NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2026-8]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427

01.00.00-FIZIKA-MATEMATIKA
journal.namdu.uz
PHYSICS AND MATHEMATICS

KIMYOVIY BOG‘ LANISHLARNI TUSHUNTIRISHDA MOLEKULYAR FIZIKANING O‘ RNI.

Vazirova E’zoza TuxtaboyevnaNamDU, fizika kafedrasi doktoranti,
ORCID: 0009-0008-7747-805X E-mail: vazirovaezoza@gmail.com
Meliboyev Bositxon Vohid o‘ g‘ li NamDU Tabiiy fanlar fakulteti Kimyo kadefrasi talabasi
ORCID: 0009-0009-0231-3768 E-mail: bositxonmeliboyev20@gmail.com

Annotatsiya: *Mazkur maqolada kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik asoslari zamonaviy ilmiy qarashlar asosida tahlil qilingan. Kimyoviy bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lish mexanizmi kvant mexanikasi, molekulyar orbitalar nazariyasi va elektron tuzilish konsepsiyalari nuqtai nazaridan yoritilgan. Shuningdek, ion, kovalent, metall va vodorod bog‘ lanishlarining fizik hamda kimyoviy xususiyatlari o‘ zaro taqqoslanib, ularning moddalarning tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalariga ta’siri baholangan. Tadqiqot davomida molekulalar barqarorligi, bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi va elektron zichligining o‘ zaro bog‘ liqligi ilmiy adabiyotlar asosida tahlil qilindi. Natijalar kimyoviy bog‘ lanishlarni molekulyar-fizik yondashuv asosida o‘ rganish moddalarning tuzilishi, reaktivligi va fizik xossalarini chuqurroq tushunishga xizmat qilishini ko‘ rsatdi. Mazkur tadqiqot fizik kimyo, molekulyar fizika va kvant kimyosi yo‘ nalishlarida olib boriladigan ilmiy izlanishlar uchun nazariy asos bo‘ lib xizmat qiladi.*

Kalit so‘ zlar: *Kimyoviy bog‘ lanish, molekulyar fizika, fizik kimyo, kvant mexanikasi, molekulyar orbital, elektron tuzilish, bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi, elektron zichligi, molekula barqarorligi.*

РОЛЬ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФИЗИКИ В ОБЪЯСНЕНИИ ХИМИЧЕСКИХ СВЯЗЕЙ.

Аннотация. *В данной статье на основе современных научных подходов проанализированы молекулярно-физические основы химической связи. Рассмотрены механизмы образования химических связей с позиций квантовой механики, теории молекулярных орбиталей и концепции электронного строения веществ. Проведено сравнительное исследование физических и химических свойств ионной, ковалентной, металлической и водородной связей, а также оценено их влияние на строение и физико-химические свойства веществ. На основе анализа научной литературы исследована взаимосвязь между стабильностью молекул, энергией связи, длиной связи и электронной плотностью. Полученные результаты свидетельствуют о том, что изучение химических связей с молекулярно-физической точки зрения способствует более глубокому пониманию строения веществ, их реакционной способности и физических свойств. Представленные материалы могут служить теоретической основой для дальнейших исследований в области физической химии, молекулярной физики и квантовой химии.*

Ключевые слова: *химическая связь, молекулярная физика, физическая химия, квантовая механика, молекулярная орбиталь, электронное строение, энергия связи, длина связи, электронная плотность, устойчивость молекулы.*

THE ROLE OF MOLECULAR PHYSICS IN EXPLAINING CHEMICAL BONDS.

Abstract. *This article presents an analysis of the molecular-physical fundamentals of chemical bonding based on contemporary scientific concepts. The mechanisms of chemical bond formation are discussed from the perspectives of quantum mechanics, molecular orbital theory, and electronic structure concepts. In addition, the physical and chemical characteristics of ionic, covalent, metallic, and hydrogen bonds are comparatively analyzed, and their influence on the structure and physicochemical properties of substances is evaluated. The relationship between molecular stability, bond energy, bond length, and electron density is examined through the analysis of scientific literature. The results indicate that investigating chemical bonding from a molecular-physical perspective provides a deeper understanding of the structure, reactivity, and physical properties of substances. The findings of this study can serve as a theoretical basis for further research in physical chemistry, molecular physics, and quantum chemistry.*

Keywords: *chemical bonding, molecular physics, physical chemistry, quantum mechanics, molecular orbital, electronic structure, bond energy, bond length, electron density, molecular stability.*

