

O`zbekstan Respublikasi Xalq Bilimlendiriw Ministrliqi

**A`jiniyaz atındag`ı No`kis Ma`mleketlik Pedagogikalıq
İnstitutı**

Ta`biyy pa`nler fakulteti

Ximiya ha`m ekologiya kafedrası

5110300-Ximiyani oqıtıw metodikası bakalavr

ta`lim bag`darinin` 4A-kurs talabasi

Eshimuratova Da`wletbike Qurbanbaevnanın`

PITKERIW QA`NIYGELIK JUMISI

Tema: Akademiyalıq litseylerde kovalent baylanistin` kvant mexanikalıq
teoriyasın oqitiwda jan`a pedtexnologiyalıq usıllardan paydalaniw

Ilimiy basshisi:

Ass. Qurbanbaeva A.

Kafedra basligi:

x.i.k. Jumabaev B.A.

Pitkeriw jumisi Ximiya ha`m ekologiya kafedrasının` _____ 2015-jıl №__

sanli majilisinde qaraldi ham qorg`awg`a ruxsat etildi

No`kis-2015 j

M A Z M U N I

	Kirisiw.....	
1	A`debiyatlarg`a sholiw.....	
2	Material metodika.....	
I	Tiykarg`ı bo`lim.....	
2.1	Kovalent baylanistin` kvant mexanik teoriyasi.....	
2.2	Valent baylanis metodi.....	
2.3	Molekulyar orbitallar metodi.....	
2.4	Xund qag`iydasi.....	
2.5	Pauli printsipli.....	
2.6	«Kaskad» sxemasinan paydalaniw.....	
	Juwmaqlaw.....	
	O`mir qa`wipsizligi.....	
	Paydalang`an a`debiyatlar.....	

I-bap.Tiykarg`ı bo`lim

1.1 Kovalent baylanistin` kvant mexanik teoriyasi

Ximiyaliq baylanis degende , biz atomlar ara ta`sir etiwshi xa`m olardi birgelikte uslap turiwshi ku`shlerin tu`sinemiz. Ximiyaliq baylanistin` sebebi sonda, atom yamasa ionlar o`z ara birikkende uliwma energiya tutimi olardin` ayirim jag`daylarda salistirmali kishi da`rejege iye boladi ha`m sistema turaqlilaw jag`dayin iyeleydi. Eger qanday da bir sistema bir jag`daydan ekinshi jag`dayg`a o`tkende onin` energiya pa`ti kemeyses, bul xadiyse «*sistema energetikaliq manpaatine iye boldi*» degen tu`sinigi menen sipatlanadi. Demek, atomlardan molekulalar payda boliwinin` sebebi sistemada energetikaliq manpaatinin` payda boliwinan boladi. Ximiyaliq baylanis onin` energiyasi, uzinlig`i ha`mde valentlik araliq mu`yeshleri ulkenligi menen xarakterlenedi.

Kovalent baylanis teoriyasi tiykarin «sirtqi qabati segiz (yamasa eki) elektronnan ibarat atom turaqli boladi» degen tu`sinikke iye. Bul baylanista turaqli konfiguratsiya eki atom arasinda bir yamasa bir neshe uliwma elektron juplari payda boliwinan kelip shig`adi. Elektron juplari payda boliwinda eki atom ha`m qatnasadi. Sonin` ushin xa`r bir atom uliwma juplari ushin o`zinen a`lbette elektron beredi. Kovalent baylanis payda boliwin bir neshe zatlarda baqlawg`a boladi. Xa`r birinde bir elektron bolg`an eki vodorod atomi o`z ara jaqinlasqanda vodorod molekulasin (H_2) payda etedi:



Ha`r bir atomnin` uliwma juplari ushin beretug`in elektroni sxemada tochka menen ko`rsetiledi. Vodorod molekulasinda bir jup elektroni eki yadro arasinda jaylasiwi na`tiyjesinde turaqli konfiguratsiya payda boliwina alip keledi.

Ftor atominda oktet, yag`niy segiz elektronli qabat payda boliwi ushin bir elektron jetispeydi. Ftordin` bir atomi onin` ekinshi atomi menen birikkende kovalent baylanis payda boladi.

