

**BDU fizika fakültəsi «Nanomaterialların kimyəvi fizikası» kafedrasında
təhsilin magistr pilləsində tədris olunan fənlər və onların
P R O Q R A M L A R I**

Fənlərin adları

1. Fizikanın tarixi və metodologiyası
2. Atomun kvant nəzəriyyəsi
3. Atom və molekul fizikasında yarımempirik kvantkimyəvi metodlar
4. Atom spektroskopiyasının əsasları
5. Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar
6. Molekulun kvant nəzəriyyəsi
7. Atom və molekul fizikasında quruluş və xassə məsələləri
8. Simmetriya nəzəriyyəsinin atom və molekul fizikasında tətbiqləri
9. Molekulyar spektroskopiyanın nəzəri əsasları
10. Molekulyar köməkçi funksiyalar
11. Maddənin quruluşunun təcrübi tədqiqat metodları
12. Kompleks birləşmələrin molekulları
13. Atom və molekul fizikasında elektron korelyasiyasının və relyativistik effektlərin nəzərə alınması

F Ə N L Ə R İ N P R O Q R A M L A R I

Fizikanın tarixi və metodologiyası

1. Giriş.
2. Zamanın ölçülməsi
3. Mexanika
4. Qravitasiya və uzağa təsir
5. Optika
6. Elektrik və maqnetizm
7. Fizikada hesablama sistemi
8. İstilik haqqında əsas baxışlar
9. Enerjinin saxlanma qanunu
10. Termodinamika
11. Atom fizikası
12. Nüvə fizikası
13. Kristallofizikası
14. İstilik şüalanması
15. Kvant fizikası
16. Azərbaycanda fizikanın inkişafı.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat:

1. М.Лауе История физики, Гос.Изд.Тех-Теорет литературы, М. 1956
2. Б.И.Спасский История физики, часть I и II, изд. МГУ, 1964
3. И.К.Кикоин Рассказы о физике и физиках, Москва «Наука», глав. Редакция физ-мат. Литературы 1986
4. Кудрявцев П.С. История физики. т.1-3, М., 1971, 563 с., 487 с.
5. Дорфман Я.Г. Всемирная история физики, т.1-2, М., 1979, 317 с.
6. Кудрявцев П.С. Курс истории физики, М., 1974, 312 с.
7. Старостин Б.Ф., Воронков Ю.С., Медведь А.Н., Афанасьев Ю.Н., Орел В.М. Хрестоматия по истории науки и техники. 2005. 704 с.

Əlavə ədəbiyyat

1. Физический энциклопедический словарь, т.т. 1-5, М., 1966.
2. Развитие физики в России (очерки). т.1-2, М., 1970, 415 с.
3. Гейзенберг В. Философские проблемы атомной физики. 2004. 192 с
4. Шредингер Э. «Мой взгляд на мир» Пер.с нем. 2005. 152 с
5. Золотов Ю.А. «Делающие науку. Кто они?» Из записных книжек. 2006. 160 с.

Tərtib edən: dos.S.Ə.Axundov

Atomun kvant nəzəriyyəsi

Giriş. Atomun quruluşu haqqında kvant nəzəriyyəsinin inkişaf tarixi.

Hidrogenəbənzər atomlar üçün Bor-Zommerfeld nəzəriyyəsi. Zommerfeldin kvantlanma şərtlərindəki inteqralların hesablanması. Dairəvi və elliptik orbitlər. Fəza kvantlanması. Bor-Zommerfeld nəzəriyyəsinin çətinlikləri.

De-Broyl hipotezi. Kvant mexanikasının yaranması. Şredinger tənliyi.

Mərkəzi sahədə hərəkətə aid Şredinger tənliyinin hidrogenəbənzər atomlar üçün həlli. Hidrogenəbənzər atomun "gizli" simmetriyası. Birləşmiş normalanmış Laqer çoxhədliləri və onların xassələri.

Çoxelektronlu atomlar üçün mərkəzi sahə yaxınlaşması. Atomlarda elektronlar arasında Kulon "qalıq" qarşılıqlı təsirinin nəzərə alınmaması. Sərbəst elektronlar modeli. Çoxelektronlu atomun elektron təbəqələri, elektron layları və elektron konfigurasiyaları. Mərkəzi sahədə hərəkət edən bir elektronun dalğa funksiyası.

Mərkəzi sahə yaxınlaşmasında atomlarda elektronların halları və spektral seriyalar. Seçmə qaydaları. Atom orbitalları və onlara uyğun elektron buludları. Elektronun spin funksiyası və onun xassələri. Atom-spin orbitalları.

Elektronların seçilməzliyi. Determinant dalğa funksiyası. Pauli prinsipi. Elementlərin dövrü sisteminin kvantmexaniki izahı. Mendeleyev cədvəlinə görə elementlərin valentliyinin təyini.

Determinant dalğa funksiyaları vasitəsilə matris elementlərinin hesablanması haqqında teorem və həyəcanlanma nəzəriyyəsinin birinci yaxınlaşmasında çoxelektronlu atomun tam elektron enerjisinin hesablanması.

Qapalı təbəqəli atomlar. Unzold teoremi. Qapalı təbəqələrdən kənarında bir elektronu olan atomlar.

