

ATOMLARARO BOG‘LANISH ENERGIYASINI ANIQLASHNING NAZARIY ASOSLARI

Shokirov Saidnazar Shuxratovich, Toshkent davlat texnika universiteti

Musaev Ali Shuxratovich, Toshkent kimyo texnologiya instituti

Annotatsiya: Ushbu maqolada ikkita atomdan tashkil topgan sistemaning atomlararo bog‘lanish energiyasini aniqlash uchun asosiy nazariy, amaliy ma’lumotlar tahlili va uni yechimi hamda bog‘lanishdagi potensial energiya atomlararo masofaga bog‘liq xolda aniqlash amalga oshirilgan. Materiallarning mexanik xossasi ko‘p jihatdan atomlararo bog‘lanish energiyasiga bog‘liq bo‘lib, uni yechimini topish orqali materiallarni mustahkamligini nazariy mustahkamlikka yaqinlashtirish imkoniyati yaratiladi.

Kalit so‘zlar: metall, atomlararo bog‘lanish, potensial energiya, material, fizik xossalar, mexanik xossalar, itarish kuchi, tortishish kuchi.

Metall va qotishmadan tayyorlangan materiallarning nazariy mustahkamligi eng avvalo materialni tashkil etuvchi atomlarning bir-biri bilan bog‘lanish energiyasiga bog‘liq. Shuning uchun atomlararo bog‘lanish energiyasini aniqlash materiallarni fizik-mexanik xossalarini yetarli darajada oshirish imkonini berishi mumkin. Qattiq jismlarni tashkil etuvchi zarrachalarning bir-biri bilan bog‘lanish energiyasi – ularni bir-biridan o‘zaro ta’sirlashmaydigan masofagacha ajratishga sarflangan ish miqdoriga teng [1].

Aytaylik, modda molekulasi ikkita A va B atomlardan tashkil topgan bo‘lsin. Agar atomlararo masofa ularning radiuslari yig‘indisidan bir necha marta katta bo‘lsa, u holda atomlar o‘zlarini erkin holda tutib, bir-birlari bilan ta’sirlashmaydilar:

$$r \gg r_A + r_B \quad (1)$$

bunda, r_A , r_B – atomlar radiusi.

Agar ular bir-biriga yaqinlashtirilsa, ularning alohida holatidagi U potensial energiyasi kamayib, bir-biriga tortishish kuchi paydo bo‘ladi. Natijada sistemaning potensial energiyasi $U(r)$ kamaya borib, $r = r_0$ masofada minimum qiymatga erishadi. Matematik nuqtai nazardan qaraydigan bo‘lsak, energiya o‘zining minimum qiymatiga – masofa bo‘yicha differentsiali nolga teng bo‘lganda erishadi:

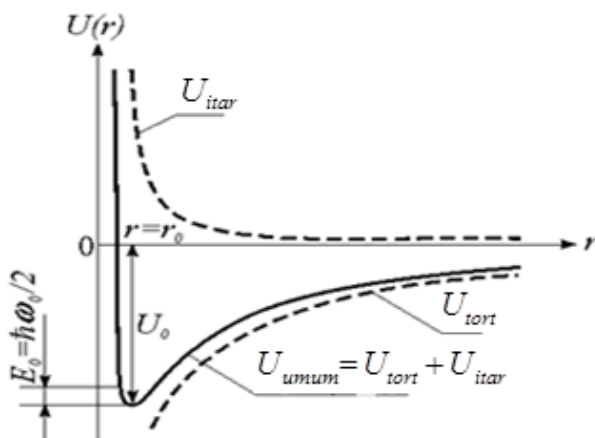
$$F = -\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r=r_0} = 0$$

bunda F – atomlararo ta’sirlashuv kuchi, N.

