

Tojiboyev Akmaljon G'ulomjon o'g'li

Geologiya fanlari universiteti professori

E-mail: a_tojiboev@yahoo.com

UO'K 538.911, 539.261, 548.31

KVANT KRISTALLOGRAFIYASI: ASOSLAR VA ISTIQBOLLAR

Annotatsiya: *Kvant kristallografiyasi - bu kristall moddalardagi elektron zichlikning yuqori aniqlikdagi modellarini yaratish uchun kvant mexanikasi, kristallografiya va hisoblash kimyosini birlashtirgan yangi fanlararo soha. U mustaqil ravishda ko'rib chiqiladigan atomlarning klassik modellari doirasidan chiqib, kvant mexanikasi tamoyillarini to'g'ridan-to'g'ri tuzilishni aniqlash va ma'lumotlarni aniqlashtirish jarayonlariga kiritadi. Ushbu maqolada kvant kristallografiyasining asosiy bosqichlari, uning asosiy metodologiyalari va kimyo, fizikadagi ahamiyati tobora ortib borayotgani - ayniqsa kimyoviy bog'lanish, zaryad taqsimoti va materiallarda yuzaga keladigan hodisalarni tushunish uchun bayon etilgan.*

Kalit so'zlar: *kvant kristallografiyasi, kvant mexanikasi, elektron zichlik, kimyoviy bog'lanish.*

Тожибоев Акмалжон Гуломжон угли

Университет геологических наук, профессор

E-mail: a_tojiboev@yahoo.com

УДК 538.911, 539.261, 548.31

КВАНТОВАЯ КРИСТАЛЛОГРАФИЯ: ОСНОВЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Аннотация: *Квантовая кристаллография — это новая междисциплинарная область, объединяющая квантовую механику, кристаллографию и вычислительную химию для создания высокоточных моделей электронной плотности в кристаллических веществах. Она выходит за рамки классических моделей независимо рассматриваемых атомов и непосредственно внедряет принципы квантовой механики в процессы определения структуры и уточнения данных. В данной статье*

изложены основные этапы квантовой кристаллографии, её ключевые методологии и растущее значение в химии и физике — особенно для понимания химической связи, распределения заряда и явлений, возникающих в материалах.

Ключевые слова: квантовая кристаллография, квантовая механика, электронная плотность, химическая связь.

Tojiboev Akmaljon G'ulomjon o'g'li

University of Geological Sciences, professor

E-mail: a_tojiboev@yahoo.com

UDC 538.911, 539.261, 548.31

QUANTUM CRYSTALLOGRAPHY: FUNDAMENTALS AND PROSPECTS

Annotation: *Quantum crystallography is an emerging interdisciplinary field combining quantum mechanics, crystallography, and computational chemistry to achieve highly accurate models of electron density in crystalline solids. It moves beyond classical independent atom models by incorporating quantum mechanical principles directly into structure determination and refinement. This article outlines the foundational steps of quantum crystallography, its major methodologies, and growing importance in chemistry and physics—particularly for understanding chemical bonding, charge distribution, and emergent phenomena in materials.*

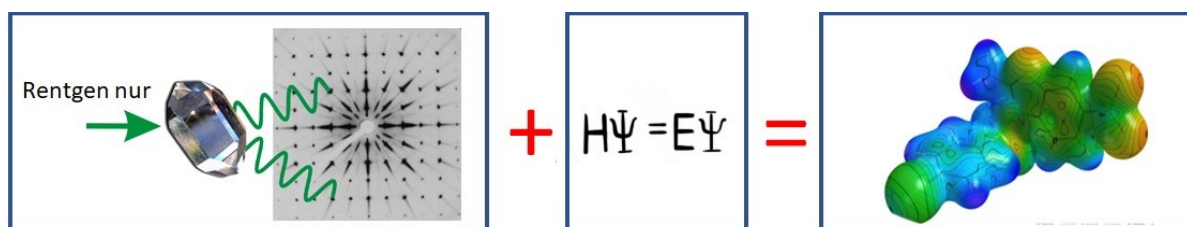
Keywords: *quantum crystallography, quantum mechanics, electron density, chemical bonding.*

