

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI**  
**OLIY VA O‘RTA MAXSUS TA‘LIM VAZIRLIGI**  
**MIRZO ULUG‘BEK NOMIDAGI O‘ZBEKISTON MILLIY**  
**UNIVERSITETI**

**N.A.Parpiyev, SH.A.Kadirova, D.S. Raxmonova,**  
**YU.E. Ibragimova**

**NOORGANIK KIMYO-I, II, III BOSQICH**

**TOHIKEHT**

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI  
OLY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI

MIRZO ULUG'BEK NOMIDAGI O'ZBEKISTON MILLIY  
UNIVERSITETI

*Ushbu o'quv qo'llanma  
O'zbekiston Milliy Universitetining  
100 yilligiga bag'ishlanadi*

## **NOORGANIK KIMYO-I, II, III BOSQICH**

*Oliy o'quv yurtlari talabalari uchun o'quv qo'llanma*

**Тошкент**  
**“MUMTOZ SO‘Z”**  
**2019**

**UO‘K: 546.11**  
**KBK 21.383**

**“Noorganik kimyo-I, II, III bosqich” o‘quv qo‘llanmasi quyidagi mualliflar jamoasi tomonidan tayyorlangan:**

**N.A.Parpiyev** – O‘zMU Kimyo fakulteti noorganik kimyo kafedrası professori, O‘zR FA akademigi, k.f.d.

**Sh.A.Kadirova**– O‘zMU Kimyo fakulteti noorganik kimyo kafedrası professori, k.f.d.

**D.S.Raxmonova** – O‘zMU Kimyo fakulteti noorganik kimyo kafedrası dotsenti v.b., k.f.n.

**Yu.E.Ibragimova**– O‘zMU Kimyo fakulteti noorganik kimyo kafedrası ilmiy hodimi.

Mazkur o‘quv qo‘llanma “Noorganik kimyo-I, II, III bosqich” fanidan “5140500-Kimyo” ta’lim yo‘nalishi uchun mo‘ljallangan bo‘lib, Kimyo fakultetining “Umumiy va noorganik kimyo” kafedrası professor-o‘qituvchilari tomonidan ishlab chiqilgan. “Noorganik kimyo-I, II, III bosqich” fani o‘quv qo‘llanmasini yaratishda yetakchi xorijiy OTMlari o‘quv dasturlarida asosiy adabiyotlar ro‘yxatiga kiritilgan D.Shriver, P.Atkins “Inorganic Chemistry” darsligidan foylalanildi.

**Masul muharrir:**  
**akademik, N.A.Parpiyev**

***Taqrizchilar:***

**Z.A.Smanova** - O‘zMU Kimyo fakulteti Analitik kimyo kafedrası mudiri, k.f.d.

**Sh.Sh.Daminova** - O‘zbekiston-Yaponiya yoshlar innovatsiya markazi laboratoriya mudiri, k.f.d.

*O‘zbekiston Respublikasi Oliy va O‘rta maxsus talim vazirligining 2018-yil 27-martdagi 274-sonli buyrug‘iga asosan nashr etishga ruxsat berilgan*

**ISBN 978-9943-5562-8-7**

**©N.A.Parpiyev, SH.A.Kadirova, D.S. Raxmonova, YU.E. Ibragimova**

**2019**

©“MUMTOZ SO ‘Z” , 2019

## SO'Z BOSHI

Mazkur “Noorganik kimyo I, II, III - bosqich” o’quv qo’llanmasining yozilishi O’zbekiston Respublikasining “Ta’lim to’g’risida”gi qonuni va Kadrlar tayyorlash Milliy dasturi, Vazirlar Mahkamasining “Uzluksiz ta’lim tizimini darsliklar va o’quv adabiyotlari bilan ta’minlashni takomillashtirish to’g’risida” gi 4-sonli (1998 yil 5 yanvar), “O’quv dasturlari, darsliklar va o’quv qo’llanmalarni qayta ko’rib chiqish va yangilarini yaratish bo’yicha Respublika Muvofiqlashtiruvchi komissiyasini tuzish to’qrisida” gi 208-sonli (2000 yil 29 may), O’zbekiston Respublikasi Oliy va o’rta maxsus ta’lim vazirligining “Oliy ta’lim muassasalarini zamonaviy o’quv adabiyotlari bilan ta’minlashni takomillashtirish to’g’risida”gi 278-sonli (2013 yil 2 avgust) qarorlari va buyruqlarining bajarilishiga qaratilgan.

Ushbu “Noorganik kimyo I, II, III - bosqich” o’quv qo’llanmasi 5140500 kimyo yo’nalishidagi Oliy va o’rta maxsus ta’lim vazirligi tomonidan tasdiqlangan o’quv dasturiga asosan yozilgan bo’lib, unda o’quv materialining ketma-ketligi, hajmi, bayon etilishi, nazariy jihatdan chuqurligi va amaliy tomondan talabalar tanlangan mutaxassisliklari doirasida egallashlari lozim bo’lgan kimyoviy bilim va ko’nikmalar hisobga olingan.

Qo’llanmada xorijiy manbalarga asoslanib, kimyoning asosiy tushunchalari va qonunlari, atom tuzilishi, molekulalar tuzilishi, molekulalar simmetriyasi, kimyoviy bog’lanish, qattiq jismlar strukturasi, kristall panjara turlari, kislota va asoslar haqidagi yangi ma’lumotlar jamlangan.

Talabalarga tushunish oson bo’lishi va qo’llanmaning samaradorligi yuqori bo’lishi uchun jadvallar, tasviriy materiallar, mustaqil tayyorlanish uchun masalalar va savollarga keng o’rin ajratilgan. Bu esa, yoshlarimizning ilmiy jihatdan nazariy va amaliy bilimlarini boyishiga yordam berishiga ishonamiz.

Qo’llanma kamchiliklardan xoli bo’lmasligi mumkin. U haqida bildirilgan fikr va mulohazalaringizni mamnuniyat bilan qabul qilamiz.

Mualliflar

## 1-BOB. ATOM TUZILISHI

Bu bob noorganik birikmalarning fizik-kimyoviy xossalarini tushuntirish tendensiyalari uchun zamin hozirlaydi. Molekula va qattiq moddalar xossasini tushunish uchun atomni tushunib olish kerak: shuning uchun noorganik kimyoni o'rganishni ularning tuzilishi va xossalarini o'rganishdan boshlash kerak.

Biz Quyosh sistemasida materiyaning paydo bo'lishini muhokama qilishdan boshlaymiz, keyin esa atom tuzilishi to'g'risidagi tushunchalarimizning va elektronning atomdagi holatini ko'rib chiqamiz.

Atomning turli kimyoviy xossalarini ionlanish energiyasi, elektronga moyillik tushunish uchun kvant nazariyasi kiritiladi

Bu xossalarini tushunish hozirda ma'lum bo'lgan 110 kimyoviy elementning kimyoviy xossalarini ratsionallashtirish uchun yordam beradi.

15 millyard yil oldin materiya juda kichik hajmda konsentrlangan bo'lib, keyin tez kengaya boshlagan. Katta portlash deb nomlangan Koinotning kengayishi to'g'risidagi fakt hozirgi zamon tushunchalarining asosini tashkil etadi.

Darhol katta portlashdan keyin  $10^9\text{K}$  da elementar zarrachalar hozirda ma'lum bo'lgan shaklda bir-biri bilan bog'lanishi uchun kerak bo'lgan juda katta kinetik energiyaga ega bo'lgan. Lekin Koinot kengaygan sari soviy boshlagan, zarrachalar harakati sekinlasha boshlagan va har xil kuchlar ta'sirida bir-biriga tortila boshladi. Xususan, atom yadrolarining paydo bo'lishi nuklonlar (protonlar va neytronlar) orasidagi (qisqa ta'sirli, lekin favqulodda kuchli tortilish) kuchli o'zaro ta'sir oqibatidir. Keyingi materiya temperaturasining pasayishi elektronlarning yadro bilan atom hosil qilib bog'lagan, elektr zaryadlari orasidagi nisbatan kuchsiz, lekin uzoq ta'sirlashuvchi-elektrmagnit o'zaro ta'sirlashuv rivojlana boshladi.

Kimyoda muhim bo'lgan elementar zarrachalar xossalari 1.1-jadvalda keltirilgan. Ularning har biri o'zining, yadrodagi protonlar soniga teng atom nomeriga  $Z$  ga ega. Ko'p elementlar bir xil atom nomerli, lekin turli atom massali

bir necha izotoplarga ega. Bu izotoplar massa soni A yadrodagi protonlar va neytronlar soni bilan farq qiladi. Massa soni A ba'zida to'g'ri holda nuklon soni deb ham ataladi. Masalan, vodorodning uchta izotopi bor. Har bir holda  $Z=1$  ga teng, ya'ni yadro bitta protonga ega.

Eng ko'p tarqalgan vodorod izotopi  $A=1$  va  ${}^1\text{H}$  bilan belgilanadi. Nisbatan kam tarqalgan deuteriy (1 atomga 6000 ta) -  $A=2$  izotop. Bu massa soni yadroda protondan tashqari bitta neytron borligini ko'rsatadi. Rasmiy ravishda deuteriy  ${}^2\text{H}$  bilan belgilanadi, lekin odatda D simvoli ishlatiladi. Uchinchi –qisqa yashovchi vodorod izotopi tritiy  ${}^3\text{H}$  yoki T. Uning yadrosi bitta proton va ikkita neytrondan iborat. Ba'zida simvoldan chap tomonda yoziladigan element atom nomerini ko'rsatish ham foydali, bunda vodorod uchta izotopini  ${}^1_1\text{H}$ ,  ${}^2_1\text{H}$  va  ${}^3_1\text{H}$  holda yozish mumkin.

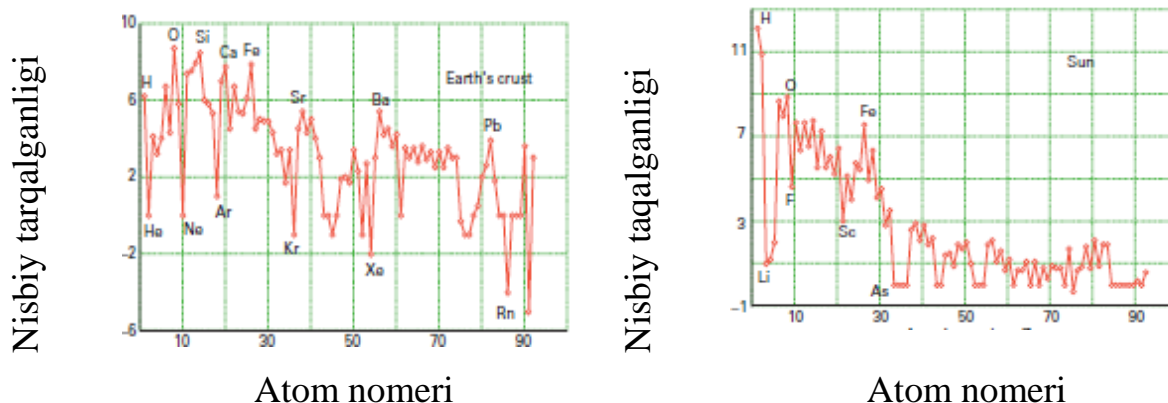
1.1-jadval

Kimyodagi muhim elementar zarrachalar

Zarracha	Simvoli	Massa	Massa soni	Zaryadi / $e^+$
Elektron	$e^-$	$5,896 \cdot 10^{-4}$	0	-1
Proton	R	1,0073	1	+1
Neytron	N	1,0087	1	0
foton	$\Gamma$	0	0	0
Neytrino	$\gamma$	0	0	0
pozitron	$e^+$	$5,896 \cdot 10^{-4}$	0	+1
$\alpha$ -zarracha	A	${}^4_2\text{He}$ yadrosi]	4	+2
$\beta$ -zarracha	B	[yadro $e^-$ chiqaradi ]	0	-1
$\gamma$ -foton	$\Gamma$	[yadro elektrmagnit radiatsiya chiqaradi]	0	0

## Elementlarning kelib chiqishi

Hozirgi zamon tasavvurlariga ko‘ra portlashdan 2 soat keyin temperatura shu darajada pasayganki, materiya asosan H(89%) atomlari va He (11%)atomlaridan hosil bo‘lgan. Buning natijasi vodorod va geliyning eng ko‘p tarqalgan element ekanligidir (1.1-rasm).



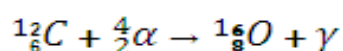
*1.1-rasm. Elementlarning yer po‘stlog‘i va quyoshda tarqalganligi.*

Ammo yadro reaksiyalarining sodir bo‘lishi natijasida keng spektrdagi boshqa elementlar hosil bo‘lgan, bu esa Koinot elementlari xilma-xilligini boyitgan.

### 1.1.Yengil elementlar yadroviy sintezi

Dastlabki yulduzlarning paydo bo‘lishi vodorod va geliy atomlaridan iborat bulutlarning gravitatsion kondensatsiyalanishi bilan tushuntiriladi. Bu bulutlarning gravitatsiya ta‘sirida siqilishi temperatura va ularning ichki zichligini kuchli oshib ketishi yadrolarning qo‘shilib ketishi jarayoniga olib kelgan. Eng dastlabki yadro reaksiyalari hozirgi vaqtda xalqaro miqyosdagi dastur asosida o‘rganilayotgan boshqariladigan yadroviy sintezga o‘xshashdir.

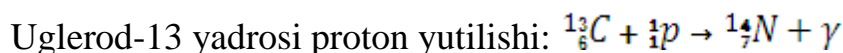
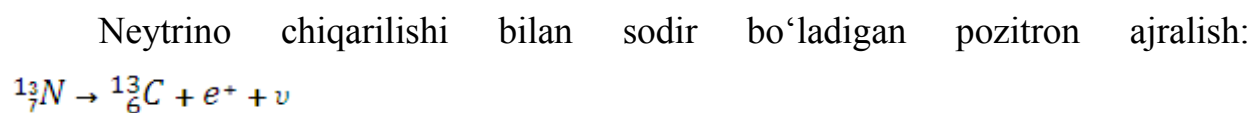
Yengil yadrolar qo‘shilganda katta atom nomerli elementlar hosil bo‘ladi va energiya ajralib chiqadi. Masalan,  $\alpha$ -zarrachalar ( ${}^4\text{He}$  yadrosi ikki proton va ikki neytrondan tashkil topgan) va uglerod-12 orasidagi yadro reaksiyasi natijasida kislorod 12 yadrosi va  $\gamma$ -kvantlar hosil bo‘ladi:



Bunda 7,2 MeV energiya ajralib chiqadi. Yadro reaksiyalarida oddiy kimyoviy reaksiyalariga nisbatan juda ko'p energiya ajralib chiqadi, chunki yadroviy o'zaro ta'sirlar elektronni atomda tutib turgan elektromagnit kuchlarga nisbatan kuchliroq bo'ladi. Oddiy kimyoviy reaksiyalar jarayonida  $10^3$  kDj/mol atrofida energiya ajralib chiqsa, yadro reaksiyalarida million marta ko'p energiya -  $10^9$  kDj/mol ajralib chiqadi.

Yadro reaksiyalarida nuklid ya'ni atom nomeri  $Z$ , massa soni  $A$  bo'lgan yadro  ${}^A_Z E$  bilan belgilanadi, bu yerda  $E$  - kimyoviy element simvoli. Shuni aytish kerakki, yadro reaksiyalari tenglamalarida dastlabki mahsulotlar massa sonlari yig'indisi, mahsulotlar massa sonlari yig'indisiga ( $12+4=16$ ) tengdir. O'xshash holda, reagentlar va mahsulotlar uchun atom nomerlari yig'indisi ( $6+2=8$ ) ham tengdir (bunda  $e^-$  holda, pozitron  $e^+$  holda belgilanadi). Pozitron bu nol massa sonli va birga teng musbat zaryadli zarracha. Yadro bunday zarrachalarni chiqarganda, nuklidning massa soni o'zgarmaydi, atom nomeri esa bir birlikka kamayadi, chunki yadro bitta musbat zaryad yo'qotadi, ya'ni bu yadrodagi protonning neytronga aylanishiga ekvivalent:  ${}^1_1p \rightarrow {}^1_0n + e^+ + \nu$ . Neytrino  $\nu$  - juda kichik (balki nolga teng) massali elektroneytral zarracha.

Atom nomerlari 26 gacha bo'lgan elementlar yulduzlar ichida sintez qilingan. Bunday elementlar "yadroviy yonish" deb ataladi va yadrolar qo'shilishi mahsuloti hisoblanadi. Bunday reaksiyalarni, oddiy reaksiyalar bilan adashtirish kerak emas, N va Ne yadrolari ham ishtirok etgan; S yadrolari bilan katalizlanadigan murakkabroq sikl ham sodir bo'lgan. (Koinot evolyusiyasining ilk bosqichlarida paydo bo'lgan yulduzlar S atomlaridagi nuqsonlarga duch kelgan, va bunda boshqa katalitik bo'lmagan reaksiya amalga oshgan). Bu sikldagi ba'zi muhim reaksiyalar quyidagilardir:





Azot-14 yadrosi proton yutilishi:  ${}^{14}_7\text{N} + {}^1_1\text{p} \rightarrow {}^{15}_8\text{O} + \gamma$

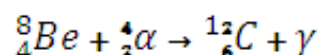
Neytrino chiqarilishi bilan pozitron ajralish:  ${}^{15}_8\text{O} \rightarrow {}^{15}_7\text{N} + e^+ + \nu$

Azot-15 yadrosi proton yutilish:  ${}^{15}_7\text{N} + {}^1_1\text{p} \rightarrow {}^{12}_6\text{C} + {}^4_2\alpha$

Bu ketma-ket reaksiyalar natijalarida to'rtta proton (to'rtta  ${}^1\text{H}$  yadrolari) bitta  $\alpha$ -zarracha ( ${}^4_2\text{He}$  yadrosi)ga aylanadi.

Bunday reaksiyalar 5 dan 10MK temperatura oralig'ida sezilarli tezlik bilan sodir bo'ladi (bu yerda 1MK=10<sup>6</sup>K). Bu esa yadro reaksiyalari bilan oddiy kimyoviy reaksiyalar o'rtasidagi ikkinchi farqdir, chunki kimyoviy reaksiyalar yuz ming marta kichik temperaturalarda sodir bo'ladi. O'rtacha energiyaga ega bo'lgan zarrachalar to'qnashishi kimyoviy o'zgarishlarga, faqat juda katta energiyaga ega bo'lgan zarrachalar to'qnashishi, yadro reaksiyalari uchun xarakterli bo'lgan, aktivlanish bareridan o'tishga olib keladi.

Nisbatan og'irroq elementlar yetarli darajada vodorod to'liq yonganda, va yulduz yadrosining siqilishi, moddaning zichligi 10<sup>8</sup> kg/m<sup>3</sup> (suvning zichligidan 10<sup>5</sup> marta katta) ga va temperatura 100MK bo'lganda hosil bo'ladi. Bunday ekstremal sharoitda geliyning "yonishi" deb nom olgan reaksiyaning sodir bo'lishiga imkoni tug'iladi. Berilliyning Koinotda kam tarqalganligi  $\alpha$ -zarrachalar to'qnashishidan hosil bo'lgan  ${}^8_4\text{Be}$  yadrosi, yana  $\alpha$ -zarrachalar bilan ta'sirlashib  ${}^{12}_6\text{S}$  yadrosi hosil bo'lishi bilan bog'liq:



Shunday qilib, geliyning yonishi, Yulduzning evoLyuisiya bosqichidagi, berilliyning barqaror oxirgi mahsulot sifatida hosil bo'lishiga olib kelmaydi. Shu sababli ham Li va B kam tarqalgan.

Bu uch elementning yadro reaksiyalari xaligacha aniq emas, lekin ular C, N va O yadrolarining yuqori energiyali zarrachalar to'qnashuvidan hosil bo'lishi mumkin.

Elementlar proton chiqarilishi bilan boradigan neytron (n) yutilishi yadro reaksiyalarida ham olinishi mumkin.  ${}^{14}_7\text{N} + {}^1_0\text{n} \rightarrow {}^{14}_6\text{C} + {}^1_1\text{p}$ . Bu reaksiya hozirgi

vaqtgacha atmosferada kosmik nurlar ta'sirida davom etmoqda, shu holda uglerod-14 radioaktiv izotopining Yerdagi konsentratsiyasi ushlab turiladi.

Temir va nikelning keng tarqalganligi ular yadrolari barqarorligi bilan bog'liq. Yadrolar barqarorligi yadro bog'lanish energiyasi  $E_{bog'}$  bilan, yadro energiyasi va uni tashkil qilgan proton va neytronlar summar energiyasi farqi bilan xarakterlanadi. Eynshteynning massa va energiya orasidagi  $E_{bog'}=(\Delta m)c^2$  munosabat bilan bog'langan, bu erda  $c$ -yorug'lik tezligi.

Yadro reaksiyalarida summar massa soni va summar zaryad o'zgarmaydi; katta bog'lanish energiyasi nisbatan barqarorroq elementlarga to'g'ri keladi. Engil elementlar vodorod va geliydan iborat yulduzlarda sodir bo'ladigan yadro reaksiyalari natijasida hosil bo'lgan.

Demak, agar yadro massasi uning komponentlari massasidan  $\Delta m=m_{nukl}-m_{yadro}$  ga farq qilsa uning bog'lanish energiyasi  $E_{bog'}=(\Delta m)c^2$  ga teng. Masalan,  $^{56}\text{Fe}$  bog'lanish energiyasi  $^{56}\text{Fe}$  yadrosi va 26 proton va 30 neytronlar energiyasi farqidir.

1.2-rasmda yadroning solishtirma bog' energiyasining massa soni bilan bog'liqligi ko'rsatilgan (solishtirma bog' energiyasi -yadro bog'lanish energiyasining uni tashkil etuvchi nuklonlar soniga nisbati, ya'ni  $E_{Bog'}/A$ ,  $A$ -massa soni). Temir va nikel egrining maksimumida joylashgan, chunki ularda nuklonlari boshqa nuklidlar qaraganda mustaxkamroq bog'langan.

Bu egridan yadro bog'lanish energiyasining atom nomeriga bog'liqligi, juft elementdan toq elementga o'tgandagi qonuniyatlarini o'rnatish qiyin. Bu maqsadda elementlarning Kosmosda taqarganligidan foydalanish mumkin; juft atom nomerli nuklidlar toq atom nomerli nuklidlarga qaraganda ko'proq tarqalgan, juft elementlar yadrolari toq elementlar yadrolariga nisbatan barqaror ekan.

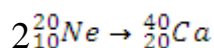
## 1.2. Og'ir elementlar sintezi

Og'ir nuklidlar neytronlar yutilishi va keyinchalik parchalanishi bilan boradigan jarayonlarida hosil bo'ladi.

Temir va unga atom nomeri bilan yaqin bo‘lgan elementlar nisbatan barqaror ekan, og‘ir yadroli elementlar energiya yutilishi bilan boradigan protsesslar natijasida hosil bo‘lishi kerak edi. Bu jarayonlar yulduzlar evoLyuisiyasida hali mavjud bo‘lmagan erkin neytronlar yutishni o‘z ichiga oladi; neytronlar keyin paydo bo‘lgan bo‘lishi mumkin, quyidagi reaksiya natijasida:

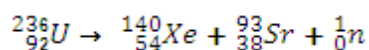


**Keñc 1.1.** Agar 2 ta yadroning massa raqamlari 56 dan kichik bo‘lsa ular bir biriga yutilib yangi kuchlroq yadroviy bog‘lanish energiyasiga ega bo‘lgan yadro hosil bo‘ladi va ortiqcha energiya ajralib chiqib ketadi. Bu jarayon **jipslashish** deb ataladi. Masalan: 2 Neon-20 yadrosi jipslashib Kalsiy-40 yadrosini beradi.



Ne uchun  $\frac{E_{\text{Bog}}}{A}$  miqdori deyarli 8.0 MeV. Shu sababli umumiy bog‘lanish energiyasi tenglamaning chap tarafidan  $2 \times 20 \times 8.0 \text{ MeV} = 320 \text{ MeV}$ . Ca uchun  $\frac{E_{\text{Bog}}}{A}$  miqdori 8.6 MeV ga yaqin. Shunday qilib tenglamaning o‘ng qismi uchun umumiy energiya  $40 \times 8.6 = 344 \text{ MeV}$ . Mahsulot va reaktivlar bog‘lanish energiyalari orasidagi farq 24 MeV.

$A > 56$  bo‘lgan yadro uchun bog‘lanish energiyasi ajralishi mumkin, qachonki yengilroq hamda katta  $\frac{E_{\text{Bog}}}{A}$  miqdoriga ega bo‘lgan mahsulotlarga parchalansa. Bu jarayon **Bo‘linish** deb ataladi. Masalan: Uran-236, Ksenon-140 va Stronsiy-93 yadrolariga bo‘linadi.



${}^{236}\text{U}$ ,  ${}^{140}\text{Xe}$  va  ${}^{93}\text{Sr}$  yadrolari uchun  $\frac{E_{\text{Bog}}}{A}$  miqdori mos ravishda 7.6, 8.4 va 8.7 MeV dir. Shu sababli bu reaksiyadan ajraladigan energiya miqdori  $(140 \times 8.4) + (93 \times 8.7) - (236 \times 7.6) \text{ MeV} = 191.5 \text{ MeV}$  har bir  ${}^{236}\text{U}$  yadrosining bo‘linishi uchun kerak bo‘lgan energiya. Bundan tashqari bo‘linish og‘ir elementlarni neytronlar bilan bombardimon qilish orqali hosil qilinishi mumkin.



Bo‘linish mahsulotlarining kinetik energiyasi taxminan 165MeV neytronlar uchun taxminan 5MeV va  $\gamma$ -nurlar hosil bo‘lishi taxminan 7MeV. Bo‘linish mahsulotlari radioaktivlar va  $\beta$ -,  $\gamma$ - va X-radiatsiyalardan kuchsizlanadi, taxminan 23MeV ajratib chiqaradi. Yadroviy bo‘linish reaktorida neytronlar taxminan 10MeV energiya ajralishi bilan tutib olinadi.

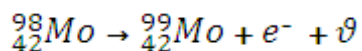
Hosil bo‘lgan energiya 10MeV ga pasayadi va reaktordan radiatsiya sifatida energiya chiqib ketadi va taxminan 1MeV yemirilmagan bo‘linish mahsulotlari sifatida qoladi. Shu sababli bitta bo‘linish hodisasi uchun hosil bo‘lgan umumiy energiya miqdori taxminan 200MeV yoki 32pJ. Bundan 1W reactor issiqligi sekundiga taxminan  $3.1 \times 10^{10}$  bo‘linishlarga to‘g‘ri kelishi kelib chiqadi. 3GW ishlab chiqaruvchi yadroviy reactor deyarli 1GW elektr energiya ishlab chiqaradi va bu kuniga 3 kg  $^{235}\text{U}$  sarfiga to‘g‘ri keladi. Uzoq umrli radioaktiv yoqilg‘i bilan bog‘liq bo‘lgan xavf-xatarlar yadroviy kuchning foydasi bilan munozaradadir. Tabiiy yoqilg‘ilarning kamayib borishi yadroviy kuchni obro‘cini ko‘taradi va shu narsa aniqki uran zaxiralari 100 yillarga yetadi. Hozirgi vaqtda uranning narxi ancha past va uranning 1 kichik bo‘lagi 3 barrel neft yoki 1 tonna ko‘mirdek energiya bera oladi. Yadroviy kuchning ishlatilishi shuningdek issiqxonalaridan chiqayotgan gazlar tezligini pasaytirib yuborishi mumkin.

Yadroviy kuchning asosiy nuqsoni bu radioaktiv chiqindilarni yig‘ish va ularning tarqalishidir. Omma yadro kuchuni noto‘g‘ri ishlatilishi va sodir bo‘lishi mumkin bo‘lgan yadroviy halokatlardan xavotirdadir

Eng yangi (portlagan) yulduzdagi kabi, intensiv neytronlar oqimi sharoitida yadro ketma-ket neytronlar yutib, og‘irroq izotoplarga aylanishi mumkin. Biroq, bir onda shunday holat yaratiladiki, bunda hosil bo‘lgan yadro  $\beta$ -parchalanishga uchraydi, ya’ni tez elektron  $e^-$  chiqaradi.  $\beta$ -parchalanishda nuklidning massa soni o‘zgarmaydi, atom nomeri bittaga ortadi (elektron chiqarilganda yadro zaryadi bittaga ko‘payadi). Masalan:



Keyingi neytron chiqarish bilan sodir bo‘ladigan  $\beta^-$ -parchalanish:



Yadro reaksiya mahsuloti bo‘lgan nuklid (bu holda texnetsiy izotopi  ${}_{43}^{99}\text{Tc}$ ) boshqa neytronni yutishi mumkin; bu jarayon davom etadi va yanada og‘irroq elementlar hosil bo‘ladi.

**Keys. 1.2.** Texnetsiy birinchi sun‘iy element (grekcha so‘zdan olingan). Sun‘iy element Erda hosil bo‘lmaydi. Yadro reaksiyalari natijasida hosil bo‘lishi mumkin. Uni Mendeleev bashorat qilgan, ochilishi ya‘ni hosil qilinishi Mendeleev chunki xossalari bashoratiga to‘g‘ri kelgan. Eng barqaror izotopi  ${}^{98}\text{Tc}$  4,2 mln yarim emirilish davriga ega. Texnetsiy qizil katta yulduzlarda ko‘proq hosil bo‘ladi.

Nisbatan ko‘proq ishlatidigan texnetsiy izotopidir.  $m$  – izotopning metastabilligini ko‘rsatadi. Texnetsiy  ${}^{99m}$  m yuqori energiyali nurlar chiqaradi, lekin nisbatan qisqa 6,01 ga teng yarim emirilish davriga ega. Bu xossalari izotopni tabiiy sharoitda  $\gamma$  nur-energiya sifatida tanadan 24 s ichida chiqib ketishi sababli ishlatilishiga qiziqish uyg‘otadi. Shuning uchun ham yadro meditsinasida bosh miya, suyaklar, qon, o‘pka, jigar, yurak, qalqonsimon bez va buyraklarni vizualizatsiya va funksional tahlil qilish uchun, radiofarmpreparatlar sifatida keng ishlatiladi.

Texnetsiy  ${}^{99m}$  m atom elektrstansiyalarida to‘planadi, foydaliroq laboratoriyada  ${}^{99}\text{Mo}$  izotopining emirilishidan generatsiya qilinadi.  ${}^{99}\text{Mo}$  ning yarim emirilish davri 66 soat bu esa uni ga nisbatan transportirovkasini yaxshiligidan dalolat beradi. Ko‘pchilik generatorlar  $\text{Al}_2\text{O}_3$ ga adsorbsiyalangan molibdat ion shaklidagi  ${}^{99}\text{Mo}$  asosida bo‘ladi.

${}^{99}\text{MoO}_4^{2-}$  qumtuproq bilan kamroq bog‘langan  ${}^{99m}\text{TcO}_4^-$  ga aylanadi. Steril  ${}^{99}\text{Mo}$  ga immobillangan kolonkada fizrastvor bilan yuviladi, boshqa og‘ir elementlar sintezi uchun yig‘iladi.

## Vodorodsimon atomlarning tuzilishi

Davriy jadvalda elementlarning joylashuvi atomlarning elektron tuzilishidagi davriy o'zgarishlarni namoyon qiladi. Dastlab, faqat bitta elektroni bor vodorod atomlarini yoki vodorodsimon atomlarni ko'rib chiqiladi, bunda murakkab effektlar elektron- elektron itarilishiv ta'sirlarni etiborga olinmaydi. Shuningdek, vodorodsimon atomlarga vodorod atomlarining o'zi, hamda  $\text{He}^+$  va  $\text{C}^{5+}$  (yulduzdan topilgan)ionlari ham kiradi.

Keyin bunday atomlar to'risidagi tamoyil bir necha elektronlari bo'lgan atomlarni yani ko'p elektronli atomlarning tuzilishini bayon qilishda ishlatiladi.

### 1.3. Spektroskopik ma'lumot

Qachonki elektr zaryad vodorod gazi orqali o'tsa elektromagnit nurlanish tarqaladi. Ular prizma yoki difraksion panjara orqali o'tadi, bu radiatsiya komponentlarini bir qanchasi topilgan: elektromagnit spektrining bitta ultrabinafsha sohasi, bitta ko'zga ko'rinadigan sohasi va bir nechta infraqizil sohalari.(1.3 shakl, 1.3 quti.).

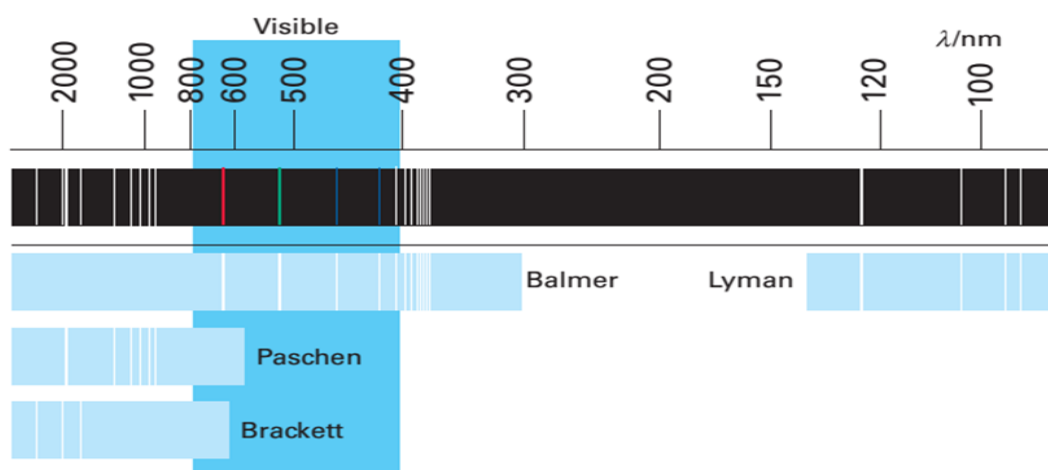
#### *Keys 1.3 Natriyli yoritish lampalari.*

*Atomlarningyorug 'liktarqatishidanfoydalanibdunyoingko 'pjoylaridako 'chalarn iyoritishdafoydalaniladi.*

*Ko 'chasariqlampalriganatriyatominigto 'lqinlaridankengfoydalaniladi. Past bosimli natriy lampalari shisha naychasi indiy qalay oksidi bilan qoplangan,  $\text{In}_2\text{O}_3$  ning mustahkamligi tarkibida 10%  $\text{SnO}_2$  borligidir. Indiy qalay oksidi infraqizil nurlanish aks ettiradi va ko'rinadigan yoru'lik uzatadi. Ichki ikki shisha naychada qattiq natriy va biroz miqdorda neon va argon bor, neon nurini biroz o'tkazishi aniqlangan. Chiroq yoqilganda neon va argon qizil nurlar chiqaradi, natriy metali esa isitadi. 3p dan 3s ga o'tganda sariq nur energiya chiqaradi va elektr zaryadi qo'zg'algan holatga o'tganda natriy tez bug'lana boshlaydi. Natriy lampalarining boshqalaridan afzalliklari ular vaqt o'tgan sari o'z yoritish kuchini kamaytirmaydi. Shu bilan birga ular iqtisodiy va energetik afzalliklarga egadir.*

## Vodorod atomining spektri

Vodorod molekulasidan elektr uchqunlari o'tkazilganda, molekula atomlarga parchalanadi va o'zidan elektromagnit nurlarini ajratib chiqaradi. Bu hodisa prizma orqali kuzatilganda esa, tarqalayotgan nurlar bir nechta seriyalardan tashkil topganini guvohi bo'lishimiz mumkin. Masalan, bir qismi Ultrabinafsha sohada ajralib chiqadigan bo'lsa, yana boshqa nurlarning ajralish ko'rish sohasiga to'g'ri keladi, qolgan qismi esa Infracizil sohada spektr beradi.



1.2-rasm. Vodorod atomining spektri va seriyali analizlari

XIX asrda Jon Ridberg zarrachaning to'liq uzunligining matematik ifodasini quyidagicha taklif etdi.

$$1/\lambda = R(1/n_1^2 - 1/n_2^2) \quad (1.1)$$

R – Ridberg doimiysi ( $1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ).

$n$  – bosh kvant soni

$n_1 = 1$  qiymatda *Layman seriyasi* deb ataladi va Ultrabinafsha sohada yotadi.

$n_1 = 2$  qiymatda *Balmer seriyasi* deb ataladi va ko'rish sohada yotadi.

$n_1 = 3$  qiymatda *Pashen seriyasi* deb ataladi va Infracizil sohada yotadi.

Spektr chiziqlarining hosil bo'lishi elektronning  $-hcR/n_2^2$  holatdan,  $-hcR/n_1^2$  holatga o'tishi bilan tushuntiriladi. Bu holatlar o'rtasidagi farq ( $hcR(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$ ) esa foton energiyasiga ( $hc/\lambda$ ) teng bo'ladi. Yuqoridagi ikki ifodalarni tenglab 1.1 tenglikni hosil qilishimiz mumkin.

#### 1.4. Kvant mexanikasining asoslari

1924- yilda Lyu de Broyl fikricha foton o'zida ham zarracha, ham to'liqin xossasini namoyon qiladi, ya'ni **dualizm** hususiyatiga ega. Fotonning zarracha hususiyatiga ega ekanligini elektromagnetik nurlanish tushuntirib bersa, uning to'liqin xossalari o'zida mujassamlashtira olishini difraksiya va interferensiya hodisalari izohlab beradi. Elektronning **dualistik** xossasidan quyidagicha xulosa chiqarsak bo'ladi: bir vaqtning o'zida harakatlanayotgan zarrachaning ham aniq trayektoriyasini, ham uning tezligini aniqlashning iloji yo'q, ya'ni uning koordinatalarini qanchalik aniqlikda hisoblanadigan bo'lsa, uning tezligi shuncha noaniqlikda aniqlanadi, va huddi shu tarzda uning tezligi qanchalik aniqlikda aniqlansa, uning trayektoriyasida shuncha noaniqlik bo'ladi. Ushbu nazariy cheklanishni anglatadigan prinsip, **Geyzenbergning noaniqlik prinsipi** deyiladi.

Keyinchalik Shredinger elektronning tabiatini izohlash maqsadida **to'liqinfunksiyasi** tushunchasini kvant mexanikasiga kiritdi va o'zining tenglamasini taklif qildi.

$$\overbrace{-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\psi}{dx^2}}^{\text{Kinetic energy contribution}} + \overbrace{V(x)\psi(x)}^{\text{Potential energy contribution}} = \overbrace{E\psi(x)}^{\text{Total energy contribution}}$$

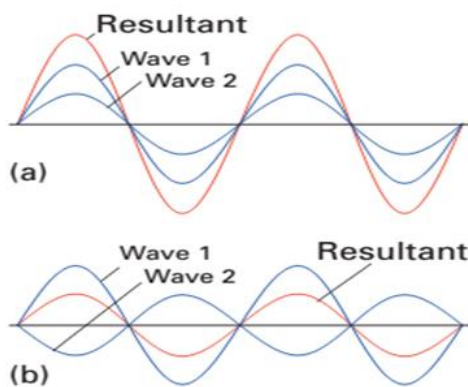
$m_e$  – elektronning massasi

$V$  – elektronning potensial energiyasi

$E$  – umumiy energiya

To'liqin funksiyasi elektronning barcha dinamik ma'lumotlarini, uning qayerda ekanligidan tortib, qanday holatda turganiga qadar ko'rsatib beradi. Elektronning joylashgan koordinatalari to'liqin funksiyasining kvadratlari bilan aniqlanadi,  $\Psi^2$ . Tajribalarga ko'ra,  $\Psi^2$  qiymati yuqori bo'lgan sohalarda elektronning bo'lish ehtimolligi yuqori, biroq  $\Psi^2$  qiymati nol bo'lgan sohada elektron aniqlanmagan.  $\Psi^2$  ning qiymati **elektronning nisbiy zichligi** deb ham ataladi.  $\Psi^2$  ning qiymati birga, ya'ni elektronni ma'lum bir sohadan topish ehtimolligi yuz foizga teng bo'lgan funksiyalar *normallashtirilgan to'liqin funksiyalar* deb ataladi.





1.3-rasm. Fazoda to‘lqin funksiyalarining kesishishi

(a) Agar to‘lqinlar bir sohada tarqalsa, natijaviy to‘lqin amplitudasi oshadi.

(b) Agar to‘lqinlar bir sohada tarqalmasa, natijaviy to‘lqin amplitudasi kamayadi.

Boshqa to‘lqinlar kabi to‘lqin funksiyasi ham musbat va manfiy ishorali amplitudalarga ega bo‘lishi mumkin. To‘lqinning ishorasi kesishuvchi to‘lqinlarning amplitudasini belgilab beradi. Masalan, bir fazoda bir xil ishorali to‘lqinlar kesishganda ularning amplitudasi ortadi, ammo turli ishorali to‘lqinlarning kesishishi ularning amplitudasi kamayishiga olib keladi. Bir xil turdagi to‘lqinlarning uchrashishi **konstruktiv interferensiya** deb ataladi. Har xil ishorali to‘lqinlarning uchrashishi esa **destruktiv interferensiya** deb ataladi. Bu kabi hodisalar kimyoda juda katta ahamiyatga ega, chunki to‘lqin funksiyalarning interferensiya hodisasi, amplitudasi kimyoviy bog‘ni tafsiflashda juda muhim vositalar hisoblanadi.

### 1.5. Atom orbitallari

Atomdagi elektronning to‘lqin funksiyasi **atom orbitallari** deb ataladi.

a) Vodorodsimon atomning energetik pog‘onalari

Elektronning to‘lqin funksiya qiymatlari **kvant sonlaridan** foydalanib, Sheredenger formulasi yordamida aniqlanadi. Ushbu kvant sonlari  $n$ ,  $l$ ,  $m_l$  bilan belgilanadi. Bu yerda  **$n$  – bosh kvant soni**,  **$l$  – orbital kvant soni** va  **$m_l$  – magnit kvant soni**. Har bir kvant soni elektronning fizik hususiyatlarini tafsiflab beradi, masalan:  $n$  – energiyani,  $l$  – orbitallning magnit burchak momentini,  $m_l$  – burchak momentining orientatsiyasini ko‘rsatib beradi.

Zarrachani energiyasi bosh kvant soning qiymatiga qarab turlicha o‘zgarishi mumkin:

$$E_n = -\frac{\hbar c R Z^2}{n^2}$$

bu yerda  $n = 1, 2, 3, \dots$  va

$$R = -\frac{m_e e^4}{8 \hbar^3 c \epsilon_0^2}$$

**R - Ridberg doimiysi** bo'lib, o'zgarmas qiymatga ega ( $1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ ).  $n$  ning qiymati qanchalik katta bo'lsa, elektron va yadro o'rtasidagi bog'lanish energiyasi shunchalik kichik bo'ladi.  $n$  cheksizlikka intilganda esa energiya nolga intiladi. Buning asosiy sababi formuladan ko'rinib turganidek, zarrachaning energiyasi  $1/n^2$  ga proporsionaldir.

$l$  ning qiymati magnit momentining orbital burchagini anglatadi, va quyidagi formula orali aniqlanadi:  $\{l(l+1)\}^{1/2} \hbar$ , bu yerda  $l = 0, 1, 2, 3 \dots$

$m_l$  – magnit kvant soni, yuqorida aytib o'tganimizdek, momentning orientatsiyasini belgilab beradi.

b) Poq'onalar, pog'onachalar va orbitallar

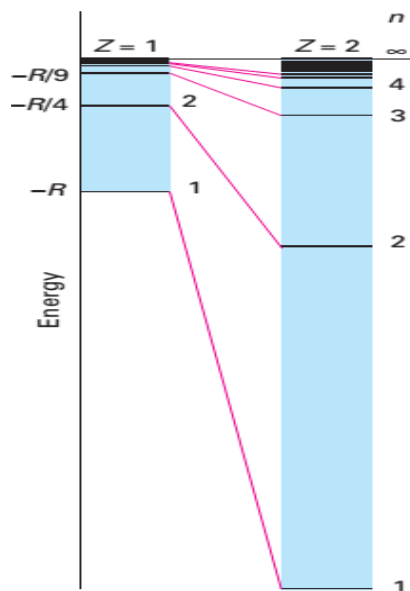
Bosh kvant soni atomdagi qobiqlar sonini bildiradi,  $n$  qiymati teng, ya'ni bir qobiqda joylashgan orbitallar deyarli bir xil energiyaga ega bo'ladi.  $n = 1, 2, 3, \dots$  yoki K, L, M ... kabi belgilanadi.

Elektron qobiqlar o'z navbatida orbitallardan tashkil topgan, orbitallar  $l$  bilan belgilanadi.  $l$  soni ( $l = 0, 1, \dots, n-1$ ) bosh kvant sonidan bir birlikka kichik bo'ladi.

$n = 1$  bo'lganda  $l = 0$

$n = 2$  bo'lganda  $l = 0, 1$

$n = 3$  bo'lganda  $l = 0, 1, 2$



1.4-rasm. Vodorod atomining  $H(Z=1)$   $He^+$  ( $Z=2$ ) ioni kvantlangan energetik pog'onalari

l ning qiymati	0	1	2	3	4	...
Orbitallar	s	p	d	f	g	...

Orbitall tarkibidagi orbitallchalar sonini aniqlash uchun quyidagi formuladan foydalaniladi :

$2l+1$ . Ushbu orbitallar **magnit kvant sonlari** bilan farqlanadi. Har bir orbitallcha  $+l$  dan  $-l$  gacha bo'lgan qiymatlarni qabul qiladi. Misol uchun d orbital uchun orbital kvant sonining qiymati  $l=2$ , demak magnit kvant sonining qiymatlari  $m_l = +2, +1, 0, -1, -2$ .

### c) Elektron spin

Yuqorida aytib o'tilgan uchta kvant sonlari doimo ham barcha elektronlarni tafsiflab berish uchun yetarli bo'lavermaydi. Masalan, ikki elektronli atomlarda, ikki elektron bir orbitalchada joylashadi, lekin ular o'zlarining yo'nalishlari bilan farq qiladi. Shunday holda bu farqni tafsiflash uchun to'rtinchi kvant sonini – **spin kvant sonini** kiritamiz. Spin kvant soni  $s$  yoki  $m_s$  bilan belgilanadi va elektronning yo'nalishini belgilab beradi (misol uchun: soat strelkasi bilan yoki soat strelkasiga qarshi harakatlanishi). Spin kvant soni  $\frac{1}{2}$  qiymatini qabul qiladi va  $\{s(s+1)\}^{1/2}\hbar$  orqali aniqlanadi. Spin kvant soni faqat ikki qiymatni qabul qilishi mumkin ya'ni  $+1/2$  va  $-1/2$ . Ushbu qiymatlar odatda chiziqlar bilan ifodalanadi, masalan  $\uparrow$  holatda  $m_s = +1/2$ ,  $\downarrow$  holatda esa  $m_s = -1/2$  qiymatlarni qabul qilsin.

#### **1.1 Misol. Kvant sonlarni aniqlash.**

**Qaysi orbital  $n=4$  va  $l=1$  bilan belgilanadi? Qaysi pog'onaga to'g'ri keladi?**

**Javob.** Biz pogo'nalarni  $n$  va pogonachalarni  $l$  bilan belgilaymiz.  $L=1$  bolganda p pog'onachag to'g'ri keladi. Bu bizga  $m_l = l, l-1, \dots, -l$  qiymatni orbital turiga qarab beradi. Yacheykalarga  $m_l = +1, 0$  va  $-1$  holda joylashadi. Bular 4p pog'onachaga to'g'ri keladi.

**Topshiriq. Qaysi orbital  $n=3$  va  $l=2$  bilan belgilanadi? Qaysi pog'onaga to'g'ri keladi?**

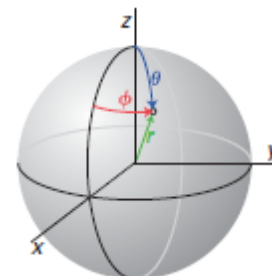
spin ikki kvant son  $s$  va  $m_s$  bilan tasvirlanadi. Uning ishorasi l orbital kvant songa o'xshash lekin o'zgarmas  $s = 1/2$  ning ahamiyatligi spin juda kichik qiymat  $\{s(s+1)\}^{1/2}\hbar$  ni beradi shuning uchun ko'p hollarda

Doimiyholda  $\frac{1}{2}\sqrt{3}\hbar$  dan foydalaniladi.

Ikkinchi kvantson magnit kvantson  $m_s$  bo'lib,

u faqat ikki qiymatga ega  $+1/2$  (soat strelkasibo'yicha) va  $-1/2$  (soat strelkasiga teskari).

Ko'pincha bu ikki qiymat  $\uparrow$  (yuqoriga spin  $m_s = +1/2$ ) va  $\downarrow$  (pastga spin  $m_s = -1/2$ ) yoki Grek yozuvida  $\alpha$  va  $\beta$  ko'rinishida ko'rsatiladi.



1.6-rasm. Sferik kутбли координаталар

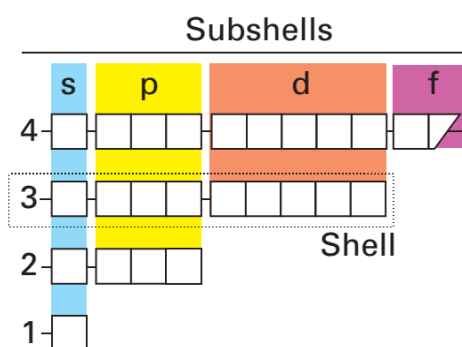
Chunki elektron atomatrofida ikki yo'nalishdagi harakat qilish mumkin. Vodorod atomida elektron kvant sonlari 4 ta, misol uchun  $n, l, m_l$  va  $m_s$  (beshinchi kvant son  $s$  doimiy  $1/2$ ).

### d) Vodorodsimon atom orbitallarining radial funksiyalari

Yadroning kulon potentsiali sferik simmetriyaga ega ekan ( $Z/r$  ga proporsional va yadroga nisbatan orientatsiyasiga bog'liq emas) orbitallarni 1.6 rasmda ko'rsatilgan sferik koordinatalarda ifodalash mumkin. Bu koordinatalarda barcha funksiyalar:

$$\psi_{nlm_l} = R_{nl}(r)Y_{nl}(\theta, \phi)$$

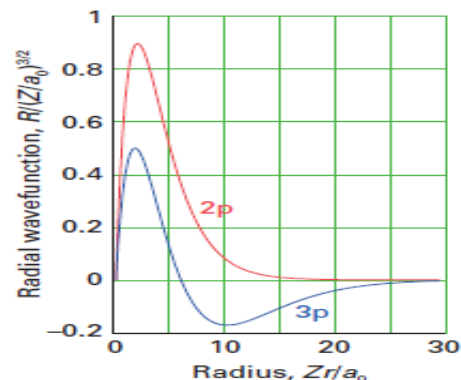
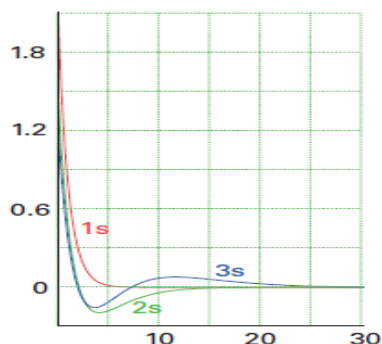
umumiy ko'rinishda bo'ladi.



1.5-rasm. Elektron qobig'ining orbital va orbitalchalarga klassifikatsiyasi

Keltirilgan formulada vodorodsimon atomlar orbitallarini radial  $R(r)$  va burchak  $Y(\theta, \phi)$  funksiyalarining ko'paytmasidan iborat deb tasavvur qilish mumkin. Radial to'liqin funksiya yadrogacha masofaga bog'liq ravishda va burchak to'liqin funksiyasi burchak koordinatalariga bog'liq ravishda orbitallarning o'zgarishini aniqlaydi. Kelgusida formulalar emas, to'liqin funksiyalarining yaqqol

namoyishidan foydalaniladi. Radial to‘lqin funksiyalar nol qiymatlarga ega bo‘ladigan nuqtalar radial tugunlar deyiladi. To‘lqin funksiyalarning burchak qismi nol orqali o‘tadigan tekisliklar tugun yuzalar deb ataladi. Bir necha misollarni ko‘rib chiqamiz.



1.7-rasm. Vodorodsimon atomning 1s, 2s va 3s orbitallarining radial to‘lqin funksiyasi keltirilgan. Eslatib grafigi o‘tamizki: radial tugunlar tegishli ravishda 0, 1 va 2 kabi belgilanadi. Har bir orbital yadroga ( $r=0$ ) noldan farqli qiymatga ega.

Masofaga bog‘liq to‘lqin funksiyalar o‘zgarishi 1.7 va 1.8-rasmlarda ko‘rsatilgan.

