

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA
MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI**

Guliston davlat universiteti

Tabiatshunoslik fakulteti

“Umumiy kimyo va kimyoviy texnologiya” kafedrası

Kurs ishi

MAVZU: KIMYOVIY BOG`LANISH. MOLEKULANING TUZILISHI.

Bajardi: Doniyorov S.
Qabul qildi : Toshboeva Sh.

Guliston -2012

Reja:

- 1. Elektromanfiylik. Elementning elektronga moyilligi**
- 2. Kimyoviy bog'lanish turlari.**
- 3. Elektron orbitallarining gibridlanishi. Valent bog'lanish va molekulyar orbitallar metodi**
- 4. Elektron orbitallarning gibridlanishi**

Kirish.

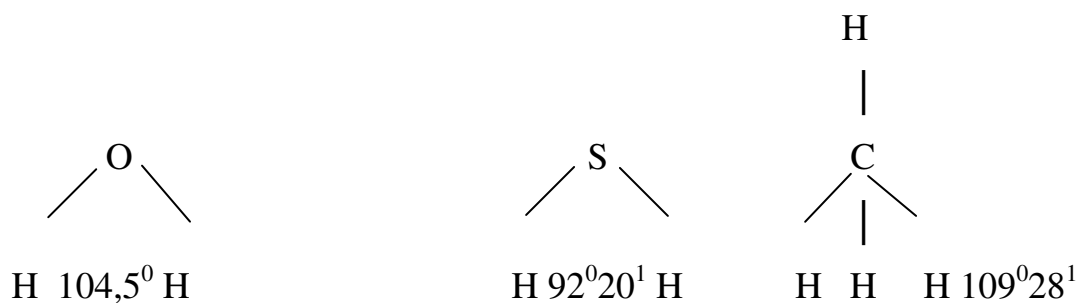
Kimyoviy bog'lanish deganda, biz atomlararo ta'sir etuvchi va ularning birgalikda ushlab turuvchi kuchlarni tushunmog'imiz kerak. Kimyoviy bog'lanish haqidagi ta'limot hozirgi zamon kimyosining asosiy masalasidir. Kimyoviy bog'lanishning sababi shundaki, atom yoki ionlar o'zaro birikkanda energiya tutumi (entalpiyasi) ularning ayrim-ayrim holda bo'lgan vaziyatdagiga nisbatan kichik qiymatga ega bo'ladi va sistema barqaror holatni egallaydi. Agar biror sistema bir holatdan ikkinchi holatga o'tganda uning energiya tutumi kamaysa, bu hodisa «sistema energetik manfaatga ega bo'ldi», degan ibora bilan tavsiflanadi. Demak, atomlardan molekulalar hosil bo'lishining sababi sistemada energetik manfaatning sodir bo'lishidir. Kimyoviy bog'lanish uning energiyasi, bog'lanish uzunligi hamda valentliklararo burchak nomli uch kattalik bilan xarakterlanadi.

Atomning tashqi energetik pog'onasida bittadan 8 tagacha elektron bo'lishi mumkin. Agar atomning tashqi pog'onasidagi elektronlar soni shu pog'ona sig'dira oladigan eng ko'p elektronlar soniga teng bo'lsa, u holda bunday pog'ona tugallangan pog'ona deyiladi. Tugallangan pog'onalar juda mustahkamligi bilan farq qiladi. Atomlar o'zaro ta'sirlashishi natijasida 3 xil zarrachalar (molekulalar, ionlar va erkin radikallar) hosil qila oladi.

Molekulalar bir-biridan o'z tarkibidagi atomlarning soni, molekula tarkibidagi atomlarning markazlariaro masofalari, bog'lanish energiyalari bilan farq

qiladi. Nodir gazlarning molekulari bir atomli, polimer moddalarning molekulari juda ko'p atomlardan iborat bo'ladi.

Molekulani tashkil qilgan atomlar valentliklari orasida burchak turlicha bo'ladi. Masalan, H_2O molekulasida kislorodning valentligi orasidagi burchak $104,5^0$ ni, H_2S da oltingugurtning valent yo'nalishi orasidagi burchak $92^020'$ (minut) ni, CH_4 da esa uglerod atomlari orasidagi burchak $109^0 28^1$ ni tashkil qiladi:



Kimyoviy bog'ni uzish uchun zarur bo'lgan energiya miqdori bog'lanish energiyasi deb ataladi. Har bir bog' uchun to'g'ri keladigan bog'lanish energiyasining qiymati 200-1000 kJ/molga yaqin bo'ladi. Masalan, CH_3F da C-F bog'ining bog'lanish energiyasi 487 kJ/molga teng. Atom yoki molekularlarning elektron berishi yoki elektron qabul qilib olishi natijasida hosil bo'ladigan zarrachalar *ionlar* deb ataladi. Ionlar musbat yoki manfiy zaryadli bo'ladi. Bu ionlar modda tarkibida bir-biri bilan bog'langan bo'ladi. To'yinmagan valentlikka ega bo'lgan zarrachalar *erkin radikallar* deb ataladi. Masalan, $C_6H_5^*$, OH^* , CH_3^* , NH_2^* lar erkin radikallar. Erkin radikallar uzoq vaqt mavjud bo'la olmaydi, lekin kimyoviy jarayon borishi uchun erkin radikallar muhim rol o'ynaydi. Yana shuni aytish kerakki, kimyoviy bog'lanish jarayonida o'zaro birikuvchi zarrachalar orasida albatta ikkita kuch ta'sir etadi. Ulardan biri zarrachalarning o'zaro tortilish kuchi (E_t) bo'lsa, ikkinchisi ularning o'zaro itarilish kuchi (E_i) dir.

Ionlanish jarayonini quyidagi tenglama shaklida ifodalash mumkin:

$$E^0 + I = E^+ + e^-$$

Bu yerda I -ionlanish energiyasi yoki ionlanish potentsiali bo`lib, atomning elektron berish qobiliyatini miqdoriy jihatdan tavsiflaydi.

Normal holatdagi gazsimon fazada bo`lgan atomdan bitta elektronni batamom chiqarib yuborish uchun zarur bo`lgan eng kichik energiya miqdori ionlanish energiyasi deyiladi. Atom va molekula ionlanishi uchun albatta energiya sarflanadi. Ionlanish energiyasi eV yoki kJ/mol bilan ifodalanadi. Ko`p elektronli atomning bir necha ionlanish potentsiali  $I_1, I_2, I_3$  va hokazo bo`lib, har doim dastlabki ionlanish potentsiali keyingilaridan kichik bo`ladi: $I_1 < I_2 < I_3 < \dots < I_n$.

Atomdan birinchi elektronni chiqarib yuborish uchun minimal miqdor energiya talab qilinadi; masalan, Li uchun $I_1 = 5,392 \text{ eV}$, $I_2 = 75,641 \text{ eV}$, $I_3 = 122,42 \text{ eV}$.

Elektromanfiylik

Elementning ionlanish potentsiali qanchalik kichik bo`lsa, u element shunchalik kuchli metall xossalariga ega bo`ladi. Shuning uchun D.I. Mendeleyev davriy jadvalida har qaysi davrning boshidan oxiriga o`tgan sari elementlarning ionlanish energiyasi ortib boradi. Masalan, Li ning ionlanish potentsiali $5,392 \text{ eV}$ ga, Be ning ionlanish potentsiali $9,32 \text{ eV}$ ga, B ning ionlanish potentsiali $17,42 \text{ eV}$ ga teng.

Davriy jadvalning har qaysi guruhida yuqoridan pastga tushgan sari ionlanish energiyasining qiymati kamayib boradi. Masalan, natriyning ionlanish potentsiali $5,14 \text{ eV}$, kaliyniki $4,34 \text{ eV}$.

