



**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM
VAZIRLIGI**

QARSHI DAVLAT UNIVERSITETI

TABIIY FANLAR KIMYO KAFEDRASI

Shodiyeva Mubina

Kimyoviy birikmalarning tuzilishini va xossalarini
matematik modellash fanidan tayyorlagan

REFERAT

Bajardi: Shodiyeva.M

Qabul qildi: Qodirov.A

Qarshi-2016

Mavzu: Matematik modellash uslubi. Kuch maydonlari yordamida molekulyar modellashtirish uslublari

Reja:

1. Model, modellashtirish, matematik model tushunchalari.
2. Matematik modelni ko'rish bosqichlari va sinflari.
3. Kuch maydonlari (atom-atomli potentsiallar)
4. E_t - Torsion ta'sirlashish.

Xulosa

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati

MODEL, MODELLASHTIRISH, MATEMATIK MODEL TUSHUNCHALARI.

«Model» soʻzi lotincha modulus, soʻzidan olingan bulib, oʻlchov, meʼyor, obraz, namuna, analog, «oʻrinbosar» degan maʼnolarni bildiradi.

Model tushunchasini taʼriflash juda qiyin. Bir manbada uning 31 ta taʼrifi sanab oʻtilgan. Shunday boʻlsada bu tushuncha har birimizga tanish: oʻyinchoq samolyot--samolyotning modeli, globus-Yerning modeli, planetariy ekrani-osmon va undagi yulduzlar modeli, $S=vt$ formula- jism harakati modeli. Bu bayon qilingan predmetlar grafik tasvirlar, formulalar bir «model»soʻzi bilan birlashadilar Model taʼriflaridan birini yuqorida bayon qilgan edik. Yana turli shaklda berilgan taʼriflardan baʼzilarini keltiramiz. Keng maʼnoda model biror obʼekt yoki obʼektlar sistemasining obrazi yoki namunasidir. N. N. Moiseev taʼrifi boʻyicha «Model deganda biz predmet (xodisa) haqida uning u yoki bu ayrim xossalarini aks ettiruvchi maʼlum bir chegaralangan maʼlumotni beruvchi soddalashtirilgan bilimni tushunamiz. Modelni maʼlumotni kodlashning maxsus shakli sifatida qarash mumkin. Oddiy kodlashda bizga barcha dastlabki maʼlumotlar maʼlum boʻladi va ularni biz faqat boshqa tilga oʻtkazamiz, model esa, qaysi tildan foydalansa ham, kishilar ilgari bilmagan maʼlumotni ham kodlaydi». Endi modellashtirish tushunchasi haqida gapiramiz. Modellashtirishning ham turli shakllardagi bayonini keltiramiz. Modellarni yasash kishilar faoliyatida juda katta ahamiyatga ega. Modelni koʻrish jarayonini modellashtirish deyiladi. Modellashtirish deganda obeʼkt (sistema) ning modeli yordamida Shu obeʼktning xossalarini tadqiq qilish jarayonini tushuniladi. Modellashtirish oʻqilish obeʼktlarini ularning modellari yordamida tadqiq etish, kuzatilayotgan predmet va xodisalarning modellarini yasash va oʻrganishdir. Obeʼktni uning modeli yordamida oʻqilish modellashtirishdir. Har qanday oʻqilish modellashtirishdan iborat, chunki bunda tegishli obeʼkt bosh miyada nerv xujayralari majmui yordamida ideal koʻrinishda aks etadi, yaʼni biz obeʼktning modeli bilan ish koʻramiz. Modellashtirish-turli jarayon va xodisalarni oʻrganishning eng keng tarqalgan metodlaridan biri.

Model tushunchasi biologiya, meditsina, kimyo, fizika, iqtisodiyot, sotsiologiya, demografiya va boshqa fanlarda ham qo'llaniqladi. Matematik model, fizik model, biologik model, iqtisodiy model va boshqa modellar turlari mavjud.

Iqtisodiy sistemalarni modellashtirishda matematik modellar keng qo'llanilmoqda. Bu soxadagi matematik modellar iqtisodiy-matematik va iqtisodiy -statistik guruhlariga ajraladi. Biz matematik modellar haqida so'z yuritamiz. Matematik modellarni tuzish sistemaviy taxlilining asosidir. Bu ixtiyoriy sistemani tadqiq qilishning markaziy bosqichidir. Keyingi taxlilning natijasi modelning sifatiga bog'liq.

Matematik model tushunchasiga ham turli ta'riflar berilgan. Ulardan ba'zilarini keltiramiz. Jarayonning matematik tavsifini, ya'ni jarayonni matematik tilda bayonlashni matematik model deb yuritamiz. Matematik model olamning ma'lum xodisalar sinfining matematik belgilar bilan ifodalangan takribiy ifodasidir.

Real sistemaning (aniqrogi sistema ishlashi jarayonining) matematik modeli deganda biz sistema parametrlariga, kirish signallariga, boshlangich shartlar va vaqtga bog'liq sistema holatlari harakteristikalarini (bular orqali chiqish signallarini) aniqlovchi munosabatlar (masalan, formulalar, tenglamalar, tengsizliklar, mantiqiy shartlar, operatorlar va boshqalar) to'plamini tushunamiz.

O'rganilayotgan jarayon yo xodisani matematik simvollar yordamida bayon qiluvchi matematik munosabatlar sistemasini matematik model deyiladi.

Ob'ektning harakteristikalarini bayon qiluvchi matematik ifodalarni matematik model deyiladi. Formulalar ko'rinishida yozilgan faqat miqdoriy harakteristikalarni o'z ichiga olgan modellarni matematik model deyiladi. Xodisalar sinfining soddalashtirilgan matematik belgilar bilan ifodalangan bayonini matematik model deyiladi.

Tashqi kuch maydonlarida biror xodisalar sinfining matematik belgilar yordamida takribiy bayoni matematik model deyiladi.

