

1. Namangan davlat universiteti 70530101-Kimyó (turlari bo'yicha) magistratura ta'lim yo'nalishi 1-bosqich talabalari uchun "Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashtirish usullari" fanidan 2024/2025 o'quv yili bahorgi semestrda o'tkaziladigan yakuniy nazorat uchun auditoriyada o'tilgan mavzular (ma'ruza, amaliy va laboratoriya) yuzasidan nazorat savollar banki

1. Zamonaviy molekulyar modellashtirish fanning shakllanish tarixi va kimyodagi o'rni.
2. Madellashtirish uchun hisoblash usullari va majmualarini tanlash.
3. Hisoblash usullari.
4. Yemprik usullar
5. yarim emprik va noemprik.
6. Xisoblashlar uchun dastlabki geometriyaning xosil bo'lio' uchullari.
7. Yemprik usullari va ularning zamonaviy kimyo muammolarini yechish usullari.
8. Molekulyar dinamika.
9. Yarim empirik usullarning zamonaviy kimyoviy muammolar yechimida qollanilishi.
10. Energetik parametrlar.
11. Zaryad taqsimotlari.
12. Noempirik hisob uslublarining zamonaviy kimyoviy muammolar yechimida qollanilishi.
13. Zichlik funksionali nazariyasiga asoslangan xisoblash usullarining zamonaviy kimyoviy muamolar yechimida qollanilishi.
14. Yarim empirik usullaridan olinadiga parametrlarining taqqoslash
15. Noempiri DFT usullaridan olinadiga parametrlarining taqqoslash.
16. Birikmlarning biologik faolligini baxolash nazariy asoslari.
17. QSAR soxalarda matematik xisoblash
18. QSPR soxalarda matematik xisoblash.
19. ChemOffice dasturining usullarning zamonaviy kimyoviy muammolar yechimida qollanilishi.
20. Portable Mest Nova dasturining usullarning zamonaviy kimyoviy muammolar yechimida qollanilishi.
21. Fizikaviy tadqiqot usullarini o'rganishda kimyoviy muammolar yechimida qollanilishi.
22. ORCA dasturlarida xisoblashlar
23. Firefly dasturlarida xisoblashlar
24. Gaussian dasturlarida xisoblashlar.
25. Hisoblash natijala i bilan tanishish.
26. Organik birikmalarining madellashtirish usullari.
27. Metallorganik va kompleks birikmalarining madellashtirish usullari.
28. Toitomerlar konfiguratsiyaga ega birikmalarining madellashtirish
29. Konformerlar konfiguratsiyaga ega birikmalarining madellashtirish
30. Geometrik konfiguratsiyaga ega birikmalarining madellashtirish .
31. Avogadro dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
32. MaSK dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
33. Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
34. Avogadro dasturida birikmalarning umumiy energiyasini topish
35. ORCA dasturida birikmalarning umumiy energiyasini topish
36. Avogadro dasturida birikmalarning tarkibiy qismlarini toppish
37. ORCA dasturida birikmalarning tarkibiy qismlarini toppish
38. Nanotube Modeler dasturida dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va boshqa dasturlar uchun eksport qilish
39. WinMopac (Mopac) dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish.
40. WinMopac (Mopac) dasturida Z-matritsa tuzish
41. HyperChem dasturida birikalarning 3D geometriyalarini hosil qilish
42. HyperChem dasturida turli xil ko'rinishda vizualizatsiya qilish
43. Avogadro dasturida ORCA dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash

44. Firefly (PC/Gamess) dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash
45. Gaussian dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash
46. Hyperchem hisoblash majmuasi va uning kimyoviy muammolarni 2yechishda qo'llanilishi
47. HyperChem dasturida birikmalar geometriyalarini empirik usullarida optimizatsiya qilish va hisoblash protokollarini tuzish
48. Hyperchem dasturida birikmalarning UB-spektral xarakteristikalarini hisoblash.
49. Hyperchem dasturida birikmalarning IQ-spektral xarakteristikalarini hisoblash
50. Hyperchem dasturida birikmalar qatorida spektral parametrlar o'zgarishlarini tahlil qilish
51. HyperChem dasturlarida anilin 3D geometriyasini hosil qilish
52. WinMopac dasturlarida anilin 3D geometriyasini hosil qilish
53. AM1 yarim-empirik hisoblash usulida kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borish.
54. Elektron va energetik parametrlarni aniqlash
55. Portable MestReNova dasturida YaMR spektrlarini o'rganish
56. ChemOffice dasturida PMR va ^{13}C spektrlarini hosil qilish.
57. Ayrim birikmalarning tajribada aniqlangan va ChemOffice dasturida olingan ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
58. Ayrim birikmalar misolida HyperChem dasturida hisoblangan zaryad taqsimotlarini ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
59. Ayrim birikmalar misolida ORCA dasturida hisoblangan zaryad taqsimotlarini ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
60. Konformerlar, tautomerlar va izomer strukturalar orasidagi hamda funktsional guruhlarining ichki aylanish bar'arlari hisobi va tahlillari
61. bilan tanishish
62. Ayrim noorganik birikmalar misolida HyperChem ORCA dasturida hisoblashlar o'tkazish dasturida hisoblashlar o'tkazish
63. Firefly dasturida hisoblashlar o'tkazish dasturida hisoblashlar o'tkazish
64. Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin)
65. Molekulyar mexanika MMP2 dasturi bilan ishlash
66. Avogadro, MaSK va Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
67. ChemDraw MaSK va Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
68. ChemDraw dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
69. ChemDraw dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
70. ChemDraw dasturida birikmalar geometriyalarini empirik va yarim-empirik hisoblash usullarida optimizatsiya qilish
71. ChemDraw dasturida dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va boshqa dasturlar uchun eksport qilish
72. ChemDraw ORCA, Firefly (PC/Gamess) va Gaussian dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash
73. ChemDraw dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish. Zmatritsa tuzish
74. ChemDraw dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topis
75. WinMopac MaSK va Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
76. WinMopac dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
77. WinMopac dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
78. WinMopac dasturida birikmalar geometriyalarini empirik va yarim-empirik hisoblash usullarida optimizatsiya qilish
79. WinMopac dasturida dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va boshqa dasturlar uchun eksport qilish
80. WinMopac ORCA, Firefly (PC/Gamess) va Gaussian dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash

81. WinMopac dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish. Zmatritsa tuzish
82. WinMopac dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
83. Gaussian MaSK va Nanotube Modeler dasturlarida birikmalarning 3D tuzilish formulalarini hosil qilish
84. Gaussian dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
85. Gaussian dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
86. Gaussian dasturida birikmalar geometriyalarini empirik va yarim-empirik hisoblash usullarida optimizatsiya qilish
87. Gaussian dasturida dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va boshqa dasturlar uchun eksport qilish
88. Gaussian ORCA, Firefly (PC/Gamess) va Gaussian dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash
89. Gaussian dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish. Zmatritsa tuzish
90. Gaussian dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
91. Avogadro dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
92. Nanotube Modeler dasturida dasturida birikmalarning 3D geometriyalarini hosil qilish va boshqa dasturlar uchun eksport qilish
93. Avogadro dasturida birikmalarning umumiy energiyasini va uning tarkibiy qismlarini topish
94. WinMopac (Mopac) dasturi uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish. Zmatritsa tuzish
95. HyperChem dasturida birikmalar 3D geometriyalarini hosil qilish va turli xil ko'rinishda vizualizatsiya qilish
96. Avogadro dasturida ORCA, Firefly (PC/Gamess) va Gaussian dasturlari uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish va kerakli "kalit" so'zlarni tanlash
97. HyperChem dasturida birikmalar geometriyalarini empirik va yarim-empirik hisoblash usullarida optimizatsiya qilish.
98. Hisoblash protokollarini tuzish Hyperchem dasturida birikmalarning UB- va IQ-spektral xarakteristikalarini hisoblash. Birikmalar qatorida spektral parametrlar o'zgarishlarini tahlil qilish
99. HyperChem va WinMopac dasturlarida anilin 3D geometriyasini hosil qilish
100. AM1 yarim-empirik hisoblash usulida kvant-kimyoviy hisoblashlar olib borish.

2. Namangan davlat universiteti 70530101-Kimyoyo (turlari bo'yicha) ta'lim magistratura yo'nalishi 1-bosqich talabalari uchun "Kimyoda zamonaviy kompyuter modellash usullari" fanidan 2024/2025 o'quv yili bahorgi semestrda o'tkaziladigan yakuniy nazorat uchun mustaqil ta'lim mavzulari yuzasidan nazorat savollar banki

