

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY TA’LIM, FAN VA
INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI**

**OLIY TA’LIM TIZIMI PEDAGOG VA RAHBAR KADRLARINI
QAYTA TAYYORLASH VA ULARNING MALAKASINI
OSHIRISHNI TASHKIL ETISH BOSH ILMIY - METODIK
MARKAZI**

**TOSHKENT DAVLAT TEXNIKA UNIVERSITETI HUZURIDAGI
PEDAGOG KADRLARNI QAYTA TAYYORLASH VA ULARNING
MALAKASINI OSHIRISH TARMOQ MARKAZI**

“ELEKTRONIKA VA ASBOBSOZLIK”

yo‘nalishi

**“KVANT-MEXANIK MODELLASHTIRISH VA
HISOBLASH USULLARI”**

moduli bo‘yicha

O’ Q U V – U S L U B I Y M A J M U A

TOSHKENT -2023

Mazkur o‘quv-uslubiy majmua Oliy va O‘rta maxsus ta‘lim vazirligining 2021 yil 25 dekabrda 538 sonli buyrug‘i bilan tasdiqlangan o‘quv dastur asosida tayyorlandi

Tuzuvchi: A.Mavlyanov-TDTU “Raqamli elektronika va mikroelektronika” dotsenti

Taqrizchi: f.m.f.n., dotsent X.Iliev “Raqamli elektronika va mikroelektronika” kafedra mudiri

O‘quv-uslubiy majmua Toshkent davlat texnika universiteti Kengashining 2021 yil 29 dekabrda 4 sonli yig‘ilishida ko‘rib chiqilib, foydalanishga tavsiya etildi.

MUNDARIJA

I. ISHCHI DASTUR	4
II. MODULNI O'QITISHDA FOYDALANILADIGAN INTERFAOL TA'LIM METODLARI	8
III. NAZARIY MATERIALLAR.....	12
IV. AMALIY MASHG'ULOT MATERIALLARI	57
V. GLOSSARIY	69
VI. FOYDALANGAN ADABIYOTLAR.....	71

I. ISHCHI DASTUR

Kirish

Dastur O'zbekiston Respublikasining 2020 yil 23 sentyabrda tasdiqlangan "Ta'lim to'g'risida"gi Qonuni, O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2017 yil 7 fevral "O'zbekiston Respublikasini yanada rivojlantirish bo'yicha Harakatlar strategiyasi to'g'risida"gi PF-4947-son, 2019 yil 27 avgust "Oliy ta'lim muassasalari rahbar va pedagog kadrlarining uzluksiz malakasini oshirish tizimini joriy etish to'g'risida"gi PF-5789-son, 2019 yil 8 oktyabr "O'zbekiston Respublikasi oliy ta'lim tizimini 2030 yilgacha rivojlantirish kontseptsiyasini tasdiqlash to'g'risida"gi PF-5847-sonli Farmonlari hamda O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasining 2019 yil 23 sentyabr "Oliy ta'lim muassasalari rahbar va pedagog kadrlarining malakasini oshirish tizimini yanada takomillashtirish bo'yicha qo'shimcha chora-tadbirlar to'g'risida"gi 797-sonli Qarorida belgilangan ustuvor vazifalar mazmunidan kelib chiqqan holda tuzilgan bo'lib, u oliy ta'lim muassasalari pedagog kadrlarining kasb mahorati hamda innovatsion kompetentligini rivojlantirish hamda oliy ta'lim muassasalari pedagog kadrlarining kasbiy kompetentligini muntazam oshirib borishni maqsad qiladi.

Ushbu ishchi o'quv dasturda kvant-kimyoviy va sonli hisoblash paketining ishlash printsipi, molekulyar mexanika, elektron strukturani hisoblashning yarim empirik usullari va aralash rejimdagi hisob-kitoblar bo'yicha bilim ko'nikma va malakalarini rivojlantirishga qaratilgan.

Modulning maqsadi va vazifalari

"Kvant-mexanik modellashtirish va hisoblash usullari" modulining maqsadi: tinglovchilarga kvant-mexanik modellashtirish va hisoblash usullari bo'yicha bilim, ko'nima va malakalarini rivojlantirish.

“Kvant-mexanik modellashtirish va hisoblash usullari” modulining vazifalari:

- Kvant-kimyoviy va sonli hisoblash paketining ishlash printsiptini izohlab berish.
- Molekulyar mexanikahaqida ma'lumotlani tahlil qilish.
- Elektron strukturani hisoblashning yarim empirik usullarini izohlash.
- Aralash rejimdagi hisob-kitoblarni o'rgatish.