Misollar. Eng qadimgi matematik modellardan biri Yevklid geometriyasidir. Bu bizni ko'rshab olgan fazo va undagi predmetlar modelidir. Predmetlar sonining abstrekt modeli sonidir. Hammaga ma'lum matematik modellar: butun sonlar sistemasi, haqiqiy sonlar sistemasi. Hozirgi zamon algebrasida gruppalar, xalqalar, maydonlar, vektor fazolar, chiziqli algebralari kabi matematik modellar bilan ish ko'riladi.

Konkret sonli harakteristikalarga ega bo'lgan modelni sonli model, mantiqiy ifodalar yordamida yozilgan modelni mantiqiy model (masalan, algoritm blok-sxemasi), grafik usuldagi modelni grafik model (masalan, grafiklar, diagrammalar, rasmlar), EHM yordamida ro'yobga chiqarilgan modelni mashina (elektron) modeli deyiladi.

Model nima uchun kerak degan savolga quyidagi javobni berish mumkin.

1) ob'ekt (jarayon)ning tarkibi, tuzilishi, asosiy xossalari, rivojlanishi qonunlari va tashqi dunyo bilan o'zaro ta'sirini tushunish uchun;

2) ob'ekt (jarayon)ni boshqarishni o'rganish va berilgan maqsad va kriteriyalarda boshqarishning eng yaxshi usullarini aniqlash uchun ;

3) ob'ektga ta'sir qilishning berilgan usullarining va formalarini ishga solishning to'g'ri va bilvosita oqibatlarini oldindan aytib berish uchun kerak. Matematik model olamni, boshqarish va oldindan aytib berishning kuchli usulidir.

Har qanday matematik model uch yo'l bilan paydo bulishi mumkin;

a) xodisani to'g'ridan-to'g'ri kuzatish natijasida, uni to'g'ridan-to'g'ri o'rganish va tushunish natijasida; bunday usul bilan olingan modelni fenomenologik model deyiladi;

b) biror deduktsiya jarayoni natijasida, bunda yangi model biror umumiy modeldan xususiy hol sifatida olinadi; bunday modellarni asimptotik modellar deyiladi;

v) biror induksiya jarayoni natijasida, bunda yangi model «elementar» modellarning tabiiy umumlashmasidan iborat bo'ladi. Bunday modellarni ansambil modellari deyiladi.

Nyuton mexanikasining hamma modellari fenomenologik modellardir. Bular kishilarning harakatlardan eng sodasi bo'lgan mexanik harakatlarning tabiatini tushunish va anglash yo'lidagi (harakatlari) tirishishlari yakunini chiqardilar. Kuchning harakat harakteriga ta'sirini Nyutongacha qilishar edi. Nyutonning ba'zi o'tmishdoshlari harakat sirlarini olib chiqishga juda yaqin keldilar. Bulardan biri I.

Kepler edi. Nyuton birinchi bo'lib impulsning saqlanish qonunini tushundi va bayon qilib berdi. Ma'lum bo'lishicha, kuch tezlikning o'zgarishini aniqlaydi, tezlikning o'zini emas, ya'ni kuch tezlikni emas, balki tezlanishni aniqlaydi:

$$F = m \frac{dv}{dt}.$$

Bu yerda massa vazni proportsionallik koeffitsienti roliga ishtirok etmoqda. Shu kabi qator kashfiyotlar yaratildi.

Matematiklar va fiziklarning birgalikdagi harakatlari tufayli fizika modellarining hozirgi zamon sistemasi barpo etildi. Bu yerda ko'zda tutilgan maqsad shuki modellarining to'plamigina emas, balki sistemasi yaratildi. Hozirgi zamon fizikasi - bu matematik modellarning mantiqan bog'langan sistemasidir. Bu jarayonda asimptotik taxlik g'oyalarining rivoji katta rol o'ynadi. Yangi modellar eskilarini inkor qilmadi, balki ularni ba'zi xususiy holdagi sifatida kiritdilar. Masalan, Navg'e-Stoks modellari o'z ichiga xususiy hol sifatida Eyler modelini kiritdilar. Agar Nave-Stoks modelida qovushqoqlikni nolga teng desak, Eyler modeliga kelamiz.

Biror tabiat xodisasi, protsessini matematik o'rganish uchun, uni avvalo soddalashtiriladi, ya'ni xodisaga xos xossalarning xilma-xilligidan bir qismini tekshirish uchun kiritadilar, hamda xodisa harakteristikalari va tashqi muxit orasidagi aloqa (bog'lanish)lar haqida ba'zi muloxazalar qilinadi. Bir qancha xodisalar modellari bir xil bo'lishi mumkin. Aksincha bir xodisa uchun bir necha turli modellar ko'rish mumkin. Model xodisa bilan aynan bir emis, u xodisa strukturasi haqida biror takribiy tasavvur beradi holos. Model ba'zan birinchi qaraganda juda qo'pol bo'lishi mumkin, lekin u qoniqarli natijalar berishi mumkin.

Masalan, I. Kepler va I. Nyuton vaqtlaridan osmon mexanikasi Quyosh sistemasi tuzilishining qo'yidagi modeliga asoslangan: Quyosh va planetalar mos massalarga ega va ular orasida tortilish kuchlari

$$F = \gamma \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

qonun bo'yicha ta'sir qiladigan material nuqtalarni bildirgan, bu yerda F -bu massalari m_1 , m_2 va oralaridagi masofalarga teng bo'lgan ikkita osmon jismlari orasidagi tortqilish kuchi, γ -tortqilish doimiysi. Planetalarni modellashtirgan material nuqtalar ularning og'irlik markazlarida joylashgan. Bu model birinchi qarashda qo'pol bo'lsa ham, u planetalar harakatini to'la qoniqarli bayon qiladi va bu model katta natijalarga olib keldi, xususan Quyosh sistemasida astronomlarga noma'lum planetalar mavjudligini isbotladi. 1846 yil Neptun, 1930y Pluton planetalarining mavjudligi isbotlandi.

