинган ва у операторлар учун жавобгар бўлган  $p$  ва  $q$  ҳам алмаштирилган:

$$\hat{A}(p, q) = A(\hat{p}, \hat{q}).$$

Масалан, оператор электрон кинетик энергиясини классик ифодаларга алмаштириш осонгина олинади

$$T = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{p_x^2}{2m_e} + \frac{p_y^2}{2m_e} + \frac{p_z^2}{2m_e}$$

компонентлар импульси  $p_x, p_y, p_z$  с операторларга мос ҳолда

$$\hat{T} = \frac{1}{2m_e} (\hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

ёки  $\Delta$  – Лаплас оператор белгилашини киритиб:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \text{получим} \quad \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$$

Потенциал энергия  $V(r, t)$  фақат координата ва вақт функцияси бўлиб,  $V$  оператор натижасида операторлар координата формуласи ва классик механикадаги потенциал энергия орқали ифодаланади. Масалан, оператор потенциал энергия электрон билан ядро заряди  $Z$  ўзаро таъсирига тенг

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{\hat{r}}$$

Тўлиқ э энергия классик системалар  $T$  кинетик ва  $V$  потенциал энергиялари суммасига тенг. Шунга ўхшаш квант механикасида ҳам  $\hat{H}$  тўлиқ энергия оператори (Гамильтон оператори ёки гамильтониан системалар) кинетик ва потенциал энергия операторлар суммасига тенг. Масалан, бир электронли атом учун:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{\hat{r}}$$

Квант механикасида қандай операторлар учун коммутациявий ўзаро боғланишлар бажарилишини кўриб чиқамиз. Ўз-ўзидан кўриниб турибдики, бунда

$$[\hat{x}, \hat{y}] = 0; \quad [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \quad \text{и т.д.}$$

Импульс  $p$  ва координаталар  $r$  операторлари коммутирланмаган бўлади. Ҳақиқатан ҳам:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{x}]f &= \hat{p}_x \hat{x}(f) - \hat{x} \hat{p}_x(f) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot f) - x(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x}(f) = \\ &= -i\hbar \cdot x \frac{\partial f}{\partial x} - i\hbar \cdot f + i\hbar \cdot x \frac{\partial f}{\partial x} = -i\hbar \cdot f; \quad \text{m.e.} \quad [\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar. \end{aligned}$$

Шунга ўхшаш,

$$[\hat{p}_y, \hat{y}] = -i\hbar; \quad [\hat{p}_z, \hat{z}] = -i\hbar.$$

п ва р операторларда коммутация мавжуд эмаслиги айнан шу ҳолатни координата ва импульс бир хил ва худди шу зарралар бир вақтда исталган олд томонга маълум даражадаги аниқлик билан ўлчашлар бўлиши мумкин эмаслигини ўзаро акс эттиради. Шундай қилиб, ўзаро боғланиш маълумотлари бошқа ноаниқлик қонунлар математик формасидир.

### **II. Тўлқин функцияси ҳақида постулат**

Исталган системалар ҳолати ҳамма ҳосил қилинган система зарра ва вақт координаталар бир қанча функциялари  $\Psi(k_1, k_2, \dots, k_n, t)$ , системалар ҳолат функцияси деб аталадиган функцияни ёки унинг тўлқин функциясини тўлиқ тавсифлайди

### **III. Физик катталикларни тавсифлаш ҳақида постулат.**

Ҳар бир динамик ўзгарувчилар (координата, импульс, энергия ва ҳ.к.) чизиқли ўз-ўзидан боғланган (самосопряженные) операторга кўра белгиланади. Ҳамма классик механика катталиклари ўртасидаги функционал муносабат квант механикасида операторлар ўртасидаги муносабатга алмаштирилади.

### **IIII. Квант механикаси асосий тенгламалари ҳақида постулат.**

Ҳолат функцияси қуйидаги тенгламага мос келиши керак

$$\hat{H}(p, q, t)\Psi(q, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(q, t)$$

Бу тенглама Шредингер томонидан айтилган постулат (1926) ва бизга **Шредингер тенгламасидан** маълум бўлиб, уни исботлаш мумкин эмас.

Оддий молекуляр физика ва структуравий кимё масалаларида реакция усуллари ва молекуланинг физик хусусиятини тушунтиришдан олдин фақат системалар **стационар ҳолати** деб аталадиган, яъни вақтга боғлиқ бўлмаган ҳолат муҳимдир.

Уларни тавсифлашдан олдин, гамильтониан аниқ вақтга боғлиқ эмас деб ҳисоблаш керак. У ҳолда кўрсатилган тенгламани ўзгарувчиларга ажратиш мумкин, бунда  $\Psi(k, t)$  тўлқин функция  $\Psi(k)$  координата ва  $\Phi(t)$  вақт билан боғлиқ қисмга кўпайтмаси кўринишда ифодаланади:

$$\Psi(k, t) = \Psi(k) \cdot \Phi(t)$$

$$\frac{\hat{H}\Psi(q)}{\Psi(q)} = i\hbar \frac{\frac{\partial \Phi(t)}{\partial t}}{\Phi(t)}$$

Бунда тенгламанинг иккала қисми тенг доимий катталик бўлиб, Гамильтон оператори хусусий қиймати, яъни квант системалар тўлиқ энергиялари

эканлигини билиш қийин эмас. Бунинг натижасида машхур **стационар Шредингер тенгламасини** келиб чиқади.

$$\hat{H}\Psi(q) = E\Psi(q).$$

Бу иккинчи тартибли чизикли дифференциал тенгламадир. Иккинчи тенглама

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(t)}{\partial t} = E\Phi(t)$$

$\Phi(t) = \Phi_0 \cdot \exp(-iEt/\hbar)$  ечимидир.

Шредингер тенгламасида гамильтониан стационар ҳолати учун чизикли ўз-ўзидан боғланган (самосопряженные) оператор – ҳар бир  $\epsilon_n$  хусусий қийматига тегишли, ҳар доим тўлиқ система хусусий функцияси  $\Psi_n(q)$  бўлади. Агар битта хусусий қиймат бир нечта хусусий функцияга ( $m$ ) тегишли бўлса, у ҳолда мавжуд ҳолат карралик бузилиши билан айнаган  $m$  га тенг дейилади. (олдинга югураётган, мисол сифатида кўрсатиш мумкин: азот атоми 3 p- орбитали битта ва бу ердаги энергия бўлиб, яъни мавжуд ҳолат карралик бузилиши 3 га тенг)

$\Psi_n$  и  $\Psi_j$  функциялар ҳар хил  $\epsilon_n$  ва  $\epsilon_j$  хусусий қийматларига ўзаро боғлиқдир:

$$\int \Psi_i \Psi_j dq = 0, \quad i \neq j.$$

Бир хил вақтдаги ортогонал ва нормаланган шартлар (ёки ортонормаланган деб айтиладиган)  $\Psi_n$  ( $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) функция куйидаги кўринишда ёзилади:

$$\int \Psi_i \Psi_j dq = \delta_{ij},$$

Бу ерда  $\delta_{ij}$  – Кронекер белгиси бўлиб, куйидагича аниқланади:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } i \neq j, \\ 1, & \text{если } i = j. \end{cases}$$

**ИВ. Физик катталикларнинг бўлиши мумкин қийматлари ҳақида постулат.**

Биргина бўлиши мумкин бўлган  $A$  динамик ўзгарувчини ҳисоблашдан олиш мумкин қийматлар  $\hat{A}$  оператор тенгламаси хусусий қиймати бўлади.

$$\hat{A}\Psi_n = A\Psi_n.$$

**В. Физик катталикларнинг ўртача қиймати ҳақида постулат.**

Физик катталиклар ўртача қиймати  $\langle A \rangle$  квант механикаси оператори  $\hat{A}$  бўлиб,  $\Psi$  ҳолатида ўзаро муносабатда аниқланади.

$$\langle A \rangle \equiv \bar{A} = \int \Psi^* \hat{A} \Psi dq = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle$$



Системалар тўлиқ энергияси ўртача қиймати  $\Psi$  ҳолатида қуйидагига тенг.

$$\langle E \rangle \equiv \bar{E} = \int \Psi^* \hat{H} \Psi dq = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle$$

Ортонормалашган функция тўплами  $\Psi_n$  ( $n = 1, 2, \dots, \infty$ ) бўлса ҳам тўлиқ система хусусий функция операторидан  $\hat{H}$  ташкил топади, яъни

$$\hat{H} \Psi_n = \varepsilon_n \Psi_n$$

$\Psi$  ни бу системалар функция қаторига ёйамиз:

$$\Psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \Psi_i$$

бунда  $c_n = \int \Psi_n^* \Psi dq$ . Ўрганилаётган ортонормалашган системалардан натижавий  $\bar{E}$  ўртача қиймат учун қуйидаги ифодаларни оламиз:

$$\bar{E} = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* c_j \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* c_j E_i \delta_{ij} = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 E_i$$

Исталган  $\hat{A}$  оператор учун ўхшаш бўлиб, бунда система хусусий функцияси система хусусий гамильтониан функцияси билан бир хил, яъни  $\Psi_n$  тенглама ечими бўлади.

$$\hat{A} \Psi_n = A_n \Psi_n \quad (n = 1, 2, \dots, \infty)$$

$\bar{A}$  ўртача қиймати қуйидагига тенг бўлиб,

$$\bar{A} = \langle \Psi | \hat{A} | \Psi \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} c_i^* c_j \langle \Psi_i | \hat{A} | \Psi_j \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 A_i.$$

$c_n$  коэффициент учун

$$\sum_i |c_i|^2 = 1,$$

ортонормалашган асосий тўплам бўйича  $\Psi$  нормалашган шарт ажралишини ифодаловчи муносабат бажарилади.

Бу  $|c_n|^2$  ни эҳтимоллик билан  $\Psi_n$  жавобгар бўлган хусусий функция,  $A_n$  қиймати олинган кўрилаётган катталиклар  $A$  бўлган алоҳида ҳисоблашлар натижаларида тушунтиришга имкон беради. Агар  $\Psi$  функция  $\Psi_n$  функциядан бири билан бир хил бўлса, унда

$$\bar{E} = \varepsilon_n, \bar{A} = A_n, \text{ бўлади.}$$

Бу ердан иккита муҳим хулоса келиб чиқади:

1) Квант механикасида физикавий катталиклар  $\Psi$  мавжуд ҳолатда, яъни фақат тўлқин функция, таърифланаётган системалар ҳолати, хусусий функция оператори ушбу физик катталиклар билан мос келган ҳолда аниқланган қийматга эга бўлади;

2) Агар иккита оператор (бизнинг ҳолда  $\hat{H}$  ва  $\hat{A}$ ) бир хил системада хусусий функциялар бўлса, у ҳолда улар бир хил вақтда аниқланган қийматга эга

бўлади, яъни исталган белгиланган аниқлик билан бир хил вақтда ҳисоблаш мумкин.

### **ВИ. Постулат. Суперпозиция қоидаси.**

Агар система  $\Psi_1$  ва  $\Psi_2$  тўлқин функциялар тавсифланаётган, мумкин ҳолатда бўлса, у ҳолда у ҳам мумкин ҳолатда бўлади.

$$\Psi = C_1\Psi_1 + C_2\Psi_2,$$

Бу ерда  $C_1$  ва  $C_2$  – ортонормаланган шартларда  $\Psi_1$  и  $\Psi_2$  куйидаги ўзаро муносабатда бўлган ихтиёрий ўзгармаслардир.

$$C_i = \int \Psi^* \Psi_i dq.$$

Бу постулат суперпозиция қоидаси деб аталадиган қоидани беради. ВИ Постулатдан шундай хулоса келиб чиқадики,  $\Psi$  функция шунақанги ҳолатни яъни система ёки  $\Psi_2$  ҳолатда эҳтимоллик билан  $C_1^2$  га, ёки  $\Psi_1$  ҳолатда эҳтимоллик билан  $C_2^2$  га тенг ҳолатни тавсифлайди.

### **ВИИ. Тўлқин функция антисимметрияси ҳақида постулот.**

Системалар тўлқин функцияси зарралар билан (полуцелым) ярим бутун спинлар (жумладан электронларда) исталган иккита зарра координата ўрнини алмаштиришига нисбатан антисимметрик бўлиши керак:

$$\Psi(K_1, K_2, \dots, K_i, \dots, K_j, \dots, K_n) = -\Psi(K_1, K_2, \dots, K_j, \dots, K_i, \dots, K_n).$$

## **МАЪРУЗА № 3**

### **ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ**

#### **РЕЖА:**

1. Ҳолатлар эволюцияси. Шредингернинг стационар тенгламаси.
2. Дискрет ва узликсиз спектрлар. Квант механикасида қўлланилган энг оддий мисоллар.
3. Бир ўлчамли масалалар: спектр. Тўлқин функциянинг сифат хусусиятлари.

*Мавзуга оид таянч иборалар:* Ҳолатлар эволюцияси, Шредингернинг стационар тенгламаси, дискрет ва узликсиз спектрлар, квант механикасида қўлланилган энг оддий мисоллар, спектр, тўлқин функциянинг сифат хусусиятлари.

Квант кимёнинг асосий вазифаси турли операторлар учун куринишдаги тенгламанинг хос кийматларини топишдан иборат. Импульс проекцияси оператори каби катор операторлар учун бу ечимлар дархолёзилади. Ҳақиқатдан, бу ҳолдаа тенглама куйидаги куринишда булади:

$$-i\hbar \frac{d\psi}{dx} = p_x \psi \quad (1)$$

ва у куйидаги функция билан каноатланади

$$\psi = \text{const} \cdot \exp(i/\hbar p_x x) \quad (2)$$

Бу ерда  $p_x$  - доимий, бунда унинг кийматлари спектри чексиз:  $-\infty < p_x < +\infty$ . (2) куринашдаги функция тулкин функциянинг барча хоссаларига эга – у бир кийматли, узлуксиз ва нормаллашган, шунинг учун  $p_x$  хусусий кийматларига хеч кандай чекланишлар кулланилмайди.

Лекин, квант механикасидаги барча операторлар орасида асосийларидан бири, классик механикадага Гамильтон функцияси сингари киритилган, Гамильтон операторидир:

$$H = -\hbar^2 / 2m \Delta + U \quad (3)$$

(бу ерда  $\Delta = \nabla^2$ ) ва системанинг тулик энергиясини аниқлайди. гамильтониан вақтга бевосита боғлиқ булмаган холларда, хос функция ва хос киймат масаласи куйидаги, Шредингернинг стационар тенгламаси деб аталувчи тенгламага келтирилади.

$$H\psi = E\psi \quad (4)$$

Бу ерда  $E$  тулик энергиянинг кутилган киймати, оператор  $H$  аксари операторлар (координата, импульс, импульс моменти, импульс моментининг квадрати ва бошқалар) билан коммутацияланади ва шу туфайли, улар билан хос функциялар системасига эга, демак (4) тенгламанинг ечими физик системанинг барча параметрларини деярли тулик тавсифлашни билдиради.

Шредингер стационар тенгламасини энг содда модел системаларга тадбигини куриб чиқамиз.

1. *Зарранинг бир улчамли эркин харакати, яъни зарра доимий потенциалга эга майдонда жойлашган ва унинг потенциал энергияси нолга тенг. Бу холда (4) тенглама куйидаги куринашни олади:*

$$-\hbar^2 / 2m d^2\psi / dx^2 = E\psi, \quad (5)$$

ёки содда алмаштиришлардан сунг,

$$d^2\psi / dx^2 + k^2\psi = 0, \quad (6)$$

Бу ерда  $k^2 \equiv 2mE / \hbar^2$  - доимий. Бундай дифференциал тенгламанинг ечими (доимий коэффицентларга эга булган иккинчи тартибли дифференциал тенглама) яхши маълум ва куйидаги куринашга эга:

$$\psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad (7)$$

Бу ерда  $c_1$  и  $c_2$  - ихтиёрий доимийлар. Бундай холда э га хеч кандай чекланишлар куйилмаслиги ва энергетик спектр узлуксиз.

Энди масалани бироз мураккаблаштирамиз ва

2. Зарранинг чексиз баланд деворли потенциал чукурдаги харакатини куриб чикамиз. Бу холда потенциал энергия

$$U = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (-\infty < x < 0; \quad a < x < \infty) \end{cases} \quad (8)$$

га тенг булади, бу ерда  $a$  – потенциал чукурнинг кенглиги. Шредингер тенгламаси (8) иккига булинади:  $x < 0$  ва  $x > a$  интервал учун:

$$-\hbar^2 / 2md^2\Psi / dx^2 + \infty \Psi = E\Psi, \quad (9)$$

ва факат  $\Psi(x) = 0$ , функция билан каноатланади, яъни зарра потенциал чукурдан ташкарида мавжуд булмайд.  $0 < x < a$  интервал учун Шредингер тенгламаси (9) билан айнан бир хил булади, лекин чегаравий шартлар куйидагича булади

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0 \quad (10)$$

(10) кушимча шартларда (9) тенгламанинг ечими функция булади, лекин  $c_1$  ва  $c_2$  константалар энди ихтиёрий эмас, аниқ кийматларни кабул киладилар:  $\Psi(0) = 0$  шартдан

$$\Psi(0) = c_1 \exp(ik0) + c_2 \exp(-ik0) = c_1 + c_2 = 0 \quad (11)$$

Келиб чикади. Бу

$$c_1 = -c_2$$

Булгандагина булиши мумкин. Энди иккинчи чегаравий шартни куриб чикамиз -  $\Psi(a) = 0$ :

$$\Psi(a) = c_1 \exp(ika) - c_1 \exp(-ika) = c_1(\exp(ika) - \exp(-ika)) = 0 \quad (12)$$

ёки

$$\exp(ika) = \exp(-ika)$$

Энди экспонентани Эйлер формуласига биноан тригонометрик функциялар куринида тасвирлаймиз:

$$\exp(ika) = \exp(-ika) = \cos(ka) + i \sin(ka) = \cos(-ka) + i \sin(-ka) \quad (13)$$

$$(\cos(-ka) + i \sin(-ka) = \cos(ka) - i \sin(ka)) \text{ эканлигини ёдда тутмоқ зарур}$$

Ухшашларни кискартириб, тенгламани куйидаги куринишга келтирамиз

$$\sin(-ka) = 0, \text{ где } k = \sqrt{2mE} / \hbar \quad (14)$$

(14) тенглик

$$ka = n\pi, \text{ ёки } k = n\pi / a \quad (15)$$

$n$  - ихтиёрий бутун сон, шарт бажарилганда уринлидир.

Шундай килиб, зарранинг потенциал чукурдаги тулкин функцияси куйидаги куринишни олади

$$\Psi(x) = c_1(\exp(in\pi x / a) - \exp(-in\pi x / a)), n = 1, 2, \dots \quad (16)$$

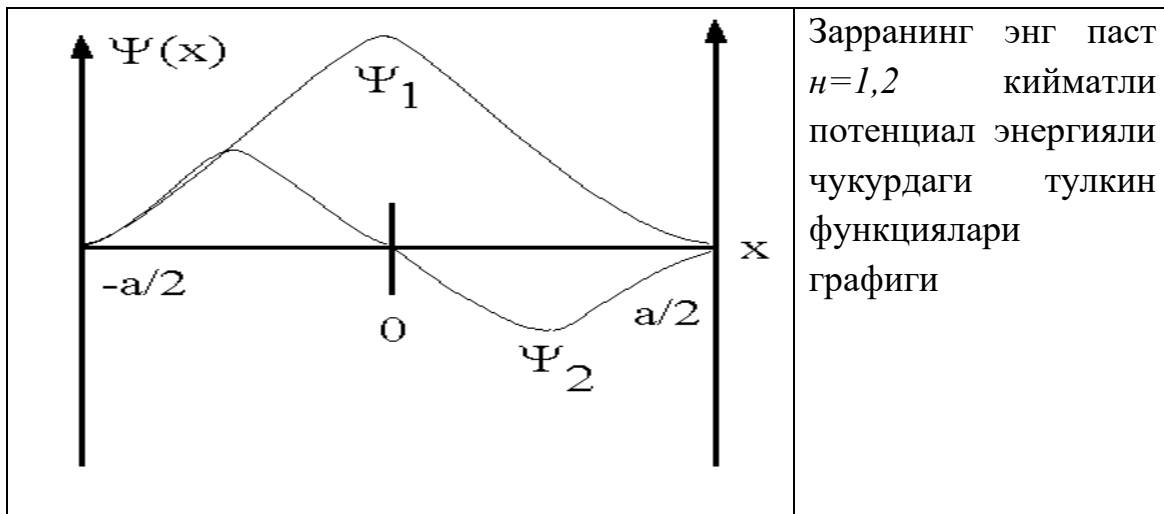
Ундан ташкари

$$k = \sqrt{2mE} / \hbar = n\pi / a \quad (17)$$

дан зарра энергияси куйидаги кийматларни кабул килиши мумкинлиги келиб чиқади:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} n^2, n = 1, 2, \dots \quad (18)$$

яъни зарра энергияси дискрет булади.



3. Энди зарранинг  $x$  уки буйлаб  $F = -kx^2$  кайтарувчи эластик куч таъсиридаги бир улчамли харакатини куриб чикамиз, бу ерда  $k$  - бикрлик коэффициенти. Бундай система чизикли гармоник осциллятор деб аталади.

Аниклик учун  $k = m\omega^2$ , де кабул киламиз, бу ерда  $\omega$  - тебранишлар частотаси, чизикли гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламасини куйидагича ёзиш мумкин:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi \quad (19)$$

Агар  $\xi = x\sqrt{m\omega / \hbar}$  ва  $\lambda = 2E / \hbar\omega$  белгилашлар киритилса, (19) куринишни олади:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = -\lambda\Psi \quad (20)$$

Бу тенгламанинг ечимини бевосита топиб булмайдиган, шунинг учун  $\xi \ll \lambda \xi^2$  деб кабул қиламиз (бу тебранишлар амплитудаси унча катта булмаганда уринлидир). Бу ҳолда (20) куйидаги тенгламага утади

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = \xi^2\Psi \quad (21)$$

Унинг ечими эса  $\Psi \sim \exp(\pm \xi^2 / 2)$  куйидагидек. Лекин тулқин функция чегараланган булганлиги туфайли, физик маънога эга манфий курсаткичли экспонентагина эга:

$$\Psi(\xi) = f(\xi) \exp(-\xi^2 / 2) \quad (22)$$

Бу функциянинг дастлабки (22) тенгламага куйиш орқали

$$\frac{d^2 f}{d\xi^2} - 2\xi \frac{df}{d\xi} + (\lambda - 1)\xi = 0 \quad (23)$$

ни оламиз.  $(\lambda - 1)$  нинг жуфт кийматларида  $(\lambda - 1) = 2n$  бу тенглама яхши маълум булган Эрмит тенгламасидир. Унинг  $n=0,1,2,\dots$  лар учун ечимлари  $H_n(\xi)$  Эрмит полиномларидир. Пастки  $n$  учун Эрмит полиномлари куйидагидек:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned} \quad (24)$$

Гармоник осцилляторнинг хос киймат ва хос функциялари учун куйидаги ибораларни оламиз:

$$\Psi(\xi) = c H_n(\xi) \exp(-\xi^2 / 2), \quad \xi = \sqrt{m\omega / \hbar} x, \quad c = \text{const}; \quad (25)$$

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (26)$$

**МАЪРУЗА № 4**  
**ВОДОРОД АТОМИ МАСАЛАСИ**  
**РЕЖА:**

1. Водородсимон арбиталлар, уларнинг радиал ва бурчак қисимларининг график кўриниши
2. Марказий майдон симметрияси туфайли бир электронли ҳолатнинг айнаши
3. Квант механика масалаларини ечишнинг тақрибий усуллари

*Мавзуга оид таянч иборалар:* Гамильтон оператори, Сферик координаталар, Бор формуласи, тулкин функция

Электроннинг ядронинг кулон майдонидаги харакати, яъни водород атоми ёки водородсимон ион тугрисидаги масалани куриб чикайлик. Бундай системанинг Гамильтон оператори электроннинг кинетик энергияси ва электроннинг ядро билан узаро таъсир потенциал энергияси операторларидан иборат булади.

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + \left( -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right) \quad 1)$$

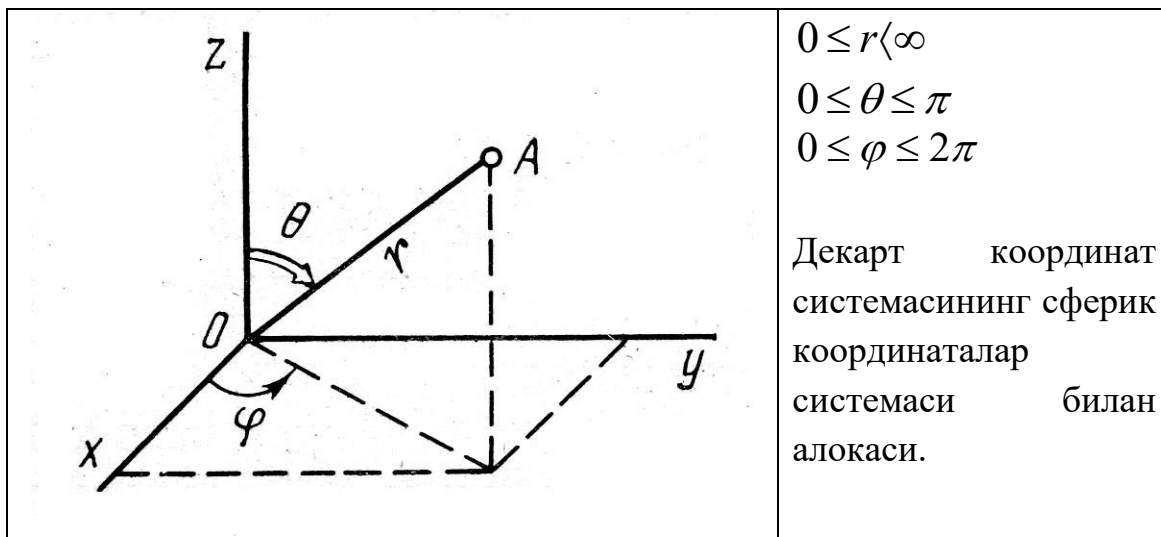
Бирок Шредингер тенгламасини келтириб, уни ечишдан олдин иккита мухим шартга келишиб олайлик. Биринчидан, бундан буён, гамилтонианда турли константаларни санаб утишдан кутулиш учун, биз СИ бирликлар системасидан атом бирликлари системасига утамиз, унда

- момент:  $\hbar$  - Планк доимийси = 1
- масса:  $m_e$  – электрон массаси = 1      2)
- заряд:  $e$  - электрон заряди = 1
- узунлик:  $a_0$  - Бор атом радиуси = 1

Электроннинг ядро кулон майдонидаги харакати масаласи сферик симметрияга эга булганлиги туфайли уни, декарт координатасидан сферик  $(r, \theta, \varphi)$  координаталарга утиб, унда ечиш мақсадга:

- $x = r \sin \theta \cos \varphi$
- $y = r \sin \theta \sin \varphi$
- $z = r \cos \theta$
- $dv = dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$

Сферик координаталарнинг узгариш чегаралари куйидагича:



Лаплас  $\nabla^2$  операторини сферик координаталр системасига утказилганда, у куйидаги курунишга эга булади:

$$\nabla^2 = \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2}$$

Юкоридагиларни хисобга олган холда Шредингер тенгламасини куйидагича ёзиш мумкин:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + 2\frac{1}{r} \Psi + 2E\Psi = 0$$

Бу эса, хусусий хосилали иккинчи тартибли дифференциал тенгламадир. Бундан тенгламалар узгарувчиларни ажратиш йули билан ечилади, яъни  $\Psi$  тулкин функцияси куйидаги курунишда кидирилади:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi),$$

Бу ерда хар бир купайтувчи факатгина бир узгарувчига боглик. **5)** ни **4)** га куйиб:

$$\frac{\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2\left( \frac{1}{r} + E \right) R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi) = - \frac{R(r)\Phi(\varphi)}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{R(r)\vartheta(\theta)}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

Тенгламанинг иккала томонини хам  $R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)$ , га купайтириб,

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2\left( \frac{1}{r} + E \right) r^2 = - \frac{1}{\vartheta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

хосил киламиз. **7)** тенгликнинг чап тарафи факат  $p$  узгарувчига боглик, ун



тарафи эса  $\theta$  ва  $\varphi$  ларга боғлиқ. Лекин тенгликнинг, ҳар хил узгарувчиларга боғлиқ томонлари факатгина бирон бир доимий катталиқка тенг булгандагина, бир-бирига тенг булиши мумкин:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2 \left( \frac{1}{r} + E \right) r^2 R(r) - cR(r) = 0$$

$c$  – доимий катталиқ. **7)** нинг унғ томони учун

$$-\frac{1}{\vartheta(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = c$$

ёки

$$\frac{\sin \theta}{\vartheta(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) + c \sin^2 \theta = - \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \quad \mathbf{9)}$$

Бу тенгликда ҳам, юкоридаги сингари, унғ ва чап тарафлари ҳар хил  $\theta$  ва  $\varphi$  узгарувчиларга боғлиқ ва улар димий катталиқк тенг булиши керак. Бу катталиқни мусбат ва  $m^2$  га тенг деб қабул қилавиқ, унда **9)** дан:

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

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) + \left( c - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \vartheta(\theta) = 0$$

Шундай қилиб, учта узгарувчили дастлабки Шредингер **4)**, тенгламаси энди ҳар бири биттадан узгарувчига боғлиқ булган, учта **8)**, **10)**, **11)** тенгламага парчаланди. Уларнинг ҳар бирини алохида қуриб чиқамиз.

