

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR
VAZIRLIGI
NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI

Muradov Murodjon

«KIMYODA KOMPYUTER MODELLASHTIRISH»
fanidan

O'QUV-USLUBIY
KO'RSATMA

(60530100 – Kimyo bakalavriyat yo'nalishi talabalari uchun)



Namangan – 2024

Ushbu o'quv-uslubiy ko'rsatma Namangan davlat universiteti ilmiy kengashi tomonidan 2024 yil «28» – iyundagi №16 – sonli buyrug'i bilan tasdiqlangan o'quv dasturi asosida tuzilgan.

Tuzuvchi:

o'qituvchi M.T. Muradov

Taqrizchi:

dotsent G'.U. Siddiqov

1-Mavzu: Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash. Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin).

1832 yilda elektromagnit telegraf aloka kashf etildi. Amerikalik Morze bir-biri bilan bogliq bulmagan holda yozuvchi telegraf apparatini ixtiro 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 Evropa-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 muljkallangan edi. Bu rakam tez orada 50 abonentga etkazildi.

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

1895 yilda 7 may radio ixtiro 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 muljkallangan kulda boshkariladigan telefon stansiyasi ishga tushirilgan.

Komp'yuter - inglizcha so'z bo'lib, u xisoblovchi demakdir. Garchand u xozirda faqat xisoblovchi bo'lmasdan, matnlar, tovush, video va boshqa ma'lumotlar ustida xam amallar bajaradi. SHunga karamasdan xozirda uning eski nomi – komp'yuter saklangan. Uning asosiy vazifasi turli ma'lumotlarni kayta ishlashdan iborat. Avallo shuni aytish lozimki, ko'pchilikning tushunchasida go'yoki biz kundalikda foydalanadigan faqat shaxsiy komp'yuter bor xolos. Bunga albatta sabablar ko'p. SHulardan biri xozirgi zamon shaxsiy komp'yuterlar ilgari

universal deb xisoblangan komp'yuterlardan tezligi va xotira xajmi jixatidan ancha oshib ketganligida bo'lsa, ikkinchi tomondan ko'p masalalarni echish uchun bu komp'yuterlar foydalanuvchilarni qanoatlantirishidir. Xozirda komp'yuter termini ko'p uchrasada, shu bilan birga eXM (elektron xisoblash mashinalari), XM (xisoblash mashinalari) terminlari xam xayotda ko'p ishlatib turiladi. Ammo biz soddalik uchun faqat komp'yuter terminidan foydalanamiz. Komp'yuterlarning amalda turli xillari mavjud: raqamli, analogli (uzluksiz), raqamli-analogli, maxsuslashtirilgan. Ammo, raqamli komp'yuterlar foydalanilishi, bajaradigan amallarning universalligi, xisoblash amallarining aniqligi va boshqa ko'rsatkichlari yukori bo'lgani uchun, ular ko'proq foydalanilmoqda. Amalda esa xozir rivojlangan mamlakatlarda komp'yuterlarning besh guruxi keng ko'llanilmoqda.

Zamonaviy kompyuterlar sinflari

Komp'yuterlarni xotirasining xajmi, bir sekundda bajaradigan amallar tezligi, ma'lumotlarning razryad to'rida (yacheykalarda) tasvirlanishiga qarab, besh guruxga bo'lish mumkin:

- super komp'yuterlar (Super Computer);
- katta komp'yuterlar (Manframe Computer);
- mini komp'yuterlar (Minicomputer);
- shaxsiy komp'yuterlar (PC-Personal Computer);
- bloknout(noutbook) komp'yuterlar.

SHuni qayd qilish lozimki, superkompyuterlarning ma'lum yo'nalish masalalarini echishga qaratilgan turlari xam mavjud.

Katta kompyuterlar (Manframe Computer)- fan va texnikaning turli soxalariga oid masalalarni echishga mo'ljallangan. Ularning amal bajarish tezligi va xotira xajmi superkompyuterlarnikiga qaraganda bir-ikki po'fona past. Bularga misol sifatida AQSHning CRAY (krey), IBM 390, 4300, IBM ES / 9000, Fransiyaning Borrous 6000, Yaponiyaning M1800 rusumli kompyuterini va boshqalarni misol qilib keltirish mumkin. Minikompyuterlar (kichik kompyuterlar) xajmi va bajaradigan amallar tezligi jixatidan katta kompyuterlardan kamida bir po'fona pastdir. SHuni aytish joizki, ularning gabariti (xajmi) tobora ixchamlashib, xatto shaxsiy kompyuterdek kichik joyni egallaydiganlari yaratilmoqda. Bunday kompyuterlar turkumiga ilk bor yaratilgan PDP-11 (Programm Driver Processor - dasturiy boshqaruv protsessori) turkumini, ilgari xarbiy maqsadlar uchun ishlatilgan(maxfiy xisoblangan) VAX, SUN turkumli kompyuterlar, IBM 4381, Hewlett Packard firmasining HP 9000 va boshqalar minikompyuterga misol bo'la oladi. SHuni aytish joizki, minikompyuterlar o'zlarining «katta ofalari» Manframe kompyuterlarni imkoniyatlari darajasiga ko'tarilib bormoqda. Buning uchun tarixga nazar solish va xozirgi ularning taraqqiyotini kuzatish etarli.

SHaxsiy kompyuterlar xozirda korxonalar, muassasalar, oliy o'quv yurtlarida keng tarqalgan bo'lib, ularning aksariyati IBM rusmiga mos kompyuterlardir.

SHaxsiy kompyuter

Bular IBM, Compaq, Hewlett-Packard, Packard Bell, Toshiba, Apple, Siemens Nixdors, Acer, Olivetti, Gateway, SUN va boshqa firmalardir. SHuni

aytish joizki, yuqorida nomlari zikr etilgan firmalar ishlab chiqargan kompyuterlar (bradenname) - «Oq yasalgan», Janubiy-SHarqiy mamlakatlarda: Malayziya, Xitoy, Tayland, Koreya va boshqa mamalakatlarda yuqorida nomlari keltirilgan firmalar litsenziyasi asosida ishlab chiqarilgan kompyuterlar «Sariq yasalgan» nomga ega. Firma nomlari ko`rsatilmagan kompyuterlar esa «nomsiz kompyuterlar» (noname)deb yuritiladi. Ayniqsa, keyingi gurux kompyuterlarni sotib olishda ular yaxshi tekshiruvdan (testlar yordamida) o`tkazilishi lozim. SHaxsiy kompyuterlar uchun uning muxim ko`rsatkichi ishlash kafolatining (kamida uch yil) bo`lishi muxim. SHu bilan birga, bunday kompyuterlarni sotib olganda litsenzion programma ta`minoti va tegishli adabiyotlar bilan birga berilish imkoniyati mavjudligi nazarda tutilishi kerak.

Noutbuk kompyuterlar. Noutbuk kompyuterlar xajmi ancha ixcham bo`lib, ammo bajaradigan amallar soni, xotira xajmi shaxsiy kompyuterlar darajasiga ko`tarilib bormoqda. Ularning qulaylik tomonlaridan biri xam elektr energiyasidan va ichiga o`rnatilgan batareyalarda xam uzluksiz (batareyani xar safar almashtirmasdan) ishlash mumkinligidir.

Bunda batareya quvvati energiyaga ulanishi bilan o`zi zaryad ola boshlaydi va u batareya bir necha yillarga mo`ljallangan bo`ladi. Xozirda bunday noutbuklarni IBM, Compaq, Acer, Toshiba va boshqa firmalar ishlab chiqarmoqda. Tabiiyki, bunday kompyuterlar o`z imkoniyatlari nuqtai nazaridan shaxsiy



kompyuterlarga tenglashayotganini nazarda tutilsa, uning narxi baland bo`lishini sezish qiyin emas. Bundan tashqari, bunday rusumli kompyuterlar 8-10 yil mobaynida buzilmasdan ishlash qobiliyatiga ega. Ular shaxsiy kompyuterlar uchun yaratilgan operatsion sistemalar MS DOS, qobiq programmalar, Windows ning oxirgi versiyalarida va boshqa operatsion sistemalar boshqaruvida ishlaydi.

Noutbuk kompyuteri



CHo`ntak kompyuteri

Xozirda noutbuk kompyuterlaridan xam ixcham cho`ntak kompyuterlari xam ishlab chiqilmoqda. Ular xam tabiiyki, operatsion sistema boshqaruvida ishlaydi va ular turli soxa masalalarini echishga qodir.

Kompyuterning ishlash printsipti va tashkil etuvchilari

Ixtiyoriy kompyuterni ishlash printsiptini birinchi bo`lib ingliz olimi CHarlz Bebich va uning g`oyasini mukammallashgan ko`rinishini Djon Fon Neyman taklif qilgan. Uning printsipti programma asosida boshqariladigan avtomatik ravishda ketma-ket ishlash foyasidan iborat. Xozirda ko`p rusmli kompyuterlar shu foya asosida ishlaydi. Lekin keyingi paytlarda ko`p protsessorli kompyuterlar, ya`ni bir vaqtda programmaning bo`laklarini ketma-ket emas, parallel bajaradigan kompyuterlar xam yaratilganligini eslatib o`tish joizdir. SHunday qilib, kompyuter avvaldan tuzilgan programma asosida ishlaydi. O`z navbatida programma qo`yilgan masalani kompyuterda echish uchun qandaydir programmalash tilida yozilgan buyruqlar (operatorlar) ketma-ketligidir. Programmalash tilida tuzilgan programmalar maxsus tarjimon programmalar yordamida kompyuter tiliga o`tkaziladi. Kompyuter tili 0 va 1 lardan tashkil topgan, ma`lum qoidalar asosida

yoziladigan ketma-ketliklardan iborat. Djon Fon Neyman printsipli bo'yicha avtomatik ravishda bajariladigan programma avval kompyuterning xotirasiga kiritiladi (yuklanadi). Xotirada turgan programma asosida programmani tashkil etuvchi xar bir operator ketma-ket bajariladi.

Boshqaruv qurilmasi deb ataluvchi maxsus qurilma xozir qanday operator bajarilishi va undan keyin qaysi operator bajarilishi ustidan nazorat o'rnatadi va uni bajarilishini ta'minlaydi. Amal (arifmetik-mantiqiy) esa protsessor deb ataluvchi qurilmada bajariladi. Programma ishlash natijasi to'rtidan-to'rti ekranda yoki tashqi qurilma (chop qiluvchi mexanizm, grafik chizuvchi qurilma, video qurilma va boshqalar) deb ataluvchi qurilmada ko'rilishi mumkin. Odatda kompyuter ikki qismdan: Hardware (kompyuterni tashkil etuvchilari - *kompyuterning qattiq qismlari*) va Software (kompyuterning programma ta'minoti - *kompyuterning yumshoq qismlaridan*) tashkil topgan deyiladi.

SHaxsiy kompyuterlarning tuzilishi

SHaxsiy kompyuterlar (inglizcha Personal Computers, qisqacha- PC) quyidagi qurilmalardan tashkil topgan:

- sistema bloki;
- monitor;
- klaviatura;
- sichqoncha;
- tashqi qurilmalar.

Windowsda sonlarni kiritish klaviaturasini sichqoncha o'rnida ishlatish mumkin.

SHaxsiy kompyuterning tuzilishi

1	Klavushlar	Vazifalari
2	Power	Kompyuterni o'chirish va yoqish
3	Sleep	Vaqtincha kompyuter dam oldirish (uxlatmoq)
4	Wake up	Vaqtincha to'xtatilgan kompyuterni ishga tushirish (uyg'atmoq)
5	Reset	kompyuterni qayta ishga tushirish
6	Esc	Buyruqlarni inkor etish
7	F1	Word dasturi xaqida yordamchi malumot
8	F4	Oxirgi bajarilgan amalni takrorlash
9	F5	Kerakli saxifaga bir martada o'tish
10	F7	So'zlarni to'gri monosini taminlash
11	F8	2-3 marta bosish natijasida barchasini blokga olish
12	F10	Word menyulariga chikish
13	F11	Redaktor formula yozilgan qatorga o'tish
14	F12	YAngi nom bilan saqlash
15	Prt Sc SysRq	Ekranni xotiraga olish
16	Scrol lock	Qo'shimcha imkoniyat yaratish
17	Pause Break	Vaqtincha to'xtatish