Atomun tam enerjisi üçün ümumi düsturun qapalı təbəqələrdən kənarında iki və daha çox elektronu olan atomlara tətbiqi. LS-rabitə yaxınlaşmasında səviyələrin elektrostatik və spin-orbital parçalanmasının ümumi mənzərəsi. Termlər və onların incə quruluşu. Hund qaydaları. Atomun elektron konfigurasiyasından alınan termlərin və onların dalğa funksiyalarının tapılması. Termlərin enerjilərinin hesablanması. jj-rabitə yaxınlaşması və bu yaxınlaşmada elektronların hallarının sistemləşdirilməsi.

Ekranlaşmış sahə modelində meydana çıxan çətinliklər və onların aradan qaldırılması üçün elektron korelyasiyasının nəzərə alınması. Korelyasiya vuruğu daxil olan dalğa funksiyaları metodu. Konfigurasiya qarşılıqlı təsiri metodu.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat:

1. Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров, М., ИЛ, 1949, 440 с.
2. Бете Г. Квантовая механика, М. Мир, 1965, 333 с.
3. Левич Е.М. Курс теоретической физики, М., Наука, т.2, 1973, 936 с.
4. Юцис А.П., Савукина А.Ю. Математические основы теории атома. Вильнюс, 1977, 480 с.
5. Мəсимов Е.Ə., Нүсəјнов И.И., Мүрсəлов Т.М. Маддəнин гурулушу. Бакы, 1997, 325 с.
6. Мəсимов Е.Ə., Мүрсəлов Т.М., Atom fizikasi, Bakı, 2002, 912 s.
7. Барсуков О.А., Ельяшевич М.А. Основы атомной физики. Издательство Научный мир. 2006. с. 648

Əlavə ədəbiyyat:

1. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, М., ВШ, 1979, 407 с.
2. Уилсон С. Электронные корреляции в молекулах, М., Мир, 1987, 304 с.

Tərtib edən: dos. N.S.Nəbiyev

Atom və molekul fizikasında yarımempirik kvantkimyəvi metodlar

Çoxelektronlu sistemlərin kvant mexanikası və onun çətinlikləri. Variasiya prinsipinə əsaslanan metodlar. Molekulyar orbitallar və valent rabitələri metodları. Xartri-Fok-Rutan tənlikləri və çoxmərkəzli inteqrallar. Qeyri-empirik kvant-mexaniki hesablamalar haqqında qısa məlumat.

Yarımempirik metodların zəruriliyi, onların empirik və nəzəri əsasları. π -və valent elektron yaxınlaşmaları. Effektiv hamilton operatoru və lokallaşmamış kimyəvi rabitələr anlayışları. Malliken-Volfsberq-Helmhols metodu. Hükkel metodu.

Diferensial örtmə (DÖ). DÖ-nin tam və qismən nəzərə alınmaması metodlarında Fok operatorunun matris elementləri və örtmə inteqralları. Empirik parametrlərin köməyi ilə bir mərkəzli və ikimərkəzli inteqralların qiymətləndirilməsi.

CNDO metodları, Heppert–Mayer-Sklyar yaxınlaşması. Matris elementlərinin ionlaşma potensialı və elektrona hərislik vasitəsi ilə qiymətləndirilməsi. Nəzəri hesablanan inteqrallar, metodun üçüncü dövr elementləri üçün təklif olunmuş variantları. Molekulun həndəsi parametrlərinin, elektrik xassələrinin və qüvvə sabitlərinin hesablanması.

INDO metodları. Elektronların spinlərinin birbaşa nəzərə alınması. Müxtəlif elektron konfigurasiyalarına aid halların fərqləndirilməsi. Birmərkəzli inteqralların Sleyter-Kondon parametrləri ilə ifadə olunması. İfrat incə parçalanma sabitlərinin və spin-spin qarşılıqlı təsirlərinin hesablanması.

MINDO metodları. İkimərkəzli matris elementlərinin empirik parametrlərlə qiymətləndirilməsi. Yaranma istiliyinin, NMR ekranlaşma sabitlərinin, ionlaşma potensialının hesablanması.

İkimərkəzli DÖ nəzərə alınmaması metodları.

Lokallaşmış orbitalların konfigurasiya qarşılıqlı təsiri metodları. **PCILO**-metodları.

Statistik modellər, X_α -metodları.

Yarımpirik metodların parametrləşdirilməsi problemləri, universallıq və inivariantlıq.

Tətbiqi hesablama proqram paketləri haqqında ümumi məlumat. MORAC, HYPERCHEM, AM, PM və s.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Полуэмпирические методы расчета электронной структуры, т.1,2, под ред. Дж. Сегал, М., Мир, 1980, 371 с.
2. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М., Теория строения молекул (электронные оболочки), М., ВШ, 1979, 407 с.
3. Шембелов Г.А.и др., Квантохимические методы расчета молекул, М., Химия, 1980, 255 с.
4. Nəbiyev N.S. Kvant kimyəvi yarımpirik metodlar. Bakı. 2002. 68 s.

Əlavə ədəbiyyat:

1. Костиков Р.Р. и др., Основы теоретической органической химии, М., Наука, 1982, 248 с.
2. Баранов В.И. и др., Программа расчета электронно-колебательных спектров многоатомных молекул, М., Наука, 1983, 192 с.

Tərtib edən: dos. N.S.Nəbiyev

Atom spektroskopiyasının əsasları

Giriş.

Spontan və məcburi keçidlərin ehtimalları. Elektrik və maqnit multipol süalanması. Enerji səviyyələrinin və spektral xətlərin təbii eni. Sadə simmetriya növləri üçün seçmə qaydaları.