Minimum energiya molekula hosil bo‘lishidagi asosiy shart hisoblanadi, chunki u bog‘lanishdagi turg‘unlikni ta’minlaydi. Bunda sistemaning umumiy $U(r)$ potensial energiyasi ikkita: tortishish $U(r)_{tort}$ va itarish $U(r)_{itar}$ potensial energiyalarining yig‘indisiga teng bo‘ladi:

$$U(r)_{umum} = U(r)_{tort} + U(r)_{itar}$$

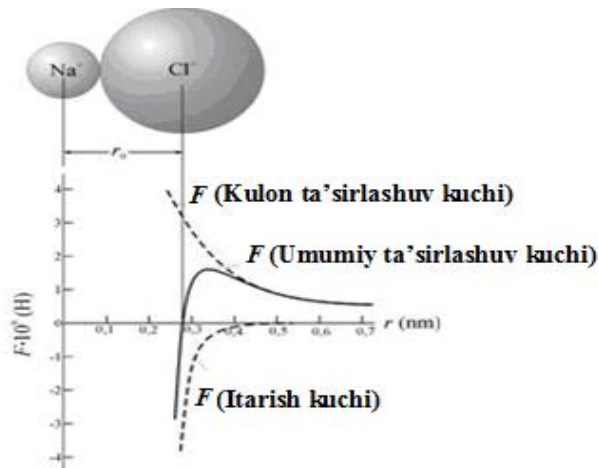
1-rasmda $U(r)_{tort}$ tortishish va $U(r)_{itar}$ itarish potensial energiyalari egri chiziqlarining hamda $U(r)_{umum}$ umumiy potensial energiya egri chizig‘ining atomlararo masofaga bog‘liq holda o‘zgarishi grafik ko‘rinishda tasvirlangan.



1-rasm. Ikkita atomning ta’sirlashuvidagi umumiy potensial energiyaning ular orasidagi masofaga bog‘liqligini ko‘rsatuvchi diagramma

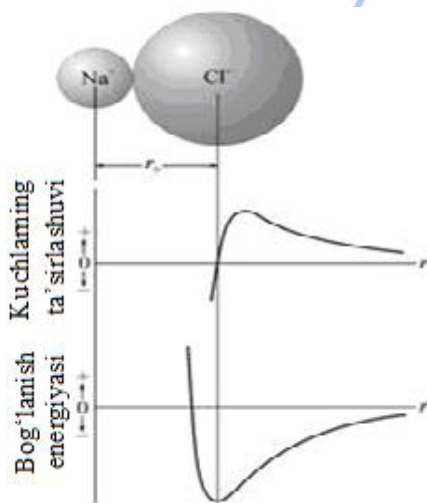
Atomlar biror $r = r_0$ masofaga yaqinlashganda, ya’ni tortishish va itarish kuchlarining qiymatlari $F_{tort} = F_{itar}$ tenglashganda AB atomlardan tashkil topgan molekula hosil bo‘ladi.

2 - rasmda natriy va xlor atomlarining ta'sirlashuvi natijasida hosil bo'lgan osh tuzi molekulasini tashkil etuvchi ionlarning o'zaro ta'sirlashuvidagi itarish va tortishish kuchlari hamda ularga mos keluvchi umumiy ta'sirlashuv kuchining egri chizig'i atomlararo masofaga bog'liq holda o'zgarishining grafigi keltirilgan.



2 – rasm. $r_0 = 0,28$ bog'lanish uzunligiga mos keluvchi Na^+ va Cl^- ionlarining ta'sirlashuv grafigi

Grafikdan ko'rinib turibdiki, ion markazlarining bir-biriga ma'lum masofaga yaqinlashuvidan hosil bo'lgan umumiy ta'sirlashuv kuchining salmoqli hissasini tortishish kuchi hosil qiladi. Ionlararo masofa 0,33 nm.ni tashkil etganda umumiy ta'sirlashuv kuchining qiymati maksimumga yetadi, undan keyin esa itarish kuchining moduli keskin ortishi bilan u pasayadi. Ionlararo masofa 0,28 nm.ni tashkil etganda umumiy ta'sirlashuv kuchi nolga teng bo'ladi.



