



O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV TA'LIM,
FAN VA INNOVATSIYALAR
VAZIRLIGI
SHAROF RASHIDOV
NOMIDAGI
SAMARAQAND DAVLAT
UNIVERSITETI



Ro'yxatga olindi:

№ BD-60530100

2024_yil "09.28"



KIMYODA KOMP'YUTER MODELASHTIRISH
FAN DASTURI

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

Fan/modul kodi	O'quv yili	Semestr	ECTS – Kreditlar	
KKM1304	2026-2027	5	4	
Fan/modul turi	Ta'lim tili		Haftadagi dars soatlari	
Majburiy	O'zbek		2	
1.	Fan nomi	Auditoriya mashg'ulotlari (soat)	Mustaqil ta'lim (soat)	Umumiy yulama (soat)
	Kimyoda komp'yuter modelashtirish	48	72	120

II Fanning maqsadi (FM)	
2	Fanning maqsadi talabalarda kimyoviy masalalarni kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarni 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 uslublarning ishlatilishi. Doking. Virtual skrining tushunchasi
M11	MOPAC dasturi
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 yo‘nalishlarini 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 topshirig‘ini tuzish.
	HyperChem va ChemLab dasturlar misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.
A5	V-mavzu.Hisob uslublarining amaliyotda qo‘llanilishi
	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 ta’lim va mustaqil ishlar

Mustaqil ta’lim uchun tavsiya etiladigan mavzular

“Kimyoda komp’yuter modellash” fani bo’yicha ma’ruza mashg’ulotlari bo’yicha mustaqil ishlarning kalendar tematik rejasi (72 soat)

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

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 modellashtirish uslublari: molekulyar mexanika usuli bilan kimyoviy masalalar echish - kvant kimyosidagi molekulyar orbitalar nazariyasi - kvant-kimyosidagi molekulyar strukturalarni o'rganish - noempirik kvant-kimyosidagi molekulyar strukturalarni o'rganish - 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 modellashtirish (o'ta muhim bilim) va hisob-kitob natijalarini tushunish uchun nazariy kimyosidagi 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 uslublari uchun kompyuter topshiriqlarini tuzish - maxsus dasturlar misolida hisob dasturlari bilan ishlash - Kimyoviy birikmalarining elektron tuzilishi va xossalari bog'liq kabi masalalarini 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 2024 yil 29- avgustdagi 1– 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: D.Q.Murodova JizDPI Kimyo va uni o'qitish metodikasi kafedrası dotsenti, PhD Z.A.Aminov – SamDVMChBI “Axborot texnologiyalari va tabiiy fanlar” kafedrası dotsenti, t.f.n

Ishchi guruh raisi:

prof.Trobov X.T.

Ishchi guruh a'zosi:

dots.Begmatov R.

**Fizikaviy va kolloid
kimyo kafedrası mudiri**

prof.Muxamadiyev N.Q.

Biokimyo instituti direktori

prof.O'roqov S.X.

**SamDU o'quv ishlari
bo'yicha 1-proroktor**

prof.Soleyev A.



Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti Biokimyoinstituti
Fizikaviy va kolloid kimyo kafedrasida 60530100-Kimyo ta'lim yo'nalishida tahsil
oluvchi bakalavrlar uchun "Kimyoda komp'yuter modellashtirish" fanidan ishlab
chiqilgan fan dasturi uchun

T A Q R I Z

"Kimyoda komp'yuter modellashtirish" fan dasturi oliy ta'limning Davlat ta'lim standartlari bo'yicha: 60530100-Kimyo ta'lim yo'nalishi bakalavrlarining tayyorgarlik darajasi va zaruriy bilimlar mazmuniga ko'ra "Kimyoda komp'yuter modellashtirish" faniga qo'yiladigan talablarga muvofiq ishlab chiqilgan.

Fan dasturi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi tomonidan tasdiqlangan "O'QUV REJA"ga muvofiq ishlab chiqilgan. U kredit-modul tizimi modul turida tanlov fani sifatida o'qitilishi rejalashtirilgan fan hisoblanadi.

