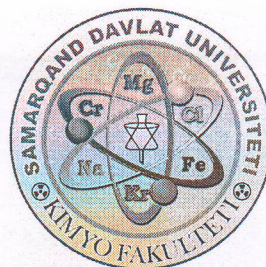


**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM
VAZIRLIGI
SAMARAQAND DAVLAT
UNIVERSITETI**



Ro'yxatga olindi:

№ BD-60530100-1.19.

2021 yil " " "



"TASDIQLAYMAN"

SamDU rektori:

R.I.Xalmuradov

2021 yil " " "

KVANT KIMYO

FAN DASTURI

Bilim sohasi:	100000 – Gumanitar soha
Ta'lim sohasi:	140000- Tabiiy fanlar
Ta'lim yo'nalishi:	60530100 – Kimyo (turlar bo'yicha)

Fan/modul kodi KVKM 10003		O'quv yili 2023-2024	Semestr 5	ECTS – Kreditlar 3	
Fan/modul turi Majburiy		Ta'lim tili O'zbek		Haftadagi dars soatlari 2	
1.	Fan nomi		Auditoriya mashg'ulotlari (soat)	Mustaqil ta'lim (soat)	Umumiy juklama (soat)
	Kvant kimyo		30	60	90
2.	I. Fanning mazmuni Fanni o'qitishdan maqsad – talabalarda kvant kimyoviy muammolarni xal qilish, kimyoviy bog'ni kvant mexanik nuqtai nazardan asoslash, valent bog'lar, molekulyar orbitallar va Xyukkel usullari, molekulyar diagrammalar va molekulalarning reaksiya qobiliyati kabi tushunchalardan iborat bilim, ko'nikma va malaka shakllantirishdir. Fanning vazifasi – talabalarga kvant mexanika va kvant kimyo kursi xaqida umumiy tushuncha berish mikrozarrachalarning dualistik tabiati, ularning to'liqin harakatini ifodalovchi Shredinger tenglamasi, to'liqin funktsiyasi, kvant mexanikaning matematik apparati, Geyzenbergning noaniqlik munosabatlari, kvant mexanik postulatlar va mikrozarrachalarning turli sistemalardagi harakati uchun Shredinger tenglamasining yechimlari, kabi masalalarni chuqur o'rgatishdan iborat. II. Asosiy nazariy qism (ma'ruza mashg'ulotlari) II.I. Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi: 1-mavzu. "Kvant kimyosi" fanining predmeti va vazifalari. 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. 2-mavzu. 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 kommutatsiyalanmaydigan operatorlar. Operatorlarning xarakteristik qiymatlari va xarakteristik funksiyalari, ularning xossalari.				

3-mavzu. Kvant mexanikasining operatorlari

Koordinata, impuls, kinetik va potensial energiyalarning operatorlari. Zarracha va zarrachalar sistemasi uchun Gamilton operatorlari.

Kvant mexanikasining asosiy postulatlari. To'liq (holat) funksiyasi va uning asosiy xossalari. To'liq funksiyasining statistik-ehtimoliyat talqini.

4-mavzu. SHredinger tenglamasi.

SHredinger tenglamasi. Holatning vaqtga bog'liq ravishda o'zgarishi. Statsionar holatlar. Statsionar holatlar uchun SHredinger tenglamasi. Potensial "yashik"dagi mikrozarrahaning harakati.

5-mavzu. Vodorod atomining kvantmexanik nazariyasi

Vodorod va vodorodga o'xshash ionlar uchun SHredinger tenglamasi.

Vodorodga o'xshash atomlar uchun SHredinger tenglamasini echish.

O'zgaruvchilarni ajratish. Kvant sonlari. Atom orbitallari.

Vodorod va unga o'xshash atomlarning asosiy holati, energiyasi va elektron zichliklarini taqsimlanishi. To'liq funksiyasining radial va burchak tashkil etuvchilari. Vodorod va vodorodga o'xshash atomlarning qo'zg'algan holatlari.