18	Tab	Kursorni sakratish yoki bir abzats joy ajratish
19	CapsLock	Katta yoki kichik xarflarda yozish (yoniq bo`lsa katta xarfda, o`chik bo`lsa kichik xarflarda yozadi)
20	Shift	Tugmachalarni vazifasini o`zgartirish (qo`shimcha tugmachalar)
21	Ctrl	Tugmachalarni vazifasini o`zgartirish (qo`shimcha tugmachalar)
22	Pusk	Start komandasini berish
23	Alt	Dastur menyusiga chiqish
24	Proble	Bo`sh joy tashlash (kursor turgan joydan boshlab surish)
25	Enter	YAngi satrga o`tkazish yoki buyruqni bajarish
26	Baskpace	Kursor turgan joydan boshlab chap tomondagi belgini o`chirish
27	Insert	Kursor oldida turgan belgini o`chirib yoki surib yozish
28	Delete	Kursorni o`ng tomonidagi belgini o`chirish (o`chirish)
29	Home	Satr boshiga kursorni o`tkazish
30	End	Satr oxiriga kursorni o`tkazish
31	Page up	Bir saxifa yuqoriga o`tish
32	Page Down	Bir saxifa pastga o`tish
33	Num lock	YOrdamchi klavaturani ishga tushirish
34	Ctrl+Esc	(Pusk) Start komandasini berish
35	Ctrl+F1	Dasturi xaqida yordamchi malumot
36	Ctrl+F2	Pechatga chikarishdan oldingi xolatni ko`rish (Predvaritelniy prosmotr)
37	Ctrl+F4	Dastur oynasini yopish (Ctrl +W)
38	Ctrl+F5	Dastur oynasini kichik xolatga keltirish
39	Ctrl+ F6	Word dokumentlarini ishlayotgani dasturlarni almashtirish
40	Ctrl+F9	Sistemali qavs ochish
41	Ctrl+F10	Word oynasi katta va kichik xolatga keltirish
42	Ctrl+F12	Xotiradagi papka va fayllar ro`yxatini ochish
43	Ctrl+Tab	Kursor tugan joydan surish
44	Ctrl+Shift	Russkiy Angliyskiy tillarga o`tkazish (bazi kompterlarda)
45	Ctrl+Shift+F	Instrumentlar panelidagi “SHrift” bo`limiga chiqish
46	Ctrl+Shift+P	Instrumentlar panelidagi “SHrift razmeriga” bo`limiga chiqish
47	Ctrl+Q	Kursorni chap chekkaga surish
48	Ctrl+W	Word oynasini yopish
49	Ctrl+E	Kursorni o`rtaga surish
50	Ctrl+R	Kursorni o`ng chekkaga surish
51	Ctrl+T	Lineykani ko`rsatkichini o`nga surush
52	Ctrl+y	Lineykani ko`rsatkichini o`nga surush

53	Ctrl+U	YOzuvni tagiga chizish
54	Ctrl+I	Qiya xolatda yozish
55	Ctrl+O	Xotiradagi papka va fayllar ro`yxatini ochish
56	Ctrl+P	Pechatga chiqarishga buyruq berish
57	Ctrl+A	Matnni xammasini belgilash
58	Ctrl+S	Saqlash
59	Ctrl+D	SHrift oynasini chiqarish
60	Ctrl+F	Matndagi kerak bo`lgan so`zni yoki belgini topish (izlash)
61	Ctrl+G	Izlash va almashtirish oynasini chiqarish
62	Ctrl+H	Matndagi so`z yoki belgini almashtirish (zamenit)
63	Ctrl+K	Biror bir so`zga faylni bo`rlash (Giperssilka)
64	Ctrl+Z	Oldinga xolatga o`tish (otmenit)
65	Ctrl+X	Belgilangan joyni qirqish
66	Ctrl+C	Belgilangan qismini xotiraga olish
67	Ctrl+V	Xotiraga olingan matnni ko`rsatilgan joyga tashlash
68	Ctrl+B	YOzuvlarni qalinlashtirish (Polujirniy)
69	Ctrl+N	YAngi dokument ochish
70	Ctrl+M	So`z yoki belgini kursor turgan joydan bir xilda o`nga surish
71	Ctrl+ Enter	YAngi saxifaga o`tish
72	Ctrl+ Delete	Kursor turgan joydan o`ng tomondagi bir so`zni o`chiradi
73	Ctrl+ End	Kursorni saxifa oxiriga o`tkazish
74	Ctrl+ Home	Kursorni saxifa boshiga o`tkazish
75	Ctrl+Insert	Belgilangan qismni doimiy xotiraga olish
76	Ctrl+1	Qator oralgida bir interval joy ajratish
77	Ctrl+2	Qator oralgida ikki interval joy ajratish
78	Ctrl+5	Qator oralgida bir yarim interval joy ajratish
79	Ctrl+Alt+ Delete	Kompyuterni qayta ishga tushirish (Perezagruzka)
80	Alt+Esc	xujjatdan chiqib ketish
81	Alt+F1	Redaktor formula yozilgan qatoga o`tish
82	Alt+F4	Word dasturdan chiqish
83	Alt+F5	Ekranni qisqartirish
84	Alt+F6	Ochilgan xujjatlarga o`tish
85	Alt+F7	Kursor turgan so`zni xatoligini tekshirish
86	Alt+F8	Makros
87	Alt+F10	Ekranni katta va kichik xolatga o`tkazish
88	Alt+F11	Microsoft Visual Basic ga o`tish
89	Alt+Tab	Dasturdan dasturga o`tish
90	Alt+Shift yoki Ctrl+Shift	Tillarni almashtirish (En,Russ,O`z)
91	Alt+Proble	Word oynasini chap yuqorisidagi svernut, vosstanovit,zakrit menyusini chiqarish

92	Alt+F	Fayl menyusiga chiqish
93	Alt+P	Pravka menyusiga chiqish
94	Alt+V	Vid menyusiga chiqish
95	Alt+A	Vstavka menyusiga chiqish
96	Alt+M	Format menyusiga chiqish
97	Alt+E	Servis menyusiga chiqish
98	Alt+T	Tablitsa menyusiga chiqish
99	Alt+O	Okno menyusiga chiqish
100	Alt+S	Spravka menyusiga chiqish
101	Alt+G	Avtofiguralar bilan ishlash
102	Ctrl+ Shift+P	Bir martada shriftga chiqish
103	Ctrl+ Shift+A	Kichik xarfdan yozilgan soʻzlarni bir martada katta xarflarga oʻtkazish
104	Ctrl+ Shift+Enter	Kursor tugan joydagi soʻzni yangi saxifaga tushirish

2-mavzu: Xromofor tutgan birikmalarni topish va UB – spektrini hisoblash. Tajribada olingan UB – spektri bilan taqqoslash.

Elektromagnit spektrining UB sohasi toʻlqin uzunligi qiymatlari bilan bir-biridan farq qiladigan ikki xil sohachalarga, yaʼni uzoq UB va yaqin UB sohachalarga boʻlinadi. Uzoq sohadagi toʻlqin uzunligining qiymati 190 nm dan kichik boʻlib, uning oxirgi kichik qiymati rentgen nurlarining sohasiga yaqinlashadi. Yaqin UB sohaga tegishli boʻlgan toʻlqin uzunlikning qiymati 190 nm dan yuqori boʻlib 450 nm gacha boʻlgan sohaga ega.

Amaliyotda organik moddalar tuzilishini oʻrganishda yaqin UB soha keng miqyosda ishlatiladi. Bu sohada yutilishning sodir boʻlishiga asosiy sabab, molekulalarda toʻyinmagan guruxlar, hamda taqsimlanmagan elektronlari boʻlgan atomlarning boʻlishidir. Yaqin UB sohasida yutilish maksimumini beradigan guruxlarga xromoforlar deb aytiladi.

Agar molekulada xromoforlar koʻp miqdordagi boshqa xromoforlar bilan bogʻlangan boʻlsa yutilish maksimumining qiymati katta toʻlqin uzunlikdagi sohaga siljiydi, shuning uchun ham bunday tuzilishdagi birikmalar koʻp hollarda rangli boʻlib, yutilish maksimumini koʻzga koʻrinadigan sohada ($\lambda=450-850$ nm) namoyon qiladi.

Elektronlarning energetik pogʻonalari va oʻtish holatlari

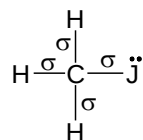
Maʼlumki, yadro atrofidagi elektronlar energetik pogʻonalarda joylashib orbitalga ega boʻladi va oʻziga xos energiyaga ega boʻlgan bunday orbitallarni $1s, 2s, 2p, 3s, \dots$ deb belgilanadi. Elektronlar spinga ega, yaʼni ular oʻz oʻqi atrofida aylanadi, uning spin soni $S=1/2$ ga teng boʻladi. Bu qiymat bitta proton spinining qiymatiga teng, demak elektron ham protonga oʻxshab ikkita spin holatida boʻladi ($\uparrow$). Pauli qonuniga asosan atom orbitalidagi elektronlar qarama-qarshi spinga ega boʻlgan ikkita elektrondan iborat boʻlganida orbital toʻliq toʻldirilgan hisoblanadi.

UB nuri taʼsirida elektronlardan birini yuqoriroq orbitalga oʻtkazish mumkin, buning natijasida UB va koʻrinuvchi sohada spektrlarning kuzatilishi roʻy beradi.

Kimyoviy bogʻning hosil boʻlishida qatnashmaydigan elektronlar atomlarda ham molekulalarda ham bir xilda joylashgan boʻladi. Kimyoviy bogʻ hosil boʻlishida qatnashadigan elektronlar esa molekulada atomlardagi elektronlardan keskin farq qiladi, yaʼni ikki atom juftini bogʻlovchi j va j^* molekulyar orbitallar ikkita atom orbitallarining birlashishidan hosil boʻladi. Toʻyingan uglevodorodlardagi uglerod-vodorod bogʻining hosil boʻlishidagi bogʻlovchi elektronlar molekulyar orbitallarda joylashgan boʻlib, ular vodorod atomining $1s$ orbitalidan va uglerod atomining sp^3 gibrid orbitalidan tashkil topadi.

CH_4 molekulasida toʻrtta oddiy s bogʻlardan tashkil topgan boʻlib, bu bogʻlarning hosil boʻlishida qatnashadigan elektronlarni quyi pogʻonadan yuqori pogʻonaga oʻtkazish uchun juda katta energiya sarf qilinadi. Bu elektron oʻtishni $\sigma \rightarrow \sigma^*$ deb va unga tegishli boʻlgan yutilish uzoq UB soha (120 nm) da namoyon boʻladi. Bu sohani amaliyotda oʻrganish imkoniyati yoʻq va shuning uchun toʻyingan uglevodorodlar UB spektri yordamida deyarli oʻrganilmaydi.

Agar toʻyingan uglevodoroddagi bitta vodorod atomini oʻzida kimyoviy bogʻ hosil boʻlishida qatnashmagan elektron tutgan oʻrinbosar bilan almashtirilsa, bu molekulada boshqacha elektron oʻtish roʻy beradi. Masalan, metilyodid molekulasida bogʻlangan va bogʻlanmagan orbitallar asosan toʻldirilgan, ammo σ^* orbital egallanmagan, shuning uchun bogʻlanmagan orbitaldan bitta elektron σ^* orbitalga oʻtishi uchun $\sigma \rightarrow \sigma^*$ oʻtishdan farqli, $n \rightarrow \sigma^*$ oʻtish kamroq energiya talab qiladi, shuning uchun ham yutilish $\sigma \rightarrow \sigma^*$ oʻtishdagi yutilishga nisbatan katta toʻlqin uzunlikdagi soha ($\lambda = 259$ nm)da namoyon boʻladi.



Olefin uglevodorodlardagi elektron oʻtishlarda oddiy bogʻlarni hosil qiluvchi elektronlarga nisbatan kamroq energiyaga ega boʻlgan π -elektronlar bir pogʻonadan ikkinchi pogʻonaga oson oʻtadi, bu oʻtish uchun kam energiya sarf boʻladi va uni $\pi \rightarrow \pi^*$ elektron oʻtish turi sifatida koʻrsatiladi. $\pi \rightarrow \pi^*$ elektron oʻtishga tegishli boʻlgan yutilish maksimumi katta toʻlqin uzunlik sohasida namoyon boʻladi.

Agar molekulalardagi funktsional guruxlarda qoʻshbogʻ hamda taqsimlanmagan juft elektronlari boʻlgan geteroatomlar boʻlsa, bunday guruxlar uchun $\pi \rightarrow \pi^*$ elektron oʻtishga nisbatan geteroatomdagi taqsimlanmagan elektronlarning oʻtishi ahamiyatli boʻlib, uni $n \rightarrow \pi^*$ oʻtish sifatida izohlanadi, bu jarayonning kuzatilishi uchun esa kam energiya sarf boʻladi. Bu elektron oʻtishga tegishli boʻlgan yutilish maksimumi kichik intensivlik bilan boshqalardan farq qiladi. Elektron oʻtishlarni energiyasi boʻyicha quyidagicha ifodalash mumkin:

Amaliyotda asosan ahamiyatga ega boʻlgan elektron oʻtishlarga $\pi \rightarrow \pi^*$, $n \rightarrow \pi^*$, va ayrim $n \rightarrow \sigma^*$ larni koʻrsatish mumkin. Ultrabinafsha spektrining

maksimum qiymatlarini namoyon bo'lishida molekuladagi elektronlarning bir atomdan ikkinchi atomga ko'chishi - lokallanish (benzol) va delokallanish holatlari (piridin) ham katta ahamiyatga ega.

Xromofor guruxi tutgan organik moddalarning UB spektrlari

O'rganilayotgan modda UB sohada yutilish maksimumiga ega bo'lmasa tarkibida dien, polien sistemalarining, aromatik xalqa va karbonil guruxi yo'qligini bilishi mumkin.