Hidrogen atomunun və hidrogenəbənzər ionların enerji səviyyələri, spektrləri və spektral seriyaları. Birelektronlu atomlar üçün seçmə qaydaları və keçidlərin ehtimalları. Enerji səviyyələrinin və spektral xətlərin incə quruluşu.

Qələvi metal atomlarının enerji səviyyələrinin dublet quruluşu.

Atomların termləri. Termlərin multiplet parçalanması.

Atomların enerji səviyyələrinin maqnit sahəsində parçalanması. Zeyeman effekti. Paşen-Bak effekti. Elektron-maqnit rezonansı.

Atomların enerji səviyyələrinin elektrik sahəsində parçalanması. Hidrogen atomu üçün Ştark effekti. Atomlar üçün ümumi halda Ştark effekti.

Atomların xarakteristik rentgen spektrləri.

Atom nüvələrinin momentləri. Nüvə spektroskopiyası haqqında anlayış.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия, Атомная спектроскопия, 2006, 416 с
2. Фриш С.Э., Оптические спектры атомов, М., 1963, 640 с.
3. Собельман И.И., Введение в теорию атомных спектров, М.,Наука,1977, 319 с

Əlavə ədəbiyyat:

1. Мəсимов Е.Ə., Һүсејнов И.И., Мүрсəлов Т.М., Маддəнин гурулушу, Бакы, 1997, 325 с.
2. Мəсимов Е.Ə., Мүрсəлов Т.М., Atom fizikasы, Bakı, 2002, 912 s.

**Tərtib edənlər: dos. N.S.Nəbiyev
b/m. F.H.Paşayev**

Atom və molekul fizikasında riyazi metodlar

Giriş.

Molekullar üçün Xartri-Fok-Rutan tənliklərinə daxil olan molekulyar (çoxmərkəzli) integralların təsnifatı.

Kompleks və həqiqi sleyter funksiyaları. Onların xassələri. Birləşmiş normalanmış Lejandr funksiyaları. Həqiqi və sferik funksiyalar. Onların xassələri.

Bir nöqtədə mərkəzləşmiş iki kompleks sferik funksiyanın və iki həqiqi sferik funksiyanın hasilinin ayrılışı. Bu ayrılış düsturlarında əmsalların tapılması. Qaunt əmsalları. Onların ifadəsi və cədvəli.

Elliptik koordinatlar. Nöqtənin dekart və sferik koordinatları ilə elliptik koordinatları arasında əlaqə. Elliptik koordinatlarda həcm elementi.

Müxtəlif nöqtələrdə mərkəzləşmiş iki birləşmiş normalanmış Lejandr funksiyalarının hasilinin elliptik koordinatlarda ayrılışı. Binomial hasil və onun ayrılış əmsallarının Nyuton binomu əmsalları ilə ifadəsi.

Bir nöqtədə mərkəzləşmiş sleyter atom orbitallarının digər nöqtədə mərkəzləşmiş sleyter funksiyaları üzrə sıraya ayrılışı.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики I, II часть. 2006
2. Б.С.Александров, А.Б.Болотин, Н.П.Пошюнайте, Р.И.Ракаукас, В.К.Шугуров, Многоцентровые интегралы, 701-75 Деп. от 13/Ш-1975.
3. Р.Мак-Вини, Б.Сатклиф, Квантовая механика молекул, М., Мир, 1972, 380 с.
4. Д.А.Варшалович, А.Н.Маскалев, В.К.Херсонский, Квантовая теория углового момента, Л., Наука, 1975, 437 с.

Əlavə ədəbiyyat:

1. А.П.Юцис, А.А.Бандзайтис, Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, 1977, 470 с.
2. Мясимов Е.Я., Мцрсялов Т.М., Атом физикасы, Баку, 2002, 912 с.

Tərtib edən: b/m. F.H.Paşayev

Molekulun kvant nəzəriyyəsi

Giriş.

Molekullarda əsas hərəkət növləri. Molekullar üçün Şredinger tənliyi və onun həlli zamanı meydana çıxan riyazi çətinliklər. Adiabatik yaxınlaşma. Molekulda elektronların və nüvələrin hərəkətinin ayrılması. Born-Oppenheimer şərti. Molekulların fəza konfigurasiyası. Simmetrik konfigurasiyaların dayanıqlığı. Yan-Teller teoremi.

Molekullarda elektronların hərəkəti üçün Şredinger tənliyi və onu dəqiq həll etməyin mümkün olmaması. Molekullar üçün Şredinger tənliyini həll etmək üçün təqribi metodlar. Birelektronlu yaxınlaşma. Molekulyar orbitallar metodu. Xartri və Xartri-Fok tənlikləri. Xartri-Fok tənliklərində mübadilə qarşılıqlı təsir enerjisinin ifadəsi. Kупmans teoremi. Atom və molekulun ionlaşma potensialının nəzəri hesablanması. Xartri-Fok tənliklərinin öz-özünə qərarlaşmış sahə metoduna görə həlli qaydası. Xartri-Fok tənliklərinin həlli zamanı meydana çıxan prinsipial çətinliklər. Xartri-Fok problemi üçün Rutan metodu. Molekulyar orbitalların atom orbitallarının xətti kombinasiyası (MO LCAO) şəklində göstərilməsi. Rutan tənliklərinin çıxarılışı. Xartri-Fok-Rutan tənliklərinin öz-özünə qərarlaşmış sahə metodu ilə həlli və kompyüterlərdən istifadə edilməsi. Xartri-Fok-Rutan metoduna əsasən molekulların həyəcanlaşma və ionlaşma enerjilərinin hesablanması. Xartri-Fok-Rutan

tənliklərində çoxmərkəzli integralların meydana çıxması və onların hesablanmasının riyazi çətinlikləri.