Kirish

Kimyoviy bog‘ lanish moddalar tuzilishini, ularning fizik va kimyoviy xossalarini, shuningdek, kimyoviy reaksiyalarning borish mexanizmini belgilovchi fundamental tushunchalardan biri hisoblanadi. Atomlarning molekulalar

va kristall panjaralar hosil qilishi, moddalarning agregat holati, erish va qaynash harorati, elektr hamda issiqlik o‘ tkazuvchanligi, magnit va optik xossalari bevosita kimyoviy bog‘ lanish tabiatiga bog‘ liq [1]. Shu sababli kimyoviy bog‘ lanishlarni chuqur o‘ rganish nafaqat kimyo, balki molekulyar fizika, fizik kimyo, kvant mexanikasi va materialshunoslik fanlarining ham muhim ilmiy yo‘ nalishlaridan biri hisoblanadi. So‘ nggi o‘ n yilliklarda fan va texnologiyalarning jadal rivojlanishi natijasida atom va molekulalarning ichki tuzilishini yuqori aniqlikda o‘ rganish imkoniyatlari kengaydi. Zamonaviy spektroskopik usullar, rentgen difraksiyasi, elektron mikroskopiya hamda kvant-kimyoviy modellashtirish usullarining rivojlanishi kimyoviy bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lish mexanizmini chuqurroq tushunishga xizmat qilmoqda [8]. Ayniqsa, elektronlarning fazoviy taqsimlanishi, orbital qoplanishi va molekulalarning energetik holatini aniqlash orqali bog‘ lanishlarning fizik mohiyatini ilmiy asosda izohlash imkoniyati yuzaga keldi.

Bugungi kunda kimyoviy bog‘ lanishlarni o‘ rganish faqat nazariy ahamiyat kasb etmay, balki amaliy jihatdan ham dolzarb hisoblanadi. Nanotexnologiyalar, yarimo‘ tkazgich materiallari, polimerlar, kompozitlar, katalizatorlar, biologik faol moddalar hamda farmatsevtika mahsulotlarini yaratishda atomlararo bog‘ lanishlarning tabiatini chuqur bilish muhim omil hisoblanadi. Moddalarning fizik va mexanik xossalarini boshqarish, ularning issiqlik va elektr o‘ tkazuvchanligini oshirish yoki kamaytirish, korroziyaga chidamliligini yaxshilash kabi masalalar bevosita kimyoviy bog‘ lanishlarning xususiyatlariga bog‘ liq [10]. Molekulyar fizika nuqtai nazaridan kimyoviy bog‘ lanish atom yadrolari va elektronlar o‘ rtasidagi elektrostatik o‘ zaro ta’sir natijasida yuzaga keladigan murakkab energetik tizimdir. Bog‘ hosil bo‘ lishi davomida tizimning potensial energiyasi kamayadi va molekula energetik jihatdan barqarorroq holatga o‘ tadi. Ushbu jarayon energiyaning saqlanish qonuni, termodinamikaning birinchi va ikkinchi qonunlari hamda statistik fizika qonunlari bilan uzviy bog‘ liq [5]. Shu jihatdan kimyoviy bog‘ lanishlarni fizik va kimyoviy qonuniyatlar asosida kompleks o‘ rganish zamonaviy ilm-fanning muhim vazifalaridan biri hisoblanadi.

Adabiyotlar tahlili

Mahalliy va xorijiy olimlar tomonidan olib borilgan tadqiqotlarda kimyoviy bog‘ lanishlarning turli jihatlari keng yoritilgan bo‘ lsa-da, ularni molekulyar fizika va fizik kimyo nuqtai nazaridan integratsiyalashgan holda tahlil qilish dolzarb masalalardan biri bo‘ lib qolmoqda. O‘ zbek olimlari M.Yo‘ ldoshev, B.Ismoilov va T.Qodirovlarning ilmiy ishlari fizik kimyo va molekulyar fizika fanlari o‘ rtasidagi bog‘ liqlikni yoritishda muhim ahamiyat kasb etsa, xorijiy olimlar Peter Atkins, Linus Pauling, Ira Levine hamda Donald McQuarrie tomonidan yaratilgan fundamental asarlarda kimyoviy bog‘ lanishlarning kvant-mexanik asoslari batafsil bayon etilgan [1, 3, 4]. Kimyoviy bog‘ lanish atomlar va ionlarning o‘ zaro ta’siri natijasida hosil bo‘ ladigan hamda moddalarning kimyoviy va fizik xossalarini belgilovchi eng muhim omillardan biri hisoblanadi. Moddalarning agregat holati, kristall panjarasining tuzilishi, elektr va issiqlik o‘ tkazuvchanligi, magnit xossalari, erish va qaynash haroratlari, shuningdek, kimyoviy faolligi bevosita kimyoviy bog‘ lanish tabiatiga bog‘ liq. Shu sababli kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik mohiyatini o‘ rganish nafaqat kimyo, balki fizika, materialshunoslik, nanokimyo va kvant texnologiyalarining ham asosiy ilmiy yo‘ nalishlaridan biri hisoblanadi. So‘ nggi yillarda olib borilgan ilmiy izlanishlar shuni ko‘ rsatmoqdaki, kimyoviy bog‘ lanishlarni faqat valent elektronlar almashinuvi bilan tushuntirish yetarli emas [7]. Ularning hosil bo‘ lish mexanizmini chuqur anglash uchun kvant mexanikasi, molekulyar fizika va fizik kimyo qonunlarini birgalikda qo‘ llash zarur. Kimyoviy bog‘ lanishlarning zamonaviy nazariyasini rivojlantirishda Linus Paulingning ilmiy ishlari alohida o‘ rin tutadi. U atom orbitallarining gibridlanish nazariyasini ishlab chiqib, molekulalarning fazoviy tuzilishini kvant mexanikasi asosida tushuntirib berdi. Paulingning fikricha, atom orbitallari bir-biri bilan qoplanishi natijasida yangi energetik holat yuzaga keladi va aynan shu holat barqaror kimyoviy bog‘ lanishning hosil bo‘ lishiga sabab bo‘ ladi. Muallif bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi va bog‘ burchagi kabi parametrlar molekulaning barqarorligini belgilashini ko‘ rsatgan. Bugungi kunda ushbu nazariya organik, noorganik va fizik kimyo fanlarida keng qo‘ llanilib kelinmoqda [9]. Peter Atkins va Julio de Paula tomonidan yaratilgan "Physical Chemistry" asari fizik kimyo bo‘ yicha eng mukammal ilmiy manbalardan biri hisoblanadi.