3 – rasm. Na⁺ - Cl⁻ ionlarning bir-biri bilan bog‘lanishdagi umumiy ta’sirlashuv kuchi va umumiy ta’sirlashuv potensial energiyasini bir-biri bilan taqqoslash diagrammasi

3 – rasmda Na⁺ va Cl⁻ ionlarning umumiy ta’sirlashuv kuchiga mos keluvchi egri chiziq va potensial energiyasi grafigi keltirilgan. Kuchlarning ta’sirlashuv qiymati nolga aylangan sistemaning ta’sirlashuv potensial energiyasi minimum darajaga yetib oladi.

Atomlararo bog‘lanishda hosil bo‘lgan potensial energiyaning xarakterini aniqlash uchun biz 1- rasmda keltirilgan grafikdan foydalangan holda atomlarning umumiy ta’sirlashuv potensial $U(r)$ energiyasini $r = r_0$ masofa bo‘yicha Teylor qatoriga yoyamiz:

$$U(r) = U_0 - (r - r_0) \left(\frac{dU}{dr} \right)_{r=r_0} + \frac{1}{2} (r - r_0)^2 \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0} - \frac{1}{6} (r - r_0)^3 \left(\frac{d^3U}{dr^3} \right)_{r=r_0} + \dots \quad (2)$$

(1)-formulaga asosan (2)-qatordagi ikkinchi qo‘shiluvchi nolga teng. $r = r_0$ oraliq masofaning kichik qiymatlarida to‘rtinchi va undan yuqori darajali qo‘shiluvchilarni inobatga olmasak ham bo‘ladi, unda uchinchi qo‘shiluvchi potensial energiyadan masofa bo‘yicha olingan 2-tartibli hosila bo‘lib, undan ko‘rinadiki, atom o‘z muvozanat holatidan kichik oraliq masofaga siljisa uni joyiga qaytaruvchi tortishish potensial energiyasi oraliq masofaga proporsional ravishda ortadi:

$$U(r) - U_0 = \frac{1}{2} (r - r_0)^2 \left(\frac{d^2U}{dr^2} \right)_{r=r_0} \quad (3)$$

Demak, (3)-formuladan ko‘rinadiki, $r = r_0$ masofada potensial energiyaning o‘zgarishi parabolik funksiya iborat bo‘ladi. Haqiqatan ham, 1-rasmda $r_0 (r \approx r_0)$ masofa yaqinida $U(r)$ funksiya o‘zini parabola kabi tutgan.

Bundan tashqari atomlar bir-biri bilan bog‘lanib, turg‘un molekula hosil qilgach, o‘z joylarida issiqlik harakatiga o‘xshash tebranma harakatda bo‘ladilar [2]. (3)-formulaga muvofiq, atomlarning o‘z joylaridan kichik qiymatlarga siljishi natijasida ularni joylariga qaytarish kuchi ular orasidagi masofaga proporsional bo‘lishini ko‘rsatadi. Bu kvant mexanikasida garmonik tebranishga mos holat bo‘lib, uning xususiy tebranma ω_0 chastotasi orqali energiya darajasini aniqlash mumkin [3].

$$E_n = h\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

bunda $n = 0, 1, 2, 3, \dots$

U_0 – potensial energiyaning minimum qiymati molekuladagi atomlarning bog‘lanish energiyasiga teng (E_0 ($n = 0$)) tebranishlarini inobatga olgan holda, haroratning absolyut nol qiymatida molekulaning bog‘lanish energiyasini quyidagicha yozish mumkin: $U_0 - \frac{h\omega_0}{2} = U_0 - E_0$ (1-rasmga qarang).

Bog‘lanish energiyasini topish uchun $U(r)_{\text{tort}}$ tortishish va $U(r)_{\text{itar}}$ itarish potentsiallar bog‘liqlik turini aniqlash zarur bo‘ladi. Ko‘pchilik olimlarning fikriga ko‘ra, tortishish potentsiali elektrostatik tabiatga ega bo‘lib, unga darajali funksiya sifatida qarash mumkin:

$$U_{\text{tort}}(r) = -\frac{a}{r^m} \quad (4)$$

bunda a – potensial energiya doimiysi, m – daraja ko‘rsatkichi.

