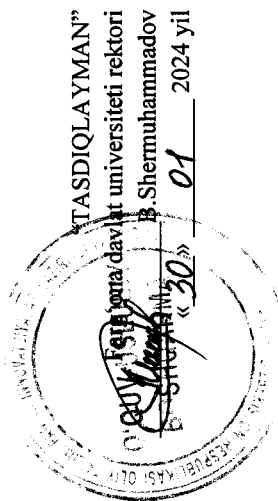


O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI



MAGISTRATURANING 70530101 – KIMYO (FAN YO'NALISHI
BO'YICHA) MUTAXASSISLIGI BITIRUVCHI KURS TALABALARI
UCHUN FANLARARO

YAKUNIY DAVLAT ATTESTATSIYASI
DASTURI

Bilim sohasi: 500000 - Tabiiy fanlar, matematika va statistika
Ta'lim sohasi: 530000 – Fizika va tabiiy fanlar
Magistratura
mutaxassisligi: 70530101 – Kimyo (fan yo'nalishi bo'yicha)

FARG'ONA 2024

Ushbu dastur O'zbekiston Respublikasi Oliy va o'rta maxsus ta'lim vazirligining 2009-yil 22-maydagi 160-son buyrug'i bilan tasdiqlangan "O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim muassasalari bitiruvchilarining yakuniy davlat attestatsiyasi to'g'risida NIZOM" (hozirga qadar mazkur Nizomga bir necha bor o'zgartirishlar kiritilgan bo'lib, 2018-yil 7-noyabrda 26-sonli buyrug'iga binoan so'nggi o'zgarish bo'lgan)ga asosan ishlab chiqildi.

Mutaxassis chiqaruvchi kafedra Kimyo kafedrasini bo'lib, dastur Kimyo kafedrasining 2023-yil "22" ~~dekabr~~ dekabr 2023 -yil 29.12 2023 -yil 2024 -yil 2024 -sonli yig'ilishida tasdiqlangan.

Kafedra mudiri

S.Mamatqulova

Tuzuvchilar:

A.A.Ibragimov – kimyo kafedrasini professori, k.f.d., professor
M.Y.Ismoilov - kimyo kafedrasini dotsenti, k.f.n.
M.Ahmadaliyev – kimyo kafedrasini prof.v.b., t.f.d.
I.J.Jalolov – kimyo kafedrasini v.b. dotsenti, k.f.n.

Taqrizchilar:

S.Urmonov – kimyo kafedrasini dotsenti, b.f.n.

ESLATMA: Yakuniy davlat attestatsiya jarayonida qo'yilgan bahodan norozi bo'lgan bitiruvchilar yakuniy davlat attestatsiyasi ballari e'lon qilingan kundan e'tiboran uch kun muddat ichida appelyatsiya komissiyasiga murojaat qilishga haqli. Yakuniy davlat attestatsiya komissiyasi va talaba o'rtasida baholash ballari bo'yicha yuzaga kelishi mumkin bo'lgan muammolar maxsus appelyatsiya komissiyasi tomonidan ko'rib chiqiladi hamda DAK raisi bilan kelishilgan holda xulosa qilinadi.

KIRISH

Mazkur dastur 70530101 – Kimyo (fan yo'nalishi bo'yicha) mutaxassisligi bitiruvchilarining ikki yil mobaynida mutaxassislik fanlarini o'qib o'zlashtirganlik darajasini aniqlash uchun o'tkaziladigan Yakuniy Davlat Attestatsiyasi sinovlari bo'yicha ishlab chiqilgan.

YAKUNIY DAVLAT ATTESTATSIYASI o'tkaziladigan fanlar tarkibi:

1. Kimyoning zamonaviy muammolari (Majburiy fanlar)
2. Tadqiqotning zamonaviy fizik kimyoviy usullari (Majburiy fanlar)
3. Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashirish usullari (Majburiy fanlar)
4. Organik moddalarning reaksiyon qobiliyati va selektivligi (Tanlov fanlar)
5. Nozik organik sintez (Tanlov fanlar)

KIMYONING ZAMONAVIY MUAMMOLARI O'QUV FANI BO'YICHA

Asosiy nazariy qism

Fanning o'qitishdan maqsadi – magistratlarga mantiqiy fikirlash, Tafakkurini shakllantirish va rivojlantirish, o'zining fikr – muloxaza, xulosalarini asosli tarzda aniq bayon etishga o'rgatish hamda fan mazmuniga kiritilgan zamonaviy kimyo rivojlanishining umumiy tendentsiyalari, zamonaviy noorganik, anallitik, organik, fizik va polimerlar kimyosining asosiy xususiyatlari va vazifalari, yangi kimyoviy birikmalarni sintez qilish, kelajak kimyoviy materiallarini yaratishga doir chuqur bilim berishdan iborat. Fanning vazifasi - zamonaviy kimyoning muammolari, zamonaviy kimyo fanlari va texnologiyasining asosiy yo'nalishlari, barqaror rivojlanishsharoitida kimyoviy jarayonlarning asosiy tarmoqlari, kimyoviy texnologiyaga "Yashil kimyo" elementlarini kiritish, kimyoviy nanotexnologiyaning shakllanishi va yutuqlarini o'rganishdan iborat.

1–mavzu. Noorganik kimyoning zamonaviy muammolari.

Noorganik kimyoning zamonaviy muammolari asosiy xususiyatlari va

vazifalari yangi kimyoviy brikmalarni toppish, sintez qilish. Noorganik kimyoning rivojlanishida kvant mexanicasining roli.

2-mavzu. Noorganik kimyoning xayotiy jarayonlarini boshqarish va tartibga solishda tutgan o'rni.

Bioorganik kimyo. Bioinjineriya, biokataliz, supromolekulyar brikmalarda katalizatorlarni roli.

3-mavzu. Kimyoviy elementlar davriy sistemasining muammolarining zamonaviy holati.

Kimyoviy elementlar davriy sistemasining radiativ elementlarning kimyoviy o'zgarishlari. Lantanoidlar va aktinoidlar.

4-mavzu. Qattiq jismlar elektronikasining kimyoviy muammolari. Kondensialangan sistemalarni o'rganishning zamonaviy jixatlari. Ionli va aralash o'tkazuvchanligi bo'lgan materiallar. Bioorganik materiallar. Shisha materiallari. Sopol materiallar va kompozitsion brikmalar. Mezastrukturali polimerlar.

5-mavzu. Yashil kimyo-barqaror rivojlanish uchun kimyo.

Ekologik kimyoning rivojlanish xususiyatlari. Yashil kimyoning 12-tamoyili. Yashil kimyoning rivojlanishi. Yashil kimyoning sintez usullari. Qauta ishlash, chiqindisiz texnologiyalar yaratish omillari.

6-mavzu. Analitik kimyoning zamonaviy muammolari.

Xromatografiya tahlil usullari. Suyuqlik xromatografiyasi. Gaz-suyuqli xromatografiyasining zamonaviy mukamallashtirilgan usullari. Ion almashuv jarayonlarini o'rganish omillari. Ion almashuv xromatografiyasining analitik kimyoning rivojlanishdagi roli.

7-mavzu. Ultrabinafsha va infraqizil spektrotlar tahlil usuli.

Organik brikmalarning ultra binafsha va infra qizil nurlanishlarida tahlil qilinishi. Organik va noorganik moddalarning tahlili. Supromolekulyar, kigandlarni tahlili. Bioorganika Kompleks brikmala. Nonazarrachalar.

8-mavzu. Mass-spektrometrik kinetik tahlil va biokimyoviy tahlil usullari.

Mas-spektrometrik kinetik tahlil va biokimyoviy tahlil usullarining tavsiflanishi. Organik moddalarning tavsifi. Biologik faol moddalarning tavsifi. Bioorganikada analizlar. Supromolekulyar kimyodagi taxillar. Fermentlar kofermentlar asosidagi kataliz jarayonlari. Kimyoviy kinetikani o'rganishdagi roli.

9-mavzu. Organik kimyoning dolzarb muammolari.

Organik kimyoning dolzarb muammolarida yavgi moddalar sintezida reksiya mexanizmlarini aniqlash orqali texnologik jarayonlarni qisqartirib bir etapda olib borish. Sintetik moddalar sintezi. Yuqori brikmalarda yngiri turdagi

Daraja	5 ballik tizim (baho)	O'zlash-tirish foizda	An'anaviy da	Baholash mezonlari
O'quv boshqarma uchun				
Professor-o'qituvchi uchun				
A+	4,51-5,0	91 - 100	A'lo	Talaba materialni mustaqil ravishda tez o'zlashtiradi: xatolarga yo'l qo'ymaydi; mashg'ulotlarda faol ishtirok etadi; savollarga to'liq va aniq javob beradi.
A	4,3-4,5	86-90		Talaba materiallarni mustaqil ravishda o'zlashtiradi: xatolarga yo'l qo'ymaydi; savollarga to'liq va aniq javob beradi.
B+	4,05-4,29	81-85	Yaxshi	Talaba materiallarni yaxshi o'zlashtirgan, uni mantiqiy ifoda eta oladi; mashg'ulotlarda faol ishtirok etadi; savollarga to'liq va aniq javob beradi, biroq uncha jiddiy bo'lmagan xatolarga yo'l qo'yadi.
B	3,51 - 4,04	71-80		Talaba materiallarni yaxshi o'zlashtirgan, savollarga to'liq va aniq javob beradi, biroq uncha jiddiy bo'lmagan xatolarga yo'l qo'yadi.
S+	3,3 - 3,5	66-70	Qoniqarli	asosiy materiallarni biladi, biroq aniq ifoda etishga qiyinaladi; savollarga javob berishda aniqlik va to'liqlik yetishmaydi; materiallarni taqdim etishda ayrim xatoliklarga yo'l qo'yadi; kommunikatsiya jarayonida qiyinchilik sezadi.
S	3,0 - 3,29	60-65		asosiy materiallarni biladi, biroq aniq ifoda etishga qiyinaladi; savollarga javob berishda aniqlik va to'liqlik yetishmaydi; materiallarni taqdim etishda ayrim xatoliklarga yo'l qo'yadi;
F	3,0 dan kam	59 dan past		materiallarni o'zlashtirmagan; savollarga javob bera olmaydi; mashg'ulotlarda ishtirok etmaydi

moddalarning reaksiya qobiliyati va selektivligi, Nozik organik sintez fanlaridan ko'p variantli test sinovi shaklida o'tkazilsa har bir variant 100 ta yoki 50 ta test savollaridan iborat bo'ladi. Olingan ballni yuqoridagi jadval orqali 5 ballik tizimga o'tkaziladi.