Azot atominda oktet payda boliwi ushin u`sh elektron jetispeydi. Eki atom azottan azot molekulasinin` payda boliwin to`mendegishe ko`rsetiwge boladi:

.



Lengmyur birigiwshi atomlar arasinda payda bolatug`in elektron juplardin` sani sol element valentligine ten`, dep qabil etti. Ma`selen, ammiaktin` payda boliwinda azottin` u`sh elektroni qatnasadi, biraq bir jup elektronlari qatnaspaydi. Usi baylanista qatnaspag`an elektron juplari – yadrolar aralig`inda qatnaspaytug`in jup elektronlar dep ataladi. Bunday elektron juplari ko`binese erkin elektron juplari dep ha`m ataladi.

L`yuis ha`m Lengmyurdin` kovalent baylanis xaqqindag`i elektron teoriyasi quramali bolmag`an zatlardag`i ximiyaliq baylanisti tastiylap berdi, biraq quramali zatlardag`i (a`sirese kompleks birikpelerdegi) ximiyaliq baylanis ta`biyatin tu`sindire almas. Ne sebepten elektron oktetinin` tek eki dubleti turaqli boladi? Ne ushin kovalent baylanis elektron juplari esabınan payda boladi, degen sorawlarg`a toliq juwap bere almas, bunnan tisqari, L`yuis-Lengmyur teoriyasi statik teoriya bolip, ol elektron ha`m yadrolardin` xa`rekettegi ag`dayin esapqa almag`an edi.

Tek g`ana kvant mexanika teoriyasi tiykarında ximiyaliq baylanistin` teoriyalari jaratildi. Xa`zirgi waqıtta kvan mexanikada ximiyaliq baylanisti tu`sindiriw ushin eki usillardan paydalaniladi. Olardin` birewi valent baylanis (VB) usili, al ekinshisi bolsa – molekulyar orbitallar (MO) usili.

Ximiyaliq baylanis degende , biz atomlar ara ta`sir etiwshi xa`m olardi birgelikte uslap turıwshi ku`shlerin tu`sinemiz. Ximiyaliq baylanistin` sebebi sonda, atom yamasa ionlar o`z ara birikkende uliwma energiya tutimi olardin` ayirim jag`daylarda salıstırmalı kishi da`rejege iye boladi ha`m sistema turaqlılaw jag`dayin iyeleydi. Eger qanday da bir sistema bir jag`daydan ekinshi jag`dayg`a o`tkende onin` energiya pa`ti kemeyse, bul xadiyse «*sistema energetikalıq manpaatine iye boldi*» degen tu`sinigi menen sipatlanadi. Demek, atomlardan molekulalar payda bolıwınin` sebebi sistemada energetikalıq manpaatinin` payda bolıwınan boladi. Ximiyaliq baylanis onin` energiyasi, uzınlıg`i ha`mde valentlik aralıq mu`yeshleri ulkenligi menen xarakterlenedi.

Atomlar o'z ara ta'sirlesivi na'tiyjesinde u'sh tu'rli bo'leksheler (molekulalar, ionlar ha'm erkin radikallar) payda boliwi mu'mkin. Molekulalar bir-birinen atomlardin' sani, molekula quramindag'i atomlardin' oraylar ara araliqlari, baylanis energiyasi menen airaladi. Xasil gazlardin' molekulalari a'piuayi jag'dayda bir atomli bolsa, polimer zatinin' molekulalarin ju'da ko'p atomlar payda etedi.

Molekulani payda etken atomlar valentlikleri arasindag'i mu'yesh xa'r tu'rli boladi. Ma'selen, suw molekulasinda kislorod valentligi arasindag'i mu'yesh 104,5 °C qa, H₂S ta ku'kirt valent bag'dari arasindag'i mu'yesh 92°20' qa ten', metanda bolsa uglerod atomlari arasindag'i mu'yesh 109°28' ge ten'.

Ximiyaliq baylanisti u'ziw ushin kerekli bolg'an energiya mug'dari *baylanis energiyasi* dep ataladi. Xa'r bir baylanis ushin tuwri keletug'in baylanis energiyasi pa'ti 200-1000 kJ·mol⁻¹ aralig'inda boladi. Ma'selen, CH₃F da C-F baylanis energiyasi 487 kJ·mol⁻¹ ge ten'. Atom yamasa molekulalardin' elektron beriwi yamasa qabil etip aliwi na'tiyjesinde payda bolatug'in bo'leksheler *ionlar* dep ataladi. Ionlar on' yamasa teris zaryadli boladi. Zat quraminda on' ionlar teris ionlar menen baylanisqan.

