

«ФАРМАЦЕВТИКА СОҲАСИНИНГ БУГУНГИ ҲОЛАТИ:
МУАММОЛАР ВА ИСТИҚБОЛЛАР»
ХАЛҚАРО ИЛМИЙ-АМАЛИЙ АНЖУМАНИ

МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
«СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ОТРАСЛИ:
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ»

INTERNATIONAL SCIENTIFIC-PRACTICAL CONFERENCE
ON THE THEME "MODERN PHARMACEUTICS:
ACTUAL PROBLEMS AND PROSPECTS"



2020 yil 13 noyabr

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
СОГЛИҚНИ САҚЛАШ ВАЗИРЛИГИ
ТОШКЕНТ ФАРМАЦЕВТИКА ИНСТИТУТИ**

**“ФАРМАЦЕВТИКА СОҲАСИНИНГ БУГУНГИ ҲОЛАТИ:
МУАММОЛАР ВА ИСТИҚБОЛЛАР”
(ХАЛҚАРО ИЛМИЙ-АМАЛИЙ АНЖУМАНИ МАТЕРИАЛЛАРИ)**

(МАТЕРИАЛЫ МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ)
**«СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ФАРМАЦЕВТИЧЕСКОЙ ОТРАСЛИ:
ПРОБЛЕМЫ И ПЕРСПЕКТИВЫ»**

**ABSTRACTS BOOK OF INTERNATIONAL SCIENTIFIC-PRACTICAL
CONFERENCE ON THE THEME "MODERN PHARMACEUTICS:
ACTUAL PROBLEMS AND PROSPECTS"**

ТОШКЕНТ - 2020



ИНФОРМАЦИОННЫЕ ТЕХНОЛОГИИ В ПРАКТИЧЕСКОЙ И ФУНДАМЕНТАЛЬНОЙ ХИМИИ

Шадманов К.К., Нарзуллаев Д.З., Ильсов Ш.Т.

Ташкентский фармацевтический институт, Ташкент, Республика Узбекистан

e-mail: davr1960@mail.ru

Цель: исследование перспектив применения информатики в практической и фундаментальной химии.

Материалы и методы исследования: обзор отечественной и зарубежной литературы по исследуемой тематике.

Результаты: с появлением новых технологий сбора, передачи, обработки, хранения, архивирования и представления информации применение компьютерной техники облегчило и ускорило исследовательскую работу во многих областях науки, в том числе и в химии. Удобный интерфейс и относительно низкая цена делает доступной для широкого круга пользователей основную часть специализированных решений. В статье приводится краткий обзор существующих пакетов прикладных программ и систем, используемых в современной химической науке.

Компьютерная химия, основанная на применении теории графов к химическим задачам прикладного и фундаментального характера, является относительно молодой отраслью химии, тесно связанной с информатикой. Следуя определению химии как науки о веществах и их взаимных превращениях, предполагают, что в компьютерной химии вещества (молекулы) моделируются молекулярными графами, а превращения веществ (химические реакции) определяются формальными операциями с графами. Такое представление задач компьютерной химии позволяет использовать аппарат дискретной математики и комбинаторики, применяя при этом компьютерные программы для решения поставленных задач. Следует отметить, что в компьютерной химии, наряду со специальными программами, применяются и универсальные: Microsoft Excel — для работы с таблицами, математические пакеты прикладных программ (Mathematica) и др.

К типовым задачам компьютерной химии относятся такие как компьютерный синтез (набор всех химических реакций между заданными реагентами), генерация наборов отвечающих заданным параметрам химических структур, поиск зависимостей типа «структура — свойство».

Существуют также задачи распознавания химических структур при обращении к химическим и физико-химическим базам данных, тесно связанные с задачами химической информатики.

Несмотря на то, что как наука химическая информатика возникла намного раньше, чем появились первые компьютеры, постановка задач этого направления на сегодняшний день уже невозможна без применения ЭВМ. Для решения задач ученые ранее пользовались различными реферативными журналами и химическими справочниками, по которым быстрый поиск информации проводился с помощью системы указателей (предметного, авторского, формульного). В основу современной химической информатики легли основные принципы обработки информации, разработанные еще тогда. Компьютерная же химия путем создания некоторого алгоритма и реализующей его компьютерной программы решает сложные многопараметрические задачи. Основное методологическое отличие химической информатики и компьютерной химии заключается именно в этом.

