

**BDU fizika fakültəsi “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrasında  
təhsilin bakalavr pilləsində tədris olunan fənlər və onların**

**PROQRAMLARI**

**Fənlərin adları**

1. Molekul fizikası
2. Fizika (kvant fizikasının elementləri)

**FƏNLƏRİN PROQRAMLARI**

**Molekul fizikası**

**Giriş.**

Hidrogenəbənzər atomların atom orbitalları, onların radial və bucaqdan asılı hissələri. Atom orbitallarının elektron buludu şəklində göstərilməsi. Hidrogen atomunun müxtəlif hallarında elektron buludunun radial və bucaq paylanması.

Çoxelektronlu atomlar üçün mərkəzi sahə yaxınlaşması. Atom-spin orbitalları. Atomlarda elektronların halları. Atomların elektron təbəqələri və elektron konfigurasiyaları.

Elementlərin valentliyi və valentlik haqqında təsəvvürlərin inkişafı.

Atomun ionlaşma potensialı, elektrona hərisliyi və elektromənfiliyi. Atom və ion radiusları. Koordinasiya ədədi.

Molekullar üçün Şredinger tənliyi. Adiabatik yaxınlaşma-molekullarda elektron, rəqs və fırlanma hərəkətlərinin ayrılması.

Molekulların quruluşunun öyrənilməsinin əsas kvantmexaniki metodları. Valent rabitələri və molekulyar orbitallar metodları. Bu metodların tətbiqinə aid misallar. Hükkel metodu.  $\pi$ -elektronlu yaxınlaşma.

Molekulların reaksiyaya girmək qabiliyyətinin kvant nəzəriyyəsi. Atomların effektiv yükü, rabitələrin tərtibi, sərbəst valentlik. Molekulyar diaqramlar.

Kimyəvi fizika təsəvvürlərinə əsasən kimyəvi rabitənin müxtəlif növləri. Birelektronlu kimyəvi rabitə.  $H^+_2$  ionu. Rabitə əmələ gətirən və rabitə əmələ gətirməyən molekulyar orbitallar. Kovalent rabitənin kvant nəzəriyyəsi.  $H_2$  molekulu. İon rabitəsi. Donor-akseptor rabitəsi. Hidrogen rabitəsi, metallik rabitə. Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri.

İkiatomlu molekullarda elektronların halları. İkiatomlu molekulların elektron konfigurasiyası. Xətti molekulların elektron hallarının təsnifatı. Qeyri-xətti molekulların elektron halları.

Hibridləşmə nəzəriyyəsi. Kimyəvi rabitələrin istiqamətlənməsi. Valent rabitələri metodunun  $NH_3$  və  $H_2O$  molekullarına tətbiqi. Atom orbitallarının hibridləşməsi.  $sp^3$ -,  $sp^2$ - və  $sp$ - hibridləşmələr.

d-orbitalların iştirakı ilə baş verən hibridləşmələr. Atomun valent halı.  $\sigma$  -,  $\pi$  - və  $\delta$ -rabitələr.

$AB_n$ -tipli molekulların fəza quruluşu. Bir-, iki-, və üçqat rabitələr. Fəza və quruluş izomerliyi.

Kimyəvi rabitələrin uzunluğu. Valent bucaqları. Kimyəvi rabitələrin möhkəmliyi. Effektiv yük və kimyəvi rabitələrin polyarlığı. Kimyəvi rabitənin polyarizəlməsi. Qeyri-polyar və polyar molekullar.

## Ə D Ə B İ Y Y A T

### Əsas ədəbiyyat

1. Эйринг Г., Уолтер Дж. Кимбалл Дж. Квантовая химия.-М.Ил.,1948.
2. Коулсон Ч. Валентность. -М. Ил. 1965.
3. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М. ИЛ. 1965.
4. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К.Химическая связь - Киев,1975.
5. Жидомиров Г.М.,Багатурянц А.А.,Абронин И.А.Прикладная квантовая химия. М., 1979.
6. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики I, II часть. 2006
- 7.Nəbiyev N.S. Kvant kimyəvi yarımempirik metodlar. Bakı. 2002. 68 s.

### Əlavə ədəbiyyat

1. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под.ред. Дж. Сигала. 1980 т.І.
2. Məsimov E.Ə.,Hüseynov İ.İ., Mürsəlov T.M. Maddənin quruluşu.-Bakı 1997.
3. Məsimov E.Ə, Mürsəlov T.M. Atom fizikası, Bakı 2002.