Elementning elektronga moyilligi

Ma'lumki, davriy jadvalda har qaysi davr ichida chapdan o`ngga o`tgan sayin atomning o`ziga elektron biriktirib olish xossasi ortib boradi. Atom o`ziga elektron biriktirib olib o`sha elementning manfiy ioniga aylanadi. *Element atomi bir elektron biriktirib olganda ajralib chiqadigan energiya miqdori ayni elementning elektronga moyilligi deb ataladi.*

Elementning elektronga moyilligi qanchalik katta bo'lsa, uning metallmaslik xossalari shunchalik kuchli ifodalangan bo'ladi. Elementlarning metallmaslik xossalarini yaqqol namoyon qilishi uchun nisbiy elektrmanfiylik (NEM) tushunchasi kiritiladi.

Ayni elementning elektrmanfiyligi uning ionlanish energiyasi bilan elektronlarga moyilligi yig'indisiga yoki uning yarmiga teng:

$$EM = E + I \quad \text{yoki} \quad EM = (E + I) / 2 .$$

$E + I$ qiymati katta bo'lgan element atomi molekula tarkibidagi elektronni o'ziga qo'shib oladi va osonlik bilan manfiy ion holatiga o'tadi. Buning natijasida molekulada ikkita qutb paydo bo'ladi va qutbli bog'lanish yuzaga chiqadi. Masalan, $EM_F = 17,42 + 3,62 = 21,04 \text{ eV}$, $EM_{Li} = 5,39 + 0,54 = 5,93 \text{ eV}$ ga teng. Demak, fluor va litiyning EM lari orasidagi nisbat $21,04:5,93 = 4:1$ ga teng.

Ge, Ne, N, Be kabi elementlarda elektronga moyillik manfiy qiymatga ega. Buning sababi shundaki, bu elementlarning elektron tuzilishida yuqori simmetriya mavjud va ularning orbitallari elektronlar bilan batamom yoki yarim to'lgan bo'ladi. Kislorod, oltingugurt, azot, uglerod kabi elementlar atomlarining ko'p zaryadli manfiy ionlarga aylanish jarayoni endotermik effekt sifatida sodir bo'ladi.

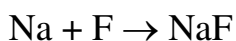
Bunday jarayonlar sistema uchun energetik manfaatga ega emas, shuning uchun ham bu elementlar bunday reaksiyalarga qiyin kirishadi va odatdagi sharoitda oz miqdorda mahsulot hosil bo'ladi.

L.Poling ta'rifiga muvofiq, elektrmanfiylik-molekuladagi atomlarning o'ziga elektronlarni tortib turish qobiliyatidir. Kimyoviy bog'lanishda asosan valent elektronlar ishtirok etadi.

s- va p-elementlarda valent elektron vazifasini eng sirtqi qavatdagi elektronlar, d-elementlarda esa sirtqi qavatning s- elektronlari va sirtqidan oldingi qavatning qisman d- elektronlari bajaradi.

Ion bog`lanish

Ion bog`lanish elektrostatik nazariya asosida tuchuntiriladi. Bu nazariyaga muvofiq, atomning elektron berishi yoki elektron biriktirib olishi natijasida hosil bo`ladigan qarama-qarshi zaryadli ionlar elektrostatik kuchlar vositasida o`zaro tortishib, tashqi qavatida 8 ta (oktet) yoki 2 ta (dublet) elektroni bo`lgan barqaror sistemani hosil qiladi. Ion bog`lanish molekulalarda juda kam uchraydi. Ion bog`lanishli moddalar kristall holatda uchraydi, shuningdek, suvli eritmalarida ion bog`lanishli molekulalar o`rniga ularni tashkil etgan ionlar bo`ladi. Ion bog`lanish energiyasini hisoblab chiqarish natijasini tajribada topilgan qiymat bilan taqqoslanadi. Masalan, tajribalarga ko`ra gaz holatdagi NaF ning bog`lanish energiyasi 6,2 eV ga teng. Demak,



reaksiyasi natijasida 6,2 eV energiya ajralib chiqadi:



Bog`lanish energiyasi deb molekuladagi ayni bog`lanishni batamom uzib tashlab, hosil bo`lgan tarkibiy qismlarni bir-biriga hech ta'sir etmaydigan holatga keltirish uchun zarur bo`lgan energiya miqdoriga aytiladi. Bog`lanish energiyasi eV yoki kJ/mollar bilan ifodalanadi. Bog`lanish energiyasining son qiymati o`zaro birikuvchi atomlarning elektron bulutlari shakliga, molekuladagi yadrolararo masofaga va boshqa faktorlarga bog`liq. Ion bog`lanishli birikmalar qiyin suyuqlanadigan qattiq moddalardir. Masalan, NaCl ning suyuqlanish harorati 893<sup>0</sup>, KCl niki 768<sup>0</sup>C. Ion bog`lanishli moddalarning suvli eritmaları, hatto suyuqlanmalari ham elektr tokini yaxshi o`tkazadi. Ion bog`lanish ionlararo o`zaro ta'sir natijasida hosil bo`ladi. Har qaysi ionni zaryadlangan shar deb qarash mumkin: shuning uchun ionning kuch maydoni fazoda hamma yo`nalishlar bo`yicha tekis tarqaladi, ya'ni ion o`ziga qarama-qarshi zaryadli boshqa ionni har

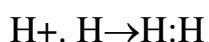
qanday yo`nalishda bir tekisda torta oladi. Demak, ion bog`lanish yo`naluvchanlik xossasini namoyon qilmaydi. Bundan tashqari, manfiy va musbat ion o`zaro birikkan bo`lsa ham manfiy ion boshqa musbat ionlarni, xuddi shuningdek, musbat ion ham yana boshqa manfiy ionlarni o`ziga tortaveradi, Demak, ion bog`lanish to`yinuvchanlik xususiyatiga ega emas.

Ion bog`lanish yo`naluvchanlik va to`yinuvchanlik xossalarini namoyon qilmasligi tufayli bitta musbat va bitta manfiy iondan iborat ion bog`lanishli molekulalar odatdagi sharoitda yakka-yakka mavjud bo`la olmaydi, ular birlashib juda ko`p ionlardan tarkib topgan gigant molekula- kristallni hosil qiladi.

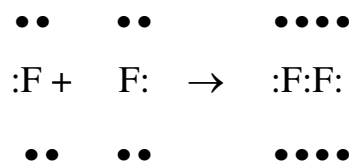
Kovalent bog`lanish

Ion bog`lanish nazariyasi asosida faqat ishqoriy metall galogenidlarining va shular tipidagi moddalarning tuzilishini tushuntirish mumkin. Lekin  $N_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $Cl_2$  kabi oddiy va ko`pchilik murakkab moddalarning tuzilishini izohlash uchun kovalent bog`lanish nazariyasi (Lyuis, 1916) dan foydalaniladi.