Ən sadə molekulyar sistem olan H_2^+ ionu üçün Xartri-Fok-Rutan tənliklərinin həlli. Birelektronlu kimyəvi rabitənin kvant mexanikası təsəvvürlərinə görə izahı. Rabitə əmələ gətirən və rabitə əmələ gətirməyən molekulyar orbitallar. H_2^+ ionu üçün enerjinin nüvələrarası məsafədən asılılığı və onun qrafikləri.

Hidrogen molekulu üçün Şredinger tənliyinin Qaytler-London metodu ilə həll edilməsi. Kovalent rabitənin yaranmasının izahı. Kovalent rabitənin yaranmasında elektronların spinlərinin rolu. Qaytler-London metodunun müxtəlif nüvəli ikiatomlu molekullara tətbiqi. Heteropolyar rabitə. İkiatomlu molekullarda elektronların hallarının təsnifatı və işarələnməsi. İkiatomlu molekulların elektron hallarının təsnifatı. İkiatomlu molekulların termlərinin, bu termlərin dalğa funksiyalarının tapılması və enerjilərinin hesablanması.

Qaytler-London metodunun çoxatomlu molekullar üçün ümumiləşdirilməsi. Valent rabitələri metodu. "Limit" quruluşları və onların tapılması üçün Rumer qaydası. Rezonans nəzəriyyəsi. Valent rabitələri metodunun benzol molekuluna tətbiqi. Valent rabitələri metodunun çətinlikləri.

İstiqamətlənmiş valentlik nəzəriyyəsi. Valent rabitələri metodunun tətbiqi ilə çoxatomlu molekullarda kovalent rabitələrin öyrənilməsi. NH_3 və H_2O molekullarında kovalent rabitələr. Maksimal örtmə prinsipi. σ - və π -rabitələr. Atom orbitallarının hibridləşməsi. sp^3 - , sp^2 - və sp - hibridləşmələr. Atomun valent halı. Metan, etan və etilen molekullarının fəza və elektron quruluşu. Kompleks birləşmələr yaranarkən atom orbitallarının hibridləşməsi.

Kimyəvi rabitələrin növləri. Elektron buludunun paylanması xarakterinə görə kimyəvi rabitələrin təsnifatı: kovalent rabitə, ion rabitəsi, donor-akseptor və dativ rabitələr. Hidrogen rabitəsi, metallik rabitə.

Doymamış karbohidrogenlər üçün π -elektronlu yaxınlaşma. Gövdə potensialı. Hükkel metodu. Hükkel metodunun tətbiqinə aid misallar. Molekulların reaksiyaya girmək qabiliyyətinin kvant nəzəriyyəsi. Molekullarda atomların effektiv yükləri. Rabitə tərtibi və sərbəst valentlik. Rabitə tərtibi ilə rabitə uzunluğu arasında asılılıq. Molekulyar diaqramlar və onların qurulmasına aid misallar. Butadien və benzol molekullarında effektiv yüklərin, rabitə tərtiblərinin və sərbəst valentliklərin Hükkel metoduna əsasən hesablanması.

Molekulların kvantmexaniki hesablanması üçün kimyəvi fizikada istifadə olunan yarımempirik metodlar. Bu metodlardan istifadə edilməsinin labüdlüyü.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Эйринг Г., Уолтер Дж., Кимбалл Дж., Квантовая химия, М, ИЛ, 1948, 527 с.
2. Маррел Дж., Кеттл С.,Теддер Дж., Теория валентности, М., Мир, 1968, 520 с.
3. Давыдов А.С., Квантовая механика, М., 1973, 703 с.
4. Цюлик Л., Квантовая химия, т.1, М., Мир, 1976, 512 с.
5. Заградник Р., Полак Р., Основы квантовой химии, М., Мир, 1979, 504 с.

6. Степанов Н.Ф. Квантовая химия М. 2001. с. 520
7. Майер И. Избранные главы квантовой химии. Издательство БИНОМ. 2006. 384 с.
8. Грибов Л.А., Муштакова С.П. Квантовая химия. Учебник-М. Гардарики. 1999.-390 с

Əlavə ədəbiyyat:

1. Минкин В.И.,Симкин Б.Я., Миняев Р.М., Теория строения молекул, М., ВШ, 1979, 407 с.
2. Щембелов Г.А., Устынюк Ю.А., Мамаев В.М. и др. Квантовохимические методы расчета молекул, М., Химия, 1980, 255 с.
3. Современные проблемы квантовой химии, Л., 1986, 319 с.
4. Мәсимов Е.Ә., Һүсејнов И.И., Мүрсәлов Т.М., Маддәнин гурулушу, Бакы, 1997, 325 с.

**Tərtib edənlər: dos. N.S.Nəbiyev
b/m. F.H.Paşayev**

Atom və molekul fizikasında quruluş və xassə məsələləri

Giriş.

Kristalloqrafiyanın əsasları. Sadə simmetriya elementləri. Kristalların həndəsi təsviri. Kristalların təsviri. Kristalların təsnifatı: kristalların sinqoniya və siniflərə bölünməsi.