Kirish

Rentgen kristallografiyasi an'anaviy klassik yaqinlashuvlarga asoslangan bo'lib, mustaqil atom modeli (Independent Atom Model - IAM) atom zichliklarini sferik va bir-biriga to'g'ridan-to'g'ri ta'sir qilmaydigan tarzda tasvirlaydi. IAM kristall tuzilishining ko'plab asosiy jihatlarini tushuntirish uchun yetarli bo'lsa-da, biroq elektronlarning qayta taqsimlanishi va delokalizatsiyasini, ya'ni kimyoviy

bog‘lanish hamda materiallarning fizik hossalari uchun muhim bo‘lgan hodisalarni to‘g‘ri aks ettira olmaydi. Kvant kristallografiyasi (Quantum Crystallography - QC) ushbu cheklovlarni yengib o‘tadi, ya’ni kvant mexanikasi asosida hisoblangan elektron zichliklarini to‘g‘ridan-to‘g‘ri kristallografik aniqlashtirish jarayonlariga kiritadi [1-4] (1-rasm).

QC ayniqsa fizika va kimyo sohasida muhim ahamiyatga ega, chunki elektronlarning holati ferroelektriklik, o‘ta o‘tkazuvchanlik kabi hodisalarni belgilaydi. Elektron taqsimotining yanada aniqroq tasviri kvant materiallarining fizik xossalarini chuqurroq tushunishga yordam beradi va eksperimental ma’lumotlarni to‘liq kvant izchilligi bilan aniqlashtirish imkonini yaratadi.



1-rasm. Rentgen difraksiya va kvant mexanikasilarining uyg‘unligi moddalarning tuzilishini chuqurroq tahlil qilishga imkon beradi.

Adabiyotlar tahlili

Kvant kristallografiyasining asosi

Rentgen difraksion tajribalardan olingan natijalar kristall moddalarning tuzilishi haqida ishonchli va batafsil ma’lumotlar beradi. Ushbu usulda tadqiqotlarimizda keng foydalanib kelmoqdamiz [5]. Lekin kristall tuzilishlarni aniqlash jarayonlardagi, yuqori aniqlik talab qiluvchi, nozik jihatlarini tadqiq qilishda cheklovlar mavjud. Shu jihatdan, zamonaviy kvant kristallografiyasi imkoniyatlaridan foydalanish ahamiyatga ega.

Kvant kristallografiyaning (QC) asosiy maqsadi – bu faqat rentgen diffraksiyon tajriba ma’lumotlariga mos keladigan emas, balki kvant mexanikasi nuqtayi nazaridan ham fizik jihatdan mazmunli bo‘lgan elektron zichliklarini

aniqlashdir. Klassik modellardan farqli o'laroq, ular atomik shakl faktorlariga va empirik moslashtirishga tayansa, QC esa to'liq funksiyasidan olingan elektron zichliklari yoki zichlik matritsalaridan foydalanib, rentgen nurlari sochilishini tushuntiradi [6].

Nazariy modellar ikkita asosiy yo'l bilan qo'llanilishi mumkin:

- Takomillashtirish (refinement) jarayonida tashqi cheklovlar yoki boshlang'ich modellar sifatida.
- To'liq kvantga mos yechimlar sifatida, bunda tajriba ma'lumotlari to'liq funksiyasi yoki elektron zichligidagi o'zgarishlarga yo'l ko'rsatadi.

Ushbu yondashuv orqali real kristallarda elektron lokalizatsiyasi, bog'lanish naqshlari va almashinish-korrelyatsiya effektlari kabi kvant mexanikasi kattaliklarini birinchi bor tajribaviy ravishda kuzatish imkoniyati paydo bo'ldi [7].