Энғ содда тенглама **10)** булиб, унинг ечими

$$\Phi(\varphi) = A e^{\pm im\varphi}$$

Бу ерда  $A$  – доимий. Тулқин функциянинг бир қиймалиқ шарти

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \text{ или } A = A e^{\pm im2\pi}, e^{\pm im2\pi} = 1 \quad \mathbf{13)}$$

ни беради. Энди комплекс сонлар учун Эйлер формуласидан фойдаланиб,  $\cos(2\pi m) \pm i \sin(2\pi m) = 1$ , бу тенглик эса факат бутун қийматли  $m$  лар учун бажарилади:  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Доимий  $A$  ни нормаллаштириш шартидан топиш мумкин:

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

$$\text{ёки } A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

Ва нихоят,  $\Phi(\varphi)$  функция куйидаги куринишни олади:

$$\Phi(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm im\varphi}, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (14)$$

Шундай килиб,  $\theta$  ва  $\varphi$  ларга боғлиқ булган тенгламанинг ечимини топдик. Бу икки функциянинг купайтмаси тулкин функциянинг бурчак кисмини ташкил килади ва сферик гармоника деб аталади:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \mathcal{Y}(\theta)\Phi(\varphi) = \left[ \frac{1}{2\pi} \frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

$$l = 0, 1, 2, \dots; m = -l \dots 0 \dots l$$

Энди  $r$  координатага боғлиқ булган **8)** тенгламани ечамиз.

$n$  ва  $l$  уртасидаги боғлиқликни топамиз:

$$l \leq n-1, l = 0, 1, \dots, n-1$$

$\mu = (-2E)^{\frac{1}{2}}, E < 0$  кийматни **35)** га куйиб, **36)**ни ҳисобга олиб, дарҳол водородсимон атом учун атом бирликларидаги энергия ифодасини оламиз:

$$E = -\frac{1}{2n^2}$$

ёки СИ бирликларида, Бор формуласи билан айнан бир хил булган

$$E = -\frac{Z^2 m_e e^4}{2n^2 \hbar^2}$$

Шундай килиб, тулкин функциянинг  $R(r)$  радиал кисми учун ечимни оламиз ва у норма шarti билан куйидагича ёзилади

$$R(r) = \left[ \left( \frac{2}{n} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-r/n} \left( \frac{2r}{n} \right)^l L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{n} \right),$$

Бу ерда  $L_{n+l}^{2l+1} \left( \frac{2r}{n} \right)$  - Лагеррнинг кўшилган купхади.

## МАЪРУЗА № 5

### СПИН

### РЕЖА:

1. Элементар заррачалар спини ва унинг магнит моментига алоқаси
2. Спин оператори ва коммутацион муносабат
3. Спин орбитлли ўзаро таъсир ва унинг кўринишлари
4. Фермионлар ва бозонлар

**Мавзуга оид таянч иборалар:** Элементар заррачалар спини ва унинг магнит моментига алоқаси, спин оператори ва коммутацион муносабат, спин орбитлли ўзаро таъсир ва унинг кўринишлари, фермионлар ва бозонлар

Спин классик қиёслашга асосланмаган, бироқ электрон учун у белгиланган ўқдаги ( $z$ , бўлиши мумкин) қуйидаги проекцияни қабул қилади:  $+1/2\hbar$  ва  $-1/2\hbar$ .

Бошқа томондан кўринадикки, оператор матрица ўзига тегишли хусусий кўрсатилган диагонал йўналишида ва диагоналида хусусий қийматларини ўз ичига олади, шунинг учун оператор матрица спин проекцияси  $z$  ўқида ўзига тегишли хусусий ҳолати қуйидаги кўринишда бўлади:

$$S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}$$

Биз 4) дан  $A$  ни ҳисобга олиш билан (ИИ.33) коммутацион хусусиятларини олишимиз мумкин ва бошқа ўқдаги аниқ кўринишдаги операторлар спин проекцияси қуйидагича бўлади:

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}$$

нкциясини экан, у ҳолда у иккита хусусий функцияга ҳам эга бўлади.

Хусусий функция билан  $+1/2\hbar$  хусусий қийматни бундан кейинги ҳолларда  $a$  деб,  $-1/2\hbar$  хусусий қиймат билан  $b$  деб, қуйидаги кўринишда ёзамиз

$$S_z a = \hbar/2 a, \quad S_z b = -\hbar/2 b$$

Модомики функция  $a$  ва  $b$  вектор-устун эканлиги келиб чиқади, чунки бир хил (ҳар хил бўлмаган) зарралар — бу қонунан аниқлаш ва бирини бошқасидан фарқлаш мумкин эмас, яъни бир хил зарраларнинг бир хиллик қонунига бўйсўнувчи зарралардир.

Бунақа зарраларга элементар зарралар (электронлар, нейтронлар ва ҳ.к.) шунингдек микрозарралар таркибига кирувчи атомлар ва молекулалар

тегишлидир.

Бир хил зарраларнинг иккита катта синфи бўлиб, булар бозонлар ва фермионлардир.

Бозон (Бозе физик олим фамилиясидан олинган) — бутун спин қийматидаги зарралар. Бозонлар фермионлардан фарқ қилиб, Бозе — Эйнштейн статистикасига бўйсўнади, яъни битта квант ҳолатга чегараланмаган сондаги бир хил зарралар жойлашиш ҳуқуқига эга бўлади.

Кўплаб бозонлар системалари зарралар тўлқин функцияси ўрнини алмаштирига нисбатан симметриклигини тавсифлайди

Фермион — замонавий илмий тушунчадир: моддалар элементар зарралардан ташкил топган. Фермионга кварк, электрон, мюон, тау-лептон, нейтрино тегишлидир. Физикада — зарралар (ёки квазизарралар) ярим бутун (полуцелым) спин қиймати асосидадир. Ўз номи олинган Энрико Ферми физикаси сазовордир.

Фермионга мисоллар: кварклар (улар протонлар ва нейтронлардан тузилган, яъни фермион ҳам дейилади), лептонлар (электронлар, мюонла, тау-лептонлар, нейтринолар), коваклар (ярим ўтказгичлардаги квазизарралар).

Фермионлар Ферми — Дирак статистикасига бўйсўнади, яъни битта квант ҳолатда унчалик кўп бўлмаган бир хил зарралар жойлашиши мумкин (Паули принципи). Паули тақиқланган принципи бўлиши мумкин бўлган мураккаб кимёвий элементлар олинаётганда атомлар электрон булутлари барқарорлиги учун жавобгардир.

Ферми — Дирак статистикаси статик физикада — квант статистикаси, қўлланилаётган бир хил фермионлар системаси (зарралар билан ярим бутун (полуцелым) спинлар, Паули тақиқланган принципига бўйсўнувчи, яъни битта квант системада кўплаб бир хил зарралар бўлиши мумкин эмас каби қоидалар); фермионлар жойлашган эҳтимоллик тақсимооти термодинамик мувозанат ҳолатдаги системалар энергетик сатҳларида аниқланади; 1926 йилда италян физиги Энрико Ферми ва у билан бир вақтда инглиз физиги Полем Дирак унинг квант-механикавий маъносини аниқлашни таклиф қилишди; фермион мавжуд энергетик сатҳни эҳтимоллик билан кўришга имкон берди.

Ферми — Дирак статистикаси ишлари 1926 йилда чоп этилди, 1927 йилда эса у Арнольдом Зоммерфельдом металллардаги электронларда қўллади.

Ферми — Дирак статистикасида  $\epsilon_i$  энергиявий ҳолатдаги зарралар ўртача сони бўлиб, у қуйидаги кўринишда бўлади,

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}\right) + 1},$$

бу ерда

ни — и ҳолатдаги зарралар ўртача сони,  
 $\epsilon_i$  — и энергия ҳолати,  
 $g_i$  — и айниган карралик ҳолати ( $\epsilon_i$  энергиявий ҳолатлар сони),  
 $\mu$  — кимёвий потенциал (абсолют ноль температурадаги  $\epsilon_F$  Ферми энергиясига тенг),

$k$  — Больцман доимийси

$T$  — абсолют температура

Ферми-газ (идеал ҳолатда) кичик температура чегарасида  $\mu = \epsilon_F$  бўлади. Бу ҳолат ( $g_i = 1$  айниган палогая эргетик сатҳлар) зарралар функция таксимоти Ферми функцияси деб аталади:

$$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - E_F}{kT}\right) + 1}.$$

Ферми — Дирак статистикаси ва Бозе — Эйнштейн бир хил зарралар системаларига бўйсўнади яъни квант эффектларига аҳамият бермаслик мумкин эмас.

Квант эффектлари зарралар концентрацияси қийматида  $(N/V) \geq n_k$  намоён бўлади, бу ерда  $n_k$  — бу мувозанатда бўлмаган температурадаги квант концентрацияси, яъни зарралар орасидаги ўртача масофа берилган температурадаги идеал газ учун ўртача де Бройл тўлқинига тенг. Зарралар тўлқин функцияси концентрацияси  $n_k$  бир-бирига «дахлдор», лекин амалий жиҳатдан тўғри келмайди.

Ферми — Дирак статистикаси мувозанатда бўлмаган температурадаги фермионлар (зарралар, яъни ҳақиқий Паули тақиқланган принцип учун), Бозе — Эйнштейн — бозонларга бўйсўнади. Бозе — Эйнштейн статистикасидан тушунарлики, берилган ҳолатдаги и зарралар сони таққосланса

$$n_i = \frac{g_i}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} - 1}$$

бу ерда  $\epsilon_i > \mu$ , ни — и ҳолатда зарралар сони,  $g_i$  — и айниган сатҳ,  $\epsilon_i$  — и энергетик ҳолат,  $\mu$  — кимёвий потенциал системалар,  $k$  — Больцман доимийси,  $T$  — темература абсолют қиймати.

## **МАЪРУЗА № 6**

### **АТОМ ВА МОЛЕКУЛАЛАР УЧУН ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ**

#### **РЕЖА:**

1. Электрон ва ядро ўзгарувчиларини ажратиш
2. Адиабатик яқинлашиш. Потенциал энергия сирти.
3. Ҳозирги замон кимёси тузилиш назариясида потенциал энергия сиртининг рўли

#### 4. Мувозанатдаги конфигурация ва молекуляр конформация

**Мавзуга оид таянч иборалар:** Норелятивистик якинлашиш, кинетик энергия, Электронлар кинетик энергияси оператори, Электронлараро Ўзаро таъсир оператори

Норелятивистик якинлашишда молекуланинг Гамильтон оператори куйидаги курунишга эга булади

$$H = T_N + T_e + V_N + V_e + V_{Ne}$$

Бу ерда ядролар кинетик энергияси оператори

$$T_N = -\sum_{\alpha} \frac{\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}}; \quad M_{\alpha} - \text{ядро массаси } a, \quad ,$$

Электронлар кинетик энергияси оператори

$$T_e = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2;$$

Ядролараро Ўзаро итаришиш энергияси оператори

$$V_N = -\sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}}; \quad Z_{\alpha} - a \text{ ядро заряди.}$$

Электронлараро Ўзаро таъсир оператори

$$V_e = \sum_{i > j} \frac{1}{r_{ij}}$$

Ядролар ва электронлар тортишиш потенциал энергияси

$$V_{Ne} = -\sum_i \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}};$$

Табиийки, молекуланинг тулик тўлқин функцияси  $\Psi(R, r)$  ядроларнинг хам, электронларнинг хам координаталарига боғлиқ булади. Шунинг учун, Шредингер тенгламасини биз куйидаги курунишига эга булаемиз:

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r)$$

Агар, ядролар массасини, электронлар массасига нисбатан чексиз катта деб қабул қилсак, тенгламадаги ядролар кинетик энергияси 0 га тенг булади, яъни ядроларни харакатсиз деб қараш мумкин, бунда Гамильтон оператори куйидаги курунишни олади:

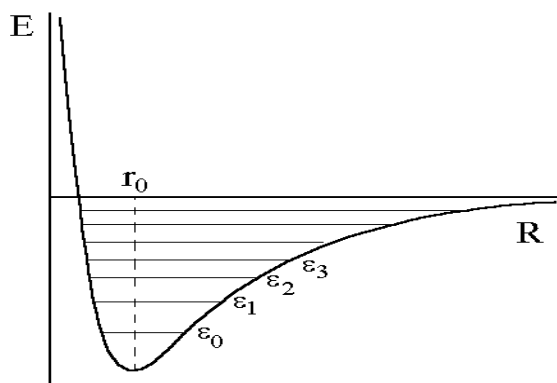
$$H = H_e + V_N$$

Бу ерда  $H_e$  - фақат электронлар координаталарига боғлиқ булган, электрон гамильтониани. Бу ҳолда электрон системаси учун Шредингер

ТЕНГЛАМАСИНИ

$$(H_e + V_N)\Phi_m(\bar{R}, r) = E(\bar{R})\Phi_m(\bar{R}, r)$$

Яъни электрон гамилтонианининг хос киймат ва хос функциялари ядро координаталарига бевосита боғлиқ булмаган функциялар булади.



Бу тенгламани ядроларнинг бир нечта маълум жойлашишлари учун ечиб, биз электрон системасининг ядролар жойланишига боғликлигини топишимиз мумкин. Икки атомли молекула учун бу график яхши маълум булиб, расмда келтирилган.

Хакикатда, электрон гамилтониани  $H_e$  Эрмит булганлиги туфайлм, унинг  $\Phi_m(\bar{R}, r)$  хос функциялари тулик ортонормаллашган базисни ташкил этади, бу, уз навбатида, бутун молекуланинг тулқитн функциясини куйидаги катор курунишида тасвирлаш имконини беради:

$$\Psi(R, r) = \sum_m \chi_m(\bar{R})\Phi_m(\bar{R}, r)$$

Бундай яқинлашиш Борн-Оппенгеймер яқинлашиши деб аталади ва ядроларнинг эффектив потенциали шунчаки  $E(\bar{R})$  электрон энергияси функцияси эканлигини билдиради. Одатда, аксари молекулалар учун Борн-Оппенгеймер яқинлашиши яхши натижалар беради ва унинг аниқлиги ядролар массаси ортиб бориши билан ортиб боради.

**20)** га биноан, куп электронли система гамилтонианининг хоссалари:

$$\left. \begin{aligned} H_{eff} \varphi_i(r_i) &= \varepsilon_i \varphi_i(r_i), i = 1, 2, \dots, N \\ H_{eff} &= \sum_i (h_i + u_i) \end{aligned} \right\}$$

Яъни бир электронли тўлқин функциялар унинг хос функциялари, хос кийматлари эса бир электронли энергиялардир. Бу иборани ёйиладиган булсак,

$$h\varphi_k(r_1) + \sum_i \int \frac{1}{r_{12}} |\varphi_i(r_2)|^2 dr_1 \varphi_k(r_1) - \sum_i \int \frac{1}{r_{12}} \varphi_i^*(r_2) \varphi_k(r_2) dr_1 \varphi_k(r_1) = \varepsilon_k \varphi_k(r_1)$$

Бу ерда иккинчи хад -  $I_{и\omega\kappa}$  кулон интеграллари йигиндиси, учинчиси эса -  $K_{и\omega\kappa}$  алмашиниш интегралари.

Узи билан келишган майдон услуби (УКМ) бир неча кетма-кет

кадамлардан иборат булиб, улар циклик равишда, ечим белгиланган аникликка эришмагунча кайтарилaveraди.

1. Биринчи кадамда  $\{\varphi_i^0(r_i)\}$  синов тўлқин функциялари танланади.
2. Улар ёрдамида икки электронли потенциал тузилади ва у энди электронларнинг алохида координаталарига боғлиқ булмайдди, чунки бу функция интеграл функция булади.
3. Тузилган потенциал ёрдамида бир электронли тенгламалар системаси ечилади ва янги  $\{\varphi_i^j(r_i)\}$  бир электронли тўлқин функциялар туплами топилади.
4. Олинган натижа аниклиги олдингиси билан солиштирилади ва агарда, сезиларли узгаришлар мавжуд булса, олинган туплам синов хисобланади ва бутун аиал 1 кадамдан бошлаб кайтариллади.

Бир электронли тўлқин функцияларни куйидаги курунишда олайлик:

$$\varphi_k(r_l) = \sum_a c_{ka} \chi_a(r_l) .$$

Албатта,  $\{c_{ka}\}$  ни топсак,  $\{\varphi_i(r_i)\}$  хам маълум булади. Энди дастлабки тенгламага куйиб:

$$\sum_a c_{ka} h \chi_a + \sum_i \sum_a c_{ka} (2I_i - K_i) \chi_a = \sum_a c_{ka} \varepsilon_k \chi_a .$$

$\chi_b^*$  га купайтириб ва интеграллаб:

$$\sum_a c_{ka} h_{ba} + \sum_i c_{ka} \sum_a (2I_i - K_i)_{ba} = \sum_a c_{ka} \varepsilon_k \int \chi_b^* \chi_a dr_l, b, k = 1, 2, 3 \dots n$$

ни оламыз,

$$h_{ba} = \int \chi_b^* h \chi_a dr_l$$

$$(2I_i - K_i)_{ba} \sum_a c_{ka} = \int \chi_b^* (2I_i - K_i) \chi_a dr_l$$

Фок операторини киритамиз

$$F \equiv h + \sum_i (2I_i - K_i)$$

ва  $S_{ba} = \int \chi_b^* \chi_a dr_l$  белгилаймыз. Энди тенгламамизни куйидагича ёзиш мумкин:

$$F \varphi_k = \varepsilon_k \varphi_k$$

Бир электронли орбиталлар учун **.6)** ифодани хисобга олиб, **.12)** ни куйидагича ёзиш мумкин:



$$\sum_i c_{ka} (F_{ba} - S_{ba} \epsilon_k) = 0$$

Бу одатдаги бир жинсли алгебраик тенгламалар системасига ухшасада,  $I_u$  ва  $K_u$  бошлангич коэффициентлар оркали аникланади,  $\Phi_{ab}$  матрица элементлари  $c_{ib}^* c_{ia}$  купайтмани уз ичига олади, яъни система чизикли эмас.

## **МАЪРУЗА № 7**

### **АТОМ ВА МОЛЕКУЛАНИНГ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИ**

#### **РЕЖА:**

1. Электрон конфигурация ва атомлар терми, Хунд қоидаси
2. Атомларда моментлар қўшилиши
3. Атом арбиталларининг кенг тарқалган типлари

**Мавзуга оид таянч иборалар:** Кимёвий боғ, валент электрон орбиталлар, кутблилик, Молекуляр орбиталлар назарияси, Боғловчи молекуляр орбиталлар

Кимёвий боғ, бу системанинг тулик энергияси камайиши билан борадиган, зарралар электрон булутлари Ўзаро копланиши билан белгиланган атомлар Ўзаро таъсиридир. Ковалент кимёвий боғнинг хосил булишидаги тулик энергиянинг камайишида алмашилиш Ўзаро таъсирининг урни мухимдир. **Ковалент боғ**— валент электрон орбиталлар жуфтининг копланиши ёки умумлашиши оркали хосил булади. Ковалент бога хос хоссалар-йуналтирилганлик, туйувчанлик, кутблилик, кутбланувчанликлар — бирикмаларнинг физик хоссаларини тулик белгилайдилар. Боғнинг йуналтурувчанлиги модданинг молекуляр структураси билан ва молекуланинг геометрик шакли билан белгиланади. Икки боғ уртасидаги бурчаклар валент бурчаклар деб аталади. Туйинувчанлик— атомларнинг чекланган микдордаги ковалент боғлар хосил килиш қобилиятидир. Атомлар уртасида хосил булган боғлар микдори уларнинг ташки электрон каватидаги орбиталлар сони билан чекланган. Боғнинг кутблилиги атомларнинг турли электрманфийлиги туфайли электрон зичликнинг турли таксимоти натижасидир. Боғнинг кутбланувчанлиги ундаги боғ электронларининг ташки электр ва магнит майдони ёки реакцияга киришаётган зарра таъсирида силжишидир. Кутбланувчанлик электронларнинг ҳаракатчанлиги билан белгиланади. Ковалентр боғларнинг кутлилиги ва кутбланувчанлиги молекулаларнинг кутбли реагентларга нисбатан реакция қобилиятини билдиради.

**Молекуляр орбиталлар назарияси (МО)** электрон зичлиги таксимоти тугрисида тасаввур беради ва молекулалар хоссаларини тушунтириб бериш имконини беради. Бу назарияда атом тугрисидаги тасаввурлар молекулаларга

тадбик килинган. Бунда молекула алохида атомлар мажмуаси эмас, балки бир бутун система сифатида каралади. Молекуладаги электронлар молекуляр орбиталларда бир-бирининг ва барча ядролар куч майдонида ҳаракатланади ва дискрет энергетик ҳолатларга эгадирлар.

Бу назарияда молекуладаги барча электронлар худди атомдаги сингари хос молекуляр орбиталларда тақсимланган булади. Электроннинг атомдаги ҳолати Шредингер тенгламасининг ечими булган тўлқин функцияси билан тавсифланади. Туртта квант сонга боғлиқ булган муайян математик курунишга эга булган, шунингдек, нормаллашиш ва бир қийматлилиқ шартини қаноатлантирган  $\psi$  тўлқин функцияси Молекуляр орбитал деб аталади. Хар бир орбитал электрон орбиталдаги энергетик ҳолатини тавсифловчи квант сонлар мажмуасига эга булади. Атомларнинг яққа марказли орбиталларидан фарқли уларок, молекулалар икки ёки ундан ортиқ атом ядролари атрофидаги куп марказли орбиталларга эга буладилар. Хар бир молекуляр орбитал, ионланиш потенциалли билан характерланадиган аниқ энергияга эга булади.

Атом s-, p-, d-, f- орбиталлари сингари молекуляр орбиталлар грек алфавити  $\sigma$ -,  $\pi$ -,  $\delta$ -,  $\gamma$ - билан белгиланади. МО атом орбиталлар етарли даражада яқинлашганида уларнинг композицияси сифатида руёбга келади. МО даги электронлар сони ва уларнинг типи курсатилган ёзув молекуланинг конфигурациясини ифодалайди. Молекуляр орбиталларнинг уч тури мавжуд: боғловчи, бушаштирувчи ва бетараф. Боғловчи молекуляр орбиталлардаги электронлар боғни мустаҳкамлайди, бушаштирувчи МО даги эса уни бекарорлаштиради. Молекула, факатгина боғловчи орбиталдаги электронлар сони бушаштирувчидагига нисбатан куп булгандагина, барқарор булади. Бетараф орбиталларда жойлашган электронлар химиявий боғ ҳосил булишида қатнашмайдилар. Молекуляр орбиталлар назариясида боғнинг тартиби куйидаги ифода билан аниқланади

$$N = \frac{n_{\text{bond}} - n_{\text{aer}}}{2}$$

Бу ерда  $n_{\text{bond}}$  ва  $n_{\text{aer}}$  — электронларнинг боғловчи ва бушаштирувчи орбиталлардаги сони.

Валент боғлар услубига нисбатан бу услуб куйидаги афзалликларга эга:

1. Электрон такчил молекулалар (диборан), молекуляр радикаллар (азот(1)-оксиди), молекуляр ионлар(нитрозил, нитроил, гидразоний, оксигенил), гипервалент бирикмалар (инертгазлар бирикмалари)даги кимёвий боғни тушунтириб беради.

2. Куп марказли орбиталларга эга булган молекулаларнинг ҳосил булишини тушунтириб беради.

3. Водород богни ковалент богнинг хусусий холи сифатида, электрон зичликлари делокализацияланиши модели ва уч марказли турт электронли боглар хосил булиши оркали (масалан,  $-X\cdots[\Phi-X\cdots\Phi]-$ ) тушунтириб беради.

Валент боглар услуги, Шрёдингер тенгламасини куп электронли молекуляр система учун ечиш услубидир. У молекуладаги атомлар уртасида икки марказли кимёвий боглар хосил булишига асосланган. Бу тасаввурлар Гайтлер – Лондон услугини куп электронли молекулаларга тадбик килиш услубидир ва у биринчи марта  $H_2$  молекуласини тугри тушунтириб берган.

Валент боглар методининг асосий физик мохияти шундаки, бунда молекуланинг тўлқин функцияси уни ташкил этувчи атомларнинг тўлқин функциялари оркали тасвирланади. Кимёвий богнинг хосил булиши атомларнинг эркин электронларининг спинларини жуфтлашиши хисобига деб каралади. Шу аснода валент боглар усули валентлик тушунчасини киритади. Молекуланинг структура формуласидаги хар бир валентлик чизигига икки тўлқин функцияси: электронлар координаталарини урин аламашилишига нисбатан симметрик булган фазовий  $\Phi(1,2)$ , ва бу опреацияга нисбатан антисимметрик булган, карама-карши спинли икки электронни тавсифловчи спин  $\sigma(1,2)$  функциялари купайтмаси куринишида ёзилади; бунда, белгиланишдаги 1 ва 2 ракамлар биринчи ва иккинчи электроннинг фазовий ва спин координаталарини белгилайди. Демак,

$$X_{AB}(1,2) = \Phi(1,2)\sigma(1,2).$$

Мураккаброк молекулалар учун эса куп электронли тўлқин функцияси Паули принципига биноан антисимметрик тарзда,  $X_{AB}(1,2)$  куринишидаги икки электронли тўлқин функция ва икки марказли богларда банд булмаган жуфтлашмаган электронлар ва умумлашмаган электрон жуфтлар, ички каватлар электрон холатларни тасвирловчи функциялар купайтмаси куринишида ёзилади.

### **МАЪРУЗА № 8** **МОЛЕКУЛАЛАРНИНГ ФАЗОВИЙ ВА ЭЛЕКТРОН** **ТУЗИЛИШИНИ ҲИСОБЛАШ УСУЛЛАРИ**

#### **РЕЖА:**

1. Квант механик ва классик механик услублар
2. Молекуляр динамика
3. Ноемперик ва ярим емперик усуллар

*Мавзуга оид таянч иборалар:* Кимёвий динамика, реакциянинг статик назарияси, ўзаро таъсирнинг конфигурацион усулиб, бирламчи тўлқин, квант кимёсининг «Ананавий» усули, Хартри-Фока усулига, функция

Бу фанни икки қисмга булиб караб куриш мумкин, статика ва динамика.

$$\left\{ \begin{array}{l} |F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}| = 0, \\ \sum_{\nu=1}^N (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) c_{i\nu} = 0. \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} |H_{kl} - E_l \delta_{kl}| = 0, \\ \sum_{k=0}^M (H_{kl} - E_l \delta_{kl}) A_{kl} = 0. \end{array} \right.$$

**Зичлик функционали назарияси.** Квант кимёсининг «Ананавий» усули, Хартри-Фока усулига асосланган булиб таянч нукта ва квант системалар холатини характерловчи тўлқин функция сифатида кулланилади, угнанилаётган боғланишларни кимёвий хусусиятини, энергиясини ва тузилиши хақида аниқ жавоб бериши мумкин. Бунинг учун электроннинг коррелированланган харакатининг энергиясининг тулик микдорини ва АО нинг куринишини, хатосиз ташкил этган асосий туплам зарур. Хозирда бундай хисоблар факат энг оддий молекула учун кулланилади. Хатто энг юкори якинлашув Фулл СИ хам, худи СС еки МСССФ 10 огир атомлардан ташкил топлан молекуляр системаларда куллинилади. Бу усулда жуда жозибали альтернатив ендашиш зичлик функциясининг назариясининг кулланилишига асосланган (ЗФН) (*Денситий Фунс-тионал Тҳеорй, ДФТ*). ЗФН усули жуда купол якинлашиш булишига карамасдан куп холларда ва куп системаларда бирлантирилган кластерлар ва КВ ларнинг квадратланишдан олинган усулининг аникликги еки хатто аникликдан юкори нукталар натижасини беради. Ва бу холат вақтнинг сарфланишида ва компетер ресурсларида худи Хартри-Фок усулидекдир!