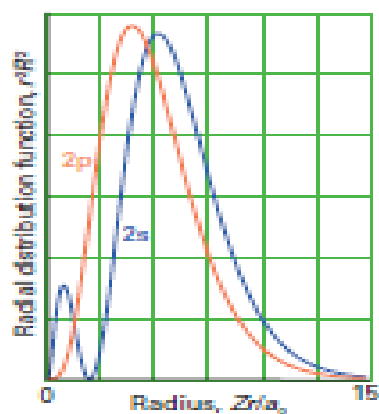
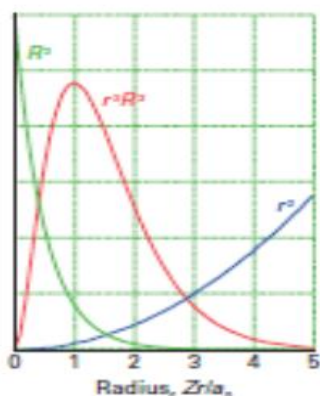
1-s orbital yani  $n=1, l=0, m_l=0$  to‘lqin funksiya yadroga nisbatan masofaga bog‘liq ravishda eksponensial kamayaadi va hech qachon nolga etmaydi.

Barcha orbitallar yadrodan etarli katta masofalarda eksponensial bog‘liqlikka ega, lekin ba’zi orbitallar yadroga yaqin nol orqali o‘tadi va demak, eksponensial bog‘liklikka o‘tguncha bir va bir necha radial (nuqtaviy) tugunlarga ega.

$n$  va  $l$  kvant sonlariga ega orbitallar umumiy xolda  $n - l - 1$  radial tugun yuzalarga ega, ular  $m_l$  ga bog‘liq emas. Masalan, 2s orbital ya’ni,  $n=2, l=0, m_l=0$  nol orqali bir marotaba o‘tadi va demak, bitta radial (nuqtaviy) tugunga ega. 3s –

Orbital nol orqali ikki marta o‘tadi va ikkita radial (nuqtaviy) tugunga ega.  $2r$  – Orbital ( $n=2, l=1$  li uch orbitallardan biri) radial tugunga ega emas. Xech bir qiymatida nolga aylanmaydi. Lekin,  $r$ -orbital  $s$ - dan tashqari barcha orbitallar kabi, yadroda ya’ni  $r=0$  da nolga teng.  $s$ -Orbital elektroni yadro yaqinida uchrasa ham, boshqa xech bir orbital elektroni u erda mavjud bo‘la olmaydi.

$s$ -Orbital radial funksiyasi yadroda nuldan farqli qiymatga ega; boshqa barcha orbitallar ( $l>0$  bo‘lganlari uchun) yadroga yaqinlashganda nolga intiladi.



1.9-расм.1s orbitalining radial taqsimlanish funksiyasi. (r-oshgan sari- oshib orbital 2s-orbitalga nisbatan boradi) va kamayuvchilarning ўrtacha yadroga yaqin. 2s-orbital samarasi o‘laroq maximum o‘tishlar yadroga nisbatan yaqin bўlgan kuzatiladi.

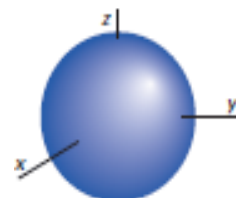
1.10-расм. Водородсимон атомнинг radial taqsimlanish funksiyasi. 2-p orbitalning radial taqsimlanish funksiyasi. 2s-orbitalga nisbatan yaqin bўlgan masofada bўlish ehtimolligi katta.

### e) Radial taqsimlanish funksiyasi.

Atomda elektron va yadro elektrostatik kuchlar bilan bog‘langan. Elektronning yadro yaqinida bo‘lish ehtimolligini bilish qiziqish tug‘diradi. Bu ma’lumot elektron bilan yadro orasidagi bog‘lanish qanchalik mustahkamligini bilishga imkon beradi.  $r$  Radiusli  $dr$  qalinlikdagi sferik qavatda elektronning to‘liq bo‘lish ehtimolligi  $\psi^2 dr$  barcha yo‘nalishlarda integraliga teng. Bu natija  $P dr$  va sferik (ya’ni burchakka bog‘lik bo‘lmagan) to‘lqin funksiya uchun quyidagicha  $P=4\pi r^2 \psi^2$  yoziladi.  $P$ - funksiya radial taqsimlanish funksiyasi deb ataladi. Agar biror rqiymatli radiusda  $P$  qiymati ma’lum (uni  $\psi$  funksiya ma’lum bo‘lsa topish

mumkin) bo'lsa, yadrodan  $r$  masofadagi  $dr$  qalinlikdagi sferaning istalgan joyida bo'lish ehtimolligini oddiy  $P$  ni  $dr$  ga ko'paytirib topishimiz mumkin.  $n$  bosh kvant sonli qavatda orbital radial taqsimlanish funksiyasi  $n-1$  sonli piklarga ega, shuningdek, yadrodan eng uzoqdagisi maksimal intensivlikka ega.

1s-Orbital yadroga nisbatan uzoqlashganda eksponensial kamayar ekan,  $r^2$  esa ortadi, radial taqsimlanish funksiyasi esa maksimum orqali o'tadi (1.9-rasm). Demak, shunday masofa borki, unda elektronni bo'lish ehtimolligi maksimal bo'ladi.



Yadro zaryadi qancha katta bo'lsa u shuncha kichik bo'ladi

(elektron yadro bilan kuchliroq ta'sirlashadi. Elektronni bo'lish ehtimolligi masofasi  $n$  ortgan sari ortib boradi, chunki energiya qancha yuqori bo'lsa elektron yadrodan uzoqda bo'ladi. Kichik energetik pog'onada vodorodsimon atom uchun elektronning eng bo'lish ehtimolligi masofasi  $P$  maksimum bo'lgan nuqtaga to'g'ri keladi.

1.11-rasm.  $s$ -orbital chegara sirti

1s-elektron uchun  $Z$  atom nomerli vodorodsimon atomda maksimum  $r_{max} = \frac{a_0}{Z}$  formula bilan aniqlanadi. Demak, 1s-elektronning bo'lish ehtimolligi masofasi atom nomeri ortishi bilan kamayadi.

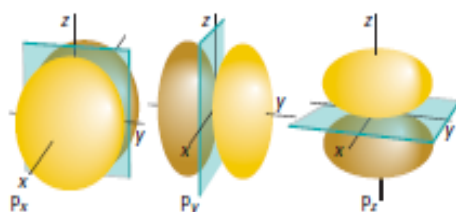
Radial taqsimlanish funksiyasi yo'nalishga bog'liq bo'lmagan holda elektronni bo'lish ehtimolligi masofasini aniqlaydi.

### **j)Atom orbitallarining burchak funksiyalari.**

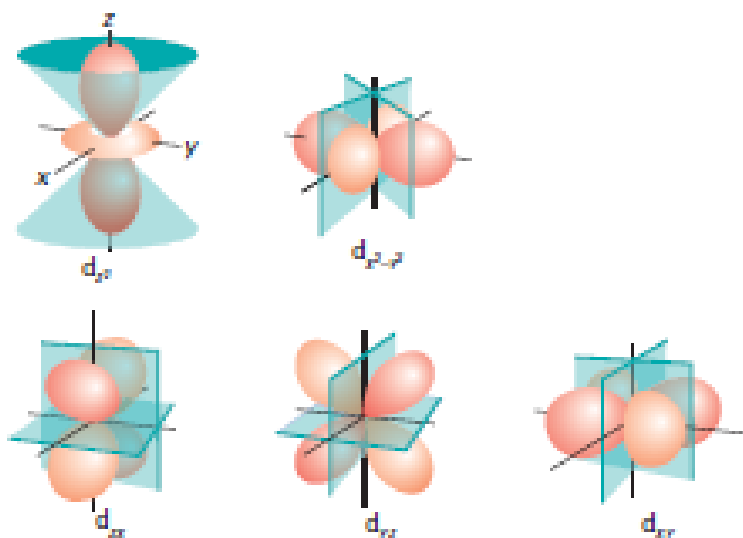
$s$ -Orbital burchak koordinatalariga bog'liq bo'lmagan holda berilgan masofada bir xil amplitudaga ega bo'ladi.

Bu  $s$ -orbital sferik simmetriyaga ega demakdir. Orbitalni markazda yadro bo'lgan sfera holida ko'rsatiladi. Orbital chegara sirti deb nomlanadigan tekislik, elektronning bo'lish ehtimolligi ko'p bo'lgan (odatda 75%) fazoni aniqlaydi. Har qanday  $s$ -orbital chegara sirti –sferadir (1.11-rasm).  $l > 0$  bo'lgan orbitallar uchun amplituda yo'nalishga bog'liq bo'ladi. Uchta  $r$ -orbitallar uchun oddiy grafik interpretatsiyasida chegara sirtlari bir xil bo'lib, ularning o'qlari dekart koordinata uchta o'qlari bo'yicha yo'nalgan bo'lib, har biri yadro orqali o'tadigan nuqtaviy

tekislikka ega (1.12-rasm). Bu esa turli qiymatli  $m_l$  orbitallar uchun  $p_x$   $p_y$   $p_z$  indekslarning paydo bo'lishini tushuntiradi. 1.12, 1.13, 1.14-rasmlarda p-, d-, f- orbitallarning chegara yuzalari keltirilgan. Eslatib o'tamiz, tipik d- orbitallar ikkita tugun yuzalar, f- orbitallar uchta tugun yuzalarga ega.

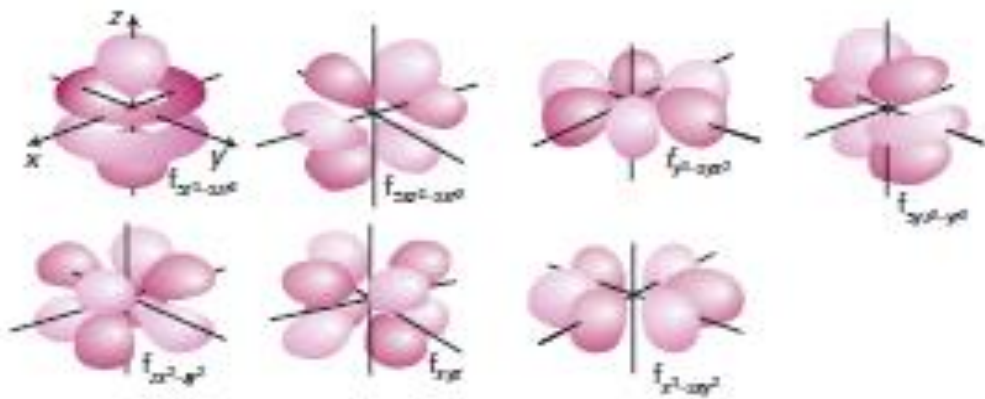


1.12-rasm. p-orbitallarining chegara yuzasi. Har bitta orbital yadrodan o'tadigan yuza tekisligi yuza qismi bo'ladi. Masalan p orbitalning tugun yuzasi bu x,y tekislik yuzasi hisoblanadi.



1.13-rasm. d-orbitallarning chegara tekisliklari ko'rinishlaridan biri. To'rtta orbitallar ikkita o'zaro perpendikulyar yadro orqali o'tuvchi tugun yuzalariga ega.  $d_{x^2}$  –orbitali uchlari yadroda birlashadigan konussimon tugun yuzalariga ega.





1.14-rasm. *f*- orbitallarning chegara yuzalari ko‘rinishlaridan biri. Ba’zi xollarda boshqa grafik tasvirlar ham uchraydi.

Orbitalning grafik tekisligi elektronning eng katta bo‘lish ehtimolligi fazosini ko‘rsatadi; *l* kvant sonli orbital *l* ta tugun yuzalarga ega.

### Ko‘p elektronli atomlar

Avval takidlanganidek, ko‘p elektronli atomlarda asosan bittadan ko‘p elektronlar mavjud bo‘ladi, He atomida ham 2 ta elektron mavjud bo‘lgani uchun uni ham ko‘p elektronli atom deb ataymiz. *N* elektronli atomlar uchun Shredinger tenglamasi echimlari barcha elektronlarning  $3N$  koordinatalarining funksiyasi bo‘ladi. Lekin murakkab funksiyalar uchun esa aniq formula chiqarishning iloji yo‘q. Kompyuter texnologiyalarining rivojlanishi programmalarining raqamli hisoblashlari aniq energiyalarga va extimollik zichliklarini qiymatlarni aniqlashga erishishga olib keladi. Bu programma shuningdek hosil bo‘lgan orbitallarning grafik tasvirini ham aks etadi, bu esa atomlarning xususiyatlarini aniqlashda yordam beradi. Noorganik kimyoda har bir elektron vodorodsimon atom orbitaliga o‘xshash orbitalda joylashishidan iborat bo‘lgan orbital yaqinlashuvdan foydalaniladi

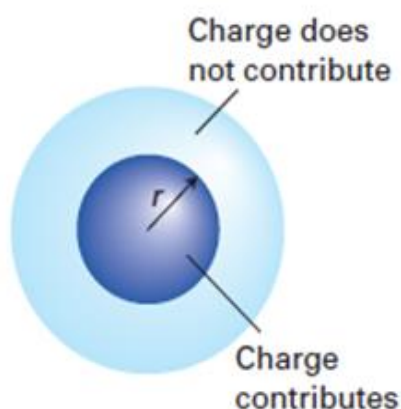
### 1.6. Kirishish effekti va ekranlanish

Asosiy holatdagi geliy atomining, yani eng kam energiya holatidagi elektron tuzilishi osonlik bilan izohlanadi. Orbital yaqinlashuvga asosan faraz qilinganda, 2 elektron H atomining 1s orbitaliga o‘xshash, lekin geliyning yadro zaryadi vodorodga nisbatan katta bo‘lgani uchun kichikroq radial taqsimlanishga ega

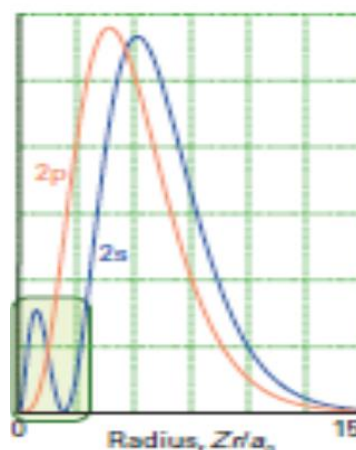
bo'lgan, sferik tuzilishidagi orbitalga joylashadi. Geliy atomi uchun 1s dagi 2 ta elektronlar holat konfiguratsiyasi  $1s^2$  hisoblanadi.

Agar davriy jadvaldagi keyingi elementga o'tilsa, litiy ( $Z=3$ ), bir necha muhim xususiyatlatga duch kelinadi.  $1s^3$  konfiguratsiyasini Pauli prinsipining fundamental xususiyatiga ko'ra rad etiladi. Unga ko'ra 2tadan ortiq bo'lmagan elektronlar bo'sh orbitalda joylashishi mumkin, va bu ikki elektronlar bo'sh orbitallarda ularning spinlar juftlari bo'yicha joylashadi. Asosan bir spinning yuqoriga qarab  $\uparrow$ , ikkinchisini esa  $\downarrow$  pastga qarab joylashishi, bu juft deyiladi  $\uparrow\downarrow$ . Ularni tasvirlashdagi boshqa yo'l esa atomdagi elektronlarni 4 xil kvant sonlari bilan tasvirlash hisoblanadi.

$1s^3$  konfiguratsiyasi Pauli prinsipi tomonidan rad etiladi, shunga ko'ra 3- elektron esa o'zidan yuqoridagi bosh katakchaka o'tadi.  $N=2$ , Shunga ko'ra 3- elektron 2s orbitalga yoki 2p orbitalga joylashadi.



1.15-rasm.  $R$  radiusli elektronni  $r$  radiusning sferasida joylashgan barcha zaryadlarning itarilishi, tashqi tomondagi zaryadlarning radiusiga ta'siri yo'qligi.



1.16-rasm.  $2s$ -elektronining ichki pogonacha orqali kirishi  $2p$  elektronlarga qaraganda kўproq, chunki  $2p$  elektronlarga qaraganda yadroga radial taqsimlanishi nol qийmatga teng. Demak,  $2s$  elektronlar  $2p$  ga nisbatan kamroq ekranlangan.

Orbital yaqinlashuvda elektron yadro atrofida sferik taqsimlangan deb, elektron itarilish hisobga olinadi, ya'ni har bir elektron, elektronlar yadroga tortilish va o'rtacha potensial itarilish bilan aniqlanuvchi maydonda harakatlanadi. Klassik elektrostatikaga asosan, sferik zaryaddan hosil bo'luvchi maydon zaryadlangan sferik maydonda joylashgan nuqtaviy zaryad hosil qilgan maydonga ekvivalent.

Nuqtaviy zaryad kattaligi, radiusi markazdan bizni qiziqtirayotgan nuqtadan markazgacha bo'lgan masofadagi sfera ichidagi to'liq zaryadga teng. Bu yaqinlashuvga asosan, elektron yadroning effektiv zaryadi ta'siri ostida bo'ladi. Yadrodan elektrongacha bo'lgan masofadagi sfera ichi zaryadidan hisoblab topiladigan bizni qiziqtirgan bu effektiv zaryad  $n$  va  $l$  qiymatlariga bog'liq, chunki elektron har xil pog'ona va pog'onachalarda turli taqsimlanish funksiyalariga ega bo'ladi. Yadro chin zaryadining effektiv zaryad qiymatigacha kamayishi ekranlanish deyiladi. Effektiv zaryad chin zaryad  $Z_e$  va ekranlanish doimiysi  $\sigma$  bilan ifodalanadi:  $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$ .

Elektron qanchalik yadroga kirib borsa  $Z_{\text{eff}}$  qiymati  $Z$  qiymatiga yaqin bo'ladi, chunki bu elektronga boshqa elektronlarning itarishishi kamroq bo'ladi. Shu nuqtai nazardan Li atomidagi 2s elektronlarni ko'rib chiqamiz. 2s elektronlarining yadroga yaqin kirishi (1s pog'ona ichiga) nol bo'lmagan ehtimolligi bor, demak, ularga to'liq zaryadi ta'sir etadi. Yadro orqali o'tuvchi tugun yuzaga ega bo'lmaganligi uchun 2p elektronlar 1s pog'onaga bunday effektiv kirib bormaydi va 1s pog'ona elektronlari bilan kuchli darajada ekranlangan bo'ladi. Xulosa qilish mumkinki, 2s elektroni past energiyaga ega bo'dadi (kuchli bog'langan) va demak, Li atomi asosiy holati  $1s^2 2s^1$ . Bu elektron konfiguratsiya  $[\text{He}]2s^1$  ko'rinishda yoziladi, bu erda,  $[\text{He}] 1s^2$  geliy atomi konfiguratsiyasini bildiradi.

Litiyning 2s orbitallari 2p orbitallariga nisbatan kam energiyaga ega. Bu 1.3- jadvalda keltirilgan ko'p elektronli atomlarining umumiy xususiyati hisoblanadi. 1.3-jadvalda bir qator atom orbitallarining asosiy holat elektron konfiguratsiyasiga to'g'ri keluvchi effektiv zaryadlari keltirilgan.

Ko'p hollarda gruppadan gruppaga o'tganda yadro zaryadining ortishi qo'shimcha elektronlar bilan kompensatsiyalanmasligi uchun davrda yadro effektiv zaryadining ortishi umumiy qonuniyat hisoblanadi.

1.2-jadvalda keltirilgan kattaliklar tashqi qavat s elektronlari shu qavat r elektronlariga nisbatan kamroq darajada ekranlanganligini ko'rsatadi. Masalan, F atomi 2s elektronlari uchun  $Z_{\text{eff}}=5,13$ , 2p elektronlari uchun esa bu qiymat kichikdir ( $Z_{\text{eff}}=5,10$ ). Analogik holda yadro effektiv zaryadi nd elektronlariga nisbatan np elektronlarida katta bo'ladi.

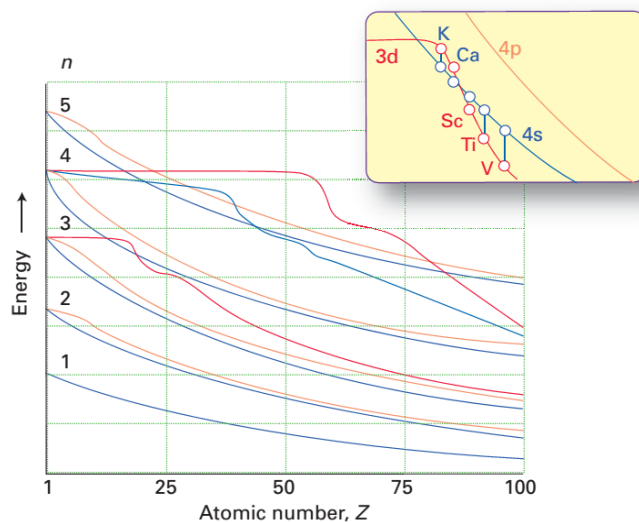
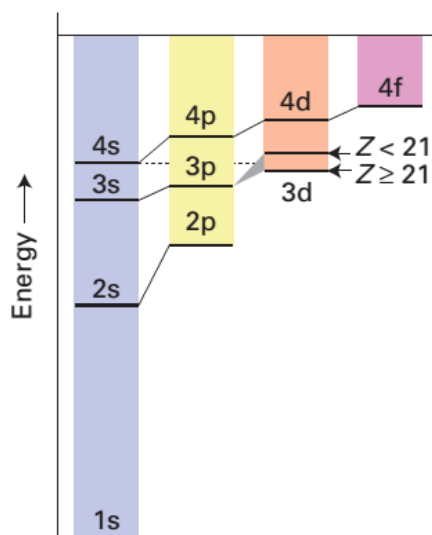
1.2-jadval

	<b>H</b>							<b>He</b>
Z	1							2
1s	1.00							1.69
	<b>Li</b>	<b>Be</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
Z	3	4	5	6	7	8	9	10
1s	2.69	3.68	4.68	5.67	6.66	7.66	8.65	9.64
2s	1.28	1.91	2.58	3.22	3.85	4.49	5.13	5.76
2p			2.42	3.14	3.83	4.45	5.10	5.76
	<b>Na</b>	<b>Mg</b>	<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Ar</b>
Z	11	12	13	14	15	16	17	18
1s	10.63	11.61	12.59	13.57	14.56	15.54	16.52	17.51
2s	6.57	7.39	8.21	9.02	9.82	10.63	11.43	12.23
2p	6.80	7.83	8.96	9.94	10.96	11.98	12.99	14.01
3s	2.51	3.31	4.12	4.90	5.64	6.37	7.07	7.76
3p			4.07	4.29	4.89	5.48	6.12	6.76

Kirish effekti va ekranlanish natijasida ko'p elektronli atomlarda quyidagi tartibda ketma-ket bo'ladi:  $ns < np < nd < nf$ .

Shuning uchun ayni qavat s orbitallari uchun eng chuqur kirishimli, f orbitalning bu xossasi eng kichik darajada bo'ladi. 1.17-rasmda neytral atom uchun energetik diagrammalarda umumiy kirish effekti va ekranlanish namoyon qilingan. 1.18-rasmda orbitallar energiyasining element atom nomeriga bog'liq ravishda o'zgarishi ko'rsatilgan orbitallar energiyasi farqi ko'pincha juda kichik, shuning uchun orbitallar tartibi atomdagi elektronlar miqdoriga bog'liq. Masalan,

kirish effekti K va Ca misolida yaqqol namoyon bo‘ladi: ular uchun 4s orbitallar 3d orbitallarga nisbatan quyida joylashgan. Element atomlarida Ga dan boshlab 3d orbitallar sezilarli darajada 4s orbitallardan quyida joylashgan, yadrodan eng uzoq 4s va 4p orbitallardir.



1.17-rasm.  $Z < 21$  (kalsiygacha)

bo‘lgan ko‘p elektronli atom energetik pog‘onalarning atom nomeriga energetik diagrammasi.

1.18-rasm. Ko‘p elektronli atomlarda bog‘liq ravishda joylashishi. Ajratib ko‘rsatilgan qism d-elektronlar paydo bo‘ladigan  $Z=20$  yaqinida

Skandiydan keyin joylashgan elementlarda pog‘onalar joylashishida o‘zgarishlar kuzatiladi. Bu diagramma elektron pog‘onalar to‘lishi asosiy prinsipini har bir orbitalga faqat ikkita elektron joylashishi inobatga olib, namoyon qiladi. Shunday qilib, agar yadro effektiv zaryadi ma’lum bo‘lsa, atom orbitallari taxminiy shakli joylashgan fazoni baholash va boshqa xossalarni aniqlash mumkin.

### 1.7. Elektronlarning to‘lib borish tartibi

Ko‘p elektronli atomlarning asosiy holati elektron konfiguratsiyalari spektroskopiya tomonidan eksperimental anuqlanadi. Ularni hisoblashda biz orbitallardagi kirish effekti, ekranlanish, hamda Paulining istisno tamoyilini ikkalasini ham hisobga olishimiz kerak. Bu asosiy holatga tog‘ri keladigan qulay

konfiguratsiyaga olib keladi va davriy jadvalni tuzulishini va ahamiyatini tushunish uchun nazariy asos bo'ladi.

### Elektron asosiy holati konfiguratsiyasi

To'lib borish tartibiga ko'ra, neytral atomlar orbitallari to'lib borish tartibi kirish effekti va ekranlanish bilan aniqlanadi

To'lib borish tartibi: 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 4s, 3d, 4p, 5s, 4d.

Har bir orbitalda ikkita elektron joylasha oladi. Shunday qilib uchta orbitalda ko'pi bilan oltita elektron va beshta orbitalda ko'pi bilan o'nta elektron joylasha oladi. asosiy holat konfiguratsiyasi birinchi beshta elementda quyidagicha bo'ladi

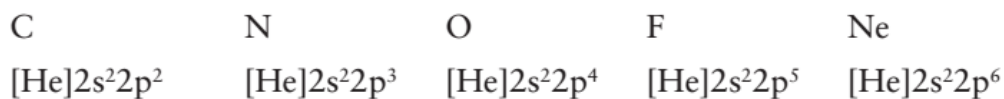
H	He	Li	Be	B
1s <sup>1</sup>	1s <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>1</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup>	1s <sup>2</sup> 2s <sup>2</sup> 2p <sup>1</sup>

Bu tartib tajriba bilan tog'ri keladi. C va B atomlarida 2p orbitallarning to'lishi boshlanadi va bittadan ko'p orbital to'lishi mumkin, bu holda Gund qoidasidan foydalaniladi. Agar bir necha orbital bir xil energiyaga ega bolsa, orbitallar har xil orbitallarga joylashadi. ***Ayni pog'onachada turgan elektronlar mumkin qadar juftlashmaslikka yani spinlarning yig'indisini mumkin qadar kattalashtirishga intiladi.***

Bir xil energiyali turli orbitallarining to'lishini ( $p_x$  va  $p_y$  kabi) har xil fazo bo'lagidagi elektronlar orasidagi (har xil orbitallardagi) itarilish, bir xil fazo bo'lagi (bir orbitaldagi elektronlar) itarilishidan zaifroq ekanligi bilan tushuntiriladi. Spinlarning parallel bo'lishi talab etilishi, parallel spinli elektronlarning bir- biridan qandaydir masofada joylashishi, demak, kamroq itarilishi kvant mexanik spin korrelyasiya effekti natijasidir.

To'lish tartibi asosiy prinsipiga asosan, uglerod atomining asosiy holati elektron konfiguratsiyasi  $1s^2 2s^2 2p_x^1 2p_y^1$  yoki qaysi p orbital birinchi navbatda to'lishi ahamiyatga emas, chunki ular ayniy orbitallardir. Odatda, alfavit tartibi  $p_x p_y p_z$  qilingan. Agar geliysimon qavatni ajratilsa ( $1s^2$ ) yozuv yanada qisqa bo'ladi [He]  $2s^2 2p^2$  va atomning elektron tuzulishi yopiq elektron qavatini o'rab turgan 2ta

s va ikkita p elektronlardan iborat deb, hisoblash mumkin. davrning boshqa elementlari uchun elektron konfiguratsiya:



Neon atomi 2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup> konfiguratsiyasi ya'ni elektron bilan to'liq bo'lgan qavat yana bir elektron qavati misolidir.

1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup> konfiguratsiyasi ichki qavatni ifodalaganda [Ne] ko'rinishida yoziladi. Natriy atomi asosiy holati inert gaz qavatiga yana bir elektronni qo'shish bilan hosil qilinadi. Bu yozuvdan tashqi elektron qavatda bitta elektronni borligini ko'rish mumkin. Keyingilarida esa, elektron orbitallarini to'lib borishi analogik ketma-ketligini ko'rish mumkin. 3s va 3p to'liq bo'lganda inert gaz argon konfiguratsiyasi [Ar] bilan belgilanadigan hosil bo'ladi [Ne] 3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>. 3d-orbitallar yuqori energiyaga ega bo'lishi uchun bu konfiguratsiya juda barqaror. Bundan tashqari keyingi tartibda 4s orbitallar to'ladi, shuning uchun K atomi konfiguratsiyasi tashqi elektron pog'onada bitta elektronli Na atomi bilan analogikdir va [Ar] 4s<sup>1</sup> holida yoziladi. Keyingi elektron esa Ca atomida 1s orbitalga [Ar] 4s<sup>2</sup> Mg atomiga o'xshash konfiguratsiya hosil qilib joylashadi. Lekin, tajriba natijalariga ko'ra keyingi element skandiyda 3d qavatcha to'ladi. Bu elementdan d-bloki elementlari boshlanadi.

Davriy sistema d-bloki elementlarida elektronlar to'lib borishi asosiy prinsipga asosan d-orbitallar to'la boshlaydi. 1.19- va 1.20-rasmlarda elektron itarilishsiz orbitallar energetik qavatlari keltirilgan. Ko'pincha d-elementlari uchun spektroskopiya ma'lumotlari va (detal hisoblashlar) energiyasi yuqoriroq 4s orbitallarning to'lishini ko'rsatadi. Bunday tartibdagi energiya bo'yicha yuqori orbitallarning to'lib borishi birinchi navbatda bu holda elektronlararo itarilishi energiyasi past 3-d orbitallar to'lganda kuchliroq bo'lgan elektronlararo itarilishning kamayishi bilan tushuntiriladi.

Elektron konfiguratsiyaga nafaqat bir elektronli orbitallar barcha energiyalarni hisobga olish kerak. Spektroskopik ma'lumotlar d-bloki asosiy holat

konfiguratsiyalarini  $3d^{10}4s^2$  holatda, 3d- orbitallar kichikroq energiyaga ega bo'lsa ham, 4s orbitallar to'lgan holda bo'lishini ko'rsatadi.

Ba'zi hollarda bir elektronning s qavatdan d-qavatga o'tishi bilan d-qavatning yarim to'lishi yoki to'liq to'lishi bilan to'liq energiyaning kichik bo'lishiga erishish ahamiyatga ega hisoblanadi. Demak, d-blok o'rtasida asosiy holat  $3d^44s^2$  (Cr uchun) emas,  $3d^54s^1$  bo'ladi. d-bloki shuningdek,  $3d^94s^2$  bilan emas,  $3d^{10}4s^1$  (Cu uchun) yakunlanadi. Analogik holat f-orbitallar to'lib boruvchi f bloki elementlari uchun ham kuzatiladi va d elektronlar f-orbitalga  $f^7$  va  $f^{14}$  konfiguratsiyalar hosil qilib ko'chadi. Masalan, Cd uchun asosiy holat  $[Xe] 4f^6 5d^2 6s^2$  emas  $[Xe] 4f^7 5d^1 6s^2$ dir.

### 1.8. Elementlar klassifikatsiyasi

Odatda bu bo'linish metall va metallmaslarni o'z ichiga oladi. Metall elementlar (shuningdek temir va mis) o'ziga xos yaltiroqlik, bolg'alanuvchan, egiluvchan, yuqori temperaturada suyuqlanuvchan qattiq moddalarni o'z ichiga oladi. Metalmaslar odatda gaz (kislorod), suyuq (brom), va qattiq (oltingugurt) elektr tokini sezilarli darajada o'tkazmaydi. Bu klassifikasiya asosida elementlar kimyoviy xossalari yotadi.

1. Metallar metalmas bilan birikib, odatda uchmaydigan qattiq moddalarni hosil qiladi (masalan, natriy xlorid).
2. Qachonki, bir metalmas boshqasi bilan biriksa ko'pincha uchuvchan molekulyar birikmalar hosil qiladi (masalan fosfor uch xlorid).
3. Qachonki, metallar bir biri bilan bog'lansa o'ziga xos fizik xossalarga ega bo'lgan qotishmalar hosil qiladi (masalan jez mis va ruxdan iborat).

Ayrim elementlar ham metallik ham metalmaslik xossalarni namoyon qiladi. Bunday elementlar amfoterlar yoki metalloidlardir deb ataladi. Amfoterlarga misol qilib germaniy, kremniy, mishyak va tellurlarni kiritish mumkin.



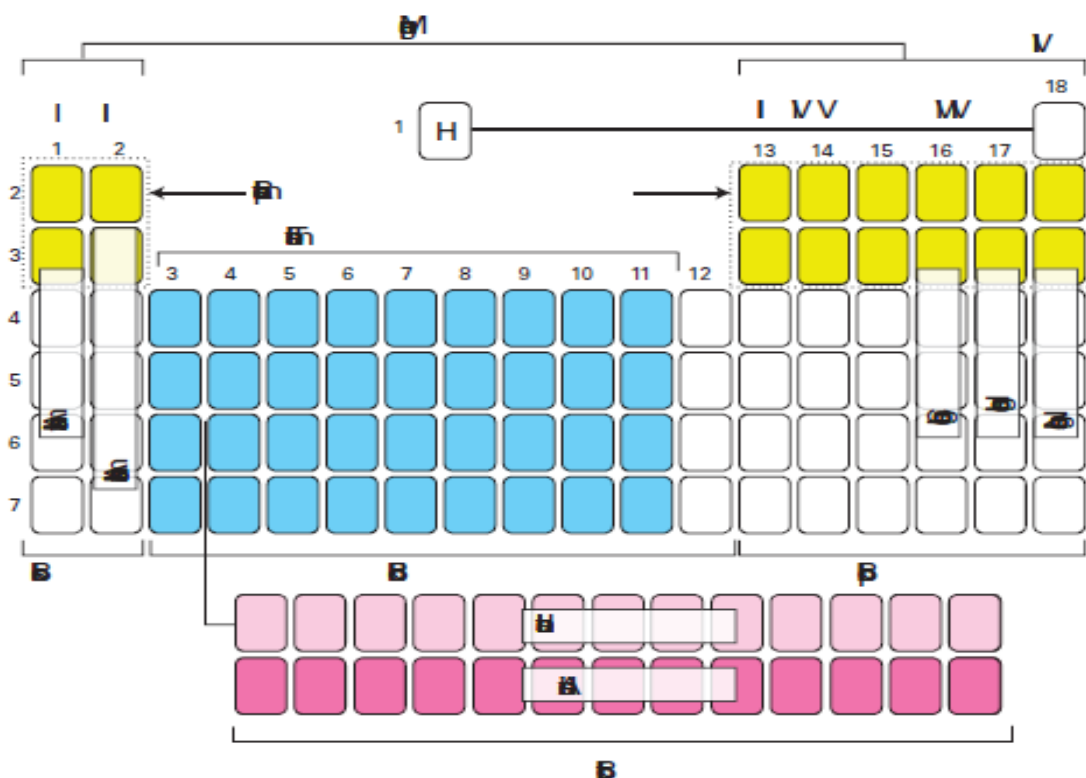
### (a) Davriy sistema

Elementlarning klassifikatsiyasini mukammal o'rganib Dmitriy Mendeleev 1869 yilda davriy jadvalni ishlab chiqdi; bu jadval kimyoviy elementlar oilalarining davriy sistemasi edi. Mendeleev ma'lum elementlarning atom og'irliklariga (molyar massa) qarab joylashtirdi. Ushbu qonun natijasida kimyoviy xossalari o'xshash bo'lgan elementlar bir oilaga ajratib jamlangan, har bir ajratilgan oilalar davriy sistemada guruhlariga ajratilgan. Misol uchun, C guruhchasi C, Si, Ge, va Sn larning H bilan hosil qilgan gidridlarining umumiy formulasi  $\text{EH}_4$  bo'ladi, buni boshqa guruhlariga ham taklif qilsa bo'ladi. N guruhchasi N, P, As va Sb larning gidridlarining umumiy formulasi  $\text{EH}_3$  bo'ladi. Boshqa elementlar bilan birikmalari oilalarda o'xshashligini ko'rsatadi, shuningdek  $\text{CF}_4$  va  $\text{SiF}_4$  bir guruhni formulasi, va  $\text{NF}_3$  va  $\text{PF}_3$  ikkinchi guruhga kiradi. 1.19 rasmda molyar hajmlarining (1 mol atom hajmi atom nomeriga bog'liq) o'zgarishining klassik misoli keltirilgan:

Mendeleev davriy sistemasining o'sha vaqtda noma'lum bo'lgan elementlarga xali to'lmagan kataklarga to'g'ri kelishini oldindan aytib kimyoviy xossalarini oldindan bashorat qildi. Masalan, jadvaldagi o'rniga qarab hosil qilishi mumkin bo'lgan bog'lar sonini bashorat qildi. Davriy sistemadan analogik xulosalar chiqarish noorganik ximiklar tomonidan birikmalarning fizik-kimyoviy xossalarini o'zgarish qonuniyatlarini tushuntirishda, hamda noma'lum moddalar (birikmalar) sintezini ishlab chiqishda hozirgi kungacha ishlatiladi.



Valent qobig‘idagi elektronlar soni: G G-10 G



1.20-rasm. Davriy sistemaning asosiy shakli

Bu ifodaga asosan, d-blokning elementlari “valent qobig‘i”  $(n-1)$  va  $ns$  d orbitaldan tashkil topganligi, shuning uchun Sc atomida uchta valent elektronlar mavjud (2ta  $4s$  va 1ta  $3d$  elektron). p- blok Se elementi valent elektronlar soni (16 guruh)  $16-10=6$  bo‘di, har birining konfiguratsiyasi  $s^2p^4$  holatda bo‘ladi. Talliy uchinchi guruhda shuning uchun u 3 ta valent elektronlari bor.

Davriy sistema bloki bir turdagi orbitallar to‘lib boradigan elementlarni o‘z ichiga oladi. Davr nomeri valent qobig‘i bosh kvant soniga to‘g‘ri keladi, grupp nomeri valent qobig‘idagi elektronlar sonini ko‘rsatadi.

### 1.9. Atomning asosiy xususiyatlari

Atomning asosiy xarakteristikalarining o‘ziga xosligi atom nomerlari o‘zgarishi bilan ularning davriy o‘zgaruvchi radiusi va elektronlarni biriktirib olishi va berishi jarayonlari bilan bog‘liq bo‘lgan energiyalari bilan ko‘rsatiladi. Atomlarning xususiyatlari o‘rganish elementlarning kimyoviy xususiyatlarini tushunishimizda katta ahamiyatga ega. Bu o‘zgarishlarni bilish kimyogarlar uchun

har bir elementning kimyoviy va strukturaviy xususiyatlarini jadval ma'lumotlarisiz oldindan aytish imkoniyatini beradi.

### a) Atom va ion radiuslar

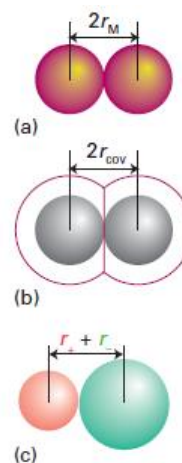
Elementlarning atom xarakterlaridan eng muhimlaridan biri bu atomlarining va shuningdek ionlarining o'lchamidir. Buni esa keying boblarda to'liqligicha ko'rib chiqamiz.

Atom tuzilishi kvant nazariyasi atom va ionlar radiuslarining aniq qiymatlarini bera olmaydi, chunki katta masofalarda elektron to'liqin funksiyasi yadroga nisbatan masofa ortgani sari eksponensiyal kamayadi. Lekin radiusning aniq qiymatini olish imkoni bo'lmasa ham, ko'p elektronli atomlar bir necha elektronli atomlarga nisbatan bir qancha kattaroq ekanligini kutish mumkin. Bunday yondashuv ximiklar tomonidan empirik qiymatlar asosida atom radiuslarini aniqlashning bir necha usullarini taklif etish imkonini beradi.

Metall radiusi qattiq metallning tajribada aniqlangan eng yaqin qoshni atomlarning yadrolari markazlari orasidagi masofaning yarmi bilan belgilanadi. Buning uchun 1.21-rasmga etiborimizni qaratamiz.

Metallmas elementlarning kovalent radiuslari molekulalardagi bitta elementning qoshni atomlari yadrolari orasidagi masofaning yarmi bilan tushuntiriladi (1.21-rasm). Shuningdek, biz metallik radiusi va kovalent radiuslaridan atom radiusi haqida ma'lumot olishimiz mumkin (1.3-jadval).

Metall va kovalent radiuslarni keyinchalik oddiy atom radiuslari deb ataymiz. Element ion radiusi esa qo'shni kation va anion yadrolari orasidagi masofa bilan aniqlanadi.



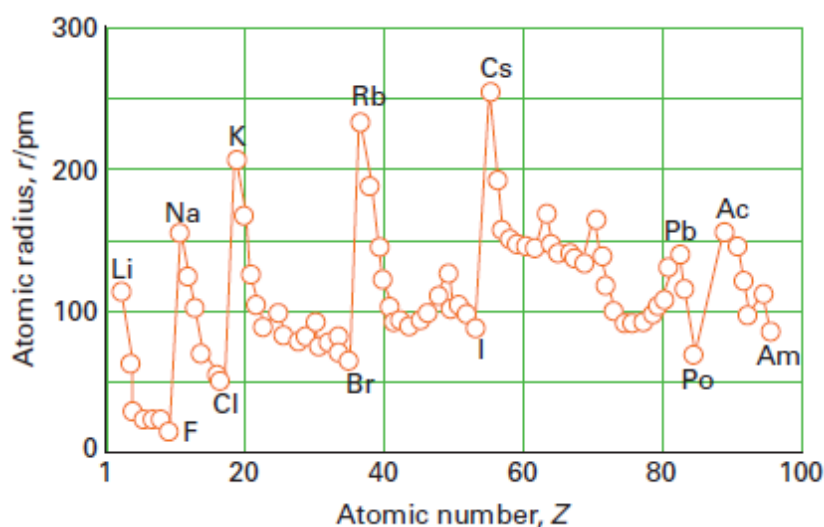
1.21-rasm. Metallik radiusi (a), kovalent radiusi (b) va ion radiusi (c) ning o'chamlari

## Atom radiuslari , r/nm

Li	Be											B	C	N	O	F
157	112											88	77	74	73	71
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl
191	160											143	118	110	104	99
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br
235	197	164	147	135	129	137	126	125	125	128	137	140	122	122	117	114
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I
250	215	182	160	147	140	135	134	134	137	144	152	150	140	141	135	133
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi		
272	224	188	159	147	141	137	135	136	139	144	155	155	154	152		

\* The values refer to coordination number 12 for metallic radii (see Section 3.2).

Metallik va kovalent radiuslardagi davriy o'zgarishni jadvaldagi malumotlardan va shuningdek 1.22-rasmdan ham yaqqol ko'rishimiz mumkin.



1.22-rasm. Davriy jadvaldagi atom radiuslarining xilma xilligi. Elslatib o'tamizki raidularning qisqarishi 6- davrdagi lantanoidlar da kuzatiladi. Metallik radiuslarini metall elementlari uchun, kovalent radiuslarni esa metallmas elementlari uchun qo'llasak bo'ladi.

1.3-jadvaldagi ma'lumotlar shuni ko'rsatadiki, atom radiuslari guruhda yuqoridan pastga ortib boradi va shuningdek davrlarda esa chapdan o'nga kamayib boradi. Bunday yo'nalishlar esa atomning elektron tuzulishi bilan

tushuntiriladi. Guruhdagi atomlarda elektronlar bilan to'lgan qavatlarning nomerlari mavjud, ularning radiuslari guruhlarda pastga o'tgan sari ortib boradi

VI davr elementlar bu umumiy qonuniyatlar qiziq va muhim chetlanishlarni namoyon qiladi. 1.19-rasmdan ko'rinadiki, d blok uchinchi qator elementlari ikkinchi qator elementlaridan, bunday elementlarning ko'p bo'lishiga qaramay metallik radiuslari juda kichik kattalikka farq qiladi.

Masalan: Mo va W larning atom radiuslari Mo ( $Z=42$ ) va W ( $Z=72$ ) mos ravishda 140 va 141 nm ga teng, vaholangki oxirgisida 32 elektronga ko'p elektronlari bor.

Guruh bo'yicha oddiy ekstropolyasiya asosida kutilgan qiymatdan kam miqdorda radius kamayishi lantanoid siqilish deb ataladi. Nomlanishi bu effekt sababini tushuntiradi.

d-blok uchinchi qator elementlari birinchi qator 4f-orbitallari to'lib boruvchi f-elementlaridan keyin kelad. Bu orbitallar kuchsiz ekranlanish qobiliyatiga ega

f-orbitaliga qo'shilayotgan elektronlar itarilishi, kattalashayotgan yadro zaryadini kompensatsiyalanishiga yo'l qo'ymaydi. Shuning uchun  $Z_{\text{eff}}$  davrda chapdan o'ngga ortadi. Kattalashayotgan yadro effektiv zaryadi barcha elektronlarga ta'sir etadi va atomning kompakt holiga olib keladi.

Analogik siqilish d-blokdan keyingi elementlar uchun ham kuzatiladi. Masalan, bordan alyuminiygacha o'tganda radius sezilarli oshsa ham ( $0,88 \text{ \AA}$  bor uchun,  $1,43 \text{ \AA}$  alyuminiy uchun), galliy radiusi alyuminiy radiusidan biroz katta. Bu effekt lantanoid siqilishga o'xshab, davr boshida joylashgan elementlar d-elektronlari kuchsiz ekranlanish xossasi bilan bog'liq bo'lishi mumkin.

Atom radiuslari ozgina qiymatga o'zgarishi ahamiyatga ega emasdek ko'rinsada, atom radiusi elementlar xossasini aniqlashda asosiy rol o'ynaydi va kichik o'zgarishlar chuqur oqibatlariga olib kelishi mumkin.

1.4-jadvaldan ko'rinadigan umumiy qonunlar barcha anionlar dastlabki atomlardan katta, barcha kationlar esa kichik (ba'zi xollarda ular yaqqol namoyon bo'ladi) bo'lishidir. Anion hosil bo'lishida atom radiusining kattalashishi -neytral

atomga nisbatan anionlarda elektronlarning kuchliroq itarilishidir. Dastlabki atomga nisbatan kation radiusining kattalashishi faqatgina elektron yo‘qotish bilan elektronlar itarilishi kamayishi bilan emas, valent elektronlarni yo‘qotganligi sababli ham sodir bo‘ladi. Bunda nisbatan kompakt elektron qobig‘i qoladi. Bu farqlarni hisobga olganda Davriy sistema ion radiuslarini o‘zgarishi elementlar atom radiuslarining o‘zgarishini ko‘rsatadi.

Atom radiusilari gruppada tepadan pastga ortadi va s va p bloklar orasida davrda chapdan o‘ngga kamayadi. f-blok elektronlaridan keyin keluvchi elementlarda atom radiusi lantanoid siqilish natijasida kamayadi. Barcha anionlar dastlabki atomlarga nisbatan katta, kationlar esa kichik.

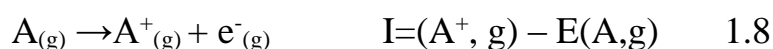
1.4 -Jadval

Ion radiusi , r/pm

<b>Li<sup>+</sup></b>	<b>Be<sup>2+</sup></b>	<b>B<sup>3+</sup></b>			<b>N<sup>3-</sup></b>	<b>O<sup>2-</sup></b>	<b>F<sup>-</sup></b>
59(4)	27(4)	11(4)			146	135(2)	128(2)
76(6)						138(4)	131(4)
						140(6)	133(6)
						142(8)	
<b>Na<sup>+</sup></b>	<b>Mg<sup>2+</sup></b>	<b>Al<sup>3+</sup></b>			<b>P<sup>3-</sup></b>	<b>S<sup>2-</sup></b>	<b>Cl<sup>-</sup></b>
99(4)	49(4)	39(4)			212	184(6)	181(6)
102(6)	72(6)	53(6)					
132(8)	103(8)						
<b>K<sup>+</sup></b>	<b>Ca<sup>2+</sup></b>	<b>Ga<sup>3+</sup></b>			<b>As<sup>3-</sup></b>	<b>Se<sup>2-</sup></b>	<b>Br<sup>-</sup></b>
138(6)	100(6)	62(6)			222	198(6)	196(6)
151(8)	112(8)						
159(10)	123(10)						
160(12)	134(12)						
<b>Rb<sup>+</sup></b>	<b>Sr<sup>2+</sup></b>	<b>In<sup>3+</sup></b>	<b>Sn<sup>2+</sup></b>	<b>Sn<sup>4+</sup></b>		<b>Te<sup>2-</sup></b>	<b>I<sup>-</sup></b>
148(6)	118(6)	80(6)	83(6)	69(6)		221(6)	220(6)
160(8)	125(8)	92(8)	93(8)				
173(12)	144(12)						
<b>Cs<sup>+</sup></b>	<b>Ba<sup>2+</sup></b>	<b>Tl<sup>3+</sup></b>					
167(6)	135(6)	89(6)					
174(8)	142(8)	<b>Tl<sup>+</sup></b>					
188(12)	175(12)	150(6)					

b) Ionlanish energiyasi

Atomdagi elektronni tortib olish uchun zarur bo'lgan energiya **ionlanish energiyasi-I** deyilib gaz fazali atomning elektronini tortib olish uchun zarur bo'lgan eng kam energiya:



Birinchi **ionlanish energiyasi I<sub>1</sub>** neytral atomdan kuchsiz bog'langan elektronni tortib olish uchun zarur bo'lgan energiya, **ikkinchi ionlanish energiya I<sub>2</sub>** hosil bo'lgan kationdan elektronini tortib olish uchun talab qilinadigan energiya hisoblanadi. Ionlanish energiyasi elektron-voltlarda (eV) o'lchanadi ammo kilojoul-mollarda ham osonlik bilan hisoblanadi (1eV= 96.485 kJ mol<sup>-1</sup>). H atomining ionlanish energiyasi 13.6 eV, shuning uchun bitta H atomidan bir elektronni tortib olish ekvivalenti mos ravishda 13.6 V ga (energiya boyicha) teng

Termodinamik hisoblashlarda ko'pincha **ionlanish entalpiyasini jarayon standart entalpiyasi 298K dagi qiymatini** ishlatish qulay. Molyar ionizatsion entalpiya Ionlanish energiyasidan  $5/2RT$  ga kattaroq. Hona temperaturasida  $RT$  2.5 kJ mol teng ekan (0.026 eV ga to'g'ri keluvchi) va ionizatsion energiya tartibi  $10^2$ - $10^3$  kJ mol<sup>-1</sup> (1-10 eV) atrofida bo'lib, ionizatsion energiya va entalpiya o'rtasidagi farqni ko'pincha etiborga olmasa ham bo'ladi.

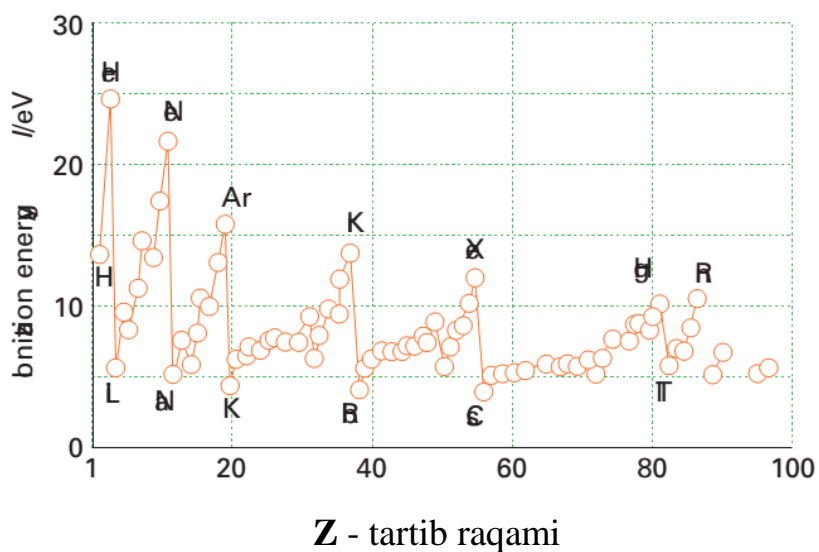
Elementning birinchi ionlanish energiyasi qiymati asosiy holatda eng yuqori ishg'ol qilingan orbital energiyasi bilan belgilanadi. Birinchi ionizatsion energiya davriy ravishda o'zgaradi (1.5-jadval), davriy sistemaning chap quyida (Cs ga yaqin) past ionlanish energiyali va eng yuqori bo'lgan ionlanish energiyasi qiymatlari o'ng yuqori tomondagi (He ga yaqin) elementlar.

