

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV TA'LIM, FAN VA INNOVATSIALAR
VAZIRLIGI**

NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI

Kimyo kaferdrasi

**“KIMYODA ZAMONAVIY
KOMPYUTER MODELLASHTIRISH”**

fanidan

**O' Q U V – U S L U B I Y
M A J M U A**



Bilim sohasi:	100000 - Gumanitar
Ta'lim sohasi:	140000 - Tabiiy Fanlar
Ta'lim yo'nalishi:	70530101-Kimyo (Organik va bioorgakik kimyo)

Namangan-2023

O'quv uslubiy majmua 2023 yil O'R OO'MTV tomonidan № 70530101 2.04. raqami bilan 202 yil 28 avgustdagi 144- sonli buyrug'i bilan tasdiqlangan fan dasturi asosida ishlab chiqilgan.

Tuzuvchi: t.f.d, v.b.dots A.B. Abdulxaev

Taqrizchilar: Sh.V.Abdullayev – NamDU k.f.d, professor
Y.R.Toshmatov - NamDU k.f.n dotsent

O'quv uslubiy majmua Namangan davlat universiteti Kengashininig 2023 yil 27 avgustdagi №1- son yig'ilishida ko'rib chiqilgan va foydalanishga tavsiya etilgan.

MUNDARIJA

№		bet
1	O'quv materiallar.....	
2	Ma'ruzalar matni.....	
3	Amaliy mashg'ulotlari.....	
4	Mustaqil ta'lim mashg'ulotlari.....	
5	Glossariy	
6	Ilovalar	
7	Fan dasturi.....	
8	Ishchi fan dasturi.....	
9	Tarqatma materiallar.....	
10	Test topshiriqlari.....	

O'QUV MATERIALLAR

MA'RUZALAR MATNI

1-MA'RUZA

Empirika va nazariya

Reja:

1. Kirish
2. Hisoblanishi mumkin bo'lgan kimyoviy kattaliklar.
3. Kompyuter tizimlarini asosiy ko'rsatkichlari va ish joyni tashkil qilish.

Kompyuter kimyosi - kimyoning informatsion texnologiyalarsiz tasavvur qilish qiyin bo'lgan sohasidir. Ushbu fan kvant-kimyoviy hisoblashlar bilan cheklanib qolmasdan o'z ichiga empirik usullarda birikmalarning turli xil fizik-kimyoviy xarakteristikalar hisobi, moddalar reaksiyon qobiliyatini baholash va biologik faolliklarini ifodalovchi matematik modellar tuzish, hamda dinamik jarayonlarni modellar kabi izlanishlarni qamrab olmoqda. Uning yuzaga kelishiga kvant mexanikasi va kvant-kimyo fanlaridagi yutuqlar bevosita sababchi bo'lgan.

Kvant-kimyo fani kimyoning ancha yosh sohalaridan biri hisoblanadi. Kanadalik olim Errol Rewals "Computational chemistry. Introduction to the Theory and Applications of Molecular and Quantum Mechanics (2003)" kitobida yozishicha, kvant-mexanikasining paydo bo'lishida Shredinger tenglamasi sabab bo'lgan bo'lsa, ushbu tenglamaning Hyukkel tomonidan sodda ko'rinishda kimyoga kirishi kvant-kimyo fanining shakllanishiga sabab bo'lgan. Xartri, Fok va Rutanlar tomonidan taklif qilingan Shredinger to'lqin tenglamasining yechimi bugungi kundagi ananaviy kvant-kimyoviy hisoblash usullarining asosini tashkil qildi. Ushbu fanning shakllanishida yana Hund, Malliken, Lauvdin, Sleyter, Popl, Parizer, Dyuar va boshqa olimlar muhim ro'l o'ynaganlar. Fukui birikmalarning reaksiyon qobiliyatini baholashda chegaraviy molekulyar orbitallar muhim ahamiyat kasb qilishini aniqladi va 1981 yilda Hoffman bilan birgalikda Nobel mukofoti sovrindori bo'lishgan.

Valter Kon tomonidan zichlik funktsionali nazariyasining (ZFN) takomillashtirilishi kompyuter kimyoda keskin burilish yasadi. Shu sababli, V. Kon va J. Popl 1998 yilda mos ravishda zichlik funktsionali nazariyasi va Gaussian hisoblash majmuasi uchun Nobel mukofoti sovrindori bo'lishgan.

Korvin Xansh tomonidan asos solingan QSAR sohasi kompyuter kimyoda birikmalarning tuzilish formulalari asosida yangi parametrlarning aniqlanishiga va ularning biologik faolligini bashorat qilishda qo'llanilishiga olib keldi va yangi tipdagi hisoblash majmualarining yaratilishiga sabab bo'ldi. Bugungi kunda informatsion texnologiyalar rivojlanishi bilan kimyoda qo'llaniladigan hisoblash usullari hamda majmualari sifat va miqdor jihatdan jadal rivojlanmoqda.

Informatsion texnologiyalar rivojlanishi tarixiga bog'liq holda yaqin o'tmishga nazar solsak, 1960-1970 yillarda bitta hisoblash usuli bitta majmuani tashkil qilgan. IBM370/195, CDC7600 va UNIVAC1110 kompyuterlari sekundiga 500 ming -2 million (o'rtacha 10^5) operatsiya bajargan. Ushbu kompyuterlarda bitta hisoblash usulida berilgan geometriyani muqobillamasdan (optimizatsiya qilmasdan) hisoblashlar bajarilgan, jumladan birikmaning umumiy energiyasi, dipol momenti, atomlardagi zaryad taqsimotlari, orbital energiyalari va shu kabi kattaliklar aniqlangan. Lekin geometriya muqobillangandan keying hisoblangan xarakteristikalar muqobillanmasdan oldingi hisoblangan xarakteristikalaridan farq qilishi mumkin.

1970 yillardan boshlab bir necha hisoblash usullarini o'z ichiga olgan majmualar yaratildi. Shulardan eng mashhuri – Gaussian (GAUSSIANS70) programmasi 1970 yilda J. Popl tomonidan yaratilgan. Undan keyin HONDO5 (1976), AMPAC (1985) va MOPAC (1989) programmalar yaratilgan. 1975-1985 yillarda kvant-kimyoviy hisoblashlarga bag'ishlangan bir nechta adabiyotlar chop etildi. Shulardan, 1985 yilda Tim Klark "The Handbook of Computational Chemistry" monografiyasi shakllanib ulgurgan kompyuter kimyosi faning yanayam rivojlanishiga sabab bo'ldi.

Zamonaviy shaxsiy kompyuterlar sekundiga milliard (10^9) o'p'etatsiya bajaradi. Supercomputerlar esa sekundiga kvadrillion (10^{15}) operatsiya bajarishga qodir.

Kompyuter kimyosi chet ellarda "Computational chemistry", "Molecular modeling", "Комп'ютерная химия", "Математическое моделирование" kabi fanlar sifatida o'qitilmoqda va u hisoblashlarning qvant-kimyoviy usullaridan tashqari molekulyar mexanika, molekulyar dinamika, molekulyar doking va QSAR sohalarini ham o'z ichiga olmoqda. Kvant-kimyoviy programmalar uchun "Demo", "Trial", "Free", "Commercial" va "Academic" kabi litsenziya turlari mavjud. "Demo" va "trial" – ma'lum muddat (1-3 oy) mobaynida kompyuterga o'rnatilib ishlaydigan, dasturning ko'rgazmali varianti hisoblanadi. "Free" – programmaning bepul ekanligini ifodalaydi. "Commercial" – pullik programma. "Academic" – ilmiy izlanishlar olib borayotgan davlat tashkilotlari uchun bepul yoki chegirmali pullik variantdagi programma.

Ta'kidlanganidek kimyoda qo'llaniladigan programmalar sifat va miqdor jihatdan ortib bormoqda. Lekin, bitta molekulani hisoblash jarayonida sistema zaryadi va spin multipletligini inobatga olinmasa noto'g'ri ma'lumotlar olinishi mumkin. Undan tashqari, muqobillash jarayonida "RMS gradient" qiymati katta ko'rsatilsa sistema global minimum holati o'rniga local minimum holatida qolib ketishi mumkin. Yana shuningdek, talabalar malakaviy bitiruv ishida yoki ilmiy ishlarida hisoblashlarni qaysi programmada va qanday sharoitlarda o'tkazganligini to'liq keltirishi lozim. Yuqoridagilardan tashqari, yana shuni ta'kidlab o'tish lozimki, kvant-kimyoviy hisoblashlar ma'lum bir maqsadga qaratilgan va natijalar izohlanib,

aniq xulosalar kertirilgan bo'lishi kerak.

1. Shaxsiy kompyuterning haqida tushuncha.

Birinchi shaxsiy kompyuter 1973 yilda Fransiyada Nruohg Trohg Ti tomonidan yaratilgan.

Kompyuter (ing . computer - hisoblayman),

EHM (Elektron Hisoblash Mashinasi) - oldindan berilgan dastur (programma) bo'yicha ishlaydigan avtomatik qurilma. Elektron hisoblash mashinasi (EHM) bilan bir xildagi atama.

Dastlab yaratilgan maskur shaxsiy kompyuter elektron o'yinchoq sifatida qabul qilindi. Bu kompyuter 1977 yilda amerikalik Stiv Jobs boshchiligidagi "Apple Computer" firmasi tomonidan mukammallashtirilib, dasturlarning katta majmuini tatbiq etib, ommaviy ravishda chiqarila boshladi. Shundan beri kompyuter hayotimizga mustaxkam joylashib, axborotni qayta ishlashning eng zamonaviy vositasiga aylandi.

Kompyuter, deganda turli hajmdagi, har xil ko'rinishdagi axborotlarni tezlik bilan ishlab berishni ta'minlovchi universal avtomatik qurilmani tushunish mumkin.

Hozirda hilma-hil zamonaviy kompyuterlar insonga holis hizmat qilmoqda. Ularning tashqi ko'rinishi ham turlicha. Lekin ularni tashkil etuvchi qurilmalar, (ya'ni apparatli ta'minoti) bilan yaqindan tanishsak, turli turkumdagi mashinalardagi qurilmalarda o'xshashlik borligini ko'ramiz. Har qanday kompyuter apparatli ta'minoti, asosiy va qo'shimcha qurilmalardan tashkil topgan. Asosiy qurilmalar kompyuter ishlashini ta'minlasa, qo'shimcha qurilmalar kompyuter bilan ishlash imkoniyatini kengaytiradi.

2. Shaxsiy kompyuterning asosiy qurilmalari

Asosiy qurilmalarga sistema bloki, monitor va klaviatura kiradi. Qo'shimcha qurilmalarga "sichqoncha" manipulyatori, printer, plotter, skaner, nurlil pero va boshqalar misol bo'ladi.

Sistema blokini asosiy xotira, protsessor va elektron sxema tashkil etadi. Asosiy xotira o'z navbatida tezkor xotira qurilmasi (TXQ) va doimiy xotira qurilmasidan (DXQ) iborat. Tezkor xotira qurilmasida kompyuterga kiritiladigan va uning ish jarayoni davomida hosil bo'luvchi barcha axborotlar va ma'lumotlarni ishlash uchun zarur bo'ladigan dasturlar vaqtincha saqlanadi. Chunki, tezkor xotira qurilmasida saqlanib turgan ma'lumotlar kompyuterlar elektr manba'dan uzilganda yoki qayta yuklangan vaqtda o'chib ketadi.

Tezkor xotira qurilmasi registrlardan tashkil topgan.

Registr - ma'lumotlarni ikkilik shaklida vaqtinchalik saqlab turish uchun mo'ljallangan qurilma. Har bir registr o'z navbatida triggerlardan tashkil topadi. Trigger mitti kondensator bo'lib, u elektr toki bilan zaryadlangan holda - "1", zaryadlanmagan holatda "0" ni ifodalaydi. Registrdagi triggerlarning miqdori

kompyuterning necha razryadli ekanini belgilaydi. Registrlar uyachalar (yacheykalar) deb ham yuritiladi. Uyachalarning har bir razryadida bir bit axborot joylashadi, ya'ni 0 yoki 1. 8 bit axborot birlashganda 1 bayt miqdordagi axborotni hosil qiladi. Har bir bayt o'z tartib raqamiga, ya'ni adresiga ega bo'ladi. Uyachaning sig'imi mashina so'zi uzunligini belgilab beradi. Mashina so'zining uzunligi baytlarda o'lchanadi. Mashina so'zining uzunligi 2, 4, 8 baytga teng bo'lishi mumkin. Demak, ketma-ket joylashgan ikki, to'rt yoki sakkiz bayt birlashib bitta mashina so'zini tashkil etishi mumkin ekan. Har bir xotira uyachasi ham o'z adresiga ega, u esa shu uyachadagi boshlang'ich bayt adresi bilan ifodalanadi. Tezkor xotira qurilmasining boshqacha nomi - RAM (Random Access Memory - tanlov bo'yicha istagan qismiga o'tish mumkin bo'lgan xotira), chunki undagi bor, istagan adresli uyachaga to'g'ridan-to'g'ri o'tish imkoniyati mavjud.

Tezkor xotira qurilmasining bir qismida kompyuter ekranidagi joriy tasvirga mos keluvchi ma'lumotlar saqlanadi, uni shartli ravishda videoxotira deb yuritiladi. Agar tezkor xotirani IBM PC rusumidagi kompyuterlar uchun olsak, u quyidagicha taqsimlanadi: dastlabki 640 Kbayti foydalanuvchi dasturlari va ma'lumotlar uchun, 1 Mbaytgacha bo'lgan qismi sistemali foydalanish uchun.

Dastur - 1) biron-bir faoliyat, ishning mazmuni va rejasi; 2) siyosiy partiyalar, tashkilotlar, alohida arboblarning faoliyatining asosiy qoidalari va maqsadlari bayoni; 3) o'quv fani mazmunining qisqacha izohi; 4) teatr, konsertlar va b.

Doimiy xotira qurilmasida kompyuter ishlagan paytda yozilgan axborot o'zgarmasdan doim saqlanadi. Unda odatda, kompyuterning har yoqilishida

uning barcha asosiy qurilmalarining sozligini tekshiruvchi dasturlar, diskuyurituvchi, monitor, klaviatura qurilmalarining ishini boshqaruvchi dasturlar, operatsion sistema diskning qaysi joyida joylashganligi haqidagi axborotlar joylashgan bo'ladi.

Protsessor - kompyuterning asosiy qurilmasi. Protsessor arifmetik va mantiqiy amallar bajaradi, xotira bilan bog'lanadi va barcha mahalliy qurilmalarning ishini boshqaradi. Protsessorning asosiy ishi tezkor xotira qurilmasida joylashgan dasturdan navbatdagi buyruqni o'qish va bajarish, natijani yozib qo'yish hamda keyingi bajariladigan buyruqni aniqlashdan iborat takrorlanuvchi jarayon.

Dastur - kompyuter bajarishi lozim bo'lgan buyruq va ko'rsatmalarining izchil ketma-ketligi. Bundan tashqari protsessor dastur mazmunidagi boshqarishni amalga oshirish, ma'lumotlarni zarur joydan o'qish, lozim joyga yozish, kerak joyga uzatish boshqa qurilmalarning izlanishini muvofiqlashtirish vazifasini ham bajaradi.

Demak, protsessor berilgan dastur va zarur ma'lumotlar asosida odam aralashuvisiz kompyuterning avtomatik ishlashini ta'minlovchi qurilma ekan.

Zamonaviy kompyuterlarda protsessor vazifasini mikroprotsessor, ya'ni o'ta katta integral sxemalar bajarmoqda, u 10 mm kvadratdan ham kichik yuzada

joylashgan yagona yarim o'tkazgichli kristalda (kremniy yoki germaniy) joylashgan millionlab mitti tranzistorlardan tashkil topadi. Misol sifatida ko'radigan bo'lsak, Intel Pentium Pro mikroprotsessori o'z ichida 5,5 milliondan ortiq tranzistorlarni saqlaydi.

Protsessorning ish unumdorligi uning tezligi (taktli chastota) va razryadlar soni bilan belgilanadi. Tezlik protsessorni 1 sekundda bajargan amallar miqdori bilan belgilanadi va Gs bilan ifodalanadi. Masalan, i8086 protsessori 10 MGs (sekundiga 10 million amal) tezlikka ega bo'lsa Pentium protsessori uchun bu ko'rsatkich 850 MGsga teng. Protsessorning razryadlari soni uning bir vaqtning o'zida baravariga ishlash mumkin bo'lgan bitlar miqdori bilan aniqlanadi. Hozirgi kunda 8, 16, 32, 64, 128 razryadli protsessorlar keng qo'llanmoqda. Protsessorning tezligini oshirish uchun hozirgi vaqtda kesh-xotira, turli matematik hamprotsessorlar kabi vositalardan foydalanish yo'lga qo'yilgan.

Kompyuter qurilmalari orasidagi axborot almashinuvi sistema magistrali - shinalar (elektr simlarining bog'lamlari) ko'magida amalga oshiriladi. Shinadagi simlar kompyuterning hamma qurilmalariga parallel holda ulanadi. Kompyuter ishi uchun uch xil shina xizmat ko'rsatadi: berilganlar (berilgan malumotlar) shinasi, adreslar shinasi, boshqarish shinasi. Bog'lamdagi simlarning miqdori, shinning razryadlari sonini belgilaydi. Aniq protsessorga mos i80386, 16/32 yozuvi, ushbu protsessor 16 razryadli berilganlar shinasi va 32 razryadli adreslar shinasiga ega ekanligini, ya'ni bir vaqtning o'zida 16 bit axborot va $2^{32} = 4$ Gbayt hajmdagi adreslar (adreslar sohasi) bilan ishlash imkoniyatini mavjudligini bildiradi. Protsessor va asosiy xotira kompyuterning sistema bloki ichidagi asosiy platada joylashadi. Unga diskurituvchi, printer kabi qo'shimcha qurilmalarni ulash uchun kontrollerlardan, ya'ni maxsus platalardan foydalaniladi. Ular ona platadagi maxsus qirqimlarga joylanadi, portlar deb yuritiluvchi ikkinchi uchlariga qo'shimcha qurilmalar bevosita ulanadilar.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

2-MA'RUZA

Atom va molekullarni fazoda ifodalash.Potensial energetik satx

Reja:

1. Molekulalarda kimyoviy bog'lanishlar va ularning fizik tabiati. Vodorod molekulasi.

2. Ikki atomli molekularining elektron, tebranma va aylanma harakati energiyasi. Molekulalarning nurlanish spektrlari.

3. Yorug'likning kombinatsion sochilishi.

Molekulalarda kimyoviy bog'lanishlar va ularning fizik tabiati.

Vodorod molekulasi.

Molekula deb, bir xil yoki har xil element atomlarining kimyoviy birikishidan tashkil topgan va ma'lum bir moddaning kimyoviy va fizik xususiyatlarini o'zida mujassamlashtirgan eng kichik zarrachaga aytiladi.

Masalan, vodorod (H_2), kislorod (O_2), azot (N_2) bir xil atomlardan tuzilgan molekulalardir. Osh tuzi ($NaCl$) molekulasi esa har xil atomlardan tashkil topgan molekulaga misol bo'la oladi. Molekuladagi atomlar tinimsiz tebranma harakat qiladilar, gaz holatdagi modda molekulari esa aylanma, tebranma va ilgarilanma harakatda ham bo'lishlari mumkin. Molekuladagi atomlarning kimyoviy bog'lanishi ularning tashqi valent elektronlari orqali amalga oshadi.

Molekula asosiy holatda elektr jixatdan neytral va ko'p zarrachali murakkab kvant sistema hisoblanadi. Kvant fizikasi Shredinger tenglamasi yordamida molekuladagi diskret energetik sathlarni aniqlash, elektronlar buluti zichligining fazoviy taqsimotini topish va molekuladagi atomlarning joylashish simmetriyasini o'rganish bilan shug'ullanadi.

Atomlardan turg'un molekula hosil bo'lishi energetik nuqtai nazardan molekula ichki energiyasi uni hosil qilgan atomlarning energiyalari yig'indisidan kichik bo'lishi bilan tushuntiriladi. Bu ikki energiyalar farqi molekulaning bog'lanish energiyasini tashkil qiladi.

Atomlarni turg'un molekula sifatida bog'lab turuvchi kuchlar asosan elektr tabiatga ega. Har qanday ikki neytral atom yoki atomlar gruppasi o'rtasida tortishish va itarish kuchlari mavjud bo'lishiga 1873 yildayoq golland fizigi I.D.Van-der-Vaals e'tibor bergan. Atomlar orasida Van-der-Vaals kuchlarini hosil bo'lishini sifat jihatidan tushuntiraylik. Aytaylik, dastlab asosiy holatda elektr dipol momenti nolga teng ikki neytral atom bir-biridan mustaqil va cheksiz uzoq masofada turgan bo'lsin. Agar bu ikki atom tashqi qobiqlaridagi elektronlar buluti bir-biri bilan sezilarli darajada tutashib ketguncha yaqinlashsa, u holda bu elektronlar harakatidagi mustaqillik yo'qolib, o'zaro bog'lanish vujudga keladi. Elektronlar buluti yadrolarni tutashturuvchi to'g'ri chiziq bo'yicha qutblanganda bu ikki atom sistemasining energiyasi minimum bo'ladi.

Shunday qilib, tashqi elektronlarning harakat holatlari o'zaro bog'lanib qolishi natijasida oniy elektr dipollarga aylangan ikki atom o'rtasida tortishish kuchlari vujudga keladi. Bunday kuchlar qutbsiz molekular orasida ham hosil bo'ladi.

Biroq, Van-der-Vaals kuchlari issiqlik harakati tufayli atomlarni molekula

holida tutib tura olmaydi. Bu molekulyar kuchlar hosil qiladigan bog'lanish energiyasi har bir atomga nisbatan $\sim 0,1$ eV tartibida bo'ladi. Van-der-Vaals kuchlari yakka holda molekula hosil qilishga etarli bo'lmasada, lekin real gazlar, suyuqliklar va ba'zi kristallarning xossalari muhim rol o'ynaydi.

Molekula hosil bo'lishiga olib keladigan ximiyaviy bog'lanish kuchlari ion (geteropolyar) va kovalent (gomepolyar) bog'lanish kuchlariga bo'linadi. Getero - grekcha turli xil, gomeo - bir xil degan so'zlarni anglatadi. Ko'pincha molekulalarda kovalent va ionli bog'lanish uchraydi.

1. Ionli (geteropolyar) bog'lanishni hosil bo'lishi bilan tanishaylik. Ishqoriy metallardagi valent elektron yadro bilan zaif bog'langan. Gologen atomlari tashqi elektron qobiqini to'lishiga bitta elektron etishmaydi. Shuning uchun ishqoriy metall atomi bilan galogen atomi yaqinlashganda ishqoriy metallning bitta elektroni gologen atomiga o'tadi. Natijada ishqoriy metall musbat, gologen atom esa manfiy ionga aylanadi. Bu musbat va manfiy ionlar o'zaro elektrostatik Kulon kuchi bilan o'zaro tortishi natijasida birikib, molekulani hosil qiladi.

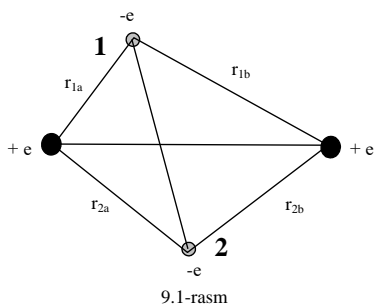
Osh tuzi NaCl molekulasini hosil bo'lish jarayonini sifat jihatdan tahlil qilaylik. Ishqoriy metal Na va galogenlar guruhiga kiruvchi Cl atomlarining elektron qobiqlar bo'yicha taqsimlanishi mos holda $1S^2 2S^2 2P^6 3S^1$ va $1S^2 1S^2 2S^2 2P^6 3S^2 3P^5$ ko'rinishda bo'lib, ular tashqi elektron qobiqlarini tuzilishi bilan farqlanadi. Ularda ichki K va L elektron qobiqlar elektronlar bilan to'lgan. Natriy atomining M qobiqida yadro bilan kuchsiz bog'langan yagona elektroni bor. Bu 3S qobiqchada elektronning bog'lanish energiyasi 5,1 eV. Xlor atomining M qobiqi batamom to'lishi uchun esa 3R qobiqchada bitta elektron etishmaydi. Agar elektron bo'lganda edi, xlor atomi uni nisbatan katta (3,7 eV) energiya bilan tutib turar edi. Demak, bir-biridan etarlicha uzoq masofada bo'lgan natriy atomidan elektronni xlor atomiga olib berish uchun $5,1 - 3,7 = 1,4$ eV energiya sarflash kerak. hosil bo'lgan ionlar bir-biriga tortiladi va birikish jarayonida 1,4 eV dan katta energiya ajralib chiqsa ular molekula bo'lib birikadilar. Tajriba va hisoblashlarning ko'rsatishicha natriy va xlor atomlari NaCl molekulasiga birikayotganda 4,2 eV energiya ajralib chiqadi.

Demak, Na^+ va Cl^- ionlarining turg'un molekuladagi elektrostatik tortishish energiyasi $1,4 + 4,1 = 5,5$ eV ni tashkil etadi. Agar bu energiyadan foydalanib, molekulaning chiziqli o'lchamini hisoblasak, $R = 2,5 \cdot 10^{-8}$ sm bo'lgan haqiqatga yaqin natija kelib chiqadi.

2. Kovalent bog'lanish kuchlari qo'shni atomlarning valent elektronlarini elektron juftlar hosil qilish yo'li bilan umumlashtirishi (almashib turishi) natijasida yuzaga keladi. Bu kuchlar sof kvant xarakterdagi almashuv kuchlari bo'lib, molekulalardagi atom va elektronlarni maxsus Kulon o'zaro ta'siridan vujudga keladi. Kovalent bog'lanishli molekulalarga N_2 , SO , NO , CH_4 kabi molekulalar misol bo'la oladi. Ayni bir xil atomlardan turg'un molekula hosil bo'lishini ion bog'lanish

yoki Van-der-Vaals kuchlari bilan tushuntirib bo'lmaydi. Vodorod molekulasini uchun kovalent bog'lanishning birinchi kvant nazariyasi V.Gaytler va F.Londonlar tomonidan 1927 yilda yaratildi. Kovalent bog'lanish tabiatini vodorod molekulasining hosil bo'lish misolida sifat jihatdan tushuntirishga harakat qilaylik.

Ikki vodorod atomini fikran elektron qobiqlari o'zaro kirishib ketguncha bir-



biriga yaqinlashamiz. Asosiy holatda har bir vodorod atomining 1S elektronning bog'lanish energiyasi 13,6 eV ga teng. Ma'lumki, uning 1S qobigida bittadan elektroni bor. Ikki vodorod atomi o'z elektronini umumlashtirish yo'li bilan K qobiqlarni to'ldirib to'yingan valentlikka ega bo'lgan sistemaga ya'ni, vodorod molekulasiga aylanadi. Bu

molekuladagi bir atomni 1S qobiqi boshqa atomni elektronini vaqtincha olish hisobiga to'ladi va geliy atomiga o'xshab qoladi. Hosil bo'lgan H2 molekulasining kvantlashgan energetik sathlarini aniqlash uchun ikki proton maydonida joylashgan ikki elektron (9.1-rasm) uchun Shredingerning statsionar tenglamasini yechish talab etiladi.

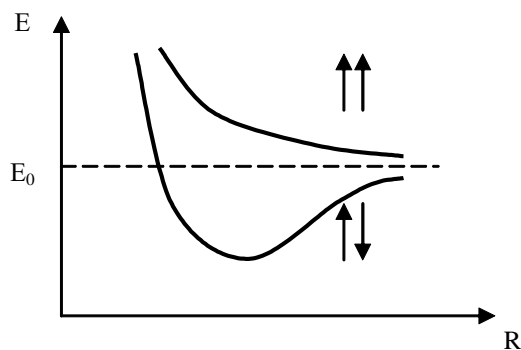
Bunday sistema uchun Shredinger tenglamasi quyidagi ko'rinishda bo'ladi:

$$\Delta_1^2 \psi + \Delta_2^2 \psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - e^2 \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2b}} \right) \right] \psi = 0 \quad (9.1)$$

bu tenglamada

$$U = -e^2 \left(\frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{R} - \frac{1}{r_{1a}} - \frac{1}{r_{2a}} - \frac{1}{r_{1b}} - \frac{1}{r_{2b}} \right) \quad 9.2$$

ifoda vodorod molekulasida ikki proton va ikki elektronning o'zaro ta'sir potensial energiyasidir.



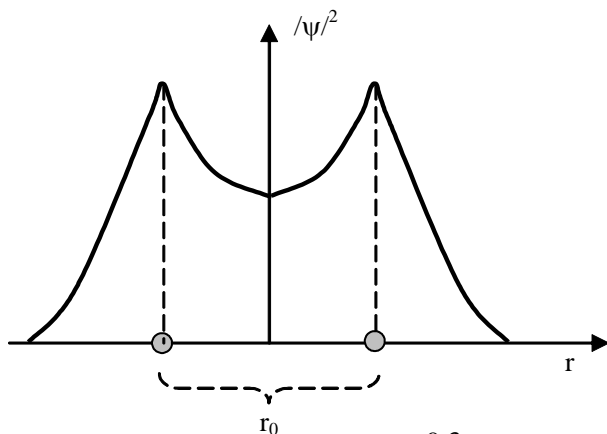
9.2-rasm

Tenglamadagi Δ_1^2 va Δ_2^2 belgilar molekuladagi birinchi va ikkinchi elektronlarining koordinatasi qatnashgan Laplas operatorini bildiradi. Bu tenglamadan olingan energiyaning xususiy qiymatlari yadrolar orasidagi masofa R ga bog'liq. Bu bog'lanish spinlari parallel va antiparallel elektronlar uchun turlicha

ko'rinishga ega (9.2.-rasm).

Vodorod molekulasining turlanmagan asosiy holati atomlarning 1S holatlaridan tashkil topganligi sababli faqatgina spinlari qarama-qarshi yo'nalgan ikki elektroni joylashtirishi mumkin.

Vodorod molekulasida elektron harakatlanadigan soha atomdagiga qaraganda kengroq bo'lganligidan noaniqliklar munosabatlariga muvofiq ikki atomli sistemaning minimal energiyasi yolg'iz atomnikidan kichikroq bo'ladi. Tajriba natijalariga ko'ra N_2 molekulasida hosil bo'lishda 4,5 eV, ya'ni NaCl molekulasidagiga qaraganda ham ko'proq energiya ajralib chiqadi. Ammo bunday sifatli mulohazalar bilan "spinlarining yo'nalishi bir xil bo'lgan vodorod atomlari turg'un molekula hosil qilishi mumkinmi?" - degan savolga javob berish qiyin. Tajriba va qat'iy nazariy hisoblashlar shuni ko'rsatadiki, spinlari bir tomonga yo'nalgan elektronli ikki vodorod atomidan molekula hosil bo'la olmaydi.



9.3-rasm.

Shunday qilib, kovalent bog'lanish sof kvant xarakterga ega bo'lib, qo'shni atom valent elektronlarining yig'indi spini nolga teng juftlarga birikishidan yuzaga keladi. Bunday elektron juftlar molekula atomlaridan hech biriga tegishli bo'lmaydi, yaxlit molekula bo'ylab umumlashgandir. Masalan, N_2 molekulasida qo'shni atomlarning

uchtadan $2R$ valent elektronlari umumlashib, 3 juft kovalent bog'lanishlar hosil qilishda qatnashadilar. Metan CH_4 molekulasida esa uglerod atomining L qobiqidagi to'rtta $2S^22P^2$ elektronlari juft-juft holda to'rtta vodorod atomlarining elektronlari bilan bog'lanadilar. Olmos, kremniy, germaniy kabi kristallar ham, kovalent bog'lanishga ega.

Turli ximiyaviy bog'lanishdan hosil bo'lgan molekular bog'lanish energiyalarini o'rganish shuni ko'rinadiki, kovalent bog'lanish kuchlari ion bog'lanish kuchlaridan kuchliroq ekan. Buni biz vodorod molekulasining o'ta turg'unligida, olmos kristallining juda qattiqligida ko'rishimiz mumkin. Ayrim kristallarda kovalent va ion bog'lanilar birgalikda ham uchraydi.

Vodorod molekulasida birinchi atom elektronini ikkinchi atom yadrosi atrofida, ikkinchi atom elektronini birinchi atom yadrosi atrofida qayd qilish ehtimolligi noldan farqli bo'ladi va bunda birinchi atomni elektroni yoki ikkinchi atom elektroni degan so'z ma'nosini yo'qotadi (9.3-rasm). Bunda kvant mexanikasidagi bir xil zarrachalarning farq qilmaslik prinsipi o'rinli bo'ladi.

2. Ikki atomli molekularining elektron, tebranma va aylanma harakati energiyasi. Molekulalarning nurlanish spektrlari.

Molekula murakkab kvant sistema bo'lib, u molekuladagi elektronlarning xarakatini, atomlarining tebranma va molekulaning aylanma harakatini hisobga oluvchi Shredinger tenglamasi bilan ifodalanadi. Bu tenglamani echimi juda

murakkab bo'lgani uchun odatda uni elektron va yadrolar uchun alohida yechiladi.

Molekulaning energiyasini o'zgarishi asosan uni tashqi qobiqidagi elektronlarning holatini o'zgarishi bilan bog'liqdir. Lekin molekuladagi elektronlarning ma'lum bir turg'un holatida ham molekula yadrolari umumiy inertsiya markazi atrofida tebranma va aylanma harakat qilishi mumkin. Molekulaning energiyasi asosan uch harakatga mos energiyalarning yig'indisiga teng:

$$E \approx E_{el} + E_{teb} + E_{ayl} \quad (9.3)$$

bunda E_{el} - elektronlarining yadroga nisbatan harakat energiyasi;

E_{teb} - yadroning tebranma harakat energiyasi;

E_{ayl} - yadroning aylanma harakat energiyasi bo'lib, u molekulaning fazodagi vaziyatini davriy ravishda o'zgarishiga bog'liq bo'lgan energiya.

Tajribadan aniqlanishicha $E_{el} = 1 \div 10$

$E_{teb} \approx 10^{-2} \div 10^{-1}$ eV; $E_{ayl} \approx 10^{-5} \div 10^{-3}$ eV ga teng.

Ya'ni $E_{el} \gg E_{teb} \gg E_{ayl}$ tengsizlik o'rinli buladi.

Bu energiyalar o'zaro quyidagi nisbatda taqsimlangan:

$$E_{el} : E_{teb} : E_{ayl} = 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}$$

bu erda m - elektron massasi, M -molekuladagi yadro massasi,

$m/M = 10^{-5} \div 10^{-3}$

Molekulaning chiziqli o'lchami valent elektronlarning harakat amplitudasi tartibidagi kattalik bo'lib, odatda $a = 10^{-8}$ sm. Bundan elektronlar harakati bilan bog'liq bo'lgan molekulaning elektron energiyasi E_{el} ham atom energiyasi tartibidagi kattalik ekanligi kelib chiqadi. Masalan, vodorod atomining asosiy holati uchun

$$e E_1 = \frac{e^4 m_0}{2h^2} = \frac{h^2}{2m_0 a_0^2} = -13,6 \text{ eV}$$

bo'lishini va unda

$$a_0 = \frac{h}{m_0 e_0^2} = 0,529 \text{ \AA}$$

Bor radiusiga teng ekanligini yuqorida ko'rib o'tganmiz. Molekula uchun Yeel absolyut qiymat bo'yicha

$$E_{\text{эл}} \sim \frac{h}{m_0 a^2} \quad (9.4)$$

tartibda bo'ladi.

(9.4) dan ko'rinib turibdiki, molekulaning energiyasi har bir atomdagi elektron energiyalarining yig'indisiga teng.

Ikki atomli molekulaning yadrolarining aylanma harakat energiyalarini baholash uchun uni qo'pol holda inertsiya momenti mr^2 bo'lgan rotatorga o'xshatish

mumkin.

Ratator deb, o'zaro bog'langan va biri ikkinchisi atofida aylanma harakat qiluvchi zarrachalar sistemasiga aytiladi.

Molekulaning aylanma xarakat energiyasi

$$E_{\text{ayl.}} = L^2/2I_0 \quad (9.5)$$

formula bilan ifodalanadi. Bunda $I_0 = mr^2$ bo'lib molekulaning inersiya markazidan o'tgan o'qqa nisbatan inersiya momenti, L - molekulaning impuls momenti bo'lib, kvantlangan qiymatlarni oladi:

$$L = \sqrt{\ell(\ell+1)}\hbar \quad (9.6)$$

bu formulada ℓ - orbital kvant soni, $\ell=0, 1, 2, 3, \dots$ qiymatlarni oladi. (2) ni hisobga olsak, (9.5) quyidagi ko'rinishni oladi.

$$E_{\text{ayl.}} = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{I_0} \quad (9.7)$$

(9.7) formulada $B = \frac{\hbar^2}{I_0}$ belgilashni kiritsak, u ancha sodda ko'rinishni oladi.

$$(E_{\text{ayl.}})_{\ell} = B \ell (\ell+1) \quad (9.8)$$

B - molekulaning aylanish doimiysi.

Kvant mexanikasidagi tanlash qoidasiga ko'ra qo'shni aylanma sathlar orasida faqat $\Delta\ell = \pm 1$ bo'lgan o'tishlarigina bo'lishi mumkin. $\Delta\ell = + 1$ shart yorug'lik yutilishiga, $\Delta\ell = - 1$ shart yorug'lik sochilishiga mos keladi.

Ikki atomli molekulaning yadrolari muvozanat vaziyati atrofida tebranma harakat qiladilar. Molekuladagi yadro tebranishlariga garmonik tebranishlar deb qarab, uni m massali chiziqli garmonik ossilyatorning tebranishlariga o'xshatish mumkin. Biz oldingi 5-ma'ruzamizda garmonik ostsiyatorning energiyasi uchun

$$E_{\text{teb.}} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 \quad (9.9)$$

ifoda bilan aniqlanishini ko'rgan edik. Tebranma kvant soni n uchun ham tanlash qoidasi bajariladi: $\Delta n = \pm 1$ Shunday qilib, yuqoridagi (9.8) va (9.9) ifodalarni hisobga olsak, molekulaning to'liq energiyasi (9.3) ga asosan

$$E = E_{\text{ayl.}} + \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0 + B \ell (\ell+1) \quad (9.10)$$

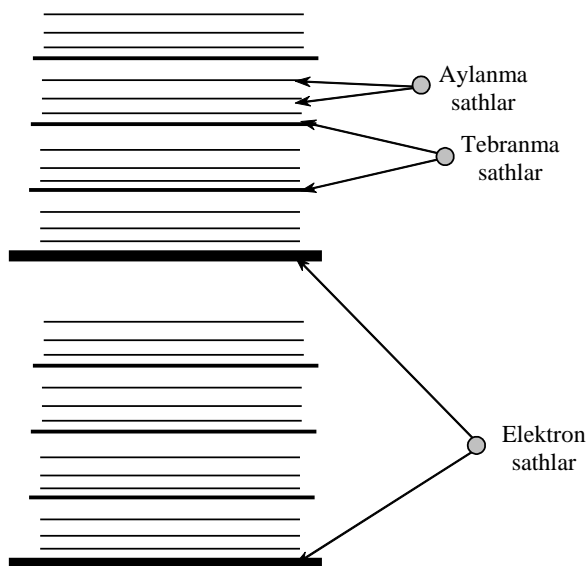
ko'rinishni oladi.

Agar molekulaga biror yorug'lik kvanti tushsa, uning energiyasining bir qismi optik elektronlarni qo'zg'atishga, qolgan qismi esa atomlarning tebranma va aylanma harakatlarini oshirishga sarf bo'ladi.

(9.10) formuladan ko'rinadiki, n va ℓ kvant sonlarining turli qiymatlari bilan aniqlanadigan molekulyar energetik spektr tebranma va aylanma energetik

sathlarning sistemasidan iborat. Vodorod molekulasida uchun $\hbar\omega_0 = 0,547 \text{ eV}$, $B = 0,07 \text{ eV}$, ya'ni molekulaning tebranma energiyasi, aylanma energiyasidan kattadir.

Bunday hol barcha ikki atomli molekularlar uchun xosdir. Demak, tebranma sathlar bir-biridan bir xilda nisbatan katta oraliqda yotsa, aylanma sathlar esa juda zich joylashgan va ℓ ortishi bilan siyraklashib boradi. Molekuladagi atomlar



9.4-rasm.

(yadrolar) harakatining kvantlanishi molekulaning nurlanish (yutilish) spektrida yaqqol namoyon bo'ladi.

(9.10) ifodaga kiruvchi har bir energiya kvantlangani uchun ular energetik sathlar to'plamidan iborat. Tajriba va nazariyadan aylanma energetik sathlar orasidagi oraliq, tebranma harakatga mos keluvchi energetik sathlar orasidagi masofadan kichik. O'z navbatida tebranma harakatga mos keluvchi sathlar orasidagi masofa bosh kvant soni bilan aniqlanuvchi elektron

sathlar orasidagi masofadan kichik. Bu hol 9.4-rasmda yo'g'on, o'rtacha yo'g'onlikdagi va ingichka chiziq bilan ikkita elektron sath uchun tasvirlangan.

Molekulalarning tuzilishi va ularning energiya sathlarining xususiyatlari kvant o'tishlarda sochilgan nurlanish (yutilish) spektrida, ya'ni molekula spektrida namoyon bo'ladi. Molekulaning nurlanish spektri kvant mexanikasidagi tanlash qoidasiga mos holda (masalan, aylanma yoki tebranma harakatga mos kvant sonining o'zgarishi ± 1 ga teng bo'lishi kerak) energetik sathlar tarkibi bilan aniqlanadi.

Shunday qilib, sathlar orasidagi turli xil o'tishlardan turli xil spektrlar hosil bo'ladi. Molekulaning spektral chiziqi chastotasi bir elektron sathdan boshqasiga o'tishga mos keluvchi (elektron spektrlarga) yoki biror tebranma harakatga mos kelgan energetik sathdan ikkinchisiga o'tishga mos kelishi mumkin. Molekulalar spektri ham chiziqli bo'lib, ular spektrning UB, IQ va ko'zga ko'rinuvchi sohasida joylashishi mumkin. Aylanma sathlar bir-biriga juda yaqin joylashgani uchun ularga mos keluvchi spektral chiziq ham bir-biriga juda yaqin bo'lib, ular xatto tutashib ketadi.

Shuning uchun ajrata olish qobiliyati o'rtacha bo'lgan spektral optik asboblarda bu chiziq tutashib ketgandek, yo'l-yo'l bo'lib ko'rinadi. Lekin ajrata olish qobiliyati katta bo'lgan optik asboblarda ularni bir-biriga juda yaqin joylashgan, alohida chiziqlardan iborat ekanini ko'rish mumkin va bu yo'llarning kichik chastotalar

tomonidagi chegarasi keskin, chastotaning katta qiymatlari tomonidagi chegarasi esa suvashgan ekanini ko'rish mumkin. Molekuladagi atomlar soni ortishi bilan molekula spektri murakkablashib, faqat keng yo'llar ko'rina boshlaydi.

Molekulalarning aylanma sathlarini mikroto'lqinli radiospektroskopiya usuli bilan o'rganiladi. Bu usulda tekshiriluvchi gaz qamalgan metall naydan (volnovod) chastotasi $\sim 10^{10}$ Gs bo'lgan elektromagnit to'lqin o'tkaziladi. Agar elektromagnit to'lqinni chastotasi gaz molekulalarining aylanma harakat chastotasiga mos kelsa, qabul qiluvchi qurilma elektromagnit to'lqin intensivligini keskin kamayganini qayd qiladi.

Molekulaning tebranma spektri IQ ($1/\lambda \cong 10^3 \text{ cm}^{-1}$) sohada joylashgan va uni infraqizil spektrofotometrlar yordamida o'rganiladi. Molekulaning tebranma harakatida sochilgan yoki yutilgan fotonning energiyasi $h\nu \approx 0,04 \text{ eV}$, unga mos kelgan to'lqin uzunligi $\lambda = s/\nu = 3 \cdot 10^{-3} \text{ m} = 30 \text{ mkm}$.

Molekulalarning aylanma va tebranma energetik sathlarini modda faqat gaz holatda bo'lganda o'rganish mumkin. Moddaning suyuq va qattiq holatida molekulalarning o'zaro ta'siri tufayli ularning tebranma va aylanma energetik sathlarini o'rganish qiyinlashadi.

Molekulyar spektroskopiyada molekulaning juft orbital soni ℓ ga mos kelgan energetik sathlar juft termlar va toq ℓ li sathlar toq termlar deb nomlanadi. N_2 molekulasi uchun molekulyar termlarning juftligi protonlar spinlarining orientatsiyasi bilan uzviy bog'liq bo'lgan quyidagi kvant holatlarni vujudga keltiradi:

a) ortovodorod - yadrolarining spinlari parallel bo'lgan H_2 holda spin funksiya simmetrik va koordinat funksiyasi antisimmetrik. Shuning uchun ortovodorod orbital kvant soni ℓ toq termlarda mavjud bo'la oladi xolos. Uning eng quyi energetik holatiga $\ell = \ell$ mos keladi;

b) paravodorod - yadrolarining spinlari antiparallel H_2 molekulasi. Bu molekula ℓ juft bo'lgan holatlardagina uchraydi. Paravodorodning eng quyi energetik holatida $\ell = 0$, ya'ni yadrolarning orbital harakati "muzlab qoladi".

Yorug'likning kombinatsion sochilishi.

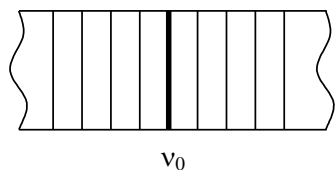
Molekular spektrini o'rganishda 1929 yilda rus olimlari T.S. Landsberg (1890-1957) va L.I. Mandelshtam va ular bilan bir vaqtda hind olimlari Ch.Raman (1888-1970) va K.Krishnan (1911 yilda tug'ilgan) kashf etgan yorug'likning kombinatsion sochilish hodisasi muhim ahamiyatga ega.

Bu effekt shundan iboratki, biror moddaga (gaz, suyuqlik, shaffof kristall) ν_0 chastotali monoxromatik yorug'lik tushsa, bu moddada sochilgan yorug'lik spektrida ν_0 chastotali chiziqdan tashqari uning ikki yonida simmetrik joylashgan qo'shimcha spektral chiziqlar ham hosil bo'ladi (9.5-rasm).

Bu qo'shimcha spektral chiziqlarga mos kelgan chastota tushayotgan monoxromatik yorug'lik chastotasi bilan yorug'likni sochayotgan molekulalarning tebranma yoki aylanma o'tishlarida hosil bo'ladigan nurlanishlar chastotalarining ayirmasiga yoki yig'indisiga teng bo'ladi, ya'ni

$$v_i = v_0 \pm v'_i \quad (9.2)$$

Kombinatsion sochilish spektridagi chastotasi moddaga tushayotgan yorug'likning chastotasidan kichik bo'lgan chiziqlar qizil yo'ldosh spektrlar,



9.5-rasm.

chastotasi v_0 dan kattalari esa binafsha yo'ldosh spektrlar deb ataladi. Hosil bo'lgan bu yo'ldosh spektr chastotasi, joylashishi va soni tushayotgan yorug'lik chastotasiga bog'liq bo'lmay, faqat yorug'lik sochilayotgan modda tabiatiga bog'liq bo'lib, uning tarkibini va tuzilishini ifodalaydi.

Yorug'likning kombinatsion sochilishidagi qonuniyatlarni kvant nazariya bilan tushuntirish mumkin. Bu nazariyaga ko'ra yorug'likni sochilish jarayoni molekula tomonidan fotonni yutib yana qayta chiqarishdan iborat. Agar bu fotonlarning energiyalari bir xil bo'lsa, sochilgan yorug'lik spektrida tushayotgan yorug'lik chastotasini v_0 bilan bir xil bo'lgan asosiy chiziq hosil bo'ladi. Lekin sochilish jarayonida yutilgan va chiqarilgan fotonlarning energiyasi teng bo'lmasligi mumkin. Fotonlar energiyasining har xil bo'lishi molekulani turg'un holatdan uyg'ongan holatga yoki uyg'ongan holatdan turg'un holatga o'tishiga bog'liq. Agar molekula turg'un holatdan uyg'ongan holatga o'tsa, qizil yo'ldosh chiziq, aksincha uyg'ongan holatdan turg'un holatga o'tsa, binafsha yo'ldosh chiziq hosil bo'ladi. Agar uyg'ongan molekulalarning soni, uyg'onmagan molekulalar sonidan ancha kam bo'lsa, binafsha yo'ldosh chiziqlarning intensivligi, qizil yo'ldosh chiziqlarnikidan kichik bo'ladi. Temperatura ortishi bilan uyg'ongan molekulalarning soni ortadi, natijada binafsha yo'ldosh chiziqlar intensivligi ham kuchayadi.

Kombinatsion sochilish hodisasi ko'p atomli murakkab molekulalardagi tebranma va aylanma energetik sathlarni, molekulalarning tuzilishini o'rganishda keng qo'llaniladi. Masalan, neft mahsulotlarining (benzin, yog'lar) tarkibi ana shunday aniqlanadi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

3-MA'RUZA

Hisoblashlarning empirik usullari

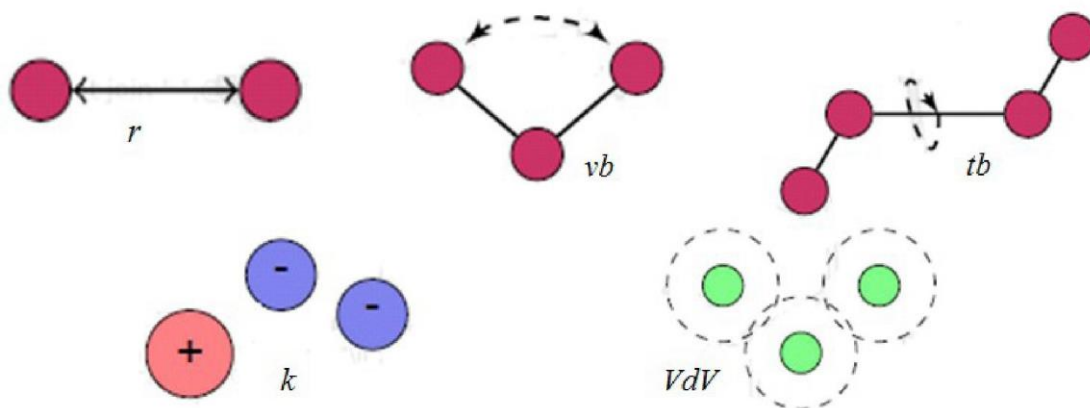
Reja:

1. Molekulyar dinamika.
2. Molekulyar mexanika usullari
3. Trayektoriyani vaqt bo'yicha ifodalash qoidalari.

Molekulyar mexanika nazariyalari o'tgan asrning 60-chi yillarida T. Xill va A.I. Kitaygorodskiylar tomonidan yaratilgan. Molekulyar mexanika termini 1958 yilda L. Bartell tomonidan taklif qilingan. Birinchi molekulyar mexanika tipidagi hisoblashlarni amalga oshiruvchi programma K.B. Viberg (K.B. Wiberg) tomonidan 1965 yilda ishlab chiqilgan. 1976 yilda N.L. Ellinjer (N.L. Allinger) MM1 usulini, 1977 yilda esa MM2 usulini taklif qildi.

Molekulyar mexanika (MM) usullarida atomlar kuch maydonlarida joylashgan N'yuton zarrachalari deb qaraladi. Ularning o'zaro ta'siri potensial energiya bilan ifodalanadi. Potensial energiya bog' uzunliklari (r), bog'lar orasidagi butchak (νb), ikki yonli (torsion) burchak va bog'lanmagan fragmentlar orasidagi elektrostatik (k) hamda Van-der-vaals ta'siriashuvlariga bog'liq. MM yoki kuch maydonlari usullarida umumiy potensial energiya yuqorida keltirilgan ta'sirlashuvlar energiyalarining yig'indisi sifatida topiladi:

$$E = E_{\text{bog'}} + E_{\nu b} + E_{tb} + E_{\text{vdv}} + E_{\text{Kulon}} \quad (19)$$



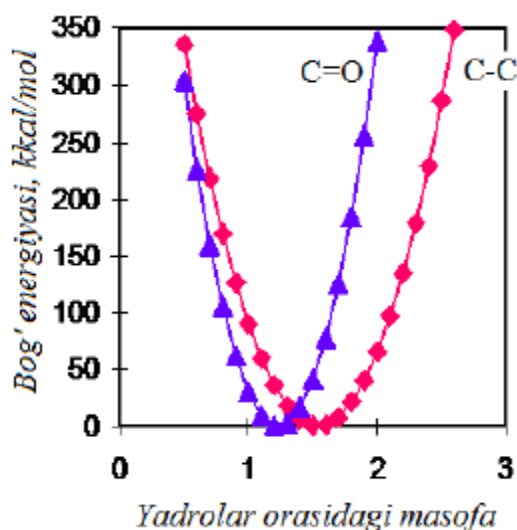
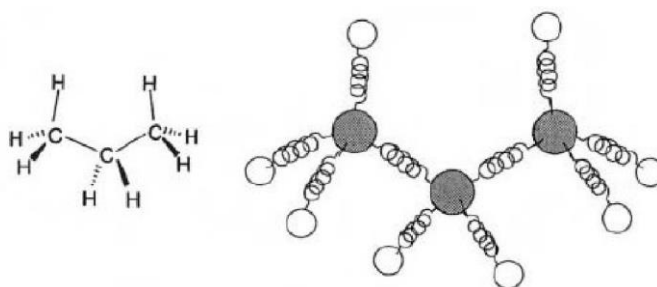
Bog' energiyasini ifodalash

MM usuli empirik usul –tajribada olingan geometrik va boshqa kattaliklar asosida parametrlanadi. Ma'lum bo'lgan, alohida olingan har bitta kimyoviy bog' uzunligi ideal bog' uzunligi (r_0) sifatida kiritilgan. Masalan, sp^3 gibridlangan C atomlari orasidagi C-C bog' uzunligi 1.508 Å, sp^2 gibridlangan C atomlari orasidagi C=C bog' uzunligi 1.333 Å va sp gibridlangan C atomlari orasidagi C≡C bog' uzunligi 1.200 Å deb kiritilgan. Bog' energiyasini topishda quyidagi ifoda yordamida

minimal energetik holat energiyasi olinadi:

$$(20) \quad E_b = \frac{k}{2}(r - r_0)^2$$

bu yerda, k - parametrlashda aniqlanadiga o'zgarmas kattalik, r_0 –parametrlashda kiritilgan ideal bog' uzunligi va r – qaralayotgan birikmadagi ideal bog' uzunligidan farq qiluvchi (real) bog' uzunligi. Ma'lumki, kimyoviy bog'lar uzunligi belgilangan masofagach uzayishi va qisqarishi mumkin. Yadrolar orasidagi masofa oshishi bilan potensial energiya ham keskin oshadi (-rasm). MM usulida kimyoviy bo'glar prujinadek tasavfur qilinadi.



C=O va C-C bog' uzunligining energiyaga bog'liqlik diagrammasi.

Valent va torsion burchak energiyasini ifodalash

MM usulida valent burchak energiyasini ifodalashda quyidagi ifodadan foydalaniladi:

$$E_{vb} = \frac{k_v}{2}(\phi_i - \phi_0)^2 \quad (21)$$

Ayrim MM programmalarida v_b kattaliklarini tajribadagi v_b kattaliklariga yaqinlashtirish maqsadida yuqoridagi ifoda mukammallashtirilgan:

$$E_{vb} = k_i/2(\phi_i - \phi_0)^2(1 - k'(\phi_i - \phi_0) - k''(\phi_i - \phi_0)^2 - k'''(\phi_i - \phi_0)^3 - k''''(\phi_i - \phi_0)^4 \dots) \quad (22)$$

Torsion bog' energiyasi quyidagi ko'rinishdagi ifodalar yordamida aniqlanadi

$$E_{\text{ab}} = \left(\frac{V_1}{2}\right) (1 + \cos(\theta_{\text{ab}})) + \left(\frac{V_2}{2}\right) (1 - \cos(2\theta_{\text{ab}})) + \left(\frac{V_3}{2}\right) (1 - \cos(3\theta_{\text{ab}})) \quad (23)$$

Van-der-Vaals va Kulon ta'sirlashuvlari energiyalarini ifodalash VdV ta'sirni to'liq ifodalovchi formulardan biri Leonard-Jons potentsiali hisoblanadi:

$$E_{\text{vdv}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^6 \right] \quad (24),$$

bu yerda, ϵ_{ij} va σ_{ij} potentsial o'ra chuqurligini ifodalovchi kattaliklar.

Kulon ta'sirni to'liq ifodalovchi formulalar quyidagicha:

$$E(q_1, q_2) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \quad (25),$$

bu yerda, q_1 va q_2 o'zaro ta'sirlahsyotgan ikkita zarrachaning zaryadi, r - q_1 va q_2 orasidagi masofa, ϵ_0 - elektr doimiysi: $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Farada/metr, ϵ_r - zaryad atrofidagi muhitning dielektrik singdiruvchanligi.

$$E = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \quad (26),$$

MM usuli programmalarini C atomlarini va boshqa atomlarni gibridlanish holati va strukturasi o'ziga xos xususiyatlarini to'liq namoyon etishi uchun parametrlash jarayonida qaytadan nomerlangan (-jadval). Masalan, har bir sinf birikmalaridagi C atomining elektron tuzilishlarini inobatga olgan holda C atomi uchun 15 ta raqamlash kiritilgan. Alkenlardagi sp^2 -gibridlangan C atomi karbonidagi sp^2 -gibridlangan C atomidan farq qilishi maktab kimyosidan ma'lum. Kislorod atomi uchun 7 xil, N atomi uchun 10 xil raqamlash kiritilgan.

