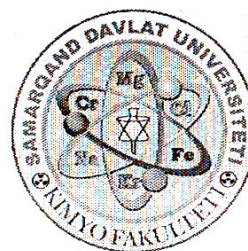


O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY TA'LIM,
FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI

SHAROF RASHIDOV NOMIDAGI
SAMARQAND DAVLAT
UNIVERSITETI



Ro'yxatga olindi:

№ BD-60530100 –KKMB-206

2023 yil “09” 27

“TASDIQLAYMAN”

SamDU rektori:

R.I.Xalmuradov

2023 yil “ ”

KVANT MEXANIKASI VA KVANT KIMYO

FAN DASTURI

Bilim sohasi:	500000 – Tabiiy fanlar
Ta'lim sohasi:	530000- Fizikaga oid fanlar
Ta'lim yo'nalishi:	60530100 – Kimyo (turlar bo'yicha)

Fan/modul kodi KKMB-206		O'quv yili 2024-2025	Semestr 3	ECTS – Kreditlar 6	
Fan/modul turi Majburiy		Ta'lim tili O'zbek		Haftadagi dars soatlari 4	
1.	Fan nomi		Auditoriya mashg'ulotlari (soat)	Mustaqil ta'lim (soat)	Umumiy juklama (soat)
	Kvant mexanikasi va kvant kimyo		60	120	180
2.	I. Fanning mazmuni Fanni o'qitishdan maqsad – talabalar tomonidan kvant mexanikasining kimyoviy masalalarni echishga tegishli qismlarini, shuningdek kvant kimyoning nazariy va hisoblash usullarini o'rganish; Asosiy e'tibor matematik apparatga emas, balki kvant mexanika va kvant kimyoning tushunchalarini fizikaviy mohiyatini ochishga (tushuntirishga) va kvant kimyoning hisoblash usullarini amalda egallashga qaratiladi. Fanning vazifasi – - talabalarda kvant kimyosining “tilini” va o'ziga xos atamalarini tushunishni shakllantirish; - talabalarni kvant mexanikasining kimyoviy masalalarni echishga tegishli qismlarini o'rgatish; - kvant kimyoning nazariy va hisoblash usullarini egallashda talabalarga yordam berish; II. Asosiy nazariy qism (ma'ruza mashg'ulotlari) II.I. Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi: Kvant mexanikaning paydo bo'lish sabablari. M.Plank tomonidan mutlaq qora jism nurlanishi spektridagi intensivlikning taqsimlanishini tushuntirilishi. Fotoeffekt hodisasini A.Eynshteyn tomonidan tushuntirilishi. Bor nazariyasi. Frank-Gers tajribasi. De Broylning gipotezasi va uning tajribada tasdiqlanishi. Kvant mexanikasi kimyo fanining nazariy asosi ekanligi. Kvant mexanikasi va kvant kimyosining predmeti va vazifalari. Kvant mexanikasining matematik apparati. Klassik fizikada fizikaviy kattaliklarni bayon qilish. Operator tushunchasi. Operatorning xossalari. Operatorlarning yig'indisi va ko'paytmasi. CHiziqli va ermit operatorlar. Kommutatsiyalanuvchi va kommtatsiyalanmaydigan operatorlar. Operatorlarning xarakteristik qiymatlari va xarakteristik funksiyalari. Operatorlarning xarakteristik qiymatlari va xarakteristik funksiyalarining xossalari. Ermitlik xossasi, ortogonallik xossasi, xususiy funksiyalarning chiziqli kombinasiyasi, kommutatsiyalanish xossasi, ixtiyoriy				

funksiyani xususiy funksiyalarning qatori ko'rinishi shaklida ifodalash.

Fizikaviy kattaliklarni kvant mexanikasida ifodalash. Koordinata, impuls, impuls momentlarining, kinetik va potensial energiyalarning operatorlari. Zarracha va zarrachalar sistemasi uchun Gamilton operatorlari.

