O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O‘RTA MAXSUS TA’LIM VAZIRLIGI

SAMARQAND DAVLAT UNIVERSITETINING
KATTAQO‘G‘ON FILIALI

Ro‘yxatga olindi
№ BD-60110800

“TASDIQLAYMAN”
Direktor
_____Sh.R.Urakov
2022-yil “___” _____

KVANT KIMYOSI

FAN DASTURI

Bilim sohasi:	100 000	– Ta’lim
Ta’lim sohasi :	110 100	– Ta’lim
Ta’lim yo‘nalishlari:	60110800	– Kimyo

Kattaqo’rg’on-2024

CamScanner yordamida skanerlangan

Fan/modul kodi KK1505		O‘quv yili 2024-2025	Semestr 5	ECTS – Kreditlar V semestr – 5	
Fan modul turi Majburoy		Ta’lim tili O‘zbek		Haftadagi dars soatlari 4	
1.	Fan nomi	Semestr	Auditoriya mashg‘ulotlari (soat)	Mustaqil ta’lim (soat)	Umumiy (soat)
	Kvant kimyosi	5	60	90	150

2. **I. Fanning mazmuni**

Fanni o‘qitishdan maqsad – Fanning mazmuni Fanni o'zlashtirishdan maqsad zamonaviy nazariy kimyo asoslarini shakllantirish, kimyoviy sistemalar (atomlar, molekulalar, kristallar) va kimyoviy reaksiyalarni tavsiflashning kvant mexanik usullari bilan tanishish, kvant kimyosining zamonaviy tushunchalari, molekulalarning fazoviy va elektron tuzilishini hisoblash usullari haqida nazariy bilimlarni olish, shuningdek, nazariy va eksperimental kimyoviy fan muammolarini hal qilish uchun kvant kimyoviy hisoblashlar bilan ishlash malaka va ko'nikmalarini egallashdir.

Fanning vazifasi – Kvant kimyo fanining vazifalari talabalarga zamonaviy kimyoning nazariy asosi sifatida kvant kimyosining axamiyati xakida, kvant kimyosi fizik kimyoning bir tarmog'i sifatida va uning zamonaviy kimyodagi o'rni haqida, kimyoviy masalalarni yechishda kvant mexanikasi asoslarini qo'llash, kvant mexanikasi va kvant kimyosi qonunlari va nazariyalarining amal qilish chegaralari haqida ma'lumot berish, turli amaliy masalalarni yechishda kvant kimyosining nazariy va hisoblash usullaridan foydalanish tamoyillarini bilish, kunikma va malakalarini shaklantirishdan iborat.

II. Asosiy nazariy qism (ma’ruza mashg‘ulotlari)

II.I. Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi:

Mavzu-1. Kirish. Kvant mexanikasining asosiy tamoyillari va rivojlanishi. Plank va Eynshteyn nazariyalari. Atomning Rezerford va Bor modellari. De Broyl tajribalari. Shredingerning to'lqin mexanikasi va Geyzenberg matritsa mexanikasi.

Mavzu-2. Kvant mexanikasining matematik apparati.
Kvant mexanikasining asosiy postulatlari. Kvant mexanikasining eng oddiy masalalari.

Mavzu-3. Fazoda zarrachalar tarqalishining ehtimolligi, to'lqin funksiyalari.

CamScanner yordamida skanerlangan

Kvant mexanikasida fizik kattaliklar operatorlari Operatorlarming funksiyalari va xos qiymatlari. Koordinata, impuls, burchak momenti, kinetik va potensial energiya operatorlari. Gamilton, operatori Kuzatiladigan miqdorlarning o'rtacha qiymatlari. Statsionar Shredinger tenglamasi. Kvant mexanikasining eng oddiy masalalari.

Mavzu-4. Atomning tuzilishi haqida asosiy ma'lumotlar.

Kvant mexanikasida ko'p elektronli atomlarni tavsiflashning umumiy tamoyillari. Elektron konfiguratsiya.

Mavzu-5. Ko'p elektronli atomlar. Yarim empirik spin nazariyasi.

