

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

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI
MAKTABGACHA VA MAKTAB TA‘LIMI VAZIRLIGI**

**AJINIYOZ NOMIDAGI
NUKUS DAVLAT PEDAGOGIKA INSTITUTI**



“TASDIQLAYMAN”

O‘quy ishlari bo‘yicha prorektor

M. Ibragimov

_____ 2025 yil

**KIMYONI KOMPYUTERDA MODELLASHTIRISH
FANI BO‘YICHA**

SILLABUS

(2-kurs kunduzgi bo‘lim uchun)

Bilim sohasi:	100000 – Ta‘lim
Ta‘lim sohasi:	110000 – Ta‘lim
Ta‘lim yo‘nalishi:	60530100 – Kimyo

Nukus-2025



Modul / FAN SILLABUSI
Tabiiy fanlar fakulteti
60530100 – Kimyo ta'lim yo'nalishi



Fan/modul:	Kimyoni kompyuterda modellashtirish
Fan/modul turi:	Majburiy
Fan/modul kodi:	XKM1404
Yil:	2025-2026
Semestr:	IV
Ta'lim shakli:	Kunduzgi
Mashg'ulotlar shakli va semestrga ajratilgan soatlar:	120
Ma'ruza	30
Amaliy	30
Mustaqil ta'lim	60
Kredit miqdori:	4
Baholash shakli:	Imtihon
Kurs tili:	o'zbek

1. Fan/modulning maqsadi (MM)

F/MM1	<p>Fanning mazmuni Fanni o'qitishdan maqsad - kompyuter texnikasini rivojlanishi va kimyoviy tadqiqotlarda yangi yo'nalish kompyuter kimyo yoki molekulyar modellashtirish yordamida organik birikmalarning tuzilishini va xossalarni hamda xususiyatlarini e'tiborga olgan holda ularni tushilishi, kimyoviy va biologik xossalarni oldindan o'rganish, tahlil qilish, skrining va sintez qilish yo'llari kabi mavzularni qamrab olgan.</p> <p>Fanning vazifasi - kimyoviy birikmalarning tuzilishi, xossalarni o'rganishni matematik nuqtai nazardan tasavvur hosil qila olish, berilgan masalalarning kompyuter dasturlari yordamida echim usullari bilan tanishish, kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarni maxsus dasturlar yordamida modellashtirish usullari, modellarni kompyuter vositasi yordamida tahlil qilish uchun tayyorlashdan iborat.</p>
--------------	--

2. Fanni o'zlashtirish uchun zarur boshlang'ich bilimlar

1	Zamonaviy kompyuterlarning ishlash prinsipi, texnik va dasturiy ta'minoti, imkoniyatlari, yo'nalish sohasidagi mutaxassislikka oid masalalarni hal qilish ko'nikmalarini va tayyor dasturiy ta'minotdan foydalana olish malakasini hosil qilish
---	---