Model sistemani yetarli to'g'ri akslantirishi va foydalanish uchun qulay bo'lishi kerak. Modelning modellashtirilgan ob'ektga mosligini modelning adekvaqligi deyiladi. "Adekvatlik" so'zi lotinchadan tarjimasi teng, tenglashtirilgan degan ma'noni bildiradi. Bu shartli tushuncha, chunki model real ob'ektga to'la mos bo'lolmaydi, aks holda bu model emas, ob'ektning o'zi bo'lardi. Odatda model qancha adekvaqtrok bo'lsa, u shuncha murakkab bo'ladi. Shuning uchun modelning soddaligi va adekvaqligi talablari qandaydir ma'noda qarama-qarshidir. Modellashtirishda adekvaqlik umuman emas, balki tadqiqot uchun muxim xisoblangan xossalari bo'yicha nazarda tutiladi.

MATEMATIK MODELNI KO'RISH BOSQICHLARI.

Matematik modelni ko'rishni 4 bosqichda amalga oshiriladi.

1. Sistemaning xulqi haqidagi model yordamida javobi izlanayotgan asosiy masalalar tuziladi.
2. Sistemaning xulqini boshqaradigan qonunlar tuplamidan muximlari xisobga olinadi.
3. Bu qonunlarga qo'shimcha holda, zarurat bulsa, sistema va uning sistema ostilari ishlashi haqida gipotezalar bayon qilinadi.
4. Qonunlar va gipotezalar matematik munosabatlar shaklida ifodalanadi va bu matematik munosabatlar birlashtiriladi.

Shu bilan matematik model ko'riladi. Bundan keyin qqabul qilingan modelning amaliyot mezonlarin kanoatlantirishi aniqlanadi, ya'ni ko'zatishlar natijasi modelning nazariy natijalari bilan ko'zatish aniqligi chegarasida mos kelishi masalasi aniqlanadi. Zarur bulsa, model takomillashtiriladi.

Optimallashtirish modellaridan matematik programmashtirish masalalari, extremaliy modellardan ommaviy xizmat ko'rsatish nazariyasi, statistik qabul nazorati, ishonchlilik nazariyasi, uyinlar nazariyasi masalalari jarayonlar tadqiqoti ko'rsida o'rganiladi. Buni e'tiborga olib qo'yida biz matematik modellardan deskriptiv modellarni optimallashtirish modellaridan funksiyalarning ekstremumini topishga keltiriladigan modellarni, extremaliy modellardan Markov zanjirlariga keltiriladigan modellarni Matematik programmashtirish masalalarining tadqiqotining rivojida o'zbek olimlarining xissalari katta. Extremaliy, uyinli modellarning tarakkiyotiga S. X. Sirojiddinov, T. A. Azlarov, Sh. K. Farmonov, N. Yu. Satimov uz shogirdlari bilan katta xissa kushdilar. V. K. Kobulov, F. B. Abutaliev, T. Buriev, N. Muxitdinov, M. Adhamov, M. Irmatov, M. I. Eydelg'mant va boshqalar uz faoliyatlarini matematik programmashtirish va matematik programmashtirishning boshqa soxalariga bag'ishladilar.

KUCH MAYDONLARI (ATOM-ATOMLI POTENSIALLAR)

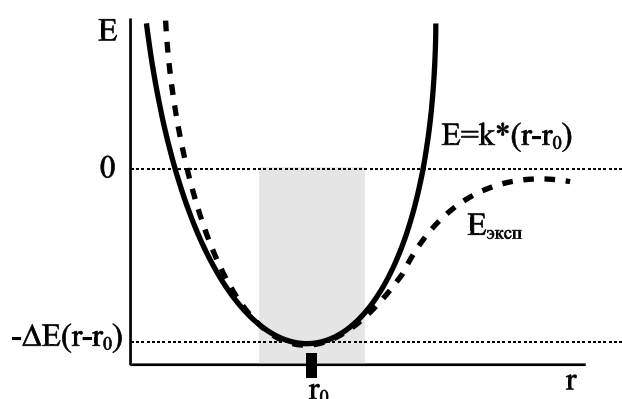
Atomlarning molekulalarda o'zaro joylashish qoidalari (atomlar aro masofalari, valent va ikki qirra burchaklar va hakoza) boy tajriyba asosida aniqlangan – empirik bilimlarga kiradi. Amaliy jixatdan xoxlagan molekulyar tuzilish uchun tegishli ma'lumotnomalardan uning stereokimyoviy parametrlarini aniqlash uchun qoidalar va tavsiyalar topish mumkin.

Kimyoviy bog'lar uchun Guk qonuni deb nomlanuvchi ro bog' uzunligi, $\Delta r_0 = (r - r_0)$ muvozanatdan chetlashish va uning zarur energiyasi ΔE orasida o'zaro $\Delta E(r)$ bog'liqlik mavjud

Bu qonunning xarakterli ta'riflari: $r=r_0$ da $-\Delta E(r_0)$ bitta minimum bo'lishi va $\Delta E(r)$ ning r cheksiz kattalashishida nolga intilishi. To'liq turda Guk qonuni murakkab matematik ifoda turida ifodalanadi, lekin r_0 ning muvozanat ma'nosi yaqinida, birinchi yaqinlashishda uni oddiy parabola orqali tasavur qilish mumkin.