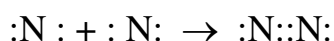
Kovalent bog`lanish nazariyasi asosini «sirtqi qavati sakkiz (yoki ikki) elektrondan iborat atom barqaror» degan tushuncha tashkil etadi. Bu bog`lanishda barqaror konfiguratsiya ikki atom orasida bir yoki bir nechta umumiy elektron juftlar hosil bo`lishidan kelib chiqadi. Elektron juftlar hosil bo`lishida ikkala atom ham ishtirok etadi. Shuning uchun har bir atom umumiy juft uchun o`zidan albatta elektron beradi. Masalan, har birida bittadan elektron bo`lgan 2 ta vodorod atomi o`zaro yaqinlashganda H_2 molekulasini hosil qiladi. Har qaysi atomning umumiy juft uchun beradigan elektroni nuqta bilan ifodalanadi:



Vodorod molekulasida bir juft elektron ikki yadro orasida joylashishi tufayli barqaror konfiguratsiya hosil bo`lishiga olib keladi. Ftor atomida oktet, ya'ni sakkiz elektronli qavat hosil bo`lishi uchun bitta elektron yetishmaydi:



Azot atomida oktet hosil bo'lishi uchun uchta elektron yetishmaydi:



Lengmyur birikuvchi atomlar orasida hosil bo'ladigan elektron juftlarning soni shu element valentligiga teng, deb qabul qildi. Masalan, ammiak molekulasida azot uch valentli, vodorod bir valentli, ya'ni NH_3 ning hosil bo'lishida azotning uchta elektroni ishtirok etadi, lekin bir jufti ishtirok etmaydi. Ana shunday *bog'lanishda ishtirok etmay qoladigan elektronlar jufti - yadrolar oralig'ida taqsimlanmagan juft elektronlar deyiladi*. Ular ko'pincha erkin elektron jufti ham deb ataladi.

Lyuis va Lengmyurning kovalent bog'lanish haqidagi elektron nazariyasi oddiy moddalardagi kimyoviy bog'lanishni izohlab berdi, lekin murakkab moddalar, ayniqsa kompleks birikmalardagi kimyoviy bog'lanish tabiatini tushuntira olmadi. Chunki Lyuis-Lengmyur nazariyasi statik nazariya bo'lib, u elektron va yadrolarning harakatdagi holatini hisobga olmagan edi.

Faqat kvant mexanika asosida kimyoviy bog'lanishning izchil nazariyalari yaratildi. Hozirda kvant mexanikasi yordamida kimyoviy bog'lanishni tushuntirish uchun 2 uslubdan foydalaniladi: valent bog'lanish (VB) metodi va molekulyar orbitalar (MO) metodi.

Kovalent bog'lanishning xossalari

Kovalent bog'lanish to'yinuvchanlik, yo'naluvchanlik, karralilik, qutblanuvchanlik kabi xossalarga ega. Vodorod molekulasiga yana bitta vodorod

atomining kelib qo`shilishi va  $H_3$  molekulasining, shuningdek,  $CH_4$  ga yana bitta  $H$  kelib qo`shilib, CH_5 ning hosil bo`lishi mumkin emas. Kvant-mexanik hisoblashlar ham bu xulosan tasdiqlaydi. Bu hodisa kovalent bog`lanishning to`yinuvchanligini tasdiqlaydi.

Atomlar orasida kovalent bog`lanish hosil bo`lganda bir atomdagi elektron bulut ikkinchi atomdagi elektron bulutni qoplaydi. Bir atomning s-elektroni ikkinchi atomning s-elektroni bilan bog` hosil qilganda hech qanday yo`naluvchan valentlik namoyon bo`lmaydi, masalan, bir vodorod atomi ikkinchi vodorod atomiga qaysi tomondan yaqinlashmasin, baribir ular orasida kimyoviy bog`lanish hosil bo`laveradi. p-elektronlar uchun hamma yo`nalishlar bir xil qiymatga ega emas: kimyoviy bog`lanish p-elektron bulutining ma'lum yo`nalishi tomonida hosil bo`ladi. Ikkita p-elektron «gantellari» o`rtasidagi burchak 90^0 bo`lishi kerak. Demak, nazariy jihatdan qaraganda  $H_2O$ ,  $H_2$ ,  $Cl_2O$ ,  $HN_3$ ,  $PCl_3$ , va boshqa birikmalarda valentliklar orasidagi burchak  $90^0$  li bo`lishi kerak edi. Haqiqatda esa bu burchaklar 90^0 dan ortiq. Buning sababi yuqoridagi molekulalarda gibridlanish hodisasi kuzatiladi. Masalan, suv molekulasidagi kislorod atomida sp^3 -gibridlanish hosil bo`ladi.

Kovalent bog`lanishning karralilik va qutblanuvchanlik xossalari haqida keyinroq so`z yuritiladi.

Qutbli (polyar) bog`lanish.

Elektrmanfiyligi bir xil bo`lmagan ikki atom o`rtasida kimyoviy bog` hosil bo`lsa, umumiy elektron juft bu ikki atomga nisbatan simmetrik joylasha olmaydi. Bu molekulalarda qarama-qarshi zaryadlarning «og`irlik markazi» bir nuqtaga tushmaydi. Shuning uchun ular qutbli molekulalar deyiladi. Ular ikki qutbli bo`lganligi uchun ularga dipol degan nom ham berilgan. Molekulaning qutbliligini tavsiflash uchun molekulaning ikki qarama-qarshi qutblari orasidagi masofa (l) dan foydalanib, $\mu = e.l$ formula bilan molekulaning dipol momenti hisoblab topiladi (e -elektron zaryadi).

Dipolning uzunligi 0,1 nm yoki 10⁻¹⁰ m bo'lganda, elektron zaryadi 1,6·10⁻¹⁹ Kl. ga teng bo'lgani uchun μ ning qiymati 10⁻²⁹ Kl.m bilan ifodalanadi. (Bunda Debay nomli birlikdan ham foydalaniladi: 1 Debay - D=0,333·10⁻²⁹ Kl.m.). Qutbli molekulalarga suv, ammiak, vodorod fluorid va boshqa moddalar misol bo'ladi. Suv molekulasida elektron juftlar kislorod atomiga, vodorod xlorid molekulasida xlor atomi tomonga siljigan bo'ladi. Demak, bu molekulalar nosimmetrik molekulalardir.

Xullas, ikki yadro orasida nosimmetrik joylashgan elektron juft tufayli hosil bo'lgan kovalent bog'lanish qutbli bog'lanish deyiladi. Agar elektron juft bir atomdan ikkinchi atomga batamom o'tib ketsa, qutbli bog'lanish ion bog'lanishga aylanadi.

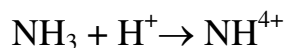
Ko'p atomli murakkab moddalarda molekulaning bir qismidagi atomlar o'zaro qutbsiz yoki qutbli bog'lanish bilan, ikkinchi qismidagi atomlar esa ion bog'lanish bilan birikkan bo'lishi mumkin.

Donor-akseptor bog'lanish.

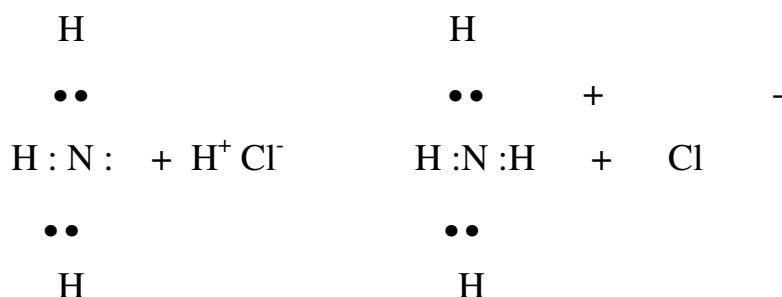
Kovalent bog'lanishni hosil qiluvchi elektronlarning biri dastlab bir atomda, ikkinchisi ikkinchi atomda bo'lishi shart emas, bu juftlar bog'lanish hosil bo'lishidan avval o'zaro birikuvchi atomlarning faqat birida bo'lib, ikkinchi atomda bo'sh orbitallar bo'lsa, kovalent bog'lanishning bir mexanizmi - koordinatsion yoki donor-akseptor bog'lanish hosil bo'ladi. Bog'lanish hosil bo'lishi uchun o'zining elektron juftini beradigan atom yoki ion *donor*, bu elektron juftini o'zining bo'sh orbitaliga qabul qiladigan atom yoki ion *akseptor* deb ataladi. Vodorod xlorid bilan ammiakning o'zaro birikishi natijasida ammoniy xlorid molekulasining hosil bo'lishi donor-akseptor bog'lanish uchun misol bo'la oladi:



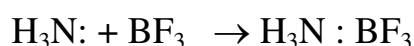
Biz bu reaksiyani ionli ko'rinishda yozaylik:



Ammiakning elektron formulasidan ma'lumki, azot atomida bog` hosil bo`lishida band qilinmagan bir juft elektron mavjud. Vodorod ionida esa 1s-orbital elektronsiz qolgan. NH_3 bilan H^+ o`zaro yaqinlashganda azotning ikki elektronli buluti azot va vodorod uchun umumiy bo`lib qoladi. Natijada azot atomi atrofida to`rtta bog`lovchi juft elektronli ammoniy ioni hosil bo`ladi:



Bu ko`rinishdagi N : H bog`lanishlar bir xil quvvatga ega va bir-biridan hech farq qilmaydi. Donor-akseptor bog`lanish 2 xil molekulalar orasida ham yuzaga chiqishi mumkin. Masalan, ammiak bilan bor ftorid orasida donor-akseptor bog`lanishni quyidagi tenglama bilan ifoda qilish mumkin:



Bu yerda NH_3 dagi azot elektron juft donori, BF_3 dagi B esa bu elektron juft uchun akseptordir.

Vodorod bog`lanish

Atom va molekulalar orasidagi yana bir bog`lanish- vodorod bog`lanish hamda molekulalararo tortishish kuchlari (Vander-Vaals kuchlari) ham ma'lum. Oriyentatsion va dispersion, polyarizatsion kuchlar ham shular jumlasiga kiradi. D.Mendeleyev davriy jadvalidagi V, VI va VII guruh metallmaslari vodorodli birikma (gidrid) larining qaynash haroratlarini o`rganish natijasida nazariya bilan

tajriba orasida qarama-qarshilik topildi. Chunonchi, HF, H₂O, NH₃ ning qaynash haroratlari kutilganidan yuqoriroq bo`lib chiqdi. H<sub>2</sub>O ning qaynash harorati H<sub>2</sub>S ning qaynash haroratidan pastroq bo`lishi kerak edi. HF ning qaynash harorati HCl nikidan, NH₃ niki esa PH₃ ning qaynash haroratidan past bo`lishi kutilgan edi. Lekin tajriba teskarisini ko`rsatdi. Bu qarama-qarshilikni vodorod bog`lanish bilan izohlash mumkin bo`ldi, chunki vodorod bog`lanish borligi tufayli HF, H<sub>2</sub>O, NH<sub>3</sub> kabi moddalarning molekulari o`zaro birikib aslida yiriklashgan (assotsiyalangan), ya'ni (HF)_n, (H₂O)_n, (NH₃)_n holatda bo`ladi. Shunga ko`ra HF, NH₃, H₂O qaynash haroratlari kutilganidan yuqori. *Vodorod bog`lanishning asosiy mohiyati shundan iboratki, biror modda molekulasida ftor, kislorod, azot kabi elektromanfiy elementlarning atomlari bilan birikkan bir valentli vodorod atomi yana boshqa ftor, kislorod va azot atomlari bilan kuchsiz bog`lanish xususiyatiga ega.* Buni quyidagi misollardan oson tushuntirish mumkin. Masalan, HF da vodorod atomi elektroni ftor atomiga yaqin joylashganligi tufayli shartli ravishda vodorod musbat zaryadga ega bo`lib qoladi, ya'ni H<sup>+</sup> ioni hosil bo`ldi, deyish mumkin.

Boshqa ftor yoki kislorod atomining juft elektronlari vodorod ionini o`ziga tortadi, natijada vodorod atomi ikki tomondan bog`lanib qoladi: $\cdots\text{H} - \text{F} \cdots\text{H} - \text{F}$ umuman (HF)_n, $n = 2,3,4,5,6$ bo`lishi mumkin. Shunday qilib, elektron manfiyligi katta bo`lgan element atomi bilan vodorod atomi orasida vujudga keladigan ikkinchi darajali kimyoviy bog`lanish vodorod bog`lanish deb yuritiladi. Lekin bu bog`lanish energiyasi unchalik katta emas. Kimyoviy bog`lanish energiyasi 8-42 kJ/molni tashkil qiladi. Vodorod bog`lanishda kimyoviy bog`lanishning mustahkamligi 21-42 kJ/molni tashkil qiladi. Molekulalararo tortishish kuchlarining mustahkamligi esa 0,1- 8,4 kJ/mol atrofida bo`ladi. Vodorod bog`lanish oqsillar, nuklein kislotalar va boshqa biologik muhim birikmalarda bo`ladi.

Elektron orbitallarining gibridlanishi

Valent bogʻlanish va molekulyar orbitallar metodi

Vodorod molekulasining hosil boʻlishini kvant-mexanika asosida tushuntirish uchun V. Geytler bilan F. London 1927-yilda taklif qilgan va L. Poling rivojlantirgan valent bogʻlanishlar (VB) nazariyasidan foydalaniladi. Bu nazariyaga muvofiq kimyoviy bogʻ hosil boʻlishi uchun quyidagi shartlar bajarilishi kerak:

1. Oʻzaro birikuvchi atomlarda elektronlarning spinlari qarama-qarshi yoʻnalishga ega boʻlishi kerak, chunki antiparallel spinli ikki elektron bir-biriga yaqinlashganda ularning elektron buluti bir-birini qoplaydi, natijada shu ikki elektron bir-biri bilan juftlashadi.

Qarama-qarshi spinga ega boʻlgan 2 elektron 2 yadro atrofida harakatlanganda yadrolararo fazoda elektron bulutlarning zichligi birmuncha ortadi. Ikki yadro orasida

katta manfiy zaryadli soha vujudga keladi va u musbat zaryadli yadrolarni oʻziga tortib jipslashtiradi, natijada kimyoviy bogʻlanish hosil boʻladi. Aksincha, elektronlarning spini oʻzaro parallel boʻlsa, oʻzaro itarilish kuchi ustun turadi. Shuning uchun ikki atom orasidagi sohada elektron bulutning zichligi hatto 0 ga qadar kamayadi va kimyoviy bogʻlanish hosil boʻlmaydi.

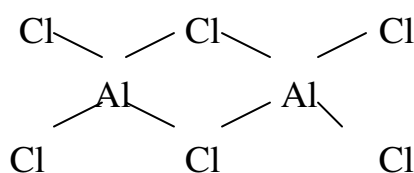
Masalan, vodorod molekulasida 2 ta yadro va 2 ta elektron bor. Yadrolar va elektronlar bir-biridan qochadi. Lekin ular orasida oʻzaro tortilish kuchi ham boʻlib, har qaysi elektronni 2 yadro tortadi va har bir yadroni 2 ta elektron tortadi.

Atomlardan molekula hosil boʻlishida energiya oʻzgarishi bilan bir vaqtda yadrolar oraligʻida elektron bulutlarning zichligi ham oʻzgaradi. Agar H_2 molekulasida hosil boʻlganda bir atomning elektron bulutini ikkinchi atomning buluti qoplamaganida edi, H_2 da yadrolararo masofa $2 \cdot 0,053 = 0,106$ nm ga teng boʻlardi. Elektron bulutlar oʻzaro qoplanishi sababli bu masofa qisqaradi va haqiqatda 0,074 nm ga teng boʻladi.

