

ÓZBEKSTAN RESPUBLIKASI
JOQARI BILIMLENDIRIW, ILIM HÁM INNOVACIYALAR MINISTRILIGI

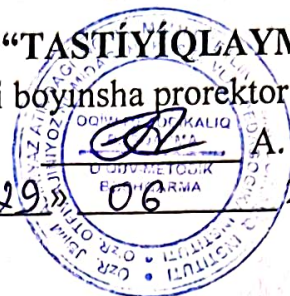
ÁJINIYAZ ATÍNDAGÍ
NÓKIS MÁMLEKETLIK PEDAGOGIKALÍQ INSTITUTI

“TASTIYIQLAYMAN”

Oqiw isleri boyinsha prorektor w.w.a.

A. Abdiev

«29» 06 2024-jil



XIMIYANI KOMPYUTERDE MODELLESTIRIW
PÁNI BOYÍNSHA

SILLABUS

(3-kurs kúndizgi bólim ushın)

Bilim tarawı:	100000 – Gumanitar
Tálim tarawı:	110000 – Pedagogika
Tálim baǵdarı:	60110800 - Ximiya

Nókis-2024



Modul / PÁN SILLABUSÍ
Tábiyyıy pánler fakulteti
60110800 – Ximiya tálim baǵdarı

Pán atı:	Ximiyada kompyuter modellestiriw
Pán túri:	Tańlaw
Pán kodı:	XKM304
Jil:	2024-2025
Semestr:	5
Tálim túri:	Kúndizgi
Shınıǵıwlardıń túri hám semestrge ajratılǵan saatları:	120
Lekciya	30
Ámeliy shınıǵıwlar	30
Laboratoriya shınıǵıwları	-
Seminar	-
Ózbetinshe jumıs	60
Kredit muǵdarı:	4
Bahalaw túri:	awizeki
Pánniń oqıw tili:	Qaraqalpaq

Pán maqseti (PM)	
PM1	Pánni oqıtıwdan maqset — kompyuter texnikasını rawajlanıwı hám ximiyalıq izertlewlerde jańa jónelis - kompyuter ximiya yamasa molekulyar modellew járdeminde neft' hám neft' ónimleri quramında ushraytuǵın organikalıq birikpelerdiń dúzilisin hám ózgesheliklerin xamda qásiyetlerin itıbarǵa alǵan túrde olardı skrining hám sintez etiw jolları sıyaqlı temalardı qamtıp alǵan.
PM2	Pánniń wazıypası - ximiyalıq máselelerdi ximiyalıq birikpelerdiń dúzilisi, ózgesheliklerin úyreniwdi matematikalıq nuktai názerden oyda sawlelendiriw payda ete alıw, berilgen máselelerdi kompyuter programmaları járdeminde sheshim usılları menen tanısıw, ximiyalıq birikpelerdiń dúzilisi hám ózgesheliklerin arnawlı programmalar járdeminde modellew usılları, modellerdi komp'yuteyor quralı járdeminde analiz qılıw ushın tayarlawdan ibarat.

Pánni ózlestiriw ushın zárúr baslanǵısh bilimler	
1.	- Analitikalıq ximiya páni, onıń wazıypaları, izertlew usılları; statistik Esaplanıwı múmkin bolǵan ximiyalıq shamalar. Empirik (tájiriybe) usılları, birikpelerdiń bog uzınlıqları, valent hám torsion múyeshleri,

	ionlanıw potentsialları hám elektronğa beyimlik. Teoriyalıq esaplaw usılları járdeminde bir neshe empirik esaplangan usıllarda anıqlanatuǵın shamalar. Birikpelerdiń esaplangan shamaları tájiriyyede alınǵan shamaları menen salıstırıw haqqında <i>túsinikke iye bolıwı kerek</i> ;
2.	Ximiyalıq kompyuter programmaları quramındaǵı empirik hám noempirik esaplaw usılları. Esaplawlar ushın dáslepki geometriyalarnı payda etiw usılları arqalı anıqlaw <i>bilw hám olardan paydalana alıwdı</i> ;