Mahalliy olimlarning ilmiy ishlari ham kimyoviy bog‘ lanishlarni o‘ rganishda muhim ahamiyat kasb etadi. Xususan, B.Ismoilov va T.Qodirov fizik kimyo bo‘ yicha tadqiqotlarida atomlararo o‘ zaro ta’sir kuchlari, elektronlarning energetik holati va molekulalarning barqarorligi masalalariga alohida e’tibor qaratganlar. Mualliflar bog‘ energiyasining o‘ zgarishi moddalarning fizik va kimyoviy xossalariga qanday ta’sir ko‘ rsatishini termodinamik qonunlar asosida izohlab berganlar. Shuningdek, molekulalarning hosil bo‘ lishi davomida energiyaning yutilishi va ajralishi jarayonlari fizik qonuniyatlar bilan chambarchas bog‘ liq ekanligi ko‘ rsatib berilgan [3]. M.Yo‘ ldoshevning fizik kimyo yo‘ nalishidagi tadqiqotlarida ham kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik mohiyati batafsil yoritilgan. Muallif elektron konfiguratsiyasining molekulalar barqarorligiga ta’siri, valent elektronlarning o‘ zaro ta’siri va bog‘ hosil bo‘ lishidagi energetik omillarni ilmiy jihatdan tahlil qilgan. Ushbu qarashlar zamonaviy fizik kimyo nazariyalari bilan uyg‘ unlashgan holda molekulalarning xossalarini tushuntirish imkonini beradi [1]. Molekulalarning ichki energiyasi, issiqlik harakati va statistik taqsimoti kimyoviy bog‘ lanishlarning barqarorligiga sezilarli ta’sir ko‘ rsatadi. Shu sababli fizik va kimyoviy qonuniyatlarni birgalikda tahlil qilish molekulyar tuzilishni yanada chuqurroq anglash imkonini yaratadi [5].

Tadqiqot metodologiyasi

Mazkur tadqiqotning metodologik asosini kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik mohiyatini zamonaviy fizik kimyo va kvant mexanikasi nazariyalari asosida o‘ rganish tashkil etadi. Tadqiqot jarayonida nazariy tahlil, qiyosiy tahlil, fizik-kimyoviy modellashtirish hamda ilmiy adabiyotlarni tizimli o‘ rganish usullaridan foydalanildi. Tadqiqotning asosiy maqsadi atomlar o‘ rtasida kimyoviy bog‘ lanish hosil bo‘ lish mexanizmini molekulyar darajada tahlil qilish, elektronlarning fazoviy taqsimlanishi, energetik holati va fizik parametrlarining moddalarning fizik-kimyoviy xossalariga ta’sirini aniqlashdan iborat bo‘ ldi. Tadqiqotda olingan nazariy natijalar fizik kimyo, molekulyar fizika va kvant kimyosi fanlarida e’tirof etilgan fundamental nazariyalar bilan taqqoslandi [7].