2. Hosil boʻlgan yangi elektron juft umumiy boʻladi. Bogʻ hosil qilishda qatnashgan atomlarning qolgan elektronlari bilan birgalikda elektronlar bilan

to'lgan qobiq hosil qilinganda barqaror elektron konfiguratsiya hosil bo'ladi. Agar bog'lanayotgan atomning bo'sh elektron qobiqchasi bo'lganda oktet konfiguratsiya o'rniga 10 ta yoki undan ko'p elektronli valent qobiq hosil bo'lishi mumkin. Masalan, PF_5 molekulasida (P atomi atrofida 10 ta elektron bor) yana HF bilan birikib PF_5 ga nisbatan barqaror bo'lgan $\text{H}[\text{PF}_6]$ (12 ta elektronli qobiq) kompleks birikma hosil qiladi. Bunday turdagi molekullar asidokomplekslarda ko'proq kuzatiladi.

Aksincha, valent qobiqchalardagi orbitallar soniga qaraganda juft elektronlar soni kam bo'lsa (masalan, alyuminiy atomida $3s$ -, $3p_x$ -, $3p_y$ - va $3p_z$ -orbitallarda faqat 3 tagina elektronlar bor), unda valent qobiqni barqaror holatga keltirish uchun bunday qobiqchalarda akseptorlik vazifasini bajara oladigan vaziyat mavjud bo'ladi. AlCl_3 bug' holatda dimer tuzilishga ega:



Ikkita Al atomlari orasidagi 2 ta ikkita xlor atomlarining juft elektronlaridan biri Al ning bo'sh qobiqchasiga «uzatiladi», dimerning barqarorligi monomernikidan kattaroq, ya'ni 1-shartga ko'ra xlorning taqsimlanmagan elektron jufti 2 yadro orasida bog'lovchi-ko'prik hosil qiluvchi elektron jufti xossasiga ega bo'ladi.

3.Valent qobiqida toq elektronlar soni bittadan ortiq bo'lsa, bu atomning hosil qiladigan bog'lar soni ham ko'p bo'ladi. Ikki atom orasida faqat sigma simmetriyali bog' hosil bo'ladi, atomning elektronlari ayni atomlar orasida π -bog' hosil qiladi yoki boshqa atomlar bilan s-bog' hosil qilishi mumkin. Umuman aytganda, valent bog'lanish uslubi molekuladagi atomlar o'z holatlarini saqlab qolgan holda faqat molekulaning ko'p elektronli to'lqin funksiyasini tuzishda qatnashishini ta'kidlaydi. Bu holat elektronlar juftlashgan holda mumkin qadar

ko`proq yadrolar orasida bo`lishi sistema energiyasining kamayishiga olib kelishini, bu esa molekula hosil bo`lishining asosiy sababi ekanligini ta'kidlaydi.

Valent bog`lanishlar metodi elektron orbitallarning gibridlanishi haqidagi g`oyalar bilan qo`shilib moddalarning tuzilishini, molekulalarda valentliklarning yo`nalishini va ko`pgina moddalarning molekulyar geometriyasini izohlab berdi. Lekin ba'zi moddalarning tuzilishini bu nazariya asosida izohlashda katta qiyinchiliklarga duch kelindi. Ba'zi moddalarda elektron juftlar yordamisiz bog`lanishlarning yuzaga chiqishi aniqlandi. Chunonchi XIX asrning oxirida Tomson vodorodni elektronlar bilan bombardimon qilish natijasida hosil qilgan molekulyar vodorod ioni H_2^+ tarkibida faqat birgina elektron bordir. Bu zarrachada yadrolararo masofa $1,06 \text{ \AA}$, uning bog`lanish energiyasi  $256 \text{ kJ/mol}$ . Lekin  $H_2^+$  ancha barqaror zarrachadir. Shu faktga asoslanib ikki yadro bir-biri bilan birgina elektron orqali birika oladi, demak, bir elektronli bog`lanish amalga oshadi, deb xulosa qilish mumkin. Shuni aytish kerakki, tarkibida toq elektronlar bo`lgan molekulalargina magnitga tortiladi. Qattiq holatdagi kislorod magnitga tortiladi. Vaholanki, kislorodning VB nazariyasiga asoslanib tuzilgan elektron formulasi kislorod molekulasida toq elektronlar borligini ko`rsatmaydi, ya'ni VB metodi kislorodning magnit xossalarini izohlay olmaydi.

Molekula hosil bo`lishida toq elektronlar rolini ko`rsatadigan nazariya 1932-yilda Gund va Malliken tomonidan yaratilib, u molekulyar orbitallar (MO) nazariyasi nomini oldi. Molekulyar orbitallarning elektronlar bilan to`lib borishi ham xuddi atom orbitallardagi kabi Pauli prinsipiga va Gund qoidasiga bo`ysunadi. Atom bir markazli (bir yadroli) sistema bo`lsa, molekula ko`p markazli sistemadir. Demak, MO nazariyasiga ko`ra har qaysi elektron molekuladagi barcha yadro va ko`p markazli orbitalar ta'sirida bo`lishi e'tiborga olinadi.

MO usulining eng ko`p qo`llaniladigan variantlaridan biri atom orbitallarining chiziqli kombinatsiya (AOChK) usulidir. Bu usulda bir elektronning molekulyar to`lqin funksiyasi o`sha molekulani tashkil etuvchi barcha atomlardagi elektronlarning to`lqin funksiyalaridan kelib chiqadigan chiziqli kombinatsiya,

ya'ni MO ni tasvirlovchi funksiyalar-molekulani tashkil etgan atomlarning to'liq funksiyalarini bir-biriga qo'shish va bir-biridan ayirish natijasida topiladi. Agar tarkibida bitta elektron va ikkita yadro bo'lgan molekulani nazarda tutilsa, ayni sistemada elektron harakatini 2 ta funksiya bilan ifodalash mumkin bo'ladi.

Ulardan biri:

$$\psi_1 = C_1 \psi_a + C_2 \psi_B$$

va ikkinchisi:

$$\psi_2 = C_3 \psi_a - C_4 \psi_B$$

bu yerda C_1, C_2, C_3, C_4 -koeffitsiyentlar, ya va yv-ayni elektronning 1-va 2-yadroga oid funksiyalari. ψ_1 - simmetrik funksiya, ψ_2 esa antisimmetrik funksiya deb ataladi.

Faraz qilaylik, barcha koeffitsiyentlarning har biri 1 ga teng bo'lsin. U holda MO lar uchun quyidagi ikki tenglamaga ega bo'lamiz:

$$\psi_{\text{bog}} = \psi_a + \psi_B$$

$$\psi_{\text{bo'sh}} = \psi_a - \psi_B$$

bu yerda ψ_a va ψ_B -o'zaro birikuvchi zarrachalarning AO funksiyalari.

Elektronning biror nuqtada mavjud bo'lish ehtimolligi to'liq funksiyaning kvadrati $|\psi_a|$ ga proporsional bo'lganligi sababli:

$$|\psi_{\text{bog}}|^2 = (\psi_a + \psi_B)^2 = \psi_a^2 + 2\psi_a\psi_B + \psi_B^2$$

$$|\psi_{\text{bo'sh}}|^2 = (\psi_a - \psi_B)^2 = \psi_a^2 - 2\psi_a\psi_B + \psi_B^2 \text{ ni yoza olamiz.}$$

Bu ifodalarda ikkinchi hadlar ($2\psi_a\psi_B$ va $-2\psi_a\psi_B$) AO ning bir-birini musbat va manfiy qoplash holatini aks ettiradi. Birinchi holda $2\psi_a\psi_B$ lar qo'shiladi, buning natijasida *bog'lovchi molekulay orbital* (BMO) lar hosil bo'ladi, ikkinchi holda $-2\psi_a\psi_B$ ayirib tashlanadi, natijada *bo'shashtiruvchi molekulay orbital* (BO'MO)

kelib chiqadi. Bu yerda yana uchinchi hol bo'lishi mumkin. Unda dastlabki AO bir-biriga simmetriyalari mos kelmaydigan bo'lsa, ular o'zaro qo'shilmaydi ham, bir-biridan olinmaydi ham. Bunday holda bog'lamaydigan orbital vujudga keladi. Dastlabki atom

orbitalining energiyasi o'zgarmay qoladi, bunday orbitallar *bog'lamovchi molekulyar orbitallar* deb yuritiladi.