Rentgen quruluş təhlili. Rentgen şüalarının atomdan və sadə qəfəsdən səpilməsinin kinematik nəzəriyyəsi. İntensivliyin ifadəsinə daxil olan vuruqlar: quruluş amplitudu, Lorens vuruğu, temperatur vuruğu, atom amplitudu və udulma vuruğu.

Elektronoqrafiyanın əsasları.

Elektron şüasının neytral atomdan səpilməsi.

Orta və ağır atomlardan səpilmədə elektron şüası üçün atom amplitudu.

İondan səpilmə. Quruluş amplitudu. Temperatur faktoru.

İdeal monokristaldan səpilmədə intensivlik. Mozaik monokristaldan səpilmədə intensivlik. Teksturadan səpilmənin intensivliyi. Polikristaldan səpilmənin intensivliyi. Elektronoqramların növü və həndəsi nəzəriyyəsi.

Elektronların atomdan səpilməsində inteqral xarakteristikaları. Xüsusi hallar üçün atom amplitudu.

Molekulların fəza quruluşu və onun təcrübi üsullarla təyin edilməsi üçün əlavə metodları: rentgen quruluş analizi, NMR, EMR, İQ, İD və s. Konformasiya, izomer, konfigurasiya anlayışları. Daxili fırlanma və dönmə izomerliyi. Molekulların fəza quruluşunu təyin edən qarşılıqlı təsirlər. Qeyri-valent, elektrostatik və torsion qarşılıqlı təsirlər. Hidrogen rabitəsi, hidrofob və hidrofil qüvvələr.

Molekulların elektrik xassələri. Dielektrik nüfuzluğu. Molekulların polyarizəlməsi. Bor atomunun polyarizəlmə əmsalinin hesablanması. Polyar və qeyri-polyar molekullar. Atom və molekulların dipol momentləri və onların

təyin olunması metodları. Həyəcanlaşma nəzəriyyəsinin köməyi ilə atomların polyarizəlmə əmsallarının hesablanması.

Molekulların maqnit xassələri. Atom və molekullarda para- və diamagnetizm. Molekullar və radikallar maqnit sahəsində. Maqnit rezonansı. Kompleks birləşmələrin maqnit xassələri. Maqnitooptik hadisələr.

Makromolekulların quruluşu və fiziki xassələri. Monomer. Polimer. Polimerlərdə konformasiya məsələləri. Polimerlərin üstmolekulyar quruluşları. Polimerlərin bükülməsinin termodinamikasının ümumi məsələləri. Polimer kompozisiyalar. Polimerlərdə və onların əsasında alınmış mikro- və nanokompozisiyaların aktiv xassələri.

Elektretlər. Elektretlərin tipləri və alınma üsulları. Homo- və hetero yüklər. Elektretlərin yaşama müddətləri və tədqiqat üsulları. Pyezo- və piroelektrik effekti. Pyezoelektriklərin quruluşunun və xassələrinin tədqiqi üsulları. Piroelektriklər. Xətti və qeyri-xətti piroelektriklər. Dielektriklərin öyrənilməsinin relaksasiya üsulları. Amin turşuları. Peptidlər. Zülallar.

Makromolekulların elektron və fəza quruluşunun nəzəri üsullarla tədqiq edilməsi. Empirik, qeyri-empirik və yarımempirik metodlar.

Molekulyar mexanika. Makromolekulların fəza quruluşunun mərhələli üsulla öyrənilməsi.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Пинскер З.Г., Дифракция электронов, М., 1949, 404 с.
2. Флинт Е.Е., Начала кристаллографии, М., 1952, 242 с.
3. Вайнштейн Б.К., Структурная электронография, М., 1956, 314 с.
4. Китайгородский А.И., Теория структурного анализа, М., 1958, 284 с.
5. В.И.Иверенова, Г.П.Ревкевич Теория рассеяния рентгеновских лучей. Изд. МГУ, 1972
6. Гомбаш В. Квантовая механика многоэлектронных систем, М., ИЛ., 1972, 276 с.
8. Волкенштейн М.В., Строение и физические свойства молекул, М., изд. АН СССР, 1955, 638 с.
9. Дашевский В.Г., Конформация органических молекул, М.,Химия, 1982,272с.

Əlavə ədəbiyyat:

1. Быков Г.В., Электронные заряды связей в органических соединениях, М., изд. АН СССР, 1960, 178 с.
2. Под ред. В.Н.Кулезнева., Основы физики и химии полимеров, М.,высшая школа 1977. 247с.
3. Сеслер, Электреты, М. 1984, 358 с.
4. И.П. Суздалев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва, 2006 589с.

Simmetriya nəzəriyyəsinin atom və molekul fizikasında tətbiqləri

Giriş.

Simmetriya nəzəriyyəsinin atom və molekul fizikasında rolu. Simmetriya çevrilmələrinin növləri.

Simmetriya çevrilmələri qrupu. Qrupun tərifi. Qrupa aid misallar. Abstrakt qruplar. Qrup üzrə sürüşmə. Alt qruplar və onlara aid misallar. Laqranj teoremi. Qoşma elementlər və siniflər. İnvariant alt qruplar. Faktor-qrup. İzomorfizm və homomorfizm.

Atom və molekulara aid simmetriya çevrilmələri qrupları. Yerdəyişmələr qrupu. Üçölçülü fırlanmalar qrupu (sferik-simmetriya qrupu). Aksial simmetriya çevrilmələri qrupu. Nöqtəvi qruplar və onların təsnifatı.

