ACADEMIC RESEARCH IN EDUCATIONAL SCIENCES VOLUME 2 | ISSUE 7 | 2021
ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

КИМЁВИЙ БОҒЛАНИШГА ЯНГИ ҚАРАШ ВА ЭЛЕКТРОН ОРБИТАЛЛАРНИНГ ТРАНСФОРМАЦИЯ НАЗАРИЯСИ

Р. А. Эшчанов
Чирчиқ давлат педагогика институти профессори
ruzimboy@gmail.com

Ш.Б. Хасанов
Хоразм Маъмун академияси катта илмий ходими
shadlik@mail.ru

М. Р. Ибрагимова
ЎзР ФА умумий ва ноорганик кимё институти катта илмий ходими,
mavluda@gmail.com

АННОТАЦИЯ

Мақолада орбиталлар гибридизацияси ҳақидаги мавжуд назариялар кўриб чиқилган, ушбу назарияларнинг камчиликлари кўрсатилган, электрон орбиталларнинг трансформация назарияси асосида атомларда кимёвий боғлар ҳосил бўлишининг янги механизмлари таклиф қилинади.

Калит сўзлар: электронлар шакли, орбиталь, қўзғалган ҳолат, электронларнинг тортилиши ва итарилиши, электрон орбиталларнинг трансформация назарияси, кимёвий боғ.

КИРИШ

Кимёвий боғ – бу икки ёки бир нечта атомлар, ионлар, молекулалар ёки уларни хоҳлаган комбинациясини биргаликда ушлаб турувчи куч. Ўз табиатига кўра, у манфий зарядланган электронлар ва мусбат зарядланган ядроларнинг тортилишининг электростатик кучи сифатида бўлади. Ушбу тортишиш кучи катталиги, асосан, атомлар ташқи қаватининг электрон конфигурациясига боғлиқ [1].

Атомни кимёвий боғлар ҳосил қилиш қобилияти унинг валентлиги дейилади. Бу тушунча жуда эскирган бўлиб, ҳозирда кимёвий боғни умумий ҳолда эмас, балки аниқ турига боғлаб қараш қабул қилинмоқда. Кимёвий боғ ҳосил бўлишида қатнашувчи электронлар валент электронлар дейилади. Ушбу

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

электронлар атомнинг энг юқори энергияга эга орбиталларида жойлашади. Атомнинг ушбу орбиталларга эга ташқи қавати валент қават дейилади.

Бир ёки турли элементлар атомлари орасида кимёвий боғ ҳосил бўлишини тушунтириш учун ҳозирги кунда валентликнинг электрон назарияси қўлланилади.

Валентликнинг электрон назарияси. Кимёвий боғ табиатининг замонавий тасаввурлари валентликнинг электрон назариясига асосланади. Ушбу назарияни бир-биридан мустақил ҳолда 1016 йилда Г.Н. Льюис ва В. Коссель ишлаб чиққанлар. Валентликнинг электрон назариясига кўра, атомлар боғлар ҳосил қилиб, энг барқарор электрон конфигурацияга (яъни, энг кам энергияга эга) электрон конфигурацияга яқинлашади. Атомлар бу ҳолатга икки хил йўл билан эришишлари мумкин:

1. Улар электронларни бериб ёки қабул қилиб ионларга айланиши мумкин. Агарда атомлар электронларни қабул қилса, улар анионларга айланади. Агарда улар электронларни йўқотса, катионларга айланади. Анион ва катионлар ташқи электрон қаватини тўлдириб, барқарор электрон конфигурацияга эга бўладилар. Анион ва катион орасида кимёвий боғ ҳосил бўлиб, у электростатик тортишиш кучи сифатида бўлади. Ушбу турдаги кимёвий боғ олдин электроновалент боғ дейилган, ҳозирда эса – ион боғ.

2. Атомлар барқарор ташқи электрон конфигурацияга электронларни умумлаштириш орқали ҳам эришишлари мумкин. Бунда ҳосил бўладиган кимёвий боғланиш ковалент боғ дейилади. Ковалент боғ ҳар бир атом берувчи биттадан электронларнинг умумлашиши ҳисобига ҳосил бўлади. Аммо айрим молекулаларда ёки кўп атомли ионларда иккала электрон ҳам бир атом томонидан тақдим қилиниши мумкин. Ковалент боғнинг бундай тури координацион, донор-акцептор ёки датив ковалент боғ дейилади.

АДАБИЁТЛАР ТАҲЛИЛИ ВА МЕТОДОЛОГИЯ

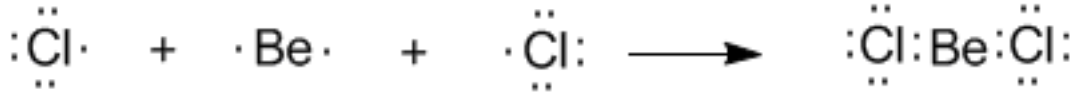
Октет қоидаси. Бирор бир атом электрон олиб, бериб ёки умумлаштириб, кимёвий боғ ҳосил қилганида унинг электрон конфигурацияси шу давр ёки олдинги давр охирида жойлашган нодир газ электрон конфигурацияси билан бир хил бўлиб қолади. Гелийдан ташқари барча нодир газлар электрон конфигурацияси ташқи қаватида октет (саккиз) электронга эга. Шунинг учун нодир газлардаги каби барқарор электрон конфигурацияга эришиб кимёвий боғ ҳосил қилиш октет қоидасининг моҳиятини ташкил қилади. Бу қоида ион ва ковалент боғларга нисбатан қўлланилиши мумкин.

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

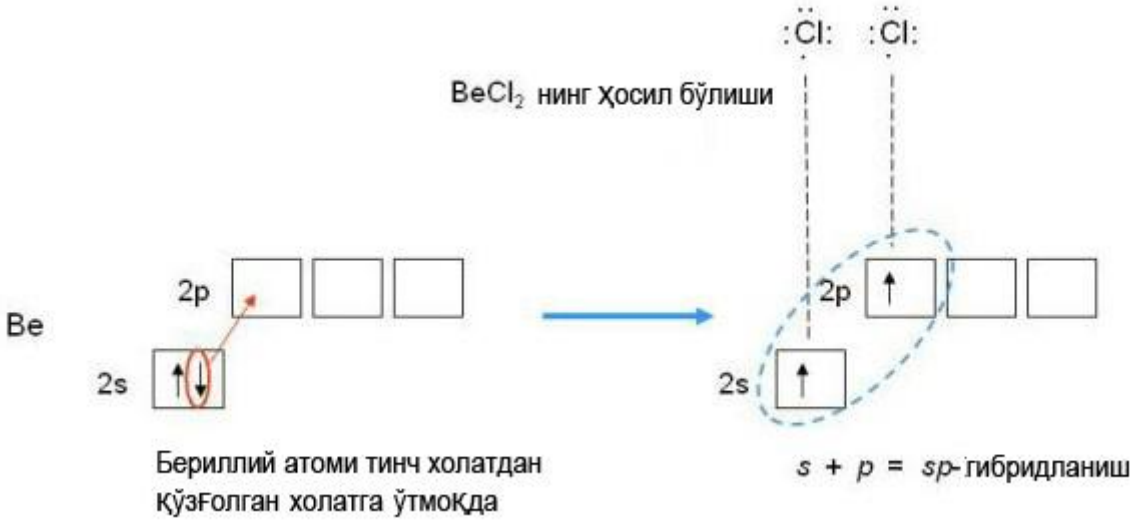
Валентликнинг электрон назариясидан кўриниб турибдики, атомлар орасидаги кимёвий боғ ҳосил бўлганда элементларнинг ташқи электрон қаватидаги валент электронларининг жуфтлашиши содир бўлади. Бунда битта элементнинг икки электрони турли шакл ва ҳолатда бўлиши ва иккинчи элементнинг иккита электрони билан иккита кимёвий боғ ҳосил қилиши мумкин, бунда мантиқан ҳосил қилувчи электронларга боғлиқ равишда турли табиатга эга боғлар ҳосил бўлиши керак. Аммо амалиётдан маълум бўлдики, икки элемент ҳосил қилган барча боғлар тенг кучли бўлади.