-Jadval. MM usulida atomlarning turlari va raqamlanishi

Ra	Si	Tavsifi	Raq	Si	Tavsifi
1	C	sp^3 -uglerod	28	H	enol yoki amid
2	C	sp^2 -uglerod, alken	48	H	ammoniy
3	C	sp^3 -uglerod,	36	D	deyteriy
4	C	sp -uglerod	20	EJ	electron juft
22	C	Siklopropan	15	S	sulfide, R_2S
29	C-	radikal	16	S+	R_3S^+
30	C+	karbokation	17	s	Sulfoksid,
38	C	sp^2 -	18	s	R_2SO_2
50	C	sp^2 -uglerod,	42	s	sp^2 -S, tiofen

56	C	sp ³ -C, siklobutan	11	F	ftorid
57	C	sp ² -C, siklobuten	12	Cl	xlorid
58	C	Karbonil,	13	Br	bromid
67	C	C=O, siklopropanon	14	I	yodid
68	C	Karbonil, keten	26	B	Boron,
71	C	Keton uglerodi	27	B	Boron,
8	N	sp ³ -azot	19	Si	silan
9	N	sp ³ -azot, amid	25	P	Fosfin, R ₃ P
10	N	sp-azot	60	P	5 valentli P
37	N	Azo yoki piridin, -	51	He	geliy
39	N ⁺	sp ³ -N, R ₄ N ⁺	52	Ne	neon
40	N	sp ² -azot, pirrol	53	Ar	argon
43	N	Azoksi, -N=N-O	54	Kr	kripton
45	N	Azid	55	Xe	ksenon
46	N	Nitro, -NO ₂	31	Ge	germaniy
72	N	Imin, oksim, =N-	32	Sn	qalay
6	O	sp ³ -kislrorod	33	Pb	Qo'rg'oshin,
7	O	sp ² -kislrorod,	34	Se	selen
41	O	sp ² -kislrorod, furan	35	Te	tellur
47	O ^o	karboksilat	59	M	magniy
49	O	epoksi	61	Fe	Temir (II)
69	O	Amin oksid	62	Fe	Temir (III)
70	O	keton	63	Ni	Nikel (II)
5	H	Vodorod	64	Ni	Nikel (III)
21	H	Spirtlardagi, OH	65	Co	Kobalt (II)
23	H	Amin, NH	66	Co	Kobalt (III)
24	H	Karboksil, COOH			

Bugungi kunda, ko'pchilik hisoblash majmualari uchun MM usullari yaratilgan va kiritilgan:

1. MM2 (ChemOffice);
2. MMX (PCModel);
3. MM+, Amber, OPLS, BIO+ (HyperChem);
4. Gchemical, MMFF94, MMFF94s, UFF (Avogadro);
5. UFF, Dreiding, Amber (Gaussian). UFF-universal force field (Universal kuch maydoni), MMFF-Merk Molecular Force Field.

MM usuli kvant-kimyoviy usullarga nisbatan juda tezkor usul sanaladi. Lekin, aniqligi yarim empirik va noempirik usullarnikiga nisbatan past. MM usullarida N, O kabi atomlaridagi bog'lanmagan elektron juft ta'sirlashuvlari to'liq inobatga olinmagan. Tautomerlar, konformerlar va boshqa birikmalarning umumiy energiyasi hisobida tajriba bilan mos tushadigan ma'lumotlar olingan.

Ayrim MM usullari atom zaryadlari va hosil bo'lish issiqligini hisoblashga

parametrlangan.

Keyingi vaqtlarda MM usulining tezkorligi asosida kvant-kimyo va MM usullari birlashtirgan, gibrid usullar (QM/MM) yaratish ustida izlanishlar olib borilmoqda. Bunga misol qilib Morokumaning ONIOM usulini misol qilib keltirish mumkin.

Molekulyar dinamika

Molekulyar dinamika molekullarning harakatini mikrodarajada modellashtirish orqali ma'lum birikmalarning fizikaviy makroxarakteristikalarini aniqlash imkonini bermoqda. Makroxarakteristikalar - molekullarning ma'lum vaqt davomida fazodagi harakati natijasida qoldirgan izi, ya'ni trayektoriyasini qayd qilish orqali aniqlanadi.

Molekulyar dinamikada zarrachalarning harakati (dinamikasi) Nyuton qonunlari bilan ifodalashadi ($F=ma$, $F=-F$). Atomlarning harakatini modellashtirish jarayonida har bir atomga ta'sir qiluvchi kuch (F) quyidagicha topilishi mumkin:

$$F_i = \frac{dU}{dr_i} \quad (27),$$

bu yerda, U -potensial atomning holati. F_i Tezlanish (a), U energiya funktsiyasi, r_i tezlik (v)

$$x(t) = v \cdot t + x_0 = a \cdot \frac{t^2}{2} + v_0 \cdot t + x_0,$$



va holat o'zgarishi (r_i) quyidagi ifodalar bilan aniqlanadi.

$$a_i = \frac{F_i}{m_i} \quad (28), \quad v = \frac{r}{t},$$

Umumiy energiya kinetik (K) va potensial (U) energiya yig'indisidan aniqlanadi. Potensial energiya MM usulidagi umumiy energiyani topish formulasidan, yani: $U = E_{\text{bog}} + E_{\text{vb}} + E_{\text{tb}} + E_{\text{vdv}} + E_{\text{Kulon}}$ topiladi. Kinetik energiya quyidagi ifoda yordamida hisoblanadi:

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N m_i v_i^2.$$

Zarrachalarning ma'lum bir vaqt ichidagi harakatining (trayektoriyasining) sanoqli yechimini topish uchun funksiyalarni Taylor qatoriga yoyish kabi amaliyotlaridan foydalaniladi.

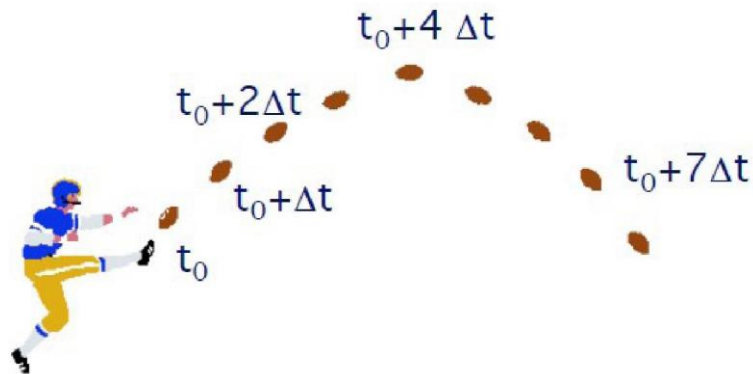
Zarrachaning x o'qi bo'yicha dastlabki (t vaqtdagi) holati va tezligini quyidagicha aniqlab olsak:

$t+\Delta t$ vaqtdagi holati (sistema dinamikasining 1-chi qadami) quyidagicha aniqlanadi:

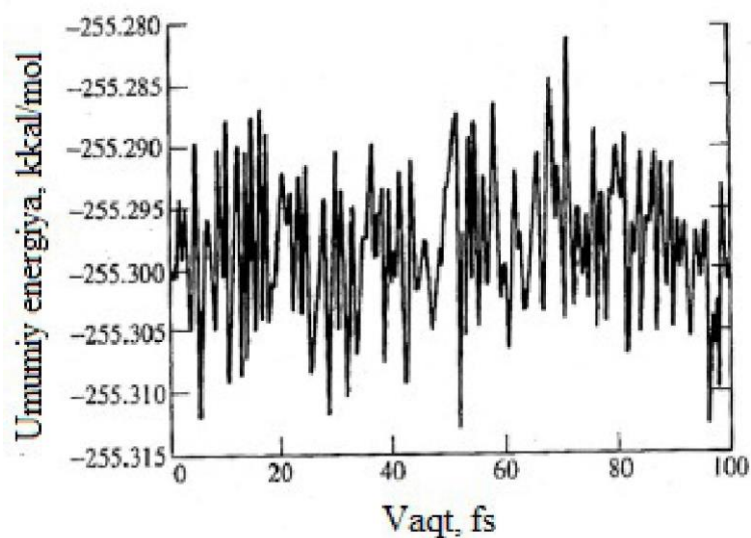
$$x(t + \Delta t) = x(t) + v(t)\Delta t + \frac{F(t)}{m} \frac{\Delta t^2}{2} + \frac{F'(t)}{m} \frac{\Delta t^3}{6} + \dots$$



$x(t + \Delta t)$ yordamida $x(t+2\Delta t)$ aniqlanishi mumkin. Xuddi shuningdek, dasdabki tezlik $v(t)$ yordamida keyingi qadamdagi tezlik $v(t+\Delta t)$ aniqlanishi mumkin.



Trayektoriyani vaqt bo'yicha ifodalash qoidalari.

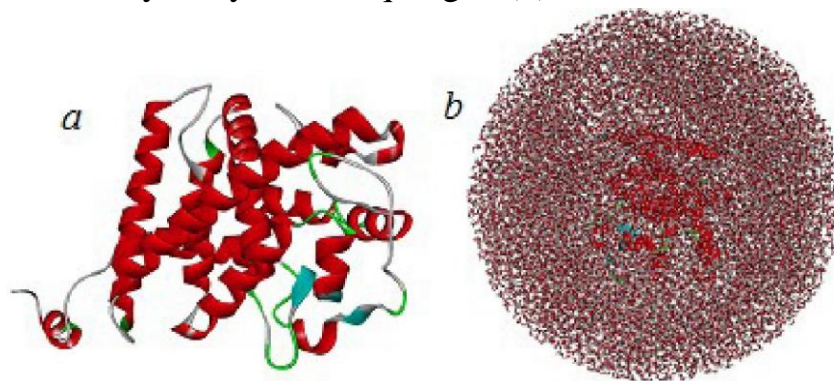


Trayektoriyalar temperature va bosim ta'sirini o'zgarishi ta'sirini inobatga olgan holda yozilishi mumkin. Vaqt o'lchovi sifatida - femtosekund (10^{-15} s.), pikosekund (s) yoki nanosekund olinadi. Quyida vaqt davomida sistema energiyasi o'zgarishini ko'rsatuvchi diagramma keltirilgan.

Vaqt davomida sistema energiyasi o'zgarishini ko'rsatuvchi MD hisoblash diagrammasi.

Bugungi kunda biologik makromolekulalarni o'rganishda MD usullari keng qo'llanilmoqda. MD usullarida ta'sirlashayotgan biologik sistemalarning energetik sathdagi global minimumini topish makromolekulada mavjud bo'lgan ko'pchilik lokal minimumlar tufayli juda murakkab. Shuning uchun ham tarkibida 1000-dan ortiq suv molekulasini, ligand molekulasini va makromolekulani birgalikda qo'shib hisoblaydigan MD hisoblashlari asosan superkompyuterlarda olib boriladi. Masalan, quyidagi oqsil molekulasini (a) MD usulida o'rganish uchun 15800-ta suv

molekulasini tutgan sferik yacheyka hosil qilingan (b):



Oqsil molekulasini va 15800-ta suv molekulasini tutgan sferik yacheyka.

Ushbu ko'rinishdagi sistemalarni talab qilingan qadam (500 qadam/1 ps) va tezlikni (24 qadam/sek) inobatga olgan holda 30 ns davomidagi dinamikasini shaxsiy kompyuterlarda hisoblash uchun qariyb 20000 soat (833 kun) vaqt ketadi. Superkompyuterlarda qariyb 1 oy mobaynida hisoblash mumkin.

MD hisoblashlarini uchun mo'ljallangan Gromacs, LAMMPS, AMBER, Monte Carlo va boshqa programmalar mavjud. HyperChem programmasida ham kichik molekular uchun MD hisoblashlarini ma'lum vaqt davomida qizdirish yoki sovitish natijasida umumiy energiya o'zgarishini hisoblash mumkin. Undan tashqari, birikmalarni suv muhitidagi (200-dan ortiq suv molekulasini tutgan to'rtburchak yacheyka) ma'lum bir vaqt oralig'idagi dinamikasini hisoblash mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

4-MA'RUZA

MO AOChK (MO JKAO) Valent elektronlar yondoshuvi.

Yarim empirik usullar

Reja:

1. Kvant-mexanikasining asosiy tenglamasi
2. Atom orbitallar va molekulyar orbitallar
3. Sleyter va Gaussian tipidagi atom orbitallar

Kvant-mexanikasining asosiy tenglamasi

Kvant-mexanika qoidalariga muvofiq, molekulaning tuziUshi va xususiyatlari

uning to'liq funksiyalari(Ψ) orqali aniqlanishi mumkin. To'liq funksiya kvant-mexanikasining asosiy tenglamasi hisoblangan Shredinger tenglamasi asosida hisoblab topilishi mumkin:

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

Ma'lumki, Shredinger tenglamasi faqat bir elektronli sistemalar (H , H_2^+ va He^+) uchun yechimga ega.

Klassik mexanikada x o'qi bo'ylab xarakadanayotgan zarrachaning umumiy energiyasi $E=T+U$ ifoda bilan topiladi. Kvant mexanikasida esa uning umumiy energiyasi gamiltonian operatori (H) yordamida aniqlanadi:

$$H = -\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right)\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) + U$$

bu yerda, U - potensial energiya bo'lib, klassik mexanika va kvant mexanikasida z zaryadli zarrachaning yadro yaqinidagi potensial energiyasi $-ze^2/r$ ifoda bilan aniqlanadi. 2-Tenglamaning birinchi qismi kinetik energiyani ifodalaydi

$$-\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right)\left(\frac{d^2}{dx^2}\right) = T$$

Elektronning harakati koordinatalar o'qining hamma qismida qaraladigan bo'lsa 2-chi ifoda quyidagi ko'rinishga keladi:

yoki

$$H = -\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right)\left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} + \frac{d^2}{dz^2}\right) + U$$

$$H = -\left(\frac{h^2}{8\pi^2 m}\right)\Delta + U$$

bu yerda Δ -Laplas operatori.

3-Tenglamaning yechimi qutbli koordinatalar sistemasida (r, θ, φ) ifodalanuvchi atom funksiyalari hisoblanadi:

$$X_{nlm} = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi) \quad (4)$$

Bu funksiyada R_{nl} - n va l kvant sonlari bilan aniqlanadigan radial qism, Y_{lm} - l va m kvant sonlari bilan aniqlanadigan burchak qism.

H atomi uchun Shredinger tenglamasining aniq yechimi asosida topilgan ayrim X_{nlm} funksiya quyida keltirilgan:

$$X_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\rho} \quad \text{1s-orbital}$$

$$\chi_{200} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} (2 - \rho) e^{-\rho/2} \quad 2s\text{-orbital}$$

$$\chi_{210} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \cos \theta \quad 2p_z\text{-orbital}$$

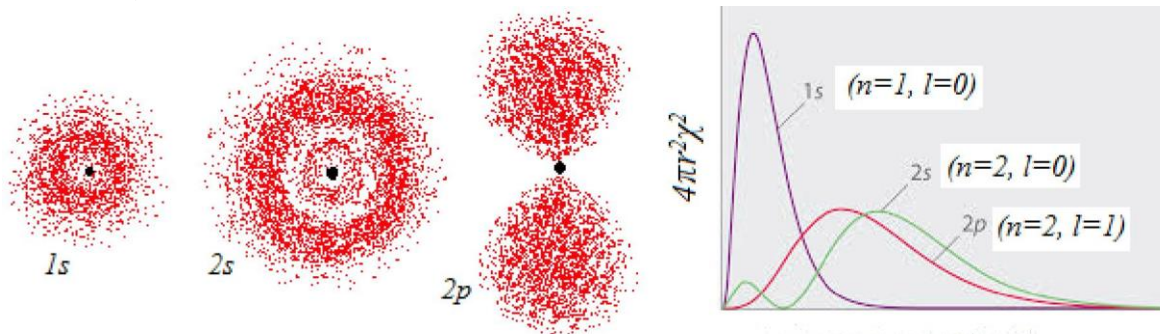
$$\chi_{211} = \frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{a_0} \right)^{3/2} \rho e^{-\rho/2} \sin \theta \cos \theta \quad 2p_x\text{-orbital,}$$

$$\rho = zr / a_0, \quad a_0 = \frac{h^2}{4\pi^2 m e^2}$$

Sferik
(sharsimon)
electron

bulutda

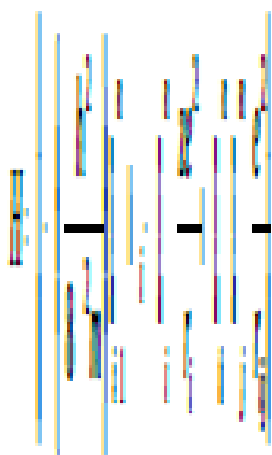
zichlik X^2 hosilasi deb olinsa, uning maydoni $4\pi r^2$ teng. Elektron zichlikning ($4\pi r^2 X^2$) yadrogacha masofaga (r) bog'liqlik grafigi tuzilganda 1s elektron uchun Bor radiusiga teng masofada ($r=0.53 \text{ \AA}$) elektron zichlik maksimal ekanligi topilgan (2s uchun $r=2.5 \text{ \AA}$).



Yadrogacha masofa (r)

-Rasm. ($4\pi r^2 X^2$) r bog'likligini ifodalovchi grafik (o'ngda).

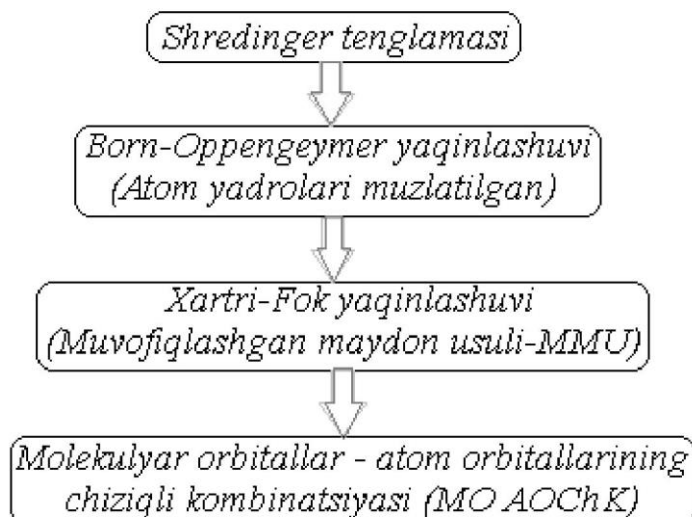
Vodorod atomining to'liqin funksiyasi ko'p elektronli sistemalarda elektronlararo tasirlashuvni ($e^2 r_{ij}$) inobatga olmaganligi uchun elektron holatini to'liq ifodalay olmaydi. Ushbu ta'sirlashuvni inobatga olgandan keyin 3-tenglamadagi energiya operatori H quyidagi ko'rinishda bo'ladi:



Bunday molekullara'ro vaqtning o'zida ko'p koordinatalariga tenglamasining aniq Shuning uchun

(5) ko'rinishdagi operatorlar ta'sirlarni baholashi uchun bir (birdan ortiq) elektronlarning bogliq va bu Shredinger yechimini cheklaydi. ham, Shredinger tenglamasi

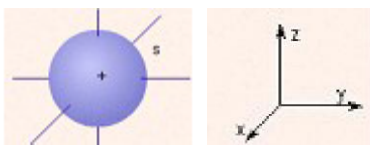
ko'p elektronli sistemalar uchun bir necha yondoshuvlar asosida yechiladi:



Atom orbitallar va molekulyar orbitallar

Maktab kimyosidan ma'lumki, yadro atrofidagi elektronning bo'lish ehtimolligi eng ko'p (90%) bo'lgan fazo orbital deyiladi.

s-orbital (bitta):



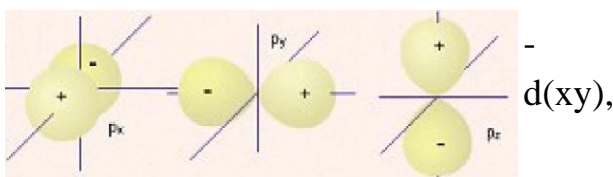
p-orbitallar uchta

- p(x), p(y), p(z):

d-orbitallar beshta

$d(z^2)$, $d(x^2-y^2)$,

$d(yz)$, $d(zx)$:



f-

orbitallar

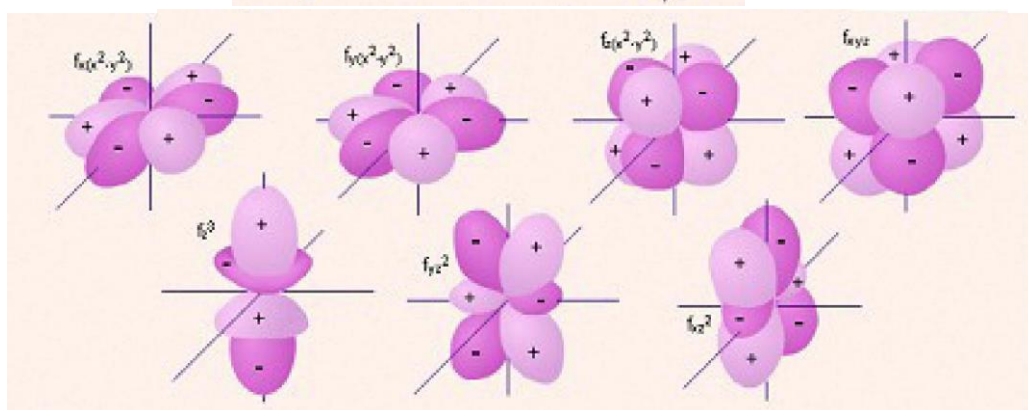
yettita - $f_x(x^2-y^2)$,

$f_y(x^2-y^2)$,

$f_z(x^2-y^2)$,

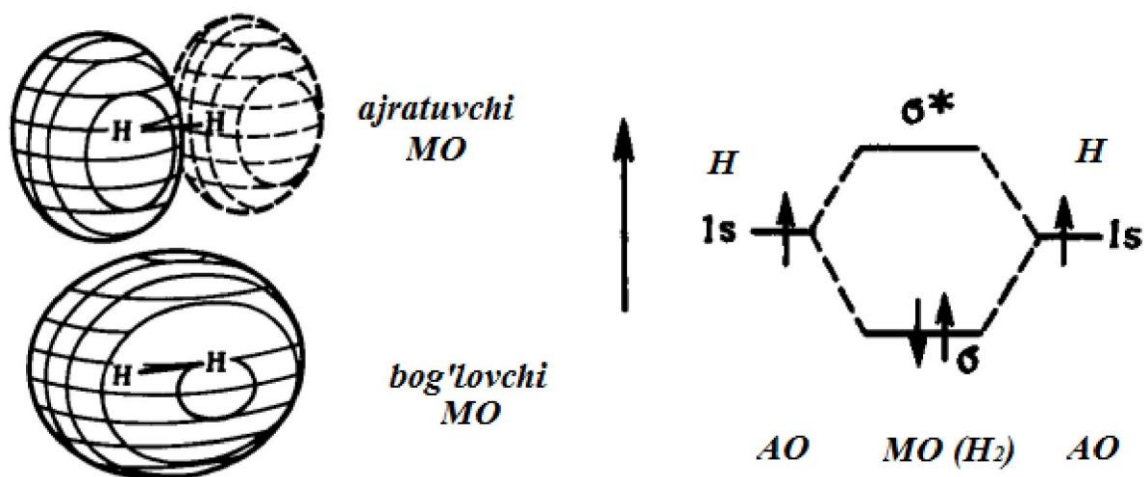
$f(xyz)$, fz^3 ,

$f(yz^2)$, $f(xz^2)$:

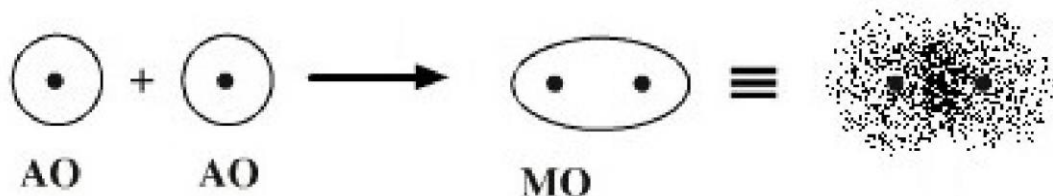


H_2 molekulasi MO-li ikkita H s-AO-larining chiziqli kombinatsiyasi ko'rinishida (MO AChK) hosil qilinadi. Molekuladagi AO-lar o'zaro qoplanishidan bog'lovch va ajratuvchi molekulyar orbitallarni (MO) hosil qiladi.

Rasm. Ikkita vodorod atomidan bog'lovchi va ajratuvchi MO-lar hosil bo'lishi



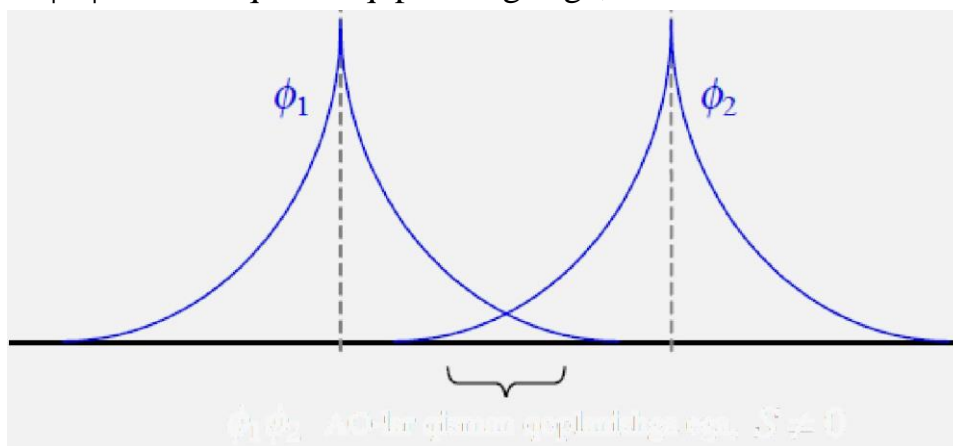
-. Ikkita vodorod atomining s-elektronlari qoplanishidan hosil bo'lgan H₂ elektron taqsimoti quyidagicha:



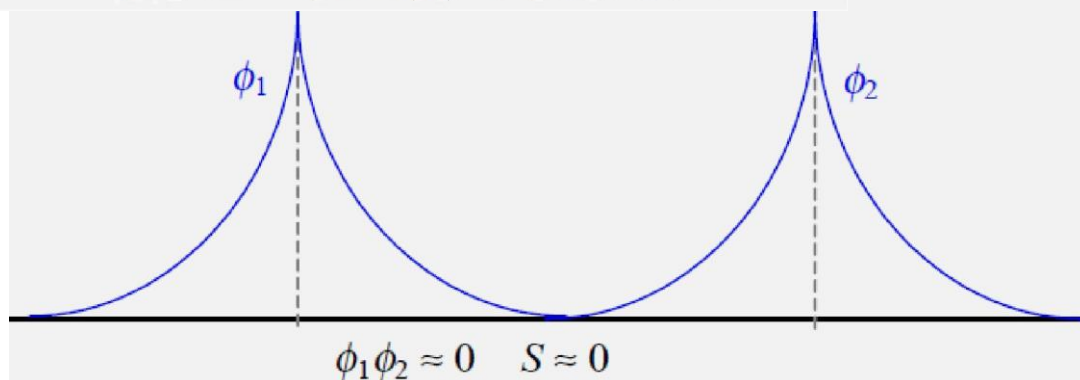
Birinchi H atomi s-elektronini ϕ_1 2-chi H atomi s-elektronini ϕ_2 funksiyalar bilan belgilab olsak AO-lar qoplanishini ifodalovchi $\phi_1\phi_2$ funksiya diagrammasi quyidagicha bo'ladi:

Φ

$\phi_1 \phi_2$ AO-lar qisman qoplanishga ega, $S \neq 0$ Hisoblashlarda AO-lar qoplanishini



ifodalovchi integral - qoplanish integrali (S). Qoplanish yuzaga kelmagan holatlarda $\phi_1 \phi_2$ funksiya nolga teng.



Sleyter va Gaussian tipidagi atom orbitallar

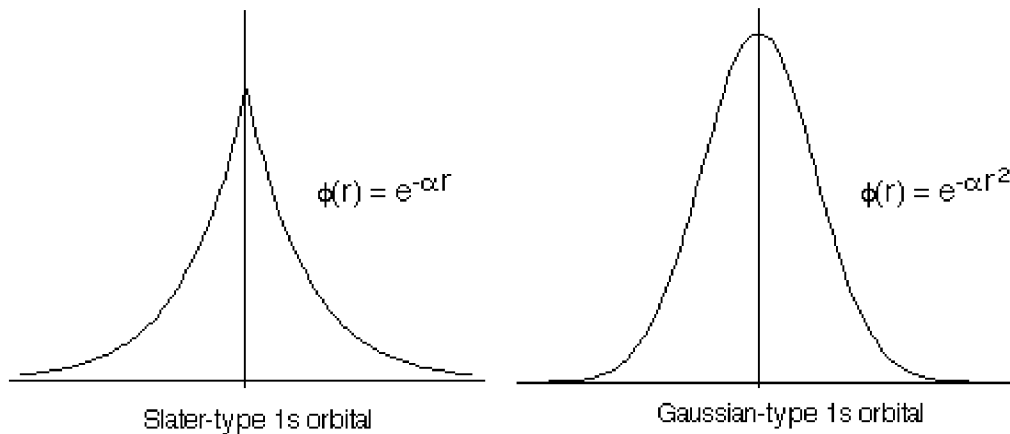
Atom funksiyalarini ifodalovchi 4-tenglamaning radial qismini aks ettiradigan tenglamani Sleyter taklif qilgan (shundan kelib chiqqan holda Sleyter tipidagi orbital –STO deyiladi):

$$\chi_{\zeta_{nl}}^{lm}(r, \theta, \varphi) = R_{\zeta_{nl}}^{STO}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

bu $R_{\zeta_{nl}}^{STO} = \frac{(2\zeta_{nl})^{3/2}}{\sqrt{(2l+1)!}} (2\zeta_{nl}r)^l \exp(-\zeta_{nl}r)$ (6) yerda, ζ - Sleyter

eksponentasi. Eksponentalar son qiymati orbital o'lchamlarini aniqlab beradi.

Hisoblashlarda tegishli integrallar Sleyter tenglamasi o'rniga Gaussian tipidagi orbitallarni (GTO) qo'llaganda ancha tez yechilishi aniqlangan:



Xartri-Fok-Rutan tenglamasi

Koordinata qismlari (MO-lar) atom orbitallarining chiziqli kombinatsiyalari (AOChK) ko'rinishidan tashkil topgan va to'lqin funksiya (Y) qiymati spin – orbitallarining antisimmetrik hosilasi ko'rinishida yozilishi asosidagi kvant-mexanik usullar keng tarqalgan. Yadroning holati muzlatilgan (Born-Oppengeymer yaqinlashuvi) deb hisoblaniladi. Kvant-kimyoviy hisoblashlar algebraik tenglamalar tizimidan tashkil topgan Xartri-Fok-Rutan tenglamasi (9) asosida hisoblab topiluvchi MO bo'yicha atom orbitallarining taqsimlanish koeffisientini topish asosida amalga oshiriladi.

$$\sum_{m_j} (F_{ij} - \epsilon_m S_{ij}) C_{mj} = 0 \quad (9),$$

Bu $F_{ij} = F_{ij}' + \sum_{k,l} P_{kl} (\langle ij | kl \rangle - \frac{1}{2} \langle ik | jl \rangle)$; yerda, S_{ij} — χ_i va χ_j atom orbitallarining

qoplanish integrali; F'_{ij} — bir elektronli gamiltonianning matritsa elementlari. U elektronlarning kinetik energiyasini va electron hamda atom yadrolari o'zaro ta'sirini inobatga oladi; P_{kl} — bog' tartibini va atom zaryadini ifodalovchi matritsa; $\langle ij|kl \rangle$ — ikkita elektronning kulon ta'sirlashuvini ifodalovchi integral:

$$\langle ij | kl \rangle = \iint x_i(\mu) (1/r_{\mu\alpha}) x_k(\alpha) x_l(\alpha) d\tau_\mu dr \quad (10).$$

Bu tenglamada integrallash dekart koordinatasining hamma qismida olib boriladi; $r_{\mu\alpha}$ — μ va α elektronlar orasidagi masofa.

Chiziqli bo'lmagan 8 tenglamalar sistemasini yechishda muvofiqlashgan maydon usuli qo'llaniladi. Unga ko'ra nolinch yondoshuv sifatida ixtiyoriy C_{mi} koeffisientlar majmuasi olinadi va u asosida F_{ij} matritsasi tuziladi. Tuzilgan matritsa asosida 8 tenglama yechilib yangi F_{ij} matritsasi koeffisientlari aniqlanadi. Bu holat F_{ij} matritsasi elementlari va C_{mi} koeffisientlari o'zgarmas bo'lib qolguncha davom etadi.

Xartri-Fok-Rutan tenglamasi yechimlariga nisbatan yondoshuvlarga bog'liq holatda kvant-kimyoviy usullar noempirik (ab initio) va yarim empirik turlarga ajratiladi.

Noempirik usullar XFR tenglamasining qat'iy yechimlariga asoslangan. Hisoblashlar davomida molekula tarkibidagi barcha elektronlar va elektronlararo o'zaro ta'sirlashish integrallari hisobga olinadi. Ab initio usulida hisoblashlarning muhim tomonlaridan biri MO-larda taqsimlanuvchi basis AO-lar turini tanlashdan iborat. Ab initio usullarining kamchiliklaridan biri ko'p atomli (30-dan ortiq atomli) birikmalarda katta basis to'plamlari tanlanganda hisoblash vaqtining sezilarli darajada ko'pligi bilan bog'liqdir.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

5-MA'RUZA

NDO va NDDO usullari

Reja:

1. Yarim empirik hisoblash usullari
2. Nolinchi darajadagi differensial qoplanish.
3. NDO (neglect differensial overlap) yondoshuvi

Yarim empirik hisoblash usullari

Yarim empirik hisoblash usullarda Xartri-Fok-Rutan tenglamasi molekula tarkibidagi elektronlarning faqat bir qismi (p-elektronlar yoki valent elektronlar) o'rtasidagi o'zaro ta'sirlashishlarni inobatga olgan holda, bir qator soddalashtirishlar asosida hisoblaniladi. Bu ko'rinishdagi soddalashtirishlarning o'rni gamiltonian tuzib chiqilayotganda tajriba ma'lumotlari asosida tanlab olingan empirik parametrlar bilan to'ldiriladi (kompensatsiyalanadi). Yarim empirik usullarda parametrlarning aniq tartibda tanlab olinishi hisobiga molekulaning ayrim fizik-kimyoviy xususiyatlarini to'g'ri ifodalashga muvafaq bo'linadi, jumladan ularning gomologik birikmalar qatori bo'yicha o'zgarishlarini aniqlash imkoni tug'iladi.

Yarim empirik usullarning rivojlanishida differensial qoplanishni umuman e'tiborga olmaydigan – nol holatdagi differensial qoplanish (ingliz tilida ZDO – Zero Differential Overlap) yaqinlashuviga asoslangan usullar katta rol o'ynadi. Bu yaqinlashuv usuli 1953 yilda bir-biridan mustaqil holatda Panzer va Parr hamda Popl tomonidan kiritilgan (shu sababli PPP usuli deb ham nomlanadi).

Nol holatdagi differensial qoplanish (NDQ) yaqinlashuvining asosiy maqsadi - hisoblashlarni sezilarli darajada soddalashtirishga qaratilgan. NDQ yaqinlashuvining ikki elektronli integralga tadbiiq etilishi alohida darajada muhim ahamiyatga ega bo'lib, bu holat barcha uchta va to'rtta markazli integrallar, va shuningdek ko'pgina bir va ikki markazli integrallarni mustasno qilishga olib keladi.

NDQ yaqinlashuviga asoslangan usullardan biri, 1965 yilda J. Popl tomonidan yaratilgan CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap -differensial qoplanishni umuman inobatga olmaslik) usuli va uning variandari -CNDO/1 va CNDO/2 hisoblanadi. Bu usulda differensial qoplanish to'liq inobatga olinmaydi.

Differensial qoplanish deganda, aniqrog'i, ϕ_μ va ϕ_ν funksiyalarning differensial qoplanishi deganda ϕ_k hamda ϕ_l funksiyalarning umumiy hajmida i elektronni toppish ehtimoliyatiga aytiladi.

CNDO usulida ϕ_μ va ϕ_ν funksiyalarning differensial qoplanishi ($S_{\mu\nu}$) kroneker delta ($\delta_{\mu\nu}$) teng deb olinadi $\delta_{ki} = \phi_k(i) \phi_l(i)$ va to'liq parametrlanadi. Shuning uchun ham ushbu usul differensial qoplanishni umuman inobatga olmaslik (CNDO) usuli deyiladi. Differensial qoplanishni inobatga olmaslik natijasida ko'pchilik ikki elektronli integrallarning hamda uch va to'rt markazli, yana shuningdek, almashinuv

integrallarining qisqarishiga (hisoblanmasligiga) olib keldi. CNDO usulida ikki elektronli integrallardan faqat kulon integrali hisoblanadi.

Kulon integrali (J) - elektronlar-yadrolar, elektronlar-elektronlar kabi elektrostatik ta'sirlarni xarakterlaydi. A atomga tegishli u electron faqat A atom ta'sir doirasida, B atomga tegishli v electron esa faqat B atom ta'sir doirasida holatida energiyani hisoblaydi.

CNDO usulida parametrlashda atomlarning ionlanish potentsiali (I) va elektronga moyillik (A) qiymadari ishlatilgan (-jadval).

CNDO usulini parametrlashda H atomi va 2-chi davr elementlari uchun ishlatilgan parametrlar

Element	$(I_s+A_s)/2$	$(I_p+A_p)/2$	$\sim> s,p$	$3^\circ A$
H	7.176	-	1.200	9
Li	3.106	1.258	0.650	9
Be	5.946	2.563	0.975	13
B	9.594	4.001	1.300	17
C	14.051	5.572	1.625	21
N	19.316	7.275	1.950	25
O	25.390	9.111	2.275	31
F	32.272	11.080	2.600	39

Ionlanish potentsiali (I) – atomdan bitta elektronni cheksiz masofaga uzoqlashtirish uchun zarur bo'lgan energiya miqdori. U tajribada fotoelektron spektroskopiya (FES) usuli yordamida aniqlanadi.

Elektronga moyillik (A) - atom (molekula) elektron biriktirganda ajralib chiqadigan energiya miqdori. U elektron transmission spektroskopiya (ETS) usuli yordamida aniqlangan.

Bu usullardan keyin differensial qoplanishni qisman inobatga oluvchi -INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap) va MINDO (Modified Intermediate Neglect of Differential Overlap) usullari yaratilgan. INDO va MINDO usullarida kulon integrallari bilan birgalikda bir markzli almashinuv integrallari ham inobatga olingan.

Almashinuv (rezonans) integrali (K). A va B yadrolar o'rtasidagi elektronlar almashinuvini ifodalaydi. Bir lahzada A atomga tegishli u electron ikkinchi lahzada B atomga tegishlidir. Bir lahzada B atomga tegishli v electron ikkinchi lahzada A atomga tegishlidir.

CNDO usulida $(uu|vv)$ kulon integrallari ϕ , va ϕ_y orbitallar (s, p_x , p_y yoki p_z) tabiatiga bog'liq bo'lmasdan faqat ular lokallashgan A va B atomlar tabiatiga $(S_A S_A | S_B S_B = P_A P_A | S_B S_B = P_A P_A | P_B P_B)$ bog'liq deb qaralgan bo'lsa INDO usulida

orbitallar tabiati inobatga olingan. Bir markazli ikki elektronli (Kulon) integrallarga s-s, s-p, p-p, p-p' (p=p_x) p'=p_y yoki p_z) va sp-sp ta'sirlashuvlar uchun eksperimental parametrlar (G, L) kiritilgan:

$$(ss|ss) = G_{ss}$$

$$(ss|pp) = G_{sp}$$

$$(pp|pp) = G_{pp}$$

$$(pp|p'p') = G_{pp'}$$

$$(sp|sp) = L_{sp}$$

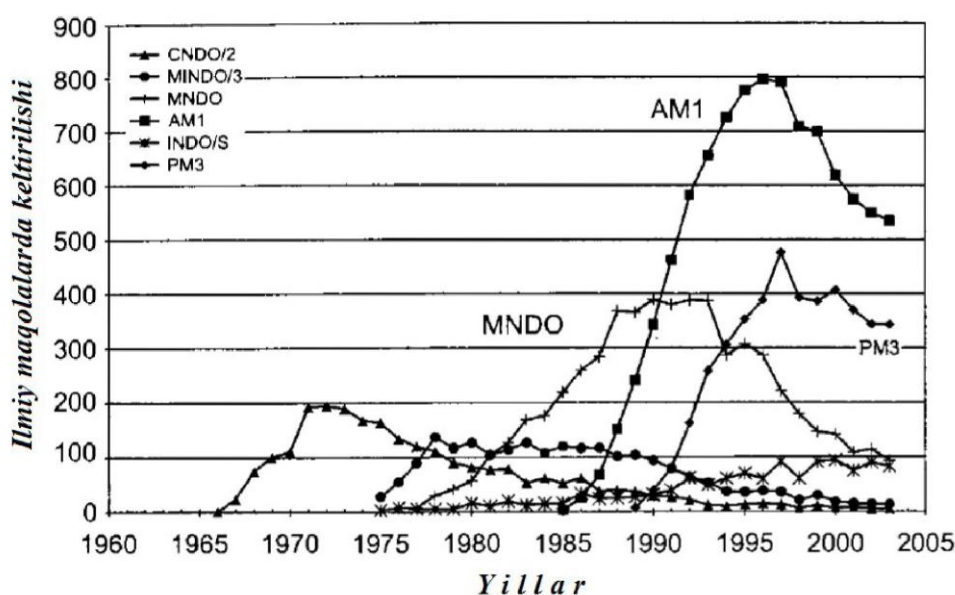
Shuni ta'kidlab o'tish lozimki, CNDO va INDO usullarining elektron (UB/ko'rinuvch) spektrlarni tavsiflash uchun yaratilgan variantlari, mos ravishda CNDO/S va INDO/S -lar hozirgacha o'z ahamiyatini yo'qotmagan.

MINDO/3 usulida ushbu o'zgarishlarga qo'shimcha sifatida yadrolar va elektronlar orasidagi ta'sirlashuvlarni to'liqroq inobatga oluvchi parametrlar kiritilgan.

Keyinchalik, NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap) yaqinlashuviga asoslangan yuqori darajada parametrlangan - MNDO, AM1 va PM3 kabi usullar yaratildi va yaqin-yaqingacha keng miqyosda foydalanilib kelindi. Bu usullar organik birikmalarning xosil bo'lish issiqligi qiymatini va geometrik ko'rsatkichlarini baholash uchun parametrlangan.

NDDO variantidagi usullarda A va B atomlar dagi orbitallar uchun INDO usulidagi 5 xil ta'sirlashuv 22-ta xilga oshirilgan va parametrlangan:

Yarim empirik usullar manbalarda keltirilishi.



Ko'pgina izlanishlar natijasida MNDO, AM1 (Austin Model 1) va PM3 (Parametric Model 3) usullarining kamchiliklari aniqlandi. Masalan, nitro- va

aminoguruhlarining atom zaryadlarini hisoblashda AM1 va PM3 usullari kamchiliklarga ega ekanligi, yana shuningdek metal komplekslarini muqobillash jarayonida RTT usuli natijalaridan ancha farq qiladigan ma'lumotlar olingan.

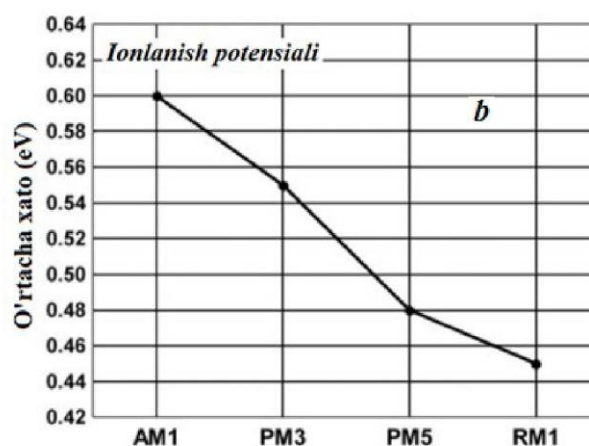
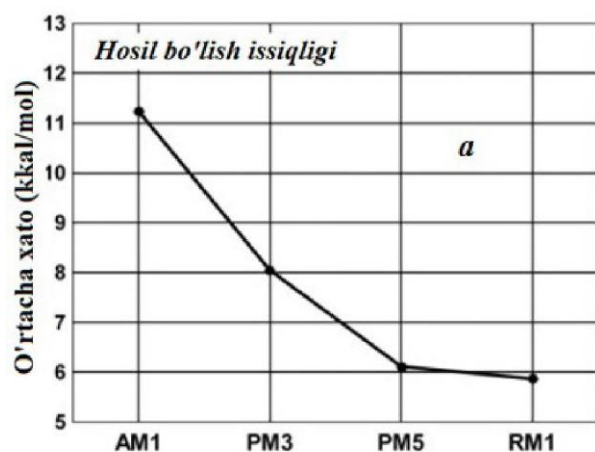
-Jadval. Yarim empirik usullarni yaratish jarayonida parametrlashda foydalanilgan birikmalar soni

Yi	Usul	Parametrlashda qatnashgan birikmalar soni	
19	MN	39	Ekspirimental kattaliklari
19	AM	200	Ekspirimental kattaliklari
19	PM	500	Ekspirimental kattaliklari
20	PM	>9000	Ekspirimental kattaliklari & ab
20	PM	>9000	Ekspirimental kattaliklari & ab

*Ekspirimental natijalar bilan birgalikda ab initio usulidan foydalanilgan. -
Jadval. Ayrim yarim empirik usullarining hosil bo'lish issiqligini hisoblashdagi xatoliklar*

Usul	AUE	RMSE	Katta
PM7	4.01	5.89	-44.4
PM6	4.42	6.16	-42.2
PM3	6.23	9.44	-135.6
AMI	10.00	14.65	200.4

*xatoliklar turi "ma'lumotlarni qayta ishlash" bo'limida tahlil qilingan.



Hosil bo'lish issiqligini (a) va ionlanish potentsialini (b) hisoblashdagi o'rtacha xatoliklar.

Keltirilgan kamchiliklar keyinchalik yaratilgan RM1 (Recife Model 1), PM6 va PM7 hisoblash usullarida bir muncha kamaytirilgan. RM1 usuli AMI usulining qayta parametrlangan usuli hisoblanadi. Uni parametrlashda quyidagi parametrlar ishlatilgan: U_{ss-s} AO uchun bir elektronli bir markazli integralni ifodalovchi kattalik; U_{pp-p} AO uchun bir elektronli bir markazli integralni ifodalovchi kattalik; p_s - s AO

uchun bir elektronli ikki markazli rezonans integralini ifodalovchi kattalik; p_p - p AO uchun bir elektronli ikki markazli rezonans integralini ifodalovchi kattalik; a_A -A atomning yadro-yadro itarishishini ifodalovchi kattalik; G_{ss} - s-s AO-larning bir-biridan itarishishini ifodalovchi bir markazli ikki elektronli integral; G_{sp} - s-p AO-larning bir-biridan itarishishini ifodalovchi bir markazli ikki elektronli integral; G_{pp} - p-p AO-larning bir-biridan itarishishini ifodalovchi bir markazli ikki elektronli integral; G_{2p} - p-p' AO-larning bir-biridan itarishishini ifodalovchi bir markazli ikki elektronli integral; H_{sp} - AO-larning almashinuvini ifodalovchi bir markazli ikki elektronli integral; o_i , b_u a -ko'paytiriluvchi koeffitsiendar ($i=1-4$); C -s tipdagi STO uchun eksponenta va \wedge -p tipdagi STO uchun eksponenta.

-Jadval.

RM1 usulida H, C, N va O atomlari uchun ishlatilgan parametrlar

Parametr	H	C	N	O
U_{ss} (eV)	-11.96067697	-51.72556032	-70.85123715	-96.94948069
U_{pp} (eV)	-	-39.40728943	-57.97730920	-77.89092978
3s (eV)	-5.76544469	-15.45932428	-20.87124548	-29.85101212
3p (eV)	-	-8.23608638	-16.67171853	-29.15101314
a_A (\AA^{-1})	3.06835947	2.79282078	2.96422542	4.17196717
G_{ss} (eV)	13.98321296	13.05312440	13.08736234	14.00242788
G_{sp} (eV)	-	11.33479389	13.21226834	14.95625043
G_{pp} (eV)	-	10.95113739	13.69924324	14.14515138
G_{p2} (eV)	-	9.72395099	11.94103953	12.70325497
H_{sp} (eV)	-	1.55215133	5.00000846	3.93217161
C(atom birlik)	1.08267366	1.85018803	2.37447159	3.17936914
$\wedge p$ (atom birlik)	-	1.76830093	1.97812569	2.55361907

PM7 usuli davriy sistemadagi 70 ta element uchun parametrlangan yagona yarim empirik hisoblash usuli sanaladi. Parametrik modellar (PM) avtorlari Jeyms Styuart (J. Stewart) tomonidan yaratilgan PM5 usuli ayrim kattaliklarni hisoblashda katta xatoliklarga olib kelishi aniqlandi. Shundan keyin u Mopac 2012 programmasiga kiritilmadi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.

3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

6 -МА'RUZA

Yarim empirik usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi

Reja:

1. Kvant kimyosi- molekulyar sistemalar qarashlarida asosiy postulat va prinsiplar.

2. Molekulyar orbitallarning sifatli nazariyasi.

3. Kvant kimyosi usullari bilan molekulyar strukturalarni ko'rsatish.

Ab initio usullari bir qancha ijobiy tomonlarga ega bo'lishi bilan birga ish uchun juda katta vaqt talab etadi. Amaliyotda faqat juda ahamiyatli masalalarni echish uchun ishlatiladi. Ularga alternativ yondashish sifatida yarimempirik yoki parametrik usullar (sinonimlar) rivojlantirilgan. Yarimempirik usullarni ishlab chiqishda juda ahamiyatli bo'lishini hisoblash operatsiyalarini qisqartirish asosiy maqsad hisoblanadi. V.16. turidagi million millon integrallar orasida deyarli barchasi nol bo'ladi. SHuning uchun u yoki bu integrallar tuplamini hisobga olmaslik taklif qilinadi. Bu CNDO – differentsial qoplashdan to'liq chetlashish, INDO – differentsial qoplashdan qisman chetlashish, MINDO – INDO modifikatsiyasi, NDDO metodlari – ikkiatomli differentsial qoplashdan chetlashish va h.q.

Juda kichik ma'nolarga ega usullar bo'lgan ko'p sondagi integrallarni hisoblash jarayonidan chetlanadi. Navbatdagi bosqich bu bir turdagi integratsiya jarayoni holatlarida tayyor javobni tegishli jadvalardan tanlash – parametrlashdir. "Parametrlar" jadvali shunday tuziladiki, energetik yoki spektral ma'lumotlarning hisoblash natijalari tajribada olingan bilan to'g'ri keladi. Bu esa usulning yarimempirik yoki parametrlangan deb nomlashga sabab bo'ldi. Bu empirik MM va ab initio usullari orasidagi kelishuvli yondashish ab initio elektron tizimlaridagi axborotni saqlagan holda ayrim holatlarda hisoblash vaqtini bir necha marta qisqartirishga imkon berdi. Hozirgi vaqtda yarimempirik hisoblashlar uchun eng taniqli va ma'lum dastur bu "MOPAC" dasturlar paketi hisoblanadi. Bu dasturlar paketi tarkibiga hozirgi paytda eng taniqli 4ta yarimempirik hisoblash usullari kiradi: MINDO/3, MNDO, AM1 va PM3. MOPAC mustaqil dastur sifatida va boshqa kuchli integratsiyalangan paketga (ChemCad, ChemOffice va h.q.) qo'shimcha dastur sifatida ishlatilishi mumkin. Ko'pchilik integratsiyalangan paketlar, masalan HyperChem yuqorida keltirilgan kvant-kimyoviy dasturlarning ancha modifikatsiyalangan turini o'z ichiga oladi va MORAS funktsiyalarining barchasini mustaqil ravishda o'zi bajaradi. Molekulyar hisoblashlar uchun zamonaviy integratsiyalangan paketlar topshiriq tuzish va unga tegishli ko'p sondagi charchatadigan harakatlarni bajarishdan operatorni ozod qiladi. Odatda tadqiqochidan grafik redaktor yordamida o'rganilayotgan molekulani tuzishni (interaktiv displeyda),

masalani echish uchun usulni tanlashni va dastur bilan mulohotda matematik hisoblashning eng zarur parametrlarni aniqlashni talab qilinadi. Zaruriy parametrlarning asosiy qismi dastur tomonidan qo'yilgan bo'ladi, lekin topshiriqni "qo'ldan" yozish uchun ham juda muhim sabablar bor.

Hulosa qilib shuni aytish mumkin:

Umuman zamonaviy molekulyar modellash bo'yicha integratsiyalangan paketlar yordamida molekula tuzilishini hisoblash usullarini kompyuterlarda o'rganish, hatto maxsus tayyorgarliksiz qiyinchilik tug'dirmaydi, ammo bunda hisoblovchiga nima va nima uchun hisoblash jarayonida sodir bo'lishi noma'lum bo'lib qoladi. Yuqorida keltirilgan axborot jarayonni echilayotgan masala talabida tushinish, nazorat va modifikatsiya qilish uchun zaruriy hisoblanadi, teskari holatda kutilmagan natijalar olinishi mumkin.

Yuqorida keltirilgan malumotlarning foydaliliga boshqa dalilni bilgan holda aniqlikga va konkret masala uchun qo'shimcha shartlar talab qiladigan usul tanlash zaruriyatining mavjudligidir. Bu shartlarning noto'g'ri tanlanishida tadqiqotchi ancha vaqtni bekor ketkazishi mumkin, xamda juda kerak bo'lmagan natijalar (yoki hatto noto'g'ri) olinishi mumkin.

Uchinchidan masalalarni echishda barcha hisoblash usullarini va ularning chegaraviy imkoniyatlarini bilish zarur, ya'ni kompyuterda masalani echish oddiy ko'rinishiga qaramasdan operator, tanlagan usulning g'oyasini bilishi zarur. Masalan, tanlangan usul ab initio yoki yarimempirik usul bo'lsa, bu holatda Rutaan tenglamasi, Xartri-Fok usuli, Born-Oppengeymer yaqinlashishi va boshqalarni bilish kerak.

Molekula parametrlarini yuqorida keltirilgan usullar yordamida hisoblash aniqligini solishtirish uchun quyidagi jadvalni V.6. keltirish mumkin.

Xar hil usullarda hisoblashning nisbiy aniqligi.

parametr	Usullar		
	empirik (MM2)	yarimempirik (PM3)	ab initio (DZ)
r (A)	0.005	0.036	0.02
φ_{val}°	1.0	3.9	5.0
Θ_{dvugr}°	5.0	14.9	
HF(kkal.mol)	0.7	7.8	12.6
D_{mom}		0.38	0.37

Xar hil usullarda hisoblash uchun talab qilinadigan nisbiy vaqtni quyidagi proportsiya bo'yicha solishtirish mumkin (propan molekulasini, xisobi T.Klark, Kompyuternaya ximiya, M., Mir, 1990.)

MM2	0.83 sek
MNDO	10.32
HF/3-21G	550
HF/6-31G(d)	4703

MM empirik usullari yordamida molekularning stereokimyosi va energetik xarakteristikalari to'g'risidagi masalalarni echish mumkin, ammo, empirik usullar ichki, molekulaning konkret geometriyasining yoki uning xossalarning shakllanish sabablari to'g'risida hech qanaqa axborot bermaydi. Bu savollarga faqat nazariy asosda, kvant kimyosi vositalari yordamida javob topish mumkin.

Molekula – moddaga xarakterli unikal xususiyatlarini namoyon qiluvchi, fazoda aniq berilgan xolatga ega, atomlarning minimal birlashmasi.

Atomlarni bir birining yonida berilgan yo'nalishda ushlab turuvchi va molekulaning xususiyatlarini aniqlovchi qonunlar qanaqa degan savol kelib chiqyapti?

Tabiiyki bu birinchi navbatda atom yadrolari va elektronlar tuplamidan tashkil topgan molekulyar tizimining umumiy energiyasi minimumining talabi. Bu energiyaga asosan Kulon elektrostatik ta'sirlashuvi va yadro va elektronlarning harakatlanishining kinetik energiyasi hissalarini qo'shadi.

Bu ta'sirlashuvlarning natijasi fazoviy barqaror strukturaning, molekulaning shakllanishiga olib keladi. Kimyoviy dasturlar uchun molekulaning elektron tuzilishining shakllanish qonuniyatlari, ayniqsa molekulyar orbitallarning shakllanishi alohida ahamiyatga ega.

Molekulalarning kimyoviy xossalari birinchi navbatda chegara molekulyar orbitallari deb nomlanuvchi: yuqori band molekulyar orbitali (YUBMO) va pastki vakant molekulyar orbitali (PVMO) bilan aniqlanadi. Bunga o'hashash masalalarni faqat kvant kimyo vositalari yordamida ko'rib chiqish mumkin.



Kvant kimyo masalalarini echish uchun birinchi navbatda manbaga xususiyatlarini ta'riflovchi y funksiyasini, va energiya operatori – Gamiltonian ni tuzish kerak. SHunday qilib olingan operator tenglamasini echishdan so'ng

$$\hat{H} * \Psi(x) = E * \Psi(x) \quad \text{V.1.}$$

ko`rilayotgan sistemaning energetik qavatlarini (Gamiltoniana E_i ning xususiy ma`nolari) va xususiy funktsiyalar uchun matematik ifodalar aniqlanadi

$$\psi_i(x) = \sum c_{ik} * \varphi_k(x) \quad \text{V.2.}$$

Ya`ni ψ_i uchun analitik ifoda qanaqadir qatoridagi $[\varphi_k]$ son koeffitsientlari yig`masi bilan almashtiriladi. Bu qator ma`lum bo`lgan to`liq jj funktsiyalarining tuplami asosida tuziladi. Zamonaviy dasturlarda bu jarayon avtomatlashtirilgan turda Ritts variatsion printsipiga muvofiq turda (asr yoki sekulyar) tenglamaning echilishi bajariladi

$$| H_{jk} - E_i * S_{jk} | = 0 \quad \text{V.3.}$$

$$\text{gde: } H_{jk} = \int \varphi_j^* H \varphi_k dx$$

$$S_{jk} = \int \varphi_j^* \varphi_k dx$$

E_i xususiy ma`nolarini olgandan so`ng V.3. dan ularga tegishli koeffitsientlar V.2. yoyish uchun aniqlanadi.

$$\sum c_{ik} * (H_{jk} - E_i * S_{jk}) = 0 \quad \text{V.4}$$

$[\varphi_k]$ koeffitsientlarini, anig`irog`i jk , xususiy funktsiyasining ichi to`plamini aniqlagandan so`ng molekulaning yoki uning qismlarining (masalan molekulyar orbitallarining) xususiyatlari V.2. dagi ψ_i bilan tasvirlanadi.

Masalan:

$$H \psi_i = E_i * \psi_i \quad \text{V.5.}$$

$\psi_i^* \psi_i - i^{\text{chi}}$ elektronning taqsimlanish geometriyasini aniqlaydi (ya`ni i -chi molekulyar orbital), E_i bo`lsa uning energiyasini, ya`ni ichi orbitaldagi elektronning ionizatsiya potentsialini aniqlaydi. Molekulaning boshqa xarakteristikalarini boshqa tegishli operatorlar yordamida aniqlanadi.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O`zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп`ютерная химия, М., Мир, 1990.