Функционал нима дегани? Функция – бу бир катор сонларнинг бошкаси билан тугри келишидир, яъни функция сонларни «олади» ва «беради» унга тугри келган сонларга:  $y = \phi(x)$ . Функционални сон ва функцияга мос холда куйилади, кайсики уз холатида, бошка сонларга тугри келади, яъни  $y = \Phi[\phi(x)]$  еки оддий  $y = \Phi[\phi]$  га. Функционал билан бирга юкорида курсатилган операцияларни бажариш мумкин, худди функциядаги каби (масалан, дифференциялаш).

$$\delta F[f] = F[f + \delta f] - F[f] = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \delta f(x) dx$$

$$\frac{\delta}{\delta f(x)} (F_1 F_2) = \frac{\delta F_1}{\delta f(x)} (F_2) + \frac{\delta F_2}{\delta f(x)} (F_1) \text{ и т.д.}$$

ЗФН усулида физик каталикларнинг калити бу электрон зичлик булиб  $\rho$ , у системани ташкил этган электронларнинг функциявий кординатаси мохиятидир. Хартри-Фок усулидаги бита электрон учун, кайсики молекуладаги

барча электронларнинг хосил булишига тенг булган электрон зичликдир

$$\rho_{total}(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2.$$

Квант ситемасини тасвирлашда куп йиллар давомида кулланилган электрон зичлик катъий асосланган интуицияга асосланган эди. Электрон зичлик тўлқин функцияга нисбатан жозибалидир.

Биринчидан, у физик аниқланган, физик маънога эга булмаган тўлқин функциядан фаркли уларок улчаса булади:

Иккинчидан, Н-электрон системаларининг тўлқин функцияси 3Н электронлар кординатасига боглик (еки 4Н га хам, агар спиннини эътиборга олсак) бунда электрон зичлик доим молекуладаги электорлар сонига боглик булмаган 3 кординаталар функция иборат.

Муаммо куйидагидан иборат: электрон зичлик ва энергия орасида Ўзаро таъсирни борлигини аниқлаш, агар бу таъсир булса унинг аниқ куриниши кандайлиги аниқлаш.

### **Хоэнберг ва Кона назарияси.**

1964 йил Хоэнберг ва Кона асосий холатнинг хусусияти ЭЗН-иккинчи тугилиши булган  $\rho$ -электрон зичликнинг функционалидан иборат булган теоремасини исботлашди. Яъни аниқрок айтганда Хоэнберг ва Кона теоремасига асосланиб **молекуланинг асосий холат энергияси электрон зичлик функционали хисобланади ва бунда энергия минималь булади, агар  $\rho$  аниқ электрон зияликнинг асосий холати булса.**

### **Кона-Шема назарияси.**

ЭЗН усули кулланилишининг бошланишида Кона ва Шем таклиф килган хисобланувчи кимёда орбиталнинг хисоб схемасида ишлаб чиқариш амалга оширилди. Кона-Шама назариясининг асосий гоёси кинетик энергия функционалини икки қисмга булишга асосланган, биринчидан ТС Ўзаро таъсирлашмайдиган электронлар системасига жавоб берувчи орбиталларнинг тузилиши формалигида куллинилиш аниқлиги хисобланади, иккинчидан ТС коррекциясини тугирлайдиган аъзони билдиради.

$$T[\rho] = T_S[\rho] + T_C[\rho],$$
$$T_S[\rho] = \sum_i^M \left\langle \varphi_i \left| -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right| \varphi_i \right\rangle.$$

Шак шубхасиз келтирилган таклиф молекулалар ситемаси тасвири учун амалий тулик Хартри-Фокка анологидир.

а) Орбиталларни ташкил этиш учун ЛКАО усули кулланилади (11.4

кисмга каранг).

б) атом орбиталлар тасвири асосий тупламлар натижасида амалга оширилади (12,2-12,6 кисмга каранг).

в) орбитал ва уларнинг энергияси Ўзаро келушиш процедураси ердамида итерацион йулда жойлашади.

### **Квант кимёсининг тақрибий усуллари**

**Ярим эмпирик усул.** Эмпирик булмаган ҳисобларни кулашда ЭХМдаги (~70%) вақтнинг асосий сарфланиши электронлар орасидаги Ўзаро таъсир интеграллини ҳисоблашга қаратилгандир ( $\mu\nu|\lambda\sigma$ ). Молекулалар сонининг қупайиши натижасида бундай интеграллар сони  $N^4$  пропорционал ҳолатда усади,  $N$  – АО базиснинг улчамидир. Бунга кура ҳисобнинг қиймати ва вақти ҳам ушиб боради. Компьютер ресурсларининг қуп сарфланиши ҳисоблаш қийин булган интегралларининг параметрларини алмаштиришга олиб келувчи бир канча соддалашган схемалар ишлаб чиқаришга олиб келди. Бу катталиклар тажрибавий маълумотлардан олинган (масалан, атомнинг ионизация потенциали ҳар хил валент ҳолатлардан), еки физик маънога эга булмаган параметрлардан яъни ҳисоблар тажрибавий маълумотлар билан мос тушиш усулида танланган. Бундан ташқари, Ўзаро таъсир интеграллини аниқловчи параметрларни уз ичига олган турли хил яқинлашиш ифодалари кулланилади. Берилган ендашувга асосланган усул *ярим эмпирик* деб аталади. Интегралларни аниқлашда параметрлар туплами ва тенгламалар ярим эмпирик усулдаги *параметризацияни* ифодалайди. Турли-хил сатхлардаги электронлар орасидаги Ўзаро таъсир интегралларнинг бефарқлиги ярим эмпирик усулдаги иерархияликни яратади. Бунда фақат умумий-валент усулларни қараш билан чегараланамиз, яъни молекуладаги электронлар боғланишини исталган турини тасвирлашда кулланиладиган усулга қарши булган, яъни, масалан,  $\pi$ -электрон усулидан (Хюккел усули), қайси-ки бу фақатгина молекуланинг  $\pi$ -электронлар системасига боғлиқлигида кулланилади.

**Қаралаётган кейинги ярим эмпирик усуллари валент яқинлашиш усуллари ҳисобланади, яъни эмпирик булмаган усулдан фарқли уларок уларда фақатгина АО валент қаватлардаги электронларнинг валентлигини ҳисобга олинади.**

Валент булмаган (қолдик) электронларнинг таъсири эмпирик параметрларда ноаниқ ҳисобланади. Полиэмпирик ҳисоблар натижаси бир вақтда молекуланинг ҳам физик ҳам кимёвий хусусиятини етарли даражада аниқ бера олмайди ҳақида узига узи аниқ ҳисоб бериши шарт.

Биринчидан, назарияни соддалаштириш муқаррар равишда ҳисоб натижаларни қуполланишига олиб келади, иккинчидан, параметрларни мослаштариш биттадан айрим ҳолларда бир канча усуллар келтириб чиқаради.

Бу билан боглик холда хар-хил параметризация усуллари тугилади, каникарли холатда муайян хусусиятни еки группавий хусусиятларни тасвирлайдиган.

Куйидаги асосий шартларни соддалаштирилган назий модел каноатлантириши шарт:

1. Яримэмпирик усул катта молекулалар хисобида кулланилиши учун етарли даражада сода булиши шарт.

2. Улар Хартри-Фока усулидаги етишмовчиликни параметризация ердамида компенсациялаши шарт (электронлар Ўзаро богликлигини, нолинчи тебранишлар энергиясини).

3. Хисоблар натижаси ортогональ узгартирувчилар АО га нисбатан инвариант булиши шарт.

Бу шундан далолат берадики, куйидаги катталиклар: энтальпиянинг хосил булиш киймати, диполь моментини, электронлар жойлашиши ва хокозалар фазода молекуланинг бурулишига боглик булмаслиги шарт.

### Нолинчи дифференциал копланиш якинлашиши.

Эслатамиз, МО ЛКАО усулида,  $\Psi_i$  орбитали  $\chi_\mu$  атом орбиталлининг чизикли комбинацияси билан аппроксимацияланади.

$$\Psi_i = \sum_{\mu} c_{i\mu} \chi_{\mu},$$

$c_{i\mu}$  – таксимланиш коэффициенти. Ярим эмпирик усулда АО ни тасвирлаш учун орбиталнинг слэтер типи кулланилади.

$n, l, m$  – Асосий, орбитал ва магнит квант сонлари,  $N$  – нормалловчи константа,  $\xi$  – слэтеров экспонентаси,  $Y_l^m(\theta, \phi)$  – сферик гармоника ва  $P_l^m(\cos\theta)$  – Лежандр купхадининг қўшувчиси.  $\xi$  – катталик одатда Слэтер конунига мос холда танланади.

Молекуланинг хусусий (МО) функцияни ва хусусий гамельтон кийматни (МО энергиясини) топиш учун Хартри-Фока-Рутаана тенгламасини ечиш шарт.

$$\sum_{\nu=1}^N (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) c_{i\nu} = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots, N.$$

Бу ерда  $\varepsilon_i$  – молекуляр орбиталнинг бирламчи-электрон энергияси  $\Psi_i$ ,  $S_{\mu\nu}$  – коплаш матрица элементи

$$S_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^*(1) \chi_{\nu}(1) dq_1,$$

$F_{\mu\nu}$  – Фока матрица элементи

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda=1}^N \sum_{\sigma=1}^N P_{\lambda\sigma} \left[ (\mu\nu | \lambda\sigma) - \frac{1}{2} (\mu\lambda | \nu\sigma) \right].$$

$X_{\mu\nu}$  – майдондаги «ялангоч» атомларнинг электрон энергиясини характерловчи колдик интеграл:

$$H_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^*(1) \hat{H}^{ocm}(1) \chi_{\nu}(1) dq_1.$$

Эмпирик булмаган усул (аб иницио – лотинча, бошидан) аниқ холда бу тенгламаларни соддалаштирмасдан ечади. Яримэмпирик усулларда  $\mu$  ва  $\nu$  га тенг булган атом орбиталлари орасида дифференциал копланиш якинлашишлари киритилади,

$$\chi_{\mu} \chi_{\nu} dq = \delta_{\mu\nu} \cdot \chi_{\mu}^2 dq,$$

$\delta_{\mu\nu}$  –Кронекер символи. Бу холатда икки электрон интегралини куйидагича езишимиз мумкин

$$(\mu\nu | \lambda\sigma) = (\mu\mu | \lambda\lambda) \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\sigma}.$$

Яримэмпирик усулда куп марказли интеграллар Ўзаро таъсири тахминан нолга тенгдир, шу билан бир каторда сезиларли даражада хисоблаш вақти кискаради. Юкорида каралган Хартри-Фока-Рутаана содалаштирилган хисоб схемаси нолли дифференциал копланиш деб номланади (НДТ). Инглисча транскрипцияда – НДО (Неглест оф Дифференциал Оверлап) еки ЗДО (Зеро Дифференциал Оверлап).

НДТ якинлашиши хар-хил усулларда турлича реаллашади. Аппроксимации тенгламаси яримэмпирик усулларни номлашда кайтарилади. Бу:

–дифференциал копланишдан буткул воз кечиш – ТЯДТ (СНДО, Сомплете Неглест оф Дифференциал Оверлап);

–дифференциал копланишдан кисман воз кечиш – КЯДТ (ИНДО, Интермедiate Неглест оф Дифференциал Оверлап);

– икки атомли дифференциал копланиш – ИАЯДТ (НДДО, Неглест оф Диатомис Дифференциал Оверлап).

### Хюккел усули

$\pi$  - Электрон якинлашиш факат  $\pi$ -электронлар системасининг туйинган квант механик хисоблари ва ароматик кўшилишлари учун хисобга олинишига асосланган. Колган валент  $\sigma$ -электронлари тегишли булган ва молекула электронлари электро статик майдондаги  $\pi$ -электронлар харакатидек ва тахмин килинганидек  $\pi$ -электрон системасининг узгаришига боглик булмаган шавкатсиз скелетдек каралади.

Яримэмпирик усулда бу электронларнинг таъсири параметрларни танлаш



еки потенциалнинг формасига караб урагнилади. Бу гоё 1931 й. немес олими Е. Хюккел томонидан таклиф килинган. Жиддий гапирганда, электронлар фаркланмаслигини хисобга олган холда  $\pi$ - еки  $\sigma$ -электронлар хақида эмас симметрияга мос келган тўлқин  $\pi$ - и  $\sigma$ -холатларни функциясини тасвирлаш керак эди. Бирок, бундай тушунчалар, « $\pi$ -электронлар» одатий булиб колди, кайсики уларни замонавий квант-кимё термини каби караш мумкин.  $\sigma$ - ва  $\pi$ -холатлар симметриясини ифодалаш ясси куп атом молекулаларда атом орбиталларини ажратиш мумкинлигига, келтирилган молекуляр орбиталларини хосил килувчи базисни тасвирлайдиган тезкор иккита грухга ажралишига асосланган.

Булардан бири  $\pi$ -орбиталига боғлиқдир, кайсики молекуланинг ясилигининг кайтарилиш нисбатига антисимметриклигигадир, иккинчиси  $\sigma$ -орбитали бу кайтарилишга нисбатан симметрикдир.

$\pi$  - электронлари факатгина симметрия хусусиятлари билан  $\sigma$  - электронларидан фаркланиб колмайди. Биринчидан хар бир грух электронлари молекуланинг турли хил қисмларида харакатланади.  $\pi$  -электронлари ясси молекулаларда нолга тенг эхтимолликка эга, бу холатда  $\sigma$  - электронлари бу яссиликда максимал эхтимолликка эгадир.  $\pi$  -Электронлари одатда кучсиз молекулалар билан боғлиқ,  $\sigma$  - поляризацияланган электронларга нисбатан, осон ионизацияланади ва катта реакциявий хусусиятга эга, шунинг учун куп холларда кимёвий ва физикавий холатлар учун жавобгар  $\pi$  - электрон боғланиш (электронлар спектри, ионизация потенциал ива хоқозалар).

Хюккелнинг молекуляр орбиталь (ХМО) усулида электронлар аро туртиш интегралдан тулик бефаркланади.

Агар кандайдир конкрет хисоблар утказиш талаб килинса, масалан: бирлашган грухлар дипол моментини, бир-бирига боғланган системадаги  $cn^2$ -гибридланган азотни киритганимизда, бир канча стандарт боғланувчилар хисоби келтирилади ва ундан кейин яхши такрорланувчи тажрибавий кийматлар кайтарилиши танланади.

## СЕМИНАР МАШҒУЛОТЛАРИ

### СЕМИНАР № 1

#### АТОМ ТЎҒРИСИДАГИ ТАСАВВУРЛАРНИНГ РИВОЖЛАНИШИ

##### Атомнинг тузилиш модели

Атомнинг биринчи тузилиш модели XX аср бошларида таклиф этилган. 1901 йилда Жан Перрен атомнинг ядро-планетар моделини таклиф қилган. Бу моделнинг батафсил тузилишини 1904 йилда япон физики Хантаро Нагаоки аниқлаган. Нагаоки моделида атом Сатурн сайёрасига ўхшатишган; планета ролини мусбат зарядланган шар бажаради ва атом хажмининг асосий қисмини ташкил қилади, электронлар эса Сатурн атрофида йўлдошларга ўхшаб, атрофида ҳалқа ҳосил қилиб жойлаган дейилади. Анча кенгроқ тузилишлардан бири *атомнинг кекс моделида* олинган.

Уильям Томсон (лорд Кельвин) атом бу қуюқ мусбат зарядланган материядан яъни тартиб билан таксимланган электронлардан иборат деган тушунчани илгари сурди. У. Томсон фикрича оддий атом яъни водород атоми - марказида электрон жойлашган мусбат зарядланган шардир. Бу моделни Ж. Ж. Томсон мукаммал ўрганиб, мусбат зарядланган шар марказида жойлашган электрон бир йўналишли концентрик ҳалқани ҳосил қилади деб ҳисоблади ва рентген нурларининг сочилишини айнан электронлар сочилиш маркази деган асосда атомдаги электронлар сонини ҳисобловчи усулни таклиф қилди. Ўтказилган тажрибалар элементлар атомидаги электронлар сони тақрибан атом масса катталигининг яримига тенглигини кўрсатди.

Ж. Ж. Томсон биринчи бўлиб элементлар хусусиятини даврийлиги билан атомлар тузилишини боғлашга уриниб кўрди, унинг тахминича атомдаги электронлар сони элементдан элементга ўтётганда тўхтовсиз ортиб боради.

1906-1909 йилларда Ганс Гейгер, Эрнст Марсден ва Эрнест Резерфорд Томсон моделини тажрибада аниқлашга уриниб кўришди, бунда улар ўзларининг машҳур бўлган олтин фольгада  $\alpha$ -зарра сочилиш тажрибасини қўллашди. Улар электрон ўрнига  $\alpha$ -зарралардан фойдаланишди, бунда  $\alpha$ -зарраларнинг массаси катта бўлганлиги учун ( электронлар массасидан 7350 марта ката) электронлар билан тўқнашганда сезиларли даражада қайтмайди ва фақат атомнинг мусбат қисмидаги тўқнашувларни регистрация қилади. Бунда улар  $\alpha$ -зарралар манбаи сифатида радийни олишиб, юпка олтин фольгадаги заррачалар сочилишни эса қоронғу хонада жойлаштирилган рух сульфидли экрандаги сцинтиляцион чакнаш орқали регистрация қилишди.

Ўтказилган тажрибалар кутилган натижаларнинг тескарисини берди. Яъни  $\alpha$ -зарраларнинг кўп қисми олтин фольгадан тақрибан тўғри

траекторияларда ўтди, аммо шу билан бир қаторда баъзи бир  $\alpha$ -зарралар катта бурчак остида қайтганлиги ҳам кузатилди, бу ҳолат атомда жуда зич жойлашган мусбат зарядлар борлигидан далолат берарди. 1911 йилда Резерфорд бу ўтказилган тажриба натижаларига асосланиб, ўзинг атомнинг ядро моделини таклиф қилди бунга кўра атомнинг марказида мусбат зарядланган яъни ҳажми атом ўлчамлари билан таққосланганда жуда кичкина ядро, унинг атрофида эса электронлар айланади, уларнинг сони элементнинг атом массасининг тақрибин ярмига тенг.

Резерфорд атом модели ҳам қаршиликлардан иборат эди, чунки классик электродинамика қонунлари асосида ядро атрофида айланадиган электронлар электромагнит нурланишни тўхтовсиз чиқариши натижасида ўз энергиясини йўқотади. Бунинг натижасида электронлар орбитаси радиуси тезлик билан камайиши лозим эди ва бу тахминлар атомнинг яшаш вақти жуда қисқалиги кўрсатарди. Шу билан бир қаторда, Резерфорд модели 1913 йилда Дания физики Нильс Хенрик Давид Борнинг принципиал янги назариясини яратишнинг асоси бўлиб хизмат қилди.

Квант гипотезасига бўйсунадиган Бор модели 1900 йилда немис физики Макс Карл Эрнст Людвиг Планкни эътиборини тортди.

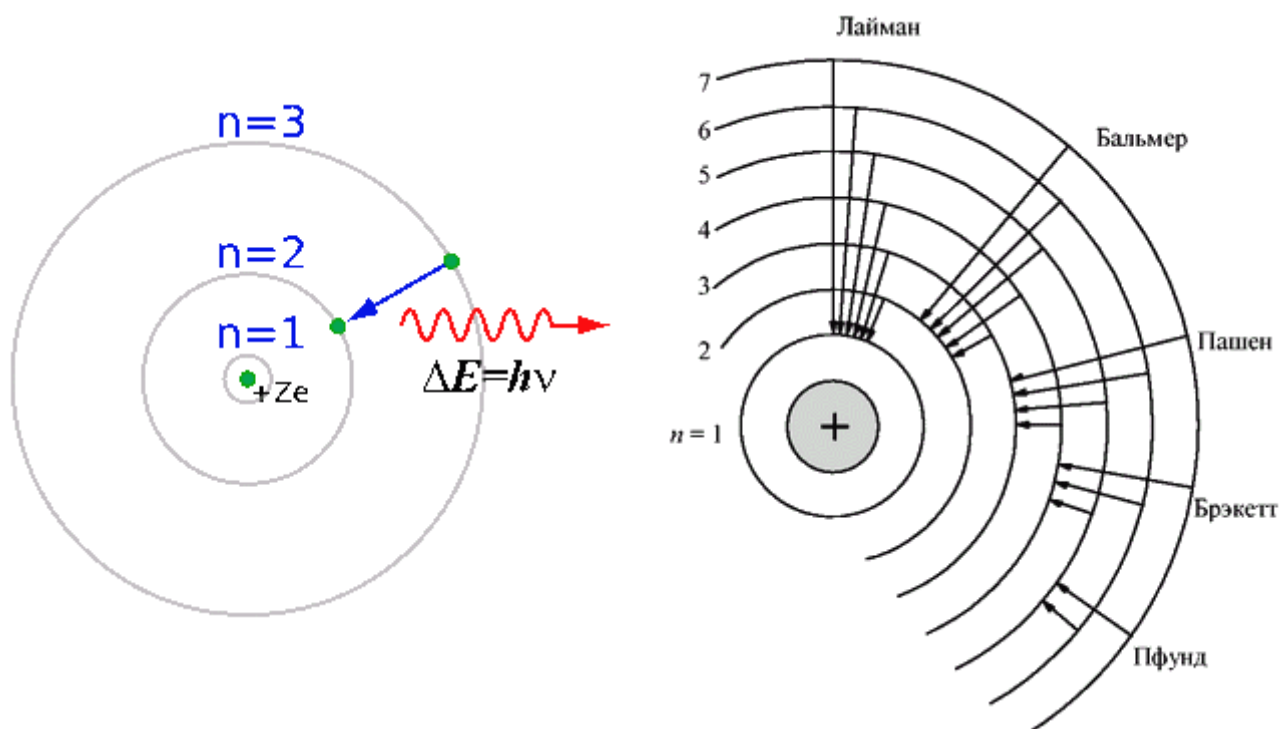
Планк жисм ўзидан нурланишни порциялар кўринишида частотага пропорционал равишда чиқаради деган постулотни илгари сурди. Квант гипотезасини фотоэффект ходисасини тушунтиришда қўллади, натижада Альберт Эйнштейн 1905 йилда ёругликнинг фотон назариясини таклиф қилди. Яна бир таклифлардан бири атомнинг Бор модели учун 1885 йилда швейцариялик олим Иоганн Якоб Бальмер, 1906 йилда америкалик физик Теодор Лайман ва 1909 йилда немис физиги Фридрих Пашеннинг водород атомининг спектрал чизиқлар серияси бўлиб чиқди. Бу сериялар (кўринадиган, ультрабинафша, инфрақизил соҳасидаги спектрлар) частотаси бутун сонлар квадратининг қийматига тескари пропорционал бўлган оддий қонуниятга бўйсунди.

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots$$

бу ерда  $R = 1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$  Ридберг доимийси

Бор планетар моделнинг барқарорлигини ва шу билан бир қаторда квант назариясининг ҳолатлари асосидаги спектрал натижалар, бир қанча постулатларни тўғрилаб, атом моделида квант чегараларни тушунтирди. Бор постулатлари кўра ядро атрофида электрон энергия йўқотмасдан айнан рухсат этилган (“стационар”) орбита бўйлаб айлана олади. Ядрога яқин орбита «турғун» (деярли барқарор) атомнинг ҳолатига тўғри келади. Атомга квант энергия юборилганда электрон деярли йўқотилган орбитага ўтади.

Тескари яъни «уйғотилган» ҳолатдан «турғун» ҳолатга ўтиш квант нурланишини чиқариш билан боғлиқдир.



Спектр асосидаги берилган ҳисоблашлар электронлар орбитасининг радиуси  $1^2:2^2:3^2:\dots:n^2$  га боғлиқ. Яъни электронларнинг айланиш ҳаракатидаги моментлар миқдори тўлиқ саналувчи асосий квант сонларига (орбиталар сонига) пропорционалдир. Электронлар сонининг максимал имконияти ҳар бир сатҳда асосий квант сонининг иккиланганига тенг; бу сон даврий жадвалдаги ўтиш элементларини миқдорига тенг. Шундай қилиб Бор модели, атомдаги электронлар қобиғи тузилиши элементни даврий хусусияти билан бевосита боғлиқдир.

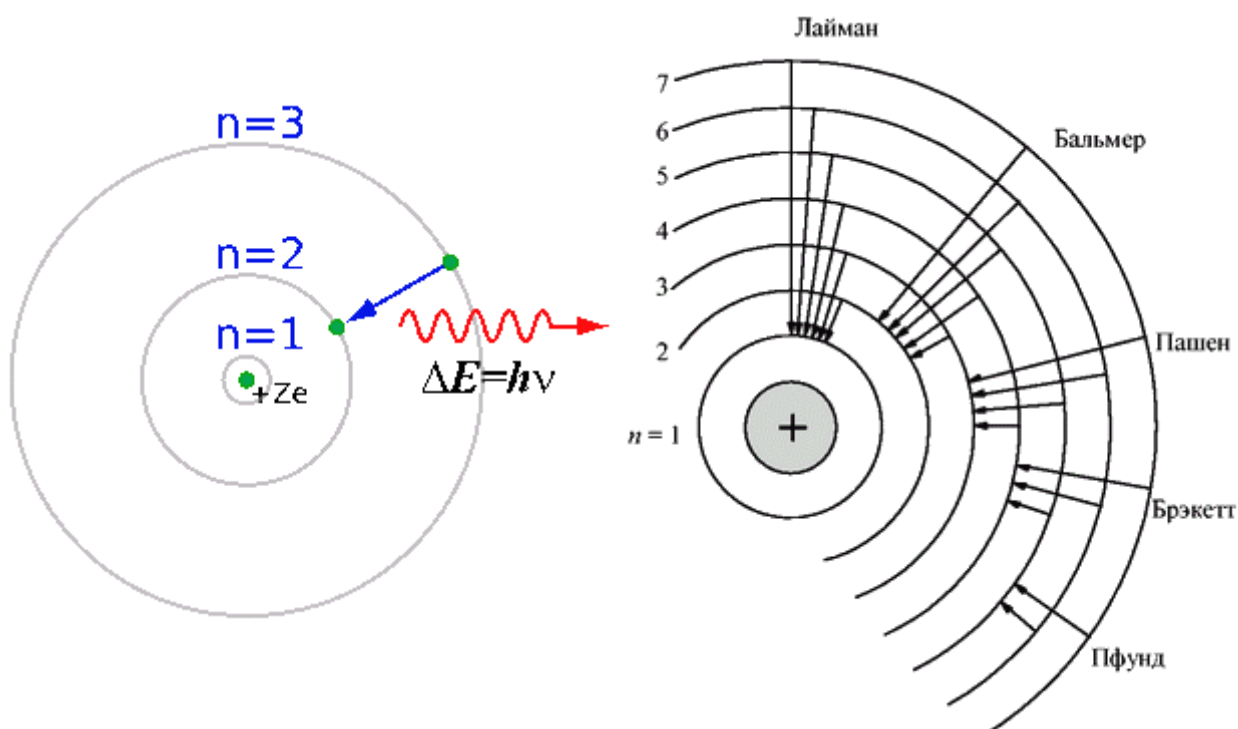
Водород атоми учун спектрал ҳисоблашлар Бор модели асосида тажриба билан таққосланганда яхши натижа берди, аммо бошқа элементлар учун тажриба натижаларидан сезиларли даражада фарқ кузатилди. 1916 йилда немис физики Арнольд Иоганн Вильгельм Зоммерфельд Бор моделини тўлдириб, электрон айлана ҳаракатидан фарқли эллипс орбиталар ҳолатида ҳам ҳаракатланади деб тахмин қилди. Шу асосида тахминан бир хил сатҳдаги энергиялар Бош квант сонига тенг бўлган орбиталар сонининг ҳолатига мос келади. Зоммерфельд орбитал квант сони (эллипслар шаклини аниқловчи) ва тезликнинг электронлар массасига боғлиқлик моделини қўшди.

