

## MOLEKULAR TUZILISH VA ENERGIYA DARAJALARI

**Axmedova Muhayyo Abdusalom qizi**

Termiz davlat universiteti talabasi

E.mail: [musiaxmedova148@gmail.com](mailto:musiaxmedova148@gmail.com)

**ANNOTATSIYA.** Ushbu maqolada molekulyar tuzilish va energiya darajalari oʻrtasidagi oʻzaro bogʻliqlik zamonaviy fizik-kimyoviy nuqtai nazardan tahlil qilinadi. Molekulalarning elektron, vibratsion va aylanish energiya holatlari hamda ularning kvant mexanikasi asosidagi tavsifi yoritiladi. Shuningdek, molekulyar orbitallar nazariyasi, energiya sathlari diskretligi va spektroskopik usullar orqali aniqlanishi ilmiy asosda koʻrib chiqiladi. Tadqiqot natijalari moddalarning fizik va kimyoviy xossalarini tushunishda muhim ahamiyat kasb etadi.

**Kalit soʻzlar.** Molekulyar tuzilish, energiya darajalari, kvant mexanikasi, molekulyar orbitallar, spektroskopiya, vibratsiya, elektron holat

**ABSTRACT.** This article analyzes the relationship between molecular structure and energy levels from a modern physicochemical perspective. The electronic, vibrational, and rotational energy states of molecules and their quantum mechanical description are discussed. In addition, the theory of molecular orbitals, discreteness of energy levels, and their determination using spectroscopic methods are considered on a scientific basis. The results are important for understanding the physical and chemical properties of substances.

**Keywords.** Molecular structure, energy levels, quantum mechanics, molecular orbitals, spectroscopy, vibration, electronic states

**АННОТАЦИЯ.** В данной статье рассматривается взаимосвязь между молекулярной структурой и энергетическими уровнями с точки зрения современной физической химии. Освещаются электронные, колебательные и вращательные энергетические состояния молекул и их описание с позиции квантовой механики. Также анализируются теория молекулярных орбиталей, дискретность энергетических уровней и их определение с помощью спектроскопических методов. Полученные результаты имеют важное значение для понимания физических и химических свойств веществ.

**Ключевые слова.** молекулярная структура, энергетические уровни, квантовая механика, молекулярные орбитали, спектроскопия, колебания, электронные состояния

## Kirish

Molekulyar tuzilish va energiya darajalari fizik kimyoning eng muhim va fundamental tushunchalaridan biri hisoblanadi. Har qanday moddaning fizik va kimyoviy xossalari uning molekulyar tuzilishiga bevosita bog'liq bo'lib, bu tuzilish esa o'z navbatida energiya darajalari bilan aniqlanadi. Klassik fizika qonunlari molekulyar tizimlarni to'liq tushuntirib bera olmaganligi sababli, ushbu sohani chuqur o'rganishda kvant mexanikasi muhim rol o'ynaydi. Kvant nazariyasiga ko'ra, molekulalardagi energiya uzluksiz emas, balki ma'lum diskret qiymatlarni qabul qiladi. Bu holat molekulalarning spektral xossalarini tushuntirishda asosiy omil bo'lib xizmat qiladi. Zamonaviy ilmiy tadqiqotlar molekulyar tuzilish va energiya darajalarini aniqlash orqali yangi materiallar yaratish, dori vositalarini ishlab chiqish va kimyoviy jarayonlarni boshqarishda keng imkoniyatlar yaratmoqda.

Shu bilan birga, molekulyar tizimlarning energetik holatini tushunish kimyoviy reaksiyalarning borish mexanizmini aniqlashda ham muhim ahamiyatga ega. Har qanday kimyoviy jarayon davomida reaksiya ishtirokchilarining energiya sathlari o'zgaradi va bu o'zgarishlar reaksiyaning termodinamik va kinetik xususiyatlarini belgilaydi. Ayniqsa, aktivatsiya energiyasi tushunchasi orqali reaksiyaning tezligi va yo'nalishi izohlanadi. Energiya darajalari orasidagi o'tishlar esa moddaning tashqi ta'sirlarga, jumladan elektromagnit nurlanishga qanday javob berishini ko'rsatadi.