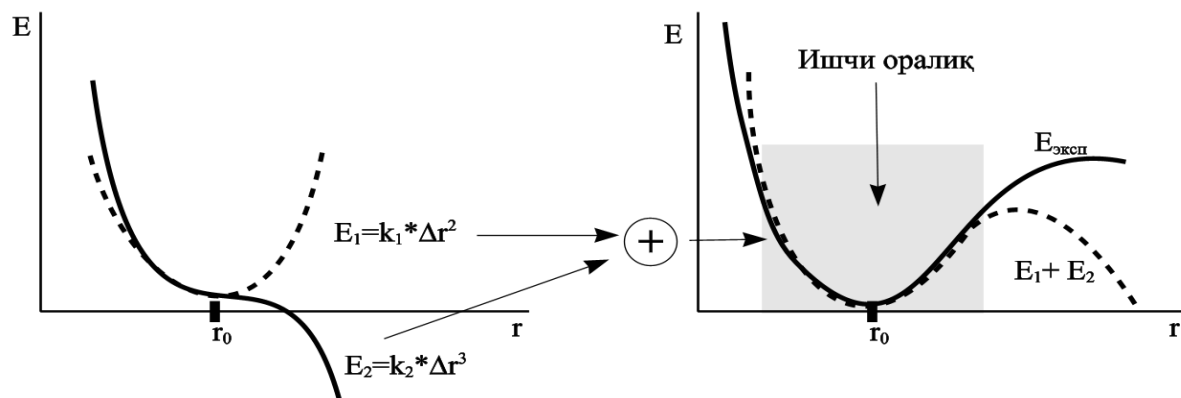
$$\Delta E = k*(r-r_0)^2 \quad 1.$$

k kimyoviy bog'ning qattqlik koeffitsiyentini aniqlaydi, $\Delta E(r)$ energiyasining nol qiymatini $-\Delta E(r_0)$ qabul qilingan.



Parabolaning xaqiqiy Guk qonuniga nisbatan xatosi ($r < r_0$) kichik qiymatlarida $\Delta E(r)$ ning birmuncha kichiklashtirilishi va r ning katta qiymatlarida kattalashtirilishi yaqqol ko'rinib turibdi. Bu xatoning samarali tuzatilishini kubik parabolaning kiritilishi (uchinchi darajadagi darajali qator) yordamida amalga oshirish mumkin.

$$\Delta E = k_1*(r-r_0)^2 + k_2*(r-r_0)^3 \quad 2.$$



Guk qonunining to'g'ri tasavur qilish sohasi (grafikda keltirilgan) kengayyadi, ammo bu sohadan tashqarida Guk qonunidan chetlashish avvalgidan kuzatiladi.

To'rtinchi, beshinchi va boshqa yaqinlashtirilish darajalarini kiritish mumkin, ammo matematik xisoblarning murakkablashishi xisoblash vaqtining uzayishiga olib keladi.

Kompyuter xisoblashlari uchun xos vaziyat shakllanmoqda ya'ni xisoblashlarning narhi va olingan natijalarning bahosi orasidan tanlash zarur bo'lgan. Xatoli hisoblashlar hech qanday bahoga ega emas va hech kimga xam kerak emas, juda aniq hisoblashlar esa juda qimmatga tushishi mumkin va shuning uchun ular ham qiziqish uyg'atmaydi.

Har xil dasturlarda odatda uchinchi darajadagi yoki hatto faqat ikkinchi darajadagi yaqinlashish bilan cheklanadi, hisoblashlar aniqligi va tezligi orasida o'zaro qo'lay variantni tanglash esa har xil dasturlarda har xil yechiladi.

Keng tarqalgan Elendjer MM2 molekulyar mexanika dasturida va uning modifikatsiyalarida $\Delta E(r)$ funksiyasi quyidagicha kiritiladi (uchinchi darajali polinom ekvivalenti):

$$E_s = 71.94 * (k_s * (r - r_0)^2 * (1 - 2.00 * (r - r_0))) \quad 3.$$

E_s – kimyoviy bog' kuchlanish energiyasi, s indeksi stretch so'zidan kelib chiqqan bo'lib – kuchlanish degan ma'noni bildiradi.

Biokimyoviy jarayonlar uchun aloqasi bor birikmalar uchun maxsus hisoblashlarni amalga oshirish uchun ishlab chiqarilgan **Amber** molekulyar mexanikasi dasturi E_s ni faqat parabola bo'yicha izoxlanadir, ammo ko'pgina juda murakkab molekulyar sistemalarni hisoblashlarda aniqligi bo'yicha MM2 Elendjer dasturidan qolishmaydi.

Jadval 1.

Har xil fragmentlarda S-S kimyoviy bog'ining uzunligi

№	Kimyoviy bog'	Bog' uzunligi (A)	Elendjer (MM2) bo'yicha bog' turi
1.	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}_3$	1.532	1 – 1
2.	$\text{H}_3\text{C}-\text{CH}=\text{C}$	1.504	1 – 2
3.	$\text{C}=\text{CH}-\text{CH}=\text{C}$	1.344	2 – 2
4.	$\text{C}=\text{CH}-\text{C}=\text{O}$	1.342	2 – 3
5.	$\text{C}=\text{CH}-\text{C}\equiv\text{N}$	1.315	2 – 4
6.	$\text{C}\equiv\text{C}-\text{C}\equiv\text{C}$	1.212	4 – 4

Extimol, xoxlagan MM dasturi har xil kimyoviy fragmentlarda har xil kimyoviy bog'lar uchun r_0 va k_s ma'nolarining boy kutubxonasiga ega bo'lishi kerak. Masalan tajriba ma'lumotlardan ko'rinib turibdiki S-S kimyoviy bog'i Jadval1. keltirilgan qiymatlarga ega bo'lishi mumkin.

Bog' uzunligini aniqlash uchun faqatgina bitta S-S bog'i ekanligini bilish bilan cheklanmasdan uglerodlarning gibridlanishini va ularning eng yaqin qo'shnilarining turini bilish xam talab qilinadi.