7- MA`RUZA

Noempirik usullar

Reja:

1. Hisoblashning noempirik usullari
2. Xartri-Fok-Rutan (XFR) tenglamasi.

3. Ab initio usuli

Hisoblashning noempirik usullari

Hisoblashlarning noempirik usullari Xartri-Fok-Rutan (XFR) tenglamalarini qat'iy tartibda yechishga asoslaniladi. Bunda hisoblash davomida molekula tarkibidagi barcha elektronlar va shuningdek, elektronlararo o'zaro ta'sirlashishlarda barcha integrallar hisobga olinadi. Ab initio usulida hisoblashning muhim jihatlaridan biri – bu MO tarkibiga kiruvchi AO (basis funksiya) turini tanlashdan iborat. Ab initio usulining kamchiligi–katta molekular uchun hisoblashda mashina vaqtining sezilarli darajada ko'p sarflanishi bilan bog'liqdir. Masalan, benzolni (CORE i5, 2.60 GHz kompyuterda) AM1 usulida hisoblash uchun 0.1 sekund vaqt ketsa noempirik usulning STO-3G basis to'plamida 45 marta ko'p, yani 4.5 sekund vaqt sarflanadi (-jadval).

-Jadval.

Turli xil basis to'plamlarida benzol molekulasini hisobi

Basis to'plam (Basis Set)	Basis funksiya	Energiya (a.b.)	Noldan farqli ikki elektronli integrallar soni	Vaqt (sekund)
STO-3G	36	-227.8913603543	124718	4.5
RHF/3-21G	66	-229.4194454700	1154023	7.4
RHF/6-31G	66	-230.6244748887	1271540	16.0
RHF/6-31G*	102	-230.7031370011	6469284	104.2
RHF/6-31G**	120	-230.7138600101	10039857	141.6
RHF/6-311G	96	-230.6630352856	4812232	33.4
RHF/6-311G*	132	-230.7440657275	16866492	202.6
RHF/6-311G**	150	-230.7543737320	24841342	277.2
RHF/6-311+G*	156	-230.7466296194	34940398	192.7
RHF/6-311++G**	180	-230.7567679465	58146865	293.6

AO-lar sonini N bilan belgilab olsak, uning soni ortishi bilan ikki elektronli integrallar uchun sarflanadigan vaqt N^4 .

Ab initio usuli o'zining hisoblashlarida yetarlicha darajada ko'p sondagi hisoblash resurslarini talab qiladi. Ab initio atamasi Shredinger tenglamasini yechishda molekulyar tizimning noempirik holatda qarab chiqilishini nazarda tutadi va uning asosida olingan Rutan tenglamasini yechishni amalga oshiradi. Lekin, ab initio usullarida ayrim xolatlarida ko'p elektronli tenglamalarni echishni osonlashtirish maqsadida bir qator cheklovlarga yo'l qo'yiladi. Noempirik

hisoblashlar maqbul bo'lgan holatdagi yechimga nisbatan to'liq va ravshan erishish imkonini beradi, biroq amaliyotda ulardan foydalanish cheklangan bo'lib, bu holat EHM mashina vaqti resurslari cheklanganligi bilan bog'liqdir, bu esa faqat uncha katta o'lchamga ega bo'lmagan molekular uchungina hisoblashlarni amalga oshirish imkonini beradi. Bunday holatlarda katta bazis to'plami yoki elektron korrelyasiyalardan voz kechiladi va albatta hisoblash aniqligi ancha pasayadi.

Barcha mavjud bo'lgan, noempirik usullar birinchi bosqichda MMU rejimida MO AOChK usuli bo'yicha bir elektronli (Sleyter determinantlari) hisoblashlarini amalga oshiradi. Hisoblashning noempirik usullarida, yarim empirik hisoblash usullari kabi Born – Oppengeymer yaqinlashuvidan foydalaniladi, bu yaqinlashuvga muvofiq, atom yadrosi vaqt davomida harakatsiz holatda qoladi (muzlatilgan hisoblanadi) va elektron zichlikning qayta taqsimlanishi yadroning har bir qayd qilingan holati uchun bir zumda amalga oshadi. Bu holatda elektronlarning to'lqin funksiyasi yadro harakatiga bog'liqmas deb nazarda tutadi hamda hisoblash aniqligiga sezilarli ta'sir qilmaydi.

Ko'pincha, noempirik hisoblash usullarining aniqligi qanday bazis to'plami (hisoblash usuli) tanlanishiga bog'liq. Barcha mavjud bo'lgan, zamonaviy noempirik dasturlaridagi hisoblashlarda Gauss tipidagi atom orbitallaridan foydalaniladi. Har bir ekvivalent sleyter tipidagi AO elektron zichlikning taqsimlanishi bo'yicha bir nechta Gauss funksiyalari bilan ifodalanib, bu holat bir va ikki markazli integrallarni hisoblashda mashina vaqtini tejash imkonini beradi.

Noempirik hisoblashlarda keng tarqalgan bazis to'plamlari sifatida STO-3G, 3-21G, 6-31G va boshqalarni keltirish mumkin.

Nisbatan oddiy tipdagi bazis majmuasi – bu STO-nG (Gauss tipidagi n funksiya orqali approksimatsiyalanuvchi sleyter tipidagi atom orbitali) hisoblanadi. Bu holat har bir atom orbitali Gauss tipidagi n funksiya yig'indisidan tashkil topganligini ifodalaydi, bunda Gauss funksiyalari koeffitsientlari shunday holatda tanlanadiki, ya'ni ularning chiziqli kombinatsiyasi sleyter tipidagi orbitallar tavsiflariga yaqinlashtiriladi. Garchi, dastlab STO-2G va STO-6G sinovlardan o'tkazilgan bo'lsada, bu ko'rinishdagi bazis yig'indilardan nisbatan ma'lum bo'lgani – STO3G hisoblanadi. Test sifatidagi hisoblashlarni amalga oshirishda STO-nG bazis yig'indisidan foydalanish natijalari ko'rsatishicha, $n > 3$ holatda hisoblash natijalari juda o'xshash hisoblanadi. Minimal qiymatdagi bazis yig'indilar o'z tarkibiga faqat atom orbitallarini qamrab oladi.

Atomlarning sferik simmetriyasi va molekularlarning makon bo'ylab joylashish invariantlik tavsiflari barcha uchta p – orbitallarni kamida bitta p – elektron vujudga kelishida xam tarkibga kiritishni talab qiladi. Bordan neongacha ikkinchi davr tarkibidagi elementlarning minimal qiymatdagi bazisi quyidagi ko'rinishdagi beshta orbitallarni o'z ichiga oladi: 1s, 2s, 2p_x, 2p_y va 2p_z .(-jadval).

Davriy sistema tarkibida barcha elementlarning muvofiqlikda tavsiflanishi uchun litiy va berilliy uchun garchi, litiy va berilliyning atom elektronlari 1s va 2s orbitallarda joylashgan bo'lsada, shartli ravishda STO-nG bazis tarkibga 2p – orbitallarni kiritish talab qilinadi.

Jadval.

Hisoblash usullarida xar bitta atomga mos keladigan bazis funksiyalar soni

Atom	STO-3G	3-21G	3-21G*	3-21+G	6-31G*	6-31G**	6-311G*
H	1	2	2	2	2	5	3
Li-Ne	5	9	9	13	15	15	18
Na-Ar	9	13	18	17	19	19	22

Bitta tipdagi (1s, 2s va hakoza) Sleyter orbitallari uchun davriy tizimda hoxlagan qatorlar uchun approksiyalanuvchi Gauss tipidagi funksiyalar n chiziqli kombinatsiyasi faqatgina sleyter eksponenta qiymati bo'yicha aniqlanadi, bu qiymat masshtabni kengaytiruvchi ko'paytma rolini bajaradi. Gauss funksiyalari n boshlang'ich kombinatsiyalari eksponensial ko'paytmaga ega bo'lgan sleyter AO ko'rinishga ega hisoblanadi (Sleyter eksponentasi deb nomlanib, ζ bilan belgilanadi) va birga teng hisoblanadi. ζ qiymatning 1 dan farqli bo'lishida, ζ qiymat uchun STO-nG yig'indisini xosil qilishda boshlang'ich kombinatsiyalar tarkibida Gauss funksiyalari eksponentalarini ko'paytirish talab qilinadi.

Odatda, har bir element uchun optimal holatdagi ζ qiymati – ya'ni, sleyter eksponenta qiymati asosiy holatda atom energiyasini to'liq minimallashtirish yo'li bilan topiladi, bunda navbatdagi bosqichda kichik o'lchamdagi molekulalar uchun hisoblash natijalari bo'yicha tuzatishlar kiritiladi. Sleyter eksponentalar son qiymati orbital o'lchamlarini aniqlab beradi. Ushbu holat bilan masshtablarni kengaytirish ko'paytmasi izohlanadi. ζ qiymati kamayishi bilan orbitallarning diffuz tavsiflari va energiyasi qiymati ortadi. Eksponentaning yuqori qiymatga ega bo'lishi orbitallarning yig'indi ko'rinishga egaligi va ularning yadroga yaqin joylashganligini ko'rsatib beradi. Har qanday minimal bazisning kamchiligi – molekulaning tuzilishga bog'liq holatda orbitallarning o'lchamlari o'zgarishlarini aniqlash imkoni mavjud emasligi bilan belgilanadi. Hisoblashlarda orbitalning minimal bazisi kengaytirilishi yoki siqilishi mumkin emas, bunda orbital eksponenta qiymati qat'iy belgilangan holatda kuzatiladi. Bu holatdagi minimal bazisda kuzatiluvchi kamchilik odatda, neytral molekulalar va ionlar bo'yicha solishtirma hisoblashlarni amalga oshirish natijalari yomonlashishiga olib keladi. Ushbu ko'rinishdagi manzara kuchli darajada anizotrop xususiyatga ega bo'lgan molekulalarda qayd qilinadi. Masalan, suv molekulasida bog'lanmagan elektron juft orbitali OH bog' orbitallariga nisbatan

ko'proq darajada diffuz xususiyatga ega bo'lishi kerak. Barcha tipdagi MO uchun minimal bazisda bir xil AO to'plami qo'llaniladi.

Minimal STO-3G bazis to'plami vodorod atomida (1s) bitta bazis funksiyani (atom orbitali), ikkinchi davrga kiruvchi – Li dan Ne gacha (1s, 2s, 2p_x, 2p_y va 2p_z) atomlarda beshta funksiyani va uchinchi davrdagi Na dan Ar gacha (1s, 2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z, 3s, 3p_x, 3p_y va 3p_z) atomlarda to'qqizta funksiyani o'z ichiga oladi. U 1970 – yillarda zamonaviy tezkorlikdagi, xotira hajmi katta bo'lgan EHM lar paydo bo'lgunga qadar keng tarqalgan. STO-3G bazisi ma'lum bir yillar davomida noempirik optimallashtirishda standart sifatida qayd qilingan, biroq unda bir qator kamchiliklar mavjud. STO-3G bazisining ko'p sonidagi kamchiliklari uning kichik o'lchamga egaligi va oddiyliigi bilan belgilanadi, bu ko'rinishdagi kamchiliklar nisbatan keng ko'lamdagi valent elektronlari ajratilgan (split-valence) bazislardan foydalanishda bartaraf qilinadi, hozirgi vaqtda STO-3G bazisi amaliyotda foydalanishdan deyarli chiqarib tashlangan.

Valent elektronlari ajratilgan (bo'lingan) va biekspansional bazis to'plamlari: 3-21G bazisi va 6-31G bazislari.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

8- MA'RUZA

Minimal, kichik, o'rta va katta basis to'plamlar

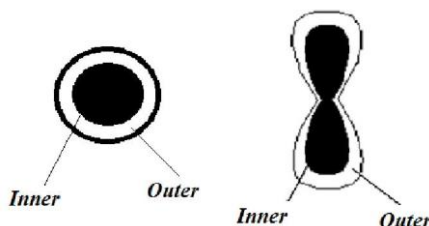
Reja:

1. Bazis to'plamlarining MO-lar qurilishiga ta'siri
2. Noempirik hisoblash usullari

Nisbatan tezkor kompyuterlarning yaratilishi STO-3G usulining 3-21G bazis to'plami tomonidan siqib chiqarilishiga sabab bo'ldi va ancha yillar birikmalarning geometriyalarni muqobillashda keng qo'llanildi. 3-21G bazis to'plamida ichki qavat orbitallarni tavsiflashda uchta, valent orbitallarni tavsiflash uchun – ikkita va bitta Gauss funksiyalaridan foydalaniladi. Zamonaviy, noempirik dasturlarda 3-21G bazis to'plami vodoroddan xlogacha bo'lgan elementlar uchun mavjud bo'lib, bunda nisbatan katta hajmdagi bazis yig'indilari turli xil dasturlar asosida Mendeleev davriy jadvali tarkibidagi barcha elementlar uchun optimallashtirilmagan. Litiy va berilliy uchun bazis yig'indilarini optimallashtirishda valent orbitallarning siqilishi bilan bog'liq muammo yuzaga keladi. Valent orbitallarning siqilishi ichki elektronlarning tavsiflanishini yaxshilaydi, biroq bu holat valent orbitallarning sifati pasayishi

hisobiga amalga oshiriladi. Bu holatda valent orbitallar siqilishi bazis orbitallarni tavsiflashda primitiv Gauss funksiyalar soni beshga teng yoki undan kam bo'lgan vaziyatlarda sezilarli holatda qayd qilinadi.

Bu kamchiliklar 6-31G bazis to'plamida tuzatilgan. AO egiluvchanligini oshirishga valent elektronlari ajratilgan va biekspensial (double zeta) bazis yig'indilaridan foydalanish orqali erishiladi. Ushbu bazis to'plamlarida AO ikkita qismdan–nisbatan yig'ilgan (kompakt) ko'rinishdagi, ichki va diffuzion tavsifga ega bo'lgan – tashqi qismlardan tashkil topadi



s va p-elektronlarning ichki (inner) va tashqi (outer) qismlarga bo'linishi.

MMU rejimida MO tuzib chiqilishida ushbu har ikkala tip orbitallar o'zaro bir – biriga bog'liq bo'lmagan holatda turli xilda variatsiyalanadi. Ushbu ko'rinishda, molekulyar orbita tuzilishga o'z hissasini qo'shuvchi AO o'lchami yig'ilgan ko'rinishdagi va diffuzion tavsiflarga ega bo'lgan tashkil qiluvchilar bo'yicha berilgan qiymatlar doirasida o'zgarishi mumkin. Valent elektronlari ajralgan va biekspensial bazis yig'indisida nomidan ko'rinib turganidek, yig'ilgan ko'rinishdagi va diffuz holatdagi tarkibiy tashkilovchilardan faqat valent orbitallar bo'linishi amalga oshadi. Biekspensial bazisda valent va shuningdek, ichki qavat orbitallar ham qismlarga ajratiladi, ya'ni ikkita turli xillikdagi eksponentialarga ega hisoblanadi. Valent elektronlari ajratilgan bazis yig'indilari orasida 6-31G bazisi nisbatan keng tarqalgan. Bunda 6-31G ko'rinishdagi qisqartma ichki qavat orbitalining oltita Gauss funksiyalaridan tashkil topganligi va valent orbitallar ikkita tarkibiy tashkilovchilarga – ya'ni, uchta Gauss funksiyalardan iborat bo'lgan yig'ilgan ko'rinishdagi va bitta Gauss funksiyadan iborat bo'lgan – diffuz holatdagi funksiyalardan tashkil topganligini ifodalayli.

Qutblanuvchi (Polarizatsion) funksiyalar. Barcha og'ir metallar atomlari uchun 6-31G bazisda d – orbitallar qo'shilishi qarab chiqilgan. Organik molekular tarkibida d – orbitallar polarizatsiyalar funksiyasini bajaradi. s – va p – orbitallarning siljishida r – orbital atom yadrosi markazidan siljishi qayd qilinadi. Nisbatan past qiymatdagi simmetriyaga ega bo'lgan d – orbitallar siljishida, p – orbitallar bilan birgalikda atomdan bitta tomonga yo'nalishda orbitallarda deformatsiya yuzaga kelishiga olib keladi. Bu ko'rinishdagi korreksiya kichik sikllarda va uchinchi davr tarkibidagi elementlar birikmalari bo'yicha hisoblashlarni amalga oshirishda muhim rol o'ynaydi.

Tarkibida polarizatsion funksiyaga ega bo'lgan standart holatdagi bazis

yig'indilar orasida $6-31G^*$ polyarizatsion bazis yig'indisi keng tarqalgan. Uning tarkibida sinch holatidagi orbitallarni tavsiflash uchun oltida primitiv Gauss funksiyalaridan foydalanilib, bunda valent holatdagi s – va p – orbitallar uchun uchta va bitta funksiya, shuningdek oltita d – funksiyalar yig'indisi mavjud hisoblanadi (yulduzcha bilan ko'rsatilgan). Oltita d – funksiyalar beshta d – va bitta s – orbitallarga ekvivalent holatlar va integrallarni hisoblash uchun nisbatan qulay hisoblanadi.

Odatda, bazis yig'indisini yaxshilashda navbatdagi qadam tarkibga barcha og'ir atomlar uchun d – orbitallarni kiritishdan tashkil topadi. O'zgaruvchan valentlikka ega bo'lgan elementlar birikmalarida odatdagi organik molekular tarkibida mavjud bo'lgan valent d – orbitallarga nisbatan boshqacha qiymat kuzatiladi. SHuningdek, noempirik dasturlar tarkibida odatdagi beshta d – orbitallar qo'llanilishi imkoniyati qarab chiqiladi.

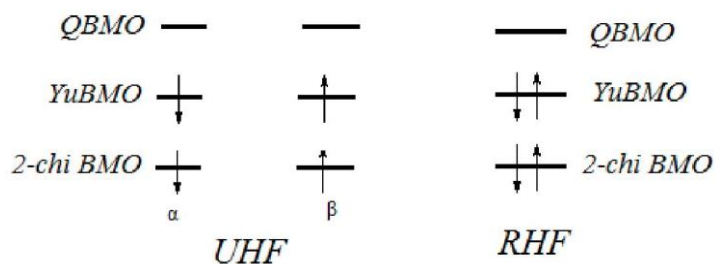
$6-31G^{**}$ bazisda barcha vodorod atomlarida p – funksiyalarning qo'shilishi. Bazis to'plamning egiluvchanlik xususiyatini oshirishda navbatdagi qadam – vodorod atomlari uchun p – funksiyani kiritishdan tashkil topadi, bu yulduzcha bilan belgilanadi, masalan – $6-31G^{**}$ ko'rinishida belgilanadi, p – orbitallar vodorod tarkibida valent holatdagi s – orbitallar kabi funksiya bajaradi, va valent holatdagi p – orbitallar uchun d – orbitallar singari funksiyaga ega hisoblanadi. Valent orbitallar uch marotabalik parchalinishiga ega bo'lgan, nisbatan yanada egiluvchanlikka ega bo'lgan holat – $6-311G^*$ va o'z tarkibida biekspensial funksiyaga ega bo'lgan d – funksiyadan tashkil topadi.

Anionlar yoki bog'lanmagan elektron juftliklarini nisbatan aniqroq holatda tavsiflashni talab qiluvchi, molekularlarda hisoblashlarni amalga oshirish uchun noempirik dasturlar tarkibida maxsus diffuzion s – va p – orbitallar to'plamiga ega bazis yig'indilarini tarkibga kiritish imkoniyati qarab chiqiladi, bunda ularning eksponenta qiymatlari 0,1 dan 0,01 gachani tashkil qiladi. Bu ko'rinishdagi bazislar qo'shimcha diffuzion funksiyalarga ega bazislar deb nomlanadi. Bazisga qo'shimcha funksiyalarning kiritilishi «+» simvol bilan ifodalanadi, masalan – $6-31+G^*$. $6-31+G^*$ qisqartmasi shuni anglatadiki, ya'ni diffuzion tavsifga ega bo'lgan s – va p – funksiyalardan tashqari, og'ir atomlarda bazis tarkibga vodorod atomi bo'yicha s – diffuzion funksiyasi xam kiritiladi. Diffuz funksiyalar yadrodan katta uzoqlik masofasida joylashgan elektronlarni nisbatan yaxshiroq tavsiflash imkoninii beradi, bu esa ularning anionlar bo'yicha hisoblashlari davomida talab qilinadi. $3-21+G$ bazis anionlarni hisoblash uchun standart holat hisoblanadi, $3-21$ bazis esa neytral molekular va kationlarni hisoblashda qulay hisoblanadi.

Cheklanmagan (UHF) va cheklangan (RHF) Xartri-Fok.

Spin bo'yicha cheklanmagan XF (UHF) usulida MO-lar α va β spin MO-larga ajratiladi. Spin bo'yicha cheklangan XF (RHF) usulida esa har bitta MO-da

antiparallel spinli 2-ta electron bor deb qaraladi:



UHF usulida hisoblashlarda bitta geometrik konfiguratsiya uchun geometrik tavsiflardan foydalanish bilan birgalikda 3-21G bazisida optimallashtirish orqali 6-31G bilan ishlash UHF/6-31G**/3-21G ko‘rinishida ifodalanadi. Agar, geometriya to‘liq holatda 6-31G* bazisida optimalashtirilgan bo‘lsa, u holda hisoblashlar UHF/6-31G**/6-31G* ko‘rinishida ifodalanadi.

Elektron korrelyasiyalar. Molekulalarning XFR usulida hisoblangan energiyasi xamisha tajribada aniqlanganidan kichik bo‘ladi. Bunga ayrim ikki atomli birikmalarning dissotsialanish energiyasini misol qilishimiz mumkin.

jadval.

Ayrim ikki atomli molekulalarning dissotsialanish energiyasi

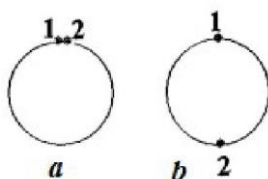
Molekula	Dissotsialanish energiyasi (E_{diss}), eV	
	Nazariy	Eksperiment
H ₂	2.65	4.75
N ₂	1.19	9.90
F ₂	-0.30	1.68

Jadvaldan ko‘rinib turibdiki, nazariy hisoblangan E^s , tajribada aniqlanganidan kichik. Xatto, F₂ molekulasida uchun olingan natija tajriba bilan mos kelmaydi. XFR hisobiga ko‘ra F₂ molekulasida barqaror bo‘lmasligi kerak.

Yuqorida ko‘rsatilgan XFR usulidagi kamchiliklar haqiqiy kulon ta’sirlashuv potentsiali (I) o‘rniga o‘rtalashgan potentsialning (II) olinishi bilan bog‘liq.

$$\sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \text{(I)}, \quad \sum_{i,j} (2J_{ij} - K_{ij}) = \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad \text{(II)}$$

Buday almashtirish natijasida, a va b holatdagi elektronlar holati XFR tenglamasida ekvivalentdir. Ammo, bir maydonda harakat qilayotgan elektronlarning kulon itarishish ta’sirilashuviga ko‘ra b holat a holatga nisbatan afzalroqdir. Demak, XFR tenglamasida inobatga olinmagan elektronlarning kulon korrelyasiyasi mavjud.



-Rasm.

Energiyaning aniq norelyativistik va XFR usulidagi yechimi orasidagi farq korrelyatsion energiya deyiladi.

$$E_{kor} = E_{aniq} - E_{XF}$$

Molekulaning aniq norelyativistik energiyasi Shredinger tenglamasini relyativistik qismlarni (spin-orbital, spin-spin va boshqa ta'sirlashuvlarni) inobatga olmagan gamiltonian yordamida yechish natijasida aniqlanadi. Ayrim atom va molekular uchun aniqlangan korrelyatsion energiyalar -jadvalda keltirilgan.

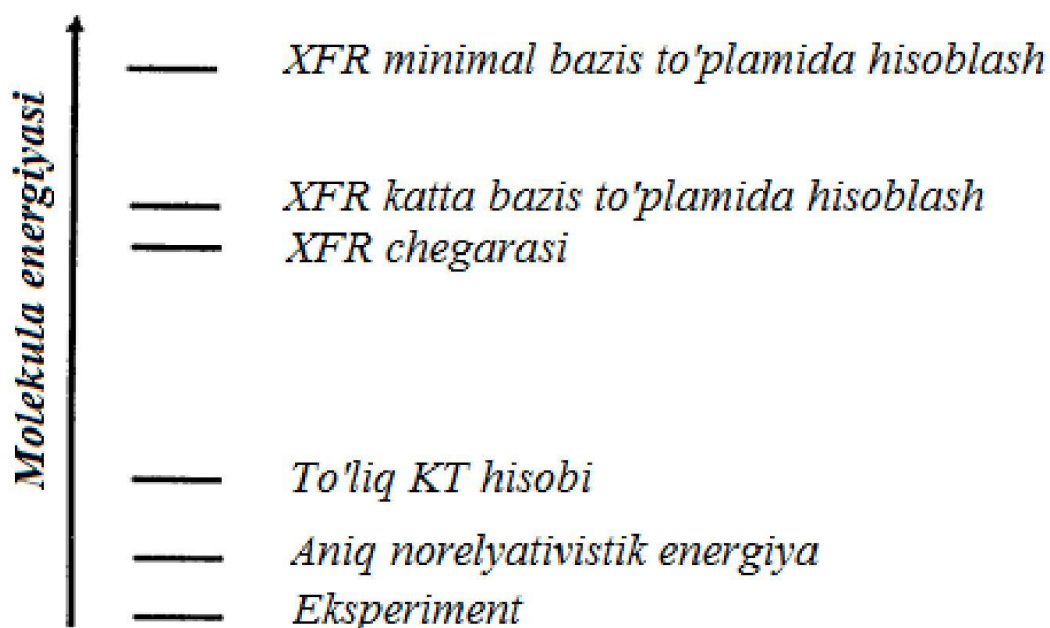
-Jadval.

Korrelyatsion energiya (E_{kor} , eV)

Sistema	E_{kor} , eV	Sistema	E_{kor} , eV
H-	-1.08	CH ₄	-8.0378
He	-1.1461	NH ₃	-9.8255
Li	-1.2319	H ₂ O	-9.7840
LiH	-1.96	H ₂ CO	-16.2661
H ₂	-1.06	Benzol	-46.7957

Hisoblashlarda elektronlarning mutonosib harakatini ifodalovchi korrelyatsion energiyalar konfiguratsion ta'sirlashuv (KT) va Myuller Plessetning 1-chi, 2-chi, 3-chi va 4-chi tartibli g'alayonlanish nazariyalaridan birini qo'llagan holda qisman inobatga olinishi mumkin.

XFR usulida to'liq KT (full configuration interaction – FULL CI) murakkab hisoblash usullarida electron korrelyatsiyalarni inobatga olingan holda hisoblash aniqligi XFR chegarasidan o'tishi mumkin (-Rasm). Lekin, bu hisoblashlar ko'p atomli sistemalar uchun kompyuter xotirasi bilan bog'liq bo'lgan Van Flek katastrofasi deb nomlanuvchi muammoni yuzaga keltiradi.



. XFR usullarining aniqlik darajasini ko'rsatuvchi diagramma.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

9- MA'RUZA

Noempirik usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi

Reja:

1.Hisoblashning empirikusullari.

2.Empirik uslublar bilan ishlashning asosiy qoidalari

Empirik hisoblash usullarida molekula (sistema) zaryadi ahamiyat kasb qilmaydi. Ammo, yarim empirik va noempirik, yana shuningdek DFT hisoblashlarida sistema zaryadi va spin multiplieti to'g'ri kiritilmasa xato hisoblashlar amalga oshirilishi mumkin.

Sistema zaryadi deganda, ionlarning kation yoki anion ekanligini ifodalash. Masalan, ammoniy kationi "+1", sulfat kislota anioni (SO_4^{-2}) "-2" bilan belgilanadi (-jadval).

Ionlarning zaryadini ifodalash

Ion	Zaryad	Ion	Zaryad
NH_4^+	+1	OH^-	-1
NH_3	0	Hal^-	-1
SO_4^{2-}	-2	C_2H_5^+	+1
HSO_4^-	-1	H_2PO_4^-	-1
CH_3COO^-	-1	PO_4^{3-}	-3

Neytral molekularning zaryadi nolga teng bo'lib, ularning har bitta MO-larida 2-tadan (u) elektron bo'ladi va umumiy elektronlar soni juft bo'ladi. Bunday sistemaning spin multiplidigi (SM) birga teng bo'ladi. Birikmada bitta juftlashmagan elektron bo'lsa $\text{SM}=2$, ya'ni dublet bo'ladi.

H_3C^- (metil radikali) $\text{SM}=2$, $\text{CHARGE}=0$.

H_3C^- (metil anioni) $\text{SM}=1$, $\text{CHARGE}=-1$

H_3C^+ (metil kationi) $\text{SM}=1$, $\text{CHARGE}=1$.

Birikmalarning SM qiymati quyidagi ifoda bilan aniqlanadi:

$$\text{SM} = 2S + 1,$$

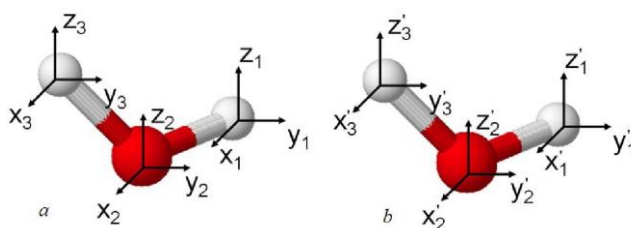
bu yerda S- birikmaning to'liq spin soni soni. Sistemada elektronlar soni toq bo'lsa, ya'ni bitta juftlashmagan electron bo'lsa $S=1/2$ va $\text{SM}=2-1/2+1=2$ bo'ladi. Reaksiyalarni modellashtirish jarayonida, masalan $\text{C}_2\text{H}_5\text{Cl} + \text{OH}^-$ sistemaning zaryadi

CHARGE=0 va SM=1. $\text{CH}_2=\text{CH}_2 + \text{Br}^+$ sistemaning zaryadi CHARGE=1 va SM=1.

Geometriyani muqobillash algoritmlari

Hisoblashlarni berilgan geometriya uchun yoki muqobillash asosida topilgan geometriya uchun bajarish mumkin. RTT asosida olingan geometriya berilgan geometriya vazifasini o'tashi mumkin. Berilgan geometriya uchun o'tqazilgan hisoblashlar -"Single point calculations" (berilgan nuqtadagi hisoblashlar) deyiladi. Bunday deyilishiga sabab berilgan geometriyadagi har bir atom koordinatalari kiritilgan nuqtadan o'zgartirilmaydi.

Muqobillash jarayonida oxirgi geometriyada atom koordinatalari dasdabkisidan farq qiladi.



-Rasm. Suv molekulasini atomlarining dastlabki (a) va muqobillashdan keyingi koordinatalari.

Suv molekulasini Mopac va Firefly programmalarida muqobillash uchun input fayllar tayyorlandi:

Mopac input fayl

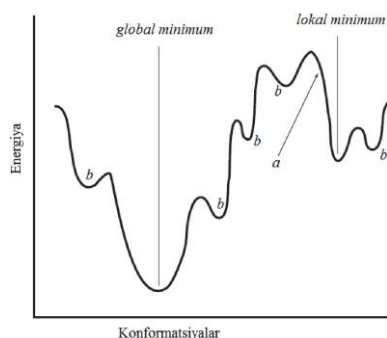
ATOM	X	Y	Z
O	.0000	.0000	.0000
H	.9600	.0000	.0000
H	-.3200	.9051	.0000

Firefly input fayl

ATOM	X	Y	Z
O	0.0000000000	0.0000000000	0.0000000000
H	1.9086232476	0.0000000000	0.0000000000
H	-0.4785258632	1.8476625770	0.0000000000

Ikkala programmada ham muqobillash jarayonida atom koordinatalari z-o'qiga nisbatan o'zgartirildi.

Muqobillashning asosiy maqsadi potensial energetik sathda (PES) geometriyaning eng minimal (global minimum) holatini topishdan iborat. Hisoblash a nuqtadan boshlansa muqobillash lokal minimum holatida to'xtaydi. Undan tashqari yashirin minimum -b nuqtalarda ham to'xtashi mumkin. Suning uchun hisoblashlarda muqobillash algoritmini va muqobillash uchun RMS gradient normasi (GNorm) kattaligini tanlash muhim ahamiyat kasb qiladi.

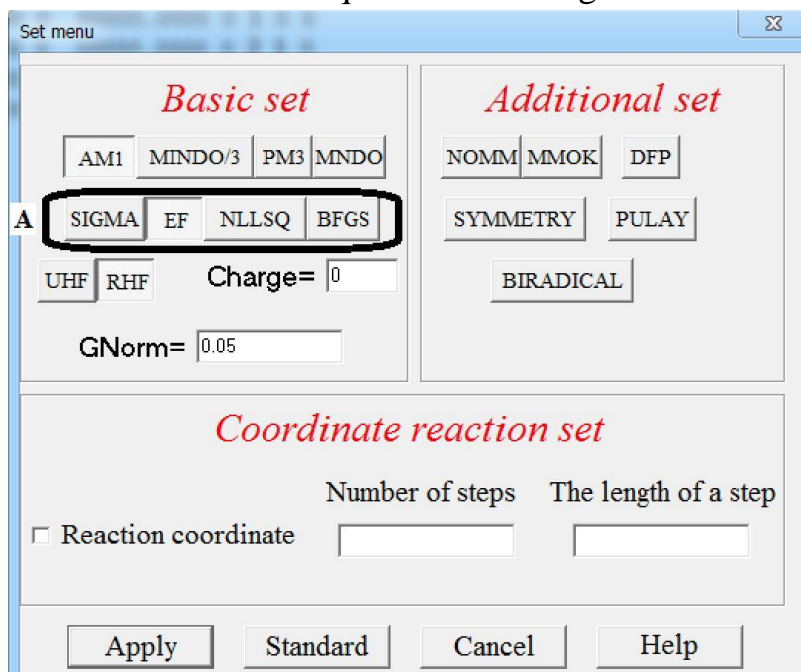


. Potensial energetik sath.

Kompyuter kimyosida “kvazi-Nyuton”, “GDIIS”, “conjugate gradient” va boshqa usullarga asoslangan muqobillash algoritmlari mavjud. Har bir hisoblash majmuasida maqbul topilgan, qo’llash tavsiya qilinadigan algoritmlar mavjud.

Hisoblash programmalaridagi mavjud bo’lgan muqobillash algoritmlari va jarayonlariga to’xtalamiz.

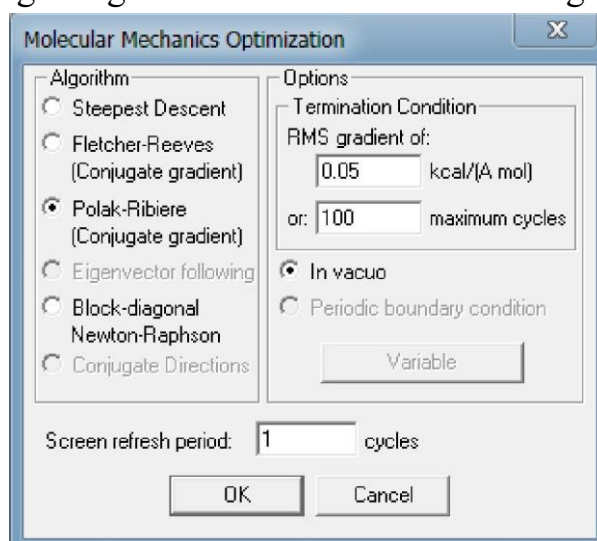
WinMopac 7.21 programmasida A deb belgilangan qismidan hisoblashlar uchun algoritmlar tanlash mumkin. Undan tashqari DFP ham algoritm hisoblanadi.



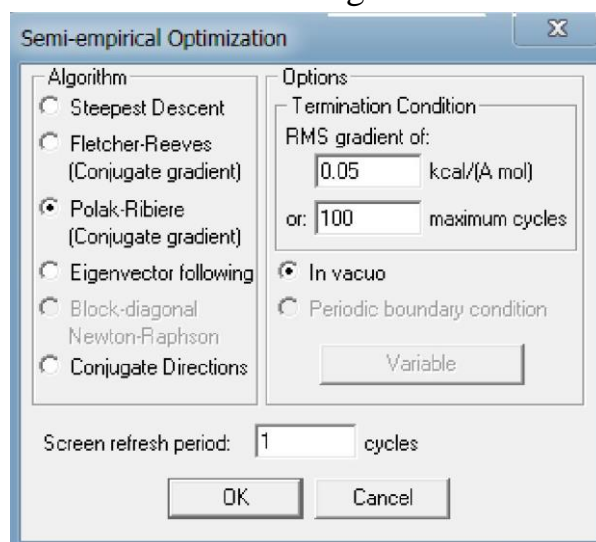
Mopac qo’llanmasidan yoki sichqonchani A qismga olib borish orqali quyidagilarni olish mumkin: SIGMA-Minimize gradients using SIGMA (SIGMA yordamida gradientni qisqartirish); EF- use EF routine for minimum search (minimum holatni topish uchun EF algoritmini qo’llash); NLLSQ - Minimize gradients using NLLSQ (NLLSQ yordamida gradientni qisqartirish); BFGS - use BFGS routine for minimum search (minimum holatni topish uchun BFGS algoritmini qo’llash). SIGMA - A. Komornicki va J.W. McIver tomonidan (1971 yilda) taklif qilingan muqobillash algoritmi. EF 1986 yilda J. Baker tomonidan o’tish holatini izlash algoritmi sifatida taklif qilingan. NLLSQ (Non-Linear Least Squares-Chiziqli

bo'lmagan eng kichik kvadrat) 1972 yilda R. H. Bartels tomonidan taklif qilingan algoritmi. BFGS algoritmi uni yaratgan olimlar (Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno) nomiga qo'yilgan. Bu algoritmi 1970 yilda yaratilgan. DFP (Davidon–Fletcher–Powell) – 1959-1963 yillarda [W. C. Davidon](#), [R. Fletcher](#) va [M.J.D. Powell](#) tomonidan taklif qilingan kvazinyuton usuliga asoslangan muqobillash algoritmi. Qolgan algoritmlar ham kvazinyuton usuliga asoslangan. WinMopac 7.21 usulida kalit so'zlar qatorida algoritmi ko'rsatilmagan holatlarda, yani avtomatik muqobillash usuli sifatida BFGS tanlangan. Mopac 2012 dasturida esa EF algoritmi tanlangan.

Hyperchem programmasida MM, yarim empirik va noempirik usullarda muqobillash uchun 6-ta algoritmi kiritilgan. Quyidagi rasmda MM usulida muqobillash mumkin bo'lgan algoritmlar faol holatda ko'rsatilgan.



Yarim empirik va noempirik muqobillash uchun ko'zda tutilgan algoritmlar quyidagi rasmda keltirilgan:



Hyperchem yaratuvchilari tomonidan Polak-Ribiere algoritmi ushbu programmalar majmuasidagi eng maqbul algoritmi sifatida e'tirof etilgan. HyperChem programmasida muqobillash aniqligi RMS (Root Mean Square – o'rtacha kvadratik farq) gradientiga bog'liq. RMS qanchalik kichik bo'lsa hisoblash

aniqligi shuncha yuqori bo'ladi. Odatda, $RMS=0.01$ olinadi. Sikllar soni muvofiqlash siklining sonini ifodalaydi. Muqobillashning oxiriga yetmasdan to'xtab qolmasligi uchun sikl sonini ko'proq (masalan, 1000) k'orsatgan maqsadga muvofiqdir.

Firefly/Gamess majmuasida NR (Nyuton-Rafson), RFO, QA, GDIIS, SCHLEGEL va BFGS muqobillash algoritmlari mavjud. Muqobillash `RUNTYP=OPTIMIZE` kalit so'zi yordamida olib boriladi. Firefly programmasida RMS gradient 10^{-4} qilib kiritilgan. Uni `OPTTOL` kalit so'ziga 10^{-5} yoki 10^{-6} qilib kichiklashtirish (`OPTTOL=0.000001`) mumkin.

Gaussian programmasida geometriyani muqobillash "opt" kalit so'zi vositasida bajariladi. Ushbu programmada FP (Fletcher-Powell), EF, Mataga-Serjant (Murtagh-Sargent), Berny va NR (Nyuton-Rafson) algoritmlari mavjud. Gaussianda RMS gradient 10^{-5} va undan kichik qilib belgilanadi.

HyperChem programmasida muqobillashning ijobiy natija bilan tugaganligini darcha pastidagi "Converged = Yes" ifodalaydi.

Input faylda kamchiliklar bo'lmagan holatda Gaussian programmasidagi hisoblashlar berilgan RMS gradientga yetgandan keyin to'xtaydi.

Firefly/Gamess programmasining o'ziga xos xususiyatidan biri shundan iboratki, input faylda kamchiliklar bo'lsa out fayl oxirida "CALCULATION TERMINATED ABNORMALLY" yozuvi keltiriladi. Kamchiliklar bo'lmagan holatda esa "CALCULATION TERMINATED NORMALLY" yozuvi keltiriladi. Lekin, bu keltirilgan yozuv muqobillash oxiriga yetganligini bildirmaydi! Muqobillash tugaganligini "EQUILIBRIUM GEOMETRY LOCATED" va aksincha "THE GEOMETRY SEARCH IS NOT CONVERGED yoki FAILURE TO LOCATE STATIONARY POINT" bildiradi.

Yordamchi majmualar (interfeyslar)

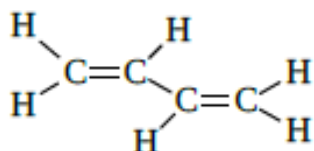
Birikmalarning hisoblashlar uchun dastlabki geometriyalarini tayyorlash hamda hisoblash natijalarini grafik tarzda ifodalash maqsadida yordamchi programmalar-interfeyslar yaratilgan. Sababi, Mopac va boshqa majmualar faqat maxsus input fayllarni tushunadi. Interfeyslarda modda geometriyasi chizilib, input fayllar xosil qilinadi. Shuning uchun oldin ayrim input fayllarni qarab chiqamiz.

Mopac Z-matritsasi

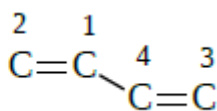
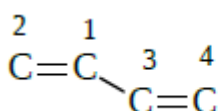
Z - matritsa - molekuladagi atomlarning ichki kordinatalarini 45mpiric45e parametrlar (bog' uzunligi, valent burchak va torsion burchak) yordamida tartibli kiritilishidir. Mopac Z-matritsasi Mopac 2009 (2012), WinMopac 7.2 kvant-kimyoviy hisoblash programmalarida hisoblash uchun modda tuzilishini kiritish usulidir.

Butadien molekulasi uchun mopac z-matritsasini tuzamiz.

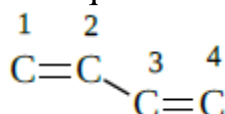
Uglerod atomlari holadarda hisoblashlar Sababi, hisoblash programmasi C3 atomi C1 atomi bilan bog'langanligini tushunmasdan C2 atomi bilan bog'langan deb qaraydi:



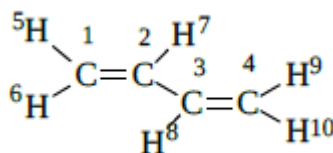
quyidagicha raqamlangan noto'g'ri bajarilishi mumkin.



Shuning uchun, birinchi navbatda 46mpiric46e molekulasini uglerod atomlari ketma-kefli buzilmagan holatda, tartibli raqamlanadi:



Keyin vodorod atomlari qo'shiladi.

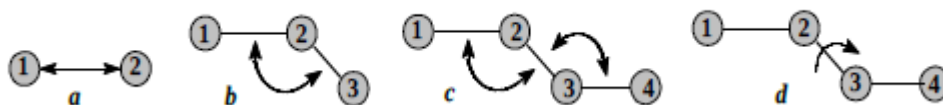


Z-Matritsa tuzishda atomlar tartib raqamiga mos ravishda kiritiladi. Z-matritsada I-qatordagi tartib raqamlari keltirilmaydi, Я-qatordagi atom simvollaridan boshlanadi. III-ustunda bog' uzunliklari keltirilgan. IV va V ustunlarda valent hamda torsion (ikki yonli) burchak kattaliklari keltirilgan.

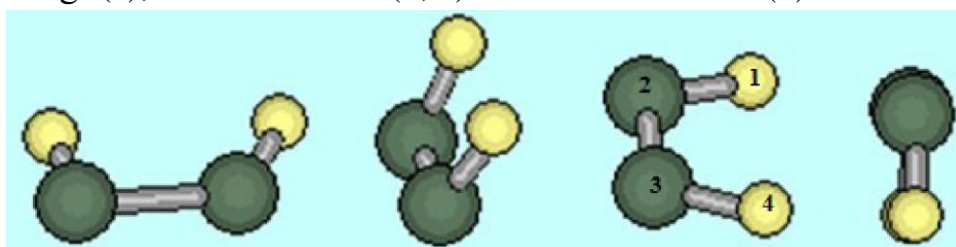
t/r	Atom	Bog' uzunligi, Å	Valent burchak	Torsion burchak	B	V	Г
I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII
1	C	0.0	0.00	0.00	0	0	0
2	C	1.4	0.00	0.00	1	0	0
3	C	1.4	135.00	0.00	2	1	0
4	C	1.4	135.00	180.00	3	2	1
5	H	1.1	120.00	180.00	1	2	3
6	H	1.1	120.00	0.00	1	2	3
7	H	1.1	120.00	0.00	2	1	5
8	H	1.1	120.00	180.00	3	2	7
9	H	1.1	120.00	180.00	4	3	2
10	H	1.1	120.00	0.00	4	3	2

VI-ustunda har bir kiritilayotgan atom qaysi atomga bog'langanligi ko'rsatiladi. VII va VIII-ustunlarda mos ravishda valent hamda torsion burchakni belgilovchi

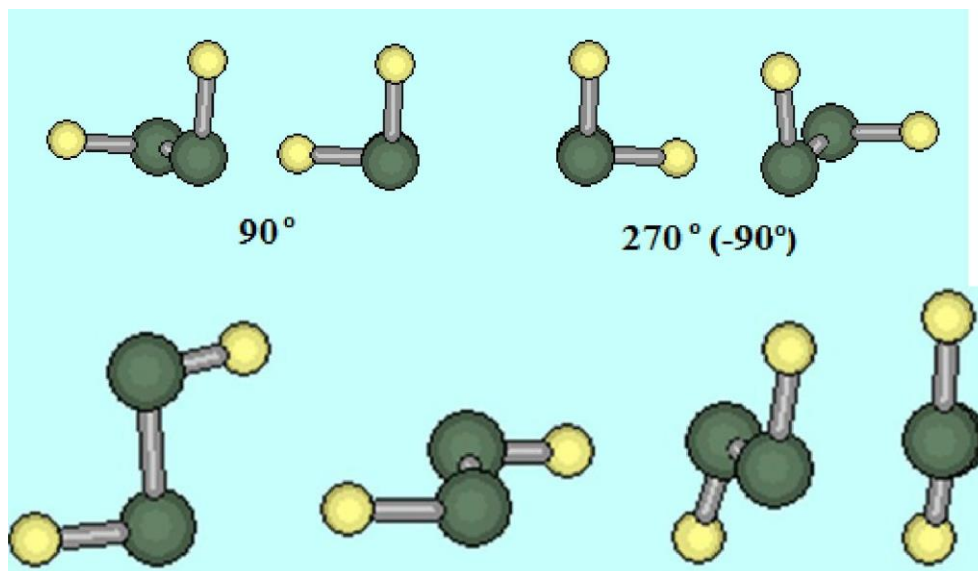
atomlar tartib raqami kiritiladi. C1 atomi koordinata boshida bo'lganligidan, III-VIII ustunlar 0-ga teng. C2 atom C1 atom bilan bog'langan va bog' uzunligi 1.4 Å. C2 atomning C1 bilan bog'langanligi VI ustunda belgilab qo'yiladi. C3 atomi 1.4 Å bog' uzunligi bilan C2 atomiga bog'langanligi VI ustunda ko'rsatilgan. Ma'lumki, ikkita bog' (uchta atom) orasida valent burchak mavjud. C3 atomi C1 bilan 120° valent burchakka ega (VII-ustun). C4 atomi C3, C2 va C1 atomlari bilan mos ravishda bog' uzunligiga, valent hamda torsion burchakka ega ekanligi VI-VIII ustunlarda ko'rsatilgan. VHI-ustun torsion burchak hosil qiluvchi atomni ko'rsatadi. Torsion burchak to'rtta atom orasida, yani uchta bog' orasida bo'ladi.



Bog' uzunligi (a), valent burchak (b, c) va torsion burchak (d).



Torsion burchak nol gradus. Xuddi daqiqa va soatni ko'rsatuvchi strelkalar ustma-ust tushganidek. 3-4 bog'ni 2-3 bog' oqi atrofida 360°-gacha aylantirish mumkin.



Torsion burchak 180°.

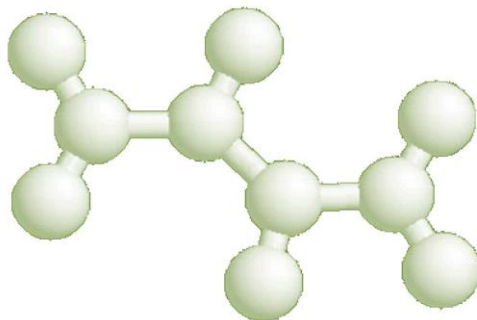
H5 vodorod atomi C1 atomiga bog'langanligini, yana shuningdek ushbu atomning C2 va C3 atomlari bilan mos ravishda valent hamda torsion burchaklar hosil qilganligini VI-VIII ustunlardan bilib olishimiz mumkin. H6 atomining geometrik parametrlarini kiritishda torsion burchakni to'g'ri kiritish muhim ahamiyat

kasb qiladi. Sababi, burchak 180° deb tanlansa H5 atom bilan ustma-ust tushib qoladi. H5 va H6 atomlarining torsion burchagini aniqlashda H7 atomini tanlash noto'g'ri sanaladi. Torsion burchak o'zidan oldin kelgan, tartib raqami o'zidan kichik bo'lgan atomlar yordamida aniqlanishi shart.

H7 atomini kiritishda C2-C3-C4 yoki C2-C1-H5 (yoki H6) atomlar ketma-ketligidan foydalanish mumkin. Yuqorida C2-C1-H5 atomlaridan foydalanildi. Agar, C2-C3-C4 atomlaridan foydalansak H7 atomi geometric parametrlari quyidagicha bo'ladi: 7H 1.1 120.00 0.00 2 3 4. H8 atomini kiritishda C3-C2-C1 yoki C3-C2-H7 atomlar ketma-ketligidan foydalansa bo'ladi. H9 va H10 atomlarini kiritishda C4-C3-C2 yoki C4-C3-H8 atomlardan foydalanish mumkin.

Demak, bir tekislikda yotuvchi butadien molekulasining hisoblash uchun tuzilgan Z-matritsasi quyidagicha:

0.0	0	0.00	0	0.00	0	0	0	0	0
1.4	0	0.00	0	0.00	0	1	0	0	0
1.4	1	135.00	1	0.00	0	2	1	0	0
1.4	1	135.00	1	180.00	1	3	2	1	0
1.1	1	120.00	1	180.00	1	1	2	3	0
1.1	1	120.00	1	0.00	1	1	2	3	0
1.1	1	120.00	1	0.00	1	2	1	5	0
1.1	1	120.00	1	180.00	1	3	2	7	0
1.1	1	120.00	1	180.00	1	4	3	2	0
1.1	1	120.00	1	0.00	1	4	3	2	0

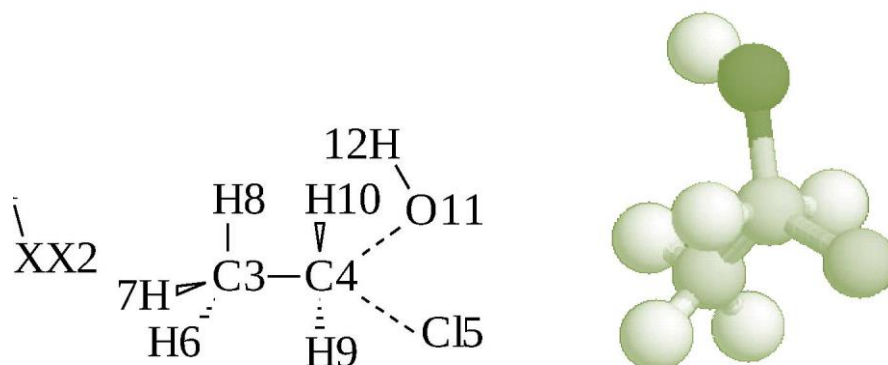


Winmopac7.21 programmasida z-matritsa asosida yaratilgan uch o'lchamli geometriya

Bog' uzunligi, valent va torsion burchaklar qiymatlaridan keyin 0 va 1 raqamlari qo'yilgan ustun keltirilgan. 1-soni hisoblash jarayonida ushbu bog' uzunligi yoki burchakni optimizatsiya qilish kerakligini ko'rsatadi. 0-soni kiritilgan kattalikning o'zgartirilmassligini bildiradi, yani o'sha bog' yoki burchak optimizatsiya qilinmaydi. Hosil qilingan tekst fayl *.zmt yoki *.dat fayllari ko'rinishida saqlangandan keyin Mopac (Winmopac) o'qiydi.

Z-matritsani tuzishda "yasama" (dummy) atomlardan ham foydalanish mumkin.

Yasama atom XX harflari bilan belgilanadi. Etilxloridning OH⁻ anioni ta'sirida hosil bo'lgan o'tish holati uchun z-matritsa tuzamiz:

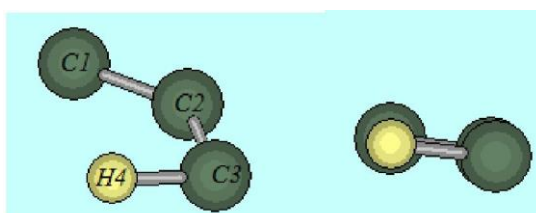


Z-matritsa tuzish uchun foydalanilgan geometriya (chapda) va Winmopac7.21 programmasida z-matritsa asosida yaratilgan uch o'lchamli geometriya (o'ngda).

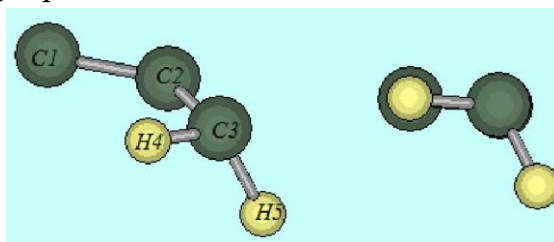
Yasama atomlarni xoxlagan joyga qo'yish mumkin. Yasama atomlarni 1 va 2 raqamlari bilan belgiladik. Birikma atomlari 3 sonidan boshlab tartibli ravishda raqamlanadi.

	XX	0	0	0.00	0	0.00	0	0	0
XX	1.4	0	0.00	0	0.00	0	1	0	0
C	1.5	1	120.00	1	0.00	0	2	1	0
C	1.5	1	120.00	1	0.00	1	3	2	1
C1	1.8	1	120	1	90.00	1	4	3	1
H	1.2	1	120.00	1	60.0	1	3	4	5
H	1.2	1	120.00	1	180.00	1	3	4	5
H	1.2	1	120.00	1	-60.00	1	3	4	5
H	1.2	1	90.00	1	180.00	1	4	3	1
H	1.2	1	90.00	1	0.0	1	4	3	1
O	1.8	1	120.00	1	-90.00	1	4	3	1
H	1.0	1	120.00	1	0.00	1	11	4	3

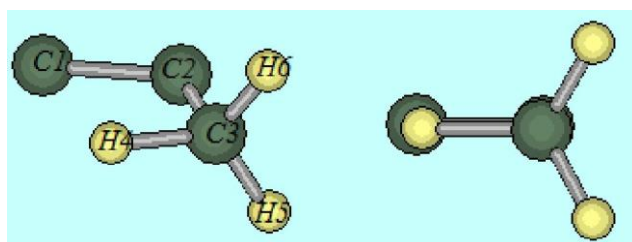
Metil va metilen guruh vodorod atomlarining torsion burchaklarini aniqlashni C1-C2-C3(H₃) va C1-C2-C3(H₂)-C4 misollarid qaraymiz. Aytaylik, C1-C2-C3 va H4 bir tekislikda.



H5 atomini C3 atomiga qo'shishda torsion burchakni 120° deb olamiz.

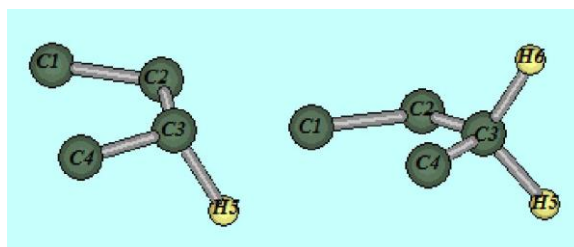


Metil guruhining oxirgi, H6 atomini qo'shishda torsion burchak 240° yani -120° deb olinadi.

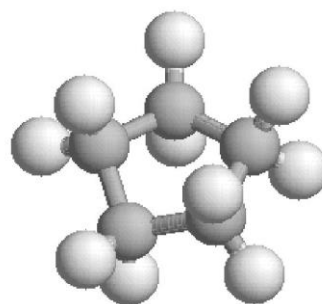
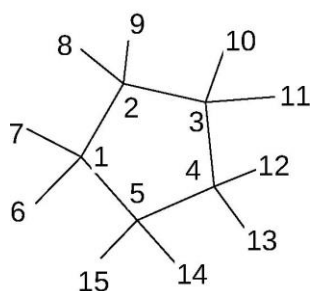


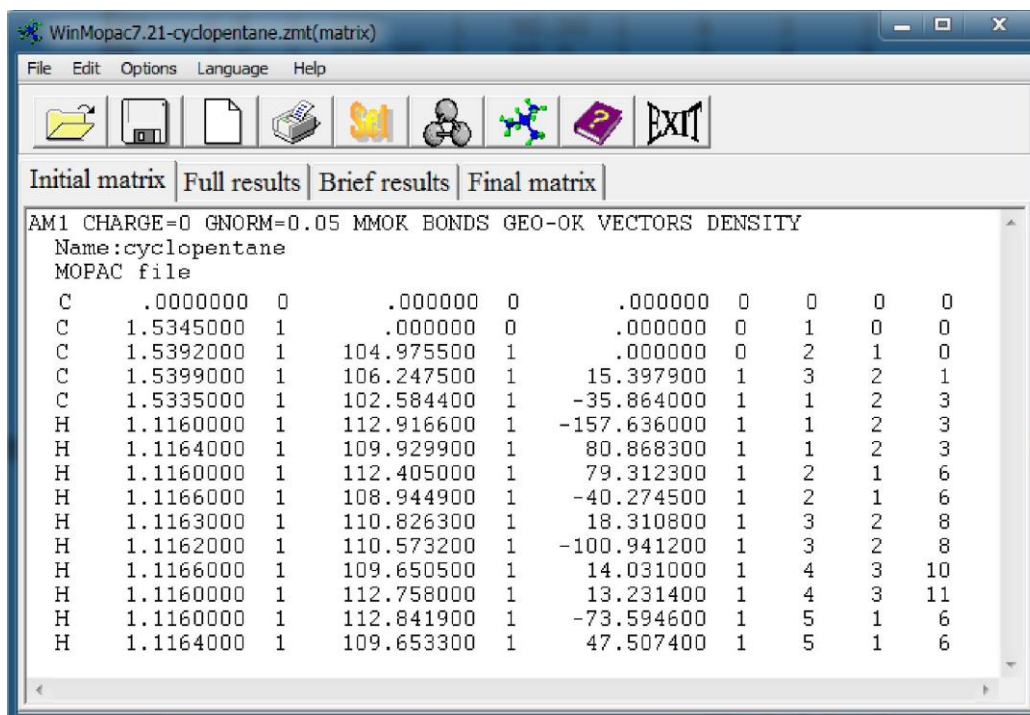
Agar C1-C2-C3-H4 torsion burchagini C2-C3 bog'i atrofida aylantirsak torsion burchak 0° - 359° - 0° (360°) oraliqda bo'lishi mumkin. 360° teng uch qismga bo'linsa 120° . Shuning uchun ham H5 va H6 atomlari qo'yilganda torsion burchak 120° olinda. Agar C1-C2-C3-H4 torsion burchak 60° deb olinsa, H5 va H6 atomlar uchun torsion burchak mos ravishda 180 hamda 300 (-60°) bo'ladi.