Буни қандай тушунтириш мумкин? Турли атом орбиталларидан бир хил боғлар ҳосил бўлишини тушунтириш учун атом орбиталларининг гибридланиши (яъни «чатишиш») тушунчасини киритиш талаб қилинди.

Келинг, $BeCl_2$ молекуласининг ҳосил бўлишини кўриб чиқамиз. Унинг ҳосил бўлиши Льюис формулалари билан ифодаланган бериллий ва хлорнинг электрон тузилишидан тушунарли бўлади:



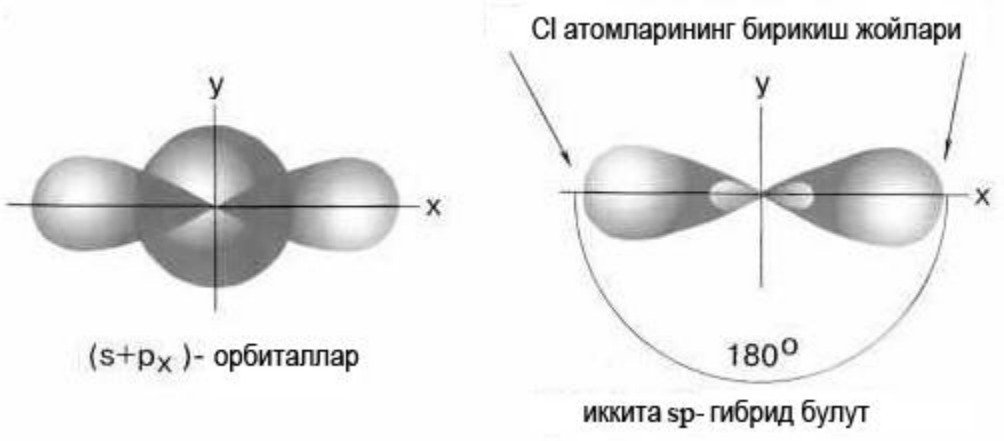
Бериллийнинг валент қавати электрон конфигурацияси $2s^2$. Хлорнинг иккита электрони билан таъсирлашиши учун бериллий электронларининг қўзғалган ҳолатга ўтиши талаб қилинади:



Агарда хлорнинг бир атоми бериллийнинг 2s-электрони, иккинчиси эса 2p-электрони ҳисобига ҳосил бўлганда, Be—Cl тенг кучли бўлмас эди. Аммо амалда иккала боғ ҳам бир хил узунлик, мустаҳкамликка эга ва 180^o бурчак остида жойлашади.

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Be—Cl боғларининг тенг кучлилигини тушунтириш учун бериллий атом орбиталларининг sp-гибридланиши ҳақида айтилади, бунда бир s-орбиталь ва бир p-орбиталь (улар орбиталь диаграммада айлана билан кўрсатилган) аралашади ва шакл ҳамда энергия бўйича тенглашади, бунда бир хил иккита sp-гибрид орбиталлар ҳосил бўлади.

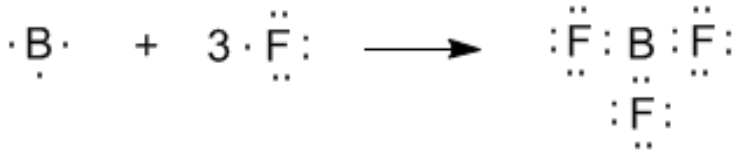


Ҳар бир гибрид орбитал носимметрик (ядро томон чўзилган). Бериллийнинг иккала гибрид орбиталлари бир тўғри чизиқда ётади.

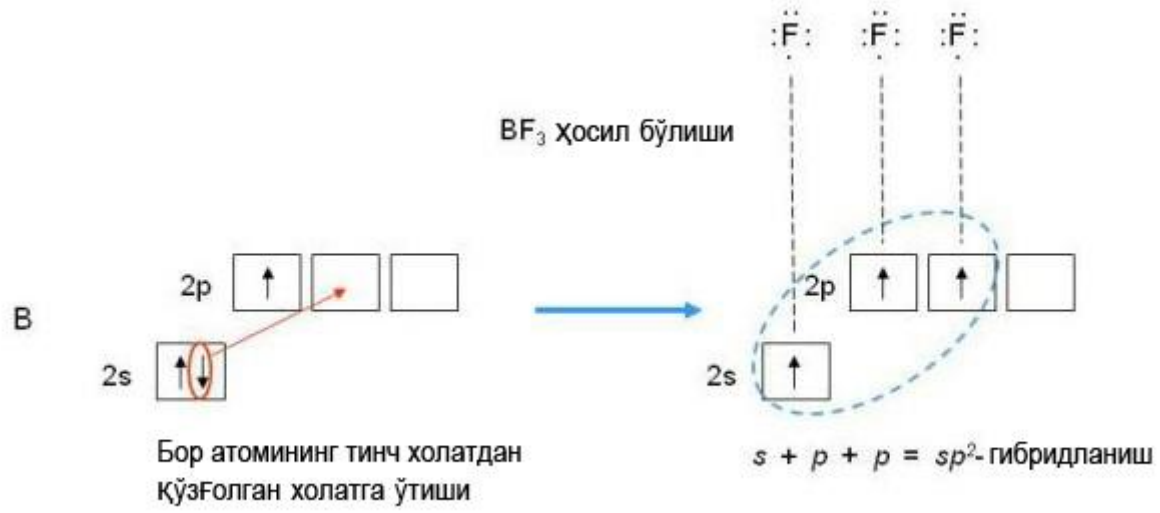
sp-гибридланиш сабаб $BeCl_2$ молекуласи чизиқли шаклга эга ва унинг барча уч томи бир тўғри чизиқда жойлашади, иккала Be—Cl боғлар эса бир хил бўлади. Қайси элементлардан ташкил топганидан қатъий назар sp-гибридланган барча молекулаларнинг геометрияси бир хил бўлади [2].

Бу ерда биринчи номутаносиблик пайдо бўлади: қандай қилиб битта s-электрон ва битта p-электрон иккита мустақил бирликлар (гибридлар) ҳосил қила олади? Наҳотки гантелсимон электронлар иккига бўлиниши, s электрон эса ярим электронлар билан бир гибрид ҳосил қилиши мумкин? Ярим электрон бўлиши мумкинми, электроннинг шакли носимметрик бўла оладими? Бундай гибридланишда гантелнинг кичик қисми ядрога яқин жойлашади, бу эса яна бир бор гибридланиш назариясининг мантиқсизлигини ва электрон булутларнинг гантелсимон шакли бўлмаслигини кўрсатади.

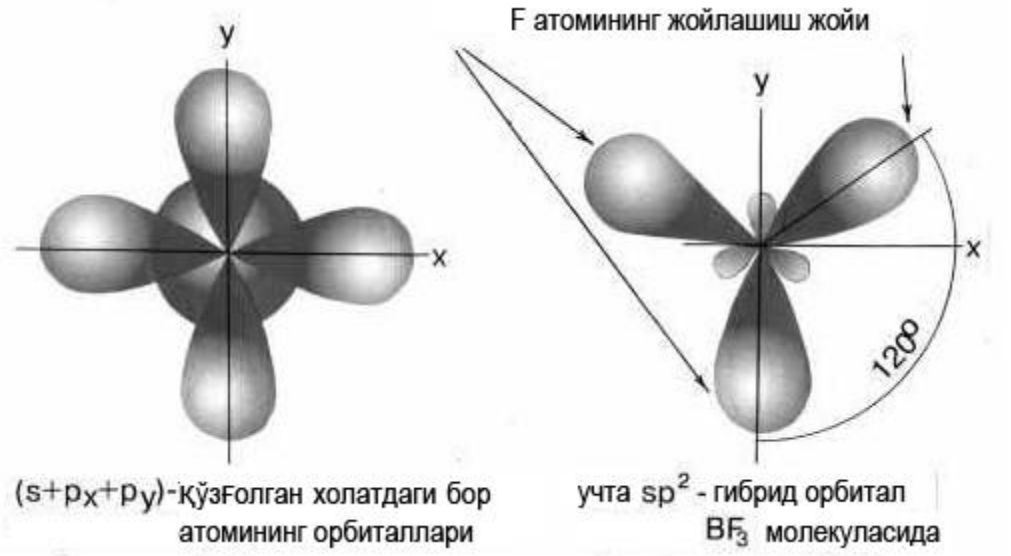
Агарда атомнинг валент қаватида битта s-орбиталь ва иккита p-орбиталь бўлса, бунда орбиталларнинг sp^2-гибридланиши кузатилади. Бунга мисол сифатида sp^2-гибридланган бор фторид молекуласини BF_3 келтириш мумкин.



ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160



Орбитал диаграммада битта s- ва иккита p-орбиталлар айлана билан кўрсатилган, улар «аралашади», яъни гибридланади.

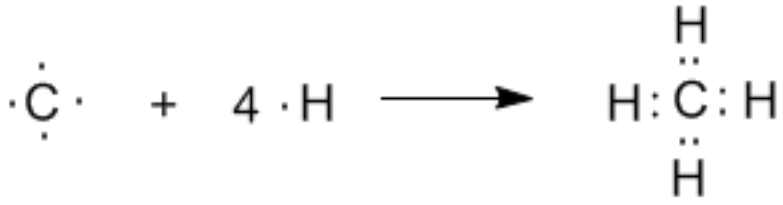


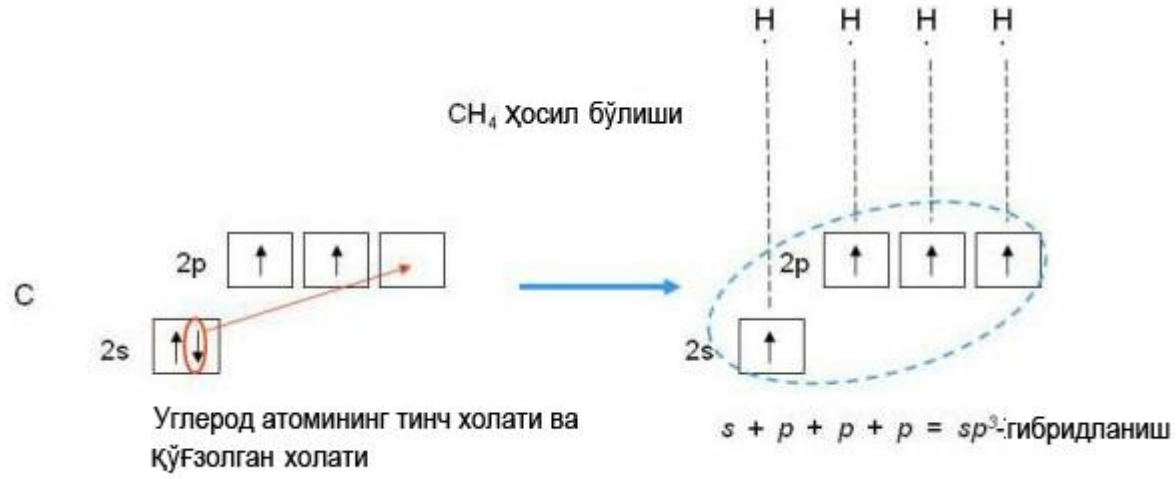
Борнинг учта sp^2-гибрид орбиталлари бир текисликда 120^o бурчак остида жойлашади [2].

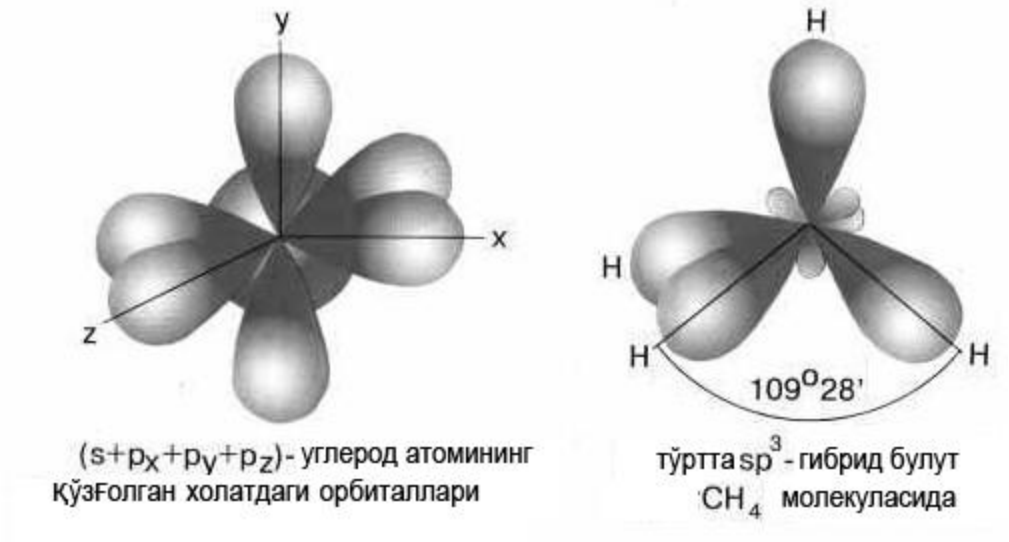
Бу ерда биз битта s-электрон иккита p-электрон билан боғланиши (гибридланиши) учун уч қисмга бўлинишини кўриб турибмиз. Яна оралиқ ярим электрон шакллар пайдо бўлмоқда, бу эса мавжуд қонунларга зид. Бунда ҳосил бўлган гибрид орбиталларда чўзиқ шакллар пайдо бўлиб, бу ўз навбатида турли энергетик учларнинг пайдо бўлишига олиб келади. Бир учи ядрога яқин жойлашса, иккинчиси узоқ жойлашади. Бу эса гибрид булутлар тенг кучлилигига зид бўлади.

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Ниҳоят, битта s- ва учта p-орбиталь аралашишидан sp^3-гибридланган молекулалар ҳосил бўлади, улар тетраэдр геометриясига эга. Мисол сифатида CH_4 метан молекуласини келтириш мумкин.







Углероднинг тўртта sp^3-гибрид орбиталлари тўғри тетраэдрнинг учларида жойлашган. Углерод атоми тетраэдр марказида бўлади. Барча боғлар орасидаги бурчаклар ўзаро бир хил ва 109°28' га тенг [2].

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Яна s-электроннинг бўлиниши, аммо бу ерда тўрт қисмга. Гибрид булутларнинг учи ва охирини ядродан турли узоқликда жойлашиши. Буларнинг барчаси гибрид булутларнинг тенг кучли эканлигини баҳсли қилиб қўймоқда.

Юқорида келтирилган маълумотлардан кўриниб турибдики, кимёвий боғ табиатини тушунтиришда ҳозиргача ноаниқликлар мавжуд. Гибридланиш назарияси кимёвий боғ ҳосил бўлишини тушунтиришда π-боғ, гибридланиш, электронларнинг турларга бўлиниши каби кўп сонли нисбий тушунчаларни қўлламоқда. Шунинг учун **электрон орбиталларнинг трансформация назарияси (ЭОТН)** таклиф қилинмоқда. Назария беш постулатдан иборат:

1. Электрон бир хил зарядга эга бўлиб, унинг импульси атомнинг эркин фазоси (сферик, ярим сферик ёки кўп секторли сферик шаклдаги) бўйича ҳаракатланаётган электромагнит булутининг тўлқин функциясига эга, электрон атом орбиталда бўлинган ячейкаларда бир ёки жуфт бўлиб жойлашади, аммо бир орбиталда ячейкалар қатлам бўлиб жойлашиши, турли шаклларга эга бўлиши (масалан, гантелсимон) мумкин эмас.

