

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI  
OLIV TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI  
TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI**



**"TASDIQLAYMAN"**

O'quv ishlari bo'yicha prorektor

 dots. R.To'rayev

"18" 06 2024 yil

**KIMYODA KOMPYUTER MODELLASHTIRISH  
FANI BO'YICHA SILLABUS**  
*(kunduzgi ta'lim shakli uchun)*

Bilim sohasi: 5001000 - Tabiiy fanlar, matematika va statistika  
Ta'lim sohasi: 530000 - Fizika va tabiiy fanlar  
Ta'lim yo'nalishlari: 60530100- Kimyo

Termiz-2024



**Modul/FAN SILLABUSI**  
**Kimyo fakulteti**  
**60530100- Kimyo**



Fan nomi:	Kimyoda kompyuter modellashtirish
Fan turi:	Maburiy
Fan kodi:	KIKB206
Yil:	2024/2025
Semestr:	3
Ta'lim shakli:	Kunduzgi
Mashg'ulotlar shakli va semestrga ajratilgan soatlar:	180
	<i>Semestr</i>
	3- semester
Umumi o'quv soati:	180
Auditoriya soati:	60
Ma'ruza:	30
Amaliy mashg'ulotlar:	30
Labaratoriya mashg'ulotlari:	
Seminar:	
Mustaqil ta'lim:	120
Kredit miqdori:	6
Baholash shakli:	Amaliy
Fan tili:	O'zbek

**Fan maqsadi(FM)**

Ushbu dastur hozirgi zamon "Kimyoda kompyuter modellashtirish" fanining nazariy asosini tashkil etadi. "Kimyoda kompyuter modellashtirish" umumkasbiy fan hisoblanib, kimyoning boshqa bo'limlarini chuqurroq o'rganishga va ulardagi umumiy qonuniyatlamini tushunishga zamin bo'lib xizmat qiladi.

**Fanni o'zlashtirish uchun zarur boshlang'ich bilimlar**

oliy matematika;  
noorganikkimyo;  
organik kimyo;  
umumiy fizika.

**Ta'lim natijalari (TN)**

**Bilimlar jihatidan:**

<b>TNI</b>	Talabalar kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va molekulyar orbitallar nazariyasini, ularning fizik-kimyoviy xossalari va parametrlarini bilishadi.
------------	--

TN2	Empirik, yarim empirik va noempirik hisoblash usullarini, shuningdek ab initio, molekulyar mexanika va molekulyar dinamika asoslarini tushunish.
TN3	ChemOffice, Avogadro, HyperChem, GaussView, ORCA va GROMACS dasturlari yordamida kimyoviy modellashtirish va hisoblash usullarini bilish.
TN4	Sistema zaryadi, spin multipletligi, mikroolam va makroolam qonunlariga bo'ysunuvchi usullarni tushunish.
TN5	Molekulalarni nomlash, turli spektrlarni (UB., YAMR., PMR.) hisoblash va grafik dasturlarda chizish qoidalarini bilish.
<b>Ko'nikmalar jihatidan:</b>	
TN6	molekulalarning fizik-kimyoviy parametrlarini hisoblash va ikki ham uch o'lchamli strukturalarni vizuallashtira olish.;
TN7	molekulalarning empirik, yarim empirik va ab initio usullari yordamida modellashtirilgan natijalarni tahlil qilish;
TN8	hyperchem va GaussView dasturlarida kompleks birikmalarning xossalarini aniqlash;
TN9	ORCA va GROMACS dasturlarida molekulyar dinamikani qo'llash orqali biopolimer va organik birikmalarni modellashtirish;
TN10	molekulalarning reaksiya xossalari va molekulyar dinamik usullar orqali hisoblashlarni bajarish;
<b>Kompetensiyalar jihatidan:</b>	
TN10	— empirik, yarim empirik, noempirik, molekulyar mexanika, molekulyar dinamika va DFT usullarining nazariy asoslarini tushuntiradi hamda kimyoviy masalalarni yechishda mos hisoblash usulini tanlay oladi, hisoblashlarni bajaradi;
TN11	— ChemOffice, Avogadro, HyperChem, GaussView, ORCA va GROMACS dasturlari yordamida molekulalarning ikki va uch o'lchamli tuzilmalarini yaratadi, modellashtiradi, fizik-kimyoviy kattaliklarini hisoblay oladi va vizuallashtira oladi;
TN12	— hisoblash natijalarini eksperimental ma'lumotlar bilan solishtiradi, molekulalar o'zaro ta'sirini modellashtiradi, QSAR va biopolimerlar (suv, oqsil) uchun molekulyar dinamika hisoblarini olib boradi hamda olingan natijalar asosida ilmiy xulosa chiqaradi va tahlil qila oladi;