Bog'lovchi orbitallarning energiyasi dastlabki AO energiyasidan kichik bo'ladi. Bo'shashtiruvchi orbitallar energiyalari aksincha, dastlabki atomlarning orbitallar energiyasidan yuqori bo'ladi. Molekulalar tarkibidagi bitta bo'shashtiruvchi orbital bitta bog'lovchi orbitalning ta'sirini yo'q qilib yuboradi.

Demak, antisimmetrik funksiya bilan ifodalanadigan orbitallar kimyoviy bog'lanishni vujudga keltirmaydi, balki molekulani beqaror qiladi. Shuning uchun, bunday orbitallar bo'shashtiruvchi orbitallar deyiladi. Bunday MO da 2 ta yadro oralig'ida elektronlarning zichligi 0 ga intiladi va elektronlar molekula turg'unligini kamaytiradi.

Agar elektron holati simmetrik funksiya bilan ifodalansa, elektron buluti yadrolar orasidagi joyda zich holatni egallaydi. Buning natijasida yadrolar bir-biriga tortiladi va bu holat ularning o'zaro birikishini ifodalaydi. BMO ning hosil bo'lishi yadrolar oralig'idagi elektron bulutning zichligini orttirib, bir xil zaryadli zarracha-yadrolarning bir-biridan itarilishini kuchsizlantirib, kimyoviy bog'lanishni kuchaytiradi.

Molekulaning barqaror yoki beqaror bo'lishi uning tarkibidagi bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlarning nisbiy miqdoriga bog'liq bo'ladi. Masalan, agar sistemada 2 ta elektron tutgan bitta BO`MO hosil bo'lsa, u xuddi shuncha elektron tutgan bitta BMO ning ta'sirini yo'qotadi. MO usulida molekula tarkibidagi elektronlarning o'zaro ta'siri e'tiborga olinmaydi. Atomda har qaysi elektron s-, p-, d-

va f-harflar bilan ishoralanadigan AO bilan xarakterlangani kabi molekulada har qaysi elektron o'ziga xos MO lar bilan tavsiflanadi. MO lar s-, p-, d- va f- harflar bilan belgilanadi. Atomdagi elektron energiyasi faqat n va l ga bog'liq bo'lib,

magnit kvant songa bog`liq emas. MO dagi elektronning energiyasi ayni orbitalning yo`nalishiga, ya'ni magnit kvant soniga ham bog`liq. Chunki molekulada yadrolarni bir-biri bilan bog`lab turgan yo`nalish boshqa barcha yo`nalishlardan farq qiladi.

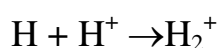
MO lar usulida bog`lanishni tavsiflash uchun *bog`lanish tartibi* degan tushuncha kiritilgan. Bog`lovchi orbitallardagi elektronlar sonidan bo`shashtiruvchi orbitallardagi elektronlar sonini ayirib tashlab, ikkiga bo`lsak bog`lanish tartibi (BT) kelib chiqadi.

Orbitallarning o`zaro qoplanuvchi qismlari bir xil ishorali to`lqin funksiyaga ega bo`lsa, musbat qoplanish sodir bo`ladi va AO bir-biriga qo`shiladi (BMO). Agar AO ning o`zaro qoplanuvchi qismlari qarama-qarshi ishorali to`lqin funksiyalarga ega bo`lsa, unda manfiy qoplanish sodir bo`lib, orbitallar to`lqin funksiyalari bir-biridan ayirib tashlanadi (BO`MO). Demak, n ta AO dan n ta MO hosil bo`lishi tabiiydir.

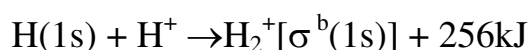
MO ni aniq misollarda ko`rib chiqamiz.

Vodorodning molekulyar ioni H_2^+ ning hosil bo`lishi.

Vodorod atomi vodorod ioni bilan birikkanda H_2^+ hosil bo`ladi:



Vodorodning 1s-orbitalidan hosil bo`lgan MO ni $\sigma^b(1s)$ shaklida ishoralasak:

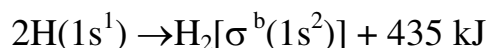


Demak, vodorod atomining 1s-orbitalidan bitta BMO hosil bo`ladi. Bu holda  $\lambda = 0$  bo`lganidan σ -holat vujudga keladi. Shunday qilib, H_2^+ ning asosiy holati σ^b holatidir. Molekulyar ionning elektron konfiguratsiyasi $H_2^+(1\sigma_s^b)$ va bog`lanish tartibi  $BT = 1/2 - 0 = 0,5$  bo`ladi.

MO nazariyasining postulatlaridan biri-BT = 0 bo`lsa, bunday zarracha mavjud bo`ladi, deb ta'kidlaydi.

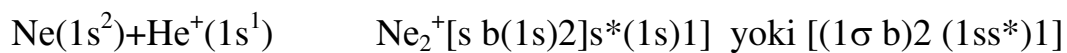
Vodorod molekulasining hosil bo'lishi. Ikkita vodorod atomi o'zaro birikib H_2 ni hosil qilganida ikkala atomning 1s-orbitallaridan 2 ta MO kelib chiqadi.

Bu orbitallarning biri bog'lovchi (σ_1) va ikkinchisi bo'shashtiruvchi (σ_1^*) orbitallar bo'lib, H_2 hosil bo'lganida ikkala atomning 1s-elektronlari BMO ga joylashadi:

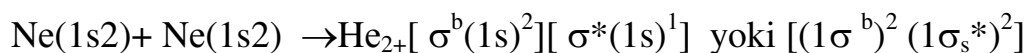


Vodorod molekulasidagi ikkita MO BMO $\sigma(1s)$ va BO'MO $\sigma^*(1s)$ faqat bitta kimyoviy bog'lanishga mos keladi, shuning uchun $r_0 = 0,074 \text{ nm}$ va $BT=1$. Formulasi $H_2:(1\sigma s^b)^2$ bo'ladi.

Geliyning molekulyar ioni Ne^{2+} ning hosil bo'lishi. Bu ion hosil bo'lganida uchta 1s-elektron ishtirok etadi; ulardan ikkitasi BMO $[\sigma_b(1s)]$ ga o'rnashadi, uchinchi elektron esa BO'MO $[\sigma^*(1s)]$ ga joylashadi.



Demak, Ne_2^+ da bitta BMO ga 2 ta elektron, bitta BO'MO ga (belgisi-*) 1 ta elektron joylashganligi sababli Ne_2^+ ioni haqiqatdan mavjuddir. Ne_2^+ da bog'lanish uzunligi 0,108 nm, bog'lanish energiyasi 23,6 kJ/mol, bog'lanish tartibi 0,5. Ne molekulasida esa 2 ta bog'lovchi va 2 ta bo'shashtiruvchi elektronlar bo'lishi kerak:



Ikki bog'lovchi elektronning ta'sirini ikki bo'shashtiruvchi elektron yo'q qilib yuborishi sababli, Ne_2 molekulasida mavjud emas.