Molekulada bitta qo'shbog' yoki uch bog' bo'lsa, ularga tegishli bo'lgan $\pi \rightarrow \pi^*$ elektron o'tish maksimumining qiymati 200 nm dan kichik qiymatli sohada namoyon bo'ladi, shuning uchun bunday birikmalar amaliyotda UB spektri bilan o'rganilmaydi, ammo qo'shbog'lar sonining ortib borishi molekulada yutilish maksimumlarini katta to'lqin uzunlik sohada namoyon bo'lishiga sababchi bo'ladi.

Kon'jugirlangan bog'li dienlar uchun $\pi \rightarrow \pi^*$ o'tishga tegishli bo'lgan yutilish 215-270 nm oralig'ida sodir bo'lib, spektr maksimumining qiymatlari dien tuzilishiga ham bog'liq bo'ladi. Agar dien trans-konformatsiyali tuzilishda bo'lsa, uning yutilish maksimumi tsis-konformatsiyalinikidan kichikroq qiymatli sohada namoyon bo'ladi. Molekulada qo'shbog'larning joylashishiga qarab izomer birikmalarni bir-biridan farq qilish mumkin. Masalan,



$$\lambda_{\text{max}} < 200 \text{ nm}$$



$$\lambda_{\text{max}} = 258 \text{ nm} (\epsilon 7200)$$

Xalqali dien sistemalarning yutilish maksimumlari qo'shbog'larning bir-biriga nisbatan qanday joylashishiga hamda xalqaning tuzilishiga bog'liq bo'ladi (jadval).

Ayrim dien birikmalarining UB sohada yutilish maksimumlari

jadval.

Birikmalar	Tuzilishi	λ_{maks} nm
1. 3-metilentsiklopenten-1		234
2. TSiklopentadien-1,3		240
3. 1,2-dimetilentsiklopentan		243
4. 3-metilentsiklogeksen-1		231
5. TSiklogeksadien		258
6. 1,2-dimetilentsiklogeksan		243
7. TSiklogeptadien		248

Dien birikmalarning UB sohadagi yutilish maksimumlar qiymatlariga molekuladagi alkil radikali va qo'shni xalqadagi guruxlarning soni taʼsir qiladi. Buni hisobga olib ayrim moddalarning yutilish maksimumlarini Vudvord formulasi yordamida hisoblash chiqarish mumkin.

$$\lambda_{\text{maks.}} = 217 + 5A + 30V + 5C$$

217 - butadienning yutilish maksimumi

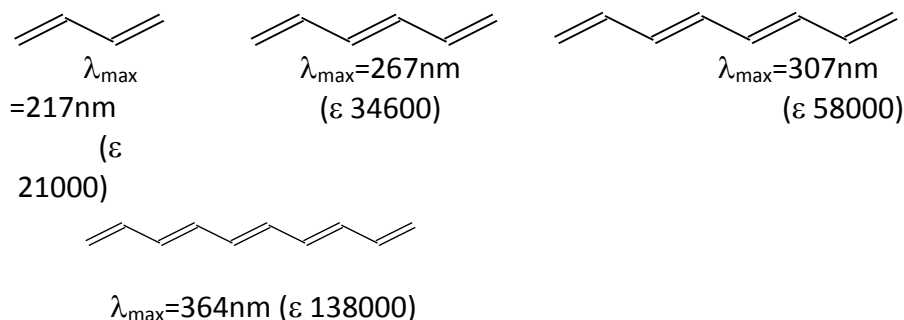
A - alkil guruxlar soni

V - konʼyugirlangan qo'shbog'lar soni

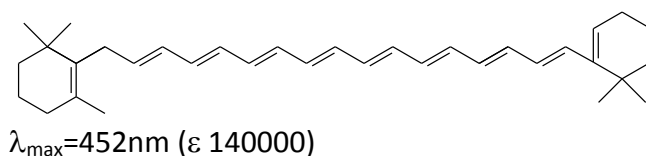
S - ekzoxalqali qo'shbog'lar soni

Qo'shbog'dan alohida joylashgan alkil guruxi moddaning UB sohadagi yutilish maksimumiga taʼsir qilmaydi; dien sistemaning birinchi yoki to'rtinchi holatida joylashgan alkil guruxi **bataxrom siljishni**, ya'ni kichik to'liqin uzunlik sohadan katta to'liqin uzunlik sohaga (7-10 nm gacha) o'tishni hosil qiladi, ikkinchi yoki uchinchi holatdagisi esa 3-4 nm gacha siljishga olib keladi. Vudvord formulasi asosida dienlar uchun hisoblab topilgan yutilish maksimumining qiymati amalda topilganidan ± 5 nm ga farq qiladi.

Molekulada konʼyugirlangan qo'shbog'lar sonining oshishi UB sohada bataxrom siljishga sababchi bo'ladi. Zanjirga har bir yangi qo'shbog'ning kiritilishi yutilish maksimumining qiymatini avvalgisiga nisbatan o'rtacha taxminan 40 nm ga oshiradi.



Molekulada konyugirlangan qo'shbog'lar sonini yanada oshib borishi yutilish maksimumini ko'rinuvchan sohaga siljitadi, bunday moddalar rangli ko'rinishda bo'ladi. Masalan, β -karotin tuzilishini misol qilib ko'rsatish mumkin.



Demak, moddalarning UB sohada yutilish maksimumi asosida molekula tarkibida polien sistema borligini va konʼyugirlangan qo'shbog'larning sonini aniqlash mumkin.

Tarkibida karbonil guruxi tutgan moddalar - alʼdegidlar, ketonlar uchun yutilish maksimumi 275-290 nm. ni tashkil etadi va yutilish $n \rightarrow \pi^*$ elektron o'tishga tegishli hisoblanadi. By o'tish simmetriya bo'yicha taʼbiqlangan bo'lgani

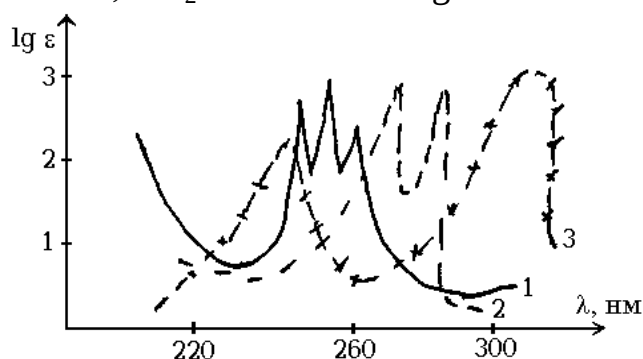
uchun maksimum intensivligi kichik bo'ladi ($\epsilon=15-20$). Aldehid va ketonlar yutilish maksimumining qiymatiga erituvchining tabiati taʼsir qiladi. Karbonil guruxi bilan vodorod bog' hosil qiluvchi erituvchilar ($>S=O \dots N-O-R$) yutilish maksimumining qiymatini kichik to'lqin uzunlik sohaga (**gipsoxrom**) siljishiga sababchi bo'ladi, chunki vodorod bog'ining hosil bo'lishi p-orbitalning energetik holatini kamaytiradi.

Kislotali muhitda $n \rightarrow \pi^*$ elektron o'tish maksimumi kuzatilmaydi, chunki bu sharoitda karbonil guruxidagi kislorodning taqsimlanmagan elektronlari kislotaning vodorod ionlari bilan bog'lanib qoladi, ya'ni protonlanish hodisasi ro'y beradi. Karbonil guruxiga tegishli bo'lgan maksimum asosan katta to'lqin uzunligidagi sohada namoyon bo'ladi.

To'yinmagan aldehid va ketonlar UB sohada yuqori intensivlikdagi $\pi \rightarrow \pi^*$ va kamroq intensivlikdagi $n \rightarrow \pi^*$ elektron o'tishlarga tegishli yutilish maksimumlarini namoyon qiladi. Karbonil guruxiga tegishli bo'lgan $n \rightarrow \pi^*$ elektron o'tish to'yingan aldehid va ketonlarga nisbatan to'yinmagan birikmalarda katta qiymatli to'lqin uzunlik sohasida yutilish maksimumini hosil qiladi.

Aromatik va geterxalqali birikmalarning UB spektrlari

Aromatik birikmalardan benzol UB sohada ikkita maksimumni - $\lambda_{\text{maks}}=200$ nm (ϵ 8000) va $\lambda_{\text{maks}}=255$ nm (ϵ 200) hosil qiladi, xalqadagi o'rinbosar tabiati ham maksimumga taʼsir etadi, masalan, alkil radikali +6 nm, galogen +9 nm, ON, OSN₃ +15 nm, NH₂ bo'lsa +25 nm ga maksimumni oshiradi (rasm).



Rasm. Benzol va uning hosilalarining UB spektrlari: 1-benzol; 2-fenol; 3-anilin.

Agar benzol xalqasidagi o'rinbosarlar soni ikkita bo'lsa, yutilish maksimumlari o'rinbosarlarning bir-biriga nisbatan xalqada joylashishiga va o'rinbosar elektrono-donor yoki elektrono-aktseptorligiga ham bog'liq bo'ladi. Orta va meta izomerli benzol hosilalarining UB spektrlari bir-biriga o'xshash, ammo para-izomerlarniki esa ulardan keskin farq qilib, bitta intensiv yutilish maksimumini namoyon qiladi.

Benzol hosilalarining UB-yutilish maksimumlari.

Jadval.

R	Ikkinchi yutilish maksimumi, λ_{maks}	ϵ -intensivlik	Uchinchi yutilish maksimumi, λ_{maks}	ϵ -intensivlik
N	203	74000	256	200
SN	206	7000	261	225
F	204	8000	248	500
Cl	210	7400	264	190
Br	210	7900	261	192
OH	211	6200	270	1450
SH	236	8000	271	630
NH	230	8600	280	1430
CH=CH ₂	244	12000	282	750
NO ₂	259	8000	-	-
OCH ₃	217	6400	269	1480
COOH	230	11600	273	970

Kondensirlangan aromatik birikmalarning UB sohadagi yutilish maksimumining intensivligi yuqori bo'lib, ularda benzolga nisbatan bataxrom siljish namoyon bo'ladi. Masalan, naftalin λ_{maks} 221 nm (ϵ 117000), 275 nm (ϵ 10000), 297 nm (ϵ 650), antratsen λ_{maks} 251 nm (ϵ 200000), 265 nm (ϵ 7500).

Organik moddalarning UB yutilishidagi ma'lumotlar

Jadval

Maksimumlar soni	Maksimumlar parametrlari λ (ϵ)	Molekula tuzilishi haqida xulosa
0	-----	Xromofor guruxlar yo'q
1	200-225 nm (10000-15000)	α, β -to'yinmagan karbon kislotalari va hosilalari.
	215-235 nm (10000-20000)	Xalqali va ochiq zanjirli dien birikmalar (trans izomer)
	240-270 nm (3000-8000)	TSis konfiguratsiyali xalqali dien
	275-290 nm (15-25)	To'yingan alʼdegid yoki keton
	270-370 nm (50000-150000)	Tarkibida 3-6 konʼyugirlangan qo'sh bog'li polien
	400-470 nm (150000-180000)	Tarkibida 7-12 konʼyugirlangan qo'sh bog'li polien
	200-230 (7000-9000) 260-280 (200)	Benzol hosilalari

2	200nm (500) 276-280 nm (20) 240-230 nm (1200-20000) 320-340 nm (20-40)	α,β -to'yinmagan aldegid yoki keton nitrobirikmalar
3	221 nm (117000), 275 nm (10000), 297 nm (650)	Ko'p xalqali aromatik birikmalar (naftalin, antratsen va boshqalar)

To'yinmagan geteroxalqali birikmalarning UB spektrlari xalqaning tuzilishiga bog'liq bo'lib, besh aʼzoli bunday birikmalarda elektron o'tishga tegishli maksimum kuzatilmaydi, chunki geteroatomdagi taqsimlanmagan elektronlar jufti xalqadagi qo'shbo'g'ning p elektronlari bilan o'zaro tasirida bo'ladi (delokallanish). Ayrim geteroxalqali birikmalarning UB sohadagi yutilish maksimumlari quyidagi qiymatlarda bo'ladi:

Jadval

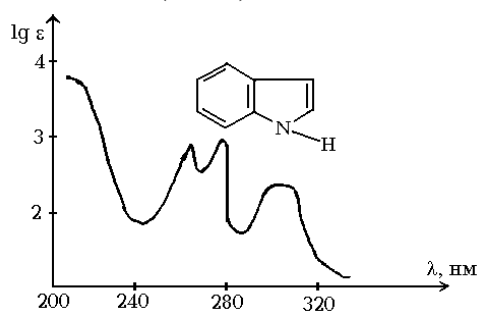
Ayrim birikmalarning UB sohadagi yutilish maksimumlari

	λ_{maks} (geksan)		ϵ	
Furan	200,	252	10000,	1,0
Tiofen	- ,	235	- ,	4500
Pirrol	210,	350	15000,	300
Piridin	195,	250	7500,	2000
Xinolin	275,	311	4500,	6300

Keltirilgan maʼlumotlar to'yinmagan geteroxalqali birikmalarning UB sohada yutilish maksimumlari benzol molekulasiyining yutilishiga yaqinligidan dalolat beradi.

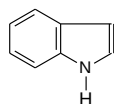
Agar geteroxalqali birikmalar qo'shbo'g' tutgan birikmalar bilan bog'langan bo'lsa, bataxrom siljishni kuzatish mumkin.