<b>Fan mazmuni</b>		
<b>Mashg'ulotlar shakli: ma'ruza (M)</b>		
<b>3-semestr</b>		
M1	Emperika va nazariya.	2
M2	Noemperik hisoblash usullari.	2
M3	Empirik va yarim emperik hisoblash usullari..	2
M4	Birikmalarning elektron tuzilishini ifodalovchi eksperimental va nazariy parametrlar.	2
M5	Kimyoda grafik dasturlar.	2

M6	ChemOffice dasturining kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi.	2
M7	Avogadro dasturida emperik hisoblashlar.	2
M8	Hyperchem hisoblash majmuasi va uning kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi.	2
M9	Hyperchem dasturida yarim emperik usullar	2
M10	Ab inito hisoblash usullari.	2
M11	Molekulyar mehanika va dinamika.	2
M12	GaussView dasturida molekularning tuzilishini hosil qilish va fizik-kimyoviy kattaliklarini hisoblash	2
M13	ORCA dasturida DFT usulida molekularni modellashtirish.	2
M14	Reaksiyalarni modellashtirish. QSAR.	2
M15	GROMACS molekulyar dinamika to'plami yordamida biopolimerlarni modellashtirish.	2
<b>Jami soat:</b>		30
<b>Mashg'ulotlar shakli: amaliy mashg'ulot (A)</b>		
<b>3-semestr</b>		
A1	ChemOffice dasturida Karbonil, gidroksil va C-H guruh tutgan birikmalarni chizish.	2
A2	ChemOffice dasturida Karbonil, gidroksil va C-H guruh tutgan birikmalarning tebranishlarini nazariy hisoblash.	2
A3	ChemOffice dasturida birikmalarning fizik-kimyoviy parametrlarini hisoblash va ikki o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish.	2
A4	ChemOffice dasturida birikmalarni nomlash, $^{13}\text{C}$ YaMR, PMR spektrlarini hisoblash.	2
A5	ChemOffice dasturida uch o'lchamli struktura chizish.	2
A6	Avogadro dasturida uch o'lchamli struktura chizish.	2
A7	HyperChem dasturlari uch o'lchamli struktura chizish va saqlash.	2
A8	HyperChem dasturida noempirik hisoblash usullari yordamida molekularning fizik-kimyoviy kattaliklarini hisoblash.	2
A9	HyperChem dasturida empirik va yarim empirik hisoblash usullari yordamida molekularning fizik-kimyoviy kattaliklarini hisoblash.	2
A10	GaussView dasturida kompleks birikmalarni modellashtirish.	2
A11	GaussView dasturida kompleks birikmalarning fizik-kimyoviy kattaliklarini hisoblash.	2
A12	ORCA dasturida moddalarni modellashtirish va turli xil amallar bajarish.	2

A13	Organik birikmalarni modellashtirish va vizualizatsiya uchun onlayn dasturlar.	2
A14	GROMACS dasturini yordamida suvni modellashtirish.	2
A15	GROMACS molekulyar dinamika to'plami yordamida oqsillarni modellashtirish.	2
<b>Jami soat:</b>		30
<b>Mustaqil ta'lim (MT)</b>		
<b>3-semestr</b>		
1	Kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va xossalari.	12
2	Molekulyar orbitalar nazariyasini rivojlantirgan olimlar.	12
3	Molekulyar xarakteristikalarini hisoblash.	12
4	Sistema zaryadi va spin multiplelligi.	12
5	Mikroolam va makroolam qonunlariga bo'ysunuvchi usullarni taqqoslash.	12
6	Atom zaryadlarini hisoblash usullari.	12
7	MM usullarining aniqligini oshirish.	12
8	O'rganilmagan birikmalarning fizik-kimyoviy parametrlarini bashorat qilish.	12
9	Belgilangan muammolar yechimiga yo'naltirilgan hisoblash usullarini yaratish.	12
10	Molekulyar dinamik usulda hisoblash dasturlari.	12
<b>Jami soat:</b>		120