Tadqiqot metodologiyasi

Ko'p qutbli va asferik atom modellari

Xansen–Koppens ko'p qutbli modeli Ideal Atom Modelini (IAM) kengaytirib, atom elektron zichliklarini sferik garmonikalar va radial funksiyalar yordamida ifodalaydi. Bu usul kovalent bog'lanishlar va erkin elektron juftliklarini modellashtirish imkonini berdi [8].

Rentgen ma'lumotlari asosida cheklangan to'liq funksiyasi moslashtirish

Jayatilaka tomonidan ishlab chiqilgan *cheklangan to'liq funksiyasi* [X-ray Constrained Wavefunction (XCW)) usuli eksperimental difraksiya ma'lumotlari yordamida kvant mexanik to'liq funksiyasini aniqlashtirish imkonini beradi. Bu yondashuvda maqsad funksiyasi minimallashtiriladi, u kvant mexanik energiyasi va kuzatilgan hamda hisoblangan strukturaviy omillar (structure factors) o'rtasidagi eng kichik kvadratlar farqini o'z ichiga oladi [6]:

$$F = E_{QM}[\psi] + \lambda \sum_h |F_{obs}(h) - F_{calc}(h, \psi)|^2$$

bu yerda $E_{QM}[\psi]$ – kvant mexanikaviy energiya, F_{obs} va F_{calc} – mos ravishda tajribaviy va hisoblangan strukturaviy faktorlar.

Bu yondashuv nazariya va eksperimentni bevosita va yagona shaklda birlashtirishga imkon beradi. Shuningdek, elektron taqsimotlarini o'rganish hamda elektron tuzilish usullarini tekshirishda qo'llaniladi.

Kvant kristallografik aniqlashtirish

So'nggi yillarda, kvant kristallografik aniqlashtirish (Quantum Crystallographic Refinement – QCR) usuli DFT yoki Hartree–Fock elektron zichliklarini aniqlashtirish jarayonida qo'llanilishi kengayib bormoqda. ORCA, CRYSTAL yoki Tonto kabi vositalardan foydalanib nazariy elektron zichliklar hisoblanadi va ular eksperimental strukturaviy omillar bilan taqqoslanadi [9]. Bu esa modda tuzilishini o'rganishda geometrik aniqlikni va elektronlar taqsimotlar aniqligini oshiradi.

Natijalar va ularning tahlili

Aniq tuzilmani aniqlash: Kvant kristallografik aniqlashtirishlar neytron difraksiyasi darajasida aniqlikka ega bo'lishi mumkin, hatto past aniqlikdagi, xona haroratida olingan rentgen ma'lumotlari asosida ham.

Elektron tuzilmani anglash: Ushbu usul tadqiqotchilarga o'rganilayotgan birikmaning to'liq elektron tuzilmasiga kirish imkonini beradi, shu jumladan zaryad zichligi va bog'lanish haqidagi ma'lumotlarni taqdim etadi.

Vodorod atomini aniqlashtirish: Kvant kristallografiya vodorod atomlarining joylashuvini va ularning anizotrop siljish parametrlarini (ADP) yuqori aniqlikda aniqlay oladi. Bu ko'pincha neytron difraksiyasi natijalari bilan mos keladi, hattoki laboratoriya darajasidagi difraktometrlarda olingan ma'lumotlar bilan ham.

Aniqlashtirish modellari takomillashuvi: Kvant kristallografiya an'anaviy usullarga qaraganda tajriba ma'lumotlariga yaxshiroq mos tushadigan ilg'or modellarni, masalan, asferik atom modeli va yuqori aniqlikdagi aniqlashtirish kabi yondashuvlarni qo'llaydi.

