

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

“TASDIQLAYMAN”

O‘quy ishlari bo‘yicha prorektor

dots. R.To‘rayev

“26” 06 2024 yil



**KIMYODA ZAMONAVIY KOMPYUTER MODELLASHTIRISH
FANI BO‘YICHA SILLABUS**

Bilim sohasi: 500000 – Tabiiy fanlar, matematika va statistika
Ta‘lim sohasi: 530000 - Fizika va tabiiy fanlar
Ta‘lim yo‘nalishlari: 70530101- Kimyo

Termiz-2024



Modul/FAN SILLABUSI

Kimyo fakulteti
70530101- Kimyo



| | |
|-------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
| Fan nomi: | Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashtirish. |
| Fan turi: | Majburiy |
| Fan kodi: | KKMU1206 |
| Yil: | 2024/2025 |
| Semestr: | 2 |
| Ta'lim shakli: | Kunduzgi |
| Mashg'ulotlar shakli va semestrda ajratilgan soatlar: | 180 |
| Umumi o'quv soati: | 180 |
| Auditoriya soati: | 90 |
| Ma'ruza: | 44 |
| Amaliy mashg'ulotlar: | 46 |
| Labaratoriya mashg'ulotlari: | |
| Seminar: | |
| Mustaqil ta'lim: | 90 |
| Kredit miqdori: | 6 |
| Baholash shakli: | Yozma |
| Fan tili: | O'zbek |

Fan maqsadi(FM)

Mazkur fanning asosiy maqsadi — magistrantlarda zamonaviy hisoblash (kompyuter) kimyosi, kvant-kimyoviy modellashtirish va molekulyar simulyatsiya usullariga tayangan holda murakkab kimyoviy tizimlarni nazariy tahlil qilish, fizik-kimyoviy xossalarni bashoratlash hamda real ilmiy va amaliy muammolarni hal etish bo'yicha chuqur bilim, amaliy ko'nikma va mustaqil ilmiy fikrlash kompetensiyalarini shakllantirishdan iborat.

Fanni o'zlashtirish uchun zarur boshlang'ich bilimlar

Fanni o'rganish uchun magistrantlardan noorganik kimyo asoslari, atom va molekula tuzilishi, kimyoviy bog'lanish turlari hamda fizik kimyoning asosiy tushunchalari (termodinamika, kimyoviy kinetika, kvant kimyosi elementlari) bo'yicha boshlang'ich bilimlarga ega bo'lish talab etiladi.

Bundan tashqari, magistrantlarda kompyuter savodxonligi, kimyoviy formulalar va molekulyar tuzilmalarni 2D va 3D ko'rinishda tasavvur qilish ko'nikmalari shakllangan bo'lishi tavsiya etiladi.

Ta'lim natijalari (TN)