Ionlanish energiya atom radiusiga bog'liq bo'lib, atom radiusi kichik elementlarning ionlanish energiyasi katta hioblanadi. Buni elektron yadroga qanchalik yaqin joylashgan bo'lsa shunchalik mustahkam bog'langanligi uchun elektronni olib tashlash uchun ko'p energiya sarflanishi bilan tushuntirish mumkin. Shu sababdan atom radiusi guruhlarda pastga qarab ortishi ionlanish energiyasi kamayib boradi, davrlarda esa chapdan o'nga o'tgan sari atom radiusi kichrayadi shu sababli ionlanish energiyasi ortadi.



## Birinchi ikkinchi uchunchi ionlanish energiyasi

<b>H</b>							<b>He</b>
1312							2373
							5259
<b>Li</b>	<b>Be</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
513	899	801	1086	1402	1314	1681	2080
7297	1757	2426	2352	2855	3386	3375	3952
11809	14844	3660	4619	4577	5300	6050	6122
		25018					
<b>Na</b>	<b>Mg</b>	<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Ar</b>
495	737	577	786	1011	1000	1251	1520
4562	1476	1816	1577	1903	2251	2296	2665
6911	7732	2744	3231	2911	3361	3826	3928
		11574					
<b>K</b>	<b>Ca</b>	<b>Ga</b>	<b>Ge</b>	<b>As</b>	<b>Se</b>	<b>Br</b>	<b>Kr</b>
419	589	579	762	947	941	1139	1351
3051	1145	1979	1537	1798	2044	2103	3314
4410	4910	2963	3302	2734	2974	3500	3565
<b>Rb</b>	<b>Sr</b>	<b>In</b>	<b>Sn</b>	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>I</b>	<b>Xe</b>
403	549	558	708	834	869	1008	1170
2632	1064	1821	1412	1794	1795	1846	2045
3900	4210	2704	2943	2443	2698	3197	3097
<b>Cs</b>	<b>Ba</b>	<b>Tl</b>	<b>Pb</b>	<b>Bi</b>	<b>Po</b>	<b>At</b>	<b>Rn</b>
375	502	590	716	704	812	926	1036
2420	965	1971	1450	1610	1800	1600	
3400	3619	2878	3080	2466	2700	2900	



1.23-rasm. Birinchi ionlanish energiyasining kamayishi

Ionlanish energiyasi ba'zi farqlar oddiy tushuntirilishi mumkin. Misol uchun bor elementini dissotsilanish energiyasi yadrosining tuzilishiga qaramay berilliylikidan kichikroq. Bu chetlanishni, borga o'tganda elektron 2p orbitalga joylashadi, yadro nisbatan 2s orbitalni kuchliroq tortishi bilan tushuntiriteda. Buning natijasida  $I_1$  qiymati Be dan B ga tomon kamayadi. Ionlashish energiyasini N va O orasida kamiyishga esa boshqacha izoh beriladi. Ularning elektron konfiguratsiyalari;



O atomida ikkita elektron 2p orbitaliga toq holda joylashganini ko'rishimiz mumkin. Ular bir biriga nisbatan kuch bilan itarilib turadi va bu itarilish natijasida yadro effektiv zaryadi kichiklashadi. Yana bir hissani  $\text{O}^+$  ioni holatida kichik energiyasi  $2s^2 2p^3$  holatida beradi: tashqi pog'ona yarim to'lgan holatda kichik energiyaga ega (1.23-rasm).

Bundan tashqari N atomida p orbital yarim to'lgan holda uning tashqi qobig'i barqoqorligi yuqori. 2 davrda F va Ne da oxirgi elektron allaqachon yarim to'lgan orbitallarni egallaydi bunda ionlanish energiyasi o'zgarishidagi umumiy qonuniyatlar O dan keyin saqlanib qoladi. Bu ikki elementda ionlanish energiyasining ortishi,  $Z_{\text{eff}}$  qiymati ortishi natijasidir. Ne dan Na ga otganganda  $I_1$  qiymati keskin tushib ketadi chunki elektron kattaroq bosh kvant sonli tashqi qobiqni egallaydi va yadrodan uzoqda joylashadi.

### 1.8-misol. Ionlanish energiyasining o'zgarishini hisoblash

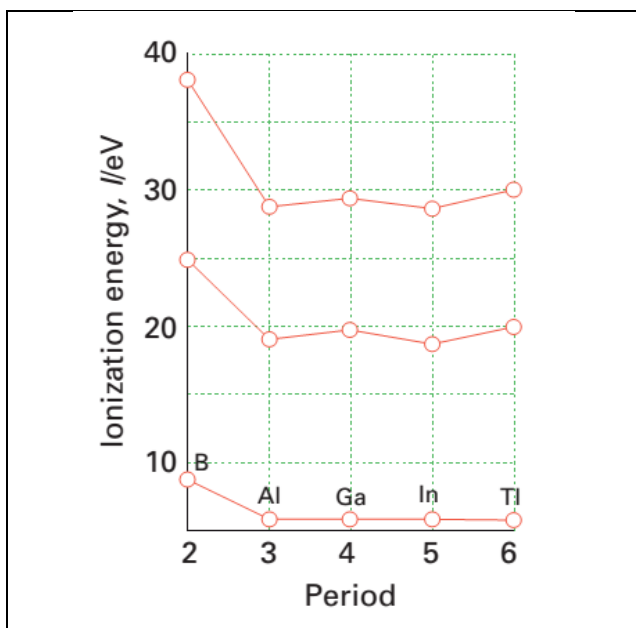
P va S da birinchi ionlanish energiyasini hisoblang.

**Javob** biz bu ikki atom elektron konfiguratsiyasi orqali javobni aniqlaymiz



N va O o'xshash bo'lgani kabi S da ham 3p orbitalida ikki toq elektron mavjud. Shuning uchun ularda ham bir biridan itarilish tufayli yadro zaryadini siljitish P ga qaraganda S da yuqori. N va O orasidagi farq kabi S dagi yarim to'lgan tashqi qavat uning ionlanish energiyasini pasayishiga olib keladi.

**Topshiriq 1.8** ftor va xlorda birinchi ionlanish energiyasini hisoblang.



1.24-rasm. Guruh elementlarida birinchi, ikkinchi va uchunchi ionlanish energiyalari.

Atom ionlanish energiyasining kimyo uchun ahamiyatli yana boshqa bir xususiyati keying ionlanish katta energiya sarfini talab etadi. Shunday qilib, ikkinchi ionlanish energiyasi (ya'ni  $E^+$  kationdan elektronni tortib olish uchun) birinchiga nisbatan katta bo'ladi, uchinchi esa yanada katta bo'ladi. Qanchalik ion zaryadi katta bo'lsa undan elektronni tortib olish uchun shunchalik katta energiya talab qilinadi. Elektron ichki qavatdan chiqib ketadigan ionlanish energiyasi farqi

(litiyning ikkinchi ionlanish energiyasi va shu guruh biror bir elementi misolida) sezilarli darajada bo'ladi, chunki elektron yopiq fazoda yadro bilan kuchli ta'sirda turgan bo'ladi. Masalan, litiy birinchi ionlanish energiyasi 5,3 eV, ikkinchisi o'n barobar katta 75,6 eV.

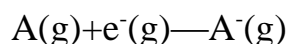
Guruh bo'ylab ionlanish energiyasi bunchalik oddiy emas. 1.24-rasmda bor gruppachasi elementlari birinchi, ikkinchi va uchunchi ionlanish energiyalari ko'rsatilgan. Ionlanish energiyasi kutilgan holda  $I_1 < I_2 < I_3$  bo'lsa ham guruh bo'yicha nomonoton o'zgaradi.

Chap pastki burchakdagi kichik qiymatlar (seziy ioni) va o'ng yuqorida katta (geliy yonida) qiymatlarni hisobga olib, davriy sistemada birinchi ionlanish energiyasi davriy o'zgaradi. Keying ionlanish katta energiya sarfini talab etadi.

#### c) Elektronga moyillik.

Element atomi bir elektron biriktirib olganda ajralib chiqadigan energiya miqdori ayni elementning elektronga moyilligi deb ataladi,  $E$  harfi bilan belgilanadi.

Elektron biriktirib olish entalpiyasi,  $\Delta_{eg}H$ , gaz fazadagi atomning elektronni biriktirib olish standart molyar entalpiyasi o'zgarishidir:



Bu jarayon entalpiyasi termodinamik jihatdan aniq bir qiymat bo'lsada noorganik kimyoda ma'nosi yaqin bo'lgan neytral atom energiyasi va gaz fazadagi manfiy zaryadlangan ion energiyalari orasidagi farq bilan aniqlanadigan elektronga moyillik bilan adashtiriladi.

$$E_a = E(A, g) - E(A^-, g)$$

$T=0$  bo'lganda elektronga moyillik elektronning birikish jarayoni entalpiyasining teskari ishora bilan olingan qiymatiga teng. Elektronga moyillikning musbat qiymatga ega ekanligi  $A^-$  ion energiyasi kichik ya'ni manfiyroq va demak, ionning energiya boyicha xolati maqbuldir. Ionlanish energiyasi, ionlanish entalpiyasi kabi elektronga moyillik va biriktish entalpiyasi tegishlicha eV va kDj/mollarda o'lchanadi.

Elektronga moyillik asosan atom orbitalining to'lmagan eng kichik pog'ona energiyasi bilan aniqlanadi. Bog'lar hosil bo'lishida chegaraviy orbitallar elektron taqsimlanishida eng ko'p o'zgarishlarga uchraydi.

1.6-jadval

Asosiy guruh elementlarining birinchi elektron yaqinlashuvi

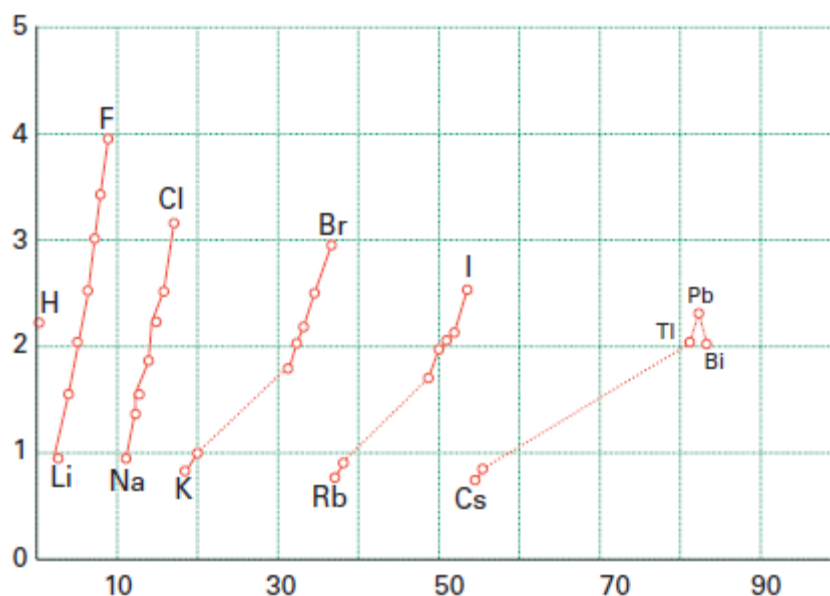
<b>H</b>							<b>He</b>
72							-48
<b>Li</b>	<b>Be</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>	<b>Ne</b>
60	≤ 0	27	122	-8	141	328	-116
					-780		
<b>Na</b>	<b>Mg</b>	<b>Al</b>	<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>	<b>Ar</b>
53	≤ 0	43	134	72	200	349	-96
					-492		
<b>K</b>	<b>Ca</b>	<b>Ga</b>	<b>Ge</b>	<b>As</b>	<b>Se</b>	<b>Br</b>	<b>Kr</b>
48	2	29	116	78	195	325	-96
<b>Rb</b>	<b>Sr</b>	<b>In</b>	<b>Sn</b>	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>I</b>	<b>Xe</b>
47	5	29	116	103	190	295	-77
* The first values refer to the formation of the ion $X^-$ from the neutral atom; the second value to the formation of $X^{2-}$ from $X^-$ .							

Agar qo‘shimcha elektron yadro effektiv zaryadi yuqori ta‘sir ostida bo‘lgan qobiqchada joylashgan bo‘lsa atom eng yuqori elektronga moyillikka ega bo‘ladi. Bu holat davriy sistemaning o‘ng yuqori tomonda joylashgan elementlar uchun amalga oshadi. Demak, ftor bilan yonma-yon joylashgan (asosan kislorod, azot va xlor lekin nodir gazlar emas) elementlar eng yuqori elektronga moyillikka ega. Ikkinchi elektron biriktirib olish entalpiyasi har doim musbat, chunki elektron itarilish yadroni elektronni tortishini kompensatsiyalaydi.

Davriy sistemada ftor bilan yonma-yon joylashgan elementlar uchun elektronga moyillik eng yuqori qiymatlarga ega bo‘ladi.

### c) Elektrmanfiylik.

Element atomining kimyoviy birikma tarkibida elektronlarni o‘ziga tortish xususiyati. Agar element atomi elektron biriktirib olishga intilsa, uni masalan, ftor atomi elektrmanfiy deyiladi.



1.25-rasm. Pauli elektrmanfiyligining davriy varianti

Agar atom elektron berishga intilsa, masalan, ishqoriy metallar, u elektrmusbat. Elektrmanfiylik son qiymatga ega va uni bog‘ energiyasi bog‘larning va molekularning qutblanishi va birikmalar kirishayotgan reaksiyalar yo‘nalishlarini tahlil qilishda ishlatiladi. Element elektrmanfiyligi

o'lchamining turli usullari bor va uning topilishiga hali ham munozaraga sabab bo'lmoqda. Tegishlixa elektrmanfiylikni aniqlashning bir necha usullari bor. Laynus Poling bo'yicha elektrmanfiylikni aniqlash bog'lar hosil bo'lishi energiyasiga tayanadi. (3 bobda) keltirilgan. Bu bobda robert Malliken atomlarning xossalariga asoslangan formulirovkasi ko'rib chiqiladi. Uning taxminicha, agar atom ionlanish energiyasi va yuqori elektronga moyillikka  $E_a$  ega bo'lsa, qo'shimcha elektronlar berishdan ko'ra olishga moyil bo'ladi, demak, yuqori elektrmanfiylikka ega bo'ladi. Va aksincha, ionlanish potentsiali va elektronga moyillik kichik qiymatlarga ega bo'lsa, atom elektronlar berishga moyil va elektrmusbat bo'ladi. Bu kuzatishlar Mallikenga elektrmanfiylikni element ionlanish energiyasi va elektronga moyilligi o'rtacha arifmetigi sifatida ta'riflashga imkon berdi.

$$\chi_{MI} = \frac{1}{2} (I + E_a)$$

Agar  $I$  va  $E_a$  qiymatlari katta bo'lsa elektrmanfiylik katta va qiymatlari kichik bo'lsa elektrmanfiylik kichik. Malliken bo'yicha elektrmanfiylik aniqlashning murakkabligi ionlanish energiyasi va elektronga moyillik valent holatiga atomning molekuladagi ega bo'lgan elektron konfiguratsiyasiga bog'liqligidir.

Demak, elektrmanfiylik qiymatlarini aniqlash uchun, atomning turli xarakterli valent holatlari uchun ionlanish energiyasi va elektrmanfiylikning o'rtacha qiymatlarini hisoblash kerak bo'ladi. 1.7 jadvalda Poling bo'yicha elektrmanfiylik bilan solishtirish mumkin. Ikkala shkala ham bir-biriga to'g'ri keladi va quyidagi nisbat bilan bog'langan:  $\chi_p = 1.35 \chi_M^{1/2} - 1.37$

1.7 -Jadval

Pauli  $\chi_p$  Mallikken  $\chi_m$  va Allred-Rochovlar elektromanfiyliklari

H							He
2.20							5.5
3.06							
2.20							
Li	Be	B	C	N	O	F	Ne
0.98	1.57	2.04	2.55	3.04	3.44	3.98	
1.28	1.99	1.83	2.67	3.08	3.22	4.43	4.60
0.97	1.47	2.01	2.50	3.07	3.50	4.10	5.10
Na	Mg	Al	Si	P	S	Cl	Ar
0.93	1.31	1.61	1.90	2.19	2.58	3.16	
1.21	1.63	1.37	2.03	2.39	2.65	3.54	3.36
1.01	1.23	1.47	1.74	2.06	2.44	2.83	3.30
K	Ca	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
0.82	1.00	1.81	2.01	2.18	2.55	2.96	3.0
1.03	1.30	1.34	1.95	2.26	2.51	3.24	2.98
0.91	1.04	1.82	2.02	2.20	2.48	2.74	3.10
Rb	Sr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
0.82	0.95	1.78	1.96	2.05	2.10	2.66	2.6
0.99	1.21	1.30	1.83	2.06	2.34	2.88	2.59
0.89	0.99	1.49	1.72	1.82	2.01	2.21	2.40
Cs	Ba	Tl	Pb	Bi			
0.79	0.89	2.04	2.33	2.02			
0.70	0.90	1.80	1.90	1.90			
0.86	0.97	1.44	1.55	1.67			

Davriy sistemada ftor yonida joylashgan elementlar yuqori ionlanish energiyasi va tegishli qiymatdagi elektrmanfiylikka ega, demak, bu elementlar Milliken bo'yicha yuqori elektrmanfiylikka ega.  $\chi_{\text{Atomning}}$  energetik pog'onalariga, ayniqsa, chegaraviy tashqi orbitallar joylashuviga bog'liq ekan, elektrmanfiylik yuqori bo'ladi agar, atom orbitallar past energiyaga ega bo'lsa. Elektrmanfiylikni aniqlashning boshqa usullari ham mavjud. A.Olred va Roxov tomonlaridan taklif etilgan shkala keng ishlatiladi. Elektronlar atomda yadro  $Z_{\text{eff}}$  zaryadi ta'siri ostida bo'ladi. Atom sirtidagi kulon potentsiali  $Z_{\text{eff}}/r$  ga proporsional, elektr maydon kuchlanganligi  $Z_{\text{eff}}/r^2$  ga proporsional. Elektomanfiylik bu maydonga propotsional,  $r$  bo'lsa,  $A$  dagi atom kovalent radiusiga to'g'ri keladi.

$$\chi_{or} = 0,744 + \frac{0,3590Z_{eff}}{r^2}$$

Bu usulda topilgan son qiymatlar Poling bo'yicha elektrmanfiylik qiymatlari bilan solishtirishga mos holda hosil bo'ladi.

Ollred Roxov ta'rifi bo'yicha yuqori effektiv yadro zaryadi va kichik kovalent radiusiga ega elementlar yuqori elektrmanfiylikka ega bo'ladi. Bunday elementlar davriy sistemada ftor yonida joylashgan. Ollred Roxov bo'yicha elektrmanfiylik qiymatlari poling bo'yicha elektrmanfiylik qiymatlariga yaqin va atomdagi elektronning taqsimlanishini muhokama qilishda ishlatiladi.

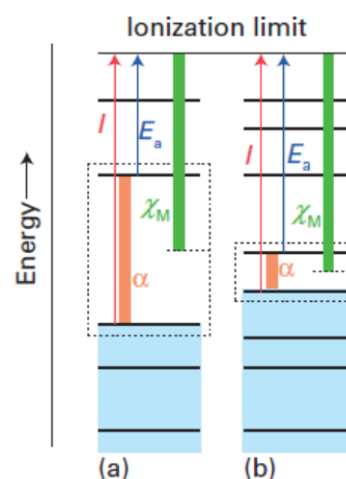
Element elektrmanfiyligi bu kimyoviy birikmalardagi element atomining elektronlarni tortish qobiliyatidir. Malliken ta'rificha elektrmanfiylik ionlanish energiyasi va elektronga moyillikning o'rtacha arifmetigi, demak, atomning chegaraviy orbitallari bilan bog'liq.

#### d) Qutblarga ajralish

Qutblanish  $\alpha$ - bu atomning elektr maydon ta'sirida (siqilishi) deformatsiyalanishi (masalan, qo'shni ionlar hosil qilgan). Agar atom yoki ionning (odatda anion) elektron buluti oson deformatsiyalansa yuqori qutblanuvchanlikka ega bo'ladi. Erkin orbitallar energiya bo'yicha yuqori, to'lgan orbitallarga yaqin joylashgan bo'lsa bunday holat yuz beradi. Qutblanuvchanlik chegara orbitallari energiya orbitallar energiyalari farqi kam bo'lsa, qutblanuvchanlik yuqori, bu farq yuqori bo'lsa qutblanuvchanlik kichik (1.26-rasmga qarang). Yaqin joylashgan chegara orbitallar odatda katta og'ir atom yoki ionlarga xos, masalan, og'ir ishqoriy metallar yoki galogenlar atomlari va ionlariga xos. Shuning uchun bu atom va ionlar kattaroq qutblanuvchanlikka ega.



Kichik va yengil atomlar ftor yaqinida joylashgan elementlar atom va ionlari odatda katta farq qiluvchi chegaraviy orbitallarga va kichik qutblanuvchanlikka ega. Energetik pog'onalari yaqin joylashgan atom va ionlar oson qutblanadi. Katta atom va ionlar yuqori qutblanuvchanlikka ega.



1.26-rasm. Energiya chegaraviy orbitallari boyicha elektrmanfiylik va qutblanish tahlili

### Nazorat savollari:

1. Atomning murakkab zarracha ekanligini ko'rsatuvchi hodisalar tavsifi.
2. Nima sababdan Borning atom modeli vodorod uchungina tadbiq qilinadi?
3. De-Broyl postulati va formulasi.
4. Kvant mexanika Nyuton mexanikasidan qanday farq qiladi?
5. Ayni energetik pog'ona uchun pog'onachalar soni nimaga teng?
6. Berilgan elementning atomida 5 ta elektron qavatlar va 7 ta tashqi elektronlar bor. Ular qanday kvant sonlari bilan tavsiflanadi. Ular uchun  $(n+1)$  yig'indisi nechaga teng?
7. Quyidagi elektron konfiguratsiyalaridan bo'la olmaydiganlarni ko'rsating va bo'la olmaslik sababini tushuntiring:  $1p^6$ ,  $2s^2$ ,  $3f^{12}$ ,  $4g^{18}$ ,  $3d^6$ ,  $4d^{10}$ ,  $3p^7$ ,  $3s^2$ .
8. Nima uchun xrom va selen guruhchalari elementlari bir guruhda lekin har xil guruhchalarda joylanadi? Qanday xossalar asosida elementlar bir guruhchani tashkil qiladi? Qanday elementlar to'la elektron analoglari bo'la oladi?

9. 112, 114 va 118 chi elementlarning elektron konfiguratsiyasini yozing, ular o'zlarining xossalari jihatidan qaysi ma'lum elementlarga yaqin bo'la oladi?
10. "Orbital" tushunchasining ta'rifini keltiring.
11. Qanday kvant sonlari bilan orbital va undagi elektronlar to'liq aniqlanadi ?

## 2-BOB. MOLEKULAR TUZILISH VA KIMYOVIY BOG‘LANISH

Noorganik kimyoda tuzilish reaksiyalarni interpretatsiya qilish yarimmiqdor modellarga asoslangan. Bu bobda biz molekulyar tuzilish modellari rivojlanishining molekulyar orbitallar nazariyasi nuqtai nazaridan ko‘rib chiqamiz. Bundan tashqari molekulalar formalarini oldindan bayon qilish metodlarini ko‘rib chiqamiz. Bobda matn bo‘yicha keng spektrdagi tuzilishlarni tushuntirishda ishlatiladigan tushunchalar ko‘rib chiqiladi. Sifat modellari hamda eksperiment va hisoblashlar orasidagi o‘zaro bog‘liqlikning muhimligi illyustratsiya qilingan.

**Lyuis strukturalari.** Lyuis kovalent bog‘i ikkita qo‘shni atom umumlashgan elektron jufti hosil qilib birikkanda hosil bo‘ladi deb taklif etdi. Bitta umumlashgan elektron jufti hosil bo‘lsa AB bilan ikki va uch elektron juftlaridan tashkil topgan, qo‘shbog‘  $A=B$ , uchbog‘ tegishlicha bilan belgilanadi. Bog‘ hosil qilishida qatnashmagan elektron juftlari taqsimlanmagan (yoki erkin) elektron juftlari deb ataladi. Taqsimlanmagan elektron juftlari atomlar bog‘lanishiga hech qanday xissa qo‘shmasa ham, ular molekula shakli va kimyoviy xossalariga ta’sir etadi.

### 2.1. Oktet qoidasi

Lyuis har xil turdagi molekulalarning mavjudligini oktet qoidasi bilan tushuntirish mumkinligini aniqladi. har bir atom to‘liq sakkiz elektronli valent qavatga etkizish uchun elektronlarni qo‘shni atom bilan bo‘lishadi. Inert gaz konfiguratsiyali yopiq elektron qavati, s va p pog‘onachalari sakkiz elektron bilan to‘lsa hosil bo‘ladi. Birgina istisno vodorod atomida hisoblanadi, chunki uning s –qavatini to‘lishi uchun ikkita elektron kerak. Oktet qoidasi Lyuis strukturalarini yozishning oddiy usulini beradi. Ko‘p hollarda Lyuis strukturalarini tuzish uch bosqichdan iborat.

1. Strukturaga qo‘shilishi kerak bo‘lgan elektronlar soni atomlar tomonidan beriladigan barcha elektronlar yig‘indisi bilan hisoblanadi ( $N$  atomi bitta elektron,

O [He] 2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup> –oltita). Iondagi har bir manfiy zaryad qo‘shimcha elektronga, musbat zaryad –elektronlar sonini bittaga kamayishiga teng.

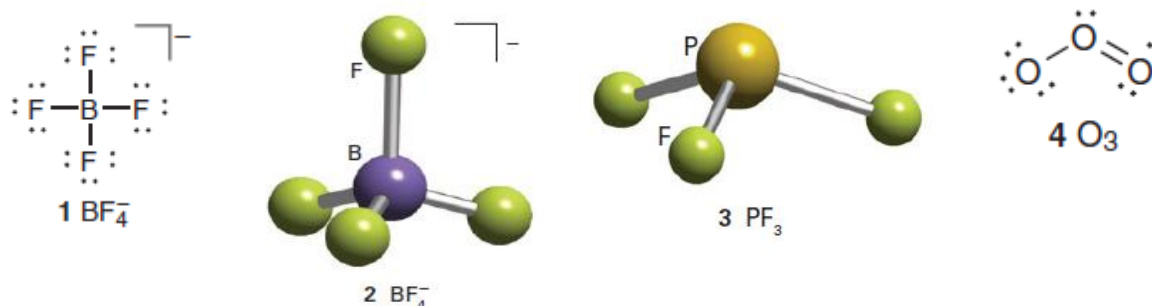
2. Elementlar simvolini shunday yozish kerakki, ularning joylashishi qanday bog‘langanligini ko‘rsatsin. Bu joylashish ko‘pincha ma‘lum yoki taxmin qilishimiz mumkin. Elektrmanfiyligi kam bo‘lgan element odatda molekulada markaziy atom hisoblanadi (SO<sub>2</sub>, yoki SO<sub>4</sub><sup>2-</sup> kabi), lekin ko‘pgina ma‘lum bo‘lgan istisnolar ham mavjud (ulardan H<sub>2</sub>O va NH<sub>3</sub>).

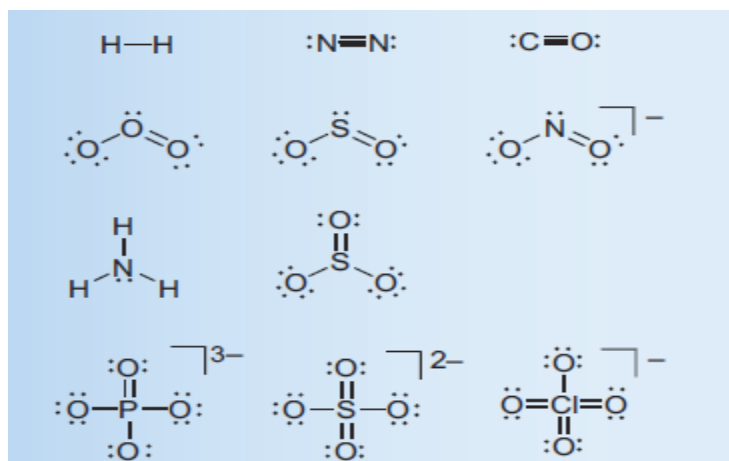
3. Elektronlarni juftlar orasida shunday taqsimlanadiki, bog‘langan bir juft elektronlar atomlar orasida joylashsin, keyin esa elektron juftlari (taqsimlanmagan elektron juftlari yoki qo‘shbog‘lar hosil qilib) har bir atomda valent elektronlar okteti bo‘lguncha qo‘shiladi

Bog‘da qatnashuvchi har bir elektron jufti chiziqcha bilan belgilanadi. 2.1-jadvalda ba‘zi oddiy molekulalarning va ionlarning Lyuis strukturalari keltirilgan. Lyuis strukturalari oddiy holatlarda molekula shaklini emas, bog‘lar va taqimlanmagan juftlar sxemasini, ya‘ni molekula geometrik formasini emas, bog‘lar topologiyasini ko‘rsatadi.

2.1-jadval

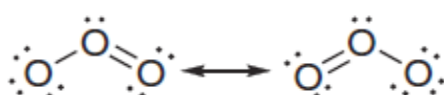
Ba‘zi oddiy molekulalarning Lyuis strukturalari





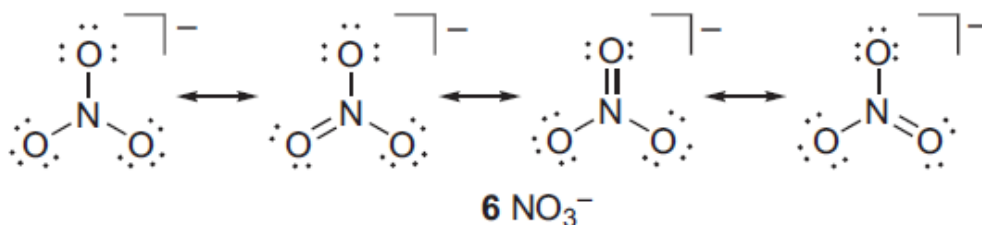
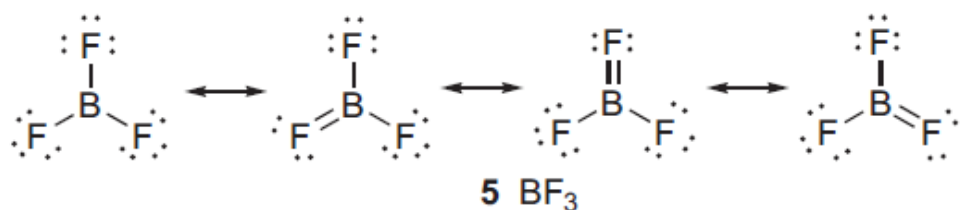
Kovalent bog‘i valent qobiqchasini oktetgacha to‘ldirish uchun kerak bo‘ladigan bo‘lingan (umumlashgan) elektronlar juftlaridan hosil bo‘ladi,

Birgina Lyuis strukturasi ko‘pincha molekulani to‘liq tavsiflay olmaydi. Masalan,  $O_3$  ning Lyuis strukturasi ikkita O-O bog‘i turlicha deb taxmin qiladi, vaholanki ular bir bog‘ va qo‘shbog‘ bog‘ uzunliklari (tegishlicha  $1,48\text{\AA}$  va  $1,21\text{\AA}$ ) orasida joylashgan bir xil uzunlikka ( $1,28\text{\AA}$ ) ega. Lyuis nazariyasidagi bu kamchilik molekulaning real strukturasi atomlar joylashishi mavjud bo‘lishi mumkin bo‘lgan barcha Lyuis strukturalari superpozitsiyasi deb qaraladigan *rezonans* konsepsiyasini kiritilishi bilan tuzatiladi. Rezonans ikkiyoqlama strelka bilan belgilanadi:



Masalan,  $BF_3$  molekulasini (5) sxemada ko‘rsatilgan superpozitsiyalar sifatida ko‘rsatish mumkin.  $BF_3$  da to‘liq oktet yo‘q, demak,  $BF_3$  molekulasini nisbatan qo‘shbog‘lar aralashmasi sifatida ko‘rsatilishi mumkin. Undan farqli ravishda  $NO_3^-$  (6) ionida uchta keyingi strukturalar dominant bo‘ladi va qisman qo‘shbog‘larga ega:

Lyuis strukturalari orasidagi rezonans hisoblangan energiyani kamaytiradi, bog‘ning xarakteri va molekula ichidagi taqsimlanishini modellashtiradi. Bir xil energiyali rezonans strukturalar eng katta rezonans stabilizatsiyasiga ega.



a) **Formal zaryad.** Rezonansga xissa qo‘shadigan qaysi Lyuis strukturasi, minimal energiyaga ega ekanligi masalasini har bir atom formal zaryadining miqdoriy baholash asosida hal qilish mumkin. Lyuis strukturasiidagi formal zaryad-bu umumlashgan elektronlar atomlar orasida teng taqsimlanganligi sharti bilan faqat kovalent bog‘ hosil qilinishi faraz qilinganda, atom hosil qilishi mumkin bo‘lgan zaryaddir.

Atomning formal zaryadi faqat kovalent bog‘i va taqsimlangan elektronlar juftlar deb taxmin etilganda, lyuis strukturalarida atom qay darajada elektronlar olishi

yo‘qotilishi tushuniladi. Demak,  $f = V - L - \frac{1}{2}P$

bu erda  $V$  dastlabki valent elektronlari soni,  $L$  molekuladagi taqsimlanmagan elektron juftlari sonlari,  $P$ -umumlashgan elektronlar soni. SHunday qilib, formal zaryad bu –erkin atomdagi valent elektronlar soni va atom molekulada ega bo‘ladigan taqsimlangan elektron juft bitta elektroni va taqsimlanmagan elektron juft ikkala elektronga ega bo‘lgan holatdagi farqdir.

Odatda, quyidagi shartlar bajarilganda, strukturalardan biri eng kichik energiyaga ega bo‘ladi: 1) atomlar formal zaryadi minimal bo‘lganda; 2) eng elektrmanfiy atom manfiy zaryadga, kichikroq elektrmanfiy musbat zaryadga ega.

b) **Oksidlanish darajasi.** Formal zaryad –bog‘ kovalent xarakterga ega deb taxmin kiritilgan holdagi kattalik. Oksidlanish darajasi-bog‘ning xarakteri ion bo‘lgan holdagi taxminda olinadigan parametrdir. Bo‘lingan juft ikkala elektroni

butunligicha elektmanfiy elementshga tegishli deb qaralgandagi atom zaryadi deb aytish mumkin. Har bir kislorod atomi (agar F atomi bo'lmasa) kislorod ioniga aylanadi, demak, oksidlanish darajasi -2, yuqoridagilarga asosan  $\text{NO}_3^- \text{N}^{5+} (\text{O}^{2-})_3$  deb qarash mumkin, shuning uchun azotning bu birikmalardagi oksidlanish darajasi +5. Agar elementga konkret zaryad yozilsa, u aniq bir oksidlanish darajasida deb aytiladi. Demak, azot oksidlanish darajasi +5, u +5 oksidlanish holatida; N(V) yoki N(+5) deb yoziladi. Bunday shakldagi yozuvlar manfiy oksidlanish darajalarida ham ishlatiladi.

c) **Gipervalentlik.** Ikkinchi davr elementlari Li dan Ne gacha oktet qoidasiga yaxshi bo'ysunadi, boshqa elementlarda ba'zi chetlanishlar kuzatiladi. Masalan,  $\text{PCl}_5$  molekulasidagi bog'lar R atomi atrofida o'nta valent elektronlar, ya'ni bitta bog'ga bir juft bo'lishini, talab etadi. Bunday turdagi, ya'ni birgina atom atrofida bo'lsa ham, sakkiztadan ko'p elektron bo'lishini talab etadigan zarrachalar gipervalent zarrachalar deb ataladi. Rezonans strukturalari kengaytirilgan oktetni o'z ichiga oladigan, lekin sakkiztadan ko'p elektronlarning bor bo'lishi zarur bo'lmagan zarrachalar gipervalent deb qaralmaydi: masalan, lyuis strukturasi rezonansiga xissa qo'shuvchi S atomi atrofida 12 ta elektronga ega bo'lsa ham,  $\text{SO}_4^{2-}$  gipervalent zarracha hisoblanmaydi. Ba'zi birikmalarda atom uning koordinatsion sonidan oshiq bo'lgan sondagi atomlar bilan qurshalgan bo'ladi. Bunda bog'lanish taqsimlangan elektron bo'lishini talab etmaydi. Misol, tariqasida  $\text{Be}_2\text{C}$  dagi sakkiz koordinatsion sonli va  $[\text{Co}_6\text{C}(\text{C}\{\text{O}\})_{18}]^{2+}$  dagi olti koordinatsion C ni keltirish mumkin. bunday zarrachalar gipervalent emas, giperkoordinatsion zarrachalar deyiladi. Besh va olti koordinatsion sonli B va C karkas tipdagi kovalent birikmalar va klasterlarda, metallik borid va karbidlarda mavjud. Gipervalentlikni  $\text{SF}_6$  va kengaytirilgan oktetni (M-n,  $\text{SO}_4^{2-}$  lyuis strukturasi uchun) an'anaviy tushuntirish uchun qo'shimcha elektronlar joylasha olishi mumkin bo'lgan pastda joylashgan d-orbitallarni hisobga olishga taqaladi. Bunga asosan, agar vakant 3d-orbitallar foydalaniladigan bo'lsa, R atomi sakkizdan ortiq elektronlarni qabul qilishi mumkin.  $\text{PCl}_5$  molekulasida bitta bo'lsa ham 3d-orbitali

ishlatilishi kerak. Shunda ikkinchi davr elementlari uchun kamroq gipervalent birikmalar paydo bo'lishini 2d-orbitallarining mavjud emasligi bilan tushuntiriladi, lekin yanada aniqroq sabab, kichik markaziy atom atrofida to'rtadan ko'p atomning joylashishidir.

Gipervalentlik, ya'ni ikkinchi davr elementlaridan keyingi elementlar uchun xos bo'lgan, valent elektronlar oktetini hosil qilish uchun ko'p sondagi atomlarni birlashtirib olish, va rezonans strukturalardagi kengaytirilgan oktetni hodisalaridir.

## 2.2. Bog'larning xossalari va tuzilish.

Bog'larning ba'zi xossalari turli xil birikmalarda taxminan bir xildir. Masalan, H<sub>2</sub>O molekulasi O-H bog'ining mustahkamligi ma'lum, bu qiymatlarni bizni qiziqtirgan CH<sub>3</sub>OH molekulasi O-H bog'i uchun ishlatishimiz mumkin.

Kimyoviy bog'ning energiyasi deb, mazkur zarracha (oddiy yoki murakkab moddaning molekulasi) hosil bo'layotgan vaqtda har bir bog' tomonidan ajratib chiqarilgan energiya yoki mavjud 2 ta atom o'rtasidagi bog'ni uzib yuborish uchun sarf qilish lozim bo'lgan energiyaning miqdoriga aytiladi. Bog'ning energiyasi spektroskopik yoki kalorimetrik usullar bilan, turli termodinamik sikllarni tadbiq qilish yo'li bilan topiladi.

Shunday qilib, bog'ning energiyasi uning muhim energetik xarakteristikasidir. Bog'ning uzilishi gomolitik (radikal mexanizmlil jarayon) yoki geterolitik (ion mexanizmlil jarayon) yo'l bilan ro'y berishi mumkin.

Bog'lar energiyasiga quyidagi qoidalar xos:

1. Bog'larning o'rtacha energiyasi bilan har bir bog' uchun alohida topilgan energiya anchagina farq qilishi mumkin.
2. Atomlarning radiusi ortib borishi bilan bog'ning mustahkamligi kamayadi.
3. Kristall moddadagi bog'ning energiyasi uning molekuladagi bog' energiyasidan katta bo'ladi.



4. Bog'ning gomolitik uzilish energiyasi geterolitik uzilish energiyasidan kichikroq bo'ladi.

Shuning uchun aksariyat kristallokimyoviy tuzilishga ega bulgan moddalar yuqori temperaturada suyuqlanadilar.

### **2.3.Valent qobig'i elektron juftining itarilish modeli(VEJI).**

Molekula geometriyasiga atomlarni bog'lovchi elektron juft va markaziy atomning valent qobig'idagi taqsimlanmagan elektron jufti hamda ular orasidagi itarilish kuchi ta'sir ko'rsatadi.

Valent qobig'i elektron jufti itarilish modeli-bu Lyuis nazariyasining oddiy kengaytirilishidir, lekin ko'p atomli molekulalarni shakllarini oldindan aytib berishda qo'l keladi. Nazariya 1940 yilda N.Sijvik va G.Pauellar tomonidan berilgan taxminlarga asoslangan, keyinchalik R.Gillepsi va R. Nayxolmlar tomonidan zamonaviy shaklda ta'riflangan.

Bog'lovchi elektron juft ikki yadro oralig'ida bo'lgani uchun ularning fazoda egallangan ko'lami taqsimlanmagan elektron juftnikidan ancha kichik bo'ladi. Shu sababli taqsimlangan (u markaziy atom A bilan bog'langan X orasida joylashgan) elektron juft orasidagi itarilish kuchi taqsimlanmagan (uni A ning elektron jufti E deb belgilaylik) ikki juft orasidagi itarilish zaifroq bo'ladi. Shunday elektron juftlar orasidagi itarilish molekulaning geometriyasini belgilovchi asossiy omil hisoblanadi.

R.Gillepsi va R.Nayxolm tomonidan ishlab chiqilgan stereokimyoviy qoidalar quyidagicha ta'riflanadi.

1. Elektron juftlar orasidagi itarilish kuchi quyidagi qator bo'yicha ortib boradi:



2. Markaziy atom bilan bog'langan atomning elektrmanfiyligi ortishi bilan elektron jufti A atomidan X atom tomon siljiydi va elektronlarning itarilishi kamayadi, valent burchaklar kichiklashadi.

3. Molekula geometriyasi markaziy atomning qo'shni atomlar bilan hosil qilgan  $\sigma$  -bog'lari soniga bog'liq, lekin  $\pi$ -bog'larning ta'siri unchalik katta bo'lmaydi.

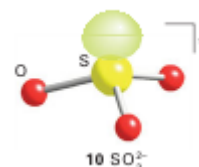
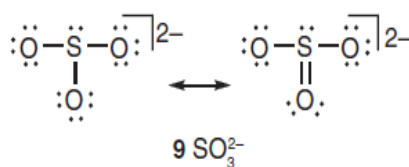
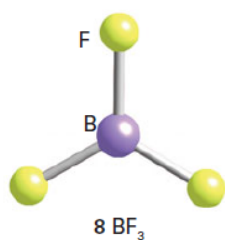
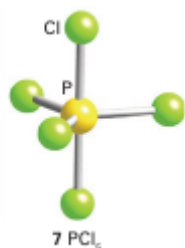
4. Tugallanmagan valent qobig'ida elektronlar jufti valent qobig'i to'lgan elementlarnikiga qaraganda kattaroq hajmni egallashga intiladi va shu sababli ular orasidagi itarilish kuchi zaiflashadi.

5. Valent qobig'i to'lgan markaziy atomda bir yoki bir necha erkin elektron juftlari bo'lgani holda u valent qobig'i to'lmagan ikkinchi element bilan bog'langan bo'lsa, markaziy atomning erkin elektron juftlari ikkinchi atomning bo'sh elektron orbitallariga ko'chadi. Bunda birinchi atomdagi juftning stereokimyoviy aktivligi yo'qolishi mumkin.

2.2-jadval

VEJI modeli bo'yicha elektron juftlarining joylashish shakli

Elektron juftlar soni:	Geometrik formasi	
2	Chiziqli	HCN, CO <sub>2</sub>
3	Tekis uchburchakli	BF <sub>3</sub> , SO <sub>3</sub> , NO <sub>3</sub> <sup>-</sup> , CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>
4	Tetraedr	CH <sub>4</sub> , SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>
5	Trigonal bipiramida	PCl <sub>5(g)</sub> , SOF <sub>4</sub> <sup>*</sup>
6	Oktaedr	SF <sub>6</sub> , IO(OH) <sub>5</sub> <sup>*</sup>



2.1-rasm. Ba'zi molekularning fazoviy tuzilishi

## Valent bog‘lanishlar usuli (VBU).

Valent bog‘lanishlar usulini Lyuisning empirik usulining kvant-mexanika yordamida rivojlantirilishi deb qarash mumkin. VBU ga binoan har bir kimyoviy bog‘ga bir juft elektron to‘g‘ri keladi. SHu sababdan, bu usulni ba‘zan lokallashgan juftlar usuli deb ham yuritiladi.

Vodorod molekulasini hosil bo‘lishini kvant mexanika asosida tushuntirish uchun V.Gaytler va F.London 1927 yilda taklif qilgan va L.Poling rivojlantirgan valent bog‘lanishlar nazariyasidan foydalanildi. Bu nazariyaga muvofiq kimyoviy bog‘ hosil bo‘lishi uchun quyidagi shartlar bajarilishi kerak.

1. O‘zaro birikuvchi atomlarda elektronlarning spinlari qarama –qarshi yo‘nalishga ega bo‘lishi kerak, chunki antiparalel spinli ikki elektron bir-biriga yaqinlashganda, ularning elektron buluti bir-birini qoplaydi6 natijada shu ikki elektron bir-biri bilan juftlashadi.

2. Hosil bo‘lgan yangi elektron juft umumiy bo‘ladi. Bog‘ hosil qilishda qatnashgan atomlarning qolgan elektronlari bilan birgalikda elektronlar bilan to‘lgan qobiq hosil qilinganda barqaror elektron konfiguratsiya hosil bo‘ladi.

3. Valent qobig‘ida toq elektronlar soni bittadan ortiq bo‘lsa, bu atomning hosil qiladigan bog‘lar soni ham ko‘p bo‘ladi. ikki atom orasida bitta sigma simmetriyali bog‘ hosil bo‘ladi, atomning qolgan elektronlari ayni atomlar orasida  $\pi$ -bog‘ hosil qiladi yoki boshqa atomlar bilan  $\sigma$ -bog‘ hosil qilishi mumkin. Ba‘zan juftlashmagan (toq) elektronlar hammasi ham bog‘lovchi juft holatga o‘tmay qolishi mumkin.

### 2.4. Vodorod molekulasi

Ikkita izolyasiyalangan ikki elektronli vodorod atomlari uchun to‘lqin funksiyasi quyidagicha yoziladi  $\psi = \chi_A(1)\chi_B(2)$ , bu erda  $\phi_A$  A indeksli vodorod 1-s orbitali. Atomlar yaqinlashganda qaysi elektron birinchi yoki ikkinchi A atomda joylashganligini bilib bo‘lmaydi.  $\psi = \chi_A(2)\chi_B(1)$ , deb yozish ham to‘g‘ri bo‘ladi, bunda ikkinchi elektron A atomda, birinchi elektron V atomda joylashgan bo‘ladi. Kvant mexanikasiga asosan, ikki holat teng ehtimollikka ega bo‘lsa, holat

funksiyasi har bir konfiguratsiya superpozitsiyasi bilan bayon qilinishi mumkin, shuning uchun molekula holati chiziqli kombinatsiya bilan tavsiflanadi.

$\psi = \phi_A(1)\phi_B(2) + \phi_A(2)\phi_B(1)$ . Bu funksiya VBU bo'yicha H-H bog'i uchun normirlanmagan to'lqin funksiyasi deyiladi. Bog' hosil bo'lishini ikki elektron ikki yadrolar orasida bo'lishi yuqori ehtimollikka ega deb tasavvur qilib, ularni bog'lab turibdi deyish mumkin. Normal holda  $\psi = \chi_A(1)\chi_B(2) + \chi_A(2)\chi_B(1)$  to'lqin holati interferensiyasi sodir bo'ladi va yadroorasi fazosida natijaviy to'lqin funksiyasining qiymati kattalashadi.

Pauli prinsipiga asosan (3) tenglama faqat juftlashgan spinli elektronlarga qo'llash mumkin, shuning uchun Valent bog'lanish usuli bo'yicha bog'lanishda faqat juftlashgan elektronlar qatnashadi. (3) tenglama bo'yicha bayon qilinadigan elektron taqsimlanish  $\sigma$ -bog'lanish deyiladi.  $\sigma$ -bog' yadrolar orqali o'tuvchi o'qqa nisbatan silindrik simmetriyaga ega bo'ladi va unda ishtirok etuvchi elektronlar bu o'qqa nisbatan nol bo'lgan orbital burchak momentiga ega.  $H_2$  molekulasi potensial energiya egrisi – energiyaning yadrolar orasidagi masofaga bog'liqligini ko'rsatuvchi energiyadir; uni yadrolar orasidagi masofa  $R$  ni o'zgartirish va masofa qiymatlariga to'g'ri keluvchi har bir energiya uchun hisoblab topiladi. Ikkita izolyasiyalangan H atomlari orasidagi masofa bog' uzunligiga yaqinlashgan sari sistema energiyasi pasayadi va har bir elektron boshqa atomga migratsiya qilishi mumkin. Lekin keyingi energiya kamayishiga ikkita musbat zaryadlangan zarrachalarning itarilishi to'sqinlik qiladi. Energiyaga bu musbat qo'shilish  $R$  kamayishi bilan ortadi. Demak, potensial energiya egrisi minimum orqali o'tadi va kichik yadrolararo masofada katta musbat qiymatlarga intiladi. Minimumga to'g'ri keladigan energiya qiymati  $D_e$  bilan belgilanadi. Minimum qanchalik chuqur bo'lsa, atomlar bir-biri bilan kuchli bog'langan bo'ladi. Potensial egrisi qiymati molekula energiyasi bog' uzunligi ortishi va kamayishi bilanchun molekula energiyasi qanchalik tez o'zgarishini ko'rsatadi. Shunday qilib, egri qiymati molekula tebranma harakati chastotasini aniqlaydi.

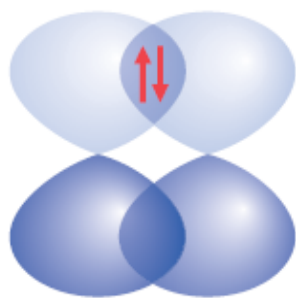
Molekula, potensial energiyasi egrisi molekula energiyasini yadrolararo masofaga bog‘liq o‘zgarishini ko‘rsatadi.

## 2.5. Bir xil yadroli ikki atomli molekulalar

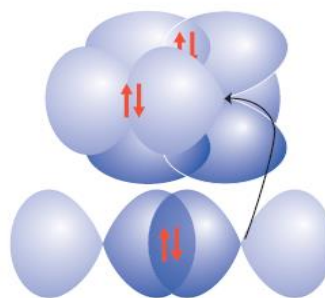
Shunga o‘xshash tavsifi yanada murakkab molekulalar uchun qo‘llanilishi mumkin, ikki atomli molekulalar ikkala atomni o‘z ichiga olgan bir xil elementlardan iborat bo‘ladi. (masalan azot molekulasini,  $N_2$ ). Azot molekulasini hosil bo‘lishini bayon qilish uchun, har bir atomning valent elektron konfiguratsiyasi ko‘rib chiqiladi. 1.8-bo‘limdan  $2s^2 2p^1_z 2p^1_y 2p^1_x$  ekanligi ma’lum. Agar atom yadrolari o‘tadigan o‘q sifatida z o‘qi tanlansa, 2.2-rasmda ko‘rsatilgandek, bir atom  $p_z$  orbital bilan ikkinchi atom  $p_z$  orbitallari qoplashishi bilan tasvirlash mumkin.

Ikki qarama qarshi yo‘nalgan p-orbitallardan  $\sigma$  bog‘ hosil bo‘ladi. Bu (3) fazoviy to‘lqin funksiya bilan ifodalaniladi. Lekin bu erda  $\chi_{A^+}$  va  $\chi_B$  sifatida  $2p_z$  orbitallar bo‘ladi. Qolgan  $2p$  orbital  $\sigma$  bog‘ hosil qilishga qatnashmaydi (o‘qqa nisbatan silindrik simmetriyaga ega emas), qolgani ikkita  $\pi$  bog‘ni hosil qilishda qatnashadi.  $\pi$  bo‘ni hosil qiladigan spin juftlari ikki p orbital fazoda o‘zaro yonma yon joylashadi.

$N_2$  molekulasida ikkita  $\pi$  bog‘ bor: ulardan biri ikki qo‘shni  $2p_x$  orbitallarning, boshqasi esa boshqa ikki  $2p_y$  orbitallardan qo‘shilishidan hosil bo‘ladi. Azot molekulasida to‘liq bog‘lar to‘plami ikkita  $\pi$  va bitta  $\sigma$  ni hosil qiladi, bu esa azot (3.6-rasm) Lyuis strukturasi mos keladi.