Baholash usullari	Test topshiriqlari, yozma ish, tahlil uchun misollar, taqdimotlar
Baholash mezonlari	5 (a'lo) – fanga oid nazariy va uslubiy tushunchalarni to'la o'zlashtira olish; – fanga oid ko'rsatkichlarni tahlil qilishda ijodiy fikrlay olish; – o'rganilayotgan jarayonlar haqida mustaqil mushohada yuritish; – o'rganilayotgan jarayonga ta'sir etuvchi omillarni aniqlash va ularga to'la baho berish; – tahlil natijalari asosida vaziyatga to'g'ri va xolis baho berish; – o'rganilayotgan jarayonlarni analitik jadvallar orqali tahlil etish va tegishli qarorlar qabul qilish. 4 (yaxshi) – o'rganilayotgan jarayonlar haqida mustaqil mushohada yuritish; – tahlil natijalarini to'g'ri aks ettira olish; – o'rganilayotgan jarayonga ta'sir etuvchi omillarni aniqlash va ularga to'la baho berish; 3 (qoniqarli) – o'rganilayotgan jarayonlarni jadvallar orqali tahlil etish va tegishli qarorlar qabul qilish. 2 (qoniqsiz) – o'rganilayotgan jarayonga ta'sir etuvchi omillarni aniqlash va ularga to'la baho berish; – o'rganilayotgan jarayonlarni analitik jadvallar orqali tahlil etish. – qaror qabul qilish haqida umumiy bilimga ega bo'lish 2 (qoniqsiz) – o'tilgan fanning nazariy va uslubiy asoslarini bilmaslik; o'tilayotgan fan qonuniyatlarini o'zlashtirishmaslikni bilmaslik

Majburiy va tanlov fanlaridan Davlat attestatsiyasi bo'yicha umumiy o'zlashtirish ko'rsatkichi 2 dan 5 ballgacha baholanadi (5 baho – a'lo, 4 baho – yaxshi, 3 baho – qoniqarli, 2 baho – qoniqsiz) yoki baholash 5 baholik shkaladan 100 ballik shkalaga o'tkaziladi.

molekulyar brikmalar sintezi. Maxsus xossali brikmalar olish texnologik jarayonini yaratish.

10-mavzu. Organik kimyoning dolzarb muammolari.

Yuqori molekulyar brikmalar asosida sintetik polimerlar olish. Organik kimyoning dolzarb muammolarida yangi moddalar sintezida reksiya mexanizmlarini aniqlash orqali texnologik jarayonlarni qisqartirib bir etapda olib boorish. Sintetik moddalar sintezi. Yuqori brikmalarda yngiri turdagi molekulyar brikmalar sintezi. Maxsus xossali brikmalar olish texnologik jarayonini yaratish. Tabiiy polimerlarni qayta ishlash texnologiyalarini mukomillastirish.

11-mavzu. Fan va texnologiyada supromolekulyar sistemalar.

Supromolekulyar sistemalar. Supromolekulyar sistemalarda kimyoviy jarayonlarning borishi. Yuqori brikmalarda yangi turdagi molekulyar brikmalar sintezi. Maxsus xossali brikmalar olish texnologik jarayonini yaratish jarayonida supromolekulyar brikmalar.

12-mavzu. Fizik kimyoning zamonaviy muammolari.

Fizik kimyoning zamonaviy muammolari polimer eritmalarining o'ziga xosligi, polimerlarning kimyoviy tuzilishi, sintetik polimerlarning olinishi va ularning fizik kimyoviy fizik-mixanik xossalarni aniqlash muammolari.

13-mavzu. Polimerlar kimyosining zamonaviy muammolari.

Mustaqil mamlakatimizda polimer maxsulotlari ishlab chiqarishga asoslangan ko'plab sanoat korxonalari borligini tushuntirish, monomerlar yordamida polimerlar sintez qilishni talabalarga o'rgatish va amaliyotga qo'llashdir. YMBlar kimyosi fanining vazifalari talabalarni polimerlarning sinflari va turlari bilangina emas, balki, bu fanning nazariy asoslari bilan ham tanishtirishdan iborat. Bundan tashqari polimerlar kimyosi fanidan olgan bilimlari va asosiy tushunchalarini chukurlashtirish, kengaytirish va rivojlantirishdir. Polimerlarning reaksiyalarining asosiy xususiyatlari; polimer eritmalarining o'ziga xosligi bilimiga; polimerlarning kimyoviy tuzilishi va sinflanishi; sintetik polimerlarning olinishi; zanjirli va bosqichli polimerlanish reaksiyalari; radikal va ionli polimerlanish reaksiyalari va ularning o'ziga xosligi;

14-mavzu. Biorganik kimyoning zamonaviy muammolari.

Fizik-kimyoviy metodlar bilan suvutilirilgan va kontsentrlangan polimer eritmalarini hosil qilish; polimerlarning molekulyar massasini aniqlash; olgan nazariy bilimlarini amalda, ya'ni laboratoriya sharoitida mustahkamlash maqsadida polimerlanish reaksiyalarini bajara olish malakasiga ega bo'lishi kerak.

15-mavzu. Funktsional nanomateriallar kimyosining zamonaviy

muammolari.

Funksional nanomateriallar kimyosining zamonaviy muammolari
Supromolekulyar sistemalarda kimyoviy jarayonlarning borishi. Yuqori
molekulyar brikmalarda yingiri turdagi molekulyar brikmalar sintezi.

Kimyoning zamonaviy muammolari o'quv fanidan savollar

1. Kimyoning zamonaviy muammolari fannga kirish.Noorganik kimyoning muammolari.
2. Noorganik kimyoning hayotiy jarayonlarni boshqarish va tartibga solishdagi o'rni..
3. Kimyoviy elementlar davriy sistemasi; muammoning zamonaviy xolati.
4. Qattiq jisimlar elektronikasining kimyoviy muammolari.
5. Yashil kimyo; Barqaror rivojlanish mezonidir.
6. Yashil kimyo - (green chemistry) -зелёная химия
7. A'trof muhitning ekologik omillari va kimyoviy jarayonlari
8. Xromatografiya usullari, suyuqlik xromatografiyasi
9. Mass-spektrometrik kinetik tahlil usuli.
- 10.Fizik kimyoning zamonaviy muammolari.
- 11.Polimerlar kinyosining zamonaviy muammolari.
- 12.Biorganik kimyoning zamonaviy muammolari.
- 13.Fan va texnologiyada supromolekular sistemalar va ularning muammolari.
- 14.Noorganik kimyoning muammolari Kimyoviy elementlar davriy sistemasi.
- 15.Yashil kimyo; Barqaror rivojlanish mezonlari.
- 16.A'trof muhitning ekologik omillari va kimyoviy jarayonlari
- 17.Xromatografiya usullari
- 18.Xromato-mass-spektrometriya kinetic tahlil usuli.
- 19.YMBIarning zamonaviy muammolari.
- 20.Nano zarrachalarning olish muammolari
- 21.Atom tuzilishi nazariyasining zamonaviy muammolari o'rganish.
- 22.Yuqori samarali o'g'itlarning yaratish istiqbollari.
- 23.Platina guruhi elementlardan foydalanish istiqbollari.
- 24.Yashil kimyoning 12ta tamoyili.
- 25.Analitik kimyoning zamonaviy muammolari. Elektron spektroskopiya asosida moddalarni tahlil qilish.
- 26.Zamonaviy organik kimyoning dolzarb vazifalari.
- 27.Tabiiy organik hom ashyoni kimyoviy qayta ishlashning asosiy yo'nalishlari.

BAHOLASH MEZONLARI

- I. 70530101 – Kimyo (fan yo'nalishi bo'yicha) mutaxassisligi talabalariga mutaxassislik fanlaridan Davlat attestatsiyasini yozma shaklda o'tkazish tartibi va baholash mezonlari

Bitiruvchi kurs talabalari Kimyoning zamonaviy muammolari, "Tadqiqotning zamonaviy-fizik usullar, Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashirish usullari, Organik moddalarning reaksiyon qobiliyati va selektivligi, Nozik organik sintez fanlaridan Davlat attestatsiyasi ko'p variantli yozma shaklda o'tkaziladi. "Yozma" variantlarning har bir savol uchun javob 20 ball bilan baholanadi.

Davlat attestatsiyasida har bir yozma javoblar quyidagi mezon asosida baholanadi:

- berilgan savolga to'g'ri va to'liq javob yozilsa, savolning mazmuni, mohiyati to'g'ri va izchil yoritilsa, shuningdek, ijodiy yondashilsa, javobda mantiqiy yaxlitlikka erishilsa o'zlashtirish ko'rsatkichi 17,2 - 20 ball oralig'ida baholanadi;

- berilgan savolga to'g'ri javob yozilsa, savolning mazmuni to'liq yoritilgan bo'lsa, o'zlashtirish ko'rsatkichi 14,1 – 17,1 ball oralig'ida baholanadi;

- berilgan savolga og'zaki javob noto'g'ri yoki yuzaki yozilgan bo'lsa, biroq berilgan savolning mazmuni to'liq yoritilmagan bo'lsa, o'zlashtirish ko'rsatkichi 12-14 ball oralig'ida baholanadi;

- berilgan savolga javob noto'g'ri yoki yuzaki javob berilsa, qo'yilgan masalaning mohiyati mazmuni ochib berilmasa, unda o'zlashtirish ko'rsatkichi 0 - 11,9 ball oralig'ida baholanadi. (17,2-20 ball - a'lo, 14,1-17,1 ball - yaxshi, 12-14 ball - qoniqarli, 0-11,9 ball - qoniqarsiz).

