



O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI
SHAROF RASHIDOV nomidagi
SAMARAQAND DAVLAT
UNIVERSITETI



Ro'yxatga olindi:

№ BD-60530100

2023 yil "09" 29



"FASDIQLAYMAN"

SamDU rektori

R. X. Xamurov

2023 yil

KIMYODA KOMP'YUTER MODELLASHTIRISH
FAN DASTURI

Bilim sohasi:	500000 – Tabiiy fanlar matematika va statistika
Ta'lim sohasi:	530000- Tabiiy fanlar
Ta'lim yo'nalishi:	60530100 – Kimyo

Fan/modul kodi KKM1004	O'quv yili 2024-2025	Semestr 3	ECTS – Kreditlar 6	
Fan/modul turi Majburiy	Ta'lim tili O'zbek		Haftadagi dars soatlari 4	
1.	Fan nomi		Mustaqil ta'lim (soat)	Umumiy yulama (soat)
	Kimyoda komp'yuter modellashtirish		60	180

II Fanning maqsadi (FM)	
2	Fanning maqsadi talabalarda kimyoviy masalalarni kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarini o'rganishni matematik nuqtai nazardan tasavvur xosil qilish va berilgan masalalarni kompyuter sistemasi yordamida echim usullarini o'zlashtirishdan iborat.
3	Ta'limning innovatsion tizimini keng qo'llash, o'qitishning interaktiv uslublari va vositalaridan, zamonaviy axborot-kommunikasiyalari hamda tenologiyalardan keng foydalanish.

Fan mazmuni	
II. Asosiy nazariy qism (ma'ruza mashg'ulotlari)	
II.I. Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi:	
Mashg'ulotlar shakli: ma'ruza (M)	
M1	Kirish. "Kimyoda komp'yuter modellashtirish" fani predmeti va vazifalari.
M2	Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni qo'llash.
M3	Molekulyar mexanika. Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellashtirish uslublari. Molekulyar Mexanika MMP2 (Elinjer Mexanikasi):
M4	Molekulyar mexanika uslubi bilan namunaviy kimyoviy masalalar echish: konformatsion analiz, reaksiya traektoriyasi, energiya, zaryad va boshqa ko'rsatkichlar hisobi.
M5	Yarim empirik uslubi. Kvant kimyosi – molekulyar sistemalar taxlilida asosiy postulatlar va prinsiplar.
M6	Kimyoviy masalalarning yarim-empirik uslublari yordamida echilishi. Kompyuter uchun topshiriqlarni tuzish va ularning qaydnomalari bilan ishlash.
M7	Ab initio uslubi. Ab initio – noempirik kvant-kimyoviy hisob uslublari. Bazis funksiyalarning tanlash qoidalari. Hisob dasturlarining zamonaviy to'plamlari.
M8	Masalani echish uchun kerak bo'lgan uslubni tanlab olish. Masalani va uning ko'rsatkichlarini keltirishning asosiy qoidalari.
M9	Hisob uslublarning amaliyotda qo'llanilishi. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi. Kimyoviy masalalar echimlarining asosiy qoidalari va amaliy ko'rsatmalari.
M10	Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR taxlil uslublarining ishlatilishi. Doking. Virtual skrining tushunchasi
III. Mashg'ulotlar shakli: Amaliyot mashg'uloti (A)	
A1	I-mavzu. Kirish
	Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash.
A2	II-mavzu. Molekulyar mexanika
	Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin yoki ChemDraw)
	Molekulyar mexanika MMP2 dasturi bilan ishlash (Elinjer Mexanikasi).

A3	III-mavzu. Yarim empirik uslubi
	RSM dasturi muhitida molekulyar mexanika uslubida namunaviy masalalar bilan ishlash.
	Molekulyar tuzilish nazariyasi bilan klassik va kvant-kimyoviy yoʻnalishlarini taqqoslash.
	Molekulyar Orbitallar nazariyasi va uning kimyoviy birikmalar xususiyatlarini bayon qilish uchun ishlatilishi.
	YArim-empirik uslublari bilan kimyoviy masala echimini topish.
A4	IV-mavzu. Av initio uslubi
	Empirik va yarimempirik usulda olingan natijalarni taqqoslash.
	Ab initio uslubi uchun kompyuter topshirigʻini tuzish.
	HyperChem va ChemLab dasturlar misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.
A5	V-mavzu.Hisob uslublarining amaliyotda qoʻllanilishi
	Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi, namunaviy kimyoviy masalani echish qonuniyatlari.
	ChemOffice dastur yordamida modda molekulalarini tuzilishini optimallashtirish.
	ChemOffice va HyperChem dasturlari yordamida organik moddalar molekulalarini spektrlarini chizish usullari.

Izoh: Har bir talaba 5 ta laboratoriya ishini bajarishi lozim.