Itarish potentsiali atomlar yadrosini o‘rab turgan elektronlarning qaytarish ko‘rsatkichiga bog‘liq:

$$U_{\text{itar}}(r) = \frac{b}{r^n} \quad (5)$$

Olimlar Born va Lan tomonidan (4 va 5) formulalarni hosil qilishda atomlarning statik modeliga tayanilgan bo‘lib, bunda sakkizinchi elektron qobiqdagi elektronlar kubning burchaklarida joylashgan. Tortishish va itarish potentsial energiya turini aniqlab (4) va (5) formulalarni inobatga olgan holda ikkita atomdan tashkil topgan molekulaning potentsial energiyasini quyidagicha yozish mumkin:

$$U(r) = -\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n} \quad (6)$$

$U(r)$ funksiyaning minimumini ta'minlash uchun itarish potensialining daraja ko'rsatkichi tortishish potensialining daraja ko'rsatkichidan katta bo'lishini ta'minlash kerak, ya'ni $n > m$.

Biz energiyaning minimumga erishish $\left(\frac{dU}{dr}\right)_{r=r_0} = 0$ shartidan atomlarning oraliq r_0 masofasini topib olamiz:

$$U(r) = \left(-\frac{a}{r^m} + \frac{b}{r^n}\right)_{r=r_0}$$

Bir tomondan $(-ar^{-m})' + (br^{-n})' = -a(-m)r_0^{-m-1} + b(-n)r_0^{-n-1}$

$$\frac{am}{r_0^{m+1}} - \frac{bn}{r_0^{n+1}} = 0 \quad \frac{am}{r_0^{m+1}} = \frac{bn}{r_0^{n+1}} \rightarrow \frac{r_0^{n+1}}{r_0^{m+1}} = \frac{bn}{am}$$

Bundan

$$r_0^{n+1-m-1} = \frac{bn}{am} \rightarrow r_0^{n-m} = \frac{bn}{am}$$

$$r_0 = \left(\frac{nb}{ma}\right)^{\frac{1}{n-m}} \quad (7)$$

$U(r)$ ni topish uchun (7) ni (6) formulaga olib borib qo'yamiz:

$$\frac{r_0^{n+1}}{r_0^{m+1}} = \frac{bn}{am} \rightarrow \frac{r_0^n r_0}{r_0^m r_0} = \frac{bn}{am} \rightarrow r_0^n = \frac{bn}{am} r_0^m$$

$$U(r) = -\frac{a}{r_0^m} + \frac{b}{\frac{bn}{am} r_0^m} = -\frac{a}{r_0^m} + \frac{am}{nr_0^m} = -\frac{a}{r_0^m} \left(1 - \frac{m}{n}\right) \quad (8)$$

Shartga ko'ra, $n > m$ ni inobatga olsak (8) formuladan shu ma'lum bo'ladiki, atomlararo bog'lanish energiyasi asosan tortishish potensial energiyasidan tashkil topgan ekan. Shunday qilib, bog'lanish energiyasi bo'yicha quyidagi asosiy xulosalarga kelish mumkin:

1. Atomlarning tortishishi ulardagi tashqi volentli elektronlar tomonidan amalga oshiriladi;
2. Itarish kuchlari asosan atomning ichki pog'onasidagi elektronlar tomonidan kulon kuchlari bo'yicha ta'sir etadi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

1. Anthony R, West “Solid State Chemistry and its applications” Second Edition. Student Edition 2014 John Wiley and Sons, Ltd
2. Philip Hofmon “Solid State Physics” Second Edition. an Introduction 2015 Wiley-VCH
3. Физика и химия твердого тела Т.1: Учебник для Вузов Фистул V.I.- М.: Металлургия, 2009. -320 с.