- II. 70530101 – Kimyo (fan yo'nalishi bo'yicha) mutaxassisligi talabalariga mutaxassislik fanlaridan Davlat attestatsiyasini "Test" sinovi shaklda o'tkazish tartibi va baholash mezonlari

Kimyoning zamonaviy muammolari, "Tadqiqotning zamonaviy-fizik usullar, Kimyoda zamonaviy kompyuter modellashirish usullari, Organik

5. O'zbekiston Respublikasi Prezidentining farmoni. O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha harakatlar strategiyasi to'g'risida. (O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlari to'plami, 2017 y., 6-son, 70-madda)

6. Zefirova O.N., Zefirov N.S. Meditsinskaya ximiya (MEDICINAL

CHEMISTRY). 1. Kratkiy istoricheskiy ocherk, opredeleniya i seli

7. Mashkovskiy M. D. Lekarstvennsie sredstva. M.: Novaya volna. 2005.

Internet saytlari:

1. <http://www.fizchim.ru>

2. www.pedagog.uz

3. www.Ziyo.net

4. www.edu.uz

5. <http://www/uralrti.ru>

6. www.chemistry.ru

7. www.labchem.ru

28. Fizik kimyoning zamonaviy muammolari. Zamonaviy fotofizika va fotokimyo bilan tanishish.
29. Supromolekulyar sistemalarni o'rganish.
30. Molekulyar va getrogen kataliz.
31. YMB va ular asosidagi materiallarning molekulyar strukturasini.
32. YMBlarni asosidagi materiallarning supromolekulyar strukturasini.
33. Bioyoqilg'i.
34. Bioorganik kimyo rivojlanishlarining asosiy yo'nalishlari. Biyoorganik nonokimyo.
35. Kimyoviy notexnologiyaning shakillanishi va yutuqlari.
36. Noorganik kimyoning muammolari
37. Asbestni ekologik xavf omillarini baxolash
38. Karomatli minerallar xaqida malumot
39. O'zbekistonda xosil bo'layotgan ayrim organik chiqindilar
40. Quruq usulda shifer ishlab chiqarish
41. Bazalt va uning hususiyatlari
42. Sun'iy minerallar nimaga kerak
43. Xotirada saqlovchi minerallar
44. Qishloq-xo'jalik chiqindilari
45. Geteroaromatik birikmalarning mass-spektrlari
46. Shifer ishlab chiqarish jarayoni
47. Bazalt asosidagi olinadigan tovar maxsulotlari
48. Olmosning olinishi va xossalari
49. Asl toshlar xaqida ma'lumot
50. Paxta sheluxasi va g'o'za-poyasi xaqida malumot
51. Asbestning turlari va xossalari
52. Bazaltning kimyoviy tarkibi va asbestdan afzalliklari
53. Sunniy olmos olish turlari va texnologiyasi
54. Yashil kimyoning 12 ta qoidasi
55. Qishloq-xo'jalik chiqindilarini qayta ishlash omillari.
56. Yashil kimyo haqida malumot
57. Atrof muhitning ekologik omillari
58. Ozbekistonda basalt ishlab chiqarish
59. Quruq usulda shifer ishlab chiqarish
60. Adsorbentlar
61. Xromatograf kalonkasi xaqida malumot
62. Yuqori samarali suyuqlik-suyuqlik xromatografik usuli
63. Qo'zg'almas faza va sorbentlar xaqida malumot
64. Mass-spektrometriya taxlil usuli.

65. Ko'p zaryadli ionlar

66. Organik kimyoning dolzarb muammolari

67. Geteroaromatik birikmalarning mass-spektrlari

68. Alifatik va aromatik geteroatomli birikmalarning mass-spektrlari

69. Polimerlar kimyosining zamonaviy muammolari

70. Polimerlar radio-elektronika sohasida

Asosiy va qo'shimcha o'quv adabiyotlar hamda axborot manbaalari

Asosiy adabiyotlar

1. Общая и неорганическая химия. В 3 томах. Под ред. Третьякова Ю.Д. Москва. «Академия», 2008.
2. Рашидова С.Ш. // Введение в химию высокомолекулярных соединений. – Ташкент: Навруз, 2014. – 194с.
3. Казичина, Л. А. Применение УФ, ИК, ЯМР и масс-спектрометрии в органической химии / Л. А. Казичина, М. Б. Куплетская. – М. : -МГУ, - 1979. – 350 с.
4. Пентин Ю.А., Вилков Л.В. Физические методы исследования в химии. Москва: Мир. -2003. -683 с.
5. Хангбаев А.Х., Маулянов С.А., Тошов Х.С. Органик бирикмалар тузилишини УВ- ва ИК-спектр усуллари ёрдамида тахлил қилиш. Тошкент: ЎзМУ, -2020, -84 б.
6. Вилков Л.В., Пентин Ю.А. "Физические методы исследования в химии". М. Мир, 2003.

Qo'shimcha adabiyotlar:

1. Нанотехнологии. Азбука для всех. Под ред. акад. Ю.Д. Третьякова. М.: Физматлит, 2008;
2. Сергеев Г.Б. Нанохимия. М.: Книжный дом Университет, 2006; Ратнер М., Ратнер Д. Нанотехнология. Простое объяснение очередной гениальной идеи. М.: Вильямс, 2007;
3. Рыбалкина М. Нанотехнологии для всех. М., 2005; Мензютина Н.В. Введение в нанотехнологию. Калуга: Изд-во научной литературы Бочкаревой Н.Ф., 2006;

Elektron ta'lim resurslari:

www.nanometer.ru – информационный сайт, посвященный нанотехнологиям;
www.nanojournal.ru – российский электронный «Наножурнал».

Asosiy va qo'shimcha o'quv adabiyotlar hamda axborot manbaalari

Asosiy adabiyotlar

1. Reutov, O.A. Organicheskaya ximiya. 1-4 ch. [Elektronnyy resurs] / O.A. Reutov, A.L. Kurs. K.P. Butin. Elektron. -M: Izdatelstvo Laboratoriya znaniy", 2012. -567 <http://e.lanbook.com/book/3152-3155>.
2. Soldatenkov A. T., Kolyadina N. M., SHENDRIK I. V. Osnovy organicheskoy khimii lekarstvennykh veshchestv. 2-e izd. M.: Mir, 2003. 192 s.
3. Glushenko N. N., Pletneva T. V., Popkov V. A. Farmatsevticheskaya ximiya M.: Mir: BINOM, 2007, 384 s.
4. Meditsinskaya XIMIYA / Kalibabchuk V.A., Grichenko Ii Galinskaya V.I. i dr. // pod red. V.A. Kalibabchuk. Kiev: Meditsina, 2008. 400 s.
5. Orlov V.D., Lipson V.V., Ivanov V.V. Meditsinskaya ximiya. Xarkov: Folio, 2005.- 461 s.
6. Granik V.G. Osnovy meditsinskoy khimii. M. Uch.2001.-384 s

Qo'shimcha adabiyotlar:

1. Mirziyoev 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 / SH.M. Mirziyoev. – Toshkent : O'zbekiston, 2016. - 56 b.
2. Mirziyoev SH M. Tanqidiy tahlil, qat'iy tartib-intizom va shaxsiy javobgarlik – har bir rahbar faoliyatining kundalik qoidasi bo'lishi kerak. Mamlakatimizni 2016 yilda ijtimoiy-iqtisodiy rivojlantirishning asosiy yakunlari va 2017 yilga mo'ljallangan iqtisodiy dasturning eng muhim ustuvor yo'nalishlariga bag'ishlangan Vazirlar Mahkamasining kengaytirilgan majlisidagi ma'ruza, 2017 yil 14 yanvar / SH.M. Mirziyoev. – Toshkent : O'zbekiston, 2017. – 104 b.
3. Mirziyoev SH. M. Qonun ustuvorligi va inson manfaatlarini ta'minlash – yurt taraqqiyoti va xalq farovonligining garovi. O'zbekiston Respublikasi Konstitutsiyasi qabul qilinganining 24 yilligiga bag'ishlangan tantanali marosimdagi ma'ruza. 2016 yil 7 dekabr /SH.M.Mirziyoev. – Toshkent: "O'zbekiston", 2017. – 48 b.
4. Mirziyoev SH.M. Buyuk kelajagimizni mard va olijanob xalqimiz bilan birga quramiz. Mazkur kitobdan O'zbekiston Respublikasi Prezidenti Shavkat Mirziyoevning 2016 yil 1 noyabrda 24 noyabrga qadar Qoraqalpog'iston Respublikasi, viloyatlar va Toshkent shahri saylovchilari vakillari bilan o'tkazilgan saylovoldi uchrashuvlarida so'zlagan nutqlari o'rin olgan. /SH.M.Mirziyoev. – Toshkent: "O'zbekiston", 2017. – 488 b.

