



<https://doi.org/10.70728/a.series.tab.v08.i05.011>

IKKI ATOMLI MOLEKULALARNING MAGNIT XOSSALARINI TAHLIL QILISHDA MOLEKULYAR ORBITALLAR USULINING ILMIY-METODIK AHAMIYATI

A.Iskandarov

Nizomiy nomidagi O'zMPU, Kimyo kafedrası dotsenti, PhD

K.Komilova

Nizomiy nomidagi O'zMPU, Kimyo ta'lim yo'nalishi talabasi

Annotatsiya. Ushbu maqolada kvant kimyosining muhim yo'nalishlaridan biri bo'lgan Molekulyar orbitallar usuli yordamida ikki atomli molekulalar (N_2 va O_2) ning elektron tuzilishi va magnit xossalari tahlil qilinadi. Valent bog'lanishlar nazariyasining cheklangan jihatlari va MO usulining afzalliklari qiyosiy o'rganilgan. Maqola pedagogika oliygohlari talabalari uchun kvant-kimyoviy tushunchalarni o'zlashtirishda metodik manba bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: Kvant kimyosi, molekulyar orbitallar usuli, paramagnitizm, diamagnitizm, elektron konfiguratsiya, kimyo ta'limi, atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasi prinsipi.

Аннотация. В данной статье на основе метода молекулярных орбиталей, являющегося одним из важнейших направлений квантовой химии, анализируются электронное строение и магнитные свойства двухатомных молекул (N_2 и O_2). Проведено сравнительное изучение ограниченных аспектов теории валентных связей и преимуществ метода молекулярных орбиталей. Статья служит методическим ресурсом для студентов педагогических вузов в освоении квантово-химических понятий.

Ключевые слова: Квантовая химия, метод молекулярных орбиталей, парамагнетизм, диамагнетизм, электронная конфигурация, химическое образование, принцип линейная комбинация атомных орбиталей.

Abstract. In this article, the electronic structure and magnetic properties of diatomic molecules (N_2 and O_2) are analyzed using the Molecular Orbital method, which is one of the key areas of quantum chemistry. A comparative study was conducted on the limitations of the Valence Bond theory versus the advantages of the Molecular Orbital method. The article serves as a methodological resource for students of pedagogical universities in mastering quantum-chemical concepts.

Key words: Quantum chemistry, molecular orbital method, paramagnetism, diamagnetism, electronic configuration, chemistry education, Linear Combination of Atomic Orbitals principle.

Kirish. Kimyoviy bog‘lanish nazariyasi moddalarning xossalarni mikrostruktura darajasida tushuntirishning asosiy vositasidir. Ko‘p yillar davomida ta’lim tizimida V.Geytler va F.London tomonidan asos solingan Valent bog‘lanishlar nazariyasi hukmronlik qilib keldi. Ushbu nazariya molekulalarning fazoviy geometriyasini va bog‘lanishlarning yo‘nalganligini tushuntirishda yuqori natija bersa-da, ba’zi fundamental ziddiyatlarga duch keldi.

Xususan, kislorod molekulasini (O_2) tajribalarda paramagnit (magnit maydoniga tortiluvchi) ekanligini ko‘rsatsa-da, Valent bog‘lanishlar nazariyasi uning barcha elektronlarini juftlashgan deb hisoblaydi va diamagnit sifatida talqin qiladi. Mazkur muammoni hal qilish uchun R.Malliken va F.Xund tomonidan taklif etilgan Molekulyar orbitallar usuli kvant kimyosida inqilobiy qadam bo‘ldi. Ushbu maqolaning dolzarbligi shundaki, u talabalarga kimyoviy tizimlarni nafaqat statik nuqtalar to‘plami, balki dinamik to‘lqin funksiyalarining kombinatsiyasi sifatida ko‘rishni o‘rgatadi.

1. Atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasi prinsipi va Shredinger tenglamasining tatbiqi.

Molekulyar orbitallar usulining matematik asosini Atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasi tashkil etadi. Molekula uchun to‘lqin funksiyasi (Ψ) alohida atomlarning to‘lqin funksiyalari (ψ) yig‘indisi sifatida ifodalanadi:

$$\Psi = C_1\psi_A \pm C_2\psi_B$$

Bu yerda + ishorasi bog‘lovchi orbitalni (energiya pasayadi, elektron zichligi yadrolar orasida ortadi), – ishorasi esa antibog‘lovchi orbitalni (energiya ortadi, yadrolar orasida elektron zichligi nolga teng bo‘lgan tugun tekisligi hosil bo‘ladi) ifodalaydi.

2. Azot (N_2) molekulasining kvant-kimyoviy tahlili.

Azot atomi $1s^2 2s^2 2p^2$ elektron konfiguratsiyasiga ega. Ikkita azot atomi birlashganda 10 ta valent elektron (ichki $1s$ elektronlarini hisobga olmaganda) molekulyar orbitallarni to‘ldiradi.

Azot uchun Molekulyar orbitallar energetik diagrammasining o‘ziga xos jihati σ_{2p_z} va $\pi_{2p_{xy}}$ orbitallarining o‘rin almashishidir ($s - p$ aralashuvi tufayli). Elektronlar Pauli prinsipi va Xund qoidasiga binoan pastdan yuqoriga qarab to‘ldiriladi:

1) σ_{2s} va σ_{2s}^* orbitallarida 4 ta elektron.

2) $\pi_{2p_x, 2p_y}$ orbitallarida 4 ta elektron.

3) σ_{2p_z} orbitalida 2 ta elektron.

Natijada, barcha 10 ta elektron juftlashgan holatda bo‘ladi. Spinlarning o‘zaro kompensatsiyalanishi molekulaning diamagnit bo‘lishini ta’minlaydi. Bog‘lanish tartibi esa quyidagi formula bo‘yicha hisoblanadi:

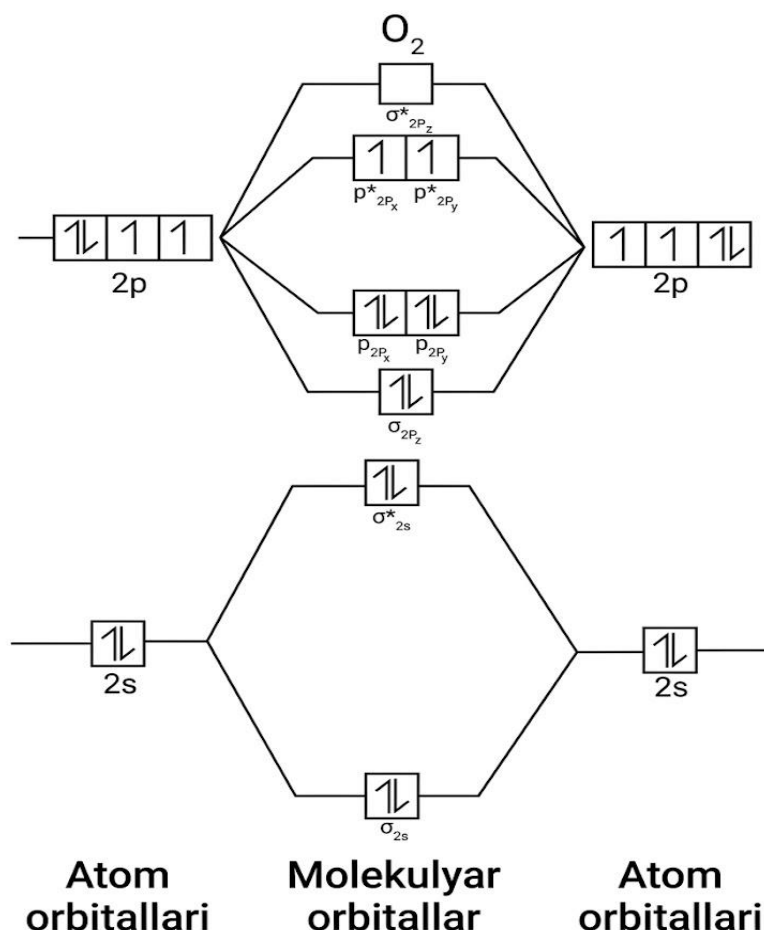
$$B.T. = \frac{n_b - n_a}{2} = \frac{8 - 2}{2} = 3$$

Bu azot molekulasidagi uchlamchi bog‘ning juda mustahkamligini asoslaydi.