Modul bo'yicha tinglovchilarning bilimi, ko'nikmasi, malakasi va kompetentsiyalariga qo'yiladigan talablar

“Kvant-mexanik modellashtirish va hisoblash usullari” modulini o'zlashtirish jarayonida amalga oshiriladigan masalalar doirasida:

Tinglovchi:

- murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirish uchun qo'llaniladigan paketlarni;
- HYPERCHEM da modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish usullarini;
- bir nuqtada energiyasini hisoblashning klassik Nyuton usulini;
- kuch maydoni dialog oynasini;
- yarim empirik usul dialog oynasini;
- boshqa yarim empirik usullar uchun dialog oynasini **bilishi lozim**.

Tinglovchi:

- kvant-kimyoviy hisoblash kimyoviy tadqiqotning samarali usuli sifatida Xartri - Fok usulidan foydalanish;
- HYPERCHEM da modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish;
- bir nuqtada energiyasini hisoblashning klassik Nyuton usulini tahlil qilish;
- molekulyar mexanikaning dialog oynasi MM + Variantlar foydalanish;
- shredinger tenglamasini yarimempirik usulda echish;
- klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish; **ko'nikmalariga ega bo'lishi lozim**.

Tinglovchi:

- klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini ishga tushirish;
- atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan qurish va tahrirlash.
- klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini sonli hisoblash.
- klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash *malakalariga* ega bo'lishi zarur.

Tinglovchi:

- atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan tahrirlash;
- ma'lumotlar bazasidagi eksperimental cho'qqilarni raqamli bilan taqqoslash.
- atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan tahrirlash *kompetentsiyalariga* ega bo'lishi lozim.

Modulning o'quv rejadagi boshqa fanlar bilan bog'liqligi va uzviyligi

“Kvant-mexanik xisoblash usullari” moduli o'quv rejadagi quyidagi fanlar bilan bog'liq: “Elektron uskunalarni ishlab chiqarish texnologiyasi” va Elektron apparatlarining ishonchliligin hisoblash usullari”.

Modulning oliy ta'limdagi o'rni

Modulni o'zlashtirish orqali tinglovchilar elektron komponentlar, qurilmalarni o'rganish, amalda qo'llash va baholashga doir kasbiy kompetentlikka ega bo'ladilar.

Modul birliklari bo'yicha soatlar taqsimoti:

№	Modul mavzulari	Tinglovchining o'quv yuklamasi, soat			
		Jami	Nazaiy	Amaliy mashg'ulot	Ko'chma mashg'ulot
1.	Kvant-kimyoviy va sonli hisoblash paketining ishlash printsipt	2	2		
2.	Molekulyar mexanika	2	2		
3.	Elektron strukturani hisoblashning yarim empirik usullari	2	2		
4.	Aralash rejimdagi hisob-kitoblar	6	2		4
5.	Klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish va ishga tushirish	2		2	
6.	Atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan qurish va tahrirlash	4		4	
7.	Klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini sonli hisoblash	2		2	
8.	Klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash. Ma'lumotlar bazasidagi eksperimental cho'qqilarni raqamli bilan taqqoslash	4		4	
	Jami:	26	8	12	4

NAZARIY MASHFULOTLAR MAZMUNI

1-maruza: Kvant-kimyoviy va sonli hisoblash paketining ishlash printsipt.

Murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirish uchun qo'llaniladigan paketlar. Kvant-kimyoviy hisoblash kimyoviy tadqiqotning samarali usuli sifatida Xartri - Fok usuli. HYPERCHEM da modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish.

2-mavzu: Molekulyar mexanika.

Bir nuqtada energiyasini hisoblashning klassik Nyuton usuli. Molekulyar mexanikaning dialog oynasi MM + Variantlar. Kuch maydoni dialog oynasini (Force Field Options Dialog Box).

**3-mavzu:Elektron strukturani hisoblashning yarim empirik usullari.
(yarim empirik).**

Shredinger tenglamasini yarimempirik usulda echish. Yarim empirik usul dialog oynasi. Boshqa yarim empirik usullar uchun dialog oynasi.

4-mavzu:Aralash rejimdagi hisob-kitoblar.

Aralash rejimdagi hisob-kitoblar. Ab initio Xartri-Fok usuli. Ab initio Advanced options dialog oynasi.

AMALIY MASHFULOT MAZMUNI

1-amaliy mashg'ulot: Klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish va ishga tushirish.

Klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish va ishga tushirish.