Tərtib edən: dos.N.S.Nəbiyev

## Fizika (kvant fizikasının elementləri)

### Giriş

Kvant fizikasının əsas inkişaf mərhələləri. Kvant fizikası kvant kimyasının nəzəri əsasıdır. Kvant kimyasının inkişaf perspektivləri və tətbiqi, kimya məsələlərinin həllində onun rolu.

### I.Kvant fizikasının riyazi aparatı

Operator anlayışı. Xətti və ermit operatorlar və onların məxsusi funksiyaları və məxsusi qiymətləri. Operatorların diskret və kəsilməz spektrləri. Operatorların matris şəklində göstərilməsi. Bəzi fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorlar. Hamilton operatoru. Şredinger tənliyi. Dalğa funksiyası və onun xassələri. Fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətləri. Qeyri-müəyyənlik münasibətləri.

Bəzi əsas fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.

Bəzi sadə hallar üçün Şredinger tənliyinin həlli. Enerjinin və impuls momentinin kvantlanması. Cırlaşma.

### II.Atomların elektron quruluşu.

Hidrogenəbənzər atomlar üçün Şredinger tənliyinin həlli.

Hidrogenəbənzər atomların atom orbitalları, onların radial və bucaqdan asılı hissələri. Atom orbitallarının elektron buludu şəklində göstərilməsi. Hidrogen atomunun müxtəlif hallarında elektron buludunun radial və bucaq paylanması. Elektronun spini və spin funksiyasının xassələri.

Çoxelektronlu atomlar üçün Şredinger tənliyi və onun həlli üçün mərkəzi sahə yaxınlaşması. Atom spin orbitalları. Atomlarda elektronların halları. Atomların elektron təbəqələri və elektron konfigurasiyaları.

Elektronların seçilməzliyi. Determinant dalğa funksiyası və Pauli prinsipi. Hund qaydası. Qurma prinsipi.

Mendeleyev cədvəlinin kvant kimyəvi izahı. Elementlərin valentliyi və valentlik haqqında təsəvvürlərin inkişafı.

Atomun ionlaşma potensialı, elektrona hərisliyi və elektromənfiliyi. Atom və ion radiusları. Koordinasiya ədədi.

### III. Molekulların elektron quruluşu

Molekul üçün Şredinger tənliyi. Adiabatik yaxınlaşma-molekullarda elektron, rəqs və fırlanma hərəkətlərinin ayrılması. Molekulların quruluşunun öyrənilməsinin əsas kvant kimyəvi metodları. Valent rabitələri metodu. Bu metodun benzol molekuluна tətbiqi. Molekulyar orbitallar metodu və onun sadə variantı olan Hükkel metodu. Bu metodun tətbiqinə aid misallar.  $\pi$ -elektronlu yaxınlaşma.

Atom və molekulun tam elektron enerjisi. Xartri-Fok tənlikləri. Kупmans teoremi. Atom orbitallarının xətti kombinasiyası yaxınlaşmasında molekulyar orbitallar /MO LCAO/ metodu. Rutan tənlikləri. Molekulyar inteqrallar. Kvant kimyasında istifadə olunan yarımempirik metodlar.

Molekulların reaksiyaya girmək qabiliyyətinin kvant nəzəriyyəsi. Atomların effektiv yükü, rabitələrin tərtibi, sərbəst valentlik. Molekulyar diaqramlar.

### IV. Kimyəvi rabitələrin kvant nəzəriyyəsi.

Kvant kimyası təsəvvürlərinə əsasən kimyəvi rabitənin müxtəlif növləri. Birelektronlu kimyəvi rabitə.  $H^+_2$  ionu. Rabitə əmələ gətirən və rabitə əmələ gətirməyən molekulyar orbitallar. Kovalent rabitənin kvant nəzəriyyəsi.  $H_2$  molekulu. İon rabitəsi. Donor-akseptor rabitəsi. Hidrogen rabitəsi. Metallik rabitə. Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri.

Kimyəvi rabitələrin uzunluğu. Valent bucaqları. Kimyəvi rabitənin möhkəmliyi. Effektiv yük və kimyəvi rabitələrin polyarlığı. Kimyəvi rabitənin polyarizəlməsi. Qeyri-polyar və polyar molekullar.

