

O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV TA‘LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI
TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI



«TASDIQLAYMAN»

Termiz davlat universiteti

O‘quv ishlari prorektori

prof.R.To‘rayev

2024-yil

KVANT MEXANIKASI VA KVANT KIMYOSI
FANINING O‘QUV DASTURI

Bilim sohasi: 500000 - Tabiiy fanlar, matematika va statistika

Ta‘lim sohasi: 530000 – Fizika va tabiiy fanlar

Ta‘lim yo‘nalishi 60530100- Kimyo (turlari bo‘yicha)

Termiz - 2024

Fan/modul kodi KKMB206	O'quv yili 2024-2025	Semestr 3	Kreditlar 6
Fan/modul turi Majburiy	Ta'lim tili O'zbek	Haftadagi dars soatlari 4	
I.	Fanning nomi	Auditoriya mashg'ulotlari (soat)	Jami yuklama (soat)
	Kvant mexanikasi va kvant kimyosi	60	180

2 I. Fanning mazmuni

Fanni o'qitishdan maqsad - «Kvant mexanikasi va kvant kimyosi» qonunlarining ma'nosini yoritib berish, shu qonunlarning qo'llanish sohalari o'rgatish va aniq kimyoviy masalalarni hal qilishda ushbu qonunlarning amaliy imkoniyatlarini to'g'ri tushuntirish. Shu sababli, «Kvant mexanikasi va kvant kimyosi» asoslarini o'rganishda, bu fanning barcha bo'limlari o'rtasidagi mavjud bog'liqlikni yoritish yo'nalishida bilim, ko'nikma va malaka shakllantirishdir.

Fanning vazifasi - kimyoning nazariy qonunlaridan turli masalalarni hal qilishda yuqori darajada foydalanish qobiliyatini rivojlantirish, kimyoviy reaksiyalar mahsulotlarini aniq hisoblash. Turli hisoblash ishlarida ma'lumotnomalardan umumiy foydalana olish.

II. Asosiy nazariy qism (ma'ruza mashg'ulotlari)

II.1. Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi:

1-mavzu. «Kvant kimyo» zamonaviy kimyoning nazariy asosi.

Kvant mexanikasi asoslari. Kvant mexanikaning asosiy postulatlari. Kvant holatlar va to'liq funksiyasi; to'liq funksiyasining asosiy xossalari. Kuzatilayotgan fizikaviy kattalik operatorlari; o'rtacha qiymat va kuzatilish dispersiyasi.

2-mavzu. Zarrachaning fazodagi taqsimlanish zichligining ehtimolligi. Kommutativ munosabat.

Kvant mexanikasining matematik apparati. Ermit operatori, uning xususiy funksiyasi va xususiy qiymati. G'alayonlanish. Operatorlarning matritsa tasavvuri. Ermit operatorlari funksiyalarini xususiy qiymatlar bo'yicha qatorga yoyish. Koordinata, impuls operatorlari, impuls momenti, kinetik va potensial energiyalar. Gamilton (gamiltonian) operatori. Noaniqlik munosabati. Uning fizik ma'nosi va misollar.

3-mavzu. Shredinger tenglamasi

Holatlar evolyusiyasi. Shredingerning stasionar tenglamasi. Diskret va uzluksiz spektrlar. Kvant mexanikasi qo'llanilgan eng oddiy misollar. Bir

o'lehamli masalalar: spektr, to'liq funksiyaning sifat xususiyatlari.

4-mavzu. To'g'riburchakli potensial

O'ra masalasi, potensial to'siq va garmonik ossilyator. Impuls momenti nazariyasi. Impuls momenti tashkil etuvchilari uchun asosiy kommutativ munosabatlar. Impuls momentlari qo'shilish qonuni.

5-mavzu. Vodород atomi masalasi

O'zgaruvchilarni ajratish. Vodородsimon orbitallar, ularning radial va burchak kislarni grafik ko'rinishi. Markaziy maydon simmetriyasi tufayli bir elektronli xolatning aynishi. Kvant-mexanika masalalarini yechishning taqribiy usullari. Stasionar xolatlarining g'alayonlanish nazariyasi. Kvant mexanikasida variatsion prinsip va variatsion metod. Rits metodi.