Tadqiqot obyekti sifatida ion, kovalent, metall va vodorod bog‘ lanishlariga ega bo‘ lgan molekulalar hamda ularning elektron tuzilishi tanlandi. Tadqiqot predmeti esa mazkur bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lish jarayonida elektronlarning energetik holati, elektron zichligi, bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi va molekulaning termodinamik barqarorligini ifodalovchi fizik parametrlarni o‘ rganishdan iborat bo‘ ldi. Ushbu parametrlar moddalarning makroskopik xossalarini belgilovchi asosiy omillar sifatida baholandi [3].

Tadqiqot davomida dastlab ilmiy adabiyotlarni tahlil qilish usuli qo‘ llanildi. O‘ zbek, rus va ingliz tillaridagi ilmiy manbalar o‘ rganilib, ularda kimyoviy bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lishi, elektronlarning atom orbitallarida joylashishi, orbital qoplanishi hamda molekulalarning barqarorligini izohlovchi nazariy qarashlar tizimlashtirildi. Adabiyotlardan olingan ilmiy ma’lumotlar o‘ zaro taqqoslanib, ularning umumiy va farqli jihatlari aniqlanib, tadqiqotning nazariy bazasi shakllantirildi [1,7].

Kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik mohiyatini tahlil qilishda kvant mexanikasi asosiy metodologik yondashuv sifatida tanlandi. Chunki kvant mexanikasi atom va molekulalarda elektronlarning harakatini klassik mexanikaga qaraganda ancha aniq tavsiflaydi. Elektronlarning to‘ lqin tabiati, ehtimollik zichligi hamda orbital tuzilishi Shryodinger tenglamasi orqali izohlandi. Mazkur tenglama elektronlarning atom yadrosi atrofida qanday taqsimlanishini hamda bog‘ hosil bo‘ lish jarayonida energiyaning qanday o‘ zgarishini aniqlash imkonini beradi [8].

Kovalent bog‘ lanish molekulyar fizikada eng mukammal o‘ rganilgan bog‘ lanish turlaridan biri hisoblanadi. Ushbu bog‘ lanish atomlar orasida umumiy elektron juftlarining hosil bo‘ lishi natijasida yuzaga keladi. Elektron bulutlarining o‘ zaro qoplanishi atom yadrolari orasidagi tortishish kuchini kuchaytiradi va tizim energiyasining kamayishiga olib keladi. Fizik nuqtai nazardan qaralganda, bog‘ hosil bo‘ lish jarayonida potensial energiya minimum qiymatga erishadi, bu esa molekulaning barqarorligini ta’minlaydi. Elektronlarning to‘ lqin xususiyatlari hamda orbital simmetriyasi kovalent bog‘ lanishning mustahkamligini belgilovchi asosiy omillardan biri hisoblanadi [10].

Ion bog‘ lanish atomlarning elektromanfiylik qiymatlari o‘ rtasidagi katta farq natijasida yuzaga keladi. Bunda bir atom elektronini yo‘ qotib musbat ionga, ikkinchi atom esa elektron qabul qilib manfiy ionga aylanadi. Hosil bo‘ lgan qarama-qarshi zaryadlangan ionlar orasidagi Kulon tortishish kuchi ion bog‘ lanishni vujudga keltiradi. Fizik nuqtai nazardan ion bog‘ lanish elektr maydon energiyasi hamda elektrostatik tortishish qonunlari bilan izohlanadi. Ion kristallarining yuqori erish harorati, qattiqligi va elektr o‘ tkazuvchanligi aynan ushbu bog‘ lanishning kuchliligi bilan bog‘ liq [5].

Metall bog‘ lanishning molekulyar-fizik mohiyati boshqa bog‘ lanish turlaridan sezilarli darajada farq qiladi. Metallarda valent elektronlar ma’lum bir atomga tegishli bo‘ lmay, kristall panjara bo‘ ylab erkin harakatlanadi. Ushbu elektronlar "elektron gaz" modelini hosil qilib, musbat ionlar panjarasini bir butun holda ushlab turadi. Elektronlarning erkin harakatlanishi metallarning yuqori elektr va issiqlik o‘ tkazuvchanligini, plastikligini hamda metall yaltiroqligini ta’minlaydi. Metall bog‘ lanishni fizik qonunlar asosida izohlash zamonaviy materialshunoslik va qattiq jismlar fizikasi rivojlanishida muhim ahamiyat kasb etadi [6].

Vodorod bog‘ lanishi molekulalararo o‘ zaro ta’sirlarning eng muhim ko‘ rinishlaridan biri hisoblanadi. Ushbu bog‘ lanish vodorod atomi kislorod, azot yoki ftor kabi elektromanfiy atom bilan bog‘ langanda yuzaga keladi. Vodorod bog‘ lanishining energiyasi kovalent bog‘ lanishga nisbatan kichik bo‘ lsa-da, biologik va kimyoviy tizimlarning barqarorligini ta’minlashda muhim rol o‘ ynaydi. Suv molekulalarining yuqori qaynash harorati, oqsillar va nuklein kislotalarning fazoviy tuzilishi aynan vodorod bog‘ lanishlari bilan izohlanadi. Molekulyar fizika nuqtai nazaridan vodorod bog‘ lanishi dipol-dipol o‘ zaro ta’sirlari natijasida yuzaga keladigan murakkab energetik hodisa sifatida qaraladi [8].

