

KVANT KIMYO FANINING RIVOJLANISHI VA VAZIFASI**Xakimova Ozoda Abduvahob qizi****Andijon Davlat Pedagogika Instituti Aniq va Tabiiy fanlar fakulteti****Kimyo yo'nalishi 2-kurs talabasi.****Telefon: +998 (91) 168 01 05****E-mail: xakimovaozodaxon34@gmail.com****<https://doi.org/10.5281/zenodo.8256189>**

Anotatsiya. Ushbu maqolada kimyo fanining bir bo'limi bo'lgan kvant kimyo fanining paydo bo'lishi, rivojlanishida qanday yangiliklar kuzatilyotgani va vazifalari haqida ma'lumotlar berilgan. Kvant kimyo atomlar va molekularining elektron tuzilishini o'rganishi aytilgan. Moddalarning qattiqligi elektron bulutlarning qisilishiga nisbatan qarshiligiga bog'liqligini, ularning deformatsiyasiga sarflanadigan energiya esa elektronlar energiyasining oshishiga olib kelishini ham aytish mumkin. Kvant kimyo fanining metodlari, fundamental qiymatlari, elektron fizik konstantalarini hisoblab chiqishga imkon beruvchi bo'limdir. Bu fan bo'limining shakllanish yillarida tarkibiy yarim-empirik metodlardan foydalaniladi.

Kalit so'zlar: Kvant kimyo, elektron bulut, deformatsiya, metod, konstanta, yarim-empirik.

O'tgan asrda ochilgan fundamental kimyoviy qonunlar kvant kimyo paydo bo'lgunga qadar chinakamiga tushunib yetilmagan edi. Kvant kimyoning rivojlanishi kimyoviy bog'lar tabiatini, atomlarning o'zaro ta'siri va molekulararo o'zaro ta'sir mexanizmlarini ochib berishga imkon yaratdi. Elektron va kvant mexanik tasavvurlar yangi kimyoviy birikmalar sintezi sohasidagi rivojlanishga yordam berdi.

Kvant kimyosi- nazariy kimyoning bir bo'limi. Kimyoviy birikmalarning tuzilishi, fizik-kimyoviy xossalari kvant nazariyasi, xususan, kvant mexanika qonuniyatlari asosida o'rganadi. Kvant kimyo elementlarning valentligi, atomlararo kimyoviy bog'ning tabiati, molekularning spektroskopik, elektrik, magnit xossalari va tuzilish masalalarini hal taxlil qiladi. Shu nuqtaiy nazardan kvant kimyo fizika va kimyo fanlari o'rtasidagi nazariy fan hisoblanadi.

Barcha kimyoviy o'zgarishlar asosida atomlar, ionlar, komplekslar, molekular elektron qavatlari holatining o'zgarishi bilan bog'liq bo'lgan fizik protseslar yotadi. Kvant kimyo atomlar va molekularining elektron tuzilishini o'rganadi. Atomlar va molekularning elektron konfiguratsiyasi faqat kimyoviy emas, balki optik, elektrofizik va xatto maxanik xossalari belgilaydi, shu bilan birga valent elektronlar shu xossalarni tashuvchilar hisoblanadi. Masalan, moddalarning qattiqligi elektron bulutlarning qisilishiga nisbatan qarshiligiga bog'liq, ularning deformatsiyasiga sarflanadigan energiya esa elektronlar energiyasining oshishiga olib keladi.

Kvant kimyo rivojlanishida bir qancha yangiliklar kuzatilgan bo'lib, bu fan bo'limining shakllanish yillarida taqribiy yarim-empirik metodlardan foydalanilar edi. Elektronlarning kimyoviy sistemalardagi harakati yadrolarning o'lchangan holatidagina ko'rilgan.

Hozirgi vaqtda kimyoviy reaksiyalarda, sistemalarda foto-qo'zg'alish va moddalarning parchalanish hodisalarida yadrolar xarakatining kvant nazariyasi rivojlanmoqda: kimyoviy lazerlardagi va molekulyar kristallardagi elektr o'tkazuvchanlik protsesslaridan tortib

biologik sistemalarning ishlab turish mexanizmlarigacha kvant-kimyoviy tekshirishlarning obyektlari tobora xilma-xil bo'lib bormoqda.

Hozirgi zamon rivojlangan hisoblash texnikasida molekularning energetik, magnit va boshqa xossalari kvant kimyo nazariyasi asosida o'rganish uchun bir necha maxsus dasturlar ishlab chiqilgan. Bunday dasturlar kompyutr yordamida taxlil qilinib, molekularning geometrik holati va boshqa kattaliklar hisoblab chiqiladi. Natijada molekulaning tuzilishi, uning reaksiya faolligi o'rganiladi.

O'zbekistonda kvant kimyo sohasidagi nazariy ishlar va ularni amaliyotda qo'llash bo'yicha ilmiy izlanishlar akademiklar tomonidan ilmiy jamoalarda hozirgi paytda ham davom ettirilmoqda.

Kvant kimyo usullari molekulyar biologiyada, masalan, biologik membranalar molekularini hisoblashda, modellashtirishda qo'llaniladi. Bundan tashqari materialshunoslikda elektr va magnit xossalari aniq belgilab olingan qotishmalar, yarimo'tgazgichlar, va shunga o'xshash materiallar olishda qo'llaniladi.

Yuqorilardan kelib chiqib, kvant kimyo elektronlarning bir-biriga bog'liqligini hisobga olishda, ayniqsa, katta miqdorda elektronlari bo'lgan molekular uchun kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasini jiddiy ravishda aniqlashtirishni, boshqa fanga bog'liqligini, qanday qonuniyatlarda, boshqa bo'lim va yo'nalishlarga qaraganda bu bo'lim boshqalaridan farq qilishini aytishimiz mumkin.

References:

1. Kimyo va hozirgi zamon. Toshkent "O'QITUVCHI" 1990
2. И. В. Казимирчик, Ю.Т. Третьяков 1989._224 b
3. J.C Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley 2004.
4. С. Д. Варфоломеев, Л.В.Кубасова Квант киме назарияси 1990
5. Кларк Т. Компьютерная химия. М. Мир. 1990