Kvant mexanikasining asosiy postulatlar. To'liq (holat) funksiyasi va uning asosiy xossalari. To'liq funksiyasining statistik-ehtimoliyat talqini. O'lchash natijalarining ehtimoliyatini hisoblash, kuzatiladigan qiymatlarning o'rtachasi. Zarrachalarning fazoda taqsimlanish zichligining ehtimoli.

Zarrachaning spini. Spinning operatori. Elektron spini to'g'risida gipoteza. Elementar zarrachalarning spini. Elektron spinining matematik bayoni. Spinning operatorlari va funksiyalari. Spin-orital ta'sirning mohiyati.

Operator tenglamaning matrisa shakli. Operatorlarni matrisa shaklida ifodalash. Matrisa shaklidagi operatorlarning xossalari. Matrisa ko'rinishdagi operator tenglama.

Geyzenbergning noaniqliklar munosabati. Munosabatni matematik ifodasi. Zarracha koordinatasi va unga qo'shma bo'lgan impulsning tashkil etuvchisini bir vaqtda o'lchash. Noaniqliklar munosabatining xulosalari.

SHredinger tenglamasi. Vaqtga bog'liq bo'lgan SHredinger tenglamasi. Holatning vaqtga bog'liq ravishda o'zgarishi. Statsionar holatlar. Statsionar holatlar uchun SHredinger tenglamasi. Diskret va uzluksiz spektrlar.

Vodorod atomining kvant mexanik nazariyasi. Vodorod va vodorodga o'xshash ionlar uchun SHredinger tenglamasi. Vodorodga o'xshash atomlar uchun SHredinger tenglamasini echish. Sferik koordinatlar sistemasiga o'tish va o'zgaruvchilarni ajratish. Kvant sonlari. Atom orbitalari.

Vodorod va unga o'xshash atomlarning asosiy holati, energiyasi va elektron zichliklarini taqsimlanishi. To'liq funksiyasining radial va burchak tashkil etuvchilari ularni grafik ko'rinishda tasvirlash.

Bir xil zarrachalar sistemasi. Elektronlar sistemasi uchun to'liq funksiyasining antisimmetrik bo'lishi. Elektronlar sistemasining to'liq funksiyasini aniqlovchi ko'rinishda tasvirlash. Geliy atomi ko'p elektronlik sistema uchun kvantmexanik masalaga oddiy misol sifatida. Singlet va triplet holatlar.

Kvantmexanik masalalarni echishning taqribiy usullari. Virojdeniya bo'lgan va bo'lmagandagi stasionar holatlar uchun g'layonlanish nazariyasi. Kvant mexanikaning variasion prinsipi va Ritsning variasion usuli.

Molekulalar uchun SHredinger tenglamasi. Born-Oppengeymer yaqinlashuvi. SHredinger tenglamasini variasion usul bilan echishning qisqacha mohiyati. Molekula tuzilish nazariyasining ikkita asosiy usuli. Valent bog'lar va

molekulyar orbitallar usullari.

Molekulyar orbitallar usuli (MO usul). Molekulyar orbitallar usulining asosiy g'oyalari. Molekulyar orbitalni atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasi ko'rinishida ifodalash. MO AOCHK usulida molekulyar orbitallarni taqribiy bayon qilish. MO AOCHK usulida H_2^+ molekula. Ushbu molekulyar ionning energiyasi va to'liq funksiyasini variatsion usul bilan hisoblash.

MO AOCHK usulida H_2^+ vodorod molekulasining ion. Asosiy holat va potensial egrilik. Kimyoviy bog' hosil bo'lishining fizikaviy sabablari. Ionning itarish holati.