Tálim nátiyjeleri (TN)	
TN1	<p>Pán boyınsha talabalardıń bilim, kónlikpe, hám qánigeligine tómenдеgi talaplar qoyıladı.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Esaplanıwı múmkin bolǵan ximiyalıq shamalar. Empirik (tájiriyye) usılları, birikpelerdiń bog uzınlıqları, valent hám torsion múyeshleri, ionlanıw potentsialları hám elektronğa beyimlik. - Teoriyalıq esaplaw usılları járdeminde bir neshe empirik esaplangan usıllarda anıqlanatuǵın shamalar. - Ximiyalıq kompyuter programmaları quramındaǵı empirik hám noempirik esaplaw usılları haqqında <i>bilimge iye boladı</i>
TN2	<ul style="list-style-type: none"> - Ximiyalıq baylanıs uzınlıqları, baylanıs energiyaları, baylanıs tártibi. Ionlanıw potentsialları. Elektronğa meyillik. Birikpelerdiń payda bolıw jıllılıǵı <i>dárejesine iye boladı</i> - ISIS Draw, ChemWin, ChemDraw. Bul programmaların esaplaw programmalarınan ayırmashılıǵı. Kompyuter modellestiriw haqqında kónlikpeler aladı.
TN3	<p>Avogadro programmasında birikpeler strukturaların payda etiw. Geometriyaların optimallaw. Empirik usıllardı parametrlew mánisi. Real hám ideal baylanıs uzınlıqları;</p> <ul style="list-style-type: none"> - Energetikalıq parametrler. Zaryad bólistiriwleri, kvant ximiyası usılları menen molekulyar strukturalardı kórsetiw, molekulyar sistemalardıń elektron, spektral hám basqa xarakteristikaların grafik járdeminde anlatıw haqqında <i>bilimge iye boladı</i>
TN4	<ul style="list-style-type: none"> - Ab-initio - ximiyalıq esaplaw usılı. Bazisli funktsiyalardı tańlaw qaǵıydaları. Zamanagóy integrirlanǵan esaplaw programmaları paketi Másele sheshiwde tiyisli usıldı tańlap alıw. <i>dárejesine iye boladı</i> IQ- hám UB-spektrlerni esaplaw. Kúsh maydanların ózgartirgen túrde zaryad bólistiriw esaplaw hám nátiyjelerin salıstırıw <i>dárejesine iye boladı</i> uyreniw haqqında kónlikpeler aladı.
Pán mazmunı	
Shınıǵıwlar túri: lekciya (L)	
L1	Empirika hám teoriya.

	<p>Esaplanıwı múmkin bolǵan ximiyalıq shamalar. Empirik (tájiriybe) usılları, birikpelerdiń baw uzınlıqları, valent hám torsion múyeshleri, ionlanıw potentsialları hám elektrongá beyimlik. Teoriyalıq esaplaw usılları járdeminde bir neshe empirik esaplangan usıllarda anıqlanatuǵın shamalar. Birikpelerdiń esaplangan shamaları tájiriybede alınǵan shamaları menen salıstırıw.</p> <p>Empirik noempirik esaplaw usılları. Ximiyalıq kompyuter programmaları quramındaǵı empirik hám noempirik esaplaw usılları. Esaplawlar ushın dáslepki geometriyalarnı payda etiw usılları.</p>
L2	<p>Birikpelerdiń elektron dúzilisin ańlatıwshı eksperimental hám teoriyalıq parametrler. Ximiyalıq baylanıs uzınlıqları, baylanıs energiyaları, baylanıs tártibi. Ionlanıw potentsialları. Elektrongá meyillik. Birikpelerdiń payda bolıw jıllılıǵı.</p> <p>Ximiyada grafik programmalar. ISIS Draw, ChemWin, ChemDraw. Bul programmaların esaplaw programmalarınan ayırmashılıǵı. Kompyuter modellew.</p>
L3	<p>Avogadro programmasında empirik esaplawlar. Avogadro programmasında birikpeler strukturaların payda etiw. Geometriyalarnı optimallaw. Empirik usıllardı parametrlew mánisi. Real hám ideal baylanıs uzınlıqları.</p> <p>Yarım empirik esaplaw usılları. Energetikalıq parametrler. Zaryad bólistiriwleri, kvant ximiyası usılları menen molekulyar strukturalardı kórsetiw, molekulyar sistemalardıń elektron, spektral hám basqa xarakteristikaların grafik járdeminde ańlatıw.</p>
L4	<p>Ab-initio esaplaw usılları Ab-initio - ximiyalıq esaplaw usılı. Bazisli funktsiyalardı tańlaw qaǵıydaları. Zamanagóy integrirlanǵan esaplaw programmaları paketi. Másele sheshıwde tiyisli usıldı tańlap alıw.</p> <p>Hyperchem esaplaw kompleksi jáne onıń ximiyalıq mashqalalardı tarqatıp alıwda qollanıwı IQ- hám UB-spektrlarnı esaplaw. Kúsh maydanların ózgerdirgen túrde zaryad bólistiriw esaplaw hám nátiyjelerin salıstırıw.</p>
L5	<p>ChemOffice programmasınıń ximiyalıq mashqalalardı sheshıwde qollanıwı 2 D hám 3 D geometriyalarnı payda etiw. YaMR-¹H hám ¹³C spektrların payda etiw. Fizikalıq-ximiyalıq xarakteristikaları menen tanısıw.</p> <p>Fizikalıq izertlewde qollanlatuǵın esaplaw kompleksler UB-, IQ-, Mass- hám YaMR-spektrların interpretatsiya qılıwda qollanıwı múmkin bolǵan programmalaradı analiz qılıw.</p>
	Shınıǵıwlar túri: Ámeliy shınıǵıw (Á)
1	Xromofor tutqan birikpelerdi tabıw hám UB - spektrini esaplaw. Tájiriybede alınǵan UB-spektri menen salıstırıw.
2	Karbonil, gidroksid hám C=N gruppası tutqan birikpelerdi sızıw hám olardıń