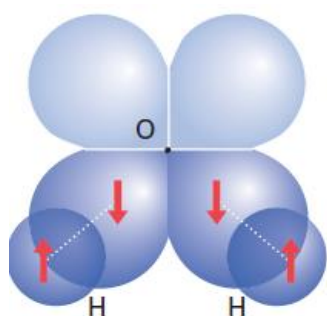
2.2-rasm.  $\pi$  bog‘ining hosil bo‘lishi



2.3-rasm.  $N_2$  molekulasini fazoviy tuzilishi. Bitta  $\sigma$  va ikkita  $\pi$  bog‘

## 2.6. Ko‘p atomli molekulalar

Ko‘p atomli molekulaga biz  $H_2O$  molekulasini misol qilib keltirishimiz mumkin. Vodorod atomining valent elektron konfiguratsiyasi  $1s^1$  va O atominiki esa  $2s^2 2p_z^2 2p_y^1 2p_x^1$  holatda bo‘ladi. Bu ikki elektron juftlarida O 2p orbitalning elektronlarini har biri bilan H ning 1s elektronlarini biriktiradi va natijasida har bir birikish  $\sigma$  bog‘ hosil qiladi. Chunki har bir  $2p_y$  va  $2p_z$  orbitallar  $90^\circ$  gradus ostida yotadi. Bu ikki  $\sigma$  bog‘ ham boshqalari kabi  $90^\circ$  ostida yotadi. (2.6 shakl). Shuningdek  $H_2O$  molekulasidagi bog‘ orasidagi burchak ulardan farq qilib  $104.5^\circ$  da bo‘lishi aniqlangan. Shunga o‘xshash struktura, ammiak molekulasidagi N atomi uchta H atomini elektronini biriktirib olishda uchta yarim to‘lgan elektron bog‘onasi ishtirok etadi. Ammiak molekulasining fazoviy strukturasi trigonal piramida shaklida bo‘lib, undagi bog‘lar orasidagi burchak  $90^\circ$  bo‘lmay balki  $107^\circ$  ekanligi ma’lum.



2.4-rasm. VBU bo‘yicha  $H_2O$  molekulasining hosil bo‘lishi. Bu molekulada ikkita  $\sigma$  –bog‘ O 2p va 1s orbitallarning qo‘shilishidan hosil bo‘ladi.

Boshqa bir ko‘p atomli molekula hosil qiladigan birikmalarga to‘rt valentli C atomi to‘rtta bog‘ orqali birikma hosil qiladi. C atomining tashqi electron qobig‘idagi bog‘ hosil qilishda qo‘zg‘almagan holatda  $2s^2 2p_z^1 2p_y^1$ , to‘rt emas ikkita bog‘ hosil qiladi.

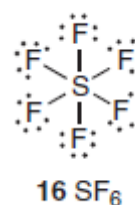
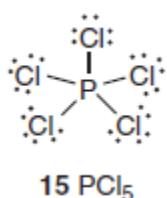
### a)G‘alayonlanish

Valent bog‘lanish usulining yaqqol kamchiligi uglerodning odatdagi to‘rt valentliligi, ya’ni to‘rtta bog‘lanish hosil qilishini tushuntira olmasligidadir. S ning asosiy holat konfiguratsiyasi  $2s^1 2p_z^1 2p_y^1 2p_x^1$  qaysiki, uglerod atomi faqat ikkita to‘rtta emas, bog‘ hosil qilishini ko‘rsatadi. Bu kamchilik g‘alayonlanish sodir bo‘lishi, ya’ni elektronning yuqoriroq energiyali orbitalga sakrab o‘tishi tahmin qilinishi bilan tushuntiriladi. Bunday elektron o‘tishi energiya sarfi talab etsa ham, mustahkam bog‘lar hosil bo‘lishi bilan va ko‘p sonli natijasi energiya

yutug'ini beradi. Bunday jarayon real emas, atom qandaydir bir holda g'alayonlangan holga o'tishi va keyin bog' hosil qilishi; bu faqat umumiy energiya o'zgarishiga bog' hosil qilinishi bilan xissa qo'shilishidir.

### (b)Gipervalentlik

2 davr elementlari Li dan Ne gacha , shuningdek oktet qoidasi ustuvor bo'ladi, lekin elementlarning keying davrlarda uni og'ishini ko'rsatadi. Misol uchun,  $\text{PCl}_5$  bog'ida valent qobig'ida P da 10 ta elektron bilan bog'lanadi, har bir P—Cl da bir juft(15). Xuddi shunday  $\text{SF}_6$  molekulasida ham S atomida 12 ta elektron bo'lishi kerak chunki F atomi markaziy S bilan elektron juftlar orqali bog'langan(16). Bog'lanishning bu turida bir atom yani markaziy atom boshqalari bilan 2dan ziyod bog' orqali bog'lanadi. Gepervalentlikni an'anaviy tushuntirish to'lmagan d orbitallarda mavjudligini tushuntiradi, P atomi 8 dan ortiq elektronni sig'dira oladi agarda 3d vakant orbital ham qatnashsa.  $\text{PCl}_5$  da 5 juft elektronlar bor, bu bog'lanishda 3d ni ishlatishimiz zarur orbitalning valent qobig'ida to'rtta 3s va 3d mavjud. 2davrda 2d orbitalning yo'qligi uchun unday xususiyatga ega emas.



### (c)Gibridlanish

Atom orbitallar bir xil atom bilan qo'shilsa gibrid orbital hosil bo'ladi: har bir maxsus molecular geometriyaga muayyan gibridlanish sxemasi mos tushadi. 14 guruh  $\text{AB}_4$  molekulasini bog'ini tasvirlaydi, chunki uning hosil bo'lishida bir turida 3ta  $\sigma$  ( $X_B$  va  $X_{A2p}$  shakli uchun), va turli xarakterni aniqlashda to'rtta  $\sigma$  qoshiladi ( $X_B$  va  $X_{A2s}$  xolat uchun ), qayerda bog' tabiati bir xil yani har bir A—B bog' ek vivalent bo'ladi, misol uchun  $\text{CH}_4$  da.

Gibridlanish natijasida elektron bulut simmetrik shaklga ega bo‘ladi. Erkin holatdagi atomlarning orbitallari gibridlangan holatda bo‘lmaydi, gibridlanish atomlardan molekular hosil bo‘lishida yuzaga chiqadi. Gibrid orbitallar o‘zining kattaroq qismi bilan boshqa atomlarning elektron bulutini ko‘proq qoplaydi. Shu sababli gibridlangan orbitallar ishtirokida hosil bo‘lgan bog‘lanish barqaror bo‘ladi.

Gibrid orbitallarning bu shakllari maxsus tizimda kombinatlashadi,

$$\begin{aligned} h_1 &= s + p_x + p_y + p_z & h_2 &= s - p_x - p_y + p_z \\ h_3 &= s - p_x + p_y - p_z & h_4 &= s + p_x - p_y - p_z \end{aligned} \quad (2.2)$$

Shuningdek orbitallar komponentlari o‘rtasidagi to‘siq bo‘ladi, har bir gibrid orbital kattaroq belgilarida qarama-qarshi yo‘nalish kichikroq nuqtalar bo‘ladi Gibrid orbitallar orasidagi burchak 109.47\* bo‘lganida tetragonal shaklni beradi. Chunki

Biz buni hozirda oson aniqlash uchun CH<sub>4</sub> ni ko‘ramiz, bunda molekula bir xil qiymatli to‘rtta C-H dan iboratligi uchun tetragonal shaklga ega. Uglerod atomi 4 ta σ bog‘ orqali H bilan bog‘langan.

Gibrid orbitallar turli kombinatsiyalardaturli xil fazoviy shakllar hosil qiladi. Qo‘shbog‘lar sp<sup>2</sup> gibridlangan holatda bo‘ladi. 2.3-jadvalda ko‘p uchraydigan ayrim gibridlanish turlari keltirilgan. Har bir gibrid bitta s va uchta p orbitaldan tuzilgan, bu sp<sup>3</sup> gibridlanish deyiladi.

2.3 -jadval

Ko‘p uchraydigan ayrim gibridlanish turlari

Koordinatsion soni	Fazoviy tuzilishi	Gibridlanishi
2	Chiziqli	sp, pd, sd
	burchakli	sd
3	Tpigon tekislikli	sp <sup>2</sup> , p <sup>2</sup> d
	Assimmetrik tekislikli	spd
	Trigonal piramida	pd <sup>2</sup>



4	Tetraedr	$sp^3, sd^3$
	Qiyshiq tetraedr	$spd^2, p^3d, pd^3$
	kvadrat	$p^2d^2, sp^2d$
5	Trigonal bipiramida	$sp^3d, spd^3$
	Tetragonal piramida	$sp^2d^2, sd^4, pd^4, p^3d^2$
	Pentagonal tekislikli	$p^2d^3$
6	Oktaedr	$sp^3d^2$
	Trigonal prizma	$spd^4, pd^5$
	Trigonal antiprizma	$p^3d^3$

## Molekulyar orbitallar usuli

### 2.7. Nazariyaga kirish

Hozirgi kunda noorganik molekulalarning deyarli barcha hisoblashlari molekulyar orbitallar usuli yordamida amalga oshiriladi. Biroq, ayrim hollarda sifat tahlili uchun Valent bog‘lanishlar usuli ahamiyatlidir.

Gomoyadroli ikki atomli molekulalar va ikki atomli ionlarni ko‘rib chiqishdan boshlaymiz. Bu zarrachalarning tuzilishi to‘g‘risidagi tasavvurlar ikki atomli geteroyadroli, ya’ni ikki xil elementlardan tuzilgan molekulalarga osonlik bilan o‘tish imkonini beradi.

Nazariya asoslangan yaqinlashuv. Atomlarning elektron tuzilishini bayonidagi kabi orbital yaqinlashuv tamoyilidan foydalaniladi, ya’ni N elektronlar uchun  $\psi$  to‘lqin funksiyasi bir elektronli to‘lqin funksiyalari  $\psi$  ko‘paytmasi kabi yozilishi taxmin qilinadi:  $\psi = \psi(1) \psi(2) \dots \psi(N)$ . Bu ifodaning ma’nosi birinchi elektron  $\psi(1)$ , -ikkinchisi  $\psi(2)$  bilan ifodalanadi va h. Bu bir elektronli funksiyalar molekulyar orbitallardir. Atomlarda bo‘lgani kabi bir elektronli to‘lqin funksiyasi kvadrati molekuladagi elektronning taqsimlanish ehtimolligini aniqlaydi.

Elektron orbital katta amplitudaga ega molekulyar orbitalda bo‘lish ehtimolligi ko‘p bo‘ladi, tugunlardan o‘tuvchi orbitalda esa mavjud bo‘la olmaydi.

Keyingi yaqinlashuv yadro yaqinidagi elektronning to‘lqin funksiyasi shu atomning atom orbitalidan amalda farq qilmasligiga asoslanadi. Masalan, molekulada elektron N atomi yadrosiga yaqin joylashgan bo‘lsa, uning to‘lqin funksiyasi shu atomning 1-s orbitalidir. Demak, har bir atomdan berilgan atom orbitallari superpozitsiyasi sifatida birinchi yaqinlashuvni tuzish mumkin. Molekulyar orbitallarni bunday modellash atom orbitallarning chiziqli kombinatsiyasi deb ataladi.

MO larni AOCHK sifatida tuzilayotgan paytda quyidagi shartlarga rioya qilish zarur.

1. Kombinatsiyalanayotgan AO larning energiyasi bir-biriga yaqin bo‘lishi kerak.
2. MO ni hosil qiluvchi AO lar bir-birini qoplay olishi kerak.
3. MO larni hosil qiluvchi AO lar molekulani hosil qilgan yadrolarni birlashtirib turuvchi o‘qqa nisbatan bir xil simmetriya xossalariga ega bo‘lishi kerak.

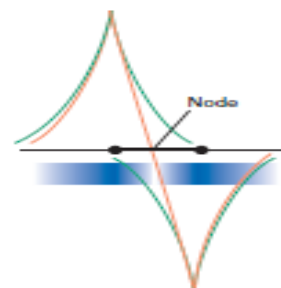
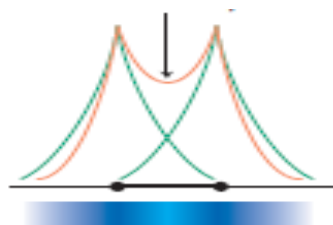
**a) Bog‘lovchi va bo‘shashtiruvchi orbitallar.**  $\psi_+$ -bog‘lovchi orbitalga misol bo‘ladi. Bu orbital elektronlar bilan band bo‘lsa, izolyasiyalangan atomlarga nisbatan molekulaning energiyasi past bo‘ladi. Birinchi yaqinlashuv bo‘yicha kimyoviy bog‘lanishni muhokama qilinganda,  $\psi_+$  ning bog‘lovchilik xarakteri, yadrolar orasidagi to‘lqin funksiyasi amplitudasining oshishiga sabab bo‘luvchi, ishorasi bo‘yicha bir xil ikki atom orbitalning interferensiyasi bilan tushuntiriladi (2.5-rasm).

$\psi_+$  orbitalda joylashgan elektron yadrolar orasidagi fazoda yuqori ehtimollik bilan mavjud bo‘ladi va ikkala yadro bilan kuchli o‘zaro ta’sirlashuvda bo‘ladi. Demak, orbitallarning qoplanishini, ya’ni yadrolar oralig‘ida elektronning bo‘lish ehtimolligini ortishiga olib keluvchi, bir orbitalning boshqa orbital joylashgan sohada tarqalishiga bog‘ mustahkamligi o‘lchovi deb hisoblash mumkin.

$\psi_-$ -bo‘shashtiruvchi orbitalga misol bo‘ladi. Bu orbital elektronlar bilan band bo‘lganda molekula energiyasi alohida atomlar energiyasidan yuqori bo‘ladi. Bu orbitaldagi elektronning, yuqori energiyasi turli amplituda qiymatli ikki orbitalning interferensiyasidan vujudga keladi, bunda to‘lqin funksiyasi

amplitudalari ayriladi va ikki yadro orasida tugun yuzasi hosil bo‘ladi (2.6-rasm).  $\psi$ -orbitalni egallovchi orbitallar yadrolar oralig‘idagi fazodan cheklangan bo‘ladi va energetik jihatdan qulay bo‘lmagan holatni egallaydi.

*Yuqori zichlik*

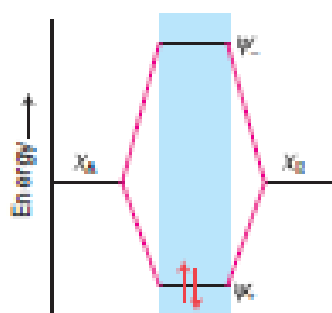


2.5-rasm. Elektron zichligining yadrolar orasida ortishi bir xil amplitudali qo‘shni orbitallar interferensiyasi natijasida yuzaga keladi.

2.6-rasm. Bo‘shashtiruvchi molekularda tugun yuzasiga olib ega bo‘lgan atom orbitallar interferensiyasi.

Odatda, ko‘p atomli molekulaning molekulay orbital energiyasi molekullararo tugunlar qancha ko‘p bo‘lsa shuncha yuqori bo‘ladi. Energiyaning ko‘tarilishi elektronlarni yadrolaro fazodan yanada ko‘proq siqib chiqarilishini ko‘rsatadi.

H<sub>2</sub> molekulasi ikki molekulay orbitali energetik pog‘onalari o‘zaro joylashuvi 2.7-rasmda ko‘rsatilgan.



2.7-rasm. Bu molekulay orbitallar energetik diagrammasining yaqqol misolidir.

Ikki molekulay orbitalari energetik farqi absorbsion spektroskopiya natijalari asosida aniqlanishi mumkin, H<sub>2</sub> molekulasi uchun 11,4eV sohada yutilish kuzatiladi (ultrabinafsha sohada, 109nm to‘lqin uzunligiga to‘g‘ri keladigan) bu

elektronni bog'lovchi orbitaldan bo'shashtiruvchi orbitalga o'tishiga to'g'ri keladi.  $H_2$  molekulasining 4,5 eV ga teng dissotsilanish energiyasi bog'lovchi orbital va izolyasiyalangan atomlar energiyasi orasidagi farqni bildiradi.

Pauli prinsipiga asosan, molekulyar orbitallardagi elektronlar soni ikkita bilan chegaralangan, shuningdek, bu elektronlar spinlari juftlashishi shart. Pauli prinsipiga asosan, Valent bog'lanish usuli kabi MO usulida ham elektronlar jufti hosil bo'lishi bir xil muhimdir, MO usuli bo'yicha ham, mustahkamligiga xissa qo'shuvchi orbitalda maksimal ikki elektron joylashishi mumkin. Masalan,  $N_2$  molekulasi izolyasiyalangan atomlarga nisbatan kichikroq energiyaga ega bo'ladi, chunki,  $\psi_+$  orbitalda joylashadi va ikkalasi ham minimal energiyaga to'g'ri keladi. Agar bitta elektroni bog'lovchi orbitalda joylashgan bo'lsa kuchsizroq bog'lanishga ega bo'lishi mumkin, masalan  $H_2^+$  zarracha qisqa yashovchi faqat gaz fazada mavjud bo'luvchi zarracha sifatida mavjuddir. Uning dissotsilanish energiyasi 2,6eV. Ikki elektronga nisbatan uch elektron bo'lishi avzallikka ega emas, chunki uchinchi elektron bo'shashtiruvchi  $\psi_-$  orbitalda joylashadi, demak, molekula mustahkamligi kamayadi. To'rtta elektron mavjud bo'lganda  $\psi_-$  - bo'shashtiruvchi orbital bo'shashtiruvchi effekti  $\psi_+$  -orbital bohlovchi effektini kompensatsiyalaydi. Bog' hosil bo'lmaydi. Bundan kelib chiqadiki, faqatgina 1s-orbitallardan iborat bog' hosil qilishga xos to'rt elektronli molekulalar, masalan,  $He_2$  dissotsiatsiyaga nisbatan beqaror bo'ladi.

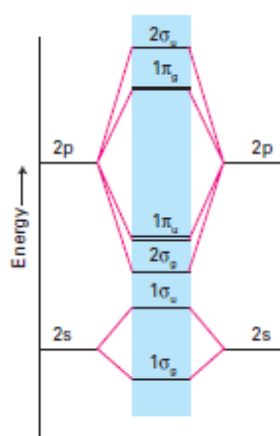
Bog'lovchi orbitallar bir xil amplitudali qo'shni orbitallar interferensiyasi natijasida yuzaga keladi; Bo'shashtiruvchi orbitallar tugun yuzasi hosil bo'lishiga olib keluvchi turli qiymatli amplitudalarga ega bo'lgan atom orbitallar interferensiyasi natijasidan hosil bo'ladi.

## **2.8. Gomoyadroli ikki atomli molekulalar.**

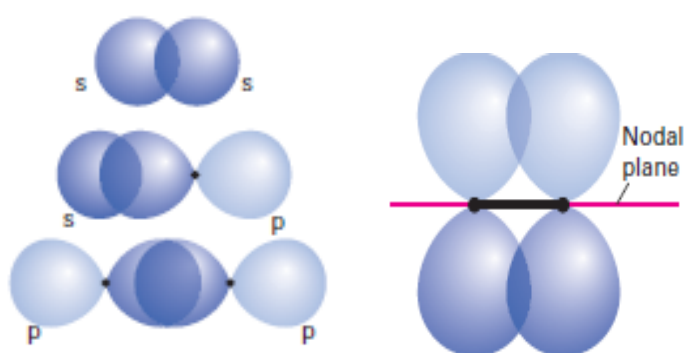
Ikki atomli molekulalar tuzilishi standart programma asosida hisoblansa ham hisoblashlar qiymatlarini tajribaviy usulda tasdiqlanishi shart. Elektron tuzilish to'g'risidagi aniq bayonlar fotoelektron spektroskopiya usulida olinishi mumkin.

Quyida MO usuli ikki atomli molekullarni o‘rganish uchun fotoelektron spektroskopiya va boshqa usullardan olingan natijalarni tushuntirish masalasi ko‘rib chiqiladi.  $H_2$  molekulasida kabi birinchi navbatda molekulyar orbitallarni tuzish uchun foydalaniladigan minimal bazislar to‘plami, ya’ni atom orbitallarining kichik to‘plamini aniqlab olish kerak. Ikkinchi davr elementlari uchun minimal to‘plam har bir atom bitta valent s-orbitallari va uchta p-orbitallari, ya’ni sakkizta orbitaldan iborat. Yuqorida aytilgandek, N ta atom orbitaldan N ta molekulyar orbital hosil qilinishi mumkin. Sakkizta molekulyar orbitalni hosil qilish uchun atomlar valent qobig‘i sakkizta (to‘rttadan har bir atom uchun) minimal to‘plami qanday tuzilishi ko‘rsatilgan. Keyin Pauli prinsipi asosida molekula asosiy holati elektron konfiguratsiyasi oldindan aytib beriladi.

Bazis to‘plamni hosil qiluvchi atom orbitallar energetik pog‘onalari molekulyar orbitallar diagrammasi ikki tomonida ko‘rsatiladi (2.8-rasm).  $\sigma$  – orbitallar yadrolarni tutushtiruvchi o‘qqa nisbatan silindrik simmetriyaga ega bo‘lgan atom orbitallar qoplanganda (uni ko‘pincha z o‘qi sifatida qabul qilinadi) hosil bo‘ladi.  $\sigma$ -belgisi, orbital silindrik simmetriyaga ega ekanligini bildiradi. Shunday qilib, molekulyar  $\sigma$ -orbitallar ikki atomning 2s 2p<sub>z</sub> orbitallaridan 5-rasmda ko‘rsatilgandek hosil bo‘ladi.



2.8-rasm.



2.9-rasm.  $\sigma$  va  $\pi$  bog‘larning hosil bo‘lishi

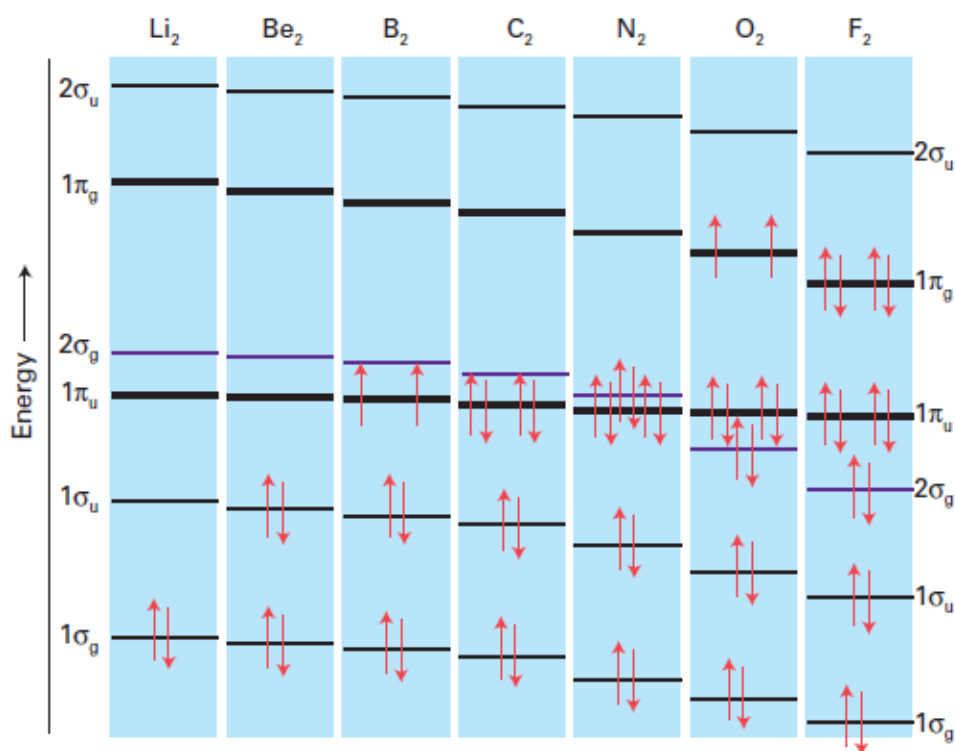
2-davr elementlari  $F_2$  va  
 $N_2$  MO diagrammalari

Silindrik simmetriyali to'rtta (A atom  $2s$  va  $2p_z$  orbitallari va V atomning tegishli orbitallari) orbitaldan to'rtta molekulyar  $\sigma$ -orbitallarni hosil qilish mumkin. Ulardan ikkitasi bog'lovchi va ikkitasi bo'shashtiruvchi. Energetik diagramma to'raligicha 2.7-rasmda keltirilgandek tuziladi (orbitallar 1  $\sigma$ , 2  $\sigma$  deb) kichik energiyali orbitaldan boshlab belgilanadi.

Qolgan z o'qi orqali o'tgan tugun yuzaga ega bo'lgan, har bir atom ikkita  $2p_x$  orbitali  $\pi$ -orbital hosil qilib qoplashishadi. Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi  $\pi$ -orbitallar ikkita  $2p_x$  va ikkita  $2p_y$  orbitallarning o'zaro qoplashishi natijasida hosil bo'ladi. Bunday qoplashish ikki juft ikki marta ayniy orbitallarni hosil qiladi.

MO usuli bo'yicha ikki atomli molekullarni bayon qilish quyidagicha amalga oshiriladi

1. N ta atom orbitallar bazis to'plamidan molekulyar orbitallar tuziladi. Ikkinchi davr uchun  $N=8$ .
2. Simmetriyasi bo'yicha sakkizta orbital ikki tip to'rtta  $\sigma$  va to'rtta  $\pi$ -orbitallarga ajratiladi.
3. To'rtta  $\pi$ -orbitallar bitta ikki marta ayniy bog'lovchi orbitallar juftini va bitta ikki marta ayniy bog'lamovchi orbitallar juftini hosil qiladi.
4. To'rtta  $\sigma$ -orbital energiya barcha sohasini qoplaydi: ulardan biri bog'lovchi, boshqasi bog'lamovchi, qolgan ikki  $\sigma$ -orbital ular orasida joylashgan.



2.10-rasm. 2-davr elementlari MO xususiyatlari

Fotoelektron spektroskopiya va kompyuter hisoblashlar (molekular uchun Shredinger tenglamasi natijalari) 2.10–rasmda ko‘rsatilgan energetik diagrammani tuzish mumkin. Bundan ko‘rinadiki,  $\text{Li}_2$  dan  $\text{N}_2$  gacha orbitallarning joylashishi rasmda ko‘rsatilgandek bo‘ladi,  $\text{O}_2$  va  $\text{F}_2$  lar uchun  $2\sigma$  va  $1\pi$ -orbitallar tartibi o‘zgaradi va 4-rasmdagidek sxema hosil bo‘ladi. Teskari tartib ikkinchi davr bo‘yicha o‘ngdan chapga o‘tganda  $2s$  va  $2p$  orbitallari energetik farqlari oshishi sababli yuzaga keladi.

Molekular uchun elektron konfiguratsiyani tuzish prinsipi.

Atomlar kabi molekular uchun elektron konfiguratsiya energetik pog‘onalar diagrammasi jamlangan holda ishlatiladi. Orbitallar energiyaning ortib borishi tartibida to‘lib boradi. Har bir orbitalda ikkitadan ko‘p bo‘lmagan juftlashgan elektron joylashgan bo‘ladi. Agar elektron joylashishi uchun bittadan ko‘p orbital mavjud bo‘lsa, (chunki ular ayniy  $\pi$ -orbitallar kabi energiyasi bir xil) orbitallar alohida to‘ladi. Bu holatda yarmigacha to‘lgan orbitallardagi elektronlar parallel spinga ega bo‘ladi, bu qoida atomlar uchun Gund qoidasiga to‘g‘ri keladi.

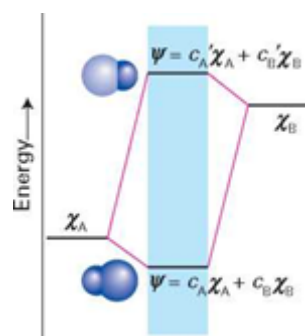
Kichik o'zgarishlar bilan bu qoidalar ikkinchi davr elementlari uchun asosiy holatda qo'llanilishi mumkin. Masalan, o'nta elektronga ega bo'lgan N<sub>2</sub> molekulasiining elektron konfiguratsiyasi: N<sub>2</sub>: 1σ<sub>g</sub><sup>2</sup>1σ<sub>u</sub><sup>2</sup>1π<sub>u</sub><sup>4</sup>2σ<sub>g</sub><sup>2</sup>.

Molekulyar orbitallar atom orbitallar kabi yoziladi; Orbitallar energiyalarni ortib borishi tartibida sanab o'tiladi, elektronlar soni esa yuqoridagi indeksida ko'rsatiladi.

## 2.9. Geteroyadroli ikki atomli molekularlar

Geteroyadroli ikki atomli molekularlarning molekulyar orbitallari gomoyadroli molekulyar orbitallardan farq qilib, har bir atom orbitaldan teng bo'lmagan hissalariga ega bo'lgan ikki atomli molekularlar hosil bo'ladi. Har bir molekulyar orbitalning o'ziga hos shakli bor.

$$\psi = C_A\chi_A + C_B\chi_B + \dots \quad (2.6)$$



2.11-rasm. Turli xil energiyali ikki atom orbitaldan hosil bo'ladigan molekulyar orbital energetik holat diagrammasi. Kam energiyali atom orbitallari birinchi navbatda quyiroqda joylashadi va aksincha. Yuqori energiyali atom orbitallari iloji boricha kamroq energiyali holatda mavjud bo'ladi.

Biz ko'rib chiqayotgan yozilmagan orbitallarni shakllantirish uchun to'g'ri simmetriya orqali

σ-yoki π-bog'lar bilan bog'langan boshqa barcha orbitallarni o'zichiga oladi. Gomoyadroli orbitallardan farqli o'laroq C<sub>A</sub> va C<sub>B</sub> ning koeffitsienlari teng emas. Yoki  $C_A^2 > C_B^2$ , χ<sub>A</sub> asosiy molekulyar orbital hisoblanib B atomning elektronlari A atomning orbitaliga yaqinlashish ehtimoli hisoblanadi. Qarama-qarshi ravishda ikki atomli geteroyadroli molekulyar orbitallarning hosil bo'lishida



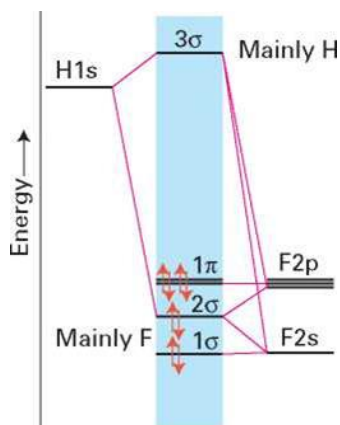
elektromanfiyligi katta atom ko'proq va elektromanfiyligi kichik atom esa bog'lanish uchun o'zining kamroq hissasini qo'shadi.

### (a) Geteroyadroli molekulyar orbitallar

*Asosiy tushunchalar:* geteroyadroli ikki atomli molekularar qutbli bo'ladi; bog'lovchi elektronlarni elektromanfiyroq atom atrofida, bo'shashtiruvchi elektronlarni esa, kam elektromanfiy atom atrofida topish ehtimolligi yuqori bo'ladi.

Molekulyar orbitallar hosil bo'lishida elektromanfiyligi katta atomga odatda ko'proq ulush to'g'ri keladi, chunki kuchliroq tortilishi ularning bog'langan holatda turishi uchun qulay holat hisoblanadi. Teng bo'lmagan ikki atomning elektronlarining juftlashishidan qutbli kovalent bog' yoki ion bog'lar hosil bo'ladi. Ion bog'lanishda bir atom hosil bo'lgan elektronlarni to'liq o'ziga tortadi. Kam elektromanfiy atomda esa bo'shashtiruvchi elektronlar yig'iladi (2.11-rasm), bo'shashtiruvchi elektronlar uchun bu joy energetik jihatdan noqulay bo'lib ularning bo'lish ehtimoli kamayadi.

Geteroyadroli va gomoyadroli atomli ikki atomli molekularar uchun yana bir farq turli atom orbitallarining umumiy energiyalari o'rtasidagi tafovutga borib taqaladi. Kam energiyali ikki to'liqin funksiyalarning ajralishini biz oldin ham qarab chiqqanmiz. Bu energiyalar ajralishiga bog'liq bo'lib, kam energiyali holatlarda gomoyadroli molekulararga nisbatan geteroyadroli ikki atomli molekularlarda kamroq kuzatiladi, bu holat turli molekularlarda energiyaning kompensatsiyalanishini nazarda tutadi. Shu bilan birga, biz albatta, boshqa faktorlarni hisobga olmasdan (orbitallar hajmi va qoplanish yo'llari) A-B bog'lanishlar A-A bog'lanishlardan kuchsiz bo'ladi deya olmaymiz. Masalan, geteroyadroli CO molekulasida unga gomoyadroli izoelektron o'xshashi N<sub>2</sub> molekulasida umumiy bog'lanish energiyalari tegishli 1070 kJ/mol va 946 kJ/mol ga teng.



### (b) Vodorod ftorid

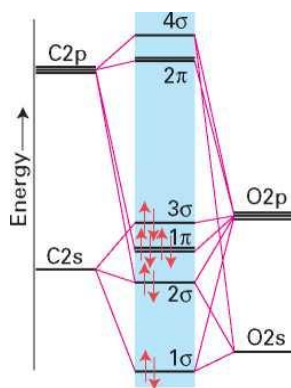
*Asosiy tushunchalar:* Vodorod ftoridida bog'lovchi orbitalalar asosan F atomi atrofida jamlanadi va bo'shashtiruvchi orbitalalar H atomi atrofida jamlangan bo'ladi.

Umumiy oddiy misol sifatida, geteroyadroli ikki atomli molekula HF ni qarab chiqamiz. Molekulyar orbitalning shakllanishida 5 ta valent orbitallar: H atomidan 1s va F atomidan 2s va 2p qatnashadi; beshta atom orbital asosiga qurilgan molekulyar orbitalda jami  $1+7 = 8$  ta valent elektron bor.

2.12-rasm. HF uchun molekulyar orbitallarning energetik holatlar diagrammasi. Unda atomlarning ionlanish energiyalari ham tasvirlangan.

HF ning  $\sigma$  orbital H 1s, F2s va F2p<sub>z</sub> orbitallari (z o'qi bo'ylab) asosida hosil bo'ladi. Bu uch atom orbitalning kombinatsiyasidan uchta  $\sigma$  molekulyar orbital uchun  $\psi = c_1\chi_{H1s} + c_2\chi_{F2s} + c_3\chi_{F2p}$ . Bu holatda F2p<sub>x</sub> va F2p<sub>y</sub> orbitalalar o'zgarish qoladi, ular  $\pi$  simmetriyaga ega

va bu simmetriyaga H valent orbitali simmetrik emas.



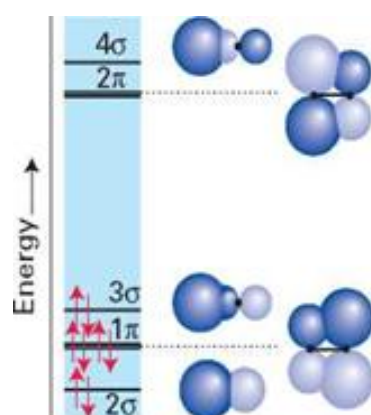
2.13-rasm. CO uchun molekulyar orbitallarning energetik holat diagrammasi.

Bu  $\pi$  orbitalalar yuqorida aytib o'tilgan bog'lanmaydigan orbitallarga to'g'ri keladi va bitta atom bilan chegaralangan molekulyar orbitallar hosil bo'ladi. E'tibor qiling, geteroyadroli ikki atomli molekullalarda inversion markaz

bo‘lmaydi, biz shuning uchun molekulyar orbitallarning g,u klassifikatsiyasidan foydalana olmaymiz.

2.12-rasmda HF uchun molekulyar orbitallarning energiya darajalari diagrammasi keltirilgan.  $1\pi$  bog‘lovchi orbitalning H1s orbitaldan energiya farqi juda ham katta bo‘lgani uchun asosan F2s ga xarakterli hisoblanadi. Shunga ko‘ra, bu orbital asosan F atomining bog‘lamaydigan orbitali hisoblanadi.  $2\pi$  orbital  $1\pi$  orbitalga nisbatan H1s va F2p orasidagi bog‘lanishni ko‘proq ifodalaydi.  $3\pi$  orbital bo‘shashtirovchi orbital hisoblanib H1s orbitalining o‘zining hususiy 1s orbitalini ifodalaydi va katta energiyaga ega (F orbitallari bilan solishtirganda) shu sababli bo‘shashtiruvchi orbitallarga o‘z hissasini ko‘proq qo‘shadi.

Sakkizta valent elektronlaridan ikkitasi atomlar orasida bitta bog‘ni hosil qilib,  $2\pi$  orbital hisoblanadi. Oltitasi  $1\pi$  va  $1\sigma$  orbitallarda joylashgan; bu orbitallar bog‘lamaydigan orbitallar va F atomida cheklangan bo‘ladi. Bu F atomi uchta taqsimlanmagan juftga ega an’anaviy modelga mos keladi. Barcha elektronlarni tasvirlangan molekula konfiguratsiyasi . Bir muhim hususiyatni ta’kidlash lozimki, barcha orbitallar F atomi ustiga to‘planishga moyil bo‘ladi. Biz fluor atomi qisman manfiy zaryadlanganligi va HF qutbli molekula bo‘lishini tajribada aniqlashimiz mumkin.

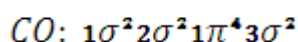


2.14-rasm. CO ning molekulyar orbital-larning sxematik tasviri, atom o‘chamlari bilan magnet hossalari tasviri bilan bog‘liqligi.

### (c) Uglarod (II) oksidi

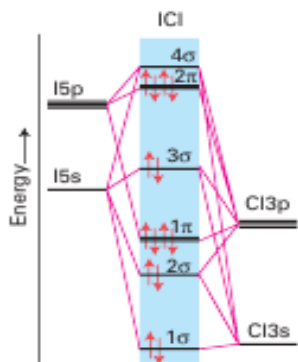
*Asosiy tushunchalar:* Uglarod (II) oksid molekulasida asosan HOMO deyarli bogʻlanmaydigan lokallashgan  $\sigma$  orbital hisoblanadi. LUMO esa boʻshashtiruvchi  $\pi$  orbital hisoblanadi.

Uglarod (II) oksidning molekulyar orbitallari energetik holat diagrammasini tuzish HF ga nisbatan murakkabroq boʻlib, undagi har ikki atomdagi 2s va 2p orbitallar  $\sigma$  va  $\pi$  molekulyar orbitallar hosil boʻlishida ishtirok etadi. Uning energetik holatlar diagrammasi 2.14-rasmda keltirilgan. Uning asosiy holat konfiguratsiyasi



Bu yerda O atomining  $1\sigma$  orbitali bogʻlamaydigan orbital hisoblanadi.  $2\sigma$  orbital bogʻlovchi. Asosan C2p orbitallar  $1\pi$  qoʻsh bogʻlanish orbitali hosil qiladi. COda HOMO  $3\sigma$  hisoblanadi, asosan bogʻlamovchi xarakterga ega C atomining C2p<sub>z</sub> orbitallaridan tashkil topgan. LUMO uchun C2p orbital xarakterli boʻlib, boʻshashtiruvchi qoʻsh bogʻlanish mavjud (2.14. rasm). C atomidagi chegara  $\pi$  juft orbitallar lokallashgan boʻlib, buday kombinatsiya metall karbonillari hodil boʻlishini toʻgʻri xarakterlaydi; metall karbonillarida HOMO dagi taqsimlanmagan  $\pi$  orbital metallning LUMO boʻsh orbitali bilan bogʻlanishda ishtirok etadi (22 bob).

C va O oʻrtasidagi elektrmanfiylik farq katta boʻlsa-da, CO molekulasida elektr dipole moment (0,1 D) qiymati kichik. Bundan tashqari, manfiy dipol qiymati kamroq elektromanfiylikka ega boʻlishiga qaramay C atomi ustida boʻladi. Bu vaziyat taqsimlanmagan juft va bogʻlovchi juftlarning oʻzaro murakkab taʼsiridan kelib chiqadi. O atomining manfiy dipol taʼsiri va O atomining taqsimlanmagan juftlari oʻzaro va C ning bogʻlovchi orbitallari bilan taʼsirlashmaydi deb qarash notoʻgʻri. Mantiqiy jihatdan qutblilki elektromanfiylikdan yumshatuvchi orbitallarga siljishi notoʻgʻri.



2.15-rasm. ICl molekulyar orbitallar diagrammasining sxematik ko'rinishi

2.5. MISOL. Geteroyadroli ikki atomli molekulasini tarkibini hisoblash.

Galogenlar o'zaro birikmalar hosil qiladi. Buning natijasida intergalogenlari birikmalaridan biri yod monoklorid bo'lib, asosiy orbitallarni  $1\sigma$ ,  $2\sigma$ ,  $3\sigma$ ,  $1\pi$ ,  $2\pi$  hisoblang. ICl uchun asosiy elektron konfiguratsiyani keltiring.

**Javob.** Birinchidan, biz molekulyar orbitalni shakllantirish uchun foydalanilgan atom orbitallarni aniqlanadi: bular Cl ning  $3s$  va  $3p$  valent orbitallari

va I ning  $5s$  va  $5p$  valent orbitallaridir. 2 davr elementlari uchun molekulyar orbitallarni keltirish shakli  $\sigma$  va  $\pi$  orbitallar 2.24-rasmda ko'rsatilgan. Bog'lovchi orbitallar asosan Cl uchun xarakterli bo'lib (chunki u elektromanfiyligi yuqori atom hisoblanadi) bo'shashtiruvchi orbitallar asosan I uchun xosdir. Ularning  $7+7=14$  ta valent elektronlari uchun, umumiy konfiguratsiyasi :  $1\sigma^2 2\sigma^2 1\pi^4 3\sigma^2 4\pi^2$

**Mustaqil topshiriq.** Gipoklorit ion uchun umumiy elektron konfiguratsiyani tuzing.

## 2.10. BOG' HUSUSIYATLARI

Biz juft elektronlar hosil bo'lishining ahamiyati ma'lum: ikki elektronlar bitta bog'lovchi orbitalni egallaydi va shu sababli maksimal bitta kimyoviy bog'lanish hosil qilishi mumkin. Biz bog'lanish tartibi tushunchasini kiritish orqali bu fikrni kengaytiramiz.

### (a) Bog' tartibi

*Asosiy tusunchalar:* bog' tartibi molekulyar orbitaldagi ikki atomlar orasidagi barcha bog'lanishlar sonini ko'rsatadi; bog'lanish kuchi qanchalik katta bo'lsa, berilgan atomlar jufti o'rtasidagi bog' tartibi katta bo'ladi.

Bog' tartibi – b, ikki atom orasidagi bog'lovchi va bo'shashtiruvchi elektronlar juftlarining soniga bog'liq. Aniqrog'i bog' tartibi quyidagicha ifodalanadi:

$$b = \frac{1}{2} (n - n^*) \quad (2.7)$$

bu yerda n – bog'lovchi va n\* - bo'shashtiruvchi orbitallardagi jami elektronlar sonini bildiradi. Bog' tartibini aniqlashda bog'lamaydigan elektronlar hisobga olinmaydi.

**A Qisqa masala.** Diftor  $F_2$  quyidagi konfiguratsiyaga ega  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_g^4 1\pi_u^4$  va chunki  $1\sigma_g^2, 1\pi_u^4$  va  $2\sigma_g^2$  orbitallar bog'lovchi, lekin,  $1\sigma_u^2$  va  $1\pi_g^4$  orbitallar bo'shashtiruvchi bo'lib,  $b = \frac{1}{2} (2 + 2 + 4 - 2 - 4) = 1$ . Demak,  $F_2$  uchun bog' tartibi 1. Unga ko'ra an'anviy bir bog'li F – F struktura mos keladi. Azot  $N_2$  molekulasida uchun konfiguratsiya  $1\sigma_g^2 1\sigma_u^2 2\sigma_g^2 1\pi_g^4$  va  $b = \frac{1}{2} (2 + 2 + 4 - 2) = 3$ . Bog' tartibi uch bo'lgan holat uchun atomlar orasida uchlamchi bog'lanish bo'lgan  $N \equiv N$  struktura mos keladi. Bunday yuqori bog' tartibini molekulaning yuqori entalpiyasi ( $946 \text{ kJ mol}^{-1}$ ) tasdiqlaydi, yana bir yuqori bog' tartibli molekula keltiring.

Izoelektronli molekula va ionlar uchun bog' tartibi bir xil bo'ladi, masalan  $F_2$  va  $O_2^{2-}$  uchun bog' tartibi 1.  $CO$  ning bog' tartibi unga izoelektronli  $N_2$  kabi 3 bo'lib,  $C=O$  strukturasiga mos. Biroq bog' tartibini bunday aniqlash geteroyadroli molekulalar uchun juda oddiy hisoblanadi.

Misol uchun, molekulyar orbitallar qayta hisoblashda va dagi katta bog'lamaydigan orbitallarni b hisoblashda O va C orasida lokallashgan deb qarab hisobga olmaslik kerak. Bunda olingan bog' tartibi o'zgarmaydi. Darsda bog'

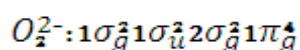
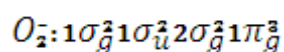
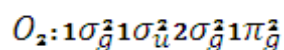
tartibini hisoblashda karrali bog‘lanishlarni hisobga olish, lekin b ning natijasini hisoblash faqat kerakli orbitallarni hisobga olish kerak.

Bog‘ tartibini aniqlash faqat bitta orbital band qilish imkoniyatini bildiradi. Masalan:  $O_2^-$  uchun bog‘ tartibi 1,5 ga teng. Chunki  $1\pi_g^3$  bo‘shashtiruvchi orbitalda 3 ta elektron mavjud.  $N_2$  dan bitta elektron chiqib ketishi bog‘ tartibini 3 dan 2,5 ga o‘zgartiradi, chunki  $N_2^+$  hosil bo‘ladi. Bu bog‘ tartibining kamayishi bog‘ energiyasini (946 dan 855 kJ/mol gacha) va bog‘ uzunligini  $N_2$  da 109pm dan  $N_2^+$  da 112pm gacha o‘zgartiradi.

### 2.1. Misol. Bog‘ tartibini belgilash

Kislorod molekulasini  $O_2$ , superoksid  $O_2^-$  va peroksid ionlari  $O_2^{2-}$  uchun bog‘ tartibini aniqlang.

Javob. Biz valent elektronlar sonini va ularning molekulyar orbitallarni qanday to‘ldirganligini aniqlash va 2.7. bandga ko‘ra b ni hisoblang.  $O_2$ ,  $O_2^-$  va  $O_2^{2-}$  uchun 12, 13 va 14 ta valent elektronlarga ega. Ularning konfiguratsiyasi



Bu yerda  $\sigma_g$  va  $\pi_g$  orbitallar bog‘lovchi, lekin,  $\sigma_u$  va  $\pi_u$  orbitallar bo‘shashtiruvchi bo‘lib, ularning bog‘ tartibi

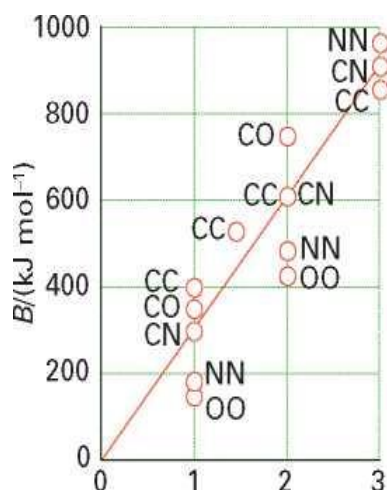
$$O_2: b = \frac{1}{2} (2 + 2 - 2 + 4 - 2) = 2$$

$$O_2^-: b = \frac{1}{2} (2 + 2 - 2 + 4 - 3) = 1.5$$

$$O_2^{2-}: b = \frac{1}{2} (2 + 2 - 2 + 4 - 4) = 1$$

**Mustaqil topshiriq.** Karbid ioni  $C_2^{2-}$  uchun bog‘ tartibini hisoblang.

**(b) Bog‘ karraliligi**



2.16 –rasm. Bog‘ tartibi va bog‘ mustahkamligi orasidagi bog‘liqlik

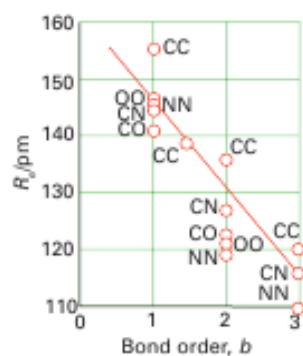
Asosiy tushunchalar: bog‘ tartibi oshishi bilan atomlar jufti orasidagi bog‘ mustahkamligi ortib, bog‘ uzunligi qisqaradi.

Bog‘ uzunligi va mustahkamligi bog‘ tartibi o‘zaro kuchli bog‘liqlik bor. Berilgan atomlar jufti uchun:

*Bog‘ tartibi ortsa, bog‘ hosil bo‘lish entalpiyasi ham ortadi.*

*Bog‘ tartibi ortsa, bog‘ uzunligi kamayadi.*

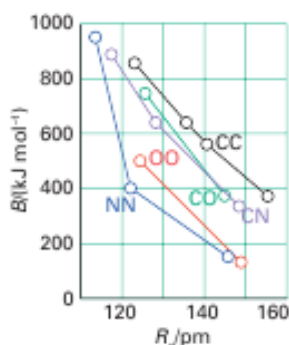
Bu tendensiyalar 2.16 va 2.17-rasmlarda ko‘rsatilgan. Bog‘liqlik turli elementlarda farq qiladi. 2 davrdagi bog‘liqlik C – C bog‘lanishlarda zaif, qo‘sh bog‘lanishning mustahkamligi C = C yakka C – C bog‘lanishning mustahkamligidan ikki barobar kamroq. Bu ayniqsa organik kimyoda to‘yinmagan birikmalarning reaksiyaga kirishishida yaqqol ko‘rinadi. Masalan, yakka bog‘lanishli birikmalarga nisbatan eten ca etinning polimerlanish reaksiyalarining energetik jihatdan afzalligi (katalizator ishlatilmasa) da ko‘rinadi. Bu bog‘liqlikni uglerodning boshqa elementlar bilan hosil qilgan birikmalarida ham hisobga olish kerak.  $N = N$  qo‘sh bog‘lanishi mustahkamligi (409 kJ/mol)  $N - N$  yakka bog‘lanishnikidan (163 kJ/mol) ikki barobar



2.17-rasm. Bog‘ tartibi va bog‘ uzunligi orasidagi bog‘liqlik



ko‘proq, uchlamchi bog‘lanishniki  $N \equiv N$  esa (946 kJ/mol) besh barobar ko‘proq.



2.18-rasm. Bog‘ uzunligi va mustahkamligi orasidagi bog‘liqlik

Bu karrali NN bog‘lari polimerlar va uch o‘lchamli birikmalardagi oddiy bog‘lanishlarga nisbatan barqarordir. Mos ravishda fosforning  $P - P$ ,  $P = P$  va  $P \equiv P$  birikmalari uchun bog‘ entalpiyalari 200, 310 va 490 kJ/mol ni tashkil etadi.

Fosfor uchun yakka bog‘lanishli birikmalar karrali bog‘laga nisbatan barqaror bo‘ladi. Shunday qilib, fosforning qattiq birikmalarida ham yakka bog‘lanishlar mavjud: oq fosforda tetragonal  $P_4$

molekulalari shu jumladan.  $P_2$  fosfor molekulalari yuqori bosim va yuqori haroratda oraliq holatlardagina mavjud.

Bog‘ tartibining yuqoridagi berilgan ikki kattaliklarning elementlar juftlari uchun bog‘liqligi quyidagicha:

*Bog‘ entalpiyasi ortsa, bog‘ uzunligi kamayadi.*

Bu bog‘lanish 2.18. rasmda keltirilgan. Bu bogliqlikdan molekula barqarorligini qarash mumkin, zero bog‘ uzunliklarini oddiy birikmalarda aniqlash mumkin.

**2.2. Misol. Bog‘ tartibi, bog‘ uzunligi va bog‘ mustahkamligi orasidagi bog‘liqlikni aytib berish.**

2.2-misolda hisoblangan kislorod molekulasida  $O_2$ , superoksid  $O_2^-$  va peroksid ionlari  $O_2^{2-}$  uchun bog‘ tartibidan foydalanib, bog‘ uzunligi va mustahkamligi

orasidagi bog'likni ko'rsating.