Gomonuklear ikki atomli molekulalarning molekulyar orbitallari. Molekulyar termlar. Ikki atomli molekulalarning elektron konfiguratsiyalari kimyoviy bog'ning xossalari. Davriy sistema birinchi davrining atomlari hosil qilgan gomonuklear molekulalar. Ikkinchi davrning atomlari hosil qilgan gomonuklear molekulalarning elektron konfiguratsiyalari va xossalari. Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi orbitallar. σ - va π -orbitallar. Bog'lamaydigan orbitallar. Ikki atomli molekulalar uchun molekulyar orbitallarning korrelyatsion diagrammalari. Ikki atomli molekulalarda elektron zichlikning taqsimlanishi.

III. Amaliy mashg'ulotlar bo'yicha ko'rsatma va tavsiyalar.

Amaliy mashg'ulotlar uchun quyidagi mavzular tavsiya etiladi:

Operatorlarning funksiyaga ta'siri. Kommutativlik xossasiga ega bo'lgan va ega bo'lmagan operatorlar. Chiziqli va ermit operatorlar mavzulariga tegishli masala va misollar echish. Operatorlarning xarakteristik qiymatlari va xarakteristik funksiyalari va boshqa mavzularga tegishli masala va misollar echish.

Bir o'lchamli potensial "yashik"da ilgarilanma harakat qilayotgan mikrozarracha uchun tuzilgan Shredinger tenglamasini echish.

Garmonik ossillyatorga tegishli masalani echish.

Vodorodga o'xshash atomlar uchun Shredinger tenglamasini echish (uchta tenglamadan bittasi echiladi). Vodorodga o'xshash atomlarning qo'zg'algan holatlari.

Geliy atomi. Geliy atomiga g'alayonlanish nazariyasini qo'llash. Asosiy holat. Variatsion prinsip. Ekranlanganlik. Elektronlar korrelyatsiyasini hisobga olish. Geliy atomining asosiy va qo'zg'algan holatlarini ifodalovchi determinant shaklidagi to'liq funksiyalarini qurish.

Xartri-Fok usuli (o'ziga muvofiqlashgan maydon, O'MM). Orbitallarni aniqlovchi tenglama. Orbitallarning energiyasi va ularning to'liq energiya bilan bog'liqligi. Kupmans teoremasi. Xartri-Fok usulini qo'llash chegaralari.

Kvant kimyosining hisoblash usullari. Atom orbitallarining keng tarqalgan bazis funksiyalarining turlari: sleyter va gaus tipidagi orbitallar. MO AOCHK O'MM usuli (Xartri-Fok-Rutan). Hisoblash usullarining klassifikatsiyasi (ierarxiyasi). Noempirik va yarimempirik usullar. Xyukkelning kengaytirilgan usuli. Differensial qoplanishni to'liq inkor qilish. Turli usullarning imkoniyatlarini taqqoslash orqali analiz qilish.

Orbitallarning gibridlanishi va molekulaning geometriyasi. Geteronuklear ikki atomli molekularlar. Kimyoviy bog'ning qutblanganligi.

Ko'p atomli molekularlar. Ko'p atomli molekularlarning xossalari. Potensial sirt. Turg'un konfiguratsiya. Molekulaning simmetriyasi.

H_2^+ molekulasiining energiyasini va to'liq funksiyasini variatsion usulda hisoblash.

Molekulyar orbitallar usulida ko'p atomli molekularlarni bayon qilish. Delokallangan va lokallangan (ekvivalent) molekulyar orbitallar. Molekulyar orbitallarning gibridlanishi. Yo'nalgan valentliklar va ko'p atomli molekularlarning xossalarini additivligi.

Qo'sh bog'li sistemalar uchun Xyukkel yaqinlashuvi. Xyukkelning molekulyar orbitallar (XMO) usuli. Atomdagi elektron zichlik va zaryadlar. Kimyoviy bog'ning tartibi. Erkin valentlik indeksi. Molekulyar diagrammalar.

Xyukkelning molekulyar orbitallar (XMO) usulini polienlarga qo'llash.

