



INNOVATIVE WORLD
Ilmiy tadqiqotlar markazi



TADQIQOTLAR



ILM-FAN



TEKNOLOGIYALAR

ZAMONAVIY ILM-FAN VA INNOVATSIYALAR NAZARIYASI

ILMIY-AMALIY KONFERENSIYA

2026



Google Scholar



zenodo



Andijan, Uzbekistan



+998335668868



<https://innoworld.net>



« ZAMONAVIY ILM-FAN VA INNOVATSIYALAR
NAZARIYASI » NOMLI ILMIY, MASOFAVIY,
ONLAYN KONFERENSIYASI TO'PLAMI

3-JILD 5-SON

Konferensiya to'plami va tezislari quyidagi xalqaro
ilmiy bazalarda indexlanadi

Google Scholar



ResearchGate

zenodo



ADVANCED SCIENCE INDEX



Directory of Research Journals Indexing

www.innoworld.net

O'ZBEKISTON-2026

KVANT KIMYOSI VA UNING HOZIRGI ZAMONDAGI AHAMIYATI

Abdullayeva Sevara Fazlidinovna

Turon universiteti Andijon filiali, kimyo fani o'qituvchisi

Tavakkalova Gulbaxor G'ulomjon qizi

Turon universiteti Andijon filiali, kimyo ta'lim yo'nalishi talabasi

Annotatsiya. Kvant kimyosi atom va molekularning elektron tuzilishini kvant mexanikasi qonunlari asosida o'rganuvchi fan sohasi hisoblanadi. Mazkur yo'nalish moddalarning fizik-kimyoviy xossalarini nazariy jihatdan tushuntirish, ularning reaktivligi, barqarorligi va spektral xususiyatlarini oldindan bashorat qilish imkonini beradi. Hozirgi kunda kvant kimyosi farmatsevtika, materialshunoslik, nanotexnologiya, biokimyo, ekologiya va kundalik hayotda qo'llaniladigan ko'plab texnologiyalarni rivojlantirishda muhim ahamiyat kasb etmoqda.

Kalit so'zlar: kvant kimyosi, molekulyar orbital, elektron tuzilish, DFT, farmatsevtika, nanomateriallar, hisoblash kimyosi.

Abstract. Quantum chemistry is a branch of science that studies the electronic structure of atoms and molecules based on the laws of quantum mechanics. This field enables theoretical explanations of the physicochemical properties of substances and predictions of their reactivity, stability, and spectral characteristics. Today, quantum chemistry plays an important role in the development of pharmaceuticals, materials science, nanotechnology, biochemistry, environmental science, and many everyday technologies.

Keywords: quantum chemistry, molecular orbital, electronic structure, DFT, pharmaceuticals, nanomaterials, computational chemistry.

Kvant kimyosi XX asr boshlarida kvant mexanikasining rivojlanishi natijasida shakllangan bo'lib, atom va molekularning tuzilishi hamda xossalarini nazariy va matematik usullar yordamida o'rganadi. Ushbu fan elektronlarning energiya holatlari, atom orbitallari va kimyoviy bog'lanishlarning tabiatini tushuntirishga xizmat qiladi. Kvant kimyosi yordamida moddalarning reaktivligi, barqarorligi va spektral xossalarini oldindan aniqlash mumkin. Bu yo'nalish tajriba natijalarini to'ldiradi, murakkab kimyoviy jarayonlarni chuqurroq tushunishga yordam beradi hamda kompyuter hisoblashlari orqali yangi moddalar va materiallarning xossalarini bashorat qilish imkonini yaratadi. Hozirgi kunda kvant kimyosi farmatsevtika, materialshunoslik, nanotexnologiya, biokimyo va ekologiya kabi ko'plab sohalarda keng qo'llanilmoqda.