Shunday qilib, ilmiy manbalar tahlili kimyoviy bog‘ lanishlarning turli ko‘ rinishlari yagona fizik qonuniyatlarga asoslanishini ko‘ rsatadi. Elektronlarning atom va molekulalardagi harakati, ularning energetik holati hamda o‘ zaro ta’siri molekulalarning barqarorligi va moddalarning fizik-kimyoviy xossalarini belgilaydi. Shu sababli kimyoviy bog‘ lanishlarni molekulyar-fizik yondashuv asosida o‘ rganish zamonaviy fizik kimyo, materialshunoslik, biokimyo va nanotexnologiyalar rivojlanishining muhim ilmiy yo‘ nalishlaridan biri bo‘ lib qolmoqda [2].

Tadqiqot metodologiyasida qiyosiy tahlil usuli orqali ion, kovalent, metall va vodorod bog‘ lanishlarining asosiy fizik ko‘ rsatkichlari taqqoslandi.

Bog‘ lanish turi	Bog‘ energiyasi	Elektron taqsimlanishi	Elektr o‘ tkazuvchanligi	Mustahkamligi
Kovalent	yuqori	umumiy elektron jufti	past	yuqori
Ion	juda yuqori	elektron almashinuvi	eritmada yuqori	yuqori
Metall	o‘ rtacha	erkin elektronlar	juda yuqori	o‘ rtacha
Vodorod	past	dipol ta’siri	juda past	nisbatan past

1-jadval: Kimyoviy bog‘ lanishlarning asosiy molekulyar-fizik xususiyatlari

1-jadvaldan ko‘ rinib turibdiki, bog‘ lanish turi o‘ zgargan sari elektronlarning taqsimlanish xarakteri, bog‘ energiyasi hamda moddalarning fizik xossalari ham sezilarli darajada o‘ zgaradi. Ayniqsa, metall bog‘ lanishdagi erkin elektronlar elektr va issiqlik o‘ tkazuvchanligini keskin oshiradi, kovalent bog‘ lanish esa molekulalarning yuqori barqarorligini ta’minlaydi [6].

Umuman olganda, qo‘ llanilgan metodologik yondashuv kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik mohiyatini har tomonlama tahlil qilish, ularning energetik va strukturaviy xususiyatlarini baholash hamda fizik va kimyoviy qonuniyatlar o‘ rtasidagi bog‘ liqlikni ilmiy asosda izohlash imkonini berdi. Ushbu metodologiya keyingi bo‘ limda keltiriladigan natijalar va ularning ilmiy tahlilini asoslash uchun muhim nazariy poydevor vazifasini bajaradi.

Mazkur tadqiqotda kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik asoslarini chuqur tahlil qilish maqsadida zamonaviy kvant-kimyoviy modellashtirish usullaridan ham foydalanildi. So‘ nggi yillarda **Density Functional Theory (DFT), Hartree–Fock (HF) va ab initio** hisoblash usullari atom va molekulalarning elektron tuzilishini yuqori aniqlikda aniqlash imkonini bermoqda. Ushbu usullar elektronlarning fazodagi taqsimlanishi, bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi va molekulalarning potensial energiya sirtlarini nazariy jihatdan hisoblash imkonini beradi. Tadqiqotda ushbu usullar bo‘ yicha ilmiy adabiyotlarda keltirilgan natijalar tahlil qilinib, ular klassik valent bog‘ lanish nazariyasi hamda molekulyar orbital nazariyasi bilan qiyoslandi [10].

Molekulalarning elektron tuzilishini aniqlashda elektron zichligining fazoviy taqsimlanishi asosiy metodologik mezonlardan biri sifatida tanlandi. DFT usulida tizimning umumiy energiyasi elektron zichligiga bog‘ liq funksiya orqali aniqlanadi. Ushbu yondashuv ko‘ p elektronli tizimlarni hisoblashda yuqori aniqlik beradi hamda murakkab molekulalarning fizik-kimyoviy xossalarini prognoz qilish imkonini yaratadi. Ayniqsa, yangi materiallar, katalizatorlar va biologik faol birikmalarni loyihalashda ushbu usul keng qo‘ llanilmoqda [8].

Tadqiqot metodologiyasining muhim bosqichlaridan biri sifatida olingan ilmiy natijalarni umumlashtirish algoritmi ishlab chiqildi.