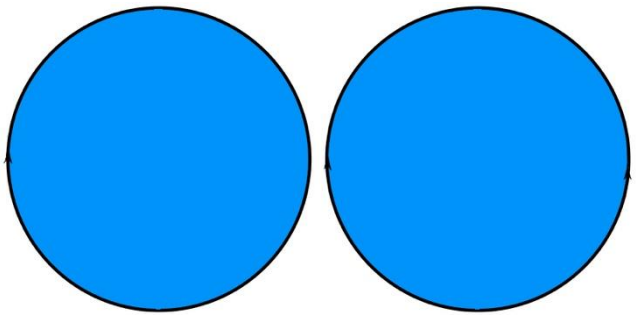
2. Электрон орбиталлар Паули принципи бўйича тўлиб боради, бунда орбиталдаги ячейкаларнинг максимал сони, Паули принципи бўйича, максимал электронлар сонининг ярмига тенг.

3. Бир орбиталь электронлари бутун орбитални тўлдиришга интилади, бунда улар сферик орбиталь фазосини минимал умумий энергия принципи бўйича тўлдириб борадилар.

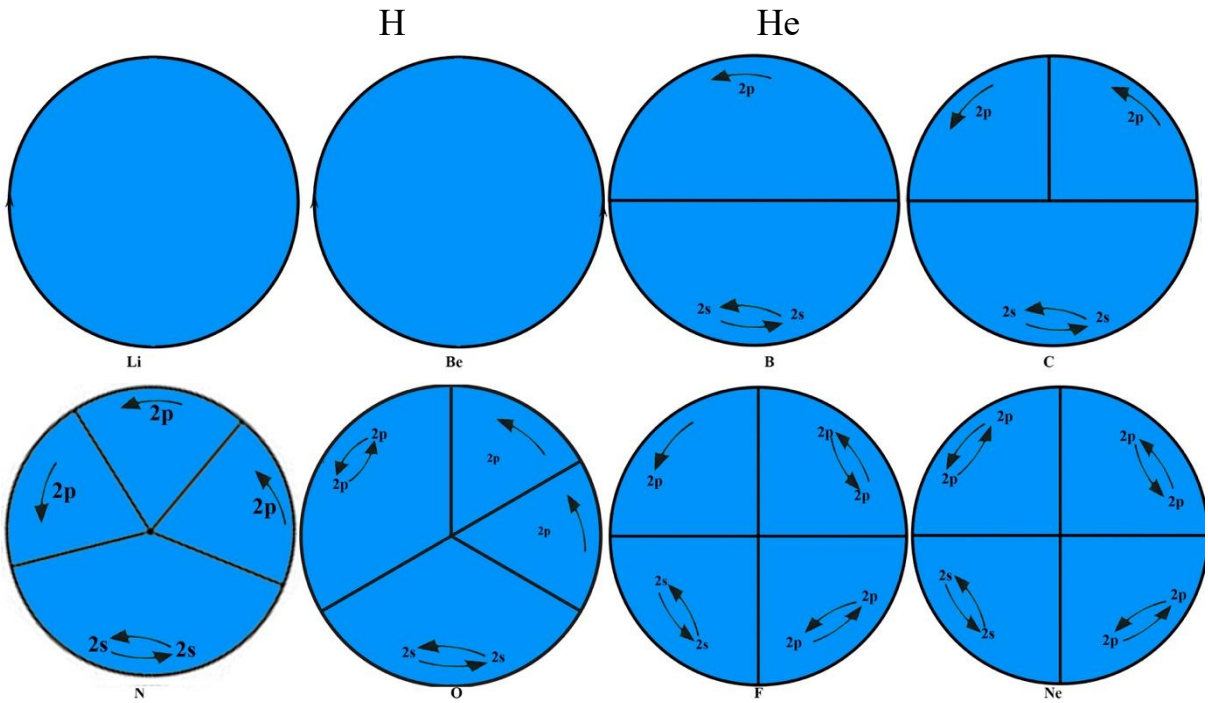
4. Ўзгарувчан валентликли элемент кимёвий боғ ҳосил қилишида электрон булутлар трансформацияси содир бўлади, бунинг натижасида кимёвий реакцияда қатнашувчи валент сферик электронлар трансформацияланади ва валент қийматига хос шакл ва миқдорни ҳосил қилади.

5. Кимёвий боғ ягона характерга эга ва σ- ҳамда π – боғларга бўлинмайди.

Таклиф қилинаётган назарияга кўра, биринчи ва иккинчи давра элементларининг ташқи электрон қаватининг тузилиши қуйидагича бўлади.



ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160



Биринчи ва иккинчи давр элементларининг валент қаватининг тузилиш схемаларидан кўриниб турибдики, орбиталда жойлашган электронлар орбиталнинг бутун фазосини тўлиқ қоплашга ҳаракат қилади. Водород атомида орбиталь бир электрон булути, гелий атоми орбиталида эса жуфт электрон булути билан қопланган.

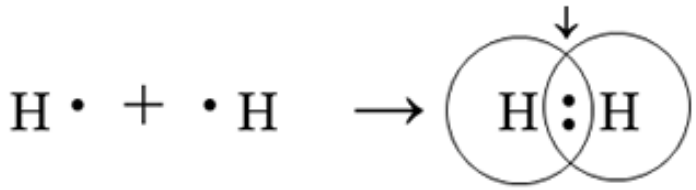
Иккинчи даврга ўтганда дастлабки литий ва бериллий атомларининг электрон тузилиши водород ва гелийникига ўхшаш, лекин шуни ҳам айтиш керакки, уларда ячейкалар ҳосил қилиш имконияти тўртга тенг. Ячейкаларнинг бундай бўлинишини биз борнинг валент қатламида кузатишимиз мумкин, бунда иккита ячейка ҳосил бўлиб, улар орбитални тенг иккига бўлади. Бир ячейкада s электронларнинг жуфти, иккинчисида эса p электрон жойлашади. Углерод атомида иккита жуфтлашмаган p электронлари бўлиб, улар иккита ячейкада, жуфтлашган s электрон эса сферанинг ярмида жойлашади, натижада углерод орбитали уч қисмга бўлинади. Азот атомида орбиталь тўрт қисмга бўлинган бўлиб, унда тақсимланмаган s-электрон жуфти мавжуд. Ушбу электрон жуфтнинг қолган p электронларни кучли итариши натижасида орбиталь тенг тўрт қисмга бўлинмаган бўлади. Электронлар орасидаги валент бурчак 107^{o} атрофида. Кислород атомида ҳам орбиталь тўрт қисмга бўлинган, аммо юқоридагилардан фарқли равишда, унда s- ва p-электронларнинг тақсимланмаган электрон жфтлари мавжуд, уларнинг ўзаро итарилиши валент бурчакнинг камайишига олиб келади. Сувда валент бурчак $104,3^{o}$ га тенг.

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

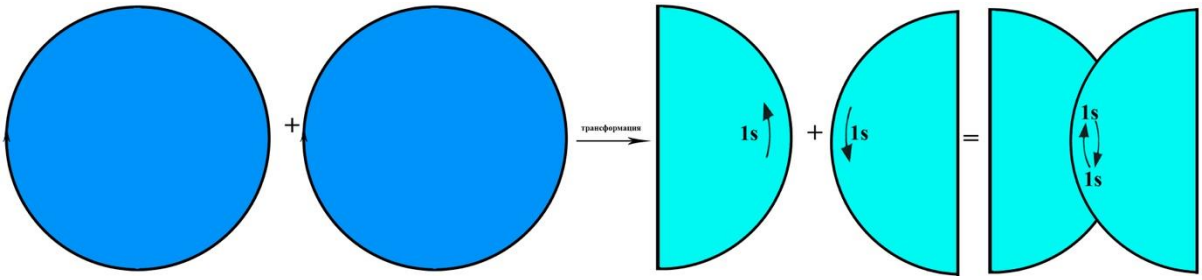
Турли молекулаларнинг ҳосил бўлишини электрон булутларнинг трансформация назариясидан келиб чиқиб, кўриб чиқамиз.