	terbelislerin teoriyalıq IQ-spektrida kórsetiw.
3	ChemOffice programmasında tómendegi birikpelerdi ataw, ¹³ C-YaMR; PMR spektrlerini esaplaw.
4	ChemOffice programmasında tómendegi birikpelerdiń fizikalıq-ximiyalıq parametrlerin esaplaw hám eki ólshemli strukturanı úsh ólshemli jaǵdayǵa ótkeriw.
5	ChemOffice programmasında úsh ólshemli struktura sızıw. Onı Hyperchem, Avogadro hám basqa programmalar o'qiy alatuǵın formatlarda saqlaw.

Ózbetinshe jumıslar (ÓJ)

1	Lekciya, ámeliy hám seminar shınıǵıwlarına tayarlıq kóriw hám úyge tapsırmalardı orınlaw. Esse aktual tema boyınsha jeke pikirin sın, publicistik hám basqa janrlarda jazba bayan etiw 10 saat
2	Dokladlar tayarlaw, kurs jumısı jazıw, konspekt jazıw, glossariy dúziw 10 saat
3	Individual ham toparlıq oqıw joybar, keys tapsırmaların orınlaw, tema boyınsha portfoliolar dúziw, axborot-analiz materiallar menen islew, derekler menen islew. 10 saat
4	Multimedialı prezentaciya jaratıw, Infografika dúziw, sızılma-súwret modeller (intellekt-kart, freym, logikalıq grafikalıq h.t.b.) jaratıw. 10 saat
5	Sabaqlıq hám oqıw qollanbalar boyınsha pán bapları hám temaların úyreniw. Sabaqtıń metodikalıq islenbelerin tayarlaw, sabaqtan tısqarı shınıǵıwlar islenbelerin tayarlaw 10 saat
6	Tarqatpa materiallar tiykarında lekciya bólimin ózlestiriw 10 saat

№	Ózbetinshe jumislardıń (ÓJ) temaları
ÓJ1	MM programmaları
ÓJ2	MM programma menyusi
ÓJ3	MM programmada islew qaǵıydaları
ÓJ4	MM programma alınǵan nátiyjeler analizi
ÓJ5	Sıpat teoriiyası
ÓJ6	Xyukkel usılı
ÓJ7	MOPAC programmaları
ÓJ8	MOPAC programmaları menen islew jolları
ÓJ9	MOPAC programma menyusi
ÓJ10	MOPAC programma nátiyjelerin basqa programmalar menen baylanıstırıw usılları
ÓJ11	GAUSSIAN programmaları
ÓJ12	GAUSSIAN programma menen islew jolları
ÓJ13	GAUSSIAN programma menyusi
ÓJ14	GAUSSIAN programmasında alınǵan nátiyjeler qáteliklerin anıqlaw
ÓJ15	Bir geteroatomlı birikpelerdiń elektron dúzilisin esaplaw
ÓJ16	Eki geteroatomlı birikpelerdiń elektron dúzilisin esaplaw