**Javob.** Biz bog' tartibi ortganda bog' entalpiyasi ortishini eslashimiz kerak. Bog' tartibi  $O_2$ ,  $O_2^-$  va  $O_2^{2-}$  uchun 2, 1.5 va 1 ga teng. Shuning uchun, bog' entalpiyalari, va  $O_2^{2-} < O_2^- < O_2$  tartibda ortishi kutiladi. Bog' uzunli bog' entalpiyasi ortgani sayin kamayadi, demak bog' uzunligi qarama-qarshi o'zgarishi kerak  $O_2^{2-} > O_2^- > O_2$ . Bu bashoratlarni gaz holatdagi O-O (146 kJ/mol) va O=O (496 kJ/mol) bog'lanishlar entalpiyalari shunigdek mos ravishda 132pm va 121pm bog' uzunliklari isbotlaydi.

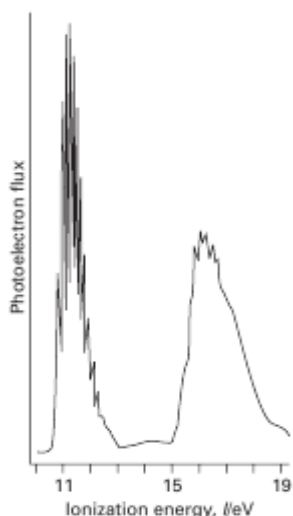
**Mustaqil topshiriq.** C-N, C=N va C≡N bog'lari uchun bog' tartibi, bog' uzunligi va bog' mustahkamligi orasidagi bog'liqlikni aytib bering.

## KO'P ATOMLI MOLEKULALAR

Molekulyar orbitallar nazariyasidan shuningdek, uch atomli molekulalar, atomlar guruhlarini va deyarli cheksiz sondagi elektronlarga ega tuzilmalarni ham o'rganish mumkin. Bunday hollarda ham molekulyar orbitallar ikki atomli orbitallarga o'xshaydi, faqat muhim farqi ularni hosil qilishda juda ko'p sondagi atom orbitallar ishtirok etishi mumkin. Avval qayd etilganidek N ta atom orbitallardan N ta molekulyar orbitallar hosil bo'lishi mumkin.

Biz ularni shakliga ko'ra  $\sigma$  va  $\pi$ , molekulyar orbitallardagi energetik holatlariga ko'ra turli energiyali bo'lishini 2.8. bo'limda ko'rib chiqqanmiz. Shu tartib ko'p atomli molekulalarning molekulyar orbitallarini muhokama qilishda ham ishlatiladi. Biz ularni o'rganishda kuchli yondoshishimiz kerak chunki, ikki atomli molekulalarning molekulyar orbitallaridan ancha murakkabdir. Shu sababli ko'p atomli molekulalarning muhokamasi ikki bosqichda amalga oshiriladi. Bu bobda biz molekulyar orbitallar shaklini hosil qilish uchun yangi fikrlardan foydalanamiz. 6-bobda ham biz molekulalarning shakllari va boshqa xususiyatlaridan molekulyar orbitallarni hisoblash uchun o'zaro simmetriya

xususiyatlaridan foydalanishni muhokama qilganmiz. Bu bobda ham ular qisqacha tarzda tushuntiriladi.



2.19-rasm.  $NH_3$  ning UB sohadagi He 21eV nurlanishi yordamida olingan fotoelektron spektri

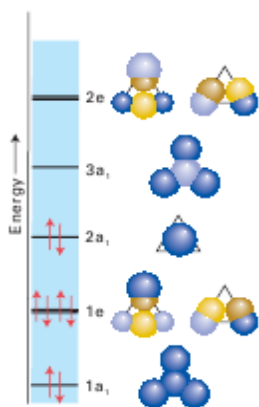
$NH_3$  fotoelektron spektri (rasm. 2.19) ko‘p atomli molekulalarning tuzilishi nazariyasi ayrim xususiyatlarni tushuntirishi ko‘rsatadi. Spekrda ikkita chiziq ko‘rinadi. Kuchsiz energiyali sohada (11 eV) o‘zgaruvchan strukturani hosil qiladi. Bu esa molekula orbitalida takrorlanishlar borligini ko‘rsatadi. Yuqori 16eV dagi keng soha esa molekulada elektronlar mustahkam bog‘langanligini ko‘rsatadi.

### (a) Ko‘p atomli molekulyar orbitallar

*Asosiy tushunchalar:* Molekulyar orbitallar shu orbitallarni hosil qiluvchi atom orbitallarning chizikli kombinatsiyalaridan iborat; ularning energiyalari gaz fazali fotoelektron spektrlariga ko‘ra belgilanadi va orbitallarning o‘zaro ta’siri ularning spektrini tahlil etish orqali aniqlanishi mumkin.

Ikki atomli molekulalar uchun joriy etilgan barcha hususiyatlar ko‘p atomli molekulalar uchun ham mavjud. Har holda, biz molekulyar orbitallarning simmetriyasini uni hosil qilayotga atom orbitallarining simmetriyalari yig‘indisi (chizikli molekulalardagi  $\sigma$  orbitallar kabi) sifatida quyidagicha yozishimiz mumkin:

$$\psi = \sum_i c_i \chi_i \quad (2.8)$$



2.20-rasm.  $NH_3$  molekulyar orbitallari hosil bo'lishida atom orbitallari o'lchamlari o'zgarishi.  $z$  - o'qi bo'yicha.

Bu chiziqli kombinatsiyada,  $\chi_i$  tegishli atom orbitallari (odatda har bir atomning valent orbitallari) va indeksdagi  $i$  esa barcha atomlar uchun simmetriklik sharti sifatida hisoblanadi.

$N$  ta atom orbitallardan  $N$  ta molekulyar orbitallar hosil bo'lishi mumkin. Shunga ko'ra:

1. Molekulyar orbitaldagi ko'p sonli bog' orbitallari katta energiyali orbitallarda bo'shashtiruvchi xarakterga ega.
2. Kam energiyali atom orbitallardan past energiyali molekulyar orbitallar hosil bo'ladi (shunga ko'ra  $s$  atom orbitallaridan  $p$  atom orbitallarga nisbatan kam energiyali molekulyar orbitallar hosil bo'ladi).
3. Yaqin bo'lmagan qo'shni atomlar shu alomatlar bo'lganida bir-biri bilan kuchsiz bog'lanadi (energiyaning kam o'zgarishi tufayli). Bu alomatlar qarama-qarshi bo'lganda kuchsiz bo'shashtiruvchi ta'sir bo'ladi.

**A Qisqa masala.**  $NH_3$ ning fotoelektron spektriga ko'ra, uning sakkizta valent elektronli molekulyar orbitalini tuzish lozim. Bu molekulyar orbital 3 ta  $H1s$ ,  $N2s$  va 3ta  $N2p$  orbitallarning kombinatsiyasidan iborat. Bu yettita atom orbitallarda yettita molekulyar orbitallar qurish mumkin (2.20-rasm).

Bu qoidalardan faqat chiziqli tuzilishga ega molekulalarda foydalaniladi, chunki barcha ko'p atomli molekulalarda ham qat'iy  $\sigma$  va  $\pi$  holatlar kuzatilmaydi. Shu bilan birga, bu usuldan ikki qo'shni atomning yadrolari orasidagi o'qda joylashgan orbitallarni ifodalash uchun foyqalanish mumkin (Masalan, MO

nazariyasini ifodalashda valent bog‘lanishlar saqlanib qolishi kerak). Ko‘p atomli molekularning simmetriyalarini ham 6 bobda tasvirlangan. Hozirda esa biz keying ma’lumotlarni o‘zlashtirishimiz uchun quyidagilarni bilishimiz kerak:

a, b hosil bo‘lmagan orbitallarni bildiradi

e ikkita hosil bo‘lgan orbitallarni (ikkita bir xil energiyali) bildiradi

t uchta hosil bo‘lgan orbitallarni (uchta bir xil energiyali) bildiradi

Bu ko‘rsatkichlar ba’zan yuqori va pastki indekslar bilan tasvirlanadi, masalan,  $a_1$ ,  $b_1$ ,  $e_g$  va  $t_2$  chunki, ularni a, b, e va t shaklida ajratish ba’zan ularning simmetriyasi tahlili uchun mos kelmaydi.

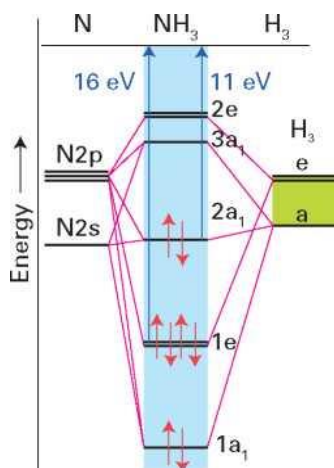
Orbitallarning yasalishi 6 bobda tasvirlangan, lekin ularning uch o‘q bo‘lab o‘zgarishini (z bo‘ylab)  $NH_3$  molekulasini uchun ko‘rib chiqib tasavvur qilish mumkin. Ikkala  $N2p_z$  va  $N2s$  orbitallar bu o‘q atrofida silindrsimon simmetriyaga ega. Uchta  $H1s$  orbitallar bir-biriga nisbatan bir xil (2.20-rasmda bir xil rang va hajmda tasvirlangan) holatda tursa silindrsimon simmetriyaga ega bo‘ladi. Biz quyidagicha molekulyar orbital tashkil qilishimiz mumkin:

$$\psi = c_1\chi_{N2s} + c_2\chi_{N2pz} + c_3\{\chi_{H1sA} + \chi_{H1sB} + \chi_{H1sC}\} \quad (2.9)$$

Bu yerdagi uchta bazis ( $H1s$  orbitallar o‘ziga xos bitta simmetriyali asos bo‘lib hisoblanadi) orbitallardan uchta molekulyar orbital hosil bo‘ladi (c ning turli koeffitsientlarining hususiyatlari). N va H atomlari orasidagi barcha bog‘lanishlar quyi energetik holatda bo‘lib, NH larning bir-biri esa yuqori energetik holatda joylashadi, bu uchinchi bog‘lanish bo‘lishini inkor etadi. Bu uchta orbital energiyasining ortishi bo‘yicha  $1a_1$ ,  $2a_1$  va  $3a_1$  tartibida joylashadi.

$N2p_x$  va  $N2p_y$  orbitallar z – o‘qiga nisbatan simmetrik bo‘ladi,  $H1s$  orbitallar bilan tegishli simmetriyalarni tashkil etish uchun foydalaniladi. Masalan, bunday superpozitsiyalardan biri

$$\psi = c_1\chi_{N2s} + c_2\{\chi_{H1sA} + \chi_{H1sB}\} \quad (2.10)$$



2.21-rasm.  $NH_3$  ning molekulyar orbitallarning elektron holatlar diagrammasi.

H1s orbitallar kombinatsiyasi  $N2p_z$  orbital bilan to'g'ri kelishini 2.20 rasmda ko'rish mumkin.  $N2s$  orbitallarni bu superpozitsiyga asosan boshqa N-H bog'lanishlari bilan kombinatsiyasini ko'rib bo'lmaydi. Hosil bo'lgan ikki energiyalari kam farq qiladi. Shunga o'xshash  $N2p_y$  ayniy orbitalini ham hosil qilish (6 bobdagi simmetriya ta'riflari orqali) mumkin. Bu misoldagi orbitallar kombinatsiyalarni birlashtirishda 1e va 2e energiyalarining ortishi kuzatiladi.

Molekulyar orbitallarning umumiy energetik holatlar diagrammasi 2.21 rasmda ko'rsatilgan. Asosiy orbitallarning joyini hisoblash va fotoelektron spektrlarning ko'rinishini hisoblab topish mumkin bo'ladi. Bizga ko'rinishicha uning fotoelektron spektrida ikkita pik 11eV va 16eV bor, demak ikkita to'lgan orbitallar mavjud. Uchinchi to'lgan orbital nurlanishning 21eV untervalidan tashqarida bo'ladi.

Bu fotoelektron spektr sakkiz elektronli to'lgan orbitallarni tasvirlaydi. Bu elektronlarning energetik jihatdan eng past energetik holatda to'g'ri kelishi molekulyar orbitallarni tuzishda esda saqlash lozim. Birinchi ikkita elektronni ga kiritib uni to'ldiring. Keying to'rttasini juft holatda 1e orbitalga kiritib uni to'ldiring. So'nggi ikkitasini bog'lamaydigan orbitalligini hisoblab faqat N atomi uchun  $2a_1$  orbitalga kiriting. Olingan umumiy konfiguratsiya  $1a_1^2 1e^4 2a_1^2$  bo'ladi. Bo'shashtiruvchi orbitallar yo'qligi tufayli molekuladagi barcha atomlar past energetik holatda bo'ladi. Bunda  $NH_3$  molekulasidagi ana'anviy qarashlarda

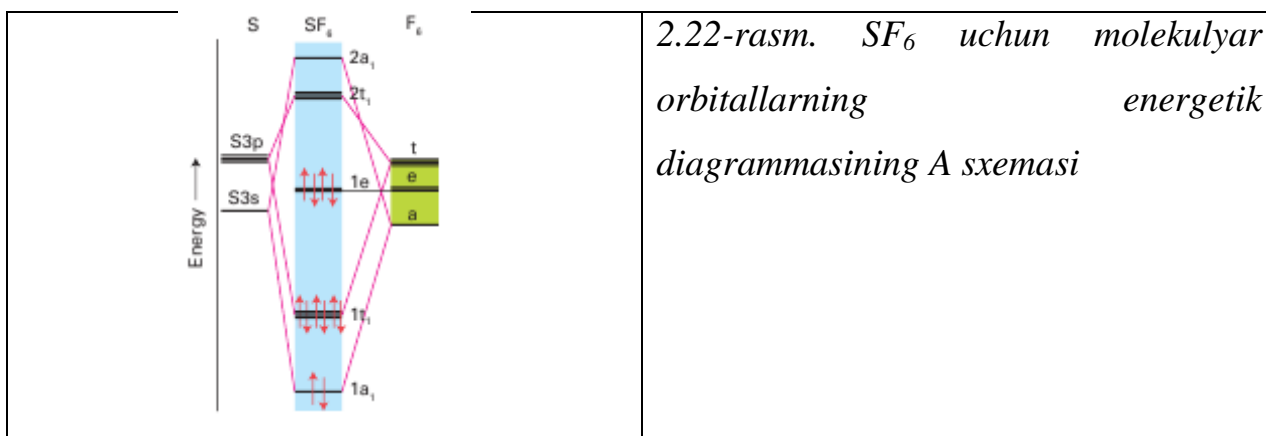
mavjud bo‘lan taqsimlanmagan juft ham HOMO  $2a_1$  da saqlanib, faqat N atomiga tegishli holatda konfiguratsiyada ishtirok etadi. Biz taqsimlanmagan juftlarning molekula shaklini ifodalashda muhim ekanligini 2.3 qismda ko‘rib o‘tganmiz. Fotelektron spektrning 11eV dagi keng to‘lqinsimon tuzilishi  $2a_1$  dagi taqsimlanmagan elektron juftlarning ionlashgan  $NH_3$  molekulasidan ajralishi natijasidir. Fotoinlanish spektrlarda keng polosali to‘lqinlarni hosil qiladi.

### (b) Molekulyar orbitallarda gipervalentlikning taqsimlanishi

*Asosiy tushunchalar:* molekulyar orbitallarda juftlarning dekolashishi natijasida ular ikkitadan ko‘proq atomlarni bog‘lashqa qatnashishi mumkin.

2.3-bobda biz valent bog‘lanishlar nazariyasi orqali atom orbitallarida sakkiztadan ortiq elektronlarni joylashtirish uchun d-orbitallarga taqsimlanish mumkinligini ko‘rganmiz. Molekulyar orbitallar nazariyasi buni yanada yaxshiroq tushuntira oladi.

Biz  $SF_6$  ni qarajak, oltita S-F bog‘lanishlarni hosil qilish uchun 12 ta valent elektronlar qatnashgani uchun gipervalentlik mavjud. Oddiy bazis atom orbitallari bo‘yicha S atomining valent orbitalidagi s va p orbitallari va oltita fluor atomining p-orbitallari S atomiga yo‘nalgan bo‘ladi. Ularning energiyasi ko‘proq S atomiga yaqin bo‘ladi, chunki biz F2s orbitallar o‘rniga F2p orbitallardan foydalanamiz. Bunda molekulyar orbital hosil bo‘lishida o‘nta atom orbitallari ishtirok etadi. Hisoblashlar to‘rtta bog‘lovchi va to‘rtta bo‘shashtiruvchi orbitallar borligini, qolgan ikki orbital esa bog‘lamaydigan orbital ekanligini ko‘rsatadi (2.22-rasm).



Joyashtirish uchun 12 ta elektron bor. Dastlabki ikkitasini  $1a_1$  ga va oltitasini  $1t_1$  ga joylashtiring. Qolgan to'rtta orbital bog'lamaydigan ekenligini hisobga olsak, umumiy konfiguratsiya  $1a_1^2 1t_1^6 1e^4$  bo'ladi. Ko'rib turganimizdek, bo'shashtiruvchi orbitallar ( $2a_1$  va  $2t_1$ ) umuman band etilmagan. Shuning uchun molekulyar orbitallar nazariyasiga ko'ra  $SF_6$  ning molekulyar orbitallari shakllantirilganda, to'rtta bog'lovchi va ikkita bog'lamaydigan orbitallarni hisobga olish va S 3d orbitallari va oktet qonuniyatini hisobga olmasa ham bo'ladi. Bu 3d orbitallar bog'lanishda ishtirok etmaydi degani emas, balki ular S va oltita F atomlari bog'lanishini tushuntirishda zarur emas deb tushuniladi. Valent bog'lanishlar nazariyasiga ko'ra esa, markaziy atom va boshqa atomlar faqat bitta bog'lanishlar bilan bog'lanadi deb qaraladi. Molekulyar orbitallar nazariyasi esa, gipervalentlikni kiritish orqali ko'p sondagi bog'lanishlar va bo'shashtiruvchi orbitallar hosil bo'lishini tushuntiradi. Shuningdek gipervalentlik boshqa savollarga: masalan, d-orbitallarning mavjudligi va katta atomlar atrofida kichik atomlarning to'planishidagi bog'liqliklarni ham tushuntiradi.

### (c) Lokallanish

*Asosiy tushunchalar:* Lokallanish va delokallanishni matematik ekvivalenti mavjud, lekin ular aniq qanday xususiyatlarni tavsiflashi 2.5-jadvalda berilgan.

“A – B bog'” deb atalgan narsa, kimyoviy bog'lanish deb ataladi va uning kimyoviy hossalari ifodalashda ishtirok etadi. Masalan  $H_2O$  dagi O-H bog'lar va H va O orasida elektron juftlarning lokallashishi bilan ekvivalent tuzilish deb qaraladi. Bu holat, elektronlarning shunchaki ikki atom o'arasidagi juftlashishlar emas barcha atomlarga dekolllashishini molekulyar orbitallar metodi tushuntira olmaydi. “A – B bog'” tushunchasini molekuladagi boshqa bog'lanishlardan mustaqil ravishda qarash ham noto'g'ridir. Shunga ko'ra, biz molekulyar orbitallar tushunchasini matematik jihatdan elektronlarning umumiy lokallashgan ekanligini ko'rsatishimiz kerak.



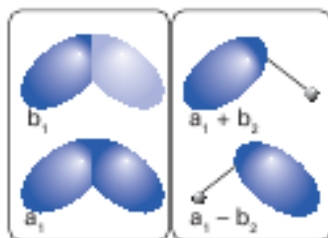
Lokallashish va delokallashish tushunchalarining hususiyatlari haqida  
umumiy ma'lumotlar

Lokallashishga mos	Delokallashishga mos
Bog' mustahkamligi	Elektron spektrlar
Kuch konstantalari	Fotoionlanish
Bog' uzunligi	Elektronga moyillik
Bryonsted bo'yicha kislotalilik*	Magnetizm
Molekulalar geometriyasini valent orbitaldagi elektron juftlarning itarilish nazariyasi tavsiflari	Walsh molekulyar geometriyasi tavsiflari Standart potentsiallar†
*4 – bobda	
†5 – bobda	

Molekulyar orbitallarni elektrtonlar umumiy lokallashishining chiziqli kombinatsiyasi sifatida qarash mumkin, lekin alohida orbitallarda holatida bundan farq qiladi.

$H_2O$  molekulasini ko'rib chiqaylik. Delokallashish ta'rifiga ko'ra, ikkita egallangan bog'lovchi orbitallar  $1a_1$  va  $1b_2$  2.23-rasmda berilgan. Ammo, biz  $1a_1 + 1b_2$  yig'indida  $1b_2$  ning manfiy yarmi  $1a_1$  orbitalning yarmini bekor qilishidan O va boshqa H atomi oralig'ida lokallashadi. Bunadan  $1a_1 - 1b_2$  ayirmada ham  $1a_1$  ning yarmi ikkinchisining yarmini deyarli bekor qilishidan orbitallar boshqa juft atomlar oralig'ida lokallanadi. Shuning uchun delokallashgan orbitallarning yig'indisi va ayirmasidan lokallangan orbitallar hosil bo'ladi (va aksincha). Bu bir

xil elektronlarni tavsiflovchi ikkita kattalik bo‘lib, bulardan birini boshqasidan yaxshiroq deb bo‘lmaydi.



2.23-rasm.  $H_2O$  molekulasida ikkita band  $1a_1$  va  $1b_2$  orbitallarning yig‘indisi va ayirmasi. Har bir holatda atomlar jufti o‘rtasida deyarli to‘liq delokallashgan orbitallar hosil bo‘ladi.

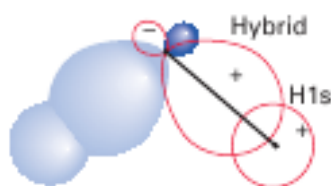
2.4-jadvalda turli kattaliklar uchun lokallashish yoki delokallashish tavsillarini ishlatish takliflari berilgan. Umuman olganda delokallashish tavsiflari butun molekulaning xususiyatlariga bog‘liq kattaliklarda zarurdir. Bunday xususiyatlarga elektron spektrlar (UB va ko‘rinadigan soha), fotoionlanish spektrlari, ionlanish va elektronga moyillik va qaytarilish potentsiallari kiritiladi. Aksincha, lokallashish xususiyatlari molekulaning biror qismi uchun xos bo‘lgan kattaliklarda zarur. Bunday xususiyatlarga bog‘ mustahkamligi, bog‘ uzunligi, bog‘ konstantalari va reaksiyalarning ba’zi jihatlari (kislota – asoslilikni belgilaydi) to‘g‘ri kelib, ko‘proq ma’lum fazoda elektronlarning joylashishiga qaratilishidan lokallashishga to‘g‘ri keladi.

#### (d) Lokallashgan bog‘lar va gibridlanish

*Asosiy tushunchalar:* Gibridlangan atom orbitallari ko‘pincha lokallashgan molekulyar orbitallar hosil bo‘lishida ishtirok etadi.

Lokallashgan molekulyar orbitallar tushunchasiga gibridlanish konsepsiyasini kiritib uni rivojlantirish mumkin. Asilini olganda, gibridlanish tushunchasi VB nazariyasiga tegishli, lekin molekulyar orbitallarda ham ba’zan oddiy sifat o‘zgarishlarini tushuntirishda ishlatiladi.

Biz molekulyar orbitallarni barcha atom orbitallarining simmetriyalari uchun tegishli deb qaraymiz. Shu bilan birga, aralash orbitallarni shakllantirishda gibrid orbitalardan (misol uchun, H<sub>2</sub>O dagi O atomi) ham lokallashgan molekulyar orbitallarni hosil qilish uchun foydalaniladi. Masalan suvdagi OH boglarning hosil bo'lishida H1s orbitallar va O2s va O2p orbitallardan iborat gibrid orbital qo'llanilishi mumkin (2.24 -rasm).



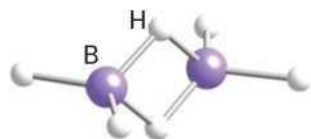
**Rasm 2.24.** H<sub>2</sub>O dagi OH lokallashgan orbitallari hosil bo'lishida O atomining gibrid orbitallari va H1s qatnashadi. Bu gibrid orbitallar  $sp^3$  shaklda bo'lishi 2.6-rasmda ko'rsatilgan.

Biz ko'rib chiqdikki, fazoda s va p orbitallarning aralashishidan hosil bo'lgan gibrid orbitallar fazoda aniq yo'nalga tetragonal shaklga ega bo'ladi. Gibrid orbitallarni lokallashgan molekulyar orbitallarni qurishda ham qo'llash mumkin. Maslan, to'rt bog'lanishli CF<sub>4</sub> da gibrid orbitallar va F 2p bog'lovchi va bo'shashtiruvchi lokallangan orbitallar hosil bo'lishi mumkin. Xuddi shunday, BF<sub>3</sub> ning elektronning taqsimlanishi B-F  $\sigma$  orbitallarni tasvirlashda biz F2p orbital bilan gibrid  $sp^2$  orbitallarning lokallanishidan foydalanishimiz mumkin. PCl<sub>5</sub> molekulasidagi lokallangan orbitallarni beshta P-Cl  $\sigma$  bog'larining beshta trigonal bipiramidaa shaklidagi  $sp^3d$  gibrid orbital bilan Cl atomining 2p orbitallaridan tashkil etiladi. Xuddi shunday biz oltitita lokallashgan orbitallarni shakllantirishda (masalan SF<sub>6</sub>) esa bizga ikkita d orbital kerak: oltitita oktaedrik  $sp^3d^2$  gibrid orbitallar qatnashadi.

### (e) Elektron tanqisligi

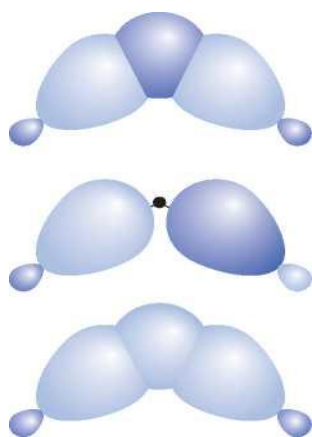
*Asosiy tushunchalar:* elektron taqchilligining mavjudlini elektronlarning bir nechta atomlarda delokallanishi bilan tushuntiriladi.

Elektron taqchil birikmalar borligi VB nazariyasi tushuntira olmadi, Luis ning fikriga ko'ra elektronlar soniga teng bog'lanishlar hosil bo'lishi yetarli emas. Bu holatni diboran  $B_2H_6$  (17) da eng oson ko'rsatish mumkin. Bu yerda 12 ta valent elektron bo'lsada, Luisning yondashuviga ko'ra esa sakkiz juft elektron sakkizta orbital hosil qiladi.



diboran  $B_2H_6$  (17)

Bir necha atom orbitallarini birlashtirib molekulyar orbitallar hosil qilishda bunday moddalar mavjudligi yordam beradi. Bu molekuladi sakkizta atomda jami 14 valent (ikkita B ning har birida uchta p va bitta s orbital va oltita H atomining har birida bittadan s orbital) orbital bor. Bu 14 ta valent orbitallardan 14 ta molekulyar orbitallar hosil qilish mumkin. Taxmina yettita molekulyar orbital bog'lovchi yoki bog'lamaydigan bo'lishiga 12 valent elektronlarning qanday joylashishiga bog'liq.



**2.25-rasm.**  $B_2H_6$  dagi ikkita B atomi va bitta H atomi orasida vujudga kelgan molekulyar orbitallar.

Biz ishlab chiqqan MOs ga ko'ra bu bo'lanishni tushuntirish uchun termina BH fragmentlar yoki BHB ko'priklari bor deyish kerak. Lokallashtirilgan MOs da terminal BH bog'larni ikki atomning orbitallaridan ( $H1s$  va  $B2s2p$  gibril) dan hosil bo'ladi. Molekulyar orbitallarda BHB ko'priksimon fragmentlarni B atomining ikkita  $B2s2p$  gibril orbitallari va H atomining  $H1s$  orbitallarining ular o'rtasidagi cho'zilgan chiziqli kombinatsiyasi hosil qiladi (rasm 2.25.). Uchta atom orbitallardan uchta molekulyar orbital hosil bo'ladi: biri bog'lovchi, biri bog'lamaydiga va uchinchi esa bo'shashtiruvchi. Bog'lovchi orbitalning ikkita elektroni BHB fragmentni ushlab tura oladi. Bu fikrga ko'ra ikkinchi BHB ko'priklari hosil bo'lishidan molekulyar orbitallar molekulalarni o'zaro bog'laydi. Shunday qilib,

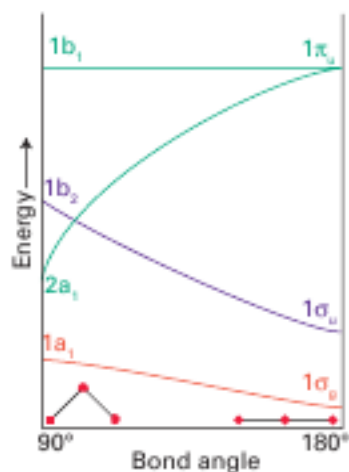
umumiy 12 ta elektronlar molekula barqarorligini ta'minlaydi, chunki olti juft molekulalararo yoyiladi.

Elektronlar tanqisli faqat borda emas (birinchi tushuntirilgan) balki, karbokationlarda va bizda keyin uchraydigan boshqa birikmalarda ham mavjud.

## 2.11. Molekulyar orbitallarga ko'ra molekulaning shakli

*Asosiy tushunchalar:* Uolsh modelida molekulalarning shakli, to'lgan molekulyar orbitallarga bog'liq bo'lib, diagrammada bog' burchaklariga kuchli bog'liqlik ko'rinadi.

MO nazariyasida bog'lovchi elektronlar butun molekula bo'ylab delokallashgan bo'ladi. Hozirda molekulyar orbitallarni maxsus dasturlar yordamida ab initio va yarim empirik uslublar orqali oson hisoblash, ancha murakkab molekulalar uchun ham katta ishonch bilan ularning tuzilishini aytish mumkin. Shunday bo'lsada, MO nazariyasi yordamida molekulalar tuzilishini tushuntirishga hali ham ehtiyoj bor.



2.26-rasm.  $XH_2$  molekulasi uchun Uolsh diagrammasi. Faqat bog'lovchi va bog'lamaydigan orbitallar ko'rsatilgan.

2.26-rasmda  $XH_2$  molekulasi uchun Uolsh diagrammasi keltirilgan. Uolsh diagrammasi maxsus bog'liqlik diagrammasi bo'lib, u bir parametrning (masalan, bog' burchagi) boshqasiga aylanishini ko'rsatadigan diagrammadir; biz keyinchalik boshqa misollarni ham ko'rib chiqamiz. Uolsh diagrammasi delokallashgan molekulyar orbitallar tuzilishini tahlil qilib unga oddiy tasvirlash yondoshuvni qabul qilgan va 1953 yilda ketma-ket bir nechta klassik maqolalar chop etgan A.D.Uolsh tomonidan ishlab chiqilgan edi. Bunday diagrammalar ko'p atomli molekulalarning shakli, spektrlari va reaksiyalarini tushuntirishda muhim rol o'ynaydi.  $XH_2$  diagrammasi qanday tarkiga egaligi va har bir molekulyar orbitalning energiyasini

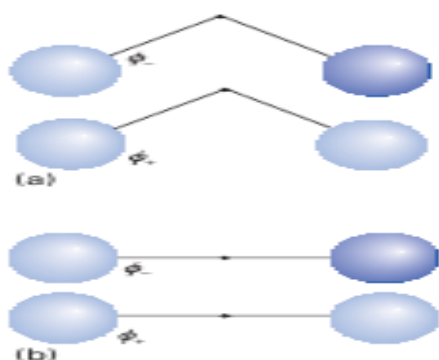
hisobga olagan holda bog‘ burchaklari 90° dan 180° gacha qilib quriladi.

Molekulyar orbitallar X ning 2s, 2p<sub>x</sub>, 2p<sub>y</sub> va 2p<sub>z</sub> atom orbitallari va ikkita H atomining 1s orbitallaridan hosil qilingan. X ning molekulyar orbitallarini hosil qilishdan oldin, H1s orbitallarining mumkin bo‘lgan kombinatsiyalarini qarab chiqaylik. H1s orbitallarining  $\phi_+$  va  $\phi_-$  chiziqli kombinatsiyalarining shakli 2.27. rasmda ko‘rsatilgan. Bu kabi “moslashgan simmetriya” tushunchasi keyinchalik ko‘pchilik tushunmovchiliklarni tushuntirdi. Molekulyar orbitallarda molekular burchaklarini ko‘rish mumkin:

$$\begin{aligned} \psi_{a_1} &= c_1\chi_{2s} + c_2\chi_{2p_z} + c_3\phi_+ \\ \psi_{b_1} &= \chi_{2p_x} \\ \psi_{b_2} &= c_4\chi_{2p_y} + c_5\phi_- \end{aligned} \quad (2.11)$$

Bu yerda uchta  $a_1$  va ikkita  $b_2$  orbitallar bor; boshqa turdagi past energiyali orbitallarni 2.2- rasmning chap tomonida ko‘rish mumkin. Chiziqli molekularlarda esa quyidagi molekulyar orbitallar bor:

$$\begin{aligned} \psi_{\sigma g} &= c_1\chi_{2s} + c_2\phi_+ \\ \psi_{\pi u} &= \chi_{2p_y} \text{ va } \chi_{2p_z} \\ \psi_{\sigma u} &= c_3\chi_{2p_y} + c_4\phi_- \end{aligned} \quad (2.12)$$



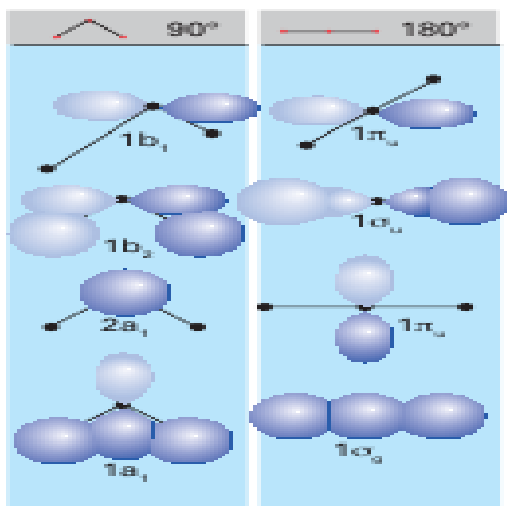
2.27-rasm. XH<sub>2</sub> ning chiziqli (a) va burchakli (b) molekularida H1s orbitallarining molekulyar orbitallar hosil bo‘lishidagi ishtiroki

Bu orbitallarni 2.28-rasmning o‘ng tomonida ko‘rish mumkin. 90° da XH<sub>2</sub> dagi bitta  $1a_1$  juda kam energiyali molekulyar orbitalda qurilgan. Orbital energiyasi kamayganda H-H bog‘ burchagi 180° gacha o‘zgaradi, chunki  $2p_z$  orbitalning  $\phi_+$  bilan ta’siri kamayadi. Bir nechta H1s orbitallarining energetik qulay  $1b_2$  holatiga o‘tishiga  $2p_y$  orbitallari halaqit beradi. Kuchsiz

bo'shashtiruvchi H-H ta'sir ham kamayadi. Eng katta o'zgarishlar  $2a_1$  orbitalda uchraydi. Bu  $90^\circ$  li molekula uchun  $X2s$  xarakterli bo'lsada, lekin molekulyar orbitallarda  $180^\circ$  li sof  $2p_z$  orbitallar bor. Shu tariqa bog' energiyasining ortishi unibg burchagini ham oshiradi. Bu  $1b_2$  da bog'lanmaydigan  $X2p$  orbital bo'lib, chiziqli molekulaga perpendikulyar holatda joylashadi. Shu sababli, uning burchagi energiyasi bilan birga o'zgaradi.

2.26-rasmdagi har bir egrilik  $180^\circ$  li o'qda maksimum va minimumda bo'ladi. Ikkita eng kam energiyali egriliklar  $180^\circ$  li o'qning minimumlarida bo'ladi.

Shuning uchun,  $XH_2$  molekulasida to'rt valentlik elektronlari chiziqli bo'ladi deb hisoblanadi.  $XH_2$  molekulasidagi to'rtta valent elektronlardan kamida bittasi bog'lanmaydigan  $2a_1$  orbitalda bo'ladi, chunki molekulada burchak hosil bo'lishi kerak. Agar molekula chiziqli bo'lsa, molekulyar orbitallarning to'lish tartibi energiyaning ortish bo'yicha  $1a_1 < 2a_1 < 1b_2 < 1b_1$ .  $XH_2$  2 davrdagi oddiy molekulalarga gaz fazadagi  $BeH_2$  kiradi ( $BeH_2$  qattiq holatda polimer to'rtta birikkan kompleks holatida bo'ladi).  $BeH_2$  ning bitta molekulasida eng kam energiyali molekulyar orbitallarda joylashgan to'rtta valent elektronlar bor. Agar, molekulaning eng kam energiyali holatiga burchak hosil bo'lishi bilan erishiladi. Biz molekulaning eng energiyali holatlarining stabillashuvidan bog' burchagi hosil bo'ladi deb hisoblaymiz. Biz keyinchalik HOMO ning (bog' burchagi ortishida) diagrammada o'ngga siljishini, molekula chiziqli bo'lsa umumiy energiya o'zgarmaydi deb qayd etiladi. Shu tariqa,  $BeH_2$  chiziqli bo'lsa, uning konfiguratsiyasini  $1\sigma^2 2\sigma^2$  bo'ladi.  $CH_2$  da,  $BeH_2$  ga nisbatan yana ikki elektron bo'lgani uchun uchta orbital to'lgan bo'lishi kerak. Bu holda, eng kam energiyali holatda molekula burchakli bo'ladi va uning konfiguratsiyasi  $1a_1^2 2a_1^2 1b_2^2$



2.28-rasm.  $XH_2$  ning 2.35- rasmda ko'rsatilgan ikki holati molekulyar orbitallari diagrammalari nisbati

Umuman olganda, besh va sakkizta valent elektroni bo'lgan  $XH_2$  molekulari burchakli bo'lishi mumkin. Aniqlangan bog' burchaklari esa quyidagicha

$BeH_2$	$BH_2$	$CH_2$	$NH_2$	$OH_2$
180°	131°	136°	103°	105°

Tajribaviy kuzatishlar sifat jihatdan Uolshning yondoshuvito'griliginiko'rsatsa dalekin molekulaning hususiyatlarini batafsil o'rganish uchun molekulyar orbitallar hisoblanishi lozim.

### 2.8. Misol. Uolsh diagrammasi yordamida taxminiy shaklni aniqlash

$XH_2$  molekulari uchun Uolsh diagrammasi asosida  $H_2O$  molekulari shaklini taxminiy ayting.

**Javob.** Biz 90° va 180° lar oralig'idagi tegishli holatni aniqlashda Uolsh diagrammasini valent elektronlar yoki molekulyar orbitallar bilan to'ldiriladi. Natijada molekulaning burchakli yoki chiziqli holati baholanadi. Bu holda biz  $XH_2$  molekulari uchun 2.37-rasmda ko'rsatilgan gorizontal o'qning kerakli sakkizta elektron sig'dira oladigan diagrammasi tanlanadi. Natija konfiguratsiyasi:  $1a_1^2 2a_1^2 1b_2^2 1b_1^2 . 2a_1$  band bo'lganligi uchun nochiziqli molekulaning energetik holati chiziqli molekulanikidan kamroq bo'ladi.

**Mustaqil topshiriq.** 3 davr elementlaridan qaysi birining  $XH_2$  molekulari chiziqli bo'lishi kutiladi. Agar shunday bo'lsa?



Uolsh yondashivini boshqa vodorodli birikmalar uchun ham qo‘llash mumkin, lekin ular juda murakkab diagrammalarga olib keladi. Uning yondashuvining ustunligi shundaki, molekulaning barcha orbitallari uchun qo‘llash mumkinlidir. Uolshning molekulyar diagrammalari zamonaviy birikmalarda ko‘p qo‘llaniladi va biz keyingi boblarda biz ham ishlatamiz.

## STRUKTURA VA BOG‘ HUSUSIYATLARI

Kimyoviy bog‘lanishlarning ayrim hususiyatlari elementlarning turli birikmalari uchun bir xil bo‘ladi. Agar shunday bo‘lganida, biz bilamizki  $H_2O$  dagi  $O-H$  bog‘ining mustahkamligi bilan  $CH_3OH$  dagi  $O-H$  bog‘larining mustahkamligini bir xil deb qarashimiz mumkin. Shuning uchun biz ushbu bo‘limda bog‘lanishning asosiy ikki hususiyati: bog‘ mustahkamligi va bog‘ uzunligi tushunchalarini ko‘rib chiqamiz. Shunigdek biz oddiy noorganik birikmalarning shakllarini tushuntirishni kengroq ko‘rib chiqamiz.

### 2.13. Bog‘ uzunligi

*Asosiy tushunchalar:* bog‘ uzunligi ikki bog‘langan atomlar yadrolari orasidagi muvozanat masofa hisoblanadi; kovalent radiuslar, metall va ion radiuslaridan davriy jadvaldagi o‘rni bo‘yicha farq qiladi.

2.5-jadval.

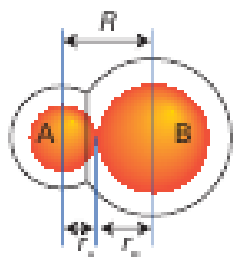
Muvozanat bog‘ uzunliklari  $\frac{R_e}{pm}$

$H_2^+$	106
$H_2$	74
$HF$	92
$HCl$	127
$HBr$	141
$HJ$	160
$N_2$	109
$O_2$	121
$F_2$	144
$Cl_2$	199
$I_2$	267

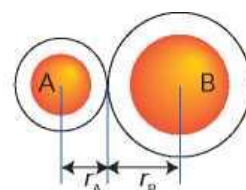
Bog‘ uzunligi ikki bog‘langan atomlar yadrolari orasidagi muvozanat masofa hisoblanadi. Bog‘ uzunligi haqidagi adabiyotlarda keltirilgan aniq ma’lumotlar asosan difraksiya rentgenografiya usulida olingan (8.1 bo‘lim). Gaz fazadagi moddalarning bog‘ uzunliklari esa asosan IQ spektroskopiya yoki elektron difraktometriya orqali aniqlanadi. 2.5-jadvalda ba’zi hususiyatlarning qiymatlari keltilgan.

Birinchi yaqinlashish uchun, bog‘ uzunligining muvozanat holatini qarashda bog‘lanishda ishtirok etadigan juftliklar atomdan chiqib ketadi deb hisoblanadi. Kovalent bog‘larda har bir atomning qo‘shgan hissasi uning kovalent radiusi deyiladi (18). 2.6-jadvaldagi ma’lumotlardan foydalanib biz  $P-N$  bog‘I uzunligini  $110pm + 74pm = 184pm$  deb hisoblashimiz

mumkin, lekin tajribada ko‘pchilik moddalarda bu bog‘lanish uzunligi 180pm ekanligi aniqlangan. Iloji boricha eksperimental bog‘ uzunliklaridan foydalanish kerak, lekin ma’lumotlar bo‘lmagan holatlar uchun ehtiyot shart kovalent radiuslarni ham bilib qo‘yish kerak. Kovalent radiuslar, metall va ion radiuslaridan (1.9a-bo‘lim) davriy jadvaldagi o‘rni bo‘yicha farq qiladi. Ikki ta’sirlashayotgan atomlar orasida kovalent radiuslargacha bo‘lgan masofada bog‘lanishlar hosil bo‘lsa, undan yaqinda ularning valent elektronlari o‘zaro itarisha boshlaydi. Kovalent radiuslar ikki bog‘langan atomlar orasidagi masofa hisoblanadi. Bog‘langan atomlarning qo‘shni bog‘lanmagan atomlarning bog‘lanmagan elektronlari va yardolari orasida itarilish vujudga keladi, bu holat Vander-Vaals radiuslar deyiladi (19).



18 Covalent radius



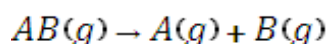
19 van der Waals radius

Van der Waals radiuslari kristallardagi atomlarning joylashishini, o‘zgaruvchan shaklli va biologik makromolekulalar strukturasi o‘rganishda muhim ahamiyatga ega (27 bob).

## 2.14. Bog‘ mustahkamligi

*Asosiy tushunchalar:* Bog‘ uzunligi alohida olingan bog‘ entalpiyalari bilan o‘lchanadi; bog‘ entalpiyalari reaksiyaning umumiy entalpiyasini hisoblash uchun qo‘llaniladi.

AB bog‘ning mustahkamligi termodinamik jihatdan



standart reaksiya jarayonidagi bog‘ning dissotsilanish entalpiyasiga  $\Delta H^\circ(A - B)$  ga teng.

O‘rtacha bog‘ entalpiyasi deb B atomning turli molekullardagi  $A - B$  tipidagi bo‘g‘lanishlarning o‘rtacha entalpiyasi hisoblanadi.

O‘rtacha bog‘ entalpiyalarini reaksiyalarning entalpiyalarini qarash uchun foydalanish mumkin. Ammo haqiqiy termodinamik natijalardan farq qilishi mumkinligi uchun ulardan foydalanish cheklangan. Masalan,  $Si - Si$  bog‘lanish entalpiyasi  $Si_2(CH_3)_6$  da 322 kJ/mol dan  $Si_2H_6$  da 226 kJ/mol gacha o‘zgaradi. 2.7-jadvalda bu sohadagi oxirgi ma’lumotlar bo‘lib, ulardan reaksiya entalpiyalarini taxminiy hisoblashda foydalanish mumkin.

**2.6 jadval. Kovalent**

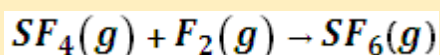
**radiuslar,  $\frac{r_{cov}}{pm}$**

<b>H</b>			
<b>37</b>			
<b>C</b>	<b>N</b>	<b>O</b>	<b>F</b>
<b>77 (1)</b>	74	66 (1)	64
	(1)		
<b>67 (2)</b>	65	57 (2)	
	(2)		
<b>60 (3)</b>	54		
	(3)		
<b>70 (a)</b>			
<b>Si</b>	<b>P</b>	<b>S</b>	<b>Cl</b>
<b>118</b>	110	104	99
		(1)	
		95 (2)	
<b>Ge</b>	<b>As</b>	<b>Se</b>	<b>Br</b>
<b>122</b>	121	117	114
	<b>Sb</b>	<b>Te</b>	<b>J</b>
	141	137	133

## 2.9 Misol O'rtacha bog' entalpiyalari yordamida hisoblashlar

25°C da  $SF_4$  dan  $SF_6$  olish reaksiyasining entalpiyasini o'rtacha bog'lanish entalpiyalari  $F_2$ ,  $SF_4$  va  $SF_6$  uchun 158, 343 va 327 kJ/mol ekanligini nazarda tutib hisoblang.

**Javob.** Biz reaksiyaning umumiy entalpiyasi parchalangan bog'larning umumiy entalpiyalari va hosil bo'lgan bog'larning umumiy entalpiyalari orasidagi farqqa tengligidan foydalanamiz. Jarayon tenglamasi:



Bu reaksiyada bir mol  $F-F$  va to'rt mol  $S-F$  bog'larini parchalanishidan chiqqan energiya  $158 + (4 * 343) = +1530kJ$ . Bu energiya musbat bo'ladi, chunki bog'lar uzilmoqda. 6 mol  $S-F (SF_6)$  bog'larning hosil bo'lishida esa  $6 * (-327) = -1962kJ$ . Bu energiya manfiy bo'ladi, chunki bog' hosil bo'lganda energiya yutiladi. Umumiy holat entalpiyasi esa:

$$\Delta H^0 = +1530 - 1962 = -432kJ$$

Demak, reaksiya ekzotermik. Reaksiyaning eksperimental qiymati 434 kJ ga juda yaqin.

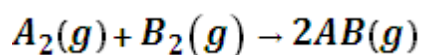
**2.9 mustaqil topshiriq.** Reaksiyaning  $S_8$  (siklik) va  $H_2$  dan  $H_2S$  hosil bo'lish entalpiyasini hisoblang.

### 2.15. Elektromanfiylik va bog' entalpiyalari.

*Asosiy tushunchalar:* Elektromanfiylikning Pauli shkalasi bog' entalpiyalari va bog'lar qutbliligini aniqlash uchun foydalidir .

1.9b bo'limda elektromanfiylik har bir atom uchun elektronni biriktirib olish uchun sarflanadigan kuch sifatida qaralgan edi. Ikkita A va B elementlarning elektromanfiyliklari farqi qancha katta bo'lsa, A – B bog'ning ion darajasi shuncha katta bo'ladi.

Linus Paulining elektromanfiylikning asli formulasi bog'ning hosil bo'lish energiyasiga borib taqaladi. Masalan,  $A_2$  va  $B_2$  molekulalardan  $AB$  hosil bo'lishi



U  $A-A$  va  $B-B$  bog'larning uzilishidan  $A-B$  bog'lar hosil bo'lishidan ortib qolgan energiya  $\Delta E$  kovalent bog'ni ionlashtirish uchun sarflanishi mumkin deb ta'kidlaydi. U elektromanfiylik farqi sifatida

$$|\chi_p(A) - \chi_p(B)| = 0.102 \left( \Delta E, \frac{kJ}{mol} \right)^{1/2} \quad (2.13a)$$

bundan

$$\Delta E = B(A-B) - \frac{1}{2} \{B(A-A) + B(B-B)\} \quad (2.13b)$$

$B(A-B)$  ni  $A-B$  bog'ning o'rtacha entalpiyasidir. Shunday qilib, ion bog'ning to'liq funksiyasiga ko'ra,  $A-A$  va  $B-B$  bog'larning o'rtacha entalpiyalari qancha katta bo'lsa  $A-B$  qutblanishi shuncha katta bo'ladi. Pauli elektromanfiyligi elementning oksidlanish darajasi ortishi bilan ortadi, 1.7-jadvalda elementlarning eng ko'p uchraudigan oksidlanish darajalari uchun keltirilgan.

2.7- jadval

**Bog'larning o'rtacha entalpiyalari. B/kJ · mol<sup>-1</sup>**

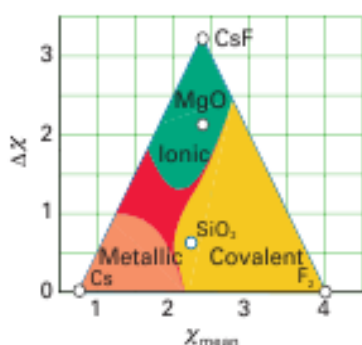
	H	C	N	O	F	Cl	Br	J	S	P	Si
H	436										
C	412	348									
		(1)									
		612									
		(2)									
		837									
		(3)									
		518									
		(a)									

N	388	305	163					
		(1)	(1)					
		613	409					
		(2)	(2)					
		890	946					
		(3)	(30					
O	463	360	157	146				
		(1)		(1)				
		743		497				
		(2)		(2)				
F	565	484	270	185	155			
Cl	431	338	200	203	254	242		
Br	366	276				219	193	
J	299	238				210	178	151
S	338	259	464	523	343	250	212	264
P	322							201
	(1)							480(
								3)
Si	318			466				226

Pauli elektromanfiyligi, turli elementlar o'rtasidagi bog'larning entalpiyalarini va bog'larning qutblanganlik darajasini taxmin qilish uchun foydalaniladi. Binary birikmalarda ikki element elektromanfiyligi orasidagi farqni ionlaganlik sifatida qarash mumkin. Biroq, 1940 yillarda Anton van Arkel va Jan Ketelaar ion, kovalent va ion bog'larni chizmada uchburchakning uchlariga joylashtirish orqali yaxshiroq tushuntirdilar. Gordon Sproul tomonidan yaratilgan Ketelaar uchburchagida asos sifatida binary birikmalardagi elementlar elektromanfiyliklarining farqi va o'rtacha elektromanfiylik ishlatiladi (2.29- rasm).

Katelaar uchburchagidan 3-bobda turli birikmalarning xossalari tushuntirish uchun keng foydalaniladi.

Ion bog‘lanish elektromanfiyliklar farqining kattaligi bilan xarakterlanadi. Bir elementning elektromanfiylik juda katta, ikkinchisini juda kam bo‘ladi yoki o‘rtacha elektromanfiylik qiymati olinadi. Masalan, CsF uchun  $\Delta\chi = 3.19$  va  $\chi'_{or} = 2.38$  bo‘lganligi uchun uchburchakning “ion” tepaligida yotadi. Kovalent bog‘lanish elektromanfiyliklar farqining kichikligi bilan xarakterlanadi. Bunday moddalar uchburchakda yo‘q. Kovalent bo‘lanishli binary birikmalar metallmaslardan tarkib topgani uchun ular katta elektromanfiylikka ega. Bu uchburchakda kovalent hudud yo‘q. Uchburchakning bu burchagida  $F_2$  joylashgan,



2.29-rasm. Katelaar uchburchagi

unda  $\Delta\chi = 0$  va  $\chi'_{or} = 3.98$  bo‘ladi (Pauli elektromanfiylikning eng katta qiymati). Metall bog‘lanish kichik elektromanfiylik farqi bilan xarakterlanadi va shuning uchun uchburchak asosi tomonida yotadi. Metall bog‘lanishda metallarning

elektromanfiylik past va farqlar ham past shuning uchun uchburchakning quyi pastki tomonida joylashadi. Bu burchakni Cs egallagan chunki,  $\Delta\chi = 0$  va  $\chi'_{or} = 0.79$  (Pauli elektromanfiylikning eng kichik qiymati). Katelaar uchburchagining afzalligi oddiygina elektromanfiylikni bilish orqali birikmalardagi bog‘lanishlarning ion, kovalent yoki metall tabiatini farqlash imkonini beradi.