Энг оддий водород молекуласидан бошлаймиз:

Классик равишда водород молекуласининг ҳосил бўлиши қуйидагича:



Биз водород молекуласини ҳосил бўлишининг қуйидаги схемасини таклиф қиламиз:



Водород атомларининг иккита сферик электрон булутлари кимёвий боғ ҳосил қилишида трансформацияга учраб ярим сфера шаклига ўтади ва шу ҳолда электрон жуфт ҳосил қилади. Тажриба маълумотларига кўра, водород атомининг электрон булути радиуси 0,53 Å, водород молекуласининг боғ узунлиги эса 0,74 Å. Ушбу қийматларни классик назариялар билан тушунтириш учун кванткимёвий ҳисоблашларга тузатувчи коэффициентлар киритиш керак бўлди, чунки иккита электрон булут қопланиши содир бўлганда радиус 0,106 Å (иккита электрон булут радиуслари йиғиндиси) га яқин бўлиши керак эди [3]. Аммо, кўриб турганимиздек, бу ерда камайиш 0,32 Å ни ташкил қилади, бу эса таклиф қилинаётган назарияга мос келади, чунки бу ерда молекуляр водороднинг электрон булути радиуси иккита водород атомларининг электрон булутлари радиуслари йиғиндиси эмас, балки иккита ярим сфералар радиуслари йиғиндисидир, бундан ташқари электрон яримсфера шаклига ўтириши натижасида зарядниг зичлашиши ва ядро томонидан кучлироқ тортилиши содир бўлади ва натижада водород молекуласининг боғ узунлиги нисбатан кичраяди.

Шу билан бирга, адабиётлардаги маълумотларда молекуляр водороднинг радиуси 0,106 Å қийматида битта минимум бўлиб, у оралиқ барқарор шаклга мос келади [3]. Буни классик назариялар билан тушунтириб бўлмайди, аммо таклиф қилинаётган назарияга мос келади. Чунки иккита водород атомидан

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

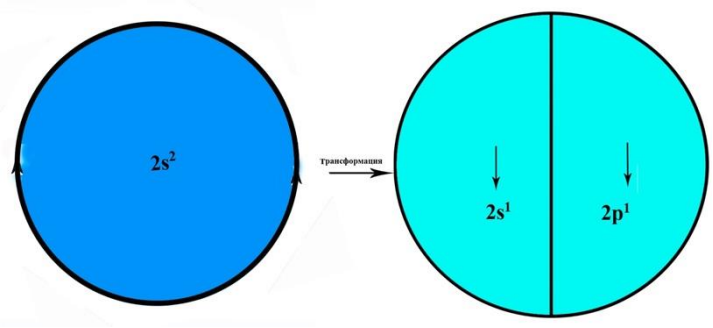
молекула ҳосил бўлишида, иккита электрон булутлар оралиқ шакл ҳосил қилиб яқинлашади ва бу ҳолат иккита водород атоми радиуслари йиғиндисига тенг бўлади. Аммо трансформация натижасида 50 ккал/моль энергия ажралади ва ярим сфера шаклига ўтиш ҳисобига радиус камайиши содир бўлади.

Кўриб турганимиздек, таклиф қилинаётган назария водород молекуласини ҳосил бўлишини яхши тушунтиради ва ҳатто классик назариялар тушунтириб билмаган айрим ҳолларга ҳам ойдинлик киритади.

Энди бирикмалар ҳосил бўлганда электрон булутларининг гибридланишини кўриб чиқсак. Юқорида кўрсатилганидек, гибридланишда турли шакл ва орбиталлардаги электронларнинг аралашиши, оралиқ шаклнинг ҳосил бўлиши ва уни бир бутун сифатида бошқа элемент билан таъсирлашиши кузатилади.

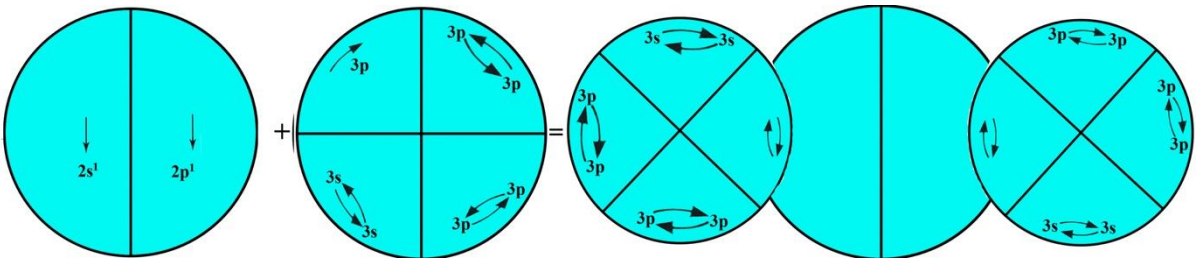
Биз эса бирикмалар ҳосил бўлишини, таклиф қилинаётган назария асосида, гибридланишни қўлламасдан тушунтирамиз.

Бериллий хлориддан бошлаймиз. Бу ерда бериллий билан хлор орасида реакция борганда бериллий атоми қўзғалган ҳолатга ўтади, бунда бериллийнинг бир s-электрони 2p орбиталга ўтади ва иккита ярим сферик орбиталларга трансформацияланади, яъни $2s^2$ сферик орбиталдан иккита $2s^1$ ва $2p^1$ яримсферик орбиталлар ҳосил бўлади ва улар фазони тўлиқ бўлиб олиб қоплайдилар ва иккита валент электрон булут ҳосил қилиб, бир-бирига 180o бурчак остида жойлашади.



Be Be*

Расм 1. Бериллийнинг $2s^2$ электронларининг $2s^1$ ва $2p^1$ трансформацияси

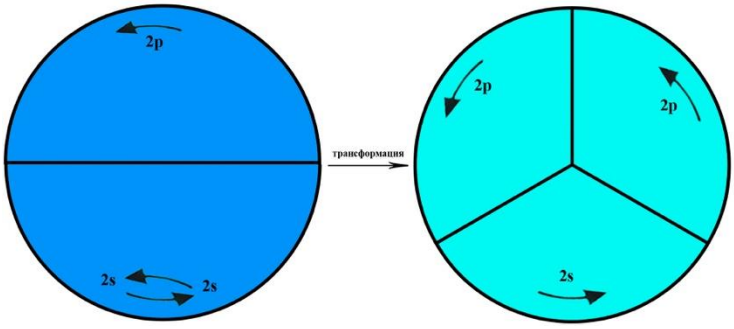


Расм 2. Бериллий хлорид молекуласи ҳосил бўлиши

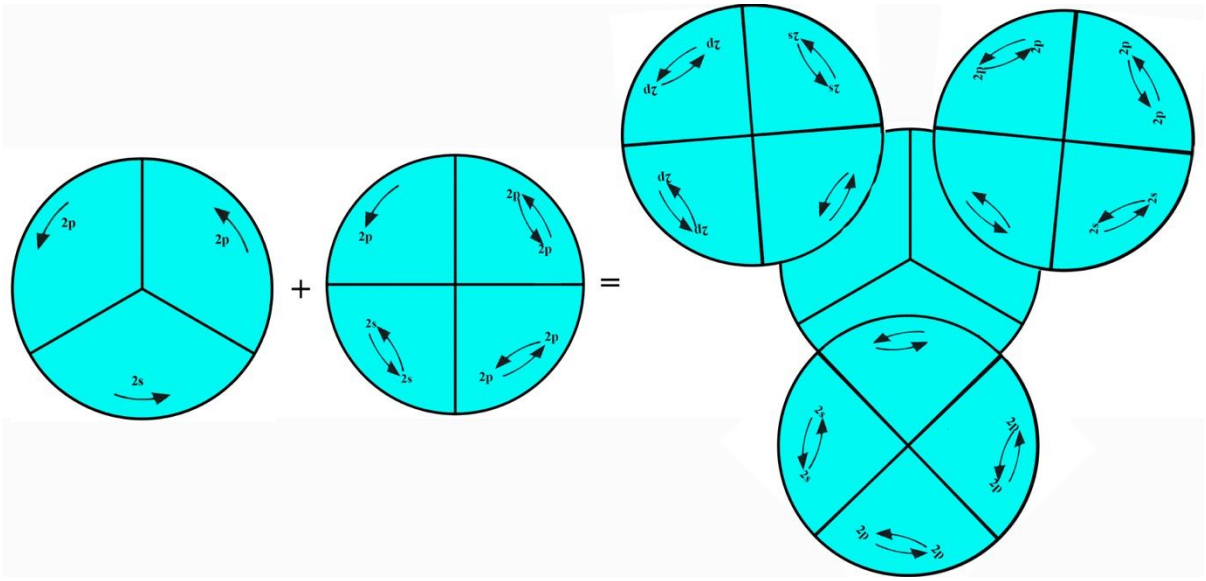
ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Шундай қилиб, иккита бир хил боғга эга бериллий хлорид молекуласи ҳосил бўлади.