2-amaliy mashg'ulot: Atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan qurish va tahrirlash.

Atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan qurish va tahrirlash.

3-amaliy mashg'ulot: Klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini sonli hisoblash.

Klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini sonli hisoblash.

4-amaliy mashg'ulot: Klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash. Ma'lumotlar bazasidagi eksperimental cho'qqilarni raqamli bilan taqqoslash.

Klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash. Ma'lumotlar bazasidagi eksperimental cho'qqilarni raqamli bilan taqqoslash.

KO'CHMA MASHG'ULOT MAZMUNI

Mavzu: Aralash rejimdagi hisob-kitoblar.

Ko'chma mashg'ulotni tinglovchilarni TDTU "Raqamli elektronika va mikroelektronika" kafedrasining laboratoriya xonasida o'tkazish rejalashtirilgan.

TA'LIMNI TASHKIL ETISH SHAKLLARI

Ta'limni tashkil etish shakllari aniq o'quv materialini mazmuni ustida ishlayotganda o'qituvchini tinglovchilar bilan o'zaro harakatini tartiblashtirishni, yo'lga qo'yishni, tizimga keltirishni nazarda tutadi.

Modulni o'qitish jarayonida quyidagi ta'limning tashkil etish shakllaridan foydalaniladi:

- ✓ ma'ruza;
- ✓ amaliy mashg'ulot;
- ✓ ko'chma mashg'ulot.

O'quv ishini tashkil etish usuliga ko'ra:

- ✓ jamoaviy;
- ✓ guruhli (kichik guruhlarda, juftlikda);
- ✓ yakka tartibda.

Jamoaviy ishlash – Bunda o'qituvchi guruhlarining bilish faoliyatiga rahbarlik qilib, o'quv maqsadiga erishish uchun o'zi belgilaydigan didaktik va tarbiyaviy vazifalarga erishish uchun xilma-xil metodlardan foydalanadi.

Guruhlarda ishlash – bu o'quv topshirig'ini hamkorlikda bajarish uchun tashkil etilgan, o'quv jarayonida kichik guruhlarda ishlashda (3tadan – 7 tagacha ishtirokchi) faol rol o'ynaydigan ishtirokchilarga qaratilgan ta'limni tashkil etish shaklidir. O'qitish metodiga ko'ra guruhni kichik guruhlarga, juftliklarga va guruhlarora shaklga bo'lish mumkin.

Bir turdagi guruhli ish o'quv guruhlari uchun bir turdagi topshiriq bajarishni nazarda tutadi.

Tabaqalashgan guruhli ish guruhlarda turli topshiriqlarni bajarishni nazarda tutadi.

Yakka tartibdagi shaklda - har bir ta'lim oluvchiga alohida- alohida mustaqil vazifalar beriladi, vazifaning bajarilishi nazorat qilinadi.

II. MODULNI O'QITISHDA FOYDALANILADIGAN INTREFAOL TA'LIM METODLARI

“Tushunchalar tahlili” metodi

Tushunchalar tahlili metodi- yangi mavzuni o'tishdan oldin ta'lim oluvchilarning birlamchi bilimlarini aniqlash va faollashtirish maqsadida, yoki asosiy qismdan keyin o'tilgan mavzuni qay darajada o'zlashtirilganini aniqlash maqsadida ishlatiladi.

Metodning amalga oshirishi: Ta'lim oluvchilarga kartochkalar tarqatiladi. Kartochkaning bir tomonida o'rganilishi lozim bo'lgan tushunchalar va ikkinchi tomonida tushunchalar mazmuni. Ushbu metoddan yakka tartibda, kichik guruhlarda amalga oshirish mumkin.

Vazifaning bajarilishi: berilgan kartochkalardagi tushunchalarning mazmunini ta'lim oluvchilar to'ldirib chiqadi va ta'lim beruvchi to'g'ri javobi bilan solishtiriladi. Nechta to'ri javob berilganiga qarab vazifalar baholaniladi.

Mazkur metod qo'llanilganda ta'lim oluvchilarning faolligi oshadi, mavzuga bo'lgan qiziqishi yuqori darajada bo'ladi hamda o'z bilimlarini baholash imkoniyati bo'ladi.

“Muammoli vaziyat” metodi -

“Muammoli vaziyat” metodi - ta'lim oluvchilarda muammoli vaziyatlarning sabab va oqibatlarini tahlil qilish hamda ularning yechimini topish bo'yicha ko'nikmalarini shakllantirishga qaratilgan metoddir.