IV. Mustaqil taʼlim va mustaqil ishlar

Mustaqil taʼlim uchun tavsiya etiladigan mavzular

“Kimyoda komp’yuter modellash” fani boʻyicha ma’ruza mashg’ulotlari boʻyicha mustaqil ishlarning kalendar tematik rejasi (120 soat)

№	Mavzu nomi
1.	Molekulyar Mexanika. MM dasturlari bilan ishlash yoʻllari.
2.	Yarim empirik uslubi. Sifat nazariyasi.
3.	Uolsh diagrammasi. Xyukkel uslubi (bir elektronli va kengaytirilgan)
4.	MOPAC dasturlari bilan ishlash yoʻllari.
5.	Ab initio uslubi.
6.	GAUSSIAN dasturlari bilan ishlash yoʻllari.
7.	Hisob uslublarining amaliyotda qoʻllanilishi.

8.	Geterotsiklik birikmalar elektron tuzilishining o'ziga xosligi.
9.	ChemOffice dasturi imkoniyatlari.
10.	Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR tahlil uslublarining ishlatilishi.
11.	Doking. Virtual skrining tushunchasi.

3.	V. Fan o'qitilishining natijalari (shakllanadigan kompetensiyalar) «Kimyoda komp'yuter modellashtirish» fanini o'zlashtirish jarayonida amalga oshiriladigan masalalar doirasida bakalavr: - molekulyar modellash uslublari: molekulyar mexanika usuli bilan kimyoviy masalalar echish - kvant kimyosidagi molekulyar orbitallar nazariyasi - kvant-kimyo uslubi yordamida molekulyar strukturalarni o'rganish - noempirik kvant-kimyo uslubi - kimyoviy birikmalarining xossalari va elektron tuzilishini <i>bilishi kerak;</i> - zamonaviy kompyuter sistemasi imkoniyatlaridan xabardor bo'lish va unda ishlashni bilish - kompyuter sistemasida qabul qilingan formatda aniq bir kimyoviy masalani qo'yishni bilish - matematik modellash (o'ta muxim bilim) va hisob-kitob natijalarini tushunish uchun nazariy kimening asosiy qoidalarini bilish kabi <i>ko'nikmalarga ega bo'lishi kerak.</i> - Molekulyar mexanika dasturlari bilan ishlash yo'llari - Yarim-empirik uslublari bilan kimyoviy masala echimini topish - Ab initio uslubi uchun kompyuter topshirig'ini tuzish - maxsus dasturlar misolida hisob dasturlari bilan ishlash - Kimyoviy birikmalarining elektron tuzilishi va xossalarga bog'liq kabi masalarini echish kabi <i>malakalarga ega bo'lishi kerak</i>
4.	VI. Ta'lim texnologiyalari va metodlari: • ma'ruzalar; • interfaol keys-stadilar; • klasterlar • test • blis – savollar
5.	VII. Kreditni olish uchun talablar: Fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'liq o'zlashtirish, tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish, o'rganilayotgan jarayonlar haqida mustaqil mushohada yuritish va joriy, oraliq nazorat shakllarida berilgan vazifa topshiriqlarni bajarish, yakuniy nazorat ishini topshirish

6.	ASOSIY ADABIYOTLAR 1. Muxamadiyev N.Q., Muxamadiyev A.N., Kompyuter kimyosi. Samarqand SamDU nashriyoti 2020 yil. 336 bet. 2. Muhamadiev N.Q. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalarini matematik modellash. - T.: Cho'lpon nomidagi NMIU, 2016. - 264 bet. 3. A.G. Yeshimbetov, D.J. Bekchanov, A.X. Xaitbayev, R.A. Eshchanov. Kompyuter kimyo. Chirchiq-2020 4. D.J. Bekchanov, R.A. Eshchanov, A.X. Xaitbayev A.G. Eshimbetov. Kompyuter kimyo. Toshkent-2020 QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR 5. М.А. Турабекова, М.Г.Левкович, Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способности, Т., Университет, 2008, 136 с. 6. «Теория и практика компьютерного моделирования нанообъектов» (УДК 541.1:681.332 (07) Т33), Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В., Красноярский государственный технический университет, 2002 г. 7. Т.Кларк, Компьютерная химия, М., Мир, 1990. 8. В.Ф.Травень, Электронная структура и свойства органических молекул, М., Химия, 1989. Internet saytlari 1) http://www.msg.ameslab.gov/GAMESS/GAMESS.html 2) http://www.ziyonet.uz 3) http://www.gaussian.com/ 4) http://www.kjemi.uio.no/software/dalton/dalton.html 5) http://www.emsl.pnl.gov/docs/nwchem/nwchem.html 6) http://www.hyper.com/
7.	Fan dasturi Samarqand davlat universiteti O'quv-uslubiy kengashining 2023 yil "___" _____dagi "___" – sonli bayonnomasi bilan ma'qullangan.
8.	Fan/modul uchun mas'ullar: Muxamadiyev N.Q. – SamDU, “Fizikaviy va kolloid kimyo ” kafedrası mudiri kimyo fanlari doktori., professor
9.	Taqrizchilar: Eshmatova N. – O'zMU “Fizikaviy va colloid kimyo” kafedrası dotsenti, k.f.d. Aminov Z.A. - SamDVMChBU Tabiiy fanlar kafedrası dotsenti, k.f.n.

Fizikaviy va kolloid kimyo
kafedrasi mudiri

Kimyo fakulteti dekani

SamDU o'quv ishlari
bo'yicha 1-prorektor



prof.Muxamadiyev N.Q.

dots.Tillayev S.U.

prof.Soleev A.S

2013