**Qisqa masal.** MgO uchun  $\Delta\chi = 3.44 - 1.34 = 2.13$  va  $\chi'_{or} = 2.38$ . Bu ko‘rsatkichlarga ko‘ra u uchburchakning ion hududida joylashadi. Aksincha,  $SiO_2$  uchun  $\Delta\chi = 2.58 - 1.90 = 0.68$  va  $\chi'_{or} = 2.24$ . Bu ko‘rsatkichlarga ko‘ra MgO va  $SiO_2$  ni past kovalent bog‘lanish hududida joylashadi.



## 2.16. Oksidlanish darajalari

*Asosiy tushunchalar:* oksidlanish darajasi 2.9 jadvaldagi qoidalarga ko‘ra aniqlanadi.

Oksidlanish darajasi  $N_{ox}$  ion xususiyatlarining orttirib ko‘rsatilishidir. Bu holatni ko‘proq elektromanfiyligi katta atom ikkita elektronni butunlay olib qo‘ygan holat deb qarash mumkin. Oksidlanish darajasi, o‘zining zaryadi bilan birga alohida bir zarracha sifatida qaraladi. Shunga ko‘ra, atomning bir oksidlanish darajasi va shu oksidlanish darajasiga muvofiq holatlari ham bo‘lishi mumkin. Ishqoriy metallar eng past elektromanfiy elemental bo‘lib, ularni har doim  $M^+$  sifatida qarash mumkin va +1 oksidlanish darajali bo‘ladi. Kisloroddan faqat F elektromanfiyroq, shuning uchun biz F dan boshqa brikmalarida kislorodni  $O^{2-}$  holatida deb qarashimiz mumkin va uning oksidlanish darajasi -2 bo‘ladi. Xuddi shunday,  $NO_3^-$  ioni tarkibi  $N^{+5}(O^{2-})_3$  bo‘ladi va azot atomining bu birikmadagi holati +5 bo‘lib, N (V) yoki N(+5) yoziladi. Bu natijalardan manfiy holatlar uchun ham qo‘llash mumkin, shuning uchun kislorodning oksidlanish darajasi -2 bo‘ladi, uning bunday birikmalari juda ko‘p.

Amalda oksidlanish darajasi oddiy hisoblarni (2.8 jadval) bajarish orqali aniqlanadi. Ushbu qoidalar birikmalarni “mutloq ion” ko‘rinishida tushuntiradi, shuning uchun amalda bo‘lmasada, kislorodning manfiy zaryadlarni soniga ko‘paytirish orqali ham boshqalarining oksidlanish darajalarini aniqlash mumkin. Oksidlanish darajasi uning bu xususiyatlariga 5 bobda yana qaytamiz. Ko‘pchilik elementlar, jumladan, d-elementlar, galogenlar, azot va b. uchun asosiy oksidlanish darajalari 2.8 jadvalda keltirilgan.

2.8- jadval

### Oksidlanish darajalarini aniqlash

- |  |    |
|--|----|
| <b>1. Barcha atomlarning oksidlanish darajalari yig‘indisi umumiy zaryadga teng.</b> | 0  |
| <b>2. Elementlarning oddiy birikmalari</b>   | +1 |

uchun	+2
3. 1 guruh atomlari uchun	+3 (EX <sub>3</sub> ), +1 (EX)
2 guruh atomlari uchun	
13 guruh atomlari uchun (B mustasno)	+1 metallmasslar bilan birikmalarida -1 metallar bila birikmalarida
14guruh atomlari uchun (C, Si mustasno)	-1 barcha birikmalari uchun -2 F birikmalaridan boshqa
4. Vodorod uchun	-1 peroksidlar uchun
5. Ftor uchun	$-\frac{1}{2}$ superoksidlarda
6. Kislород uchun	$-\frac{1}{3}$ ozonidlarda
7. Galogenlar uchun	-1 ko'pchilik birikmalarida, kislorodli birikmalar va elektromanfiyrog galogenli birikmalaridan tashqari

### 2.10 Masala Elementning oksidlanish darajasini aniqlash

Vodorod sulfid H<sub>2</sub>Sdagi Hning, permanganat ionidagi MnO<sub>4</sub><sup>-</sup>dagi Mn ning oksidlanish darajasi qanday?

**Javob.** Biz 2.9-jadvalda berilgan qoidalar asosida ishlashimiz kerak. (a) umumiy zaryad 0 ga teng bo'ladi; demak,  $2N_{ox}(H) + N_{ox}(S) = 0$ . Metallmaslar bilan birikmalarda  $N_{ox}(H) = +1$  ekanligidan  $N_{ox}(S) = -2$  bo'ladi. (b) barcha atomlarning oksidlanish darajalari yig'indisi -1 bo'lishi kerak.  $4N_{ox}(O) + N_{ox}(Mn) = -1$  va  $N_{ox}(O) = -2$  ekanligidan  $N_{ox}(Mn) = -1 - 4(-2) = +7$ . Bu birikmada Mn (VII) bo'ladi. Uning rasmiy nomi ham tetraoksimarganets (VII) ion.

**Mustaqil topshiriq 2.10.** O<sub>2</sub><sup>+</sup>dagi O ning PO<sub>4</sub><sup>-3</sup> dagi P ning oksidlanish darajasini hisoblang.

## NAZORAT SAVOLLARI VA MASALALAR:

1. Kimyoviy bog' hosil bo'lish sabablari nimada?
2. Kimyoviy bog'ning geometrik va energetik ko'rsatkichlari.
3. Kimyoviy bog'larning turli xilda bo'lishiga sabab nimada?
4. Kimyoviy bog' xilining modda xossasiga ta'siri.
5. Quyidagi moddalarda kovalent bog'lanishni hosil bo'lish mexanizmi qanday?  
 $\text{NH}_4^+$ ,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{BF}_4^-$ .
6. Qanday bog'lanishlar  $\sigma$ - bog'lanish,  $\pi$ -bog'lanish deyiladi?
7. Ion bog'lanishning to'yinmovchanligi va yo'naluvchanlikka ega emasligining asosida qanday sabab yotadi?
8. Bog'ning elektrmanfiyligi va entalpiyasi.
9. Molekulyar orbitallar atom orbitallarning chiziqli kombinatsiyasi sifatida.
10. Molekulyar orbitallarni ifodalash.
11. VBU va MOU ni o'zaro taqqoslash.
12.  $\text{N}_2^+$ ,  $\text{Ne}_2^+$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{F}_2$  zarracha va molekularining tuzilishini MOU vositasida tushuntiring.
13. MO usuli molekular orbitallari konfiguratsiyasi asosida
  - a)  $\text{S}_2$ ,
  - b)  $\text{Cl}_2$  molekularining bog' tartibini aniqlang.
14. Quyidagi ionlanish protsesslari bog' uzunligi va tartibining qanday o'zgarishlari bilan yuz beradi:
  - a)  $\text{O}_2 \rightarrow \text{O}_2^+ + e^-$
  - b)  $\text{N}_2 + e^- \rightarrow \text{N}_2^-$
15. Quyidagi ikki atomli molekula va ionlarning energetik diagrammasini tuzing:  
 $\text{H}_2^-$ ,  $\text{Be}_2$ ,  $\text{O}_2$  ulardagi bog' tartibini aniqlang. Ko'rsatilgan ion yoki molekulalardan qaysilari paramagnit ekanligini ko'rsating.
16. Kislorod energetik bog'onalari diagrammasidan foydalanib,  $\text{O}_2$  ning mavjud bo'lishini tushuntiring.

## MASHQLAR

1. Quyidagi birikmalar qanday shaklda bo‘lishi mumkin: (a)  $\text{H}_2\text{S}$ , (b)  $\text{NH}_4^+$ .
2. Quyidagi birikmalar qanday shaklda bo‘lishi mumkin: (a)  $\text{SO}_2$ , (b)  $\text{SO}_3^{-2}$ , (c)  $\text{IF}_5$
3. Quyidagi birikmalar qanday shaklda bo‘lishi mumkin: (a)  $\text{ClF}_3$ , (b)  $\text{ICl}_4^-$ , (c)  $\text{I}_3^-$ .
4. VBN taxminlariga ko‘ra:  $\text{ICl}_6^-$  va  $\text{CF}_4$  bog‘ burchaklari qanday bo‘ladi?

Qattiq holatdagi birikmalarda fosfor pentaxlorid moddasi kationi  $\text{PCl}_4^+$  va  $\text{PCl}_6^-$  anionlari mavjud. Bu ionlarning tuzilishi qanday?

5.  $B(\text{Si} = \text{O}) = 640 \text{ kJ mol}^{-1}$  dan foydalanib, kislorod – kremniy bog‘larining qo‘sh bog‘ emas, tetraedr holatidagi yakka bog‘li birikmasi uchun entalpiyani hisoblang.
6. Azot va fosforning asosiy holati  $\text{N}_2$  va  $\text{P}_4$ . Yakka va ko‘p bog‘lanishli holatlar uchun entalpiyalarni solishtiring. Bog‘ entalpiyalaridan foydalanib reaksiya entalpiyalarini hisoblang.

### 3-BOB. ODDIY QATTIQ JISMLAR STRUKTURASI

Ko'pchilik noorganik birikmalar qattiq holda bo'lib, atom, ion, molekulalarning tartibli strukturasi iborat bo'ladi. Eng sodda qattiq birikma bu metallar bo'lib, bunda metall atomlari strukturada tartib bilan bo'shliqlarda joylashgan bo'ladi. Metall markazlari bir-biri bilan metall bog' hosil qilib bog'lanadi. Metall bog'lanish quyidagicha ta'riflash mumkin: bunda biror elementning atomlari bitta yoki bir necha elektronlarini berib, metall bog'lanish hosil qiladi va bu elektron barcha metall atomlari uchun umumiy bo'ladi. Bog'ning kuchi erkin harakatlanuvchi elektronlar bilan qolgan kation orasidagi o'zaro ta'sirlashuvga bog'liq. Yana bir ta'rifga ko'ra metallar ko'plab sondagi atom orbitallaridan iborat bo'lgan katta molekulalar bo'lib, orbitallarning bir-biriga ustma-ust tushishi natijasida molekular orbital hosil qiladi.

Metall bog'li elementlarning ionlanish energiyalari kichkina bo'lib, ular davriy jadvalning chap tarafida, *d* ustundagi elementlar va shu ustunga yaqinidagi *p* ustunidagi elementlarni o'z ichiga oladi. Ko'pchilik elementlar metallar, lekin metall bog'lanish shuningdek ko'plab qattiq birikmalarda ham uchraydi, ayniqsa, *d* metallarning oksidlari va sulfidlarida. Masalan  $\text{ReO}_3$  va  $\text{FeS}_2$  birikmalarida metall bog'lanish kuzatiladi.

Metallarga xos bo'lgan xossalari metall bog'lanish natijasidir: metallar bog'lanuvchan (bosim bilan ishlov berilganda oson deformatsiyaga uchraydi) hamda elastik bo'ladi chunki elektronlar atom yadrolari o'rtasida qayta taqsimlanish xossasiga ega hamda bog'da yo'naluvchanlik yo'q. Bundan tashqari, metallar metall yaltiroqliligiga ega bunga sabab esa erkin elektronlar elektromagnit nurlarni qaytaradi.

Ion bog'lanishda har xil elementlarning ionlari birgalikda karkasda ushlanib turiladi, bunda qarama-qarshi zaryadlarning bir-biriga tortilishi natijasida simmetriya paydo bo'ladi. Ion bog'lanish shuningdek elektron berish va elektron olishga ham bog'liq bo'lgani uchun bu bog' metallarning elektromanfiy

elementlari bilan hosil qilgan birikmalarida ham uchraydi. Lekin bu erda ko‘plab istisnolar uchraydi: hamma birikmalar ham ionli emas va ba’zi birikmalar (masalan ammoniy nitrat) ham ionli bog‘ni ham kovalent bog‘ning xossalarini namoyon qiladi.

Ion va metall bog‘lanish yo‘nalishga ega emas, shuning uchun bunday bog‘li strukturaga bo‘shliq to‘ldiruvchi model ya’ni sharsimon model qo‘llaniladi, bu esa ionlar o‘rtasidagi elektrostatik ta’sirlashuvlarning kuchini va sonini maksimallashtiradi. Metall strukturaning ifodalovchi shar modellar neytral atom sifatida taqdim etiladi, chunki har bir kation teng miqdorda elektronlar bilan qurshab olingan bo‘ladi. Ionli bog‘larni tasvirlovchi modellar anion va kationli bo‘ladi, sababi bunda bitta atom tipidan boshqa atom tipiga elektronlar o‘tishi kuzatiladi.

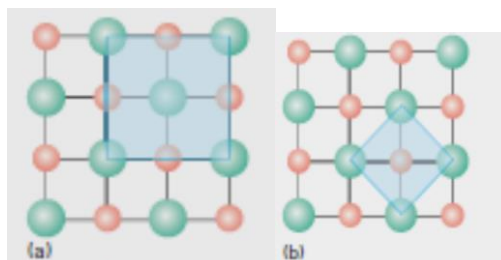
### **3.1. Elementar yacheykalar va kristall strukturalar**

Element yoki birikmalarning kristallarini doimiy takrorlanuvchi strukturaviy elementlar ya’ni atom, molekula, ionlardan tuzilgan deb qarash mumkin.

Metallar va ion birikmalarning ahamiyatli xususiyatlaridan biri kristall hosil qilib joylashishidir.

Kimyoviy element (oddiy modda) yoki birikma kristali atom, ion yoki molekulaning asimmetrik birliklarini tartibli (davriy) ravishda qaytarilishi deb qaralishi mumkin. Fazoviy panjara-bu struktur elementlarni o‘rnini aniqlovchi nuqtalardan hosil bo‘lgan ob’ektdir. Aniqroq qilib aytganda, fazoviy panjara- bu kristallning asosiy tuzilishini aniqlovchi, bir xil qurshovga(o‘ramga) ega bo‘lgan, uch o‘lchovli cheksiz nuqtalar yig‘indisidan iborat. Ba’zi bir xollarda asimmetrik fragmentlar panjara tugunlarida joylashgan bo‘ladi, bu esa asosiy shart emas. Panjaraga bir xil struktur birliklar, har bir panjara tuguniga asimmetrik fragment to‘g‘ri kelgan holda joylashsa, kristallik struktura hosil bo‘ladi. Uchlarida joylashgan fazoviy panjara tugunlari bilan tashkil etilgan paralelloiped fazoviy panjaraning kichik bo‘lagiga fazoviy panjaraning elementar yacheykasi deb ataladi. Elementar yacheyka tanlashning bir necha usullari bor (1-rasm). lekin

katta simmetriyaga ega bo'lgan kichkina yacheykalarni tanlash maqsadga muvofiq. 1- rasmdagi ikki o'lchamli obektda har xil elementar yacheykalar tanlanadi, ularning har biri parallel ko'chirilishi natijasida boshlang'ich tarkibni takrorlashadi. Shunday qilib, 1-rasmda berilgan a va b elementar yacheykalardan b yacheyka afzalroq, chunki u kichkinaroq *a* yacheykaga qaraganda.

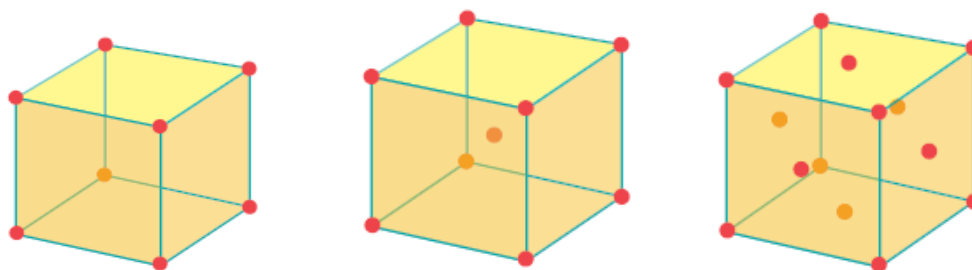


3.1-rasm. Ikki o'lchamli struktura va elementar yacheyka tanlashning ikki usuli.

Oddiy elementar yacheykalarda panjara tugunlari faqat yuqori qismida uchraydi va boshqa erda uchramaydi va parallel simmetriya faqat takrorlanuvchi yacheykada joylashgan.

Elementar katakcha-bu kristall fragmenti bo'lib burish va akslantirish operatsiyalaridan foydalanilmagan holda, boshqa shunday fragmentlar bilan butun kristallni hosil qiladi.

Qattiq jismlar strukturasi atom va ionlar modellari bo'lgan qattiq sharlar joylashishi terminlari bilan bayon qilinishi mumkin. Zich joylashishlarda to'lmagan hajm minimal bo'ladi. Eng murakkab panjara turi bu hajmiy-markazlashgan elementar yacheykalarda 2 ta panjara tugunlari bilan va yuzamarkazli 4 ta panjara tugunlari bilan.



3.2-rasm.

*oddiy elementar yacheyka*    *hajmiy –markazlashgan*    *yuzamarkazli*

Uchta ulchamlarda panjara parametrlari orasidagi munosabat strukturaning simmetriyasi natijasida dastlabki ettita kristal tizimlarni xosil kiladi (3.1. jadval va 3.2-rasm). Barcha tasvirlangan strukturalar tarkibiga muvofik kristal tizimlardan biriga tegishlidir: bu bulimda keltirilgan kuppina tasavvurlar oddiy tarkiblar va munosabatlar bilan boglik bulib, ular yukori simmetriyali kubsimon va geksoanal tizimlarga ega.

Burchaklar ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ) va uzunliklar ( $a$ ,  $b$ ,  $c$ ) odatda ulchamlarni ifodalashda foydalalaniladi va yacheyka birligi shaklini ifodalovchi yacheyka birlik parametrlaridir (yacheyka parametrlari); 3.2-rasmda ularning triklin qismida ko‘rish mumkin.

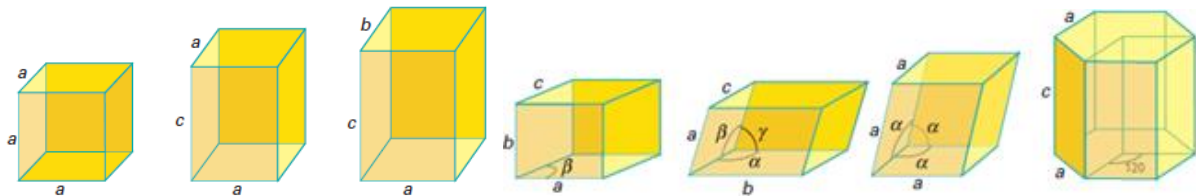
3.1-jadval

Yetti xil kristal sistemalar

Sistema	Yacheyka parametrlari orasida munosabatlar	Yacheyka birligini ifodalovchilar	Mavjud simmetriyalar
Triklin	$a \neq v \neq s, \alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^0$	$a b c \alpha\beta\gamma$	Yuk
Monoklin	$a \neq v \neq s, \alpha \neq \gamma \neq 90^0, \beta=90^0$	$a b c \alpha\gamma$	Birta ikkilamchi o‘q aylanishi yoki kuzgudagi tekislik
Ortorombik	$a \neq v \neq s, \alpha = \beta = \gamma = 90^0$	$a b c$	Uchta qo‘sh perpendikulyarlar yoki kuzgudagi tekislik
Rombogedral	$a = v = s, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^0$	$\alpha$	Birta uchlamchi o‘q aylanishi
Tetragonal	$a = v \neq s, \alpha = \beta = \gamma = 90^0$	$a c$	Birta turtlamchi o‘q aylanishi
Geksagonal	$a = v \neq s, \alpha = \beta = 90^0, \gamma = 120^0$	$a c$	Birtaolti karrali o‘q aylanishi
Kubik	$a = v = s, \alpha = \beta = \gamma = 90^0$	$a$	Turtta uchlamchi o‘q



			aylanishidan tetragedralga intiladi
--	--	--	-------------------------------------



*Kubik tetragonal ortorombik monoklin triklinik rombogedral geksagonal*

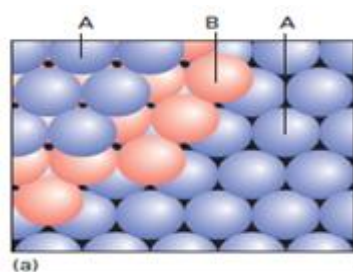
*3.3- rasm. Yetti xil kristal sistemalar*

### **3.2. Zich sharsimon joylashishlar (upakovka)**

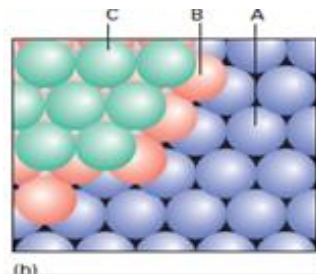
Ko'pchilik metall va ionli birikmalarni qattiq sferada xuddi qismlardan (atom yoki ionlar) tuzilgan deb tassavvur qilish mumkin. Agar bu erda kovalent bog' yo'nalmagan bo'lsa, bu sferalar birgalikda geometriyaga mos ravishda zich bo'lib, fazoda erkin joylashadi hamda zich upakovkali strukturani hosil qiladi. Bunday strukturada band qilinmagan bo'shliq hajm minimal darajada bo'ladi. Zich upakovkali sferaning koordinatsion soni (eng yaqinida joylashgan qo'shnilar) 12 ga teng bo'lib, geometrik jihatdan ehtimolligi yuqori bo'lgan son. Agar bog' yo'nalgan bo'lsa, hosil bo'lgan struktura zich upakovkali bo'lmaydi va koordinatsion son 12 dan kichik bo'ladi. 2-rasmda bir qavatli bir-biriga o'xshash sharlar keltirilgan bo'lib, yonidagi qo'shnisining eng katta soni 6 ga teng. Ushbu qavatdagi sharlar orasidagi chuqurlariga sharlarni joylashtirib zich upakovkali sharlarning ikkinchi qavati hosil qilinadi. Uchinchi zich upakovkali qavat esa ikki xil yo'l bilan joylashtiriladi va natijada 2 ta politipni hosil qiladi.

Birinchi politipda uchinchi qavatdagi sharlar bevosita birinchi qavatning to'g'risida joylashadi. Bu ABAB... ketma-ketligiga to'g'ri keladi, bu erda A oldingi A qavatdagi sharlar ketma-ketligini takrorlaydi, xuddi shunga o'xshab B qavat ham. Natijada geksagonal zich upakovka hosil bo'ladi. Ikkinchi politipda uchinchi qavatdagi sharlar birinchi qavatdagi chuqurlarining ustiga o'rnashadi, ikkinchi qavat birinchi qavatdagi chuqurlarning yarmisini qoplaydi, uchinchi qavat

esa qolganlarini qoplaydi va ABCABC... strukturasi hosil bo‘ladi, bu erda C boshqa qavatdagi C qatorini takrorlaydi, lekin A va B qatoriga mos kelmaydi. Bundan kubiksimon zich joylashishlar hosil bo‘ladi. Quyida geksagonal GZU(a) va kubiksimon KZU (b) zich upakovkali strukturalar keltirilgan.



3.4-rasm a)



b)

## METALLAR VA QOTISHMALARNING TUZILISHI

Metallarni rentgenografik usulda o‘rganilishi shuni ko‘rsatadiki, ko‘pchilik metallar strukturasi zich upakovkali bo‘lib, atomlar orsidagi kuchsiz yo‘nalgan kovalent bog‘ mavjud. Zich upakovkali metallarning zichligi yuqori bo‘ladi, chunki eng ko‘p massa kichkina hajmga yig‘ilgan bo‘ladi. Aslida, d-blok o‘rtasidagi elementlar (iridiy va osmiy yonidagi) normal sharoitda eng zich qattiq moddalar hisoblanadi.

### 3.3.Politiplar

Metallarning strukturasi GZU yoki KZU turida bo‘lishi ularning atomlarini elektron strukturasi, qo‘shni atomlar bilan o‘zaro ta’sirlashish darajasiga hamda bog‘larning yo‘nalganligiga bog‘liq bo‘ladi. Aslida, zich upakovkali strukturalar ABAB yoki ABCABC tartibida bo‘lishi shart emas. Bundan ham murakkabroq zich upakovkali politiplar uchrashi mumkin, ular A,B va C qatorlarining murakkabroq takrorlanishi natijasida yoki taxlanish ketma-ketligi tasodifiy bo‘lishi natijasida hosil bo‘ladi. Masalan, kobalt metalli murakkab politipga misol bo‘ladi. 500<sup>0</sup> dan yuqori haroratda, kobalt KZU strukturaga ega, lekin sovitilganda fazoviy o‘tishlar sodir bo‘ladi, ya’ni uning strukturasi tasodifiy atomlarning bog‘lanishlaridan iborat bo‘lib qoladi, masalan ABACBABABC... Ba’zi

na'munalarda kobalt politipi tasodifiy bo'lmaydi, undagi ketma-ket bir necha yuzta qavatdan keyin takrorlanadi.

### 3.4. Polimorfizm

Metall bog'larning kuchsiz yo'nalganligi polimorfizm- turli temperatura va bosimda har xil kristall shakllarini hosil qilish hodisasi orqali tushuntiriladi. Ma'lum bo'lishicha, zichroq upakovkalanagan fazalar past temperaturada termodinamik jihatdan barqaror bo'ladi va kam zich upakovkali strukturalar yuqori temperaturada barqaror bo'ladi. Xuddi shunga o'xshab, yuqori bosimda metallar zich upakovkali bo'ladi, masalan GZU va KZU. Polimorf metallar temperatura oshishiga qarab  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  harflari bilan belgilanadi. Ba'zi metallar yuqori temperaturada o'zlarining quyi temperaturadagi formasiga o'tadi. Masalan, Fe 906<sup>0</sup>C da  $\alpha$ -holatda bo'ladi, 1401<sup>0</sup>C da Fe $\gamma$ -holatda bo'lib, KZU strukturada bo'ladi va yana suyuqlanish haroratiga etganda 1530<sup>0</sup>C ga Fe yana  $\alpha$ -holatga qaytadi. Temirning GZU kristallini hosil qiluvchi  $\beta$ -polimorfi yuqori bosimda sodir bo'ladi.

### 3.5. Metallarning atom radiusi

Metallarning atom radiusi - qattiq birikmadagi atom markazlari orasidagi masofaning yarmiga teng. Lekin panjaraning koordinatsion soni ortishi bilan bu masofa ham ortib boradi. Shuning uchun koordinatsion soni har xil bo'lgan bitta atom strukturaning atom radiusi ham har xil bo'ladi hamda koordinatsion soni 12 ga teng bo'lgan elementning atomi koordinatsion soni 8 bo'lgan atomga qaraganda kattaroq. Bir qancha element va qotishmalarning har xil polimorf formalarining atomlari orasidagi masofani o'rganish asosida Goldshmit koordinatsion songa bog'liq holda o'rtacha nisbiy atom radiusni keltirib chiqardi.

3.1- jadval

Nisbiy atom radiusning koordinatsion songa bog'liq holda o'zgarishi

Koordinasion son	Nisbiy radius
12	1

<b>8</b>	0,97
<b>6</b>	0,96
<b>4</b>	0,88

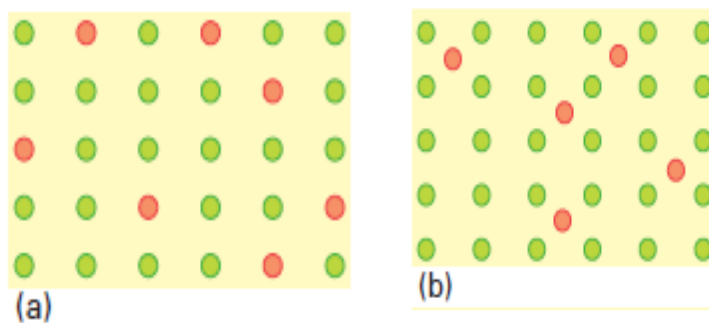
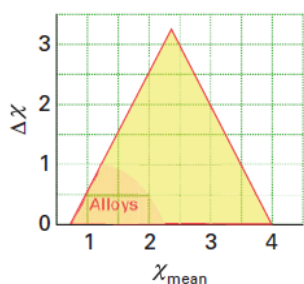
Goldshmitning bu qoidasidan keyin quyidagi xulosalar kelib chiqadi:

- atom radiuslar guruhlarda yuqoridan pastga qarab ortib boradi;
- atom radiuslar davrlarda chapdan o'ngga qarab kamayib boradi.

### 3.6. Qotishmalar

Qotishmalar metallarning aralashmasi bo'lib, suyuq komponentlar o'zaro aralashib sovitilgandan keyin qotishmaga aylanadi. Qotishmalar gomogen qattiq eritma bo'lishi mumkin, bunda bitta metall atomi boshqa metall atomi orasida tarqaladi yoki aniq tuzilishga va ichki strukturaga ega bo'lgan birikma holida bo'lishi mumkin.

Qotishmalar odatda, ikkita elektromusbat metallardan shakllanadi, shuning uchun ular Ketelaar uchburchakining chap tarafining pastki qismida joylashadi 3.5 –rasm.



3.5-rasm. Qotishmalar Ketelaar uchburchakda qotishmalari joylashishi. 3.6-rasm. Almashinish (a) va singdirilish (b)

Qattiq eritmalar ikkiga bo'linadi: singdirilgan qattiq eritmalar va almashilgan qattiq eritmalar. Singdirilgan qattiq eritmalarda erigan metallarning atomlari erituvchi metallning bo'shliqlari orasiga joylashadi. Lekin bu ajratish universal hisoblanmaydi, chunki tugunlararo singdirilgan atomlar tartibli

joylashgan bo'lishi mumkin va hosil bo'lgan qattiq eritma atom bir qismining boshqa strukturada almashinishi deb qaralishi mumkin. Qattiq eritmani yangi birikma deb hisoblash mumkin, va uning strukturasi dastlabki metall bilan bog'ni tasodifiy xarakterga ega deb hisoblash mumkin.

Qotishmalarning tipik misoli latundir (40% ruxning misdagi), bronza (boshqa metallning (ruxning yoki nikelning emas) misdagi eritmasi; quyma bronza, masalan, 10% qalay va 5% qo'rg'oshin) va zanglamaydigan po'lat (xromning 12% temirdagi eritmasi)

a) Almashinish qattiq eritmalari.

Almashinish qattiq eritmalari odatda uchta shart bajarilganda hosil bo'ladi.

1. Elementlar atom radiuslari bir-biridan 15% dan ko'p farq qilmaydi.
2. Toza metallarning kristallik strukturalari bir xil; atomlar orasidagi yo'naltirilgan o'zaro ta'sir mos tushadi.
3. Ikkala komponent elektrmusbat xarakteri bir-biriga yaqin, aks holda birikma hosil bo'lishi ehtimolligi yuqori.

Natriy va kaliy kimyoviy o'xshash bo'lsada va hajmiy markazlashgan tuzilishga ega, natriy atom radiusi ( $1,91\text{\AA}$ ) kaliy atom ( $2,35\text{\AA}$ ) radiusiga nisbatan 19% kam, va ikki metall qattiq eritma hosil qilmaydi. Boshqa tomondan elektrmusbat xarakteri yaqin, d-blok ikki qo'shni elementlari mis va nikel, o'xshash kristall tuzilishga (TMK) va atom radiuslari qiymatlari yaqin qiymatlarga (Ni  $1,25\text{\AA}$ , Cu  $1,28\text{\AA}$ , bor yo'g'i 2,3%) ega va nikeldan toza misgacha bo'lgan qattiq eritmalar uzluksiz qatorini hosil qiladi. Misning to'rtinchi davr boshqa qo'shnisi rux ham atom radiusi yaqin qiymatlariga ega ( $1,37\text{\AA}$ , ya'ni 7% ga ko'p), lekin tuzilishi GZU. Bu holatda metallar qisman aralashadi va cheklangan konsentratsiya intervalida qattiq eritma hosil qiladi. Almashinish qattiq eritmalari yuqoridagi shartlar bajarilganda hosil bo'ladi.

b) Singdirilgan qattiq eritmalari

Erituvchi tuzilishidagi tugunlar orasida joylashish uchun atomlari etarlicha kichik bo'lgan metallmaslar (masalan, bor va uglerod) orasida singdirilgan qattiq

eritmaları hosil bo‘ladi. Kichik atomlar mezbon dastlabki strukturasi saqlagan holda metall panjarasiga joylashadi. Bunda metall atomlari va singdirilgan atom o‘rtasida oddiy nisbat bajariladi ( $Fe_3C$ ), yoki kichik atomlar metall tuzilishining mavjud bo‘lgan bo‘shliqlariga joylashadi. Birinchi holatda chin kimyoviy birikma, ikkinchi holatda –qattiq eritma hosil bo‘ladi 3.6-rasm

c) Intermetallidlar.

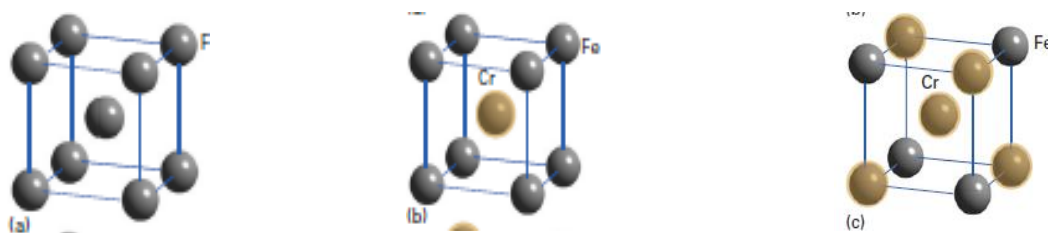
Metallarning suyuq eritmaları sovutilganda dastlabki metallardan farqli aniq tuzilishli fazalar hosil bo‘ladi. Bu fazalar intermetallidlar deyiladi. Ularga  $\beta$ -latun ( $CuZn$ ) va  $MgZn_2$ ,  $Cu_3Au$  va  $Na_5Zn_{21}$  tarkibli birikmalar kiradi.

Intermetallidlar ikki metallardan hosil bo‘lgan birikmalar.

### ION BIRIKMALAR

Ion bog‘lanishli birikmalar modeliga ko‘ra qattiq moddalar qarama-qarshi zaryadlangan sharlarning elektrostatik tortishuvi kuchlari (Kulon kuchlari) hisobiga hosil bo‘ladi; agar qattiq moddaning termodinamik hisob-kitobga asoslangan hossalari, tajriba yo‘li bilan aniqlangan qiymatlarga mos tushadigan bo‘lsa, u holda shu modda ion bog‘lanishli deb yuritiladi.

Ko‘pgina ion bog‘lanishli birikmalar, masalan  $NaCl$  va  $KNO_3$ , kation tarkibidan ajralib chiqqan elektronlar anion atrofida stabillashganligi sababli o‘zlarining mo‘rtligi bilan ajralib turadi. Bundan tashqari ion bog‘lanishli birikmalar odatda yuqori suyuqlanish temperaturaga va qutbli erituvchilarda erish hususiyatiga ega, ayniqsa suvda. Biroq,  $CaF_2$  bundan mustasnodir, chunki kalsiy fluorid yuqori suyuqlanish temperaturasiga ega bo‘lishiga qaramay, suvda yaxshi erimaydi.



3.7- rasm. Temirning (a),  $FeCr$ (b),  $Fe$  va  $Cr$  metallarining qotishmalari

### 3.7. Ion birikmalarning asosiy struktur turlari

Quyidagi bo‘limda keng ko‘lamda ion birikmalar strukturalari va ularning prototiplarini ko‘rib chiqamiz. Masalan, osh tuzi strukturasini faqatgina NaCl mineraliga emas, balki yana boshqa bir nechta qattiq moddalarga ham o‘rinlidir. Ko‘pgina kristal panjaralarda, odatda anionlar, markazlashgan va yoqlari markazlashgan kristall panjara turiga ega bo‘lsa, kationlar esa shu panjaraning oktaedrik va tetraedrik bo‘shliqlariga joylashadi.



3.8-rasm. (a) Osh tuzining strukturasini va (b) tekislikdagi tasviri.

### Binar birikmalar, $AX_n$

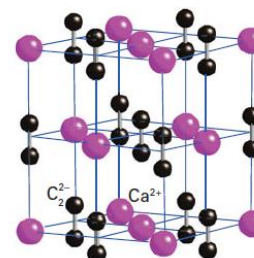
Muhim ion bog‘lanishli birikmalarga: osh tuzi, seziiy xlorid, sfalerit, flyuorit, vyursit, nikel arsenit va rutillar kiradi.

Oddiy turdagi ion bog‘lanishli birikmalar – bir turdagi kation (A) va bir turdagi aniondan (X) tashkil topib, ularning turli xil nisbatlaridan hosil bo‘ladi, masalan  $AX$ ,  $AX_2$  va hokazo. Kation va anionlarning o‘lchamlariga qarab ularning nisbatlari turlicha bo‘ladi. Dastavval, biz  $AX$  birikmasini, so‘ng  $AX_2$  va yana boshqa bir nechta stexiometriyalarni ko‘rib chiqamiz.

#### a) NaClning kristall panjarasi tasnifi.

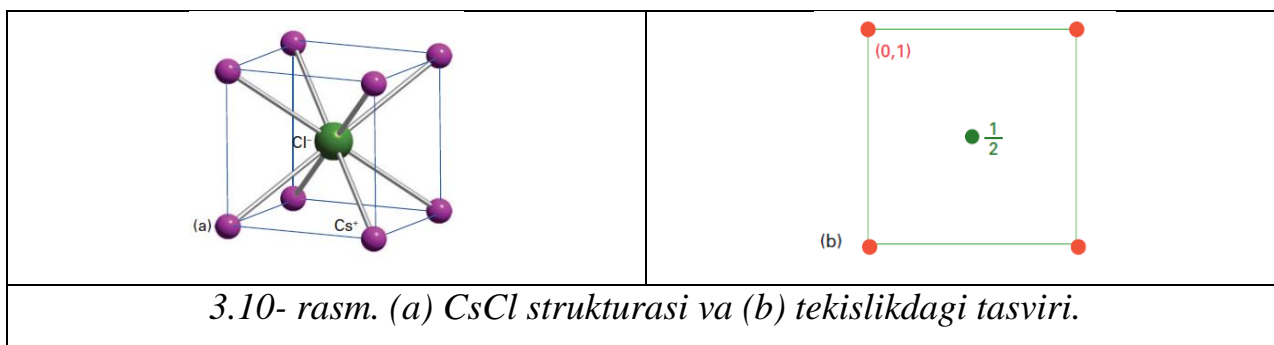
Har bir natriy kationi 6ta xlor anioni bilan, xlor anionlari esa oltita natriy kationi bilan o‘ralgan bo‘ladi va shu boisdan har bir ionning koordinatsion soni oltiga teng bo‘ladi 3.8- rasm.

Osh tuzining elementar yacheykasida



3.9 –rasm.  $CaC_2$  strukturasini

$8 \cdot \frac{1}{8} + 6 \cdot \frac{1}{2} = 4$   $\text{Na}^+$  kation va  $12 \cdot \frac{1}{4} + 1 = 4$   $\text{Cl}^-$  anionlar mavjud. SHu boisdan, har bir elementar yacheyka 4ta NaCl molekulasidan tashkil topgan. Elementar yacheykadagi molekular soni Z bilan belgilanadi va shu qiymat natriy xlorid uchun  $Z=4$ .

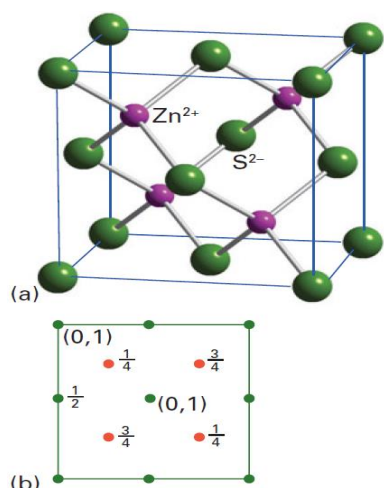


Osh tuzi tipidagi moddalarda kation yoki anionlarning soni birdan ortiq ham bo'lishi mumkin, lekin bunda qarama-qarshi zaryadli zarralarning 1:1 nisbatlari saqlanib qolishi darkor, masalan  $\text{CaC}_2$ , (3.9-rasm)  $\text{LiNO}_2$  (ya'ni  $\text{Li}_{0.5}\text{N}_{0.5}\text{O}$ ).

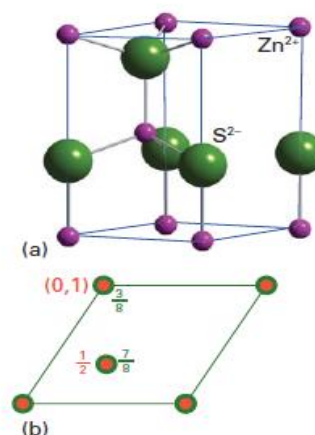
Ba'zi birikmalar AX tarkibga ega bo'lishiga qaramay osh tuzi kristall panjarasidan farq qiladi, masalan CsCl, CsBr, CsJ va shu ionlar radiuslari kabi o'lchamni o'zlarida aks ettirgan ba'zi birikmalar (TIJ,  $\text{NH}_4\text{Cl}$ ). Seziy xlorid kristall panjara elementar yacheykasining (3.10-rasm) har bir qirrasida bittadan xlor anionlari, yacheykaning markazidagi bo'shliqda esa Cs kationi joylashgan bo'ladi va shu sababli  $Z=1$ . Har bir ionlarning koordinatsion soni 8 ga teng va (8,8) ko'rinishida belgilanadi.

**b) Sfalerit (rux yaltirog'i)** nomi ZnS minerali nomidan olingan. NaCl kabi sfalerit ham hajmiy markazlashgan kubik panjaraga ega, biroq kationlar panjaradagi tetraedrik bo'shliqlarni egallagan bo'ladi, shuning uchun har bir ion to'rtta boshqa qo'shni ionlar bilan o'ralgan bo'ladi va (4,4)- koordinatsiyaga ega va  $Z=4$ . (3.11-rasm)





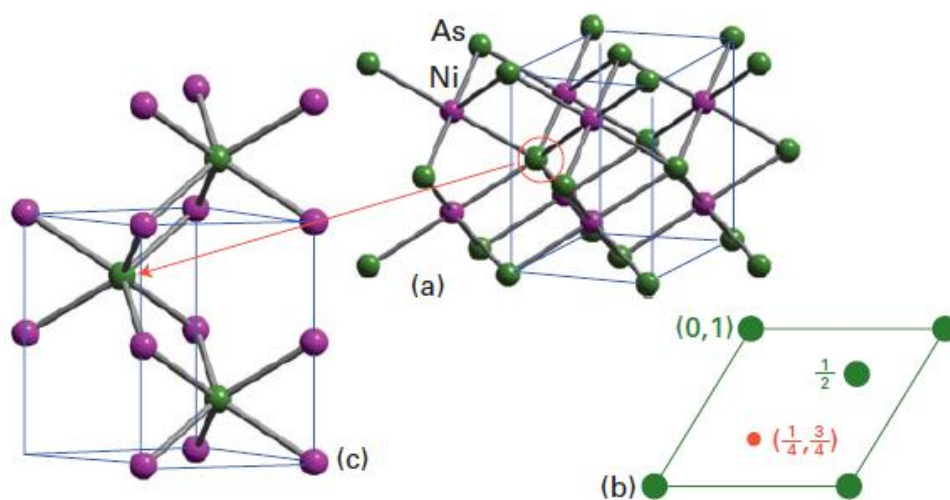
3.11-rasm. Sfalerit strukturasi (a) va tekislikdagi tasviri (b).



3.12-rasm. Vyursit strukturasi (a) va tekislikdagi tasviri (b).

c) **Vyursit strukturasi** rux sulfidning boshqa bir polimorf birikmasiga atab qo'yilgan. Bu tuzilishli birikmalar sfalerit tipidagi birikmalardan geksagonal zich joylashgan panjaraga egaligi bilan farq qiladi. (3.12- rasm)

d) **Nikel-arsenid strukturasi (NiAs)** ham geksagonal zich joylashgan panjaraga ega, lekin bunda Ni atomlari oktaedr boshliqlarda joylashgan va As atomlari esa Ni atomlarning trigonal prizmalari markazida joylashgan bo'ladi. NiS, FeS va yana bir nechta sulfidlar shu tipdagi kristall panjaraga ega. Nikel-arsenid strukturasi MX ko'rinishida tasvirlanib, qutblangan ionlar orasida hosil bo'ladi, ammo elektromanfiylik qiymatlarining farqi kam bo'ladi.

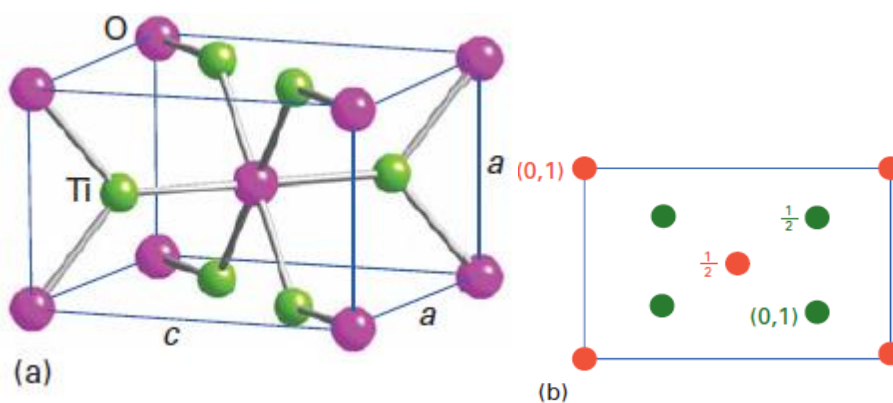


3.13-rasm. Nikel arsenid strukturasi (a) va tekislikdagi tasviri (b).

$AX_2$  tarkibli birikmalarning struktura birliklari **flyuorit** tipiga mansub bo‘lib, tabiatda uchraydigan flyuorit minerali ( $CaF_2$ ) nomiga atab qo‘yilgan. Flyuorit molekulasida  $Ca^{2+}$  kationi yoqlari markazlashgan kubik joylashuvga,  $F^-$  ioni esa kristall panjaraning barcha tetraedrik bo‘shliqlarini egallagan holatda bo‘ladi. Panjarada kationlar soni anionlarnikidan ikki barobar ko‘p bo‘lganligi sababli (8,4) koordinatsiyaga egadir.

e) **Antiflyuoritning** strukturasi flyuorit strukturasi qarama-qarshisi bo‘lib, unda kation bilan anionlarning holati (joyi) almashgan bo‘ladi. Ba’zi ishqoriy metallarning oksidlari shu tipdagi panjaraga ega (masalan:  $Li_2O$ ). Bunda kationlar soni anionlarnikidan ikki barobar ko‘p bo‘ladi va shu boisdan koordinatsiyasi (4,8)ga teng deb hisoblanadi.

f) **Rutil strukturasi** nomi rutil minerali nomiga atab qo‘yilgan bo‘lib, titan (IV) oksidi,  $TiO_2$  tarkibiga ega. Kristall panjaradagi anionlar geksagonal zich joylashuvga ega bo‘lib, kationlar faqatgina oktaedrik bo‘shliqlarning yarmini egallagan holatda bo‘ladi. Kristall panjara shu tipdagi strukturani qabul qilishining sababi  $Ti^{4+}$  ioning oktaedr holatga moyilligi bilan tushuntiriladi. Har bir  $Ti^{4+}$  atomi oltita O atomlari bilan o‘ralgan va har bir kislorod atomi uchta  $Ti^{4+}$  ioni bilan o‘ralgan holatda bo‘ladi va shu sababli rutil panjara turi (6,3)-koordinatsiyaga ega bo‘ladi.



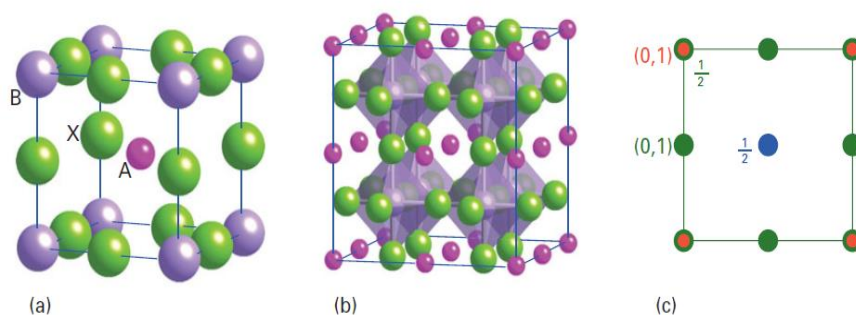
3.14-rasm. Rutil strukturasi (a) va tekislikdagi tasviri (b).

## Uchlamchi fazalar $A_aB_bX_n$

Perovskit va shpinellarning strukturalari mos ravishdagi stexiometriyaga,  $ABO_3$  va  $AB_2O_4$ , ega bo‘lgan ko‘pgina birikmalarda o‘z aksini topgandir.

Bo‘lishi mumkin bo‘lgan struktur birliklarning ehtimolligi birdaniga oshib ketdi, chunki ionlarning soni uchtaga etdi. Binar birikmalarga o‘xshamagan holda, shu tipga ega bo‘lgan panjaradagi ionlarning o‘lchamini yoki ularning koordinatsion sonini oldindan aytib berish biroz muskuldir.

**j) Perovskit minerali.**  $CaTiO_3$ ,  $ABX_3$  ning struktur prototipi hisoblanadi (asosan oksidlar). Perovskit minerali ideal holatda kubik ko‘rinishga ega bo‘lib, A kationi 12 ta X anioni bilan va har bir B kationi esa 6 ta X anionlar bilan o‘ralgan holatda bo‘ladi, ya’ni  $AO_2BO$  yoki  $ABO_3$  ko‘rinishida ifodalanadi.



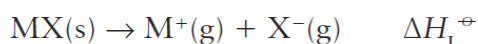
*3.15-rasm. Perovskit mineralining tuzilishi*

Oksidlarda,  $X = O$  va shu boisdan A va B ionlarining zaryadlar yig‘indisi +6 qiymatini qabul qilishi darkor. Bu qiymat esa turli xil yo‘llar bilan erishilishi mumkin; masalan  $A^{2+}B^{4+}$  va  $A^{3+}B^{3+}$ , bundan tashqari  $A(B_{0.5}B'_{0.5})O_3$  ko‘rinishida ham ifodalanishi mumkin  $La(Ni_{0.5}Ir_{0.5})O_3$ .

### 3.8. Ion bog‘lanishli birikmalarning energetikasi.

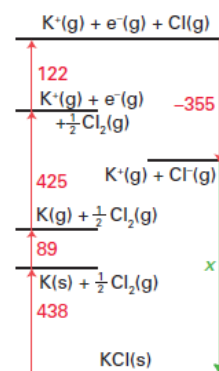
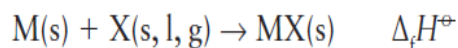
#### Kristall panjara entalpiyasi va Born- Gaber sikli

Kristall panjaraning entalpiyasi Born- Gaber sikli yordamida aniqlanadi. Eng turg‘un kristall panjara, eng katta entalpiyaga ega bo‘ladi.

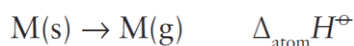


Kristall panjaraning buzilishi doimo endotermik jarayon bo‘lganligi sababli, uning hosil bo‘lish energiyasi har doim musbat qiymatlarni qabul qiladi.

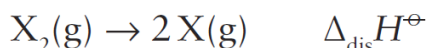
Kristall panjara entalpiyasining qiymati Born-Gaber sikli yordamida aniqlanadi. YUqoridagilardan xulosa qiladigan bo'lsak, birikmalarning elementlarga standart parchalanish entalpiyasi doimo manfiy qiymatlarni qabul qiladi.



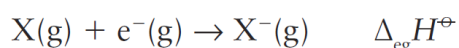
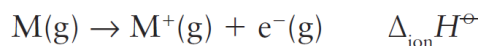
Kristall panjaraning gaz holatdagi ionlardan hosil bo'lish standart entalpiyasi manfiy qiymatni qabul qiladi. Qattiq elementlar uchun, standart atomlanish entalpiyasining qiymati standart sublimatlanish entalpiyasiga teng bo'ladi.



Gaz holatdagi element uchun esa standart atomlanish entalpiyasining qiymati, standart dissotsiyalanish qiymati bilan belgilanadi.



