

2-kurs (keshki) ushın Ximiyanı kompyuterde modellestiriw páninen sorawlar toplamı

1. Molekulanıń keńisliktegi dúzilisin vizivializaciyalaw.
2. Ximiyanı kompyuterde modellestiriwde paydalanılatuǵın programmalar menen tanıstırıw.
3. ChemDraw programmasına kiriw.
4. Strukturalıq ximiyalıq formulalardı redaktorlaw.
5. Búgingi kúnge shekem túrli ximiyalıq dúzilistegi on millionlap organikalıq birikpeler sintezlengen. On minlap qosimshalar bar.
6. Hár bir birikpe ózine tán fizikalıq hám ximiyalıq qásiyetlerge iye. Biraq, paydalanılatuǵın barlıq birikpeler ushın hár qıylı qásiyetlerdiń isenimli ornalıǵan eksperimentallıq mánisleri joq.
7. Organikalıq birikpelerdiń fizikalıq-ximiyalıq qásiyetlerin olardıń ximiyalıq dúzilisi tiykarında eksperimentallıq hám statistikalıq usıllar járdeminde boljaw.
8. Ximiyalıq maǵlıwmatlar bazasın basqarıwdıń avtomatlastırılǵan sisteması (XBAS).
9. Relyatsion maǵlıwmatlar bazası.
10. Relyatsion maǵlıwmatlar bazasın joybarlaw.
11. Ximiyalıq maǵlıwmatlar bazasın basqarıw.
12. Ximiyalıq belgili.
13. Bazı bir matematikalıq maǵlıwmatlar menen islew.
14. Kvant mexanikasınıń baslanǵısh noqatları Shredinger teńlemesi bolıp tabıladı.
15. Vodorod atomı hallarınıń tiykarǵı nızamları.
16. Elektron qabatlardı gibridlew hám toltırıw máselelerin sheshiwdiń juwiq usılları.
17. Shredinger teńlemeleri molekulalardıń dúzilisi.
18. Molekulyar strukturanıń simmetriyası.
19. Kvant mexanikası elementleri hám molekulalardıń dúzilisi, teoriyası.

20. Potencial energiya betin úyreniw.
21. Molekulyar sistema.
22. Berilgen noqatta energiyanı esaplaw.
23. Atom koordinataları.
24. Molekulyar sistemalar geometriyasın optimallastırıw.
25. Ótiw komplekslerinin geometriyasın úyreniw.
26. Molekulalıq sistemalardıń dinamikasın modellestiriw molekulanıq dinamika usılı bolıp tabıladı.
27. Braun dinamikasınıń usılı Monte-Karlo usılı bolıp tabıladı.
28. Elektron hám terbelis spektrlerin esaplaw.
29. Esaplaw usıllarınıń ulıwma ózgeshelikleri hám esaplaw ximiyası máseleleri.
30. Molekulyar orbitalıq usıl.
31. Empirikalıq emes usıllar - vodorod atomı hám molekulası.
32. NH₃ molekulası.
33. Etilen molekulasınıń elektron spektri.
34. Yarım empirikalıq usıllar.
35. Keńeytilgen Huckel usılı (RMH) differencial qaplamanı itibarǵa almaw. qaldırıwǵa múmkinshilik beredi.
36. Klassikalıq mexanika usılları járdeminde molekulanıq konformaciyasın hám dinamikasın úyreniw.
37. Chem3D da atom-molekulalıq sistemanıń potencial energiyasın, molekulanıq mexanikanı hám molekulanıq dinamikanı esaplaw.
38. Potencial kúshler maydanınıń funkciyaları.
39. Geometriyanı optimallastırıw hám konformaciyalıq analiz.
40. Molekulyar dinamika.
41. Molekulalıq mexanika hám molekulanıq dinamika.
42. Molekulalıq mexanikanıń kúsh maydanları HyperChem.
43. Konformatsion analiz hám dinamika.
44. Aralas esaplaw usılları.
45. Molekulyar óz ara tásirlesiwlerdi kompyuterde modellestiriw.
46. Valentlik emes óz ara tásir túrleri.

47. Tikkeley elektrostatalıq óz-ara tásirlesiwler.
48. Polyarizaciyanın óz-ara tásiri.
49. Rezonanslı shawqım.
50. Keshigiw hám relyativistlik tásirlerdi esapqa alʒan halda.
51. Almaslaw óz ara tásiri Donor-akceptor óz ara tásiri.
52. Vodorod baylanısının kóp atomlı molekulalardıń ximiyalıq dúzilisine tásiri.
53. Valentlik emes óz-ara tásirlesiwler energiyasınıń termodinamikaʒa qosatuʒın úlesine tiykarlanʒan esaplawlar.
54. Fazalıq ótiw dáwirindegi funkciyalardı modellestiriw.
55. Birikpegen óz-ara tásirlesiwlerdin dinamikasını modellestiriw.
56. Potencial energiya betleri boylap qozʒalıs spektrlerdegi molekulalar aralıq óz-ara tásirlesiwlerdin kórinisi bolıp tabıladı.
57. Óz ara tásirlesiwlerdin stoxastikalıq dinamikasi.