C1-C2-C3-C4 bir tekislikda yotgan deb tasavvur qilgan holda C3 atomiga 2- ta H atomini kiritamiz. H4 atomini kiritishda ham C1-C2-C3-H4 torsion burchak 120° belgilanadi. H5 atomini kiritishda esa 240° (-120°) tanlanadi. To'yingan uglevodorodlarda valent burchak 109° - 110° deb olinadi.



Siklopentan molekulasi uchun Z-matrisa tuzamiz. Uglerod atomlari ketma-ketlikka rioya qilgan holda 1-dan 5-gacha raqamlangan. Har bitta C atomiga 2ta H atomi bir-biriga nisbatan 120° ostida birikkan.





\$DATA

C4H6

C1 (Simmetriya guruhi)

C

C 1 dis2

C 2 dis3 1 ang3

C 3 dis4 2 ang4 1 dih4

H 1 dis5 2 ang5 3 dih5

H 1 dis6 5 ang6 2 dih6

H 2 dis7 1 ang7 6 dih7

H 3 dis8 2 ang8 1 dih8

H 4 dis9 3 ang9 2 dih9

H 4 dis10 3 ang10 2 dih10

dis2=1.5400

dis3=1.5400

ang3=120.000

dis4=1.5400

ang4=120.000

dih4=180.000

dis5=1.0900

ang5=120.000

dih5=0.000

Games (Firefly) programmasi \$DATA belgisidan boshlab kiritiladi. Oldin birikmaning brutto formulasi va simmetriya guruhi (C1) keltiriladi.

Games Z-matritsasi har bir kiritilayotgan atomning bog' uzunligi "dis" so'zi bilan tartibli raqamlanadi. Dis-so'zi inglizcha "distance-masofa". Xuddi shuningdek, valent burchak va torsion burchak kattaliklari mos ravishda "ang" (angle-burchak) hamda "dih" (dihedral-ikki yonli) so'zlari yordamida kiritiladi. Geometrik parametrlar kattaliklari atomlar kiritilgandan keyin bir qator tashlab, keyin ketma-ketlikda kiritiladi.

Gaussian Z-matritsasi

Games Z-matritsasi dis6=1.0900 ang6=120.000 dih6=180.000 dis7=1.0900 ng7=120.000	!%chk=temp #kalit so'zlar Winmostarda tuzilgan 0 1 C C 1 R2 C 2 R3 1 A3	Gaussian Z matrisasi Winmostar, Gaussveiw va boshqa interfeyslar yordamida tuzilishi mumkin. Kalit so'zlaridan keyin uchta qatorga kerakli izohlarni yozish mumkin.
---	--	--

dih7=0.000	C 3 R4 2 A4 1 D4	Undan keyin birikma zaryadi (0) va spin kattaligi (1) bir qatorda ketma-ket kiritiladi. Butadienning to'rtta uglerod atomi va vodorod atomlari chizilgan tartibi bo'yicha kiritiladi. Bog' uzunliklari R, valent burchak A hamda torsion burchak D raqamlangan harflari bilan belgilab olinib, ularning kattaliklari kiritiladi.
dis8=1.0900	H 1 R5 2 A5 3 D5	
ang8=120.000	H 1 R6 2 A6 3 D6	
dih8=0.000	H 2 R7 1 A7 2 D7	
dis9=1.0900	H 3 R8 2 A8 1 D8	
ang9=120.000	H 4 R9 3 A9 2 D9	
dih9=0.000	H 4 R10 3 A10 2 D10	
dis10=1.0900	R2 1.558823529	
ang10=120.000	R3 1.690409033	
dih10=180.000 \$END	R4 1.569852463	
	R5 1.078843504	
	R6 1.120401994	
	R7 1.190973517	
	R8 1.145530658	
	R9 1.320237706	

R10 1.179696487 A3 149.3475341 A4 144.9819680 A5 122.8249468 A6 121.9767070 A7 123.4325463 A8 99.3316894 A9 136.5497755 A10 127.8344523 D4 -180.0000000 D5 0.0000000 D6 179.9999991 D7 0.0000000 D8 0.0000000 D9 0.0000000 D10 -180.0000000

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

10- MA'RUZA

Zichlik funktsionali nazariyasiga asoslangan gibrid usullar

Reja:

1. Hisoblashlarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari
2. Atom zaryadlarini hisoblash usullari
3. Birikmalarni reaksiya qobiliyatini baholash

Bugungi kunda funktsional zichlik nazariyasi (DFT-Density Functional Theory) kimyo va fizika sohalaridagi ko'pchilik muammolarni yechishda keng qo'llanilib kelinmoqda. Maxsus, faqat DFT hisoblashlarini amalga oshiradigan majmualar

yaratilgan. DFT usullari Firefly/Gamess, Gaussian va boshqa majmualarga kiritilgan.

Bu usul asosida Kon-Shem yondoshuvi yotadi. Bunga, 1964 yilda Xoenberg va Kon tomonidan taklif qilingan teoremlar asos bo'lgandi.

Unga ko'ra molekulaning asosiy elektron holatdagi xossalari asosiy holat elektron zichlik funksiyasi $\rho_0(x,y,z)$ bilan aniqlanadi.

Matematika kursidan ma'lumki, funksiya biron bir sonni xuddi shunday songa yoki boshqasiga o'girish xususiyatidir. Buni kalkulyatorda amallarni bajarishga o'xshatish mumkin. Masalan, 2 sonini yozib x^3 funksiyasini bajarsak 8 soni chiqadi.

Xoenberg-Kon teoremasiga ko'ra, molekulaning asosiy holatdagi xossasi asosiy holat zichligining funksiyasidir. Masalan, sistema energiyasi E_0 zichlik funksiyasi natijasida topilishi mumkin: $p_0(x,y,z) - E_0$.

Funksiyani $F[p_0]$ bilan belgilasak, $E_0 = F[p_0] = E[p_0]$ (11).

Kon va Shem tomonidan orbitallarni hisoblash sxemasining kiritilishi DFT-ning kompyuter kimyoda keng miqyosda qo'llanilishiga olib keldi. Kon-Shem nazariyasining asosiy g'oyasi kinetik energiya funksionalini ikki qismga (T_s va T_c) bo'lishdan iborat.



Ayrim funksiyalar:

$1 \xrightarrow{x^2} 1$	$1 \xrightarrow{x^2} 1$
$2 \xrightarrow{x^2} 4$	$2 \xrightarrow{x^2} 8$
$5 \xrightarrow{x^2} 20$	$5 \xrightarrow{x^2} 25$
$5 \xrightarrow{x^2(y=6)} 3125$	$5 \xrightarrow{x^2(y=6)} 15625$

1-chisi (T_s), ta'sirlashmayotgan elektronlar sistemasi hisoblanishini, 2-chisi (T_c) to'ldiruvchi (korreksiya) qismni ifodalaydi (correction).

$$T[p] = T_s[p] + T_c[p] \quad (12),$$

$$T_s[\rho] = \sum_i^M \left\langle \varphi_i \left| -\frac{1}{2} \nabla_i^2 \right| \varphi_i \right\rangle \quad (13)$$

Bu yondoshuv asosida molekulyar sistemalarni xuddi XFR usulidek o'rganish imkoniyati tug'ildi, yani orbitallarni tuzish MO AOChK usulida olib boriladi va atom orbitallarni ifodalash basis to'plamlari yordamida olib boriladi, yana shuningdek, orbitallar va ularning energiyalari MMU bilan aniqlanadi.

Zichlik funksionali nazariyasida xuddi XFR tenglamasidek Kon-Shem

tenglamasi mavjud:

$$\sum_{\nu=1}^N (K_{\mu\nu} - \epsilon_l S_{\mu\nu}) c_{\nu} = 0, \quad \mu=1,2,\dots,N \quad (14)$$

DFT yondoshuvida $K_{,\nu}$ - matritsasi Fok matritsasiga o'xshash. Kon-Shem orbitallarining energiyasi quyidagi asriy tenglamadan topiladi:

$$|K_{,\mu} - \epsilon_l S_{,\mu}| = 0. \quad (15)$$

Umumiy energiya XFR usulida quyidagicha topilishini inobatga olsak:

$$E_{\text{Total}} = T + E_{\text{ne}} + J + K + E_{\text{nn}} \quad (16)$$

DFT usulida ham xuddi shunga o'xshash:

$$E_{\text{DFT}}[p] = T_s[p] + E_{\text{ne}}[p] + J[p] + E_{\text{xc}}[p] \quad (17)$$

16 tenglamada E_{ne} - elektronlarning yadroga tortishish energiyasi, J- elektronlarning o'zaro itarishish kulon energiyasi, K-almashinuv energiyasi, Enn- yadrolararo ta'sirlashuv, Born-oppengeymer yaqinlashuviga ko'ra $E_{\text{nn}} = \text{const}$.

17 tenglamadagi kinetik energiyas T_s Kon-Shem orbitallaridan tashkil topgan Sleyter determinant yordamida topiladi. E_{xc} - korrelyasion-almashinuv funksionali.

Yarim empirik hisoblashlarda (Mopac) ELECTRONIC ENERGY 16 tenglamadagi T, E_{ne} , J va K energiyalar summasini ifodalaydi. CORE-CORE REPULSION esa E_{nn} -ni ifodalaydi:

FINAL HEAT OF FORMATION	=	-7.55754 KCAL
TOTAL ENERGY	=	-1018.35044 EV
ELECTRONIC ENERGY	=	-2522.40133 EV
CORE-CORE REPULSION	=	1504.05088 EV
IONIZATION POTENTIAL	=	10.75897
NO. OF FILLED LEVELS	=	13
MOLECULAR WEIGHT	=	187.862
COMPUTATION TIME	=	0 h 0 min 1 sec

Firefly/Gamess programmasida ab initio va DFT hisoblashlarda bir elektronli va ikki elektronli integrallar energiyalari (hartrida, lhartri=627.51 kkal/mol) alohida ko'rsatiladi. Undan tashqari potensial energiya tarkibiy qismlari ham ko'rsatilgan bo'ladi.

```

-----
ENERGY COMPONENTS
-----
ONE ELECTRON ENERGY = -326.1341636329
TWO ELECTRON ENERGY = 109.8764315356
NUCLEAR REPULSION ENERGY = 64.2863884636
-----
TOTAL ENERGY = -151.9713436338
ELECTRON-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = 109.8764315356
NUCLEUS-ELECTRON POTENTIAL ENERGY = -478.0854318075
NUCLEUS-NUCLEUS POTENTIAL ENERGY = 64.2863884636
-----
TOTAL POTENTIAL ENERGY = -303.9226118083
TOTAL KINETIC ENERGY = 151.9512681745
VIRIAL RATIO (V/T) = 2.0001321177

```

17 tenglamadagi tenglamadagi E_{XC} qiymatini topish orqali ko'p elektronli sistemalarning umumiy energiyasini aniqlash mumkin. Ammo, amaliyotda uning aniq qiymati ma'lum emas. Ma'lum bo'lgan DFT usullari parametrlash natijasida topilgan $E_{xc}[\rho]$ funksionali bilan farq qiladi.

Bir nechta yondoshuvlarga asoslangan DFT usullari taklif qilingan. Masalan, lokal spin zichlik yondoshuvi (Local Spin Density Approximation), gradientli korreksiya (GGA-Generalized Gradient Approximation) va gibrud usullar.

LSDA usullarida XFR hisoblash aniqligidagi natijalar olingan. GGA yondoshuviga asoslangan usullar sarasiga B88 va LYP usullarini kiritish mumkin. B88 1988 yil Bekke tomonidan taklif qilingan. LYP usulining avtorlari Li, Yang va Parr hisoblanadi. Hisoblashlarda GGA yondoshuviga asoslangan usullarda LDA yondoshuviga nisbatan aniqroq natijalar olingan.

$$E_{XC}^{B3LYP} = (1-a)E_x^{LSDA} + a \cdot E_x^{HF} + b \cdot \Delta E_x^{B88} + (1-c)E_c^{VWN} + c \cdot \Delta E_c^{GGA} \quad (18),$$

Bugungi kunda gibrud yondoshuvga asoslangan usullar keng tarqalgan, masalan B3LYP.

bu yerda, a, b va c Bekke tomonidan aniqlangan konstantalar. Ifoda Xartri-Fok (HF), B88 va LSDA usullaridan topiladigan tuzatish almashinuv qismlarini o'z ichiga olgan. Yana shuningdek, korrelyasion energiyalarni ifodalashda Vosko, Vilc va Nusair (Vosko, Wilc, Nusair) formulasidan foydalanilgan hamda gradient korreksiya kiritilgan.

Firefly/Gamess programmasidagi B3LYP1 boshqa programmalaridagi B3LYP bilan ekvivalent. Firefly-ga B3LYP5 usuli ham kiritilgan. Undan tashqari bu programmaga LYP, BLYP, BHLYP, BVWN5 kabi 20-dan ortiq DFT usullari kiritilgan.

Gaussian programmasida LSDA, BPV86, B3LYP, CAM-B3LYP, B3PW91, MPW1PW91, PBEPBE, HSEH1PBE, HCTH, TPSSTPSS, WB97XD va boshqa usullari mavjud.

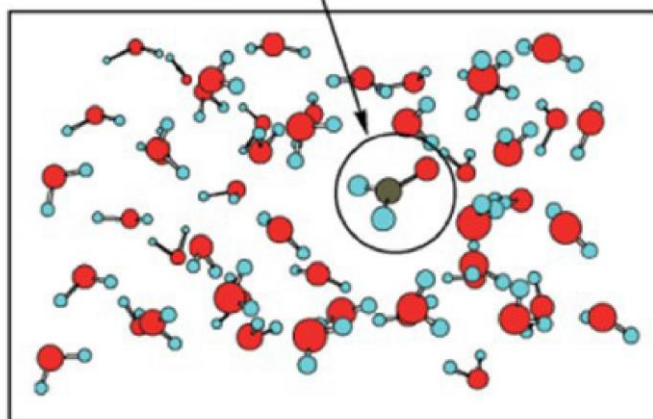
Kvant-kimyoviy hisoblarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari

Ma'lumki reaksiyalar suyuq fazada boradi. Erituvchilar tabiatiga qarab reaksiya unumi va mexanizmi o'zgarishi mumkin. Shuning uchun gaz fazada qilinadigan hisoblashlarga erituvchi ta'sirini inobatga olish yo'llari o'ylab topilgan.

Kvant-kimyosidagi solvatlanish effektlarini inobatga olish usullarini ikki usulga bo'lish mumkin: 1. Diskret usullar 2. Kontinual.

Diskret usullarda birikma va erituvchi ta'siri birikma atrofiga bir nechta erituvchi molekulalarini qo'yib hisoblashga asoslangan. Bu usul supermolekulalar yondoshuvi deb ham ataladi.

Supermolekula usuli: suv molekulari orasidagi formaldegid



Kontinual (solvaton) usullarda erituvchi molekulari qatnashmaydi, faqat erituvchi kattaliklari kiritiladi. Reaktiv maydon modeli kontinual yondoshuvga asoslangan, keng tarqalgan erituvchi ta'sirini inobatga olish usulidir. Bu modelda solvent dielektrik o'tqazuvchanlikka (ϵ) ega bo'lgan bir jinsli qutbli maydon deb qaraladi. Eritgan modda solvent ichidagi bo'shliqqa joylashtiriladi. Dielektrik o'tqazuvchanlikka ega bo'lgan maydonga tushirilgan har qanday zaryad erituvchida elektrik maydonni yuzaga keltiradi. Ushbu maydon erigan modda bilan ta'sirlashish orqali uning xarakteristikalarini o'zgartiradi. Solvat molekulasini bo'shliqda ma'lum bir tartibda yo'nalgan bo'ladi hamda molekula tuzilishi ta'sirlashuv natijasida vakuumdagiga nisbatan o'zgaradi. Eritgan moddaning erkin solvadanish energiyasi G_{solv} quyidagi tarkibiy qismlar yig'indisidan iborat:

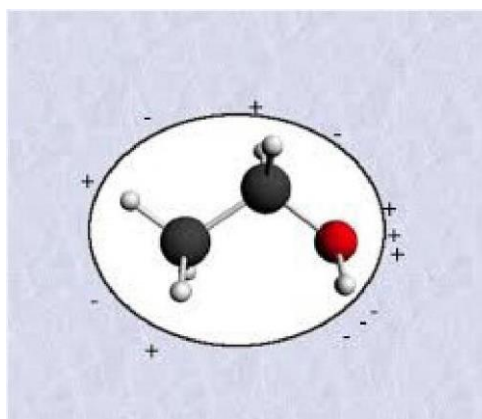
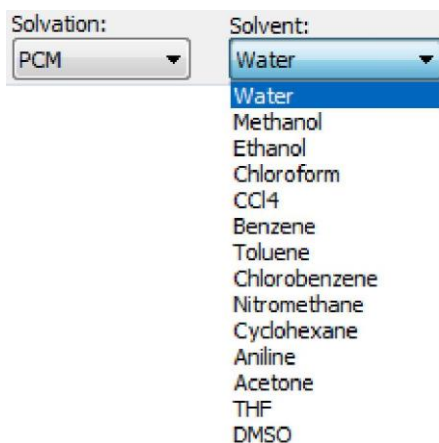
$$\Delta G_{\text{sol}} = \Delta G_{\text{el}} + \Delta G_{\text{disp.}} + \Delta G_{\text{kav.}}$$

bu yerda, ΔG_{el} - erituvchi va erigan birikma orasidagi elektrostatik ta'sirlashuv, $\Delta G_{\text{disp.}}$ - dispersion (solvent-solvat Van-der-Vaals) ta'sirlashuv, $\Delta G_{\text{kav.}}$ - kavitatsion energiya, yani erigan modda bo'shlig'i atrofida tashqi qadamni hosil qilishda sarflanadigan energiya.

Bo'shliq hosil qilish ma'lum bir energiyani talab qiladi, shuning uchun $G_{\text{kav.}} > 0$. Eritmada dispersion va elektrostatik ta'sirlashuvlarning mavjudligi erigan birikma barqarorligini oshiradi, yani energiyani kamaytiradi, shuning uchun $\Delta G_{\text{el}} < 0$, $\Delta G_{\text{disp.}} < 0$.

Hisoblash programmalarida keng ommalashgan usullardan biri PCM (Polarized Continuum Model) va uning soddalashtirilgan varianti COSMO (Conductor-like Screening Model).

Gaussian programmasida PCM-ning bir necha xil variandari kiritilgan: IEFPCM, I-PCM, SCI-PCM va CPCM modellari mavjud.



Gamess/Firefly programmasida faqat 14 erituvchi ta'sirini inobatga oluvchi D-PCM usuli mavjud:

Jadval.

Ayrim erituvchlarning dielektrik o'tqazuvchanligi (ϵ)

Erituvchi	ϵ	Erituvchi	ϵ
Argon	1.430	Xinolin	9.16
Siklogeksan-C ₆ H ₁₂	2.0165	Dixloretan	10.125
Tetraxlormetan-CCl ₄	2.2280	Propanol	18.05
Benzol-CeHe	2.2706	2-Propanol	19.264
Tolunol-C ₆ H ₅ CH ₃	2.3741	Aseton-CH ₃ COCH ₃	20.493
Dietilefir-C ₂ H ₅ OC ₂ H ₅	4.2400	Etanol-C ₂ H ₅ OH	24.852
Xloroform-CHCl ₃	4.7113	Metanol-CH ₃ OH	32.613
Benzolxlorid-C ₆ H ₅ Cl	5.6968	Asetonitril	35.688
Anilin-C ₆ H ₅ NH ₂	6.8882	Nitrometan -CH ₃ NO ₂	36.562
Tetragidrofuran (THF)	7.4257	DMSO-(CH ₃) ₂ SO ₂	46.826
Dxlormetan	8.93	Suv-H ₂ O	78.3553

Quyida tiosionat anionini suvli muhitda hisoblash uchun tuzilgan input fayl keltirilgan:

! GAMESS (US) STYLE.

SSYSTEM SEND

SCONTRL RUNTYP^OPTIMIZE SCFTYP=RHF DFTTYP=B3LYP1

ICHARG=-1 COORD-CART SEND


```

SBASES GBASES=N31 NGAUSS=6 SEND
SSTATPTNSTEP=100 OPTTOL=0.000001 SEND
SPCM SOLVNT=WATER SEND
SDATA
CNS CI
NITROGEN  7.0  0.000000000  0.000000000  0.000000000
CARBON    6.0  1.470000000  0.000000000  0.000000000
SULFUR    16.0  2.380000000  1.576166000  0.000000000
SEND

```

Hisoblash natijasida quyidagi energetik kattaliklar olindi:

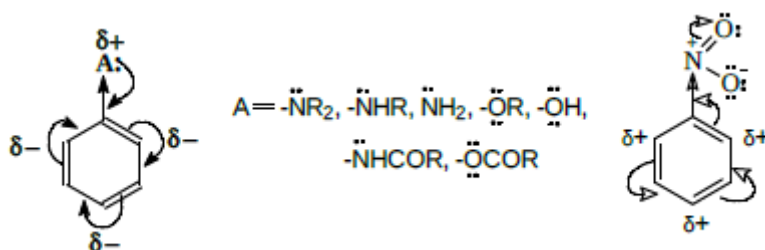
```

FREE ENERGY IN SOLVENT  = -308196.55 KCAL/MOL
INTERNAL ENERGY IN SOLVENT = -308136.15 KCAL/MOL
DELTA INTERNAL ENERGY  = 0.00 KCAL/MOL
ELECTROSTATIC INTERACTION = -60.40 KCAL/MOL
PIEROTTI CAVITATION ENERGY = 0.00 KCAL/MOL
DISPERSION FREE ENERGY  = 0.00 KCAL/MOL
REPULSION FREE ENERGY   = 0.00 KCAL/MOL
TOTAL INTERACTION        = -60.40 KCAL/MOL
TOTAL FREE ENERGY IN SOLVENT = -308196.55 KCAL/MOL

```

Atom zaryadlarini hisoblash usullari

Kimyo fanida moddalarning muhim parametrlaridan biri ulardagi zaryad taqsimoti hisoblanadi. Zaryad taqsimotini aniqlagan holda moddalarning reaksiyon markazlarini, reaksiyalarning boorish mexanizmlarini, aromatic birikmalarda nukleofil va elektrofil reaksiyalar markazlarini aniqlash mumkin. Odatda, kimyoviy moddalardagi atomlarning zaryadi δ^{\pm} holatida belgilanadi. Elektron bulutni o'zi tomonga tortgan atomning zaryadi δ^{-} , electron buluti boshqa atom tomonga siljigan atomning zaryadi esa δ^{+} bilan belgilanadi.



Atomlarning zaryad qiymatini eksperimental usullar bilan aniqlab bo'lmaydi,

lekin uni hisoblashning bir necha matematik usullari mavjud:

- Malliken zichlik taqsimoti tahlili (Mulliken population analysis);
- Lauvdin zichlik taqsimot tahlili (Lovdin population analysis);
- Tabiiy bog' tartibi tahlili (NBO – Natural bond order analysis);
- Molekula tarkibidagi atomlar (AIM – Atoms in molecules);
- Elektrostatik ta'sirlashishlar usuli (Merz – Singh – Kollman (MK), Chelp, ChelpG).

Zichlik taqsimoti tahlili (ZTT) –bu molekula yadrosi atrofida elektron zichlik yoki taqsimlanishni tavsiflash to'liq funksiyasi va u bilan bog'liq bo'lgan boshqa axborotlarning matematik usulda ifodalanishi hisoblanadi.

Atom qobiqlari tavsiflari bevosita tajriba yo'li bilan kuzatilishi mumkin emas, chunki bu tavsiflar takrorlanmas ko'rinishda o'ziga xoslikka ega bo'lib, har qanday turdagi fizik tavsiflar orqali aks ettirish imkonini bermaydi. Ma'lumki, atom musbat zaryadga ega bo'lgan yadro va uning atrofida elektron qobiqlar bo'ylab joylashgan manfiy zaryadga ega elektronlardan tashkil topgan bo'lib, bu tavsiflar har bir atomda o'ziga xos farqlanishlarni belgilab beradi. Biroq, zich holatdagi elektron qobiqlarning yadroga tortilib turish tavsiflari haqidagi tushuncha bu holatda zichlik bo'yicha elektronlarning taqsimlanish qonuniyatlarini batafsil tushuntirib berish imkoniyatini bermaydi. Bunda elektronlarning yadro atrofida joylashishi barqaror holatdagi son bilan ifodalash mumkin bo'lgan qiymatga ega bo'lmasdan, balki vaqt ulushlari davomida yadrodan ma'lum bir masofada joylashish holatida bo'lishi qayd qilinadi. Garchi, bu su'niy holatda tasavvur qilingan manzarani ifodalab bersada, molekulyar darajadagi o'zaro ta'sirlashishlarda nukleofil yoki elektrofil ta'sirlashishlarga moyillik xususiyatlarini tavsiflashda samarali ko'rinishda, holatni oldindan baholash imkonini beradi. Bu tavsiflar kimyogar uchun ion yoki kovalent tabiatga ega qutblanishlar, bog'lanishlar va hokazo holatlarni oydinlashtirish imkonini beradi.

Malliken bo'yicha zichlik taqsimoti tahlili keng qo'llaniluvchi tahlillardan biri hisoblanadi. Malliken tomonidan ishlab chiqilgan sxemaga muvofiq, fundamental holatda ikkita orbital orasidagi qoplanish to'liq funksiyasining ular orasida bir xil qiymatda taqsimlanishi amalga oshiriladi. Bu tamoyil alohida olingan elemendarning elektromanfiylik xususiyatini to'liq holatda tushuntirib bera olmaydi. Biroq, bu holat haqiqatdan ham to'liq funksiyalarning ajratilishida va kichik basis to'plamlarini tavsiflashda juda samarali usul hisoblanadi.

Ayrim kamchiliklarga qaramasdan, Malliken bo'yicha zaryad hisobi juda keng ommalashgan. Ehtimol, ushbu usulning keng ommalashishining eng asosiy sabablaridan biri- ushbu usulning oson tushinilishi bilan bog'liq bo'lishi mumkin. Bu holat albatta, katta darajada afzallikni belgilab beradi, chunki zichlik taqsimoti tahlili ko'pgina holatlarda kimyo yo'nalishida amalga oshiriluvchi tajriba natijalarini miqdoriy jihatdan oldindan aytib berish maqsadlarida ham foydalaniladi. Qayd qilib

o'tish kerakki, hozirgi vaqtda mavjud bo'lgan adabiyot ma'lumodari tarkibida Malliken ZTT ikki xil nuqtai nazardan tavsiflanishi kuzatiladi. Bu holatdagi farqlanishlar asosan turli xil dasturiy pakedardan foydalanilganda tahlillarning turli xilda aks ettirilishi va ularning turli xilda nomlanishi asosida kelib chiqadi. Shuning uchun Malliken bo'yicha atom zaryadini yarim empirik PM3 va noempirik usullarda qarab chiqamiz.

Molekula tarkibidagi molekulyar orbitalar - bu AO chiziqli funksiyalar kombinatsiyalarining asosini tashkil qiladi. Bu holatda me'yoriy barqarorlik ta'minlanishi uchun MO-dagi koeffisiendar kvadratlarining yig'indisi, ya'ni normallashtirish shard 1-ga teng bo'lishi talab qilinadi.

$$1 = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = \int \Psi^*(q) \Psi(q) dq$$

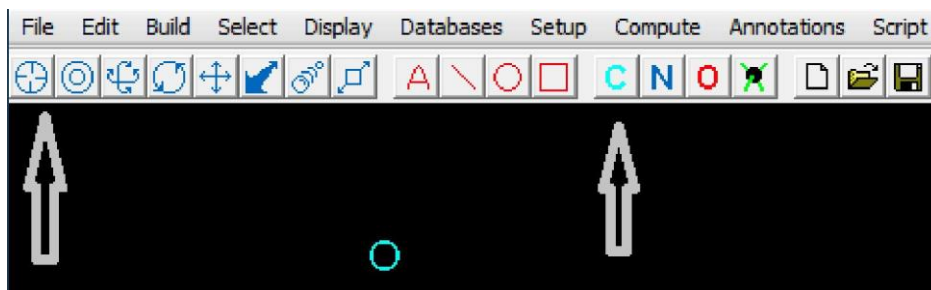
Bu yerda, $\Psi^* \Psi$ kompleks qo'shma funksiyadir. Bu tenglik normallashtirish sharti deb ataladi. Ψ funksiya har doim mos koeffisiendarni tanlash orqali normalangan bo'lishi kerak.

$$C_1^2 + C_2^2 + \dots + C_n^2 = \sum_{i=1}^n |C_i|^2 = 1$$

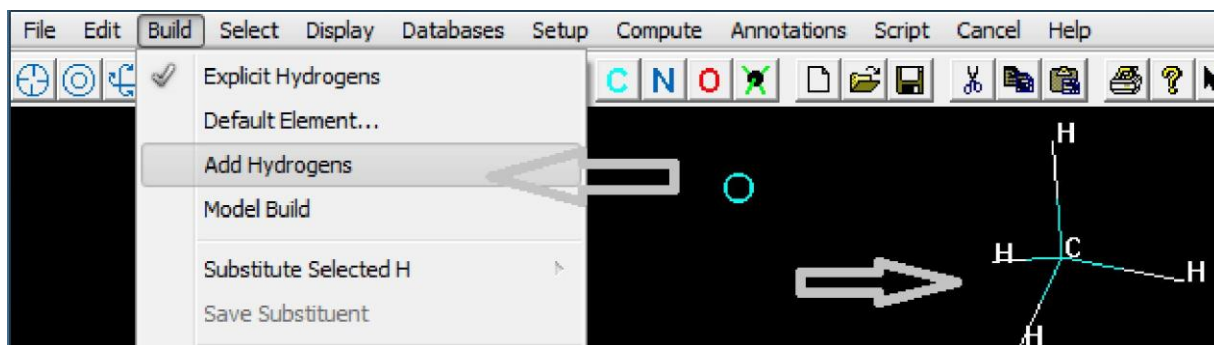
C-doimiy koeffisientlar.

Ushbu normallashtirish shartini metan molekulasini misolida ko'rib chiqaylik.

Hyperchem majmuasida "draw" tugmasi yordamida C atomini belgilab olinadi va darchaga bitta bosiladi.

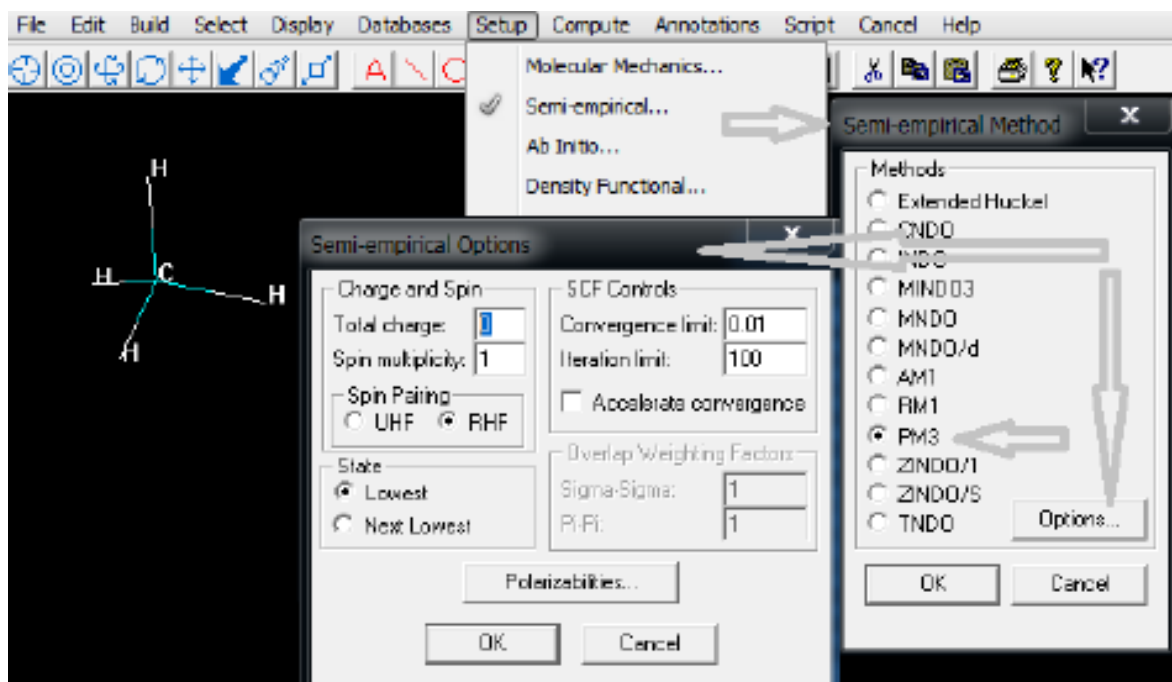


C atomi xosil qilingandan keyin menyudagi Build bo'limidagi "Add Hydrogens" tugmasi yordamida vodorod atomlari qo'shiladi –metan molekulasini xosil bo'ladi.



Keyingi bosqichda metan molekulasini PM3 yarim 73empirik usulida optimizatsiya qilish uchun zaryad (Total charge=0) va spin (Spin multiplicity=1)

tanlanadi. OK tugmalari bosiladi. Menyu “Compute” qismidan muqobillashga o’tiladi.



Buning uchun Hyperchem dasturida PM3 usulida hisoblab topilgan quyidagi jadvaldan foydalanamiz:

Eigenvalues(a.u.) and Eigenvectors

Mol. Orbital		1	2	3	4	5	6
Symmetry:		1 A1	1 T2	1 T2	1 T2	2 A1	2 T2
Eigenvalue		-29.87991	-13.64277	-13.64276	-13.64276	4.24491	4.59437
S	C 1	0.74527	0.00000	0.00000	-0.00000	-0.66677	-0.00000
Px	C 1	0.00000	-0.33331	-0.34822	-0.51728	0.00001	-0.50082
Py	C 1	0.00000	-0.23569	0.61339	-0.26104	0.00000	0.49132
Pz	C 1	-0.00000	0.57731	0.04937	-0.40523	-0.00001	-0.08857
S	H 2	0.33338	0.61241	-0.00000	-0.00000	0.37265	-0.00000
S	H 3	0.33338	-0.20414	-0.06983	0.57315	0.37263	-0.12524
S	H 4	0.33338	-0.20414	-0.46145	-0.34705	0.37263	0.55068
S	H 5	0.33338	-0.20414	0.53128	-0.22610	0.37263	-0.42544
Mol. Orbital		7	8				
Symmetry:		2 T2	2 T2				
Eigenvalue		4.59437	4.59438				
S	C 1	0.00000	0.00001				
Px	C 1	0.37164	0.33336				
Py	C 1	0.45067	0.23572				
Pz	C 1	0.39856	-0.57739				
S	H 2	-0.00000	0.61233				
S	H 3	0.56357	-0.20412				
S	H 4	-0.17332	-0.20412				
S	H 5	-0.39024	-0.20412				

Yuqorida keltirilgan MO-larning koeffitsientlari uchun normallashtirish shartini (har bir AO koeffitsiendari kvadratining yig'indisi lga tengUgini) har bir ustun (MO) uchun hisoblab chiqamiz:

1-ustun - energiyasi -29.87991 eV bo'lgan 1-chi band (bog'lovchi) MO:

$$(0.74527)^2 + (0.33338)^2 + (0.33338)^2 + (0.33338)^2 + (0.33338)^2 = 1 \text{ bo'lishi kerak!}$$

$$0,5554273729 + 4 \times 0,1111422244 = 0,5554273729 + 0,4445688976 = 0,9999962705$$

2-ustun uchun:

$$(0.33331)^2 + (0.23569)^2 + (0.57731)^2 + (0.61241)^2 + 3 \times (0.20414)^2 = 1,000483867461$$

3-ustun uchun:

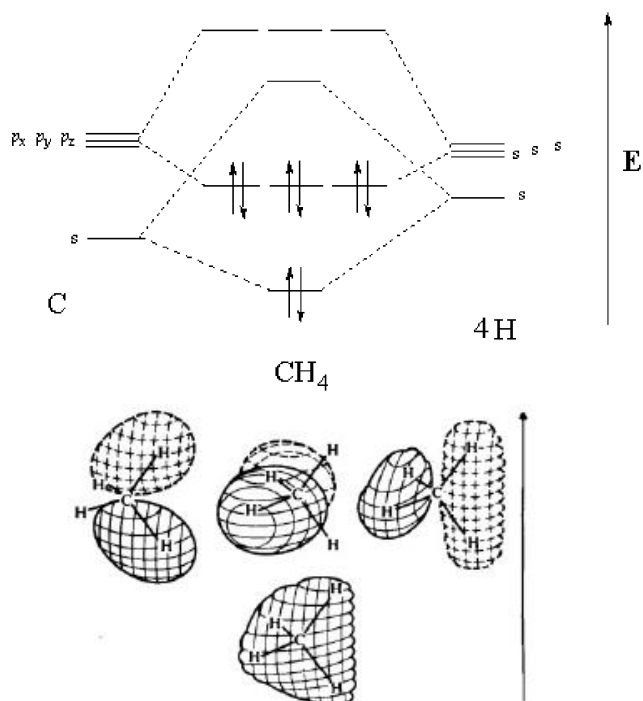
$$(0.34822)^2 + (0.61339)^2 + (0.04937)^2 + (0.06983)^2 + (0.46145)^2 + (0.53128)^2 = 1,0000126272$$

4-ustun uchun:

$$(0.51728)^2 + (0.26104)^2 + (0.40523)^2 + (0.57315)^2 + (0.34705)^2 + (0.22610)^2 = 0,9999976679$$

Qaralgan to'rtta ustun metan molekulasining band MO-larini tashkil qiladi. Ularning hammasida normallashtirish sharti bajarilishini aniqlandi. C atomining 4-ta valent elektroni hamda 4-ta H atomining 4-ta s-elektroni 4-ta $((4+4)/2=4)$ MO hosil qiladi. Uchta sathning energiyasi, yani 2-chi, 3-chi va 4-chi MO energiyalari bir xil (-13.6427 eV). Bunday sathlar "virojdenniy (degenerated)" orbitallar deyiladi. Normallashtirish sharti bo'sh (bo'shashtiruvchi) MO-lar uchun ham saqlanadi. 5-8 ustunlardagi (bo'shashtiruvchi MO) koeffisientlar kvadratarining yig'indisi ham 1-ga teng.

To'lqin funksiyadagi koeffisientlardan foydalangan holda Mulliken usulida har bir atomning zaryadini hisoblash mumkin.



Buning uchun Hyperchem dasturida hisoblangan "Density matrix (zichlik matritsasi)" yoki "Atomic orbital electron populations (AO-lardagi electron zichlik)" natijalaridan foydalanish mumkin. Uglerod atom orbitallari (s, px, py va pz) ulushlari yig'indisini topamiz:

$$C(S)+C(P_x)+C(P_y)+C(P_z)=1.11085+0.99987+0.99987+0.99987=4.11046$$

Malliken bo'yicha atom zaryadini toppish ifodasi quyidagich:

$$q_A = Z_A - \sum_{I \in A} P_{II}$$

Bu yerda P_{ii} – zichlik matritsasi, Z_A -yadro zaryadi. Yarim empirik usullarda valent yondoshuvga ko'ra, yadro zaryadi sifatida valent elektronlar soni olinadi.

Density Matrix

	S	C	1	Px	C	1	Py	C	1	Pz	C	1	S	H	2	S	H	3
S C 1		1.11085		-0.00000		-0.00000		0.00000		0.00000		0.49692		0.49692				
Px C 1		-0.00000		0.99987		-0.00000		0.00000		0.00000		-0.40825		-0.40824				
Py C 1		-0.00000		-0.00000		0.99987		0.00000		0.00000		-0.28868		-0.28867				
Pz C 1		0.00000		0.00000		0.00000		0.99987		0.00000		0.70710		-0.70711				
S H 2		0.49692		-0.40825		-0.28868		0.70710		0.97238		-0.02774						
S H 3		0.49692		-0.40824		-0.28867		-0.70711		-0.02774		0.97239						
S H 4		0.49692		0.81650		-0.28867		0.00000		-0.02774		-0.02774						
S H 5		0.49692		-0.00000		0.86603		0.00000		-0.02774		-0.02774						
				S H 4		S H 5												
S C 1		0.49692		0.49692														
Px C 1		0.81650		-0.00000														
Py C 1		-0.28867		0.86603														
Pz C 1		0.00000		0.00000														
S H 2		-0.02774		-0.02774														
S H 3		-0.02774		-0.02774														
S H 4		0.97239		-0.02774														
S H 5		-0.02774		0.97239														

ATOMIC ORBITAL	ELECTRON POPULATIONS														
AO:	1	S	C	1	Px	C	1	Py	C	1	Pz	C	2	S	H
	1.110846			0.999871			0.999871			0.999871		0.999871	0.972385		
AO:	3	S	H	4	S	H	5	S	H						
	0.972385			0.972385			0.972385								

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

11-MA'RUZA

Struktura asosida turli hil parametrlarni hisoblash

Reja:

1. Termodinamik parametrlarni hisoblash usullari.
2. Struktura asosida turli hil parametrlarni hisoblovchi majmualar

Ayrim olimlar tomonidan ultrabinafsha (UB)-, infraqizil (IQ)- va yadro magnit rezonansi (YaMR) spektroskopiya usullari kvant-kimyoning “eksperimental” usullari qatoriga kiritilgan. Bu qatorga birikmalarning ionlanish potensialini (Kupmans

teoremasiga ko'ra EYuBMO) aniqlab beruvchi fotoelektron spektroskopiya (Photoelectron spectroscopy-PES) usuli kiritilgan. Yana shuningdek, oksidlanish va qaytarilish potensialini aniqlovchi polyarografiya hamda electron transmission spektroskopiya (ETS) usullari kiritilgan. ETS spektroskopiyasi birikmalarning elektronga moyilligini, ya'ni quyi bo'sh MO energiyalari haqida ma'lumotlar bergan (usul juda kam ishlatiladi). UB-spektroskopiyasi band va bo'sh MO-lar orasidagi energetik farqni aniqlab beradi. IQ-spektroskopiya usuli birikmalarning tebranish sathlari va ulardagi o'tishlar haqida ma'lumotlar beradi. YaMR yadrolardagi atomlarning nisbiy zichligi haqida ma'lumot beradi. Yuqorida qayd

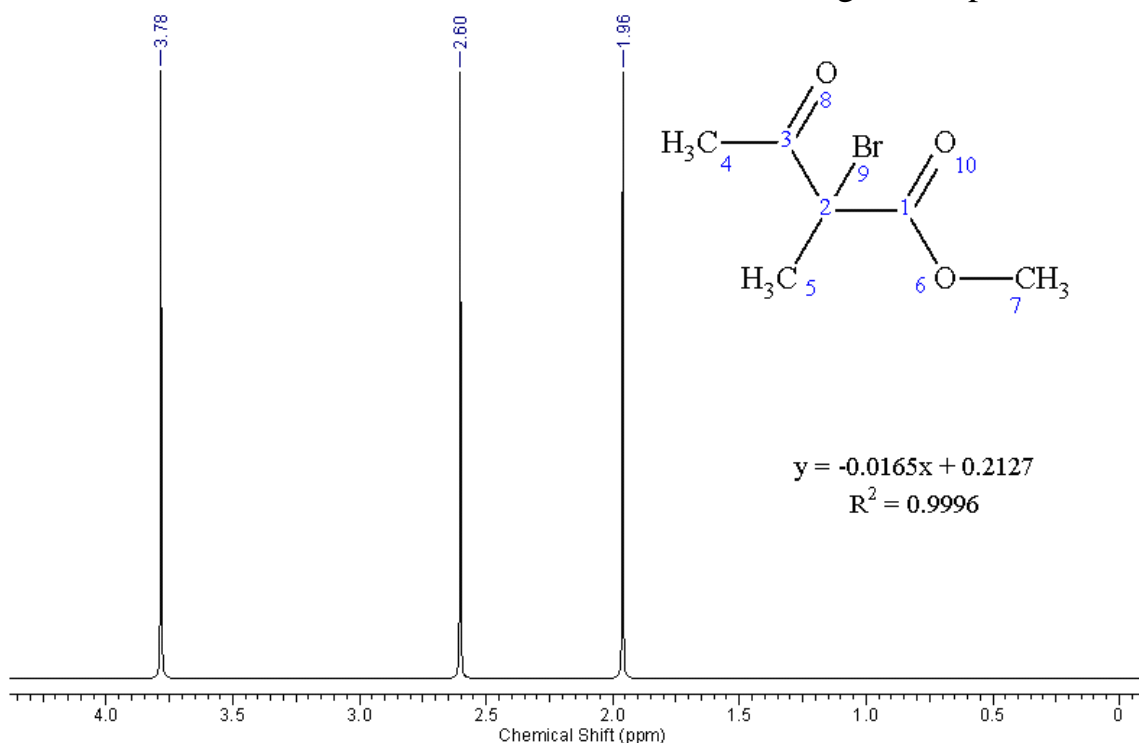
qilingan usullar hamda roentgen tuzilish tahlili (RTT) usuli hisoblash usullarini baholashda mezon vazifasini o'taydi.

Ma'lumki, ^1H va ^{13}C ЯMP signallari mos ravishda 0-10 hamda 0-250 m.u. oralig'ida kuzatilishi ko'pgina omillarga bog'liq:

- Atomlardagi electron zichlik (Qo'shni guruhlar ta'siri)
- Fazoviy holat
- Anizotropiya effekti
- Erituvchi tabiati
- H –bog'
- Molekulalararo ta'sirlar
- Harorat va boshqa omillar.

Bu omillar orasida yadro atrofidagi electron zichlik asosiy ro'l o'ynaydi. Buni quyidagi misolda ko'rishimiz mumkin:

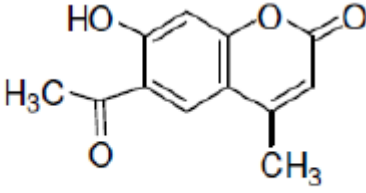
-Rasm. Metil 2-bromo-2-metil-3-oksobutanoatning PMR spektri.



Uchta metil guruhi protonlarining electron zichligi qo'shni guruhlar ta'sirida o'zgargan va shuning natijasida signallari uchta joyda kuzatiladi. Spekrtdagi 1.96 million ulushida (m.u.) joylashgan signal 5-uglerod atomi protonlariga, 2.6 m.u.-da joylashgan signal 4-uglerod atomidagi protonlarga va 3.78 m.u.-dagi signal 7-uglerod atomi protonlariga mos keladi.

Adabiyotlarda, kichik molekulali va ion tipdagi birikmalarning YaMR 13C-spektrlari va atomlardagi zaryad zichligi yaxshi korrelyasi qilishi ta'kidlangan ($R^2 \geq 0.7$). Qo'shbog' tutgan va aromatik birikmalar atom zaryadlarining YaMR signallari bilan taqqoslash ancha murakkab. Sababi, qo'shbog'ning anizotropiya effekti tufayli 13C signallari nisbatan kuchsiz magnit maydonga siljigan. Misol tariqasida, 6-asetil-7-gidroksi-4-metilkumarin 13C spektri va Malliken, Louvdin hamda NPA bo'yicha zaryad taqsimoti korrelyasiyasi qaraldi (-Jadval). 6-Asetil-7-gidroksi-4-metilkumarin 13C signallarining Mallikenga zaryad hisoblash usuliga nisbatan Lauvdin va NPA zaryad taqsimoti usullari bilan yaxshi korrelyasiya qilishi aniqlandi (-Jadval). Olingan natijalar Lauvdin bo'yicha zaryad hisobi Mallikenga nisbatan yaxshiroq korrelyasi qilishi aniqlandi.

6-Asetil-7-gidroksi-4-metilkumarin 13C signallari va B3LYP1/6-31G usulida hisoblangan atom zaryadlari

№	¹³ C, m.u.	Malliken	Lauvdin	NPA	6-asetil-7-gidroksi-4-metilkumarin
C3	112.0	6.22	6.19	6.35	
C4	152.8	5.85	5.95	5.94	
C4a	113.6	5.91	6.08	6.15	
C5	127.0	6.22	6.05	6.17	
C6	118.6	5.92	6.11	6.19	
C7	160.3	5.77	5.86	5.64	
C8	109.0	6.13	6.19	6.34	
C8a	156.0	5.75	5.84	5.63	
C9	199.8	5.70	5.80	5.47	
C (4)	21.2	6.48	6.31	6.72	
R²		0.7759	0.8391	0.8768	

*Atom zaryadlari yaqro sonini ayirmasdan keltirildi.

Birikmalarning YaMR-spektrlarini o'rganish

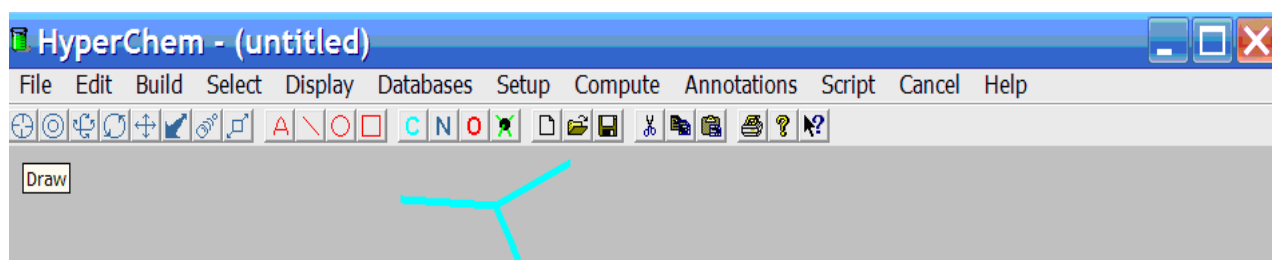
ChemOffice, ACDlabs, PortableMestReNova va boshqa programmalarda empirik usullarda va juda qisqa vaqt oralig'ida birikmalarning YaMR spektrlarini hisoblash mumkin. Bu programmalar ichida ACDlabs keng imkoniyatga ega ekanligi bilan ajralib turadi. Unda birikmalarning ikki o'lchamli spektrlarini olish imkoniyati mavjud. Yana shuningdek, steroid tipdagi birikmalarda bitta C atomiga birikkan ikkita metil guruhi C atomlarining signali xuddi tajribadagidek ikkita joyda kuzatiladi. Ammo, bu programmalar faqat keng o'rganilgan yadrolar (asosan 1H, 13C) uchun YaMR spektrlarini bera oladi. Gaussian programmasida birikmaning kimyobiy siljishlarini (ekranlanish kattaligini - magnetic shielding tensor) o'rganish

uchun NMR (Nucleir Magnetic Resonanse) kalit so'zi kiritiladi. Undan tashqari, YaMR spektrni hisoblash usuli sifatida GIAO, CSGT, IGAIM yoki SingleOrigin usullaridan birini tanlash mumkin (#NMR=GIAO B3LYP/6-31G). #NMR=all belgilansa SingleOrigin, IGAIM va CSGT usullari bilan ekranlanish kattaligi hisoblanadi. Olingan natijalar Gaussveiw programmasida standart birikma (1H va 13C uchun TMS) ekranlanish kattaligi bilan solishtirish orqali YaMR spektrlar vizualizatsiya qilinishi mumkin.

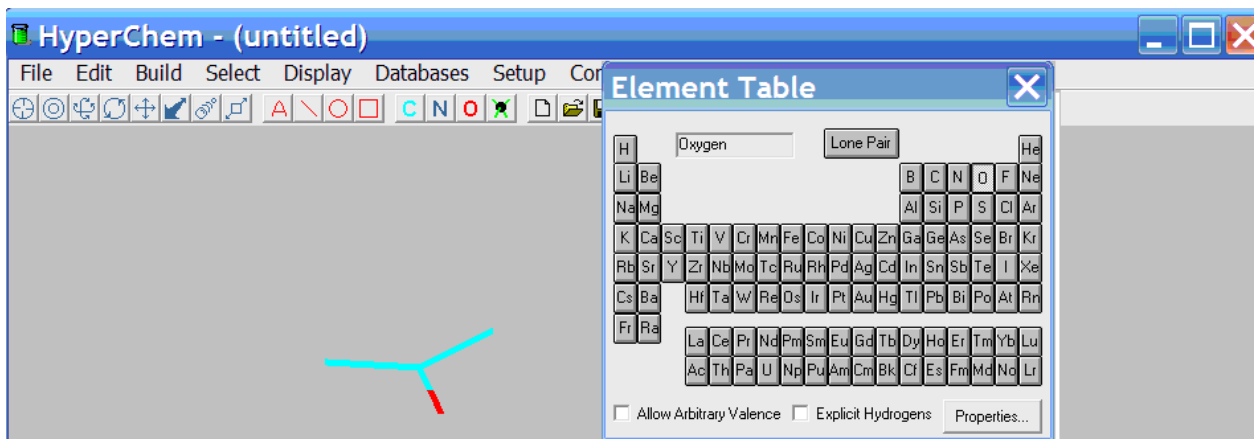
HyperChem programmasida yarim empirik TNDO usuli yordamida YaMR spektrlarini olish imkoniyati mavjud.

IQ-spektrlar hisobi

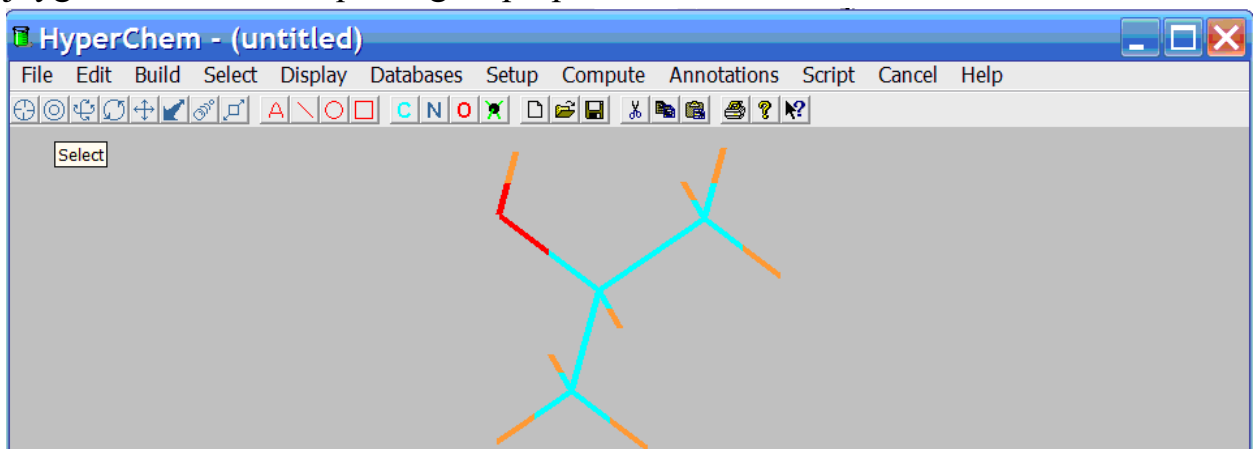
Tebranish turlarini mukammal o'rganish va animatsion holatda ko'rish uchun kvant-kimyoviy hisoblashlardan foydalanish maqsadga muvofiqdir. Hyperchem - tebranishlarni vizual ko'rsatib bera oladigan, eng qulay programmalar majmuasi hisoblanadi. Lekin, shuni takidlab o'tish kerakki, eksperimental va nazariy IQ-spektrlar intensivliklari faqat ayrim DFT (Density Functional Theory- funksional zichlik nazariyasi) usullari bilan hisoblangandagina mos tushishi mumkin. Ammo, eksperimental va nazariy IQ-spektrlardagi to'liq soni (ν , cm^{-1}) qiymatlari yarim empirik, noempirik (ab initio) va funksional zichlik nazariyasi (DFT) usullari bilan hisoblaganda ham 200 cm^{-1} - gacha farq qilishi mumkin. Shuning uchun ham IQ-hisoblashlarda ko'paytiriluvchi koeffitsientlardan (weighting factors) foydalaniladi. Instrumentlar panelidan chizish (Draw) tugmasini bir marta bosib, bir nuqtadan uch tomonga chiziq chizamiz:



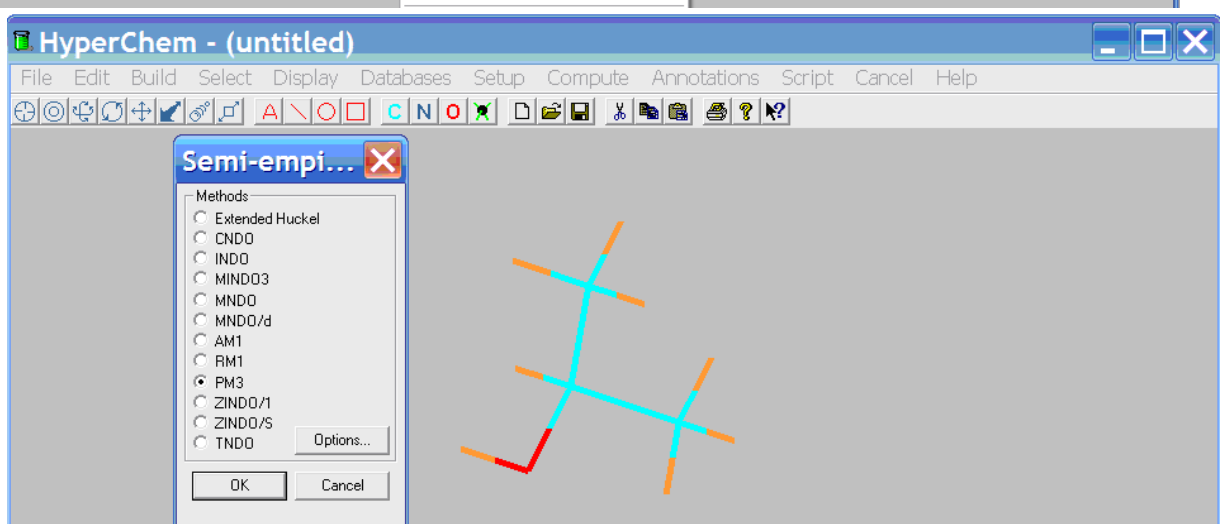
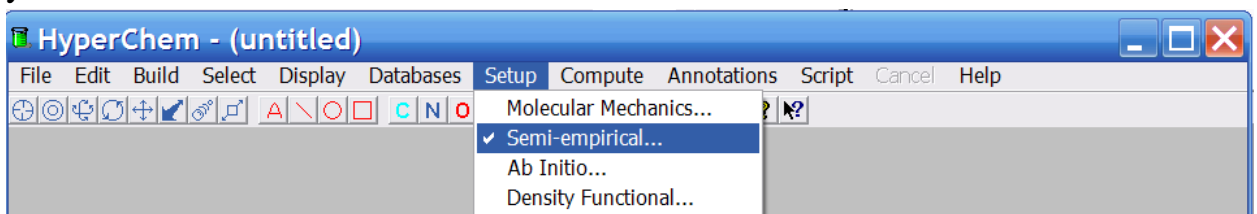
Chizish (Draw) tugmasini ikki marta bosib, elementlar jadvali ochiladi va undan kislorod atomi belgilab olinadi. Bu amalni instrumentlar panelidagi kislorod atomini (O) belgilash orqali ham amalga oshirsa bo'ladi. Undan keyin, kursorni chizilgan chiziqlardan birining uchiga bosiladi. Elementlar jadvalidan uglerod atomi belgilab olinib, qolgan ikkita chiziq uchiga va chiziq birlashgan nuqtaga bosiladi.

