

MOLEKULALARNING TUZILISHI VA SPEKTRLARI: KVANT MEXANIK ASOSLAR

Bobomurodova Gavhar

Boboyorova Mavjuda

Denov tadbirkorlik va pedagogika institute talabasi

Annotatsiya. Ushbu maqolada molekulalarning kvant mexanik asosda tashkil topishi, ularning bog‘lanish energetikasi, aylanish va tebranish harakatlari, shuningdek, spektral xususiyatlari tahlil qilingan.

Kalit so‘zlar: kvant mexanikasi, molekulyar tuzilma, kovalent bog‘lanish, ion bog‘lanish, spektral chiziqlar, aylanish va tebranish energiyalari, Franck–Condon printsiipi, Raman effekti, yadro spini, orto-para holatlar.

Molekulalarning tuzilmasi atomlarning o‘zaro elektromagnit kuchlar orqali barqaror bog‘lanishiga asoslanadi. Molekulalarda ikkita asosiy bog‘lanish turi mavjud: ion va kovalent bog‘lanish. Ion bog‘lanishda elektronlar bir atomdan boshqasiga to‘liq o‘tadi (masalan, NaCl), kovalent bog‘lanishda esa ular umumiy foydalaniladi (masalan, H₂). Kvant mexanikasi nuqtai nazaridan kovalent bog‘lanishda elektronlar to‘lqin funksiyalari orqali bog‘lanadi, bunda ularning zichligi ikkita yadro orasida maksimal bo‘ladi. Molekulaning umumiy energiyasi yadro orasidagi masofaga bog‘liq holda minimallashtiriladi:

$$E_{\text{tot}}(R) = E_{\text{elektron}}(R) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}$$

bu yerda E_{elektron} – elektronlarning bog‘lanish energiyasi, ϵ_0 – bo‘shliqning dielektrik o‘tkazuvchanligi, R – yadrolararo masofa, e – elementar zaryad.

Molekulalardagi energiya sathlari faqat elektron holatlar bilan chegaralanmaydi. Har bir molekula o‘ziga xos tebranish va aylanish harakatlariga ham ega. Aylanish harakatining kvantlangan energiyasi quyidagi tenglama bilan ifodalanadi:

$$E_r = \frac{\hbar^2}{2I} r(r + 1), \quad r = 0, 1, 2, \dots$$

bu yerda $I = \mu R^2$ – molekulaning inertsia momenti, μ – kamaytirilgan massa. Shuningdek, yadro tebranish harakati ham kvantlangan bo‘lib, u quyidagicha ifodalanadi:

$$E_v = \hbar\omega \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad v = 0, 1, 2, \dots$$

bu yerda $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$, k – kuch konstantasi. Ushbu energiyalar molekulaning turli holatlari orasidagi o'tishlar natijasida spektral chiziqlarni hosil qiladi. Har bir elektron holat bir nechta tebranish sathlarini o'z ichiga oladi, har bir tebranish sathi esa o'z navbatida aylanish sathlariga ega bo'ladi.

Franck–Condon printsipli spektral o'tishlarning ehtimolini tushuntiradi. Ushbu printsipga ko'ra, elektron o'tishlar paytida yadrolarning holati deyarli o'zgarmaydi, chunki elektron harakati yadro harakatiga nisbatan juda tez sodir bo'ladi. Bu shuni anglatadiki, eng kuchli spektral o'tishlar elektron zichliklarining ustma-ust tushgan joylarida ro'y beradi, ya'ni potentsial quduqlarning vertikal o'tishlarida. Bu, ayniqsa, ko'rinadigan va ultrabinafsha spektrlarda kuzatiladigan bant spektrlari bilan bog'liq.

Simmetrik molekulalarda (masalan, O_2 , N_2) elektr dipol momenti mavjud emasligi sababli ularning infraqizil spektrlari sezilmaydi. Biroq, bunday holatlarda Raman effekti yordamida molekulalarning tebranish va aylanish harakatlarini tahlil qilish mumkin. Raman effekti kiruvchi yorug'likning molekula bilan to'qnashib, chastotasi biroz o'zgargan holatda sochilishiga asoslangan. Bu hodisada kuzatiladigan chiziqlar:

$$\Delta\nu = \nu_{\text{kiruvchi}} \pm \nu_{\text{molekula}}$$

ko'rinishida bo'ladi. $\Delta r = \pm 2$ o'tishlar Raman spektrlarida mavjud bo'lib, ular orqali molekulalarning aylanish inersiya momenti ham aniqlanishi mumkin.

Yadro spini molekulaning simmetriya xossalariga sezilarli ta'sir ko'rsatadi. Masalan, H_2 molekulasida yadro spinlari simmetrik (orto) yoki antisimetik (para) kombinatsiyada bo'lishi mumkin. Agar yadro spinlari butun sonli bo'lsa (bozon), to'lqin funksiyasi simmetrik bo'lishi kerak; yarim butun son (fermion) bo'lsa – antisimetik. Bu holatlar natijasida ayrim aylanish holatlari taqiqlanadi yoki intensivligi kamayadi.

Quyidagi jadvalda ayrim ikki atomli molekulalarning tebranish va aylanish konstantalari keltirilgan:

Molekula	ω (sm^{-1})	B (sm^{-1})
----------	-------------------------------	--------------------------

H ₂	4401	60.8
CO	2170	1.931
HCl	2885	10.6

Bu ma'lumotlar eksperimental spektral o'lchovlar orqali aniqlanadi va molekulalarning tuzilmasi, kuch konstantalari va izotop farqlari haqida ma'lumot beradi. Molekulyar spektrlardagi nozik chiziqlarning tahlili nafaqat laboratoriyada, balki astrofizik kuzatuvlarda ham katta ahamiyatga ega. Masalan, yulduzlararo bulutlardagi molekulalarni aynan ularning infraqizil yoki radio spektrlari orqali aniqlash mumkin.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Herzberg G. Spectra of Diatomic Molecules. Van Nostrand, 1950.
2. Atkins P., Friedman R. Molecular Quantum Mechanics. Oxford University Press, 2011.
3. Levine I.N. Quantum Chemistry, 7th Edition. Pearson, 2013.
4. McQuarrie D.A. Quantum Chemistry. University Science Books, 2008.