3. Ta'lim natijalari (TN)	
TN1	Fanni o'zlashtirish natijasida talaba: - kimyoviy birikmalarni kompyuterda modellash;
TN2	- kimyoviy birikmalarning tuzilishi va reaksiyon qobiliyati;
TN3	- ab initio-noempirik kvant-kimyoviy hisob uslubi,
TN4	- struktura-biologik faollik haqida <i>haqida tasavvurga ega bo'lishi</i> ;
TN5	- hozirgi zamon kompyuter texnikalar sistemasining imkoniyatlarini;
TN6	- matematik modellash usulini to'g'ri tanlashni va hisoblash natijalarini qayta ishlash va tushunishni <i>bilishi va ulardan foydalana olishi</i> ;
TN7	- grafiklar asosida molekula tuzilishini aks ettira olish;
TN8	- kompyuter texnikasi bilan ishlash; kimyoviy ilmiy-tadqiqot ishlarida zamonaviy kompyuter dasturlarini qo'llash <i>ko'nikmalariga ega bo'lishlari kerak</i> .
4. Fan / mazmuni	
Mashg'ulotlar shakli : ma'ruza (M) IV semestr	
M1	1-mavzu. Empirika va nazariya. Hisoblanishi mumkin bo'lgan kimyoviy kattaliklar. Empirik (tajriba) usullari, birikmalarning bog' uzunliklari, valent va torsion burchaklari, ionlanish potentsiallari va elektronga moyillik kattaliklari. Nazariy hisoblash usullari yordamida bir nechta empirik usullarda aniqlanadigan kattaliklar. Birikmalarning hisoblangan kattaliklari tajribada olingan kattaliklari bilan taqqoslash.
M2	2-mavzu. Kimyoda grafik dasturlar. ISIS Draw, Chem Win, ChemDraw. Ushbu dasturlarning hisoblash dasturlaridan farqi.
M3	3-mavzu. Birikmalarning elektron tuzilishini ifodalovchi eksperimental va nazariy parametrlar Kimyoviy bog uzunliklari, bog' energiyalari, bog' tartibi. Ionlanish potentsiallari. Elektronga moyillik. Birikmalarning hosil bo'lish issiqliklari. Energetik tirqich.
M4	4-mavzu. Empirik va noempirik hisoblash usullari. Kimyoviy kompyuter dasturlari tarkibidagi empirik va noempirik hisoblash usullari. Hisoblashlar uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish usullari.
M5	5-mavzu. Avogadro dasturida empirik hisoblashlar. Avogadro dasturida birikmalar 3D strukturalarini hosil qilish. Geometriyalarni optimallashtirish. Empirik usullarni parametrlash mohiyati. Real va ideal bog' uzunliklari.
M6	6-mavzu. Yarim empirik hisoblash usullari. Energetik parametrlar. Zaryad taqsimotlari, kvant kimyosi usulblari bilan molekulyar strukturalarni ko'rsatish, molekulyar sistemalarning elektron, spektral va boshqa tavsiflarini grafik yordamida ifodalash.
M7	7-mavzu. Ab initio-hisoblash usullari Ab initio-kimyoviy hisoblash uslubi. Bazisli funksiyalarni tanlash qoidalari. Zamonaviy integrirlangan hisoblash dasturlari paketi. Masala yechishning tegishli uslubni tanlab olish.
M8	8-mavzu. ChemOffice dasturining kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi 2D va 3D geometriyalarni hosil qilish. YAMR- ¹ H va ¹³ C spektrlarini hosil qilish. Fizik-kimyoviy xarakteristikalar bilan tanishish.
M9	9-mavzu. Hyperchem hisoblash majmuasi va uning kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi IQ- va UB-spektrlarni hisoblash. Kuch maydonlarini o'zgartirgan holda zaryad taqsimotlarini hisoblash va natijalarni solishtirish.
M10	10-mavzu. Gaussian dasturining kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi. IQ- va UB-spektrlarni hisoblash. Kuch maydonlarini o'zgartirgan holda zaryad taqsimotlarini hisoblash va natijalarni solishtirish.
M11	11-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.
M12	12-mavzu. Birikmalarning biologik faolligini baholashning nazariy usullari. Kimyoviy strukturani biologik faollikka bog'liqligini o'rganish
M13	13-mavzu. PASS analiz usuli
M14	14-mavzu. Molekulyar doking va skrining
M15	15-mavzu. Dasturlardan foydalanib kimyoviy masalalarni echish
IV semester bo'yicha jami: 30 soat	
Mashg'ulotlar shakli : amaliy mashg'ulot (A) IV semestr	
Amaliy mashg'ulotlar multimedia qurilmalari bilan jihozlangan auditoriyada bir akademik guruhga bir professor-o'qituvchi tomonidan o'tkazilishi zarur. Mashg'ulotlar faol va interfaktiv usullar yordamida o'tilishi, mos ravishda munosib pedagogik va axborot texnologiyalar qo'llanilishi maqsadga muvofiq.	
A1	1. ISIS Draw, Chem Win, ChemDraw dasturlarida struktura hosil qilish va reaksiyalarni shakllantirish 4 soat
A2	2. Avogadro dasturida empirik hisoblashlar. Kimyoviy bog uzunliklari, bog' energiyalari, bog' tartibi. Ionlanish potentsiallari. Elektroniga moyillik. Birikmalarning hosil bo'lish issiqliklari. 4 soat
A3	3. ChemOffice dasturida quyidagi birikmalarning fizik-kimyoviy parametrlarini hisoblash va ikki o'lchamli strukturani uch o'lchamli holatga o'tkazish. 4 soat
A4	4. ChemOffice dasturida uch o'lchamli struktura chizish. Uni HyperChem, Avogadro va boshqa dasturlar o'qiy oladigan formatlarda saqlash.
A5	5. Xromofor tutgan birikmalarni topish va UB spektrini hisoblash. Tajribada olingan UB-spektri bilan taqqoslash.
A6	6. Karbonil, gidroksid va C=N guruh tutgan birikmalarni chizish va ularning tebranishlarini nazariy IQ-spektridan ko'rsatish.
A7	7. ChemOffice dasturida quyidagi birikmalarni nomlash, ¹³ C YAMR, PMR spektrlarini hisoblash.
A8	8. HyperChem dasturi misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.
A9	9. Gaussian dasturi misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.
A10	10. PASS dasturida birikmalarning biologik faolligini nazariy o'rganish
A11	11. Docking dasturlari yordamida birikmalarni Molekulyar doking qilish
A12	12. Dasturlardan kompleks foydalangan holda kimyoviy masalalarni echish
IV semestr bo'yicha jami: 30 soat	