Бор тузлари ҳосил бўлишида иккита электрон жуфт ҳосил қилади, бир электрон эса жуфтлашмаган ҳолатда бўлади, иккинчи атом электронларининг таъсирида электронларнинг трансформацияси содир бўлади ва ҳар бир электрон сферанинг 1/3 қисмини 120о бурчак остида қоплайди, бу эса электронларни бир биридан тенг узоқликда бўлиши ва иккинчи атом электронлари билан тенг кучли боғ ҳосил қилишини таъминлайди:



Расм 3. Бор атомида электронлар трансформацияси



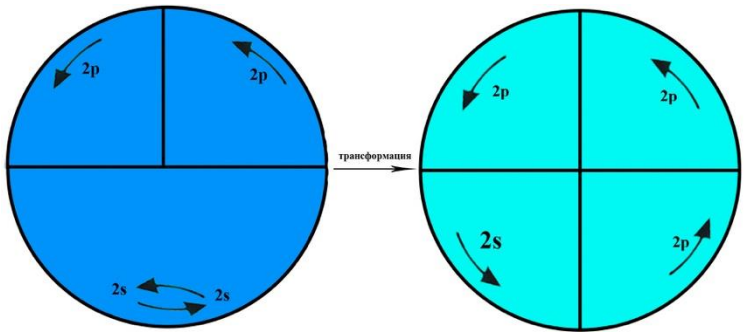
Расм 4. Бор фторид молекуласининг ҳосил бўлиши

Углерод бирикмаларида иккинчи орбиталдаги барча тўрт электрон қатнашади, бунда сфера 3 қисмга бўлинган бўлиб, сферани ярмини эгаллаган бир қисмида жуфтлашган s электронлар, сферанинг қолган қисмида эса жуфтлашмаган p электронлар жойлашади.

Углерод атомига бошқа атом билан бирор бир энергия билан таъсирлашувида электрон булутлар трансформацияси содир бўлади. Бунда

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

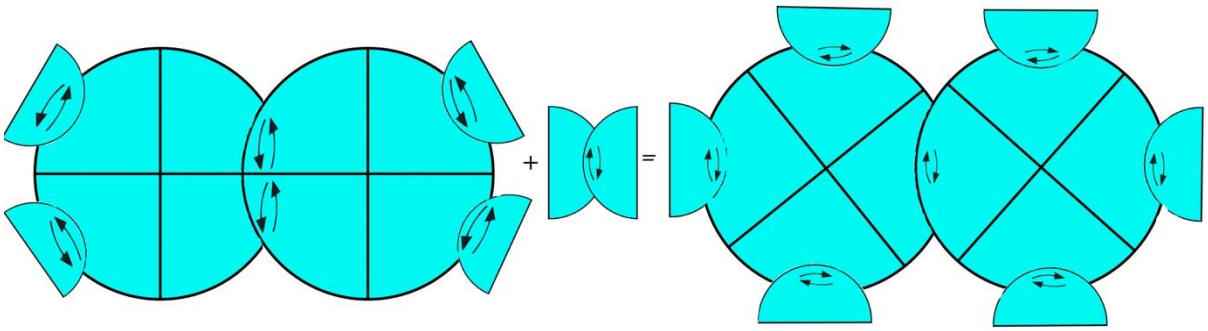
трансформация натижасида орбиталь сфераси тўртга бўлинади, улар фазода бир-бирига нисбатан 109°28’ бурчак остида жойлашади. Сферанинг бу қисмларида битта s ва учта p электронлар жойлашади ва тетраэдрик тузилишга эга бўлади, бунда электронлар бир-биридан тенг узоқликда бўлади.



Тетраэдр

Расм 5. Углерод атомида электронлар трансформацияси

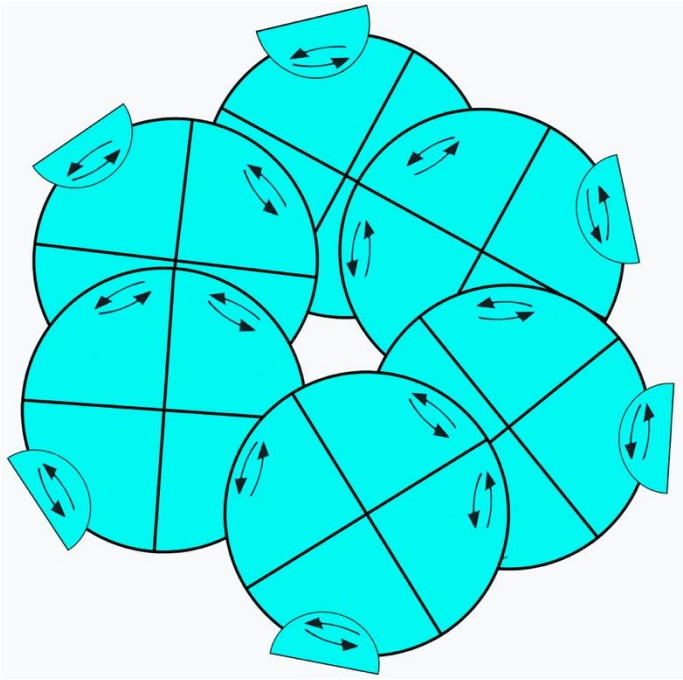
Тўйинмаган углеводородлар молекуласида π-боғ ҳосил бўлишини қандай тушунтириш мумкин, деган савол туғилади. Аслида таклиф қилинаётган назарияга кўра, π-боғ мавжуд эмас. Углерод атомлари орасидаги иккитадан электронлар боғлар ҳосил қилади, ушбу боғлар тенг кучли бўлганлиги сабабли улар орасида кучли итарилиш юзага келади ва бу боғлар заифлашиб қолади. Бу ерда ҳосил бўлган боғлар бир хил, яъни σ- ва π-боғ тушунчаси мавжуд эмас. Шунинг учун бирикиш реакциясига ушбу иккала боғнинг хоҳлаган биттаси киришиши мумкин. Шундай бўлса нима учун қўш боғларнинг тенг кучли эмаслиги ҳақида тасаввурлар пайдо бўлган? Ҳамма гап шундаки, тадқиқотчи фақат дастлабки ва охирги ҳолатни кўради. Бошқа молекула билан таъсирлашганда иккала боғнинг хоҳлаган биттаси реакцияга киришади, аммо янги боғ ҳосил бўлгач, қолган боғнинг энергияси ошади ва тадқиқотчида икки боғдан биттаси ҳамиша кучли бўлган, деган тасаввур пайдо бўлади. Аслида эса, иккала боғ тенг кучли ва бир хил энергияга эга бўлади.



Расм 6. Этан ҳосил бўлишида этилен ва водороднинг реакцияси

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Электрон булутлар трансформацияси назариясини қўллаб бензол молекуласи тузилишини ва углерод атомларининг тенг кучлилигини кўчувчи қўш боғсиз тушунтириш мумкин:



Расм 7. ЭОТН бўйича бензол молекуласининг тузилиши

Таклиф қилинаётган структурадан кўриниб турибдики, ҳар бир углерод атоми қўшни углерод атоми билан қўш боғ ҳосил қилади ва этилендаги каби бу боғларнинг ўзаро итарилиши натижасида боғлар заифлашиши юзага келади. Натижада углероднинг барча атомлари бирикиш реакциясига киришиш хусусиятига эга бўлади.

