

O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY TA’LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI
QO‘QON DAVLAT UNIVERSITETI



“TASDIQLAYMAN”
Qo‘qon davlat universiteti
rektori D.Xodjayeva
30-iyun 2025-yil

KIMYODA KOMPYUTER MODELLASHTIRISH
O‘QUV DASTURI

Bilim sohasi:	500000-Tabiiy fanlar, matematika va statistika
Ta’lim sohasi:	530000-Fizika va tabiiy fanlar
Bakalavriat ta’lim yo’nalishi:	60530100-Kimyo (turlari bo’yicha)

Fan/Modul kodi KKM1404		O'quv yili 2025-2026	Semestr 3	ECTS-Kreditlar 4	
Fan/Modul turi Majburiy		Ta'lim tili O'zbek		Haftadagi dars soatlari 3-semestr - 4 soat	
1	Fanning nomi	Auditoriya mashg'ulotlari (soat)		Mustaqil ta'lim (soat)	Jami yuklama (soat)
	Kimyoda kompyuter modellashtirish	60		60	120
2	I. FANNING MAZMUNI Fanni o'qitishdan maqsad - talabalarda 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. Kimyoviy birikmalarning xususiyatlari va tuzilishini modellashtirishi, turli xil birikmalarni ularning xususiyatlariga qarab keng skrining qilish, kimyoviy reaksiyalar va jarayonlarni matematik modellash, ularning tuzilishi va biologik faolliklarini bashorat qilish imkonini beradi, reaksiyon qobiliyati, sintez jarayonlari oldindan aytib beradi. Kurs organik, noorganik va biologik kimyoga tegishli turli masalalarni o'rganish uchun hisoblash usullarini o'rganadi. Bunga, masalan, reaksiyalarning issiqlik va faollanish energiyalarini hisoblash, reaksiya mexanizmlarini modellashtirish, qisman atom zaryadlari va turli spektral xossalarni hisoblash usullari kiradi. Asosiy e'tibor nazariyaning matematik tafsilotlariga emas, balki printsiplarni tushunish va usullarni qo'llash qobiliyatiga qaratiladi. II. ASOSIY NAZARIY QISM (MA'RUZA MASHG'ULOTLARI) Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi: 1-mavzu. Empirika va nazariya. <i>Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni qo'llash. Kompyuter tizimlarini asosiy ko'rsatkichlari va ish joyni tashkil qilish.</i> 2-mavzu. Molekulyar Mexanika <i>Molekulyar mexanikaga kirish. Mashhur kuch maydonlarini taqqoslash; molekulyar mexanikaning ishlashi. Hisoblanishi mumkin bo'lgan kimyoviy kattaliklar. Empirik usullari, birikmalarning bog' uzunliklari, valent va torsion burchaklari, ionlanish potentsiallari va elektronga moyillik kattaliklari.</i>				

Molecular Mechanic-I (THE reyting #215 University of Florida)
https://www.chem.ufl.edu/wp-content/uploads/sites/89/2023/08/CHM6586_Liu_Fall23.pdf

3-mavzu. Molekulyar dinamika. Emperik noemperik hisoblash usullari.

Kimyoviy kompyuter dasturlari tarkibidagi emperik va noemperik hisoblash usullari. Hisoblashlar uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish usullari.

4-mavzu. Birikmalarning elektron tuzilishini ifodalovchi eksperimental va nazariy parametrlar.

Kimyoviy bog' uzunliklari, bog' energiyalari, bog' tartibi. Ionlanish potentsiallari. Elektonga moyillik. Birikmalarning hosil bo'lish issiqliklari. Energetik tirqich.

Electronic structure-I THE reyting #215 University of Florida)
https://www.chem.ufl.edu/wp-content/uploads/sites/89/2023/08/CHM6586_Liu_Fall23.pdf

5-mavzu. Avagadro dasturida empirik hisoblashlar.

Avagadro dasturida birikmalar 3D strukturalarini hosil qilish. Geometriyalarni optimallashtirish.

6-mavzu. Xartri - Fok molekulyar orbital nazariyasi

Sleyter determinantlari, antisimetriya printsiplari, Xartri-Fok tenglamalarini chiqarish, ixtiyoriy spin-orbital konfiguratsiyalar uchun Hartri-Fok energiya ifodalari, spin integratsiyasi, cheklangan va cheklanmagan havolalar.