Uglerodning Mendeleyev jadvalining 6-chi elementi ekanligi yetarli ma'lumot emas – uglerod ko'p qirrali element ekanligi aniqlangan Atomlarni belgilash uchun yangi sistematika kiritish zarur bo'ladi. Masalan uglerod atomi uchun jadvalning ohirgi ustunidagi 1 dan 4 gacha sonlar. 1 dan 4 gacha nomerlar uglerod atomi uchun har xil struktur kimyoviy xolatlarni aniqlaydi. MM2 dastur kutubxonasidagi birinchi 24 turdagi atomlar jadval 2 da keltirilgan. Ular odatda MM da kvaziatom sifatida ta'riflanadigan Mendeleyev jadvalining faqat 5 atomini va LP (№20) - taqsimlanmagan elektron juftini ko'rsatadi.

Jadval.2

MM2 molekulyar modellash dasturidagi atom turlari.

N ^o	Atom turi		N ^o	Atom turi		N ^o	Atom turi
1	C (sp ³)		9	N (sp ²) amidli		17	S >S=O S- oksid
2	C (sp ²) alken		10	N (sp)		18	S >SO ₂ sulfon
3	C (sp ²) karbonil		11	F ftor		19	Si kremniy
4	C (sp) alkin		12	Cl xlor		20	LP taqsimlanmagan elektron juft
5	H NH/OH lardan tashqari		13	Br brom		21	H spirtli OH
6	O efir, gidroksil		14	I yod		22	C siklopropan
7	O karbonil		15	S -S- sulfid		23	H aminli NH
8	N (sp ³)		16	S ⁺ (>S ⁺) kation		24	H karboksilli COOH

“Amber” dasturida uglerodning real atomi “Amber”-atomlarining 30 dan ortiq turlari bilan tasvirlanadi. Bu murakkab biologik birikmalar molekulalarining xususiyatlarini ancha aniqroq tasvirlashga imkon beradi.

MM dasturlaridagi kimyoviy bog‘lar parametrlarining jadvali odatda jadval turida beriladi.

Jadval.3.

HyperChem paketidagi MM+ dasturi kimyoviy bog‘larning parametrlarining jadvali

N ^o	Bog‘ shifri	Kimyoviy bog‘	r ₀	k _s	Dip.moment
----------------	-------------	---------------	----------------	----------------	------------

1	1-1	C(sp ³)-C(sp ³)	1.523	4.400	0.000
2	1-2	C(sp ³)-C(sp ²)	1.497	4.400	0.300
3	2-2	C(sp ²)-C(sp ²)	1.337	9.600	0.000
4	1-3	C(sp ³)-CO	1.509	4.400	0.300
5	2-3	C(sp ²)-CO	1.351	9.600	0.000
6	3-3	OC-CO	1.334	9.600	0.000
7	1-4	C(sp ³)-C(sp)	1.470	5.200	0.750
8	2-4	C(sp ²)-C(sp)	1.313	9.900	0.000
9	3-4	OC-C(sp)	0.000	999.000	0.000
10	4-4	C(sp)-C(sp)	1.212	15.600	0.000
11	1-5	C(sp ³)-H	1.113	4.600	0.000
12	2-5	C(sp ²)-H	1.101	4.600	0.000
13	3-5	OC-H	1.113	4.600	0.000
14	4-5	C(sp)-H	1.090	5.900	0.000
15	1-6	C(sp ³)-O	1.402	5.360	0.440
16	2-6	C(sp ²)-O	1.355	6.000	0.001
17	3-6	OC-O	1.338	5.050	-0.200
18	4-6	C(sp)-O	0.000	999.000	0.000
19	6-6	O-O	1.428	3.950	0.000
20	3-7	C=O	1.208	10.800	2.600
21	1-8	C(sp ³)-N(sp ³)	1.438	5.100	0.040
22	2-8	C(sp ²)-N(sp ³)	1.377	6.320	-0.400
23	4-8	C(sp)-N(sp ³)	0.000	999.000	0.000
24	6-8	O-N(sp ³)	0.000	999.000	0.000
25	8-8	N(sp ³)-N(sp ³)	1.381	5.600	0.000

Keltirilgan raqamlar (parametrlar) katta miqdordagi tajribaviy ma'lumotlarni o'rtacha hisobi asosida olingan. MMning aniq dasturlarida bunaqa jadvallar bir nechta ming qatorlardan iborat bo'lishi mumkin. Shunga e'tibor berish kerakki, 9, 18, 23 va 24 xolatlari uchun malumotlar yig'ish va "ishonchli" parametrlarni aniqlash amalga oshira olinmadi. Bu 999.0 raqamlar bilan belgilanadi. MM dasturlari bunday fragmentlar bilan uchrashganda o'z ishini to'xtatadi yoki bu parametrlarning qanaqadir " mantiqiy" ma'nosini qo'yib ish qaynomasi bu to'g'risida ogoxlantiriladi.

Xaqiqiy molekulalarda, formula.3. bo'yicha, barcha kimyoviy bog'larning kuchlanishi ΔE_{si} hisoblaniladi va umumiy molekula uchun jamlanadi

$$V_s = \sum \Delta E_{si} \quad \text{II.4.}$$

V_s atomlarning "stretch" yoki "to'g'ridan -to'g'ri" (direct) o'zaro ta'sirlashish kuch potentsiali, ayrim xolatlarda 1-1 potentsiali sifatida aniqlanadi. V_s qiymatini molekulaning fazoviy (3D) strukturasini tuzganda kimyoviy bog' uzunliklarini buzilishida jarima chorasi sifatida qarash mumkin.

Xaqiqiy molekulalarda bunday jarimalar amaliy jihatdan doim kuzatiladi, chunki xaqiqiy molekulaning to'liq strukturasini bog'larning kuchlanishisiz tuzish mumkin emas.