Келтирилган мисоллардан кўриниб турибдики, таклиф қилинаётган электрон орбиталларнинг трансформация назарияси водород молекуласининг ҳосил бўлишидаги локал минимум, бензол молекуласида барча углерод атомларини тенг кучлилиги каби муаммоларга ойдинлик киритади.

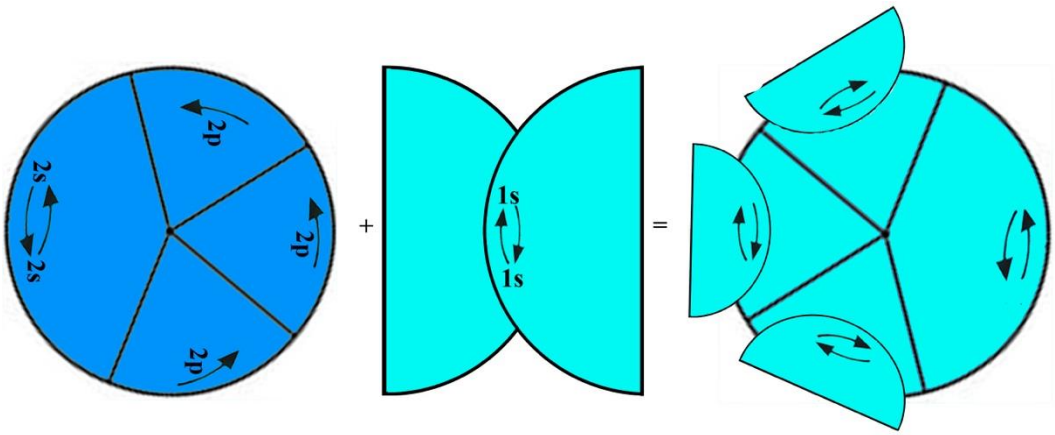
МУҲОКАМА ВА НАТИЖАЛАР

Гибридланишини тушунтириш учун “типидаги” қўшимча ишлатиладиган айрим молекулаларни кўриб чиқсак.

Масалан, аммиак тузилишини тушунтиришда азот атомидаги тақсимланмаган электрон жуфт бир оддий боғ сифатида қаралган ва шунинг ҳисобига sp^3 типидаги гибридланиш дейилган. Таклиф қилинаётган назария бўйича эса нафақат типидаги сўздан, балки гибридланишдан ҳам воз кечиш мумкин бўлади. Аммиак молекуласининг ҳосил бўлишида азотнинг

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

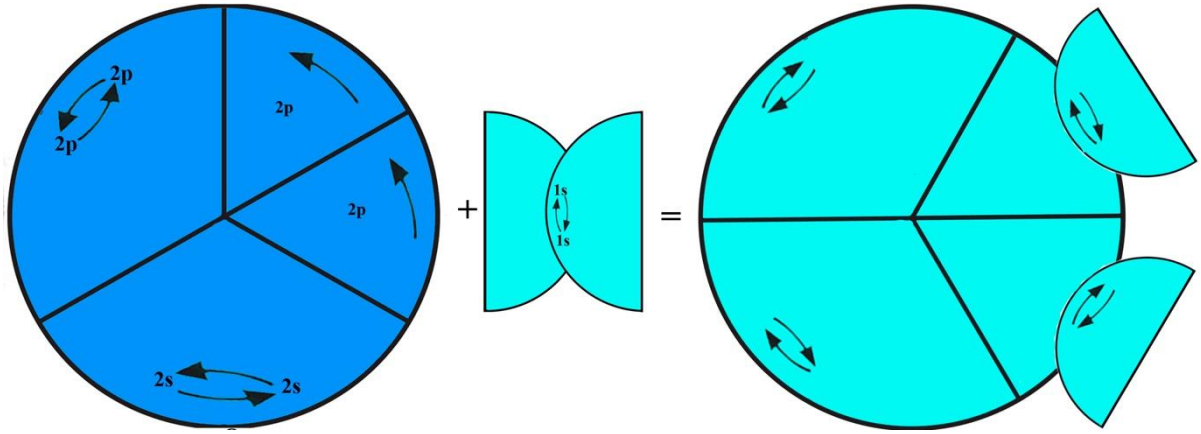
тақсимланмаган электрон жуфти ўзидан p-электронларни кучли итаради, бунинг натижасида тўрт ячейка фазода 90^o бурчакда эмас, балки бироз каттароқ – $107,3^o$ бурчак остида жойлашади.



Расм 8. Аммиак молекуласи ҳосил бўлишининг электрон схемаси

Шунингдек, сув молекуласида ҳам кислороднинг тақсимланмаган иккита электрон жуфтини псевдосигма боғ сифатида қараб сувни sp^3-типидаги гибрдизация дейилган. Агар марказий атом тўртта оддий боғ ҳосил қиладиган барча бирикмаларни sp^3-гибридланган десак, унда бу гибридланишнинг валент бурчаги ўзгарувчан катталикка айланиб қолади.

Шунинг учун электрон орбиталларнинг трансформацияси назариясидан келиб чиқиб, валент бурчак ҳақида гибридланишга боғламасдан гапиришимиз мумкин. Кислород атомида s- ва p-электронларнинг тақсимланмаган электрон жуфтлари ўзаро итаришади, азот атомидан фарқли равишда 2 та s-электронга тўртта p-электрон тўғри келиб, бундан 2 p электрон жуфт ҳолда жойлашади. Бунинг натижасида p электронларнинг итарилиши кучли бўлади ва валент бурчак 90^o дан кам фарқ қилади. Амалиёт кўрсатишича, ҳақиқатан ҳам, сувнинг валент бурчаги $104,27^o$ ва аммиакнинг валент бурчагидан кам.

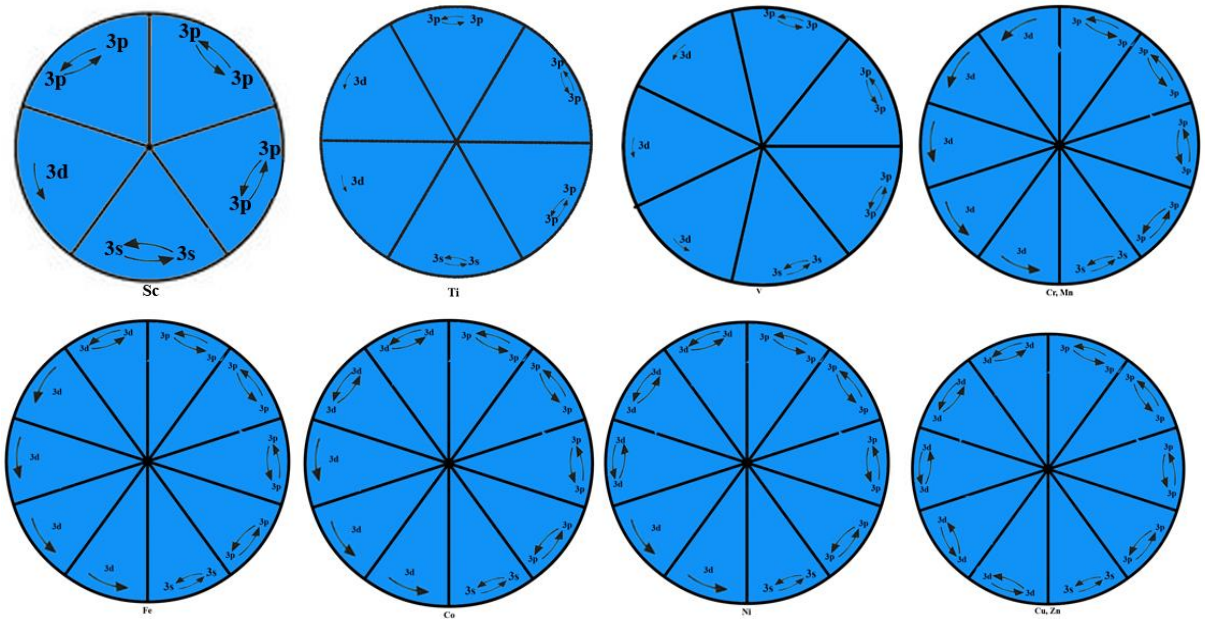


Расм 9. Сув ҳосил бўлишининг электрон схемаси

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

Юқорида келтирилган маълумотлардан кўриниб турибдики, таклиф қилинаётган электрон орбиталларнинг трансформация назарияси кимёвий боғ ҳосил бўлишини осонроқ тавсифлашга имкон яратади, бунда турли электронларни чатиштиришга хожат қолмайди. Шу билан бирга, электрон орбиталлар трасформацияси назарияси доирасида мавжуд назариялар тушунтириб билмаган ва хусусий ҳолатлар деб қаралган айрим ҳодисалар ҳам тушунтирилди.