Toyinbag'an valentlikke iye bo'leksheler *erkin radikallar* dep ataladi. Ma'selen, CN·, NO·, CH₃· ha'm NH₂· Lar Erkin radikallar. Adettegi jag'dayda Erkin radikallar uzaq waqit tura almaydi. Biraq ximiyaliq protsessler bariwi ushin Erkin radikallar ju'da ulken rol oynaydi. Ha'zirgi waqitta bir neshe turaqli radikallar tabilg'an.

Ximiyaliq baylanis protsessinde o'z ara birigiwshi bo'leksheler arasinda eki ku'sh ta'sir etedi, olardan biri bo'lekshelerdin' o'z ara tartilisiw ku'shi (E_t) bolsa, ekinshisi – olardin' bir-birinen iteriliwi (E_i) ku'shi.

Ionlaniw protsessin to'mendegi ten'leme formasinda ko'rsetiwge boladi:



Bul ten'lemedegi **I** - atomnin' elektron beriwi qabiletin mug'darliq ta'repinen xarakterleydi; *oni ionlaniw energiyasi yamasa ionlaniw potentsiali* dep

taladi; $I = E_{\infty} - E_{\text{tiykarg'ib}}$ yag'niy, *gaz ta'rizli fazada bolg'an normal' jag'daydag'i atomnan bir elektrondi uliwma shig'arip jiberiw ushin kerek bolg'an minimal energiya mug'dari ionlaniw energiyasi – I*. Atom ha'm molekula ionlaniw ushin a'lbette energiya sarplaw kerek. Ionlaniw energiyasi eV yamasa $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ menen aniqlanadi. Ko'p elektrong'a iye bolg'an atomnin' bir neshe ionlaniw potentsiali I_1, I_2, I_3 ha'm tag'ida basqalari belgili. Barqulla $I_1 < I_2 < I_3 < \dots < I_n$ boladi.

Ionlaniw potentsialin spektroskopik tekseriw na'tiyjesinde ha'm basqa usillar menen aniqlawg'a boladi. Eger qisqa tolqinli spektral bag'darg'a muwapiq keletug'in elektromagnit terbeliwler sani ν_i belgili bolsa, ionlaniw energiyasin Plank nizami tiykarinda:

$$I_i = h \nu_i$$

ten'leme ja'rdeminde aniqlawg'a boladi. N.Bor teoriyasina muwapiq, vodorod ta'rizli bo'lekshelerdin' ionlaniw energiyasi

$$I_i = 13,6 z^2/n^2$$

formulasi menen esaplanadi. (Bul formulada z – yadro zaryadinin' ta'rtip sani; n – Bor orbitasinin' bas kvant sani).

Atomnan birinshi elektrondi shig'ariw ushin minimal mug'dar energiya talap etiledi; ma'selen, Li ushin $I_1 = 5,392 \text{ eV}$, $I_2 = 75,641 \text{ eV}$, $I_3 = 122,42 \text{ eV}$.

Ko'p elektronli atomlardin' ionlaniw potentsiallarin esaplaw ushin:

$$I = 13,6 z^{*2}/n^{*2}$$

formuladan paydalaniwg'a boladi. Bul jerde: n^* - effektiv kvant sani, z^* - yadronin' effektiv zaryadi. Dj.Sleyter usinisina muwapiq n^* menen n arasinda to'mendegi baylanis belgili:

eger bolsa n 1 2 3 4 5 6

eger bolsa n^* 1,0 2,0 3,0 3,7 4,0 4,2

n^* penen n arasindag'i ayirma $(n - n^*)$ kvant deffekti dep ataladi.

Elementtin' ionlaniw potentsiali (I) qanshelli kishi bolsa, bul element sonshama kushli metalliq qa'siyetlerine iye boladi. Sonin' ushin D.I.Mendeleev da'wirlik sistemasinda xa'r da'wirdin' basinan aqirina otken sayin elementlerdin'

ionlaniw energiyasi artip baradi. Ma`selen, Li ushin 5,392 eV, Be diki 9,32 eV, F din` ionlaniw potentsiali 17,42 eV g`a ten`.