Shunga o'xshash jarimalarni boshqada stereokimyoviy parametrlar uchun tegishli kuch konstantalari (yoki adabiyotda tegishli kuch maydonlarini aniqlash deb nomlanuvchi) yordamida aniqlash mumkin. Masalan Elendjer MM2 dasturida valent burchagi uchun, II.3. bilan o'xshash holda, tegishli kuch funksiyasi quyidagicha aniqlanadi:

$$E_b = 0.02191 \cdot (k_b \cdot (\varphi - \varphi_0)^2 \cdot (1 + 7 \cdot 10^{-8} \cdot (\varphi - \varphi_0)^4)) \quad \text{II.5.}$$

b indeksi band so'zidan kelib chiqib, valentn burchagini bildiradi.

Kuch parametrlarining tegishli jadvali:

Jadval .4.da berilgan.

HyperChem paketidagi MM+ dasturining valent burchaklarining kuch parametrlari.

№	Burchak	k_b	1 Tur	2 Tur	3 Tur
1	1 - 1 - 1	0.450	109.470	109.510	109.500
2	1 - 1 - 2	0.450	109.470	109.510	109.500
3	1 - 2 - 1	0.450	117.200	0.000	0.000
4	1 - 2 - 2	0.550	121.400	122.000	0.000
5	2 - 1 - 2	0.450	109.470	109.510	109.500
6	2 - 2 - 2	0.430	120.000	0.000	0.000
7	1 - 1 - 3	0.450	107.800	109.900	110.000
8	1 - 3 - 1	0.400	116.600	0.000	0.000
9	1 - 2 - 3	0.380	121.000	0.000	0.000
10	1 - 3 - 2	0.400	115.000	0.000	0.000
11	2 - 1 - 3	0.470	109.470	110.510	110.200
12	2 - 2 - 3	0.600	114.600	117.600	0.000
13	2 - 3 - 2	0.600	112.000	0.000	0.000
14	3 - 1 - 3	0.470	109.470	110.510	110.200
15	1 - 1 - 4	0.450	109.470	112.400	109.000
16	1 - 2 - 4	0.470	122.000	0.000	0.000
17	2 - 1 - 4	0.470	109.470	110.510	110.200
18	2 - 4 - 2	0.400	180.000	0.000	0.000
19	1 - 4 - 4	0.200	180.000	0.000	0.000
20	4 - 1 - 4	0.470	109.470	110.510	110.200

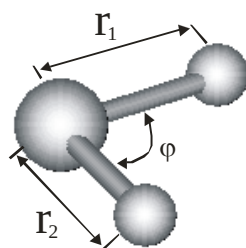
1,2,3 turi $-0, 1, 2$ birikkan vodorod atomlariga ega markaziy atom uchun muvozanat valent burchaklarining φ_0 QIYMATLARI “Band” “bog‘lanishlik” kuch potentsiali oldingiga o‘hshash turda ifodalanadi

$$V_b = \Sigma \Delta E_{bi} \quad \text{II.6.}$$

Birinchi xolatdan farqli ravishda geminal o‘zaro ta’sirlashishning potentsiali yoki 1-2 potentsial deb nomlanadi.

E_s va E_b energiyalarining kuch funksiyalari o‘zaro bog‘liq: valent burchagining (band kuchlanishi) buzilishi bu burchakka tegishli ro bog‘lar uzunligi muvozanat qiymatlarini o‘zgarishiga olib keladi yoki teskarisi. Bu ikkita kuchlanishlarning o‘zaro ta’siri ayrim xolatlarida “cross stretch-band” (chorrahal) ta’sirlashish deb nomlanadi. U birgalikdagi kuchlanishning qo‘shimcha formulasi yordamida qisman to‘g‘rilanilishi mumkin:

$$E_{sb} = 2.51124 * (k_{sb} * (\varphi - \varphi_0)) * ((r_1 - r_0(1)) + (r_2 - r_0(2))) \quad \text{II.7.}$$



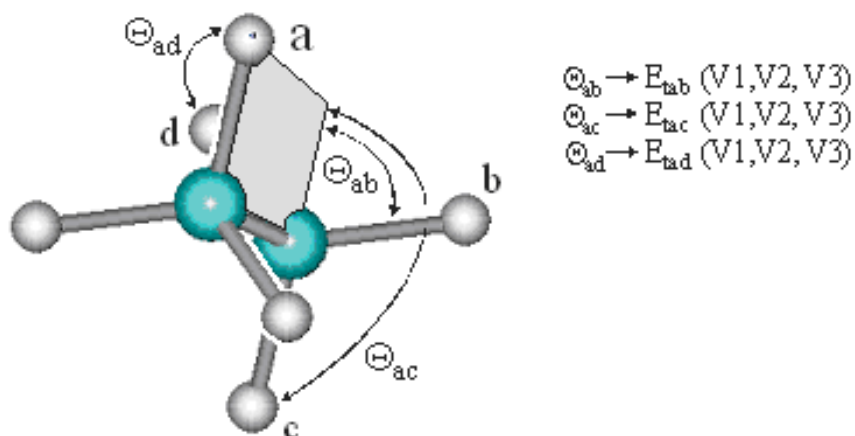
MM dasturlarida E_{sb} -kuchlanishlarini hisoblash uchun valent burchagini hosil qiluvchi atomlar turlariga bog‘liqli k_{sb} parametrlarining juda katta jadvallari keltirilgan. Ko‘p xollarda bu jadvallar E_b potentsiallari parametrlari jadvali bilan birlashtiriladi.

E_t - TORSION TA’SIRLASHISH.