6-mavzu. Kvant mexanikasining hisoblash usullari va ularni oddiy sistemalar uchun qo'llash.

Variatsiyalash usuli. Ritsning variatsiyalash usuli. Qo'zg'alish (g'alayonlanish) nazariyasi. Geliy atomining asosiy holati. Qo'zg'alish nazariyasini geliy atomiga qo'llash. Ekranlanish. O'ziga muvofiqlashtirilgan maydon yoki Xartri-Fok usuli. Elektronlar korrelyasiyasini hisobga olish. Spinni hisobga olish. Bir xil zarrachalar sistemasi. Elektronlar uchun to'liq funksiyasini antisimmetrik ekanligi. Ko'p elektronli atomlar, ularni to'liq funksiyalari. Paulining taqiqlash qoidasi. Orbital yaqinlashish. Sleyter determinanti. Kupmans teoremasi.

7-mavzu. Molekulalarni hisoblash usullari.

Born-Oppengeymer yaqinlashuvi. Molekula uchun SHredinger tenglamasi.

Molekula tuzilish nazariyasining ikkita asosiy usuli. Valent bog'lar va molekulyar orbitallar usullari. Xartri-Fok usuli.

Molekulyar orbitallar usuli. MO usulining asosiy g'oyalari. Molekulyar orbital (MO) atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyasi (AOCHK) usulida molekulyar orbitallarni taqribiy ifodalash.

8-mavzu. H_2^+ molekulasining asosiy holati. Potensial egriligi. Kimyoviy bog'. Kimyoviy bog' hosil bo'lishining fizikaviy sabablari. H_2^+ molekulasining itarishish holati. SHredinger tenglamasining taqribiy va aniq echimlari. Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi molekulyar orbitallar.

YAdrolari bir xil bo'lgan ikki atomli molekulalarning molekulyar orbitallar.

MO ni simmetriyasiga qarab ajratish. σ va π - molekulyar orbitallar. Gibridlanish.

9-mavzu. Xyukkelning MO usuli.

Qo'sh bog'li sistemalar uchun Xyukkel yaqinlashuvi. Atomdagi elektron zichlik va zaryadlar. Kimyoviy bog'ning tartibi. Erkin valentlik indeksi. Molekulyar diagrammalar. Xyukkel usulini polienlarga tatbiq etish.

10-mavzu. Xyukkelning molekulyar orbitallar usulini aromatik birikmalarga qo'llash. XMO usulida benzol molekulasini. Xyukkelning $4n+2$ qoidasi va benzol halqasiga ega bo'lmagan aromatik birikmalar. XMO usuli yordamida molekulaning ba'zi kattaliklarini hisoblash.

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

Amaliy mashg'ulotlar uchun quyidagi mavzular tavsiya etiladi:

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

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

3. Kvant kimyosining hisoblash usullari. Kvant kimyosining hisoblash usullarini ierarxiyasi (o'sish qatori). Noempirik kvant kimyo. Noempirik hisoblashlar uchun bazis funksiyalar. Analitik bazis funksiyalar. Atom bazis to'plamlari. Poplning molekulyar bazis to'plamlari. Boshqa bazis to'plamlari. Ko'p bosqichli ekstrapolyasion hisoblash sxemalari. Molekulani noempirik kvant-kimyoviy hisoblashlarning aniqligi. YArimempirik kvant kimyo: Differensial qoplanishni to'liq inkor qilish. YArimempirik usullarni parametrlash prinsiplari. Differensial qoplanishni qisman hisobga oladigan usullar. σ va π -elektronlarni ajratish. π -Elektron yaqinlashish.