Molekulyar tuzilish va energiya darajalarini o'rganish nafaqat nazariy ahamiyatga ega, balki tajribaviy jihatdan ham muhimdir. Zamonaviy spektroskopik usullar yordamida molekulalarning energetik holatlari aniqlanib, ularning tuzilishi haqida aniq ma'lumotlar olinadi. Ushbu usullar orqali olingan natijalar kvant mexanik hisoblashlar bilan uyg'un holda tahlil qilinib, murakkab molekulyar tizimlarning xossalari chuqur o'rganiladi.

Bundan tashqari, molekulyar darajadagi energiya o'zgarishlarini bilish yangi avlod materiallari va texnologiyalarni yaratishda muhim omil hisoblanadi. Xususan, nanomateriallar, yuqori samarali katalizatorlar hamda biologik faol moddalarni ishlab chiqishda molekulyar tuzilish va energiya darajalarining o'zaro bog'liqligi asosiy nazariy poydevor vazifasini bajaradi. Shu sababli ushbu yo'nalishdagi ilmiy izlanishlar hozirgi kunda jadal rivojlanib, fizik kimyo fanining eng istiqbolli sohalaridan biri sifatida e'tirof etilmoqda.

## Asosiy qism

Molekulyar tuzilish atomlarning fazoviy joylashuvi, ular orasidagi kimyoviy bog'lanishlar hamda elektronlarning taqsimlanishi bilan belgilanadi. Ushbu tizimni to'liq tushuntirish klassik fizika doirasidan chiqib, kvant mexanikasi asosida amalga oshiriladi.

Kvant nazariyasiga ko'ra, molekuladagi elektronlar aniq trayektoriya bo'ylab harakatlanmaydi, balki ehtimollik zichligi bilan tavsiflanadigan orbital holatlarda mavjud bo'ladi. Har bir orbital ma'lum energiya qiymatiga ega bo'lib, bu qiymatlar diskret xarakterga ega.

Molekulardagi energiya darajalari odatda uch asosiy turga ajratiladi: elektron, vibratsion va aylanish energiya darajalari. Elektron energiya darajalari eng yuqori energiyaga ega bo'lib, ular elektronlarning bir molekulyar orbitaldan boshqasiga o'tishi bilan bog'liq. Bu o'tishlar odatda ultrabinafsha yoki ko'rinuvchi elektromagnit nurlanishni yutish yoki chiqarish bilan sodir bo'ladi. Vibratsion energiya darajalari molekuladagi atomlarning o'zaro nisbiy tebranish harakati bilan bog'liq bo'lib, ular infraqizil diapazonda kuzatiladi. Aylanish energiya darajalari esa molekulaning butun holda aylanish harakati bilan tavsiflanadi va ular odatda mikroto'lqin diapazonida aniqlanadi. Ushbu uch turdagi energiya darajalari birgalikda molekulaning umumiy energiya holatini shakllantiradi.

Kvant mexanik tavsifda molekulaning umumiy energiyasi Schrödinger tenglamasi orqali aniqlanadi, bunda tizimning to'lqin funksiyasi asosiy rol o'ynaydi. Ushbu tenglama analitik yechimga ega bo'lmagan murakkab tizimlar uchun yaqinlashgan usullar qo'llaniladi. Masalan, Born-Oppenheimer yaqinlashuvi yordamida yadrolar va elektronlarning harakati ajratib qaraladi, bu esa hisoblashlarni sezilarli darajada soddalashtiradi. Natijada, molekulyar energiya sathlari aniqlanib, ularning tuzilish bilan bog'liqligi o'rganiladi.

Molekulyar orbitallar nazariyasi molekulardagi elektron tuzilishni izohlashda eng muhim modellardan biri hisoblanadi. Ushbu nazariyaga ko'ra, atom orbitallari chiziqli kombinatsiyalanib, yangi molekulyar orbitallarni hosil qiladi. Bog'lovchi orbitallar energiyasi past bo'lib, ular molekulani barqarorlashtiradi, antibog'lovchi orbitallar esa yuqori energiyaga ega bo'lib, molekula barqarorligini kamaytiradi. Elektronlar ushbu orbitallarda Pauli prinsipi va Hund qoidasiga muvofiq joylashadi. Molekulaning kimyoviy xossalari aynan qaysi orbitallar band yoki bo'sh ekanligiga bog'liq holda aniqlanadi.