“Muammoli vaziyat” metodi uchun tanlangan muammoning murakkabligi ta'lim oluvchilarning bilim darajalariga mos kelishi kerak. Ular qo'yilgan muammoning

yechimini topishga qodir bo‘lishlari kerak, aks holda yechimni topa olmagach, ta’lim oluvchilarning qiziqishlari so‘nishiga, o‘zlariga bo‘lgan ishonchlarining yo‘qolishiga olib keladi. «Muammoli vaziyat» metodi qo‘llanilganda ta’lim oluvchilar mustaqil fikr yuritishni, muammoning sabab va oqibatlarini tahlil qilishni, uning yechimini topishni o‘rganadilar.

“Muammoli vaziyat” metodining bosqichlari quyidagilardan iborat:

1. Ta’lim beruvchi mavzu bo‘yicha muammoli vaziyatni tanlaydi, maqsad va vazifalarni aniqlaydi. Ta’lim beruvchi ta’lim oluvchilarga muammoni bayon qiladi.
2. Ta’lim beruvchi ta’lim oluvchilarni topshiriqning maqsad, vazifalari va shartlari bilan tanishtiradi.
3. Ta’lim beruvchi ta’lim oluvchilarni kichik guruhlariga ajratadi.
4. Kichik guruhlar berilgan muammoli vaziyatni o‘rganadilar. Muammoning kelib chiqish sabablarini aniqlaydilar va har bir guruh taqdimot qiladi. Barcha taqdimotdan so‘ng bir xil fikrlar jamlanadi.
5. Bu bosqichda berilgan vaqt mobaynida muammoning oqibatlari to‘g‘risida fikr-mulohazalarini taqdimot qiladilar. Taqdimotdan so‘ng bir xil fikrlar jamlanadi.
6. Muammoni yechishning turli imkoniyatlarini muhokama qiladilar, ularni tahlil qiladilar. Muammoli vaziyatni yechish yo‘llarini ishlab chiqadilar.
7. Kichik guruhlar muammoli vaziyatning yechimi bo‘yicha taqdimot qiladilar va o‘z variantlarini taklif etadilar.
8. Barcha taqdimotdan so‘ng bir xil yechimlar jamlanadi. Guruh ta’lim beruvchi bilan birgalikda muammoli vaziyatni yechish yo‘llarining eng maqbul variantlarini tanlab oladi.

III. NAZARIY MATERIALLAR

1- ma'ruza: Kvant-kimyoviy va sonli hisoblash paketining ishlash printsiplari

Reja:

1. Murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirish uchun qo'llaniladigan paketlar.
2. Kvant-kimyoviy hisoblash kimyoviy tadqiqotning samarali usuli sifatida
3. Xartri - Fok usuli
4. HYPERCHEM-da modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish

Kalit so'zlar: Xartri - Fok usuli, kvant-kimyoviy hisoblash, yarim empirik usul, takrorlanuvchanlik, inversiyalar, bog'lanish uzunligi, dipol momenti, elektrostatik potentsial.

1.1. Murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirish uchun qo'llaniladigan paketlar.

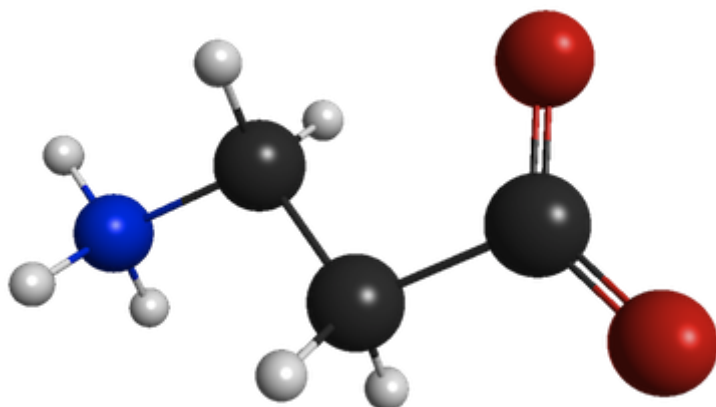
Hozirgi kunda molekulyar, kristalli va o'tish (nano) kattalikdagi murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli modellashtirishda kvant kimyoviy va molekulyar dinamikaning usullari keng qo'llanilmoqda. Bu tegishli dasturiy ta'minotning texnologik rivojlanishi bilan bog'liq.