Density functional theory THE reyting #215 University of Florida)
https://www.chem.ufl.edu/wp-content/uploads/sites/89/2023/08/CHM6586_Liu_Fall23.pdf

7-mavzu. Yarim empirik hisoblash usullari.

Kvant kimyosi – molekulyar sistemalar taxlilida asosiy postulatlar va printsiplar. Molekulyar orbitallar nazariyasi.

8-mavzu. Kimyoviy masalalarning yarim-empirik uslublari yordamida yechilishi

Energetik parametrlar. Zaryad taqsimotlari, kvant kimyosi uslublari bilan molekulyar strukturalarni ko'rsatish, molekulyar sistemalarning elektron, spektral va boshqa tavsiflarini grafik yordamida ifodalash.

9-mavzu Kimyoda grafik dasturlar.

ISIS Draw, ChemWin, ChemDraw. Ushbu dasturlarning hisoblash dasturlaridan farqi.

10-mavzu. Ab initio - hisoblash usullari

Ab initio – kimyoviy hisoblash uslubi. Bazisli funksiyalarni tanlash qoidalari. Zamonaviy integrirlangan hisoblash dasturlari paketi. Masala yechishning tegishli uslubini tanlab olish.

11-mavzu. Hyperchem hisoblash majmuasi va uning kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi.

IQ va UB – spektrlarini hisoblash. Kuch maydonlarini o'zgartirgan holda zaryad taqsimotlarini hisoblash va natijalarni solishtirish.

12-mavzu. Kimyo muammolarini yechish uchun foydalanadigan dasturlar
Kimyo muammolarini yechish uchun foydalanadigan dasturlar

13-mavzu. ChemOffice dasturining kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi

2D va 3D geometriyalarni hosil qilish. YaMR-¹H va ¹³C spektrlarini hosil qilish. Fizik kimyoviy xarakteristikalarini bilan tanishish.

14-mavzu. Fizikaviy tadqiqot usullarini o'rganishda qo'llaniladigan hisoblash majmualari.

UB, IQ, Mass va YaMR – spektrlarini interpretatsiya qilishda qo'llanilishi mumkin bo'lgan dasturlarni tahlil qilish

15-mavzu. Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR taxlil uslublarining ishlatilishi

Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR taxlil uslublarining ishlatilishi. Doking. Virtual skrining tushunchasi.

III. AMALIY MASHG'ULOTLAR TAQSIMOTI

1 mavzu Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash.

Shaxsiy kompyuterlarga yangi dasturlar o'rnatishni o'rganish va ishga tushirishni taminlash.

2. mavzu Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash

Kompyutiyerda yordamchi va grafik dasturlarni ishga tushirish va ishlashni taminlash

3. mavzu Xromofor tutgan birikmalarni topish va UB – spektrini hisoblash.

Ultrabinafsha spektr soxalari asosida xrom tutgan birikmalar spektrlarini taxlil qilish va aniqlash usullarini o'rganish

4. mavzu Ul'trabinafsha (UB) soha ko'rinuvchan nurlardan boshlanib, qisqa to'lqin uzunligidagi rentgen nurlari. Organik moddalar UB va ko'rinuvchan nurlar.

Ul'trabinafsha ko'rinuvchan nurlar asosida organik birikmalar to'yingan uglevodorod gamologlari , sikloalkanlar to'yinmagan uglevadarod xamda aromatik birikmalarni to'lqin uzunligi aniqlash

5. mavzu mavzu Karbonil, gidroksil va C=H guruh tutgan birikmalarni chizish va ularning tebranishlarini nazariy IQ-spektridan ko'rsatish.

Karbonil gurux, gidroksil gurux, qo'shbog' va uchbog' tutgan birikmalarni chizish xamda valent tebranishlarini aniqlash va IQ-spektrini taqqoslash

6. mavzu ChemOfficye dasturida birikmalarni nomlash, ^{13}C , YAMR, PMR spektrlarini hisoblash. Yadro magnit-rezonans spektroskopiyasi.

ChemOfficye dasturida birikmalarni anqlashtirish Yadro magnit-rezonans spektroskopiyasi Praton magnit-rezonans spektroskopiyasi spektrlarini xisoblash usullari

7. mavzu Yadro magnit-rezonans spektroskopiyasi atomlar, molekulalar yoki ionlardagi yadrolar, organik birikmalarning YAMR tahlili uchun ^1H va ^{13}C yadrolari spini signali

YMR spektroskopiyasi atomlar, molekulalar yoki ionlardagi yadrolar, organik birikmalarning YAMR tahlili uchun vodarod protoni va o'nuch uglerod izotopi yadrolari spini signali aniqlash

8. mavzu ChemOfficye dasturida birikmalarning fizik kimyoviy parametrlarini hisoblash va ikki o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish.