| Bilimlar jihatidan: | |
|-----------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| TN1 | hisoblash (kompyuter) kimyosining shakllanish tarixi va zamonaviy rivojlanish bosqichlarini chuqur biladi; |
| TN2 | empirik, yarim-empirik, noempirik va zichlik funksional nazariyasi (DFT) usullarining nazariy asoslarini tushunadi; |
| TN3 | molekulyar mexanika va molekulyar dinamika metodlarining fizik-kimyoviy mohiyatini izohlay oladi; |
| TN4 | kvant-kimyoviy hisoblashlarda olinadigan energetik, elektron va geometrik parametrlarning mazmunini anglaydi; |
| TN5 | organik, noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalarni modellashtirish usullarini biladi; |
| TN6 | biologik faol birikmalarni nazariy baholash tamoyillarini tushunadi; |
| TN7 | UB, IQ va YaMR spektrlarini hisoblash va tahlil qilishning nazariy asoslarini biladi; |
| TN8 | zamonaviy kvant-kimyoviy dasturiy majmualarning (Gaussian, ORCA, Firefly va boshqalar) imkoniyatlari va cheklovlarini farqlay oladi. |
| Ko'nikmalar jihatidan: | |
| TN8 | molekulalar va materiallarning 2D va 3D tuzilish modellarini yaratish; |
| TN9 | dastlabki geometriyalarni tuzish va optimallashtirish; |
| TN10 | empirik, yarim-empirik va kvant-kimyoviy hisoblashlarni mustaqil bajarish; |
| TN11 | Z-matritsa tuzish va hisoblash paketlari uchun kirish fayllarini tayyorlash; |
| TN12 | energiya minimumlarini topish va konformerlarni tahlil qilish; |
| TN13 | UB, IQ va YaMR spektrlarini hisoblash hamda talqin qilish; |
| TN14 | turli hisoblash usullarida olingan natijalarni taqqoslash va xatoliklarni baholash; |
| TN15 | hisoblash natijalarini jadval, grafik va diagrammalar ko'rinishida tahlil qilish; |
| TN16 | Microsoft Excel va boshqa yordamchi dasturlardan ilmiy ma'lumotlarni qayta ishlashda foydalanish. |
| Kompetensiyalar jihatidan: | |
| TN16 | zamonaviy kimyoning chuqur nazariy va amaliy bilimlarini, shu jumladan ilg'or tadqiqot usullari, matematik va kompyuter modellashtirish, hamda eksperimental natijalarni talqin qilish kompetensiyasiga ega bo'ladi; |
| TN17 | sanoat va laboratoriya sharoitida ishlab chiqarish va xizmat ko'rsatish jarayonlarini boshqaradi, texnologik jihozlarning xavfsiz va samarali ishlashini ta'minlay oladi; |
| TN18 | ilm-fan va texnologiyalarning yutuqlarini sanoat jarayonlariga tatbiq etadi va joriy etilgan yechimlarning iqtisodiy hamda ijtimoiy samaradorligini baholaydi; |

| Fan mazmuni | | |
|------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------|---|
| Mashg'ulotlar shakli: ma'ruza (M) | | |
| 2-semestr | | |
| MI | Hisoblash (kompyuter) kimyosi, modellashtirish usullari tarixining | 2 |

| | | |
|----------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| | qisqacha tavsifi. | |
| M2 | Hisoblash (kompyuter) kimyosi, modellashtirish usullari tarixining qisqacha tavsifi. | 2 |
| M3 | Hisoblash usullari, empirik, yarim empirik va hisoblash usullari. | 2 |
| M4 | Hisoblash usullari, empirik, yarim empirik va hisoblash usullari | 2 |
| M5 | Empirik usullar va ularning zamonaviy mexanika qo'llanilishi | 2 |
| M6 | Molekulyar dinamika va molekulyar mehanika. | 2 |
| M7 | Molekulyar dinamika va molekulyar mehanika. | 2 |
| M8 | Yarimempirik hisoblash usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi. | 2 |
| M9 | Noempirik hisoblash usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi. | 2 |
| M10 | Zichlik funksionallik nazariyasi usullarining kimyoda zamonaviy muammolarni yechishla qo'llanilishi. | 2 |
| M11 | Zichlik funksionallik nazariyasi usullarining kimyoda zamonaviy muammolarni yechishla qo'llanilishi. | 2 |
| M12 | Yarim-empirik, noempirik va DFT usullaridan olinadigan parametrlarni taqqoslash | 2 |
| M13 | Birikmalarning biologik faolligini baholashning nazariy usullari. | 2 |
| M14 | Birikmalarning biologik faolligini baholashning nazariy usullari | 2 |
| M15 | ChemOffice, Portable dasturlarining kimyoviy muammolari qo'llanilishi. | 2 |
| M16 | Fizikaviy ultrabinafsha va YaMR-spektrlari qo'llaniladigan hisoblash usullari na majmualari. | 2 |
| M17 | ORCA va Gaussian zamonaviy kvant-kimyo majmualari. | 2 |
| M18 | ORCA va Gaussian zamonaviy kvant-kimyo majmualari. | 2 |
| M19 | Organik birikmalarni modellashtirish usullari. | 2 |
| M20 | Metalloorganik va kompleks birikmalarni modellashtirish usullari. | 2 |
| M21 | Metalloorganik va kompleks birikmalarni modellashtirish usullari. | 2 |
| M22 | Konfiguratsiyaga ega birikmalarni molellashtirish. | 2 |
| | Jami soat: | 44 |
| Mashg'ulotlar shakli: Amaliy mashg'ulot (A) | | |
| 2-semestr | | |
| A1 | Avogadro, MaSK Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish. | 2 |
| A2 | Avogadro, MaSK Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish. | 2 |
| A3 | Avogadro dasturida birikmalarning umumiy energiyasini uning tarkibiy qismlarini topish. | 2 |
| A4 | Avogadro dasturida birikmalarning umumiy energiyasini uning tarkibiy qismlarini topish. | 2 |
| A5 | MOPAC dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish. Z-matritsa tuzish. | 2 |

