

Kimyoda kompyuter modellashtirish fanida Yakuniy nazorat savollari 4-kurs (KECHKI) kimyo yonalishi uchun

1. Kompyuterda topshiriqlarni tayyorlash va fikr-mulohazalarni qabul qilish bilan tanishtirish
2. Muayyan funksiyalarni tanlash mezonlari
3. Esaplaw usullaridan amaliy foydalanish
4. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
5. Kimyoviy tajribalarda kompyuterda ishlash
6. Kompyuter tizimlarini o'qishlari
7. Aislu MORAS dasturi yordamida jag'ini silkitadi
8. Vazifa va moment parametrlarini o'rnatish qoidalari
9. Termodinamik parametrlarni baholash usullari
10. Standart yordamchi muharrir va grafik dasturlar bilan ishlash
11. Atom zaryadlarini hisoblash usullari.
12. Molekulyar mexanika MMR2 dasturi bilan bog'langan.
13. Shemlab dasturi yordamida UV spektrini modellashtirish
14. Zamonaviy keng qamrovli esaplaw dasturlari
15. Yarim empirik usul
16. Molekulyar orbitallar usuli
17. Z-matritsani aniqlash, molekulyar tizimlarni elektron spektrlarning grafik ko'rinishida ko'rsatish va boshqa munosabatlar.
18. Ab initio-empirik kvant-kimyoviy bo'lmagan baholash usullari
19. NurerShem dasturi
20. Empirik bo'lmagan baholash usullari
21. Molekulyar orbitalarning nazariyasi va sifati
22. MO qurilishiga asosiy summalarining ta'siri
23. Xartri-Fok-Rutan tenglamasi (XFR)
24. Chem Office dasturlari yordamida organik moddalar parametrlarini o'rganish
25. GAUSSIAN dasturi bo'yicha Ailew hujayralari
26. Yarim empirik usul
27. Minimal, individual, o'rta va katta miqdorlar
28. Kvant-kimyoviy usullar.
29. Tautomerlarning proton almashinuvini o'rganish.
30. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
31. NATURE dasturi HyperChem dasturi.
32. Esaplavskiy kva 1. Yarim empirik usul Xususiyatlar nazariyasi.
2. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterda ishlash, kompyuter tizimlarini o'rgatish.
3. MM dasturi bo'yicha molekulyar kinetika.
4. Moras Z-matritsasi. Yamas atom massasidagi Z-matritsaning sxemasi
5. Kush konlarida kompyuter modellashtirish dasturlari bilan ishlash.
6. Kompyuterning vazifalari va qaytishlari bilan tanishish.
7. Kalkulyatorlarning amaliyotda qo'llanilishi Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi.
8. Avagadro dasturida hisob-kitoblarni amalga oshirish.Hisoblash natijalarini tahlil qilish.
9. MO qurilishiga bazaviy summalarining ta'siri
10. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
11. Z-matritsani aniqlash, molekulyar tizimlarni elektron spektrlarning grafik ko'rinishida ko'rsatish va boshqa bog'lanishlar.
12. Tautomerlardan proton almashinuvini o'rganish
13. PU uzunligini parametrlash qoidalari.
14. Shemlab dasturi yordamida UV spektrini modellashtirish.
15. MORAS dasturi bo'yicha orolning jag'lari.
16. Standart muharrir yordamchilari va grafik dasturlar bilan ishlash.
17. Kimyoviy usullar uchun Shemlab dasturi yordamida UV spektrini modellashtirish.
33. PU uzunligini parametrlash qoidalari.
34. DRAKON dasturi yordamida deskriptorlarni tanlash va struktura-faoliyatning matematik modelini yaratish.
35. Kush maydonlarida molekulyar modellashtirish usullari.