Биз биринчи ва иккинчи давр элементларининг валент қобиқлари тузилишини кўриб чиқдик. d-электронлар пайдо бўлганда нима бўлади? Ҳеч нима. Қобиқда янги ячейкалар пайдо бўлади ва бу электронлар s ва p электронлар каби уларга жойлашиб бошлайди.



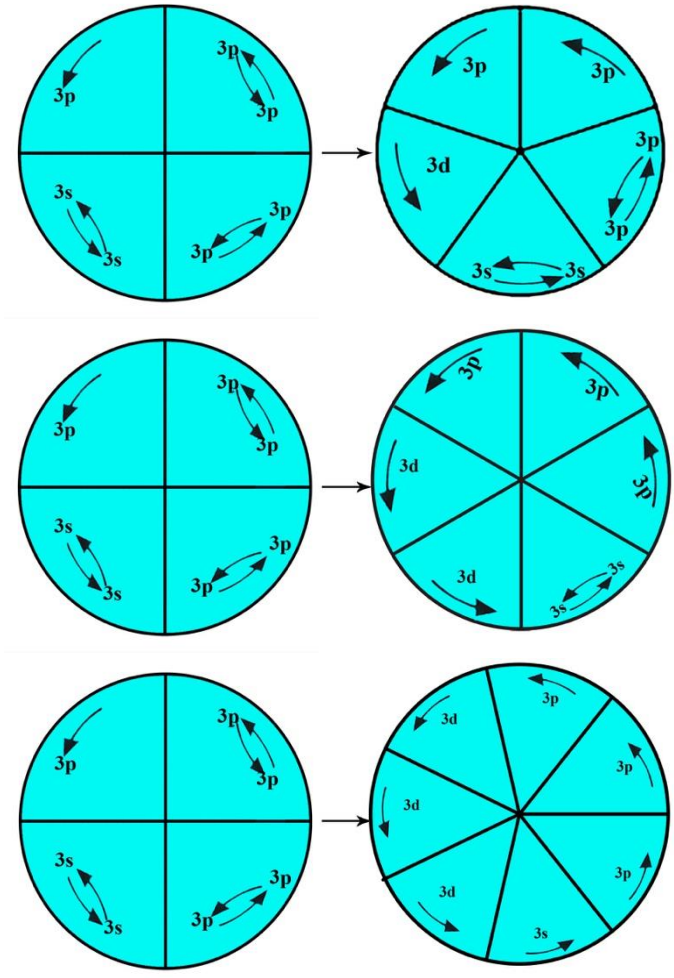
Расм 10. 4-давр элементларининг валент қобиғининг тузилиши

Шундай қилиб, ЭОТН иккинчи постулати бўйича учинчи орбиталда кўпи билан ячейкалар сони, Паули принципи бўйича, максимал электронлар сонининг ярмига тенг бўлади ва у электронлар билан элементда пайдо бўлишига кўра тўлиб боради.

Маълумки, айрим элементлар ўзгарувчан валентликка эга ва бу элементларнинг қўзғалган ҳолатга ўтиши билан боғлиқ. Хлор атоми мисолида уни қўзғалган ҳолатга ўтишини кўриб чиқамиз. Хлор Д.И. Менделеевнинг кимёвий элементлар даврий системасида учинчи даврда жойлашади ва электронлар билан тўлиши мумкин бўлган 3 та орбиталга эга. Паули принципи

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

бўйича, учинчи орбиталда кўпи билан $2x3^2=18$ электрон бўлиши мумкин, ЭОТН иккинчи постулатига кўра эса, ячейкаларнинг максимал сони электронларнинг максимал сонининг ярмига тенг, яъни 18/2=9. Тинч ҳолатда хлорнинг учинчи орбитали 4 та ячейкага бўлинган, бунда 3 та ячейкада жуфт ва 1 ячейкада жуфтлашмаган электронлар.



Қўзғалган ҳолатга ўтишда электрон жуфтларнинг бўлиниши ва жуфтлашмаган электронларнинг учинчи орбиталда янги ячейкалар ҳосил қилиб ўтиши кузатилади. Хлор электрон жуфтларининг аста-секин жуфтлашмаган ҳолатга ўтиши натижасида хлорнинг валентлиги 1,3,5 ва 7 бўлиши мумкин [4].

ХУЛОСА

Юқорида келтирилган маълумотлар асосида қуйидаги хулосалар қилиш мумкин:

ISSN: 2181-1385
Scientific Journal Impact Factor (SJIF) 2021: 5.723
Directory Indexing of International Research Journals-CiteFactor 2020-21: 0.89
DOI: 10.24412/2181-1385-2021-7-144-160

1. Электрон орбиталларнинг тузилиши ҳақидаги ҳозирги кунда мавжуд назариялар барча ҳолатларни тушунтириб бера олмайди ва кимёнинг ривожланиши билан бундай ҳолатлар кундан-кунга кўпайиб бормоқда.

2. Таклиф қилинаётган электрон орбиталларнинг трансформацияланиш назарияси нафақат кимёвий элементларнинг электрон орбиталлари тузилишини тўлиқ тушунтиради, балки кимёвий боғ табиатини ҳам очиб беради. Бунда мавжуд назариялар билан тушунтириб бўлмаган айрим ҳодисаларга аниқлик киритилади.

3. Таклиф қилинаётган назария асосида гибридланиш назарияси тўлиқ инкор қилинмоқда ва иккита атом орасида ҳосил бўладиган кимёвий боғнинг тенг кучлилиги гибрид булутларсиз исботланмоқда.

4. Этилен ва бензол молекулалари тузилиши мисолида углерод атомлари орасидаги барча боғлар бир хиллиги ва уларни σ- ва π-боғларга ажратиш мантиқсиз эканлиги кўрсатилди.

5. Электрон орбиталларнинг трансформацияланиш назарияси ёрдамида элементларни ўзгарувчан валентлик намоён қилиб қўзғалган ҳолатга ўтиши тушунтириб берилди.

REFERENCES

1. Мартынова Т.В. Химия: учебник и практикум для прикладного бакалавриата / Т.В. Мартынова, И.В. Артамонова, Е.Б. Годунов; под общ. ред. Т.В. Мартыновой. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Издательство Юрайт, 2019. — 368 с. — (Серия: Бакалавр. Прикладной курс).

2. Строение вещества. Методические указания для самостоятельной работы студентов всех специальностей и проведения практических занятий по химии. – Могилёв: Белорусско-Российский университет, 2003. – 38 с.

3. Паулинг Л. Природа химической связи / Пер. с англ. М.Е. Дяткиной. Под ред. проф. Я.К. Сыркина. — М.–Л.: Госхимиздат, 1947. — 440 с.

4. Eshchanov R., Khasanov Sh., Ibragimova M. A new look at chemical bonding and the theory of transformation of electronic clouds // Bulleten Khorezm Mamun academy, 2021.-№7, p. 6-17.