Kvant kristallografiyaning qattiq moddalar fizikasidagi qo'llanilish sohalari

Elektron korrelyatsiyasi va delokalizatsiyasi: Kvant kristallografiya (QC) elektronlarning delokalizatsiyasi va o'zaro korrelyatsiyasini to'g'ridan-to'g'ri aniqlash imkonini beradi. Bu quyidagi materiallarda ayniqsa muhimdir:

- Yuqori haroratli o'ta o'tkazgichlar – bu yerda Cu–O bog'larining xususiyatlari va elektronlarning juftlashuvi aniq zaryad zichligini talab qiladi.
- Mott izolyatorlari – bu materiallarda elektronlarning lokalizatsiyasi to'la bo'lmagan zonalar mavjud bo'lishiga qaramay, izolyatorlik xatti-harakatiga olib keladi.

Ushbu effektlar elektron zichligining topologik tahlili orqali vizualizatsiya qilinadi va miqdoriy baholanadi (masalan, Molekuladagi atomlar kvant nazariyasi - QTAIM) [8].

Kristallardagi bog'lanish va zaryad ko'chishi: Kovalent, vodorod bog'lanishlar va ion xususiyatlarini yuqori aniqlikda tushunish quyidagi holatlar uchun mukammal modellar tuzishga imkon beradi:

- Ferroelektrik yoki magnitli materiallardagi fazaviy o'tishlar.
- Past o'lchamli o'tkazuvchilardagi zaryad tartiblanish fenomenlari.
- Pyezoelektrik va nolinar optik materiallardagi qutblanish effektlari.

Bu tushunchalar materiallarni birlamchi modellashtirishga asos bo'ladi, bu esa nafaqat fundamental ilmiy tushunchani, balki qurilma dizaynini ham rivojlantiradi.

Kvant topologiyasi va magnetizm: QC, shuningdek, magnit va topologik materiallarni o'rganishda qo'llaniladi. Ushbu materiallarda spin zichligi va zaryadning anizotropiyasidagi nozik jihatlar juda muhimdir. So'nggi tadqiqotlar aniqlashtirilgan spin zichliklarini magnit almashinish kuchlari va orbital hissa bilan bog'lashga harakat qilmoqda, bu esa QC'ni **kvant magnetizm** sohasida istiqbolli vositaga aylantirmoqda [10].

Kelajakdagi istiqbollar

Yuqori aniqlikdagi dinamik tadqiqotlar: Erkin elektron lazerlari (X-ray Free-electron lasers - XFEL) va ultratez sinxrotron manbalari hozirda femtosekund darajasida kristallografiyani amalga oshirishga imkon bermoqda. Bu esa vaqtga

bog‘liq kvant kristallografiyasi imkoniyatlarini ochmoqda. Ushbu yondashuv kimyoviy reaksiyalar yoki yorug‘lik ta’sirida yuz beradigan fazaviy o‘zgarishlar davomida elektronlarning qanday harakatlanishini xaritalash imkonini beradi.

Neytron va elektron diffraksiyalar sinergetikasi: Kvant kristallografiyasini neytron yoki elektron diffraksiyasi bilan birlashtirish vodorod atomlari, magnit zichliklari va engil atomlarning joylashuvini yanada aniq modellashtirish imkonini beradi. Bular odatda faqat rentgen ma’lumotlari orqali aniqlashda qiyinchilik tug‘diradi.

Dasturiy o‘rganish va avtomatlashtirish: Mashinaviy o‘rganish kvant kristallografik tozalashning ayrim jihatlarini, masalan, elektron zichligini bashorat qilish yoki xatolik tahlilini avtomatlashtirishni boshladi. Bu esa hisoblash xarajatlarini kamaytiradi va bu sohaga kirishni kengaytiradi [11].