Agar benzol xalqasi besh xalqali geteroatom tutgan birikma bilan kondensirlangan bo'lsa, masalan indol sistemasida, ikkita yutilish maksimumi namoyon bo'ladi (rasm).

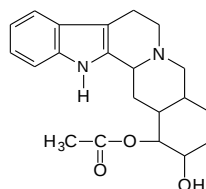


Rasm. Indolning UB spektri.

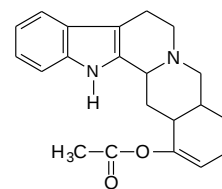
Indol molekulasiyaga tegishli bo'lgan yutilish maksimumlaridan tabiatda ko'p tarqalgan va katta sinfni tashkil qiladigan indol alkaloidlarining tuzilishini aniqlashda ishlatish mumkin.



Indol
 $\lambda = 225$ (e 2500)
 $\lambda = 270$



Alloioximbin
 $\lambda = 225$ (e 3290)
 $\lambda = 290$ (e 5540)

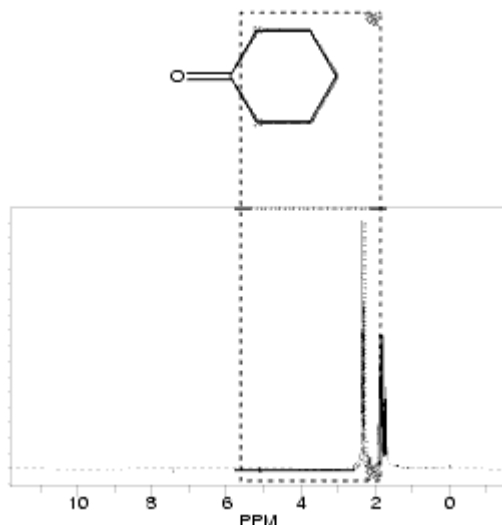


Aymalitsin
 $\lambda = 225$ (e 4900)
 $\lambda = 270$ (e 6750)

Aymalitsin alkaloidining UB spektrida $\lambda=225$ nm maksimumi va e qiymatining yuqori bo'lishiga asosiy sabab CH_3COO guruxi yon tomonida qo'shbog'ning borligi deb hisoblash mumkin.

3-Mavzu: ChemOffice dasturida birikmalarni nomlash, ^{13}C , YaMR, PMR spektrlarini hisoblash

1. Спектр файлини очинг.
2. Спектрга белгиламоқчи бўлган структура ёки структураларни чизинг.
3. Структурадаги махсус атом ва боғланишларни танланг.
4. Сиз структурага белгиланишини хоҳлаган чуқки ёки чуқкиларни қилинг.



5. **Structure** менюсидан **Make Spectrum-Structure Assignment**. ни танланг.

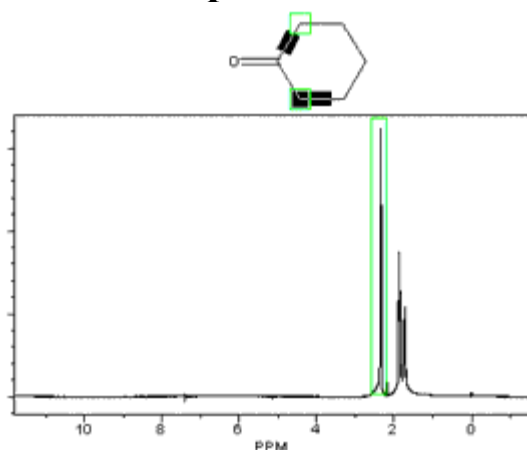
4. Структурадаги танланган атом ва боғланишлар спектр чуқкилари билан бирга бирлаштирилади.

7.2. Спектр белгилашларни таҳрир қилиш.

Спектр белгилашларни кўриб чиқиш учун

1. **Losso** ёки **Margue** қурулмаларига киринг.
2. Кўрсаткични **peak** устига жойлаштинг.

ЯМР ахбороти



Белгиланган атомларни ва боғланишлар ёрқин рангда номоён бўлади.

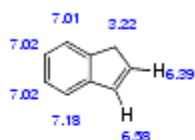
Chem ЯМР Pro, ChemDraw Ultra нинг хусусиятидир. **Chem ЯМР Pro** танланган молекулалар учун протон ва C^{13} ҳолатини номоён қилади ва баҳолайди.

1. Кўрилатган кимёвий структурасини танланг.

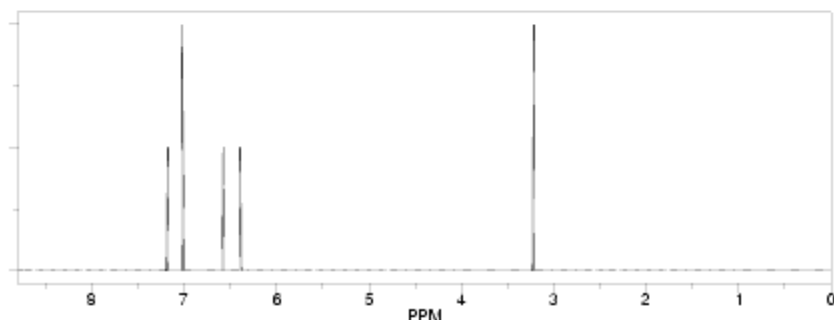


2. **Estimate** менюсидан ёки **Scripts** менюсидан H^1 **ЯМР Shift** ёки C^{13} **ЯМР Shift** ни танланг.

ChemNMR H-1 Estimation



Estimation Quality: blue = good, magenta = medium, red = rough



Protocol of the H-1 NMR Prediction:

Node	Shift	Base + Inc.	Comment (ppm rel. to TMS)
CH	7.02	7.26 -0.12 -0.12	1-benzene 1 -C=C 1 -C
CH	7.02	7.26 -0.05 -0.19	1-benzene 1 -C=C 1 -C
CH	7.18	7.26 0.04 -0.12	1-benzene 1 -C=C 1 -C
CH	7.01	7.26 -0.05 -0.20	1-benzene 1 -C=C 1 -C
CH2	3.22	1.37 1.22 0.63	methylene 1 alpha -1:C^C^C^C^C^1 1 alpha -C=C
H	6.58	5.25 1.65 -0.32	1-ethylene 1 -1:C^C(R)^C^C^C^C^1 gem 1 -C-1:C^C^C^C^C^C^1 trans
H	6.39	5.25 0.00 1.05	1-ethylene 1 -1:C^C(R)^C^C^C^C^1 trans 1 -C-1:C^C^C^C^C^C^1 gem

Chem JAMP Pro баҳоланган қийматлар билан молекулаларни қайта чизади ва ахборотни қуйида кўрсатилганидек янги ойнадаги спектр чизиқларини номоён қилади.

4-mavzu: ChemOffice dasturida uch o'lchamli struktura chizish, Uni HyperChem, Avagadro va boshqa dasturlar o'qiy oladigan formatlarda saqlash

1. Қуйидагилардан бирини бажаринг.

- Воситалар панели билан белгилаш орқали ягона атомни танлаш.
- Атомларни **Shift-click** қисми орқали кўп сондаги атомларни танланг

2. Қуйидагилардан бирини бажаринг.

- Ўнг томонни белгиланг, atom ни кўрсатинг, ўзингиз ҳоҳлаган хусусиятни кўрсатинг ва мувофиқ ҳолатни танланг.

- **Atom** ни кўрсатинг ва **Hot keys “1”** ни босинг. **Atom** хусусиятлари матни каттакчасидан танланган атомлар билан бирлаштириш хоссаларни танланг.

Atom хусусиятларини рўйхатдаги танланган хусусиятлари билан бирлаштириш учун танланг.

3. **Ok** ни босинг.



Атом хоссалари билан бирлашган атомларга тегишли кичик белгиланишлар номоён бўлади. Пайдо бўладиган ҳарактер қайси савол хусусиятлари белгиланганлигига боғлиқ бўлади. Агар бирдан ортиқ хоссалари белгиланган бўлса, атомга тегишли бирдан ортиқ хоссалари номоён бўлади. Атом хоссалари кўрсаткичлари қуйидаги жадвалда номоён бўлади.

	Хоссалар
U	Алмашинувчи эркин сайт (сайтларнинг бир нечаси асосида бирлашган)
X	Алмашинувчи: алмашинувчиларнинг максимал сони асосида бирлашган
H	Безуслевнўй водород
R	Ҳалқа боғ ҳисоби
S	Тўйинмаганлик
C	Реакция ўзгариши
T	Реакция стереолиги
L	Трансляция

Эътибор беринг: ноодатий валентлик атом хоссаси индивидуал кўрсаткични таъминламайди.

Боғ хоссаларини аниклаш

Структурадаги танланган боғланишнинг боғ хоссаларини аниклаш учун

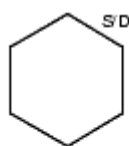
1. Қуйидагилардан бирини бажаринг.

- Воситалар панелидан фойдаланган ҳолда боғланишни топинг.
- **Shift** тугмаси билан бирга

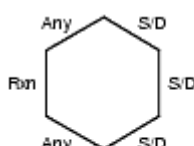
2. Қуйидагилардан бирини бажаринг.

- Ўнг томонлама белгиланг, боғланишни кўрсатинг, ўзингиз ҳоҳлаган хоссани кўрсатинг, сўнггра мувофиқ ҳолатни танланг.
- **Structure** менюсидан, **Bond properties** ни танланг. Боғ хоссалари матнидан, рўйхатдаги танланган боғланишлар билан бирлаштириш учун атом хоссаларини танланг.
- Боғланишни кўрсатинг ва **Hot keys** **“1”** ни босинг. Боғ хусусиятлари матнидан танланган атомлар билан бирлаштириш учун атом хусусиятларини танланг.

3. **Ok** ни белгиланг ва босинг.



one bond



many bonds

Боғ хоссалари билан бирлашган боғларга тегишли матндан дескрипторлар номоён бўлади. Номоён бўлган дескриптор белгиланган савол хоссага боғлиқ бўлади. Агар бирдан ортиқ хосса белгиланган бўлса атомга тегишли бирдан ортиқ хосса номоён бўлади. Дескриптор қуйидаги жадвалда тасвирланган.

Дескриптор	Хоссалар
Any	Боғ тузилиши: ҳарқандай
S/D	Боғ тузилиши: бирламчи қўшбоғ
D/A	Боғ тузилиши: қўшбоғ ароматик
S/A	Боғ тузилиши: бирламчи ароматик
Rng	Халқа

Chn	Занжир
Rxn	Реакцион марказ

Намуналар билан ишлаш

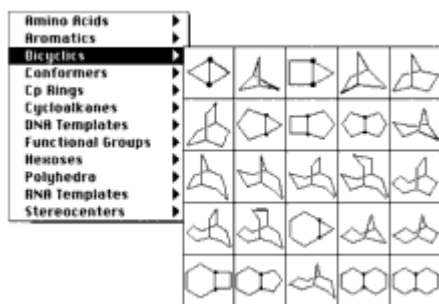
Шарҳ: Template (намуна) хусусиятлар структура шаклларига кўра ёки функционал жиҳатдан ташкил этилган структуралар коллекциясидир. **Template** саҳифа ичидаги структура **Template** деб юритилади. Саҳифаларни яратиш учун талаб қилинган вақтни қисқартириш учун структура чизиш ўрнига мавжуд **Template** дан фойдаланинг. **ChemDraw** билан тақсимланган **Template** тентлар **Windows** нинг «**CD: Template**» да тўпланади. Ёки **ChemDraw** алликациясидан “**ChemDraw Folder**” нинг бир хил

Эътибор беринг. **ChemDraw** Рго да сиз ўзингизнинг умумий фойдаланилган структураларингизни **Template** каби аниқлай оласиз. **ChemDraw ChemDraw Folder** даги ҳар қайси **Template** саҳифалари **Windows** менюсида **Open special (Windows)** бандида рўйхатланади.

Template воситалари

Template воситалари сиз танлашингиз мумкин бўлган шаклларнинг, структуралар ёки объектларнинг палитрасини ўз ичига олади.

- Биринчи даража мавжуд **Template** саҳифаларини номойиш қилади.



- Иккинчи даража ҳар бир **Template** саҳифа ичидаги **Template** ларни номойиш қилади.

Эътибор беринг. **ChemDraw** Рго да агарда ҳар қандай **Template** саҳифа чоп қилиш учун очиқ бўлса, рор-ир меню сегментланади. Юқори сегмент чоп қилиш учун айна вақтда мавжуд бўлган **Template** саҳифаларни ўз ичига олади.

СHEMDRAW ФОРМАТЛАРИНИ КУЛЛАБ-КУВВАТЛАНИШИ.

ChemDraw дастури **ChemDraw** саҳифалари ичида, **ChemDraw** саҳифалари орасида ва бошқа системалардан фойдаланган ҳолда яратилган

саҳифалар ўртасида ахборотларни трансфер қилиш учун мавжуд кўплаб стандарт система буйриқларини ўз ичига олади. Агарда **ChemDraw** саҳифаси, алоҳида компютерда мавжуд бўлмаган ўзининг шахсий шрифтларига эга бўлса, у ҳолда у мавжуд шрифтлар билан тўлдирилади.