Simmetriya qruplarının təsvirləri. Təsvirin bazisi və ölçüsü. Çevirmə matrisləri və onların xarakterləri. Gətirilə bilən və gətirilə bilməyən təsvirlər. Oxşar çevirmə. Requlyar təsvir və ona aid misallar. Təsvirlərin birbaşa hasili. Təsvirlərin simmetrik və antisimmetrik hasilləri. Təsvirlərin ortoqonallıq xassələri. Təsvirlərin xarakterləri və onların xassələri.

Təsvirlərin gətirilməsi. Şur lemmaları. Gətirən matris və onun qurulmasına aid misallar.

Qrupların gətirilə bilməyən təsvirləri. Bəzi qrupların gətirilə bilməyən təsvirlərinin matrislərinin tapılması. Gətirilə bilməyən təsvirlər və atom və molekulaların termlərinin təsnifatı. Matris elementləri üçün seçmə qaydaları.

Atom və molekulaların kompüter vasitəsilə kvantmexaniki hesablanmasında simmetriya nəzəriyyəsinin tətbiqinə aid misallar: BH_3 , NH_3 , C_6H_6 və s. molekulaların enerji səviyyələrinin və molekulyar orbitallarının tapılması.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика, М., Наука, 1974, 752 с.
2. Болотин А.Б., Степанов Н.Ф., Теория групп и ее применение в квантовой механике молекул, М., Наука, 1973, 227 с.
3. Б.Л.Ван дер Ваден. Метод теории групп в квантовой механики. 232 с. Ижевск.РХД. 1999.

Əlavə ədəbiyyat:

1. Фларри Р., Квантовая химия, М., Мир, 1985, 472 с.
2. Аминов Л.К. Теория симметрии. 2002. 192 с
3. Банкер Ф., Йепсен П. Симметрия молекул и спектроскопия 2004. 768 с

Tərtib edənlər: b/m. M.R.Vahabova

Molekulyar spektroskopiyanın nəzəri əsasları

Giriş.

Molekulun enerjisinin elektron, rəqs və fırlanma enerjilərinin cəmi şəklində göstərilməsi. Molekulyar spektrlərin əsas növləri. Molekulun elektron enerjisinin nüvələrarası məsafələrdən asılılığı. Potensial əyriləri və potensial səthləri.

Molekulların elektron spektrləri. Zolaqlar və onların quruluşu. Frank-Kondon prinsipi.

Molekulların rəqsləri. İkiatomlu molekulların rəqs spektrləri. İkiatomlu molekulların spektroskopik parametrlərinin nəzəri hesablanması. Çoxatomlu molekulların spektrləri. Seçmə qaydaları.

Molekulların fırlanması və fırlanma spektrləri. Fırlanma spektrləri və molekulların quruluşu.

Molekullarda işığın kombinasiya səpilməsi. Kombinasiya səpilməsi spektrləri.

Molekulların quruluş və xassələrinin spektroskopik tədqiqat metodları.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия Молекулярная спектроскопия 2006, 528 с
2. Ельяшевич М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия, Общие вопросы спектроскопии 2006. 240 с
3. Фриш С.Э., Оптические спектры атомов, М.-Л., Наука, 1963, 640 с.
4. Собельман И.И., Введение в теорию атомных спектров, М., Наука, 1977, 319с.

Əlavə ədəbiyyat:

1. Мәсимов Е.Ә., Һүсејнов И.И., Мүрсәлов Т.М., Маддәнин гурулушу, Бакы, 1997, 325 с.
2. Банкер Ф., Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия, М., Мир, 1981, 451 с.

Tərtib edənlər: dos. N.S.Nəbiyev

b/m. F.H.Paşayev

Molekulyar köməkçi funksiyalar

Giriş

Xartri-Fok-Rutan (XFR) tənliklərinə daxil olan çoxmərkəzli inteqralların hesablanması metodları haqqında ümumi məlumat.

Molekul fizikasında istifadə olunan $A_n(P), B_n(\beta), Q_{NN'}(p,t)$ köməkçi funksiyaları. Onlar üçün rekurent və analitik düsturlar.

XFR tənliklərinə daxil olan birmərkəzli örtmə, kinetik enerji və nüvəyə cazibə inteqrallarının analitik hesablanması. Birmərkəzli ikielektronlu inteqralların hesablanması üçün analitik ifadə.

XFR tənliklərinə daxil olan ikimərkəzli inteqralların elliptik koordinatlarda hesablanmasının daha əlverişli olması. Koordinat sisteminin Eyler bucaqları qədər fırlanması zamanı kompleks və həqiqi sleyter atom orbitallarının çevrilməsi düsturları. Bu çevrilmənin əmsalları, ümumiləşmiş sferik funksiyalar. Onların ifadəsi və cədvəlləri. Eyler bucaqlarının molekulu təşkil edən atomların dekart koordinatları vasitəsilə təyin olunması.

XFR tənliklərinə daxil olan ikimərkəzli örtmə, kinetik enerji və nüvəyə cazibə inteqralları üçün analitik ifadələr alınması.

XFR tənliklərinə daxil olan iki-, üç- və dördmərkəzli ikielektronlu inteqralların və üçmərkəzli nüvəyə cazibə inteqrallarının hesablanması üçün sleyter atom orbitallarının digər nöqtədə mərkəzləşmiş sabit eksponentli sleyter funksiyaları üzrə ayrılışı düsturundan istifadə olunması. Bu ayrılışın əmsalları üçün analitik ifadə tapılması. Həmin ayrılışın yığılma xassələrinin araşdırılması.