34. Dorilarning ta'sir qilishining steroidkimyoviy jixati
35. Dorivor moddalarda boradigan asosiy kimyoviy reaksiyalar.
36. Dori moddalarining organizmda ta'sir xususiyati.
37. Dori vositalarining eksperimental tadqiqi va klinik sinovlari
38. Dori vositalarining farmakodinamikasi.
39. Dorilarning farmakokinetik ko'rsatkichlari.
40. Yangi dori vositalarini ishlab chiqarishda sifat nazoratidan o'tkazish tartibi.
41. Qattiq fazada moddalar sintezi.
42. Moddalarning biologik faolligini o'rganish usullari.
43. Eritmadagi kombinator sintezi.
44. Kimyoviy birikmalarni sintez qilish usullari.
45. Polimer yuzasida kimyoviy birikmalarni sintez qilish usullari.
46. Farmokinetika.
47. Farmokinetikaning asosiy tushuncha va qoidalari.
48. Oddiy efirlar identifikatsiyalash sintezi jarayoni.
49. Murakkab efirlar kimyoviy sintezi.
50. Aminobirikmalar sintezi.
51. Aminobirikmalarining xosilalari sintezi.
52. Aldegid xosilalari sintezi.
53. Ketonlar xosilalari sintezi.
54. Aromatik uglevodorod xosilalari sintezi.
55. Suyuqliklarning sirt tarangligi.
56. Suyuq-gaz chegarasidagi adsorbsiya
57. Suyuqlik-suyuqlik chegarasidagi adsorbsiya
58. Sirt faol moddalar.
59. Sirti faol moddalar molekularining yo'nalishi
60. Sirti faol moddalar molekularining xususiyatlari.
61. Adsorbsiya chegarasi
62. Adsorbsiyaning asoslanishi.
63. Adsorbsiyaning Lengmyur tenglamasi
64. Biologik membrananing tuzilishi
65. Polimolekulyar adsorbsiya
66. Adsorbsion terapiyaning asoslari
67. Biologiya va tibbiyotda analiz usullarining qo'llanishi
68. Xromatografik taxil usullari
69. Xromatografik usullar sinflanishining prinsiplari
70. Xromatografiya moddalarni ajratish mexanizmlari

TADQIQOTNING ZAMONAVIY FIZIK-KIMYOVIY USULLARI O'QUV FANI BO'YICHA

Asosiy nazariy qism

“Tadqiqotning zamonaviy fizik-kimyoviy usullari” fani fanlararo kasbiy modulning variativ (o'zgaruvchan) qismiga tegishli. Ushbu fan noorganik, analitik, organik, bioorganik va polimerlar kimyosidan talabalarining olgan fundamental bilimlarini qamrab olgan va ularni umumlashtirishga va chuqurlashtirishga mo'ljallangan.

1-mavzu. Fizikaviy tadqiqot usullari turlari. Elektromagnit nurlanishlar va ularning izoxi. Elektromagnit to'liqlarning shkalasi. Spektrometrlari. Fizikaviy tadqiqot usullari turlari va uning kimyo fani rivojidadagi ahamiyati.

2-mavzu. Fizik-kimyoviy taxil usullarining asoslari: xususiyatlari, afzalligi va kamchiliklari.

3-mavzu. Atom va molekulyar spektroskopiya usullari. Fizik-kimyoviy taxil usullarini amaliyotda ko'llash. Instrumental taxil usullarining sezgirligi, takrorlanuvchanligi va tanlovchanligi.

4-mavzu. Ultrabinafsha va ko'rinuvchan soxa spektroskopiyasi. Spektroskopiya xakida tushuncha. Elektromagnit nurlanish. Ultrabinafsha (UB) spektroskopiyasi. UB va ko'rinuvchan soxa spektroskopiyasi. Elektron o'tish turlari. p→l elektron o'tishning xossalari. Taxilning refraktomegrik usuli. UB-spektroskopiyaning foydalanilish imkoniyatlari.

5-mavzu. Mass-spektroskopiya uslubining asoslari, rivojlanish tarixi. amaliyotda ishlatilishi. Moddarni spektrometrga kiritish uslubi. Spektrometrlarning sezgirlik darajasi va spektrlarda ionlarning ajralib chikishi.

6-mavzu. Rezonans magnit spektroskopiya usullari. YaMR- va EPR-spektroskopiya. Spektroskopiyada kuzatiladigan signallar parametrlarini belgilovchi omillar.

7-mavzu. PMR spektroskopiya parametrlari. Spin-spin ta'sir konstantasi. Signallarning multipleklik turlari. Signallarning nozik vao'ta nozik ajralishlari.

8-mavzu. Rentgen taxil usullari. Rentgen nurlarining monoxromatik manbalari. Rentgen nurlarining detektorlari. Rentgen nurlanish. Rentgen difraktsiyas. Lyuminesent taxil. Stoks lyuminesentsiya xodisasi. uning mexanizmi. lyuminesens materiallarga misollar.

9-mavzu. Taxilning xromatografik usullari, ularning fizikaviy asoslari va sinflanishi. Xromatografiya usullarining sezgirligi. anikligi. yutuk va

kamchiliklari.

10-mavzu. Xromatografik usullarning xususiyatlari. Ulardan aralashmalar tarkibini taxlil qilishda ishlatilishi. Xromatografik ajratib olish jarayonining mexanizmi.

11-mavzu. Gaz va suyuq aralashmalarni ajratish usullari. Molekulyar adsorbsion xromatografiya. Suyuklik xromatografiyasi.

12-mavzu. Gaz va gaz-suyuklik xromatografiyasi: bu usullarning sinflanishi. Ishlatiladigan detsktorlar. Xromatografiya usullari yordamida snfat va mikdorij taxlil qilish.

13-mavzu. Xromatomass-spektrometriya usuli. Ionlanish turlari.

Suyuklik xromatografiya usullari. Usulda foydalaniladigan kolopka. detektor (UB-. diod-matritsali. flyuorotsent, refraktometr). Moddalarining ushlanib kolishiga xarorat. elyuent tezligi va fazalar tabiatining ta'siri.

Tadqiqotning zamonaviy fizik-kimyoviy usullari fanidan savollar

1. Fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining umumiy xususiyatlari va klassifikatsiyasi.
2. Spektroskopik usullar klassifikatsiyasi
3. UF-spektroskopiya usuli.
4. Ultrabinafsha va ko'rinuvchan soha spektroskopiyasi
5. Infraqizil (IQ)-spektroskopiya
6. Xalqali uglevodorodlarning IQ-spektrlari
7. Refraktometrik taxlil usuli.
8. Optik spektroskopiyaning asoslari, UB spektroskopiya, elektron o'tish turlari
9. IQ-spektroskopiya asoslari, tebranish turlari, chastota kiymatiga ta'sir etuvchi omillar.
10. Gidroksil va karbonil guruxi tutgan birikmalarni IQ spektrlari.
11. Aromatik birikmalarning IQ spektrlari.
12. PMR spektroskopiya parametrlari. Spektrlarni soddalashtirish usullari.
13. Spin-spin ta'sir kovstantasi. Moddaning fazoviy tuzilishi aniqlash usullari.
14. YaMR spektroskopiya. Ikki o'ldhamli spektor.
15. Mass-spektroskopiya asoslari, spektrlarni taxlil qilish usullari.
16. Mass-spektroskopiya asoslari, Bo'lakli, qayta guruhlanuvchi, metastabil ionlar va ularning xosil bo'lish konuniyatleri.
17. To'yingan va aromatik uglevodorodlarning mass- spektrlari.

3. Organik sintezning umumiy printsiplari: molekula asosini qurish, funksional guruhlarni va ularni modifikatsiyalash hamda organik molekula sintezini rejalashtirish.
4. Organik sintezni rejalashtirishda hisobga olinadigan omillar, dastlabki moddadan maqsadli moddagacha(sintetik) yoki maqsadli moddadan(retrosintetik) dastlabki moddagacha bo'lgan ikki usuli hamda asosiy tushunchalari
5. Spirtlar va glikol sistemalarini himoya qilish. trifenilmetil efrilari. trialkilsil efrilari. tetrahidropiran efrilari. etiliden va benziliden asetallari. izopropiliden ketallari.
6. Karbonil guruhnii himoya qilish.1,3-dioksolan himoya. 1,3-oksatiolan himoya. 1,3-ditiolan himoyasi. 1,3-ditian himoyasi.
7. Karboksil guruhnii himoya qilish.
8. Benzil efrilari. trimetilsil efrilari.
9. Stabillangan karbanionlar va turdosh nukleofillar yordamidagi sintezlar, asetosirka efr yordamidagi sintezlar, malon efr yordamidagi sintezlar
10. Qaytarilish reaksiyalari. Uni amalga oshiruvchi reagentlar. Qaytarilishni turlari. Gomogen va geterogen kataliz.
11. Kondensatsiya reaksiyalari.
12. Kondensatsiya reaksiyalarni asosiy turlari.
13. O'rta almashinish reaksiyalari.
14. Birikish reaksiyalari.
15. Aldol kondensatsiyasi kroton kondensatsiyasi, Friedel - Crafts reaksiyasi.
16. Aldol kondensatsiyasi.
17. Knyovenagel reaksiyasi.
18. Perkin reaksiyasi.
19. Benzoin kondensatsiyasi.
20. Atsiloyn kondensatsiyalanishi.
21. Enantiomer toza birikmalar sintezi.
22. Yenolyatlarning alkilash va atsillash reaksiyalari.
23. Yangi dori vositalarni yaratish strategiyasi.
24. Yangi vositalarni izlash va ishlab chiqish usullari
25. Xalq tabobatini takomillashtirish yo'llari
26. An'anaviy tibbiyot va kelajak dori vositalarining biotexnologiyasi
27. Dori vositasi yaratish bosqichlari.
28. Yangi dori yaratish manbaalari.
29. Dorivor moddalarning kimyoviy sintezi.
30. Dorivor moddalarning qidirish manbaalari.
31. Dorivor moddalarning retseptorlar bilan ta'sirlashishi
32. Yangi dorivor moddalarni biologic sinovlardan o'tkazish.
33. Yangi dorivor moddalarni ta'sir mexanizmini o'rganish.