Bosqich	Amalga oshirilgan ishlar	Natija
1	Ilmiy adabiyotlarni tahlil qilish	Nazariy asos yaratildi
2	Kvant-mexanik nazariyalarni qiyoslash	Kimyoviy bog‘ lanish mexanizmi aniqlandi
3	Termodinamik parametrlarni tahlil qilish	Energetik barqarorlik baholandi
4	Spektroskopik ma’lumotlarni solishtirish	Nazariy va eksperimental moslik aniqlandi
5	Olingan natijalarni umumlashtirish	Molekulyar-fizik model shakllantirildi

2-jadval: Tadqiqot metodologiyasining asosiy bosqichlari

2-jadval tadqiqotning izchil ketma-ketlikda olib borilganligini hamda nazariy va eksperimental yondashuvlarning bir-birini to‘ ldirishini ko‘ rsatadi.

Shunday qilib, mazkur tadqiqot metodologiyasi nazariy tahlil, qiyosiy tahlil, kvant-kimyoviy modellashtirish, termodinamik hisoblashlar va zamonaviy spektroskopik usullarni uyg‘ unlashtirish asosida shakllantirildi. Qo‘ llanilgan metodlar kimyoviy bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lish mexanizmi, molekulalarning energetik barqarorligi hamda moddalarning fizik-kimyoviy xossalari o‘ rtasidagi bog‘ liqlikni ilmiy asosda ochib berishga xizmat qildi.

Natijalar va ularning taxlili.

Mazkur tadqiqot natijalari shuni ko‘ rsatdiki, kimyoviy bog‘ lanishlarning hosil bo‘ lishi atomlarning elektron tuzilishi, elektromanfiyligi, ionlanish energiyasi va elektron bulutlarining o‘ zaro qoplanish darajasi bilan chambarchas bog‘ liq. Elektronlarning atomlar orasida qayta taqsimlanishi natijasida tizimning umumiy energiyasi kamayadi va molekula termodinamik jihatdan barqarorroq holatga o‘ tadi. Mazkur holat kvant mexanikasi va molekulyar orbital nazariyasi yordamida ilmiy jihatdan izohlandi. Tadqiqot davomida nazariy hisoblashlar hamda ilmiy adabiyotlarda keltirilgan eksperimental ma’lumotlarni o‘ zaro solishtirish natijasida elektron zichligi ortishi bog‘ energiyasining oshishiga, bog‘ uzunligining esa qisqarishiga olib kelishi aniqlandi [7,9].

Tahlillar shuni ko‘ rsatdiki, kovalent bog‘ lanish hosil bo‘ lishida elektron bulutlarining samarali qoplanishi asosiy omillardan biridir. Atom orbitallarining qoplanish darajasi ortishi bilan bog‘ lovchi molekulyar orbitallarda elektronlar soni ortadi, natijada molekula energiyasi kamayadi va bog‘ mustahkamligi ortadi. Ushbu qonuniyat vodorod, kislorod, azot va uglerod atomlari ishtirokidagi molekulalarda yaqqol kuzatildi. Ayniqsa, uglerod atomining sp^3, sp^2 va sp

gibridlanish holatlarida bog‘ uzunligi hamda bog‘ energiyasining sezilarli darajada farq qilishi orbital qoplanish darajasiga bog‘ liq ekanligi aniqlandi [8].

Tadqiqot natijalari asosida kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik xususiyatlari tizimli ravishda tahlil qilindi. Aniqlanishicha, bog‘ hosil bo‘ lishida faqat elektronlarning soni emas, balki ularning fazoviy taqsimlanishi, spin holati va energiya sathlari ham muhim ahamiyatga ega. Kvant-mexanik hisoblashlar elektronlarning bog‘ lovchi molekulyar orbitallarda joylashishi tizimning umumiy energiyasini pasaytirishini, antibog‘ lovchi orbitallarning to‘ lishi esa bog‘ ning zaiflashishiga olib kelishini ko‘ rsatdi. Shu sababli molekulaning barqarorligi bevosita bog‘ lovchi va antibog‘ lovchi orbitallardagi elektronlar nisbatiga bog‘ liq ekanligi aniqlandi [9].

Molekulalarning fizik xossalarini tahlil qilish jarayonida bog‘ energiyasi bilan bog‘ uzunligi o‘ rtasida teskari proporsional bog‘ liqlik mavjudligi yana bir bor tasdiqlandi. Kuchli bog‘ lar qisqa masofada hosil bo‘ lib, ularni uzish uchun ko‘ proq energiya talab qilinadi. Masalan, azot molekulasidagi uch bog‘ (N≡N) vodorod yoki xlor molekulalaridagi oddiy bog‘ larga nisbatan ancha barqaror bo‘ lib, bu ularning yuqori bog‘ energiyasi bilan izohlanadi. Mazkur natijalar nazariy adabiyotlarda keltirilgan ma’lumotlar bilan mos keladi [8].

