



**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O‘RTA MAXSUS
TA‘LIM VAZIRLIGI
SAMARAQAND DAVLAT
UNIVERSITETI**



Ro‘yxatga olindi:
№ BD- 60530100-1.22
202_ 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 (turlar bo‘yicha)

Fan/modul kodi KMODM1003	O‘quv yili 2022-2023	Semestr 1	ECTS – Kreditlar 3	
Fan/modul turi Majburiy	Ta’lim tili O‘zbek		Haftadagi dars soatlari 3	
1.	Fan nomi	Auditoriya mashg‘ulotlari (soat)	Mustaqil ta’lim (soat)	Mustaqil ta’lim (soat)
	Kimyoda komp’yuter modellashtirish	46		44

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. Model va jarayonlarni modellashtirish haqida ayrim sodda tushunchalar. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni qo'llash. Kompyuter tizimlarini asosiy ko'rsatkichlari va ish joyni tashkil qilish
M2	Molekulyar mexanika. Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellashtirish uslublari. Molekulyar Mexanika MMP2 (Elinjer Mexanikasi): Empirik uslublari bilan ishlashning asosiy qoidalari, Molekulyar tuzilishni xisoblash uchun topshiriqning va hisob qaydnomasining tuzilishlari. Molekulyar mexanika uslubi bilan namunaviy kimyoviy masalalar echish: konformatsion analiz, reaksiya traektoriyasi, energiya, zaryad va boshqa ko'rsatkichlar hisobi
M3	Yarim empirik uslubi. Kvant kimyosi – molekulyar sistemalar taxlilida asosiy postulatlar va prinsiplar. Molekulyar orbitallar nazariyasi. Kvant-kimyó uslublari yordamida molekulyar strukturalarni ifodalash, Z-matritsani aniqlash, molekular sistemalarini elektron, spektral va boshqa ko'rsatkichlarini grafik yordamida ifodalash. Kimyoviy masalalarning yarim-empirik uslublari yordamida echilishi. Kompyuter uchun topshiriqlarni tuzish va ularning qaydnomalari bilan ishlash.
M4	Ab initio uslubi. Ab initio – noempirik kvant-kimyoviy hisob uslublari. Bazis funksiyalarning tanlash qoidalari. Hisob dasturlarining zamonaviy to'plamlari. Masalani echish uchun kerak bo'lgan uslubni tanlab olish. Masalani va uning ko'rsatkichlarini keltirishning asosiy qoidalari.
M5	Hisob uslublarning amaliyotda qo'llanilishi. Kimyoviy

	birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi. Kimyoviy masalalar echimlarining asosiy qoidalari va amaliy ko'rsatmalari. 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 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 (44 soat)

№	Mavzu nomi	Ish turi	Axborot manbai	Hisobot shakli	Ajrati lgan soat
1.	Molekulyar Mexanika. MM	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual	[A 1-3, Q 13-	Konspekt daftari,	4

	dasturlari bilan ishlash yo‘llari.	topshiriqlarni bajarish.	19]	og‘zaki	
2.	Yarim empirik uslubi. Sifat nazariyasi.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
3.	Uolsh diagrammasi. Xyukkel uslubi (bir elektronli va kengaytirilgan)	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
4.	MOPAC dasturlari bilan ishlash yo‘llari.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
5.	Ab initio uslubi.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
6.	GAUSSIAN dasturlari bilan ishlash yo‘llari.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
7.	Hisob uslublarining amaliyotda qo‘llanishi.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
8.	Geterotsiklik birikmalar elektron tuzilishining o‘ziga xosligi.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
9.	ChemOffice dasturi imkoniyatlari.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
10.	Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR tahlil uslublarining ishlatilishi.	Adabiyotlardan konspekt qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4
11.	Doking. Virtual skrining tushunchasi.	Adabiyotlardan konspek qilish. Individual topshiriqlarni bajarish.	[A 1-3, Q 13-19]	Konspekt daftari, og‘zaki	4

3.	V. Fan o‘qitilishining natijalari (shakllanadigan kompetensiyalar) «Kimyoda komp’yuter modellash» 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 kimining 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 xossalari 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. J.C.Cramer. Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. JohnWiley, 2004. 2. Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия: для студентов и преподавателей. – Солон-пресс, 2005. 3. Muhamadiev N.Q. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalari matematik modellash. - T.: Cho'lpon nomidagi NMIU, 2016. - 264 bet. 4. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев, Теория строения молекул, М., Высшая школа, 1979. QO'SHIMCHA ADABIYOTLAR 1. М.А. Турабекова, М.Г.Левкович, Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способности, Т., Университет, 2008, 136 с. 2. «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. 3. Т.Кларк, Компьютерная химия, М., Мир, 1990. 4. В.Ф.Травень, Электронная структура и свойства органических молекул, М., Химия, 1989. 1. В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев, Теория строения молекул, М., Высшая школа, 1979. 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) http://www.qchem.ru/d/lect/khsl_qchem/20Lecture-19.pdf
7.	Fan dasturi Samarqand davlat universiteti O'quv-uslubiy kengashining 2021 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 Muxamadiyev A.N. – SamDU, “Fizikaviy va kolloid kimyo ” kafedrası assistenti PhD.
9.	Taqrizchilar: Eshmatova N. – O'zMU “Fizikaviy va colloid kimyo” kafedrası dotsenti, k.f.d. Aminov Z.A. - SamDVMI “Tabiiy va ilmiy fanlar” kafedrası dosenti, t.f.n.

Fizikaviy va kolloid kimyo
kafedrası mudiri

Kimyo fakulteti dekani

SamDU o'quv ishlari
bo'yicha prorektor



prof.Muxamadiyev N.Q.

dots.Musulmonov N.X.

prof.Soleyev A.S.