Neytral atomlardan ionlarning hosil bo'lish entalpiyasining qiymati ularning ionlanish energiyasi va ionlanish potentsiali qiymatlari bilan aniqlanadi.



Entalpiya qiymatlarining o'zgarishlari yig'indisi kristall panjara hosil bo'lish entalpiyasiga teng bo'ladi. Born- Gaber sikli yordamida olingan qiymatlar nisbatan aniqligi bilan ajralib turadi, faqatgina 10 kJ ga farq qilishi mumkin.

### 3.9. Panjara entalpiyasining boshqa imkoniyatlari

Panjara entalpiyasining boshqa imkoniyatlari bu ion va molekula, shuningdek elektro neyrtal fazodagi pazani shakllanishiga javobgar bo'lgan molekularlar aro tasir ortasidagi Vander Walls tasiri hisoblanadi. Bu turning muhimligi bazida esa dominantligi dispersion tasir (London ta'siri) natijasidadir. Bu dispersion ta'sir elektronlar izchiligidagi(va qisqa dipol momenti dagi), bir

molekulaning electron izchilligi boylab harakatlanishidagi, qoshni molekula va 2ta qisqa dipol moment orasidagi tasirlardagi fluctatsion o'tishlar natijasida kelib chiqadi.

Tasirlarning molyar potensial energiyasi , V, bu quyidagicha o'zgaradi:

$$V = -\frac{N_A C}{d^6}$$

Bu yerda C constant hisoblanadi. Kam polyarlangan ionlar uchun bu imkoniyat tahminan elektrostatik imkoniyatning 1%idir va ionik qattiqliklarning elementar panjara entalpiyasini hisoblash ahamiyatsiz hisoblanadi. Shuningdek, yuqori polyarlangan ionlar masalar  $Tl^+$  va  $I^-$  yuqori foizli muhim imkoniyatlar hosil qila oladi. Shuning uchun birikmalar uchun (LiF, CsBr) dispersion ta'sir 16 KJ mol<sup>-1</sup> va 50 kJ mol<sup>-1</sup> imkoniyatida baholanadi.

### **Amaliy va nazari miqdorlarni taqqoslash**

Amaliy panjara entalpiyasi va qattiq moddalarning (Born –Mayer tenglamasi) ion modelini hisoblashdagi kattaliklar orasidagi bog'liklik ion holatidagi qattiqliklarning o'lchovini ta'minlab beradi. 3.9-jadvalda bazilari hisoblangan va panjara entalpiyasi elektromanfiylik farqlari bilan birgalikda o'lchangan.

3.2- Jadval

#### Amaliy va nazariy panjara entalpiyalarini taqqoslash

	$\Delta H_L^{calc} / (kJ mol^{-1})$	$\Delta H_L^{exp} / (kJ mol^{-1})$	$(\Delta H_L^{exp} - \Delta H_L^{calc}) / (kJ mol^{-1})$
LiF	1029	1030	1
LiCl	834	853	19
LiBr	788	807	19
Lil	730	757	27
AgF	920	953	33
AgCl	832	903	71
AgBr	815	895	80
AgI	777	882	105

Ion modeli mavjud bo'la oladi qachonki, delta  $X > 2$  bo'lganda. Ammo delta  $X < 2$  holarida bog'larning kovalentligi ortib boradi. Shuning uchun bu esimizda qoladiki, ionlarning polyarlangandagi roli elektromanfiylik uchun ahamiyatsizdir. Shuning uchun ishqoriy metallar ion molel bilan, yuiqori elektromanfiylikka ega bo'lgan F atomining juda kam polyarlangan ion ( $F^-$ ) bilan va kam elektro manfiylikka ega bo'lgan I atomidagi yuqoripolyarlangan ion ( $I^-$ ) bilan juda yaxshi birikmalar beradi. Bu yo'nalish shuningdek kumush uchun panjara entalpiyasi uchun ham taaluqlidir. Amaliy va nazariy miqdorlar orasidagi farq yodda juda katta hisoblanadi, bu esa birikmalar uchun ion modelda muhim kamchiliklarni ko'rsatib beradi. Kumush litiyga qaraganda juda ham kam reaksiyaga kirishish efektini beradi, kumusning elektromanfiyligi(1.93) litiyning elektromanfiyligiga (0.98) nisbatan yuqori hisoblanadi. Ularning bog'larida muhim kovalent xususiyatlarni ko'rishimiz mumkin.

Elektronlarning elektromanfiyligi yoki ionlarning polyarlanganligi da bularni qo'llash har doim ham aniq bo'lavermaydi. ion model eng yaxshi shartnoma bu kation polyarlangananion polyarlangan birikmalar kovalentligidir. Shuningdek, juft elementlarning elektromanfiyligi oralaridagi farq juda kichik va elektromanfiyligi va polyarlanganligi tomonidan taminlagan o'lchovlar aniq bo'lmaydi.

Bazi misollarni hisoblash natijasida biz gaz birikmalarning barqarorligini oldindan aytishimiz mumkin.  $O_2^+PtF_6^-$  ion birikmasi kislorodning  $PtF_6$  bilan reaksiyasi natijasida hosil bo'lgan. Hisoblangan kislorodning (1176 kJ mol) va Xe ning (1169 kJ mol) energiyalari bularning bir xilligini va shuningdek ularning ionlari bo'lgan  $Xe^+$  va  $O_2^+$  ionlarining o'xshashligini ko'rsatadi. Shuningdek kislorod molekulasini platinum geksafторid bilan ta'sirlashishi natijasida ham topilgan. Bu esa Xe uchun xaligini oldindan ko'rsatadi. Va xaqiqatdan ham Xe bilan ionli birikma beradi. Bazi hisoblashlar ularning barqarorligini ko'rsatadi. Birikmalarning turlarini ko'pligi masalan yerdagi monogologenidlarning barqarorligi masalan  $MgCl$ . Born-Mayer panjara eltalpiyasi va Born-Gaber sikli

natijasidagi hisoblashlar Mg bilan MgCl<sub>2</sub> lar o‘zaro disproporsionalligini ko‘rsatadi. Termodinamika jihatidan beqaror bo‘lgan birikmalar izolatsiyalangan bo‘lishi mumkin qachonki, ularni ajralishi juda sekin bo‘lganda. Haqiqatdan ham, Mg(I)ning birikmalari 2007-yilda hisobot qilingan.

### 3.10. Kapustinskiy tenglamasi

Kapustinskiy tenglamasi ion birikmalarining entalpiya panjarasini baxolashda va shuningdek aniq bir ionlarning termokimyoviy radiusini o‘lchovini berishda qo‘llaniladi.

Kapustinskiy tenglamasi quyidagi hollarda kuzatilgan: agar Madelung kostantasi strukturaviy nomerlar uchun ion nomerlari binoan ajratilganda.  $N_{ion}$ , bazi miqdorlar esa ularning hammasi uchun kelib chiqqan. Shuningdek biz eslab qolishimiz kerakki, miqdorlar koordinatsion nomerlar bilan ortib boradi, shuning uchun ion radiusi koordinatsion nomer va shuningdek ularning o‘zgarishi bilan ortib boradi. Bu ko‘rsatilgan natijalar Kapustinskiy tenglamasi deb ataladi:

$$\Delta H_L^{\ominus} = \frac{N_{ion} |z_A z_B|}{d} \left( 1 - \frac{d^*}{d} \right) \kappa$$

Bu tenglamada  $\kappa = 1.21 \cdot 10^5 \text{ kJ pm mol}^{-1}$ .

Kapustinskiy tenglamasini sferik bo‘lmagan ionlarning radiusining qayd qilingan miqdorlarini va Born-Gaber sikli yordamida topilgan panjara entalpiyasi miqdorini hilbblashda qo‘llaymiz. Bu usul bilan olingan parametrlar termokimyoviy radius deb nomlanadi. Ular ion birikmalarning entalpiya panjarasini baxolashda va shuningdek birikmalar formasiyasini ularni strukturasi bilmagan holda hisoblash imkonini beradi.

Qisqa tasnif: kaliy nitratning panjara entalpiyasini baholash. Bunda bizga ion formulasining nomeri ( $N_{ion}=2$ ), ularning zaryadlari  $z(K^+)=+1$ ,  $z(NO_3^-)=-1$  va ularning termokimyoviy yig‘indisi quyidagicha  $138 \text{ pm} + 189 \text{ pm} = 327 \text{ pm}$

$$\Delta H_{\text{L}}^{\ominus} = \frac{2|(+1)(-1)|}{327 \text{ pm}} \times \left(1 - \frac{34.5 \text{ pm}}{327 \text{ pm}}\right) \times (1.21 \times 10^5 \text{ kJ pm mol}^{-1})$$

$$= 622 \text{ kJ mol}^{-1}$$

3.4-jadval

### Ion radiuslar

Main-group elements					
BeF <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	BF <sub>4</sub> <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	NO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	OH <sup>-</sup>	
245	228	185	189	140	
		CN <sup>-</sup>	NO <sub>2</sub> <sup>-</sup>	O <sub>2</sub> <sup>2-</sup>	
		182	155	180	
			PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>
			238	230	236
			AsO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	SeO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
			248	243	
			SbO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	TeO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	IO <sub>4</sub> <sup>-</sup>
			260	254	249
					IO <sub>3</sub> <sup>-</sup>
					182
Complex ions				d-Metal oxoanions	
[TiCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[IrCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[SiF <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[GeCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	CrO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	MnO <sub>4</sub> <sup>-</sup>
248	254	194	243	230	240
[TiBr <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[PtCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[GeF <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	[SnCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>	MoO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	
261	259	201	247	254	
[ZrCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>			[PbCl <sub>6</sub> ] <sup>2-</sup>		
247			248		

Source: A.F. Kaputinskii, *Q. Rev. Chem. Soc.*, 1956, 10, 283.

### 3.11. Ion holatdagi birikmalarning termik barqarorligi

Karbonatlarning termik parchalanishida temperaturani ushlab turishimiz alohida ahamiyatga ega. (buni anorganik qattiq moddalarda osonlikcha kuzatishimiz mumkin)



misol uchun magniy karbonatning parchalanishi uchun 300°C qizdirish kerak bo'lsa kalsiy karbonat uchun 800°C atrofida. Kation radiusi ortishi bilan termik parchalanish temperaturasi beqarorlashadi(karbonatlar uchun, 3.11-jadval).



Odatda katta kationlar katta anionlarga nisbatan barqarordir.  $MCO_3$  ning parchalanishi uchun 298 k issiqlik zarur.

3.5-jadval

Termik parchalanish temperaturasi

	$MgCO_3$	$CaCO_3$	$SrCO_3$	$BaCO_3$
$\Delta G^\ominus / (kJ\ mol^{-1})$	+48.3	+130.4	+183.8	+218.1
$\Delta H^\ominus / (kJ\ mol^{-1})$	+100.6	+178.3	+234.6	+269.3
$\Delta S^\ominus / (kJ\ mol^{-1})$	+175.0	+160.6	+171.0	+172.1
$\theta_{decomp} / ^\circ C$	300	840	1100	1300

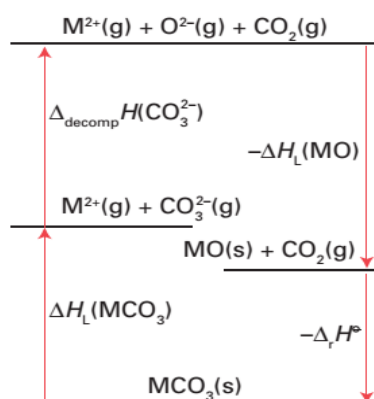
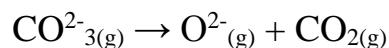
Kationlar katta bo'lganda barqarorligi, anionlarning beqaror bo'lishini ularning entalpiya panjarasi termini orqali tushuntirish mumkin. Birinchi biz qattiq anorganik murakkab moddalarning parchalanish temperaturasi tasvirlashda Gibbs energiyasi termini orqali maxsulotni aniqlashimiz mumkin. Asosiy holda qattiq moddalarning entalpiyasi  $\Delta G^\ominus = \Delta H^\ominus - T\Delta S^\ominus$ , temperaturani oshirganimizda ikkinchi teskari holat kuzatiladi

$$T = \Delta H^\ominus / \Delta S^\ominus$$

Ko'pincha reaksiya entalpiyasini hisoblashning o'zi yetarli bo'ladi, chunki entropiya M uchun xos bo'lib gaz holatida entalpiya  $CO_2$  da yuqori hisoblanadi. Asosiy holda qattiq moddalarning parchalanish entalpiyasi bizga quyidagilani beradi:

$$\Delta H^\ominus \approx \Delta_{parchal} H^\ominus + \Delta H^\ominus_L (MCO_3, q) - \Delta H^\ominus_L (MO, q)$$

Gaz fazada  $CO_3^{2-}$  uchun asosiy holatda parchalanish entalpiyasi  $\Delta_{parchal} H^\ominus$  (3.49 figura) :

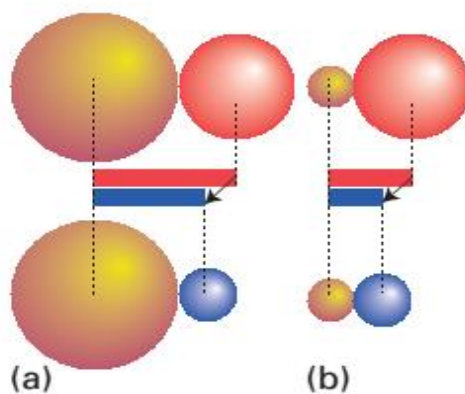


qattiq holdagi  $\text{MCO}_3$  parchalanishini termodinamik sikl entalpiyasi orqali ko‘rinishi

Chunki  $\Delta_{\text{parchal}}H^\circ$  katta va musbat, umumiy reaksiya entalpiyasi musbat(parchalanish endotermik) lekin oksidlar entalpiyasiga qaraganda karbanatlar entalpiya panjarasining musbat ushorasi kuchliroq shuning uchun

$$\Delta H^\circ_L (\text{MCO}_3, q) - \Delta H^\circ_L (\text{MO}, q).$$

Bundan parchalanish temperaturasi oksidlarga qaraganda karbonatlarda entalpiya panjarasi nisbatan yuqoriligini kuzatishimiz mumkin. Kichik va yuqori zaryadlangan kationlardan tuzilgan (masalan  $\text{Mg}^{2+}$ ) birikmalar nima uchun oksidlarining entalpiya panjarasi karbonatlariga nisbatan pastligini tushuntiradi. 3.50 figurada kichik kationlardagi bir qancha muhim o‘zgarishlar, uning entalpiya panjarasini turli xil katta kichiklikdagi kationlarda tasvirlab beradi. Bu o‘zgarishlar kichikroq juft birikmalarni kichik qismidan nisbatan katta kationlarni ajratib olinadi. Rasmda kationlar kattalashgani anionlar kichrayani sari panjaralari o‘zgarishini ko‘rsatib beradi. Shunday qilib ko‘p atomli anionlar turli xil entalpiya panjarasi parchalanishida kationlar katta kichikligi muhim va maquldir.



3.17-rasm.

Legirlovchi aralashmalarning ionlari va bo‘shliqlari ko‘pgina qimmatbaho toshlarning rangiga sabab bo‘ladi. Alyuminiy oksidi, kremniy oksidi va flyuorid toza xolatida rangsiz, ularga begona ionlar aralashmasi yoki bo‘sh pog‘onalarning kiritilishi, ulardan olingan materiallarning rangli bo‘lishiga olib keladi. Aralashmalar va defektlar tabiatda foydali qazilmalarda, geologik va ekologik

sharoitlar hisobiga hosil bo‘ladi. Masalan, d-metall ionlari ko‘pincha qimmatbaho toshlar paydo bo‘lib, o‘sadigan eritmalarda bo‘ladi. Radioaktiv moddalarning nurlanishidan bo‘sh elektronlar hosil bo‘ladi, ular tutqichda ushlab qolinadi.

Qimmatbaho toshlardagi rang manbai sifatida legirlovchi aralashmaning d-metall ioni xizmat qiladi. Qizil yoqutning qizil rangga bo‘yalishiga tarkibidagi alyuminiy oksidi va d-metall hisoblangan xrom ionlari sabab bo‘ladi. Xrom ionlari zumradning yashil rangiga ham sabab bo‘ladi. Struktura markazida berilliy bo‘lib, berilliy ionlari berilliy alyuminiy silikatida  $\text{Be}_3\text{Al}_2(\text{SiO}_3)_6$  oltita silikat ionlari bilan qurshalgan bo‘ladi, rubinda esa xrom ionlari atrofida oltita kislorod ionlari bo‘ladi, bu energiyani yutilishiga olib keladi. Boshqa d-metall ionlari qimmatbaho toshlardagi boshqa ranglarga javob beradi. Temir (II) ioni gavharning qizil rangiga javob beradi, peridotning sarg‘ish-yashil rangga bo‘yalishiga sabab bo‘ladi. Mn(II) ioni turmalinning qizg‘ish rangiga javob beradi. Yoqut va zumraddagi ranglar d-metall ionlarining legirlovchi aralashmasidagi bitta elektronning qo‘zg‘olishi sababli paydo bo‘ladi. Legirlovchi aralashmalarining turi bittadan ko‘p bo‘lsa, ular o‘rtasida elektronlar ko‘chib o‘tishi xolatlari bo‘lishi mumkin. Bunga misol tariqasid asfirda keltirish mumkin. Saffirda, yoqutdagi kabi alyuminiy oksidi bo‘ladi, lekin bu qimmatbaho toshda ba’zi bir alyuminiy ionlari temir (II) va titan (IV) ga almashgan. Bu material sariq sohada ko‘rinuvchan nurlanishni yutadi, elektron temir (II)dan titan (IV)ga o‘tadi, yaltiroq ko‘k rangni paydo qiladi.

Boshqa qimmatbaho toshlarda va minerallarda rang mezbon strukturaning zaryadini iondan farqlab turuvchi dopingi natijasi hisoblanadi. Har ikki xolda ham rang-markaz yoki F-markaz shakllanib boradi. Shu strukturadan joy olgan F-markazdagi zaryad noldan farq qiladi, u elektronni oson berishi yoki boshqa iondan elektronni olishi mumkin. Bu elektron yorug‘likni yutishi hisobiga qo‘zg‘olgan xolatga o‘tishi mumkin, shu sababli u o‘zidan nur chiqara boshlaydi. Masalan, siyohrang uchun kalsiy fluoridida F-markaz fluor ioni egallagan joydagi bo‘sh joyda shakllanadi. Bu joy elektronni tutib oluvchi joy hisoblanadi,

mineralga ionlovchi radiatsiya ta'sir etishi natijasida paydo bo'ladi. Elektronni qo'zg'olishi natijasida 530-600 nm to'lqin uzunligi sohasida yorug'lik yutiladi, mineral siyohrang tusga kiradi.

Kvarsning siyohrang hosilasi bo'lgan ametistda ba'zi  $Si^{+4}$  ionlari  $Fe^{3+}$  ionlariga almashgan. Bu almashinuv natijasida bo'sh joy, ya'ni qopqon paydo bo'ladi (bitta yo'qolgan elektron hisobiga). Bu materialdagi elektronlarning keyingi qo'zg'olishi 540 nm to'lqin uzunligida yorug'likni yutilishi hisobiga sodir bo'ladi. Agar ametist kristalli  $450^{\circ}C$  gacha qizdirilsa, bo'sh joy uning qopqonidan qutiladi. Kristallning rangi temir, legirlangan kremniy dioksidiga xos bo'lgan rangga qaytadi, tsitrin toshining sariq rangi uning belgisi hisoblanadi. Agar tsitrin nurlantrilsa, regenirlanadi va boshlang'ich rangiga qaytadi.

Rang markazlari yadroviy o'zgarishlar hisobiga ham olinishi mumkin. Masalan, olmosdagi 14S parchalanishi. Bu parchalanish natijasida olmos strukturasi kirib olgan qo'shimcha valent elektronlari bor 14N atomi hosil bo'ladi. Bu N atomlari bilan bog'langan elektronlarning pog'onalari spektrning ko'rinuvchan sohasida yutilish imkonini beradi va olmoslarni ko'k bilan sariq rangga kirishiga sabab bo'ladi.

### 3.6-jadval

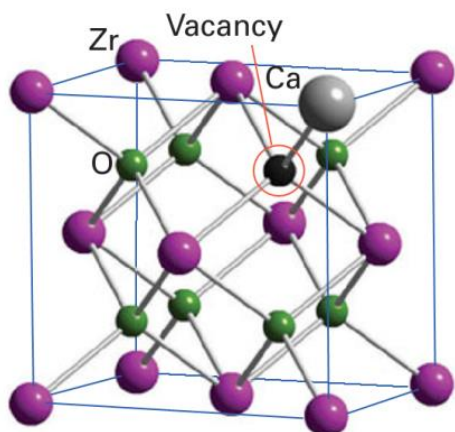
Qimmatbaho toshlar va ulardagi rangni paydo bo'lishi

Mineral yoki qimmatbaho tosh	Rang	Boshlang'ich formula	Rang beruvchi qo'shimcha yoki defekt
Yoqut	qizil	$Al_2O_3$	Xrom ionlari alyuminiy ionlariga almashadi
Zumrad	Yashil	$Be_3Al_2(SiO_3)_6$	Xrom ionlari alyuminiy ionlariga almashadi
Turmalin	Yashil yoki qizg'ish	$Na_3Li_3Al_6(BO_3)_3(SiO_3)_6F_4$	$Cr^{3+}$ yoki $Mn^{2+}$ ionlari $Li^+$ yoki $Al^{3+}$ ionlariga almashadi
Gavhar	Qizil	$Mg_3Al_2(SiO_4)_3$	$Fe^{2+}$ 8-koordinatsiyon

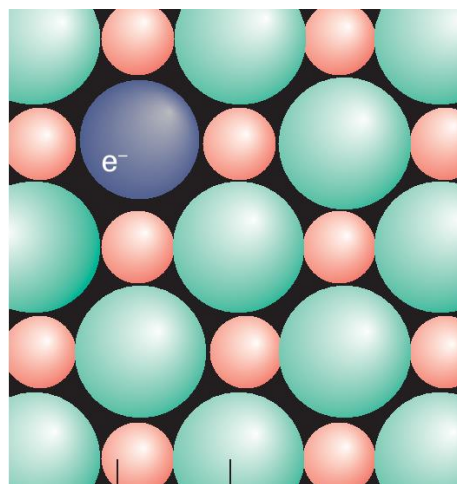
			pogʻonasida Mg <sup>2+</sup> ga almashadi
Peridot	Sariq-yashil	Mg <sub>2</sub> SiO <sub>4</sub>	Fe <sup>2+</sup> 6-koordinatsiyon pogʻonasida Mg <sup>2+</sup> ga almashadi
Sapfir	Havorang	Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	Fe <sup>2+</sup> va Ti <sup>4+</sup> oʻrtasida electron almashinuv
Olmos	Rangsiz, koʻk yoki sariq	C	N dagi rang markazlari
Ametist	siyohrang	SiO <sub>2</sub>	Fe <sup>3+</sup> /Fe <sup>2+</sup> oʻtish vaqtidagi rang markazlari
Fluorit	siyohrang	CaF <sub>2</sub>	electron oʻtishlar asosidagi rang markazlari

Rubin kompozitsiyalari odatda (Al<sub>0,998</sub>Cr<sub>0.002</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub> boʻlib, 0.2% Cr<sup>3+</sup> ionlarni oʻz tarkibida saqlaydi. Baʼzi qotishmalar bundan ham yuqoriroq darajadagi defektni namoyon qilishi mumkin.

Qoʻshimchani kiritilishi, albatta, modda elektron taqsimlanishiga taʼsir etadi. ZrO<sub>2</sub> birikmasiga Zr<sup>4+</sup> ioni orniga, Ca<sup>2+</sup> ionining kiritilishi natijasida, birikmadan O<sup>2-</sup> ajralib chiqadi va modda neytralligini saqlab qoladi.



3.18-rasm.  $ZrO_2$  oksidiga  $Ca^{+2}$  ionining kiritilishidan hosil bo'lgan subkristall panjara  $O^{2-}$  defekti kuzatiladi.  $Ca^{+2}$  ioning kiritilishi  $ZrO_2$  ning stabilligini oshirib beradi.



3.19 rasm. F- markazda vakant anion o'rnini egallagan elektron tasvirlangan. 3D maydonda elektronning energiyasi, vakant zarracha energiyasiga yaqinligini ko'rishimiz mumkin.

Modda defektning yana bir o'ziga xos hususiyatlaridan biri – **rangli markaz** hosil qilishidir, ya'ni IQ, ko'rinadigan va UF sohalardagi xarakteristik yutilish natijasida hosil bo'ladigan kimyoviy hodisa. Rangli markaz hodisasini amaliy mashg'ulotlar yordamida ham kuzatsak bo'ladi. Ishqoriy metall galogenidlarini, gaz gorelkasida qizdirilganda, misol uchun, NaCl olov rang, KCl binafsha rang, va KBr ko'k- yashil rangli alanganga hosil qiladi. Rangli markazda galogen vakant ioni o'rniga electron kiritilsa **F- markaz** hosil bo'ladi. F- markazli birikmalar olish uchun, materialga X- nurlar ta'sir etiladi va anion o'rniga electron kiritiladi.

### **Nostexiometrik moddalar va qattiq eritmalar.**

(a) Nostexiometriya

d-, f-, va p- elementlarning kristall panjarasi odatda ideal stexiometriyadan chekinadi.

Nostexiometrik moddalar . Misol uchun,  $1000^{\circ}C$  monooksid temir odatda  $Fe_{1-x}O$  ko'rinishida ham ifodalanadi.  $Fe_{0.89}O$  dan  $Fe_{0.96}$  gacha o'zgarishi mumkin.

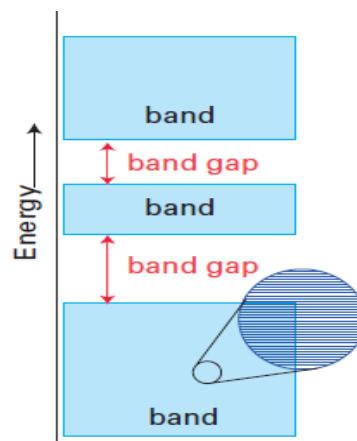
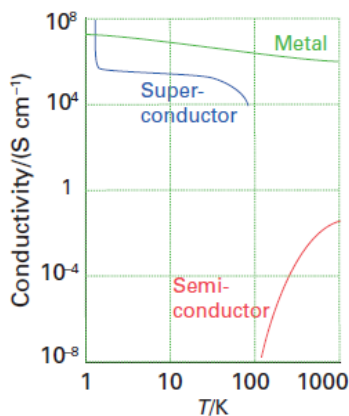
Nostexiometriya darajasi o'zgarishi bilan uning fizikaviy hossalari ham o'zgarib bo'radi. Kompozitsiya o'zgarishi bilan moddaning termodinamik hossalari ham chiziqli o'zgarib boradi. Nonstexiometrik moddalar xossalarining bunday o'zgarishi **Vegard qoidasi** deb ham ataladi.

### **Qattiq jismlar elektron strukturasi.**

Molekulyar orbitallar usulini qattiq jismlar strukturasi tushuntirishda ham qo'llash mumkin. Metallar uchun juda ham mos keladi. Uning yordamida xarakterli yaltiroqligi, yaxshi elektr-va issiqlik o'tkazuvchanligi, plastikligini tushuntirish mumkin. Barcha bu xossalari atomlarning elektronlarini umumiy elektronlarga berishiga asoslangan. Metallarning yaltiroqligi va elektr o'tkazuvchanligi bu elektronlarning tushayotgan nurning o'zgaruvchan tok maydoni ta'siri, yoki potentsiallar farqi natijasida yuzaga keladi. Yuqori elektr o'tkazuvchanlik ham elektronlarning harakatchanligi bilan bog'liq, chunki elektronlar tebranib turgan atomlar bilan urilib ularning energiyasini boshqa atomlarga etkazishi mumkin. Mexanik deformatsiyaning engilligi ham elektronlar harakatchanligi yana bir namoyon bo'lishidir. Elektron o'tkazuvchanlik yana yarim o'tkazgichlarga ham xosdir.

Moddalarni metall o'tkazuvchi, yarimo'tkazgich va o'ta o'tkazgichlarga bo'linishi solishtirma o'tkazuvchanlikning teperaturaga bog'likligiga asoslangan. Metall o'tkazgichlarga temperatura oshishi bilan o'tkazuvchanlikning kamayishi xosdir. Yarim o'tkazgichlar esa temperatura ortishi bilan o'tkazuvchanligi oshadigan moddalardir.

Bundan tashqari metallarning xona temperaturasidagi o'tkazuvchanligi yarim o'tkazgichlarga nisbatan yuqori bo'ladi. Tipik qiymatlari 3.20- rasmda keltirilgan. Qattiq izolyator kichik elektr o'tkazuvchanlikka ega bo'lgan moddalardir. O'ta o'tkazuvchi moddalar nolga teng elektr qarshilikka ega bo'lgan moddalardir.



3.20-rasm. Moddalarni metallar,

3.21 –rasm qattiq jism electron

yarim o‘tkazgichlar va o‘ta strukturasi orbitallar zonalar o‘tkazuvchilarga bo‘linishi solishtirma seriyalari bilan bayon qilinadi elektr o‘tkazuvchanligining temperaturaga bog‘likligiga asoslangan.

Katta miqdordagi atomlarning qoplashishidan energiyalari juda yaqin bo‘lgan molekulyar orbitallar hosil bo‘ladi va amaliy jihatdan uzluksiz zonalar hosil qiladi. (3.20-rasm). Zonalar hech qaysi molekulyar orbitallarga to‘g‘ri kelmaydigan intervallar bilan bo‘lingan. Ularni ta‘qiqlangan zonalar deb ataladi.

### Yarim o‘tkazgichlar

Yarim o‘tkazgichlarning xarakterli fizik xususiyati ularning temperatura ortishi bilan elektr o‘tkazuvchanligining ortishidir. Xona temperaturasida yarim o‘tkazgichlar elektr o‘tkazuvchanligi metallar va izolyatorlarga tegishli qiymatlar orasidagi qiymatlarni egallaydi.

### O‘ta o‘tkazuvchan moddalar

1987 yilgacha ma‘lum bo‘lgan o‘ta o‘tkazuvchilar (metallar va ba‘zi oksidlar va galogenidlar)ni o‘ta o‘tkazuvchan bo‘lishi uchun 20 K past temperaturagacha sovitish kerak bo‘lgan. Lekin 1987 yilda birinchi yuqori



temperaturali o'ta o'tkazuvchan moddalar kashf etildi. Ularning o'tkazuvchanlik xossasi 120K da namoyon bo'ladi.

### **NAZORAT SAVOLLARI:**

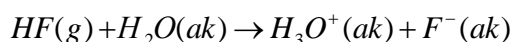
1. Kristallarning muhim xususiyatlari.
2. Polimorfizm va politipiya o'rtasidagi farqni tushuntiring. Har biri uchun bittadan misol keltiring.
3. Kristallardagi nuqsonlar. Nuqtaviy, chiziqli va sirt nuqsonlari.
4. Zich taxlamalar bo'lmagan tuzilishlarni sanab bering.
5. Metallar va ion birikmalarning asosiy xarakteristikasi.
6. Kristall elementar yacheykasi deb nimaga aytiladi
7. Kristallarning fizik xususiyatlari: mexanik, elektrik, magnit va optik xususiyatlari.
8. Qotishmalar to'g'risida tushuncha bering.
9. Magniy sulfidning kristall strukturasi qanday bo'lishi mumkin?
10. Elektr o'tkazuvchanlik qanday moddalarga xos?
11. Qattiq moddalarning qanday struktur turlarini bilasiz?
12. Moddalarni metallar, yarim o'tkazgichlar va o'ta o'tkazuvchilarga bo'linishi nimaga asoslangan?
13. Kristallik izolyatorlar deb nimaga aytiladi?
14. Moddalarni izolyatorlar va yarim o'tkazgichlarga ajratish nimaga asoslangan?
15. Perovskitda titanning koordinatsion soni nechaga teng?
16. Rutilda titanning koordinatsion soni nechaga teng?

## 4-BOB. KISLOTA VA ASOSLAR

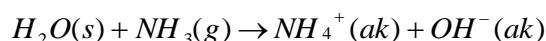
Daniyalik fiziko-kimyogar Ioxan Bryonsted va ingliz kimyogari Tomas Louri bir-biridan bexabar holatda kislota –asos reaksiyasining eng asosiy farqi zarrachalarning biridan biriga proton o‘tishi amalga oshadi. Bryonsted-Louri ta’rifiga ko‘ra proton bu vodorod ioni. Ular protonlar donori vazifasini bajaruvchi har qanday moddani kislota deb? Protonni biriktiradigan har qanday moddani asos deb atashni taklif qildilar. O‘zini shunday tutgan kislota va asoslar Bryonsted kislota va asoslari deb aytiladi.

Bu ta’riflarda proton ko‘chishi sodir bo‘ladigan muhit tushunchasi hech qachon ishlatilmaydi, shunday qilib proton ko‘chishi har qanday erituvchida va hatto erituvchisiz sharoitda ham amalga oshaveradi.

Bryonsted kislotasiga misol qilib HF olinishi mumkin, erish jarayonida u protonni boshqa molekula masalan suvga berishi mumkin :



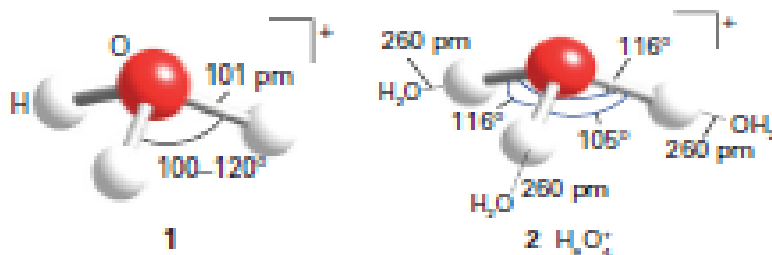
Bryonsted asos sifatida – NH<sub>3</sub> ammiak olinishi mumkin, u protonni donordan oladi:



Bu tenglamalar reaksiyada suv amfoter modda ekanligini ko‘rsatmoqda. Bunday moddalar Bryonsted bo‘yicha ham asos va ham kislota rolini bajarishini korsatadi.

Kislota protonini suvga berganda u gidroksoniy ioniga aylanadi. Gidroksoniy ioning valent burchaklari va atomlari masofasi H<sub>3</sub>O<sup>+</sup>ClO<sub>4</sub><sup>-</sup> ni strukturasi asosida olingan. Agr eng oddiy formula kerak bo‘lsa gidroksoniy ionini quyidagicha tassavur etish kerak H<sub>9</sub>O<sub>4</sub><sup>+(2)</sup>.

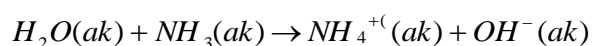
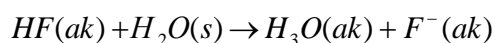
Suvning klasterlarini gaz fazadagi o‘rganish va uni masspekttri, H<sub>3</sub>O<sup>+</sup> atrofida 20 ta suv molekulasi kondensatsiyalangan pentagonal dekaedr hosil bo‘lganini ko‘rsatadi. Shu tufayli H<sup>+</sup>(H<sub>2</sub>O)<sub>21</sub> hosil bo‘ladi. Natijalar u yoki bu modelni proton ishtirokida suvda hosil bo‘lishi tajriba sharoitiga bog‘liq ekan.



Bryonsted kislota protonlarning donori, Bryonsted asoslari protonlar akseptoridir. Eng oddiy holat suvdagi ko‘p atomli gidroksoniy ioni  $H_3O^+$  orqali tushuniladi.

#### 4.1. Suvdagi kislota asos muvozanati

Kislota va asos orasida protonning ko‘chishi ikkala yo‘nalishda ham bir zumda sodir bo‘lib dinamik muvozanatga o‘tadi

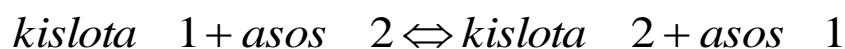


Bu reaksiyalar kislota HF va asos  $NH_3$  ning o‘zini suvdagi holatini to‘laroq bayon etadi.

Bryonsted kislota va asosining o‘ziga xos tarafi proton ko‘chishining tezda muvozanat holatiga o‘tishidir.

##### a) Tutash kislota va asoslar

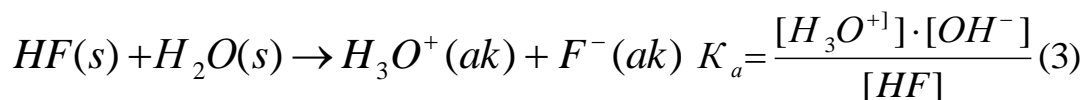
Bryonstedning umumiy muvozanat tenglamasi kislotadan asosga proton o‘tishi kuzatilib quyidagi to‘g‘ri va teskari reaksiya tenglamasi bilan ifodalanadi:



Asos 1 kislota 1 ga tutash hisoblanadi, kislota 2 asos 2 ga tutash bo‘ladi. Kislota tutash bo‘lgan asos, shunday zarrachaki, u kislota proton yo‘qotishi natijasida hosil bo‘ladi. Asos bilan tutash bo‘lgan kislota esa o‘ziga proton biriktirganda hosil bo‘lgan zarrachadir. Masalan,  $F^-$  ioni asos u HF bilan tutash,  $H_3O^+$  -kislota va u  $H_2O$  bilan tutash hisoblanadi. Umuman tutash kislota va asoslarning deyarli prinsipial farqi yo‘q, chunki tutash kislota yana bitta kislota va tutash asos yana bitta asosdir. Eritmada tutash kislota va asoslar orasida muvozanat roy beradi.

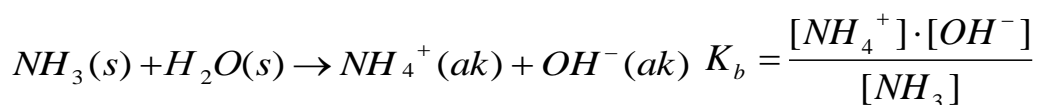
## 6) Bryonsted kislotalarinig kuchi

Bryonsted kislotasining kuchi, masalan HF uchun kislotalik konstantasi bilan ifodalanadi (yoki kislotaning ionlanish konstantasi)  $K_a$ :



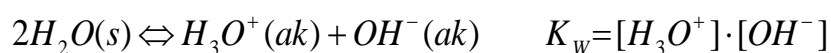
Bu formulada  $[X]$  molyar konsentratsiyaning raqamiy ifodasini ko'rsatadi, zarrachalar X (agar, HF ning molyar konsentratsiyasi 0,001 bo'lsa, unda HF molekulalarining konsentratsiyasi  $[HF] = 0,001$ )<sup>1</sup>. Bunda qiymat  $K_a < 1$  va kislota protonni mahkam ushlaydi. Tajribalar asosida HFning  $K_a$  normal sharoitdagi qiymati  $3,5 \cdot 10^{-4}$ , tengligi aniqlangan. Demak HF ning suvda uncha ko'p bo'lmagan molekulalari deprotonlangan va bunday hisoblar  $K_a$  qiymati bilankimyo kurslarida beriladi.

Shunday fikr yuritib, asosning asoslik konstantasini aniqlash mumkin  $K_b$ :



Agar  $K_b < 1$ , asos protonlarning kuchsiz akseptori hisoblanadi va unga tutash kislota eritmada kichik konsentratsiyada mavjud bo'ladi. Ammiak uchun tajribada o'lchangan  $K_b$  ning qiymati  $K_b = 5,6 \cdot 10^{-10}$  ga teng. Normal sharoitda  $NH_3$  ning kam sondagi molekulalari protonlashgan bo'ladi. Protonlashgan molekulalarning son qiymati  $K_b$  asosida oson aniqlanadi.

Suv amfolit elektrolit bo'lgani uchun pritonning o'tishi begona kislota yoki asos bo'lmasa hammuvozanat holati ro'y beradi. Protonng bir suv molekulasidan boshqasiga o'tishi avtoprotoliz deyiladi (yoki avtoionlanish). Avtoionlanish darajasi avtoprotoliz konstantasi bilan tavsiflanadi (suvning ion ko'paytmasi)  $K_w$ .



Tajribada aniqlangan  $K_w$  ning qiymati  $25^\circ S$  da  $K = 1 \cdot 10^{-14}$  ga teng. Toza suvda arzmagan sondagi ionlar mavjud. Erituvchining avtoprotoliz konstantasini

bilish asosning kuchini unga tutash bo‘lgan kislota orqali baholashga imkon beradi.  $K_b$  ning qiymati  $K_a$  bilan quyidagicha bog‘langan.



Bu tenglamadan:

$$K_a \cdot K_b = K_w \quad (6)$$

Bu formulani kislotalik konstantasi  $NH_4^+$  va asoslik konstantalari ifodalarini  $NH_3$  bir-biriga bog‘liqlikdan foydalanib topish mumkin. (6) tenglama  $K_b$  qancha kata bo‘lsa  $K_a$  shuncha kichik bo‘ladi, asos qancha kuchli bo‘lsa unga tutash kislota shuncha kuchsiz bo‘lar ekan. (6) tenglamaning ma’nosi asosning kuchini, unga tutash bo‘lgan kislotaning kislotalik konstantasi orqali baholash mumkin.

Kislotaning molyarligi va kislotalik konstantasi keskin farq qilgani uchun, ularni o‘nli logarifmlar orqali ifodalash juda qulay:

$$pH = -\lg[H_3O^+] \quad pK = -\lg K \quad (7)$$

K uyqorida keltirilgan kislotalardan birining konstantasi. Masalan, 25 °S  $pK_w=14,00$ . Bundan quyidagi kelib chiqadi:

$$pK_a + pK_b = pK_w \quad (8)$$

Shunday ifodalar tutash kislota va asoslarning har qanday erituvchidagi kuchini baholash uchun ishlatish mumkin. Faqat bunda  $pK_w$  orniga har bir erituvchi uchun avoprotoliz konstantasi  $pK_{sol}$  olinishi kerak.

Bryonsted kislotasining kuchi kislotalilik konstantasi va Bryonsted asosligini kuchi asoslik konstantasi orqali ifodalanadi. Asos qanchalik kuchli bo‘lsa unga tutash kislota kuchsiz bo‘ladi.

### **B) kuchlivakuchsizkislotalar**

5.1-jadvalda ko‘p uchraydigan kislotalarning kislotalik konstantasi keltirilgan. Birikma kuchli kislota bo‘lishi uchun kislota asos eritmasidagi muvozanat protonning suv molekulasiga o‘tishi tarafiga silgigan bo‘lishi kerak.

## Kislotalarning kislotalik konstantasi

kislota	HA	A <sup>-</sup>	K <sub>a</sub>	pK <sub>a</sub>
iodid	HI	I <sup>-</sup>	10 <sup>11</sup>	-11
perxlorat	HClO <sub>4</sub>	ClO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	10 <sup>10</sup>	-10
bromid	HBr	Br <sup>-</sup>	10 <sup>9</sup>	-9
xlorid	HCl	Cl <sup>-</sup>	10 <sup>7</sup>	-7
sulfat	H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	10 <sup>2</sup>	-2
gidroksoniy ioni	H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>	H <sub>2</sub> O	1	0,0
xlorat	HClO <sub>3</sub>	ClO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	10 <sup>-1</sup>	1
sulfit	H <sub>2</sub> SO <sub>3</sub>	HSO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	1,5 · 10 <sup>-2</sup>	1,81
gidrosulfat	HSO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	SO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	1,2 · 10 <sup>-2</sup>	1,92
fosfat	H <sub>3</sub> PO <sub>4</sub>	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	7,5 · 10 <sup>-3</sup>	2,12
ftorid	HF	F <sup>-</sup>	3,5 · 10 <sup>-4</sup>	3,45
piridiniy ioni	HC <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N <sup>+</sup>	C <sub>5</sub> H <sub>5</sub> N	5,6 · 10 <sup>-6</sup>	5,25
karbonat	H <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	4,3 · 10 <sup>-7</sup>	6,37
sulfid	H <sub>2</sub> S	HS <sup>-</sup>	9,1 · 10 <sup>-8</sup>	7,04
borat	B(OH) <sub>3</sub>	B(OH) <sub>4</sub> <sup>-</sup>	7,2 · 10 <sup>-10</sup>	9,14
ammoniy ioni	NH <sub>4</sub> <sup>+</sup>	NH <sub>3</sub>	5,6 · 10 <sup>-10</sup>	9,25
sianid	HCN	CN <sup>-</sup>	4,9 · 10 <sup>-10</sup>	9,31
gidrokarbonat ion	HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup>	CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup>	4,8 · 10 <sup>-11</sup>	10,32
gidroarsenat ion	HAsO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	AsO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	3,0 · 10 <sup>-12</sup>	11,53
gidrosulfid ion	HS <sup>-</sup>	S <sup>2-</sup>	1,1 · 10 <sup>-14</sup>	14
gidrofosfat ion	HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	PO <sub>4</sub> <sup>3-</sup>	2,2 · 10 <sup>-13</sup>	12,67
digidrofosfat ion	H <sub>2</sub> PO <sub>4</sub> <sup>-</sup>	HPO <sub>4</sub> <sup>2-</sup>	6,2 · 10 <sup>-8</sup>	7,21

## 5.1. jadval. Kislotalarning kislotalik konstantasi

Shunday qilib birikmada  $pK_a < 0$  ( $K_a > 1$  qiymatga to'g'ri keladi. Agar  $K_a \gg 1$ ) kuchli kislota bo'adi. Bunday kislotalar eritmada to'la protonidan ajralgan bo'ladi. Bunday bo'linish shartli albatta. Masalan, xlorid kislota eritmada gidroksoniy ioni va xlorid ioni bo'ladi. Ayni eritmada HCl molekulari konsentratsiyasi eritmada juda kam bo'ladi. Agar eritmadagi  $pK_a > 0$  (bunda  $K_a < 1$ ) kislota kuchsiz hisoblanadi. Bu eritmada zarrachalar orasidagi kislota asos munosabati ionlashmagan nmolekulalar tarafga qarab surilgan. Vodorod ftorid suvda kuchsiz kislota. U eritmada gidroksoniy ion va ftorid ioni tutadi eritmada ko'plab zarrachalar HF molekulari hisoblanadi.

Kuchli asos amaliy jihatdan suvdagi eritmada to'la protonlashgan bo'ladi. Masalan, O<sup>2-</sup> ioni suvda darhol OH<sup>-</sup> ioniga aylanadi. Kuchsiz asos qisman

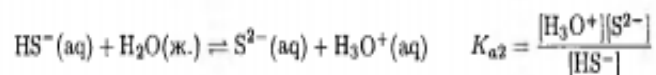
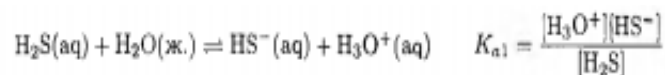
protonlashgan bo‘ladi. Masalan, ammiak eritmada tola  $\text{NH}_3$  molekulari holatida bo‘ladi va juda kam  $\text{NH}_4^+$  ionlari saqlaydi.

Kuchli kislota bilan tutash bo‘lgan asoslar kuchsiz asos bo‘lib, uning uchun proton biriktirish termodinamik jihatdan va’qul emas.

Kislota yoki asosning kuchli yoki kuchsiz bo‘lishi uning kislotalik konstantasiga bog‘liq. Tutash kislota va asoslarning kuchi orasida teskari bog‘liklik mavjud.

### в) Ko‘p kislotali asoslar

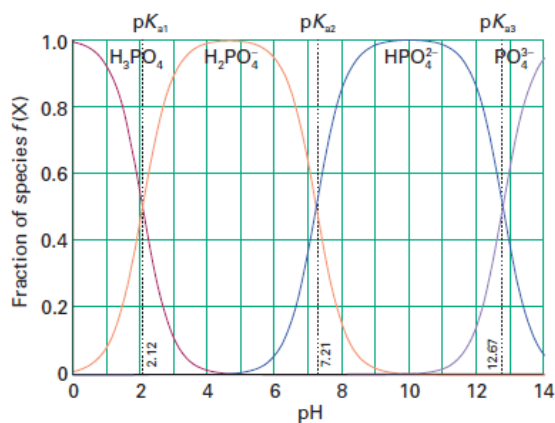
O‘zidan bittadan ortiq proton beradigan kislotalarni ko‘p asosli kislotalar deyiladi. Misol sifatidako‘p asosli kislota sifatida  $\text{H}_2\text{S}$  olinishi mumkin. Bu kislota ikkita proton beradi va uning uchun



5.1-jadvalga ko‘ra  $K_{a1} = 9,1 \cdot 10^{-8}$  ( $\text{p}K_{a1} = 7,04$ ) va  $K_{a2} = 10^{-14}$  ( $\text{p}K_{a2} = 14$ ). Odatda ikkinchi dissotsilanish konstantasi  $K_{a2}$  doim  $K_{a1}$  dan kichik boladi ( $\text{p}K_{a2}$  bo‘lsa  $\text{p}K_{a1}$  dan katta). Keyingi bosqichda + (musbat) zaryadlangan protonni chiqarish anchagina elektrostatik ish bajarishga tog‘ri keladi.

Ko‘p asosli kislota asos eritmasidagi konsentrasiyasini belgilashda taqsimlanish diagrammasi aniq ko‘rsatadi. Bu diagrammada X turdagi zarrachalar bilan ularning turi va pH hamda ularning qismlari orasidagi bog‘lanishni grafigi chiziladi. uch asosli kislota  $\text{H}_3\text{PO}_4$  uchta proton ajratganda turli ionlar :  $\text{H}_2\text{PO}_4^-$ ,  $\text{HPO}_4^{2-}$  va  $\text{PO}_4^{3-}$  hosil bo‘ladi. Bu ionlarni pH funksiyasi deb qaralsa (5.1 rasm).  $\text{H}_3\text{PO}_4$  molekularining qismi quyidgicha topiladi:

$$\alpha(\text{H}_3\text{PO}_4) = \frac{[\text{H}_3\text{PO}_4]}{[\text{H}_3\text{PO}_4] + [\text{H}_2\text{PO}_4^-] + [\text{HPO}_4^{2-}] + [\text{PO}_4^{3-}]}$$



5.1-rasm. Ortofosfat kislota eritmasida hosil bo'ladigan turli zarrachalarning taqsimlanish diagrammasi (eritma tarkibi pH funksiyasi sifatida)

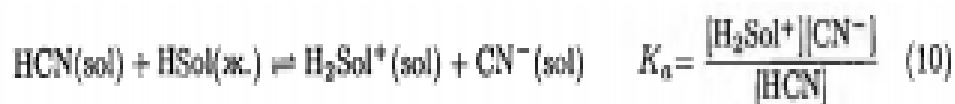
pH va a orasidagi bog'lanish o'zgarishi har bir kislotaning va u bilan tutash asosning pH qo'shadigan hissasini ko'rsatib beradi. Diagramma shuningdek qaysi pH qiymatida u yoki bu zarrachalar ta'siri ustunligi to'g'risida ma'lumot beradi. Masalan,  $\text{pH} > \text{pK}_{a3}$  tengsizlik gidroksil ionlarining eng kichik konsentratsiyasini ko'rsatadi, bunda  $\text{PO}_4^{3-}$  to'la protonlar ajratgan holatda mavjud bo'ladi. Oraliq holatlardagi zarrachalar mos pKa qiymatiga kora joylashgan bo'ladi.

Ko'p asosli kislota o'z protonlarini ketma-ket ajratadi, har bir proton ajratish jarayoni qiyinroq amalga oshadi; eritmada mavjud zarrachalarning konsentratsiyasining pH ga bog'liqligini diagramma ko'rsatib beradi.

#### 4.2. Erituvchining ta'sir effekti

Kislota (yoki asosning) kuchi qanday bo'lishi kerakligi ayni erituvchining avtoprotolitik konstantasi qiymati bilan belgilanadi. Har qanday suvdan ko'ra kuchli kislota suvga proton berib  $\text{H}_3\text{O}^+$  hosil qiladi.  $\text{H}_3\text{O}^+$  dan boshqa kislota suvda protonlangan holda qolishi mumkin emas.

Kislotalar uchun ta'sir effekti pKa orqali ifodalash mumkin. HCN uchun, agar u HSol erituvchida erigan bo'lsa va  $\text{pK}_a < 0$ , bo'lganda ayni HSol erituvchidagi kislotalik konstantasi:

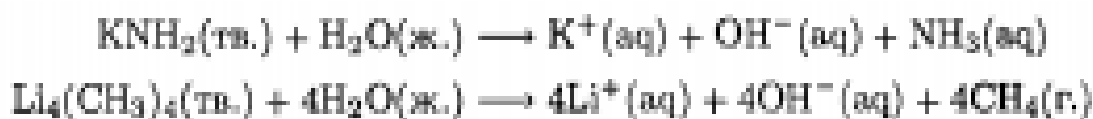




Butenglamagako‘ra  $pK_a < 0$  barchakislotalaruchunHSolerituvchida ( $K_a > 1$ ) kislotalikni  $H_2Sol^+$  ko‘rsatadi.