Kvant kristallografiyasining muammolar

O‘z istiqboliga qaramasdan, kvant kristallografiyasi bir nechta dolzarb muammolarga duch kelmoqda:

- Hisoblash xarajatlari: Yirik tizimlar uchun yuqori darajadagi to‘lqin funksiyalarini hisoblash hanuz juda qimmatga tushadi.
- Ma’lumotlar talablari: Kvant aniqlashtirish odatda yuqori aniqlikdagi, past shovqinli rentgen ma’lumotlarini talab qiladi.
- Tushunarli bo‘lishi: To‘lqin funksiyalarini kristallografik modellar bilan integratsiya qilish ochiq-oydin bo‘lishi kerak, bu esa natijalarni takrorlash imkonini beradi.
- Dasturiy ta’minotning standartlashtirilmaganligi: Hozirda mavjud vositalar (masalan, XD2016, Tonto) barqaror, keng ko‘lamli va foydalanuvchiga qulay tarzda ishlab chiqilishi uchun yanada rivojlantirilishi kerak.

Xulosa

Kvant kristallografiyasi strukturaviy fanlari va materiallar fizikasi sohasida ahamiyatli yutuq hisoblanadi. U kvant nazariyasi va tajribaviy kristallografiyani birlashtirib, kristall tizimlaridagi kimyoviy bog‘lanish, zaryad taqsimoti va

elektron tuzilishini yangi nuqtai nazardan o'rganish imkonini beradi. Hisoblash quvvati ortib, tajribaviy usullar rivojlanishi bilan kvant kristallografiyasi fizik kimyo va qattiq moddalar fizikasi sohalarida ajralmas vositaga aylanishi kutilmoqda.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Coppens P. *X-ray Charge Densities and Chemical Bonding*. / Oxford University Press - 2020.
2. Gatti C. Chemical bonding in crystals: new directions. / *Zeitschrift für Kristallographie*. – 2005. - 220(5-6). – p. 399–457.
3. Krawczuk A., Genoni A. Current developments and trends in quantum crystallography./ *Acta Cryst. B80*. - 2024. – p. 249-274.
4. Genoni A., Bučinský L., Claiser N., Contreras-García J., Dittrich B., Dominiak P. M., Espinosa E., Gatti C., Giannozzi P., Gillet J. M., Jayatilaka D., Macchi P., Madsen A., Massa L., Matta C. F., Merz K. M., Nakashima P. N. H., Ott H., Ryde U., Grabowsky S. Quantum crystallography: current developments and future perspectives. / *Chemistry - A European Journal*. - 2018. - 24(43). – p. 10881-10905.
5. Tojiboev A. G., Elmuradov B. Zh., Mouhib H., Turgunov K. K., Abdurazakov A. Sh., Makhmadiyarova Ch. E., Tashkhodjaev B., Mirzaev S. Z. Structural insight from intermolecular interaction and energy framework analysis on 2-substituted 6,7,8,9-tetrahydro-11H-pyrido[2,1-b]quinazolin-11-ones. / *Acta Crystall. Section B*. – 2021. - 77(3). – p. 416-426.
6. Jayatilaka D., Grimwood D. J. Wavefunctions derived from experiment. / *Acta Crystallographica Section A*. - 2001. - 57(1). – p. 76–86.
7. Matta C. F., Bader R. F. W. An experimentalist's view of the quantum mechanical atom in a molecule. / *Journal of Physical Chemistry A*. – 2006. - 110(24). – p. 6365–6371.
8. Bader R. F. W. *Atoms in Molecules: A Quantum Theory*. / Oxford University Press. - 1994.

9. Spackman M. A. Experimental charge densities and intermolecular interactions. / *CrystEngComm*. - 2006. - 8(6). – p. 378–388.
10. Macchi P. Quantum crystallography and quantum chemistry: A fruitful cooperation. / *IUCrJ*. – 2020. - 7(2). – p. 208–218.
11. Pãk A., Brown M. L., Popelier P. L. A. A computationally efficient quasi-harmonic study of ice polymorphs using the FFLUX force field. / *Acta Cryst. A*81. – 2025 – p. 36-48.