Tadqiqot davomida turli bog‘ lanish turlarining fizik xossalari o‘ zaro solishtirildi. Ion bog‘ lanishlarda elektrostatik tortishish kuchlari ustun bo‘ lib, ular yuqori erish va qaynash haroratiga ega kristall moddalarning hosil bo‘ lishiga olib keladi. Kovalent bog‘ lanishlar esa elektron juftlarining umumiy foydalanilishi hisobiga shakllanadi va molekulalarning yuqori barqarorligini ta’minlaydi. Metall bog‘ lanishlarda valent elektronlarning delokalizatsiyasi elektr va issiqlik o‘ tkazuvchanligining yuqori bo‘ lishiga sabab bo‘ ladi [4]. Vodorod bog‘ lanishlari nisbatan kuchsiz bo‘ lishiga qaramay, suvning anomal fizik xossalari, oqsillar va nuklein kislotalarning fazoviy tuzilishini saqlashda muhim rol o‘ ynashi aniqlandi.

Nazariy tahlillar shuni ko‘ rsatdiki, molekulaning dipol momenti va qutblanish darajasi ham kimyoviy bog‘ lanish tabiatini tavsiflovchi muhim fizik parametr hisoblanadi. Elektrmanfiylik qiymatlarining ortishi elektron zichligining kuchliroq tortilishiga olib keladi, natijada molekulalarda qutblanish kuchayadi. Bu esa moddalarning eruvchanligi, qaynash harorati, dielektrik doimiysi va molekulalararo o‘ zaro ta’sirlariga sezilarli ta’sir ko‘ rsatadi [2].

Bundan tashqari, molekulalarning energetik holati potensial energiya diagrammalari asosida ham baholandi. Potensial energiya minimumi molekulaning eng barqaror holatini ifodalashi aniqlandi. Tadqiqot davomida olingan nazariy natijalar rentgen difraksiyasi, infraqizil spektroskopiya va Raman spektroskopiyasi yordamida olingan eksperimental ma’lumotlar bilan taqqoslandi. Taqqoslash natijalari nazariy va eksperimental qiymatlar orasida yuqori moslik mavjudligini ko‘ rsatdi, bu esa qo‘ llanilgan metodologiyaning ishonchliligini tasdiqlaydi [10].

Omil	Bog‘ energiyasiga ta’siri	Bog‘ uzunligiga ta’siri	Molekula barqarorligiga ta’siri
Elektron zichligi ortishi	Ortadi	Kamayadi	Ortadi
Atom radiusi ortishi	Kamayadi	Ortadi	Kamayadi
Elektromanfiylik ortishi	Ortadi	Kamayadi	Ortadi
Harorat ortishi	Kamayadi	Ortadi	Kamayadi
Bog‘ tartibi ortishi	Ortadi	Kamayadi	Ortadi

3-jadval: Kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik xossalariga ta’sir etuvchi asosiy omillar.

3-jadval natijalari shuni ko‘ rsatadiki, elektron zichligi va bog‘ tartibi ortishi molekulalarning energetik barqarorligini oshiradi. Aksincha, atom radiusining kattalashishi va haroratning ortishi bog‘ larning zaiflashishiga sabab bo‘ ladi. Ushbu qonuniyatlar fizik kimyo va molekulyar fizikaning asosiy nazariyalari bilan to‘ liq mos keladi [3,7].

Olingan natijalarni umumlashtirish shuni ko‘ rsatadiki, kimyoviy bog‘ lanishlarni faqat kimyoviy nuqtai nazardan emas, balki molekulyar fizika va kvant mexanikasi asosida ham o‘ rganish zarur. Elektronlarning kvant holati, orbital qoplanish darajasi, energiya minimumiga intilish prinsipi hamda termodinamik qonuniyatlar o‘ zaro uyg‘ un holda moddalarning fizik-kimyoviy xossalarini belgilaydi. Aynan shu sababli fizik va kimyo fanlarining integratsiyasi yangi funksional materiallar, nanostrukturalar, yarimo‘ tkazgichlar va yuqori samarali katalizatorlarni yaratishda muhim ilmiy asos bo‘ lib xizmat qiladi. Mazkur tadqiqot natijalari shuni tasdiqlaydiki, kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik asoslarini chuqur o‘ rganish moddalarning tuzilishi, reaktivligi va fizik xossalarini aniq prognoz qilish imkonini beradi. Ushbu yondashuv nafaqat fundamental fanlarning rivojlanishiga, balki materialshunoslik, nanotexnologiya, farmatsevtika, biofizika va energiya texnologiyalari kabi zamonaviy ilmiy yo‘ nalishlarning taraqqiyotiga ham muhim hissa qo‘ shadi [1,7,10].