Knyovenagel reaksiyasi. Perkin reaksiyasi. Benzoin kondensatsiyasi. Atsiloin kondensatsiyalanishi.

9-mavzu. Qayta guruhlanish reaksiyalari

Qayta guruhlanish reaksiyalari, pinakonolin qayta guruhlanish, sigmatrop qayta guruhlanish, [3,3]-sigmatrop qayta guruhlanishi, Koup qayta guruhlanishi, Klyayzen qayta guruhlanishi.

10-mavzu. Enantiomer toza brikmlar sintezi

Enantiomer toza brikmlar sintezi. Optik faol brikmlarning absolyut konfiguratsiyasi ifodalarini (R, S), Kan, Ingold va Prelog qoidasi. Uglerod-uglerod qoshbog'ni gidrogenlash. Epoksidlash. Karbonil guruhni qaytarish.

11-mavzu. Uch a'zoli halqalarni hosil qilish usullari

Uch a'zoli halqalarni hosil qilish usullari. Vyurtz ichkimolekulyar reaksiyalari va yenolyatlarni alkilash reaksiyalari. Olingugurt iidlari siklopropanlash reagentlari sifatida. Siklopropanlarni sintez qilishning [2+1]-siklobirikish umumiy usuli. Tabiiy brikmlarni sintez qilishda ichkimolekulyar siklopropanlash. Simmons - Smit reaksiyasi. Kulinkovich reaksiyasi.

12-mavzu. To'rt a'zoli halqalarni hosil qilish usullari

To'rt a'zoli halqalarni hosil qilish usullari. 1,4-bifunksional hosilalarning halqalanishi. Siklobutanlar sintezidagi uch a'zoli halqaning kengayishi reaksiyalari. Termik [2+2] siklobirikish. Ketenlar ishtirokidagi [2 +2]-siklobirikish reaksiyalari.

13-mavzu. Besh a'zoli va olti a'zoli halqalarni hosil qilish usullari

Yenolyatlarning alkilash va asillash reaksiyalari. Yenolyatlarning alkilanishi va Vittig reaksiyasi. Siklopentananelash reaksiyalarida konyugatsiyalangan enonlarning ishtiroki. Posen - Kxanda reaksiyasi. Robinson reaksiyasi.

14-mavzu. Olefin va asetilenlarning metatezisi

Reaksiya mexanizmi va metall kompleks katalizatorlarni optimallashtirish. Halqa hosil qiluvchi metatezis (RCM reaksiyasi). Tabiiy brikmlar sintezidagi RCM reaksiyasi.

15-mavzu. Biologik muhim organik brikmlar sintezi

Yangi dorilarni loyihalashda quyi molekulyar tabiiy brikmlarning ahamiyati. Dori vositalarining xususiyatlarini optimallashtirish usuli sifatida biofaol tabiiy brikma tarkibini o'zgartirish. Tabiiy brikmlarning to'liq sintezining yangi dorilarni loyihalashda tutgan o'rni.

Nozik organik sintez o'quv fanidan savollar

1. Organik sintez bugungi kunda g'aroyib murakkab tuzilishli molekulyar konstruksiyalar olish fani ekanligi.
2. Organik sintezning har bir bosqichida kutilmagan sintetik muammolar, tuzilishning spetsifik holatlari, organik brikmlar reaksiyon qobiliyatlarini alohida hollari nafaqat yangi sintez usullari yaratish.

18. Moddalar tuzilishi aniqlashda UB-, IQ-, YaMR- va mass-spektroskopiya birligida ishlatish.
19. ¹³C spektral analiz usullari.
20. Reigenospektral usullar.
21. Molekulyar lyuminissensiya
22. Lyuminestent taxlil.
23. Raman spektroskopiyasi
24. Rentgenspektral analiz usullari.
25. Xromatografik taxlil usullari, ularning klassifikatsiyalanishi.
26. Xromatografik taxlil usullaridan foydalanish.
27. Xromatografik bo'linish jarayoni mexanizmi.
28. Gaz va suyuqlik aralashmalarini ajratish usullari.
29. Gaz va gaz-suyuqlik xromatografiyasi usullari, taxlil qilish uslubi.
30. Spektrolashga namunalarni tayyorlash va spektrolash.
31. UB-spektroskopiyaga yordamida moddalarning eritmada mikdorini aniqlash uchun eritma tayyorlash.
32. UB-spektrometrlarda eritma. tabletka holatlarida spektrlar olish uchun namunalarni tayyorlash
33. IQ-spektrometrlarda eritma. tabletka xolatlarida spektrlar olish uchun namunalarni tayyorlash.
34. Kimyoning turli soxalarida UB-, IK-spektroskopiyaga va Xromatografiya usullaridan foydalanish istiqbollari.
35. Atom-spektral taxlil
36. Radiomagnit spektroskopiyaga
37. Rentgen usullar
38. Elektron va ion spektroskopiyasi
39. Molekulyar ionlarning hosil bo'lishi
40. Sindirish ko'rsatkichi
41. Termomexanik usul
42. Termogravimetrik va differensial-termik taxlil
43. Xromatografiya usulining asosiy tushunchalari
44. Gaz xromatografiyasi
45. Suyuqlik xromatografiyasi
46. Xromato-mass-spektrometriya usuli.
47. YaMR spektrometrlarning ishlash uslubi bilan tanishtirish, spektrolash uchun eritmalarini tayyorlash.
48. Spektrolash va ko'p tarqalgan ion massalarining jadvali bilan tanishtirish.
49. Benzin fraksiyalarining taxlili.

50. Yupqa qatlamli va qog'oz xromatografiyalar. Tadqiqotning termik usullari
51. Ikki komponentli suyuq sistemada komponentlar konsentratsiyasini miqdoriy aniqlash uchun refraktometrlarning ishlash prinsipi va refraktometriya asoslarini o'rganish.
52. DSK usuli yordamida qattiq moddalarning suyuqlanish va kristallanish jarayonlarini o'rganish.
53. Suyuqlik xromatografiya usuli yordamida aralashmalarining ajratib olish va taxill qilishni o'rganish
54. Diyen uglevodorodlarning UB spektrlari Vudvord-Fizer formulasi.
55. Kislorodli birikmalarining UB spektrlari.
56. Zamonaviy IQ spektrometrlari ishlash prinsiplari.
57. IQ spektr chastotalari va tebranish turlari
58. YAMR ning ^{13}C turi.
59. YAMR ning ^1H turi.
60. Spin-spin ta'sir konstantasi
61. Organik moddalarni Mass-spektroskopiya usulida o'rganish
62. UB spektrometrlarning blok chizmasi. Bir va ikki nurli spektrometrlar
63. IQ-spektrometrlarning blok chizmasi. UR-20 va Spekdord (Germaniya) asboblarning tuzilishi va ishlatilishi.
64. IQ, spektrlar asosida geometrik izomerlar (sis-, trans-) ni aniqlash uslubi
65. Birlamchi, ikkilamchi va uchlamchi aminobirikmalarni IQ spektrlari orqali aniqlash
66. UB va IQ, uslublarining birgalikda ishlatilib modda tuzilishi haqida ma'lumot olish.
67. Furiye almashirgichli YAMR spektrometrlar bilan tanishish va uning ishlash jarayoni ^{13}C spektrlar olishda EHM mashinasi yordamida signallar intensivligini jamlash uslubi.
68. Mass-spektrometrlar chizmasi. MX-1331 va MX-1321 masspektrometrlarning ishlash yo'llari.
69. Xromatografik jarayonga temperaturaning ta'siri
70. Xromatogrammalarni o'qish. Xromatografik cho'qqi va uning parametrlari.

Tadqiqotning zamonaviy fizik kimyoviy usullari fanidan

Asosiy adabiyotlar

1. Юнусов Т.К., Зайнутдинов У.Н., Утенизов К., Салихов Ш.Н. "Кимёда физикавий усуллар". Тошкент. «Университет», 2007.

NOZIK ORGANIK SINTEZ O'QUV FANI BO'YICHA

Fan tarkibiga quyidagi mavzular kiradi:

1-mavzu. Nozik organik sintez fanining maqsadi va vazifalari.

Organik sintez bugungi kunda g'aroyib murakkab tuzilishli molekulyar konstruktsiyalar olish fani ekanligi. Organik sintezning har bir bosqichida kutilmagan sintetik muammolar, tuzilishning spetsifik holatlari, organik birikmalar reaksiyon qobiliyatlari alohida hollari nafaqat yangi sintez usullari yaratish.

2-mavzu. Organik sintezning umumiy printsiplari.

Organik sintezning umumiy printsiplari: molekula asosini qurish, funksional guruhlar va ularni modifikatsiyalash hamda organik molekula sintezini rejalashtirish ko'rib chiqiladi. Organik sintezni rejalashtirishda hisobga olinadigan omillar, dastlabki moddadan maqsadli moddagacha(sintetik) yoki maqsadli moddadan(retrosintetik) dastlabki moddagacha bo'lgan ikki usuli hamda asosiy tushunchalari yoritilgan.

3-mavzu. Funksional guruhlarini himoyalash

Spirtlar va glikol sistemalarini himoya qilish. trifenilmetil efirlari. trialkilsilil efirlari. tetrahidropiran efirlari. etiliden va benziliden asetallari. izopropiliden ketallari. Karbonil guruhi himoya qilish. 1,3-dioksolan himoya. 1,3-oksatolan himoya. 1,3-ditiolan himoyasi. 1,3-ditian himoyasi. Karboksil guruhi himoya qilish. Benzil efirlari. trimetilsilil efirlari.

4-mavzu. Uglerod-uglerod bog'ini hosil qilish: metallorganik birikmalar yordamidagi sintezlar.

Uglerod-uglerod bog'ini hosil qilishda metallorganik birikmalar, ya'ni magniyorganik birikma, litiiyorganik birikma, litiydiaktil kuprat, ferrotsen, grinyar reaksiyasi, Schlenk muvozanati ko'rib chiqiladi.