Chemdraw, ChemOfficye dasturida birikmalarning fizik kimyoviy parametrlarini moddalarni tuzilishi konfiguratsiyasi kimyoviy bog'lanishi va valent burchaglarini hisoblash va ikki o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish

9. mavzu ChemOfficye dasturida uch o'lchamli struktura chizish, uni HyperChem, Avagadro va boshqa dasturlar o'qiy oladigan formatlarda saqlash.

ChemOfficye dasturida birikmalarning fizik kimyoviy parametrlarini moddalarni tuzilishi konfiguratsiyasi kimyoviy bog'lanishi va valent burchaglarini hisoblash va uch o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish

10. mavzu ChemOfficye dasturida uch o'lchamli struktura chizish, Uni HyperChem, Avagadro va boshqa dasturlar bilan ishlash usullari.

HyperChem, Avagadro va ChemOfficye dasturida birikmalarning fizik kimyoviy parametrlarini moddalarni tuzilishi konfiguratsiyasi kimyoviy bog'lanishi va valent burchaglarini hisoblash va uch o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish

11. mavzu HyperChem dasturi misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.

HyperChem dasturi birikmalarning fizik kimyoviy parametrlarini moddalarni tuzilishi konfiguratsiyasi kimyoviy bog'lanishi va valent burchaglarini hisoblash

12. mavzu Metalloorganik birikmalarni modellashtirish usullari.

Metalloorganik birikmalarni HyperChem Avagadro va ChemOfficye moddalarini tuzilishi konfiguratsiyasi kimyoviy bog'lanishi va valent burchaglarini hisoblash va uch o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish

13. mavzu Birikmalarning reasion qobilyatini baholovchi indekslar

Kimyoviy reaksiyalar vaqtida ichki energiyasini o'zgarishi yaniy issiqlik effektlari asosida ichki energiya entoriya entalpiyasini aniqlash usullari

14. mavzu Birikma strukturasi va biologik faollik orasidagi miqdoriy bog'liqlik. Tabiiy birikmalarning QSAR taxlili

Xujayrada kechadigan biologik xossalarni QSAR taxlili orqali aniqlash va matematik taxlil qili usullari

15. mavzu Molekulyar doking va virtual skrining. Natijalarni qayta ishlash.

Molekulalarni HyperChem Avagadro va ChemOfficye dasturlar orqali virtual xossalarni xosil qilini o'rganish

IV. MUSTAQIL TA'LIM VA MUSTAQIL MASHG'ULOTLAR

Mustaqil ta'lim topshiriqlari

1. Darslik va o'quv qollanmalar bo'yicha fan boblari va mavzularini o'rganish;
2. Tarqatma materiallar bo'yicha ma'ruza qismini o'zlashtirish;
3. Maxsus adabiyotlar bo'yicha fan bo'limlari yoki mavzulari ustida ishlash;
4. Talabaning o'quv, ilmiy-tadqiqot ishlarini bajarish bilan bog'liq bo'igan fan bo'limlari va mavzularni chuqur o'rganish;

5. Faol va muammoli o'qitish uslubidan foydalaniladigan o'quv mashg'ulotlari;

- 6 Kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va xossalari o'rganish. Sol'vatlanish energiyasini aniqlash

- 7 Kimyoda grafik dasturlar bilan . Karbonil gurux, gidroksil gurux, qo'shbog' va uchbog' tutgan birikmalarni chizish xamda valent tebranishlarini aniqlash va IQ-spektrini taqqoslash

- 8 Androidlar (smartfonlar) uchun mo'ljallangan kimyoga oid dasturlar bilan ishlash.