Ə D Ə B İ Y Y A T

Əsas ədəbiyyat

1. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул, М., Мир, 1972, 380 с.
2. Александров Б.С., Болотин А.Б., Пошюнайте Н.П., Ракаускас Р.И., Шугуров В.К., Многоцентровые интегралы 701-75 деп. от 13/Ш-1975.
3. Варшалович Д.А., Маскалев А.Н., Херсонский В.К., Квантовая теория углового момента, Л., Наука, 1975, 437 с.

Əlavə ədəbiyyat:

1. Юцис А.П., Бандзайтис А.А., Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, 1977, 470 с.
2. Зализняк В.Е. Основы вычислительной физики I, II часть. 2006

Tərtib edənlər: b/m. F.H.Paşayev

Maddənin quruluşunun təcrübi tədqiqat üsulları

Elektron, tunel və atom qüvvət mikroskopiyasının fiziki əsasları. Luminsent analiz. Foto-, termo-, elektrotermoluminsensiya üsulları.

Nanoquruluşların öyrənilməsinin difraksiya üsulları. Xüsusi müqavimət, yürüklük, sərhəddə hal sıxlığının tədqiqi, interferometrüsulu ilə nazik təbəqələrin tədqiqi. Səthin öyrənilməsinin xüsusiyyətləri. Zond mikroskopları.

Rentgen quruluş təhlil metodu.

Polikristal maddələrdən rentgenoqramların alınması və indeksləşdirilməsi. Elementar özəyin ölçülərinin dəqiq təyin edilməsi. Kristal ölçülərinin rentgenoqrama təsiri. Rentgenoqramda xəttlərin intensivliyi.

Monokristalların rentgen quruluş təhlili: Laue rentgenoqramları. Fırlanma və rəqs monoxromatik rentgenoqramlar üsulu.

İnterferensiyanın sönmə qanunları və kristalın simmetriya elementləri. Kristalın atom quruluşunun təyin edilməsi ardıcılığı.

Elektronoqrafiya metodu.

Nazik kristal təbəqələrin alınması texnologiyası. Elektronoqraf. Polikristal nazik lövhələrdən elektroqramların alınması və indeksləşdirilməsi. Monokristal nazik təbəqələrdən elektronoqramların alınması və indeksləşdirilməsi. Elektronoqramlara görə kristalın fəza qəfəsinin sabitlərinin təyin olunması üsulları. Fəza qəfəsində atomların koordinatlarının hesablanması.

Spektroskopik tədqiqat üsulları.

Maddənin quruluşunun əsas tədqiqat üsulları. Atom və molekulyar proseslərə uyğun spektral oblastlar. Optik spektroskopiya. Ultra bənövşəyi və görünən işıq spektroskopiyası. İnfraqırmızı (İQ) spektroskopiya. Mikrodalğa spektroskopiyası. Kombinasiya səpilməsi spektroskopiyası. Nüvə maqnit rezonansı (NMR) spektroskopiyası. Proton maqnit rezonansı (PMR). Nüvə kvadrupol rezonansı (NKR) spektroskopiyası. Elektron paramaqnit rezonansı (EPR) spektroskopiyası. Rentgen spektroskopiyası. Qamma spektroskopiyası. Fotoelektron və rentgenelektron spektroskopiyası. Kütlə spektroskopiyası.

Я Д Я Б И Й Ы А Т

Əsas ədəbiyyat

1. Флинт Е.Е., Начало кристаллографии, М., 1959, 242 с.
2. Бокий Г.Б., Порай-Кошиц М.А., Рентгеноструктурный анализ, т.1, М., 1964, 489 с.
3. Вилков Л.В., Пентин Ю.А., Физические методы исследования в химии, М., ВШ, 1987, 367 с.
4. Мәсимов Е.Ә., Нүвə магнит резонансы, Бакы, БДУ nəшријјаты, 1993,
5. Миронов В.Л., Основы сканирующей зондовой микроскопии, Москва 2004. 143с.
6. Ч.Пул, Ф.Оуенс., Нанотехнологии Москва 2004, 327с.
7. И.П. Суздалев. Физико-химия нанокластеров, наноструктур и наноматериалов. Москва, 2006 589с.

Əsas ədəbiyyat

1. Мәсимов Е.Ә., Нүсөјнов И.И., Мүрсәлов Т.М., Маддә гурулушу, Бакы, 1997, 325 с.

**Tərtib edənlər: dos.M.Ə.Ramazanov
dos. S.Ə.Axundov**

Kompleks birləşmələrin molekulları

Kompleks birləşmələr (KB). KB-in ilk Verner nəzəriyyəsi. Koordinasiya nəzəriyyəsinin əsasları: mərkəzi atom və liqandlar, xarici və daxili təbəqə (sfera, örtük), koordinasiya ədədi, kompleks nüvəsi, nüvənin yükü, əsas və yan (əlavə) valentlik. Liqandların dentantlığı. KB-də kimyəvi rabitələrin təbiəti. Mərkəzi atomun (ionun) liqandlarla elektrostatik və kovalent qarşılıqlı təsirlərinin təbiəti (çulğasma).