Da`wirlik sistemasinin` xa`r gruppada joqaridan to`menge tu`sken sayin ionlaniw energiyasinin` ku`shi kemeyip baradi. Ma`selen, natriydiw potentsiali 5,14 eV, kaliydiki 4,34 eV.

Da`wirlik sistemada xa`r bir da`wir ishinde shepten on`g`a o`tken sayin atomnin` o`zine elektron biriktirip aliw qa`siyeti artip bara beredi. Atom o`zine elektron biriktirip alip, sol elementtin` teris ionina aylanadi. Element atomi bir elektron biriktirip alg`anda ajiralip shig`atug`in energiya mug`dari sol elementtin` *elektrong`a ilayiqilig`i* dep ataladi. Bul mug`dar  $\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  yamasa elektronvol`tlar menen o`l`shenip, E xa`ribi menen belgilenedi. Elementtin` *elektrong`a ilayiqililig`i* qanshelli ulken bolsa, onin` metallemeslik qa`siyetleri sonshelli ku`shli tastiyoqlang`an boladi.

Berilliy, azot ha`m neonnin` *elektrong`a ilayiqililig`i* teris zaryadina iye. Gruppa ishinde joqaridan to`menge o`tken sayin E nin` ku`shi artadi.

Elementlerdin` metallemeslik qa`siyetlerin ko`rsetiw ushin elektroterislik (ET) tu`sinigi kiritilgen. Elementtin` elektroterisligi onin` ionlaniw energiyasi menen *elektrong`a ilayiqililig`i* jiyindisina (yamasa onin` yarimina) ten`:

$$ET = E + I \text{ yamasa } ET = E + I / 2$$

Elektroterislikti esaplaw usili menen barliq elementler ushin *elektrong`a ilayiqililig`i* ku`shleri xaqqinda mag`liwmat joq ekenligi sebepli elektroterislik xaqqinda tu`sinikler bolmag`anlig`i sebepli oni du`ziu imkani bolmadi. Usi sebepten bir qansha usillar usinildi. Birinshi uliwma usildi L.Poling usindi. Ol to`mendegishe ko`rsetpe berdi. Eger eki element atomlarinin` elektroterisligi o`z ara ten` bolsa, A-V baylanis energiyasi A-A ha`m V-V baylanis energiyasinin` ortasha geometriyaliq ko`rsetkishlerine ten` boladi, sebebi atomlar arasindag`i belgili A-A, V-V ha`m A-V kovalent baylanislarda elektronlar A-A, V-V ha`m A-V dag`i eki atom arasinda birdey aniqlanadi.

Ximiyaliq baylanista tiykarinan valent elektronlar qatnasadi, s- ha`m p-elementlerde valent elektron waziypasin en` sirtqi qabattag`i elektronlar, d-

elementlerde bolsa sirtqi qabatinin` s- elektronlari ha`m sirttan alding`i qabattin` d- elektronlari orinlaydi. Aniq etip aytqanda, elementke ha`mme waqit elektroterislik tiyisli boladi dep aytiw xaqiyqattan ha`m biraz shetleniwge alip keledi, sebebi bul qasiyet turli faktorlar ta`sirine, asirese elementtin` valent jag`dayina, onin` ko`rkemli oksidleniw da`rejesine, atomdi qorshap turg`an basqa atomlardin` koordinatsion sanina ha`m basqa jag`daylarg`a baylanisli boladi. Xa`zir waqitta elementlerdin` elektroterisligin tu`sindirgende orbital` elektroterislikten paydalaniladi. Bul qa`siyet ximiyaliq baylanista qatnasip atirg`an atom orbitalinin` jag`dayina qarap o`zgeredi.

1.2 Valent baylanis metodi

Vodorod molekulasinin` payda boliwin kvant-mexanika tiykarinda tu`sindiriw ushin V.Geytler menen F.London 1927 jilda usinis etken va L.Poling rawajlandirg`an *valent baylanislar* teoriyasinan paydalaniladi. Bul teoriyag`a muwapiq ximiyaliq baylanis payda boliw ushin to`mendegi sha`rtlar orinlaniwi kerek.