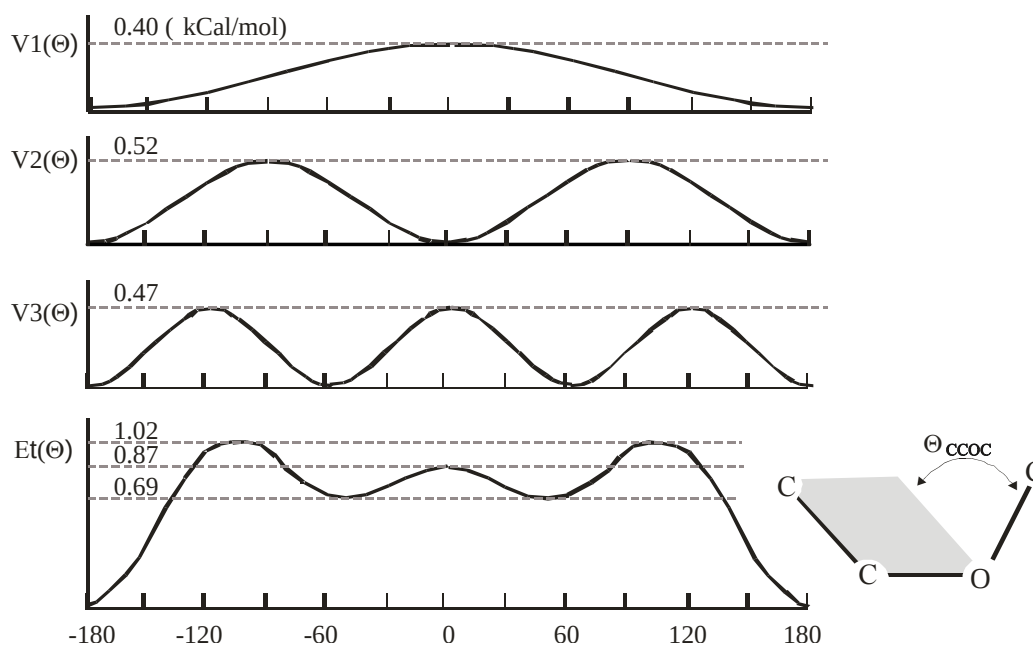
Stereoximiyadan yahshi ma’lumki, ikkita guruhning ularni bog‘lashtiruvchi kimyoviy bog‘lar atrofida (R_a va R_b larning vitsinal joylashishi) aylanishi (burilishi) (masalan R_a va R_b) natijasida bir qancha energetik to‘siq (baryer) kuzatiladi. Bu to‘siqlar $E_t = f(\Theta_{ab})$ potentsial funksiyasi bilan ifodalanadi. Bu yerda

Θ_{ab} – Ra va Rb o‘rindoshlar bog‘lari orasidagi ikki qirrali burchak. Ammo bu energiya uchun asoslangan matematik ifodasi yo‘q. Xar qanday xolatda u empirik ma’lumotlardan tanlangan koefitsiyentlari bilan Furye qatorining qismi turida ko‘rsatilishi mumkin. Odatda Furye qatoridan 3 ta a‘zo qoldiriladi. Qator koefitsiyentlari V1, V2, V3 potentsiallari ifodalanadi Elendjer dasturlarida bu funksiya quyidagicha standart shaklda aniqlanadi:

$$E_t = (V1/2) * (1 + \cos(\Theta_{ab})) + (V2/2) * (1 - \cos(2\Theta_{ab})) + (V3/2) * (1 + \cos(3\Theta_{ab})) \quad \text{II.8.}$$



Ikkiqirrali (torsion) ta'sirlashishning potensial funksiyalarining grafigi



V1 potentsiali to'g'ri to'g'ri qismini tasvirlaydi, V2 va V3 lar esa – uning shaklini to'g'ri to'g'ri. Xaqiqiy hisoblashlarda o'rindoshlarning burilishini, va shuningdek kimyoviy bog'ning teskari tomonidagi boshqa o'rindoshlarga nisbatan ya'ni $V_t(a,b)$, $V_t(a,c)$, $V_t(a,d)$ larni hisobga olish kerak. Bundan tashqari kimyoviy bog'ning bir tomonidagi va ikkinchi tomonidagi barcha o'rindoshlarning ta'sirlashishini jamlash kerak.

Natijada bitta uglerod-uglerod sp^3-sp^3 bog'i atrofida burilishi uchun II.8 turdagi 9 ta funksiyani jamlash kerak, ular torsion burilishining uchta to'g'ri to'g'ri ifodalaydi. sp^3-sp^2 Bog'lari uchun torsion burilishining oltita to'g'ri to'g'ri ifodalaydigan 6 ta funksiyani jamlash kerak. sp^2-sp^2 Bog'lari uchun ikkita bir xil burilish to'g'ri to'g'ri ifodalaydigan 4 ta funksiyani jamlash kerak. Masalan siklogepten molekulasi uchun torsion ta'sirlashish funksiyalarining umumiy soni 52 taga teng. Bu ta'sirlashish kuchlilik xolatda vitsinal yoki 1-3 potentsial deb nomlanadi.

Keltirilgan potentsiallar to'plami analiz qilinayotgan molekulaning 3D strukturasining sifatini qoniqarli baholash uchun yetarli hisoblanadi.

Yuqorida atab o'tilgan potentsiallar ayrim xollarda valent kuch maydoni deb nomlanadi, chunki u valentli bog'langan atomlarning sterik kuchlanishini hisobga oladi. Ammo, hisoblanayotgan tuzilishlarning ularning xaqiqiy geometriyasiga to'g'ri kelishi uchun valentli bog'langan atomlarning fazoviy o'zaro ta'sirlarini ham hisobga olish kerak. Bu molekulaning 3D-strukturasining shakllanish sxemasida kamida yana ikkita (Van der Vaals va elektrostatik o'zaro ta'sirlashish) juda ahamiyatli energetik hissa bo'lib hisoblanadi.

Shuni aytish kerakki Van der Vaals o'zaro ta'sirlashishning hozirgi paytda aniq ta'rifi va shuningdek matematik qiymati yo'q.

Umumiy qabul qilingan qoydalar bo'yicha Van der Vaals o'zaro ta'sirlashish bu tajribada kuzatiladigan (empirik) xodisa hisoblani kvant kimyosi usullari bilan

ta'riflanadigan asosan turtta asosiy ta'sirlashishlarning (elektrostatik, qutiblanish , diffuzion va almashinish ta'sirlashishlar) jami hisoblanadi.