| | | |
|------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|
| A6 | HyperChem dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va turli xil ko'inishda vizualizatsiya qilish. | 2 |
| A7 | Avogadro ORCA, Firefly (PC/Gamess) Gaussian dasturlarida moddalarning dastlabki geometriyalarni hosil qilish. | 2 |
| A8 | Avogadro ORCA, Firefly (PC/Gamess) Gaussian dasturlarida moddalarning dastlabki geometriyalarni hosil qilish. | 2 |
| A9 | Birikmalarning ikki o'lchamli tuzilish formulalarini va reaksiya tenglamalarini ChemWindow, IsisDraw dasturlarida hosil qilish va birikmaning nomini topish. | 2 |
| A10 | Birikmalarning ikki o'lchamli tuzilish formulalarini va reaksiya tenglamalarini ChemWindow, IsisDraw dasturlarida hosil qilish va birikmaning nomini topish. | 2 |
| A11 | Modeler dasturida birikmalarning 3D geometriyalarni hosil qilish. | 2 |
| A12 | Modeler dasturida birikmalar geometriyalarini empirik, yarim-empirik metodlari bo'yicha optimizatsiya qilish. | 2 |
| A13 | HyperChem dasturida birikmalarning UB- va IQ-spektral xarakteristikalarini hisoblash. Birikmalar qatorida spektral parametrlar o'zgarishlarini tahlil qilish. | 2 |
| A14 | HyperChem dasturida birikmalarning UB- va IQ-spektral xarakteristikalarini hisoblash. Birikmalar qatorida spektral parametrlar o'zgarishlarini tahlil qilish. | 2 |
| A15 | HyperChem dasturlarida hisoblangan zaryad taqsimotlarini siljishlarini Microsoft Excel dasturida dasturlarida anilin 3D geometriyasini hosil qilish va AMI yarim-empirik hisoblash usulida kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borish. Elektron va energetik parametrlarni aniqlash. | 2 |
| A16 | Portable dasturida moddalarning YaMR spektrlarini o'rganish. | 2 |
| A17 | ChemOffice dasturida PMR, 13C spektrlarini hosil qilish. Ayrim birikmalarning tajribada aniqlangan ChemOffice dasturida olingan 13C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash. | 2 |
| A18 | ChemOffice dasturida PMR, 13C spektrlarini hosil qilish. Ayrim birikmalarning tajribada aniqlangan ChemOffice dasturida olingan 13C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash. | 2 |
| A19 | Ayrim birikmalar misolida HyperChem, Firefly va ORCA dasturlarini o'rganish. | 2 |
| A20 | Ayrim birikmalar misolida HyperChem, Firefly va ORCA dasturlarini o'rganish. | 2 |
| A21 | Konformerlar, tautomerlar va polimer strukturalar orasidagi hamda funksional guruhlarning ichki aylanish barerlari hisobi va tahlillari bilan tanishish. | 2 |
| A22 | Ayrim noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalar misolida HyperChem, va ORCA dasturlarida hisoblashlar va hisoblash natijalarini tahlil qilish. | 2 |

| | | |
|-----------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| A23 | Ayrim noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalar misolida HyperChem, va ORCA dasturlarida hisoblashlar va hisoblash natijalarini tahlil qilish. | 2 |
| Jami soat: | | 46 |
| Mustaqil ta'lim (MT) | | |
| 2-semestr | | |
| 1 | Valent bog'lanish nazariyasi va molekulyar orbitallar nazariyasi o'rtasidagi asosiy farqlar nimalardan iborat? | 10 |
| 2 | Empirik hisoblashlar uchun mo'ljallangan dasturlar va komplekslar. | 10 |
| 3 | Kvant kimyo atamalari va ularning izohlari. | 10 |
| 4 | Hisoblashlarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari. Solvatsiya energiyasi. | 10 |
| 5 | Kenichi Fukui, Xoffman va Pearsonlarning organik kimyo rivojlanishidagi o'rni. | 20 |
| 6 | Kimyoda statistika. Hisoblash natijalarini baholash. Eksperimental natijalarning ishonchlilik darajalarini aniqlash. | 10 |
| 7 | Kimyoviy elektron ma'lumotlar bazalari, spektral ma'lumotlar bazalari. | 20 |
| Jami: | | 90 |