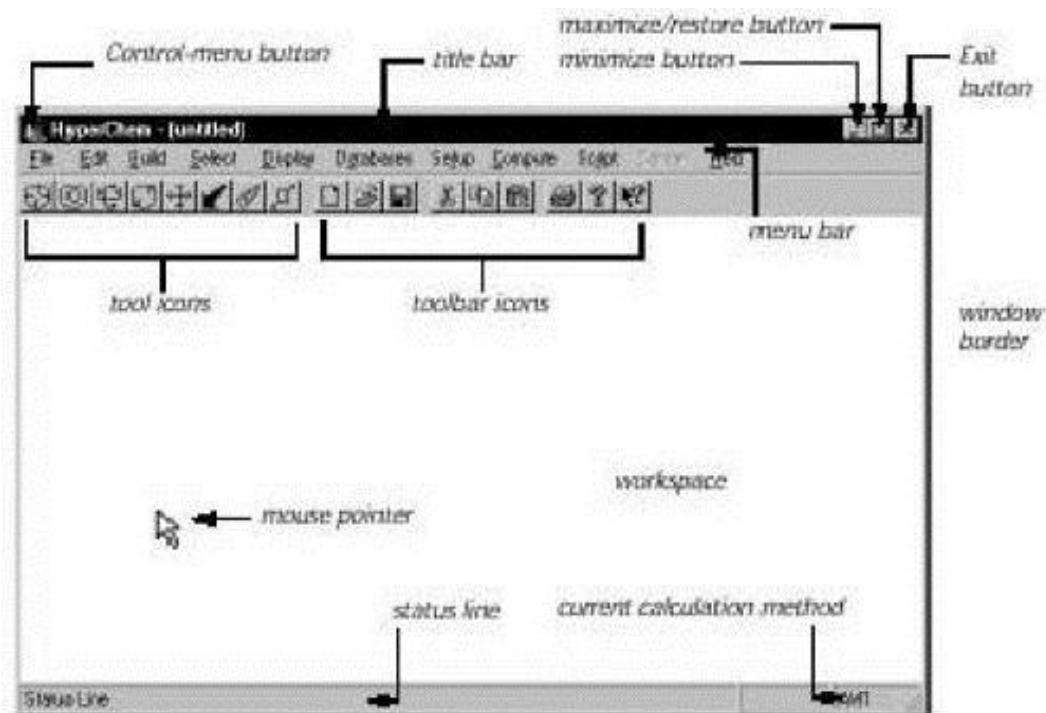
5-Mavzu: HyperChem dasturi misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash

***HyperChem* Dasturi**

Bugungi kunda kvant kimyosi va molekulyar dinamika usullari molekulyar, kristalli va o'tish (nano) o'lchamdagi murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirishda keng tarqalgan. Bu tegishli matematik ta'minotning texnologik rivojlanishi bilan bog'liq. Hozirgi kunda dunyoda kvant kimyosi va molekulyar dinamika usullarini qo'llaydigan ko'plab zamonaviy hisoblash komplekslari mavjud, biroq foydalanuvchilarning keng doirasi uchun ushbu usullardan foydalanishda ma'lum bo'lgan kvant-kimyoviy va molekulyar-dinamik *HyperChem* dasturi bilan ta'minlanadi. Ushbu multimedia kitobida taqdim etilgan molekulyar-dinamik modellashning barcha natijalari ushbu dasturning turli versiyalari yordamida olingan. Ushbu dasturning bepul demo versiyasini o'rganuvchilar *Hypercube* korporatsiyasi veb-saytidan olishlari mumkin (www.hyper.com).

HyperChem dasturining ingliz tilidagi hujjatlari *CDK.pdf*, *GetStart.pdf*, *Referenc.pdf*. fayllarida joylashgan. Kvant kimyosi va molekulyar dinamikaning usullari va dasturlari bilan mutlaqo tanish bo'lmagan o'quvchilar uchun ushbu bobda *HyperChem* dasturi bilan ishlashni osonlashtiradigan "yosh jangchi kursi" mavjud.

Dasturni o'rnatganingizdan va ishga tushirgandan so'ng, monitorda oyna paydo bo'ladi (dastur versiyasidan qat'iy nazar):



HyperChem oynasining qismlari

Sarlavha nomi siz ishlayotgan fayl nomini ko'rsatadi. Agar siz yangi yaratilgan faylda ishlayotgan bo'lsangiz, unda **untitled** nomi paydo bo'ladi.

Menyu qatorida **HyperChem** boshqa menyu nomlarni o'z ichiga oladi:

Fayl Fayli,
Edit Tartibga solish,
Build Ob'ektlarni qurish,
Select Tanlash,
Display Ko'rsatish,
Databases Ma'lumotlar bazasi,
Setup O'rnatish,
Compute Hisoblash,
Cancel Bekor qilish,
Skript Yozuvi,
Help Yordam.

Asboblار paneli asboblار satrining chap tomonida siz qurish, tanlash, ko'rsatish va atom yoki molekulani ko'chirish uchun foydalanadigan sakkizta vosita tugmachasi mavjud ("sichqonchadan foydalanish" ostiga qarang).

Holat satri hozirgi vaqtda ko'rsatilgan molekula ichidagi atomlar soni, hisoblash holati, energiya yoki gradient miqdori kabi mavjud ma'lumotlarni ko'rsatadi. Menyu elementini tanlaganingizda, mavzu qisqacha tavsifi holat satrida paydo bo'ladi.

Menyuni boshqarish tugmalari *HyperChem* oynasini o'zgartirish, ko'chirish, kengaytirish va yopish imkonini beruvchi buyruqlarni o'z ichiga oladi. Ular, shuningdek, boshqa oynalarni faollashtirish imkonini beruvchi kalit buyruqni ham o'z ichiga oladi.

Sichqonchadan foydalanish

Hyperchem da ishlash ko'pincha sichqoncha yordamida amalga oshiriladi. Bu quyidagicha ishlatiladi:

1. *Точка* (nuqta)-harakat nuqtasi (sirg'anish), kursor *HyperChem* oynasida tanlashni xohlayotganingizni bildiradi.
2. *L-Нажатие*(bosish)-sichqonchanning chap tugmasini bosib.
3. *R- Нажатие*(bosish)-o'ng tugmasini bosib. Odatda, *R-Нажатие* (bosish) qarama-qarshi ta'sir *L-Нажатие*(bosish) bor.
4. *Двойное нажатие*-Ikki marta bosish-sichqonchanning chap tugmasi bilan tez ikki marta bosish.
5. *L-протяжка* yoki *R-протяжка*-sichqonchanning chap yoki o'ng tugmachasini bosib, ish joyidagi yangi pozitsiyaga kursorni (sirg'anish) bosib harakatlantiring.
6. *LR-протяжка* -sichqonchanning chap tugmachasini bosib ushlab turing, so'ngra o'ng tugmasini bosib va kursorni ish joyida yangi joyga ko'chiring.
7. *RL-протяжка* -xuddi *LR-протяжка* kabi, lekin avval o'ng sichqoncha tugmasini bosib.

Sichqoncha kursori shaklni o'zgartirishi mumkin. Buni ko'rish uchun:

1. Asbob tasvirini ko'rsating (**Draw**) chap tugmasini bosib.
2. Kursorni ish joyiga ko'chiring. Kursor tegishli shaklga ega bo'ladi:.
3. Asbob tasvirini ko'rsating (**Selekt**) va chap tugmasini bosib.
4. Kursorni ish joyiga ko'chiring. U tegishli shaklga ega bo'ladi: Xuddi shu tarzda, kursorning shakli asboblarning satrining qolgan oltita tugmachasini tanlashda o'zgaradi.

Klaviatura muqobillari

HyperChem standart klaviatura muqobillarini taqdim etadi

Klaviatura muqobilidan foydalangan holda menyuni ochish uchun bir vaqtning o'zida [**Alt**] tugmachasini va [**S**] tugmachasini bosib. Tanlash menyusi ochiladi (**Select**).

Shunday qilib, boshqa barcha menyularni bir vaqtning o'zida [**Alt**] bilan bir vaqtning o'zida birinchi harfi nomini (**File** menyusi uchun **F**, va hokazo) bosishingiz mumkin.

Menyuni yopish uchun: [**Alt**] yoki [**Esc**] tugmasini bosib.

Ochiq menyu elementlaridan birini tanlash uchun: bir vaqtning o'zida [**Alt**] tugmachasini va menyu elementining birinchi harfiga mos keladigan tugmani (Atom elementi uchun **A**) bosib.

Eng qisqa klaviatura tugmalari

HyperChem turli xil qisqa klaviatura yo'llariga ega.

- [Ctrl] + [N] - создать новый файл (*New* на Файловом меню).
- [Ctrl] + [O] - открыть файл (*Open* на Файловом меню).
- [Ctrl] + [S] - сохранить (*Save*)
- [Ctrl] + [X] - вырезать (*Cut*)
- [Ctrl] + [C] - копировать (*Copy*)
- [Ctrl] + [V] - вставить (*Past*)
- [Alt] + [F4] - выход (*Exit*)
- [F4] - построение изоповерхностей
- [F9] - копирование всего изображения (*Copy ../book/image(III)/Image*) в меню Редактирования.
- [Esc] - отмена.

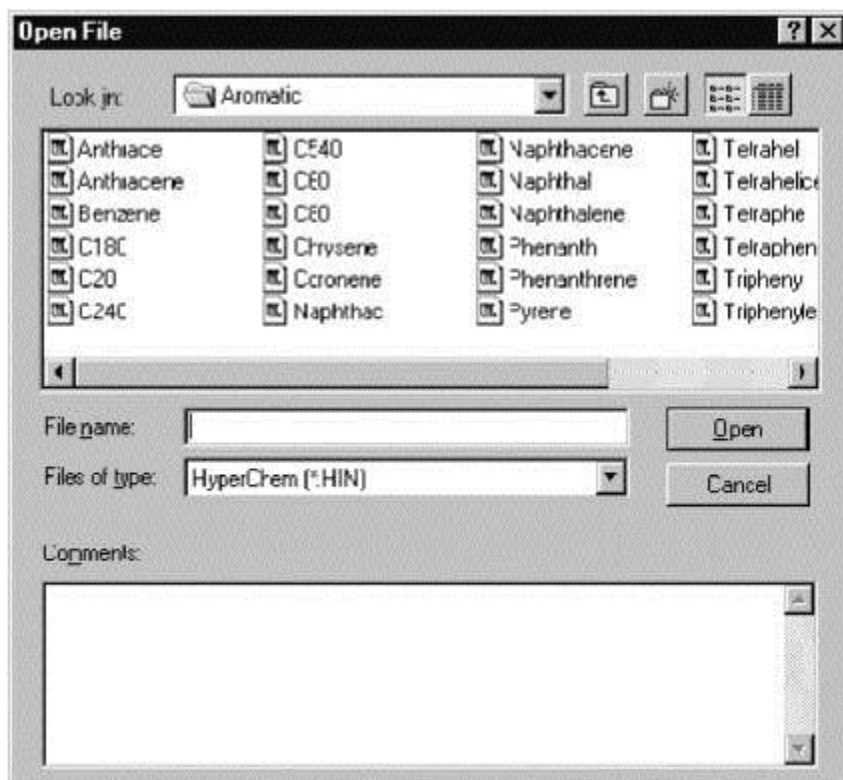
Sample file faylini ochish

HyperChem dasturida molekular bilan uchta usulda ishlashingiz mumkin:

1. Asbob-uskunalar ikki o'lchamli (2D) molekula tuzilishini yaratishga imkon beradi va keyin uni **HyperChem** modellashtiruvchisi bilan uch o'lchamli (3D) turga aylantiradi.
2. Qoldiqlarni tanlash oqsillar va nuklein kislotalarini yaratish uchun **HyperChem/Lite**-dan aminokislotalar va nukleotidlarning (nukleozidlar) tayyor qoldiqlarini doimiy ravishda tanlash imkonini beradi.
3. O'qish: **HyperChem** kirish fayli formatida (HIN fayli) yoki oqsil banki ma'lumotlarida **Brookhaven Protein Data Bank** (ENT fayli), shuningdek, bir qator boshqa formatlarda saqlangan atom va molekulyar koordinatalar to'plami.

HIN faylini ochish

1. **Fayl** menyusiga oynaning yuqori chap qismiga sichqonchani ko'rsatgichlari harakat qildiring.
2. Sichqonchani chap tugmasini bosib (L-Нажатие) fayl menyusini oching
3. Muloqot blokida **Open** (ochiq)menyuni tanlang
4. Fayllar ro'yxati paydo bo'ladi, ular orasida kerakli va L-Нажатие ni tanlashingiz kerak-uni ochish uchun sichqoncha tugmasini bosing.



Displeyni o'rnatish parametrlaridan foydalanish

HyperChem oxirgi ish seansidan avtomatik ravishda ekran parametrlarini ishlatadi. Displeyni o'rnatish parametrlarini display menyusi (display) yordamida tanlashingiz mumkin.

