

ATOM VA MOLEKULALAR ORASIDAGI O'ZARO TA'SIRNI KVANT MEXANIKASI ASOSIDA O'RGANISH

Xamidova Diyora Mavlonjon qizi
Abduvahobova Madinabonu O'lmasjon qizi
Andijon davlat pedagogika instituti
Fizik va Astronomiya yo'nalishi talabalari

ANNOTATSIYA

Atom va Molekula qanday tuzilganligi va ularning xossalarini klassik mexanika orqali tushuntirishdagi kamchiliklar kvant mexanikasi yaratilishi bilan muvaffaqiyatli to'ldirildi. Ushbu maqolada atom va molekulalar orasidagi o'zaro ta'sirni kvant mexanikasi asosida ko'rib chiqamiz.

Kalit so'zlar. Vander vals kuchlari, shredinger tenglamasi, geyzenbergning noaniqlik prinsipi, to'liq funktsiya.

Kvant mexanikasini yaratilishiga asosiy sabab makro va mikro dunyo orasidagi o'zaro tushunmovchiliklardir. Makro dunyo - Nyuton qonunlari o'rinli bo'lgan va barcha jarayonlarni nyuton qonunlari asosida tushuntirila olinadigan olam, mikro dunyo - mikro zarralar proton, elektron kabi kichik o'lchamli zarralarni va ularga bog'liq ravishda sodir bo'luvchi turli jarayonlar tushuniladi. Yuqorida ta'kidlanganidek makro dunyoni o'rganishda nyuton qonunlari asos qilib olinadi, ammo nyuton qonunlari mikro dunyoni o'rganishda zaiflik qiladi. Misol uchun elektronlarni orbitadagi joylashuvini klassik mexanikada aniqlash imkonsiz, shu sababli ularni harakatini va ehtimoliy o'rnini aniqlash uchun kvant mexanikasiga yuzlanamiz. Atom va molekulalar orasidagi o'zaro ta'sirni o'rganish kvant mexanikasi orqali muvaffaqiyatli tushuntiriladi. Bunda, eng avval atom va molekulalarning tuzilishi, ular orasidagi bog'lanishlar, atomlarning elektron tuzilishi va energiyasi orqali tushuntiriladi. Molekulalar orasidagi kuchlar – ionli, kovalent va vodorod bog'lanishlari – atomlarning kvant holatlari va energetik pog'onalariga bog'liq ravishda izohlanadi. Molekulalarning strukturasi va o'ziga xos xususiyatlarini tushunish atomlar o'rtasidagi elektromagnit kuchlarning o'zaro ta'sirini o'rganishdan boshlanadi. Masalan, ion bog'lanish elektrostatik tortishish kuchlariga asoslangan bo'lib, kovalent bog'lanish esa elektronlarning kvant orbitalarida taqsimlanishi bilan bog'liq. Bu jarayonlarni tushuntirish uchun zamonaviy kvant mexanikasi, ayniqsa Shredinger tenglamasi va Born-oppengeymer postulati muhim ahamiyatga ega. Atomlar va molekulalar o'rtasidagi o'zaro ta'sirlarning nazariy asoslari, asosan, ularning zaryad taqsimotiga va o'zaro elektronlar harakati va kuchlariga asoslanadi. Bu o'zaro ta'sirlar bir nechta turga bo'linadi: elektrostatik (kuchli), van der Waals, vodorod

bog'lanishlari, va kovalent bog'lanishlar. Har bir tur o'zining xususiyatlariga ega bo'lib, ularning matematik ifodalanishi turli xil hisob-kitoblar va fizik nazariyalarni talab qiladi.