Bizning atrofimizdagi barcha moddalar kichik zarrachalardan iborat: molekulalar, atomlar, protonlar, elektronlar va boshqalar. 20-asrning boshlarida ushbu xilma-xillikni tavsiflash uchun olimlar kvant mexanikasi apparatini ishlab chiqdilar. Uning asosiy g'oyasi - sof holatlar uchun to'lqin funktsiyalaridan yoki aralashgan xolatlar uchun zichlik matritsasiidan foydalanish, bu orqali kosmosda zarrachani topish ehtimoli zichligini hisoblash mumkin. Ammo yuqoridagi zarrachalardan tashkil topgan tizimlar nihoyatda murakkab bo'lganligi sababli, Shredinger tenglamasini analitik echish mumkin emas.

Ammo bir qator taxminlar va soddalashtirishlarni amalga oshirib, juda katta tenglamalar tizimiga o'tish mumkin. Gamiltonianlar bilan haqiqiy Shredinger tenglamasidan barcha o'zaro ta'sirlarni hisobga olgan holda oddiyroq modelga o'tish tartibi yaxshi tasvirlangan, masalan, "Molekulyar tuzilish nazariyasi" kitobida

Minkin VI, Simkin B.Ya., Minyaev RM. bu keng yo'ritilgan. Shunday qilib, barcha vazifalar kompyuterda hisob-kitoblarga qisqartiriladi.

Kvant kimyoviy hisoblash foydalanib tizimning optimal geometriyasini, tebranish spektrlarini, asosiy holatlarning energiyasini, termodinamik parametrlarini (garchi yaqinlashuvlardan biri atomlarning yadrolari harakatlanmasligiga olib keladi va shuning uchun harorat mutloq nolga teng bo'lsa), elektr maydonlarining parametrlarini, zichlik va elektronlarning taqsimlanishini aniqlash mumkin. Hisob-kitoblar va eksperimental usullardan birgalikda foydalanish yangi ma'lumotlarni olishga olib keladi va tajribalar natijalarini tekshirish yoki tushuntirishga imkon beradi. Bundan tashqari, quyida keltirilgan rasmlarni osongina suratga olish mumkin bo'lgan dasturiy ta'minot to'plami mavjud va agar siz ularni aks ettiradigan sirtlarni, masalan, qisman zaryadlarni chizsangiz, darslik uchun juda chiroyli bo'ladi.



To'g'ridan-to'g'ri hisob-kitoblar uchun dasturiy ta'minotni ham pullik, ham bepul topish mumkin. Hammasi tadqiqotchining imkoniyatlariga bog'liq. Gauss tiliga e'tibor bering va Firefly bepul dasturlar. Gauss tili juda qimmat. Hisoblashning yuqori ko'rsatkichlari olimlar uchun juda muhimdir, chunki katta tizimlar yoki yuqori aniqlik katta miqdordagi hisoblashni talab qiladi. Ular ko'plab protsessorlarda bir necha oy kompyuter vaqtini olishlari mumkin. Bu vaqt oddiy kompyuterda yillarni hisoblashdan ko'ra yaxshiroqdir.

Rivojlanayotgan har qanday fan o'z ob'ektlarini sifat jihatidan miqdoriy tavsiflashga o'tadi va tobora ko'proq matematik apparatdan foydalanadi. Bu kimyoda ham sodir bo'ladi. Bugungi kunda molekullarning ko'plab xususiyatlarini,

moddalarning ayrim sinflarini va kimyoviy hodisalarni tajriba o'tkazmasdan, qimmatbaho uskunalari va reaktivlardan foydalanmasdan tushunish va hatto kuzatish mumkin. Bundan tashqari, tajribalarda har doim ham mavjud bo'lmagan ma'lumotlarni olish mumkin. Kvant kimyosi, kompyuter texnologiyalari va yuqori darajadagi dasturiy ta'minotni yaratishning jadal rivojlanishi kvant kimyosi molekulyar tizimlarning geometrik tuzilishi, ularning barqarorligi, kimyoviy reaksiyalar mexanizmlari va turli xil fizik-kimyoviy, kimyoviy va tajriba ma'lumotlarini talqin qilish muammolarini o'rganishning asosiy vositasiga aylandi. jismoniy usullar. Shu bilan birga, nafaqat ma'lum birikmalar, balki gipotetik molekullar, oraliq mahsulotlar, kimyoviy reaksiyalardagi o'tish holatlari va hatto xayoliy kimyoviy narsalarning xususiyatlarini o'rganish mumkin bo'ldi. Ko'pincha, bunday birikmalarni hisoblashda ma'lum molekullarga qaraganda ko'proq muammolar bo'lmaydi.