Atomlar va molekulalarning imzolaridan foydalanish

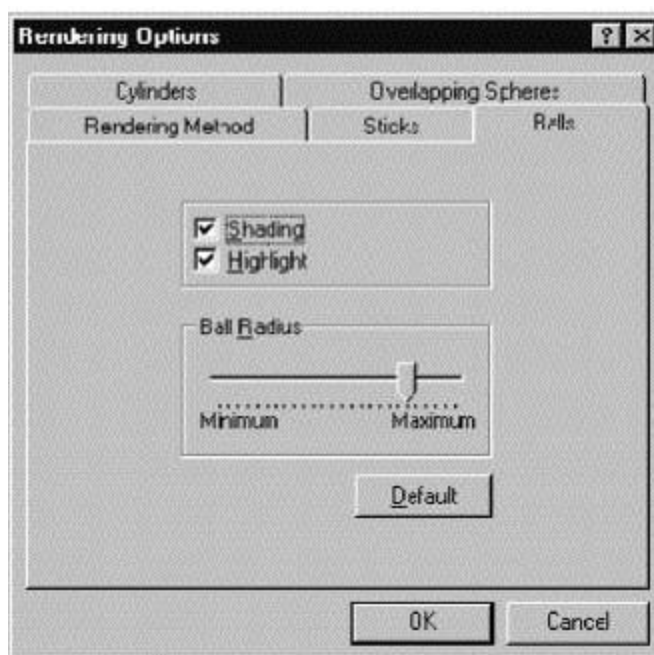
Agar molekula atom zaryadlarining imzosi bilan ko'rsatilsa va hokazo bo'lsa, ularni quyidagi tarzda olib tashlashingiz mumkin:

1. **L-Нажатием** tugmasini bosib **Labels** (teglar) ni oching.
 2. Atomlarning imzolari ro'yxatida avtomatik ravishda **None (Ничто)** belgilanadi.
 3. **L-Нажатием** OK tugmasini bosish atomlarning imzolarini bekor qiladi. Dialog qutisi yopiladi va imzo ko'rinmaydi.
- Dialog qutisi yopiladi va molekula tanlangan belgilar bilan belgilanadi (elementlarning kimyoviy belgilar, zaryadlar va boshqalar).

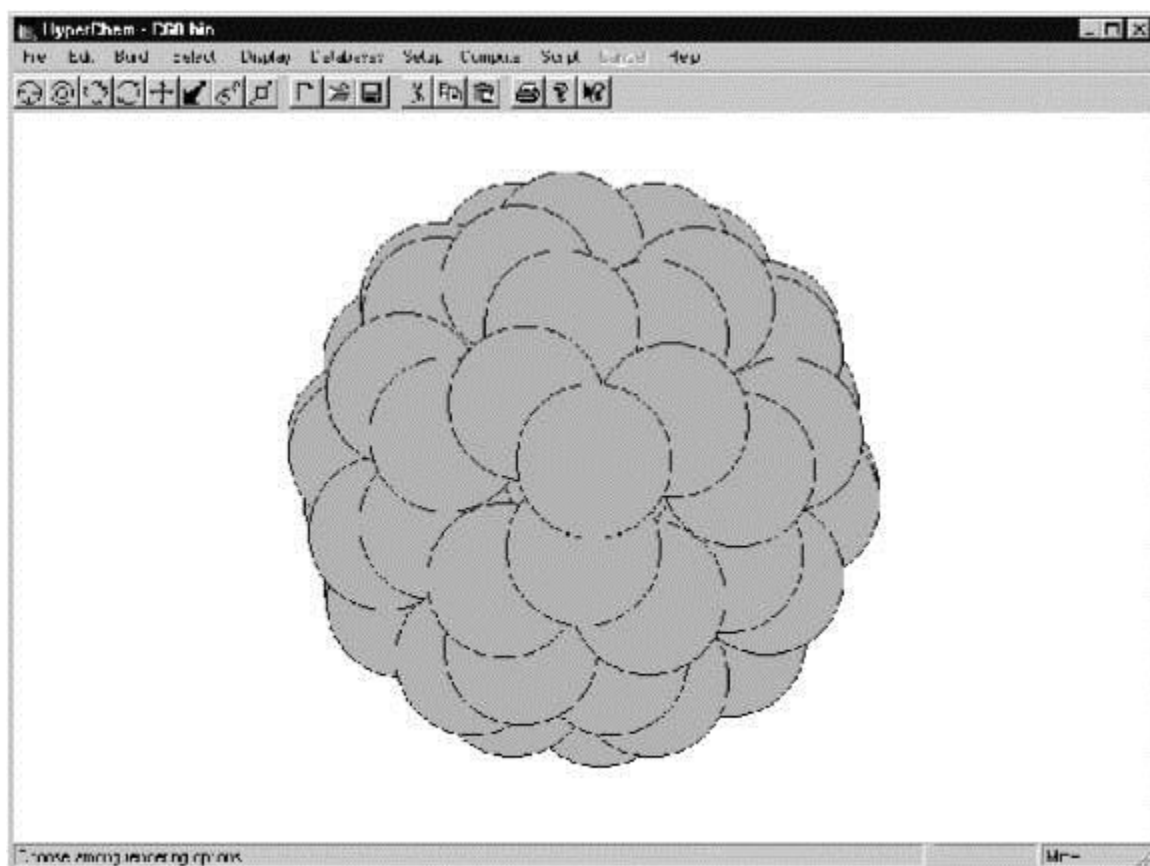
Molekulyar tasvirlardan foydalanish

Molekulyar tizim tasvirlarini o'zgartirish uchun:

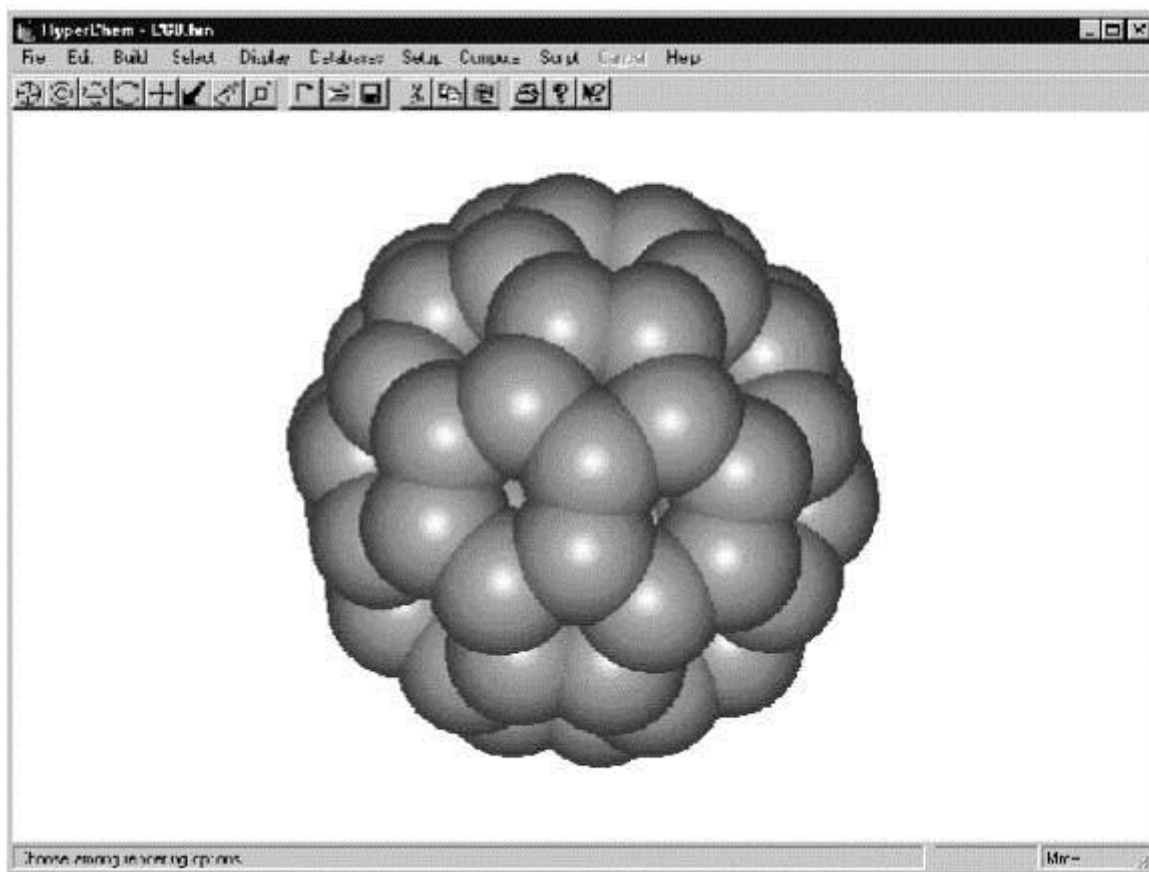
1. Display menyusida Renderings ni tanlang.
2. Dialog menyusida, masalan, **Balls** (sharlar) ni tanlang va belgilang.
3. Dialog oynasining yuqori qismida parametr varag'ini ochadigan **Balls** tugmasini bosing.



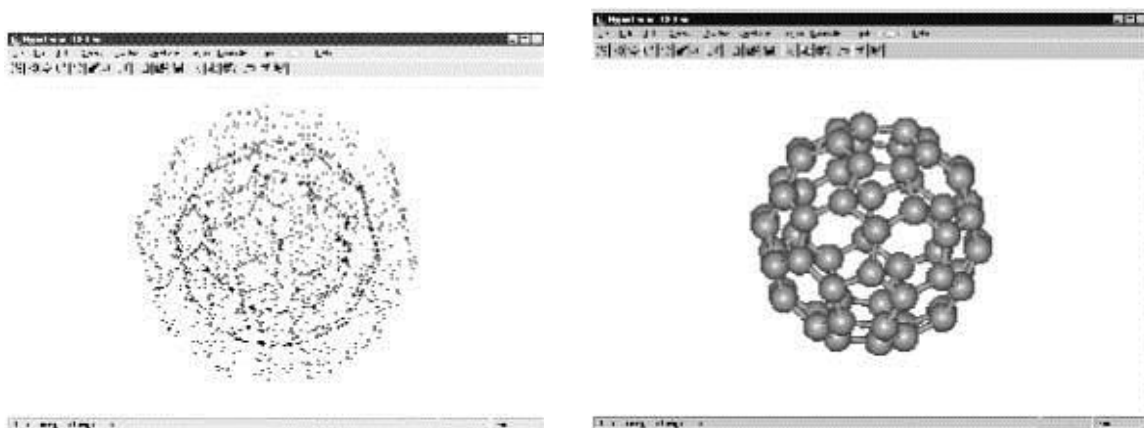
4. Agar siz **Shading (Затемнения)** belgisini olib tashlasangiz va **OK** tugmasini bossangiz, molekula taxminan, lekin tezda qayta ishlangan taxminiy tasvir olinadi.



Agar siz Shading-ni belgilang va OK-ni bosing, bu bo'shliq bilan to'ldirilgan tasvirni beradi.



Agar dialog menyusida **Sticks & Dots** (*Стержни и точки*) ni tanlasangiz. Bu vakillik molekula shaklini yaxshi ko'rsatadi.

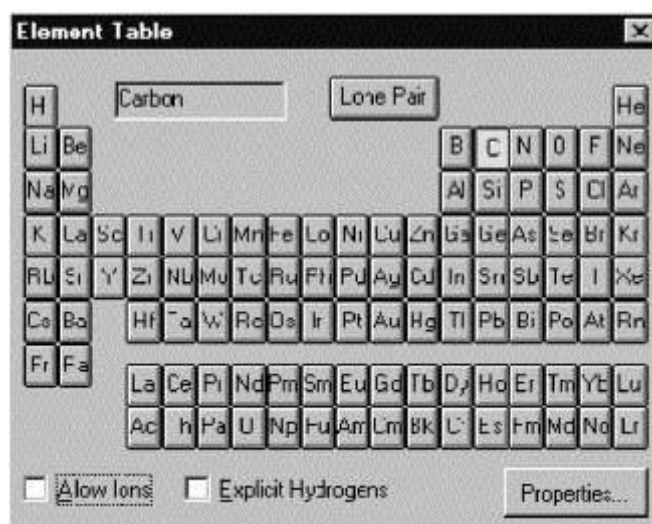


Ob'ektlarni qurish va tahrirlashning asosiy usuli

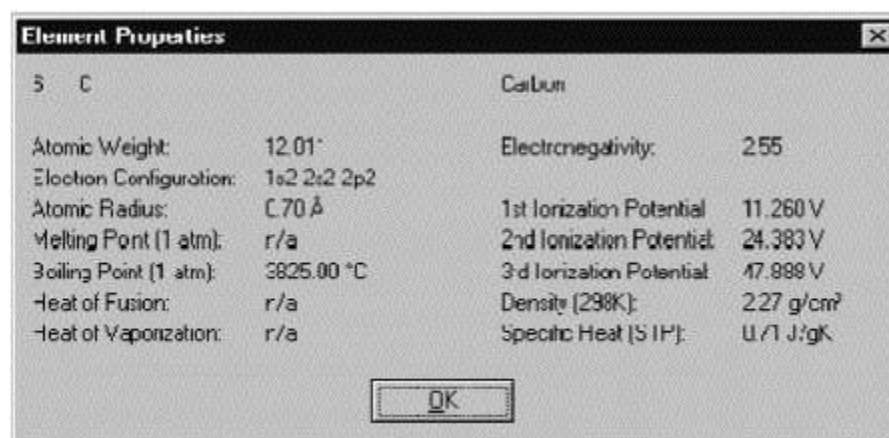
HyperChem ochilgandan so'ng, Oynani to'liq ekranga kengaytirish tavsiya etiladi. Katta ish joyida molekullarni qurish juda qulay.