Hibridləşmə nəzəriyyəsi. Kimyəvi rabitələrin istiqamətlənməsi. Valent rabitələri metodunun  $NH_3$  və  $H_2O$  molekullarına tətbiqi. Atom orbitallarının hibridləşməsi.  $sp^3$ -,  $sp^2$ - və  $sp$ - hibridləşmələr. d-orbitalların iştirakı ilə baş verən hibridləşmələr. Atomun valent halı.  $\sigma$ -,  $\pi$ - və  $\delta$ -rabitələr.  $AB_n$ -tipli molekulların fəza quruluşu. Bir-, iki-, və üçqat rabitələr.

### V. Atom və molekulların termləri.

Atomların elektron halları. Atom termləri. Termlərin incə və ifrat incə quruluşu. Spin-orbital qarşılıqlı təsiri. Termlərin multipletliyi.

Molekullarda elektronların halları. İkiatomlu molekulların molekulyar orbitalları və elektron konfigurasiyası: eyni atomlardan və müxtəlif atomlardan ibarət ikiatomlu molekullar. Xətti və qeyri-xətti molekulların elektron hallarının təsnifatı. Molekulların termləri və onların işarələnməsi.

### VI. Kompüter kvant kimyası.

Kvant kimyasında kompüterlərdən istifadə olunması. Atom və molekulların elektron quruluşunun hesablanması üçün istifadə olunan müasir alqoritmlər və proqram kompleksləri.

# ƏDƏBİYYAT <sup>4</sup>

## Əsas ədəbiyyat

1. Эйринг Г., Уолтер Дж. Кимбалл Дж. Квантовая химия.-М.Ил.,1948.
2. Коулсон Ч. Валентность. -М. Ил. 1965.
3. Стрейтвизер Э. Теория молекулярных орбит для химиков-органиков.-М.: ИЛ. 1965.
4. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М. Ил. 1972.
5. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К.Химическая связь - Киев,1975
6. Жидомиров Г.М., Багатурянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. -М., 1979.

## Əlavə ədəbiyyat

1. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков М:1980,т.т. 1,2.
2. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под.ред. Дж. Сигала. 1980 т.І.
3. Məsimov E.Ə., Hüseynov İ.İ., Mürsəlov T.M. Maddənin quruluşu. - Bakı 1997.

**Tərtib edən: b/m. F.N.Paşayev**

**BDU fizika fakültəsi “Nanomaterialların kimyəvi fizikası” kafedrasında  
təhsilin bakalavr pilləsində tədris olunan fənlər və onların**

**PROQRAMLARI**

**Fənlərin adları**

1. Molekul fizikası
2. Fizika (kvant fizikasının elementləri)

**FƏNLƏRİN PROQRAMLARI**

**Molekul fizikası**

**Giriş.**

Hidrogenəbənzər atomların atom orbitalları, onların radial və bucaqdan asılı hissələri. Atom orbitallarının elektron buludu şəklində göstərilməsi. Hidrogen atomunun müxtəlif hallarında elektron buludunun radial və bucaq paylanması.

Çoxelektronlu atomlar üçün mərkəzi sahə yaxınlaşması. Atom-spin orbitalları. Atomlarda elektronların halları. Atomların elektron təbəqələri və elektron konfigurasiyaları.

Elementlərin valentliyi və valentlik haqqında təsəvvürlərin inkişafı.

Atomun ionlaşma potensialı, elektrona hərisliyi və elektromənfiliyi. Atom və ion radiusları. Koordinasiya ədədi.

Molekullar üçün Şredinger tənliyi. Adiabatik yaxınlaşma-molekullarda elektron, rəqs və fırlanma hərəkətlərinin ayrılması.

Molekulların quruluşunun öyrənilməsinin əsas kvantmexaniki metodları. Valent rabitələri və molekulyar orbitallar metodları. Bu metodların tətbiqinə aid misallar. Hükkel metodu.  $\pi$ -elektronlu yaxınlaşma.

Molekulların reaksiyaya girmək qabiliyyətinin kvant nəzəriyyəsi. Atomların effektiv yükü, rabitələrin tərtibi, sərbəst valentlik. Molekulyar diaqramlar.

Kimyəvi fizika təsəvvürlərinə əsasən kimyəvi rabitənin müxtəlif növləri. Birelektronlu kimyəvi rabitə.  $H^+_2$  ionu. Rabitə əmələ gətirən və rabitə əmələ gətirməyən molekulyar orbitallar. Kovalent rabitənin kvant nəzəriyyəsi.  $H_2$  molekulu. İon rabitəsi. Donor-akseptor rabitəsi. Hidrogen rabitəsi, metallik rabitə. Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri.

İkiatomlu molekullarda elektronların halları. İkiatomlu molekulların elektron konfigurasiyası. Xətti molekulların elektron hallarının təsnifatı. Qeyri-xətti molekulların elektron halları.