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

5. Butadien uchun SHredinger tenglamasini MOX usuli bilan echish.

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 MO LKAO usuli bilan hisoblash/ 3. Elektronning spini. Spin-orbital o‘zaro ta’sir. 4. Vodorod atomi uchun Bor nazariyasi 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. Operator tenglamaning matritsa shakli. 7. YArim empirik hisoblash usullari. CNDO usuli. 8. MOX usulida atom orbitallari oldidagi koeffitsientlarni hisoblash (etilen, allil, butadien va yuqori polienlar uchun) 9. Atom orbitallarining gibridlanishi 10. Lokallangan va delokallangan molekulyar orbitallar 11. Parizer-Parr-Popl (PPP) usulining mohiyati. 12. PPP usulini formaldegidning xossalarini hisoblash uchun qo‘llash. 13. Molekulyar orbitallar usulida geteroatomli molekulalar. 14. MOX usuli yordamida molekulyar orbitallarining energiyasini hisoblash. Annulenlar.
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. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 бет. 5. Заградник Р., Полак Р. Основы квантовой химии. М.: Мир, 1979. 504 бет . 5. Мелёшина А.М. Курс квантовой химии: Учеб. пособие. Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1981. 198 бет. 6. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул. М.: Высш. шк., 1997. 560 бет. 7. Quvatov A. Kvant mexanika va kvant kimyosi, ma'ruzalar matni, Qo'shimcha adabiyotlar: 1. Ахмедова Г., Маматкулов О., Холбаев И. Атом физикаси. Тошкент, Истиклол, 2013, 416 б. 2. Қодиров О., Бойдедаев А., Физика курси, 3.қисм, Квант Физикаси. Т. А.Навоий номидаги Ўз.Миллий кутубхонаси нашриёти, 2005, 232б. 3. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. Учебное пособие. М.: Высш.шк., 1989. 303 бет . 4. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.: Высш. шк., 1984. 275 бет. 5. Пардаев О.П. Квант механикаси дан масалалар ечиш. Самарқанд, СамДУ, 1996, 76 б. 6. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К. Химическая связь. Выща.шк., 1975, 304 с. 7. Цюлике Л. Квантовая химия. учеб. пособ., Мир, 1976, т.1, 512 с. 8. Аминова Р.М. Основы современной квантовой химии, 2004, 106 с. 9. Грибов В.Д., Муштакова С.П., Квантовая химия, 1999, 387 с. 10. Расулов Э., Бегимкулов У., Квант физикаси, 2 қисм., Т., Фан ва технология, 2009, 400 б. 11. Мусаханов М.М., Квант механикаси, Т., Тафаккур бўстони, 2011, 352 б. Axborot manbalari (saytlar): 1. www.gov.uz – O'zbekiston Respublikasi xukumat portali. 2. www.twirpx.com ushbu saytda bepul kitoblarning electron variantlari qo'yilgan.
7.	Fan dasturi Samarqand davlat universiteti O'quv-uslubiy kengashining 2021 yil ____-_____-son bayonnomasi bilan ma'qullangan.
8.	Fan/modul uchun mas'ullar: E.Abduraxmonov – SamDU, “Analitik kimyo” kafedrasi mudiri, kimyo fanlari doktori, professor.

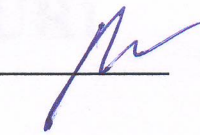
	A.Quvatov – SamDU, “Analitik kimyo” kafedrası dotsenti, fizika-matematika fanlari nomzodi
9.	Taqrizchilar: O.Pardaev – SamDU, “Nazariy fizika” kafedrası professori, fizika-matematika fanlari nomzodi, (tashqi) Q.Xalilov – SamDU, “Fizikaviy kimyo” kafedrası dotsenti, kimyo fanlari nomzodi (ichki)

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

(2021 yil "___" ___dagi ___-sonli majlis bayonnomasi).

Kefedra mudiri:  prof. E.Abduraxmanov

Fakultet kengashi raisi:  dots. N.X. Musulmonov

SamDu o'quv ishlari bo'yicha prorektor:  prof. A.Soleev