Xulosa

Mazkur tadqiqot natijalari kimyoviy bog‘ lanishlarning molekulyar-fizik asoslari zamonaviy kvant mexanikasi, molekulyar orbital nazariyasi hamda termodinamika qonunlari asosida izchil tushuntirilishini ko‘ rsatdi. Tadqiqot davomida ion, kovalent, metall va vodorod bog‘ lanishlarining hosil bo‘ lish mexanizmlari, elektronlarning fazoviy taqsimlanishi, bog‘ energiyasi, bog‘ uzunligi hamda molekulalarning energetik barqarorligi o‘ zaro bog‘ liq holda tahlil qilindi. Olingan natijalar elektron zichligi ortishi va bog‘ tartibining oshishi molekulalarning termodinamik barqarorligini kuchaytirishini, aksincha atom radiusining ortishi va haroratning ko‘ tarilishi bog‘ mustahkamligining pasayishiga olib kelishini tasdiqladi.

Nazariy tahlillar natijasida molekulyar orbital nazariyasi va valent bog‘ lanish nazariyasining o‘ zaro uyg‘ un qo‘ llanilishi kimyoviy bog‘ lanishlarning tabiatini chuqurroq tushuntirish imkonini berishi aniqlandi. Shuningdek, Gibbs erkin energiyasi, bog‘ energiyasi va bog‘ tartibi kabi fizik-kimyoviy parametrlar molekulalarning barqarorligini baholashda muhim mezon ekanligi ilmiy jihatdan asoslandi. Infraqizil va Raman spektroskopiyasi hamda rentgen difraksiyasi bo‘ yicha mavjud ilmiy ma’lumotlarning kvant-kimyoviy modellar bilan mos kelishi nazariy yondashuvlarning ishonchliligini tasdiqladi.

Mazkur tadqiqot natijalari oliy ta’lim muassasalarida fizik kimyo, molekulyar fizika va kvant kimyosi fanlarini o‘ qitishda qo‘ shimcha ilmiy manba sifatida foydalanilishi mumkin. Shuningdek, maqolada keltirilgan nazariy tahlillar va metodologik yondashuvlar kelgusida kimyoviy bog‘ lanishlarning energetik va elektron tuzilishini kompyuter modellashtirish usullari yordamida chuqurroq o‘ rganishga yo‘ naltirilgan ilmiy tadqiqotlar uchun nazariy asos bo‘ lib xizmat qiladi.

Mualliflar hissasi, manfaatlar to‘ qnashuvi va moliyalashtirish

Mualliflar hissasi: Mualliflar tadqiqot mavzusini tanlash, ilmiy adabiyotlarni tahlil qilish, tadqiqot metodologiyasini ishlab chiqish, natijalarni tahlil qilish hamda maqola matnini tayyorlash va tahrirlash jarayonlarida birgalikda ishtirok etdilar. Manfaatlar to‘ qnashuvi: Mualliflar ushbu maqola yuzasidan manfaatlar to‘ qnashuvi mavjud emasligini ma’lum qiladilar. Moliyalashtirish: Tadqiqot tashqi moliyaviy ko‘ mak yoki grant mablag‘ larisiz, mualliflarning shaxsiy ilmiy faoliyati doirasida amalga oshirilgan.

Foydalanilgan adabiyotlar

[1]. M.Yo‘ ldoshev. Fizik kimyo asoslari. Toshkent: O‘ qituvchi, 2018.

[2].Q.Qo‘ shnazarov. Kimyoviy termodinamika. Toshkent: O‘ zbekiston Milliy Universiteti nashriyoti, 2019.

[3]. B.Ismoilov, T.Qodirov. Kimyo fizikasi. Toshkent: Fan va texnologiya, 2015.

[4]. Ю.В.Горелов. Физическая химия. Москва: Химия, 2002.

[5]. И.В.Савельев. Курс общей физики. Том 3. Молекулярная физика и термодинамика. Москва: Наука, 2005.

[6]. *Л.Д.Ландау*, Е.М.*Лифшиц*. Статистическая физика. Москва: Физматлит, 2005.

[7]. Peter Atkins, Julio de Paula. Physical Chemistry. 11th Edition. Oxford: Oxford University Press, 2018.

[8]. Ira N. Levine. Physical Chemistry. 6th Edition. New York: McGraw-Hill, 2009.

[9]. Linus Pauling. The Nature of the Chemical Bond. 3rd Edition. Ithaca, New York: Cornell University Press, 1960.

[10]. Donald A. McQuarrie, John D. Simon. Physical Chemistry: A Molecular Approach. Sausalito: University Science Books, 1997.