Kvant mexanikasi klassik mexanikadan farqli o'laroq, atom hodisalarini harakat tushunchalari asosida emas, balki ehtimolliklar asosida tasvirlaydi. Klassik mexanikadagi kabi zarra trayektoriyasi (kordinatalar va tezliklarning aniq qiymatlari) kvant mexanikasida mavjud emas. Buning o'rniga, Geyzenbergning noaniqlik prinsipi qo'llaniladi, unga ko'ra zarraning impulsi va koordinatasi bir vaqtning o'zida aniq qiymatlarga ega bo'la olmaydi. Matematik ifodada, bu

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar \quad (1)$$

ko'rinishida yoziladi, bu yerda Δp va Δx impuls va koordinataning noaniqliklarini bildiradi. Bu noaniqlik Plank doimiysi ($\hbar$) bilan bog'liq. Kvant mexanikasida harakatni tasvirlash klassik mexanikadan tubdan farq qilgani uchun, uning matematik apparati ham boshqacha. Tizimning holati to'liq funktsiyasi $\Psi(q)$ bilan ifodalanadi, bu yerda q - tizimning koordinatalari to'plami. To'liq funktsiyasining moduli kvadrati ma'lum bir holatning ehtimollik zichligini beradi, ya'ni zarraning ma'lum bir koordinatada topilish ehtimolini ifodalaydi. Bu yondashuv kvant mexanikasining statistik tabiatini aks ettiradi. Xulosa qilib aytganda, kvant mexanikasida zarrachaning holati ehtimolliklar asosida tasvirlanadi. $|\Psi(x, y, z, t)|^2$ funktsiyasi t vaqtda (x, y, z) koordinatalarida zarrachaning topilish ehtimollik zichligini beradi. Atom va molekullarning elektron bulutlari ham aslida shu ehtimollik zichligi funktsiyasining grafik ko'rinishidir. To'liq funktsiyasi nafaqat zarrachaning fazoviy holatini, balki uning fizik kattaliklarini (impuls, energiya va boshqalar) ham aniqlash imkonini beradi. To'liq funktsiyasi quyidagi shartlarni qanoatlantirishi kerak:

1. Bir ma'noli: Bitta qiymatga ega bo'lishi kerak.
2. Chegaralangan va uzluksiz: Fazoning barcha nuqtalarida aniqlangan va uzluksiz bo'lishi kerak.
3. Ikki marta differentsiallanuvchi: Ikkinchi tartibli hosilalarga ega bo'lishi kerak.
4. Normallashtirilgan: Ehtimolliklar yig'indisi 1 ga teng bo'lishi kerak:

$$\int |\Psi(q)|^2 dq = 1 \quad (2)$$

bu yerda q - tizim koordinatalari to'plami.

Fizik kattaliklarni hisoblash uchun operatorlar qo'llaniladi. operator $\hat{A}$ - bu bir funktsiyani (f) boshqa funktsiyaga (g) o'zgartiruvchi qoida:

$$\hat{A}f = g \quad (3)$$

demak, kvant mexanikasida fizik kattaliklar operatorlar orqali ifodalanadi va ularning qiymatlari to'liq funktsiyasiga ta'sir qilish orqali aniqlanadi.

Kvant mexanikasining asosiy postulatlarini quyidagicha ta'riflanadi:

To'liq funktsiyasi postulati: Har qanday tizimning holati uning zarralari koordinatalari va vaqtdan iborat $\Psi(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$ funktsiyasi bilan to'liq tasvirlanadi. Bu funktsiya tizimning holat funktsiyasi yoki to'liq funktsiyasi deb ataladi.

Fizik kattaliklar postulati: Har bir dinamik o'zgaruvchi (koordinata, impuls, energiya va h.k.) chiziqli o'z-o'ziga qo'shma operator bilan ifodalanadi. Klassik mexanikadagi kattaliklar orasidagi funksional bog'lanishlar kvant mexanikasida operatorlar orasidagi bog'lanishlarga almashtiriladi. Kvant mexanikasining asosiy tenglamasi postulati: Holat funktsiyasi Shredinger tenglamasiga bo'ysunadi. Bu tenglama postulat sifatida qabul qilinadi va isbotlanmaydi. Molekulyar fizika va strukturaviy kimyoning ko'pgina masalalarida, ayniqsa reaksiya mexanizmlari va molekullarning fizik xossalarini tushuntirishda, tizimning statsionar holati, ya'ni vaqtga bog'liq bo'lmagan holati muhim ahamiyatga ega.