Shaxsiy atomlarni chizish:

1. *Default element*ni yaratish menyusini oching. *Element jadvalini* dialog menyusini-D.I. Mendeleyev elementlarining davriy jadvali.



2. Elementni tanlash uchun sichqonchani kursori kerakli elementga o'ting va chap tugmani bosing.
3. Agar *Properties* tugmasini bossangiz, tanlangan elementning fizik xususiyatlari haqida ma'lumotni o'z ichiga olgan oyna ochiladi.



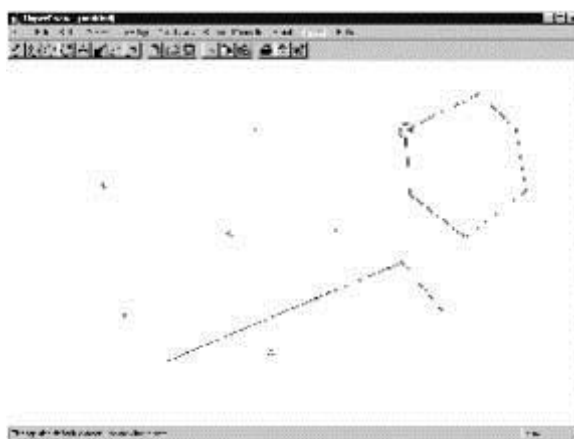
OK tugmasini bosgandan so'ng, oyna yo'qoladi.

4. Bundan tashqari, *"Allow ions"* (ionlar qabul qilinadi) yoki *"Explicit hydrogens"* (vodorod Qo'shish) ni ham qayd etishingiz mumkin.
5. Elementni tanlagandan so'ng, *Element jadvalini* yoping.
6. Kursorni ish joyiga ko'chiring. Shu bilan birga, u □ ko'rinish shaklini oladi
7. Sichqoncha chap tugmasini bir marta bosib, tanlangan atomni ish maydoniga joylashtiring. Shunday qilib, bir elementning cheksiz ko'p sonli atomlarini bir-biridan har qanday masofada joylashtirishingiz mumkin.
8. Elementni o'zgartirish uchun *Default Element*-ni oching va sichqonchani chap tugmasi bilan bosing..



9. Ikkita atomni bir-biriga ulash uchun sichqonchani "ko'rish" atomga o'ting va chap tugmani  (**Draw**) qo'yib, boshqa atomga chiziq torting. Shunday qilib, fazoda joylashtirilgan barcha atomlar kimyoviy birikmalar orqali bitta molekulaga ulanishi mumkin.

10. Molekula chizishning yana bir usuli bor. Bir atomni tuzilish maydoniga joylashtirganingizdan so'ng, chap tugmachani (**Л-протяжка**) qoldirmasdan, undan ikkinchi atom bo'lishi kerak bo'lgan joyga chiziq chizib oling va sichqonchani bosmasdan bir marta bosing. Bu ikkinchi atomning pozitsiyasidir.



11. Molekulalarni qurishda, ularning barchasi tekis tuzilishga ega emasligini hisobga olish kerak, shuning uchun fazoda ma'lum bir burchak ostida alohida atomlarni joylashtirish uchun molekula sichqonchani ko'rsatgichidan orqali ochilishi mumkin.

12. Bir nechta (ikki, uch, bir yarim) kimyoviy bog'larni yaratish uchun, sichqonchani chap tugmasini bir marta (ikki marta) bir bog'lanishni tasvirlaydigan chiziq yonida joylashtirish kerak.

13. Ulanishlarni yoki atomlarni olib tashlash uchun sichqonchanning o'ng tugmasini bosing (**Р-щелчок**).

Tanlangan atomlar (molekulalar) bilan ishlash

Bir vaqtning o'zida bir nechta atomlarni yoki barcha molekulalarni belgilab, keyin nusxa oling yoki olib tashlang. Buning uchun  tugmadan foydalaning (bir-biriga bir-biriga biriktirilgan bir juft doiralar).

1. Avval *Select* menyusida tanlash parametrlarini tanlashingiz kerak. Alohida *atomlar*, *qoldiqlar (residues)* va butun molekulalarni alohida yoki birgalikda ajratish mumkin.

2. Tanlash parametrlarini o'rnatganingizdan so'ng (masalan,  atom tugmasini bosing), kursorni ish maydonida ajratilgan ob'ektga olib boring va *L-целчок* ni bosing

3. Xuddi shu tarzda, ikki atom o'rtasidagi aloqani ajratish mumkin. Bunday holda, tanlov parametrlarida atomlarni belgilash kerak.

Tanlangan qismlar buferga olib tashlanishi yoki undan chiqarilishi mumkin (*Edit* menyu bo'limida yoki bo'limlardagi tegishli tugmalar).

Tanlangan qismlar, shuningdek, tegishli vositalarni tanlab, ularni o'ng tugmasini bosib "ushlab turish" orqali ish maydoniga alohida-alohida ko'chirilishi yoki aylanishi mumkin. (faqat bundagi zaruriy menyu uchun *Fail/Preferences/Tool* bekor qilish () *whole molecular translation*).

Tanlovni bekor qilish uchun kursorni ekranning bo'sh joyiga qo'ying va sichqonchaning chap tugmasini bosing. Atomning alohida qismini, qismini yoki aloqasini tanlashni bekor qilish uchun, kursatkich tanlangan ob'ektga ishora qiladi va bir marta sichqonchaning o'ng tugmasini bosing.

Atom guruhini tanlash

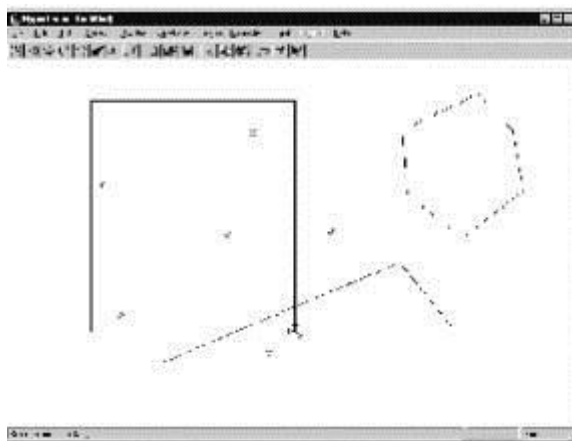
Bir guruh atomni tanlashda ular to'rtburchakda joylashgan

1. Tanlash menyusida *Select* " *Select Sphere*" ni tanlash kerak emas.

2. Ish joyining bo'sh qismidagi nuqtani tanlang, chap va o'ng sichqoncha tugmachalarini (*LR -протяжка*) ajratilgan atomlarga bir vaqtning o'zida ushlab turing. Shu bilan birga, tanlov maydonining chegarasini ko'rsatadigan to'rtburchak chiziladi.

3. Sichqoncha tugmachalarini qo'yib yuboring va tanlov maydonidagi barcha atomlar ta'kidlanadi.

Xuddi shu oynada atomlarning ikkinchi guruhini tanlashingiz mumkin. Buni amalga oshirish uchun *Select* menyusida ko'p tanlovlarni belgilash kerak. Shundan so'ng, xuddi shu tarzda to'rtburchakda yana bir atom guruhini tuzish kerak. Shu bilan birga, avvalgi atomlarga yangi ajratilgan atomlar qo'shiladi.



Barcha atomlarni tanlash uchun ish joyining bo'sh joyida kursorni joylashtirish va sichqonchaning chap tugmasi bilan bir marta bosish kerak. Barcha sekretyalarni bekor qilish uchun kursor ish joyining bo'sh joyida bo'lsa, sichqonchaning o'ng tugmasini bir marta bosishingiz kerak.

Atomlarni olib tashlash

Bitta atom yoki aloqani olib tashlash uchun:

1. Asboblar panelidagi  (**Draw**) asbob tasviriga bir marta bosing.
2. Kursorni olib tashlanadigan ob'ektga o'tkazing va **R-щелчок** ni bosing. Atom yoki bog' yo'qoladi.

Bir nechta atomlarni yoki ulanishlarni olib tashlash uchun:

LR-протяжки orqali to'rtburchakning ichidagi atomlar va olib tashlanishi kerak bo'lgan ulanishlar

Edit (Редактирования) menyusida **Clear (Очистить)**ni tanlang. Dialog blogi ko'ringanda qandaydir savol paydo bo'ladi: "Хотите ли вы удалить выбор?" "Ha" tugmasini bosish kerak.

1. Tanlash (**Select**) menyusidan atomlarni ( **Atoms**) belgilang.
2. Ish maydonidagi chap tugmani bosib atom yoki bog'ni tanlang.
3. Edit (tartibga solish) menyusida nusxa ko'chirish (nusxa olish) ni tanlang. Atom yoki bog'ni nusxasi buferda saqlanadi.
4. Buferdan ish joyiga moslamalarni kiritish uchun tahrirlash menyusida **Past (Вставить)**. buyrug'ini tanlashingiz mumkin.

HyperChem ish joyini tozalash:

Fayl (файл) Menyusidan **New (Новый)** element tanlang. Dialog oynasida quyidagi savol paydo bo'ladi: "Хотите ли вы сохранить текущие изменения в данном файле?"

"No"ni tanlash kerak. **HyperChem** ish joyini tozalaydi.

Polipeptidlarni yaratish

Hozirgacha siz alohida molekulalarni tuzishni va **HIN** faylidan koordinatalarni o'qib, ularni ko'rsatishni o'rgandingiz. Ushbu bo'lim **HyperChem** kutubxonasidan amino kislotalar qoldiqlarini ketma-ket tanlash orqali polipeptidlarni tuzish tamoyillarini belgilaydi.

Amino kislotalar kutubxonasining dialog menyusini ochish:

Databases (ma'lumotlar bazasi) Menyusidan **Amino Acids (Аминокислоты)**. Punktini tanlang.

Ushbu dialog menyusini barqaror va polipeptid tuzayotganda har doim ochiq qoladi.



Doimiy ravishda qoldiqlarni tanlab, ikkinchi darajali polipeptid tuzilishini hosil qilasiz. Lekin buning uchun muloqot oynasida ushbu strukturaning nima bo'lishi kerakligini ta'kidlash kerak: alfa spirali (**Alphe helix**), betta-Leaf (qatlami) (**Beta sheet**) yoki boshqa variantlar. *Phi* va *psi* burchagi avtomatik ravishda o'rnatiladi. *Omega* burchagi (*Omega*) o'zgarishi mumkin, lekin odatda trans-peptid aloqasi uchun 180°. Polipeptid zanjirining N-uchi bilan hosil qilishni boshlang.

Zanjir hosil qilish uchun:

L-chertish bilan N-oxiridagi qoldiqdan boshlab aminokislotalarni ketma-ket tanlang. **HyperChem** aminokislotalarni bir-biriga nisbatan mos burchaklarga ega bo'lgan zanjirni hosil qiladi.

Zwitter-ionni yaratish

Siz hosil qilgan polipeptid zanjirida N-oxiri HN-ni va C-oxirini CO guruhini o'z ichiga oladi. Switter ionni yaratish aminokislota qoldiqlarini N - va C-modifikatsiyasini o'zgartiradi.

Ma'lumotlar bazasi menyusida switter ion yaratish uchun *Switter ion*-ni tanlang

(*Switter ion*). **HyperChem** polipeptidning ohirgi C-ga (COO-ni olish) va N-oxiriga (NH₃ gacha) ikkita protonga kislorod atomini qo'shadi.

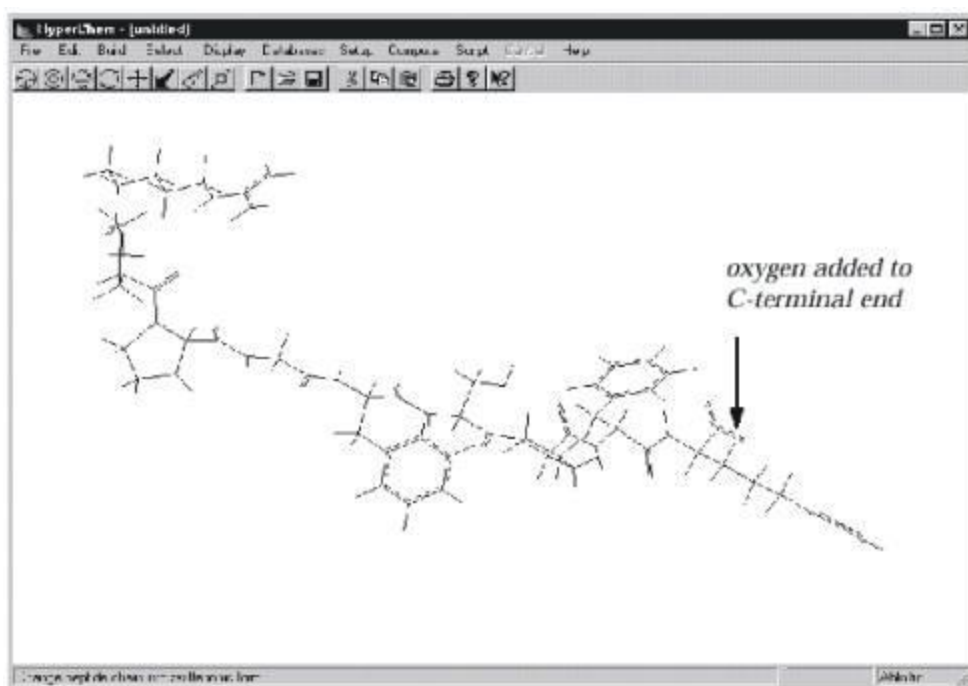
Mutagenез

Oqsil muhandisligida maxsus sayt mutagenezda muhim rol o'ynaydi. Muhim joyda ma'lum bir amino kislota ni almashtirish oqsilning tuzilishi va xususiyatlarini va shuning uchun funktsiyani o'zgartirishi mumkin.