Fan bo'yicha mustaqil ta'lim topshiriqlarini bajarishda talabalar quyidagi vazifa va majburiyatlarni amalga oshirishi lozim:

- a) o'tilgan mavzuni chuqur o'rganishlari uchun darslik, o'quv materiallari bilan faol ishlash;

- b) ma'ruza, amaliy mashg'ulotlar va nazorat turlariga (sinov va imtihonlarga) oldindan tayyorgarlik ko'rish, vaqtdan unumli foydalanish;

- c) mustaqil ta'lim topshiriqlarining har birini belgilangan muddatlarda taqdim etish;

	d) mustaqil ta'limni topshirish muddati o'tgach vazifalar qabul qilinmasligi shartini bilish va rioya qilish; e) mustaqil ta'lim topshiriqlarini bajarishda plagiat (ko'chirmakashlik)ga yo'l qo'ymaslik talabini bilish va rioya qilish. Fan bo'yicha mustaqil ta'lim topshiriqlari quyidagi shakllar bo'yicha muqobillik tamoyili asosida bajarilishi tavsiya etiladi: 1) mavzu yuzasidan tahliliy ma'lumot (esse) tayyorlash; 2) kurs ishi (loyihasi)ni bajarish; 3) aniq mavzu bo'yicha tahliliy taqdimot (prezentatsiya) tayyorlash; 4) tajriba-sinov ishlarini amalga oshirish; 5) berilgan mavzuni chuqur o'rganish va yuqori darajada tahlil qilish; 6) berilgan masalaga aniq yechim topish va uni tahlil etish; Fan bo'yicha mustaqil ta'lim topshiriqlari laboratoriya mashg'ulotlari jarayonida baholanib boriladi hamda oraliq nazorat turi bo'yicha baholashda inobatga olinadi.
3	Ta'lim natijalari / Kasbiy kompetentsiyalari Fanni o'zlashtirish natijasida talaba: -davlat siyosatining dolzarb masalalarini bilishi, ijtimoiy-iqtisodiy muammolar va jarayonlarni mustaqil tahlil qila olish; -mantiqiy fikrlashni rivojlantirish, to'g'ri xulosa chiqarish, ilmiy madaniyatni shakllantirish; -xorijiy tillardan birida kasbiy faoliyatiga oid hujjatlar va ishlar mohiyatini tushunishi, tabiiy ilmiy fanlar bo'yicha kasbiy faoliyati doirasida zaruriy bilimlarga ega bo'lishi hamda ulardan zamonaviy ilmiy asosda kasb faoliyatida foydalana bilish; -axborot texnologiyalarini kasbiy faoliyatida qo'llay bilishi, axborotlarni yig'ish, saqlash, qayta ishlash va ulardan foydalanish usullarini egallagan bo'lishi, faoliyatida mustaqil asoslangan qarorlar qabul qila olish; -yangi bilimlarni mustaqil egallay bilishi, o'z ustida ishlashi va mehnat faoliyatini ilmiy asosda tashkil qila olish; -ta'lim yo'nalishi ixtisoslik fanlarni o'rganish va chuqur egallash uchun zarur bo'lgan fundamental umumkasbiy bilimlarni, amaliy ko'nikma va uquvlarni shakllantirishi; ta'lim yo'nalishiga muvofiq kasb faoliyati sohalarida erishilgan asosiy yutuqlar, muammolar va ularning rivojlanish istiqbollari haqida tasavvur hosil qilishi; -ta'lim yo'nalishiga muvofiq kasb faoliyati sohalarida erishilgan asosiy yutuqlar, muammolar va ularning rivojlanish istiqbollari haqida tasavvur hosil qilishi; -Kimyoviy birikmalar tuzilishini modellashtirish, kvant kimyoviy hisoblashlar orqali modda tuzilishi haqidagi ilmiy tasavvurlarni shakllantirish ko'nikmalariga ega bo'lishi kerak.