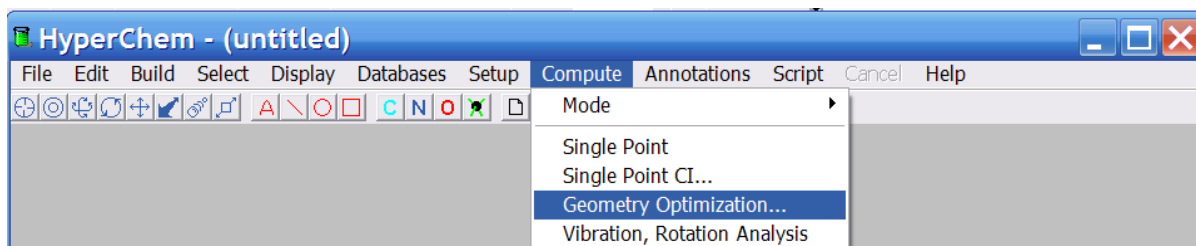


Shundan keyin, belgilash (Select) tugmasini ikki marta bosiladi, natijada kerakli joyga vodorod atomi qo‘shilgan, propanol-2 strukturasi hosil bo‘ladi:

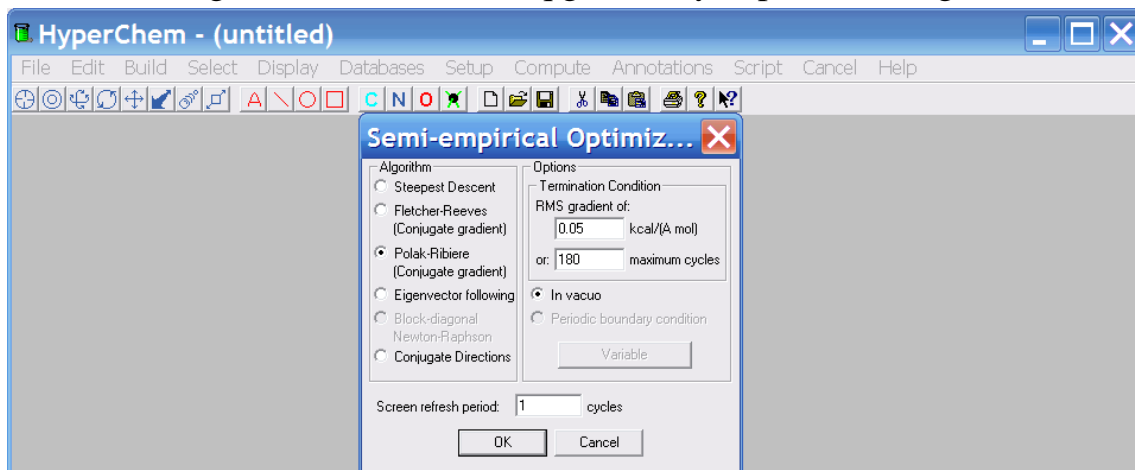


Chizilgan geometriyani yarim empirik (semi-empirical) hisoblash usuli yordamida optimizatsiya qilish uchun menyular satridagi Setup–ga kiriladi va RM3 metodi belgilab olinib, hisoblash (Compute) qicmidan Geometry Optimization yozuvi bosiladi





Muqobillash (optimizatsiya) algoritmi sifatida Polak-Ribiere algoritmi belgilanadi. OK tugmasini bosish bilan oq geometriya optimal holatga keltiriladi.



Shundan keyin molekulaning IQ-spektrini hisoblash mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

12-MA'RUZA

ZAMONAVIY INTEGRALLANGAN HISOBLASH DASTURLARI PAKETI

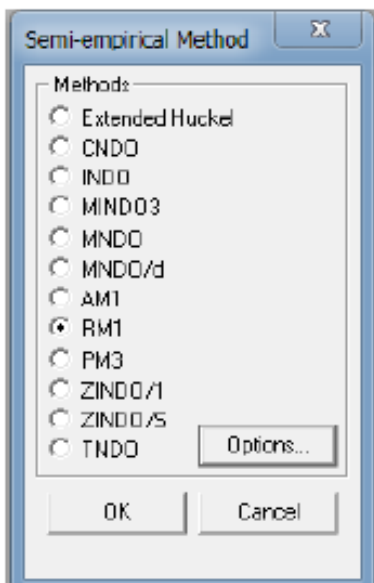
Reja:

1. Kimyoda qo'llaniladigan hisoblash majmualari
2. ChemDraw, ChemWindow va IsisDraw programmalarida ishlash

Ta'kidlab o'tilganidek, informasion texnologiyalar rivojlanishi bilan kimyoda ishlatiladigan programma majmualari sifat va miqdor jihatdan rivojlandi va rivojlanmoqda. Ularning asosiy turlari www. internet saytida tavsiflangan. Biz faqat ayrimlari haqida to'xtalamiz xolos. Eng birinchi yaratilgan va mashhur hisoblash majmualaridan biri J. Popl tomonidan yaratilgan GAUSSIAN hisoblash majmuasidir. Bugungi kunda ushbu usulning shaxsiy kompyuterlarga mo'ljallangan Windows va Linux operatsion sistemalarida ishlaydigan variantlari yaratilgan. GAUSSIAN

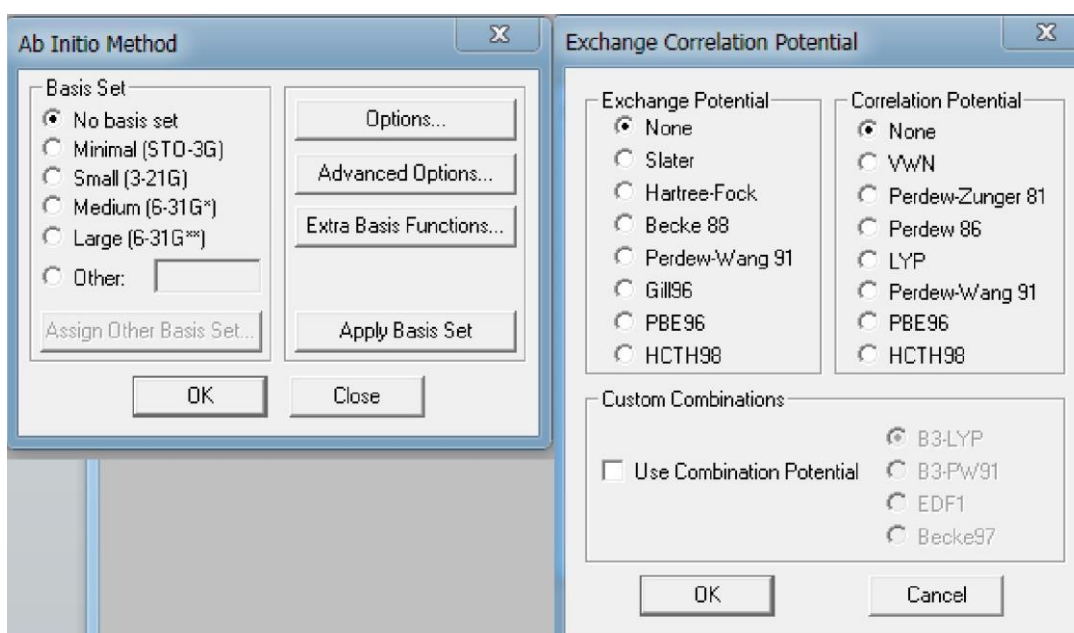
hisoblash majmuasi keng imkoniyatga ega bo'lib, kimyoning deyarli barcha sohalaridagi muammolarni yechishga mo'ljallangan va o'z ichiga ayrim yarim empirik hamda juda ko'p noempirik hisoblash usullarini qamrab olgan.

GAMESS (General Atomic and Molecular Electronic Structure System) Gordon guruhi tomonidan yaratilgan kvant-kimyoviy hisoblash majmuasi sanaladi. Uning PC/GAMESS varianti A. Granovskiy tomonidan Windows uchun modifikasiya qilingan. Ushbu variant 2009 yildan boshlab Firefly deb nomlanmoqda. U bir necha yarim empirik va noempirik hisoblash usullarini o'z ichiga olgan. Yana shuningdek, DFT, MP2-4 hisoblashlarini amalga oshirish mumkin. UB- va IQ-spektrlarini DFT va noempirik usullarda hisoblash mumkin.



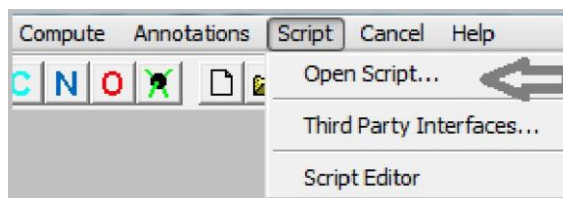
Ham yarim empirik ham noempirik, yana shuningdek molekulyar mexanika usullarida hisob-kitob o'tqazishimkoniyatini beruvchi majmualardan biri HyperChem hisoblanadi. GAUSSIAN va GAMESS programmalaridan farqli ravishda hisoblanishi kerak bo'lgan birikmaning geometriyasi xuddi qalam bilan chizilgandek hosil qilinadi va hisoblashlarni bevosita kuzatib turish imkoniyati mavjud, yani vizualizatsiya qilingan. HyperChem programmasiga MM+, AMBER, BIO+ va OPLS MM usullari kiritilgan. Yarim empirik usullarining qariyb hammasi kirgan:

No empirik usullar minimal bazis to'plamidan boshlab kichik, o'rta va katta bazis to'plamlari kiritilgan. Undan tashqari, keng turdagi DFT usullari yordamida hisoblashlar olib boorish mumkin.



Molekulyar dinamika hisoblashlarini ham amalga oshirish mumkin. Reaksiyalarni modellashtirish va o'tish holatlarini topish mumkin. Undan tashqari, HyperChem programmasida bajariladigan ishlar uchun script fayl yordamida algoritmlarni tuzish mumkin.

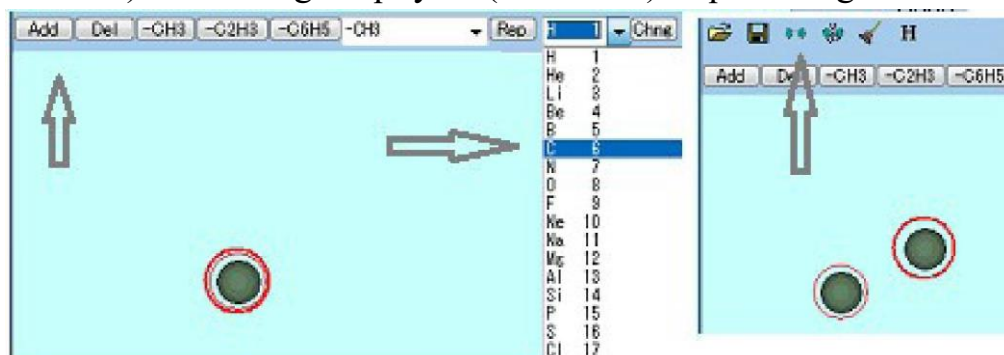
Yuqorida keltirilganlar *.txt fayl ko'rinishida yoziladi. Undan keyin *.txt fayl kengaytirgichi *.scr qilib o'zgartiriladi va quyida ko'rsatilgan "Open Script"-dan ochiladi:



Yarim empirik hisoblashlar uchun mo'ljallangan, keng tarqalgan majmualardan biri MOPAC sanaladi. J. Styuart (J. Stewart) 1981 yildan boshlab uni yaratishni boshlagan, lekin birinchi varianti 1989 yilda yaratildi. 1989-2000 yillar mobaynida kimyoning barcha muammolarini yechishga bag'ishlangan ilmiy maqolalar turli xil nashrlarda chop etildi. Ilk variantlarida (Mopac6 va Mopac7) MINDO/3, MNDO, AM1 va PM3 usullari kiritilgan edi. Bugungi kudagi oxirgi versiyasi MOPAC2012 programmasida MINDO/3, MNDO, AM1, PM3, RM1, PM6 va PM7 yarim empirik usullari mujassam.

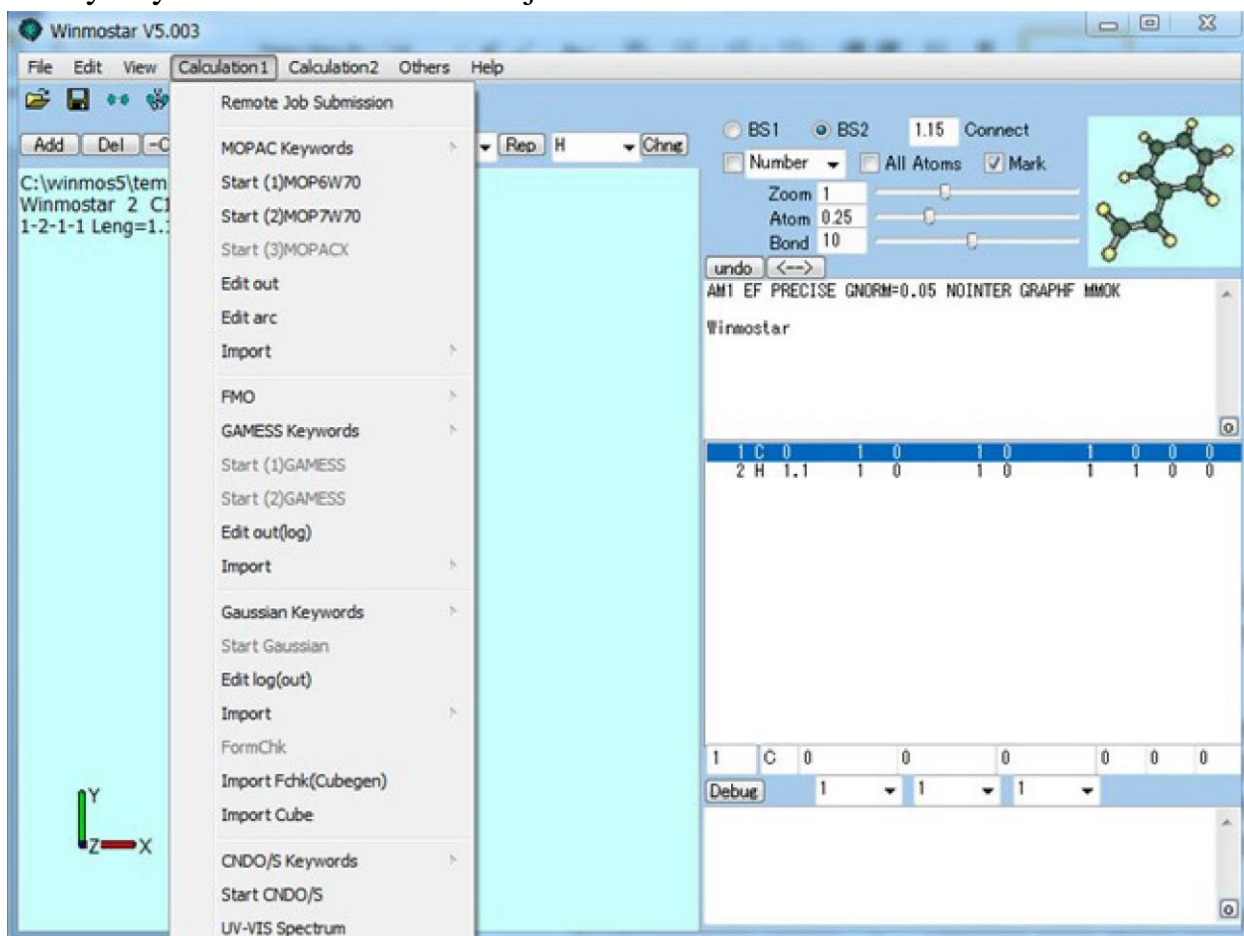
Kimyoda qo'llanilishi mumkin bo'lgan hisoblash majmualari, imkoniyatlari va boshqa qo'shimcha ma'lumotlarni maxsus internet saytlaridan olish mumkin. (Masalan, <http://www.freechemical.info/freeSoftware/kinds.php>)

Yuqorida Avogadro, GaussView, MaSK, ChemCraft va WinMostar interfeyslarida Mopac, Gamess yoki Gaussian input fayllarini tuzish mumkinligi aytiladi. Bu interfeyslarning ichida Yaponiyalik olimlar tomonidan yaratilgan WinMostar (www.winmostar.com) programmasi keng imkoniyatlarga ega. Unda birikmalarning geometriyasini chizgan holda, Mopac, Gamess va Gaussian programmalari uchun input fayllarni hosil qilish mumkin. Bu programmada birikma strukturasi chizish, tog'rirog'i hosil qilish belgilangan atomga ma'lum atomni qo'shish (Add atom) hamda bog'ni qo'yish (Add bond) orqali amalga oshiriladi.

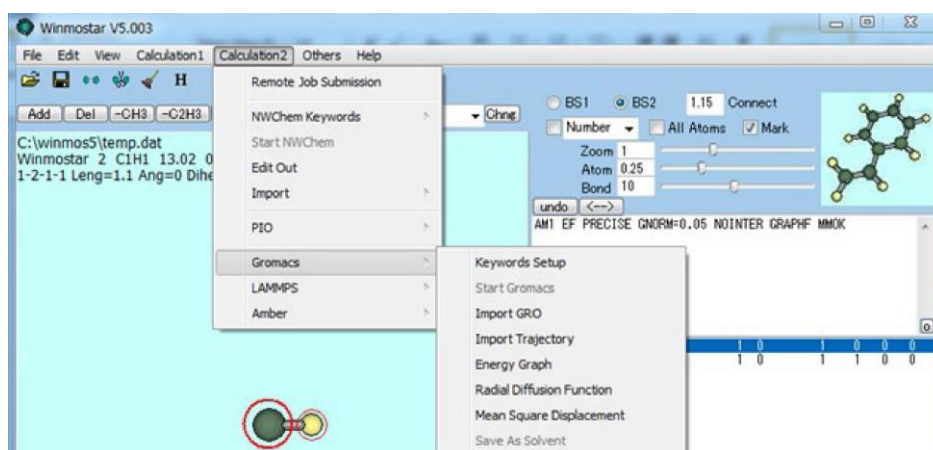


Bu programmada mavjud bo'lgan CNDO/S hisoblash usuli bilan xromofor

tutgan birikmalarning ultrabinafsha va ko'rinuvch spektrlarini hisoblash mumkin. MOP6W70 va MOP7W70 Mopac programmalari yordamida ham yarim-empirik kvant-kimyoviy hisoblash amallarini bajarish mumkin.



Avtorlar Gromacs, LAMMPS va Amber kabi molekulyar dinamika programmalari uchun ham dastlabki hisob (input) fayllarini tuzishni yo'lga qo'yishgan.

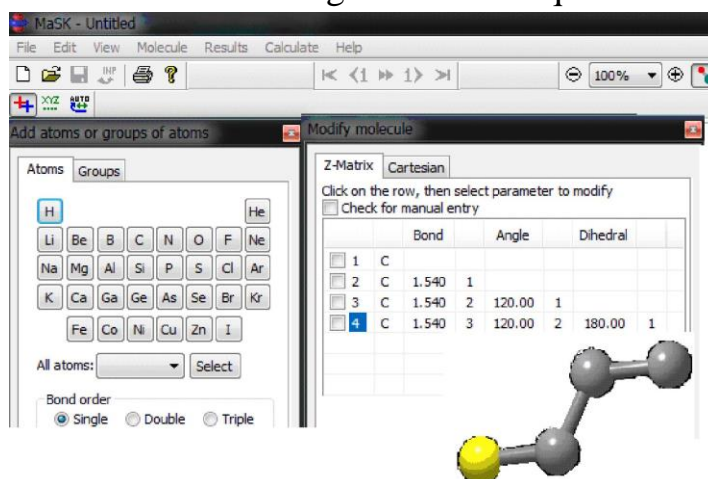


Programmaning uch oylik demo (trial), bir yillik student va ilmiy xodimlarga mo'ljallangan kommersial litsenziyalari mavjud.

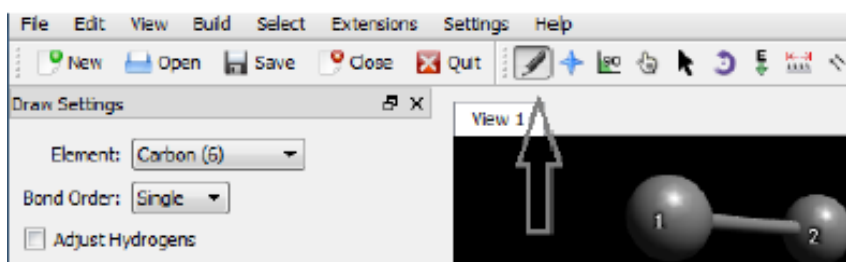
GaussView (www.gaussian.com) interfeysi asosan Gaussian programmasida hisoblashlarni amalga oshirish va hisoblash natijalarini (*.out va *.log fayllarni) o'qishga mo'ljallangan (komertsial) majmua.

ChemCraft (www.chemcraftprog.com/order.html) programmasining cheklangan imkoniyatli, olti oylik demo varianti mavjud. Unda birikma geometriyasini chizish mumkin emas. Gaussian va Gamess input fayllarinida keltirilgan birikma strukturasini visual qilish imkoniyatiga ega. Ushbu programmada Gaussian va Gamess hisoblash natijalarini tahlil qilish mumkin. Ayrim input fayllarni bir-biriga o'gira oladi.

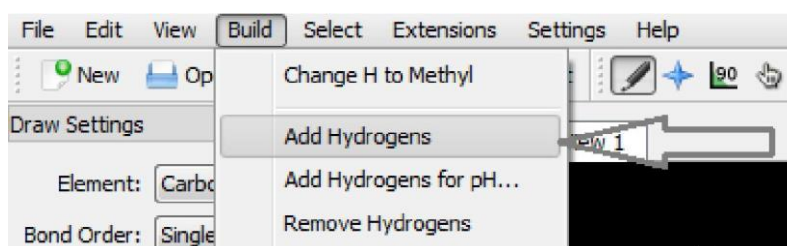
MaSK interfeysi Gamess programmasi uchun birikma geometriyasini chizish yo'li bilan input fayl tuzish imkoniyatiga ega. Yuklab olish va o'rnatish mumkin (bepul). Birikma geometriyasini chizish uchun avvalo “++” (Add atoms or groups of atoms) belgi va kerakli atom tanlanadi. Keyingi atom tanlangandan keyin “++” oldingi atom ustiga bosiladi va programmaning o'zi kimyoviy bog' hosil qiladi. Masalan, “++” bilan H atomi tanlanib, oldingi C atomi ustiga bosilsa C-H bog'i hosil bo'ladi. Shu amal yana takrorlansa H-C-H guruhini hosil qiladi.



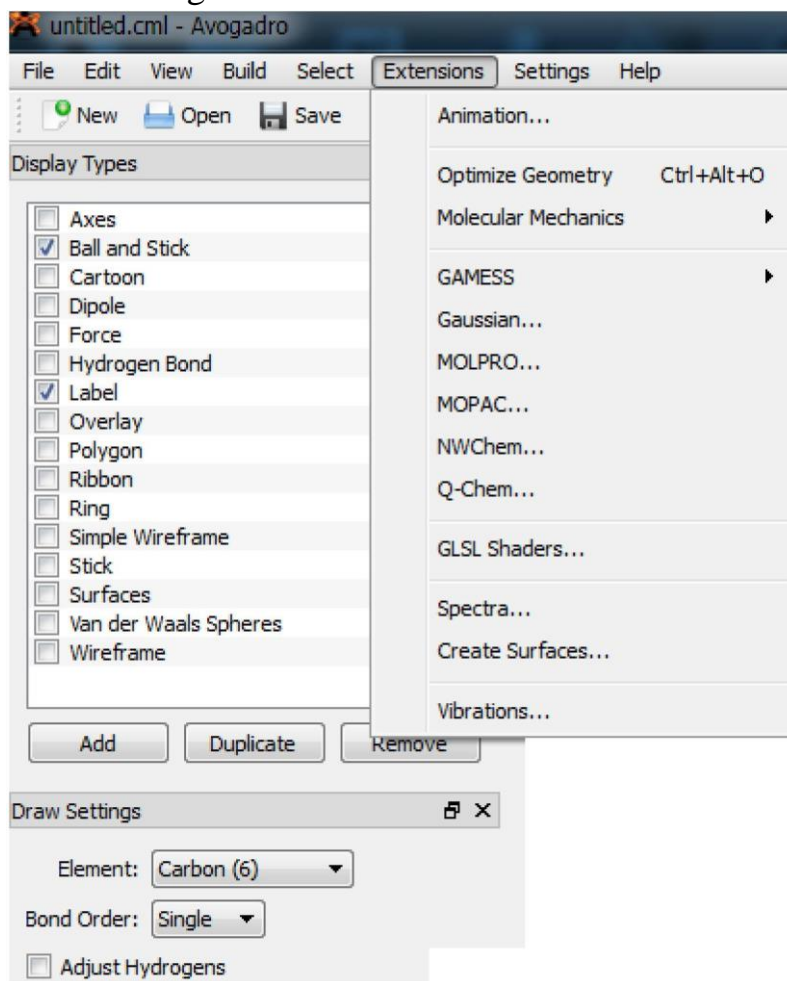
Avogadro – interfeys hamda molekulyar mexanika hisoblash majmuasi (bepul). Birikmalar geometriyasi chizish (draw tool) yo'li bilan hosil qilinadi. “Draw tool” programmada “qalam” belgisi bilan ifodalangan.



Chizilgan C atomlariga “Add hydrogens” tugmasini bosish orqali H atomlarini qo'shish mumkin.



Avogadro programmasi ko'pchilik kvant-kimyoviy hisoblash majmualari uchun input fayllar tuzish ko'zda tutilgan.



Birikma geometriyasi chizilayotganda boglangan atomlar ketma-ketligi saqlanishi kerak. Hisoblash jarayonlari visuallashtirilgan majmualarda notartib holatda chizilgan struktura normal optimizatsiya qilinishi mumkin. Lekin, Gamess, Gaussian kabi programmalarda noempirik hisoblashlarda xatoliklarga yo'l qo'yilishi mumkin.

ChemDraw, ChemWindow va IsisDraw programmalarida birikmalarning faqat ikki o'lchamli geometriyasi chizilishi mumkin. Bu programmalarda chizilgan geometriyalar kvant-kimyoviy hisoblashlarga yaroqsiz. Ammo, ChemOffice programmasi ikki o'lchamli birikma geometriyasini uch o'lchamli holatga o'tqaza oladi (Get 3D Model → Edit 3D):

Umuman olganda, ChemOffice keng imkoniyatga ega, kimyogarlarga to'liq ko'makchi vazifasini o'tay oladigan programma (pullik).

ChemOffice programmasi quyidagi tarkibiy qismlardan iborat:

1. ChemDraw;
2. Chem 3D;
3. ChemFinder.

ChemDraw birikmalarning ikki o'lchamli tuzilish formulalarini chizish mumkin.

Chizilgan strukturani nomlash mumkin (Structure→Convert Structure to Name) va nom asosida struktura chizish mumkin (Convert Name to Structure).

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

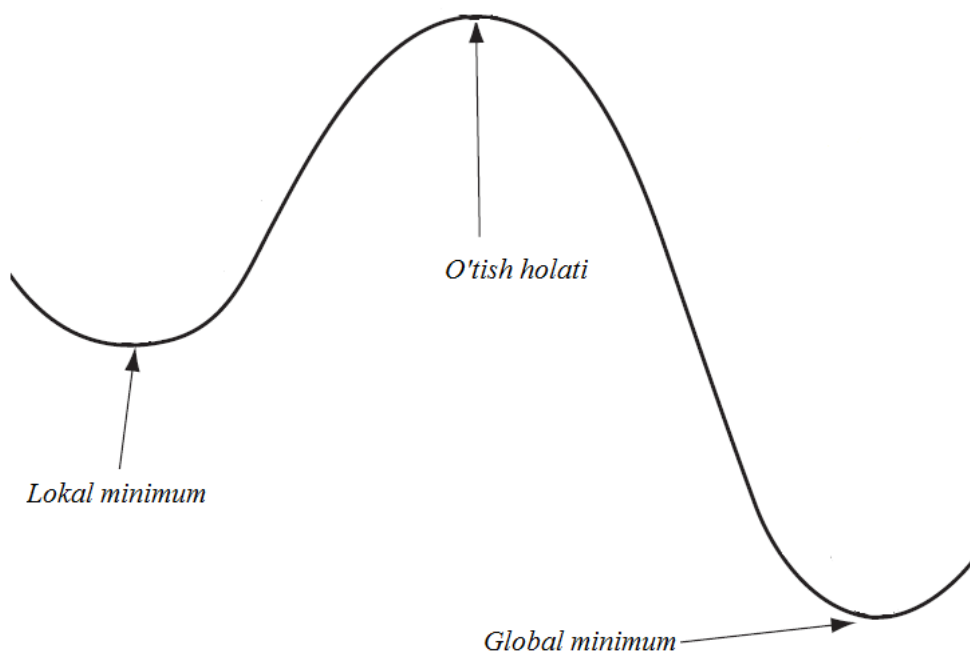
13-MA'RUZA

Masala yechishning tegishli uslubini tanlab olish. Masala va uning parametrlarini tuzishning asosiy qoidalari

Reja:

1. Tautomerlarni proton ko'chishini o'rganish

Hisoblashlar yordamida amin-imin, imin-enamin, keto-enol, laktam-laktim va boshqa tautomerlarning qaysi formasi barqarorligini va bir-biriga o'tish baryerini aniqlash mumkin. Mopac2012 programmasida o'tish holatini TS (Transition search) kalit so'zi, Gaussianda esa opt=ts kalit so'zi yordamida topish mumkin. Undan tashqari, Mopac programmasida SADDLE kalit so'zi yordamida ham o'tish holatini topish mumkin. Firefly/Gamess programmasida RUNTYP=SADPOINT kalit so'zi yordamida o'tish holati topiladi. O'tish holati bir tautomer holatdan ikkinchi ikkinchi tautomer holatiga o'tishdagi energetic sathning maksimum holati:



Firefly programmasida AM1 usuli bilan timin molekulasining laktam va laktim

holatlarining hosil bo'lish issiqligi (ΔH_f) va umumiy energiyasi (E_{total}) hamda bir-biriga o'tish baryeri (E_a) hisoblandi.

Laktam holat input fayli:

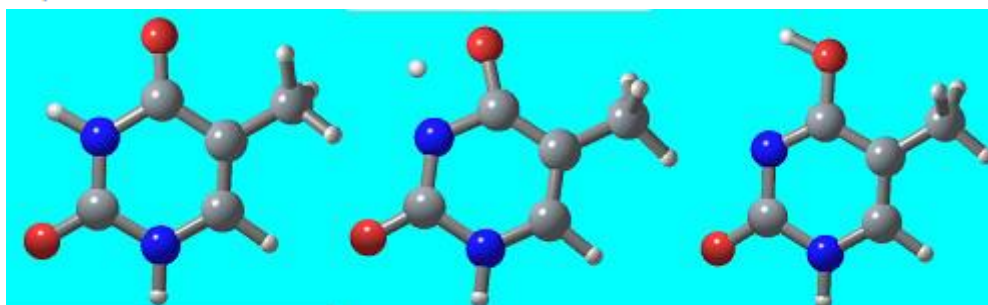
```
! GAMESS (US) STYLE. Input created by MaSK (http://ccmsi.us/mask)
$SYSTEM $END
$CONTRL RUNTYP=OPTIMIZE SCFTYP=RHF COORD=CART $END
$BASIS GBASIS=AM1 $END
$STATPT NSTEP=100 $END
$DATA
C5H6N2O2
C1
N      7.0  -0.0034260382  0.1395529623  0.0038032393
C      6.0  1.3972389644  0.1229425235  0.0494849643
N      7.0  2.0773307023  1.3605096546  0.0133492384
C      6.0  1.3805104399  2.5488856863  -0.0637087285
C      6.0  0.0183364915  2.5897346127  -0.1103010574
C      6.0  -0.7508850001  1.3300980097  -0.0694279551
O      8.0  -1.9899832286  1.2499289285  -0.0905872256
O      8.0  2.0425115988  -0.9443629286  0.1202623490
C      6.0  -0.7400940457  3.8512110463  -0.2114918983
H      1.0  1.9983889199  3.4664299815  -0.0844958114
H      1.0  -0.4726506506  -0.7401214831  0.0332830511
H      1.0  3.0703146013  1.3401194586  0.0512731282
H      1.0  -0.1779442443  4.6975147998  0.2540818738
H      1.0  -1.7302399725  3.7476880824  0.3006922154
H      1.0  -0.9318925381  4.1001556656  -1.2862173832
$END
```

Laktim holat input fayli:

```
! GAMESS (US) STYLE. Input created by MaSK (http://ccmsi.us/mask)
$SYSTEM $END
$CONTRL RUNTYP=OPTIMIZE SCFTYP=RHF COORD=CART $END
$BASIS GBASIS=AM1 $END
$STATPT NSTEP=100 $END
$DATA
C5H6N2O2
C1
N      7.0  -0.0720345416  0.1245846082  -0.0295275466
C      6.0  1.3348746217  0.1115672813  0.0598328181
N      7.0  2.0507070879  1.3561180413  0.0648579143
C      6.0  1.3794438384  2.5452559719  -0.0148319853
C      6.0  0.0048422484  2.5924913766  -0.1037039012
C      6.0  -0.6758046089  1.3059214183  -0.1055246715
O      8.0  -2.0386824248  1.3726339571  -0.1929249930
O      8.0  2.0154016998  -0.9281972259  0.1367459232
C      6.0  -0.7575485713  3.8485853748  -0.1925166666
H      1.0  1.9885096007  3.4690920589  -0.0042532600
H      1.0  3.0430002334  1.3296722325  0.1285981315
H      1.0  -2.4168928613  0.4746255920  -0.1859808834
H      1.0  -0.0820906597  4.7375979186  -0.1459256773
H      1.0  -1.4941617492  3.9106660331  0.6482474905
H      1.0  -1.3317139135  3.8827783613  -1.1530926927
$END
```

O'tish holatni topish input fayli quyidagicha:

```
! GAMESS (US) STYLE. Input created by MaSK (http://ccmsi.us/mask)
$SYSTEM $END
$CONTRL RUNTYP=SADPOINT SCFTYP=RHF COORD=CART $END
$BASIS GBASIS=AM1 $END
$STATPT HESS=CALC $END
$DATA
C5H6N2O2
C1
N      7.0   0.0067656022   0.1211817508  -0.0686169682
C      6.0   1.3858967684   0.0807580171   0.0684305859
N      7.0   2.0554294863   1.3584604847   0.1106404982
C      6.0   1.3643709415   2.5374569935   0.0201426065
C      6.0  -0.0102338675   2.5889742654  -0.1155409869
C      6.0  -0.6651655361   1.3085299640  -0.1578971950
O      8.0  -1.8955540284   0.9104328344  -0.2782681564
O      8.0   2.0898011287  -0.9431429964   0.1570313801
C      6.0  -0.7773027261   3.8412502904  -0.2050490925
H      1.0   1.9668659869   3.4656504554   0.0601741784
H      1.0  -1.2969712650  -0.3538514344  -0.1951768702
H      1.0   3.0457143342   1.3524156203   0.2057341529
H      1.0  -0.1037211778   4.7135414420  -0.3911978693
H      1.0  -1.3378832977   4.0225552450   0.7472261635
H      1.0  -1.5229433496   3.7793240679  -1.0373544268
$END
```

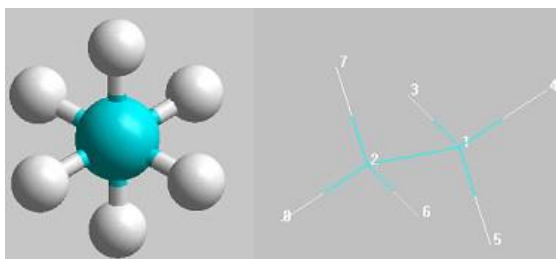


Laktam		O'tish holati		Laktim	
ΔH_f	= -61.10	ΔH_f	= -48.12	ΔH_f	= -48.39
kkal/mol		kkal/mol		kkal/mol	
E_{total}	= -	E_{total}	= -	E_{total}	= -
65.3284329945		65.33077570118		65.3081825516	

Hosil bo'lish issiqligi kattaliklari 12.71 kkal/mol-ga laktam holat laktimga nisbatan barqaror ekanligini ko'rsatmoqda. Laktim holatdan laktam holatga o'tish baryeri $E_a=0.27$ kkal/mol. Laktam holatdan laktim holatga o'tish baryeri $E_a=12.98$ kkal/mol.

Konformatsion izlanishlar: ichki aylanish baryerini o'rganish

Etan molekulasida misolida metil guruhining ikkinchi metil guruhiga nisbatan ichki aylanishini qaraymiz. Buni Mopac programmasida bajarish juda qulay. Mopac z-matritsasi tuzish bo'limida ta'kidlanganidek, torsion bog' uzunligi kattaligidan keyingi "1" soni "-1" qilib kiritilsa ushbu torsion burchakni berilgan nuqta (POINT) va qadam (STEP) asosida aylantirish hisoblashi bajariladi.



Aytaylik H7-C2-C1-H4 torsion burchakni C2-C1 o'qi atrofida aylantirish kerak. Ushbu torsion burchak 59.99° ekanligini z-matritsadan ko'rishimiz mumkin. Torsion burchakdan (59.9989 -dan) keyingi 1 soni (aylanaga olingan) muqobillash jarayonida ushbu torsion burchakni ham muqobillash kerakligini bildiradi. Ushbu 1 soni oldiga “-” ishorasini qo'ysak programma “Reaction coordinate calculation” hisoblashi amalga oshirilishini tushunadi.

```
Name :
MOPAC file
C      00000.0000  0  00000.0000  0  00000.0000  0  0  0  0
C      00001.5400  1  00000.0000  0  00000.0000  0  1  0  0
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00000.0000  0  1  2  0
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00119.9994  1  1  2  3
H      00001.0900  1  00109.4714  1  00239.9997  1  1  2  3
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00299.9994  1  2  1  4
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00059.9989  ① 2  1  4
H      00001.0899  1  00109.4714  1  00179.9991  1  2  1  4
0
```

Bu hisoblashni to'liq bajarish uchun “Coordinate reaction set” qismida qadamlar soni va gradus ko'rsatiladi. $0-360^\circ$ oraliqda har 10° qadam bilan aylantirib ko'rish maqsadida 36 nuqtani (POINT=36) tanladik.

AM1 CHARGE=0 GNORM=0.01 STEP=10 POINT=36 GEO=OK

Name:

MOPAC file

```

C      00000.0000  0  00000.0000  0  00000.0000  0  0  0  0
C      00001.5400  1  00000.0000  0  00000.0000  0  1  0  0
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00000.0000  0  1  2  0
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00119.9994  1  1  2  3
H      00001.0900  1  00109.4714  1  00239.9997  1  1  2  3
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00299.9994  1  2  1  4
H      00001.0899  1  00109.4709  1  00059.9989  -1  2  1  4
H      00001.0899  1  00109.4714  1  00179.9991  1  2  1  4
O

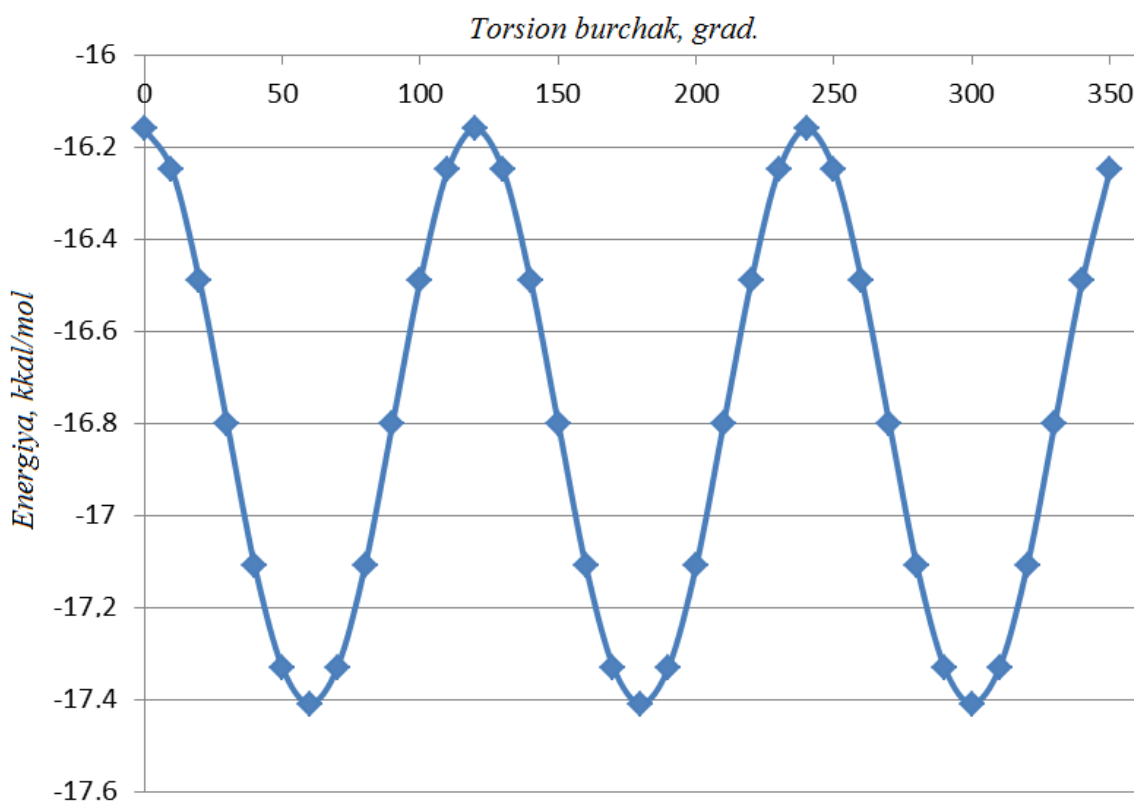
```

Hisoblash natijalari –jadvalda va –rasmda keltirilgan. Ichki aylanish energiyasining torsion burchakka bog'liqlik diagrammasi potensial sathida uchta maksimum va uchta minimumni ko'rishimiz mumkin. Energetik minimum nuqtalari 60, 180 va 300 (yani -60) graduslarda to'g'ri keladi. Energetik sathning maksimum holatlari esa 0, 120 va 240 (yani -120) graduslarda kuzatiladi.

Hisoblash natijalari

Hisoblash natijasi	Tahrirdan keyin		
59.99890 -17.414450	60 -17.41	0	-16,16
69.99890 -17.334331	70 -17.33	10	-16,25
79.99890 -17.113046	80 -17.11	20	-16,49
89.99890 -16.804777	90 -16.80	30	-16,8
99.99890 -16.489038	100 -16.49	40	-17,11
109.99890 -16.252817	110 -16.25	50	-17,33
119.99890 -16.165217	120 -16.16	60	-17,41
129.99890 -16.252737	130 -16.25	70	-17,33
139.99890 -16.488789	140 -16.49	80	-17,11
149.99890 -16.804467	150 -16.80	90	-16,8
159.99890 -17.112846	160 -17.11	100	-16,49
169.99890 -17.334266	170 -17.33	110	-16,25
179.99890 -17.414446	180 -17.41	120	-16,16
189.99890 -17.334301	190 -17.33	130	-16,25
199.99890 -17.112908	200 -17.11	140	-16,49
209.99890 -16.804545	210 -16.80	150	-16,8
219.99890 -16.488869	220 -16.49	160	-17,11
229.99890 -16.252786	230 -16.25	170	-17,33
239.99890 -16.165234	240 -16.16	180	-17,41
249.99890 -16.252783	250 -16.25	190	-17,33
259.99890 -16.488965	260 -16.49	200	-17,11

269.99890 -16.804700	270 -16.80	210	-16,8
279.99890 -17.112982	280 -17.11	220	-16,49
289.99890 -17.334293	290 -17.33	230	-16,25
299.99890 -17.414445	300 -17.41	240	-16,16
309.99890 -17.334302	310 -17.33	250	-16,25
319.99890 -17.112930	320 -17.11	260	-16,49
329.99890 -16.804625	330 -16.80	270	-16,8
339.99890 -16.488973	340 -16.49	280	-17,11
349.99890 -16.252825	350 -16.25	290	-17,33
359.99890 -16.165221	360 -16.16	300	-17,41
369.99890 -16.252772	10 -16.25	310	-17,33
379.99890 -16.488895	20 -16.49	320	-17,11
389.99890 -16.804546	30 -16.80	330	-16,8
399.99890 -17.112867	40 -17.11	340	-16,49
409.99890 -17.334271	50 -17.33	350	-16,25



Torsion burchakning ichki aylanish energiyasiga bog'liqlik diagrammasi

Demak, AM1 usulida muqobillangan dastlabki geometriyada bir metil guruhi H atomlari ikkinchi metil guruhi H atomlariga nisbatan eng optimal holatda joylashgan ekan. Gaussian programmasida xuddi Mopac programmasidek Gaussian z-matritsasi yordamida kerakli torsion burchakni belgilangan nuqta va qadamlar yordamida amalga oshirish mumkin.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

14-MA'RUZA

Hisob uslublarini amaliyotda qo'llanilishi. Kimyoviy birikmalarning electron tuzilishi va xossalari

Reja:

1. Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi.
2. Kimyoviy masalalarning echimlarini asosiy qoidalari va amaliy ko'rsatmalari.

OZOD VALENTLIK INDEKSI

Ozod valentlik indeksi – F yangi kvant himyaviy tushuncha bulib, u Vernerning koldik moyillik tushunchasiga yoki Tilening parsial valentlik tushunchasiga mos keladi.

Agar biror-bir atomning ozod valentlik indeks 0 ga teng bulsa, u holda shu atom yangi bog hosil kilaolmaydi. F ni quyidagi formula asosida hisoblanadi

$$F=N_{\max} - N_r \quad (127)$$

N_{\max} – mazkur atom hosil kilaolishi mumkin bulgan boglarning maksimal soni. Moffit kur-satgandek uglerod atomi uchun $N_{\max}=3+ =4,732$; N_r - berilgan atomdagi boglar tartibining yigindisi

N_r ni hisoblash uchun berilgan atomdagi va boglarnin sonini aniqlash lozim. Har bir bogning tartibi 1 ga teng. bogning tartibini esa yuqorida korsatilgan usulda hisoblanadi. SHu ikkalasining yigindisi N_r ni beradi.

OZODLIK VALENTLIK INDEKSINI HISOBLASHGA MISOLLAR

1. BUTADIEN

Butadien molekulasidagi uglerod atomlarining ozod valentlik indeksini hisoblash uchun yuqorida olingan kiymatlardan (125) (126) foydalanamiz.

1 ni S atomi 3 ta va 1 ta bogi hosil kilgan.

SHuning S1 ning umumiy boglar tartibi;

$$N_1 = 0,894 + 3 \cdot 1,0 = 3,894$$

2 chi S atomning umumiy boglar tartibi;

$$N_2 = 0,894 + 0,447 + 3 \cdot 1,0 = 4,341$$

Molekula simmetrik tuzilishiga ega bulganligi uchun

$$N1=N4; \quad N2=N3$$

Shu natijalardan foydalanib (127) formula asosida butadien uchun F1; F2; F3 va F4 ni hisoblash mumkin.

$$F1 = F4 = 4,732 - 3,894 = 0,838$$

$$F2 = F3 = 4,732 - 4,341 = 0,391$$

2. BENZOL

Benzol molekulasiidagi har bir S atomi uchun N2 ni hisoblasak, ularning qiymati bir hil chikadi.

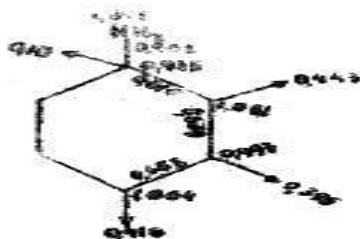
$$N1 = N2 = \dots = N6 = 1,667 \cdot 2 + 1 = 4,334$$

SHuning uchun benzol molekulasiidagi hamma uglerod atomlarining ozod valentlik indeksi bir hil songa teng buladi.

$$F1 = F2 = \dots = F6 = 4,723 - 4,334 = 0,398$$

MOLEKULYAR DIAGRAMMALAR

Odatda molekularidagi kvantimiyaviy hisoblashlarning asosiy natijalari molekulyar diagrammalarda kursatilgan buladi. Molekulyar diagramma deb berilgan molekula uchun bogning tartibini, ozod valentlik indeksini va -elektron enchiligini kursatuvchi molekulyar formulaga aytiladi. Masalan, anilinning molekulyar diagrammasi quyidagicha yoziladi.

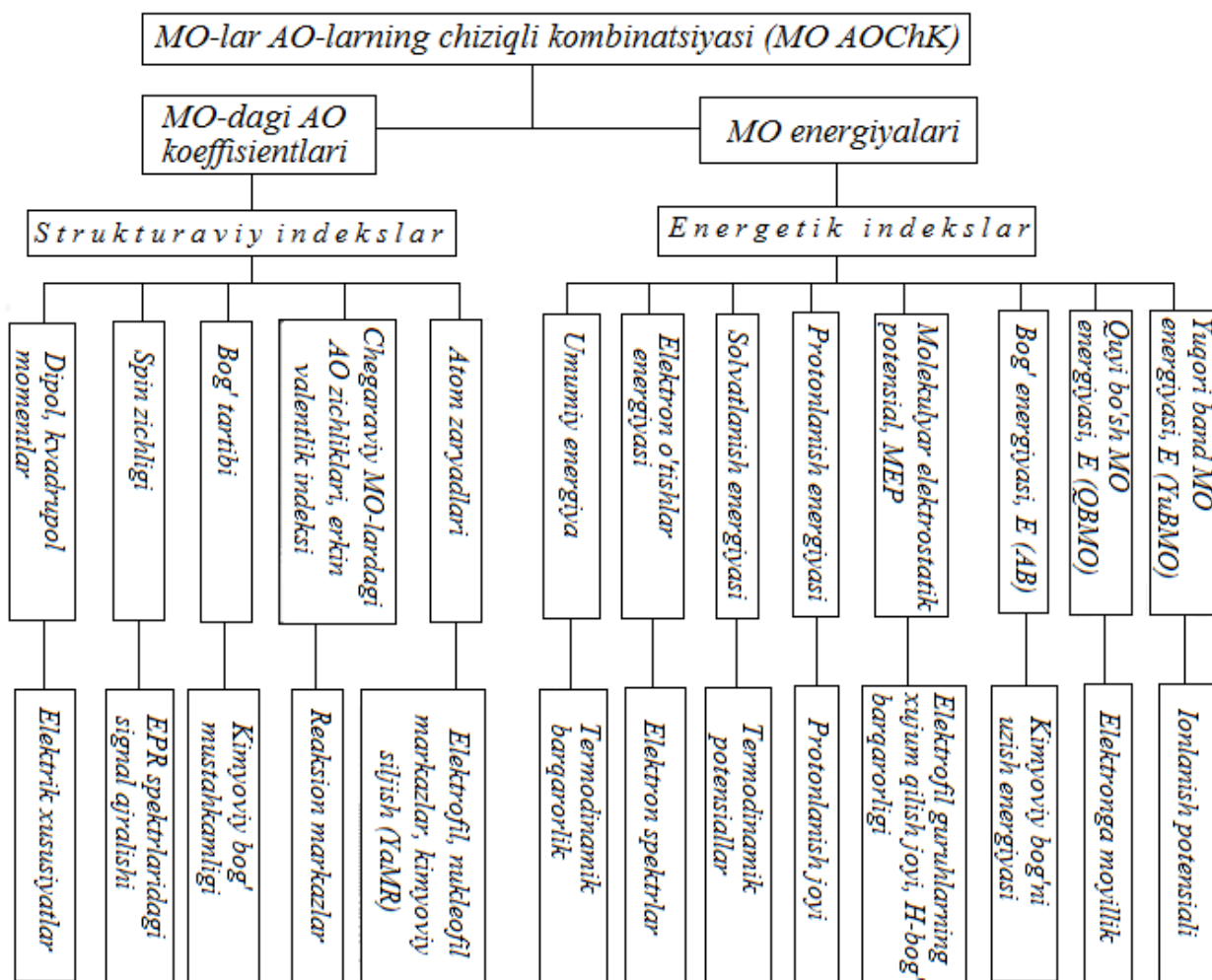


Bu diagrammada -elektron zichlikning qiymati har sir atomning yonida korsatilgan, -bogning tartibi esa atomlarni birlashtiruvchi chizik boylab yozilgan. Strelkalarining ohirida har bir S atomiga tegishli bolgan ozod valentlik indeksining qiymati korsatilgan.

Molekulyar diagrammalarni bilgan holda molekulaning himiyaviy reaksiyaga kirishish ko-biliyati hakida kerakli hulosalarni olishimiz mumkin.

Birikmalarning tajribadagi aniqlangan reaksiyon qobiliyati to'g'risidagi ma'lumotlar bilan korrelyatsiya qiluvchi kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida aniqlangan elektron va energetik xarakteristikalar reaksiyon qobiliyat indeksleri (RQI) hisoblanadi. Ular ikki guruhga bo'linadi. Birinchisi, kimyoviy reaksiyalarda ta'sirlashayotgan birikmalarning o'tish holatini inobatga olgan holda aniqlanadi. Ikkinchisi, statistik RQI - dastlabki birikmaning electron tuzilishini o'rganish asosida aniqlanadigan parametrlar: atom zaryadi, bog' tartibi, orbitallar energiyasi va boshqa

kattaliklar. Bunday parametrlar QSAR sohasida deskriptorlar deyiladi (-rasm). Quyidagi rasmda energetik va strukturaviy indekslar keltirilgan.



Reaksiyon qobiliyat indeksleri va ularning fizik-kimyoviy interpretatsiyasi

Organik birikmalarning reaksiyon qobiliyatini baholashda qo'llaniladigan indeksning asoslaridan biri chegaraviy MO-lardagi (ChegMO) elektron zichlik. Yuqori band MO (YuBMO) va quyi bo'sh MO (QBMO) chegaraviy MO-lar hisoblanadi. Ularning kimyoviy reaksiyalardagi roli yaponiyalik olim K. Fukui tomonidan o'rganilgan. YuBMO-da elektron zichligi yuqori bo'lgan atom elektronodonor atom hisoblanadi va elektrofil reaksiyon markaz ($f_r^E=2(C_r^{YuBMO})^2$) hisoblanadi. QBMO-da elektron zichligi yuqori bo'lgan atom elektronoakseptor atom hisoblanadi va nukleofil reaksiyon markaz ($f_r^N=2(C_r^{QBMO})^2$) hisoblanadi. Orbital RQI element AO-lari kvadratlarining yig'indisi sifatida aniqlanadi:

$$f_r = 2 \sum_i c_i^2 = 2(c_s^2 + c_{p_x}^2 + c_{p_y}^2 + c_{p_z}^2).$$

YuBMO, QBMO orbital energiyalari va ular orasidagi farq ($\Delta E=E_{QBMO}-E_{YuBMO}$, eV) ham muhim ahamiyat kasb qiladi. Birikmalar qatorida YuBMO energiyasining ortishi (band sathning QBMO tomonga ko'tarilishi) birikmaning elektrodonorlik xossasining oshishini ko'rsatadi. QBMO energiyasi birikmalarning

elektronoakseptorlik qobiliyatini (elektronga moyilligini) belgilaydi. Molekulalarning qattiq (η) va yumshoqligi (σ) ChegMO energiyalari asosida aniqlanadi. Qattqliq ionlanish potentsiali (I) va elektronga moyillik (A) ayirmasining 2-ga bo'linganika teng: $\eta=(I-A)/2$; yumshoqlik quyidagicha topiladi: $\sigma=1/2\eta$. Absolyut elektromanfiylik ham ChegMO asosida topiladi: $(I+A)/2=X$.

Qattiq birikmalarning YuBMO va QBMO orasidagi farq (energetik tirqich) katta bo'ladi. Yumshoq birikmalar kichkina energetik tirqichga ega. Pirsonning "Qattiq va yumshoq kislota va asoslar" nazariyasiga ko'ra qattiq kislotalar (masalan: RCO+) ko'pincha qattiq asos bilan (masalan: NH₃, RNH₂ va b.) ta'sirlashadi. Yumshoq kislotalar yumshoq asoslar bilan ta'sirlashadi. Pirson, Fukui va Klopman ishlarini mujassamlashtirilgan holda kimyoviy reaksiyalar orbital va zaryad nazorat bilan boradigan reaksiyalarga ajratiladi

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

15-MA'RUZA

Yangi dorivor moddalarni yaratishning nazariy usullari

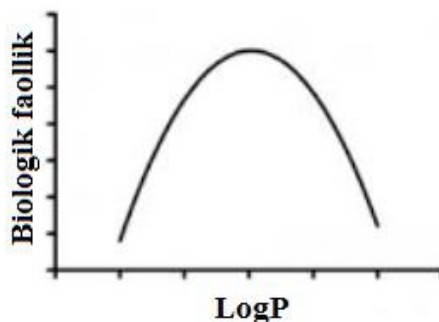
Reja:

1. QSAR/QSPR-Quantitative Structure-Activity/Property Relationship
Birikma strukturasi va biologik faollik (xossa) orasidagi miqdoriy bog'liqlik.