6-mavzu. Spin

Elementar zarrachalar spini va uning magnet momentiga aloqasi. Spin operatori va kommutatsion munosabat. Spin-orbital o'zaro ta'sir va uning ko'rinishlari. Aynan o'xshash zarralar sistemasi; fermionlar va bozonlar. Elektronlar sistemasi uchun to'liq funksiyasining antisimmetriyasi. Elektronlar sistemasi to'liq funksiyasini aniqlovchi ko'rinishida tasvirlash.

7-mavzu. Atom va molekula uchun Shredinger tenglamasi

Elektronlar va yadro harakatining ajratilishi. Adiabatik yaqinlashish. Potensial energiya sirti. Hozirgi zamon kimyosi tuzilish nazariyasida potensial energiya sirtining roli. Muvozanatdagi konfiguratsiya va molekular konformatsiyasi.

8-mavzu: Elektronlar to'liq tenglamasi, Xartri - Fok metodi

Elektron zichlik va uning yakka atomdan molekulaga o'tishida o'zgarishi. Variatsion prinsip asosida elektronlar to'liq tenglamasini taqribiy yechish usullari. Bir elektroili yaqinlashish. Orbitalarni belgilovchi tenglamalar. Orbitalar energiyasi va ularning elektronlar to'liq energiyasi bilan aloqasi. Kuppman teoremasi va fotoelektron spektr. Xartri - Fok metodi qo'llanilish chegarasi. Konfiguratsion o'zaro ta'sir usuli haqida tushuncha. Valent sxemalar usuli.

9-mavzu. Atomlarning elektron tuzilishi

Elektron konfiguratsiya va atomlar termini. Atomlarda momentlar qo'shilishi. Xund qoidasi. Atomlarning elektron tuzilishi va D.I. Mendeleevning elementlar davriy sistemasi.

10-mavzu: Molekulyar orbitalarni atom orbitalarining chiziqli kombinatsiyasi (AOCHK) ko'rinishida tasvirlash.

Atom orbitalarining keng tarqalgan bazi tiplari: sleyter orbitali va gauss

tipi. AOCHK MO UKM uslubi. Elektron zichlik funksionali usuli haqida tushuncha.

11-mavzu: Simmetriya va molekular xossalari. Orbitallar simmetriyasi ekvivalent orbitallar.

Molekulaning elektron holatlari klassifikatsiyasi va molekulyar orbitallarning simmetriya bo'yicha klassifikatsiyasi. Sigma va Pi orbitallar. Pi elektron yaqinlashish. Bog'lovchi va bo'shashtiruvchi orbitallar. Gibrilalanish va atomdagi s-, p- va Z-orbitallar fazasidagi gibril orbitallar.

12-mavzu: Kvant kimyosining yarim empirik uslublari.

Nul differensial qoplash usullari. Bu usullarga asoslangan kompyuter dasturlari.

13-mavzu: Pi elektron sistemalar uchun Xyukkel metodi.

Kvant kimyosidagi yarim empirik usullarini qo'llash imkoniyatlari va chegarasi. Pi bog'li sistemalar qonuniyatlari.

14-mavzu: Xyukkelning kengaytirilgan uslubi.

Qattiq bog'lanish usuli haqida tushuncha. Molekulyar dinamika va Monte Karlo usullari haqida tushuncha. Empirik usullar.

15-mavzu: Aromatik va antiaromatiklik.

Aromatik sistemalar uchun Xyukkel metodida misollar yechish. Elektronlar zichligi va delokalizatsiyasi. Elektron taqsimot konturlari.