Geliy atomi. Pauli prinsipi va eng kam energiya prinsipi. Elektron konfiguratsiya. Spin. Spin operatorlari. Ikki elektronli sistemalarning singlet va triplet xolati.

Mavzu-6. Elektronli atomlarning termlari. Elektron konfiguratsiya.

Termlar. Termlarning strukturasi. Spin-orbital ta'sirlashuv. LS-bog'lar. Gund qoidasi. D.I.Mendeleev elementlarining davriy sistemasi. Shtark, Zeeman va Pashen-Bak effektlari.

Mavzu-7. Atomning tuzilishi haqida asosiy ma'lumotlar.

Vodorod atomi muammosi. O'zgaruvchilarni ajratish. Diskret spektr. Kvant mexanikasida ko'p elektronli atomlarni tavsiflashning umumiy tamoyillari. Elektron konfiguratsiya. Terma.

Mavzu-8. Vodorod atomi. Vodorod atomi muammosi.

To'lqin funksiyasining radial va burchak qismlarining sifat xususiyati. Vodorod atomining s-, p- va d- funksiyalari. Kvant mexanikasining variatsion prinsipi va variatsion usuli. Rits usuli.

Mavzu-9. Ikki atomli molekulalar. Molekular orbitallar lokallashgan atom orbitallarining chizikli kombinatsiya usuli (MO AOChK).

Ikki atomli molekulalar termlarining sistematikasi. Ikki atomning yaqinlashuvidan kelib chiqadigan molekular atamalar. Gaytler-London usuli (valent sxemalar usuli - valent boglar (VB) usuli), kimyoviy bog'lanishning paydo bo'lish sababi.

Mavzu-10. Molekular orbitallar usuli.

Ikki atomli molekulalar asosiy termini topish, kislorod molekulasi. Korrelyatsiya diagrammasi. Bog'lanish turlari (σ, π). MO va VB usullarini taqqoslash.

Mavzu-11. Bog'larning yunalganligi, gibridlanish, gibrid atom va molekular orbitallar, gibridlanish turlari.

Bog'lanish tiplari ionli, kovalent, qutbli, demor akseptor: Kimyoviy bog'lanish tushunchasining rivojlanishi

CamScanner yordamida skanerlangan

Mavzu-12. Ko'p atomli molekulalar.

Molekular orbitallarning simmetriyasi Guruhlar mazariyasi, nuqtali guruhlar MO ni topish uchun guruxlar nazariyasini qio'llash. Uzun bir o'lchovli π-sistemalar

Amaliy yoki laboratoriya mashg'ulotlar bo'yicha ko'rsatma va tavsiyalar.

Amaliy mashg'ulotlar bo'yicha quyidagi mavzular tavsiya etiladi:

Mavzu-1 Kvant nazariyasi rivojlanishining asosiy bosqichlari. Kvant kimyosi zamonaviy kimyo fanining asosi sifatida

Mavzu-2. Qora jismning nurlanishi. Klassik mexanikaning muvaffaqiyatsizligi Marsden tajribasi va Rezerford nazariyasi.

Mavzu-3. Kvant mexanikasi postulatlari. Kvant mexanikasida fizik kattaliklar operatori. Gamilton operatori.

Mavzu-4. Shredinger tenglamasi. Kvant mexanikasining asosiy masalalari Tunnel effekti xaqida tushuncha. Erkin elektron modeli, Gilbert nazariyasi.

Mavzu-5. Vodorodsimon atomlar uchun Shredinger tenglamasi, Atom orbitallari Kvant sonlari va ularning fizik ma'nosi. Impuls moment nazariyas Spin: operatorlari, kattaliklari, funksiyalari. Spin-orbital ta'sirlashish

Mavzu-6. Ko'p elektronli atomlar. Ko'p elektronli atomlar uchun kvantsonlari Ko'p elektronli atomlarning termlari Gund kondasi. Sleter-Zener orbitallari va qoidalari

Mavzu-7. Elektromagnit nurlanish ta'siridagi o'tishlar Saralash kid Eynshteyn koeffitsienti Tashki maydon ta'siri Shtark, Zeeman va Pashena-Bak effektlari.