2. Molekulyar doking va virtual skrining

Chet el statistik ma'lumotlarida keltirilicha bitta dorini amaliyotga tadbiiq qilish uchun uning dastlabki sintez qilingan yoki o'simliklardan ajratib olingan vaqtidan hisoblaganda 5 yildan 16 yilgacha vaqt va 100 mln. dollar mablag' sarf bo'larkan. Harajatlarni kamaytirish uchun 1000-ta birikmaning farmakologiyasini o'rganish o'rniga ularning ichidagi faol bo'lishi mumkin bo'lgan bir nechta birikmalarni o'rganish harajatlarni keskin kamaytiradi. Birikmalarning tuzilish formulalari asosida ularning biologik faolliklarini bashorat qilish, struktura-biologik faollik bog'liqliklarini o'rganish talab qilinardi. Bu sohadagi birinchi ishni, bugungi kunda "QSAR otasi" nomini olgan Korvin Hansh 1971 yilda amalga oshirgan. U biologik faollik va LogP orasida miqdoriy bog'liqlik mavjudligini aniqlagan. LogP birikmalarning xujayra membranasidagi lipid qo'shqatlamidan o'tishini ifodalovchi kattalik bo'lib, taqsimlanish koeffisienti deyiladi. LogP QSAR sohasida qo'llanilgan

1-chi deskriptor bo'ldi.



Hansch diagrammasi

Deskriptor – organik birikmalar tuzilishining o'ziga xos hususiyatini ifodalovchi parameter. Birikma tuzilish formulasi asosida hisoblanadigan xar qanday son deskriptor bo'lishi mumkin. Masalan, molekulyar massa, atom zaryadlari, dipol moment va boshqalar.

Bugungi kunda hisoblash majmualarida birikmalarning elektron tuzilishini va geometrik xarakteristikalarini ifodalash maqsadida besh mingdan ortiq deskriptorlar aniqlangan. Deskriptorlarni hisoblaydigan maxsus programmalar yaratilgan. Shulardan eng mashxuri Dragon (komersial) programmasi hisoblanadi. Uning oxirgi varsiyasi ma'lum bo'lgan deskriptorlarning hammasini hisoblash imkoniyatini beradi. Uning bepul variantida 1400-ga yaqin 18-ta kategoriyadagi deskriptorlarni hisoblash mumkin

Yaratilgan deskriptorlar birikmalarning reaksiyon qobiliyati, fizik-kimyoviy xarakteristikalari va biologik faollikni matematik modellashda, yani miqdoriy jihatdan baholovchi matematik tenglamalar (modellar) tuzishda keng qo'llanilmoqda.



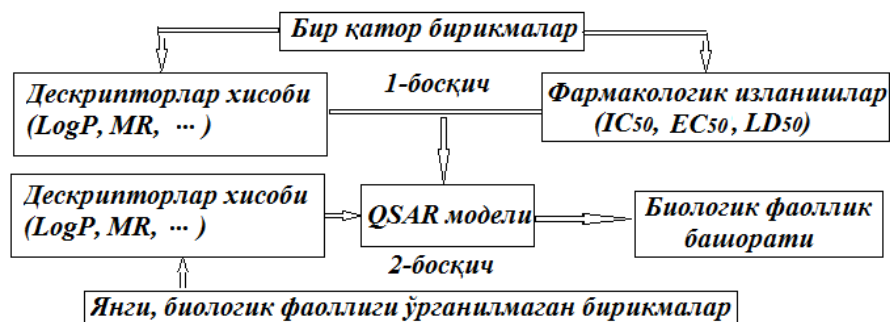
-Dragon programmasidagi deskriptorlar kategoriyasi.

QSAR yoki QSPR sohasida 1-chi bosqichda bir qator birikmalarning tajribada o'rganilgan faolligini yoki xossasini ifodalovchi kattaliklar uchun deskriptorlardan foydalangan holda matematik model tuziladi

Biologik faollikni ko'rsatuvchi parametr sifatida IC50 (inhibitory concentration), EC50 (effective concentration) yoki ED50(effective dose) olinishi mumkin. Birikmalarning toksikologiyasi o'rganilayotgan bo'lsa LD50 (lethal dose 50%) olinadi. Bu kattaliklar 1/LogIC (1/LogED, 1/LogLD) holatiga o'girilgan holda olinadi.

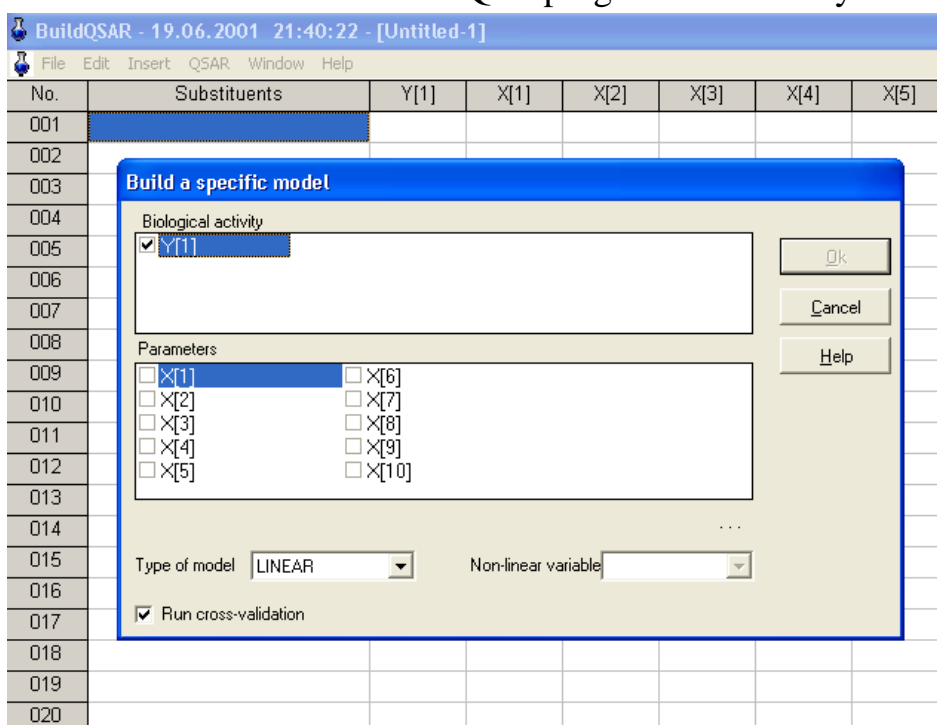
Modellar tuzish jarayonida modelning ishonchli bo'lishi muhim ahamiyat kasb qiladi. Ishonchli modellar olish uchun o'rganilayotgan birikmalarning 75-80 foizi tajriba guruhiga qolgan 20-25 foizi test guruhiga ajratiladi. Buning uchun umumiy birikmalar soni 40-dan ortiq bo'lishi tafsiya qilinadi.

Aytaylik, bizda BF qiymatlariga ega 40-ta birikma bor. Uning 10-tasini (25%) test guruhiga ajratamiz. Qolgan 30-tasi asosida matematik model tuzamiz.



QSAR izlanishlaridagi bosqichlar.

Model tuzish uchun maxsus BuildQsar programmasidan foydalanamiz

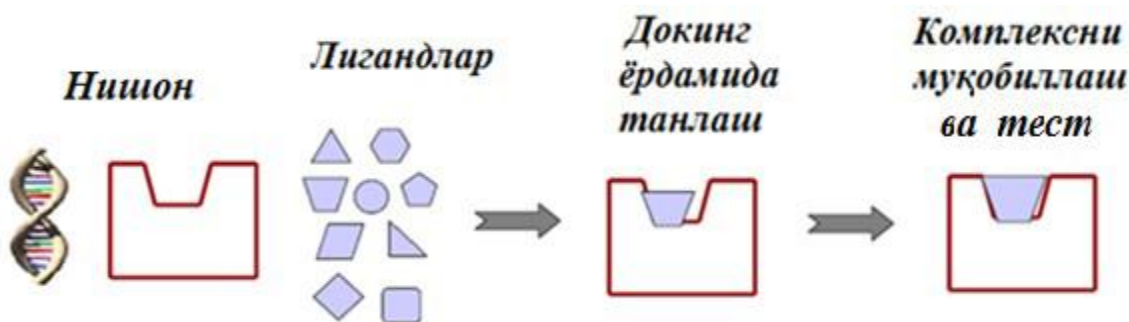


Modellar olishga mo'ljallangan BuilQsar programmasi.

BuildQsar programmasida o'rganilayotgan 30-ta birikmaning BF kattaligi (Log1/IC) Y[1] deb, deskriptorlar X[1] ...X[n] belgilanadi. Programmaga korrelyasi koeffitsienti $R^2 \geq 0.7$ bo'lgan, 1-7 deskriptordan tarkib topgan modellarni top deb komanda berish mumkin. Shuni ta'kidlab o'tish kerakki, topiladigan modeldagi deskriptorlar soni o'rganilayotgan birikmalar soniga ko'ra ma'lum bir chegaraga ega. Topiladigan modeldagi maksimal deskriptorlar sonini (DS) birikmalar sonini (BS) 5-ga bo'lish orqali topiladi: $DS=BS/5$. Demak, qaralayotgan 30-ta birikma uchun tanlanadigan modelda deskriptorlar soni 6-tadan oshmasligi kerak ($Y = X_1+X_2+X_3+X_4+X_5+X_6$). Bitta, ikkita, uchta, to'rtta, beshta va oltita deskriptorli modellar ichidan korrelyasiya koeffitsienti (R^2) eng yuqori bo'lganlari tanlab olinadi. Olingan modellar, test guruhidagi birikmalar uchun hisoblangan deskriptorlarni ushbu modelga qo'yib bashorat qilingan biologik faollik kattaligi aniqlanadi. Test guruhi birikmalari uchun tajribadan ma'lum bo'lgan BF kattaligi va bashorat qilingan BF kattaligi orasidagi miqdoriy bog'liqlik (R^2_{test}) aniqlanadi. Ushbu qiymat $R^2_{test} \geq 0.7$ bo'lsa topilgan model ishonchi model sanaladi.

Molekulyar doking va virtual skrining

QSAR qismida aytib o'tganimizdek, yuz minglab birikmalar ichidan biologik faolligi yuqoriroq bo'lgan, dorivor modda bo'lishi mumkin bo'lgan birikmalarni (lider birikmalarni) sintez va farmokologik izlanishlar uchun tafsiya qilish chiqimlarni kamaytiradi, mablag'larni tejash imkonini beradi. Molekulyar doking programmalari oqsil-oqsil yoki kichik molekulari birikmalarning (ligandlarning) oqsillar, retseptorlar yoki DNK bilan bog'lanishini baholaydi



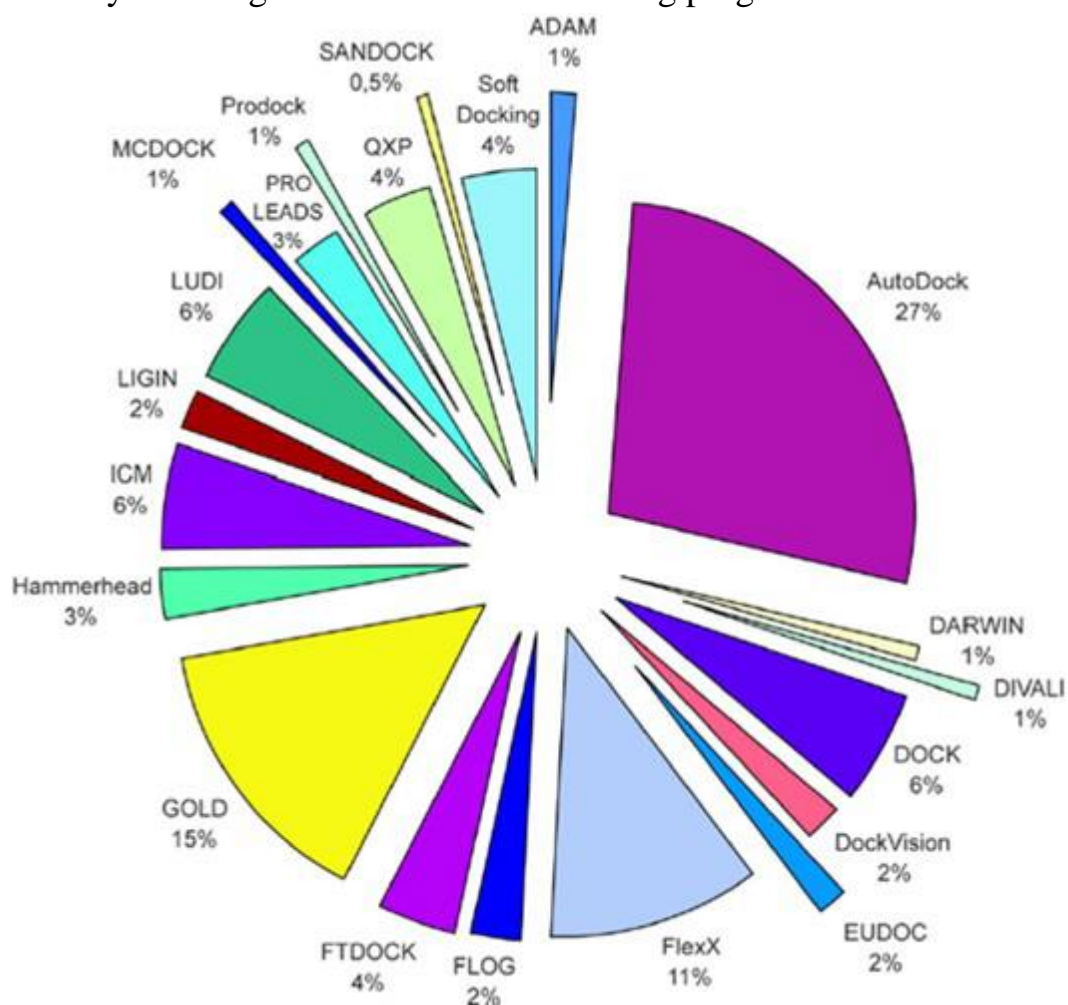
Molekulyar doking programmalarining ishlash tamoyillari

Doking so'zi inglizcha "dock, docking" so'zlaridan olingan bo'lib kemanding maxsus to'xtash joyini (poronni) bildiradi. Bu nom ligand molekularining makromolekulaning maxsus qismiga, yani uning faol qismlariga (active, binding site) borib bog'lanishidagi o'xshashlik tufayli berilgan.

Molekulyar doking – yumshoq va qattiq doking qismlariga bo'linadi. Qattiq dokingda makromolekula geometriyasini o'zgartirmaydi faqat ligand molekulari geometriyasini o'zgartiradi deb qaraladi. Yumshoq dokingda xuddi ligand molekulari kabi makromolekula qismlarida geometriya o'zgarishi hisobga olinadi.



Molekulyar doking izlanishlari maxsus doking programmalarida olib boriladi



Ushbu programmalarida doking izlanishlarini olib boorish uchun protein ma'lumotlar bazasida (www.pdb.com) mavjud bo'lgan RTT usuli yordamida o'rganilgan makromolekula bo'lishi shart. Makromolekula faol qismi tajriba ma'lumotlariga suyangan holda aniqlanadi. Aniqlangan faol qism koordinatalari doking jarayonida ko'rsatiladi va ligandlar bog'lanish energiyasi (ΔG , kkal/mol)

asosida baholanadi. Doking programmalarining afzallik tomoni shundaki, u ylar yordamida xatto hali sintez qilinmagan, tasavvur qilingan xar qanday strukturalarning ham ma'lum bir makromolekulaga bog'lanishini tekshirib ko'rish mumkin. Aniqroq qilib aytganda millionlab strukturalarni skrining qilish natijasida ularning ichidan faol bo'lishi mumkin bo'lgan "lider" birikmalarni tanlab olish mumkin. Bunday skrininglarni amalga oshirish uchun chet ellarda maxsus serverlar ochilgan. Ular yordamida o'zingiz tanlagan makromolekulaga tanlangan ligandlarning bog'lanishini tekshirib ko'rishingiz mumkin. Bu jarayon virtual skrining deyiladi. Skrining natijalari tahlili bog'lanish energiyasi (ΔG , kkal/mol) va u yordamida aniqlanadigan LE (ligand efficiency) kattaliklarini solishtirganholda olib boriladi. LE vodoroddan tashqari xar bir atom uchun bog'lanish energiyasini ifodalaydi va quyidagicha topiladi: $LE = -(\Delta G)/N$, bu yerda N – atomlar soni (H-dan tashqari).

Molekulyar doking izlanishlari natijasida ligand molekularining makromolekula faol qismiga borib bog'lanishi 70-80% aniqlikda topilmoqda.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп'ютерная химия, М., Мир, 1990.

AMALIY MASHG'ULOTLAR

1.Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash.

1832 yilda elektromagnit telegraf aloka kashf etildi. Amerikalik Morze bir-biri bilan boglik bulmagan holda yozuvchi telegraf apparatini ihtiroy kildilar . SHu asosida Morze telegraf alifbosi yaratildi. Bu Morze alifbosiga asosan 1841 yilda Peterburg – «Sarskoe selo» orasida uzunligi 25 km va 1843 yilda Vashington Baltimor orasida uzunligi 63 km aloka yaratildi.

1866 yilda kabelli telegraf alokasi yaratildi. Bu alokadan Yevropa-Osiyo-Atlantika okeani orkali foydalanildi.

1837 yilda odam nutkini elektrik signal orkali uzatishga harakat kilindi. 40 yildan keyin 1876 yilda shotlandiyalik bulgan Bostan shahri fukarosi Aleksandr Grehem Bell elektromagnit telefon yaratdi.

1878 yilda muhandis A Mihalskiy kumirli mikrofon yaratdi.

1879 yilda telefon apparati yaratildi. (« Bell Telephone CO» firmasi E.Grey, germaniyalik E. Berliner, Bell, bostonlik Bleyk)

1878 yilda Nyu-Heven (AKSH) shahrida eng birinchi kulda boshkariladigan telefon stansiyasi ishga tushirildi. Bu stansiya 25 ta abonentga hizmat kursatishga muljallangan edi. Bu rakam tez orada 50 abonentga yetkazildi.

1887 yili rus muhandisi A.Mosiskiy kichik hajmdagi avtomatik telefon stansiyasini ishlab chikdi. 1889 yili aka-uka Stroudjerlar yukori va aylanma harakatga asoslangan izlovchini ihtiroy kildilar. 1892 yilda La-Port (AQSH) shahrida shu izlovchiga asoslangan birinchi avtomatik telefon stansiyasi ishga tushirildi.

1895 yilda 7 may radio ihtiroy kilindi. U 1900 yilda balikchilarni kutkarishda ishlatildi.

1916 yilda Moskvada kulda boshkariladigan stansiyalar asosida 60000 abonentga hizmat kursata oladigan mahalliy telefon stansiyasi bor edi.



1921 yilda Detroit kompaniyasi 2 MGsga yakin chastotali diapozonda ishlaydigan mobil telefon yaratdi.

1980 yillarda uyali aloka tizimlari ishga solindi. Birinchi NMT – 450 standarti (AKSH) ishlatildi.

Turkistonda birinchi telefon alokasi tugrisidagi malumot 1887 yilga tegishli. SHu yili Turkiston ulkasi pochta – telegraf alokasi boshligi uyi bilan Toshkent pochta

binosi urtasida aloka urnatilgan. 1904 yil 7 sentyabrda Toshkent shahrida 55

abonentga muljallangan kulda boshkariladigan telefon stansiyasi ishga tushirilgan.

1. Shaxsiy kompyuterning haqida tushuncha.

Birinchi shaxsiy kompyuter 1973 yilda Fransiyada Nruohg Trohg Ti tomonidan yaratilgan.

Kompyuter (ing . computer - hisoblayman),

EHM (Elektron Hisoblash Mashinasi) - oldindan berilgan dastur (programma) bo'yicha ishlaydigan avtomatik qurilma. Elektron hisoblash mashinasi (EHM) bilan bir xildagi atama.

Dastlab yaratilgan maskur shaxsiy kompyuter elektron o'yinchoq sifatida qabul qilindi. Bu kompyuter 1977 yilda amerikalik Stiv Jobs boshchiligidagi "Apple Computer" firmasi tomonidan mukammallashtirilib, dasturlarning katta majmuini tatbiq etib, ommaviy ravishda chiqarila boshladi. Shundan beri kompyuter hayotimizga mustaxkam joylashib, axborotni qayta ishlashning eng zamonaviy vositasiga aylandi.

Kompyuter, [deganda turli hajmdagi](#), har xil ko'rinishdagi axborotlarni tezlik bilan ishlab berishni ta'minlovchi universal avtomatik qurilmani tushunish mumkin.

Hozirda hilma-hil zamonaviy kompyuterlar insonga holis hizmat qilmoqda. Ularning tashqi ko'rinishi ham turlicha. Lekin ularni tashkil etuvchi qurilmalar, (ya'ni apparatli ta'minoti) bilan yaqindan tanishsak, turli turkumdagi mashinalardagi qurilmalarda o'xshashlik borligini ko'ramiz. Har qanday kompyuter apparatli ta'minoti, asosiy va qo'shimcha qurilmalardan tashkil topgan. Asosiy qurilmalar kompyuter ishlashini ta'minlasa, qo'shimcha qurilmalar kompyuter bilan ishlash imkoniyatini kengaytiradi.

2. Shaxsiy kompyuterning asosiy qurilmalari

Asosiy qurilmalarga sistema bloki, monitor va klaviatura kiradi. Qo'shimcha qurilmalarga "sichqoncha" manipulyatori, printer, plotter, skaner, nurli pero va boshqalar misol bo'ladi.



Sistema [blokini asosiy xotira](#), protsessor va elektron sxema tashkil etadi. Asosiy xotira o'z navbatida tezkor xotira qurilmasi (TXQ) va doimiy xotira qurilmasidan (DXQ) iborat. Tezkor xotira qurilmasida kompyuterga kiritiladigan va uning ish jarayoni davomida hosil bo'luvchi barcha axborotlar va ma'lumotlarni ishlash uchun zarur bo'ladigan dasturlar vaqtincha saqlanadi. Chunki, tezkor xotira qurilmasida saqlanib turgan ma'lumotlar kompyuterlar elektr manba'dan uzilganda yoki qayta yuklangan vaqtda o'chib ketadi.

Tezkor xotira qurilmasi registrlardan tashkil topgan.

Registr - ma`lumotlarni ikkilik shaklida vaqtinchalik saqlab turish uchun mo`ljallangan qurilma. Har bir registr o'z navbatida triggerlardan tashkil topadi. Trigger mitti kondensator bo'lib, u elektr toki bilan zaryadlangan holda - "1", zaryadlanmagan holatda "0" ni ifodalaydi. Registrdagi triggerlarning miqdori kompyuterning necha razryadli ekanini belgilaydi. Registrlar uyachalar (yacheykalar) deb ham yuritiladi. Uyachalarning har bir razryadida bir bit axborot joylashadi, ya`ni 0 yoki 1. 8 bit axborot birlashganda 1 bayt miqdordagi axborotni hosil qiladi. Har bir bayt o'z tartib raqamiga, ya`ni adresiga ega bo'ladi. Uyachaning sig'imi mashina so'zi uzunligini belgilab beradi. Mashina so'zining uzunligi baytlarda o'lchanadi. Mashina so'zining uzunligi 2, 4, 8 baytga teng bo'lishi mumkin. Demak, [ketma-ket joylashgan ikki](#), to'rt yoki sakkiz bayt birlashib bitta mashina so'zini tashkil etishi mumkin ekan. Har bir xotira uyachasi ham o'z adresiga ega, u esa shu uyachadagi boshlang'ich bayt adresi bilan ifodalanadi. Tezkor xotira qurilmasining boshqacha nomi - RAM (Random Access Memory - tanlov bo'yicha istagan qismiga o'tish mumkin bo'lgan xotira), chunki undagi bor, istagan adresli uyachaga to'g'ridan-to'g'ri o'tish imkoniyati mavjud.

Tezkor xotira qurilmasining bir qismida kompyuter ekranidagi joriy tasvirga mos keluvchi ma`lumotlar saqlanadi, uni shartli ravishda videoxotira deb yuritiladi. Agar tezkor xotirani IBM PC rusumidagi [kompyuterlar uchun olsak](#), u quyidagicha taqsimlanadi: dastlabki 640 Kbayti foydalanuvchi dasturlari va ma`lumotlar uchun, 1 Mbaytgacha bo'lgan qismi sistemali foydalanish uchun.

Dastur - 1) biron-bir faoliyat, ishning mazmuni va rejasi; 2) siyosiy partiyalar, [tashkilotlar](#), alohida arboblarning faoliyatining asosiy qoidalari va maqsadlari bayoni; 3) o'quv fani mazmunining qisqacha izohi; 4) teatr, konsertlar va b.

Doimiy xotira qurilmasida kompyuter ishlagan paytda yozilgan axborot o'zgarmasdan doim saqlanadi. Unda odatda, kompyuterning har yoqilishida

uning barcha asosiy qurilmalarining sozligini [tekshiruvchi dasturlar](#), diskuyurituvchi, monitor, klaviatura qurilmalarining ishini boshqaruvchi dasturlar, operatsion sistema diskning qaysi joyida joylashganligi haqidagi axborotlar joylashgan bo'ladi.

Protsessor - kompyuterning asosiy qurilmasi. Protsessor arifmetik va mantiqiy amallar bajaradi, xotira bilan bog'lanadi va barcha mahalliy qurilmalarning ishini boshqaradi. Protsessorning asosiy ishi tezkor xotira qurilmasida joylashgan dasturdan navbatdagi buyruqni o'qish va bajarish, natijani yozib qo'yish hamda keyingi bajariladigan buyruqni aniqlashdan iborat takrorlanuvchi jarayon.

Dastur - kompyuter bajarishi lozim bo'lgan buyruq va ko'rsatmalarining izchil ketma-ketligi. Bundan tashqari protsessor dastur mazmunidagi [boshqarishni amalga oshirish](#), ma`lumotlarni zarur joydan o'qish, lozim joyga yozish, kerak joyga uzatish

boshqa qurilmalarning izlanishini muvofiqlashtirish vazifasini ham bajaradi.

Demak, protsessor berilgan dastur va zarur malumotlar asosida odam aralashuvisiz kompyuterning avtomatik ishlashini ta`minlovchi qurilma ekan.

Zamonaviy kompyuterlarda protsessor vazifasini mikroprotsessor, ya`ni o'ta katta integral sxemalar bajarmoqda, u 10 mm kvadratdan ham kichik yuzada joylashgan yagona yarim o'tkazgichli kristalda (kremniy yoki germaniy) joylashgan millionlab mitti tranzistorlardan tashkil topadi. Misol sifatida ko'radigan bo'lsak, Intel Pentium Pro mikroprotsessori o'z ichida 5,5 milliondan ortiq tranzistorlarni saqlaydi.

Protsessorning ish unumdorligi uning tezligi (taktli chastota) va razryadlar soni bilan belgilanadi. Tezlik protsessorni 1 sekundda bajargan amallar miqdori bilan belgilanadi va Gs bilan ifodalanadi. Masalan, i8086 protsessori 10 MGs (sekundiga 10 million amal) tezlikka ega bo'lsa Pentium protsessori uchun bu ko'rsatkich 850 MGsga teng. Protsessorning razryadlari soni uning bir vaqtning o'zida baravariga ishlash mumkin bo'lgan bitlar miqdori bilan aniqlanadi. Hozirgi kunda 8, 16, 32, 64, 128 razryadli prsessorlar keng qo'llanmoqda. Protsessorning tezligini oshirish uchun hozirgi vaqtda kesh-xotira, turli matematik hamprotsessorlar kabi vositalardan foydalanish yo'lga qo'yilgan.

Komppyueter qurilmalari orasidagi axborot almashinuvi sistema magistrali - shinalar (elektr simlarining bog'lamlari) ko'magida amalga oshiriladi. Shinadagi simlar kompyuterning hamma qurilmalariga parallel holda ulanadi. Kompyuter ishi uchun uch xil shina xizmat ko'rsatadi: berilganlar (berilgan malumotlar) shinasi, adreslar shinasi, boshqarish shinasi. Bog'lamdagi [simlarning miqdori](#), shinaning razryadlari sonini belgilaydi. Aniq protsessorga mos i80386, 16/32 yozuvi, ushbu protsessor 16 razryadli berilganlar shinasi va 32 razryadli adreslar shinasiga ega ekanligini, ya`ni bir vaqtning o'zida 16 bit axborot va $2^{32} = 4$ Gbayt hajmdagi adreslar (adreslar sohasi) bilan ishlash imkoniyatini mavjudligini bildiradi.

Protsessor va asosiy xotira kompyuterning sistema bloki ichidagi asosiy platada joylashadi. Unga diskyurituvchi, printer kabi qo'shimcha qurilmalarni ulash uchun kontrollerlardan, ya`ni maxsus platalardan foydalaniladi. Ular ona platadagi maxsus qirqimlarga joylanadi, portlar deb yuritiluvchi ikkinchi uchlariga qo'shimcha qurilmalar bevosita ulanadilar.

Ma`lumotlarni kiritish - chiqarish qurilmalari. Kompyuterga turli shakldagi axborotlarni kiritish yoki chiqarish uchun xizmat qiluvchi qurilmalarni ma`lumotlarni kiritish - chiqarish qurilmalari (MKCHQ) deb yuritiladi. Ularni ba`zida maxalliy qurilmalar deb xam ataydilar.



Eng asosiy ma`lumotlarni kiritish - [chiqarish qurilmalari](#), safiga monitor (display), klaviatura va diskyurituvchi qurilmalari kiradi.

Kompyuterga turli shakldagi axborotlar kiritishning yo'llaridan biri klaviaturada joylashgan tugmalar ko'magida amalga oshiriladi. Aniq bir tugmani yoki tugmalar birikmasini bosilishiga aynan mos ikkilik kodni kiritilishiga olib keladi, Buning boisi shifrllovchi deb yuritiladigan - mikrosxema ma'lum bir tugma bosilishida hosil bo'ladigan signalni ikkilik kodga aylantirib beradi.



Monitor kompyuterning ish jarayonida vujudga keladigan axborotlarning zarur qismini ekranda yoritib berishni ta'minlaydi. Monitor matn yoki grafik rejimda ishlaydi. Matn rejimida ekran belgi o'rinlari deb yuritiluvchi alohida qismlarga bo'linadi. Grafik rejimda ekran piksel deb ataluvchi nuqtalar to'plamidan tashkil topadi. Ikkala rejimda ham belgi yoki pikselning ranglari, fonning rangi, ravshanligi va boshqa parametrlar xaqidagi ma'lumotlar videoxotirada saqlanadi. Monitoridagi piksellarning umumiy miqdori monitoring imkon darajasi,

deb ataladi.

Hozirgi davrda keng tarqalgan monitorlarni tavsiflovchi jadvalni keltiramiz. Bu erda belgi o'rinlarining miqdori ekrandagi satr va ustunlardagi belgi o'rinlarning miqdorlari ko'paytmasi hamda piksellar soni gorizontal va vertikal bo'yicha piksellar sonining ko'paytmasi [shaklida berilgan](#)

Monitor nomi	Matn rejimi		Grafik rejimi	
	Ranglar miqdori	Belgi o'rinlar miqdori	Ranglar miqdori	Piksellar miqdori
CGA	16	80x25	2	640x200
			4	620x200
EGA	16	80x25	16	640x350
	16	80x43		
VGA	16	80x25	16	640x480
	16	80x50		
SVGA	16	80x50	256	640x480
			16	800x600

Diskyurituvchi - disklarni aylantirishga xizmat qiluvchi motor moslamasi hamda ularga ma'lumot yozish va o'qish magnit boshchasidan tashkil topuvchi qurilma. Disklar asosan uchga bo'linadi: egiluvchan disk, qattiq disk (vinchester) hamda kompakt disk (CD ROM - Kompakt - Disk - Read Only Memory).

Egiluvchan disk va qattiq disklarga axborotlar sektorlarga bo'lingan

halqasimon yo'lchalar bo'ylab yoziladi. Disklar temir moddasini saqlovchi qotishmadan tayyorlanib ularning [magnitlangan qismi birlarni](#), qolgan qismlari esa nollarni ifodalaydi. Sektor va yo'lchalar o'z tartib raqamlariga ega bo'lib, har bir sektorning sig'imi 0.5 Kbayt ni tashkil etadi.

Egiluvchan disk asosan ikki xil bo'lib ular diametrlarining uzunliklari bilan farqlanadilar (3,5 dyuymli- 98mm, 5,25 dyuymli - 133 mm).

Egiluvchan disk uni himoya qiluvchi maxsus qattiq plastik qutilarda saqlanadi. Diskning sig'imi yo'lchalarning zichligi va uning ishchi tomonlari soniga bog'liq. Zichliklarning bir karrali (SD - Single Density), ikki karrali (DD- Double Density), to'rt karrali (QD-Quadruply Density) va yuqori darajali (HD-High Density) xillari mavjud. Diskning faqat bir tomonidan foydalanish mumkin bo'lsa, u - SS - Single Sided belgi bilan va diskning, ikki tomonini ishlatish imkoniyati bo'lsa - DS - Double Sided belgilari bilan tamg'alanadi.

Masalan, DS/HD xildagi 3.5 dyuymli diskning axborot sig'imi 1.44 Mbayt ni, 5.25 dyuymli disk uchun esa 1.2 Mbayt ni tashkil etadi.

Vinchesterlar kompyuterning ichida joylashgan bo'lib, uning hajmi bir necha Gbaytgacha boradi. Vinchester deganda silindrsimon shaklidagi maxsus germetik idishga joylashtirilgan bir o'qqa mustahkamlangan ustma-ust joylashgan diskning majmuini tushuniladi. Kompyuter ichida birdaniga bir necha vinchesterlar joylashishi ham mumkin.

Kompakt diskning axborot sig'imi o'rta hisobda 640 Mbayt ni tashkil etadi. Undagi axborotlarni yozish yo'lchalari spiralsimon shaklda bo'lib, ma'lumotlarni o'qish va yozish lazer nuri ko'magida amalga oshiriladi. Kompakt disk oltin yoki alyuminiy qotishmalaridan tayyorlanib, doirasimon plastik ichiga joylangan holatda bo'ladi.



Alyuminiy (Aluminium), A1 -Mendeleyev davriy sistemasining III guruhiga mansub kimyoviy element. Tartib raqami 13, atom massasi 26,9815; Aluminiy lot. alumen (achchiqqosh) so'zidan kelib chiqqan. Tabi-atda bitta barqaror izotop holida ($AG' 100\%$) uchraydi, bir necha sun'iy [radio-aktiv izotoplari bor](#), ular orasida eng ahamiyatlisi A12' (yarim yemirilish dav-ri 7,4-105 y.).

Kompakt disk bilan ishlashga mo'ljallangan diskdonning vazifasi ham oddiy diskdonnikiga o'xshash ammo ish prinsipi magnitlanishga emas, balki lazer nuridan foydalanishga asoslangan. Kompakt diskning zarur qismlari nur berib qizitib bo'rttiriladi. Kompakt disk bilan ishlashga mo'ljallangan diskdon ichida kichik quvvatda berilgan nur kompakt diskning bo'rtib chiqqan qismlariga borib urilib akslanadi. Nurning akslanib qaytgani haqidagi signal birlarni, teskarisi esa nollarni ifodalaydi. Hozirgi davrda sig'imi 10 Gbaytgacha boradigan kompakt diskni ishlab

chiqish yo'lga qo'yilmoqda. Kompakt disklarda axborot saqlash qulay bo'lsada, uning ish tezligi vinchesternikiga qaraganda sekindir. Ushbu disklarning diametrlari ham 5.25 yoki 3.5 dyuymlik bo'ladi.

Magnit disklarning yangi xillariga misol sifatida magnitoptik disklarni keltirishimiz mumkin. Bu disklarni yaratishda magnit va optik texnologiyaning yutuqlari birlashgan. Magnitoptik disklarning ustunligi ularning sig'implarining kattaligi, [olib yurish mumkinligi](#), ish tezligining kattaligidir. Demak, xuddi shu diametrli egiluvchan disklarga qaraganda o'rtacha olganda ularning sig'implari hajmi 300, axborotlarni o'qish yoki yozish tezligi esa 10 barobardan ham ortiq kattadir.

3. Shaxsiy kompyuterning qo'shimcha qurilmalari

Printer - ma'lumotlarni qog'ozga chiqarish qurilmasi. Printerlarning uch xili mavjud: bosma (matritsa-o'yma qolip), purkovchi, lazerli. Bosma printerda qog'ozdagi bosilayotgan satr bo'ylab harakatlanadigan maxsus qurilmaga o'rnatilgan metall ignachalar qog'oz va qurilma orasiga o'rnatilgan rangli tasmaga tegib qog'ozda iz qoldirib ma'lumotlarni hosil qiladi, shu nuqtalarning to'plami esa qog'ozga belgilar yoki shakllarni chiqarilishini ta'minlaydi.

Metallar (yun. metalleuo - qaziyman, yerdan qazib olaman) - oddiy sharoitda yuqori elektr o'tkazuvchanligi, issiq o'tkazuvchanligi, elektr o'tkazuvchanligi, elektr magnit to'lqinlarini [yaxshi qaytarishi](#), plastikligi kabi o'ziga xos xususiyatlarga ega bo'lgan oddiy moddalar. M.

Ko'rinib turibdiki, bosma printerdan chiqarilayotgan axborotlarning rangi o'rnatilgan tasma rangiga mos bo'ladi.

Purkovchi printer- qog'ozga chiqariladigan ma'lumotlarni, maxsus idishdagi suyuqlikni juda kichik naycha teshigidan bosimli purkash yo'li bilan hosil qiladi.

Lazer printeri- ma'lumotlarni chop etishda rang solingan maxsus barabanga elektr maydonini ta'sir ettirishdan foydalanadi.

Maydon - ochiq, me'moriy [jihattan tartibga keltirilgan](#), atrofi bino, inshootlar yoki daraxtlar bilan to'silgan keng satq. To'rtburchakli, temperaturapetsiyasimon. doirasimon, tuxumsimon (oval) va boshqa shakllarda yopiq yoki ochiq holda bo'ladi.

Bunday printerlar tez va soz ishlaydi, qog'ozga chiqariladigan axborotli mahsulotning sifati yuqoridir. Bosma yoki purkovchi printer bir minutda bir bet ma'lumot chop etsa, lazer printerining shunday ko'rsatkichi o'n betdan ortiq. Purkovchi va lazer printerlarda ma'lumotlarni turli rangli qilib chop etish imkoniyati mavjud.

Yurgichni boshqarish va qo'shimcha boshqarish vazifalarni bajaruvchi qurilmalarning quyidagi xillari mavjud: "sichqoncha", trekbol, joystik. "Sichqoncha" - biror sirt bo'ylab surib yurgizilganda ichida joylashgan [sharcha harakatga keladi](#),

hosil bo'lgan signallar kompyuterga uzatiladi va ekranda yurgichning mos harakatlari yuzaga keladi.

Harakat - borliqning ajralmas xususiyati bo'lgan o'zgaruvchanlikni (q. Barqarorlik va o'zgaruvchanlik) ifodalovchi falsafiy kategoriya. H. tushunchasi imkoniyatlarning voqelikka aylanishini, ro'y berayotgan hodisalarni, olamning beto'xtov yangilanib borishini aks ettiradi.

"Sichqonchada" o'rnatilgan tugmalar ko'magida boshqaruvchi buyruqlarni jo'natish mumkin.

Trekbol - sichqoncha"ning to'nkarib qo'yilgan holatiga o'xshaydi, undan asosan notebook xilidagi ko'chma kompyuterlardan foydalaniladi.

Joystik - tugmali harakatlanuvchi [maxsus dastadan iborat qurilma](#), u asosan faqat o'yin yoki mashq bajaruvchi dasturlarni boshqarishda qo'llanadi.

Plotter (grafiyasagich) - chizmalarni qog'ozga chiqarish uchun xizmat qiluvchi qurilma. Qog'ozda tasvirlanadigan chizmalar tushlangan pero bilan hosil qilinadi. Chizmalar 300x300 sm o'lchamgacha bo'lgan katta qog'ozlarga ham chiqarilishi mumkin.



Skaner - foto rasm, grafik va matn shaklidagi axborotlarni kompyuterga kiritish uchun ishlatiladi. Demak, rasm, shakl yoki matnni albatta bevosita

kompyuterda hosil qilish shart emas, balki uni oldin tashqarida tayyorlab olib kompyuterga kiritish sharoitini yaratib, bu rasmdan kompyuterda ko'rsatmali foydalanish imkoniyatini beradi. Hozirda stol usti skanerlari va qo'l skanerlari keng tarqalgan. Stol usti skanerlari o'z navbatida planshet, rulon, proeksionxillarga bo'linadi. Skanerning har bir turi qo'yilgan masalaga mos ravishda bajara oladigan vazifaga qarab o'z joyida qo'llanadi.

Strimer - vinchesterdagi eng zarur axborotlarni [buzmasdan asrash uchun](#), uning nusxasini ko'chirib zahirada saqlash uchun xizmat qiladigan qurilma. Strimer ma'lumotlarni magnit tasmalarga juda tez ko'chirishni tashkil etadi. Magnit lentalar sifatida audio yoki video tasmalardan foydalaniladi.

Modem - kompyuter signallarini telefon signallariga aylantiruvchi va aksincha telefon signallarini kompyuter signallariga aylantirishni ta'minlovchi maxsus qurilma. Demak, modem telefon tarmoqlari orqali



kompyuterlarni o'zaro bog'lash imkoniyatini yaratib berar ekan. Modem kompyuterda o'zgaras tok orqali hosil qilingan signallarni turli chastotali tovush signallarining kombinatsiyasiga aylantiradi va shu jarayonni teskari tartibda ham bajaradi. Bu esa yakka kompyuterdan foydalanganga qaraganda, ancha katta hajmdagi axborot bilan ishlash imkoniyatlarini ochib beradi.

Soundblaster - axborot saqlagichlarga yozilgan raqamli audioaxborotni tovushlarga aylantirib beruvchi qurilma. Soundblaster qurilmasining chiqish qismiga ovoz kuchaytirgich yoki ovoz kolonkalarini ulash mumkin, bu bilan kompyuterning multimedia imkoniyatlarini to'liq namoyon etishga yo'l ochiladi.



Multimedia - matn, tovushli ma'lumotlarni, tabiiy va grafik tasvirlarni birlashtiruvchi axborot texnologiyasi. Multimedia uchun zamonaviy CD - ROM texnologiyalar taqdimnomasi ilk marta 1987 yili Sietldagi konferensiyada (Second Microsoft CD - ROM Conference) bo'lib o'tdi va bu sana video va audioaxborotli to'laqonli multimedaning paydo bo'lishining boshlanishi deb hisoblanadi.

Windowsda sonlarni kiritish klaviaturasini sichqoncha o`rnida ishlatish mumkin. Bunday xolat xar xil sabablarga ko`ra, sichqoncha ishlamay qolganda yuz berishi mumkin.

Shaxsiy kompyuterning tuzilishi

No	Klavushlar	Vazifalari
1	Power	Kompyuterni o`chirish va yoqish
2	Sleep	Vaqtincha kompyuter dam oldirish (uxlatmoq)
3	Wake up	Vaqtincha to`xtatilgan kompyuterni ishga tushirish (uyfatmoq)
4	Reset	kompyuterni qayta ishga tushirish
5	Esc	Buyruqlarni inkor etish
6	F1	Word dasturi xaqida yordamchi malumot
7	F4	Oxirgi bajarilgan amalni takrorlash
8	F5	Kerakli saxifaga bir martada o`tish
9	F7	So`zlarni to`gri monosini taminlash
10	F8	2-3 marta bosish natijasida barchasini blokga olish
11	F10	Word menyulariga chikish
12	F11	Redaktor formula yozilgan qatorga o`tish
13	F12	YAngi nom bilan saqlash

14	Prt Sc SysRq	Ekranni xotiraga olish
15	Scrol lock	Qo`shimcha imkoniyat yaratish
16	Pause Break	Vaqtincha to`xtatish
17	Tab	Kursorni sakratish yoki bir abzats joy ajratish
18	CapsLock	Katta yoki kichik xarflarda yozish (yoniq bo`lsa katta xarfdan, o`chik bo`lsa kichik xarflarda yozadi)
19	Shift	Tugmachalarni vazifasini o`zgartirish (qo`shimcha tugmachalar)
20	Ctrl	Tugmachalarni vazifasini o`zgartirish (qo`shimcha tugmachalar)
21	Pusk	Start komandasini berish
22	Alt	Dastur menyusiga chiqish
23	Proble	Bo`sh joy tashlash (kursor turgan joydan boshlab surish)
24	Enter	Yangi satrga o`tkazish yoki buyruqni bajarish
25	Baskpace	Kursor turgan joydan boshlab chap tomondagi belgini o`chirish
26	Insert	Kursor oldida turgan belgini o`chirib yoki surib yozish
27	Delete	Kursorni o`ng tomonidagi belgini o`chirish (o`chirish)
28	Home	Satr boshiga kursorni o`tkazish
29	End	Satr oxiriga kursorni o`tkazish
30	Page up	Bir saxifa yuqoriga o`tish
31	Page Down	Bir saxifa pastga o`tish
32	Num lock	Yordamchi klavaturani ishga tushirish
33	Ctrl+Esc	(Pusk) Start komandasini berish
34	Ctrl+F1	Dasturi xaqida yordamchi malumot
35	Ctrl+F2	Pechatga chikarishdan oldingi xolatni ko`rish (Predvaritelniy prosmotr)
36	Ctrl+F4	Dastur oynasini yopish (Ctrl +W)
37	Ctrl+F5	Dastur oynasini kichik xolatga keltirish
38	Ctrl+ F6	Word dokumentlarini ishlayotgani dasturlarni almashtirish
39	Ctrl+F9	Sistemali qavs ochish
40	Ctrl+F10	Word oynasi katta va kichik xolatga keltirish
41	Ctrl+F12	Xotiradagi papka va fayllar ro`yxatini ochish
42	Ctrl+Tab	Kursor tugan joydan surish
43	Ctrl+Shift	Ruskiy Angliyskiy tillarga o`tkazish (bazi kompternlarda)
44	Ctrl+Shift+F	Instrumentlar panelidagi "SHrift" bo`limiga chiqish
45	Ctrl+Shift+P	Instrumentlar panelidagi "SHrift razmeriga" bo`limiga

		chiqish
46	Ctrl+Q	Kursorni chap chekkaga surish
47	Ctrl+W	Word oynasini yopish
48	Ctrl+E	Kursorni o`rtaga surish
49	Ctrl+R	Kursorni o`ng chekkaga surish
50	Ctrl+T	Lineykani ko`rsatkichini o`nga surush
51	Ctrl+y	Lineykani ko`rsatkichini o`nga surush
52	Ctrl+U	YOzuvni tagiga chizish
53	Ctrl+I	Qiya xolatda yozish
54	Ctrl+O	Xotiradagi papka va fayllar ro`yxatini ochish
55	Ctrl+P	Pechatga chiqarishga buyruq berish
56	Ctrl+A	Matnni xammasini belgilash
57	Ctrl+S	Saqlash
58	Ctrl+D	SHrift oynasini chiqarish
59	Ctrl+F	Matndagi kerak bo`lgan so`zni yoki belgini topish (izlash)
60	Ctrl+G	Izlash va almashtirish oynasini chiqarish
61	Ctrl+H	Matndagi so`z yoki belgini almashtirish (zamenit)
62	Ctrl+K	Biror bir so`zga faylni bo`rlash (Giperssilka)
63	Ctrl+Z	Oldinga xolatga o`tish (otmenit)
64	Ctrl+X	Belgilangan joyni qirqish
65	Ctrl+C	Belgilangan qismini xotiraga olish
66	Ctrl+V	Xotiraga olingan matnni ko`rsatilgan joyga tashlash
67	Ctrl+B	YOzuvlarni qalinlashtirish (Polujirniy)
68	Ctrl+N	YAngi dokument ochish
69	Ctrl+M	So`z yoki belgini kursor turgan joydan bir xilda o`nga surish
70	Ctrl+ Enter	YAngi saxifaga o`tish
71	Ctrl+ Delete	Kursor turgan joydan o`ng tomondagi bir so`zni o`chiradi
72	Ctrl+ End	Kursorni saxifa oxiriga o`tkazish
73	Ctrl+ Home	Kursorni saxifa boshiga o`tkazish
74	Ctrl+Insert	Belgilangan qismni doimiy xotiraga olish
75	Ctrl+1	Qator oraligida bir interval joy ajratish
76	Ctrl+2	Qator oraligida ikki interval joy ajratish
77	Ctrl+5	Qator oraligida bir yarim interval joy ajratish
78	Ctrl+Alt+ Delete	Kompyuterni qayta ishga tushirish (Perezagruzka)
79	Alt+Esc	xujjatdan chiqib ketish

80	Alt+F1	Redaktor formula yozilgan qatoga o`tish
81	Alt+F4	Word dasturdan chiqish
82	Alt+F5	Ekranni qisqartirish
83	Alt+F6	Ochilgan xujjatlarga o`tish
84	Alt+F7	Kursor turgan so`zni xatoligini tekshirish
85	Alt+F8	Makros
86	Alt+F10	Ekranni katta va kichik xolatga o`tkazish
87	Alt+F11	Microsoft Visual Basic ga o`tish
88	Alt+Tab	Dasturdan dasturga o`tish
89	Alt+Shift yoki Ctrl+Shift	Tillarni almashtirish (En,Russ,O`z)
90	Alt+Proble	Word oynasini chap yuqorisidagi svernut, vosstanovit,zakrit menyusini chiqarish
91	Alt+F	Fayl menyusiga chiqish
92	Alt+P	Pravka menyusiga chiqish
93	Alt+V	Vid menyusiga chiqish
94	Alt+A	Vstavka menyusiga chiqish
95	Alt+M	Format menyusiga chiqish
96	Alt+E	Servis menyusiga chiqish
97	Alt+T	Tablitsa menyusiga chiqish
98	Alt+O	Okno menyusiga chiqish
99	Alt+S	Spravka menyusiga chiqish
100	Alt+G	Avtofiguralar bilan ishlash
101	Ctrl+ Shift+P	Bir martada shriftga chiqish
102	Ctrl+ Shift+A	Kichik xarfdan yozilgan so`zlarni bir martada katta xarflarga o`tkazish
103	Ctrl+ Shift+Enter	Kursor tugan joydagi so`zni yangi saxifaga tushirish

Nazorat savollari

1. Kompyuterning dasutriy ta`minoti asosiy qismi?
2. SHaxsiy kompyuterlarning dasturiy ta`minoti tug`risida ma`lumot bering?
3. Tashqi qurilmalarni o`rnatish qanday amalga oshiriladi?
4. Modem vazifasi qanday?
5. Jamiyat informatizatsiyalashiriluvini deb nimaga aytiladi?
6. Informatizatsiyalashgan jamiyat nima?

Tayanch iboralar

- Axborot,
- Axboriy jarayonlar,
- Axborot texnologiyasini belgilovchi ichki omillar,
- Axborotni uzatish usullari,
- Axborotlashtirish,
- Axborotlashgan jamiyat,
- Axborot texnologiyasi fani,
- Axborot texnologiyasi modellari,
- Axborot texnologiyasidan foydalanish.

2. Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin).

CHEMDRAW XAQIDA

ShemDraw-kimyoviy strukturalarni ifodalashning eng maqbul vositasi.

ShemDraw kimyo soxasi mutaxassislarining ehtiyoji hisobga olinib yaratilgan.

ShemDraw ni maqsadi imkoniyat darajasida yuqori sifatli kimyoviy tasvirlar bilan ta'minlash.

ShemDraw-o'quvchi, talaba, o'qituvchi, mutaxassis, ilmiy xodimlari mo'ljallangan.

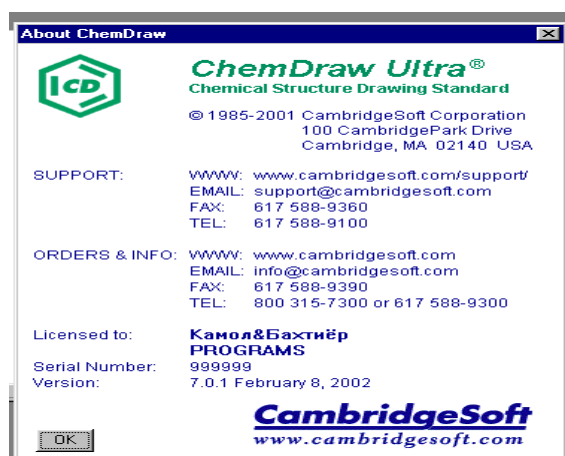
ShemDraw - Amerika Kushma SHtatlarining KembridjSoft korporatsiyasi tomonidan ishlab chikilgan.

Manzili:

e.mail: support@cambridgesoft.com.

Tel: 617 588-9390

Fax: 617 588-9100

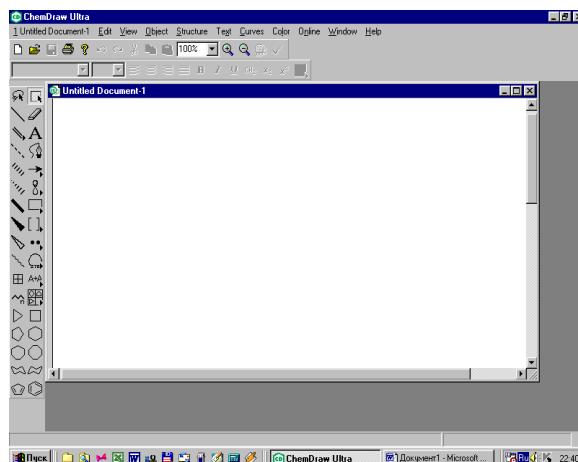


SHEMDRAW

1.1. ShemDrawni boshlash

ShemDrawni quyidagi tartibda ishga tushirish mumkin:

Windows 95,98 yoki NT muhitida:
ShemDraw yorlig'ini ikki marotaba bosing.
Start menyusidan ShemDrawni tanlang.



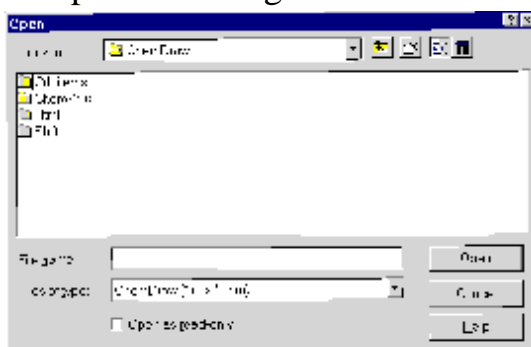
1.2. Tasvirni ifodalash uchun saxifa yaratish.

1. Fail menyusidan, Open Special ni tanlang.
2. Paneldan yangi yaratilajak saxifaning shaklini tanlang
Yangi sahifa Stule Sheet parametrlari bilan avtomatik o'rnatiladi.

1.3. Sahifa ochish.

Fail menyusidagi faylar ro'yxatidan kerakli faylni tanlang.
Qo'shimcha ma'lumot uchun MRULIST ga qarang.
ShemDraw sahifani ochish.

1. Fail menyusidan Open ni tanlang.



Dialogli panel paydo bo'ladi. Windows versiyasi uchun shunday panel quyida ko'rsatilgan. Faylingiz joylashgan papkani belgilang.

2. ShemDraw fayliga tegishli bo'lmagan faylni ochish uchun dialog panelidagi fayllar formati ro'yxatidan tegishli formatni tanlang.
3. Kerakli faylni belgilang.
4. Open yoki OK tugmasini bosing.

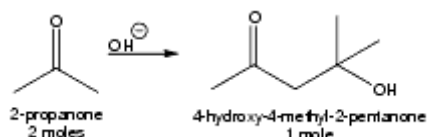
KO'RSATMALAR

2.1. Kirish

Ushbu ko'rsatma ShemDraw ning tasvirlash imkoniyatlarni amalda bajarish uchun Sizga asosiy ma'lumotlarni beradi. Dastlab Siz mazkur ko'rsatmada uchraydigan umumiy kirishdagi «Kelishuv» va «Atamalar» bilan tanishib oling.

1-ko'rsatma: Reaksiya tenglamalari.

Ushbu ko'rsatmada siz quyidagi oddiy reaksiya sxemasini (tenglamasini) chizasiz.



2.2. ShemDraw sahifasini yaratish.

1. ShemDraw ga kiring.
2. Fail menyudan Save As ni tanlang.
3. Maxsus matn paneliga tut 1. sdx ni yozing.
4. Faylni saqlash uchun tegishli papkani tanlang.
5. Save ni bosing.



6.

7. Tools menyusini bosing va Fixed lengths (Aniqlangan uzunlik) va Fixed Angles (Aniqlangan burchak) komandalari qo'llanilganiga ishonch hosil qiling. Agar ushbu komandalar qo'llanilmagan bo'lsa, ularni belgilang.

Izoh: Fixed lengths va Fixed Angles komandalarning qo'llanilishi, siz tasvirlagan strukturadagi bog' uzunliklari va burchaklarini chizilganidan saqlashdan iborat.

Kimyoviy bog'ni yaratish.



1. To'liq bog' (Solid Bond) tugmachasini bosing. Hosil bo'lgan (+) belgisini sichqoncha tugmachasini bosib turgan holda yangi

sahifaning istalgan joyiga olib keling.

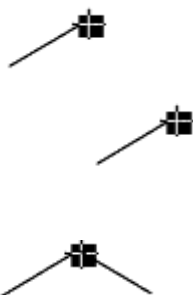
2. Sichqoncha tugmachasini bosib turgan holda 30^0 darajali bo'lgan ostida diogonal chizing



CHizayotgan bog' burchagi 30^0 li darajaga yetganda sichqoncha tugmachasini qo'yib yuboring.

2.4. Ikkinchi bog'ni qo'shish:

1. Bog' tegishli bo'lgan o'ng tugmani bosiladi.



2. Qora katakcha markazi bosiladi.

120^0 darajali farqi bilan ikkinchi bog' tasvirlanadi.

Izoh: Bog' qo'shilganda, ular orasidagi burchak, maxsus dialog ifodalanadi va xatoliklari ko'rsatiladi. Xatoliklarni kuzatishingiz mumkin.

Uchinchi bog'ni qo'shish:



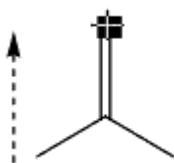
1. Quyidagi tasvirlangan holatda chizing.

Bog'ni qo'shish uchun:

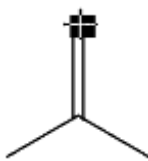
2. Kora katakcha markazini bosing.

Bittalik bog'ni qo'sh bog'ga o'zgartirish.