5-mavzu. Uglerod-uglerod bog'ini hosil qilish: stabilangan karbanionlar va turdosh nukleofillar yordamidagi sintezlar.
Stabilangan karbanionlar va turdosh nukleofillar yordamidagi sintezlar, asetosirka efir yordamidagi sintezlar, malon efir yordamidagi sintezlar ko'rib chiqiladi.

6-mavzu. Organik birikmalarining qaytaralish reaksiyalari
Qaytaralish reaksiyalari. Uni amalga oshiruvchi reagentlar. Qaytarilishni turlari. Gomogen va geterogen kataliz. Qaytarilish mahsulotlari.

7-mavzu. Organik birikmalarining oksidlanish reaksiyalari.

Uni amalga oshiruvchi reagentlar. Oksidlanishni turlari. Oksidlanish mahsulotlari. C-H σ -bog'ini elektron juftiga elektrofil hujum orqali oksidlanish. C-H σ -bog'ini elektron juftiga elektrofil hujum orqali oksidlanish. π -Elektronlar juftiga radikal hujum orqali oksidlanish.

8-mavzu. Kondensatsiya reaksiyalari

Kondensatsiya reaksiyalari. Kondensatsiya reaksiyalarini asosiy turlari. O'rin almashinish reaksiyalari. Birikish reaksiyalari. Aldol kondensatsiyasi krotan kondensatsiyasi, Friedel - Crafts reaksiyasi. Aldol kondensatsiyasi.

KIMYODA ZAMONAVIY KOMPYUTER MODELASHTIRISH USULLARI O'QUV FANI BO'YICHA

Asosiy qism

Talabalarni kimyoda qo'llanilayotgan zamonaviy kompyuter modellash dasturlari va majmualari bilan tanishtirishdan iborat. Talabalarda kompyuterda modellash tirish fanlarida ishlash va kimyoviy muammolarni mustaqil yechish ko'nikmalarini shakllantirish.

1-mavzu. Zamonaviy molekular modellash tirish fanining shakllanish tarixi va kimyodagi o'rni. Modellash tirish uchun hisoblash usullarini va majmualarini tanlash.

Hisoblash (kompyuter) kimyosi, modellash tirish usullari tarixining qisqacha tavsifi. Ushbu sohada ishlagan, fan rivojiga katta hissa qo'shgan olimlar. Kimyoda qo'llaniladigan kompyuter dasturlarining qisqacha tavsifi. Kimyoviy muammo va unga mos hisoblash usullarini tanlash.

2-mavzu. Hisoblash usullari. Empirik, yarim empirik va noempirik hisoblash usullari. Hisoblashlar uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish usullari.

Molekular modellash tirishda qo'llaniladigan hisoblash usullari va majmualari tavsifi. Boshlang'ich geometriyalarni hosil qilish usullari.

3-mavzu. Empirik usullar va ularning zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi.

Empirik usullarning afzalliklariva kamchiliklari. Molekular mexanika usullarida parametrlash qoidalari. Empirik usullardan olinadigan parametrlar. Zamonaviy kimyoviy muammolar yechimida empirik usullarning qo'llanilishi.

4-mavzu. Molekular dinamika.

Harakatlarni sonli ifodalash usullari. Hisoblash usullari va majmualari. Kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi.

5-mavzu. Yarimempirik hisoblash usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi. Energetik parametrlar. Zaryad taqsimotlari.

Valent elektronlar yondoshuvi. Yarim-empirik usullarning turlari. Atomlardagi zaryad taqsimotlarini hisoblash usullari. Yarim-empirik hisoblash usullaridan olinadigan nazariy parametrlar va ularning ahamiyati.

6-mavzu. Noempirik hisoblash usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi.

Ab initio –noempirik kvant-kimyoviy hisoblash usullari. Zamonaviy ab initio bazis to'plamlari. Ushbu usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi.

7-mavzu. Zichlik funksionali nazariyasiga asoslangan hisoblash

21. Ion va radikalardaga hamda uch a'zoli xalqa tutgan to'yinmagan birikmalardagi mezomeriya.
22. Molekuladagi atomlar ta'sirini miqdoriy jihatdan aniqlash. Korrelyasion tenglamalar.
23. O'rmbosarlar va reaksiyalarning konstantalari.
24. Aminobirikmalarning asosli xususiyatlari.
25. Qattiq va yumshoq kislota va asoslar.
26. O'rish holati nazariyasi.
27. S_N1 reaksiyasi va uning o'ziga xos xususiyatlari.
28. S_N2 reaksiyasi va uning o'ziga xos xususiyatlari
29. Nukleofil almashinish reaksiyalarning mexanizmlari bilan reaksiya mahsulotlari orasidagi bog'lanish.
30. Olefinlarga elektrofil birkish reaksiyasining mexanizmi.
31. Konyugirlangan qo'sh bog'li dienlarga birkish reaksiyalari.
32. O'rmbosarlarning yo'naltiruvchi ta'siri.
33. Uglrod atomining tuzilishi. s- va p- elektronlar (atom orbitalar).
34. Organik birikma molekulasidagi atomlarning o'zaro ta'siri. Induksion ta'sir.
35. Mezomeriya va fazoviy ta'sir.
36. Organik reaksiyalarning mexanizmi.
37. Organik reaksiyalarning tezliklari va kinetik izotop effekti.
38. To'yingan uglrod atomidagi nukleofil almashinish reaksiyasi.
39. Markovnikov qoidasi.
40. Benzol yadrosidagi elektrofil almashinish reaksiyalari.
41. Reagentlarning fazoviy ta'siri. o- va p-izomerlarning nisbati.
42. Benzol yadrosidagi o'rmbosarlarning elektrofil almashinish reaksiyalari.
43. Radikal almashinish va birkish reaksiyalari.
44. Radikal galogenlash.
45. Oksidlash reaksiyasi to'g'risida.
46. Uglrod atomining valent holatlari. Molekulyar orbitalar (MO).
47. Mezomeriya va reaksiyon markazning ko'chishi.
48. Kimyoviy bog'larning xarakteristiklari.
49. Mezomeriya va reaksiyon markazning ko'chishi.
50. Spirtlar, fenollar va karbon kislotalarning kislotali xususiyatlari.
51. Aminobirikmalarning asosli xususiyatlari.
52. Organik reaksiyalarning turlari.
53. Turli sinf birikmalariga xos reaksiyalar.
54. Korrelyatsion tenglamalar.
55. O'rmbosarlik va reaksiyalarning konstantalari.
56. Ichkimolekulyar va molekulararo vodorod bog'lari.
67. Alkanlarda o'tadigan radikal mexanizmdagi reaksiyalar.
68. Aromatik uglevodordlarning S_E reaksiyalari va ularning mexanizmi.
69. Aromatik xalqadagi o'rindoshlarning yonaltirish qobiliyati.
70. Okso birikmalar va asoslar orasidagi reaksiya mexanizmi

birikma halqasidagi atomlar yo n-elektronlarga boy, yoki ulardagi n-elektronlar etishmaydigan holatda bo'lishi mumkin. Shu jihatdan ular n-elektronlari ortiqcha yoki n-defitsit strukturalarga ega bo'lishi mumkin. N-Elektronlari ortiqcha geterotsiklik birikma halqasidagi n-elektron larning soni halqadagi atomlar sonidan ko'p bo'ladi.

15-mavzu. Ayrim elektrofil almashinish reaksiyalari va ularning o'ziga xos xususiyatlari.

Benzol suvsiz sulfat kislotada eriydi, BF₃ yoki SbF₅ ishtirokida HF bilan reaksiyaga kirishadi. Bunday ta'sirlashuv natijasida c-komplekslar hosil bo'ladi. Bu komplekslarning hosil bo'lishi PMR spektri yordamida isbotlangan. Bu komplekslar tarkibiga kiruvchi anionlarning asosiligi qanchalik kichik bo'lsa (anion barqaror bo'lsa) a-komplekslar shunchalik barqaror bo'ladi, chunki anionlarning protonni tortib olish qobiliyati past bo'ladi. Benzolning kuchli kislotalar bilan bunday kompleks hosil qilish xususiyati undan termik barqaror polifenil polimerini olishga imkon beradi.

Organik moddalarning reaksiyon qobiliyati va selektivligi fanidan savollar

1. Valentlik va oksidlanish darajasi. Anorganik va organik birikmalar ishtirokidagi oksidlanish-qaytarilish reaksiyalari.
2. Kimyoviy bog' turlari. Vodorod bog'i. Ichkimolekulyar va molekulyararo vodorod bog'lari.
3. Elektron, struktura va fazoviy tuzilish formulalar.
4. Molekuladagi atomlar ta'sirini miqdoriy jihatdan aniqlash.
5. To'yingan uglerod atomidagi vodorodning elektrofil almashinish reaksiyalari.
6. Reaksiyon qobiliyat, selektivlik va ayrim holatlardagi almashinish.
7. Kimyoviy reaksiyalarning turlari. O'tish holati nazariyasi. Faollanish energiyasi.
8. Sinxron va asinxron reaksiyalari. Reaksiyalarning mexanizmlari.
9. Alkinlarga birikish reaksiyalari.
10. Radikal almashinish reaksiyalarida reagentlarning reaksiyon qobiliyati.
11. Mezomer ta'sir va uning o'ziga xos xususiyatlari.
12. Mezomeriya momenti. Mezomer ta'sirning boshqa turlari.
13. Qutbli qo'shibog' tutgan uglerod atomidagi nukleofil reaksiyalari.
14. Aromatik qatordagi elektrofil o'rin olish reaksiyalari.
15. Olefinlar va aromatik birikmalardagi elektrofil reaksiyalari.
16. Geterotsiklik birikmalarning tuzilishi va xossalari.
17. Ayrim elektrofil almashinish reaksiyalari va ularning o'ziga xos xususiyatlari.
18. Organik birikmalarning xossalarga ta'sir etuvchi omillar.
19. Gibrilalanish sp³, sp² va sp-elektronlar (atom orbitalari-AO).
20. Induksion ta'sirning ishorasi (yo'nalishi) va kuchini aniqlash usullari.

usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi.