36. Kimyoviy va farmatsevtik tadqiqotlar uchun QSAR va QSRS tahlil usullaridan foydalanish.
37. Kush dalalarida molekulyar modellashtirish usullari.
38. Ko'p elektronli atomlar AO.
39. Agrus Lab dasturi oqsil-ligand komplekslari va ularning birikmalarining tuzilishidagi o'zgarishlar haqida xabar beradi.
40. Ko'p atomli spirtlar izomeriyasining nomenklaturasi
41. Vodorod atomining elektron orbitallari.
42. Energiya operatori-Gamiltonian.
43. Yarim empirik usul Xususiyatlar nazariyasi
44. Hisob-kitoblar dasturlarining vaqt summolari
45. Kush konida kompyuter simulyatsiyasi dasturlari bilan ishlash
46. Gauss ko'rinishida Aislu
47. Atom zarralarini hisoblash usullari.
48. HyperChem shuningdek, Chemlab dasturlari kabi zamonaviy kompyuter dasturlari bilan ishlaydi.
49. Avagadro dasturida hisob-kitoblar amalga oshirildi. Hisoblash natijalarini tahlil qilish.
50. Geterotsiklik birikmalarining elektron konfiguratsiyasining xarakteristikasi.
51. Zichlik funksional nazariyasiga asoslangan gibrid usullar.
52. Molekulyar diagrammalar.
53. Yarim empirik usullar ham mavjud.
54. Varadorlar atomlarining elektron orbitallari.
55. MM dasturi bo'yicha molekulyar kinetika.
56. Uolsh diagrammasi. Gyukkel usuli.
57. Chem Office dasturida obyekt molekularlarining strukturasini optimallashtirish.
58. ArgusLab dasturi Protein-ligand komplekslarining tuzilishini o'rganish haqida ma'lumot.
59. Puw Length Parametr qoidalari
60. Balansni jo'natish shakllari
61. "Slater-Zener" OAJ
62. Raqamli integral Verlet qonuni usuli.
63. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterda ishlash, kompyuter tizimlari kurslari
64. Moras Z-matritsasi. Yamas atom massasidagi Z-matritsaning sxemasi
65. Kvant kimyosi - molekulyar tizimlar bilan bog'liq holda postulatlar va tamoyillarni o'rganish usullari.
66. Muammoni hal qilish usullari va ko'rsatmalarni taqdim etish qoidalari
67. Ko'p elektronli atomlar.
68. Slater-Zener AO va GAMMES dasturlari
69. Esoplast va molekulyar xarakteristikaning molekulyar geometrik parametrlari
70. Molekulyar sistemalar tahlilida kvant kimyosining postulatlar va tamoyillari.
71. Kvant kimyoviy usullar kontekstida molekulyar tuzilmalar korsetasi.
72. Kompyuter o'qituvchi ko'rsatmasi bo'yicha ishlaydi.
73. Asosiy funksiyalarni tanlash mezonlari Hisob-kitob dasturlarining vaqt summolari.
74. Kalkulyatorlarning hayotda qo'llanilishi Kimyoviy birikmalarining xossalari va elektron tuzilishi.
75. Gauss 09 dasturi.
76. ArgusLab dasturi Protein-ligand komplekslarining tuzilishini o'rganish haqida ma'lumot.
77. Jeykning kompyuter dasturi.
78. Zichlik funksional nazariyasiga asoslangan gibrid usullar.
79. Valsh diagrammasi, Gyukkel usuli.
80. DRAKON dasturi yordamida deskriptorlarni tanlash va struktura-faoliyatning matematik modelini yaratish.
81. Kimyoviy va farmatsevtik tadqiqotlar uchun QSAR va QSRS tahlil usullaridan foydalanish.
82. Kvant kimyoviy tahlilining ab initio-empirik usullari.
83. Dastur ArgusLab Protein-ligand komplekslarining tuzilishini o'rganish h
85. Yarim empirik usul Belgilar nazariyasi.
86. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterda ishlash, kompyuter tizimlarini o'rgatish.
87. MM dasturi bo'yicha molekulyar kinetika.
88. Moras Z-matritsa. Yamasa atom massasida Z-matritsani qurish
89. Kush konlarida kompyuter simulyatsiyasi dasturlari bilan ishlash.
90. Kompyuterning vazifalari va qaytishlari bilan tanishning.
91. kalkulyatorlarni amaliyotda qo'llash Kimyoviy birikmalarining xossalari va elektron tuzilishi.

92. Avagadro dasturida hisob-kitoblarni bajarish. Hisoblash natijalarini tahlil qilish.
93. MO qurilishiga asosiy summalarining ta'siri
- 94 Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
95. Z-matritsani aniqlash, molekulyar tizimlarni elektron spektrlarning grafik ko'rinishida ko'rsatish va boshqa bog'lanishlar.
74. Kalkulyatorlarning hayotda qo'llanilishi Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi.
75. Gauss 09 dasturi.
76. ArgusLab dasturi Protein-ligand komplekslarining tuzilishini o'rganish haqida ma'lumot.
77. Jeykning kompyuter dasturi.
78. Zichlik funksional nazariyasiga asoslangan gibrid usullar.
79. Valsh diagrammasi, Gyukkel usuli.
80. DRAGON dasturi yordamida deskriptorlarni tanlash va struktura-faoliyatning matematik modelini yaratish.
81. Kimyoviy va farmatsevtik tadqiqotlar uchun QSAR va QSRS tahlil usullaridan foydalanish.
82. Kvant kimyoviy tahlilining ab initio-empirik usullari.
83. Dastur ArgusLab Protein-ligand komplekslarining tuzilishini o'rganish h
85. Yarim empirik usul Belgilar nazariyasi.
86. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterda ishlash, kompyuter tizimlarini o'rgatish.
87. MM dasturi bo'yicha molekulyar kinetika.
88. Moras Z-matritsa. Yamas atom massasida Z-matritsani qurish
89. Kush konlarida kompyuter simulyatsiyasi dasturlari bilan ishlash.
90. Kompyuterning vazifalari va qaytishlari bilan tanishish.
- 91 . kalkulyatorlarni amaliyotda qo'llash Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi.
92. Avagadro dasturida hisob-kitoblarni bajarish. Hisoblash natijalarini tahlil qilish.
93. MO qurilishiga asosiy summalarining ta'siri
- 94 Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi
95. Z-matritsani aniqlash, molekulyar tizimlarni elektron spektrlarning grafik ko'rinishida ko'rsatish va boshqa bog'lanishlar.
- 96Tautomerlardan proton almashinuvini o'rganish
- 97 PU uzunligini parametrlash qoidalari.
98. Shemlab dasturi yordamida UV spektrini modellashtirish.
99. MORAS dasturi bo'yicha orolning jag'lari.
100. Standart muharrir yordamchilari va grafik dasturlar bilan ishlash.
101. Shemlab bilan UV spektrini modellashtirish
- 97 PU uzunligini parametrlash qoidalari.
98. Shemlab dasturi yordamida UV spektrini modellashtirish.
99. MORAS dasturi bo'yicha orolning jag'lari.
100. Standart muharrir yordamchilari va grafik dasturlar bilan ishlash.
101. Shemlab bilan UV spektrini modellashtirish