1. Quyida ko'rsatilgani kabi atomni aniqlang va sichqoncha tugmasini bosing.

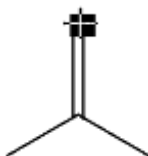


2. Quyida ko'rsatilganidek bitta bog'ni chizing. Sichqoncha tugmasini qo'yib yuboring.

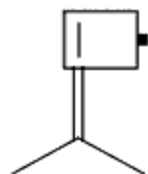


2.5. Kimyoviy strukturalarga belgilar qo'shish:

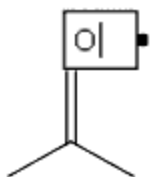
1. Ko'rsatilganidek kerakli atomni aniqlang.



2. Atomga ikki marta ketma-ket bosning.



3. Matn uyasiga O yozing.



4. Matn uyasini quyida usullar yordamida yoping. Oynani bo'sh qismiga kursorni olib kelib bosning yoki boshqa vositaga o'ting.

2.6. Strukturani nusxalash:

1. Lasso Tool belgisini bosning.



Oxirgi chizilgan struktura avtomatik ravishda belgilanadi.

2. Strukturani ko'chirish uchun boshqa o'rin tanlang.

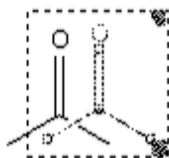


3. Alt tugmasini bosning



(+) plus belgisi qo'l ko'rsatkich sizning tanlash vosita (tool) ning dublikat qilish holatida ekanligingizni bildiradi.

4. Tanlash to'rt burchakni (Selection Rectangle) o'nga suring.



Surishni boshlashingiz bilan strukturaning nusxasi paydo bo'ladi. Dastlabki struktura o'z o'rnida qoladi. Nusxa dastlabkisidan to'la ajralgandan so'ng sichqoncha tugmasini qo'yib yuboring.

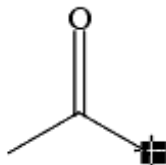
Eslatma: Agar siz nusxani yuqorida ko'rsatilganidek hosil qilsangiz siz uni saxifa oynasida hohlagan joyga surishingiz mumkin. Agar nusxani dastlabkisi bilan birga bo'lsin desangiz, surayotganda Shift ni bosib turing.

Dublikat qilingan strukturaga o'zgartirishlar kiritish.

1. Solid Bond ni bosib

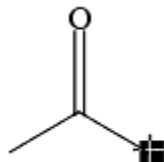


2. Nusxa strukturada quyida ko'rsatilgan kora belgiga to'g'rilang va bosib.

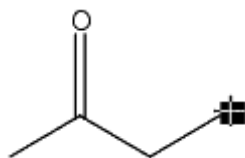


2.7. Bitta atomga bir nechta bog'larni qo'shish:

1. Quyida ko'rsatilgan atomga qarating.



2. Atomga uch marta bosib, har bir bosish orasida bir oz pauzaga yo'l bering.

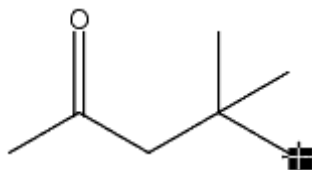


Agar sichkonchani ketma-ket tez bossangiz 3 martalik bosish deb olinib, oxirgi atomingizni duplikat qilishi mumkin.

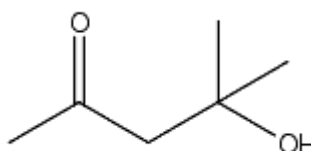
Hot Keys (faol tugmalar)an foydalanib, atom (label) ini yaratish.

Hot Keys (faol tugmalar) maxsus atom (label) lariga biriktirilgan, klaviaturangizdagi tugmalardir.

1. Quyidagi atomga qarating.

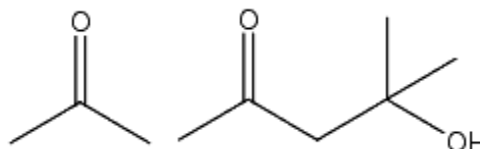


2. «O» ni yozing (tering).



Yakka elementli nomoyon qiladigan «Hot Keys» lardan foydalanganingizda vodorod atomi to'g'ri miqdori boshka belgigaga qo'shiladi.

Saxifaingizda quyidagi ikkita struktura bo'lishi kerak.

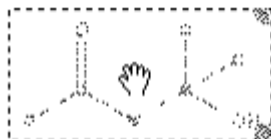


Quyidagi qadamlarda, siz struktura tanlashda boshqacha metoddan foydalanasiz, so'ngra strelkaga joy qoldirish uchun strukturalarni ajratasiz.

1. Marquee tool ni bosning.



ESLATMA: Boshqa usulda, Marquee tool ni ishlatish uchun siz «Lasso tool» ni tanlab, Alt tugmasini bosib turishingiz mumkin. Oxirgi chizilgan ob'ekt tanlanadi. Tanlamani strelkaga joy qoldirish uchun suring. Struktura yaxlitligini hosil qilish uchun Shift ni bosib turib, tanlama to'rtburchakni o'nga suring.



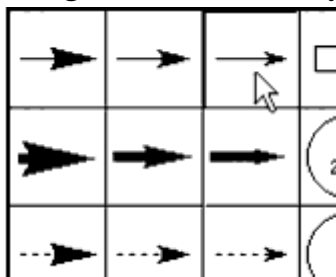
Reaksiya sxemasiga strelkalar qo'shish..

1. Strelka nomoyon bo'lishi uchun sichqoncha tugmasini Arrow tool ustida bosib ushlab turing.



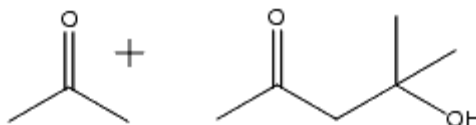
ESLATMA: «Arrow icon» ning past-o'ng burchagida uchburchak unda panel' mavjudligini bildiradi.

2. Kursorni quyida ko'rsatilgan» strelka kabi yurgizing.

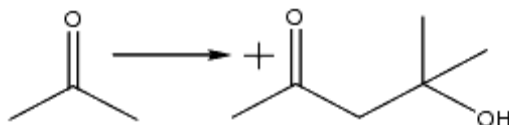


3. Strelkani xoxlagan uzunligingizda chizing.

1. Birinchi strukturaga qarating va sichqoncha tugmasini bosib turing.



2. Strelkanini o'zingiz hohlagan uzunlikda suring. Sichqoncha tugmasini qo'yib yuboring.



ESLATMA: Agar strelkani uzunligini (yoki X-o'qiga bog'liq burchakni) o'zgartirmoqchi bo'lsangiz:

1. Shift ni bosib turib strelkani boshiga qarating. (to'g'ri qaratayotgan bo'lsangiz o'zi bilnadi)

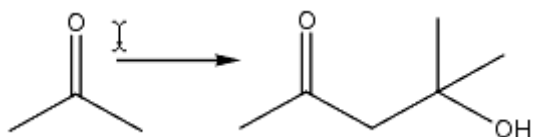
2. Strelkani boshini hohlagan uzunlikda (va burchakda) suring. Reagentlar va reaksiyalarni nomoyon qilish uchun formula va boshqalarni kiritish uchun Text tool dan foydalaning.

2.8. Tasvirga matn kiritish.

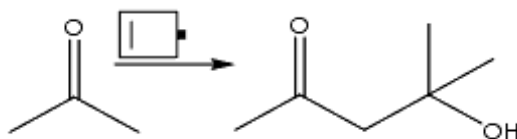
1. Text tool ni bosing.



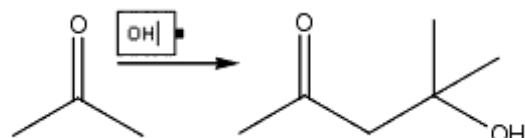
2. CHizma ustiga qarating. Matn kiritish belgisi paydo bo'ladi.



3. Matn yozish urni hosil buladi



4. OH ni tering



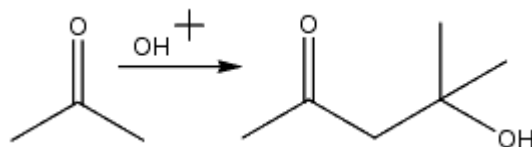
ESLATMA: Agar siz tasvirni qayta joylashtirmoqchi bo'lsangiz, selection tool (tanlash vositasi) ni tanlang va tasvirni suring.

Chemical Symbols tool paneli mavjud bo'lgandan sung maxsus simvollardan foydalanib, zaryad simvolni qo'shing.

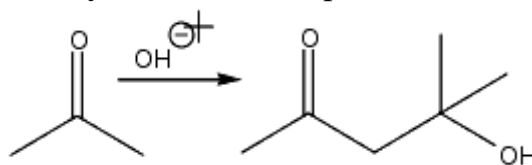
1. Sichqoncha tugmasini Shemical Symbol ustida bosib tutib turing. Pastda ko'rsatilgan negative charge sumbol ga suring va sichqoncha tugmasini qo'yib yuboring.



2. OH yozuvi markaziga qarating.



3. Charge symbol (zaryad simvoli)ni qo'shish uchun bosing.



ESLATMA: Agar simvol kiritgandan so'ng sichqoncha tugmasini bosilgan holda ushlab tursangiz, statik holatda simvolni belgi atrofida aylantirishingiz mumkin.

Shemical Symbol palette dan olib qo'shilgan ob'ektlar avtomatik ravishda o'zlari eng yaqin bo'lgan struktura bilan birlashadi. (bog'lanadi).

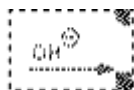
Arrow singari ba'zi ob'ektlar avtomatik ravishda bog'lanmaydi. Siz o'zingiz Group command dan foydalanib ob'ektlarni gruppalashtirishingiz mumkin. SHundan so'ng siz guruxlangan ob'ektlarni birgalikda o'zgartirish (manipulate) yoki siljitish uchun tanlashingiz mumkin.

2.9. Ob'ektlarni gruxlash uchun:

1. Tanlash vositasi (Selection tool) ga bosing.



2. Shift ni bosib turgan holda arrow , OH va zaryad simvoli (zaryad simvoliga)ga bosing.



«Shift» tugmasi ob'ektlarni tanlashga boshqa ob'ektlarni tanlashdan chiqarmagan holda qo'shish imkonini beradi.

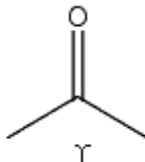
3. Object menyusidan Group ni tanlang.

ESLATMA: Individual ob'ektlarni grappa ichida ularning ustiga bosish orqali tanlashingiz ham mumkin.

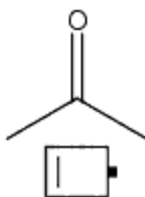
1. Tanlash uchun Text tool ga bosing.



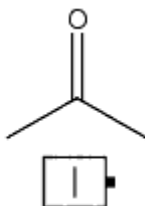
2. Birinchi struktura pastiga qarating.



3. Text box (matn katakchasi) yaratish uchun bosing.



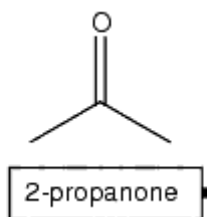
4. Text menyusidan Centered ni tanlang (markazlashtirish uchun).



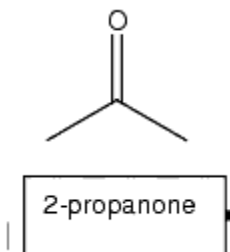
Kursor matn katakchasi markaziga siljiydi.

Yozing:

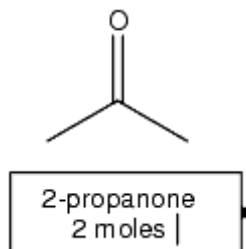
1. “propanol-2” deb yozing.



2. Yangi qator qo'shish uchun Enter yoki Return ni bosning.

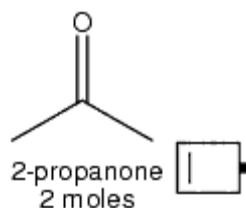


3. “2 mol” deb yozing.



Boshqa strukturalar uchun matn yaratish

1. Birinchisiga tutash bo'lgan boshqa matn katakchasi yaratish uchun Tab ni bosning.



ESLATMA: Oldingi matn bilan bir xil o'lchami, uslubiga ega bo'lgan ko'p yozuvlarni yaratish uchun text tool ning caption holatida Tab tugmasidan foydalanishingiz mumkin.

2. 4-gidroksi-4-metil-2-pentanon deb yozing, Enter yoki Return ni bosning, so'ng 1 mol' deb yozing.

Agar sizning yozuvlaringiz strukturalar ostida to'g'ri joylashtirilmagan bo'lsa, ularni selection tool (tanlash vositasi) yordamida siljitishingiz mumkin.

1. Selection tool ni bosning.

Avtomatik ravishda matn atakchasi tanlanadi. Chunki u oxiri chizilgan ob'ektdir.

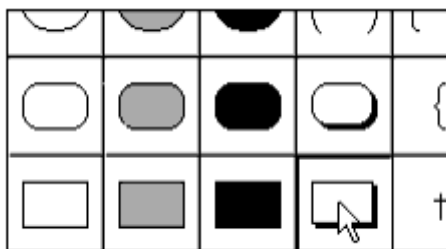
O'z strukturasi ostida yozuvni markazga olib kelishi uchun Left (chap) yoki Right Arrow (o'ng) ni bosning. Bu usul Tab tugmasi yordamida yaratilgan sozlash'arni muvofiqlashtiradi.

CHizgini yakuniga yetkazish uchun sxema atrofiga soyali katakachani qo'shing.

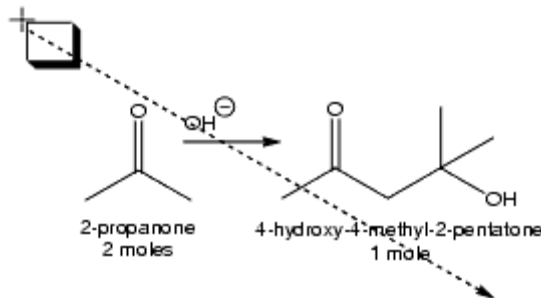
1. Sichqoncha tugmasini Drawing Elements tool ustiga bosib tutib turing.



2. CHizuvchi elementlar panelidan Shadowed box ni tanlang.



3. Reaksiya sxemasining yuqori chap burchagiga qarating. Katakcha chizish uchun sichqoncha tugmasini bosib turib diogonal bo'yicha past o'ngga suring.



Saxifani saqlang va yoping.

1. File menyusidan Save ni tanlang.
Saxifaingiz saqlandi.
2. File menyusidan Close ni tanlang.

3. AlChemY. Kuch maydonlari muhitida kompyuter modellashtirish dasturlari bilan ishlash.

КИМЁВИЙ СТРУКТУРАЛАРНИ ЧИЗИШ.

Кимёвий структураларни чизиш учун қуйидаги восита (tool) лар керак бўлади.

Боғлар воситаси

Халқалар воситаси

Циклик занжир.

Хатони автоматик текшириш.

ChemDraw Ultra да автоматик равишда Кимёвий номлардан структуралар чизиш учун меню.

3.1. Боғлар воситаси (Bond tools) .

Бу восита панелдаги турли хил боғ турлари намуналари ва белгиларидан иборат. Ҳар бир воситани ифодаловчи белгилар келтирилади.

Ўзгармас бурчаклар билан чизиш.

Х-ўқига нисбатан 15 градус бурчакли боғларни чизиш учун:

1. Tools менюсидан Fixed Angles ни танланг. Fixed Angles командаси ёнида активлигини билдирувчи белги пайдо бўлади.

2. Bond tool га босинг.

3. Саҳифа ойнасида боғнинг бир учидан бошқа учига суринг.

4. Боғ учини бошқа бурчакларга силжитинг.

Маълумот майдони 15-градусли бурчакда эканлигини кўрсатади. Кўпроқ маълумот учун Message area (хабар майдони) га қаранг.

Click қилиш (босиш) орқали боғ қўшиш.

Тезда ўзгармас узунликда боғ қўшиш учун

1. Bond (боғ) tool (воситаси) га босинг.

2. Кора катакча маркази га босинг.





Янги боғ чизилади ва сиз танлаган атомга қўшилади.

Бу усул билан чизилган боғлар доимо чизиш курсаткичлари (Drawing Settings) диалог қутисида кўрсатилган ўзгармас узунлик (Fixed length) да фойдаланган ҳолда чизилади.

Халқа чизиш

Турли хил шакл ва улчамдаги Халқаларни чизиш учун куйидаги чизмалардан фойдаланиш мумкин.

	Циклопропан
	Циклобутан
	Циклопентан
	Циклогексан
	Циклогептан
	Циклооктан
	Занжирлик циклогексан (1)
	Занжирлик

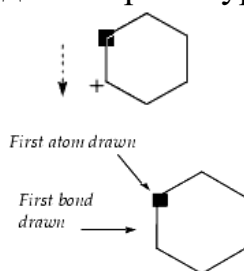
	циклогексан (2)
	Циклопентадиен
	Бензол

Агар халқа чизаётганингизда Fixed Length (ўзгармас узунлик) актив бўлса, халқадаги ҳар бир боғнинг узунлиги автоматик равишда ўзгармас узунликка келтирилади. Агар Fixed Angles (ўзгармас бурчаклар) актив бўлса, у ҳолда халқадаги биринчи боғнинг X-ўқи билан ташкил қиладиган бурчаги 15-градус бўлади.

1. Ring tool ни босинг.
2. Кўрсаткични саҳифа ойнасига жойлаштиринг. Циклогексан воситаси (tool) қуйида кўрсатилади.



3. Биринчи боғнинг бошидан охирига суринг.

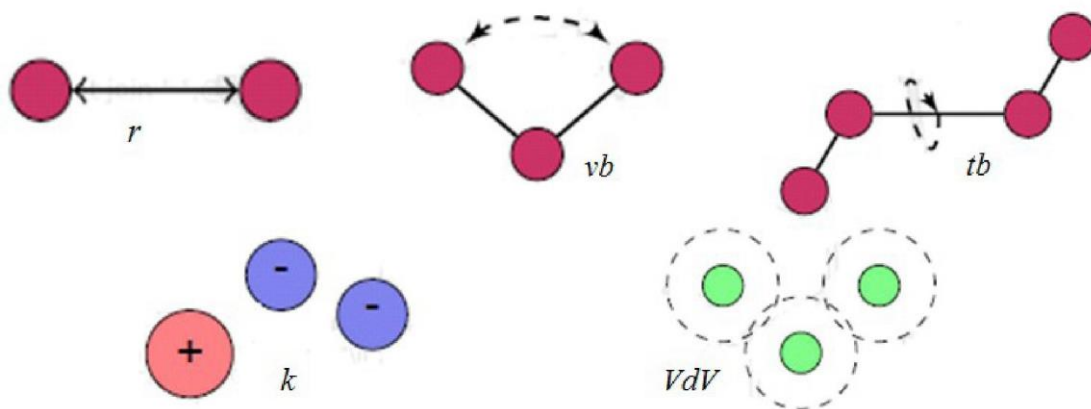


Саҳифа ойнасига келтирилганда, кўрсаткич халқа воситаси (ring tool) кўрсаткичига айланади. Халқа ускунаси (ring tool) кўрсаткичи устидаги квадрат биринчи чизилган атомни кўрсатади. Шу квадрат остидаги боғ биринчи чизилган боғ бўлади.

4. Molekulyar mexanika MMP2 dasturi bilan ishlash

Molekulyar mexanika (MM) usullarida atomlar kuch maydonlarida joylashgan N'yuton zarrachalari deb qaraladi. Ularning o'zaro ta'siri potensial energiya bilan ifodalanadi. Potensial energiya bog' uzunliklari (r), bog'lar orasidagi butchak (ν_b), ikki yonli (torsion) burchak va bog'lanmagan fragmentlar orasidagi elektrostatik (k) hamda Van-der-vaals ta'siriashuvlariga bog'liq. MM yoki kuch maydonlari usullarida umumiy potensial energiya yuqorida keltirilgan ta'sirlashuvlar energiyalarining yig'indisi sifatida topiladi:

$$E = E_{\text{bog}'} + E_{\nu_b} + E_{\text{tb}} + E_{\nu_{dv}} + E_{\text{Kulon}} \quad (19)$$

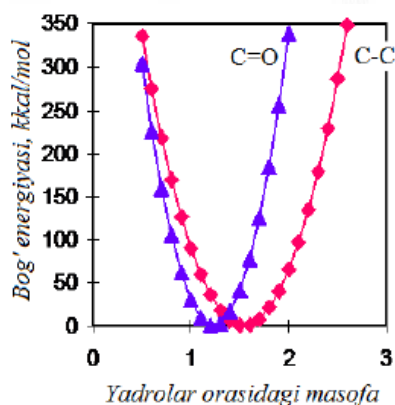
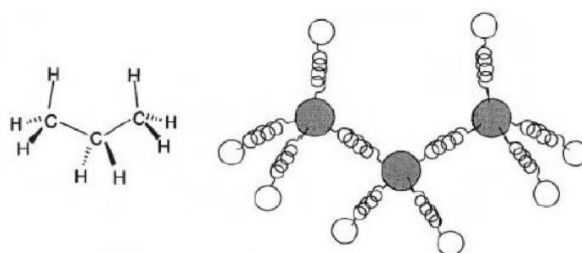


Bog' energiyasini ifodalash

MM usuli empirik usul –tajribada olingan geometrik va boshqa kattaliklar asosida parametrlanadi. Ma'lum bo'lgan, alohida olingan har bitta kimyoviy bog' uzunligi ideal bog' uzunligi (r_0) sifatida kiritilgan. Masalan, sp^3 gibridlangan C atomlari orasidagi C-C bog' uzunligi 1.508 Å, sp^2 gibridlangan C atomlari orasidagi C=C bog' uzunligi 1.333 Å va sp gibridlangan C atomlari orasidagi C≡C bog' uzunligi 1.200 Å deb kiritilgan. Bog' energiyasini topishda quyidagi ifoda yordamida minimal energetik holat energiyasi olinadi:

$$E_b = \frac{k}{2}(r - r_0)^2 \quad (20)$$

bu yerda, k-parametrlashda aniqlanadiga o'zgarmas kattalik, r_0 –parametrlashda kiritilgan ideal bog' uzunligi va r –qaralayotgan birikmadagi ideal bog' uzunligidan farq qiluvchi (real) bog' uzunligi. Ma'lumki, kimyoviy bog'lar uzunligi belgilangan masofagach uzayishi va qisqarishi mumkin. Yadrolar orasidagi masofa oshishi bilan potensial energiya ham keskin oshadi (-rasm). MM usulida kimyoviy bo'glar prujinadek tasaffur qilinadi.



C=0 va C-C bog' uzunligining energiyaga bog'liqlik diagrammasi.

Valent va torsion burchak energiyasini ifodalash

MM usulida valent burchak energiyasini ifodalashda quyidagi ifodadan foydalaniladi:

$$E_{vb} = \frac{k_1}{2} (\phi_i - \phi_0)^2 \quad (21)$$

Ayrim MM programmalarida vb kattaliklarini tajribadagi vb kattaliklariga yaqinlashtirish maqsadida yuqoridagi ifoda mukammallashtirilgan:

$$E_{vb} = k_1/2(\phi_i - \phi_0)^2(1 - k'(\phi_i - \phi_0) - k''(\phi_i - \phi_0)^2 - k'''(\phi_i - \phi_0)^3 - k''''(\phi_i - \phi_0)^4 \dots) \quad (22)$$

Torsion bog' energiyasi quyidagi ko'rinishdagi ifodalar yordamida aniqlanadi

$$E_{\theta} = \left(\frac{V_1}{2}\right)(1 + \cos(\theta_{ab})) + \left(\frac{V_2}{2}\right)(1 - \cos(2\theta_{ab})) + \left(\frac{V_3}{2}\right)(1 - \cos(3\theta_{ab})) \quad (23)$$

Van-der-Vaals va Kulon ta'sirlashuvlari energiyalarini ifodalash VdV ta'sirni to'liq ifodalovchi formulalardan biri Leonard-Jons potentsiali hisoblanadi:

$$E_{vdv} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=i+1}^N 4\epsilon_{ij} \left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r_{ij}}\right)^6 \right] \quad (24),$$

bu yerda, ϵ_{ij} va σ_{ij} potensial o'ra chuqurligini ifodalovchi kattaliklar.

Kulon ta'sirni to'liq ifodalovchi formulalar quyidagicha:

$$E(q_1, q_2) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \quad (25),$$

bu yerda, q_1 va q_2 o'zaro ta'sirlashyotgan ikkita zarrachaning zaryadi, r - q_1 va q_2 orasidagi masofa, ϵ_0 - elektr doimiysi: $\epsilon_0 = 8.85 \cdot 10^{-12}$ Farada/metr, ϵ_r - zaryad atrofida muhitning dielektrik singdiruvchanligi.

$$E = \sum_{i=1}^{N_A} \sum_{j=1}^{N_B} \frac{q_i q_j}{4\pi\epsilon_0 \epsilon_r r_{ij}} \quad (26),$$

MM usuli programmalarida C atomlarini va boshqa atomlarni gibridlanish holati va strukturasi o'ziga xos xususiyatlarini to'liq namoyon etishi uchun parametrlash jarayonida qaytadan nomerlangan (-jadval). Masalan, har bir sinf birikmalaridagi C atomining electron tuzilishlarini inobatga olgan holda C atomi uchun 15 ta raqamlash kiritilgan. Alkenlardagi sp^2 -gibridlangan C atomi karbonidagi sp^2 -gibridlangan C atomidan farq qilishi maktab kimyosidan ma'lum. Kislorod atomi uchun 7 xil, N atomi uchun 10 xil raqamlash kiritilgan.

MM usulida atomlarning turlari va raqamlanishi

Raqam	Simvol	Tavsifi	Raqam	Simvol	Tavsifi
1	C	sp ³ -uglerod	28	H	enol yoki amid
2	C	sp ² -uglerod, alken	48	H	ammoniy
3	C	sp ³ -uglerod, C=O(N)	36	D	deyteriy
4	C	sp-uglerod	20	EJ	electron juft
22	C	Siklopropan	15	S	sulfide, R ₂ S
29	C-	radikal	16	S+	R ₃ S ⁺
30	C+	karbokation	17	s	Sulfoksid, R ₂ SO
38	C	sp ² -uglerod, siklopropen	18	s	R ₂ SO ₂
50	C	sp ² -uglerod, aromatik	42	s	sp ² -S, tiofen
56	C	sp ³ -C, siklobutan	11	F	ftorid
57	C	sp ² -C, siklobuten	12	Cl	xlorid
58	C	Karbonil, siklobutanon	13	Br	bromid
67	C	C=O, siklopropanon	14	I	yodid
68	C	Karbonil, keten	26	B	Boron, trigonal
71	C	Keton uglerodi	27	B	Boron, tetragonal
8	N	sp ³ -azot	19	Si	silan
9	N	sp ³ -azot, amid	25	P	Fosfin, R ₃ P
10	N	sp-azot	60	P	5 valentli P
37	N	Azo yoki piridin, -N=	51	He	geliy
39	N+	sp ³ -N, R ₄ N ⁺	52	Ne	neon
40	N	sp ² -azot, pirrol	53	Ar	argon
43	N	Azoksi, -N=N-O	54	Kr	kripton
45	N	Azid	55	Xe	ksenon
46	N	Nitro, -NO ₂	31	Ge	germaniy
72	N	Imin, oksim, =N-	32	Sn	qalay
6	O	sp ³ -kislrorod	33	Pb	Qo'rg'oshin, R ₄ Pb
7	O	sp ² -kislrorod, karbonil	34	Se	selen
41	O	sp ² -kislrorod, furan	35	Te	tellur
47	O"	karboksilat	59	Mg	magniy
49	O	epoksi	61	Fe	Temir (II)
69	O	Amin oksid	62	Fe	Temir (III)
70	O	keton	63	Ni	Nikel (II)
5	H	Vodorod	64	Ni	Nikel (III)
21	H	Spirtlardagi, OH	65	Co	Kobalt (II)
23	H	Amin, NH	66	Co	Kobalt (III)
24	H	Karboksil, COOH			

Bugungi kunda, ko'pchilik hisoblash majmualari uchun MM usullari yaratilgan va kiritilgan:

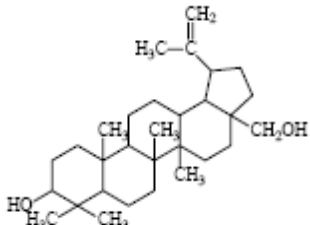
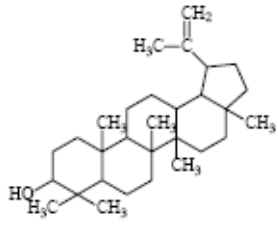
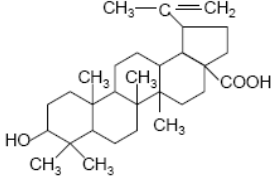
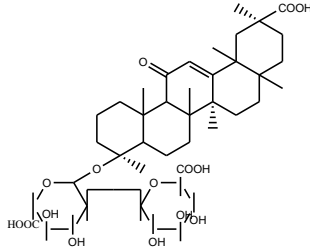
1. MM2 (ChemOffice);
2. MMX (PCModel);
3. MM+, Amber, OPLS, BIO+ (HyperChem);
4. Gchemical, MMFF94, MMFF94s, UFF (Avogadro);
5. UFF, Dreiding, Amber (Gaussian). UFF-universal force field (Universal kuch maydoni), MMFF-Merk Molecular Force Field.

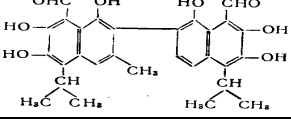
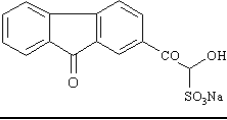
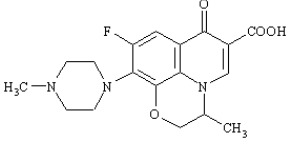
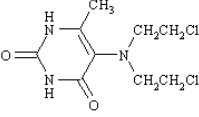
MM usuli kvant-kimyoviy usullarga nisbatan juda tezkor usul sanaladi. Lekin, aniqligi yarim empirik va noempirik usullarnikiga nisbatan past. MM usullarida N, O kabi atomlaridagi bog'lanmagan elektron juft ta'sirlashuvlari to'liq inobatga olinmagan. Tautomerlar, konformerlar va boshqa birikmalarning umumiy energiyasi hisobida tajriba bilan mos tushadigan ma'lumotlar olingan.

Ayrim MM usullari atom zaryadlari va hosil bo'lish issiqligini hisoblashga parametrlangan.

Keyingi vaqtlarda MM usulining tezkorligi asosida kvant-kimyovo va MM usullari birlashtirgan, gibrid usullar (QM/MM) yaratish ustida izlanishlar olib borilmoqda. Bunga misol qilib Morokumaning ONIOM usulini misol qilib keltirish mumkin.

AMALIY MASHG'ULOTLAR UCHUN MASALALAR TO'PLAMI

	
<p>Структура формуласи 3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>	<p>Структура формуласи 3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>
	
<p>Структура формуласи</p>	<p>Структура формуласи</p>

<p>3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>	<p>3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>
	
<p>Структура формуласи 3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>	<p>Структура формуласи 3 D структураси Модданинг ИЮПАК буйича номи Элементларнинг фоиз таркиби Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>
	
<p>Структура формуласи 3 D структураси Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>	<p>Структура формуласи 3 D структураси Турли физик-кимёвий константалар ПМР – спектр С13 – спектр Олинган натижалар юзасидан хулосалар</p>

GLOSSARIY

DBF (Data Base File) fayl- MO yozuvlaridan iborat fayl.

DOS(Disk Operation Systems) - diskli operatsion tizim bo'lib, kompyuter qurilmalarining vazifalarini to'ldiruvchi, ularning ishlashini ta'minlovchi va boshqaruvchi, amaliy programmalarini bajarilishini ta'minlovchi programmalar majmui.

E-Mail - elektron pochta (1971 yili ARPANET tarmog'ida birinchi marta qo'llanilgan axborotlarni uzatish tizimi.

Hardware - kompyuter ning qurilmalar ta'minoti.

HTML (Hypertext MARKUP LANGUAGE) - gipertekstni bel-gilash tili-www hujjatlari tili.

Hypertext (gipertekst) – boshqa hujjatlar(yoki betlararo alo-qa) bilan aloqalarni o'z ichiga olgan hujjat. Biror aloqani aniqlash bilan avtomatik ravishda boshqa hujjat chaqiriladi.

IMP (Information Message Processor) - axboriy xabarlar protsessori.

INTERNET -TCP/IP bayonnomasi asosida ishlovchi va unga mos xizmatlar majmuini birlashtiruvchi kompyuter tarmoqlari.

NC (Norton Commander) - MS DOS OS ning qobiq-programmasi bo'lib, foydalanuvchining MS DOS da ishlash sharo-itini yengillatish, muloqot tashkil qilish uchun yaratilgan pro-grammalar majmui. U disdagi fayl va kataloglarning joylanishini kompyuter ekranida tasvirlab unda harakatlanish, "Sayohat" qilish imkonini yaratadi, DOS bilan sodda va ixcham muloqot qilishni, turli xizmat vazifalarini bajarishni ta'minlaydi.

NCP (Network Control Protocol) – tarmoqni boshqarish ba-yonnomasi.

Paintbrush - grafik muxarrir bo'lib, u relyatsion ma'lumotlar ombori; ya'ni ikki o'lchovli jadvallar shaklida tashkil qilingan ma'lumotlar ombori.

Software - kompyuter ning programma ta'minoti.

TCP/IP (Transmission Control Protocol/Internet protocol-uzatishni

TIP (Terminal information Processor) - terminalli axboriy protsessor.

UDP (User Datagram Protocol)- foydalanuvchi deyta-grammalarining bayonnomasi.

Windows 3.1 - DOS ni grafik texnologiyaga asoslangan qobig'i bo'lib, u ko'p maslaklikni va programmalar vazifalarini integratsiyalash (yig'ish) ni ta'minlaydi.

Windows 95- 97 - grafik texnologiyaga asoslangan operatsion tizim.

WWW (World Wide Web)- gipertekstga asoslangan axboriy taqsimlangan mul'timedia tizimi. Bugungi kunda ilmiy-texnik bilimlar, virtual kutubxona, o'qituv jarayonining ilovalari tayyorlanayotgan juda kuchli axborot texnologiyasi(san'at dara-jasidagi) vositasi.

Yost- klientga biron- bir xizmat ko'rsatuvchi kompyuter .

Abonent tizimi - foydalanuvchilarga axborot tarmoqlarining xizmatlarini ta'minlovchi axborot tizim.

Avtomatlashtirilgan loyihalash tizimi -loyihalash jarayonini avtomatlashtirishga mo'ljallangan programmalar va qurilmalar majmui.

Alifbo-raqamli axborot-bitta tugmachani bosish bilan kompyuter ga kiritiladigan belgilar majmui (harflar, raqamlar, munosabat belgilari va b.).

Almashuv buferi(Clipboard) - Windows operatsion tizimi ishlash jarayonida ajratiladigan xotira sohasi. Ilova va huj-jatlar o'rtasida grafik va matnli axborotlarni almashishga mo'ljallangan xotira.

Aloqa tuguni - tizimlar o'rtasida uzatiladigan axborotlar aloqasini ta'minlovchi apparat va programma ta'minoti.

Amaliy jarayon-foydalanuvchi topshirig'i bo'yicha baja-riladigan axborotni qayta ishlash jarayoni.

Amaliy programma - foydalanuvchi topshirig'ini bajaruvchi programma.

Arifmetik ifoda-qo'shish, ayirish, ko'paytirish, bo'lish, darajaga ko'tarish(^), ochuvchi (va yopuvchi) qavslar yordamida yozilgan son, funktsiya, indeksli va indeksiz o'zgavuchilar ketma-ketligidan iborat yozuv. Arifmetik ifoda natijasi son bo'ladi.

Axboriy bank-axborotlarni saqlash va qayta ishlashga imkon beruvchi axboriy, texnik, programmaviy, til va tashkiliy vositalar majmui.

Axboriy madaniyat - insonni barcha axborot texnolo-giyalaridan kerakli tarzda foydalana olishi.

Axboriy resuslar- ilmiy nazariya,jarayon va hodisalarni o'rganish borasidagi tadqiqotlar, kashfiyot, bino va mashinalar loyihalari, jamiyat va tabiat haqidagi xabarlarga asoslangan davlatning ma'naviy potentsiali.

Axboriy tizim-qandaydir usulda tuzilgan ma'lumotlar, ularni saqlash va qayta ishlashga mo'ljallangan qurilma(programmalar majmui).

Axborot tarmoqlari arxitekturasi - axboriy tizimlar birikmasini hosil qilish san'ati.

Axborotlar tuzilmasi - ma'lumotlarni tasvirlash va tashkil qilish to'g'risidagi kelishuv.

Axborotni boshqarish tili - xabarlarni izlash, ularni qayta ishlash va axboriy bazaga kirish bilan bog'lik amallarni aniqlashga mo'ljallangan axborot izlash tili.

Axborotni siqish - ma'lum hajmdagi axborotni saqlash uchun undagi bitlar sonini kamaytirish jarayoni.

Bayonnoma (protokol)- axboriy tizimlarni o'zaro faoliyatini ta'minlovchi masalalardan biri bajarilishini ifodalovchi qoida berilgan hujjat.

Bayt - kompyuter tomonidan yaxlit birlik sifatida qabul qilinadigan 8 bitdan iborat axborot. U turli belgilarni kompyuter da tasvirlash, ularni bir-biridan farqlash imko-niyatini beradi.

Bit - axborotning eng kichik biriligi bo'lib, u ikkilik sanoq sistemasidagi raqam. Bitning qiymati 0 yoki 1 ga teng.

Bog'langan fayllar -birinning bosh kaliti-ikkinchisi bosh kalitining katta qismini tashkil qiluvchi ikki ma'lumotlar fayli(DBF).

Bosish qurilmasi (printer)- axborotni qog'ozda akslantiruvchi qurilma.

Bosh kalit - qiymati ma'lumotlar faylidagi yozuvni bir qiymatli aniqlashga imkon beradigan DBF fayl yozuvlaridan iborat maydonlar majmui.

Boshqarish bayonnomasi (tarmoqlararo bayonnoma)- halqaro kompyuter tarmoqlarida ma'lumotlarni almashishni ta'minlovchi kelishuv haqidagi hujjat.

Boshqaruvchi belgi-kodlar jadvalidagi 32 dan kichik o'nli kodga mos keluvchi belgilar. Ulardan kompyuter qurilmalarini boshqarish va axborotlarni uzatish uchun foydalaniladi.

Boshlang'ich yuklash - kompyuter ni tokka ulaganda ishga tayyorlash.

Buyruq - axboriy tizim tomonidan axborotni qayta ishlash jarayoniga bog'lik aniq amal bajarilishini talab qiluvchi son, so'z yoki jumla.

Burash mintaqasi - hujjat yoki ro'yhat oynasining pastki yoki o'ng qismida joylashadi. Oynaga sig'magan hujjat bo'ylab ko'chib yurishga (skroling) xizmat qiladi (ko'rsatkich va bosqich bilan ta'minlangan).

Videoaxborot- turli tasvirlar(fotogarfiya, rasm va boshqalar) yordamida uzatiladigan axborotlar.

Videodisk- metall yoki plastmassadan ishlangan tekis disk.Uning satxiga lazer nuri yordamida o'qiladigan axborot yoziladi.

Vinchester – qattiq diskni programma tuzuvchilar tomonidan nomlanishi.

Virtual voqelik - axborot vositalarining eng dolzarb yo'nalishlaridan biri. Turli voqeliklarga taqlidni tasvirlovchi programmalar.

Grafik muxarrir - grafikli tasvirlarni yaratish va o'zgartirish uchun foydalaniladigan programma vositalari.

Deytagramma - qabul qiluvchi kompyuter ga oldindan xabar qilmasdan uzatilgan axborotlar paketi. Bu usul uncha katta bo'lmagan axborotlarni uzatishda foydalaniladi.

Disk yuritgich (diskovod) - egiluvchan magnitli diskka xizmat qiluvchi elektron-mexanik qurilma.

Drayver(driver) - amaliy programma va tashqi qurilma yoki xotira o'rtasida joylashgan tizim programmasi. U aniq bir vazifani bajaradi (Masalan, klaviatura, "sichqoncha", printer, monitor drayverlari).

Ilova oynasi - amaliy programma bajarilayotgan oyna.

Interfeys (interface)- o'zaro ta'sir, aloqa, birlashish, kelishish vositalari. Programma tuzuvchi, foydalanuvchi, kompyuter operatori interfeyslari bir-biridan farqlanadi. Interfeysning asosiy tushunchalari: menyu va muloqot oynasi.

Ifoda - ma'lum mulohazani yozish shakli. Ifoda operand (tashkil qiluvchilar)dan iborat bo'ladi. Ular bir-biri bilan ifodaning ma'nosini bildiruvchi maxsus belgilar yordamida birlashtiriladi. Amaliy informatikada arifmetik, shartli va mantiqiy ifodalar farqlanadi.

Kengaytma - fayl nomining bir qismi bo'lib, faylda ifodalangan axborot turini aniqlaydi.

Klient (Client) – tarmoqning qaeridadir joylashgan servisdan foydalanuvchi nomidan xizmat oladigan amaliy programma.

Mantiqiy disk - qattiq magnitli disk xotirasining bo'lagi bo'lib, bu bo'laklar S:, D:, E: va boshqa lotin alifbosi harflari bilan belgilanadi.

Mantiqiy ma'lumot - "Haqiqat" yoki "Yolg'on"(1 yoki 0) qiymatlaridan birini qabul qiluvchi ma'lumot.

Matn muxarriri - matnli fayl va matnli hujjatlarni kiritish va o'zgartirishga mo'ljallangan programma vositalari.

Matnli fayl - o'zgaruvchan uzunlikdagi qatorlardan iborat fayl bo'lib, har bir satri kodlar jadvalidagi ixtiyoriy belgilar majmui. Ma'lum amalni bajarishga, vazifani bajarish yo'nalishini o'zgartiruvchi, tanlash maydoni turidagi bandlardan iborat. Asosiy, gorzontal, vertikal menyular bir-biridan farqlanadi.

Ma'lumot -ob'ektning muayyan xususiyatini belgilovchi ko'rsatkich bo'lib, u ko'rilayotgan ob'ektni aniq bir nusxasi uchun ma'lum sonli, matnli yoki boshqa qiymat qabul qiladi.

Ma'lumotlar ombori (MO)-qaralayotgan sohadagi ob'ektlar holatini va ular o'rtasidagi munosabatlarni aniqlovchi nomlangan ma'lumotlar majmuidir. Relyatsion, shajarasimon va to'rsimon tuzilishdagi MO farqlanadi.

Ma'lumotlar ombori tizimi (MOT)- MO bilan to'ldirilgan MOBT ma'lumotlar banki (MB). Markaz-lashtirilgan yig'ish va jamoa bo'lib foydalanishga mo'ljallangan ma'lumotlarning MO texnologiyasiga asoslangan programma, til, tashkiliy va texnik vositalari. Ma'lumotlar tuzilishini normallashtirish - shajarasimon daraxt shoxlari orqali bargni mos shoxga va tugunga joylashtirish jarayoni. Bosh kalit - MO dagi ixtiyoriy yozuvni tanlab olish imkonini beruvchi yozuv bo'lib, u ob'ektni bir nusxasidan boshqasini farqlay oladi.

Ma'lumotlar omborini boshqarish tizimi (MOBT) MO ni yaratish, yuritish va ko'p foydalanuvchilar tomonidan birgalikda qo'llanishga mo'ljallangan til va programma vositalarining majmui.

Menyu - tanlash mumkin bo'lgan ob'ekt (narsa) lar ro'yhati.

Mikroprotssessor - kompyuter ning "miya" si. Unga tushadigan buyruqlarni

bajaradi va boshqa qurilmalar ishini boshqaradi.

Modem (Modulyator, Demodulyator)- kompyuter ni axborot uzatish tizimi bilan o'lchovchi qurilma.

Monitor (display) - elektron nurli truba asosida ishlaydigan televizor ekrani bo'lib axborotlarni o'zida akslantiradi.

Muloqot oynasi – aniq ma'lumotni kiritishga so'rov beriladigan joy.

Mul'timedia (mul'ti-ko'p, media-vosita) -axborotlarni akslantirish ko'p axboriy vositalar (ovoq, rasm, fotografiya, musiqa va boshqalar)dan foydalanish.

Oyna - ekranni to'rtburchak hoshiya bilan chegaralangan bo'lagi.

Operativ xotira - har biri bir baytni saqlashga mo'ljallangan elektron uyachalar majmui. Bu uyachalar 0,1,2,... 35000, 35001,..sonlar bilan tartiblanadi. Uyachaning tartib soni unga shu paytda yozilgan baytning adresi deyiladi.

Pereklyuchatel' - menyu bandi, uskunalar panelidagi piktogramma, muloqot oynasidagi maydon.

Piksel - videoadapter tomonidan (monitor ekranida) yaratilgan tasvirning minimal elementi (Picture Element - pel).

Piktogramma (ikonka)- programma yoki programmalar gu-ruxini ifodalovchi belgi.

Programma guruxi - hujjat oynasiga ochiladigan u yoki bu ma'noda bir xil turdagi programma bilan beriladi.

Punkt - shrift o'lchami (balandligi) ning birligi bo'lib, uning qiymati 1/72 dyuymga teng(1 dyuymq 2,54 sm).

Relyatsion yondoshuv - ixtiyoriy tuzilishdagi ma'lumotlarni sodda ikki o'lchovli jadval ko'rinishda tasvirlash.

Sichqoncha-ekran koordinatorlarini ko'rsatish va sodda buyruqlarni bajarishga mo'ljallangan qurilma (manipulyator).

Takrorlanuvchi gurux - ob'ektning har bir nusxasiga mos holda turli hajmda mos keladigan axborot.

Tanlash maydonlari guruxi - menyuning bitta va faqat bittasi tanlanadigan bandlari (Masalan, piktogramma, muloqot oynasi maydonlari). Tanlangan maydon bajariladigan vazifani mumkin bo'lgan hollaridan birini amalga oshirishni ta'minlaydi.

Tarmoq grafigi - tarmoqning aloqa kanallari orqali vaqt birligi ichida o'tuvchi axborot hajmi. U muhim ko'rsatkich bo'lib tarmoqning qanchalik bandligini va holatini ko'rsatadi.

Telekommunikatsiya - axbortni uzatishga telealoqa vositalarini qo'llash.

Uskunalar paneli - foydalanuvchi grafik interfeysi elementlari. Uning yordamida uskunaviy vazifalar va programma boshqaruvi bajariladi.

Fayl adresi - faylning to'la nomi bo'lib, u fayl joylashgan diskning mantiqiy

nomi, unga yo'l va nomi hamda kengaytmasini ko'rsatadi. Masalan: S: -kafedra-kitob-bob1.txt.

Fayllarni arxivlash - diskdagi joyni tejash maqsadida fayllar guruxini bitta arxiv faylga joylashtirish amali.

Faylni chetlatish - diskda shu fayl joylashgan qismni boshqa fayllar joylashishi uchun ochiq deb e'lon qilish.

Hujjat - amaliy programma yordamida qayta ishlanadigan ob'ekt.

Egiluvchan disk - axborotlarni doimiy saqlash uchun ishlatiladigan magnitli axborot to'plagich.

Elektron jadvallar - jadval ma'lumotlarini qayta ishlash uchun mo'ljallangan programma vositalari.

Elektron nashr – maqola va kitoblarni kompyuter da tashkil qilish va undan foydalanish tizimi.

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

Руйхатга олинди

№ 5140500

2018 йил "18" 08



КИМЁВИЙ КОМПЬЮТЕР МОДЕЛЛАШ

ФАН ДАСТУРИ

Билим соҳаси:	100000 – Гуманитар соҳа
Таълим соҳаси:	140000 – Табiiй фанлар
Таълим йуналиши:	5140500 – Кимё

ТОШКЕНТ- 2018

Ўзбекистон Республикаси Олий ва ўрта махсус таълим вазирлигининг 2018 йил "25" 08 даги "141"-сонли буйруғининг 6-илоvasи билан фан дастури рўйхати тасдиқланган.

Фан дастури Олий ва ўрта махсус, касб-хунар таълими йўналишлари бўйича Ўқув-услубий бирлашмалар фаолиятини Мувофиқлаштирувчи Кенгашининг 2018 йил "13" 08 даги 4 - сонли баённомаси билан маъқулланган.

Фан дастури Мирзо Улугбек номидаги Ўзбекистон Миллий университетида ишлаб чиқилди.

Тузувчи:

Ешимбетов А.Г. - Табiiй бирикмалар кимёси кафедраси доценти, кимё фанлари номзоди

Такризчилар:

Мухтаров А.П. - ЎзМУ, Физикавий ва коллоид кимё кафедраси доценти, ф-м.ф.н.;

Тургунов К.К. - ЎзР ФА Ўсимлик моддалари кимёси институти катта илмий ходими, к.ф.н.

Фан дастури Мирзо Улугбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети Кенгашида кўриб чиқилган ва тасвир килинган (2018 йил "13" 07 даги 3 - сонли баённома).

Кирish

Ушбу дастур бакалаврларни компьютер техникасининг ривожланиши ва кимёвий тадқиқотларда янги йўналиш – компьютер кимё ёки молекуляр моделлаш ёрдамида кимёвий бирикмаларнинг тузилишини ва хоссаларини ҳамда хусусиятларини эътиборга олган ҳолда уларни скрининг ва синтез қилиш йўллари қабул мавзуларини қамраб олган. “Кимёвий компьютер моделлаш” фани математик ва табиий илмий фанлар блокига киритилган курс бўлиб, 4 курсда ўқитилиш режалаштирилган.

II. Ўқув фанининг мақсади ва вазифаси

Кимёвий компьютер моделлаш фанини ўқитишдан мақсад- талабаларга кимёвий масалаларни кимёвий бирикмаларнинг тузилиши хоссаларини ўрганишни математик нуқтан назардан тасаввур қосил қилиш ва берилган масалаларни компьютер системаси ёрдамида ечиш усуллари билан таништиришдан иборат.

Ушбу мақсадга эришиш учун бу фан талабаларининг назарий билимлар, амалий қўникмалар, кимёвий жараҳларга услубий ёндашув ҳамда илмий дунёқарашнинг шакллантириш вазифаларини бажаради.

Фан бўйича талабаларнинг билимга, қўникма ва малакаларига қуйидаги талаблар қўйилади. Талаба:

- кимёвий бирикмаларни компьютерда моделлаш; кимёвий бирикмаларнинг тузилиши; *ab initio* нормлирик квант-кимёвий ҳисоб услуб, базисли функцияларни танлашдаги қоидалар ҳақида *қоғизда тасаввурга эга бўлиши*;

- ҳозирги замон компьютер техникалар системасининг имкониятларини; математик моделлаш усулини тўғри танлашни ва ҳисоблаш натижаларини тушунишни *билиши ва улардан фойдаланиши*;

- графиклар асосида молекула тузилишини ақс эттира олиш; компьютер техникаси билан ишлаш; кимёвий илмий-тадқиқот ишларида компьютер техникасини қўллаш *қўликчаларига эга бўлишлари керак*.

III Асосий назарий қисм (маъруза машғулотлари)

1-маъруза. Эмпирика ва назария.

Ҳисобланиши мумкин бўлган кимёвий катталиклар. Эмпирик (тажриба) усуллари, бирикмаларнинг боғ узунликлари, валент ва торсион бурчаклари, нонланш потенциаллари ва электронга мойиллик катталиклари. Назарий ҳисоблаш усуллари ёрдамида бир нечта эмпирик усулларда аниқланадиган катталиклар. Бирикмаларнинг ҳисобланган катталиклари тажрибада олинган катталиклари билан таққослаш.

2-мавзу. Атом ва молекулаларнинг фазода ифодаланиш. Потенциал энергетик сатх.

Ҳисоблаш усулларида дастлабки геометрияларни тўғри киритиш. Дастлабки геометрияларни тайёрлаш вазифасини ўтайдиган дастурлар. Бирикма геометрияларини уч ўлчамли кўринишда ифодаланиш, элементларнинг валентликларини инобатга олган ҳолда керакли водород атоми ва бошқа функционал гуруҳлар қўшиш. Айрим ҳисоблаш усуллари махсус тартибда, яъни боғ узунликлари, валент ва торсион боғларни кўрсатган ҳолда тузиладиган инпут файлларни (z-матрицаларни) талаб қилади.

3-мавзу. Ҳисоблашларнинг эмпирик усуллари

Молекуляр динамика. Молекулаларнинг ҳаракатини микродаражада моделлаш, физикавий макрохарактеристикаларини аниқлаш, Молекулаларнинг маълум вақт давомида фазодаги ҳаракати ва траекториясини кайд қилиш. Заррачаларнинг ҳаракати, Ньютон қонуни. Тайлор каторига ёйиш. Эмпирик усулларнинг кимёвий муаммолар ечимида қўлланилиши

4-мавзу. MO АОЧК (MO ЛКАО). Валент электронлар ёндошуви.

Ярим эмпирик усуллар

Молекуляр орбиталлар. Атом орбиталларининг чизикли комбинациялари. MO усулида электронлар.Сигма боғнинг қуйи банд MO-лари. Юқори банд MO-энергияси бирикмаларнинг ионланиш потенциалини ифодалайди. Ярим эмпирик усуллар. Валент ёндошуви. Бирикмаларнинг MO боғларини куриш.

5-мавзу. NDO ва NDDO усуллари.

ZDO-(zero differential overlap). Нолинчи даражадаги дифференциал қопланиш. NDO (neglect differential overlap) ёндошуви. (CNDO, INDO, MNDO) ҳисоблашлар. NDDO (neglect diatomic differential overlap) ёндошуви. Юқори даражада параметрланган MNDO, AM1, PM3 усуллари. Бирикмаларнинг геометрик кўрсаткичлари, физик-кимёвий катталиклари ва реакция қобилиятлари.

6-мавзу. Ярим эмпирик усулларнинг кимёвий муаммолар ечимида қўлланилиши

Квант кимёси – молекуляр системалар қарашларида асосий постулат ва принциплар. Молекуляр орбиталларнинг сифатий назарияси. Квант кимёси услублари билан молекуляр структураларни кўрсатиш, Z-матрицаларни аниқлаш, молекуляр системаларнинг электрон, спектрал ва бошқа тавсифларини график ёрдамида ифодаланиш. Кимёвий масалаларнинг ярим-

эмпирик усуллари ёрдамида ечилши. Компьютер учун масалалар тузиш ва уларнинг ечимлари баённомалари билан ишлаш.

7-мавзу. Нозмпирик усуллар.

Нозмпирик ҳисоб усулларининг амалиётда қўлланилиши. Хатри-Fock-Rotap (XFR) тенгламаси. *Ab initio* усули. *Skytel* детерминантлари. *Wolp* – Оррегенуег яқинлашуви. Атомларнинг сферик симметрияси ва молекулаларнинг фазода жойлашиши.

8-мавзу. Минимал, кичик, ўрта ва катта базис тўпланлари.

Базис тўпланларининг МО-лар қурилишига таъсири. Нозмпирик ҳисоблаш усуллари. МО-лар қуришда атомларнинг ички электронлари. Минимал, кичик, ўрта ва катта базис тўпланлари тартиби. Банд МО-лар сони ва МО-лар сонининг ўзгариши. Электрон корреляциялар.

9-мавзу. Нозмпирик усулларининг қимёвий муаммолар ечимида қўлланилиши

Ҳисоблашнинг эмпирик усуллари. Эмпирик усуллар билан ишлашнинг асосий қондалари. Молекулар тузилишини ҳисоблаш учун вазифани ва ҳисоблаш баённомаларни расмийлаштириш. Молекулар механика усули билан намунавий қимёвий масалалар ечиш: молекуланинг реакция траекторияси, энергиялари, зарядлари ва бошқа таъсирларини ҳисоблаш. Эмпирик усулларнинг қимёвий муаммолар ечимида қўлланилиши.

10-мавзу. Зичлик функционали назариясига асосланган гибрид усуллар.

Ҳисоблашларда эритувчи таъсирни инобатта олиш усуллари. Атом зарядларини ҳисоблаш усуллари. Бирикмаларнинг реакция қобилиятларини баҳолаш.

11-мавзу. Структура асосида турли хил параметрларни ҳисоблаш.

Термодинамик параметрларни ҳисоблаш усуллари. Структура асосида турли хил параметрларни ҳисобловчи мажмуалар. Бирикмаларнинг тажрибада олинган кўрсаткичларини ифодаловчи математик моделлар. ChemOffice дастурида бирикмаларнинг ЯМР спектрларини олиш.

12-мавзу. Замоновий интегрланган ҳисоблаш дастурлари пакети.

HyperChem, ORCA, GAMESS, FIREFLY, Gaussian, ChemOffice, ACDLabs, Portable MestReNova, FID (free induced decay) – интерферограммани спектр кўралишига келтириш ва спектр устида амаллар бажариш.

13-мавзу. Масала ечишнинг тегишли услубни танлаб олиш. Масала ва унинг параметрларини тузишнинг асосий қондалари.

Таутомерлар орасида юзага келадиган энергетик тўсиқлар, заряд тақсимотлари, нуклеофил марказлар, электрофил марказлар, орбитал назорат билан борадиган реакциялар, заряд назорат билан борадиган реакциялар, фаол водород атомларини аниқлаш, азот атомларининг протонга мойиллигини аниқлаш.

14-мавзу. Ҳисоб услубларининг амалиётда қўлланилиши. Кимёвий бирикмаларининг электрон тузилиши ва хоссалари.

MM усули дастурлари C атомлари ва бошқа атомларни гибридлашиш ҳолати ва структурасининг ўзига хос хусусиятларини тўлиқ ўрганиш, MM2 (ChemOffice); MMX (PCModel); MM+, Amber, OPLS, BIO+ (HyperChem); Chemical, MMFF94, MMFF94s, UFF (Avogadro); UFF, Dreiding, Amber (Gaussian).UFF ва MMFF.

15-мавзу. Янги доривор моддаларни яратишнинг назарий усуллари.

InSilico ва Драг дизайн тушунчалари. QSAR соҳаси. Дескрипторлар. Build QSAR дастури. Молекуляр докнинг ва виртуал скрининг. Натижаларни қайта ишлаш. Назарий ва экспериментал характеристикаларнинг бир-бирига боғлиқлиги.

IV. Амалий маъмулотлари бўйича кўрсатма ва тавсиялар
Амалий машғулотлар учун тавсия этилаётган мавзулар:

Атом ва молекулаларни фазода ифодалаш

1. Шахсий компьютерлар билан ишлаш.
2. Стандарт ёрдамчи редактор ва график дастурлари билан ишлаш (ChemWin).
3. AIChemу. Куч майдонлари муҳитида компьютер моделлаштириш дастурлари билан ишлаш.

Ҳисоблашларнинг эмпирик усуллари

4. Молекуляр механика MMPE2 дастури билан ишлаш.
5. PCM дастури муҳитида молекуляр механика услубида намунавий масалалар билан ишлаш.
6. Молекуляр тузилиш назарияси билан классик ва квант-кимёвий йўналишларини таққослаш.