Kvant kimyosining nazariy asosini Shryodinger tenglamasi tashkil etadi. Shryodinger tenglamasi yordamida atom va molekularning energiya holatlari, elektron tuzilishi va kimyoviy bog'lanish xususiyatlari aniqlanadi. Ushbu tenglama kvant kimyosidagi barcha nazariy hisoblashlarning asosini tashkil etadi.

Amaliy kvant-kimyoviy hisoblashlarda Xartri-Fok usuli, Myoller-Plessetning ikkinchi tartibli yaqinlashuv usuli, bog'langan klasterlar usuli hamda elektron zichligi funksionali nazariyasi kabi zamonaviy yondashuvlar keng qo'llaniladi. Ushbu usullar yordamida molekularning fazoviy tuzilishi, umumiy energiyasi, elektronlarning taqsimlanishi va kimyoviy reaktivligi yuqori aniqlik bilan aniqlanadi.

Kvant kimyosi bugungi kunda ilm-fan va texnologiyaning ko'plab yo'nalishlarida keng qo'llanilmoqda. Xususan, farmatsevtika sohasida yangi dori vositalarini yaratish,

ularning biologik faolligi va xavfsizligini baholashda muhim ahamiyatga ega. Materialshunoslikda yangi materiallar, katalizatorlar va yarimo'tkazgichlarning xossalari oldindan aniqlash imkonini beradi. Nanotexnologiyada nanostrukturalarning elektron tuzilishi va fizik-kimyoviy xususiyatlari o'rganiladi. Biokimyoda fermentlar, oqsillar va boshqa biomolekulalarning tuzilishi hamda faoliyati tahlil qilinadi. Ekologiya sohasida esa ifloslantiruvchi moddalarning parchalanish mexanizmlari va ularning atrof-muhitga ta'siri aniqlanadi.

Kvant kimyosi inson hayotida ham muhim o'rin tutadi. Tibbiyotda antibiotiklar, viruslarga qarshi va saratonga qarshi preparatlarni yaratishda ushbu fan yutuqlaridan keng foydalanilib kelinmoqda. Jumladan, energetika sohasida yuqori samarali litium-ion batareyalar va quyosh panellari tayyorlanmoqda, qishloq xo'jaligida o'simliklarni himoya qiluvchi vositalar, biologik faol moddalar va ekologik xavfsiz preparatlar yaratilmoqda hamda atrof-muhitni muhofaza qilish, suv va havoni tozalash uchun samarali adsorbentlar, katalizatorlar va filtr materiallari ishlab chiqilmoqda. Shu sababli kvant kimyosi inson salomatligi, oziq-ovqat xavfsizligi, ekologik barqarorlik va texnologik taraqqiyotda katta ahamiyatga ega.

Hozirgi vaqtda sun'iy intellekt va yuqori unumdor kompyuter texnologiyalarining rivojlanishi kvant kimyosining imkoniyatlarini yanada kengaytirdi. Bugungi kunda yangi dori vositalarini yaratish, energiya saqlash tizimlarini takomillashtirish, ekologik xavfsiz materiallarni ishlab chiqish hamda laboratoriya xarajatlarini kamaytirishda kvant kimyosi muhim vosita bo'lib xizmat qilmoqda. Gaussian, Q-Chem va ORCA kabi dasturiy paketlar yordamida murakkab molekulyar tizimlar chuqur tahlil qilinib, ularning xossalari yuqori aniqlik bilan bashorat qilinmoqda.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Levine, I. N. Quantum Chemistry. 7th ed. Boston: Pearson, 2014. 744 p.
2. Sodiqov, B. S. Fizik kimyo. Toshkent: O'zbekiston, 2019. 512 b.
3. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry. 3rd ed. Chichester: John Wiley & Sons, 2017. 664 p.
4. Rahimov, Q. R. Nazariy kimyo va zamonaviy hisoblash usullari. Toshkent: Universitet, 2021. 296 b.
5. Abdullayev, A. A. Kvant mexanikasi asoslari. Toshkent: Fan va texnologiya, 2016. 384 b.