Бу сериялар (ёруғлик, ультрабинафша ва инфрақизил сохаларда) жуда оддий қонуниятга бўйсунардилар: частоталар бутун сонлар квадратларига тескари пропорционал эди:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2} \right) \quad n = 3, 4 \dots$$

Бу ерда  $R = 1.097 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ , Ридберг доимийси.

Бор атомнинг планетар моделининг барқарорлигини ва бу спектрал натижаларни, атом моделига квант чегараланишлар бир қанча постулатларни олдинга суриб, квант назарияси ёрдамида тушунтириб берди. Бор постулатларига кўра, электрон ядро атрофида фақатгина маълум рухсат берилган (стационар) орбиталар бўйлаб айланади ва уларда электрон нур таратмайди. Ядрога энг яқин орбита атомнинг нормал, яъни энг барқарор ҳолатига тўғри келади. Атомга энергия кванти берилганда, электрон кейинги, узокроқ орбитага ўтади. «Ғалаёнланган» ҳолатдан «нормал»га қайтиб ўтиш нур кванти чиқариш билан боради.



Спектрал маълумотлар асосидаги ҳисоб-китоблар кўрсатишича, электрон орбиталарининг радиуслари  $1^2, 2^2, 3^2, \dots, n^2$  нисбатда бўлади. Бошқача қилиб айтганда, айланаётган электроннинг ҳаракат миқдори моменти Бош квант сон (орбита номери)га пропорционал.

Хар бир қобикдаги электронларнинг максимал мумкин бўлган сони Бош квант сон квадратининг иккиланганига тенг: бу сон эса даврий жадвал даврларидаги элементлар сонига тенг бўлиб чиқди.

Шундай қилиб, Бор модели элементлар хоссаларининг даврийлигининг атомлар электрон қобикларининг тузилиши билан боғлиқлигини аниқлади.

## СЕМИНАР № 2

### “КВАНТ КИМЁ” ЗАМОНАВИЙ КИМЁНИНГ НАЗАРИЙ АСОСИ

Квант механикасида зарралар траекторияси тушунчаси бўлмайди (яъни координаталар аниқ қийматлари ва физик объектлар тезлиги мажмуи).

Бу ҳол Гейзенберг томонидан аниқланган, квант механикасининг асосий қоидаларидан бири - ноаниқлик қоидаси (ёки ноаниқ нисбат ) деб аталадиган қоидага мос маънони англатади.

Ноаниқлик қоидасининг жуда кўп қўлланиладиган математик ифодаларидан бири қуйидагича кўринишда бўлиб:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar/2$$

Бу ерда  $\Delta p$  ва  $\Delta x$  ноаниқликлар  $p = mv$  ўртача квадрат импульс оғиши ва улар ўртача қиймати координаталарини англатади.

Физикавий тушунтиришлар мазкур ўзаро боғланишдан иборат, зарралар координата ва импульси бир вақтда аниқ қийматга эга бундай ҳолатлар бўлмайди. Ноаниқлик ўлчамини  $\hbar$  Планк доимийси белгилайди.

Квант механикасидаги классик механика талаблари билан солиштирилган ҳаракат ҳақидаги физик тушунчалар радикаль ўзгаришлари табиий равишда шунчалик назарий математик аппарат радикал ўзгаришлардир. Бу боғлиқликда дастлаб квант механикасидаги ҳолатга қандай тарзда тавсиф бериш мумкин деган савол пайдо бўлади.

Гарчи  $q$  – квант системалар координаталар мажмуаси,  $dq$  – бу координаталар дифференциал кўпайтмаси бўлса ҳам, конфигурацияли фазовий элементлар ҳажми деб аталади.

Бир хил зарралар учун  $q = x, y, z$ , а  $dq = dx \cdot dy \cdot dz = dV$  – оддий фазовий элемент ҳажми

Квант механикаси математик аппарат асосий қоидалари тасдиқ бўлган система ҳолати бўлиши мумкин деб тавсифланган аниқ (умуман айтганда, комплекс ҳолда) функция координатаси  $\Psi(q)$ , системалар тўлқин функцияси деб аталади. У биринчи марта квант механикасига 1926 йилда Шредингер томонидан киритилган.

Шундай қилиб, тўлқин функция квант системалари ҳолатидаги функциядир. Тўлқин функция ёрдами билан ҳолат тавсифи статистик бўлади, эҳтимоллик билан табиати: тўлқин функция модуль квадрати тўлқин функцияга боғлиқ ҳолда шу катталиқ эҳтимоллик қийматини беради.

Масалан,  $x, y, z$  координаталар билан фазо нуқтасидаги  $t$  вақт моментидега  $|\Psi(x, y, z, t)|^2$  эҳтимоллик билан зарраларни топиш.

Зарраларни топиш эҳтимоллик мажмуи баъзи бир фазо чегарали соҳаларда эҳтимоллик зичлиги деб аталади.

Масалан, мактаб кимё курсидан маълумки, атом ёки молекула орбиталлари учун жавобгар бўлган электрон булутлар математик нуқтаи назардан эҳтимоллик зичлик функциясини яъни  $|\Psi|^2$  билдиради.

Тўлқин функцияси фақатгина фазодаги микрообъектларни топиш эҳтимоллиги тақсимотини тавсифлабгина қолмай, балки максимал тўлиқ олишга, квант механикаси қонунлари билан исталган физик катталиклар ҳақидаги маълумотларни биргаликда, бу микрообъектларни табиатини аниқлашга имкон беради. Буни куйида кўрсатилгандек кўринишда бўлади.

Ҳолат функцияси (тўлқин функцияси) битта маънога эга деган шартни қаноатлантириши зарур, ҳамма қўлланилган фазода чегаравий ва узлуксиздир. У икки қаррали дифференциал минимумига ўхшаш бўлиши мумкин. Бундан ташқари аниқлашда ҳамма бўлиши мумкин системалар координата қийматлари йиғиндиси керак бўлиб, бу бир хил бирликларда бўлади яъни

$$1 = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \int \Psi^*(\kappa) \Psi(\kappa) d\kappa$$

Бу ерда  $\Psi^*$  – функция бўлиб,  $\Psi$  билан комплекс боғлиқдир. Бу тенглик **нормаланган шарт** деб аталадиган тўлқин функциясини ифодалайди. Танлаш сифатида ҳар доим  $\Psi$  функция доимий коэффицентига мос ҳолда бўлиши мумкин, яъни бошқача айтганда нормаланган бўлади.

### 2.3.Операторлар.

Квант системалар қонунлари тавсифи унинг динамик ўзгарувчиларини (координата, импульс, энергия ва ҳ.к. ) аниқлаш мумкинлигини англатади.

Олдинги бўлимда кўрсатилганидек, тўлқин функция квант системалар максимал тўлиқ тавсифини беради, яъни  $\Psi$  қиймати динамик ўзгарувчилар тўпламини ҳисоблашга имкон беради.

Бу эса тўлқин функцияда баъзи бир таъсир кучларига (ингл.- операте) эришилади. Тўлқин функцияда таъсир кучини тавсивлашда квант механикаси математик аппаратининг муҳим тушунчаларидан бири – оператор тушунчасини киритиш лозим бўлади. Операторни аниқлашга ўтамиз.

Бир хил  $\phi$  функция бошқа функция  $\gamma$  га мос ҳолда қўйилган  $\hat{A}$  оператор қонуният бор. Оператор бўлиши мумкин бўлган таъсир кучини  $\phi$  функцияга кўпайтмаси  $\gamma$  функция орқали ифодаланишини аниқлайди.

$$\hat{A}\phi = \gamma$$

Масалан,  $\hat{A} = d/dx$  и  $\phi = 5x^2$  бўлсин. Унда

$$\hat{A}\phi = d/dx(5x^2) = 10x = \gamma$$

1.  $\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  иккала операторнинг йиғиндиси ва айирмаси:

$$(\hat{A} + \hat{C})\phi = \hat{A}\phi + \hat{C}\phi$$

$$(\hat{A} - \hat{C})\phi = \hat{A}\phi - \hat{C}\phi$$

2 Операторлар кўпайтмаси:

$$\hat{A}\hat{C}\phi = \hat{A}(\hat{C}\phi)$$

Масалан,  $\hat{A} = \sin x$ ,  $\hat{C} = d/dx$ ,  $\phi = \sin x$ :

$$\hat{A}\hat{C}\phi = \hat{A}(\hat{C}\phi) = \sin x \cdot d/dx(\sin x) = \sin x \cdot \cos x = 0.5 \sin 2x.$$

3. **Операторлар учун коммутатив қонун ҳар доим ҳам бажарилмайди!**  $\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  иккала операторлардан ташкил топган, оператор деб аталадиган коммутатор кейинги кўриниши:

$$\hat{S} = [\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}.$$

$\hat{A}$  ва  $\hat{C}$  операторлар коммутиритланади, яъни натижавий оператор  $\hat{S} = 0$

$$[\hat{A}, \hat{C}] \equiv \hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A} = 0,$$

4. Операторлар учун ассоциатив қонуният бажарилади:

$$\hat{A}(\hat{C}\hat{S}) = (\hat{A}\hat{C})\hat{S}.$$

5.  $n$ -чи даражали оператор  $\hat{A}^n$   $n$  та кетма-кет қабул қилинган  $\hat{A}$  операторлар орқали ифодаланади, масалан:

$$\hat{A}^n \phi = \hat{A}\hat{A}\hat{A}\phi.$$

6.  $e^{\hat{A}}$  оператор экспонента қуйидагича аниқланади:

$$e^{\hat{A}} = 1 + \hat{A} + \hat{A}^2/2! + \hat{A}^3/3! + \dots$$

7. Квант механикасида муҳим рол ўйнайдиган чизиқли операторлар қуйидаги қоида мос келади:

$$\hat{A}(\phi + \gamma) = \hat{A}\phi + \hat{A}\gamma$$

$$\hat{A}(c\phi) = c\hat{A}\phi$$

$$\hat{A}(c\phi + d\gamma) = c\hat{A}\phi + d\hat{A}\gamma,$$

$c$  ва  $d$  – коэффицентлар. Операторлар дифференцияланган ва квадратга кўтариб чиқилган:

$$d/dx(\phi + \gamma) = d/dx(\phi) + d/dx(\gamma)$$

$$d/dx(c\phi) = c \cdot d/dx(\phi)$$

$$(\phi + \gamma)^2 = \phi^2 + 2\phi\gamma + \gamma^2 \neq \phi^2 + \gamma^2.$$

Шундай қилиб, дифференцияланган операторлар чизиқли, квадрат даражадаги операторлар эса чизиқли бўлмаган операторлардир.

Хусусий функция оператори  $\hat{A}$  шундай  $\phi$  функция бўлиб, бунда  $\hat{A}$  таъсирида доимий сонга кўпайтирилган  $\phi$  функцияга қайта олмайди.

$$\hat{A}\phi = k \cdot \phi,$$

бунда  $k$  –  $\hat{A}$  хусусий оператор қиймати дейилади.

Масалан, майли  $\hat{A} = d^2/dx^2$  ва  $\phi = \sin(bx)$  бўлсин. Унда

$$\hat{A}\phi = d^2/dx^2(\sin(bx)) = b \cdot d/dx(\cos(bx)) = -b^2 \cdot \sin(bx),$$

Яъни  $d^2/dx^2$  хусусий оператор қиймати  $-b^2$  доимийдир.

Хусусий операторлар қиймати орқали динамик ўзгарувчилар квант механикасида ушбу ўзгарувчилар **кутилган натижа қийматини** аниқлайди.

Шу билан бирга хусусий оператор функция ўлчанган физик катталиклар квант системалар тўлқин функцияси бўлиши мумкин. Яъни, агар

$$\hat{A}\Psi = a \cdot \Psi$$



Охирги тенглама шуни тақоза қиладики, тўлқин функция нормаллашган ( $|\Psi|^2$  бирликка тенг интеграл) бўлади. Кўпгина ҳолларда нормаллашган шартлар бажарилса, бошқача йул билан, яъни кутилган физик катталиклар қиймати қуйидаги тенглама орқали ҳисобланади

$$\langle A \rangle = \frac{\int \Psi^*(q) \hat{A} \Psi(q) dq}{\int \Psi^*(q) \Psi(q) dq}$$

Квант механикасида ўз-ўзидан боғланган (самосопряженные) операторлар жуда муҳим роль ўйнайди, бошқача айтганда улар эрмитовлар дейилади.

Ўзаро боғланган (самосопряженные) ёки эрмитов оператор – ўзаро боғланган ҳаққоний оператордир:

$$\int f^* \hat{A} g dq = \int g (\hat{A}^* f^*) dq,$$

$\hat{A}^*$  бу ерда  $\hat{A}$  дан олинган олдидаги ўзгартирилган белги мавҳум қисмдир

Эрмитов операторлар ажойиб хусусиятга эга бўлиб: улар хусусий қиймати ҳар доим мавжуддир.

Оператор координаталар оддий координата бўлиб, унинг таъсир кучи исталган функцияда  $x$ ,  $y$  ва  $z$  аниқланган координаталарини  $\mathbf{r}$  векторга кўпайтмасини ўз ичига олади, яъни

$$\hat{\mathbf{r}}f = \mathbf{r}f$$

или  $\hat{x}f = x \cdot f$ ,  $\hat{y}f = y \cdot f$ ,  $\hat{z}f = z \cdot f$ .

Оператор импульси  $\hat{p}$  операторлар ва унинг проекциялари орқали (масалан, декарт координата ўқларида) аниқланади:

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla = -i\hbar \left( \hat{i} \frac{\partial}{\partial x} + \hat{j} \frac{\partial}{\partial y} + \hat{k} \frac{\partial}{\partial z} \right)$$

или  $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ ,  $\hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$ .

Исталган динамик ўзгарувчилар  $A(p, q)$  функцияси оператор  $\hat{A}(p, q)$  га алмаштирилади. Бу ерда бу функция классик ифодаларидан олинган ва у операторлар учун жавобгар бўлган  $p$  ва  $q$  ҳам алмаштирилган:

$$\hat{A}(p, q) = A(\hat{p}, \hat{q}).$$

Масалан, оператор электрон кинетик энергиясини классик ифодаларга алмаштириш осонгина олинади

$$T = \frac{m_e v^2}{2} = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{p_x^2}{2m_e} + \frac{p_y^2}{2m_e} + \frac{p_z^2}{2m_e}$$

компонентлар импульси  $p_x, p_y, p_z$  с операторларга мос ҳолда

$$\hat{T} = \frac{1}{2m_e} (\hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

ёки  $\Delta$  – Лаплас оператор белгилашини киритиб:

$$\Delta \equiv \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \text{ получим } \hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta$$

Потенциал энергия  $V(\mathbf{r}, t)$  фақат координата ва вақт функцияси бўлиб,  $V$  оператор натижасида операторлар координата формуласи ва классик механикадаги потенциал энергия орқали ифодаланади. Масалан, оператор потенциал энергия электрон билан ядро заряди  $Z$  ўзаро таъсирига тенг

$$\hat{V} = -\frac{Ze^2}{r}.$$

Тўлиқ э энергия классик системалар  $T$  кинетик ва  $V$  потенциал энергиялари суммасига тенг. Шунга ўхшаш квант механикасида ҳам  $\hat{H}$  тўлиқ энергия оператори (Гамильтон оператори ёки гамильтониан системалар) кинетик ва потенциал энергия операторлар суммасига тенг. Масалан, бир электронли атом учун:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{r}.$$

Квант механикасида қандай операторлар учун коммутациявий ўзаро боғланишлар бажарилишини кўриб чиқамиз. Ўз-ўзидан кўриниб турибдики, бунда

$$[\hat{x}, \hat{y}] = 0; \quad [\hat{p}_x, \hat{p}_y] = 0 \text{ и т.д.}$$

Импульс  $p$  ва координаталар  $r$  операторлари коммутирланмаган бўлади. Ҳақиқатан ҳам:

$$\begin{aligned} [\hat{p}_x, \hat{x}]f &= \hat{p}_x \hat{x}(f) - \hat{x} \hat{p}_x(f) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}(x \cdot f) - x(-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x}(f) = \\ &= -i\hbar \cdot x \frac{\partial f}{\partial x} - i\hbar \cdot f + i\hbar \cdot x \frac{\partial f}{\partial x} = -i\hbar \cdot f; \text{ м.е. } [\hat{p}_x, \hat{x}] = -i\hbar. \end{aligned}$$

Шунга ўхшаш,

$$[\hat{p}_y, \hat{y}] = -i\hbar; \quad [\hat{p}_z, \hat{z}] = -i\hbar.$$

$p$  ва  $r$  операторларда коммутация мавжуд эмаслиги айнан шу ҳолатни координата ва импульс бир хил ва худди шу зарралар бир вақтда исталган олд томонга маълум даражадаги аниқлик билан ўлчашлар бўлиши мумкин

эмаслигини ўзаро акс эттиради. Шундай қилиб, ўзаро боғланиш маълумотлари бошқа ноаниқлик қонунлар математик формасидир.

### СЕМИНАР № 3 ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ

Квант кимёнинг асосий вазифаси турли операторлар учун қуринишдаги тенгламанинг хос кийматларини топишдан иборат. Импульс проекцияси оператори каби катор операторлар учун бу ечимлар дархолёзилади. Ҳақиқатдан, бу ҳолда тенглама қуйидаги қуринишда бўлади:

$$-i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} = p_x \psi \quad (1)$$

ва у қуйидаги функция билан каноатланади

$$\psi = \text{const} \cdot \exp(i p_x x / \hbar) \quad (2)$$

Бу ерда  $p_x$  - доимий, бунда унинг кийматлари спектри чексиз:  $-\infty < p_x < +\infty$ . (2) қуринишдаги функция тулқин функциянинг барча хоссаларига эга – у бир кийматли, узлуксиз ва нормаллашган, шунинг учун  $p_x$  хусусий кийматларига ҳеч қандай чекланишлар қўлланилмайди.

Лекин, квант механикасидаги барча операторлар орасида асосийларидан бири, классик механикадага Гамильтон функцияси сингари киритилган, Гамильтон операторидир:

$$H = -\hbar^2 / 2m \Delta + U \quad (3)$$

(бу ерда  $\Delta = \nabla^2$ ) ва системанинг тулик энергиясини аниқлайди. гамильтониан вақтга бевосита боғлиқ бўлмаган ҳолларда, хос функция ва хос киймат масаласи қуйидаги, Шредингернинг стационар тенгламаси деб аталувчи тенгламага келтирилади.

$$H\psi = E\psi \quad (4)$$

Бу ерда  $E$  тулик энергиянинг қўтилган киймати, оператор  $H$  аксари операторлар (координата, импульс, импульс моменти, импульс моментидаги квадрат ва бошқалар) билан коммутацияланади ва шу туфайли, улар билан хос функциялар системасига эга, демак (4) тенгламанинг ечими физик системанинг барча параметрларини деярли тулик тавсифлашни билдиради.

Шредингер стационар тенгламасини энг содда модел системаларга тадбиғини қуриб чиқамиз.

1. *Зарранинг бир улчамли эркин ҳаракати, яъни зарра доимий потенциалга эга майдонда жойлашган ва унинг потенциал энергияси нолга тенг. Бу ҳолда (4) тенглама қуйидаги қуринишни олади:*

$$-\hbar^2 / 2m d^2 \Psi / dx^2 = E\Psi, \quad (5)$$

ёки содда алмаштиришлардан сунг,

$$d^2\Psi / dx^2 + k^2\Psi = 0, \quad (6)$$

Бу ерда  $k^2 \equiv 2mE / \hbar^2$  - доимий. Бундай дифференциал тенгламанинг ечими (доимий коэффициентларга эга булган иккинчи тартибли дифференциал тенглама) яхши маълум ва куйидаги курунишга эга:

$$\Psi(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}, \quad (7)$$

Бу ерда  $c_1$  и  $c_2$  - ихтиёрый доимийлар. Бундай холда э га хеч кандай чекланишлар куйилмаслиги ва энергетик спектр узлуксиз.

Энди масалани бироз мураккаблаштирамиз ва

2. *Зарранинг чексиз баланд деворли потенциал чукурдаги харакатини куриб чикамиз. Бу холда потенциал энергия*

$$U = \begin{cases} 0 & (0 < x < a) \\ \infty & (-\infty < x < 0; \quad a < x < \infty) \end{cases} \quad (8)$$

га тенг булади, бу ерда  $a$  – потенциал чукурнинг кенглиги. Шредингер тенгламаси (8) иккига булинади:  $x < 0$  ва  $x > a$  интервал учун:

$$- \hbar^2 / 2m d^2\Psi / dx^2 + \infty \Psi = E\Psi, \quad (9)$$

ва факат  $\Psi(x) = 0$ , функция билан каноатланади, яъни зарра потенциал чукурдан ташкарида мавжуд булмайди.  $0 < x < a$  интервал учун Шредингер тенгламаси (9) билан айнан бир хил булади, лекин чегаравий шартлар куйидагича булади

$$\Psi(0) = \Psi(a) = 0 \quad (10)$$

(10) кушимча шартларда (9) тенгламанинг ечими функция булади, лекин  $c_1$  ва  $c_2$  константалар энди ихтиёрый эмас, аник кийматларни кабул киладилар:  $\Psi(0) = 0$  шартдан

$$\Psi(0) = c_1 \exp(ik0) + c_2 \exp(-ik0) = c_1 + c_2 = 0 \quad (11)$$

Келиб чикади. Бу

$$c_1 = -c_2$$

Булгандагина булиши мумкин. Энди иккинчи чегаравий шартни куриб чикамиз -  $\Psi(a) = 0$ :

$$\Psi(a) = c_1 \exp(ika) - c_1 \exp(-ika) = c_1 (\exp(ika) - \exp(-ika)) = 0 \quad (12)$$

ёки

$$\exp(ika) = \exp(-ika)$$

Энди экспонентани Эйлер формуласига биноан тригонометрик функциялар курунида тасвирлаймиз:

$$\exp(ika) = \exp(-ika) = \cos(ka) + i \sin(ka) = \cos(-ka) + i \sin(-ka) \quad (13)$$

( $\cos(-ka) + i \sin(-ka) = \cos(ka) - i \sin(ka)$ ) Эканлигини ёдда тутмоқ зарур)

Ухшашларни кискартириб, тенгламани куйидаги курунишга келтирамиз

$$\sin(-ka) = 0, \text{ где } k = \sqrt{2mE} / h \quad (14)$$

(14) тенглик

$$ka = n\pi, \text{ ёки } k = n\pi / a \quad (15)$$

$n$  - ихтиёрый бутун сон, шарт бажарилганда уринлидир.

Шундай килиб, зарранинг потенциал чукурдаги тулкин функцияси куйидаги курунишни олади

$$\Psi(x) = c_1(\exp(in\pi x / a) - \exp(-in\pi x / a)), n = 1, 2, \dots \quad (16)$$

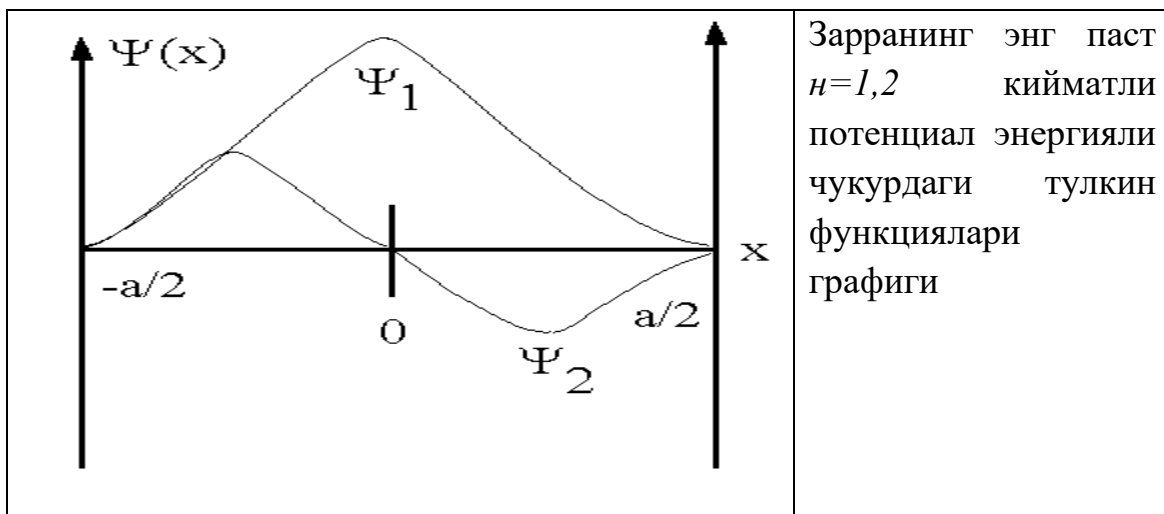
Ундан ташкари

$$k = \sqrt{2mE} / h = n\pi / a \quad (17)$$

дан зарра энергияси куйидаги кийматларни кабул килиши мумкинлиги келиб чиқади:

$$E = \frac{\pi^2 h^2}{2ma^2} n^2, n = 1, 2, \dots \quad (18)$$

яъни зарра энергияси дискрет булади.



3. Энди зарранинг  $x$  уки буйлаб  $F = -kx^2$  кайтарувчи эластик куч таъсиридаги бир улчамли харакатини куриб чикамиз, бу ерда  $k$  - бикрлик коэффициенти. Бундай система чизикли гармоник осциллятор деб аталади.