Xyukkel usuli bilan oddiy sistemalarni hisoblash. Siklobutadien. Xyukkelning molekulyar orbitallar (XMO) usulini aromatik birikmalarga qo'llash, benzol.

Aromatiklik xossasi va Xyukkelning $4n+2$ qoidasi. MOX usulida geteroatomni hisobga olish. Bog'larning tartibi, π -elektron zichlik va erkin valentlik indeksleri.

Gomoyadrolik va geteroyadrolik ikki atomli molekularlarning elektron tuzilishi.

Kvant-kimyoviy modellashtirish tadqiqot usuli sifatida. Kvant-kimyoviy hisoblashlarni amalga oshirishdagi muammolar. Kvant-kimyoviy dasturlar. GAUSSIAN, GAMESS, HYPERCHEM. Kvant-kimyoviy hisoblashlarning sxemasi va nomenklaturasi.

IV. Mustaqil ta'lim va mustaqil ishlar

Mustaqil ta'lim uchun tavsiya etiladigan mavzular:

1. Vodorod atomi uchun SHredinger tenglamasini echish (qolgan ikkita tenglamani echish).

	2. Vodorod molekulasini (H_2) MO AOCHK usuli bilan hisoblash. 3. Elektronning spini. Spin bilan bog'langan magnit moment. Spin-orbital o'zaro ta'sir. 4. Vodorod atomi uchun Bor nazariyasi. Bor postulatlari. 5. Noaniqliklar munosabati. Munosabatni matematik ifodasi, zarracha koordinatasi va unga qo'shma bo'lgan impulsni tashkil etuvchisini bir vaqtda o'lchash. Noaniqliklar munosabatini xulosalari. 6. Operatorlarni matritsa shakli. Operatorlarni matritsa shaklida ifodalash. Matritsalarining xossalari. Shredinger tenglamasining matritsa shakli. 7. YArim empirik hisoblash usullari. CNDO, INDO va MNDO usullari. 8. MOX usulida atom orbitallari oldidagi koeffitsientlarni hisoblash (etilen, allil, butadien va yuqori polienlar uchun) 9. Atom orbitallarining gibridlanishi. sp-, sp^2- va sp^3- gibrid orbitallar. 10. Lokallangan va delokallangan molekulyar orbitallar. 11. Parizer-Parr-Popl (PPP) usulining mohiyati. 12. PPP usulini formaldegidning xossalari hisoblash uchun qo'llash. 13. Molekulyar orbitallar usulida geteroatomli molekulalar. 14. MOX usuli yordamida molekulyar orbitallarning energiyasini hisoblash. Annulenlar. 15. Butadien uchun SHredinger tenglamasini MOX usuli bilan echish.
3.	V. Fan o'qitilishining natijalari (shakllanadigan kompetensiyalar) ➤ Fanni o'zlashtirish natijasida talaba: kvant mexanikasi rivojlanishining qonuniyatlari va asosiy bosqichlari; ushbu fanning asosiy usullari va qoidalari; ushbu fanning mohiyati va uning boshqa fanlar orasidagi o'rni haqida <i>tasavvur va bilimga ega bo'lishi</i>; ➤ professional faoliyatida ushbu fanni o'rganish natijasida olgan bilimlarini ishlatishni; olingan natijalarni tahlil qilish, tegishli xulosalar chiqarish; atom va molekulalarning tuzilishini bayon qila bilish; ushbu fanning hisoblash usullarini qo'llab hisob-kitoblar qilish kabi <i>ko'nikmalarga ega bo'lishi</i>; ➤ ushbu fan bo'yicha materiallar tanlash usullari bo'yicha; moddaning tuzilishi haqidagi tasavvurlar bo'yicha; Shredinger tenglamasini yechish usullari bo'yicha <i>malakaga ega bo'lishi kerak</i>.
4.	VI. Ta'lim texnologiyalari va metodlari: • ma'ruza vaqtida tezkor savol-javob; • interfaol muloqot; • amaliy ishlar.
5.	VII. Kreditni olish uchun talablar: Fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'liq o'zlashtirish, tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish, o'rganilayotgan masalalar haqida mustaqil mushohada yuritish va joriy, oraliq nazorat shakllarida berilgan vazifa topshiriqlarni bajarish, yakuniy nazorat ishini topshirish
6.	Asosiy adabiyotlar:

1. Цирельсон В.Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. Учебник для высшей школы, 3-издание. Москва. БИНОМ. 2014, 522 стр
2. Унгер Ф.Г. Квантовая механика и квантовая химия, курс лекций, Томск, ТГУ, 2007, 240 стр.
3. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 бет.
4. Мелёшина А.М. Курс квантовой химии: Учеб. пособие. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1981. 198 бет.
5. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. шк., 1997. 560 бет.
6. Quvatov A. Kvant mexanika va kvant kimyosi, ma'ruzalar matni,
7. Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия, учебное пособие, часть 1, Москва, Юрайт, 2023, 183 с.
8. Ермаков А.И. Квантовая механика и квантовая химия, учебник и практикум для вузов, часть 2, Москва, Юрайт, 2023, 402 с.

Tavsiya qilinadigan qo'shimcha adabiyotlar

9. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 бет.
10. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979. 504 бет.
11. Ахмедова Г., Маматкулов О., Холбаев И. Атом физикаси. Тошкент, Истиклол, 2013, 416 б.
12. Қодиров О., Бойдедаев А., Физика курси, 3-қисм, Квант Физикаси. Т. А.Навоий номидаги Ўз.Миллий кутубхонаси нашриёти, 2005, 232б.
13. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. Учебное пособие. М.: Высш.шк., 1989. 303 бет .
14. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984. 275 бет.
15. Пардаев О.П. Квант механикаси дан масалалар ечиш. Самарқанд, СамДУ, 1996, 76 б.
16. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Выща.шк., 1975, 304 с.
17. Цюлик Л. Квантовая химия. учеб. пособ., Мир, 1976, т.1, 512 с.
18. Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии, 2004, 106 с.
19. Грибов В.Д., Муштакова С.П., Квантовая химия, 1999, 387 с.
20. Расулов Э., Бегимкулов У., Квант физикаси, 2 қисм., Т., Фан ва технология, 2009, 400 б.
21. Мусаханов М.М., Квант механикаси, Т., Тафаккур бўстони, 2011, 352 б.

	Internet manbalar: 1. http://www.ziyonet.uz/ 2. www.twirpx.com . 3. www.chemexpress.fatal.ru 4. www.twirpx.com ushbu saytda bepul kitoblarning electron variantlari qo'yilgan.
7.	Fan dasturi Samarqand davlat universiteti O'quv-uslubiy kengashining 2023 yil ____ - ____ -son bayonnomasi bilan ma'qullangan.
8.	Fan/modul uchun mas'ullar: A.Quvatov – SamDU, “Analitik kimyo” kafedrası dotsenti, fizika-matematika fanlari nomzodi
9.	Taqrizchilar: O.Pardaev – SamDU, “Nazariy fizika” kafedrası professori, fizika-matematika fanlari nomzodi, (tashqi) Q.Xalilov – SamDU, “Fizikaviy kimyo” kafedrası dotsenti, kimyo fanlari nomzodi (ichki)

Ushbu fanning o'quv dasturi SamDU Kimyo fakulteti Kengashida ko'rib chiqilgan va foydalanishga tavsiya qilingan.

(2023 yil " ____ " ____ dagi ____ -sonli majlis bayonnomasi).



Kafedra mudiri: _____

R Begmatov

Fakultet kengashi raisi: _____

dots. S.Tillayev

SamDU o'quv ishlari bo'yicha prorektor: _____

prof. A.Soleev

“Kelishilgan”

SamDU o'quv uslubiy boshqarma boshlig'i:

Sh.A.Muranov

____ “ ____ ” ____ 2023 yil