Anologik holat asoslarning suvdagi eritmasida amalga oshadi. Har qanday asos, u qancha kuchli bo‘lsa, suv molekulasini tortib olish uchun har bir asos molekulasiga  $OH^-$  ionini hosil qiladi. Demak,  $OH^-$  eng kuchli asos ekan.

Ana shu holat tufayli  $NH_2^-$  va  $CH_3^-$  ionlarini suvda eritib amid va metilidlar hosil qilishini o‘rganish mumkin emas, chunki ikkala ion ham suvda tola protonlanib  $NH_3$  va  $CH_4$  ga aylanib  $OH^-$  ionini hosil qiladi:



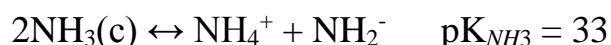
Erituvchieffektinira’sirasoslaruchun  $pK_b$  orqaliifodalashmumkin, agarHSoldaeriganasoskuchlibo‘lsa  $pK_b < 0$ , erituvchiHSoldaeriganasosning  $pK_b$  qiymati:



Demak, barcha  $pK_b < 0$  asoslar ( $K_b > 1$  bo‘ladi) HSol erituvchida ionlar holida  $Sol^-$  mavjud bo‘ladi.

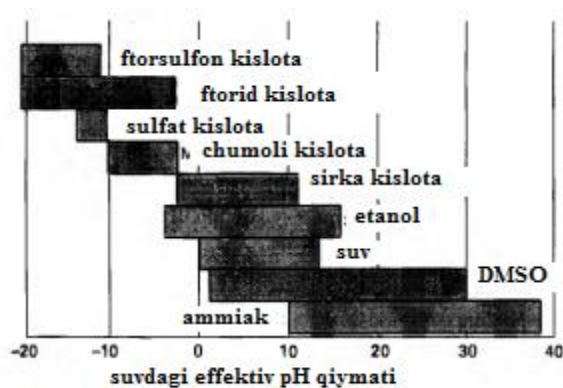
Erituvchi HSol erigan kislota va asoslar ta’sir effektiga ega emas, agar kislotalik konstantasi qiymati  $pK_a = 0$  va  $pK_{sol}$  orasidagi qiymatga ega bo‘lsa. Har qanday kislota erituvhida ta’sir effektiga ega, agar ayni erituvchi HSol da  $pK_a < 0$ , bo‘lsa erituvchi ta’sir effektiga ega bo‘ladi. Har qanday asos erituvchida ta’sir effektiga ega agar  $pK_a > pK_{sol}$  holat uchun. Suvuchun  $pK_w = 14$ .

Suyqammiakuchunavtoprotolizmuvozanati quyidagicha:



Sol ayni holatda suyq ammiak eritmasini anglatadi. Qiymatlar kislota va asoslarning ammiak eritmasida suvga nisbatan kam farqlanishini ko‘rsatadi. Kislota va asoslarning kuchi diapazoni qiymatlari 5.2-rasmda keltirilgan.

Bu qiymatlar dimetilsulfoksidda ( $DMSO, (CH_3)_2SO$ ) ancha keng va  $pK_{DMSO} = 37$



Rasm 5.2. Har xil erituvchilardagi kislota va asoslarning kuchlari diapazoni. Diapazon kengligi erituvchining avtoprotoliz doimiyligiga (pK sol) proporsional

DMSO kislotalarning keng spektrida o'rgansa bo'ladi ( $H_2SO_4$  dan  $PH_3$  gacha).

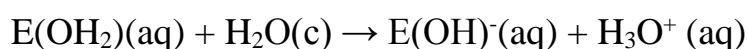
Bularni ichida suv eng kichik diapazonga ega erituvchi hisoblanadi. Buni sababi suvning dielektrik doimiyligi yuqoriligi hisoblanadi (81), shuning uchun suvda  $H_3O^+$  va  $OH^-$  oson hosil bo'ladi.

Avtoprotoliz konstantasi yuqori bo'lgan erituvchini kislota va asoslarning kuchi bo'yicha farqlashda foydalanish qulay hisoblanadi.

## BRYONSTED KISLOTALIGINING O'ZGARISH QONUNLARI

Bryonstedning kislota va asoslari suvli eritmalarda ko'rib chiqiladi. Eng keng tarqalgan kislotalar sinfi molekulada markaziy atom bilan bog'langan  $OH^-$  guruhdan proton ajratadigan moddalardir. Bunday proton kislota molekulasida mavjud bo'lib, qolgan barcha protonlardan farq qilishi uchun nordon proton ham deyiladi. (masalan  $CH_3COOH$  molekulasidagi metil guruhining protonlari). Uch xil turdagi kislotalar qatorini ajratish mumkin:

1. Markaziy iondagi metallga koordinatsiyalangan suv molekulasida tarkibidagi proton nordon proton deb yuritiladi:

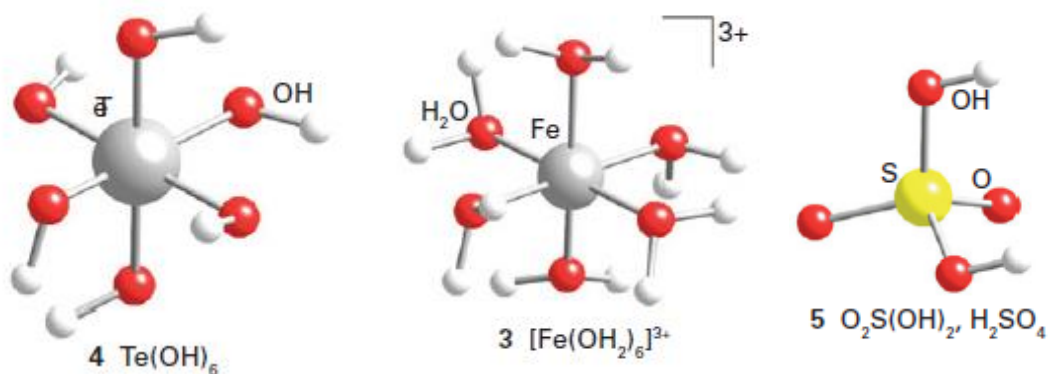


masalan:



(3) sxemada akvakislota hisoblangan geksaaqvatemir(III) ioning strukturasi ko'rsatilgan.

2. Hidroksokislotalar, nordon proton gidroksil guruhga tegishli bo'lib, molekulada =O guruh mavjud emas. Shunday kislotaga minerallar hosil bo'lishida muhim ahamiyatga ega bo'lgan  $\text{Si}(\text{OH})_4$  (4) ni olish mumkin.

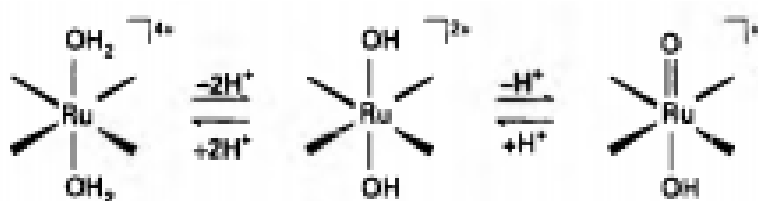


3. Oksokislotalar, ularning molekulasida oksoguruh mavjud, ayni paytda gidroksil guruhi ham shu atom bilan bog'langan. Masalan, sulfat kislotasi  $\text{H}_2\text{SO}_4$  (4) va  $(\text{O}_2\text{S}(\text{OH})_2)$  (5).

Uchala oksikislotalarni ham akvakislotalarning ketma-ket protonajratishidan jarayon amalga oshadi deyish mumkin:



Bu holatlarni amalga oshishiga misol qilib Ru(IV) oraliq oksidlanish darajasiga ega bo'lgan d-metallar akvaionlarini ketma-ket hosil bo'lishini misol qilib olish mumkin:



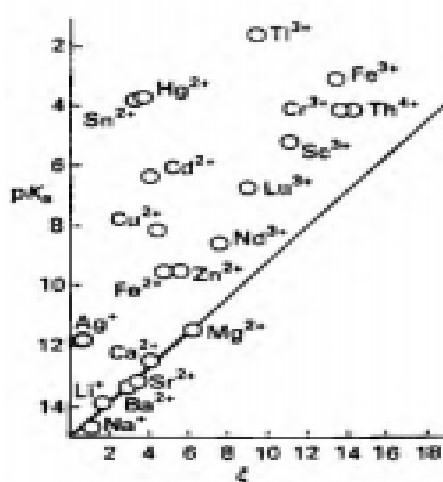
Akvakislotalar markaziy atomi s- va d- elementlar va davriy jadvalning chap tarafida joylashgan p- bloki elementlari uchun xos hisoblanadi.

Oksokislotalar uyqoti oksidlanish darajasiga ega elementlar orasida ko‘proq uchraydi. p-blok elementlar uchun oraliq oksidlanish darajasida ham oksikislotalar hosil qiladi (masalan  $\text{HClO}_2$ ).

Akvakislotalar, gidroksokislotalar va oksikislotalar davriy jadvalning turli qismlarida joylashgan elementlar uchun uchraydi.

### 4.3. Akvakislotalarning kuchi o‘zgarishi qonuniyatlari

Akvakislotalarning kuchi, qoidaga ko‘ra markaziy atomning oksidlanish darajasi ortishi va ayni ionning radiusi kamayishi bilan ortadi. Bu holatni ion modeli nuqtai nazardan tushuntirish mumkin, bunda zaryadi  $z$  metall ioni ion esa sferik deb qaraladi.  $r_+$  ion radiusiga ega va suvning diametri  $d$  bo‘lsa  $pK_a$  gaz fazada bir nuqtadan elektronni chiqarish uchun kerak bo‘ladigan ishga proporsional bo‘ladi. Proton yonida kationlar borligi va ularning zaryadi katta hamda ion radiusi kichikligi va uni yoqotish osonligi tufayli ion model asosida  $z$  ortishi va  $r_+$  kamayishi bilan kislotalik ortadi. Elektrostatik paramtrning o‘zgarishi  $\xi = z^2 / (r_+ + d)$  kislotalikka mos keladi. Ushbu modeldagi gazlar uchun ishlab chiqilgan qonuniyatlar solvatsiya bir xil bo‘lganida eritmalarga ham qo‘llanilishi mumkin.



5.3-rasm. Elektrostatik parametr  $\xi$  bilan akvaionlarning kislotalik konstantasi orasidagi bog‘lqligi. Kichik zaryadli qattiq ionlar uchunchiziqli boglanish kuzatilib qolgan ionlar ancha kuchli kislotalikni namoyish etadi.

Kislotalarning ion kuchini baholashda ion model to'g'riligini 5.3-rasmdan baholash mumkin. Ion birikmalar hosil qiladigan (bular odatda s-elementlar) ion model pKa bilan elektrostatik parametri mos kelgan. Ba'zi d-elementlarda ( $\text{Fe}^{2+}$  va  $\text{Cr}^{3+}$ ) 5.3-rasmdagi to'g'ri chiziqqa yaqin boradi. Lekin ko'pchilik ionlar (kislotalar kuchi katta bo'lib ularda pKa qiymati kichik) to'g'ri chiziqdan ancha chetlanadi.

Bu shuni ko'rsatadiki, metal ionlari ion model ko'zda tutganidan protonni kuchliroq itaradi. Kationning + zaryadi markaziy ion bilan to'la lokallashmagan, lekin ligandlar bilan qisman lokallashgan va kation nordon protonga yaqinroq joylashgan.

Delokalizasiya tufayli M-O bog' qisman kovalent xarakterga ega. To'g'ri chiziqdan ko'proq chetlanish kovalent bog' hosil qiladigan ionlarda kuzatiladi. Oraliq metallarda d- elementlar oxiridan va p- metallarda ( $\text{Cu}^{2+}$  va  $\text{Sn}^{2+}$ ) akva kislotalarning kuchi ion model ko'zda tutilganidan kora kuchliroqdir. Bu zarrachalar uchun ion model ishlamaydi, lekin kovalent bog' ancha moyilroq. Metall va kislorodning orbitallarini qoplanishi chapdan o'ngga qarab ortadi. Guruhlarda bo'lsa pastga qarab ortadi, shuning uchun og'ir d- elementlar ionlariga o'tganda akvakislotalarning kuchi ortadi.

Akvakislotalarning kuchi metall ionining musbat zaryadi ortishi va ion radiusi kamayishi bilan ortadi. Bu holatdan chetlanish, qoidaga ko'ra, kovalent bog'ning hissasi ortgan holatlarda kuzatiladi.

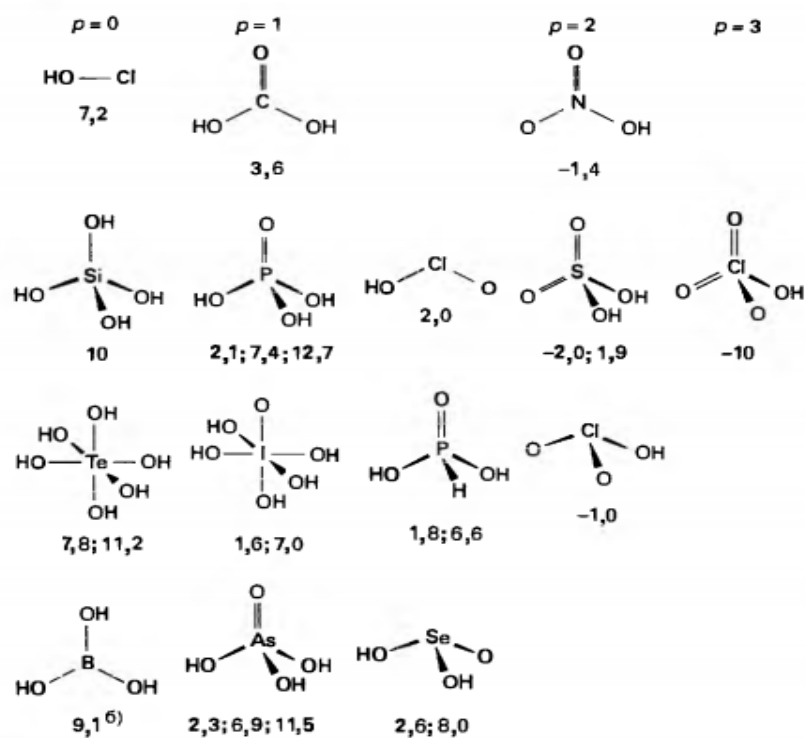
#### **4.4. Oddiy oksokislotalar**

Monoydroli oddiy oksokislotalar o'z tarkibida faqat bitta element tutadi. Bularga  $\text{H}_2\text{CO}_3$ ,  $\text{HNO}_3$ ,  $\text{H}_3\text{PO}_4$  va  $\text{H}_2\text{SO}_4$  kiradi. Ular davriy jadvaldagi yuqori o'ngda turgan elektromanfiy va uyqori oksidlanish darajasiga ega elementlardan hosil bo'lgan (5.2-jadval). Jadvaldan ko'rinib turibdiki,  $\text{B}(\text{OH})_3$ ,  $\text{H}_2\text{CO}_3$  va  $\text{HNO}_3$  molekulari yassi tuzilishga ega, ayni paytda ularning keying davrdagi analoglari boshqacha tuzilishni namoyon etadi.

2 davr elementlari uchun  $\pi$ -bog‘ hosil qilish o‘ziga xos xususiyat, shuq uchun molekullarga tekis holat afzalroq.

5.2 -jadval

Oksokislotalarning strukturasi va pKa qiymati.



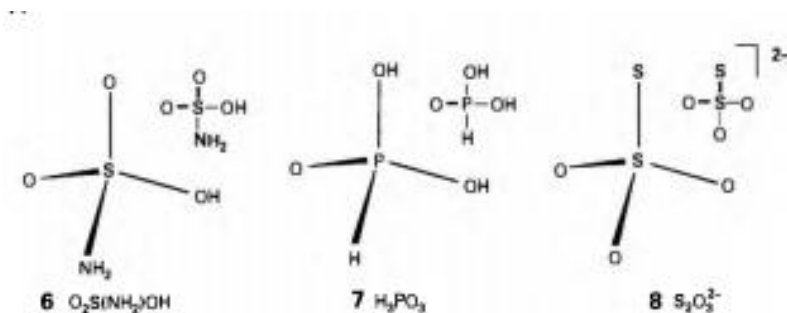
p- vodorod bilan bog‘lanmagan kislorod atomlarining soni.

a) almashingan oksikislotalar

Bunday kislotalar oksokislotalar qatoridagi bir yoki bir necha OH - guruhni boshqa o‘rinbosarlarga almashtirib olinadi. Ularning ichida fatorsulfon kislota  $O_2SFOH$  va aminosulfon kislota  $O_2S(NH_2)OH$  (6) olish mumkin.

Ftor eng elektromanfiy element bo‘lgani uchun u oltingugurt atomidan elektronlarni tortadi va uni musbat zaryadini ortishiga sababchi bo‘ladi. Natijada almashingan kislota  $O_2S(OH)_2$  nisbatan kuchli bo‘lib qoladi. Triftoformetansulfon kislota  $CF_3SO_3H$  tarkibidagi  $CF_3$  elektronakseptor o‘rinbosar hisoblanadi (yoki  $O_2S(CF_3)(OH)$ ). Agar elektron juftga ega  $NH_2$  olsa, teskarisi  $\pi$ -bog‘ hosil

bo'lishi tufayli elektron bulut oltingugurt atomiga qarab surulishi mumkin. Bu holatda kislota kuchi kamayib, markaziy atomning musbat zaryadi kamayadi.



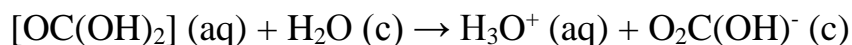
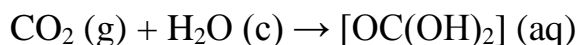
Hamma oksid kislotalarda ham markaziy atom kislorod va gidroksil guruh bilan o'ralgan dastlabki struktura modeli saqlanavermaydi. Ba'zan markaziy atom vodorod bilan boglangan, misol uchun, fosfit kislota, u ikki asosli kislota bo'lib, proton nordon emas (P-H bog'idagi).  $\text{OPH}(\text{OH})_2$  formula YAMR va tebranma spektroskopiya usullarida tasdiqlangan. Ba'zan oksoguruhda ham o'zgarishlar ro'y beradi. Bunga yaqqol misol tiosulfat ion  $\text{S}_2\text{O}_3^{2-}$  (8) markaziy ionda kislorod o'rniga oltingugurt atomi kirgan.

Elektroakseptor o'rinbosar kuchiga qarab oksid kislotalarning kuchi o'zgarishi mumkin, agar oksid kislota dagi markaziy atom bilan to'g'ridan to'g'ri vodorod birikkan bo'lsa u kislotalik xossalarni namoyon etmaydi.

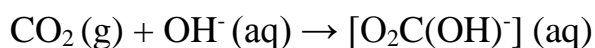
#### 4.5. Suvsiz oksidlar

##### a) Kislotali va asosli oksidlar

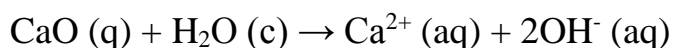
Kislotali oksid deb shunday oksidga aytiladiki, u suvda eriganda suvni biriktirib protonini erituvchiga beradi:



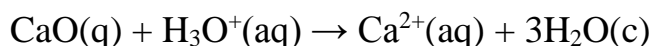
Kislotali oksid- bu shunday oksidki, asosning suvdagi eritmasi bilan ta'sir etadi (ishqor bilan):



Asosli oksid bo'lsa suvda eriganida proton biriktiradi



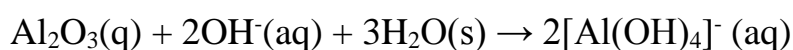
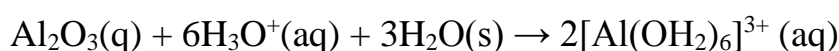
Boshqachasiga asosli oksid kislota bilan ta'sir etadigan oksiddir:



Metallar odatda asosli oksid hosil qiladi va metallmaslar kislotali oksidlar hosil qiladi.

### 6) Amfoterlik

Amfoter oksidlar kislotalar bilan ham va ham ishqorlar bilan ta'sir etadi (grekchasiga bu «ikkala» ma'nonin beradi. Aluyminiy oksid kislota bilan ham asos bilan ham ta'sir etadi:



Amfoterlik yengil 2 guruh elementlarida va 13(III) guruh elementlarida kuzatiladi ( $\text{BeO}$ ,  $\text{Al}_2\text{O}_3$  va  $\text{Ga}_2\text{O}_3$ ). Shuningdek d- guruh elementlarida ham uyqori oksidlanish darajasida ( $\text{TiO}_2$  va  $\text{V}_2\text{O}_5$ ) va ba'zi bir 14/IV va 15/V ( $\text{SnO}_2$  va  $\text{Sb}_2\text{O}_5$ ) kabi oksidlar ham amfoter hisoblanadi.

### LYUIS BO'YICHA KISLOTALIK

Bryonsted-Lourining kislota-asos nazariyasida asosiy e'tibor zarrachalar orasida proton ko'chishiga qaratilgan. Ushbu qarash juda umumiy bo'lsa ham zarrachalar orasida proton ko'chishi sorir bo'lmaydigan reaksiyalarni tushuntira olmaydi. Bryonsted-Louri nazariyasi taklif etilgan 1923 yildayoq, nazariyaning bu kamchiligi G.N.Lyuis tomonidan ishlab chiqilgan va umumiy kislotalik nazariyasi deb uyritiladi. Lyuisning qarashlari faqat 1930 yilga kelibgina ommalashdi.

Lyuis bo'yicha kislota- elektron juftning akseptoridir. Lyuis bo'yicha asos elektron huftning donoridir. Lyuis kislotasi A harfi bilan, Lyuis asosi bo'lsa :B harfi bilan belgilanadi, zarrachalardagi erkin(bog'lanmagan elektronlar) ko'rsatilmaydi. Kislota va asos orasidagi ozaro ta'sir kompleks hosil bo'lishi bilan amalga oshib A-B bilan umumiy elektronlar (A:B) vositasida bog'lanib qoladi.

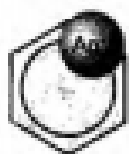


#### 4.6. Lyuisning kislota va asoslariga misollar

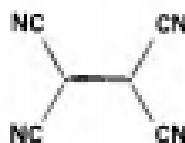
Lyuis bo'yicha proton kislota hisoblanadi, chunki u elektron jufti bor modda, masalan ammiakka birikishi  $\text{NH}_3$  dan  $\text{NH}_4^+$  hosil qilishi mumkin. Bundan har qanday protonlar manba'si Bryonsted bo'yicha kislota va u Lyuis bo'yicha kislota xossasiga ega. Barcha Bryonstad bo'yicha asos hisoblangan moddalar bir paytni o'zida Lyuis bo'yicha ham asoslardir, chunki protonlar akseptori ayni paytda elektronlar donori hisoblanadi, masalan Lyuis bo'yicha asos va Bryonsted bo'yicha ham asosdir. Lekin, Lyuis bo'yicha kislotalar va asoslar anchagina kengroq sinf birikmalari kiradi, Lyuis boyixcha protonng mavjud bo'lishi eng asosiy narsa emas. Lyuis bo'yicha kislotalik va asoslikni belgilashda quyidagilarga e'tibor berish kerak:

1. Koordinatsion birikmalarda metal ioni asos tomonidan berilgan elektron juftni bog'lashi mumkin. Bunga misol,  $\text{H}_2\text{O}$  molekularini erkin elektronlarini qabul qilibgidratlangan  $\text{Co}^{2+}$  ionini olish mumkin  $[\text{Co}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$ . Shunday qilib kationlar Lyuis kislotalaridir. Kumush ioni  $\text{Ag}^+$  benzol bilan hosil qilgan kompleksda kation (kislota) asosning  $\pi$ -elektronlari bilan ta'sir etib olinadigan moddaga alohida e'tibor berish kerak (19).

2. To'la bo'lmagan oktet elektronlarga ega molekular elektron juft qabul qilish hisobiga elektronlarni to'ldirish mumkin. Lyuisning kislota va asoslari muvozanatdagi jarayonlarni muhokama qilishda ishlatiladi. Reaksiya tezligini baholashda elektron juft nukleofil, elektronlar akseptori elektrofil deyiladi. Shuni ta'kidlash kerakki, Bryonsted klotasi HA kompleks hisoblanib, u Lyuis kislotasi  $\text{H}^+$  va Lyuis asosi  $\text{A}^-$  ta'siridan hosil bo'lgan. Shuning uchun ham Bryonsted kislotasi Lyuisning kislotalik xossasini korsatadi, lekin Lyuis kislotasi bo'laolmaydi.

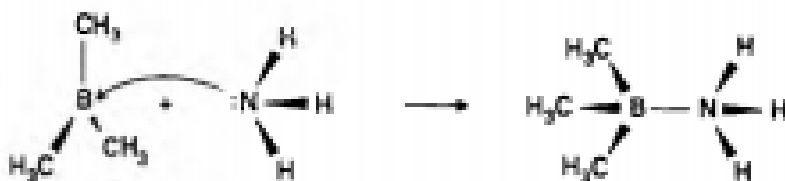


19  $[\text{C}_6\text{H}_6\text{Ag}]^+$



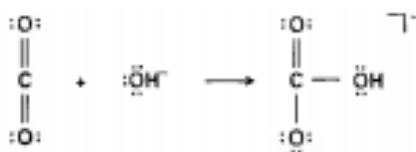
20 Тетрацианоген

Misol,  $B(CH_3)_3$ ,  $NH_3$  va boshqa donorlar danerkin elektron juftlarni qabul qilishi mumkin:

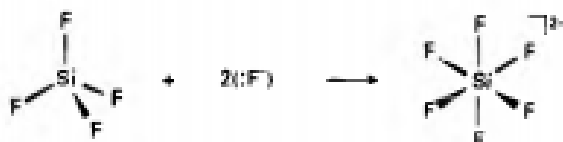


Demak,  $B(CH_3)_3$  - Lyuisning kislota hisoblanadi.

3. To'la oktetli elektronlarga ega molekula va ion uchun valent elektronlarning qayta tuzulishi amalga oshishi mumkin. Misol, uchun  $HCO_3^-$  hosil bo'lishida  $CO_2$  molekulasini  $OH^-$  ionidan elektron juft qabul qilib Lyuis kislota vazifasini bajaradi:



Molekula yoki ion o'zining valent electron qavatchalarini kengaytirib, yana bir juft electron qabul qilishi mumkin. Bunga misol  $SiF_4$  (kislota) o'ziga  $F^-$  (Lyuis kislota) ionini biriktirib  $[SiF_6]^{2-}$  gaaylanadi.



Bunday kislotalik og'ir p-elementlar galogenidlari uchun xarakterlidir, masalan,  $SiX_4$ ,  $AsX_3$  va  $PX_5$  (bu yerda X- galogen).

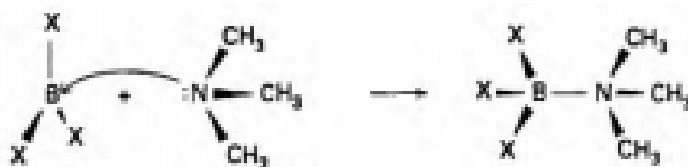
5. Elektron qavati to'lgan molekullarda ekelektron juft bo'shashtiruvchi electron orbitallarga elektron juft joylanishi amalga oshishi mumkin.

Misol sifatida tetrasianoetenni olish mumkin (20) u bo'shashtiruvchi  $\pi$ -orbitallarga elektron qabul qilib kislota vazifasini bajaradi.

Lyuis kislotalari elektronlar akseptori Lyuis asoslari elektronlar akseptori hisoblanadi.

#### 4.7. Bor va uglerod guruhi elementlari kislotalari

Yassi molekular  $BX_3$  va  $AlX_3$  tugallanmagan oktet va vakant p-orbitallarga ega, ular molekulaning tekisligiga perpendikulyar joylashgan(21) hamda Lyuis asosining erkin juftini qabul qilishi:



Kompleks hosil qilgan kislota pyramidal shaklga ega boladi va B-X bog'ini o'z yangi qo'shnilaridan qochadi.

##### a) Bor galogenidlari

Komplekslarning termodinamik barqarorligi:  $N(CH_3)_3$  dan  $BX_3$  tarafga qarab quyidagicha o'zgaradi:  $BF_3 < BCl_3 < BBr_3$ . Elektromanfiylik ortib borishiga bu qator teskariga bog'langan. Eng kuchli bog'  $BF_3$  da bo'lishi kerak edi, chunki F atomi B ning + zaryadini oshirishi kerak edi.  $BX_3$  molekulasidagi galogen atomlari 2p orbital hisobiga  $\pi$ -bog' hosil qilishi mumkin, bu bog'ni buzilsa, akseptorning orbitalidan qutulish mumkin bo'ladi. Kichik fluor atomi 2p orbital hisobiga mustahkam  $\pi$ -bog' hosil qiladi:

<b>21</b>	<b>22</b>	<b>23</b>

Borning trifloridi sanoatda katalizator sifatida ishlatiladi. Uning roli uglerod atomi bilan bog'langanasosni tortib olish uchun karb kationni yuzaga keltirishdir:



Bor triflorid gaz modda, shuning uchun uni dietilefirdagi eritmasi ishlatiladi. Erish jarayoni ham Lyuisning kislotalik xossasini bir ko‘rinishidir, chunki erishda kislorod va erituvchi atomi bilan kompleks hosil qiladi.

Lyuis kislotaligi borning trigalogenidlari qatorida shu qatorda ortib boradi:

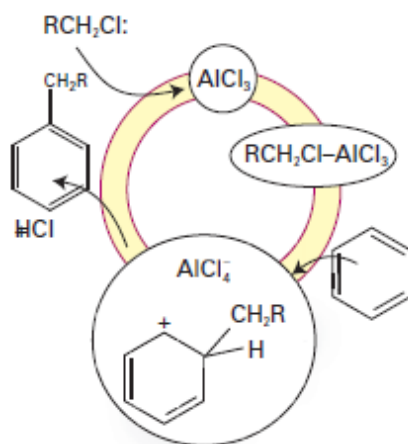


### 6) Aluiminiyning galogenidlari

Gaz fazasida aluiminiy galogenidlari dimer holatda bo‘ladi va quyidagi molekulyar formulaga ega  $Al_2Cl_6$  (23). Har bir aluiminiy atomi Cl atomiga nisbatan kislota rolini bajaradi.

Aluiminiy xlorod organik reaksiyalarda Lyuis kislotasi sifatida katalizator bo‘ladi. Klassik misol, Fredel-Krafts alkillash ( $R^+$  aromatik halqaga birikishi) va asillash reaksiyalari ( $RCO^+$  birikishi) keltirish mumkin. Katalitik sikl 5.9-rasmda keltirilgan

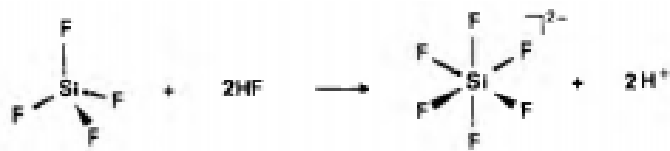
Aluiminiy galogenidlari gaz fazada dimer bo‘lib, ularning eritmalari katalizator sifatida ishlatiladi.



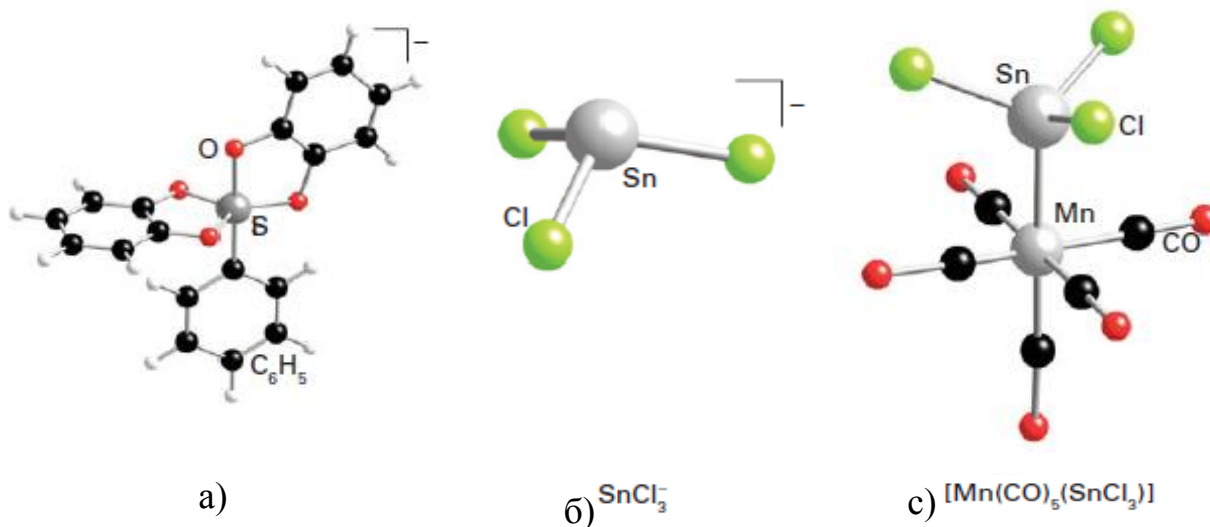
5.9-rasm. Fridel-Krafts alkillash reaksiyalarida katalitik halqada aluiminiy xloridni rolini ko‘rsatadigan sxema.

### 8) kremniy va qalay kislotalari

Ugleroddan farq qilib kremniy atomi o‘zining valent elektronlarini kengaytirishi (u anchagina kata o‘lchamga ega bo‘la oladi) va gipervalent holatga o‘tadi:



Shunaqa holatlar kremniyning reaksiyalarida ham kuzatiladi. Proton ishtirokida Lyuis asosi  $\text{F}^- \text{O}^{2-}$  ni Si dan ajratib olgani uchun plavik kislota shishani eya oladi ( $\text{SiO}_2$ ).  $\text{SiX}_4$  kislota xossasini o'zgarish qonuniyati quyidagicha:  $\text{SiH}_4 < \text{SiBr}_4 < \text{SiCl}_4 < \text{SiF}_4$ . Bu erda I dan F ga qarab galogenning elektron tortish xususiyati ortib boradi. Bu qonuniyat  $\text{BX}_3$  birikmalaridagi holatni teskarisidir. Si atomining koordinasion soni 4 va 6 bo'lishi mumkin, masalan  $[\text{SiF}_6]^{2-}$  ionida. Ba'zan u trigonal bipiramida koordinatsion son 5 hosil qiladi (5.9-rasm. a).



5.9-rasm. Komplekslarning tuzilishi

Qalay (II) xlorid Lyuis bo'yicha ham kislota, ham asos bo'lishi mumkin. Kislota sifatida u  $\text{Cl}^-$  ioni bilan ta'sir etadi va kompleks  $[\text{SnCl}_3]^-$  ni hosil qiladi (5.9-rasm. b). Bu kompleksda erkin elektron saqlanadi va uni  $\text{SnCl}_3$  deb yozish to'g'riroq bo'ladi.

$[(\text{CO})_5\text{Mn}-\text{SnCl}_3]$  (5.9-rasm. c) u asos rolini o'ynab metal-metal bog'ini hosil qiladi. Hozirgi paytda metal-metal bog'larini hosil qiladigan birikmalar noorganik kimyoda katta ahamiyatga ega.

Germaniy va kremniy galogenidlari Lyuis kislotalari hisoblanadi. Ular 5 yoki 6 koordinasiyali bo‘ladi. Qalay (II) xloridi Lyuis bo‘yicha ham kislota, ham asosdir.

**Nazorat savollari:**

1. Bronsted kislotasi kuchi qanday ifodalanadi
2. Kuchli va kuchsiz kislota, asos deb nimaga aytiladi
3. Ko‘p asosli kislota deb nimaga aytiladi
4. Oddiy oksikislotalar deb nimaga aytiladi
5. d-elementlarining yuqori oksidlanish larajasidagi oksidlari qanday xossalarni namoyon qiladi
6. Qattiq kislota va asoslar orasidagi ta’sir qanday xarakterga ega
7. Yumshoq kislota va asoslar orasidagi ta’sir qanday xarakterga ega
8. Bor trifloridi sanoatda katalizator sifatida ishlatilish sababini tushuntiring.
9.  $\text{BF}_3$  -  $\text{BCl}_3$  -  $\text{BBr}_3$  qatorda Lyuis kislotalari kislotaliligi qanday o‘zgaradi?

## Glossariy

Термин	Terminology	O‘zbek tilidagi sharhi
Atom	Atom	kimyoviy elementning oddiy va murakkab moddalar molekulasi tarkibiga kiruvchi eng kichik zarracha. Ikkinchi ta’rifi musbat zaryadlangan yadro bilan bitta yoki bir necha elektronlardan tarkib topgan elektroneytral zarracha.
Molekula	Molekule	muayyan moddaning kimyoviy xossalarini o‘zida saqlab qoladigan eng kichik zarracha.
Kimyoviy element	Chemical element	atomlarning har qaysi alohida turi. (yadro zaryadlari teng bo‘lgan – atomlar turi).
Modda	substance	o‘z massasiga ega bo‘lgan va elementar zarrachalardan tashkil topgan materiyaning bir bo‘lagi
Izotop	Isotope	atom massalari bilan farq qiladigan kimyoviy elementning turli xil ko‘rinishi.
Nuklid	nuclide	ayni sondagi proton va neytronlar bilan ifodalangan atomlar turi
Massa defekti	mass defect	yadro massasining yadrodagi protonlar va neytronlar massalarining yig‘indisidan kichiklik farqi
YArim emirilish davri	half-destroyed	atomni yashash davrini tavsiflab, ayni elementning ayni vaqtdagi bor qismini yarmini parchalanishga zarur bo‘lgan vaqt
Termoyadroli reaksiyalar	thermonuclear reaction	atom yadrolaridan murakkabroq yadrolarni hosil bo‘lish reaksiyalari.
$\alpha$ -parchalanish	$\alpha$ - half-	atom yadrolarining radioaktiv

		parchalanishi natijasida $\alpha$ -zarracha ajralib chiqadi. natijada yadroning zaryadi 2 ga, massasi 4 birlikka kamayadi.
$\alpha$ -zarracha	$\alpha$ -particle	geliy Ne atomining yadrosi 4, 2 ta proton va 2 ta neytrondan tashkil topgan.
Atom yoki ion radiusi	The radius of an atom or ion	yadro markazidan atom yoki ionning eng oxirgi elektronini orbital radiusi.
Atom massasi	atomic mass	kimyoviy element atomining atomning massa birligida ifodalangan o'rtacha qiymati.
Atom massa birligi	Atomic mass unit	uglerodning $^{12}_6\text{C}$ izotopi atomning 1/12 qismi
Interferensiya	Interferentsiya	bitta manbadan har xil yo'llar orqali tarqalayotgan to'lqinlarning o'zaro ta'sirlashuvi tebranish fazalari o'zaro mos bo'lgan joylarda bu ikki to'lqin bir-birini kuchaytiradi-amplitudalar qo'shiladi.
Ionlanish energiyasi	the ionization energy	qo'zg'algan holatdagi atomdan elektronni chiqarish uchun zarur bo'lgan eng kichik energiya.
Kvant	quantum	Elektromagnit yoki boshqa xil qandaydir maydon energiyasini bo'lagi, tashkiliy qismi, birligidir.
Kvant sonlari	quantum numbers	Mikrozarrachalarning holatini yoki ularning xossalari-momenti, zaryadi va boshqalarni xarakterlaydi, belgilaydi
To'lqin funksiyasi	wave function	kvant mexanikada eng asosiy kattalik bo'lib, u sistemaning holatini ifodalaydi va fizikaning kattaliklarning eng ehtimol



		va o'rtacha qiymatlarini topishga imkon beradi.
Elektron bulutlari	electronic clouds	shu erda elektronni bo'lish ehtimolligini aniqlaydi
Elektronga moyillik	electron trends	neytral atomga elektron birikib, uni manfiy zaryadlangan ionga aylanishidagi energetik effekt.
Elektromanfiylik	Elektromanfiylik	ayni elementning atomini birikmalarda boshqa element atomiga nisbatan elektron zichlikni o'zi tomon tortish xususiyati.
Kimyoviy bog'lanish	chemical link	bog'lanuvchi zarrachalarning elektron bulutlarini qoplanishi va sistemaning to'la energiyasini kamayishi bilan boradigan jarayon
Kimyoviy bog'ning tavsiflari	The chemical characteristics of the garden	kimyoviy bog'lanish energiyasi va geometrik parametrlari
Bog'ning geometrik parametrlari	Geometric parameters of the garden	kimyoviy bog'ning uzunligi, molekuladagi bog'lanish burchagi.
Bog'ning energiyasi	binding energy	bog'ni alohida atomlardan hosil qilinganida yutilgan energiya miqdori bilan yoki bog'ni uzish uchun sarf qilingan ish miqdori bilan aniqlanadi.
Bog'ning uzunligi	bond length	molekuladagi atomlar yadrolari markazlari orasidagi masofa.
Gipervalentlik	hypervalent	birgina atom atrofida bo'lsa ham. sakkiztadan ko'p elektron bo'lishini talab

		etadigan zarrachalar gipervalent zarrachalar deb ataladi
Effektiv zaryad	effective charge	atomning manfiy zaryadlari va yadroning musbat zaryadlarining algebraik yig'indisi.
Kovalent bog'lanish	covalent bonds	elektron juftlar hisobiga hosil bo'lgan kimyoviy bog'lanish.
Qutbsiz yoki gomeopolyar bog'lanish	Non-covalent and covalent bond	bir xil atomlar orasida hosil bo'lgan kovalent bog'lanish.
Qutbli kovalent bog'lanish	Polar covalent bonds	elektromanfiyliklari o'zaro farq qiladigan elementlarning atomlari orasida sodir bo'lgan kimyoviy bog'lanish
$\delta$ - bog'	$\delta$ -bond	kimyoviy bog' bo'lib, unda atom yadrolarini bog'lovchi chiziq bo'lovchi elektron bulutlarini o'q simmetriyasi hisoblanadi.
$\pi$ - bog'	$\pi$ -bond	bog'lovchi elektron bulutlari faqatgina atom yadrolari orqali o'tuvchi simmetriya tekisligiga ega bo'ladi.
$\psi^+$ -bog'lovchi orbital	$\psi^+$ bonding orbitals	yadrolar orasidagi to'lqin funksiyasi amplitudasining oshishiga sabab bo'luvchi, ishorasi bo'yicha bir xil ikki atom orbitalning interferensiyasidan hosil bo'lgan orbital.
$\psi^-$ - bo'shashtiruvchi orbital	$\psi^-$ antibonding orbital	tugun yuzasi hosil bo'lishiga olib keluvchi turli qiymatli amplitudalarga ega bo'lgan atom orbitallar interferensiyasi natijasidan hosil bo'ladi, bu esa tugun

		yuzalar hosil bo'lishi bilan tasdiqlanadi.
Bog' tartibi	Communication procedure	Bog'lovchi orbitallardagi elektronlar sonidan bo'shashtiruvchi orbitallardagi elektronlar sonini ayirmasi ikkiga bo'lingandagi qiymat (BT). Bu qiymat noldan farqli bo'lsa molekula mavjud bo'ladi.
To'lqin uzunligi	wavelength	to'lqin jarayonining yonma-yon joylashgan cho'qqilar orasidai masofaga aytiladi.
Interferensiya	Interference	bitta manbadan har xil yo'llar orqali tarqalayotgan to'lqinlarning o'zaro ta'sirlashuvi tebranish fazalari o'zaro mos bo'lgan joylarda bu ikki to'lqin bir-birini kuchaytiradi-amplitudalar qo'shiladi.
Atom orbitallarining qoplashishi	overlap of atomic orbitals	yadrolar orasidagi elektron bulutizichligini ortishiga, elektronlar potensial energiyasining kamayishiga va kovalent bog'ini hosil qilishga olib keluvchi , antiparallel spinli elektronlar to'lqin funksiyalarini qo'shilishi
SHredinger tenglamasi	Schrödinger equation	elektronlarning atomlardagi holatining ifodasi, $\Psi$ -to'lqin funksiyasini hisoblashga imkon beruvchi kvant mexanikasining asosiy tenglamasi. Uning kvadrati atom elementidagi elektronning bo'lish ehtimolligini ifodalaydi.
Ayniy orbitallar	degenerate orbitals	bir xil energiyali bir pog'ona orbitallari; masalan, r-orbitallar –uch karra, d-

		orbitallar-besh karra; f- etti karra ayniy orbitallar.
Bog‘lamovchi atom orbital	nonbonding orbital	ikki elektroni bo‘lgan shu sababli almashinish mexanizmi bilan bog‘lanishda ishtirok etmaydigan, lekin donor-akseptor mexanizmi bilan bog‘ hosil qiluvchi orbital.
Bo‘shashtiruvchi orbital	antibonding orbital	tegishli atom orbitallaridan energiyasi yuqori bo‘lgan molekulyar orbital.
Bog‘lamovchi molekulyar orbital	Nonbonding molecular orbital	energiyasi dastlabki atom orbital energiyasiga teng bo‘lgan molekulyar orbital.
Optik aktivlik	optical activity	Moddaning kelayotgan nurni aniq bir qiymatda bura olish qobiliyati
Enantiomer molekulalar	enantiomeric molecules	Enantiomer molekulalar bir-biridan tushayotgan nurning burilish yo‘nalishi bilan farq qiladi
Ko‘zgu – aylanish o‘qi	mirror swivel axis	Molekulani 90° da o‘z aksi bilan aylanishi
Simmetriya elementi	symmetry elements	Aylanish o‘qi, inversiya markazi, oynaviy-aylanish o‘qi va tekislikdagi oyna aksidan iborat
Chiziqli molekulalar	linear molecules	Noodatiy hodisa bo‘lib, molekula o‘z o‘qi atrofida aylanayotgan payti o‘zgarishsiz qoladi.
Molekulani normal tebranishi	the normal vibrations of the molecule	Atomlarning bir – biriga bog‘liq bo‘lmagan kollektiv harakati
Xiral molekula	chiral molecule	Grekl tilida “qo‘l” degan ma’noni

		bildiradi. O'zini oynadagi aksiga mos kelmaydigan molekula
Enantiomer	enantiomer	Grekl tilida "ikki", "ikkita" ma'nosini bildiradi. Xiral molekula va uning oynadagi aksi
Simmetriyalangan chiziqli kombinatsiya (SChK)	a linear combination of symmetric	Atom orbitalinining ma'lum bir simmetriyadagi kombinatsiyasidan quriladigan molekulyar orbital
Molekulyar tebranish	molecular vibrations	Molekula geometriyasining muvozanatdagi kichik davriy xatoligi
Polyar molekula	polar molecule	Doimiy elektrlangan dipol momentiga ega molekula
Anizotropiya	anisotropy	qattiq moddaning fizik xossalarini yo'nalishga bog'liq ravishda turli kattaliklar bilan xarakterlanishidan iborat hodisa.
Bronza	Bronze	Misning turli metallar (qalay, alyuminiy, berilliy, qo'rg'oshin, kadmiy, xrom va b.) bilan qotishmasi.
Kristallik panjara	crystal cell	zarrachalar joylashuvidagi qat'iy takrorlanuvchanlikni namoyon qiluvchi kristallik holat modeli (uzoq tartib).
Metall bog'lanish	metallic bond	toza metallar, qotishmalar va intermetall birikmalarga xos bo'lgan nisbatan erkin elektronlar mavjudligi bilan belgilanadigan kimyoviy bog'lanish.
Elementar katakcha	unit cell	bu kristall fragmenti bo'lib burish va akslantirish operatsiyalaridan

		foydalanilmagan holda, boshqa shunday fragmentlar bilan butun kristallni hosil qiladi.
--	--	--

## MUNDARIJA

<b>1-BOB</b>	<b>ATOM TUZILISHI</b> .....	5
1.1.	Yengil elementlar yadroviy sintezi.....	7
1.2.	Og‘ir elementlar sintezi.....	10
1.3.	Spektroskopik ma’lumot.....	14
1.4.	Kvant mexanikasining asoslari.....	16
1.5.	Atom orbitallari.....	17
1.6.	Kirishish effekti va ekranlashish.....	25
1.7.	Elektronlarning to‘lib borish tartibi.....	29
1.8.	Elementar klassifikatsiyasi.....	32
1.9.	Atomning asosiy xususiyatlari.....	35
<b>2-BOB</b>	<b>MOLEKULYAR TUZILISH VA KIMYOVIY</b>	
	<b>BOG‘LANISH</b> .....	51
2.1.	Oktet qoidasi.....	51
2.2.	Bog‘larning xossalariva tuzilishi.....	56
2.3.	Valent qobig‘i elektron juftining itarilishi modeli.....	57
2.4.	Vodorod molekulasi.....	59
2.5.	Bir xil yadroli ikki atomli molekulalar.....	61
2.6.	Ko‘p atomli molekulalar.....	62
2.7.	Nazariyaga kirish.....	65
2.8.	Gomoyadroli ikki atomli molekulalar.....	68
2.9.	Geteroyadroli ikki atomli molekulalar.....	72
2.10.	Bog‘ hususiyatlari.....	77
2.11.	Molekulyar orbitallarga ko‘ra molekulaning shakli.....	93
2.12.	Bog‘ uzunligi.....	97
2.13.	Bog‘ mustahkamligi.....	98
2.14.	Elektromanfiylik va bog‘ entalpiyalari.....	99
2.15	Oksidlanish darajalari.....	103
<b>3-BOB</b>	<b>ODDIY QATTIQ JISMLAR STRUKTURASI</b> .....	109

3.1.	Elementar yacheykalar va kristall strukturalar.....	110
3.2.	Zich sharsimon joylashishlar.....	113
3.3	Politiplar.....	114
3.4.	Polimorfizm.....	115
3.5.	Metallarning atom radiusi.....	115
3.6.	Qotishmalar.....	116
3.7.	Ion birikmalarning asosiy struktur turlari.....	119
3.8.	Ion bog‘lanishli birikmalarning energetikasi.....	123
3.9.	Panjara entalpiyasining boshqa imkoniyatlari.....	124
3.10.	Kapustinskiy tenglamasi.....	127
3.11.	Ion holatdagi birikmalarning termik barqarorligi.....	128
<b>4-BOB</b>	<b>KISLOTA VA ASOSLAR.....</b>	<b>138</b>
4.1.	Suvdagi kislota asos muvozanati.....	139
4.2.	Erituvchining ta’sir effekti.....	144
4.3.	Akvakislotalarning kuchi o‘zgarishi qonuniyatlari.....	148
4.4.	Oddiy oksokislotalar.....	149
4.5.	Suvsiz oksidlar.....	151
4.6.	Lyuisning kislota va asoslariga misollar.....	153
4.7.	Bor va uglerod guruhi elementlari kislotalari.....	155



### **Asosiy adabiyotlar**

1. D.Shriver, P. Atkins. Inorganic Chemistry. Published in Great Britain by Oxford University Press, New York, 2010.
2. James E.House. Inorganic Chemistry. Elsevier, Illinois Wesleyan University 2013. R 832
3. F.A. Cotton, G. Wilkinson. Advanced inorganic chemistry. John Willey & sons. inc. 1999. R.1368

### **Qo‘shimcha adabiyotlar**

1. Parpiev N.A., Raximov H.R., Muftaxov A.G. Anorganik kimyo (nazariy asoslari). - Toshkent, “O‘zbekiston”, 2000.-479 b.
2. Ахметов Н.С. Общая и неорганическая химия -“Высшая школа”, 2002. - 743 с.
3. Общая и неорганическая химия. В 3 Трех томах, под редакцией Третьякова Ю.Д. Москва: “Академия”, 2008.
4. Угай Я.А.Общая и неорганическая химия.- Москва: “Высшая школа”, 2002. - 527 с.
5. Глинка Н.Л. Общая химия. Москва: “Интеграл - Пресс”, 2006. – 728 с.
6. Коренев Ю.М., Григорев А.Н.,Желиговская Н.Н., Дунаева К.Н.Задачи и вопросы по общей и неорганической химии. Москва: “Мир”, 2004. – 368 с.
7. Глинка Н.Л. Задачи и упражнения по общей химии. Ленинград, “Химия”, 1985.- 263 с.
8. То‘хтаевН.Р., Cho‘lponovК.А., QosimovaМ.В., ZaripovaR.Sh. “Anorganik kimyo” fanidanta'lim texnologiyasi. Toshkent, 2016.

### **Elektron manbalar**

1. [www.nuuz.uz](http://www.nuuz.uz).
2. [www.natlib.uz](http://www.natlib.uz).
3. [www.ziyo.net.uz](http://www.ziyo.net.uz).
4. [www.chemexpress.fatal.ru](http://www.chemexpress.fatal.ru).