III. Amaliy mashg'ulotlari bo'yicha ko'rsatma va tavsiyalar
((Laboratoriya ishlari), (Seminar mashg'ulotlari), (Kurs ishi),
(Mustaqil ta'lim) o'quv rejada ko'rsatilgan turi (nomi) bo'yicha
voziladi)

Amaliy mashg'ulotlar uchun quyidagi mavzular tavsiya etiladi:

1. Atom kimyosining tarixi.
2. Kvant holatlar va to'lqin funksiyasi.
3. Kvant nazariyasi rivojidadagi asosiy bosqichlar.
4. Radiusning Bor modeli
5. Bor modelidagi energetik pog'onalar.
6. Fizik kattaliklar operatorlari. Noaniqlik munosabati.
7. Shredinger tenglamasi.
8. Kvant mexanikasi qo'llangan eng oddiy misollar. Bir o'lchamli masalalar.
9. Vodorod atomi masalasi. Variatsion prinsip. Spin.
10. Atomlar va molekular uchun Shredinger tenglamasi.
11. Potensial energiya satxi. Xartri - Fok metodi. Valent sxemalar uslubi va MO.
12. Molekular simmetriyasi. Gibrilalanish Atomlar elektron

tuzilishi. Atomlar termlari. MO AOCHK.

13. π -elektronli sistemalar uchun Xyukkel metodi.
14. Dinamik kvant kimyosi.
15. Orbital simmetriya saqlanishi bilan boradigan reaksiyalar. Kvant biokimyosi.

IV. Mustaqil ta'lim va mustaqil ishlar

1. Atom tuzilish nazariyalari. Atom modellari.
2. Yorug'likning elementar kvant nazariyasi.
3. Zarrachalarning to'liq xususiyati.
4. To'liq-korpuskulyar dualizmi.
5. Chiziqli operatorlar.
6. Noaniqlik munosabati.
7. Shredinger tenglamasi.
8. Erfest teoremasi.
9. Simmetriya va gruppalar nazariyasining elementlari.
10. Matrisalar va ular ustida amallar.
11. Mikrozarxaning erkin harakati.
12. Zarxaning potensial to'siqdan qaytishi.
13. Azimutal funksiyani aniqlash.
14. Vodorodsimon atom elektronining holat funksiyasi.
15. Ishqoriy metall atomlarining optik elektron modeli.
16. Qo'zg'alish nazariyasi.
17. Elastik sochilish. Born yaqinlashishi.
18. Majburiy va spontan kvant o'tisblar.
19. Dipol nurlanish uchun tanlash qoidasi.
20. Spinni hisobga oluvchi to'liq funksiyasi.
21. Pauli tenglamasi.
22. Aynan o'xshash zarrachalar sistemasi.
23. Zeeman effekti.
24. Shtark effekti.
25. Murakkab atomlarning tuzilishi.
26. Elektron qavatlarining tuzilishi.
27. Kimyoviy bog'lanish kuchiarining tabiati.
28. Ikki atomli molekularning spektri.
29. Shredingerning relyativistik tenglamasi.
30. Dirak tenglamasi.

Mustaqil o'zlashtiriladigan mavzular bo'yicha talabalar tomonidan referatlar tayyorlash va uni taqdimot qilish tavsiya etiladi

3

V. Ta'lim natijalari / Kasbiy kompetensiyalari Ta'laba bilishi kerak:

- kvant mexanika fani va uning usullari xaqida umumiy tushuncha. Kvant mexanika va klassik fizika o'rtasidagi munosabat. Kvant mexanikaning