Аниклик учун  $k = m\omega^2$ , де кабул киламиз, бу ерда  $\omega$  - тебранишлар частотаси, чизикли гармоник осциллятор учун Шредингер тенгламасини куйидагича ёзиш мумкин:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \Psi = E\Psi \quad (19)$$

Агар  $\xi = x\sqrt{m\omega/\hbar}$  ва  $\lambda = 2E/\hbar\omega$  белгилашлар киритилса, (19) курунишни олади:

$$\frac{d^2\Psi}{d\xi^2} - \xi^2\Psi = -\lambda\Psi \quad (20)$$

Бу тенгламанинг ечимини бевосита топиб булмайди, шунинг учун  $\xi \ll \lambda\xi^2$  деб кабул киламиз (бу тебранишлар амплитудаси унча катта булмаганда уринлидир). Бу холда (20) куйидаги тенгламага ўтади

#### СЕМИНАР № 4 ВОДОРОД АТОМИ МАСАЛАСИ

Электроннинг ядронинг кулон майдонидаги харакати, яъни водород атоми ёки водородсимон ион тугрисидаги масалани куриб чикайлик. Бундай системанинг Гамильтон оператори электроннинг кинетик энергияси ва электроннинг ядро билан узаро таъсир потенциал энергияси операторларидан иборат булади.

$$H = T + V = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) + \left( -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cdot \frac{1}{r} \right) \quad 1)$$

Бирок Шредингер тенгламасини келтириб, уни ечишдан олдин иккита мухим шартга келишиб олайлик. Биринчидан, бундан буён, гамильтонианда турли константаларни санаб утишдан кутулиш учун, биз СИ бирликлар системасидан атом бирликлари системасига утамиз, унда

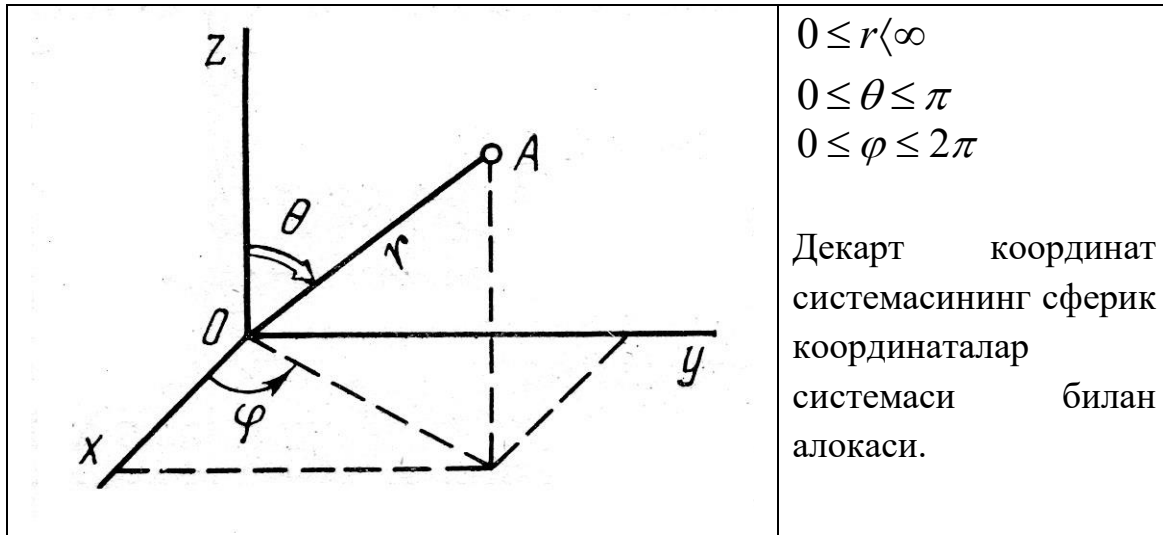
- момент:  $\hbar$  - Планк доимийси = 1
- масса:  $m_e$  - электрон массаси = 1      2)
- заряд:  $e$  - электрон заряди = 1
- узунлик:  $a_0$  - Бор атом радиуси = 1

Электроннинг ядро кулон майдонидаги харакати масаласи сферик симметрияга эга булганлиги туфайли уни, декарт координатасидан сферик  $(r, \theta, \varphi)$  координаталарга утиб, унда ечиш мақсадга:

- $x = r \sin \theta \cos \varphi$

- $y = r \sin \theta \sin \varphi$
- $z = r \cos \theta$
- $dv = dx dy dz = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$

Сферик координаталарнинг узгариш чегаралари куйидагича:



Лаплас  $\nabla^2$  операторини сферик координаталр системасига утказилганда, у куйидаги курунишга эга булади:

$$\nabla^2 = \left( \frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2} \right) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2}{d\varphi^2}$$

Юкоридагиларни хисобга олган холда Шредингер тенгламасини куйидагича ёзиш мумкин:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{d\Psi}{dr} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\Psi}{d\theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Psi}{d\varphi^2} + 2\frac{1}{r}\Psi + 2E\Psi = 0$$

Бу эса, хусусий хосилали иккинчи тартибли дифференциал тенгламадир. Бундан тенгламалар узгарувчиларни ажратиш йули билан ечилади, яъни  $\Psi$  тулкин функцияси куйидаги курунишда кидирилади:

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi),$$

Бу ерда хар бир купайтувчи факатгина бир узгарувчига боглик. **5)** ни **4)** га куйиб:

$$\frac{\vartheta(\theta)\Phi(\varphi)}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2\left( \frac{1}{r} + E \right) R(r)\vartheta(\theta)\Phi(\varphi) = -\frac{R(r)\Phi(\varphi)}{r^2 \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\vartheta(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{R(r)\vartheta(\theta)}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{d^2\Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

Тенгламининг иккала томонини хам  $\frac{r^2}{R(r)\mathcal{G}(\theta)\Phi(\varphi)}$ , га кўпайтириб,

$$\frac{1}{R(r)} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2 \left( \frac{1}{r} + E \right) r^2 = - \frac{1}{\mathcal{G}(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\mathcal{G}(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2}$$

хосил қиламиз. **7)** тенгликнинг чап тарафи факат  $p$  узгарувчига боғлиқ, ун тарафи эса  $\theta$  ва  $\varphi$  ларга боғлиқ. Лекин тенгликнинг, хар хил узгарувчиларга боғлиқ томонлари факатгина бирон бир доимий катталиқка тенг бўлгандагина, бир-бирига тенг бўлиши мумкин:

$$\frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + 2 \left( \frac{1}{r} + E \right) r^2 R(r) - cR(r) = 0$$

$c$  – доимий катталиқ. **7)** нинг ун тарафи учун

$$- \frac{1}{\mathcal{G}(\theta) \sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\mathcal{G}(\theta)}{d\theta} \right) - \frac{1}{\Phi(\varphi) \sin^2 \theta} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} = c$$

ёки

$$\frac{\sin \theta}{\mathcal{G}(\theta)} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\mathcal{G}(\theta)}{d\theta} \right) + c \sin^2 \theta = - \frac{1}{\Phi(\varphi)} \frac{d^2 \Phi(\varphi)}{d\varphi^2} \quad \mathbf{9)}$$

Бу тенгликда хам, юқоридаги сингари, ун тарафи ва чап тарафлари хар хил  $\theta$  ва  $\varphi$  узгарувчиларга боғлиқ ва улар димий катталиқка тенг бўлиши керак. Бу катталиқни мусбат ва  $m^2$  га тенг деб қабул қиламиз, унда **9)** дан:

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

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin \theta \frac{d\mathcal{G}(\theta)}{d\theta} \right) + \left( c - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) \mathcal{G}(\theta) = 0$$

Шундай қилиб, урта узгарувчили дастлабки Шредингер **4)**, тенгламаси энди хар бири биттадан узгарувчига боғлиқ бўлган, урта **8)**, **10)**, **11)** тенгламага парчаланди. Уларнинг хар бирини алоҳида қўриб чиқамиз.

Энг содда тенглама **10)** бўлиб, унинг ечими

$$\Phi(\varphi) = A e^{\pm im\varphi}$$

Бу ерда  $A$  – доимий. Тулқин функциянинг бир қиймалиқ шarti

$$\Phi(0) = \Phi(2\pi) \text{ или } A = A e^{\pm im2\pi}, e^{\pm im2\pi} = 1 \quad \mathbf{13)}$$

ни беради. Энди комплекс сонлар учун Эйлер формуласидан фойдаланиб,



$\cos(2\pi m) \pm i \sin(2\pi m) = 1$ , бу тенглик эса фақат бутун кийматли  $m$  лар учун бажарилади:  $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Доимий  $A$  ни нормаллаштириш шартидан топиш мумкин:

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

$$\text{ёки } A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}.$$

## СЕМИНАР № 5 СПИН

Бошқа томондан кўринадики, оператор матрица ўзига тегишли хусусий кўрсатилган диогонал йўналишида ва диогоналида хусусий кийматларини ўз ичига олади, шунинг учун оператор матрица спин проекцияси  $S_z$  ўқида ўзига тегишли хусусий ҳолати куйидаги кўринишда бўлади:

$$S_z = \begin{pmatrix} \hbar/2 & 0 \\ 0 & -\hbar/2 \end{pmatrix}$$

Биз 4) дан  $A$  ни ҳисобга олиш билан (ИИ.33) коммутацион хусусиятларини олишимиз мумкин ва бошқа ўқдаги аниқ кўринишдаги операторлар спин проекцияси куйидагича бўлади:

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & \hbar/2 \\ \hbar/2 & 0 \end{pmatrix}, \quad S_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\hbar/2 \\ i\hbar/2 & 0 \end{pmatrix}$$

ункциясини экан, у ҳолда у иккита хусусий функцияга ҳам эга бўлади.

Хусусий функция билан  $+\hbar/2$  хусусий қийматни бундан кейинги ҳолларда  $\alpha$  деб,  $-\hbar/2$  хусусий қиймат билан эса  $\beta$  деб, куйидаги кўринишда ёзамиз

$$S_x \alpha = \hbar/2 \beta, \quad S_x \beta = \hbar/2 \alpha$$

Модомики функция  $\alpha$  ва  $\beta$  вектор-устун эканлиги келиб чиқади, чунки бир хил (ҳар хил бўлмаган) зарралар — бу қонунан аниқлаш ва бирини бошқасидан фарқлаш мумкин эмас, яъни бир хил зарраларнинг бир хиллик қонунига бўйсўнувчи зарралардир.

Бунақа зарраларга элементар зарралар (электронлар, нейтронлар ва ҳ.к.) шунингдек микрозарралар таркибига кирувчи атомлар ва молекулалар тегишлидир.

Бир хил зарраларнинг иккита катта синфи бўлиб, булар бозонлар ва

фермионлардир.

Бозон (Бозе физик олим фамилиясидан олинган) — бутун спин қийматидаги зарралар. Бозонлар фермионлардан фарқ қилиб, Бозе — Эйнштейн статистикасига бўйсўнади, яъни битта квант ҳолатга чегараланмаган сондаги бир хил зарралар жойлашиш ҳуқуқига эга бўлади.

Кўплаб бозонлар системалари зарралар тўлқин функцияси ўрнини алмаштирига нисбатан симметриклигини тавсифлайди

Фермион — замонавий илмий тушунчадир: моддалар элементар зарралардан ташкил топган. Фермионга кварк, электрон, мюон, тау-лептон, нейтрино тегишлидир. Физикада — зарралар (ёки квазизарралар) ярим бутун (полуцелым) спин қиймати асосидадир. Ўз номи олинган Энрико Ферми физикаси сазовордир.

Фермионга мисоллар: кварклар (улар протонлар ва нейтронлардан тузилган, яъни фермион ҳам дейилади), лептонлар (электронлар, мюонла, тау-лептонлар, нейтринолар), коваклар (ярим ўтказгичлардаги квазизарралар).

Фермионлар Ферми — Дирак статистикасига бўйсўнади, яъни битта квант ҳолатда унчалик кўп бўлмаган бир хил зарралар жойлашиши мумкин (Паули принципи). Паули тақиқланган принципи бўлиши мумкин бўлган мураккаб кимёвий элементлар олинаётганда атомлар электрон булутлари барқарорлиги учун жавобгардир.

Ферми — Дирак статистикаси статик физикада — квант статистикаси, қўлланилаётган бир хил фермионлар системаси (зарралар билан ярим бутун (полуцелым) спинлар, Паули тақиқланган принципига бўйсўнувчи, яъни битта квант системада кўплаб бир хил зарралар бўлиши мумкин эмас каби қоидалар); фермионлар жойлашган эҳтимоллик тақсимооти термодинамик мувозанат ҳолатдаги системалар энергетик сатҳларида аниқланади; 1926 йилда италян физиги Энрико Ферми ва у билан бир вақтда инглиз физиги Полем Дирак унинг квант-механикавий маъносини аниқлашни таклиф қилишди; фермион мавжуд энергетик сатҳни эҳтимоллик билан кўришга имкон берди.

Ферми — Дирак статистикаси ишлари 1926 йилда чоп этилди, 1927 йилда эса у Арнольд Зоммерфельдом металллардаги электронларда қўллади.

Ферми — Дирак статистикасида  $\epsilon_i$  энергиявий ҳолатдаги зарралар ўртача сони бўлиб, у қуйидаги кўринишда бўлади,

$$n_i = \frac{g_i}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - \mu}{kT}\right) + 1},$$

бу ерда

$n_i$  —  $i$  ҳолатдаги зарралар ўртача сони,

$\epsilon_i$  —  $i$  энергия ҳолати,

$\epsilon_i$  — и айниган карралик ҳолати ( $\epsilon_i$  энергиявий ҳолатлар сони),  
 $\mu$  — кимёвий потенциал (абсолют ноль температурадаги  $\epsilon_F$  Ферми энергиясига тенг),

$k$  — Больцман доимийси

$T$  — абсолют температура

Ферми-газ (идеал ҳолатда) кичик температура чегарасида  $\mu = \epsilon_F$  бўлади. Бу ҳолат ( $g_i = 1$  — айниган қолган эрgetic сатҳлар) зарралар функция тақсимооти Ферми функцияси деб аталади:

$$F(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\epsilon_i - E_F}{kT}\right) + 1}.$$

Ферми — Дирак статистикаси ва Бозе — Эйнштейн бир хил зарралар системаларига бўйсўнади яъни квант эффектларига аҳамият бермаслик мумкин эмас.

Квант эффектлари зарралар концентрацияси қийматида  $(N/V) \geq n_k$  намоён бўлади, бу ерда  $n_k$  — бу мувозанатда бўлмаган температурадаги квант концентрацияси, яъни зарралар орасидаги ўртача масофа берилган температурадаги идеал газ учун ўртача де Бройл тўлқинига тенг. Зарралар тўлқин функцияси концентрацияси  $n_k$  бир-бирига «дахлдор», лекин амалий жиҳатдан тўғри келмайди.

Ферми — Дирак статистикаси мувозанатда бўлмаган температурадаги фермионлар (зарралар, яъни ҳақиқий Паули тақиқланган принцип учун), Бозе — Эйнштейн — бозонларга бўйсўнади. Бозе — Эйнштейн статистикасидан тушунарлики, берилган ҳолатдаги и зарралар сони таққосланса

$$n_i = \frac{g_i}{e^{(\epsilon_i - \mu)/kT} - 1}$$

бу ерда  $\epsilon_i > \mu$ ,  $n_i$  — и ҳолатда зарралар сони,  $g_i$  — и айниган сатҳ,  $\epsilon_i$  — и энерgetic ҳолат,  $\mu$  — кимёвий потенциал системалар,  $k$  — Больцман доимийси,  $T$  — температура абсолют қиймати.

## СЕМИНАР № 6

### АТОМ ВА МОЛЕКУЛАЛАР УЧУН ШРЕДИНГЕР ТЕНГЛАМАСИ

Нерелятивистик яқинлашишда молекуланинг Гамильтон оператори куйидаги қуринишга эга бўлади

$$H = T_N + T_e + V_N + V_e + V_{NE}$$

Бу ерда ядролар кинетик энергияси оператори

$$T_N = -\sum_{\alpha} \frac{\nabla_{\alpha}^2}{2M_{\alpha}}; M_{\alpha} - \text{ядро массаси } a. \quad ,$$

Электронлар кинетик энергияси оператори

$$T_e = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2;$$

Ядролараро Ўзаро итаришиш энергияси оператори

$$V_N = -\sum_{\alpha > \beta} \frac{Z_{\alpha} Z_{\beta}}{R_{\alpha\beta}}; Z_{\alpha} - a \text{ ядро заряди.}$$

Электронлараро Ўзаро таъсир оператори

$$V_e = \sum_{i > j} \frac{1}{r_{ij}}$$

Ядролар ва электронлар тортишиш потенциал энергияси

$$V_{Ne} = -\sum_i \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha}}{r_{i\alpha}};$$

Табиийки, молекуланинг тулик тўлқин функцияси  $\Psi(R, r)$  ядроларнинг ҳам, электронларнинг ҳам координаталарига боғлиқ булади. Шунинг учун, Шредингер тенгламасини биз куйидаги куринишига эга булаемиз:

$$H\Psi(R, r) = E\Psi(R, r)$$

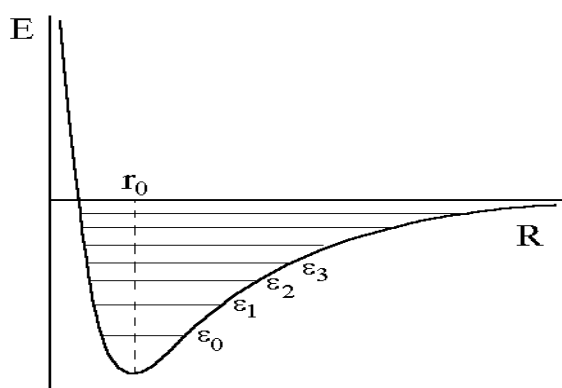
Агар, ядролар массасини, электронлар массасига нисбатан чексиз катта деб қабул қилсак, тенгламадаги ядролар кинетик энергияси 0 га тенг булади, яъни ядроларни ҳаракатсиз деб қараш мумкин, бунда Гамильтон оператори куйидаги куринишни олади:

$$H = H_e + V_N$$

Бу ерда  $H_e$  - фақат электронлар координаталарига боғлиқ булган, электрон гамильтониани. Бу ҳолда электрон системаси учун Шредингер тенгламасини

$$(H_e + V_N)\Phi_m(\bar{R}, r) = E(\bar{R})\Phi_m(\bar{R}, r)$$

Яъни электрон гамильтонианининг хос қиймат ва хос функциялари ядро координаталарига бевосита боғлиқ булмаган функциялар булади.



Бу тенгламани ядроларнинг бир нечта маълум жойлашишлари учун ечиб, биз элеткрон системасининг ядролар жойланишига боғлиқлигини топишимиз мумкин. Икки атомли молекула учун бу график яхши маълум булиб, расмда келтирилган.

Хақиқатда, электрон гамильониани  $H_e$  Эрмит булганлиги туфайлм, унинг  $\Phi_m(\bar{R}, r)$  хос функциялари тулик ортонормаллашган базисни ташкил этади, бу, уз навбатида, бутун молекуланинг тулқитн функциясини куйидаги катор курунишида тасвирлаш имконини беради:

$$\Psi(R, r) = \sum_m \chi_m(\bar{R}) \Phi_m(\bar{R}, r)$$

Бундай яқинлашиш Борн-Оппенгеймер яқинлашиши деб аталади ва ядроларнинг эффектив потенциали шунчаки  $E(\bar{R})$  электрон энергияси функцияси эканлигини билдиради. Одатда, аксари молекулалар учун Борн-Оппенгеймер яқинлашиши яхши натижалар беради ва унинг аниқлиги ядролар массаси ортиб бориши билан ортиб боради.

**20)** га биноан, куп электронли система гамильтонианининг хоссалари:

$$\left. \begin{aligned} H_{eff} \varphi_i(r_i) &= \varepsilon_i \varphi_i(r_i), i = 1, 2, \dots, N \\ H_{eff} &= \sum_i (h_i + u_i) \end{aligned} \right\}$$

Яъни бир электронли тўлқин функциялар унинг хос функциялари, хос кийматлари эса бир электронли энергиялардир. Бу иборани ёйиладиган булсак,

$$h \varphi_k(r_1) + \sum_i \int \frac{1}{r_{12}} |\varphi_i(r_2)|^2 dr_1 \varphi_k(r_1) - \sum_i \int \frac{1}{r_{12}} \varphi_i^*(r_2) \varphi_k(r_2) dr_1 \varphi_k(r_1) = \varepsilon_k \varphi_k(r_1)$$

Бу ерда иккинчи хад -  $I_{и\omega\kappa}$  кулон интеграллари йигиндиси, учинчиси эса -  $K_{и\omega\kappa}$  алмашиниш интегралари.

Узи билан келишган майдон услуби (УКМ) бир неча кетма-кет кадамлардан иборат булиб, улар циклик равишда, ечим белгиланган аниқликка эришмагунча кайтарилaveraди.

1. Биринчи кадамда  $\{\varphi_i^0(r_i)\}$  синов тўлқин функциялари танланади.

2. Улар ёрдамида икки электронли потенциал тузилади ва у энди электронларнинг алохида координаталарига боғлиқ бўлмайди, чунки бу функция интеграл функция бўлади.

3. Тузилган потенциал ёрдамида бир электронли тенгламалар системаси ечилади ва янги  $\{\varphi_i^j(r_i)\}$  бир электронли тўлқин функциялар туплами топилади.

4. Олинган натижа аниқлиги олдингиси билан солиштирилади ва агарда, сезиларли узгаришлар мавжуд бўлса, олинган туплам синов ҳисобланади ва бутун анал 1 кадамдан бошлаб қайтарилади.

Бир электронли тўлқин функцияларни қуйидаги қуринишда олайлик:

$$\varphi_k(r_l) = \sum_a c_{ka} \chi_a(r_l) .$$

Албатта,  $\{c_{ka}\}$  ни топсак,  $\{\varphi_i(r_i)\}$  ҳам маълум бўлади. Энди дастлабки тенгламага қуйиб:

$$\sum_a c_{ka} h \chi_a + \sum_i \sum_a c_{ka} (2I_i - K_i) \chi_a = \sum_a c_{ka} \varepsilon_k \chi_a .$$

$\chi_b^*$  га қупайтириб ва интеграллаб:

$$\sum_a c_{ka} h_{ba} + \sum_i c_{ka} \sum_a (2I_i - K_i)_{ba} = \sum_a c_{ka} \varepsilon_k \int \chi_b^{*a} \chi_a dr_l, b, k = 1, 2, 3 \dots n$$

ни оламиз,

$$h_{ba} = \int \chi_b^* h \chi_a dr_l$$

$$(2I_i - K_i)_{ba} \sum_a c_{ka} = \int \chi_b^* (2I_i - K_i) \chi_a dr_l$$

Фок операторини киритамиз

$$F \equiv h + \sum_i (2I_i - K_i)$$

ва  $S_{ba} = \int \chi_b^* \chi_a dr_l$  белгилаймиз. Энди тенгламамизни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$F \varphi_k = \varepsilon_k \varphi_k$$

Бир электронли орбиталлар учун **.6)** ифодани ҳисобга олиб, **.12)** ни қуйидагича ёзиш мумкин:

$$\sum_i c_{ka} (F_{ba} - S_{ba} \varepsilon_k) = 0$$

Бу одатдаги бир жинсли алгебраик тенгламалар системасига ухшасада,  $I_u$  ва  $K_u$  бошлангич коэффициентлар орқали аниқланади,  $\Phi_{ab}$  матрица

элементлари  $C_{ib}^*C_{ia}$  купайтмани уз ичига олади, яъни система чизикли эмас.

## **СЕМИНАР № 7**

### **АТОМ ВА МОЛЕКУЛАНИНГ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИ**

Ковалент бога хос хоссалар- йуналтирилганлик, туйувчанлик, кутблилик, кутбланувчанликлар – бирикмаларнинг физик хоссаларини тулик белгилайдилар. Богнинг йуналтурувчанлиги модданинг молекуляр структураси билан ва млекуланинг геометрик шакли билан белгиланади. Икки бог уртасидаги бурчаклар валент бурчаклар деб аталади. Туйинувчанлик— атомларнинг чекланган микдордаги ковалент боглар хосил килиш кобилиятидир. Атомлар уртасида хосил булган боглар микдори уларнинг ташки электрон каватидаги орбиталлар сони билан чекланган. Богнинг кутблилиги атомларнинг турли электрманфийлиги туфайли электрон зичликнинг турли таксимоти натижасидир. Богнинг кутбланувчанлиги ундаги бог электронларининг ташки электр ва магнит майдони ёки реакцияга киришаётган зарра таъсирида силжишидир. Кутбланувчанлик электронларнинг харакатчанлиги билан белгиланади. Ковалентр богларнинг кутлилиги ва кутбланувчанлиги молекулаларнинг кутбли реагентларга нисбатан реакцион кобилиятини билдиради.

**Молекуляр орбиталлар назарияси** (МО) электрон зичлиги таксимоти тугрисида тасаввур беради ва молекулалар хоссаларини тушунтириб бериш имконини беради. Бу назарияда атом тугрисидаги тасаввурлар молекулаларга тадбик килинган. Бунда молекула алохида атомлар мажмуаси эмас, балки бир бутун система сифатида каралади. Молекуладаги электронлар молекуляр орбиталларда бир-бирининг ва барча ядролар куч майдонида харакатланади ва дискрет энергетик холатларга эгадирлар.

Бу назарияда молекуладаги барча электронлар худи атомдаги сингари хос молекуляр орбиталларда таксимланган булади. Электроннинг атомдаги холати Шредингер тенгламасининг ечими булган тўлқин функцияси билан тавсифланади. Туртта квант сонга боглик булган муайян математик куринишга эга булган, шунингдек, нормаллашиш ва бир кийматлилик шартини каноатлантирган  $\psi$  тўлқин функцияси Молекуляр орбитал деб аталади. Хар бир орбитал электрон орбиталдаги энергетик холатини тавсифловчи квант сонлар мажмуасига эга булади. Атомларнинг якка марказли орбиталларидан фаркли уларок, молекулалар икки ёки ундан ортик атом ядролари атрофидаги куп

марказли орбиталларга эга буладилар. Хар бир молекуляр орбитал, ионланиш потенциали билан характерланадиган аниқ энергияга эга булади.

Атом с-, п-, д-, ф- орбиталлари сингари молекуляр орбиталлар грек алфавити  $\sigma$ -,  $\pi$ -,  $\delta$ -,  $\gamma$ - билан белгиланади. МО атом орбиталлар етарли даражада якинлашганида уларнинг композицияси сифатида руёбга келади. МО даги электронлар сони ва уларнинг типи курсатилган ёзув молекуланинг конфигурациясини ифодалайди. Молекуляр орбиталларнинг уч тури мавжуд: боғловчи, бушаштирувчи ва бетараф. Боғловчи молекуляр орбиталлардаги электронлар боғни мустахкамлайди, бушаштирувчи МО даги эса уни бекарорлаштиради. Молекула, факатгина боғловчи орбиталдаги электронлар сони бушаштирувчидагига нисбатан куп булгандагина, баркарор булади. Бетараф орбиталларда жойлашган электронлар химиявий боғ хосил булишида катнашмайдилар. Молекуляр орбиталлар назариясида боғнинг тартиби куйидаги ифода билан аникланади

$$N = \frac{n_{\text{bond}} - n_{\text{aer}}}{2}$$

Бу ерда  $n_{\text{bond}}$  ва  $n_{\text{aer}}$  — электронларнинг боғловчи ва бушаштирувчи орбиталлардаги сони.

Валент боғлар услубига нисбатан бу услуб куйидаги афзалликларга эга:

4. Электрон такчил молекулалар (диборан), молекуляр радикаллар (азот(1)-оксиди), молекуляр ионлар(нитрозил, нитроил, гидразоний, оксигенил), гипервалент бирикмалар (инертгазлар бирикмалари)даги кимёвий боғни тушунтириб беради.

5. Куп марказли орбиталларга эга булган молекулаларнинг хосил булишини тушунтириб беради.

6. Водород боғни ковалент боғнинг хусусий холи сифатида, электрон зичликлари делокализацияланиши модели ва уч марказли турт электронли боғлар хосил булиши оркали (масалан,  $-X \cdots [F-X \cdots F]-$ ) тушунтириб беради.

Валент боғлар услуби, Шрёдингер тенгламасини куп электронли молекуляр система учун ечиш услубидир. У молекуладаги атомлар уртасида икки марказли кимёвий боғлар хосил булишига асосланган. Бу тасавурлар Гайтлер – Лондон услубини куп электронли молекулаларга тадбик килиш услубидир ва у биринчи марта  $H_2$  молекуласини тугри тушунтириб берган.



Валент боғлар методининг асосий физик мохияти шундаки, бунда молекуланинг тўлқин функцияси уни ташкил этувчи атомларнинг тўлқин функциялари оркали тасвирланади. Кимёвий боғнинг хосил булиши атомларнинг эркин электронларининг спинларини жуфтлашиши ҳисобига деб каралади. Шу аснода валент боғлар усули валентлик тушунчасини киритади. Молекуланинг структура формуласидаги ҳар бир валентлик чизигига икки тўлқин функцияси: электронлар координаталарини урин аламашилишига нисбатан симметрик булган фазовий  $\Phi(1,2)$ , ва бу опреацияга нисбатан антисимметрик булган, карама-карши спинли икки электронни тавсифловчи спин  $\sigma(1,2)$  функциялари купайтмаси куринишида ёзилади; бунда, белгиланишдаги 1 ва 2 ракамлар биринчи ва иккинчи электроннинг фазовий ва спин координаталарини белгилайди. Демак,

$$\chi_{AB}(1,2) = \Phi(1,2)\sigma(1,2).$$

Мураккаброк молекулалар учун эса куп электронли тўлқин функцияси Паули принципига биноан антисимметрик тарзда,  $\chi_{AB}(1,2)$  куринишидаги икки электронли тўлқин функция ва икки марказли боғларда банд булмаган жуфтлашмаган электронлар ва умумлашмаган электрон жуфтлар, ички каватлар электрон ҳолатларни тасвирловчи функциялар купайтмаси куринишида ёзилади.

## **СЕМИНАР № 8**

### **МОЛЕКУЛАЛАРНИНГ ФАЗОВИЙ ВА ЕЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИНИ**

### **ҲИСОБЛАШ УСУЛЛАРИ**

**Зичлик функционали назарияси.** Квант кимёсининг «Ананавий» усули, Хартри-Фока усулига асосланган булиб таянч нукта ва квант системалар ҳолатини характерловчи тўлқин функция сифатида кулланилади, угнанилаётган боғланишларни кимёвий хусусиятини, энергиясини ва тузилиши хақида аниқ жавоб бериши мумкин. Бунинг учун электроннинг коррелированланган ҳаракатининг энергиясининг тулик микдорини ва АО нинг куринишини, хатосиз ташкил этган асосий туплам зарур. Хозирда бундай ҳисоблар фақат энг оддий молекула учун кулланилади. Хатто энг юкори якинлашув Фулл СИ ҳам, худди СС еки МСССФ 10 огир атомлардан ташкил топлан молекуляр системаларда куллинилади. Бу усулда жуда жозибали альтернатив ендашиш зичлик функциясининг назариясининг кулланилишига асосланган (ЗФН) (*Денситй Фунс-тионал Тҳеорй, ДФТ*). ЗФН усули жуда купол якинлашиш булишига карамасдан куп холларда ва куп системаларда бирлантирилган

кластерлар ва КВ ларнинг квадратланишдан олинган усулининг аниқликги еки хатто аниқликдан юкори нукталар натижасини беради. Ва бу ҳолат вақтнинг сарфланишида ва компетер ресурсларида худи Хартри-Фок усулидекдир!