1.2. Kvant-kimyoviy hisoblash kimyoviy tadqiqotning samarali usuli sifatida.

Ma'lum va noma'lum bo'lgan atom-molekulyar tuzilmalarning fazoviy va elektron tuzilishini, fizik-kimyoviy va kimyoviy xususiyatlarini kvant-kimyoviy modellashtirish va ularning birikmalari kimyoviy tadqiqotning samarali usuli hisoblanadi.

Bunday modellashtirishning muhim bosqichi o'rganilayotgan tizimning to'g'ri kvant-kimyoviy hisobini amalga oshirishdir. Amaliy kvant kimyosi kvant kimyoviy hisob-kitoblari va ularning natijalarini klassik va kvant nazariyalari nuqtai nazaridan talqin qilish bilan shug'ullanadi.

Iqtisodiy nuqtai nazardan, kvant-kimyoviy hisoblash, qoida tariqasida, eksperimental tadqiqot usullaridan ko'ra ko'proq maqsadga muvofiqdir. Kvant kimyoviy hisob-kitoblarni amalga oshirish uchun tadqiqotchiga tobora arzonlashib kelayotgan kompyuter texnologiyalari va kvant kimyoviy dasturlari kerak. Hisob-kitoblarning murakkabligi faqat atomik tarkibi, hajmi va molekulyar tizimlarning o'rganilgan holatlari bilan belgilanadi.

Kvant kimyoviy hisob-kitoblarning axborot tarkibi, shuningdek, molekulalarning tuzilishini o'rganishning eksperimental usullari bilan taqqoslaganda ancha yuqori. Darhaqiqat, bir yoki ikkita hisob-kitoblarda darhol molekula geometriyasi, holatning termodinamik funksiyalari, ionlanish energiyalari, dipol momenti, elektron zichligi taqsimoti, elektron spektr va boshqalar haqida ma'lumot olish mumkin. Eksperimental usullarning hech biri bunday keng ma'lumotlar to'plamini taqdim etmaydi. Bundan tashqari, molekulalarning hisoblangan ba'zi xususiyatlarini va ularning birlashmalarini (bog'lanish tartiblari, erkin kovalentliklar, o'tish holatlarining xususiyatlari) eksperimental tarzda aniqlash mumkin emas, ammo ular kimyoviy reaksiyalarda molekulalarning xatti-harakatlarini tavsiflash uchun muhim ahamiyatga ega.

Kichik molekulyar tizimlar xossalari qiymatlarining elektron korrelyatsiyasini hisobga olgan holda keng asoslarda va kvant-kimyoviy hisoblangan ishonchliligi etarli darajada. Ammo, umuman olganda, amalda muhim bo'lgan ko'p atomli molekulalar va turli xil materiallarning model tizimlari uchun olingan natijalarning ishonchliligi hali ham past. Shuning uchun, aniq muammolarni hal qilishda ularning ishonchliligini isbotlash majburiydir. Bunga odatda turli xil taxminlarda olingan ma'lumotlarni taqqoslash orqali erishiladi. Masalan, empirik bo'lmagan hisob-kitoblarda, buning uchun har xil kenglik va egiluvchanlikning asosiy to'plamlari, turli darajadagi elektron korrelyatsiya hisobi ishlatilishi mumkin. Yarim empirik hisob-kitoblarda, shu maqsadda, hisob-kitob natijalarini empirik bo'lmagan yuqori darajadagi hisob-kitoblar bilan yoki tajriba bilan tanlab taqqoslash amalga oshiriladi; oldindan, oddiyroq va ilgari yaxshi o'rganilgan tizimlar misollaridan foydalangan holda ular qo'llanilgan usulning etarligini isbotlaydilar. Olingan natijalarning ishonchliligi uchun eng muhim mezon ularni eksperimental ma'lumotlar bilan taqqoslashdir.

Amalga oshirilgan kvant kimyoviy hisobining aniqligi ko'rib chiqilayotgan xususiyatga bog'liq. Bunday holda, biz faqat eksperimental ravishda kuzatilgan xususiyatlarni hisoblashning aniqligi haqida gapirishimiz mumkin. Molekulalar va moddaning kuzatib bo'lmaydigan xususiyatlariga, masalan, kimyoviy bog'lanish

tartibiga, elektronlarning o'zaro bog'liqlik energiyasiga va boshqalarga kelsak, bu holda biz ularning takrorlanuvchanligi haqida gapirishimiz mumkin. Hisob-kitoblarning aniqligi hisoblangan va eksperimental ma'lumotlarni taqqoslash yo'li bilan aniqlanadi va takroriylik turli xil taxminlarda hisoblangan miqdorlarning qiymatlarini taqqoslash orqali aniqlanadi.