Qoldiqni almashtirish uchun:

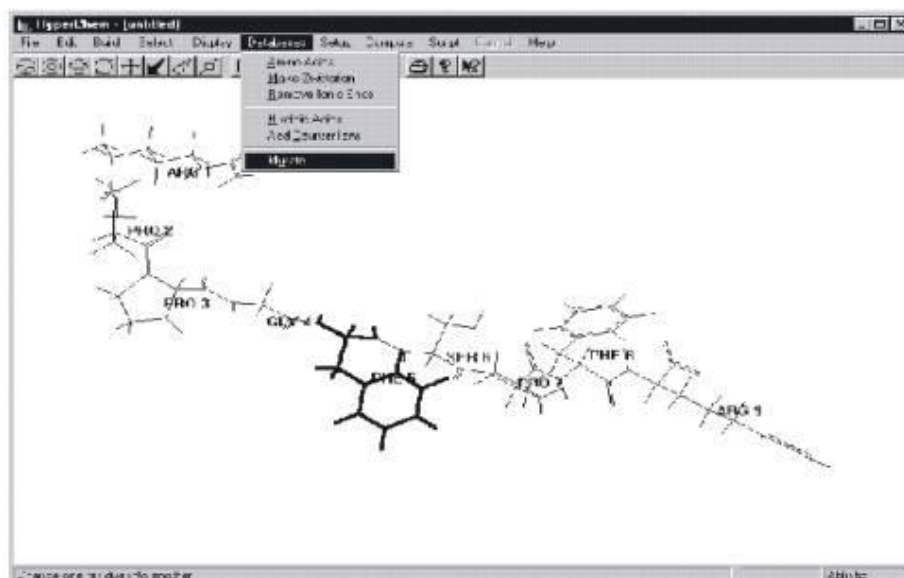
Birinchidan, almashtirilishi kerak bo'lgan amino kislota ni tanlang. Buni amalga oshirish uchun yorliqdagi display menyusida (Labels), Name+Seq-ni balanslarni belgilash va OK-ni bosish. Bundan tashqari, tanlash (tanlash) menyusida qolganlarni (Residues) belgilashingiz mumkin.

Shundan so'ng, kursorni tanlang va L - ni bosish, kerakli amino kislota ni tanlang.



Ma'lumotlar bazasi menyusida ilgari faol bo'lmagan *Mutatsiya (Mutate)* elementi bo'ladi

Mutate dialog menyusida tanlangan qoldiqning o'rnini bosadigan amino kislota ni tanlang va OK tugmasini bosish. O'zgartirish mavjud Olingan strukturani saqlang.



Mashg'ulot qilish

1. Betta konformatsiyasida keyingi polipeptid zanjirini hosil qilish:
2. Ma'lumotlar bazasi menyusidan Nucleic Acids dan foydalanib nuklein kislotasini yarating.

Qurilish parametrlarini o'lchash (Measuring Structural Properties)

Ushbu bo'lim tarkibiy aloqalarni o'lchash texnikasini tasvirlaydi. Bundan tashqari, burchaklarni o'lchash usullari, shuningdek, atomlarning displey xususiyatlari, masalan, to'lovlar va mekansal koordinatalar haqida ma'lumot beriladi.

Atomlarning xususiyatlari

Atomning asosiy xususiyatlari haqida ma'lumot olish uchun uni ajratish kerak. Vaziyat satrida atom raqami, turi, va molekulyar mexanikaning tanlangan kuch maydoni, zaryadi, shuningdek, bu atomning x, y va z koordinatalarini paydo bo'ladi.

Menyu elementlari sizga kerak bo'lgan atom turini (atom turi), Sozlash zaryadini (zaryadini) va standart dastur tomonidan o'rnatilganlardan farqli ravishda geometriya (cheklangan geometriya) ni o'rnatish imkonini beradi.

Bog' uzunligini o'lchash

Agar siz atom emas, balki bog'ni tanlasangiz, u haqida ma'lumot holat satrida paydo bo'ladi. **HyperChem** muayyan turdagi kutubxonasiga ega bo'lib,

atomlar va gibridizatsiya o'rtasidagi bog'larning uzunligi u sukut bo'yicha o'rnatiladi

Kutubxonada bog' uzunligi haqida ma'lumot bo'lmasa, **HyperChem** ikki atomning kovalent radiuslarining o'rtacha qiymatidan foydalanadi.

Masofani o'lchash uchun siz kursorning shaklini (Select) o'zgartirishingiz va ushbu aloqani tanlashingiz kerak. Vaziyat satrida angstromlarda ifodalangan ikki atom o'rtasidagi aloqa uzunligining qiymati paydo bo'ladi (Å)

Shu bilan birga, **Build** menyusida "**Constrain bond length**" faol elementi bo'lib, u standart dastur modellarini ishlab chiquvchi tomonidan o'rnatilganidan farqli ravishda istalgan aloqa uzunligini o'rnatish imkonini beradi.

Bog' burchaklarini o'lchash

Ikkilamchi bog' orasidagi burchakni o'lchash uchun birinchi, ikkinchi va uchinchi atomlarni ketma-ket ajratish kerak, ular orasidagi aloqalar burchak hosil qiladi. Bunday holda, ikkinchi atom bu burchakning tepasida bo'lishi kerak. Holat satri burchak o'lchamini ko'rsatadi.

Menyu **Build** faol element bo'ladi **Constrain Bond Angle**, bu burchakning qiymatini o'zgartirish imkonini beradi.

Burilish burchaklarini o'lchash(Torsion burchak)

Atomning birinchi, ikkinchi (burchakning uchi) va molekula tekisligidan tashqarida joylashgan uchinchi atomni ketma-ket tanlang. Tik turgan chiziqli birinchi ikkita atom va uchinchi atomning tekisligi bo'lgan holat satrlari orasidagi burilish burchagi paydo bo'ladi.

Build menyusidagi "**Constrain Bond Torsion**" elementi faol bo'lib, bu sizning xohishingizga ko'ra ushbu qiymatni o'zgartirish imkonini beradi.

Ikkita bog'lanmagan atomlar orasidagi masofani o'lchash

O'lchovni boshlashdan oldin, **Select** menyusida **Multiple Selections (bir nechta tanlov)** elementini belgilash kerak. Bu ish oynasida bir nechta atomni ta'kidlash imkonini beradi. L - bir marta bosish bilan har qanday atomning ikkitasini ajratib oling, holat satri ular orasidagi masofani ko'rsatadi.

Vodorod bog'lari

Vodorod bog'larini shakllantirish uchun qulay shart-sharoitlarni tasdiqlash uchun **HyperChem** ularni hisoblab chiqadi va ularni ekranga chiqaradi.

Vodorod donoriga masofa 3.2 Å dan kam bo'lsa va donor va qabul qiluvchining kovalent bog' burchagi 120 darajadan kam bo'lsa, vodorod bog'lari hosil bo'ladi.

Vodorod bog'lari uchun shartlarni tasdiqlash:

1. **Display** menyusidan **Show Hydrogen Bonds** (**Показать водородные связи**)

nuqtasini belgilang.

2. U erda, *Recompute H Bonds* (Вычислить заново водородные связи) tanlang.

HyperChem vodorod bog'larini nuqta chiziq bilan ko'rsatadi.

Vodorod bog'lari har bir konfiguratsiyada avtomatik ravishda hisoblanmaydi, shuning uchun molekulalarning geometriyasini o'zgartirganda vodorod bog'lari qayta hisoblanishi kerak.

2D va 3D da kichik molekulalarni yaratish

Endi siz atomlarni hosil qilishni o'rgandingiz va ular orasidagi aloqalar molekula hosil qilishni boshlashingiz mumkin. **HyperChem** sizga har qanday o'lchamdagi molekulalarni yaratishga imkon beradi, ammo amaliy sabablarga ko'ra siz kichik va o'rta molekulalarning qurilishi bilan Cheklanishingizni tavsiya qilamiz.

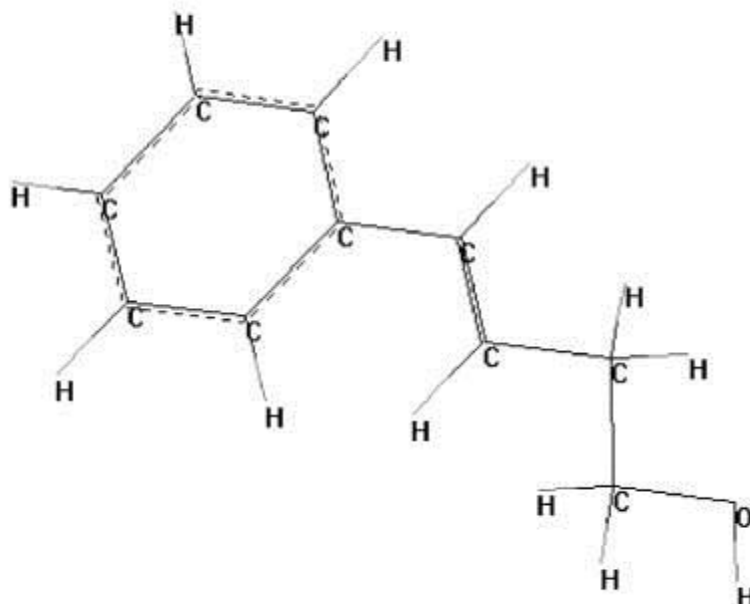
Ushbu mashqda siz 1-gidroksi-3-fenil-2 propen molekulasini hosil qilasiz.

1. *Default elements*-da *Build* menyusini elementlarning davriy jadvalini oching

2. *Allow ions* (Допустимы ионы) va *Explicit hydrogens* (Добавить водороды) belgilang. Agar *Explicit hydrogens* o'chirilmasa, ular chizish jarayonida avtomatik ravishda uglerod skeletiga qo'shilmaydi.

3. Uglerod (C) ni tanlang va dialog qutisini yoping. Uglerod qurilish uchun o'rnatilgan element sifatida o'rnatiladi

4. Endi quyidagi tuzilishga ega bo'ling:



Molekulani hosil qilish paytida siz noto'g'ri geometriyani olishingiz mumkin, lekin bu tuzilmani o'zgartirmasdan oldin ishingizni saqlang. Bu yo'l sizni

qayta-qayta jalb qilmaslikka imkon beradi, lekin faqat hosil qilingan molekulaning asl nusxasida kerakli tuzatishlarni amalga oshiradi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

Asosiy darsliklar va o'quv qo'llanmalar ro'yhati.

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. Компьютерная химия, М., Мир, 1990.
4. A.Quvvatov, X.Boboqulov. Fizikaviy tadqiqot usullari. Amaliy mashg'ulot uchun qo'llanma. SamDU. 2017. 118 b.

Qo'shimcha adabiyotlar

5. М.А.Тўрабекова, М.Г.Левкович «Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способности Т., Университет. 2008. 136с.
6. «Теория и практика компьютерного 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.
7. Травень В.Ф. Электронная структура и свойства органических молекул, М., Химия, 1989.
8. Теддер Дж., Нехватал Э. Орбитальная теория в контурных диаграммах, М., Мир, 1988.
9. Минкин В.И., Симкин Б.Я., Миняев Р.М. Теория строения молекул, М., Высшая школа, 1979.
10. Молекулярная механика MM2. Инструкция по эксплуатации (1977, 1982 гг.)

Mundarija

№	Mavzular	
1	Shaxsiy kompyuterlar bilan ishlash. Standart yordamchi redaktor va grafik dasturlari bilan ishlash (ChemWin).	3
2	Xromofor tutgan birikmalarni topish va UB – spektrini hisoblash. Tajribada olingan UB – spektri bilan taqqoslash.	9
3	ChemOffice dasturida birikmalarni nomlash, ^{13}C , ^1H NMR, PMR spektrlarini hisoblash	16
4	ChemOffice dasturida uch o'lchamli struktura chizish, Uni HyperChem, Avagadro va boshqa dasturlar o'qiy oladigan formatlarda saqlash	18
5	HyperChem dasturi misolida zamonaviy jamlangan hisob dasturlari bilan ishlash	22
6	Foydalanilgan adabiyotlar	39