<b>Asosiy adabiyotlar</b>		
1	Errol G. Lewars. Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer Science-Business Media B.V. 2011. Pp. 687.	
2	Rebecca C. Wade., Outi M. H. Salo-Ahen Molecular Modeling in Drug Design. Germany (HITS gGmbH/Heidelberg University) vs Finland (Abo Akademi University). 2019 y. Pp 222.	
3	Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. Maulyanov S.A. Toshov H.S. Kompyuter kimyosi. Uslubiy qo'llanma. Toshkent. o'zMU bosmaxonasi. 2015 yil. 115 b.	
<b>Qo'shimcha adabiyotlar</b>		
1	Sirelson V.G. Kvantovaya khimiya. Molekuly, molekulyarnye sistemy i tverdyye tela: uchebnoye posobiye. M.: Binom. Laboratoriya znaniy, 2010. 495 s.	
2	Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. Maulyanov S.A. Toshov H.S. "Portable MestReNova" dasturida spektrlar ustida amallar. Uslubiy qo'llanma. o'zMU bosmaxonasi. 2019 yil. 60 b.	
3	Axborot manbaalari: 1. www.nuuz.uz.	

- |   |
|---|
| 2. <a href="http://www.natlib.uz">www.natlib.uz</a> .                       |
| 3. <a href="http://www.ziyonet.uz">www.ziyonet.uz</a> .                     |
| 4. <a href="http://www.chemexpress.fatal.ru">www.chemexpress.fatal.ru</a> . |

### **Kimyoda kompyuter modellashtirish fanining baholash mezonlari**

#### **Fan bo'yicha ta'lim yuklamasi:**

Kimyo ta'lim yo'nalishida III-semestrda:

30 soat ma'ruza

30 soat amaliy mashg'ulot

120 soat mustaqil ta'lim

Kredit: Universitet nizomi bo'yicha 180 soatlik yuklamaga 6 kredit beriladi. Hemis dasturidagi kredit baholash tizimida maksimal ball – 100, o'zlashtirish chegarasi – 60%. Joriy va oraliq nazoratdan talaba jami 50 ball, yakuniy nazoratdan esa 50 ball to'playdi.

1. Joriy nazorat (JN) mezoni (20 ball)

Talaba amaliy mashg'ulotlarni bajarib, mavzu bo'yicha nazariy bilimlarni egallasa, jami 20 ball to'playdi (3-semestr:  $10 \times 2 = 20$  ball).

2. Oraliq nazorat (ON) mezoni (30 ball)

Oraliq nazorat ma'ruza-mashg'ulot tugagandan so'ng o'tkaziladi.

Oraliq nazoratda talabaga og'zaki yoki test savollari asosida 5 ball, mustaqil ta'lim mavzulari bo'yicha 10 ball berilishi mumkin.

ON mustaqil ishlar modul jadvali asosida belgilangan muddatda topshiriladi. Belgilangan muddatda topshirilmagan ishlar qabul qilinmaydi.

Modulda belgilangan oraliq nazorat va mustaqil ish uchun talaba jami 15 ball to'playdi. Umumiy oraliq nazoratdan talaba 30 ball oladi.

3. Yakuniy nazorat (YaN) mezoni (50 ball)

Yakuniy nazorat yozma shaklda o'tkaziladi.

Talabaga beshta savoldan iborat variant taqdim etiladi. Ularning uchtasi mustaqil ta'limga tegishli savollar bo'ladi.

Har bir yozma savolga to'liq javob berilganida 10 ball beriladi.