Ularning har biri ancha murakkab ta'riflanadi va ekspress usullarda amaliy ma'lumotlarga yaqinlashtiriladigan ba'zi ta'sirlashish yig'indisi bilan almashtiriladi.

Van der Waals ta'sirlashishlarini hisobga olish uchun Elendjer dasturlarida bu tur ta'sirlashishning eng ommoviy, ayrim 12/6 potentsiali yoki Kolumbik potentsiali deb nomlanuvchi empirik formulasi tanlangan.

$$rv/r < 3.311 \text{ ychyn } E_{vdw} = k_v * (2.9 * 10^5 * e^{(-12.5 * rv/r)} - 2.25 * (rv/r)^6) \quad \text{II.9.}$$

$$rv/r > 3.311 \text{ ychyn } E_{vdw} = 336/176 * k_v * (rv/r)^6$$

*Bunda: rv – ta'sirlosuvchi atomlarning Van der Waals radiuslarining yig'indisiga, k_v – kuch konstantasi, $k_v = \sqrt{E_i * E_j}$ turida hisoblaniladi*

E_i va E_j - i va j atomlari uchun “mustaxkam” parametri

MM dasturi barcha zarur rv , k_v , E_i va E_j jadvallari bilan taminlanadi. Ayrim xolatlarda Van der Waals ta'sirlashish yig'indiga $\geq 1-4$ potentsiali turida belgilanadi.

Elektrostatik ta'sirlashish, Van der Waals ta'sirlashishga asosiy hissa bo'lsa ham mustaqil hisoblanadi va asosan bu ta'sirlashishni qaytalaydi. U kutublangan (polyarlangan) bog'larining dipol-dipolli ta'sirlashish sifatida yoki atomlarning zaryadli ta'siri sifatida hisobga olinishi mumkin.

Aynan MM dasturining opsiyalariga bog'likli bu ta'sirlashishlarning majmuasi bo'lishi mumkin.

Elendjer dasturlarida dipol-dipolli ta'sirlashishi uchun μ_a va μ_b ikkita dipollarning oddiy tasirlashish formulasi qo'llaniladi:

$$E_{dd} = 14/39418 * (\mu_a \mu_b * (\cos(X) - 3\cos(A_a) * \cos(A_b))) * r^3/1.5 \quad \text{II.10.}$$

Bunda: - X - μ_a va μ_b dipollari orasidagi burchak, r – ularning markazlari orasidagi masofa, A_a va A_b – dipollar va ularning markazlarini tutashtiruvchi chiziqli orasidagi burchak.

1.5 Koeffitsiyenti – gaz fazasiga tanlangan, ya'ni vakuumda hisoblash uchun muhitning dielektrik o'tkazuvchanlik parametri. Bu parametr orqali muhitni hisobga olish ham mumkin.

Har xil MM dasturlarida keltirilgan kuch potentsiallari farqlanishi mumkin. Qo'shimcha keltirilgan potentsiallarga ta'sirlashish ruyhatiga molekula9ning spetsifik xususiyatlarini hisobga oladigan xissalar ham kiritilishi mumkin: masalan turta'zoli halkaning mavjudligi, konyugirlangan sistemalardagi (-ta'sirlashishni hisobga olish yoki olmaslik va h.q.).

Barcha keltirilgan energetik xissalarning yig'indisi molekulaning gipotetik 3D-strukturasini ishonchli baholash uchun yetarlidir.

$$E_o = \sum E_i \quad \text{II.11.}$$

Bu qiymatni optimal 3D-geometriyadan chetlashish o'lchovi sifatida yoki muvozanatli stereokimyoviy parametrlardan chetlashish uchun "jarima" deb ta'riflanishi mumkin. Molekulaning optimal 3D-geometriyasi minimal Yeo qiymatiga ega bo'ladi. Bundan geometriyani optimallashtirishning juda oddiy algoritmi hosil bo'ladi: molekulani tuzib uning 3D-strukturasining variantlarini ko'rib chiqish kerak va ularning ichidan minimal Yeo qiymatiga ega geometriyani tanglash kerakki, uning har qanday o'zgarishi Yeo energiyasining faqat oshishiga olib kelish kerak.

XULOSA

MM dasturlarining bunday ko'rinishlari quyidagilarni o'z ichiga oladi:

1. Odatda tajribada aniqlanilgan – **empirik ma'lumotlar**, muvozanatli stereokimyoviy parametrlarining katta kutubxonasi.

2. Sterekimyoviy kuchlanishning barcha xissalarini jamlovchi dastur – **hisoblash dasturi**.

3. Jami kuchlanishni pasaytirish maqsadida molekula geometriyasini modifikatsiyalovchi dastur – **optimallashtirish dastur**.

4. O‘quvchini vazifasi, tegishli qaytnomalarni tuzish va operatorning kompyuter tizimi bilan aloqasini ta’minlovchi dastur – integratsiyalangan qavat. Bitta qobiq bir nechta har xil MM ga va noempirik dasturlarga o‘xshash dasturlar to‘plamini o‘z ichiga olishi mumkin.

Adabiyotlar ro'yxati

1. T.Klark, *Kompyuternaya ximiya*, M., Mir, 1990.
2. V.I.Minkin, B.Y.Simkin, R.M.Minayev, *Teoriya stroyeniya molekul*, M., Vyushaya shkola, 1979.
3. V.F.Traven', *Elektronnaya struktura i svoystva organicheskix molekul*, M., Ximiya, 1989.
4. S.I.Raxmonkulova, IVM RS, *shaxsiy kompyuterida ishlash*, "Shark" NMK-S.PRINT, Toshkent, 1998.
5. M.A. Turabekova, M.G.Levkovich, *Matematicheskoye modelirovaniye stroyeniya ximicheskix soyedineniy i ix reakzionnoy sposobnosti*, T.,Universitet, 2008, 136 s.