Функционал нима дегани? Функция – бу бир катор сонларнинг бошқаси билан тугри келишидир, яъни функция сонларни «олади» ва «беради» унга тугри келган сонларга:  $y = \phi(x)$ . Функционални сон ва функцияга мос ҳолда куйилади, кайсики уз ҳолатида, бошқа сонларга тугри келади, яъни  $y = \Phi[\phi(x)]$  еки оддий  $y = \Phi[\phi]$  га. Функционал билан бирга юкорида курсатилган операцияларни бажариш мумкин, худди функциядаги каби (масалан, дифференциялаш).

$$\delta F[f] = F[f + \delta f] - F[f] = \int \frac{\delta F}{\delta f(x)} \delta f(x) dx$$

$$\frac{\delta}{\delta f(x)} (F_1 F_2) = \frac{\delta F_1}{\delta f(x)} (F_2) + \frac{\delta F_2}{\delta f(x)} (F_1) \text{ и т.д.}$$

ЗФН усулида физик каталикларнинг калити бу электрон зичлик булиб  $\rho$ , у системани ташкил этган электронларнинг функциявий кординатаси мохиятидир. Хартри-Фок усулидаги бита электрон учун, кайсики молекуладаги барча электронларнинг ҳосил булишига тенг булган электрон зичликдир

$$\rho_{total}(r) = \sum_{i=1}^N |\varphi_i(r)|^2.$$

Квант ситемасини тасвирлашда куп йиллар давомида кулланилган электрон зичлик катъий асосланган интуицияга асосланган эди. Электрон зичлик тўлқин функцияга нисбатан жозибалидир.

Биринчидан, у физик аниқланган, физик маънога эга булмаган тўлқин функциядан фаркли уларок улчаса булади:

Иккинчидан, N-электрон системаларининг тўлқин функцияси 3N электронлар кординатасига боглик (еки 4N га хам, агар спиннини эътиборга олсак) бунда электрон зичлик доим молекуладаги электорлар сонига боглик булмаган 3 кординаталар функция иборат.

Муаммо куйидагидан иборат: электрон зичлик ва энергия орасида Ўзаро таъсирни борлигини аниқлаш, агар бу таъсир булса унинг аниқ куруниши кандайлиги аниқлаш.

### **Хоэнберг ва Кона назарияси.**

1964 йил Хоэнберг ва Кона асосий ҳолатнинг хусусияти ЭЗН-иккинчи тугилиши булган  $\rho$ -электрон зичликнинг функционалидан иборат булган теоремасини исботлашди. Яъни аниқрок айтганда Хоэнберг ва Кона теоремасига асосланиб молекуланинг асосий ҳолат энергияси электрон

**зичлик функционали хисобланади ва бунда энергия минималь булади, агар  $\rho$  аник электрон зияликнинг асосий холати булса.**

### **Кона-Шема назарияси.**

ЭЗН усули кулланилишининг бошланишида Кона ва Шем таклиф килган хисобланувчи кимёда орбиталнинг хисоб схемасида ишлаб чиқариш амалга оширилди. Кона-Шама назариясининг асосий гоёси кинетик энергия функционалини икки қисмга бўлишга асосланган, биринчидан ТС Ўзаро таъсирлашмайдиган электронлар системасига жавоб берувчи орбиталларнинг тузилиши формалигида куллинилиш аниклиги хисобланади, иккинчидан ТС коррекциясини тугирлайдиган аъзони билдиради.

$$T[\rho] = T_S[\rho] + T_C[\rho],$$
$$T_S[\rho] = \sum_i^M \left\langle \varphi_i \left| -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right| \varphi_i \right\rangle.$$

Шак шубҳасиз келтирилган таклиф молекулалар ситемаси тасвири учун амалий тулик Хартри-Фокка анологидир.

а) Орбиталларни ташкил этиш учун ЛКАО усули кулланилади (11.4 қисмга қаранг).

б) атом орбиталлар тасвири асосий тупламлар натижасида амалга оширилади (12,2-12,6 қисмга қаранг).

в) орбитал ва уларнинг энергияси Ўзаро келушиш процедураси ердамида итерацион йулда жойлашади.

## **СЕМИНАР № 9**

### **ОРБИТАЛ СИММЕТРИЯ САҚЛАНИШИ БИЛАН БОРАДИГАН РЕАКТСИЯЛАР. КВАНТ БИОКИМЁСИ.**

**Ярим эмпирик усул.** Эмпирик булмаган хисобларни кулашда ЭХМдаги (~70%) вақтнинг асосий сарфланиши электронлар орасидаги Ўзаро таъсир интеграллини хисоблашга қаратилгандир ( $\mu\nu|\lambda\sigma$ ). Молекулалар сонининг купайиши натижасида бундай интеграллар сони  $N^4$  пропорционал холатда усади,  $N$  – АО базиснинг улчамидир. Бунга кура хисобнинг киймати ва вақти ҳам усиб боради. Компьютер ресурсларининг куп сарфланиши хисоблаш кийин булган интегралларининг параметрларини алмаштиришга олиб келувчи бир канча соддалашган схемалар ишлаб чиқаришга олиб келди. Бу катталиклар тажрибавий маълумотлардан олинган (масалан, атомнинг ионизация потенциали хар хил валент холатлардан), еки физик маънога эга булмаган параметрлардан яъни хисоблар тажрибавий маълумотлар билан мос тушиш

усулида танланган. Бундан ташкари, Ўзаро таъсир интегралини аниқловчи параметрларни уз ичига олган турли хил яқинлашиш ифодалари кулланилади. Берилган ендашувга асосланган усул *ярим эмпирик* деб аталади. Интегралларни аниқлашда параметрлар туплами ва тенгламалар ярим эмпирик усулдаги *параметризацияни* ифодалайди. Турли-хил сатхлардаги электронлар орасидаги Ўзаро таъсир интегралларнинг бефарклиги ярим эмпирик усулдаги иерархияликни яратади. Бунда факат умумий-валент усулларни караш билан чегараланамиз, яъни молекуладаги электронлар боғланишини исталган турини тасвирлашда кулланиладиган усулга карши булган, яъни, масалан,  $\pi$ -электрон усулидан (Хюккел усули), кайси-ки бу факатгина молекуланинг  $\pi$ -электронлар системасига боғликлигида кулланилади.

**Каралаётган кейинги ярим эмпирик усуллари валент яқинлашиш усуллари хисобланади, яъни эмпирик булмаган усулдан фаркли уларок уларда факатгина АО валент каватлардаги электронларнинг валентлигини хисобга олинади.**

Валент булмаган (колдик) электронларнинг таъсири эмпирик параметрларда ноаниқ хисобланади. Полиэмпирик хисоблар натижаси бир вақтда молекуланинг хам физик хам кимёвий хусусиятини етарли даражада аниқ бера олмайди хакида узига узини аниқ хисоб бериши шарт.

Биринчидан, назарияни соддалаштириш мукаррар равишда хисоб натижаларни куполланишига олиб келади, иккинчидан, параметрларни мослаштариш биттадан айрим холларда бир канча усуллар келтириб чикаради. Бу билан боғлиқ холда хар-хил параметризация усуллари тугилади, каникарли холатда *муайян хусусиятни еки группавий хусусиятларни* тасвирлайдиган.

Куйидаги асосий шартларни соддалаштирилган назий модел каноатлантириши шарт:

1. Яримэмпирик усул катта молекулалар хисобида кулланилиши учун етарли даражада сода булиши шарт.

2. Улар Хартри-Фока усулидаги етишмовчиликни параметризация ердамида компенсациялаши шарт (электронлар Ўзаро боғликлигини, нолинчи тебранишлар энергиясини).

3. Хисоблар натижаси ортогональ узгартирувчилар АО га нисбатан инвариант булиши шарт.

Бу шундан далолат берадики, куйидаги катталиклар: энтальпиянинг хосил булиш киймати, диполь моментини, электронлар жойлашиши ва хокозалар фазода молекуланинг бурулишига боғлиқ булмаслиги шарт.

### **Ноллинчи дифференциал копланиш яқинлашиши.**

Эслатамиз, МО ЛКАО усулида,  $\Psi_{\mu}$  орбитали  $\chi_{\mu}$  атом орбиталлининг

чизикли комбинацияси билан аппроксимацияланади.

$$\Psi_i = \sum_{\mu} c_{i\mu} \chi_{\mu},$$

$c_{i\mu}$  – таксимланиш коэффициенти. Ярим эмпирик усулда АО ни тасвирлаш учун орбиталнинг слэтер типи кулланилади.

$n, l, m$  – Асосий, орбитал ва магнит квант сонлари,  $N$  – нормалловчи константа,  $\xi$  – слэтеров экспонентаси,  $Y_{l,m}^M(\theta, \phi)$  – сферик гармоника ва  $P_l^m(\cos\theta)$  – Лежандр купхадининг қўшувчиси.  $\xi$  – катталиқ одатда Слэтер конунига мос холда танланади.

Молекуланинг хусусий (МО) функцияни ва хусусий гамельтон кийматни (МО энергиясини) топиш учун Хартри-Фока-Рутаана тенгламасини ечиш шарт.

$$\sum_{\nu=1}^N (F_{\mu\nu} - \varepsilon_i S_{\mu\nu}) c_{i\nu} = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots, N.$$

Бу ерда  $\varepsilon_i$  – молекуляр орбиталнинг бирламчи-электрон энергияси  $\Psi_i$ ,  $S_{\mu\nu}$  – коплаш матрица элементи

$$S_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^*(1) \chi_{\nu}(1) dq_1,$$

$F_{\mu\nu}$  – Фока матрица элементи

$$F_{\mu\nu} = H_{\mu\nu} + \sum_{\lambda=1}^N \sum_{\sigma=1}^N P_{\lambda\sigma} \left[ (\mu\nu | \lambda\sigma) - \frac{1}{2} (\mu\lambda | \nu\sigma) \right].$$

$H_{\mu\nu}$  – майдондаги «ялангоч» атомларнинг электрон энергиясини характерловчи колдик интеграл:

$$H_{\mu\nu} = \int \chi_{\mu}^*(1) \hat{H}^{ocm}(1) \chi_{\nu}(1) dq_1.$$

Эмпирик булмаган усул (аб иницио – лотинча, бошидан) аник холда бу тенгламаларни содалаштирмасдан ечади. Яримэмпирик усулларда  $\mu$  ва  $\nu$  га тенг булган атом орбиталлари орасида дифференциал копланиш якинлашишлари киритилади,

$$\chi_{\mu} \chi_{\nu} dq = \delta_{\mu\nu} \cdot \chi_{\mu}^2 dq,$$

$\delta_{\mu\nu}$  – Кронекер символи. Бу холатда икки электрон интегралини куйидагича езишимиз мумкин

$$(\mu\nu | \lambda\sigma) = (\mu\mu | \lambda\lambda) \delta_{\mu\nu} \delta_{\lambda\sigma}.$$

Яримэмпирик усулда куп марказли интеграллар Ўзаро таъсири тахминан

нолга тенгдир, шу билан бир каторда сезиларли даражада хисоблаш вакти кискаради. Юкорида каралган Хартри-Фока-Рутаана содалаштирилган хисоб схемаси нолли дифференциал копланиш деб номланади (НДТ). Инглисча транскрипцияда – НДО (Неглест оф Дифференциал Оверлап) еки ЗДО (Зеро Дифференциал Оверлап).

НДТ якинлашиши хар-хил усулларда турлича реаллашади. Аппроксимации тенгламаси яримэмпирик усулларни номлашда кайтарилади. Бу:

–дифференциал копланишдан буткул воз кечиш – ТЯДТ (СНДО, СомпLETE Неглест оф Дифференциал Оверлап);

–дифференциал копланишдан кисман воз кечиш – КЯДТ (ИНДО, Интермедиате Неглест оф Дифференциал Оверлап);

– икки атомли дифференциал копланиш – ИАЯДТ (НДДО, Неглест оф Диатомис Дифференциал Оверлап).

### Хюккел усули

$\pi$  - Электрон якинлашиш факат  $\pi$ -электронлар системасининг туйинган квант механик хисоблари ва ароматик кўшилишлари учун хисобга олиншига асосланган. Колган валент  $\sigma$ -электронлари тегишли булган ва молекула электронлари электро статик майдондаги  $\pi$ -электронлар харакатидек ва тахмин килинганидек  $\pi$ -электрон системасининг узгаришига боглик булмаган шавкатсиз скелетдек каралади.

Яримэмпирик усулда бу электронларнинг таъсири параметрларни танлаш еки потенциалнинг формасига караб урагнилади. Бу гоё 1931 й. немес олими Е. Хюккел томонидан таклиф килинган. Жиддий гапирганда, электронлар фаркланмаслигини хисобга олган холда  $\pi$ - еки  $\sigma$ -электронлар хакида эмас симетрияга мос келган тўлқин  $\pi$ - и  $\sigma$ -холатларни функциясини тасвирлаш керак эди. Бирок, бундай тушунчалар, « $\pi$ -электронлар» одатий булиб колди, кайсики уларни замонавий квант-кимё термини каби караш мумкин.  $\sigma$ - ва  $\pi$ - холатлар симметриясини ифодалаш ясси куп атом молекуларда атом орбиталларини ажратиш мумкинлигига, келтирилган молекуяр орбиталларини хосил килувчи базисни тасвирлайдиган тезкор иккита грухга ажралишига асосланган.

## МУСТАҚИЛ ТАЪЛИМ МАВЗУЛАРИ

<b>№</b>	<b>Мустақил таълим мазмуни</b>	<b>Соати</b>
<b>1</b>	Рентген нурлари. Мутлақо қора жисм муаммоси.	<b>4</b>
<b>2</b>	Планк ғояси ва эйнштейнинг квант назарияси.	<b>4</b>
<b>3</b>	Электромагнит нурланишнинг квантланганлиги.	<b>4</b>
<b>4</b>	Франк ва Гертс тажрибалари, атом системаларида энергетик поғоналарнинг дискретлиги.	<b>6</b>
<b>5</b>	Резерфорд тажрибалари. Штерн ва Герлах тажрибалари.	<b>4</b>
<b>6</b>	Юленбек ва Гаудсмит тажрибалари ва электрон спини.	<b>6</b>
<b>7</b>	Ёруғлик нурининг дуалистик табиати. Девисон-Жермер тажрибалари ва микрозаррачаларнинг дифракцияси.	<b>6</b>
	<b>ЖАМИ</b>	<b>34</b>

## **КВАНТ МЕХАНИКАСИ ВА КВАНТ КИМЁ ФАНИДАН ОРАЛИК НАЗОРАТ САВОЛЛАРИ**

1. Де Бройль тенгламасини ёзинг ва тушунтиринг.
2. Бор постулатларини келтиринг.
3. Бор-Зоммерфельд моделини тушунтиринг.
4. Комптон эффекти?
5. Мутлак кора жисм ва унинг нурланиши тушунчаси.
6. Ультрабинафша халокат тугрисида маълумот беринг.
7. Девиссон-Жермер тажрибасини тушунтириб беринг.
8. Ридберг формуласи. Атом спектри сериялари.
9. Фотоэффект конунлари.
10. Бор назариясини корпускуляр-тулкин дуализми принциpidан келтириб чиқаринг.
11. Вин конуни.
12. Релей-Жинс формуласи.
13. Мутлако кора жисм учун Планк назарияси.
14. Қандай операторлар Эрмит булади?
15. Квант механикаси постулатларини келтиринг.
16. Хос киймат ва хос функция тушунчаси?
17. Коммутация принципи?
18. Координата, импульс ва энергия операторларини келтиринг.
19. Биринчи Бор радиусининг кийматини ноаниклик принципи асосида келтириб чиқаринг.
20. Комплекс кушма, кушма ва уз-узига кушма операторлар тушунчаси?
21. Тургун тулкинлар қандай?
22. Электроннинг атомдаги тулик энергияси қандай ва нима учун?
23. Эркин электронлар энергиясининг боғланган электронлар энергиясидан фарқи?
24. электроннинг атомдаги тулик энергиясининг қайси қисми қатта, потенциалми ёки кинетик?
25. Шредингер тенгламасининг потенциал ура учун ечими қандай?
26. Шредингер тенгламасининг потенциал тусик учун ечими қандай?
27. Шредингер тенгламасини потенциал тусик учун ечимини келтириб чиқаринг.
28. Шредингер тенгламасини потенциал ура учун ечимини келтириб чиқаринг.
29. Галаёнланиш назариясининг моҳияти?
30. Вариацион принципни тушунтиринг.
31. Квант сонларнинг орбиталлардаги тугунларга алоқасини курсатинг.
32. С ва п- электронлар тулкин функциялари фазалари.



33. Электрон утишда танлаш коидаси
34. Ритцинг вариацион принципи.
35. Бурчак координаталари Декарт координаталари билан кандай боғланган?
36. Турли орбиталлар учун Радиал функция таксимотини курсатинг.
37. магнит моменти спин билан кандай боғланган?
38. Спин компонентлари бир-бири билан кандай коммутацияланади?
39. спин-орбитал узаро таъсир натижасида термлар кандай парчланади?
40. Слэтер детерминантидан тулкин функциясининг антисимметрик эканлиги кандай килиб келтириб чиқарилади?
41. Харакат микдори моменти оператор ива унинг ташкил этувчиларининг коммутацион хусусиятлари.
42. Узи-узи билан келишган майдон тушунчасини ёритиб беринг.
43. Аср тенгламасини тахлил килинг.
44. Итерацион услубни тушунтиринг.
45. Купманс теоремасини келтиринг.
46. Хартри-Фок услуби камчиликлари.
47. Куп электронли атом учун Шредингер тенгламасини ечиш учун кулланилаг якинлашишлар.
48. Хартри, Хартри-Фок, Хартри-Фок-Рутаан методлари бир-биридан фарқи.
49. Валент боғлар услубининг МО усулидан фарқи?
50. Ток ва жуфт симметрияга эга булган МО лар тугрисида тушунча.
51. Сигма ва пи боғловчи ва бушаштирувчи орбиталларнинг энергия буйича кетма-кетлиги.
52. С, п, д орбиталларнинг узаро гибридланиши.
53. Активланиш энергияси промоторлаш энергиясидан фарқи.
54. Аррениуснинг активланиш коидаси.
55. Хэммонд постулати.
56. Кертин-Гаммет принципи.
57. Хартри-Фок-Рутаан тенгламасининг Хартри-Фок тенгламасидан фарқи.
58. Хартри-Фок услубининг Локал зичлик функционали услубидан фарқи.
59. Конфигурацион узаро таъсир тушунчасини ёритиб беринг?
60. нол дифференциал копланиш назариясининг мохияти.
61. Тулик электрон ва пи-электрон якинлашишлар.
62. Квант кимёсининг ярим эмпирик услубларининг афзалликлари ва камчиликлари.

## ГЛОССАРИЙ

### А

**Аб иницио** (лат. “бирламчи тамойиллар”, “бошланиши”) – хозирги замон квант механикасининг асосий ҳисоблаш методи. Олинадиган асосий маълумотлар, молекула ёки кристаллардаги ядро заряди ва уларнинг ҳолати ва базис функциялар (қоидаларга оид слейтер ёки гаусс типига мансуб) тўпламидир. Эквивалент номи – неэмпирик ҳисоблашлар. Бу ҳисоблаш методлари ичида анча аниқроқ методдир. Одатда бир электронли Хартри-Фок ёки Кон-Шэм тенгламаларини электрон корреляцияси билан ечишни ташкил этади. Кўпчилик ҳисоблашларни ечишда МО АОЧА (молекуляр орбиталлар кўринишидаги атом орбиталларининг чизиқли амаллари) фойдаланилади.

**Ангстрем** - оралик бирлик,  $10^{-10}$  м.га тенг

**Атом катталиклари** – Квант кимёда ҳисоблашларни соддалаштириш учун қўлланилади.  $m=1$ ,  $\hbar=1$  ни қабул қилади. Бу ёрдамида танлашда, узунлик ва энергия бирлиги бўлиб  $\hbar^2/m_e^2=1$  катталиги, Бор =  $0,529177 \cdot 10^{-8}$  см,  $m_e^4 / \hbar^2 = 1$ , Хартри =  $27,2116$  эВ, тезлик бирлиги -  $v^2 / \hbar = 2,18769 \cdot 10^8$  см  $s^{-1}$  катталиги, вақт бирлиги  $-\hbar^3/m_e^4 = 2,41888 \cdot 10^{-17}$  хизмат қилади. Бошқа физик катталиклар атомдаги бирликлар ўзгаради.

**Атом орбитал (АО)** Математик функция, битта электрон координаталари жойлашиш тартибини кўрсатади. Атомдаги электронлар тақсимланиш (унинг спини ҳисобга олинмаган) жойларини ифодалайди. Атом орбиталларининг чизиқли амаллари, тахминий ёзилган молекуляр орбиталлар жами АО, орбиталнинг базис тўпламини ташкил этишига рухсат беради.

### Б

**Больцман фактори** - Молекула системасида, тенглик муносабатларида, зарра сони, энергия  $E_i$  Больцман эхп ( $-E_i / kT$ ) катталиги билан пропорционал, бу ерда  $k$  - Больцман константаси

### Б

**Валент яқинлашиш** – соддалаштирувчи яқинлашиш, ҳисоблашларда вақатгина валент электронларгина (ва орбиталларни) ҳисобга олинади. Полуэмпирик квант-кимёвий методларда, худди ЭХТ, СНДО, МНДО, АМ1 ва ПМ3 лардаги каби айнан шу яқинлашишдан фойдаланилади (тўлиқ валент аб иницио методидан яхши натижага эга)

**ЮБМО (ХОМО)** – юқори банд молекуляр орбитал. Купмас теоремаси бўйича, молекуланинг юқори банд молекуляр орбитали энергияси ионланиш потенциалига тахминан тенг ва тесқари ишора қабул қилади.

**Тебранувчи ҳолатлар** – Молекула ёки кристалл ҳолатида, система ичидаги бўлинмаган электрон ва ядровий таъсирларни аниқлайди. Ядровий

тебранишлар энергияси асосий ва ғалаёнланган электрон ҳолатлар энергиялари фарқига солиштирса бўладиган даражага етганда пайдо бўлади

**Тўлқин функцияси** – заррача координата функцияси ва вақти  $\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n, t) = \Psi(\{x\}, t)$ , н заррача учун система ҳолатини тўлиқ тавсифлайди. Тўлқин функция қаралаётган система учун Шредингер тенгламаси ечими бўлиб, система ҳақида тўлиқ маълумот ўз ичига олади, зарраларнинг фазода жойлашиши, кинетик энергияси ва бошқаларларни аниқлаш имконини беради.  $\Psi^*(\{x\}, t)\Psi(\{x\}, t)dx$  ифоданинг маъноси шундаки,  $t$  вақт моментиди,  $1$  – заррача  $x_1$  дан  $x_1+dx_1$  гача координата интервалида,  $2$  – заррача  $x_2$  дан  $x_2+dx_2$  гача координата интервалида ва ҳоказо бўлади

**Айниш** – агарда системада икки ёки бир нечта ҳар хил тўлқин функцияси мос келса ва худди шу энергия система ҳолатининг айнаши деб аталади. Демак, бўш атомнинг  $3$  та  $np$ -орбитали система функциясининг уч қарра айнашганини намоён этади,  $p$ -орбитали эса икки атомли молекуланинг икки қарра айнашганлик тўпламидир. Айнаш система симметрияси билан чамбарчас боғлиқ.

**Г**

**Гамильтониан** –  $H$  системанинг тўлиқ энергия оператори.  $H = T + V$  қиймати кинетик энергия  $T$  ва потенциал энергия  $V$  йиғиндисига тенг бўлади.

**Орбиталларининг гибридланиши** – математик усул, молекула ва системанинг ковалент боғланишларидаги геометрик муносабатлари учун структуравий кимёда кенг қўлланилади. Гибрид орбиталлар ўзини АО ҳар хил чизиқли комбинацияси каби намоён қилади ва бўлинмаган электрон жуфтлар ва ички электронларни ҳисобга олади. Умумий ҳолатда гибрид АО эквивалент эмас. АО лари яққол гибридланганида молекула геометрияси дискретланади ва орбиталларининг максимал қоплашиши юз беради, кейинчалик кўпроқ йўналган қопланган гибрид АО бошқа боғланишлар хусусиятларини намоён этади.

**Энергиянинг глобал минимуми** – энг муҳим нуқта потенциал энергия юза (ПЕЮ), сида энг чуқур минимум юз беради. Молекуляр системаларнинг анча барқарор конфигурацияларини характерлайди. Қолган локал минимумлар ПЕЮ ги кичик энергияли изомерларга мос келади. Потенциал энергиянинг юзасининг асосий нуқтаси, молекуляр система (масалан, ўтказувчанлик ҳолати) лардаги барқарор бўлмаган геометрик системаларга мос келадиган глобал ёки локал минимумларга эга эмаслигидир.

**Потенциал энергия градиенти** – молекуляр системалар бўйича дастлабки потенциал энергия ядро координаталарига тадбиқ этилган. Потенциал энергия юза нуқтасида энергия градиенти нолга тенг бўлиши, молекуляр системаларнинг конфигурацион ҳолатга ўтиши ёки глобал ёки локал минимум ҳолатларини ифодалайди.

**Чегаравий орбитал** – реакция қобилияти назарияси тўғрисидаги тушунчалардан бири, келтирилган ғояга муфовиқ реакцияларда хужумнинг қулай жойини максимал электрон зичликка эга бир нечта орбиталдаги атомлар бажаради. Электрофил реакция вақтида чегаравий орбитал, юқори банд молекуляр орбитал **ЮБМО (ХОМО)**, нуклеофил реакцияда пастки бўк молекуляр орбитал **ПБМО (ЛУМО)** кўринишда бўлади.

**Д**

**Датив боғланиш** – кимёвий боғланиш, комплексдаги марказий атомнинг бўш  $\pi$ -орбиталига лигандлардаги тўлган АО электронлар узатилишини ифодалайди ва лиганддаги  $\pi$ -орбитали хусусий тескари ишорасини англатади. Бу, масалан хром гексакарбонил  $\text{Cr}(\text{CO})_6$  да юз бериш тартиби: электрон жуфтлар лиганддан металл ионига  $\pi \rightarrow \pi$  боғи орқали алмашиниши ( $\pi \rightarrow \pi$  донорланиш ёки донор-акцептор боғланиш) ва  $\pi \rightarrow \pi$  боғи (қайта  $\pi$ -донорланиш ёки датив боғланиш) орқали электронларнинг лигандага қайта ўтиши жараёни юз беради.

**Слейтер детерминанти** – атом ёки молекулларнинг мувофиқлашган спин орбиталлардан хосил бўлишини белгиловчи детерминант. Н электронлардан тахминий кўп электронли тўлқин функцияси олишга ёрдам бериб, уни тўғри тескари симметрияли хоссасини таъминлайди. Слейтер детерминанти элементларида орбитал электронларини хисобга олувчи ва детерминант усун (қатор) лари ўрни билан эквивалент электронлар алмаштирувчи хусусиятлар мавжуд.

**Тақиқланган зона** – каттиқ жисмлардаги юқори энергетик зона, электронлар билан тўлган (валент) зона ва пастки электронлар билан тўлмаган (ўтказувчи зона) энергетик даражалари орлиғи.

**Реакцияга мойиллиги кўрсаткичи (РМК)** – реакция мойиллиги хақида тажрибавий маълумотлар билан квант-кимёвий хисоблашларда олинган электрон ва энергетик харктеристик натижалар асосида уйғунлашган ахборотлар тўплами. Реакцияга мойиллиги кўрсаткичи амалиётда қўлланилиш билимлар режасида хисоблаш катталиклари – дискрипторлар тўплами билан молекуляр системаларнинг аниқ бўлган хоссалари корреляциясини кўриш мумкин.