| | | |
|---------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--|
| Asosiy adabiyotlar | | |
| 1 | Rebecca C. Wade., Outi M. H. Salo-Ahen. Molecular Modeling in Drug Design. Germany (HITS gGmbH/Heidelberg University) vs Finland (Abo Academi University). 2019 y. Pp 222 p. | |
| 2 | Matthias Otto. Chemometrics. Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. Third Edition. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGa. 2017. Rr. 386. | |
| 3 | Errol G. Lewars. Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Springer Science-Business Media B.V. 2011. Rr. 687 p. | |

Magistrantning fan bo'yicha o'zlashtirish ko'rsatkichini nazorat qilishda quyidagi mezonlar tavsiya etiladi:

Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashtirish usullari faniga 44 soat ma'ruza, 46 soat amaliy mashg'ulot va 90 soat mustaqil ta'lim ajratilgan. Universitet nizomi bo'yicha bu 180 soat yuklama hajmiga 6 kredit beriladi. Hemis dasturidagi kredit baholash tizimidagi 100 ball, o'zlashtirish chegarasi esa 60 foizdir. Joriy va oraliq nazoratida talaba jami 50 ball to'plashi mumkin. Talaba yakuniy nazoratda esa 50 ball to'playdi.

JN mezoni (20 ball).

JN: Talaba amaliy mashg'ulotlarini bajarib, mavzu bo'yicha nazariy bilimlarni egallasa, har bir darsda qatnashishiga qarab maksimal 0.86 ball berib boriladi, jami 20 ball to'playdi ($23 \cdot 0.86 = 20$ ball).

ON mezoni (30 ball).

ON: Oralq nazorati ma'ruza mashg'uloti tugagandan so'ng o'tkaziladi. Oralq nazoratida talabaga og'zaki yoki test savollari asosida 15 ball olishi mumkin. ON mustaqil ishi uchun modul jadvali asosida topshiriqlarini berilgan muddatda topshiradi. Belgilangan muddatida taqdim qilinmagan mustaqil ishlar qabul qilinmaydi. Modulda belgilangan mustaqil ta'lim va mustaqil ish uchun talaba 15 ball to'playdi. Talaba umumiy oralq nazoratdan 30 ball to'playdi.

YaN mezon (50 ball).

YaN: Yakuniy nazorat yozma shaklida o'tkazilsa, talabaga beshta savoldan iborat variantlar taqdim etiladi. Ularning uchtasi mustaqil ta'limlarga tegishli savollar bo'ladi. Har bir yozma savollarga to'liq yozilgan javobi uchun 10 ball beriladi. Jami 50 ball.

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

| | |
|---------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Muallif: | Kasimov Sherzod Abduzoirovich, kimyo fanlari doktori, professor |
| E-mail: | qosimovsh@tersu.uz |
| Tashkilot: | Termiz davlat universiteti, kimyo fakulteti, noorganik kimyo kafedrasida. |
| Taqrizchilar: | Razzoqova S.R. – O'zMU kimyo kafedrasida dotsenti kimyo fanlari falsafa doktori, dotsent. Iraliyev B. – Denov tadbirkorlik va pedagogika instituti, texnika fanlari nomzodi dotsent. |

Mazkur Sillabus "Noorganik kimyo" kafedrasining 2024-yil 24 - 06 dagi 21 - sonli yig'ilish bayoni bilan ma'qullangan.

Mazkur Sillabus universitet O'quv uslubiy-kengashining 2024-yil 26- 06 dagi 11 -sonli yig'ilish bayoni bilan tasdiqlangan.

O'quv-uslubiy boshqarma boshlig'i: **A.J.Ibragimov**
Fakultet dekani: **X.X.Turaev**
Kafedra mudiri: **Sh.A.Kasimov**
Tuzuvchi: **Sh.A.Kasimov**