Luisin turşu və əsas anlayışı. KB-in Verner və müasir təsnifatı. Aşağıspinli və yüksək spinli komplekslər. Oktaedrik, tetraedrik və kvadratik komplekslərdə mərkəzi atomun orbitallarının hibridləşməsi.

Kristal sahəsi nəzəriyyəsinin (KSN) əsasları. Oktaedrik, tetraedrik və kvadratik komplekslərin kristal sahəsində mərkəzi atomun d-orbitallarının parçalanması. Cütləşmə və parçalanma enerjiləri. Güclü və zəif sahəli liqandların əmələ gətirdiyi oktaedrik və tetraedrik komplekslərin qərarlaşma enerjilərinin dəyişməsi. Parçalanma kəmiyyətinin KB-nin rəngi ilə əlaqəsi. KSN-nə görə KB-nin maqnit xassələrinin izahı. Liqandların spektrokimyəvi ardıcılığı. KSN-nə görə normal və dönmüş spinellərin izahı. Yan-Teller effekti.

Liqand sahəsi nəzəriyyəsi (LSN). Enerji diaqramı, donor akseptor rabitəsi. LSN-də parçalanma kəmiyyəti. Rabitə yaratmayan orbitallar. Mərkəzi atomun d-elektronlarının liqandın sərbəst (rabitə yaratmayan) orbitalları ilə dativ qarşılıqlı təsir imkanları. KB-nin tədqiqində, valent rabitələri metodunun, KSN və LSN-nin imkanlarının müqayisəsi.

Üzvü və qeyri-üzvü polidental liqandların KB-ri. Aminturşu və metla elementli KB-lər. Helatlar. Çuqayevin dövrü qaydaları. Klasterlər və çox nüvəli komplekslər. Klatratlar. Supramolekulyar birləşmələr.

KB-nin dayanıqlıq sabiti. Dayanıqlıq sabitinin mərkəzi ionun yükündən, radiusundan və elektron konfigurasiyasından asılılığı. Kinetik labil və ətalətli komplekslər. Ətalətli sistemlərin həndəsi və optik izomerləri.

Çernyayev effekti.

Təbiətdə KB-in rolu: fermentlər, xlorofil, hemoqlobin və s.

KB-in texnoloji proseslərdə, tibbdə və kənd təsərrüfatında istifadəsi.

Uçucu KB-lər və onların qeyri-üzvi sintezdə rolu.

Ə D Ə B İ Y Y A T

1. Бальхаузен К., Введение в теорию поля лигандов, М., Мир, 1964, 360 с.
2. Берсукер И.Б., Строение и свойства координационных соединений. Введение в теорию, Л., Химия, 1971, 312 с.
3. Берсукер И.Б., Электронное строение и свойства координационных соединений. Введение в теорию, Л., Химия, 1976, 352 с.
4. Кантор Ч., Шимлер П., Биофизическая химия, т. 3, М., Мир, 1985, 496 с.

Tərtib edən: dos. N.S.Nəbiyev

Atom və molekul fizikasında elektron korelyasiyasının və relyativistik effektlərin nəzərə alınması

Giriş.

Elektron korelyasiyasının nəzərə alınmasının zəruriliyi.

Atom və molekullarda elektron korelyasiyasının iki növü: Fermi və Kulon korelyasiyaları. Xartri-Fok metodunda nəzərə alınan və nəzərə alınmayan korelyasiya. Korelyasiya enerjisi.

Elektron korelyasiyasını nəzərə almaq üçün istifadə olunan metodlar haqqında ümumi məlumat. Hilleras metodu. Ceyms-Kulic metodu. Çoxkonfigurasiyalı qarşılıqlı təsir metodu və onun çatışmayan cəhətləri.

Korelyasiya vuruğu daxil olan (korelyasiyalanmış) dalğa funksiyaları metodu. Bu metod vasitəsilə atom və molekullarda ikielektronlu korelyasiyanın nəzərə alınması. $1 + \sum_p a_p r_{ij}^p$ kimi korelyasiya vuruğu daxil olan dalğa funksiyası

vasitəsilə atom və molekulların tam elektron enerjisi üçün ümumi ifadə. Bu ifadəyə daxil olan $r_{12}^k (k \geq 0)$ korelyasiya vuruqlu molekulyar inteqralların təsnifatı. Həmin inteqralların sleyter funksiyaları bazisində analitik hesablanması.

Atom və molekullarda ikielektronlu korelyasiyanın korelyasiyalanmış dalğa funksiyaları vasitəsilə nəzərə alınmasına aid misallar.

Hidrogenəbənzər atomların relyativistik nəzəriyyəsi. Kleyn-Qordon tənliyi.

Enerji səviyyələrinin incə quruluşu. Spin-orbital qarşılıqlı təsir. İncə quruluş sabiti. Lamb sürüşməsi. Elektronun kütləsinin onun sürətindən asılı olmasının nəzərə alınması. Breyt-Pauli Hamilton operatoru.

Ə D Ə B İ Y Y A T

1. Бете Г., Солпитер Э., Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, М., ФМ, 1960, 562 с.
2. Мак-Вини Р., Сатклиф Б., Квантовая механика молекул, М., Мир, 1972, 380с.
3. Уилсон С., Электронные корреляции в молекулах, М., Мир, 1987, 304 с.
4. Аборенков И.В., Братцев В.Ф., Тулуб А.В., Начала квантовой химии, М., ВШ, 1989, 203 с.

Tərtib edən: b/m. F.H.Paşayev