Hozirgi vaqtda kvant kimyosi asosiy holatdagi ajratilgan kichik, o'rta kattalikdagi va hattoki ba'zi yirik molekulalarning xususiyatlarini maqbul aniqlik bilan tasvirlashga imkon beradi. Hozircha molekulalarning ko'plab hayajonlangan holatlari va materiyaning quyuqlashgan holatini tavsiflovchi molekulalararo o'zaro ta'sirlarni hisoblashda natijalar unchalik ishonchli emas.

Amalga oshirilgan kvant kimyoviy hisobining aniqligi ko'rib chiqilayotgan xususiyatga bog'liq. Bunday holda, biz faqat eksperimental ravishda kuzatilgan xususiyatlarni hisoblashning aniqligi haqida gapirishimiz mumkin. Molekulalar va moddaning kuzatib bo'lmaydigan xususiyatlariga, masalan, kimyoviy bog'lanish tartibiga, elektronlarning o'zaro bog'liqlik energiyasiga va boshqalarga kelsak, bu holda biz ularning takrorlanuvchanligi haqida gapirishimiz mumkin. Hisob-kitoblarning aniqligi hisoblangan va eksperimental ma'lumotlarni taqqoslash yo'li bilan aniqlanadi va takroriylik turli xil taxminlarda hisoblangan miqdorlarning qiymatlarini taqqoslash orqali aniqlanadi.

Tajriba shuni ko'rsatadiki, ishlatilgan asoslar to'plami qanchalik keng bo'lsa va elektron korrelyatsiya qanchalik to'liq hisobga olinsa, molekulalarning geometrik parametrlarini ab initio usullari bilan hisob-kitoblarning aniqligi shuncha yuqori bo'ladi. Asosan davriy tizimning kichik davrlari elementlari tomonidan hosil qilingan molekulalarning hisob-kitoblarida olingan bir qator miqdorlarni hisoblash aniqligining taxminiy baholari Jadvalda keltirilgan. 1.

Jadval 1.

Molekulyar xususiyatlarni usul bilan hisoblashdagi xatolar HF

Xususiyat	Minimal asoslar to'plamlari	Polarizatsiya funktsiyasi bilan bo'linish valentligi	Kengaytirilgan BN va elektron korrelyatsiya hisobi
Uzunlik Aloqa. A, pm	2-3	1-2	0,5
Obligatsiya burchaklari A, daraja	co	1-2	0,7
Burilish burchaklari A, daraja	Более 10	3-9	2-3
Etanning ichki aylanish to'sig'i, kJ / mol	12,6	12,7	<ul style="list-style-type: none"> ○ 12,4 ○ (12,3 — эксп.)
Xossalari	Minimal asoslar to'plamlari	Polarizatsiya funktsiyasi bilan bo'linish valentligi	Kengaytirilgan BN va elektron korrelyatsiya hisobi
A, kJ / mol reaksiyalarining issiqlik	Haqiqiy emas natijalar, xatolar	10 gacha 100 gacha 100 dan ortiq	"10

effektleri: gomodesmichlar; izodemik; anizodezmik	juda katta		
Ionlanish energiyalari A, eV	До 1 и более	0,2-0,4	0,1-0,25
Molekulararo ta'sir o'tkazish energiyasi	Haqiqiy emas. ma'no	120-130% ga yuqori baholangan	
Quvvatli doimiy ?,%	20-30 ga yuqori baholangan	5-20 ga yuqori baholangan	5 dan kam
Vibratsiyali spektr lentalarining intensivligi 8, %		-100	“30
Dipol momenti d,d		0,26	0,34

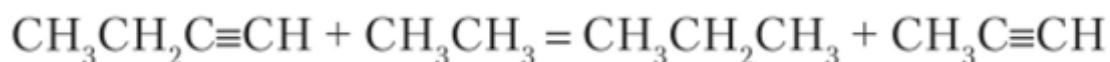
Eslatma. Jadvalda asoslar to'plamlarining sin turlaridan foydalanganda davriy tizimning dastlabki uch davrining kimyoviy elementlari tomonidan hosil bo'lgan ba'zi bir kichik va o'rta molekularning xususiyatlarini hisoblashdagi mutlaq (D) yoki nisbiy (e) xatolarining o'rtacha qiymatlari ko'rsatilgan.