1. Elektron va energetik parametrlarni aniqlash
2. Portable MestReNova dasturida YaMR spektrlarini o'rganish
3. ChemOffice dasturida PMR, ^{13}C spektrlarini hosil qilish.
4. Ayrim birikmalarning tajribada aniqlangan va ChemOffice dasturida olingan ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
5. Ayrim birikmalar misolida HyperChem dasturida hisoblangan zaryad taqsimotlarini ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
6. Ayrim birikmalar misolida Firefly dasturida hisoblangan zaryad taqsimotlarini ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
7. Ayrim birikmalar misolida ORCA dasturida hisoblangan zaryad taqsimotlarini ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
8. Konformerlar, tautomerlar va izomer strukturalar orasidagi hamda funktsional guruhlarning ichki aylanish bar'arlari hisobi va tahlillari bilan tanishish
9. Ayrim noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalar misolida HyperChem dasturida hisoblashlar o'tkazish va hisoblash natijalarini tahlil qilish
10. Ayrim noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalar misolida Firefly dasturida hisoblashlar o'tkazish va hisoblash natijalarini tahlil qilish

11. Ayrim noorganik, metalloorganik va kompleks birikmalar misolida ORCA dasturida hisoblashlar o'tkazish va hisoblash natijalarini tahlil qilish
12. Xromatografiyaning ayrim usullari va ChemOffice dasturida olingan ^{13}C kimyoviy siljishlarini Microsoft Excel dasturida taqqoslash
13. Qon tarkibidagi qand miqdorini aniqlash
14. Qo'ng'ir ko'mirning kimyoviy tarkibi
15. Kimyoviy ifloslangan reaktivlarni tozalash usullari
16. Kimyoviy analizda tarozilar
17. Konduktometrik analiz usullari
18. Bufer eritmalar va ularning analizda ishlatilishi
19. Ekstraksiya usuli
20. Analiz uchun namunaolish
21. Potentsiometrik analiz
22. Valent bog'lar va molekulyar orbitallar nazariyalari orasidagi asosiy farqlar.
23. Empirik hisoblashlar uchun mo'ljallangan dasturlar va ajmualar.
24. Kvant-kimyoga oid atamalar va ularning sharhi.
25. Hisoblashlarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari. Sol'vatlanish energiyasi.
26. Kenichi Fukui, Xoffman va Pirsonlarning organik kimyodagi o'rni.
27. Kimyoda statistika. Hisoblash natijalarini baholash. Tajriba natijalarining ishonchlilik darajalarini baholash.
28. Kimyoga oid electron bazalar. Spektrlar bazalari
29. Androidlar (smartfonlar) uchun mo'ljallangan kimyoga oid dasturlar.
30. Molekulyar dinamika (MD). Harakatlarni sonli ifodalash usullari. MD bo'yicha hisoblash majmualari.
31. Styuartlarning hisoblash usullarining rivojlanishida tutgan o'rni.
32. Hisoblash natijalaridan (*.out, *.log fayllaridan) geometrik, elektron va energetik parametrlarni aniqlash
33. Onlayn ko'rinishda birikmalarning electron bazalari bilan tanishish
34. Microsoft Excel dasturida struktura-xossa matematik modellarini olish
35. BuildQsar dasturida struktura - xossa/biologic faollik modellarini olish Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni qo'llash
36. Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellashtirish uslublari.
37. Molekulyar Mexanika MMP2 (Elinjer Mexanikasi).
38. Molekulyar mexanika uslubi bilan namunaviy kimyoviy masalalar yechish.
39. Kvant kimyosi – molekulyar sistemalar taxlilida asosiy postulatlar va printsiplar.
40. Molekulyar orbitallar nazariyasi.
41. Kvant-kimyo uslublari yordamida molekulyar strukturalarni ifodalash,
42. Kimyoviy masalalarning yarim-empirik uslublari yordamida yechilishi.
43. Ab initio uslubi.
44. Ab initio – noempirik kvant-kimyoviy hisob uslublari. Bazis funktsiyalarning tanlash qoidalari.
45. Hisob dasturlarining zamonaviy to'plamlari.
46. Hisob uslublarning amaliyotda qo'llanilishi.
47. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
48. Kimyo va farmatsevtika tadqiqotlarida QSAR va QSPR taxlil uslublarining
49. Kon va J.Popl zichlik funktsionali nazariyasi va Gaussian
50. Komp'yuter kimyosini fanining shakllanishigi
51. Word dasturi
52. Excel dasturi
53. Avagadro dasturida organik kimyo benzol moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
54. Avagadro dasturida organik kimyo fenol moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
55. Avagadro dasturida organik kimyo Dimetil silan moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash

56. Avagadro dasturida organik kimyo *Fenolformaldegid smolasi* moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
57. Avagadro dasturida organik kimyo Adipin kislota moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
58. Avagadro dasturida organik kimyo Akrolein moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
59. Avagadro dasturida organik kimyo Yuqori molekulyarni moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
60. Avagadro dasturida organik kimyo element organik birikmalarni moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
61. Avagadro dasturida organik kimyo Adenin $C_5H_5N_5$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
62. Avagadro dasturida organik kimyo Guanin $C_5H_5N_5O$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
63. Avagadro dasturida organik kimyo Sitozin $C_4H_5N_3O$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
64. Avagadro dasturida organik kimyo Timin $C_5H_6N_2O_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
65. Avagadro dasturida organik kimyo Uratsil $C_4H_4N_2O_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
66. Avagadro dasturida organik kimyo C_5H_6NCl (3-xlorpiridin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
67. Avagadro dasturida organik kimyo $C_5H_{10}NH$ (Piperidin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
68. Avagadro dasturida organik kimyo C_5H_4NBr (3-brompiridin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
69. Avagadro dasturida organik kimyo $C_5H_4NNO_2$ (2-nitropiridin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
70. Avagadro dasturida organik kimyo C_4H_8NH (Pirrolidin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
71. Avagadro dasturida organik kimyo C_4H_4NH (Tetrayodpirrol) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
72. Avagadro dasturida organik kimyo C_4H_6NH (3-Pirrolin) moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
73. Avagadro dasturida organik kimyo Pirimidin $C_4H_4N_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
74. Avagadro dasturida organik kimyo Pirazin $C_4H_4N_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
75. Avagadro dasturida organik kimyo Dioksin $C_4H_4O_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
76. Avagadro dasturida organik kimyo Tiazin C_5H_6N moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
77. Avagadro dasturida organik kimyo Purin $C_5H_4N_4$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
78. Avagadro dasturida organik kimyo Indol C_8H_7N moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
79. Avagadro dasturida organik kimyo Xinolin C_9H_7N moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
80. Avagadro dasturida organik kimyo Piridin C_5H_5N moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
81. Avagadro dasturida organik kimyo Piran C_5H_6N moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
82. Avagadro dasturida organik kimyo Tiopiran C_5H_6S moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash

83. Avagadro dasturida organik kimyo Imigdazol $C_3H_4N_2$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
84. Avagadro dasturida organik kimyo Oksazol C_3H_3ON moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
85. Avagadro dasturida organik kimyo Tiazol C_3H_3SN moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
86. Avagadro dasturida organik kimyo Tiofen C_4H_4S moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
87. Avagadro dasturida organik kimyo $CH_2(NH_2)CH_2COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
88. Avagadro dasturida organik kimyo $H_2=CH-COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
89. Avagadro dasturida organik kimyo $RCH(NH_2)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
90. Avagadro dasturida organik kimyo $\alpha-NH_2CH_2COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
91. Avagadro dasturida organik kimyo $CH_3CH(CH_3)CH_2C(NOH)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
92. Avagadro dasturida organik kimyo $(CH_3)_2CHCH_2CH(NH_2)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
93. Avagadro dasturida organik kimyo $CH_3CH(NH_2)CN$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
94. Avagadro dasturida organik kimyo Triptofan $H_2CH(CH_2C_6H_5NH)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
95. Avagadro dasturida organik kimyo Fenilalanin $NH_2CH(CH_2C_6H_5)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
96. Avagadro dasturida organik kimyo Asparagin $NH_2CH(CH_2COOH)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
97. Avagadro dasturida organik kimyo Glutamin k $NH_2CH(CH_2CH_2COOH)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
98. Avagadro dasturida organik kimyo Glutamin $NH_2CH(CH_2CH_2CONH_2)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
99. Avagadro dasturida organik kimyo Lizin $NH_2CH((CH_2)_4NH_2)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash
100. Avagadro dasturida organik kimyo Arginin $H_2CH((CH_2)_3N(H)C(NH_2)=NH)COOH$ moddasini stukturasi va kvant sonlarini xissoblash

Fan bo'yicha yakuniy nazorat savollari Kimyo kafedrasining 2025 yil "26" fevraldagii 7-son yig'ilishida muxokama etilgan va ma'qullangan.

Fakultet dekani

Kafedra mudiri

Tuzuvchi(lar)



(Handwritten signatures of T.A. Sattarov, M.T. Muradov, and G'.A. Doliyev)

T.A. Sattarov

M.T. Muradov

G'.A. Doliyev