3. Kislorod (O_2) molekulasi va paramagnitizmning isboti.

Kislorod atomi $1s^2 2s^2 2p^4$ tuzilishiga ega. Ikkita atom qo‘shilganda 12 ta valent elektron hosil bo‘ladi. Elektronlar taqsimoti azotdan farqli ravishda σ_{2p_z} pastroq energiyaga ega bo‘lgan tartibda boradi:

- 1) σ_{2s} , σ_{2s}^* , σ_{2p_z} va $\pi_{2p_{xy}}$ orbitallari to‘liq to‘ladi (10 ta elektron).
- 2) Qolgan 2 ta elektron eng yuqori energiyali bo‘sh turgan $\pi_{2p_{xy}}^*$ (antibog‘lovchi) orbitallarga o‘tadi.



Bu yerda Xund qoidasi ishga tushadi: elektronlar energiyasi teng bo‘lgan ikkita π^* orbitalga bittadan va parallel spinli bo‘lib joylashadi. Mana shu ikkita toq elektron molekulaga

xususiy magnit momentini beradi va uni paramagnit qiladi. Valent bog‘lanishlar nazariyasi buni tushuntira olmas edi, chunki u kislorodda qo‘shaloq bog‘ni faqat elektronlar jufti hosil qiladi deb hisoblardi.

Pedagogika oliy ta‘lim muassasalarida ushbu mavzuni o‘qitishda biz quyidagi argumentlarni ilgari suramiz:

Vizuallashtirishning roli: Talabalarga faqat konfiguratsiyani yozish emas, balki energetik diagrammalarni chizish orqali “energetik zinapoya” konsepsiyasini tushuntirish samaraliroq.

Eksperiment va nazariya bog‘liqligi: Suyuq kislorodning magnitga tortilishi aks etgan videomateriallar nazariy Molekulyar orbitallar diagrammasi bilan solishtirilganda, talabalarda ilmiy bilishning gnoseologik zanjiri (kuzatish → muammo → nazariy yechim) shakllanadi.

Kelajakdagi tadbiri: Ushbu bilimlar keyinchalik kompleks birikmalar kimyosi va molekulyar spektroskopiyani o‘rganishda poydevor bo‘lib xizmat qiladi.

Xulosa qilib aytish mumkinki, molekulyar orbitallar usuli kimyoviy tizimlarning magnit va energetik xossalarini prognoz qilishda eng ishonchli kvant-mexanik model hisoblanadi. Azot va kislorod molekulalari misolida biz elektronlarning nafaqat soni, balki ularning orbitallardagi joylashish tartibi moddaning makroskopik xossalarini qanday belgilashini ko‘rdik. Bu kabi tahlillar kelajakdagi kimyo o‘qituvchilarining ilmiy dunyoqarashini kengaytirishda va ularda tanqidiy fikrlashni rivojlantirishda muhim ahamiyat kasb etadi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

- 1) Eshchanov X.O., Razzokov A.Sh. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi. Oliy o‘quv yurtlari uchun o‘quv qo‘llanma. Urganch-“Milleniumus print”, 2024-yil. – 168 bet.
- 2) Akbarov H.I., Kattayev N.T., Berdimurodov E.T., Mamatov J.Q. Kvant mexanikasi va kvant kimyosi. Oliy o‘quv yurtlari uchun o‘quv qo‘llanma. “Demal”-2024-yil. – 204 bet.
- 3) Bozorov N.I., Ibodullayeva I.M., Usmonova D.T., Saydaxmetova. Kimyo asoslari. O‘quv qo‘llanma. Toshkent: “Ilm ziyo”, 2020-yil. – 256 bet.