Fan dasturining 22 soat ma'ruza, 26 soat amaliy mashg'ulotlarining mavzulari, ularning mazmuni ishlab chiqarishga, xususan bakalavrlarning ta'lim yo'nalishiga oid muammolarni yechishga bog'liq holda tuzib chiqilgan. Unda Kimyoda komp'yuter modellashtirishni kimyoviy birikmalarning tuzilishini va xossalarini matematik modellash, 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 uslub kimyoviy birikmalarining xossalari va elektron tuzilishini bilishi kerak.

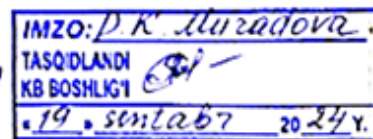
Mazkur fan bo'yicha o'rganilishi rejalashtirilgan mavzular umumta'lim maktablari, akademik litsey va kasb-hunar kollejlari uchun mo'ljallangan kimyo fani dasturidan farq qiladi hamda mavzularni takrorlanishiga yo'l qo'yilmagan.

Umuman olganda tayyorlangan Kimyoda komp'yuter modellashtirish Fan dasturi DTS talablariga to'liq javob beradi deb hisoblayman va uni tasdiqlash hamda o'quv jarayonida qo'llashga tavsiya etaman.



Jizzard Kimyo va uni o'qitish metodikasi
kafedrasida dotsenti, PhD:

D.K.Muradova



Sharof Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti Biokimyoinstituti
Fizikaviy va kolloid kimyo kafedrasida 60530100-Kimyo ta'lim yo'nalishida tahsil
oluvchi bakalavrlar uchun "Kimyoda komp'yuter modellash" fanidan ishlab
chiqilgan fan dasturi uchun

TAQRIZ

"Kimyoda komp'yuter modellash" fan dasturi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi tomonidan tasdiqlangan "O'QUV REJA"ga muvofiq ishlab chiqilgan. U kredit-modul tizimi modul turida o'qitilishi majburiy bo'lgan fan hisoblanadi.

Fanning nomidan kelib chiqadiki, bu Kimyoda komp'yuter modellash fanining stereokimyo, kvant kime va tadqiqotning fizikaviy usullari bo'limlariga juda kerakli xisoblanadi. Kimyoviy birikmalarning tuzilishini va xossalarini matematik modellash bu fanlarning prinsiplari, nizomlari bilan birga ularning terminlari va stilistikasiga ham asoslangan. Bu kursda stereokimyoni va kvant kimyoni aniqlash kompyuter masalalarini shakllash va olingan natijalarni muxokama qilish orqali qaytariladi. Kompyuter modellash bo'yicha amaliy ishlar o'z navbatida kimyoviy fanlarni qo'shimcha jiddiy va ko'rgazmali o'zlashtirishga imkon yaratadi. Bundan tashqari, fizikaviy tadqiqot usullari bo'yicha olinadigan natijalarni bilish va masalani echish jarayonini nazorat qilish uchun kerak.

Ushbu fan dastiri III-kurs, 60530100–Kimyo bakalavr uchun mo'ljallangan. Fan dasturida umumiy III-kurslar uchun 5-semestrda 22 soat ma'ruza, 26 soat amaliy mashg'uloti uchun fan mavzulari berilgan. Fan dasturida Dasturda kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarini o'rganishni matematik nuqtai nazardan tasavvur xosil qilish va berilgan masalalarni kompyuter sistemasi yordamida echim usullarini o'zlashtirishdan iborat.

Fanning vazifasi kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarini matematik modellash usullari matematik nisbatlar (modellar) ni kompyuter vositasi yordamida analiz (taxlil) qilishga asoslangan.

Dastur bo'lim va mavzular ketma-ketligi asosida tuzilgan bo'lib, ma'ruza, amaliyot ishlari uchun mavzular, mustaqil ta'limning uchun tavsiya etilgan mavzular va ularni bajarish uchun talablar batafsil yoritilgan. Xulosa qilib aytganda, ushbu dastur talab darajasida tuzilgan bo'lib, dasturdan bakalavr ta'lim yonalishi talabalari foydalanishlari uchun tavsiya qilaman.

SamDVMChBU "Axborot texnologiyalari
va tabiiy fanlar" kafedrasida dotsenti, k.f.u.



 **Z. Aminov** o'z imzosini
TASDIQLAYMAN
Samarqand davlat veterinariya meditsinasi,
chorvachilik va biotexnologiyalar universiteti
Xosimlar bo'limi boshlig'i 