Yakuniy nazoratdan jami 50 ball olinadi

#### **Talabaning fan bo'yicha o'zlashtirish ko'rsatkichini nazorat qilishda quyidagi mezonlar tavsiya etiladi:**

**a) 5 baho olish uchun talabaning bilim darajasi quyidagilarga javob berishi lozim:**

fanning mohiyati va mazmunini to'liq yoritma olsa;

fundagi mavzularni bayon qilishda ilmiylik va mantiqiylik saqlanib, ilmiy xatolik va mantiqiy chalkashliklarga yo'l qo'ymas;

fan bo'yicha mavzu materiallarining nazariy yoki amaliy ahamiyati haqida aniq tasavvurga ega bo'lsa;

fan doirasida mustaqil erkin fikrlash qobiliyatini namoyon eta olsa;

berilgan savollarga aniq va lo'nda javob bera olsa;

konspektga puxta tayyorlangan bo'lsa;

mustaqil topshiriqlarni to'liq va aniq bajargan bo'lsa;

fanga tegishli qonunlar va boshqa me'yoriy-huquqiy hujjatlarni to'liq o'zlashtirgan bo'lsa;

fanga tegishli mavzulardan biri bo'yicha ilmiy maqola chop ettirgan bo'lsa;

tarixiy jarayonlarni sharxlay bilsa.

**b) 4 baho olish uchun talabning bilim darajasi quyidagilarga javob berishi lozim:**

fanning mohiyati va mazmunini tushungan, fandagi mavzularni bayon qilishda ilmiy va mantiqiy chalkashliklarga yo'l qo'ymasa;

fanning mazmunini amaliy ahamiyatini tushungan bo'lsa;

fan bo'yicha berilgan vazifa va topshiriqlarni o'quv dasturi doirasida bajarsa;

fan bo'yicha berilgan savollarga to'g'ri javob bera olsa;

fan bo'yicha konspektini puxta tayyorlagan bo'lsa;

fan bo'yicha mustaqil topshiriqlarni to'liq bajargan bo'lsa.

**v) 3 baho olish uchun talabning bilim darajasi quyidagilarga javob berishi lozim:**

fan haqida umumiy tushunchaga ega bo'lsa;

fandagi mavzularni tor doirada yoritib, bayon qilishda ayrim chalkashliklarga yo'l qo'yilmasa;

bayon qilish ravon bo'lmasa;

fan bo'yicha savollarga mujmal va chalkash javoblar olinsa;

fan bo'yicha matn puxta shakllantirilmagan bo'lsa.

**g) quyidagi hollarda talabning bilim darajasi qoniqarsiz 2 baho bilan baholanishi mumkin:**

fan bo'yicha mashg'ulotlarga tayyorgarlik ko'rilmagan bo'lsa;

fan bo'yicha mashg'ulotlarga doir hech qanday tasavvurga ega bo'lmasa;

fan bo'yicha matnlarni boshqalardan ko'chirib olganligi sezilib tursa;

fan bo'yicha matnda jiddiy xato va chalkashliklarga yo'l qo'yilgan bo'lsa;

fanga doir berilgan savollarga javob olinmasa;

fanni bilmasa.

### Fan o'qituvchisi to'g'risida ma'lumot

Muallif:	Kasimov Sherzod Abdizairovich, kimyo fanlari doktori, professor
E-mail:	qosimovsh@tersu.uz
Tashkilot:	Termiz davlat universiteti, kimyo fakulteti, noorganik kimyo kafedrasini.
Taqrizchilar:	Razzoqova S.R. – O`zMU kimyo fakultet Noorganik kimyo kafedrasini mudiri, PhD, CHoriyeva N.B. – Termiz muhandislik texnologiya

Mazkur Sillabus "Noorganik kimyo" kafedrasining 2024-yil "19"-  
06 dagi №- 41 sonli yig'ilish bayoni bilan ma'qullangan.

Mazkur Sillabus universiteti o'quv-uslubiy Kengashining 2024-yil "26"-  
06 dagi №- 9 sonli yig'ilish bayoni bilan tasdiqlangan.

O'quv-uslubiy

boshqarma boshlig'i:

A. Ibragimov

Fakultet dekani:

X.X. Turaev

Kafedra mudiri:

Sh.A. Kasimov

Tuzuvchi:

Sh.A.Kasimov