5. Mustaqil ta'lim (MT)		
1	Darslik va o'quv qo'llanmalar bo'yicha fan boblari va mavzularini o'rganish;	12 soat
2	Tarqatma materiallar bo'yicha ma'ruza qismini o'zlashtirish;	12 soat
3	Maxsus adabiyotlar bo'yicha fan bo'limlari yoki mavzulari ustida ishlash;	12 soat
4	Talabaning o'quv, ilmiy-tadqiqot ishlarini bajarish bilan bog'liq bo'lgan fan bo'limlari va mavzularni chuqur o'rganish;	12 soat
5	Faol va muammoli o'qitish uslubidan foydalaniladigan o'quv mashg'ulotlari;	12 soat
<p>Mustaqil ta'limning asosiy maqsadi - o'qituvchining rahbarligi va nazoratida muayyan o'quv ishlarini mustaqil ravishda bajarish uchun bilim va ko'nikmalarini shakllantirish va rivojlantirishdan iborat. Mazkur fanni o'rganuvchi talabalar auditoriyada olgan nazariy bilimlarini mustahkamlash va amaliy masalalarni yechishda ko'nikma hosil qilish uchun mustaqil ta'lim tizimiga asoslanib, kafedra o'qituvchilari rahbarligida, mustaqil ish bajaradilar Bunda ular qo'shimcha adabiyotlardan, hamda Internet saytlaridan foydalanib mustaqil ta'lim mavzusiga doir uy vazifalarini bajaradilar, ko'rgazmali qurollar va slaydlar tayyorlaydilar. Talaba mustaqil ishini tashkil etishda quyidagi shakllardan foydalanadi:</p> <ul style="list-style-type: none"> • ayrim nazariy mavzularni o'quv adabiyotlari yordamida mustaqil o'zlashtirish; 		

- berilgan mavzular bo'yicha axborot (referat) tayyorlash;
- berilgan mavzular bo'yicha kompyuterda harakat modellarini tayyorlash;
- berilgan mavzular bo'yicha kompyuterda animatsiya va slaydlar tayyorlash;
- berilgan mavzular bo'yicha kompyuterda video namoyishlarini tayyorlash;
- nazariy bilimlarni amaliyotda qo'llash.

Mustaqil ta'lim mavzulari (MT)

MT 1	Kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va xossalari.
MT 2	Molekulyar orbitallar nazariyasini rivojlantirgan olimlar.
MT 3	Mikroolam va makroolam qonunlariga bo'ysinuvchi usullarni taqqoslash.
MT 4	MM usullarining aniqligini oshirish.
MT 5	O'rganilmagan birikmalarning fizik-kimyoviy parametrlarini bashorat qilish.
MT 6	Belgilangan muammolar echimiga yo'naltirilgan hisoblash usullarini yaratish.
MT 7	Yarim empirik va noempirik (STO-3G) nuqtai nazardan MO-lar sonini aniqlash.
MT 8	DFT nima?
MT 9	Noempirik kvant kimyoviy hisoblash uslubi.
MT 10	Zaryad taqsimoti tahlili usullari

Jami: 60 soat

6. Ta'lim texnologiyalari va metodlari:

- ma'ruzalar;
- interfaol keys-stadilar;
- seminarlar (mantiqiy fikrlash, tezkor savol-javoblar);
- guruhlarda ishlash;
- taqdimotlarni qilish;
- individual loyihalar;
- jamoa bo'lib ishlash va himoya qilish uchun loyihalar.

7. Kreditlarni olish uchun talablar:

Fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'la o'zlashtirish, tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish, o'rganilayotgan fizikaviy qonuniyatlar haqida mustaqil mushohada yuritish va joriy, oraliq nazorat shakllarida berilgan vazifa va topshiriqlarni bajarish, yakuniy nazorat bo'yicha nazorat ishini topshirish.