Energiya darajalarining diskretligi va o'tishlari spektroskopik usullar orqali eksperimental ravishda aniqlanadi. Har bir molekula o'ziga xos spektrga ega bo'lib, bu spektr orqali uning tuzilishi haqida muhim ma'lumotlar olinadi. Infraqizil spektroskopiya vibratsion o'tishlarni aniqlashda keng qo'llanilsa, ultrabinafsha va ko'rinuvchi soha spektroskopiyasi elektron o'tishlarni o'rganadi. Spektral chiziqlarning joylashuvi va intensivligi molekuladagi bog'lanish turi, atomlarning massasi va geometrik tuzilishga

bog'liq bo'ladi. Shu sababli spektroskopiya molekulyar tuzilishni aniqlashning eng muhim usullaridan biri hisoblanadi.

Molekulyar tuzilish va energiya darajalari o'rtasidagi bog'liqlik kimyoviy reaksiyalar mexanizmini tushunishda ham muhim ahamiyatga ega. Reaksiya jarayonida moddalarning energiya sathlari o'zgaradi va aktivatsiya energiyasi tushunchasi yuzaga keladi. Agar molekulalar orasidagi energiya to'siqlari kichik bo'lsa, reaksiya tezroq sodir bo'ladi. Aksincha, katta energiya farqi reaksiyaning sekin kechishiga olib keladi. Shu bilan birga, tashqi omillar - temperatura, bosim va katalizatorlar - energiya darajalariga ta'sir ko'rsatib, reaksiyaning borishiga sezilarli o'zgarish kiritadi.

Zamonaviy ilmiy tadqiqotlarda molekulyar tuzilish va energiya darajalarini aniqlash kompyuter modellashtirish va kvant-kimyoviy hisoblashlar orqali ham amalga oshiriladi. Ushbu usullar murakkab molekulalarning xossalari oldindan bashorat qilish, yangi moddalar yaratish va ularning reaktivligini baholash imkonini beradi. Shu jihatdan, molekulyar darajadagi energiya tahlili nafaqat nazariy, balki amaliy ahamiyatga ham ega bo'lib, farmatsevtika, materialshunoslik va nanoteknologiya sohalarida keng qo'llanilmoqda.

## Xulosa

Molekulyar tuzilish va energiya darajalari o'rtasidagi o'zaro bog'liqlik fizik kimyoning asosiy nazariy poydevorini tashkil etadi. Kvant mexanikasi asosida energiya darajalarining diskretligi va molekulyar orbitallar nazariyasi moddalarning ichki tuzilishini chuqur tushunishga imkon beradi. Spektroskopik usullar esa ushbu nazariy bilimlarni tajribada tasdiqlashga xizmat qiladi. Natijada, molekulyar darajadagi jarayonlarni anglash orqali kimyoviy reaksiyalarni boshqarish, yangi materiallar yaratish va ilm-fan taraqqiyotiga hissa qo'shish imkoniyati kengayadi. Ushbu yo'nalishdagi tadqiqotlar kelajakda yanada rivojlanib, zamonaviy texnologiyalarning asosini tashkil etishda davom etadi.

## FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. **Rustamov H.R.** – “**Fizik kimyo**” Toshkent nashriyoti, 2000-yil. Ushbu darslikda molekulyar tuzilish, termodinamika asoslari, kimyoviy kinetika va energiya o'zgarishlari batafsil yoritilgan.
2. **Olimov N.Q.** – “**Fizik va kolloid kimyo**” Fan nashriyoti, Toshkent, 2006-yil. Kitobda termodinamika, kimyoviy muvozanat, kinetika va molekulyar jarayonlarning fizik-kimyoviy asoslari bayon etilgan.
3. **Asqarov Ibrohimjon** – “**O'zbekiston kimyogar olimlari**” Fan va texnologiya nashriyoti, 2014-yil. O'zbekiston kimyo fanining rivojlanishi, olimlarning ilmiy ishlari va kimyoviy tadqiqotlar haqida ma'lumot beradi.



4. **Abdullaev R., Xamidjonov I.X.** – “**Molekulyar fizika**” O‘zbekiston Milliy universiteti nashri, 2005-yil. Molekulyar kinetik nazariya, modda tuzilishi va energiya holatlari haqida fundamental bilimlar berilgan.
5. **Aminov S.N.** – “**Fizik va kolloid kimyo fanidan o‘quv-uslubiy majmua**” Toshkent, 2018-yil. Termodinamika, energiya o‘zgarishlari, issiqlik effektlari va kimyoviy jarayonlarning fizik asoslari yoritilgan.