Hibridləşmə nəzəriyyəsi. Kimyəvi rabitələrin istiqamətlənməsi. Valent rabitələri metodunun  $NH_3$  və  $H_2O$  molekullarına tətbiqi. Atom orbitallarının hibridləşməsi.  $sp^3$ -,  $sp^2$ - və  $sp$ - hibridləşmələr.

d-orbitalların iştirakı ilə baş verən hibridləşmələr. Atomun valent halı.  $\sigma$  -,  $\pi$  - və  $\delta$ -rabitələr.

$AB_n$ -tipli molekulların fəza quruluşu. Bir-, iki-, və üçqat rabitələr. Fəza və quruluş izomerliyi.

Kimyəvi rabitələrin uzunluğu. Valent bucaqları. Kimyəvi rabitələrin möhkəmliyi. Effektiv yük və kimyəvi rabitələrin polyarlığı. Kimyəvi rabitənin polyarizəlməsi. Qeyri-polyar və polyar molekullar.

## Ə D Ə B İ Y Y A T

### Əsas ədəbiyyat

1. Эйринг Г., Уолтер Дж. Кимбалл Дж. Квантовая химия.-М.Ил.,1948.
2. Коулсон Ч. Валентность. -М. Ил. 1965.
3. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М. ИЛ. 1965.
4. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К.Химическая связь - Киев,1975.
5. Жидомиров Г.М.,Багатурянц А.А.,Абронин И.А.Прикладная квантовая химия. М., 1979.
6. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики I, II часть. 2006
- 7.Nəbiyev N.S. Kvant kimyəvi yarımempirik metodlar. Bakı. 2002. 68 s.

### Əlavə ədəbiyyat

1. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под.ред. Дж. Сигала. 1980 т.І.
2. Məsimov E.Ə.,Hüseynov İ.İ., Mürsəlov T.M. Maddənin quruluşu.-Bakı 1997.
3. Məsimov E.Ə, Mürsəlov T.M. Atom fizikası, Bakı 2002.

Tərtib edən: dos.N.S.Nəbiyev

## Fizika (kvant fizikasının elementləri)

### Giriş

Kvant fizikasının əsas inkişaf mərhələləri. Kvant fizikası kvant kimyasının nəzəri əsasıdır. Kvant kimyasının inkişaf perspektivləri və tətbiqi, kimya məsələlərinin həllində onun rolu.

### I.Kvant fizikasının riyazi aparatı

Operator anlayışı. Xətti və ermit operatorlar və onların məxsusi funksiyaları və məxsusi qiymətləri. Operatorların diskret və kəsilməz spektrləri. Operatorların matris şəklində göstərilməsi. Bəzi fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorlar. Hamilton operatoru. Şredinger tənliyi. Dalğa funksiyası və onun xassələri. Fiziki kəmiyyətlərin orta qiymətləri. Qeyri-müəyyənlik münasibətləri.

Bəzi əsas fiziki kəmiyyətlərə uyğun operatorların məxsusi qiymətləri və məxsusi funksiyaları.

Bəzi sadə hallar üçün Şredinger tənliyinin həlli. Enerjinin və impuls momentinin kvantlanması. Cırlaşma.

### II.Atomların elektron quruluşu.

Hidrogenəbənzər atomlar üçün Şredinger tənliyinin həlli.

Hidrogenəbənzər atomların atom orbitalları, onların radial və bucaqdan asılı hissələri. Atom orbitallarının elektron buludu şəklində göstərilməsi. Hidrogen atomunun müxtəlif hallarında elektron buludunun radial və bucaq paylanması. Elektronun spini və spin funksiyasının xassələri.

Çoxelektronlu atomlar üçün Şredinger tənliyi və onun həlli üçün mərkəzi sahə yaxınlaşması. Atom spin orbitalları. Atomlarda elektronların halları. Atomların elektron təbəqələri və elektron konfigurasiyaları.

Elektronların seçilməzliyi. Determinant dalğa funksiyası və Pauli prinsipi. Hund qaydası. Qurma prinsipi.

Mendeleyev cədvəlinin kvant kimyəvi izahı. Elementlərin valentliyi və valentlik haqqında təsəvvürlərin inkişafı.

Atomun ionlaşma potensialı, elektrona hərisliyi və elektromənfiliyi. Atom və ion radiusları. Koordinasiya ədədi.