Эффективное развитие фармацевтической промышленности обеспечивает синтез новых лекарственных форм, требующий прогнозирования токсикологического и фармакологического действия создаваемых препаратов. Для этого создаются значительного объема специализированные банки данных, объединяющих и упорядочивающих информацию о молекулярных структурах известных соединений и

сопоставляющих их биологические и физико-химические свойства. Разработка эффективных методов кодирования структурных формул органических соединений является одной из важнейших задач химической информатики при организации таких банков данных.

Описываемый теорией графов образ молекулярных структур в привычном для химика двумерном виде является одним из лучших решений в области представления структурных формул. Этому способствует использование современных молекулярных редакторов, позволяющих химику мыслить в привычной и удобной и для него форме. С помощью таких редакторов можно быстро откорректировать структурную формулу, у пользователя за один сеанс вырабатывается навык автоматической работы.

В организации автоматизированного сбора, хранения, поиска и обработки данных о строении вещества большую значимость имеют специальные языки представления структурированной информации. Граф, представляющий структурную формулу химического соединения, если в качестве языка представления данных выбран дескрипторный язык, может быть изображён множеством соответствующих ему дескрипторов.

Выводы: развитие многих направлений химической науки невозможно без применения новейших средств прикладной информатики. Благодаря тесному содружеству информатики и химии новейшее компьютерное оборудование стало обычным для большинства химических лабораторий и учебных заведений по всему миру.

Литература:

1. Химические приложения топологии и теории графов/под ред. Р. Кинга/Chemical Applications of Topology and Graph Theory, ed. by R. V. King. М.: Мир, 1987.
2. Каплан И.Г., Межмолекулярные взаимодействия. Физическая интерпретация, компьютерные расчеты и модельные потенциалы [Электронный ресурс] : учеб. пособие - Электрон. дан. - Москва : Издательство 'Лаборатория знаний', 2017. -397 с. - Режим доступа: <https://e.lanbook.com/book/94111>.

ФАНЛАРНИ ЎҚИТИШДА MOODLE ОНЛАЙН ТАЪЛИМ ПЛАТФОРМАСИНИНГ ИМКОНИЯТЛАРИ

Байдуллаев А.С.

Тошкент фармацевтика институти, Тошкент ш., Ўзбекистон Республикаси
e-mail: baidullaev_a@mail.ru

Бугунги кунда талабаларга сифатли таълим беришни ташкил қилишда илмий-техника тараққиёти маҳсули бўлган замонавий ахборот-коммуникацион технологиялар ва уларнинг моддий асоси компьютерлар хизматидан кенг фойдаланиб электрон дарслик ва қўлланмалар ташкил этиш ва интернет манбаларидан ҳамда масофадан ўқитишнинг дастурий воситаларидан фойдаланиш давр талаби бўлиб қолмоқда. Айнан шу мақсадда ахборот-коммуникацион технологияларидан фойдаланиш, мутахассисларнинг умумий маълумоти ва касбий тайёргарлигининг сифатини ошириш учун жаҳон андозаларига жавоб берувчи ахборот технологияларини таълим жараёнига тадбиқ этиш ҳам муҳим аҳамият касб этади. Янги технологиялар негизида (масалан, “Moodle” тизимида) индивидуаллаштирилган таълим методикасини ишлаб чиқиш, талабанинг билимларини шакллантириш ва такомиллаштириш ҳамда эгаллаган билим даражасини аниқлаш каби вазифалар ҳал қилинади. Таълим жараёнида масофали ўқитиш технологияларидан фойдаланиш таълим мазмуни, шакллари ва усулларининг ижобий ўзгаришига кучли таъсир кўрсатади.

Мақсад: ёшларни юксак ахлокли, маънавиятли ва маърифатли, меҳнатга виждонан муносабатда бўлишга, жамият ва оиласи олдида ўз маъсулиятини чуқур англаб етувчи,