4	Ta'lim texnologiyalari va metodlari: ma'ruzalar; interfaol keys-stadilar; mantiqiy fikrlash, tezkor savol-javoblar; guruhlarda ishlash; taqdimotlarni qilish; individual loyihalar; amaliy ishlarni bajarish va xulosalash; jamo bo'lib ishlash va ximoya qilish uchun loyihalar.
5	KREDITLARNI OLISH UCHUN TALABLAR Fanga ajratilgan kreditlar talabalarga har bir semestr bo'yicha nazorat turlaridan ijobiy natijalarga erishilgan taqdirda taqdim etiladi. Fan bo'yicha talabalar bilimni baholashda oraliq (ON) va yakuniy (YaN) nazorat turlari qo'llaniladi. Nazorat turlari bo'yicha baholash: 5 – “a'lo”, 4 – “yaxshi”, 3 – “qoniqarli”, 2 – “qoniqarsiz” baho mezonlarida amalga oshiriladi. Baholash mezonlari: Talaba mustaqil xulosa va qaror qabul qiladi, ijodiy fikrlay oladi, mustaqil mushohada yuritadi, olgan bilimni amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda – 5 (a'lo) baho; Talaba mustaqil mushohada yuritadi, olgan bilimni amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda – 4 (yaxshi) baho; Talaba olgan bilimni amalda qo'llay oladi, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunadi, biladi, ifodalay oladi, aytib beradi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega deb topilganda – 3 (qoniqarli) baho; Talaba fan dasturini o'zlashtirmagan, fanning (mavzuning) mohiyatini tushunmaydi hamda fan (mavzu) bo'yicha tasavvurga ega emas, deb topilganda – 2 (qoniqarsiz) baho bilan baholanadi. Oraliq nazorat o'quv semestrda bir marta yozma shaklida o'tkaziladi. Talabalar semestr davomida fanga ajratilgan amaliy (seminar, laboratoriya) mashg'ulotlarda muntazam baholanib boriladi va oraliq nazorat turi bo'yicha baholashda inobatga (mashg'ulot hamda mustaqil ta'lim topshiriqlarini o'z vaqtida, to'laqonli bajarganligi, mashg'ulotlardagi faolligi kabi mezonlar asosida) olinadi. Bunda mashg'ulotlar va mustaqil ta'lim topshiriqlari bo'yicha olgan baholar o'rtachasi oraliq nazorat turi davrida olingan baholar bilan o'rtachalanadi hamda qaydnomaga rasmiylashtiriladi. Oraliq nazorat turidan qoniqarsiz baho olgan yoki sababsiz qatnashmagan talaba yakuniy nazorat kuniga qadar ko'pi bilan ikki marta qayta topshirishi

	mumkin. Yakuniy nazorat turi semestr yakunida tasdiqlangan grafik bo'yicha test yoki yozma shaklida o'tkaziladi. Nazorat turlari test shaklida o'tkazilganda talabaga 50 ta savol taqdim etiladi va har bir to'g'ri javob uchun 2,0 ball hisoblanadi. Test sinovi natijalari bo'yicha to'plangan ballar bahoga quyidagicha konvertatsiya qilinadi: - 0-59 ball – “2” (qoniqarsiz); - 60-69 ball – “3” (qoniqarli); - 70-89 ball – “4” (yaxshi); - 90-100 ball – “5” (a'lo). Yozmashaklda o'tkaziladigan nazorat turlarida talabaga beshtadan kam bo'lmagan savol (topshiriq)dan iborat nazorat varianti taqdim etiladi. Talaba nazorat variantining har bir topshirig'i bo'yicha alohida baholanib, ularni o'rtachalash orqali yakuniy baho shakllantiriladi va butun sonlarda qayd qilinadi. Nazorat turlarini ko'rsatilgan shaklda topshira olmaydigan imkoniyati cheklangan talabalarga fakultet dekani ruxsati bilan nazorat turlarining mos keluvchi muqobil shakli belgilanadi.
6	Asosiy adabiyotlar: 1. Ibragimov B.T., Ergashov M.Y., Eshimbetov A.G. va boshq. Kimyoda kompyuter modellashtirish. Darslik. Kamolot nashriyoti. BuxDU. 2022 yil. 284 b. 2. G' A.Doliyev Kimyoda kompyuter modellashtirish usullari NamDU 2024 216 b 3. Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. va bosh. Kompyuter kimyo. Olquv qollanma. Toshkent. O 'zMU bosmaxonasi. 2020 yil. 174 b. Qo'shimcha adabiyotlar: 4. Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. Maulyanov S.A. Toshov H.S. “Portable Mest ReNova” dasturida spektrlar ustida amallar. Uslubiy qollanma.O'zMU bosmahonasi. 2019 yil. 60 b. 5. G' A.Doliyev. Avogadro dasturida empirik hisoblashlar. Uslubiy qollanma NamDU bosmahonasi. 2022 yil. 70 b. Internet saytlari https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-031-51443-2 https://msu.ru/en/info/struct/depts/vmc.html
7	Fan dasturi Qo'qon davlat universiteti tomonidan ishlab chiqilgan va universitet kengashining 2025-yil 30-iyundagi 1-sonli bayonnomasi bilan ma'qullangan
8	Fan /Modul uchun mas'ul: N.J.Abdullayev– QDU, Kmyo kafedrası o'qituvchisi, PhD
9	Taqrizchi: G'. Ochilov – QDU, Kimyo kafedrası mudiri DsS