Mavzu-8. Shredingerning molekular tenglamasi Adabatik yakınlashish. Yadroning tebranishi. Elektronning to'lkin tenglamasi. Elektron zichlik va uning kimyoviy bog'lanish xosil bo'lishida o'zgarishi.

Mavzu-9. Xartri va Xartri-Fok usullari. Xartri-Fok tenglamasi. Molekular orbitallarni lokallashgan atom orbitallarining chizikli kombinatsiya usulida kurinishi Sleter va Gauss bazis fuknsiyalari.

Mavzu-10. Molekular orbitallarni simmetriyasi bo'yicha va xolatiga ko'ra klassifikatsiyasi. Ikki atomli molekulalarni xisoblash. Ikki atomli molekulalaring korrelyatsion diagrammalari. Ikki atomli molekular orbitallaring gomo- i geteroyadro molekulalari. (He_2, Li_2, Be_2, B_2, S_2, N_2, O_2, F_2, SO, HF, LiF).

Mavzu-11. Ko'p atomli molekulalarning molekular orbitallari (BeH_2, BH_3), BF_3, NH_3, H_2O, CH_4, C_2H_2, NO_2).

Mavzu-12. Ekvivalent orbitallar va simmetriya orbitallari. s-, p-, d-tipidagi gibridlanish. Lokallashgan molekular orbitallar va kimyoviy tuzilish xakidagi klassik nazariyalar.

Laboratoriya mashg'ulotlar bo'yicha quyidagi mavzular tavsiya etiladi:

Mavzu-1. Formaldegid molekulasi HCHO xossalarining kvant kimyoviy hisobi.

Mavzu-2. Ketonlarning xossalarining kvant kimyoviy hisobi.

CamScanner yordamida skanerlangan

Mavzu-3. Nitrobirikmalarning xossalarining kvant kimyoviy hisobi.
Mavzu-4. Organik kislotalar xossalarining kvant kimyoviy hisobi.
Mavzu-5. Kvant kimyosining yarim empirik usullari
Mavzu-6. Kvant kimyosining yarim empirik usullari

III. Mustaqil ta'lim va mustaqil ishlar.

Mustaqil ta'lim uchun tavsiya etiladigan mavzular:

Mavzu-1. Kvant mexanikasining paydo bo'lishi va rivojlanishining tarixiy sabablari.
Mavzu-2. Kvant mexanikasining matematik aparati operator tushunchasi. Operatorlarning xossalari.
Mavzu-3. Operatorlarning xarakteristik funksiyalari va xarakteristik qiymatlarining xossalari.
Mavzu-4. Operatorlarni matritsa shaklida ifodalash.
Mavzu-5. Kvant mexanıkasının operatorları. fızıkavıy kattalıklarnı kvant mexanıkasıda ıfodalanıshı.
Mavzu-6. Kvant mexanıkasının asosıy postulatları
Mavzu-7. Kvant mexanikasi masalalarini echishning taqribiy usullari
Mavzu-8. Molekula uchun shredınger tenglaması
Mavzu-9. Molekulyar orbıtallar usulının asosıy g'oyaları
Mavzu-10. Varıatsıon prıntsıp asosıda elektronlar to"kqın tenglamasını taqrıbıy echısh usulları
Mavzu-11. Yadrolari bir xil bo'lgan ikki atomli molekulalarning molekulyar orbitallari
Mavzu-12. Kvant kımyosının yarımempırık usulları.
Mavzu-13. .Xyukkelnıng molekulyar orbıtallar (xmo) usulı.
Mavzu-14. Xyukkelnıng molekulyar orbıtallar usulını (xmo) aromatık bırıkmalarga qo'llash
Mavzu-15. Dınamık kvant kımyosı. kvant bıokımyosı.
Mavzu-15. Orbıtal sımmetrıyanıng saqlanıshı bılan boradıgan reaksıyalar.