ÓJ17	Kóp geteroatomli birikpelerdiń elektron dúzilisin esaplaw
ÓJ18	Kúsh maydanları ortalığında kompyuter modellestiriw programması menen islew
ÓJ19	Ab initio usılı ushın kompyuter tapsırmaların dúziw
ÓJ20	Molekulyar mexanika MM2 programması menen islew
ÓJ21	Tábiiy birikpelerdi QSAR analizi
ÓJ22	ArgusLab programması. Belok-ligand komplekslerin dúziw, úyreniw hám olardıń baylanısı haqqında maǵlıwmat alıw
ÓJ23	Standart járdemshi redaktor hám grafik programmalar menen islew (Isis Draw)

Tiykargı ádebiyatlar	
1.	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.	2. Rebecca C. Wade., Outi M. H. Salo-Ahen Molecular Modeling in Drug Design. Germany (HITS gGmbHG'Heidelberg University) vs Finland (Abo Akademi University). 2019 y. Pp 222.
3.	3. Matthias Otto. Chemometrics. Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. Third Edition. Wiley-VCH Verlag GmbH & So. KGa. 2017. Pp. 386.
Usınıs etiletuǵın qosımsha ádebiyatlar	
1.	4. Mirziyoev Sh.M. Erkin va farovon demokratik O'zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. Toshkent, "O'zbekiston" NMIU, 2017. -29 b.
2.	5. Mirziyoev Sh.M. Tanqidiy taxlil, qat'iy tartib-intizom va shaxsiy javobgarlik xar bir raxbar faoliyatining kundalik qoidasi bo'lishi kerak. O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Maxkamasining 2016 yil yakunlari va 2017 yil istiqbollariğa bag'ishlangan majlisidagi O'zbekiston Respublikasi prezidentining nutqi. G'G' Xalq so'zi gazetasi. 2017 yil 16 yanvar, №11.
3	6. Tsirelson V.G. Kvantovaya ximiya. Molekulo', molekulyarno'e sistemo' i tverdo'e tela: uchebnoe posobie. -M.: Binom. Laboratoriya znaniy 2010. 495 s.
4	7. Ibragimov I.M., Kovshov A.N., Nazarov Yu.F. Osnovo' kompyuternogo modelirovaniya nanosistem: Uchebnoe posobie. SPb. Lan, 2010. 384 s.
5	8. Mirziyoev Sh.M. Erkin va farovon demokratik O'zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. Toshkent, "O'zbekiston" NMIU, 2017. -29 b.
6	9. Mirziyoev Sh.M. Tanqidiy taxlil, qat'iy tartib-intizom va shaxsiy javobgarlik xar bir raxbar faoliyatining kundalik qoidasi bo'lishi kerak. O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Maxkamasining 2016 yil yakunlari va 2017 yil istiqbollariğa bag'ishlangan majlisidagi O'zbekiston Respublikasi prezidentining nutqi. G'G' Xalq so'zi gazetasi. 2017 yil 16 yanvar, №11.
7	10. Tsirelson V.G. Kvantovaya ximiya. Molekulo', molekulyarno'e sistemo' i tverdo'e tela: uchebnoe posobie. -M.: Binom. Laboratoriya znaniy 2010. 495 s.

Pán oqıtıwshısı haqqında maǵlıwmat

Baǵdarlama avtorı:	L.G. Aymurzaeva – “Ximiya oqıtıw metodikası” kafedrası docent w.w.a., (PhD).
E-mail:	
Shólkem:	Nókis mámleketlik pedagogikalıq institutı “Ximiya oqıtıw metodikası” kafedrası
Pikir bildiriwshiler:	Ximiya ilimleri kandidatı docent, A.I.Sharipova Pedagogika ilimleri kandidatı E.Abdisattarova

Pán Sillabusı Ájiniyaz atındaǵı Nókis mámleketlik pedagogikalıq institutı oqıw metodikalıq keńesiniń 2024-jıl «29» 06 11 - sanlı májilis bayannaması menen tastıyıqlanǵan.

Pán Sillabusı “Ximiya oqıtıw metodikası” kafedrasınıń 2024-jıl «25» 06 11 - sanlı májilis bayannaması menen maqullanǵan.

Oqıw-metodikalıq basqarma baslıǵı:

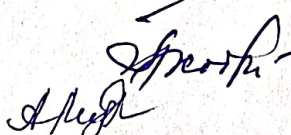


A. Abdiev

Fakultet dekanı:

Q. Reymov

Kafedra baslıǵı:



L. Kabulova

Dúziwshi:

L. Aymurzaeva