**Ион боғланиш** – электрон зичликнинг асимметрик тарқалиши орқали юзага келадиган кимёвий боғланиш. Ион боғланиш дипол моментининг ноль кийматли холатидан иборат.

## ИЛОВАЛАР

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ  
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ  
МИРЗО УЛУГБЕК НОМИДАГИ ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ  
УНИВЕРСИТЕТИ

“ТАСДИҚЛАЙМАН”  
ЎзМУ ректори

2018 йил 13 07

“КЕЛИШИЛДИ”

ЎзМУ таълим вазирлиги

25 08

67-5140500-2.09

18.08

КВАНТ КИМЁСИ ВА КВАНТ МЕХАНИКАСИ  
ФАН  
ДАСТУРИ

Билим соҳаси:	100000	–	Гуманитар соҳа
Таълим соҳаси:	140000	–	Табиий фанлар
Таълим йўналиши:	5140500	–	Кимё

ТОШКЕНТ – 201 \_

Фан дастури Олий ва ўрта махсус, касб-хунар таълими йуналишлари бўйича Ўқув-услубий бирлашмалар фаоллигини Мувофиқлаштирувчи Кенгашининг 2018 йил "18" 08 даги 4 -сонли баённомаси билан маъқулланган.

Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 йил "25" 08 даги 744 сонли буйруғи билан маъқулланган фан дастурларини таянч олий таълим муассасаси томонидан тасдиқлашга розилик берилган.

Фан дастури Ўзбекистон Миллий университетида ишлаб чиқилди.

#### Тузувчилар:

Мухтаров А.П. – Физикавий кимё кафедраси, ф.м.ф.и.

Юнусов Ф.У. – Физикавий кимё кафедраси катта ўқитувчиси, к.ф.и.

#### Такрирчилар:

Сидиков А.Ж. Тошкент кимё технология институти проф., к.ф.д.

Шарипов Х.Т. Фан ва тараккиёт ДУК. Проф., к.ф.д.

Фан дастури Ўзбекистон Миллий университети Кенгашида кўриб чиқилган ва тасдиққа таянч қилинган (2018 йил "13" 07 даги "3" - сонли баённома).

## I. Ўқув фанининг долзарблиги ва олий касбий

### таълимдаги ўрни

Ушбу ўқув дастур кимё фанини ўрганишда зарур бўлган билимларни талабаларга етказувчи назарий ва амалий фанларнинг энг муҳимларидан бири бўлган «Квант кимёси ва квант механикаси» курси бўйича тузилган бўлиб, у университетларнинг кимё ихтисослиги бўйича бакалаврлар тайёрлайдиган таълим йўналиш учун мўлжалланган.

Бу фан атомлар, молекулалар ва ионлардан ташкил топган кимёвий моддаларга хос бўлган тузилиш ва хусусиятларни ўрганиш ва билиш натижасида уларни осонлик билан идентификациялаш, эга бўлиши керак бўлган хоссалари олдиндан айтиб қўйилган материалларни яратишнинг илмий асосларини ўргатади.

### II. Ўқув фанининг мақсади ва вазифаси

Фани ўқитишдан мақсад – талабаларга «Квант кимёси ва квант механикаси» қонунларининг маъносини ёритиб бериш, шу қонунларнинг қўлланиш соҳаларини ўргатиш ва аниқ кимёвий масалаларни ҳал қилишда ушбу қонунларнинг амалий имкониятларини тўғри тушунтириш. Шу сабабли, «Квант кимёси ва квант механикаси» асосларини ўрганишда, бу фanning барча бўлимлари ўртасидаги мавжуд боғлиқликни ёритиш йўналишида билим, кўникма ва малака шакллантиришдир.

Фанининг вазифаси – кимёнинг назарий қонунларидан турли масалаларни ҳал қилишда уддабуронлик билан фойдаланиш қобилиятини ривожлантириш, кимёвий реакциялар маҳсулдорлигини аниқ ҳисоблаш. Турли ҳисоблаш ишларида маълумотномалардан унумли фойдалана олиш. «Квант кимёси ва квант механикаси» ўқув фанини ўзлаштириш жараёнида амалга ошириладиган масалалар доирасида талаба:

- квант механика фани ва унинг усуллари ҳақида умумий тушунча. Квант механика ва классик физика ўртасидаги муносабат. Квант механиканинг асослари. Квант механиканинг пайдо бўлиши ва ривожланишининг тарихий сабаблари. 19-асрнинг охиридаги физиканинг умумий тавсифи. Радиоактивликнинг очилиши. Электроннинг очилишини **билиши керак;**

- квант механиканинг физик асослари. Тўлқин функцияси. Тўлқин функцияси тушунчасини физик нуқтаи назардан талқини. Тўлқин функциясининг нормалланиш шартлари. Заррачалар системаси учун тўлқин функцияси. Молекулаларнинг реакция қобилиятини квант-кимёвий тушунтириш. Молекуляр диаграммалар ёрдамида молекулаларнинг реакция қобилияти тушунтириш **кўникмаларига эга бўлиши керак;**

- боғнинг тартиби, электрон зичлик ва озод валентлик индекси тушунчалари. Молекуляр орбиталлар усули ёрдамида молекулаларнинг микдорий кўрсаткичларини ҳисоблаш **малакаларига эга бўлиши керак.**

### **III. Асосий назарий қисм (маъруза машғулоти)**

#### **1- мавзу. Атом тўғрисидаги тасаввурларнинг ривожланиши.**

Атом тўғрисидаги қадимий тасаввурлар. Электроннинг кашф этилиши. Радиоактивлик. Атом тузилиши назариялари. Абсолют қора жисмнинг нурланиши. Квант назарияси. Фотоэффект. Водород атоми спектри. Корпускуляр-тулқин дуализми. Резерфорд тажрибаси. Бор назарияси.

#### **2- мавзу. “Квант кимёси” замонавий кимёнинг назарий асоси.**

Квант механикаси асослари. Квант механиканинг асосий постулатлари. Квант ҳолатлар ва тўлқин функцияси; тўлқин функциясининг асосий хоссалари. Кузатилаётган физикавий катталиқ операторлари; ўртача қиймат ва кузатилиш дисперсияси. Координата, импульс операторлари, импульс моменти, кинетик ва потенциал энергиялар. Гамильтон (гамильтониан) оператори. Ноаниқлик муносабати. Унинг физик маъноси ва мисоллар.

#### **3- мавзу. Шредингер тенгламаси.**

Ҳолатлар эволюцияси. Шредингернинг стационар тенгламаси. Дискрет ва узлуксиз спектрлар. Квант механикаси қўлланилган энг оддий мисоллар. Бир ўлчамли масалалар: спектр, тўлқин функциянинг сифат хусусиятлари.

#### **4- мавзу. Водород атоми масаласи.**

Ўзгарувчиларни ажратиш. Водородсимон орбиталлар, уларнинг радиал ва бурчак қисмларининг график кўриниши. Марказий майдон симметрияси туфайли бир электронли ҳолатнинг айнаиши. Квант-механика масалаларини ечишнинг тақрибий усуллари. Стационар ҳолатларнинг галаёнланиш назарияси. Квант механикасида вариацион принцип ва вариацион метод. Ритц методи.

#### **5- мавзу. Спин.**

Элементар заррачалар спини ва унинг магнит моментига алоқаси. Спин оператори ва коммутацион муносабат. Спин-орбитал ўзаро таъсир ва унинг кўринишлари. Айнан ўхшаш зарралар системаси: фермионлар ва бозонлар. Электронлар системаси учун тўлқин функциясининг антисимметрияси. Электронлар системаси тўлқин функциясини аниқловчи кўринишида тасвирлаш.

#### **6- мавзу. Атом ва молекула учун Шредингер тенгламаси.**

Электронлар ва ядро харакатининг ажратилиши. Адиабатик яқинлашиш. Потенциал энергия сирти. Ҳозирги замон кимёси тузилиш назариясида потенциал энергия сиртининг роли. Мувозанатдаги конфигурация ва молекулалар конформацияси. Орбиталларни белгиловчи тенгламалар. Орбиталлар энергияси ва уларнинг электронлар тўлиқ энергияси билан алоқаси. Купманс теоремаси ва фотоэлектрон спектр. Хартри – Фок методи қўлланилиш чегараси. Конфигурацион ўзаро таъсир усули ҳақида тушунча. Валент схемалар усули.

#### **7- мавзу. Атом ва молекуланинг электрон тузилиши.**

Электрон конфигурация ва атомлар терми. Атомларда моментлар қўшилиши. Хунд қондаси. Атомларнинг электрон тузилиши ва Д.И. Менделеевнинг элементлар даврий системаси. Атом орбиталларининг кенг тарқалган базис типлари: слейтер орбитали ва гаусс типи. АОЧК МО ЎКМ усули.



## **8- мавзу. Молекулаларнинг фазовий ва электрон тузилишини хисоблаш услублари.**

Квант механик ва классик механик услублар. Молекуляр динамика. Монте Карло услуби. Ноэмпирик ва ярим эмпирик усуллар. Конфигурацион ўзаро таъсир. Зичлик функционали услуби. Нул дифференциал қоплаш усуллари. Бу усулларга асосланган компьютер дастурлари.

### **IV. Семинар машғулотларини ўтказиш бўйича кўрсатма ва тавсиялар**

Семинар машғулотларида, маърузаларда ўтилган мавзулар янада мустахкамланади ва конкретлаштирилади ҳамда турли мавзуларга бағишланган мисол ва масалалар кўриб чиқилади. Семинар машғулотларини ташкил этиш бўйича кафедра профессор-ўқитувчилари томонидан кўрсатма ва тавсиялар ишлаб чиқилади. Унда талабалар асосий маъруза мавзулари бўйича олган билим ва кўникмаларини амалий масалалар ечиш орқали янада бойтадилар.

Семинар машғулотлари учун тавсия этиладиган мавзулар:

1. Атом тўғрисидаги тасаввурларнинг ривожланиши.
2. “Квант кимё” замонавий кимёнинг назарий асоси.
3. Шредингер тенгламаси.
4. Водород атоми масаласи.
5. Спин.
6. Атом ва молекула учун Шредингер тенгламаси.
7. Атом ва молекуланинг электрон тузилиши.
8. Молекулаларнинг фазовий ва электрон тузилишини хисоблаш услублари.
9. Зичлик функционали услуби. Нул дифференциал қоплаш усуллари.

***Изох.** Ишчи дастур тузишда ажратилган соатга мос равишда семинар машғулотлари танланади ва ўтказилади. Семинар мавзулари рўйхати ишчи ўқув дастурида янгиланиши, кенгайтирилиши мумкин.*

### **V. Мустақил таълим ва мустақил ишлар**

Мустақил иш ўқитувчининг талабаларга аввалдан бериб қўйиладиган фаннинг мавзулари асосида ташкил этилади. Мустақил иш учун қуйидаги топшириқларни бажариш тавсия этилади.

Мустақил таълим учун тавсия этиладиган мавзулар:

1. Атом ва молекула учун Шредингер тенгламаси
2. Рентген нурлари. Мутлақо қора жисм муаммоси.
3. Планк ғояси ва Эйнштейннинг квант назарияси.
4. Электромагнит нурланишнинг квантланганлиги.
5. Франк ва Герц тажрибалари, атом системалари энергетик поғоналарнинг дискретлиги.
6. Резерфорд тажрибалари. Штерн ва Герлах тажрибалари.
7. Юленбек ва Гаудсмит тажрибалари ва электрон спини.
8. Ёруғлик нурининг дуалистик табиати. Девисон-Жермер тажрибалари ва микрозаррачаларнинг дифракцияси.

## **VI. Асосий ва қўшимча адабиётлар ҳамда ахборот манбаалари**

### **Асосий адабиётлар:**

1. Фларри Ричерд. Квантовая химия «Мир» 2005.
2. Хедвиг Г. Прикладная квантовая химия «Мир» 2001.
3. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Назарий физика қисқа курси. 2-китоб. Квант механикаси. “Ўқитувчи” нашриёти, Тошкент, 1977. 387 бет.
4. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 бет.

### **Қўшимча адабиётлар:**

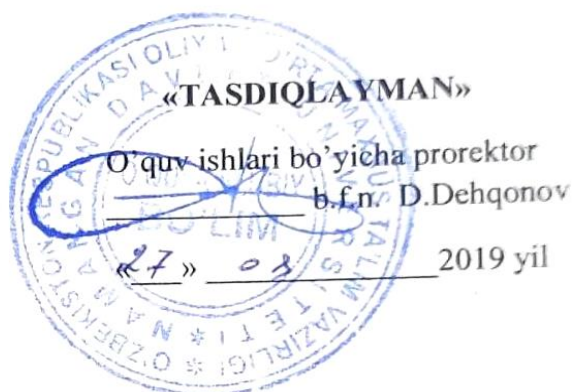
5. Мирзиёев Ш.М. Танқидий таҳлил, қатъий тартиб-интизом ва шахсий жавобгарлик - ҳар бир раҳбар фаолиятининг кундалик қондаси бўлиши керак. Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамасининг 2016 йил якунлари ва 2017 йил истиқболларига бағишланган мажлисидаги Ўзбекистон Республикаси Президентининг нутқи. // Халқ сўзи газетаси. 2017 йил 16 январь, №11.
6. Мирзиёев Ш.М. Буюк келажагимизни мард ва олийжаноб халқимиз билан бирга қурамыз. Тошкент, Ўзбекистон. 2017.
7. Мирзиёев Ш.М. Қонун устуворлиги ва инсон манфаатларини таъминлаш юрт тараққомети ва халқ фаровонлигининг гарови. ЎзР Конституцияси қабул қилинганлигининг 24 йиллигига бағишланган тантанали мажлисидаги маъруза. 2016 йил 7 декабрь
8. Мирзиёев Ш.М. Эркин ва фаровон, демократик Ўзбекистон давлатини биргаликда барпо этамыз. Ўзбекистон республикаси Президенти лавозимига киришиш тантанали маросимига бағишланган Олий Мажлис палаталарининг қўшма мажлисидаги нутқ. Ўзбекистон, -2017й.
9. ЎзР ПҚ-2909. Олий таълим тизимини янада ривожлантириш чоратадбирлари тўғрисида. Тошкент ш., 2017 й. 20 апрель.
10. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. 381 бет.
11. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по квантовой теории молекул. Ростов-на-Дону: Изд-во Ростов. ун-та, 1992.

### **Интернет сайтлари**

12. [www.chemport.ru](http://www.chemport.ru).
13. [www.subscribe.ru](http://www.subscribe.ru).

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

**NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI  
KIMYO KAFEDRASI**



**KVANT KIMYOSI**

**fanining**

**ISHCHI O'QUV DASTURI**

*2019/2020 o'quv yili kunduzgi ta'lim shakli, 1-kurslari uchun*

Bilim sohasi: 100000-Gumanitar soha  
Ta'lim sohasi: 140000-Tabiiy fanlar  
Bakalavriat ta'lim yo'nalishi: 5140100-Kimyo (kunduzgi)

NAMANGAN – 2019

Fanning ishchi o'quv dasturi 2018 yil O'R OO'MTV tomonidan  
№ BD-5140500 raqami bilan 2018 yil 14-iyundagi 531- sonli buyrug'i bilan  
tasdiqlangan fan dasturi asosida ishlab chiqilgan

Tuzuvchi:

dotsent, k.f.n. O.Abdullayev

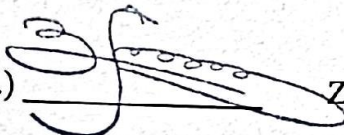
Ishchi o'quv dasturi Kimyo kafedrasining 2019 yil 26 avgustdagi 1-son  
yig'ilishidagi muhokamadan o'tgan va fakultet kengashida muhokama qilish uchun  
tavsiya etilgan.

Kafedra mudiri: \_\_\_\_\_ PhD D.Xolmatov

Ishchi dastur Nam DU ning Tabiiy fanlar fakulteti kengashida muhokama  
qilingan va foydalanishga tavsiya qilingan (2019 yil 26 avgustdagi 1- sonli  
bayonnoma)

Fakultet dekani:  dots. A.Nazarov

Kelishildi:

O'quv-uslubiy boshqarma boshlig'i(V.B.)  Z. Mo'minov

## **O'quv faninng dolzarbligi va oliy kasbiy ta'limdagi o'rni**

Ushbu o'quv dastur kimyo fanini o'rganishda zarur bo'lgan bilimlarni talabalarga yetkazuvchi nazariy va amaliy fanlarning eng muhimlaridan biri bo'lgan "Kvanti kimyo" kursi bo'yicha tuzilgan bo'lib, u universitetlariing kimyo ixtisosligi bo'yicha bakalavrlar tayyorlaydigan ta'lim yo'nalish uchun mo'ljallangan.

Bu fan atomlar, molekulalar va ionlardan tashkil topgan kimyoviy moddalarga xos bo'lgan tuzilish va xususiyatlarni o'rganish va bilish natijasida ularni osonlik bilan identifikatsiyalash, ega bo'lishi kerak bo'lgan xossalari oldindan aytib qo'yilgan materiallarni yaratishning ilmiy asoslarini o'rgatadi.

## **II. O'quv fanining maqsadi va vazifasi**

Fanni o'qitishdan maqsad - talabalarga «Kvant kimyosi» qonunlarining ma'nosini yoritib berish, shu qonunlarning qo'llanish sohalarini o'rgatish va aniq kimyoviy masalalarni hal qilishda ushbu qonunlarning amaliy imkoniyatlarini to'g'ri tushuntirish. Shu sababli, «Kvant kimyosi» asoslarini o'rganishda, bu fanning barcha bo'limlari o'rtasidagi mavjud bog'liqlikni yoritish yo'nalishida bilim, ko'nikma va malaka shakllantirishdir.

Fanning vazifasi - kimyoning nazariy qonunlaridan turli masalalarni hal qilishda uddaburonlik bilan foydalanish qobiliyatini rivojlantirish, kimyoviy reaksiyalar mahsuldorligini aniq hisoblash. Turli hisoblash ishlarida ma'lumotnomalardan unumli foydalana olish. "Kvant kimyosi" o'quv fanini o'zlashtirish jarayonida amalga oshiriladigan masalalar doirasida bakalavr

- kvant mexanika fani va uning usullari haqida umumiy tushuncha. Kvant mexanika va klassik fizika o'rtasidagi munosabat. Kvant mexanikaning asoslari. Kvant mexanikaning paydo bo'lishi va rivojlanishining tarixiy sabablari. XIX-asrning oxiridagi fizikaning umumiy tavsifi. Radioaktivlikning ochilishi. Elektronning ochilishini ***bilishi kerak***;

- kvant mexanikaning fizik asoslari. To'lqin funktsiyasi. To'lqin funktsiyasi tushunchasini fizik nuqtai nazardan talqini. To'lqin funktsiyasining normallanish shartlari. Zarrachalar sistemasi uchun to'lqin funktsiyasi. Molekulalarning reaksiyon qobiliyatini kvant-kimyoviy tushuntirish. Molekulyar diagrammalar yordamida molekulalarning reaksiyon qobiliyati tushuntirish ***ko'nikmalariga ega bo'lishi kerak***;

- bog'ning tartibi, elektron zichlik va ozod valentlik indeksi tushunchalari. Molekulyar orbitallar usuli yordamida molekulalarning miqdoriy ko'rsatkichlarini xisoblash ***malakalariga ega bo'lishi kerak***.

## 2.Asosiy qism.

### 2.1.Umumiy va o'quv ishlari turlari bo'yicha hajmi

II semestrda 68 soat, haftasiga 2 soatdan, 16 soat ma'ruza, 18 soat seminar mashg'uloti ajratilgan, 34 soat mustaqil ta'lim.

### 2.2. Semestr bo'yicha mashg'ulot turlariga ajratilgan soatlarning taqsimoti.

Semestrlar	Yuklama	Auditoriya mashg'ulotlari turi bo'yicha o'quv yuklamasi taqsimoti (soat)			Mustaqil ta'lim
		Jami	Ma'ruza	Seminar mashg'ulot	
II semestr	68	34	16	18	34
<b>Jami</b>	<b>68</b>	<b>34</b>	<b>16</b>	<b>18</b>	<b>34</b>

## 3. Asosiy nazariy qism (ma'ruza mashg'ulotlari)

### 1-mavzu. Atom to'g'risidagi tasavvurlarning rivojlanishi

Atom to'g'risidagi qadimiy tasavvurlar. Elektronni kashf etilishi. Radioaktivlik. Atom tuzilish nazariyalari. Absolyt qora jismning nurlanishi. Kvant nazariyasi. Fotoeffekt. Vodorod atomi spektri. Korpuskulyar-to'lqin dualizmi. Rezerdford tajribasi. Bor nazariyasi.

### 2-mavzu. "Kvant kimyo" zamonaviy kimyoning nazariy asosi

Kvant mexanikasi asoslari. Kvant mexanikaning asosiy postulatlar. Kvant holatlar va to'lqin funksiyasi; to'lqin funksiyasining asosiy xossalari. Kuzatilayotgan fizikaviy kattalik operatorlari; o'rtacha qiymat va kuzatilish dispersiyasi. Koordinata, impuls operatorlari, impuls momenta, kinetik va potensial energiyalar. Gamlilton (gamiltonian) operatori. Noaniqlik munosabati. Uning fizik ma'nosi va misollar.

### 3-mavzu. Shredinger tenglamasi

Holatlar evolyutsiyasi. Shredingerning statsionar tenglamasi. Diskret va uzluksiz spektrlar. Kvant mexanikasi qo'llanilgan eng oddiy misollar. Bir o'lchamli masalalar: spektr, to'lqin funksiyaning sifat xususiyatlari.

### 4-mavzu. Vodorod atomi masalasi

Vodorodsimon orbitallar, ularning radial va burchak qismlarining grafik ko'rinishi. Markaziy maydon simmetriyasi tufayli bir elektronli holatning aynishi. Kvant mehanika masalalarini yechishning taqribiy usullari. Stasionar holatlarning g'alayonlanish nazariyasi. Kvant mexanikasida variasion prinsip va variasion metod. Rits metodi

## 5-mavzu. Spin

Elementar zarrachalar spini va uning magnit momentiga aloqasi. Spin operatori va kommutasion munosabat. Spin orbitalli o'zaro ta'sir va uning ko'rinishlari. Aynan o'xshash zarralar sistemasi. Fermionlar, va bozonlar. Elektronlar sistemasi uchun to'lqin funksiyasining antisimmetriyasi. Elektronlar sistemasi to'lqin funksiyasini aniqlovchi ko'rinishida tasvirlash.

## 6-mavzu. Atom va molekula uchun Shredinger tenglamasi

Elektronlar va yadro O'zgaruvchilarni ajratilishi. Adiyatik yaqinlashish. Potensial energiya sirti. Hozirgi zamon kimyosi tuzilish nazariyasida potensial energiya sirtining roli. Muvozanatdagi konfigurasiya va molekular konformasiyasi. Orbitallarni belgilovchi tenglamalar. Orbitallar energiyasi va ularning elektronlar to'lqin energiyasi bilan aloqasi. Kuzmansk tenglamasi va fotoelektron spektr. Xartli-Fok metodi qullash chegarasi. Konfigurasion o'zaro ta'sir usuli haqida tushuncha. Valent sxemalar usuli.

## 7- mavzu. Atom va molekulaning electron tuzilishi

Elektron konfigurasiya va atomlar termi. Atomlarda momentlar qo'shilishi. Xund qoidasi. Atomlarning electron tuzilishi va D.I.Mendeleevning elementlar davriy sistemasi. Atom orbitallarining keng tarqalgan bazis tiplari, sleyter orbital va gauss tipi. AOCHK MO O'KM uslubi.

## 8-mavzu. Molekulalarning fazoviy va electron tuzilishini hisoblash uslublari

Kvant mexanik va klassik mexanik uslublar. Molekulyar dinamika. Monte-Karlo uslubi. Noemperik va yarim emperik usullar. Konfigurasion o'zaro ta'sir. Nul differensial qoplash usullari. Bu usullarga asoslangan kompyuner dasturlari.

## 4. "Kvant kimyosi" fani bo'yicha ma'ruza mashg'ulotining kalendar tematik rejasi

№	Ma'ruza mavzulari	Soati
1	Atom to'g'risidagi qadimiy tasavvurlar. Elektronni kashf etilishi. Radioaktivlik. Atom tuzilish nazariyalari. Absolyt qora jismning nurlanishi. Kvant nazariyasi. Fotoeffekt. Vodorod atomi spektri. Korpuskulyar-to'lqin dualizmi. Rezerdford tajribasi. Bor nazariyasi.	2
2	Kvant mexanikasi asoslari. Kvant mexanikaning asosiy postulatlar. Kvant holatlar va to'lqin funksiyasi; to'lqin funksiyasining asosiy xossalari. Kuzatilayotgan fizikaviy kattalik operatorlari; o'rtacha qiymat va kuzatilish dispersiyasi. Koordinata, impuls operatorlari, impuls momenta, kinetik va potensial energiyalar. Gamlilton (gamiltonian) operatori. Noaniqlik munosabati. Uning fizik ma'nosi va misollar.	2

3	Holatlar evolyutsiyasi. Shredingerning statsionar tenglamasi. Diskret va uzluksiz spektrlar. Kvant mexanikasi qo'llanilgan eng oddiy misollar. Bir o'lchamli masalalar: spektr, to'lqin funksiyaning sifat xususiyatlari.	2
4	Vodorodsimon orbitallar, ularning radial va burchak qismlarining grafik ko'rinishi. Markaziy maydon simmetriyasi tufayli bir elektronli holatning aynishi. Kvant me[anika masalalarini yechishning taqribiy usullari. Stasionar holatlarning g'alayonlanish nazariyasi. Kvant mexanikasida variasion prinsip va variasion metod. Rits metodi.	2
5	Elementar zarrachalar spini va uning magnit momentiga aloqasi. Spin operatori va kommutasion munosabat. Spin orbitalli o'zaro ta'sir va uning ko'rinishlari. Aynan o'xshash zarralar sistemasi. Fermionlar, va bozonlar. Elektronlar sistemasi uchun to'lqin funksiyasining antisimmetriyasi. Elektronlar sistemasi to'lqin funksiyasini aniqlovchi ko'rinishida tasvirlash.	2
6	Elektronlar va yadro O'zgaruvchilarni ajratilishi. Adiabatik yaqinlashish. Potensial energiya sirti. Hozirgi zamon kimyosi tuzilish nazariyasida potensial energiya sirtining roli. Muvozanatdagi konfigurasiya va molekular konformasiyasi. Orbitallarni belgilovchi tenglamalar. Orbitallar energiyasi va ularning elektronlar to'lqin energiyasi bilan aloqasi. Kupmans tenglamasi va fotoelektron spektr. Xartli-Fok metodi qullash chegarasi. Konfigurasion o'zaro ta'sir usuli haqida tushuncha. Valent sxemalar usuli.	2
7	Elektron konfigurasiya va atomlar termi. Atomlarda momentlar qo'shilishi. Xund qoidasi. Atomlarning electron tuzilishi va D.I.Mendelevning elementlar davriy sistemasi. Atom orbitallarining keng tarqalgan bazis tiplari, sleyter orbital va gauss tipi. AOCHK MO O'KM uslubi.	2
8	Kvant mexanik va klassik mexanik uslublar. Molekulyar dinamika. Monte-Karlo uslubi. Noemperik va yarim emperik usullar. Konfigurasion o'zaro ta'sir. Nul differensial qoplash usullari. Bu usullarga asoslangan kompyuner dasturlari..	2
<b>JAMI</b>		<b>16</b>

## 5. Seminar mashg'ulotlari

### 5.1.Seminar mashg'ulotlarini o'tkazish bo'yicha ko'rsatma va tavsiyalar

Seminar mashg'ulotlarida, ma'ruzalarda o'tilgan mavzular yanada mustahkamlanadi va konkretlashtiriladi hamda turli mavzularga bag'ishlangan misol va masalalar ko'rib chiqiladi.

Seminar mashg'ulotlarni tashkil etish bo'yicha kafedra professor-o'qituvchilari tomonidan ko'rsatma va tavsiyalar ishlab chiqiladi. Unda talabalar asosiy ma'ruza



mavzulari bo'yicha olgan bilim va ko'nikmalarini amaliy masalalar yechish orqali yanada boyitadilar.