Davriy jadvalning II davr elementlari molekula hosil qilishida atomning birinchi qobig'idagi elektronlari bog'lanish hosil qilishda ishtirok etmaydi, biz uni Ne_2 molekulasida misolida ko'rdik. Atomlardagi p-elektronlarning magnit kvant sonlari 0+

boʻlganligi sababli bu elektronlar molekulada s- va p-orbitallarga joylashishi mumkin. Bu yerda ham energiyaning minimumga intilish qonuniyati oʻz kuchini saqlab qoladi; molekulada orbitallar energiyaning ortishi tartibida elektronlar bilan toʻlib boradi. Bu tartib quyidagi qator shaklida ifodalanadi:

$$1\sigma_s^2 < 1\sigma_s^* < 2\sigma_s^2 < 2\sigma_s^* < 2\pi_y^2 = 2\pi_y^* < 2\pi_y^* < 2\pi_z^* < 2\sigma_x^*$$

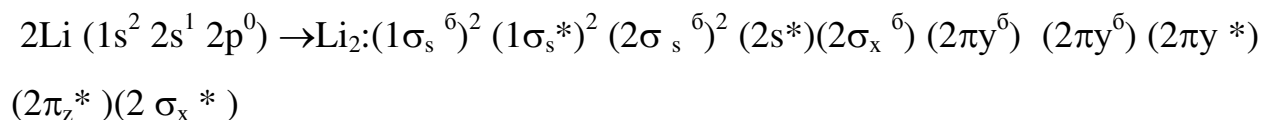
Bu tartib D.I. Mendeleyev davriy jadvalida davr boshida joylashgan elementlar ishtirokida hosil boʻlgan molekulalar uchun toʻgʻri keladi. Bunday hollarda ikki yadro oraligʻida joylashadigan s-elektronlar soni hali koʻp emas. Bunday orbitallarning simmetriyasi keyingi elektronlar simmetriyasiga befarq boʻlmaydi, ularning simmetriyalari bir xil boʻlishi oʻzaro itarish kuchlarini koʻpaytirib yuborishi mumkin. Yuqoridagi qatorda 9- va 10- elektronlar joylashadigan orbitalning simmetriyasi ham oldingi orbitallarnikidek boʻlsa, elektronlararo itarish kuchi ortib ketadi. Boshqa vaziyatda, agar paydo boʻladigan elektronlar simmetriyasi oʻzga boʻlgan orbital (p_x -va p_y -orbitallar) da joylashsa, elektronlar bulutining zichligi ikki yadroni birlashtiruvchi molekula oʻqi ustida joylashmasdan, shu oʻqdan tashqarida joylashadi, elektronlararo itarish kuchlari bu holda molekulani zaiflashtira olmay qoladi, ya'ni bu holat molekula uchun energetik afzal boʻladi.

Xulosa qilib aytganda, 8 ta elektrondan ortiqchasi quyidagi tartibda keltirilgan elektron konfiguratsiyaga ega boʻladi:

$$1\sigma_s^2 < 1\sigma_s^* < 2\sigma_s^2 < 2\sigma_s^* < 2\pi_y^2 = 2\pi_z^2 < 2\sigma_x^2 < 2\pi_y^* = 2\pi_z^* < 2\sigma_x^*$$

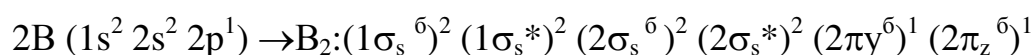
Energiyasi kam boʻlgan orbitallardan soʻng yuqori energiyali orbitallar elektronlar bilan toʻla boshlaydi. Yuqoridagi mulohazalarni nazarda tutib litiy, bor, uglerod, kislorod, fluor, azot va CO molekulalarining hosil boʻlishini koʻrib chiqamiz.

Litiy molekulasi hosil bo'lishi. Molekulani hosil qilishda har bir valent qobiq va ichki qobiq elektronlari ishtirok etishini hisobga olgan holda quyidagi sxemani yozamiz:



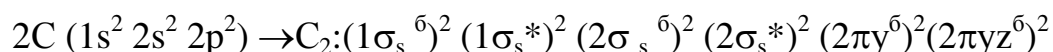
Molekuladagi bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlar soni bir xil, ya'ni molekulaning $BT = 0$, shu sababli Li_2 molekulasi mavjud emas.

Bor molekulasi hosil bo'lishi:



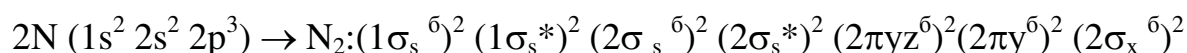
Demak, bor molekulasida 6 ta bog'lovchi va 4 ta bo'shashtiruvchi elektronlar bor. $BT = 6 - 4/2 = 1$. B_2 da bog'lanish uzunligi 0,159 nm, bog'lanish energiyasi 289,5 kJ/mol, u paramagnit xossa namoyon qiladi.

Uglerod molekulasi hosil bo'lishi:



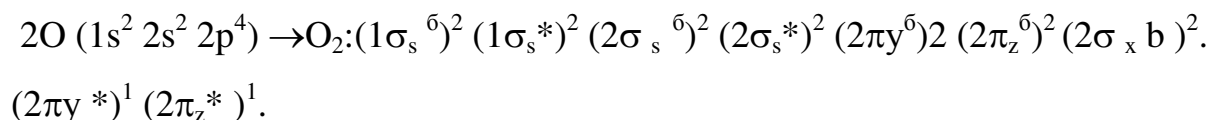
Demak, uglerod molekulasida 8 ta bog'lovchi va 4 ta bo'shashtiruvchi elektronlar bor. $BT = 8 - 4/2 = 2$. C_2 da bog'lanish uzunligi 0,131 nm, bog'lanish energiyasi 617,5 kJ/mol, u diamagnit xossa namoyon qiladi.

Azot molekulasi hosil bo'lishi:



Demak, azot molekulasida ortiqcha bog'lovchi elektronlar soni 6 ga teng; ammo 4 ta σ_s -bog'lovchi elektron ta'sirini 4 ta σ_s -bo'shashtiruvchi elektron yo'q qilib yuboradi. Azot molekulasida mavjud va u nihoyatda mustahkam molekuladir. $BT = 10^{-4} / 2 = 3$. r_0 - bog'lanish uzunligi 0,11 nm, bog'lanish energiyasi 941 kJ/mol.

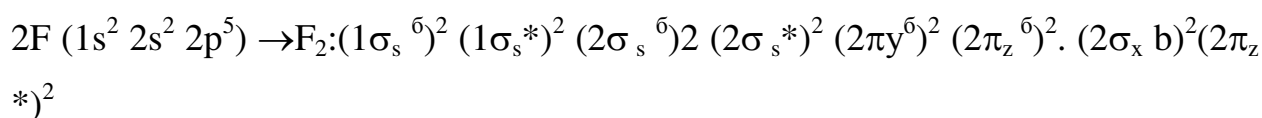
Kislorod molekulasining hosil bo'lishi:



Demak, kislorod molekulasining $2\pi^*$ -orbitalida faqat 2 ta elektron bor, vaholanki, bu orbitalda 4 ta elektron bo'lishi mumkin edi. Shu sababli Gund qoidasiga binoan 2 ta $2\pi^*$ -elektron parallel spinlarga ega bo'lishi kerak. Bu hol Pauli printsiptiga zid emas, chunki elektronlardan birining magnit kvant soni $l = -1$ va ikkinchisidiki $l = +1$ dir.