8. Asosiy adabiyotlar

1	1. Ibragimov B.T., Ergashov M.Y., Eshimbetov A.G. va boshq. Kimyoda kompyuter modellashtirish. Darslik. Kamolot nashriyoti. BuxDU. 2022 yil. 284 b.
2	2. Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. va bosh. Kompyuter kimyo. O'quv qo'llanma. Toshkent. O'zMU bosmaxonasi. 2020 yil. 174 b.
3	3. N.Q.Muhamadiyev. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalarni matematik modellashtirish. Cho'pon nashriyoti. 2016 y. O'quv qo'llanma.
4	4. Rebecca C. Wade., Outi M. H. Salo-Ahen Molecular Modeling in Drug Design. Germany (Heidelberg University) vs Finland (Abo Akademi University). 2019 y. Pp 222.

9. Qo'chimsha adabiyotlar

1	5. Mirziyoyev Sh.M. Erkin va farovon, demokratik O'zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. O'zbekiston Respublikasi Prezidenti lavozimiga kirishish tantanali marosimiga bag'ishlangan Oliy Majlis palatalarining qo'shma majlisidagi nutq. Toshkent, 2016. 56-b.
2	6. Ибрагимов И.М., Ковшов А.Н., Назаров Ю.Ф. Основы компьютерного моделирования наносистем: Учебное пособие. СПб. Лань, 2010. 384 с.
3	7. Eshimbetov A.G. Xaitbayev A.X. Maulyanov S.A. Toshov H.S. "Portable MestReNova" dasturida spektrlar ustida amallar. Uslubiy qollanma. O'zMU bosmahonasi. 2019 yil. 60 b.
4	8. 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.
5	9. Xaitbayev A.X. Turg'unboyev Sh.Sh., Toshov H.S. Kimyoda kompyuter modellashtirish.

Uslubiy qo'llanma. Toshkent. FarDU. 2022	
Internet saytlari	
1	http://www.nuuz.uz/
2	http://www.natlib.uz/
3	http://www.ziyonet.uz/
4	http://www.xumuk.uz/

Talabalarning 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 yoritib olsa;
- fandagi mavzularni bayon qilishda ilmiylik va mantiqiylik saqlanib, ilmiy xatolik va chalkashliklarga yo'l qo'ymas;
- fan bo'yicha mavzu materiallarning nazariy yoki amaliy ahamiyati haqida aniq tasavvurga ega bo'lsa;

- fan doirasida mustaqil erkin fikrlash qobiliyatini namoyon qila 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 talabaning bilim darajasi quyidagilarga javob berishi lozim:

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

- fanning mazmunini amaliy ahamiyatini tushingan bo'lsa;
- fan bo'yicha berilgan vazifa va topshiriqlarni oquv dasturi doirasida bajarsa;
- fan bo'yicha berilgan savollarga to'g'ri javob bera olsa;
- fan bo'yicha konspektini puxta shakllantirgan bo'lsa;
- fan bo'yicha mustaqil topshiriqlarni to'liq bajargan bo'lsa;
- fanga tegishli qonunlar va boshqa me'yoriy hujjatlarni o'zlashtirgan bo'lsa.

v) 3 baho o'lish uchun talabaning 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'yilmas;

- 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 talabaning 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:	M.B. Ajieva – “Kimyo o'qitish metodikasi” kafedrasida dotsenti., p.f.n
E-mail:	
Tashkilot:	Nukus davlat pedagogika instituti “Kimyo o'qitish metodikasi” kafedrasida
Taqrizchilar:	Kimyo fanlari nomzodi dotsent, B.Ch. Nurimbetov Kimyo fanlari nomzodi B.A. Jumabaev

Mazkur Sillabus Ajiniyoz nomidagi Nukus davlat pedagogika instituti o'quv-uslubiy Kengashning 2025 yil « ____ » _____ - sonli majlis bayoni bilan tasdiqlangan.

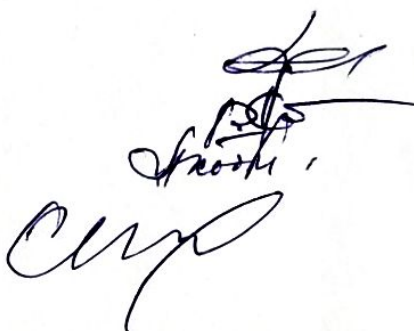
Mazkur Sillabus “Kimyo o'qitish metodikasi” kafedrasining 2025-yil « ____ » _____ - sonli majlis bayoni bilan maqullangan.

O'quv-uslubiy boshqarma boshlig'i:

Fakultet dekani:

Kafedra mudiri:

Tuzuvchi:



A. Abdiev

Q. Reymov

L. Kabulova

M. Ajieva