### 6. "Kvant kimyosi" fani bo'yicha seminar mashg'ulotining kalendar tematik rejasi

<b>№</b>	<b>Seminar mavzulari</b>	<b>Soati</b>
1	Atom to'g'risidagi tasavvurlarning rivojlanishi	2
2	"Kvant kimyo" zamonaviy kimyoning nazariy asosi	2
3	Shredinger tenglamasi	2
4	Vodorod atomi masalasi	2
5	Spin	2
6	Atom va molekula uchun Shredinger tenglamasi	2
7	Atom va molekulaning electron tuzilishi	2
8	Molekulalarning fazoviy va electron tuzilishini hisoblash uslublari	2
9	Orbital simmetriya saqlanishi bilan boradigan reaksiyalar. Kvant biokimyosi.	2
<b>JAMI</b>		<b>18</b>

### 7. Mustaqil ta'lim va mustaqil ishlar

Mustaqil ish o'qituvchining talabalarga avvaldan berib qo'yiladigan fanning mavzulari asosida tashkil etiladi. Mustaqil ish uchun quyidagi topshiriqlarni bajarish tavsiya etiladi.

### 8. "Kvant kimyosi" fani bo'yicha mustaqil ish mavzularining kalendar tematik rejasi

<b>№</b>	<b>Mustaqil ta'lim mazmuni</b>	<b>Soati</b>
1	Rentgen nurlari. Mutlaqo qora jism muammosi.	4
2	Plank g'oyasi va Eynshteyning kvant nazariyasi.	4
3	Elektromagnit nurlanishning kvantlanganligi.	4
4	Frank va Gerts tajribalari, atom sistemalarida energetik pog'onalarning diskretligi.	6
5	Rezerford tajribalari. Shtern va Gerlax tajribalari.	4
6	Yulenbek va Gaudsmit tajribalari va elektron spini.	6
7	Yorug'lik nurining dualistik tabiati. Devison-Jermer tajribalari va mikrozarrahalarining difraktsiyasi.	6
<b>JAMI</b>		<b>34</b>

## “Kvant kimyo” fanidan talabalar bilimini baholash mezonlari

№	Nazorat turlari	Soni	Baho	
			maksimal	o'tish
<b>1. Joriy nazorat</b>				
I.	1.1. Seminarlarda ishtiroki	9	5	3
	1.2. Talabaning mustaqil ishi	7	5	3
<b>2. Oraliq nazorat</b>				
II.	2.1. Yozma ish (3 ta savol)	1	5	3
<b>3. Yakuniy nazorat</b>				
III.	3.1. Og'zaki (3 ta savol)	1	5	3

Talabalarning bilimi quyidagi mezonlar asosida baholanadi:

Talaba mustaqil xulosa va qaror qabul qiladi, ijodiy fikrlay oladi, mustaqil mushohada yuritadi, olgan bilimini amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda - 5 (a'lo) baho;

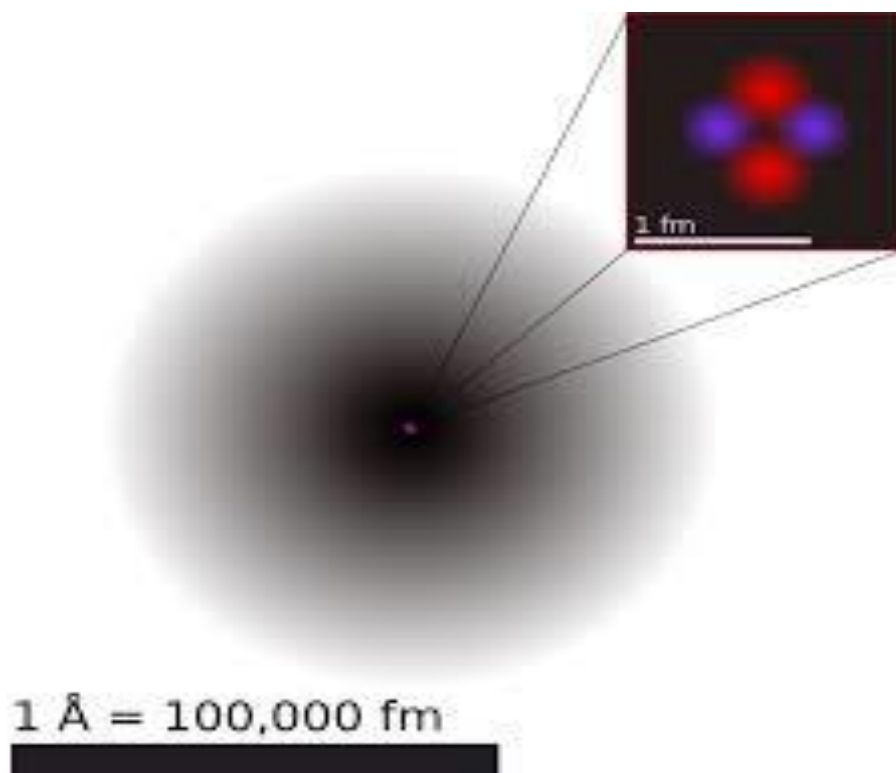
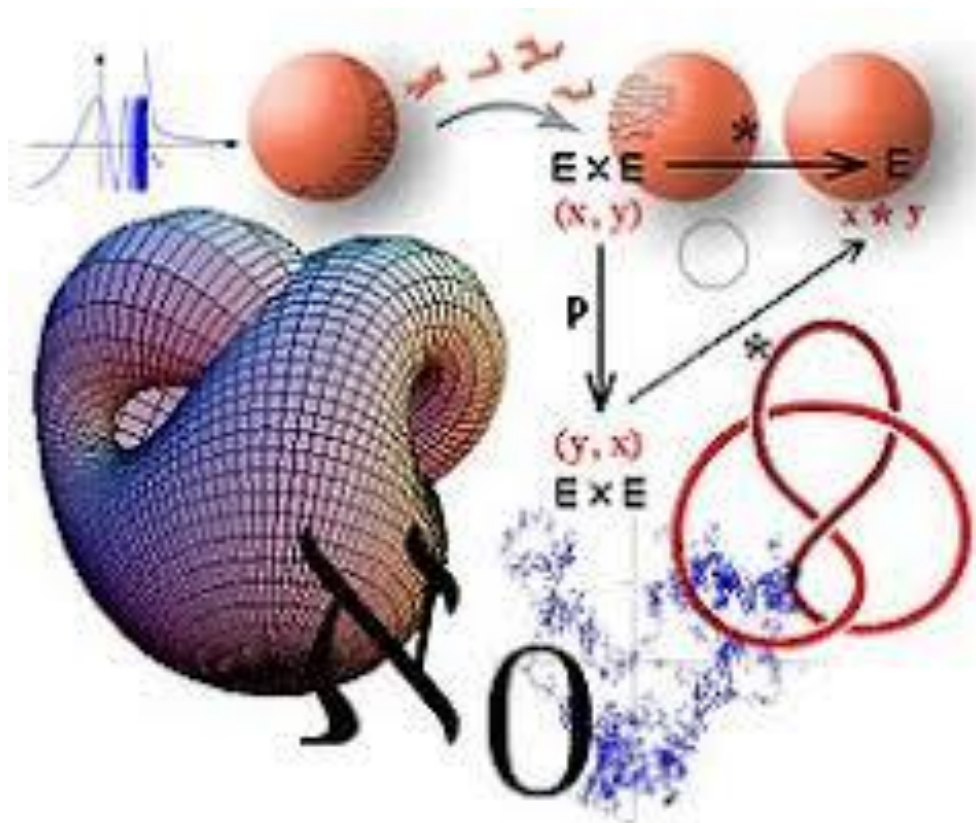
Talaba mustaqil mushohada yuritadi, olgan bilimini amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatni tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda- 4 (yaxshi) baho;

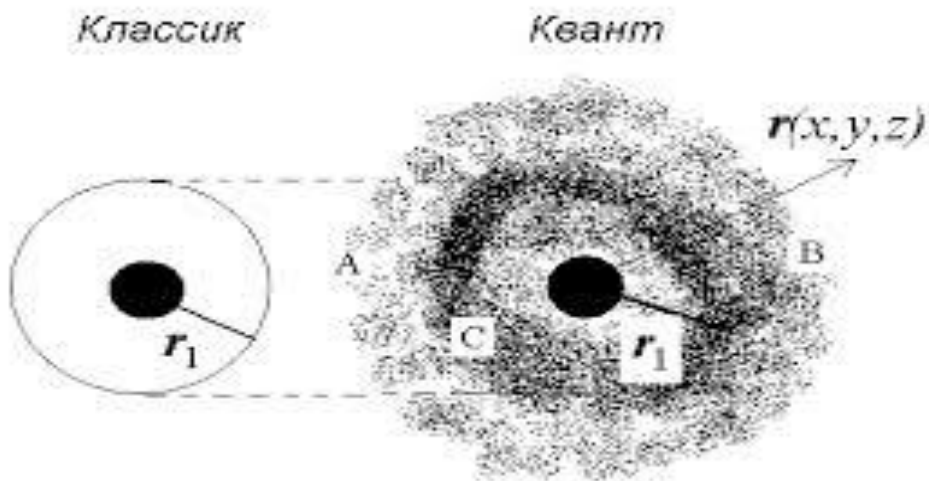
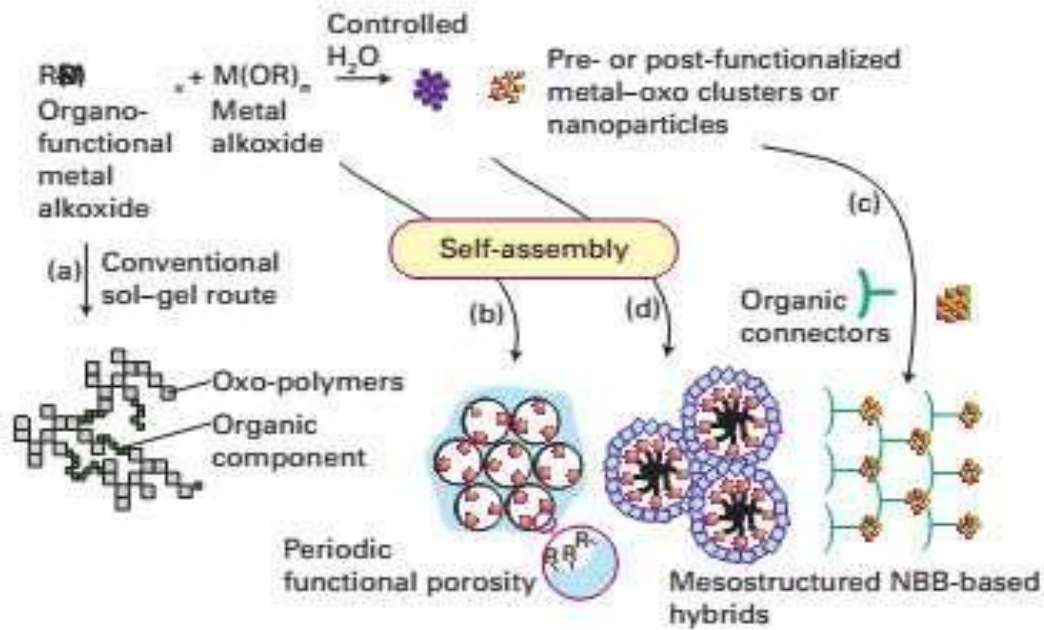
Talaba olgan bilimini amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatni tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda - 3 (qoniqarli) baho;

Talaba fan dasturini o'zlashtirmagan, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunmaydi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega emas deb topilganda - 2 (qoniqarsiz) baho bilan baholanadi.

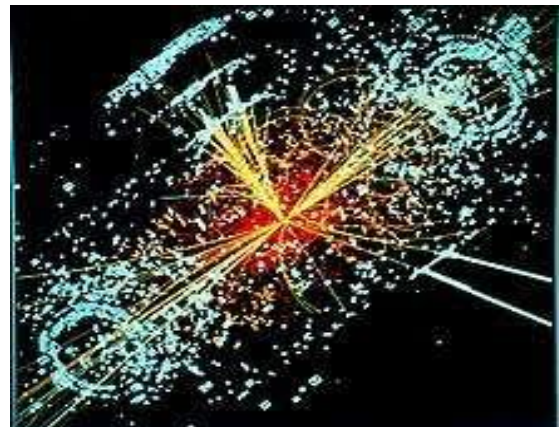
Talabalar bilimini baholash 5 baholik tizimda amalga oshiriladi. Bunda 5,4 va 3 baholar nazorat turlariga kirish yoki talabalarga stipendiya tayinlash va kursdan-kursga ko'chirish uchun asos bo'lsa, 0, 1 va 2 baholar nazorat turlariga kirish uchun yetarli bo'lmaydi va belgilangan muddatlarda talaba fandan qayta topshira olmasa akademik qarzdor hisoblanadi.

# ТАРҚАТМА МАТЕРИАЛЛАР



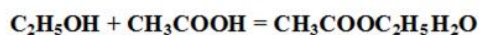
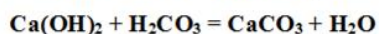
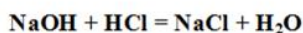


биринчи давр	1879-1881 йилларда физик ва химия соҳасида янги келажакдаги атом ва молекула теорияси шаклланди. 1879 йили Роберт Бунзен ва Густав Кирхгоф атом спектрини ўқиди. 1881 йили Роберт Кирхгоф атом спектрини ўқиди.
иккинчи давр	1926 йили 1927 йилида физик ва химия соҳасида янги келажакдаги атом ва молекула теорияси шаклланди. 1926 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди. 1927 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди.
учинчи давр	1933-1941 йилларда физик ва химия соҳасида янги келажакдаги атом ва молекула теорияси шаклланди. 1933 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди. 1941 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди.
тўртинчи давр	1941-1950 йилларда физик ва химия соҳасида янги келажакдаги атом ва молекула теорияси шаклланди. 1941 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди. 1950 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди.
бешинчи давр	1951 йилида физик ва химия соҳасида янги келажакдаги атом ва молекула теорияси шаклланди. 1951 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди. 1951 йили Роберт Шредингер атом спектрини ўқиди.

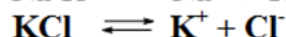
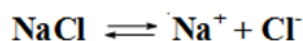


## Neytrallanish

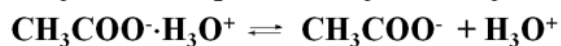
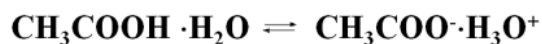
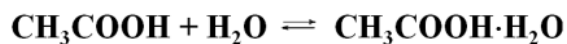
- Eritma tarkibida pH va OH lar soni teng bo'lsa muxit neytrallanish sodir bo'ladi va bu hodisa neytrallanish deyiladi.



## Ionoforlar



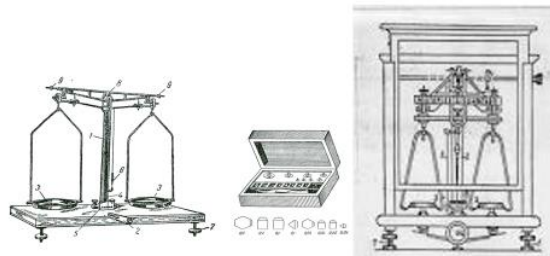
## Ionogenlar



- Миқдорий анализ қилинаётган моддаларнинг миқдорига қараб бир нечага (макро-, яриммикро-, микро-, ультрамикро-) бўлинади. Уларнинг назарий асослари аввалгидек, лекин идишлар, пипеткалар, тарозилари бошқача бўлади

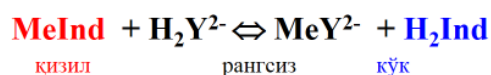
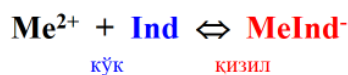
Метод	Намуна миқдори мг	Эритма ҳажми (газ) мл	Аниқланадиган модда миқдори мг
1. Макро-	> 100	>10 (>100)	>10 <sup>-1</sup>
2. Яриммикро-	100-10	10-1 (2-10)	10 <sup>-1</sup> -10 <sup>-2</sup>
3. Микро-	10-1	1-10 <sup>-1</sup>	10 <sup>-3</sup>

## Тарози



Техник кимйовий тарози ва унинг тошлари: 1-колонка; 2-арретир; 3-тарозининг паллалари; 4-стрелка; 5-шкала; 6-шовун; 7-тарозини горизонтал holatini to'g'rilash uchun vint; 8-yelka; 9-Тарози pallasini to'g'rilash uchun vint.

## МЕТАЛЛОХРОМ ИНДИКАТОРЛАРИ РАНГ ЎЗГАРИШИ МЕХАНИЗМИ



Аниқ модда	Ind	pH	Ind ранги	MeInd ранги
Ca <sup>2+</sup>	калькон карбон кислота	pH > 12	мовий	қизил-сапсар
Mg <sup>2+</sup>	эриохром қора Т	pH < 6,3 6,3-11,6 pH > 11,6	Қизил кўк сарик	қизил
Pb <sup>2+</sup> , Zn <sup>2+</sup> , Bi <sup>3+</sup>	ксиленол оранж	2 < pH < 6,4 pH > 6,4	сарик қизил-сапсар	қизил
Al <sup>3+</sup> , Zn <sup>2+</sup>	дитизон	pH < 6,3	Яшил-кўк	қизил-сапсар

## ТЕСТЛАР

Н	Савол	А	Б	С
1	Микрозаррачалар қандай хоссани намоен қилади?	Корпускуляр	тулкинсимон	Корпускуляр ва тулкинсимон
2	Тулкин функция қандай хусусиятларга эга булиши керак ?	Куп кийматли , узлукли, дуалистик табиатда	Тугалланган , бир кийматли , узлуксиз	Куп йуналишли , тугалланмаган , узлуксиз куп кийматли
3	Потенциал ящигида харакат қилаётган заррачаларнинг тезлигини аниқлашда қандай формуладан фойдаланилади ?	$V = \hbar m \lambda$	$V = \hbar k$	Хар иккаласи ҳам тугри
4	Қайси квант сон электронларнинг атомдаги энергиясини белгилайди?	Бош квант сон	Орбитал квант сон	Магнит ва бош квант сон
5	Атомда қандай ҳолатда жойлашган электронларнинг энергияси энг минимал булади?	Ядрога энг якин турган поғонадаги электронлар	Ядродан энг узокда жойлашган электронлар	Электронларнинг ядро билан таъсирлашиш энергияси барча электронлар учун бир хил
6	Электронларнинг энергияси қандай омилларга	Ядро билан электрон орасидаги масофага	Электронларнинг харакат микдори моментига	Хар иккаласи ҳам

	боглик?			
7	Катоддан ажралиб чикаетган электронларнинг тезлиги унга тушаётган еруглик частотаси билан кандай боғликлиги бор?	Частота ортса, тезлик камаяди	Частота билан тезликнинг алоқаси йук	Частота ортса тезлик ортади
8	Квант механикасида ишлатиладиган операторлар кандай хоссаларга эга булиши керак?	Чизикли, уз-узига кушма еки эрмит	Тулкинсимон ,уз-узига эрмит	Спиралсимон, уз-узига комплекс
9	Гармоник тебраниш нима?	Системанинг номувозанат холатида руй берадиган тебраниш	Системанинг уз мувозанат холати яқинида юз берадиган тебраниш	Системада узлуксиз булиб турадиган тебранишлар
10	Кристал панжарадаги атомнинг тебраниши кандай тебранишга киради?	Чизикли	Тулкинсимон	Гармоник
11	Кайси назарияга биноан тебранаётган заррача потенциал ура тубида нольга тенг энергия	Классик физика ва Бор назариясига	Квант механика назариясига	Квант механика ва Бор назариясига

	билан харакатсиз холатда мавжуд була олади?			
12	Спинлари кандай холатда булса электрон булутлари бир – бирини коплайди?	Антисимметр ик йуналишда булса	Параллел йуналишда булса	Симметрик йуналишда булса
13	Валент боғлар методининг молекуляр орбиталлар методидан камчилиги	Валент боғлар методи якка электронларн инг боғ хосил килишидаги ахамиятини тушунтириб беролмайди	Валент боғлар методи жуфт электронларнинг боғ хосил килишдаги урнини тушунтириб беролмайди	Валент боғлар методи боғ хосил килишда аник бир теоремаси йук
14	Молекуляр орбиталларнинг атом орбиталларидан фарки	Бир марказли	Куп марказли симметрияга эга.	Узгарувчан марказли симметрияга эга.
15	Молекуляр орбитал кандай хосил булади?	Атом орбиталларни нг чизикли комбинацияла ри сифатида.	Атом орбиталларнингб ир-бирига нисбатан карама- карши фазада еки бир хил фазада якинлашишлари дан хосил булади.	Хар иккала холатда хам хосил булади.
16	Бир хил фазада турган иккита электроннинг комбинацияси кандай молекуляр	Боғловчи молекуляр орбита	Бушаштирувчи молекуляр орбита	Икки жуфт узаро эквивалент молекуляр орбита



	орбитал хосил килади?,			
17	Эффэктиф богловчи электронлар сонини кандай хисоблаб топилади?	Богловчи электронлар билан бушаштирувчи и электронларнинг йигиндисидан .	Богловчи электронлар билан бушаштирувчи электронлар айирмасидан.	Богловчи ва бушаштирувчи электронларнинг купайтмасидан.
18	Берилган атомлар жуфти учун тартиби ортиши билан унинг унинг энергияси ва бог узунлиги кандай узгаради?	Е камайиб ,бог узунлиги ортади.	Е хам , бог узунлиги хам ортади.	Е ортиб , бог узунлиги камаяди.
19	Умумий энергияси о дан кичик бўлганда электронлар кандай номланади?	Еркин электрон	Боғламган электрон	Валент электрон.
20	Пси функция урани чегараларида кандай қийматларга эга бўлиши керак?	0 га тенг	0 дан катта	0 дан кичик.
21	Гейзенбергнинг ноаниқлик принциpidан кандай хулоса келиб чиққан?	Заррачани бир вақтда хам импульсини, хам координатсия сини аниқлаб	Фазани бирор нуқтасида заррани аниқ мавжуд бўла олиш эхтимоллиги	Заррани ўзининг де-Броел тўлқини эгаллаган фаза бўлагининг исталган нуқтасида бўлиш

		бўлмайди.	бор.	ихтимоллиги юқори.
22	Патенциал энергия чексиз катта қийматга тенг нуқтада қуйидаги ходисаларининг қайси бири руй беради?	Тўлқин функцияси 0 га айланади.	Тўлқин функцияси узлуксизлик қийматига эга бўлади.	Хар иккала ҳолат ҳам тўғри
23	Агар системага ташқаридан ҳеч қандай куч таъсир қилмаётган бўлса, унинг потенциал энергияси қандай ўзгаради?	0 га тенг	Ташқи таъсирсиз ҳам у доим 0 дан катта қийматга эга.	$U=0$ ёки $U<0$
24	Катод нурларини антикадон билан тўқнашиши натижасида қандай нур ҳосил бўлади?	Гамма нури.	Рентген нури.	Оқ нур.
25	Қуйидаги фикрларни қайси бири Планк томонидан айтилган?	Жисм ўзидан нурланиши порциялар қуринишида частотага пропорционал равишда чиқаради.	Атом бу қуюқ мусбат зарядланган материядан иборат.	Электр магнит майдонда катод нурлари ўз юналишини ўзгартиради ва у ўз таркибида манфий зарядланган зарра ҳосиласини намоён қилади.
26	Мувозанат нурланиши	Температурага	Босимга.	Ҳеч қандай нарсага боғлиқ

	энергиясининг зичлиги ва унинг спектрал таркиби қандай омилга боғлиқ?			эмас.
27	Қуйидаги фикрларни қайси бири тўғри?	Электрон ядро атрофида исталган орбиталлар бўйлаб айланади ва уларда электрон нур таратади.	Ядрога энг яқин орбита атомнинг нормал, яъни энг барқарор ҳолатига тўғри келади.	Ҳар бир қобикдаги электронларнинг максимал бўлган сонни орбитал квант сон квадратининг иккиланганига тенг.
28	Уран тузлари қуёш ёруғлиги бўлмаганда ҳам доимо нурланиш содир бўлишини ким кузатган?	Пер Кюри.	Жан Батист Перрен	Антуан Анри Беккерел.
29	Қуйидаги фикрларни қайси бири тўғри?	Ҳар қандай микрозаррача ни ҳаракатини тўлқинсимон процес деб қараш мумкин.	Корпускуляр-тулқинсимон табиат фақат фотонларгагина хос.	Ҳар иккаласи ҳам тўғри.
30	Электронларни М. О ни егаллашда қайси қоидаларга риоя қилади?	Энергиянинг энг кам бўлиш принципи.	Паули принципи ва Гунт қоидаси.	Ҳар иккаласи ҳам тўғри.
31	М. о қандай ҳосил бўлади?	Атом орбиталларни	Атом орбиталларнинг	Валент боғларнинг чизиқли

		нҗ чизиқли комбинатсияс и хисобига.	тўрсимон комбинатсияси хисобига.	комбинатсияси хисобига.
32	Квант мезаникасида электрон прбитал харакат миқдори моментининг қиймати қайси квант сони билан белгиланади?	Бош кват сони.	Орбитал квант сони.	Магнит квант сони.
33	Потенциал яшиқда $X$ ўқининг қиймати $0 \leq x \leq a$ оралиғда ўзгарганда унинг потенциал энергияси қандай ўзгаради?	$U=0$	$U=\infty$	$U<0$
34	Потенциал яшиқдан ташқарида заррачанинг потенциал энергияси қандай қийматга эга бўлади?	Чексиз катта қийматга эга бўлади.	0 дан кичик бўлади.	$0 < U < \infty$
35	Қуйидаги фикр қайси методни мохиятини очиб беради: ҳар бир электрон ядро ва қолган $n-1$ та	Хартри-Фок методи.	Бергман- Бертолле методи.	Хюккел методи.

	электрондан иборат бўлганатом қолдиғИ билан таъсирлашади ва атомнинг энергияси шу таъсирлар энергияси йиғиндисидан иборат.			
36	Қандай ҳолатда жойлашган электронларнинг энергияси энг максимал бўлади?	Ядродан энг узоқ турган поғонада жойлашгани.	Ядродан энг яқин турган поғонада жойлашгани.	Хамма поғоналардаги электронларнинг энергияси бир хил бўлади.
37	Електроманфийликнинг улчов бирлиги қилиб Малликен деган олим қайси атомнинг электроманфийлигини олган?	Литий	Фтор	Водород
38	Марказий симметрияга эга бўлган майдонда ҳаракатланаётган заррачанинг потенциал энергияси қандай функцияда бўлади?	Фақат масофанинг функцияси.	Фақат заррача улчами функцияси.	Масофа ва заррача ўлчами функцияси.
39	Марказий симметрияга эга бўлган	Вақтга.	Температурага.	Масофага.

	майдонда система холати қайси факторларга боғлиқ бўлмайди?			
40	Система қандай холатда потенциал энергияга эга бўлмайди?	Системага ташқаридан ҳеч қандай куч таъсир қилмаганда.	Система ҳар қандай холатда ҳам потенциал энергияга эга бўлади.	Системадаги ички таъсир ташқи таъсирдан кичик бўлганда.
14 34 3	Материянинг дуалистик табиати даслаб қайси заррача учун топилган	электрон	протон	Ёруғлик нури
42	Фотоеффе́кт нима	Жисм сиртидан ёруғлик нури таъсирида эътибори	Радиоактив заррачаларнинг сочилиши	Жисм сиртига эътибори
43	еркин электрон учун энергия йиғиндисидан қандай ишорага эга	манфий	Мусбат	нол
44	Резерфорд атомнинг қандай моделини таклиф этди.	Планетар	Булочка	Тўғри жавоб юқ
45	Фотоеффе́кт нима.	Ёруғлик таъсирида моддадан нейтронларнинг чиқиш ҳодисаси.	Ёруғлик таъсирида моддадан электронларнинг чиқиш ҳодисаси.	Ёруғлик таъсирида моддадан протонларнинг чиқиш ҳодисаси.



112,1,110,3,108,5,106,7,104,9,102,11,100,13,98,15,96,17,94,19,92,21,90,23,88,25,86,27,84,29,82,31,80,33,78,35,76,37,74,39,72,41,70,43,68,45,66,47,64,49,62,51,60,53,58,55

56,57,54,59,52,61,50,63,48,65,46,67,44,69,42,71,40,73,38,75,36,77,34,79,32,81,30,83,28,85,26,87,24,89,22,91,20,93,18,95,16,97,14,99,12,101,10,103,8,105,6,107,4,109,2,111