Shunday qilib, MO usuli kislorod molekulasida 2 ta toq elektron borligini nazariy ravishda izohlab berdi. Ikkita toq elektron borligi sababli suyuq va kristall holdagi kislorod magnitga tortiladi, u paramagnit modda. Bundan tashqari, kislorod molekulasida ortiqcha 4 ta bog'lovchi elektronlar bor. $BT = 10^{-6} = 2$, $r_0 = 0,121$ nm, bog'lanish energiyasi 494 kJ/mol.

Ftor molekulasining hosil bo'lishi:



Demak, ftor molekulasida ortiqcha bog'lovchi elektronlarning soni 2 ga teng, shu sababli molekulada ftor atomlari o'zaro yakka bog'lanishga ega. B_2 - C_2 - N_2 qatorida bog'lovchi MO lar elektronlar bilan to'lib borgan sari molekulada yadrolararo masofa kichiklashadi, lekin bog'lanish energiyalari kattalashib boradi. Aksincha

$N_2-O_2-F_2$ qatorida bo'shashtiruvchi orbitallar elektronlar bilan to'lib borgan sari molekuladagi yadrolararo masofa kattalashadi, lekin bog'lanish energiyalari qiymati kichiklashadi.

Neon molekulasini mavjud bo'la olmaydi, chunki uning tarkibidagi bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlar soni tengdir.

MO lar nazariyasi molekullarning asosiy xossalari bo'lmish molekullarning ionlanish energiyasi, molekullarning magnit xossalari va moddalarning rangga ega bo'lish yoki bo'lmasligi kabi bir qator xossalarini to'g'ri izohlay oladi.

Endi 2 xil element atomlaridan (geteroyadroli) molekullar hosil bo'lishini MO usulida ko'rib chiqamiz.

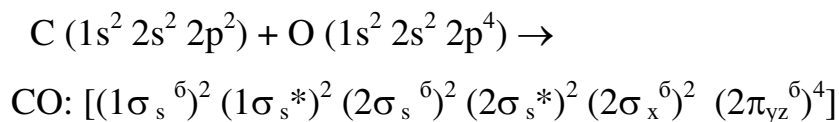
Litium gidrid-LiH molekulasining hosil bo'lishi:



LiH molekulasida yagona bog'lanishni hosil qilgan ikki elektron ko'proq vaqt vodorod atomi sohasida harakat qiladi.

Litium gidrid qisman ion xarakterga ega. Uning dipol momenti 1,96 Kl. m. ga teng.

CO molekulasining hosil bo'lishi:



CO molekulasida ortiqcha bog'lovchi elektronlar soni 6 ga yetadi. Bitta σ -va 2 ta π -bog'lanish mavjud ($C=O$). Uning bog'lanish energiyasi 1067 kJ/mol.

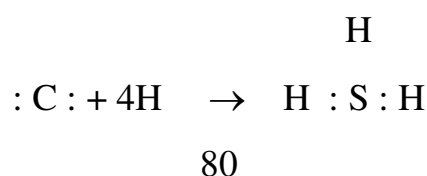
Xulosa: MO usuli yordamida yanada murakkab molekullarning tuzilishini to'g'ri talqin qilish mumkin.

Elektron orbitallarning gibridlanishi

Uglerod atomi tinch sharoitda $1s^2 2s^2 2p^2$ tuzilishiga ega. Uning 2 ta juftlashgan elektroni bor. Lekin uglerod hech qachon ikki valentli bo'lmaydi. Uglerod atomi qo'zg'algan holatda to'rtta yakka elektronga ega shu sababli to'rt valentli:



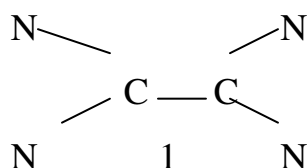
Biz uglerod atomi IV valentli holatga kelishi uchun uning 2s - orbitalidagi juftlashgan elektronlardan birini 2p - orbitalga o'tkazish kerak deb aytib o'tdik. Hosil bo'lgan ana shu 4 ta bir elektronli orbitallarga 4 ta vodorod atomi keltirib, 4 ta bog'lanishni yuzaga chiqargan bo'laylik. Agar orbitallar bir-biriga ta'sir ko'rsatmasa, p- orbitallar ishtiroki bilan hosil bo'lgan 3 ta bog'lanish fazoda o'zaro perpendikulyar ravishda joylanib, to'rtinchisi, ya'ni s-orbital ishtirokida hosil bo'lgan bog'lanish hech qanday yo'nalishga ega bo'lmasligi kerak edi. Lekin tajriba buni tasdiqlamaydi. Metan molekulasida uglerod atomi tetraedrning markaziga joylangan bo'lib, tetraedr uchlarida vodorod atomlari turadi:



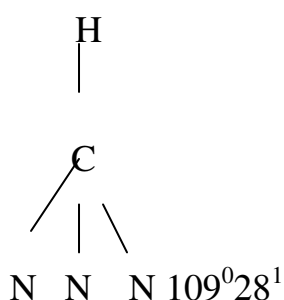
To'rtala valentlik o'zaro $109^\circ 28'$ burchaklar hosil qiladi, sistema tamomila simmetrik shaklga ega. Qarama-qarshilikni bartaraf qilish uchun elektron orbitallarni gibridlanishi deb o'ylash mumkin. Bu tasavvurga muvofiq turli orbitallarga mansub elektronlar ishtirokida kimyoviy bog'lanish yuzaga chiqishida, bu elektronlarning bulutlari bir-biriga ta'sir ko'rsatib o'z shakllarini o'zgartiradi, natijada turli orbitallarning o'zaro qo'shilish mahsuloti-gibridlangan orbitallar hosil bo'ladi.

Sp^3 - gibril orbitalda elektron bulutning zichligi yadroning bir tomonida kattaroq bo`lib, ikkinchi tomonida kichikroq. Shu sababli gibrilangan orbitallar ishtirokida hosil bo`lgan bog`lanishlar barqaror bo`ladi.

Agar bitta s-orbital bilan ikkinchi p-orbital gibrilansa, o`zaro  $120^0$  bo`ylab joylashgan uchinchi gibril orbital hosil bo`ladi (sp^2 - gibrilalanish).

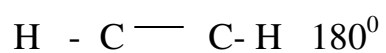


O`zaro birikuvchi atomlar orasida birgina valent chiziq bilan tasvirlanadigan yakka bog`lanish hosil bo`lganida elektron bulutlar o`sha atomlarning yadro markazlararo eng yaqin to`g`ri chiziq bo`ylab bir birini qoplaydi, bunday bog`lanish s-(sigma) bog`lanish deb ataladi. Masalan, metanda 4 ta s-bog`lanish bor. Bu bog`lanish bir-biriga nisbatan  $109^028^1$  burchaklar hosil qiladi, s-bog`lanishlar hosil qilishda uglerodning 4 ta gibril orbitallari va har qaysi vodorod atomining bittadan s-elektronli orbitallari ishtirok etadi:



Har qaysi uglerod atomida bittadan juftlanmagan elektron qoladi. Ular o`zaro bog`lanish hosil qila olmaydi, chunki bu Pauli prinsipiga zid keladi. Shuning uchun bu elektronlar bog`lanish tekisligiga perpendikulyar tekislikda o`zaro elektron bulutlarini qoplaydi. Bunday bog`lanish p-bog`lanish deb aytiladi. Masalan, atsetilen molekulasi 3 ta s-bog`lanish, 2 ta p-bog`lanish bor. Unda

valent bogʻlanishlar orasidagi burchak 180^0 ga teng va molekula fazoda chiziqli shaklga ega boʻladi:



Foydalanilgan adabiyotlar:

1. H.R.Rahimov «Noorganik kimyo», 1984 y.
2. N.S.Axmetov «Obhaya i neorganicheskaya kimyo», 1988 g.
3. A.K.Glinka «Umumiy kimyo», 1974 y.