Zichlik funksionali nazariyasiga asoslangan hisoblash usullari. Ushbu usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi.

8-mavzu. Yarin-empirik, noempirik va DFT usullaridan olinadigan parametrlarni taqqoslash.

Geometrik, elektron va energetik parametrlar va ularni taqqoslash. Ussullar kamchiliklari va afzalliklari

9-mavzu. Birikmalarning biologik faolligini baholashning nazariy usullari. QSAR va QSPR sohalarida matematik modellar tuzish qoidalar.

In Silico – birikmalarning biologik faolliklarini nazariy baholash usullari. Struktura – faollik/xossa miqdoriy bog'liqligi (QSAR/QSPR). Molekular doking va bu sohada qo'llaniladigan majmualar.

10-mavzu. ChemOffice va Portable MestReNova dasturlarining kimyoviy muammolarni yechishda qo'llanilishi.

Dasturlarning imkoniyati. Erkin induksiyaning so'nishi – FID. YaMR spektrlarini ustida amallar. FID ni spektr ko'rinishiga keltirish. Onlayn FID bazalari bilan tanishish.

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

Ultrabinafsha, infraqizil va YaMR-spektrlarini o'rganishda qo'llaniladigan hisoblash usullari va majmualari.

12-mavzu. ORCA, Firefly va Gaussian dasturlarida hisoblashlar. Hisoblash natijalari bilan tanishish.

Zamonaviy kvant-kimyoviy hisoblash usullari. Boshlang'ich geometriyalarni hisoblash uchun tayyorlash. Hisoblash natijalari bilan tanishish.

13-mavzu. Organik birikmalarni modelashtirish usullari.

Organik birikmalarni hisoblash. Reaksiyon qobiliyat ko'rsatkichlari. Orbital va zaryad nazorati bilan boradigan reaksiyalar. Reaksiya mexanizmlarini o'rganish.

14-mavzu. Metalloorganik va kompleks birikmalarni modelashtirish usullari.

Metalloorganik va kompleks birikmalarni hisoblashning o'ziga xos xususiyatlari. Spin holatlari. Singlet, dublet, triplet va b. holatlar.

15-mavzu. Tautomerlar, konformerlar va geometrik konfiguratsiyaga ega birikmalarni modelashtirish.

Eng optimal energiya, strukturalar orasidagi energetik farq. O'tish holati. Aktivlanish energiyasi. Bir-biriga o'tish reaksiya koordinatalari.

Kimyoda zamonaviy kompyuter modellash usullari fanidan savollar

1. Kompyuter kimyosi fa'ni va uning rivojlanishi.
2. Axborot tizimlari va ma'lumotlar bazasi.
3. Kvant-mexanikasining asosiy tenglamasi.
4. Shredinger tenglamasini ko'p elektronli sistemalar uchun yechishda yondoshuvlar.
5. Atom orbitallar va molekulyar orbitallar.
6. Sleyter va Gaussian tipidagi atom orbitalar.
7. Xartri-Fok-Rutan tenglamasi.
8. Kompyuter modellash.
9. Kuch maydonlari (atom-atomli potentsiallar).
10. Torsion ta'sirlashish.
11. Empirik hisoblash usullari.
12. Yarim-empirik hisoblash usullari.
13. Noempirik hisoblash usullari.
14. Kimyoda ishlatiladigan dasturlar va ularning turlari.
15. Nol holatdagi differensial qoplanish (*ZDO – Zero Differential Overlap*) yaqinlashuviga asoslangan usullar.
16. *NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap)* yaqinlashuviga asoslangan usullar.
17. RM1, PM6 va PM7 hisoblash usullari.
18. *Ab initio* usuli.
19. Vodorod atomining elektron orbitalari.
20. Ko'p elektronli atomlarning orbitalari.
21. Sleyter-Zener atom orbitalari.
22. STO-3G, 3-21G, 6-31G bazis to'plamlari.
23. Molekulyar dinamika.
24. Modellash usullari uchun hisoblash usullarini va majmualarini tanlash.
25. Hisoblashlar uchun dastlabki geometriyalarni hosil qilish usullari.
26. Zichlik funksional nazariyasiga asoslangan hisoblash usullarining zamonaviy kimyo muammolarini yechishda qo'llanilishi.
27. Cheklanmagan (UHF) va cheklangan (RHF) Xartri-Fok.
28. Elektron korrelyatsiyalar.
29. Zichlik funksional nazariyasi (DFT).
30. Kon-Shem yondoshuvi.
31. Molekulyar mexanika (MM) nazariyalarning rivojlanish tarixi.
32. Molekulyar mexanika (MM) usullarining mohiyati.

suvdan yengil, suvda kam eriydi, organik eritmalarda yaxshi eriydi.

10-mavzu. Radikal almashinish reaksiyalarida reagentlarning reaksiyon qobiliyati.

Kimyoviy reaksiyalar vaqtida, sharoitga qarab, bog'ning uzilishi simmetrik tarzda amalga oshishi mumkin. Bog'ning bunday uzilishi gomolitik yoki radikali uzilish deb ataladi, hosil bo'lgan zarrachalar esa erkin radikallar, toq elektronli zarrachalar deb ataladi. Bu energiya termik, fotokimyoviy, radioaktiv nurlanish, mexanik va kimyoviy yoki elektrokimyoviy energiyalar bo'lishi mumkin. Ko'pincha R^* tarzida yoziladigan radikali zarrachani uglevodorod qoldig'i R bilan aralashtirmaslik lozim. Erkin radikallar turli usullar bilan hosil qilinadi. Shu usullarga to'xtalib o'tamiz.

11-mavzu. Mezomer ta'sir va uning o'ziga xos xususiyatlari. Mezomeriya momenti. Mezomer ta'sirning boshqa turlari.

Reaksiyalarning bunday qiyinlik bilan borishi pirdinning tuz hosil qilib ion holatga o'tishi bilan tushuntiriladi. Pridin-N-oksidi esa elektrofl almashinish

reaksiyalariga osonlik bilan kirishadi, chunki bunda u neytral molekula holida reaksiyaga kirishadi va mezomeriya tufayli uning 2- va 4-holatlari elektrofl almashinish uchun qiyindir.

12-mavzu. Aromatik holat. Xyukkel qoidasi.

Organik kimyoning asosiy muammolaridan biri benzol va uning tuzilishi bilan bog'liq bo'lgan. Bu muammoni 1931-yilda E. Xyukkel to'Mqin mexanikasi yordamida hal qildi.

C₆H₆-benzol molekulasining yassi (tekis) tuzilishi uglerod atomlari elektronlarining sp²-gibridlanishiga ega ekanini ko'rsatadi. Har bir uglerod p-atom orbitalarining o'qlari xalqa tekisligiga perpendikulyar joylashgan:

13-mavzu. Olefinlar va aromatik birikmalardagi elektrofl reaksiyalar.

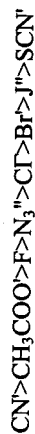
Olefinlarda va aromatik yadroda oson qutblanuvchan r-elektronlar mavjud bo'lganligi uchun ular Lyuis asoslaridir. Shuning uchun ular birinchi navbatda kislotalar yoki Lyuis kislotalari (elektrofillar) bilan reaksiyaga kirishadi va ular uchun elektrofl birikish va elektrofl almashinish reaksiyalari xos. Olefinlar yoki aromatik birikmalarning elektrofl bilan o'zaro ta'sirlashuvidan beqaror adduktlar (π -komplekslar) yoki karbokationlar (σ -komplekslar) hosil bo'ladi.

14-mavzu. Geterotsiklik birikmalarning tuzilishi va xossalari.

Geterotsiklik birikmalar-tiofen, pirrol, firan aromatik xususiyatga ega bo'lib, yadrolardagi n-elektronlarning tekis taqsimlanish darajasi benzoldagi elektronlarning taqsimlanishiga nisbatan past bo'lib, quyidagi qatorda kamayib boradi. Geterotsiklik birikmalarning elektrofl yoki nukleofil reagentlarga nisbatan reaksiyon qobiliyati ularning tuzilishiga bog'liq. Geteroaromatik

6-mavzu. Reaksiyon qobiliyat, selektivlik va ayrim holatlardagi almashinish.

Optik faol bo'lgan R-X yuqoridagi ion juft hosil bo'lish bosqichidayoqratsemizatsiyaga uchraydi. Sn2 reaksiyalarda oraliq holat reagent-nukleofilga nisbatan yuqori selektivlikka ega. Bipolyar aproton erituvchilarda nukleofilning solvatlanish darajasi yuqori bo'lmaganligi uchun nukleofil reagentlarning reaksiya tezligi quyidagi qatorda kamayib boradi:



Bu qator nukleofil reagentlar asosligining kamayib borish qatoriga mos eladi

7-mavzu. Kimyoviy reaksiyalarning turlari. O'tish holati nazariyasi. Faollanish energiyasi.

Kimyoviy reaksiya bir kimyoviy moddalar majmuining boshqa moddalarga aylanishi jarayonidir. Kimyoviy reaksiyalar spontan, ya'ni o'z-o'zidan, yoki boshqariluvchi bo'lishi mumkin. Ikkinchi holda kimyoviy reaksiyani o'tkazish uchun tashqaridan biror energiya (issiqlik, yorug'lik, elektr) talab etiladi. Kimyoviy reaksiyalarda elektronlar harakati bosh rolni o'ynaydi. Kimyoviy reaksiyaga kirishuvchi moddalar reagentlar, deb ataladi. Reaksiya natijasida hosil bo'ladigan moddalar esa kimyoviy reaksiya mahsulotidir. Kimyoviy reaksiyalar kimyoviy formulalar orqali ifoda etiladi. Kerakli mahsulotni olish uchun bir necha reaksiyalar ketma-ketligi talab etilishi mumkin, bu jarayonga kimyoviy sintez deyiladi.