CamScanner yordamida skanerlangan

.	**V. Ta'lim natijalari /Kasbiy kompetensiyalar** **Talaba bilishi kerak:** • me'yoriy-huquqiy hujjatlarni izlash, tahlil qilish va ulardan kasbiy faoliyatida foydalanish ko'nikmalariga ega bo'lishni bilishi kerak; • fanni o'rganishda talabalar yangi bilimlarni mustaqil egallay bilishi, mehnat faoliyatini ilmiy asosda tashkil qila olishi ko'nikmalariga ega bo'lishi kerak; • tegishli bakalavriyat yo'nalishi bo'yicha raqobatbardosh umumkasbiy tayyorgarlikka ega bo'lishi kerak; • Fanning atamalari, tegishli hodisalari, qonun va qonuniyatlarining kimyoviy mohiyatini tushunib olish. Fan doirasidagi standart va nostandart masalalarni yechish va yechimlarning to'g'riligini tekshirish haqida tasavvur va bilimga ega bo'lishi; • Fan sohasiga oid barcha turdagi masalalarni yechish bo'yicha amaliy malaka hamda ko'nikmalarga ega bo`lish. Laboratoriya ishlarini bajarish va olingan natijalarni tahlil qilish va tegishli xulosalar chiqarishga oid amaliy malaka hamda ko'nikmalarga ega bo'lish. • Fan bo'yicha egallangan nazariy bilim va ko'nikmalarni amalda qo'llash, malakasiga ega bo'lishi kerak.
4.	**VI. Ta'lim texnologiyalari va metodlari:** • Ma'ruzalar; • interfaol keys-stadilar; • aqliy hujum; • guruhlarda ishlash; • taqdimotlar yaratish; • jamoa bo'lib ishlash.
5.	**VII. Kreditni olish uchun talablar:** Fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'liq o'zlashtirish, tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish, masalalar yecha olishi, laboratoriya ishlarini bajara olishi, o'rganilayotgan jarayonlar haqida mustaqil mushohada yuritish va joriy, oraliq nazorat shakllarida berilgan vazifa topshiriqlarni bajarish, yakuniy nazorat ishini topshirish.
6.	**Asosiy adabiyotlar:** 1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Назарий физика қисқа курси. 2-китоб. Квант механикаси. "Ўқитувчи" нашриёти, Тошкент 1977. 387 бет. 2. Мелёшина А.М. Курс квантовой механики для химиков: Учеб. пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: Высш. шк., 1980. 215 бет. 3. Фларри Р. Квантовая химия. М.: Мир, 1985. 472 бет. 4. 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.:

CamScanner yordamida skanerlangan

Высш. шк., 1997. 560 бет.
Qo'shimcha adabiyotlar:
7. Абаренков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В. Начала квантовой химии. Учеб Высш.шк., 1989. 303 бет .
8. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 2001. 336 бет .
9. Дей К., Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. 3-е изд. М.: Химия, 1976. 568 бет.
10. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990. 381 бет.
11. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь: Учеб. пособие. 2-е изд. М.:
12. Салем Л. Электроны в химических реакциях. М.: Мир, **1985. 285 бет.**

Axborot manbalari (saytlar):

1. http://www.chem.msu.ru
2. http://www.rushim.ru
3. http://www.hemi.msu.ru
4. http://www.ziyonet.uz
5. http://www.natlib.uz
6. http://www.nuu.uz
7. http://www.nanochemlab.ru
8. http://www.rusnanonet.ru

7.	**Fan dasturi Samarqand davlat universitetining Kattaqo'rg'on filiali kengashining 202_ yil __ _____ dagi ___-son bayonnomasi bilan ma'qullangan.**
8.	**Fan/modul uchun ma'sullar:** J.J.Javharov -"Axborot texnologiyalari" kafedrasi kimyo fani o'qituvchisi.
9.	**Taqrizchilar:** Z.Q.Shukurov SamDU KF Biznesni boshqarish va axborot texnologiyalari fakulteti "Axborot texnologiyalari" kafedrasi mudiri, (PhD) (ichki) S.U.Tillayev – SamDU, "Organik sintez va bioorganik kimyo" kafedrasi mudiri, kimyo fanlari nomzodi, dotsent (tashqi).

CamScanner yordamida skanerlangan