МО АОЧК (МО ЛКАО). Валент электронлар ёрдоғи.

Ярим эмпирик усуллар

7. Молекуляр Орбиталлар назарияси ва унинг кимёвий бирикмалар хусусиятларини баён қилиш учун ишлатилиши.

Ярим эмпирик усулларнинг кимёвий муаммолар ечимида қўлланилиши

8. Ярим-эмпирик услублари билан кимёвий масала ечимини топиш.

Нозмирик усуллар

9.Ab initio услуби учун компьютер топшириғени тузиш.

Замонавий интегрirlанган хисоблаш дастурлари пакети

10.HyperChem ва ChemLab дастурлар нисолида замонавий жамланган хисоб дастурлари билан ишлаш.

11.Кимёвий бирикмаларнинг хоссалари ва электрон тузилиши, намунавий кимёвий масалани ечиш конуниятлари.

Янги дорнвор модалларни яратишнинг назарий усуллари

12.Табий бирикмаларнинг QSAR тахлили.

13.DRAGON дастурини ишлатиб дескрипторлар таидаш ва структура-фаолликни математик моделни тузиш.

14.ArgusLab дастури. Оксил-лиганд комплексларини тузиш, ўрганш ва уларнинг боғланиши хақида ахборот олиш.

Амалий машгулотларга назарий тайёрланиш, ишни бажариш усули билан танишиш, амалий ишни мустанкил бажариш, олинган натижаларни хисоблаш ва тегишли кулосалар чиқариш, хисобот тайёрлаш ва уни химов килиш. Олинган натижаларни кайта ишлаш, модаллар ва маълумотномаларда кеелтирилган физик катталардан фойдалана олиш, графиклар ва жалваллар тузиш, талабаларда янги педагогик технологияларга кўникмалар хосил килиш.

VI. Мустанкил таълим ва мустанкил ишлар

Мустанкил таълим учун тавсия этиладиган мавзулар:

1.Эмпирик услублар билан ишлашнинг асосий кондалари.

2.Замонавий интегрirlанган хисоблаш дастурлари пакети.

3.Кимёвий бирикмаларнинг электрон тузилиши ва хоссалари

4.Z-матрицаларни аниқлаш, молекуляр системаларнинг электрон,спектрал ва бошка тавсифларини график ёрдамида ифодалаш.

Мустанкил ўзлаштирилладиган мавзулар бўйича талабалар томонидан рефератлар тайёрлаш ва уни тақдимот килиш тавсия этилади.

Ишак. Мустанкил таълим учун тавсия этилган мавзуларнинг соатлари лаборатория ва семинар машгулотларига тайёрларлик кўрши соатларидан ортиб қолган соатлар дажасидан келиб чиққан ҳолда белгиланады.

VII. Асосий ва қўшимча адабиётлар ҳамда ахборот манбаалари
Асосий адабиётлар

1. J.C.Cramer. Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley, 2004.
2. A.G. Eshimbetov, A.X. Xaitboev, S.A. Maulyanov, H.S. Toshov. Kompyuter kimyosi. O'zMU. 2015, 112 b.
3. Т.Кларк, Компьютерная химия, М., Мир, 1990.

Қўшимча адабиётлар

4. Ш.М. Мирзиёев. Эркин ва фаровон демократик Ўзбекистон давлатини биргаликда барпо этишимиз. Тошкент, "Ўзбекистон" НМНУ, 2017. -29 б.
5. Ш.М. Мирзиёев. Қонун устуворлиги ва инсон манфаатларини таъминлаш юрт тараққиёти ва халқ фаровонлигининг гарови. "Ўзбекистон" НМНУ, 2017. -47 б.
6. Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича ҳаракатлар стратегияси тўғрисида"ги ПФ-4947-сонли Фармони. Ўзбекистон Республикаси қонун ҳужжатлари тўплами, 2017й., 6-сон, 70-модда.
7. Ш.М. Мирзиёев. Танқидий таҳлил, қатъий тартиб-интизом ва шахсий жавобгарлик ҳар бир раҳбар фаолиятининг қундалик қондириши бўлиши керак. Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамасининг 2016 йил якуни ва 2017 йил натижаларига бағишланган мажлисидаги Ўзбекистон Республикаси президентининг нутқи. // Халқ сўзи газетаси, 2017 йил 16 январь, №11.
8. ЎзР ПҚ-2909. Олий таълим тизимини янада ривожлантириш чораталбирлари тўғрисида. Тошкент ш., 2017 й. 20 апрель.
9. М.А. Турабекова, М.Г.Левкович, Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способности. Т., Университет, 2008, 136 с.
- 10.«Теория и практика компьютерного моделирования нанобъектов» (УДК 541.1:681.332 (07) Т33), Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В., Красноярский государственный технический университет, 2002 г.
- 11.В.Ф.Травень, Электронная структура и свойства органических молекул. М., Химия, 1989.
- 12.Дж.Теддер, Э.Нехвтал, Орбитальная теория в контурных диаграммах. М.,Мир, 1988.
- 13.В.И.Минкин, Б.Я.Симкин, Р.М.Миняев, Теория строения молекул, М., Высшая школа, 1979.
- 14.Молекулярная механика MM2. Инструкция по эксплуатации (1977, 1982 гг.)

Интернет ва ЗнѐНет сайтлари

15. <http://www.gov.uz> - Ўзбекистон Республикаси ҳукумат портали
16. <http://www.lex.uz> - Ўзбекистон Республикаси Қонун ҳужжатлари маълумотлари миллий базаси
17. <http://www.netsci.org/Science/Compchem/> Молекуллар моделлаштириш ва QSAR таҳлили назарияси бўйича илмий мақолалар тўплами
18. http://www.talate.mi.it/dragon_exp.htm - DRAGON дастури ва ундаги дескрипторлар ҳақидаги маълумотлар
19. www.planaria-software.com - ArgusLab дастури ва унинг ишлатилиши ҳақидаги маълумотлар ва мақолалар

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIV VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI
NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
KIMYO KAFEDRASI**



**KIMYOVIY KOMPYUTER MODELLASH
fanining**

ISHCHI O'QUV DASTUR

2019/2020 o'quv yili kunduzgi ta'lim shakli, 4-bosqich uchun

Bilim sohasi:	100000 - Gumanitar soha
Ta'lim sohasi:	140000 - Tabiiy fanlar
Bakalavriat ta'lim yo'nalishi:	5140500 - Kimyo (kunduzgi)

NAMANGAN – 2019

Fanning ishchi o'quv dasturi O'zbekiston Respublikasi Oliy va o'rta maxsus ta'lim vazirining 2019 yil -avgustdagi -sonli buyrug'i bilan tasdiqlangan namunaviy fan dasturi asosida tuzilgan.

Tuzuvchi:



M.Muradov

Fanning ishchi o'quv dasturi Kimyo kafedrasining 2019 yil 26- avgustdagi 1-sonli yig'ilishida muhokamadan o'tgan va fakultet Kengashida ko'rib chiqish uchun tavsiya etilgan.

Kafedra mudiri:



D.S.Xolmatov

Ishchi o'quv dastur Tabiiy fanlar fakultetining 2019 yil 26-avgustdagi 1-sonli Kengashida ko'rib chiqilgan va foydalanishga tavsiya etilgan.

Fakultet Kengashi raisi:



A.A.Nazarov

Kelishildi:

O'quv- uslubiy boshqarma boshlig'i v.b.:



Z.Mo'minov

"Kimyoda kompyuter modellashtirish" fanining ishchi o`quv dasturi tuzilmasi va mazmuni.

Kirish

“Kimyoda kompyuter modellashtirish” fani kompyuter kimyo yoki molekulyar modellashtirish – kompyuter vositalari yordamida kimyoviy birikmalarning xususiyatlari va tuzilishini modellashtirishi, turli xil birikmalarni ularning xususiyatlariga qarab keng skrining qilish, ularning sintez yo`llarini, ba'zi kimyoviy reaksiyalar va jarayonlarni matematik modellashtirish, ularning tuzilishi va biologik faolliklarini bashorat qilish imkonini beradi.

O`quv fanining maqsadi va vazifalari

Fanning maqsadi - talabalarda kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarini o`rganishni matematik nuqtai nazardan tasavvur hosil qilish va berilgan masalalarni kompyuter sistemasi yordamida echim usullarini o`zlashtirishdan iborat.

Fanning vazifasi - kimyoviy birikmalarning tuzilishi va xossalarini matematik modellashtirish usullari matematik nisbatlar (modellar) ni kompyuter vositasi yordamida analiz (taxlil) qilishga asoslangan.

Fan bo`yicha bilim, ko`nikma va malakaga qo`yiladigan talablar

“Kimyoda kompyuter modellashtirish” o`quv fanini o`zlashtirish jarayonida amalga oshiriladigan masalalar doirasida bakalavr:

- zamonaviy kompyuter sistemasi imkoniyatlaridan xabardor bo`lish va unda ishlashni bilish;

- kompyuter sistemasida qabul qilingan formatda aniq bir kimyoviy masalani qo`yishni bilish;

- matematik modellashtirish (o`ta muxim bilim) va qisob-kitob natijalarini tushunish uchun nazariy kimining asosiy qoidalarini bilish va tushuntirish ko`nikmalariga ega bo`lishi kerak;

- zamonaviy dasturlar paketi yordamida molekullarning miqdoriy ko`rsatkichlarini hisoblash malakalariga ega bo`lishi kerak.

Fanning o`quv rejadagi boshqa fanlar bilan o`zaro bog`liqligi va uslubiy jihatdan uzviy ketma-ketligi

Dasturni amalga oshirish o`quv rejasida nazarda tutilgan matematik va tabiiy, umumkasbiy va ixtisoslik fanlaridan etarli bilim va ko`nikmalarga ega bo`lishlik talab etiladi.

Fanning ishlab chiqarishdagi o`rni

“Kimyoda kompyuter modellashtirish” umumiy kursi kimyoviy birikmalarning

xususiyatlari va tuzilishini modellashtirishi, turli xil birikmalarni ularning xususiyatlariga qarab keng skrining qilish, kimyoviy reaksiyalar va jarayonlarni matematik modellashtirish, ularning tuzilishi va biologik faolliklarini bashorat qilish imkonini beradi, reaksiya qobiliyati, sintez jarayonlari oldindan aytib beradi.

ASOSIY QISM

Umumiy va o'quv ishlari turlari bo'yicha qajmi

Fanga umumiy 140 soat ajratilgan bo'lib, shundan auditoriya mashg'ulotlari 84 soat bo'lib, ikki semester davomida haftasiga 4 soatdan o'tiladi.

Semestr bo'yicha mashg'ulotlarga ajratilgan soatlar taqsimoti

Semestr	Yuklam a	Auditoriya mashg'ulotlari turi bo'yicha o'quv yuklamasi taqsimoti (soat)			Mustaqil ish
		Jami	Ma'ruza	Amaliy mashg'ulot	
7		42	14	28	28
8		42	16	26	28
Jami	140	84	30	54	56

Ma'ruza mashg'ulotlari mazmuni va unga ajratilgan soatlar

№	Mavzular	Qisqacha mazmuni	Soati
1	Empirika va nazariya	Hisoblanishi mumkin bo'lgan kimyoviy kattaliklar. Empirik usullari, birikmalarning bog' uzunliklari, valent va torsion burchaklari, ionlanish potentsiallari va elektronga moyillik kattaliklari	2
2	Atom va molekullarni fazoda ifodalash. Potensial energetik satx.	Hisoblash usullarida dastlabki geometriyalarni to'g'ri kiritish. Dastlabki geometriyalarni tayyorlash vazifasini o'taydigan dasturlar.	2
3	Hisoblashlarning empirik usullari	Molekulyar dinamika. Molekullarning harakatini mikrodarajada modellashtirish, fizikaviy makroxarakteristikalarini aniqlash.	2
4	MO AOC _h K (MO JIKAO)	Molekulyar orbitallar. Atom	2

	Valent elektronlar yondoshuvi. Yarim empirik usullar	orbitallarining chiziqli kombinatsiyalari. MO usulida elektronlar. Sigma bog'ning quyi band MO-lari	
5	NDO va NDDO usullari	ZDO-(zero differensial overlap). Nolinchi darajadagi differensial qoplanish. NDO (neglect differensial overlap) yondoshuvi	2
6	Yarim empirik usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi	Kvant kimyosi - molekulyar sistemalar qarashlarida asosiy postulat va prinsiplar. Molekulyar orbitallarining sifatli nazariyasi. Kvant kimyosi usublari bilan molekulyar strukturalarni ko'rsatish.	2
7	Noempirik usullar	Noempirik hisob usulbarining amaliyotda qo'llanilishi. Xarti-Fok-Rutan (XFR) tenglamasi. Ab initio usuli	2
VII semester jami			14
8	Minimal, kichik, o'rta va katta basis to'plamlari	Bazis to'plamlarining MO-lar qurilishiga ta'siri. Noempirik hisoblash usullari	2
9	Noempirik usullarning kimyoviy muammolar yechimida qo'llanilishi	Hisoblashning empiric usullari. Empiric usulbar bilan ishlashning sosiy qoidalari. Molekulyar tuzilishni hisoblash uchun vazifani va hisoblash bayonnomalarini rasmiylashtirish.	2
10	Zichlik funksionali nazariyasiga asoslangan gibrid usullar	Hisoblashlarda erituvchi ta'sirini inobatga olish usullari. Atom zaryadlarini hisoblash usullari. Birikmalarni reaksion qobilyatlarini baholash	2
11	Struktura asosida turli xil parametrlarni hisoblash	Termodinamik parametrlarni hisoblash usullari. Struktura asosida turli xil parametrlarni hisoblovchi majmualar	2
12	Zamonaviy integrangan hisoblash dasturlari paketi	HyperChem ORCA, GAMEES, FIREFLY, Gaussian, ChemOffice,	2

		ACDLabs, Portable MestReNova, FID (Free induced decay)	
13	Masala yechishning tegishli uslubini tanlab olish. Masala va unung parametrlarini tuzishning asosiy qoidalari	Tautomerlar orasida yuzaga keladigan energetik to'siqlar, zaryad taqsimotlari, nukleofil markazlar, orbital nazorat bilan boradigan reaksiyalar	2
14	Hisob uslublarining amaliyotda qo'llanilishi. Kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va xossalari	MM usuli dasturlari C atomlari va boshqa atomlarni gibridlanish xolati va strukturasi o'ziga xos xususiyatlarini to'liq o'rganish,	2
15	Yangi dorivor moddalarni yaratishning nazariy usullari	InSiliko va Drag dizayn tushunchalari. QSAR sohasi. Deskriptorlar. Buld QSAR dasturi. Molekulyar doking va virtual skrining	2
VIII semester jami			16
Hammasi:			30

Amaliy mashg'ulotlar taqsimoti

№	Mashg'ulotlar mazmuni	Soat
1	Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash.	4
2	Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin).	4
3	AlChem. Kuch maydonlari muhitida kompyuter modellashtirish dasturlari bilan ishlash.	4
4	Molekulyar mexanika MMP2 dasturi bilan ishlash	4
5	PCM dasturi muxitida molekulyar mexanika uslubida namunaviy masalalar bilan ishlash.	4
6	Molekulyar tuzilish nazariyasi bilan klassik va kvant-kimyoviy yo'nalishlarni taqqoslash	4
7	Molekulyar Orbitallar nazariyasi va uning kimyoviy birikmalar xususiyatlarini bayon qilish uchun ishlatilishi.	4
Jami bahorgi semestr		28
8	Yarim empirik uslublari bilan kimyoviy masala yechimini topish	2
9	Ab initio uslubi uchun kompyuter topshirig'ini tuzish	4
10	HyperChem va ChemLab dasturlar misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash.	4

11	Kimyoviy birikmalarning xossalari va elektron tuzilishi, namunaviy kimyoviy masalani yechish qonuniyatlari.	4
12	Tabiiy birikmalarning QSAR taxlili.	4
13	DRAGON dasturini ishlatib deskriptorlar tanlash va struktura-faollikni matematik modelini tuzish.	4
14	ArgusLab dasturi oqsil-ligand tuzilishi va ularning bog'la-nishi xaqida axborot olish.	4
Jami bahorgi semester		26
Hammasi		54

Mustaqil ish mavzulari va shakllari

№	Mustaqil ta'lim mavzulari	Berilgan topshiriqlar	Soati
1.	Empirik uslublar bilan ishlashning asosiy qoidalari.	Referat yozish. Dastur asosida berilgan moddaning ko'rsatkichlarini hisoblash.	8
2.	Zamonaviy integrirlangan hisoblash dasturlari paketi.	Referat yozish. Dastur asosida berilgan moddaning ko'rsatkichlarini hisoblash.	8
3.	Z-matritsalarini aniqlash, molekulyar sistemalarning elektron, spektral va boshqa tavsiflarini grafik yordamida ifodalash.	Dastur asosida berilgan moddaning ko'rsatkichlarini hisoblash. Internet ma'lumotlaridan foydalanish	8
4.	Kimyoviy birikmalarning elektron tuzilishi va xossalari	Referat yozish va taqdimot tayyorlash	8
5.	ChemOffice dasturlari bilan ishlash, organik moddalar parametrlarini o'rganish	Dastur bilan ishlashni o'rganish va o'rganilganlar asosida berilgan moddaning ko'rsatkichlarini hisoblash.	8
6.	Ab initio uslubi. GAUSSIAN dasturlari bilan ishlash yullari.	Dastur asosida berilgan moddaning ko'rsatkichlarini hisoblash.	8
7.	Hisob uslublarning amaliyotda qo'llanishi. Geterotsiklik birikmalar elektron tuzilishining o'ziga xosligi.	Referat yozish va taqdimot tayyorlash Test savollarini tayyovlash	8
JAMI			56

NAZORAT SAVOLNOMALARI

1. Kimyoviy tadqiqotlarda komp'yuterlarni ishlatishning asosiy yo'nalishlari.
2. Ma'lumot-axborot tizimlari bilan ishlashning asosiy usullari
3. Komp'yuter sintezining texnologiyasi va usullari.
4. Komp'yuter tizimidagi ish joyi: kompyuter tizimlarining apparat va dasturiy ta'minoti.
5. Kimyoviy matnlar muxarrirlari bilan ishlash usullari.
6. Kuch maydonlarining potentsial funktsiyalari turlari.
7. Molekulyar mexnika usullarida parametrlanish qoidalari.
8. Kimyoviy tuzilish muxarrirlari bilan ishlash qoidalari.
9. Molekula geometriyasini hisoblash uchun vazifani rasmiylashtirish va uning tuzilishi.
10. MM2 usullarida molekula geometriyasini tasvirlash qoidalari.
11. Dastur ishini boshqarish uchun asosiy ma'lumotlar .
12. Molekula geometriyasini optimallashtirish va dastur ishini nazorat qilish.
13. MMR2 dastur qaydnomalari bilan ishlash qoidalari va strukturasi.
14. Molekulyar mexanika usullari yordamida hisoblanadigan molekularning fizik-kimyoviy parametrlari.
15. Kvant mexanika postulatlar.
16. Vodorod simon atomlar uchun kvant sonlarni aniqlash.
17. Molekula tuzilishini hisoblashning xususiyati, Born-Oppengeymer yaqinlashishi.
18. Rutaana tenglamalari va ular yechimi – kanonik molekulyar orbitallar - MO.
19. Yarimempirik usullar va ularning xususiyatlari, kengaytirilgan Xyukkel usuli (RMX), CNDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3.
20. Z-matritsalar yordamida molekula geometriyasini tasvirlash.
21. Kimyoviy traektoriyalarni hisoblash.
22. CHeklangan va cheklanmagan Xartri-Fok usullari.
23. onfiguratsion ta'sirlashishni yaqinlashtirishda hisoblash usullari.
24. Ab initio usullaridagi asosiy funktsiyalar tuplami.
25. Dorivor preparatlarni ratsional qidirishning va yaratishning asosiy fazalari. Lider-birikma va uni qidirish strategiyalari.
26. Klassik QSAR. Deskriptorlar to'g'risida umumiy tushuncha: topologik, kvant-kimyoviy, fizik-kimyoviy
27. "Tuzilish-faollik" modellari yordamida optimal tuzilishlari tanlash.

Asosiy darsliklar va o`quv qo`llanmalar ro`yhati.

Asosiy adabiyotlar

1. J.C.Cramer, Essentials of computational chemistry. Theories and Models. Second Edition. John Wiley.2004.
2. A.G.Eshimbetov, A.X.Xayitboyev, S.A.Maulyanov, H.S.Toshev. Kompyuter kimyosi. O`zMU. 2015. 112 b.
3. Кларк Т. Комп`ютерная химия, М., Мир, 1990.

Qo`shimcha adabiyotlar

4. Sh.Mirziyoyev. Erkin va farovon demokratik O`zbekiston davlatini birgalikda barpo etamiz. Toshkent. "O`zbekiston" NMIU. 2017.-29b.
5. Sh.Mirziyoyev. Qonun ustuvorligi va inson manfaatlarini ta`minlash yurt taraqqiyoti va xalq farovonligining garovi. Toshkent. "O`zbekiston" NMIU. 2017.-47b.
6. "O`zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo`yicha xarakatlar strategiyasi to`g`risida"gi PF-4947-sonli Farmoni. O`zbekiston Respublikasi qonun xujjatlari to`plami. 2017y., 6-son. 70-modda.
7. Sh.Mirziyoyev. Tanqidiy tahlil, qat`iy tartib intizom va shaxsiy javobgarlik har bir rahbar faoliyatining kundalik qoidasi bo`lishi kerak. O`zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasining 2016 yil yakunlari va 2017 yil istiqbollari bag`ishlangan majlisidagi O`zbekiston Respublikasi prezidentining nutqi.//Xalq so`zi gazetasi. 2017 yil 16 yanvar №11.
8. O`zR PQ-2909. Oliy ta`lim tizimini yanada rivojlantirish chora tadbirlari to`g`risida. Toshkent sh. 2017y. 20 aprel.
9. М.А.Тўрабекова, М.Г.Левкович «Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способностью Т., Университет. 2008. 136с.
10. «Теория и практика комп`ютерного моделирования нанообъектов» (УДК 541.1:681.332 (07) Т33), Романова Т.А., Краснов П.О., Качин С.В., Аврамов П.В., Красноярский государственный технический университет, 2002 г.
11. Травен` В.Ф. Электронная структура и свойства органических молекул, М., Химия, 1989.
12. Теддер Дж., Нехватал Э. Орбитал`ная теория в контурных диаграммах, М., Мир, 1988.
13. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, М., Высшая школа, 1979.

14. Молекулярная механика ММ2. Инструкция по эксплуатации (1977, 1982 гг.)

Internet va Ziyonet saytlari

15. <http://www.gov.uz>. - O'zbekiston Respublikasi hukumat portali

16. <http://www.lex.uz>. - O'zbekiston Respublikasi qonun hujjatlari ma'lumotlari milliy bazasi

17. <http://www.netsci.org/Science/Compchem/>; Молекуляр моделлаштириш ва QSAR тахлили назарияси бўйича илмий мақолалар тўплами:

18. http://www.taletе.mi.it/dragon_exp.htm DRAGON дастури ва ундаги дескрипторлар ҳақидаги маълумотлар:

19. www.planaria-software.com ArgusLab дастури ва унинг ишлатилиши ҳақидаги маълумотлар ва мақолалар:

Talabalarni baholashning reyting ishlanmasi

Talabalarning o'zlashtirishi 100 ballik tizimda amalgam oshiriladi. Talabanning o'zlashtirishi JN-40 ball, ON-30 ball va YaN-30 ball bilan belgilanadi. Talaba mustaqil ishi (TMI) uchun 10 ball ajratilgan.

Fan reyting ishlanmasi va baholash mezonlari

№	Nazorat turlari	Soni	Ball	Jami ball
1	I. Joriy nazorat (JN)			
	1.1. Amaliy mashg'ulot	15	2	30
	1.2. TMI (ishchi dasturda keltirilgan mustaqil mavzulari bo'yicha) – referat, konspekt yozish yoki plakat(maket) tayyorlash.	1	10	10
2	II. Oraliq nazorat			
	2.1. Test (30 ta savol)	1	30	30
3	III. Yakuniy nazorat			
	3.1. Yozma ish	1	30	30
Jami				100

Baholash mezoni

JN - Topshiriqlarini to'la mustaqil bajargan va amalda qo'llay oladigan talabaga har bir amaliy mashg'ulot uchun 1,4 – 2,0 ball, to'la bajarmagan talabaga

bajarilgan ish hajmiga va sifatiga qarab 1,1-1,4 ballgacha beriladi.

TMI- Amaliy mashg'ulot bo'yicha berilgan talabalar mustaqil ishlarining mavzulari bo'yicha referat, konspekt, plakat (maket) tayyorlanadi:

- mavzu to'liq ochilgan to'g'ri xulosa chiqarilgan va ijodiy fikrlari bo'lsa - 8,6 - 10 ball;

- mavzu mohiyati ochilgan, faqat xulosasi bor – 7,6-8,5 ball;

- mavzu mohiyati yoritilgan, ammo arziyas kamchiligi bo'lsa – 6,6 – 7,5 ball beriladi;

- mavzu mohiyati yoritilgan, ammo ayrim kamchiliklari bor bo'lsa- 5,5-6,5 ball beriladi.

ON - Oraliq nazorat test usulida 1 marta o'tkaziladi.

Oraliq nazorat bo'yicha berilgan talabalar mustaqil ishlarining bajarilishi (ma'ruzada o'tilmagan mavzulardan mustaqil o'zlashtirish uchun alohida mavzular beriladi va talabalar ushbu mavzular bo'yicha alohida daftarga 36 ta test-masala echib keladi. Testlarni to'la echgan va amalda qo'llay oladigan talabaga 4,5 – 5,0 ball, to'la echmagan talabaga echgan soniga, hajmiga va sifatiga qarab 2,8-4,5 ballgacha beriladi.

YaN - Yakuniy nazorat yozma ish usulida o'tkaziladi va 30 ballgacha baxolanadi.

Yakuniy nazoratda talaba 3 ta savolga yozma (Tayanch iboralarga asoslangan) javob berishi lozim. Har bir yozma savolga 10 ball ajratiladi.

- agar savol mohiyati to'la ochilgan bo'lib, mavzu bo'yicha talabaning tanqidiy nuqtai nazari

 - bayon qilingan bo'lsa – 9,0 – 10 ball;

- savol mohiyati to'la ochilgan, asosiy faktlar to'g'ri bayon qilgan bo'lsa – 8,2 – 8,8 ball;

- savolga to'g'ri javob berilgan, lekin ayrim kamchiliklari bor bo'lsa – 7,0 – 8,0 ball;

- berilgan savolda javoblar umumiy va kamchiliklar ko'proq bo'lsa – 5,6 - 6,0 ball beriladi.

UMUMIY NAZORAT SAVOLLARI

1. Kompyuterning dasutriy ta`minoti asosiy qismi nima?
2. SHaxsiy kompyuterlarning dasturiy ta`minoti tug`risida ma`lumot bering.
3. Tashqi qurilmalarni o`rnatish qanday amalga oshiriladi.
4. Modem vazifasi qanday.
5. Moddiy ishlab chikarish texnologiyasi nimalardan iborat?
6. Axborot nima?
7. Axborot texnologiyasi nima?
8. Axboriy revolyutsiyaning k iymati nimalardan iborat?
9. Jamiyat informatizatsiyalashtiriluvi deb nimaga aytiladi?
10. Informatizatsiyalashgan jamiyat nima?
11. Insonning axboriy madaniyatixakida gapirib uting?
12. Jamiyatda informatika kanday urin tutadi?
13. Informatikaning xozirgi boskichlaridagi vazifalari?
14. Axborot nima?,
15. Axboriy jarayonlar nima?,
16. Axborot texnologiyasini belgilovchi ichki omillar nima?,
17. Kompyuterlarni rivojlanish bosqichlari nima?
18. Kimyoda kompyuterlarni qo`lanilish jihatlari nima?.
19. Kompyuter tizimlarini asosiy ko`rsatkichlari va ish joyni tashkil qilish nima?.
20. Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellashtirish nima?.
21. Molekulyar mexanika uslublari nima?.
22. Zo`riqqan tizimlar nima?.
23. Molekulyar Mexanika (MMP2) nima?.
24. Elinjer Mexanikasi nima?.
25. Empirik uslublarni bilan ishlashning asosiy qoidalari nima?.
26. Molekulyar tuzilishni hisoblash uchun topshiriqning va xisob qaydnomasining tuzilishlari nima?.
27. Yarim empirik uslub nima?
28. Kvant kimyosi – molekulyar sistemalar taxlilida asosiy postulatlar va printsiplari nima?.
29. Kvant-kimyo uslublari yordamida molekulyar strukturalarni ifodalash nima?.
30. Z-matritsani aniqlash nima?.
31. Molekulalar sistemalarini elektron, spektral va boshqa ko`rsatkichlarini grafik yordamida ifodalash nima?.

32. Molekulyar orbitallar usuli nima?
33. Kimyoviy masallarning yarim-empirik uslublari yordamida yechilishi nima?. Kompyuter uchun topshiriklarni tuzish va ularning qaydnomalari bilan ishlash nima?.
34. Ab initio uslubi nima?.
35. Bazis funktsiyalarning tanlash qoidalari nima?.
36. Masalani yechish uchun kerak bulgan uslubni tanlab olish nima?.
37. QSAR va QSPR taxlil nima?.
38. Doking nima?.
39. Virtual skrining tushunchasi nima?.
40. Zamonaviy integrallangan paketlar nima?.
41. ChemWin dasturi; moddalar tuzish, tavsifini aniqlash. nima?.
42. Kimyodan electron o`quv materiallar, ma`lumotlar bazasi nima?.
43. Interaktivlik nima?.

Mustakil ta'lim uchun savollar

1. Kuch maydonlari ishlatiladigan uslubni ko'rsating
2. Berilgan formula orqali ifodalanadigan energiya turini kursating
3. Berilgan formula orqali ifodalanadigan energiya turini kursating.
5. Berilgan formula orkali ifodalanadigan energiya turini kursating
6. Berilgan formula orkali ifodalanadigan energiya turini kursating.
7. Berilgan formula orqali ifodalanadigan energiya turini kursating:
8. MM uslubi orqali xisoblanmaydigan parametrlar turini ko'rsating
9. MM uslubida xisoblanmaydigan parametrlarni ko'rsating
10. MM uslubi orqali xisoblanmaydigan parametrlar turini ko'rsating ?
11. Eng tezkor uslubni ko'rsating:
12. Molekulyar mexanikadagi vodorod atomi turini ko'rsating
13. Berilgan u+slublardan molekulyar mexanikaga tegishligini ko'rsating
14. Berilgan uslublardan ab initio uslubiga tegishligini ko'rsating
15. Berilgan uslublardan yarim-imperik uslubiga tegishligini ko'rsating
16. Molekulyar mexanikadagi parametrlanish bu:
17. Z-matritsada ishlatiladigan parametrlarni ko'rsating:
18. N atomlardan iborat bo'lgan sistemani Z-matritsasiga kiritiladigan geometrik parametrlar sonini ko'rsating:
19. N atomlardan iborat bulgan sistemani Dekart koordinatalari ichra kiritiladigan geometrik parametrlar sonini ko'rsating:
20. Yarim-empirik uslublarni empirik uslublariga nisbatan afzalligini ko'rsating:
21. MORAS dasturida pi-sistemani xisobining kalit so'zi:
22. MORAS dasturida lokalizatsion orbitallarni xisobining kalit so'zi:

23. MORAS dasturida kuchaytirilgan anikligi xisobining kalit so'zi:
24. MORAS dasturida molekula geometriyasi optimizatsiyalashsiz xisobining kalit so'zi:
25. MORAS dasturida molekular orbitallar xisobining kalit so'zi:
26. MORAS dasturida simmetriya xisobining kalit so'zi:
27. Yarim-empirik uslublarni ab initio uslublariga nisbatan afzalligini ko'rsating:
28. Yarim-empirik uslublarni ab initio uslublariga nisbatan kamchiligini ko'rsating:
29. Molekulyar mexanika uslubini yarim-empirik uslubi oldidagi afzalligi:
30. Molekulyar mexanika uslubini yarim-empirik uslubi oldidagi afzalligi:
31. Yarim-empirik uslubini molekulyar mexanika uslubi oldidagi afzalligi:
32. Ab initio uslubini boshqa uslublardan asosiy farqi:
33. To'lik bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
34. Eng oddiy bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
35. d-orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
36. Vodorod atomdagi r-orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalarni ko'rsating
37. Li dan boshlab qutblangan orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
38. Barcha atomlardagi qutblangan orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
39. Li-dan boshlab barcha atomlardagi diffuzion orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
40. Barcha atomlardagi diffuz orbitallarni inobatga oladigan bazis funktsiyalar to'plamini ko'rsating:
41. Bir xil bulgan bazis funktsiyalar to'plamlarini aniklang: 1) 6-31G, 2) 6-31G**, 3) 6-31G(d,p), 4) 6-31+G*, 5) 6-31++G
42. Molekulyar Dinamika bu:
43. Kimyoviy traektoriya bu:
44. Geometriya optimizatsiyasi bu:
45. Optimizatsiyasiz xisob bu:
46. Molekulaning o'tish ko'rinishi bu:
47. Stereokimyoviy deb xisoblanmaydigan parametrni ko'rsating:
48. Stereokimyoviy deb xisoblanadigan parametrni ko'rsating:
49. SCF uslubi bu:
50. CSF uslubini kashf etgan olimlar:
51. Iteratsion jarayon SCF bu:
52. Xarri-Fok uslubida inobatga olinmaydigan ta'sirlashuvlarni ko'rsating:

53. Qanday ta'sirlashuvlarni inobatga olinishi uchun MR2 uslub kashf etilgan?
54. O'zaro kelishilgan maydon uslubiga tegishli bo'lmagan uslubni ko'rsating:
55. CI (configuration interaction) konfiguratsion ta'sirlashuv uslubini inobatga oladigan omillar:
56. DFT (Density Functional Theory) kvant-kimyoviy uslub qo'yidagi modelga assoslangan:
57. RHF Xartri-Fok uslubini (restricted Hartree-Fock) – molekular sistemalarni qo'yidagi printsipl orqali xisoblaydigan kvant-kimyo uslubini:
58. UHF Xartri-Foka uslubini (unrestricted Hartree-Fock) – molekular sistemalarni xisoblaydigan kvant-kimyo uslubini bo'lib u qo'yidagi qoidaga assoslangan:
59. Ionizatsiyalanish potentsial energiyasi bu:
60. Elektroniga moyillik bu:
61. Molekulyar orbital bu:
62. Lokalizatsiyalangan molekular orbital bu:
63. MO AOCHK uslubini – bu molekulyar orbitallarni kuyidagi kurinishi:
64. YuTMO bu:
65. QBMO bu:
66. Molekulani reaksiya qobiliyati belgilaydigan omillar:
67. Molekulani muxit bilan ta'sirlashuvi quyidagilar bilan belgilanadi:
68. Kvant-kimyo uslublariga kirmaydigan uslubni belgilang:
69. Bazis funktsiyalarning to'plami bu:
70. Almashuv energiya bu:
71. Ichki novalent elektronlar ishtroki:
72. Korrelyatsion energiya bu:
73. Elektrostatik ta'sirlashuv bu:
74. Kvant-kimyo xisoblashlarda input (yani kiruvchi) fayl qanday koordinatalar yordamida beriladi:
75. Kimyoda qo'llaniladigan programmalarni ko'rsating:
76. YaMR va strukturaviy taxlil uslublari yordamida olingan oqsillarning 3D strukturasi qaysi ma'lumotlar bazasidan olish mumkin?
77. YaMR va strukturaviy taxlil uslublari yordamida olingan nuklein kislotalarning 3D strukturasi qaysi ma'lumotlar bazasidan olish mumkin?
78. Maqolalar, patentlar va kitoblar ma'lumotlar bazasini ko'rsating:
79. Rentgenstrukturaviy taxlil uslublari yordamida olingan kichik molekulyar massali organik moddalarning va ularning ayrim metallar bilan komplekslarining 3D strukturasi qaysi ma'lumotlar bazasidan olish mumkin?
80. Dori-darmonlarni kompyuterda modellashtirishda ishlatiladigan "retseptor qism" termini nima anglatadi?

81. Dori-darmon kompyuter modellashtirishda ishlatiladigan “ligand” termini nimagi anglatadi?

82. Dori-darmonlarni kompyuter yordamida modellashtirishda ishlatiladigan uslublarni ko’rsating:

83. Erituvchidagi eritilgan moddaning molekula xarakatini o’rganish uchun ishlatiladigan uslubni ko’rsating:

84. Yuzdan ortiq Aconitum va Delphinium alkaloidlari berilgan va ularning antiaritimik faolligi aniqlangan. Yangi xosilalarni faolligini nazariy aniqlab beruvchi uslubni tanlang.

85. Minglab moddalarning biomakromolekula bilan nazariy bog’lanishiga asoslanib tezkor virtual skrining o’tqazadigan uslubni aniqlang.

86. Metal kompleks birikmalarining o’rganilishi uchun ishlatiladigan yarimempirik uslubini ko’rsating:

87. HyperChem dasturida mavjud bo’lgan polipeptidlarni chizishda yordam beradigan ma’lumotlar bazasi ko’rsating:

88. HyperChem dasturida kerakli bo’lgan uslubni tanlashda ishlatiladigan ro’yxat nomini ko’rsating:

89. HyperChem dasturida moddalar strukturasi chizish uchun ishlatiladigan menyu nomini ko’rsating:

90. HyperChem dasturida ro’yxatdagi Select vazifasi:

91. HyperChem dasturida ro’yxatdagi Edit vazifasi:

92. HyperChem dasturida ro’yxatdagi Compute vazifasi:

93. Labels ro’yxatdagi atom zaryadlarini chiqazib beradigan ma’lumotnomani ko’rsating:

94. Labels ro’yxatdagi atom nomerlarini chiqazib beradigan ma’lumotnomani ko’rsating:

95. Labels ro’yxatdagi atom zmassalarini chiqazib beradigan ma’lumotnomani ko’rsating:

96. Build ro’yxatdagi Default element vazifasi:

97. Build ro’yxatdagi Add Hydrogens vazifasi:

98. HyperChem dasturida chiqish faylini yozib beradigan File ro’yxatdan kerakli ma’lumotnomani tanlang:

99. Molekulani grafik ko’rinishini o’zgartiradigan Display ro’yxatdan kerakli ma’lumotni tanlang:

100. Display ro’yxatdagi Show Multiple Bonds vazifasini ko’rsating:

JORIY NAZORAT SAVOLLARI.

Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni ishlatish

1. Kimyoviy tadqiqotlarda kompyuterlarni ishlatishning asosiy yo'nalishlari.
2. Ma'lumot-axborot tizimlari bilan ishlashning asosiy usullari.
3. Kompyuter sintezining texnologiyasi va usullari.
4. Kompyuter tizimidagi ish joyi: kompyuter tizimlarining apparat va dasturiy ta'minoti.
5. Kimyoviy matnlar muxarrirlari bilan ishlash usullari.

Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellash qoidalari mexanika metodlari – MM).

1. Kuch maydonlarining potentsial funktsiyalari turlari.
2. Molekulyar mexnika usullarida parametrlanish qoidalari.
3. Kimyoviy tuzilish muxarrirlari bilan ishlash qoidalari.

Molekulyar mexanika usullarida ishlash qoidalari

1. Molekula geometriyasini ?isoblash uchun vazifani rasmiylashtirish va uning tuzilishi.
2. MM2 usullarida molekula geometriyasini tasvirlash qoidalari.
3. Dastur ishini boshqarish uchun asosiy malumotlar .

Molekulyar mexanika dasturi qaytnomalari bilan ishlash

1. Molekula geometriyasini optimallashtirish va dastur ishini nazorat qilish.
2. MMR2 dastur qaytnomalari bilan ishlash qoidalari va strukturasi.
3. Molekulyar mexanika usullari yordamida ?isoblanadigan molekularning fizik-kimyoviy parametrlari.

Kvant kimyosining empirik bo'lmagan va yarimempirik usullarda ishlash uchun asosiy qoidalari

1. Kvant mexanika postulatlarini.
2. Statsionar masala uchun Shredinger tenglamasining yechimi:
 - Ritts variatsion usuli.
 - ozish nazariyasi usullari.
3. Vodород simon atomlar uchun kvant sonlarni aniqlash.
4. Molekula tuzilishini xisoblashning xususiyati, Born-Oppengeymer yaqinlashishi.
5. Rutaan tenglamalari va ular yechimi – kanonik molekulyar orbitallar - MO.

Rutaan tenglamalarini yaxlitli yechishning yarimempirik usullari

1. Yarimempirik usullar va ularning xususiyatlari, kengaytirilgan Xyukkel usuli (RMX), CNDO, MINDO, MNDO, AM1, PM3.
2. Z-matritsalarini yordamida molekula geometriyasini tasvirlash.
2. Kimyoviy traektoriyalarni xisoblash.

Xartri-Foka yaqinlashtirishidagi empirik bo'lmagan hisoblash usullari.

1. Cheklangan va cheklanmagan Xartri-Fok usullari.
2. Konfiguratsion ta'sirlashtirishni yaqinlashtirishda hisoblash usullari.
3. ab initio usullaridagi asosiy funktsiyalar tuplami.

Molekulyar modellash masalalarini yechish usullari

1. Tasvirlangan geometriya shartida masalalarni yechish (single point).
2. Geometriya optimallashtirish bo'yicha masalalar.
3. Kimyoviy traektoriyalar va oraliq shartlarni qidirish.
4. Molekulalarning spektral va boshqa fizik-kimyoviy parametrlarini modellash.
5. Molekulalar parametrlarini hisoblashning dinamik usullari.
6. Molekulalarning mumkin bo'lgan kimyoviy faolligini analiz qilish.
7. Kimyoviy reaksiyalarni modellash.
8. Masalalarni yarimempirik usullar yordamida amaliy yechilishi

Vazifa tuzish va dastur malumotini tanlash

Dastur ishini nazorat qilish.

Hisoblash qaydnomalarni analiz qilish:

1. molekulalarning geometrik parametrlari.
2. molekulalarning energetik parametrlari.
3. molekulalarning zaryad tavsiflari
4. kimyoviy bo'nlarning strukturasi.
5. molekulyar orbitallar tuzilishi.
6. kimyoviy bo'nlarning energetik tavsiflarini
7. molekulalarning (-elektron sistemasini analiz qilish.
8. lokallashtirilgan molekulyar orbitallarni o'rganish.

Molekulyar modellash usullarini solishtirish va amaliy kimyoviy masalalarni hisoblash strategiyasi.

1. Molekulyar modellash usullarining nisbiy tavsiflari
2. Amaliy kimyoviy masalani yechish usulini tanlash qoidalari .

Yangi dorivor preparatlarni ratsional kompyuterli konstruksiyalash usullari

1. Dorivor preparatlarni ratsional qidirishning va yaratishning asosiy fazalari. Lider-birikma va uni qidirish strategiyalari.
2. Klassik QSAR. Deskriptorlar to'rtisida umumiy tushuncha: topologik, kvant-kimyoviy, fizik-kimyoviy.
3. "Tuzilish-faollik" modellari yordamida optimal tuzilishlari tanlash.
4. Molekulyar doking – retseptor tuzilishi to'rtisida bilimlarga asoslangan usul. Doking xisoblashlarda ishlatiladigan algoritmlar. «ligand», «retseptor», «retseptor»soxa tushunchalari.

«Kimyoviy kompyuter modellash» fanidan yakuniy nazorat savollari

1-VARIANT

	Tayanch iboralar	Axbamiyat beriladigan tomonlari
	kompyuter dasturlari haqida tushuncha. Kimyoviy jarayonlarni modellashtirishda matematikaning roli	kompyuter dasturlari, model', matematik modellashtirish, kimyoviy jarayonlarni modellashtirish, matematik model'.
	Molekulyar mexanika (MM). Atom-atom potentsial funtsiyasi metodi. Molekula to'liq energiyasining matematik ifodasi.	Matematik modellashtirishda molekulyar mexanika metodi, atom-atom potentsial funtsiyasi metodi, molekula taxlili, molekulyar mexanika metodining afzalliklari va kamchiliklari
	Chem Offise elektron sistemasi	Chem Offise elektron dasturining yaratilish tarixi, mohiyati, Yarim empirik molekulyar orbitallar metodlari.

2-VARIANT

	Tayanch iboralar	Axbamiyat beriladigan tomonlari
	Personal kompyuter lar, hisoblash texnikasining kimyoviy tadqiqotlarda qo'llanilishi.	kompyuter , protsessor, monitor, disklar, displey, modem, printer, servis va informatsion sistemalar, modelashtirishda kompyuter ning roli, tadqiqotlarni avtomatlashtirish.
	Molekulyar dinamika usulida moddellashtirish.	Molekulyar dinamika (MD) metodi, MD usulida moddellashtirish, Sonli eksperimentlar, Molekulyar-dinamik eksperimentlar, MD metodi tenglamasi, Ergodik ginoteza, Broun dinamikasi metodi.
	MORAS dasturi	MORAS dasturi mohiyati, vazifasi, S2 simmetriyali metilen guruxini MORAS programmasi bo'yicha xisblash uchun kompyuter da ma'lumotlarni kiritish varianti, olingan natijalarni taqqoslash

3-VARIANT

	Tayanch iboralar	Axiomat beriladigan tomonlari
	Kimyoviy jarayonlarni modellashtirish usullari. Stoxastik, stastik va determinantlangan modellar	Fizik modellashtirish, matematik modellashtirish, stoxastik model, stastik model, determinantlangan model
	Kimyoviy bog'lanish modellari	Ion bog'lanish va kovalent bog'lanish nazariyalari, Ionlar uzaro ta'sir energiyasi matematik ifodasi, Ionli kristall panjaralarining turlari, Modelung konstantasi, Born-Lande tenglamasi, Born-Gaber tsikli
	Kimyoviy kompyuter dasturlari	ShimWin dasturi, Chimix dasturi, animatsion mul'timediyali elektron sistemalar, ISIS dasturi, HyperChem dasturi, Gaussian dasturi, virtual kimyoviy laboratoriyalar

Tuzuvchi:

M.Muradov

TEST TOPSHIRIQLARI

№1

Birinchi marotaba kompyuter qachon ishlab chiqilgan?
1942
1952
1972
1962

№2

Ilk kompyuterlarning ma'lumot tashuvchi vositasi qanday atalgan?
Perfokarta
Magnit lenta
Kompakt disk
Magnit disk

№3

Kompyuterda xisob-kitob ishlarini olib borish uchun yetarli bo'lgan va asosiy qismlari keltirilgan qatorni ko'rsating.
Klaviatura, protsessor, monitor
Klaviatura, printer, monitor
Klaviatura, vinchester, monitor
Vinchester, disk, klaviatura

№4

Kuch maydonlari ishlatiladigan uslubni ko'rsating
Molekulyar Mexanika
Ab initio
yarim empirik uslublari
Kimyoviy traektoriyalar xisobi

№5

Telefon tarmog'i orqali kompyuterlar orasida informatsiya almashinish vositasi.....
Modem
Skaner
Intranet
Internet

№6

Kompyuterlarni kimyoviy tadqiqotlarda jadal qo'llanilishi qaysi yillardan boshlangan
1975
1985
1980
1990

№7

Kompyuterlarni kimyoviy tadqiqotlarda (modellashda) qo'llash uchun kimyo tadqiqotchisiga qo'yiladigan talablar qaysi qatorda to'g'ri ifodalangan
Matematikani yaxshi bilishi
Kimyoviy xisob-kitoblarni avtomatlashtirishni bilishi.
Kimyo qoidalarini matematik rejalashni bilishi
A) Matematik qoidalarni kimyoviy rejalashni bilishi

№8

Quyida keltirilgan omillarning qaysi biri kompyuterlarni kimyoviy tadqiqotlarda qo'llanish jihati deb keltirilgan?
Modellash, Avtomatlashtirish, axborot, dasturlash
Modellash, Avtomatlashtirish, axborot, servis.
Modemlash, Avtomatlashtirish, axborot, servis
Modellash, kimyolashtirish, axborot, servis

№9

Qaysi qatorda kimyo uchun kompyuter matn redaktorlari to'g'ri ko'rsatilgan
Alchemy, Windows, Chemlab, Chemoffice
Chemwin, Isis, Chemlab, MSDOS.
Chemlexicon, Isis, ChemCab, Chemoffice.
Chemwin, Isis, Chemlab, Chemoffice

№10

Molekulyar sistemaning sterik zo'riqishi tushunchasi qaysi modellash usuliga tegishli
Molekulyar orbitallar usuli.
Molekulyar mexanika
Kuch maydonlari usuli
Kvant kimyosi usuli

№11

Atomlar zaryadining o'zaro ta'sirini va qutblangan bog'larning o'zaro dipol-dipol ta'sirini hisobga oluvchi matematik modellash usulini ko'rsating
Molekulyar orbitallar usuli
Molekulyar mexanika
Yarim esperik usuli
Kuch maydonlari usuli

№12

Molekulyar mexanika usuli bo'yicha Elendjer dasturi birinchi marta qachon e'lon qilingan
1977 y
1982 y
1987 y
1985 y

№13

ChemDRAW dasturida molekulaning fizik xossalari xaqidagi ma'lumot qaysi menyu tarkibida joylashgan
View
Structure
Edit
File

№14

ChemDRAW dasturida umumiy qo'shimcha panellari xaqidagi ma'lumot qaysi menyu tarkibida joylashgan?
View
Structure
Edit
File

№15

ChemDRAW dasturida asosiy qo'shimcha panellari xaqidagi ma'lumot qaysi menyu tarkibida joylashgan
View
Structure
Edit

File

№16

ChemDRAW dasturida molekulaning 13 S bo'yicha parametrlari xaqidagi ma'lumot qaysi menyu tarkibida joylashgan?
Structure
View
Edit
File

№17

ChemDRAW dasturida molekulaning 3D modelini yaratish qaysi men'yu tarkibida joylashgan
Edit
Structure
View
File

№18

ChemDRAW dasturida molekulaning nomlash xaqidagi ma'lumot qaysi menyu tarkibida joylashgan
Structure
View
Edit
File

№19

Molekulyar mexanika yoki boshqa modellashtirish usullari uchun kimyo matnini yozishda qo'llaniladigan dasturlar paketi keltirilgan qatorni ko'rsating?
Alchemy, Desktopmodeling, Hyperchem
Hyperchem, Chemoffice, Lexicon
PCM, Hyperchem, MSDOS
Desktopmodeling, PCM, WD

№20

MOPAC dasturida lokalizatsion orbitallarni xisobi kalit so'zi
LOKALISE
RESTART

PRICISE
BONES

№21

Kimyoviy moddalarni matematik modellashning molekulyar mexanika usulini kamchiligini aniqlang
Molekulaning elektron tuzilishi haqida ma'lumotni sekin berishi
Faqat 100 gacha bo'lgan atomli molekulani modellashi
Molekulaning elektron tuzilishi haqida ma'lumot bera olmaydi
Faqat 1000 gacha bo'lgan atomli molekulani modellashi

№22

SHredinger tenglamasi matematik modellashning qaysi usulida markaziy o'rin tutadi?
Kvant kimyosi usuli
Yarim esperik usuli
Molekulyar mexanika
Kuch maydonlari usuli

№23

Yarim emperik usullarni ab initio uslublariga nisbatan afzalligini ko'rsating
Tezkorligi
Aniqligi
Energetik parametrlar xisobi
Molekulaning elektrostatik parametrlari

№24

Kovalent bog'larning kvant mexanik nazariyasini rivojlantirgan olimlarni aniqlang
SHredinger va Laplas
Geytler va London
Boyl va Mariot
Geytler va Bor

№25

Klassik molekulyar orbitallar usuli bo'yicha hisoblash quyida keltirilgan qaysi usulga mansub
Emperik usuli
Yarimemperik usul

Noemperik (ab initio)
Kvantkimyoviy usul

№26

Molekulyar orbitallar usuli yordamida modellashtirishda qanday kamchilik belgilangan.
Hisoblashlar uchun ko'p vaqt ketishi.
Hisoblashlar uchun ko'p parametrlar talab etilishi
MO usuli emperik bo'lgani uchun
Faqat molekulalarga tegishli orbitallar bilan ishlagani uchun

№27

Z-matritsada ishlatiladigan parametrlarni ko'rsating?
Atomlararo masofa, valent va torsion burchaklar
dekart koordinatalar
sfera koordinatalari
kordinatalar markazidagi masofa

№28

Molekulalar tuzilishini modellashtirish qaysi usullari bor
Molekulyar mexanika, yarim emperik, emperikmas
Molekulyar mexanika, yarim emperik, statistik
Molekulyar mexanika, emperikmas, statistik
Yarim emperik, emperikmas, statistik

№29

Ushbu bog'langan atomlar ro'yxati qaysi modda tuzilishini ifodalaydi: 1 – 2 – 3 – 4 – 5 – 6 - 1
TSiklogeksan
Metiltsiklopentan
Dimetilsi-klobutan
Geksan

№30

To'lqin funksiyasi (ψ) qaysi ma'noni bildiradi
Elektronning atomdagi taqsimotini
Molekulada elektronning o'yg'ongan holatini
Kimyoviy bog'ning kovalenligini

Elektronning yadroga tadbiqini

№31

To'liq gibridlanish nazariyasiga ko'ra NH ₃ molekulasida qanday gibridlashga ega
sp ³
sp ²
sp
dsp

№32

Molekula konfiguratsiyasini qaysi omillarga asosan aniqlash mumkin
Atomlar elektron bulutlarining tuzilishi va shakli
Moddaning tuzilishi va zichligi
Bog'ning takrorliligi va bog' energiyasi
Gibridlanish va elektr o'tkazuvchanlik

№33

1,2-dixloretanning qaysi shakli – tsis yoki trans izomeri qutbsiz?
Trans shakli
TSis shakli
Trans shakli tsis shakliga qaraganda qutbli
TSis va trans shakli

№34

Qaysi zarrachaning (He_2 ёku He_2^+) barqarorligi yuqori ?
He_2^+
He_2
Har ikkala zarrachaning barqarorigi bir xil
Zarrachalarning barqarorligi ishonchli farq qilmaydi

№35

NO molekulasidagi bog'lar tartibini aniqlang
3
2.5
2
3.5

№36

ChemOffice dasturlar majmuasining CS ChemDraw dastri nima uchun mo'ljallangan ?
Kimyoviy formulalar redaktori
Kimyoviy birikmalar ma'lumotlari bankini tuzish, muxarirlash va boshqarish uchun
Kimyoviy birikmalarni vizuallashtirish, kompyuterda modellesh va hisoblashlar uchun
Jadval ma'lumotlarini ko'rish va muxarirlash uchun

№37

ChemOffice dasturlar majmuasining CS Chem3D dastri nima uchun mo'ljallangan ?
Kimyoviy birikmalarni vizuallashtirish, kompyuterda modellesh va hisoblashlar uchun
Kimyoviy formulalar redaktori
Kimyoviy birikmalar ma'lumotlari bankini tuzish, muxarirlash va boshqarish uchun
Jadval ma'lumotlarini ko'rish va muxarirlash uchun

№38

Berilgan uslublardan molekulyar mexanikaga tegishligini ko'rsating
MP2
MNDO
B3LYP
AMBER

№39

MOPAC dasturlar majmuasida qaysi usuldagi hisoblashlar amalga oshiriladi ?
Emperikmas
Yarim emperik
Molekulyar mexanik
Statistik

№40

MM dasturlar majmuasida qaysi usuldagi hisoblashlar amalga oshiriladi ?
Molekulyar mexanik
Emperikmas

Yarim emperik
Statistik

№41

HNO_3 molekulasi qaysi bog'lardan iborat va markaziy atomning gibridlanishi qanday ?
Ion, qutbli kovalent, donor-aktseptor, sp^2
Ion, kutbsiz
Ion, donor-aktseptor, sp^2
Metall, ion, qutbli kovalent, donor-aktseptor, sp^2

№42

GAUSSIAN dasturlar majmuasida qaysi usuldagi hisoblashlar amalga oshiriladi ?
Emperikmas
Yarim emperik
Molekulyar mexanik
Statistik

№43

H_3O^+ molekulasi qaysi bog'lardan iborat va markaziy atomning gibridlanishi qanday ?
Ion, qutbli kovalent, sp^3
Qutbli kovalent, donor-aktseptor, sp^3
Ion, vodorod, sp^3
Ion, qutbli kovalent, donor-aktseptor, sp^3

№44

SO_2 molekulasi markaziy atomining gibridlanish tipi qanday ?
sp^3
sp^2
sp
sp^3d

№45

Yarim emperik usullarni ab initio uslublariga nisbatan afzalligini ko'rsating
Tezkorligi
Aniqligi

Energetik parametrlar xisobi
Molekulaning elektrostatik parametrlari

№46

Cterokimyoviy deb xisoblanmaydigan parametrlarni ko'rsating
Zaryad
Bog' uzunligi
Valent burchak
Torsion burchak

№47

Qanday ta'sirlashuvlarni inobatga olish uchun MR2 uslubi kashf etilgan
Korrelyatsion ta'sirlashuv
Kinetik energiya
Elektronlararo Kulon ta'sirlashuv
O'zaro almashinuv ta'sirlashuv

№48

$\overset{1}{\text{C}}\equiv\overset{2}{\text{C}}-\overset{3}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{4}{\text{C}}\text{H}=\overset{5}{\text{C}}\text{H}_2-\overset{6}{\text{C}}\text{H}_3$ Ushbu molekulada uglerod atomlarining gibrirlanish turini belgilang
1-sp ² ; 2-sp ² ; 3-sp ³ ; 4-sp ² ; 5-sp ² ; 6-sp ³
1-sp; 2-sp; 3-sp ² ; 4-sp ² ; 5-sp ² ; 6-sp ³
1-sp; 2-sp; 3-sp ² ; 4-sp ² ; 5-sp ² ; 6-sp ³
1-sp ² ; 2-sp; 3-sp; 4-sp ³ ; 5-sp ³ ; 6-sp ³

172,1,170,3,168,5,166,7,164,9,162,11,160,13,158,15,156,17,154,19,152,21,150,23,148,25,146,27,144,29,142,31,140,33,138,35,136,37,134,39,132,41,130,43

128,45,126,47,124,49,122,51,120,53,118,55,116,57,114,59,112,61,110,63,108,65,106,67,104,69,102,71,100,73,98,75,96,77,94,79,92,81,90,83,88,85

86,87,84,89,82,91,80,93,78,95,76,97,74,99,72,101,70,103,68,105,66,107,64,109,62,111,60,113,58,115,56,117,54,119,52,121,50,123,48,125,46,127

44,129,42,131,40,133,38,135,36,137,34,139,32,141,30,143,28,145,26,147,24,149,22,151,20,153,18,155,16,157,14,159,12,161,10,163,8,165,6,167,4,169,2,171