8-mavzu. Sinxron va asinxron reaksiyalar. Turli sinf birikmalariga xos reaksiyalar. Reaksiyalarning mexanizmlari.

Yadroda faollashiruvchi guruhlar bo'Mganda nukleofil almashinish alifatik qatordagi sinxron (SN₂) yoki asinxron (SN₁) reaksiyalardan farqli ravishda nukleofilning birikishi orqali sodir bo'ladi (SnAt mexanizm). Nukleofil reagent CH₃O⁻ ning birikishi natijasida hosil bo'Madigan oraliq anion o-va n-holatlardagi -NO₂ guruhlar ta'siri tufayli barqarorlashadi

9-mavzu. Alkinlarga birikish reaksiyalari.

Alkinlar-molekulasida uchlamchi bog' bo'lgan asitilen qatori to'yinmagan uglevodorodlari, umumiy formulasi C_nH_{2n-2}. Ularning birinchi vakili asitilen CH≡CH dir. Asitilendagi vodorod metil radikallar bilan almashirilsa, molekulasida uchlamchi bog' bo'lgan gomologik qator hosil bo'ladi. Uning birinchi gomologi metilatsetilen CH₃-C≡CH; ikkinchisi etilatsetilen CH₃-CH₂-C≡CH va hokazo. Xalqaro nomenklatura bo'yicha asitilen qatori uglevodorodlarni nomlashda ularga muvofiq keladigan alkaning -an qo'shimchasi o'rniga -in qo'shimchasi qo'yiladi. Alkinlar tabiatda uchramaydi, ular asosan alkanlar va kalsiy karbiddan olinadi. Alkinlar uchun birikish, polimerlanish, o'rin olish va oksidlanish reaksiyalari xosdir. Alkinlarning oldingi uchta a'zosi gazlar, C₃H₄ dan boshlab suyuq moddalar, yuqori alkinlar (C₁₆H₃₀) esa qattiq moddalar. Alkinlar alkenlar kabi

33. Turli hisoblash majmualari uchun yaratilgan MM usullari.
34. Sistema zaryadi va spin multipletligi.
35. Yordamchi majmualar (interfeyslar).
36. Dori yaratish jarayonining umumiy bosqichlari.
37. Valent bog'lar va molekular orbitalar nazariyalari orasidagi asosiy farqlar.
38. Hisoblashlarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari. Solvatlanish energiyasi.
39. Kimyoga oid elektron bazalar. Spektrlar bazalari.
40. Androidlar (smartfonlar) uchun mo'ljallangan kimyoga oid dasturlar.
41. Kimyoda statistika. Hisoblash natijalarini baholash. Tajriba natijalarining ishonchlilik darajalarini baholash.
42. Dorivor moddalarni ratsional kompyuterli konstruksiyalash usullari.
43. QSAR/QSPR, 3D-QSAR usullari.
44. De novo dizayn.
45. Molekulyar doking.
46. Kimyoda qo'llaniladigan yordamchi (grafik) dasturlar.
47. Kimyoda qo'llaniladigan hisoblash dasturlari.
48. Atom zaryadlarini hisoblash usullari.
49. Malliken bo'yicha zichlik taqsimoti tahlili.
50. Tabiiy bog' tartibi tahlili (NBO – Natural bond order analysis).
51. Zaryad taqsimoti va YaMR.
52. Birikmalarning YaMR spekttrlarini o'rganish.
53. Moddalarning IQ-spektrlari tahlili.
54. Popl, Dyuar va Styuartlarning hisoblash usullarining rivojlanishida tutgan o'rni.
55. Kenichi Fukui, Xoffman va Pirsonlarning organik kimyodagi o'rni.
56. Empirik hisoblashlar uchun mo'ljallangan dasturlar va majmualar.
57. Hyperchem dasturida birikmalarning UB- va IQ-spektral xarakteristikalarini hisoblash.
58. Tautomerlar, konformerlar va geometrik konfiguratsiyaga ega birikmalarni modellashtirish.
59. Organik birikmalarni modellashtirish usullari.
60. Metalloorganik va kompleks birikmalarni modellashtirish usullari.
61. Birikmalarning biologik faolligini baholashning nazariy usullari.
62. Fizikaviy tadqiqot usullarini o'rganishda qo'llaniladigan hisoblash majmualari.
63. Birikmalarning reaksiyon qobiliyatini baholovchi indekslar.

ORGANIK MODDALARNING REAKSION QOBILIYATI VA SELEKTIVLIGI O'QUV FANI BO'YICHA

1-mavzu. Valentlik va oksidlanish darajasi. Anorganik va organik birikmalar ishtirokidagi oksidlanish-qaytarilish reaksiyalari.

Oksidlanish darajasi, oksidlanish soni-oksidlanish reaksiyasini talqin qilishda valentlik o'rnida ishlatiladigan tushuncha. Kimyoviy birikmani batamom ionli tuzilishga ega deb faraz qilinsa, uning tarkibidagi bitor elementning shartli zaryadi shu elementning oksidlanish darajasi deb ataladi. Elementlarning Oksidlanish darajasini aniqlashda doim kislorodning Oksidlanish darajasini-2, vodorodnikini +1 deb qabul qilinadi.

2-mavzu. Kimyoviy bog' turlari. Vodorod bog'i. Ichkimolekulyar va molekulararo vodorod bog'lari.

Vodorod bog'-bir yoki ikki molekuladagi ikki yoki bir necha atom orasida vodorod atomi orqali bog'lanish. Vodorod boshqa elementlardan atomida yagona elektroni borligi bilan farq qiladi. U bu elektronini elektr-manfiyroq elementga berib, ionli yoki qutbli birikma hosil qilganida, uning yadrosi (N^+) butunlay yoki bir qadar elektrsizlanadi.

3-mavzu. Elektron, struktura va fazoviy tuzilish formulalar.

Strukturaviy formula-bu tekislikda yoki uch o'lchovli fazoda ifodalangan (kovalent) birikmadagi atomlarning joylashishi va bog'lanish tartibini grafik tarzda tavsiflovchi kimyoviy formulaning bir turi. Strukturaviy formulalardagi bog'lanishlar (umumiy elektron juftlari) valentlik chiziqlari (zarbalar) bilan ko'rsatilgan.

4-mavzu. Molekuladagi atomlarning qutblaniruvchi induksion ta'siri. Uning kuchi va ishorasini aniqlash.

Qutblanuvchanlik - zarbalar (atom, ion va molekula)ning elektr maydonda dipol momentiga ega bo'lish xossasi. Elektr maydon (Y_e) ta'sirida atom sistemalaridagi elektr zaryadlar siljib, dipol moment (R) induksiyanadi. Maydon o'chirilganda induksiyanlangan r moment yo'qoladi. Q. tushunchasi, odatda, doimiy dipol momentiga ega bo'lgan zararlarga, mas, qutbli molekulalarga qo'llanmaydi.

5-mavzu. To'yingan uglerod atomidagi vodorodning elektrofil almashinish reaksiyalari.

To'yingan uglevodorodlar-uglevodorodlarning gomologik qatori, umumiy formulasi C_nH_{2n+2} . Atsiklik birikmalar sinfiga mansub; eng oddiy vakili-metan CN_4 ; bu qatordagi har qaysi keyingi a'zo o'zidan oldingi uglevodoroddan CN_2 guruh (gomolog) bilan farqlanadi. Katoming boshlang'ich 4 a'zoning nomi: metan CN_2 , etan C_2N_6 , propan C_3N_8 , butan C_4N_{10} ; keyingi gomologlarning nomi yunoncha sanoq sonlar bilan ifodalanadi, mas., Barcha To'yingan uglevodorodlar ning nomiga "an" qo'shimchasi qo'shib aytiladi.

64. Reaksiyalarni modellash.
65. Birikma strukturalari va biologik faollik (xossa) orasidagi miqdoriy bog'liqlik
66. QSAR izlanishlaridagi bosqichlar.
67. Molekulyar doking va virtual skrinig.
68. Hisoblashlardagi xatolik turlari va ularni qayta ishlash.
69. Ideal va real bog' uzunliklari.
70. Umumiy energiya va uning tarkibiy qismlari.

Asosiy va qo'shimcha o'quv adabiyotlar hamda axborot manbaalari

1. A.G. Eshimbetov, A.X. Xaitbayev, S.A. Maulyanov, H.S. Toshov. Kompyuter kimyosi, T. "OzMU", 2015.
2. N.Q. Muhamadiyev. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalari matematik modellash, T. "Cho'lpon", 2016.

Qo'shimcha adabiyotlar

1. D.C. Young. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to real-World Problems. Wiley Interscience, 2001. Twelfth Edition, Pearson Education, Inc. New Jersey, USA, 2015. 891 p.;
2. C. Stan Tsai. An introduction to computational biochemistry. John Wiley, New York, 2002
3. E. Lewards. Computational Chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics. Kluwer Academic publisher, New-York, 2004
4. J.C. Cramer. Essentials of Computational Chemistry. Theories and Models. John Wiley, 2004
5. G.I. Kobzev. Primenenie neempiricheskix i poluempiricheskix metodov v kvantovo-ximicheskix raschetax: Uchebnoe posobie. Orenburg: GOU OGU, 2004
6. M.Ye. Solovyev, M.M. Solovyev. Kompyuternaya ximiya. Moskva, Solon-Press, 2005

Axborot manbaalari

1. <http://www.chem.msu.ru>
2. <http://www.rushim.ru>
3. <http://www.zivo.net>