### III. Molekulların elektron quruluşu

Molekul üçün Şredinger tənliyi. Adiabatik yaxınlaşma-molekullarda elektron, rəqs və fırlanma hərəkətlərinin ayrılması. Molekulların quruluşunun öyrənilməsinin əsas kvant kimyəvi metodları. Valent rabitələri metodu. Bu metodun benzol molekuluна tətbiqi. Molekulyar orbitallar metodu və onun sadə variantı olan Hükkel metodu. Bu metodun tətbiqinə aid misallar.  $\pi$ -elektronlu yaxınlaşma.

Atom və molekulun tam elektron enerjisi. Xartri-Fok tənlikləri. Kuppmans teoremi. Atom orbitallarının xətti kombinasiyası yaxınlaşmasında molekulyar orbitallar /MO LCAO/ metodu. Rutan tənlikləri. Molekulyar inteqrallar. Kvant kimyasında istifadə olunan yarımempirik metodlar.

Molekulların reaksiyaya girmək qabiliyyətinin kvant nəzəriyyəsi. Atomların effektiv yükü, rabitələrin tərtibi, sərbəst valentlik. Molekulyar diaqramlar.

### IV. Kimyəvi rabitələrin kvant nəzəriyyəsi.

Kvant kimyası təsəvvürlərinə əsasən kimyəvi rabitənin müxtəlif növləri. Birelektronlu kimyəvi rabitə.  $H^+_2$  ionu. Rabitə əmələ gətirən və rabitə əmələ gətirməyən molekulyar orbitallar. Kovalent rabitənin kvant nəzəriyyəsi.  $H_2$  molekulu. İon rabitəsi. Donor-akseptor rabitəsi. Hidrogen rabitəsi. Metallik rabitə. Van-der-Vaals qarşılıqlı təsiri.

Kimyəvi rabitələrin uzunluğu. Valent bucaqları. Kimyəvi rabitənin möhkəmliyi. Effektiv yük və kimyəvi rabitələrin polyarlığı. Kimyəvi rabitənin polyarizəlməsi. Qeyri-polyar və polyar molekullar.

Hibridləşmə nəzəriyyəsi. Kimyəvi rabitələrin istiqamətlənməsi. Valent rabitələri metodunun  $NH_3$  və  $H_2O$  molekullarına tətbiqi. Atom orbitallarının hibridləşməsi.  $sp^3$ -,  $sp^2$ - və  $sp$ - hibridləşmələr. d-orbitalların iştirakı ilə baş verən hibridləşmələr. Atomun valent halı.  $\sigma$ -,  $\pi$ - və  $\delta$ -rabitələr.  $AB_n$ -tipli molekulların fəza quruluşu. Bir-, iki-, və üçqat rabitələr.

### .Atom və molekulların termləri.

Atomların elektron halları. Atom termləri. Termlərin incə və ifrat incə quruluşu. Spin-orbital qarşılıqlı təsiri. Termlərin multipletliyi.

Molekullarda elektronların halları. İkiatomlu molekulların molekulyar orbitalları və elektron konfigurasiyası: eyni atomlardan və müxtəlif atomlardan ibarət ikiatomlu molekullar. Xətti və qeyri-xətti molekulların elektron hallarının təsnifatı. Molekulların termləri və onların işarələnməsi.

### VI. Kompüter kvant kimyası.

Kvant kimyasında kompüterlərdən istifadə olunması. Atom və molekulların elektron quruluşunun hesablanması üçün istifadə olunan müasir alqoritmlər və proqram kompleksləri.

# ƏDƏBİYYAT <sup>4</sup>

## Əsas ədəbiyyat

1. Эйринг Г., Уолтер Дж. Кимбалл Дж. Квантовая химия.-М.Ил.,1948.
2. Коулсон Ч. Валентность. -М. Ил. 1965.
3. Стрейтвизер Э. Теория молекулярных орбит для химиков-органиков.-М.: ИЛ. 1965.
4. Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. - М. Ил. 1972.
5. Яцимирский К.Б., Яцимирский В.К.Химическая связь - Киев,1975
6. Жидомиров Г.М., Багатурянц А.А., Абронин И.А. Прикладная квантовая химия. -М., 1979.

## Əlavə ədəbiyyat

1. Мелешина А.М. Курс квантовой механики для химиков М:1980,т.т. 1,2.
2. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры. Под.ред. Дж. Сигала. 1980 т.І.
3. Məsimov E.Ə., Hüseynov İ.İ., Mürsəlov T.M. Maddənin quruluşu. - Bakı 1997.

**Tərtib edən: b/m. F.N.Paşayev**