1. O`z ara birigiwshi atomlarda elektronlardin` spinlari qarama-qarsi bag`darg`a iye boliwi kerek, sebebi antiparallel` spinli eki elektron bir-birine jaqinlasqanda, olardin` elektron bulti bir-birin qaplaydi: na`tiyjede usi eki elektron bir-biri menen juplasadi.

Qarama-qarsi sping`a iye bolg`an eki elektron eki yadro a`tirapinda xa`reketlengende yadrolar ara fazada elektron bultlardin` tig`izlig`i artadi. Eki yadro arasinda ulken teris zaryadli bo`lekshe payda boladi ha`m ol on` zaryadli yadrolardi o`zine tartip olardi biriktiredi. Na`tiyjede bo`leksheler arasinda ximiyaliq baylanis payda boladi. Kerisinshe, elektronlardin` spini o`z ara parallel` bolsa, eki atom arasindag`i tarawda elektron bultinin` tig`izlig`i nol`ge deyin kemeyedi ha`m ximiyaliq baylanis payda bolmaydi, sebebi bul jag`dayda atomlar arasinda o`z ara iyteriliw ku`shi u`stin turadi.

Ma`selen, vodorod molekulasında eki yadro ha`m eki elektron bar. Olar arasinda to`mendegi o`z ara ta`sir bar: yadrolar ha`m elektronlar bir-birinen qashadi. Biraq elektronlar menen yadrolar arasinda o`z ara tartilisiw ku`shi payda

boladi; xar qaysisi elektrondi eki yadro tartadi ha'm xar bir yadroni eki elektron tartadi.

Antiparallel` spinli eki H atomi bir-birine jaqinlasip, atomlar ara araliqqa  $r_0 = 0,074$  nm g`a jetkende sistemanin` potentsial energiyasi minimal ko`rsetkishke iye bolip, 4,48 eV g`a yamasa  $434,8 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$  ge ten` boladi. Demek, H_2 degi baylanis uzunlig`i  $r_0 = 0,074$  nm ha'm baylanis energiyasi 4,48 eV boladi. Atomlardan molekula payda boliwinda energiya o`zgerisi menen bir waqitta yadrolar aralig`inda elektron bultlarinin` tig`izlig`i da o`zgeredi.

Eger vodorod molekulası payda bolg`anda bir atomnin` elektron bultin ekinshi atomnin` bulti qaplap alg`anda, H_2 de yadrolar ara araliq $2 \cdot 0,053 = 0,106$ nm g`a ten` bolar edi; elektron bultlari o`z ara qaplaniwi sebepli bul araliq qisqaradi ha'm xaqiyqatında 0,074 nm ge ten` boladi. Eger birigiwshi atomlardag`i elektron orbitallari o`z ara mu`yesh payda etip jaylasqan bolsa, reaksiya na`tiyjesinde payda bolg`an molekulada ha'm atomlar bag`darli valentlikler payda etedi. Valent baylanis payda boliwinda atomlardin` gibridlengen orbitallari ha'm qatnasadi.

2. Payda bolg`an jan`a elektron jubi uliwmastirilg`an boladi, baylanis payda boliwinda qatnasqan atomlardin` qalg`an elektronlari menen tolg`an (I da`wir elementler atomlari ushin dublet, qalg`an da`wir elementlerinin` atomlari ushin, tiykarinan oktet) qabat payda bolg`anda turaqli elektron konfiguratsiya payda boladi. Eger baylanisip atirg`an atomnin` bos elektron qabati (ma`selen, valent qabatında elektronlari bolmag`an d- yamasa f- qabatlar) bolg`anda oktet konfiguratsiya ornina 10 yamasa onnnanda ko`birek elektronli valent qabati payda boliwi mu`mkin. Ma`selen,  $\text{PF}_5$  molekulası (fosfor atomi atirapında 10 elektron bar) ja`ne HF menen birigip PF_5 ke salistirg`anda turaqli bolg`an $\text{H}[\text{PF}_6]$ (12 elektronli qabat) kompleks birikpe payda boladi. Bunday tu`rdegi molekulalar atsidokomplekslerde ko`birek baqlanadi. PF_5 qarag`anda  $\text{PF}_6^-$  molekulyar anionda fosfordin` simmetriyasi joqariraq bolg`an maydan qorshawında turaqlilig`i artadi, sistemanin` energiyasi paseyedi.