Kvant mexanikasi XX asr ilm-fanining eng muhim yutuqlaridan biri sifatida, klassik mexanikaning mikro darajadagi cheklovlarini bartaraf etish uchun shakllandi. Atom va molekullar darajasidagi hodisalar klassik qonunlar asosida izohlab bo'lmazligi sababli ehtimolliklar nazariyasiga asoslangan kvant mexanikasi rivoj topdi. Geyzenbergning noaniqlik prinsipi, Born-oppengemer yaqinlashuvi va Shredinger tenglamasi mikro zarralarning xatti-harakatlarini tushunish, ularni modellash va bashorat qilishda nazariy asos bo'lib xizmat qiladi. Atom tuzilishini kvant mexanik yondashuv orqali o'rganish bizga elektronlar energetik holatlari, kvant sonlari, orbital konfiguratsiyalar va ularning kimyoviy faoliyatdagi rolini chuqur anglash imkonini beradi. Elektronlarning yadro atrofida to'liq funktsiyasi tarzida taqsimlanishi molekullarning bog'lanish energetikasini, geometrik tuzilishini va stabiligini tushunishda hal qiluvchi rol o'ynaydi.

Xulosa: Molekulalararo o'zaro ta'sir turlarini tahlil qilish orqali ularning kimyoviy va fizik xossalariga ta'sir etuvchi asosiy kuchlar o'rganildi. Kovalent va ion bog'lanishlar asosiy bog'lanish turlari bo'lsa, vodorod bog'lanishlari, van-der-Vaals kuchlari kabi zaifroq, ammo molekullar tuzilmasi va xossalarida muhim o'rin tutuvchi ta'sir turlari ham alohida yoritildi. Ushbu kuchlar suyuqliklar, oqsillar, DNK strukturalari va polimerlar kabi tizimlarda muhim ahamiyat kasb etadi. Born-oppengeyer yaqinlashuvi elektron va yadro masalalarini ajratadi, bu molekulyar Shredinger tenglamasini yechishni hisoblash jihatidan osonlashtiradi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Atkins, P., & de Paula, J. (2022). Physical Chemistry. Oxford University Press. Ushbu kitob molekullarning energetik xossalari, kimyoviy bog'lanishlar
1. 2. McQuarrie, D. A., & Simon, J. D. (2020). Quantum Chemistry. University Science Books. Kvant mexanikasi asosida molekullarning elektron tuzilishi va bog'lanishlarini tahlil qilishga oid muhim nazariy asoslar keltirilgan.

2. Levine, I. N. (2021). Molecular Spectroscopy. Wiley. Molekulalarning energiyasi va ularning fizik-kimyoviy o'zaro ta'sirlarini tushuntiruvchi zamonaviy qo'llanma.
3. Pauling, L. (1960). The Nature of the Chemical Bond. Cornell University Press. Molekulyar valentlik va kimyoviy bog'lanish nazariyasining klassik asoslarini yorituvchi fundamental asar.
4. Alberts, B., Johnson, a., Lewis, J., Raff, M., & Walter, P. (2022). Molecular Biology of the Cell. Garland Science. Molekulalarning biologik jarayonlardagi roli va fizik-kimyoviy asoslari haqida zamonaviy qarashlar.
5. Miller, W. H. (2019). The Semiclassical Way to Dynamics and Spectroscopy. oxford University Press. Molekulyar dinamikani fizik va kvant mexanik nuqtai nazardan o'rganish haqidagi keng qamrovli tadqiqot.
6. <https://uz.khanacademy.org/science/chemistry/electronic-structure-of-atoms/orbitals-and-electrons/a/the-quantum-mechanical-model-of-the-atom>
7. Khan Academy: Van der Waals Forces
8. <http://www.youtube.com/watch?v=8qfzpJvsp04>
9. London Dispersion Forces - Chemistry LibreTexts
10. [https://chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/General_Chemistry_Supplement_\(Eames\)/Phases_and_Intermolecular_Forces/London_Dispersion_Forces](https://chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/General_Chemistry_Supplement_(Eames)/Phases_and_Intermolecular_Forces/London_Dispersion_Forces)