	<p>asoslari. Kvant mexanikaning paydo bo'lishi va rivojlanishining tarixiy sabablarini. 19-asrning oxiridagi fizikaning umumiy tavsifi. Radioaktivlikning ochilishi. Elektronning ochilishi haqida tasavvurga ega bo'lishi; (bilim)</p> <ul style="list-style-type: none"> • kvant mexanikaning fizik asoslari. To'liq funksiyasi. To'liq funksiyasi tushunchasini fizik nuqta nazardan talkini. To'liq funksiyasining normallashtirish shartlari. Zarrachalar sistemasi uchun to'liq funksiyasi. Molekulalarning reaksiya qobiliyatini kvant-kimyoviy tushuntirish. Molekular diagrammalar yordamida molekulalarning reaksiya qobiliyati tushuntirishni bilishi va ulardan foydalana olishi; (ko'nikma) • bog'ning tartibi, elektron zichlik va ozod valentlik indeksi tushunchalari. Molekular orbitalar usuli yordamida molekulalarning miqdoriy ko'rsatkichlarini hisoblash ko'nikmalariga ega bo'lishi kerak. (malaka)
4	<p>VI. Ta'lim texnologiyalari va metodlari:</p> <ul style="list-style-type: none"> • ma'ruzalar; • amaliy mashg'ulotlar; • ilmiy-tadqiqot elementlarini o'zida tutgan amaliy mashg'ulotlar; • interfaol keys-stadilar; • seminarlar (mantiqiy fikrlash, tezkor savol-javoblar); • guruhlarda ishlash; • taqdimotlar qilish; • individual referatlar; • jamoa bo'lib ishlash va himoya qilish uchun loyihalar.
5	<p>VII. Kreditlarni olish uchun talablar:</p> <p>Fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'la o'zlashtirish, tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish, o'rganilayotgan jarayonlar haqida mustaqil mushohada yuritish va joriy, orallq nazorat shakllarida berilgan vazifa va topshiriqlarni bajarish. Amaliy ishlarni bajarishdan oldin kollokviumlar topshirish, referatlar yozish va himoya qilish, yakuniy nazorat bo'yicha yozma ishni muvaffaqiyatli topshirish.</p>
6	<p>Asosiy adabiyotlar:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Фларри Ричерд. Квантовая химия. М.: Мир, 2009. 463 с. 2. Хедвиг Г. Прикладная квантовая химия. М.: Мир 2003. 596 с. 3. "Квантовая механика и квантовая химия" Холдинг «Лабиринт» 115419, Москва 2010 г.

	<p>4. X.O.Eshchanov. Kvant kimyosi va kvant mexanikasi. Globe EDIT. 2020 y.</p> <p style="text-align: center;">Qo'shimcha adabiyotlar:</p> <p>5. Mirziyoev Sh.M. Erkin va farovon, demokratik O'zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. Toshkent, "O'zbekiston" NMIU, 2017. -29 b.</p> <p>6. Mirziyoev Sh.M. Qonun ustuvorligi va inson manfaatlarini ta'minlash yurt tarakmyoti va xalq farovonligining garovi. "O'zbekiston" NMIU, 2017. -47 b.</p> <p>7. Mirziyoev Sh.M. Buyuk kelajagimizni mard va oliyanob xalkimiz bilan birga quramiz. Toshkent, "O'zbekiston". 2017.</p> <p>8. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017 yil 7 fevraldagi "O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha harakatlar strategiyasi to'g'risida"gi PF-4947-sonli Farmoni, O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlari to'plami, 2017 y. 6-son, 70-modda.</p> <p>9. «Kvant asri» Muallif – Brayan Klegg, «Icon books» nashriyoti 2014-yil.</p> <p>10. «Tangri effekti: kvant chigalligi» Muallif – Brayan Klegg, «St Martin Griffin» nashriyoti 2009-yil.</p> <p>11. «Kvant nazariyasi sizga muhtoj emas» Muallif – Markus Choun, «Faber va Faber» nashriyoti 2008-yil.</p> <p>12. «Kvant mexanikasining ajoyib tarixi» Muallif – Jeyms Kakalios, «Duckworth» nashriyoti 2010-yil.</p> <p>13. «Kvant» Muallif – Manjit Kumar, «Icon books» nashriyoti 2009-yil.</p> <p style="text-align: center;">Axborot manbaalari</p> <p>1. www.chemport.ru.</p> <p>2. www.scientificamerican.com/topic/quantum-physics/</p> <p>3. www.quantumphysics.iop.org/</p>
7	Termiz davlat universitetining O'quv metodik Kengashi tomonidan ma'qullangan. (2024-yil "26" 06 daqi 11 sonli bayonnoma)
8	<p style="text-align: center;">Fan/moduli uchun ma'sullar:</p> <p>Geldiyev Y.A. - TerDU., "Fizikaviy kimyo" kafedrasida katta o'qituvchisi, kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori.</p> <p>Umirova G.A. - TerDU., "Fizikaviy kimyo" kafedrasida mudiri, kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori</p>
9	<p style="text-align: center;">Taqrizchilar:</p> <p>Akbarov H.I. – O'zMU., "Fizikaviy kimyo" kafedrasida mudiri, kimyo fanlari doktori, prof.</p> <p>Kattayev N.T. – O'zMU., "Fizikaviy kimyo" kafedrasida professori, kimyo fanlari doktori.</p>