Qattiq bo'lmagan molekularning ichki aylanishi yoki teskari aylanishi paytida o'zaro bog'liqlik energiyasi saqlanib qoladi (chunki konformatsion o'tish paytida molekulaning elektron juftlari soni o'zgarmaydi), chunki elektron korrelyatsiyani

hisobga olish hisoblashning aniqligiga juda oz ta'sir qiladi. DZ-bazis to'plamlarda polarizatsiya funktsiyalaridan majburiy foydalanish bilan u allaqachon ancha yuqori. Umuman olganda, guruhlarning aylanishi va teskari yo'nalishi bilan aniqlangan konformatsion o'tish energiyasini hisoblashdagi xato ~ 9 kJ / mol.

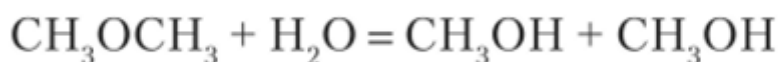
Muayyan muammo - bu reaksiyalarning issiqlik ta'sirini hisoblashning aniqligi. Bunday holda, ± 10 kJ / mol gacha bo'lgan xato bilan energiya tavsiflarining qiymatlarini beradigan hisob-kitoblar kimyoviy aniqlik bilan bajarilgan deb hisoblanadi.

Buning uchun barcha reaksiyalarni uch turga ajratish qulay: gomodezmik, izodemik va anizodezik. Reaksiya mahsulotlarining molekularida klassik ikki markazli kimyoviy bog'lanishlar va har bir turdagi yakka elektron juftlari soni boshlang'ich moddalar molekulariga nisbatan o'zgarishsiz qoladigan kimyoviy reaksiyalar deyiladi. Masalan, butin va etanni propan va propinga qayta tashkil etish reaksiyasi homodezmga tegishli



Bunday reaksiyalarda korrelyatsiya energiyasining saqlanishi (o'zgarmasligi) sodir bo'ladi, shuning uchun DZP darajasida (va undan ham pastroq) issiqlik ta'sirini hisoblashning aniqligi juda yuqori va kimyoviy aniqlikda.

Bir oz kamroq darajada korrelyatsiya energiyasini saqlash izodemik reaksiyalarda sodir bo'ladi, bunda har bir turdagi kimyoviy bog'lanishlar soni ham o'zgarmaydi. Biroq, ularda alohida atomlarda har xil turdagi bog'lanishlar soni o'zgaradi. Masalan, reaksiya tenglamasining chap va o'ng tomonlarida



izodemik bilan bog'liq bo'lib, kislorod atomlaridagi geminal atomlarning turlari saqlanib qolmagan. Korrelyatsiya energiyasining past darajada saqlanishi tufayli izodemik reaksiyalarning issiqlik effektlari gomodezmiklarga qaraganda katta xato bilan hisoblanadi.

Qolganlari va eng keng tarqalgan reaksiyalari anizodezikdir. Ular har bir turdagi kimyoviy bog'lanishlar sonini saqlamaydilar. Masalan, har qanday dissotsiatsiya yoki parchalanish reaksiyasi anizodezikdir. Bunday reaksiyalarning issiqlik effektlarini hisoblashda elektronlarning korrelyatsion energiyasini hisobga olishga qo'yiladigan talablar izo- va gomodezmiklarga nisbatan ancha yuqori.

Shunday qilib, atomizatsiya va gemolitik bog'lanishni ajratish energiyalari va reaksiyalar uchun faollashuvchi to'siqlar HF/6-'3G ** usuli bilan 100 kJ / mol dan ortiq xato bilan hisoblanadi. Bunday kimyoviy reaksiyalardagi energiya o'zgarishlarini elektronlararo korrelyatsiya hisobga olingan taqdirdagina to'g'ri hisoblash mumkin. Energiya ta'sirini kimyoviy aniqlik bilan hisoblash usullari yuqori aniqlikdagi usullar deb ataladi. Ular, odatda, G3 usuli kabi yuqori darajadagi elektron korrelyatsiya usullarini o'z ichiga oladi. Biroq, hisob-kitoblar amaliyoti shuni ko'rsatadiki, yuqori darajadagi usul har doim ham energiya ta'sirini aniqroq hisoblashga kafolat bermaydi.

Ab initio usuli bilan molekullarning normal tebranish chastotalari tajriba bilan taqqoslaganda yuqori baholanadi. Buning sababi kuch barqarorligini topish uchun harmonik yaqinlashuvdan foydalanish va dinamik elektron korrelyatsiyaga e'tibor bermaslikdir. Shu bilan birga, agar ular ma'lum bir tuzatish koeffitsienti bilan ko'paytirilsa, tajribaga juda yaqin bo'lgan chastotalarni olish mumkin, bu asoslar to'plamining turiga va elektron korrelyatsiyani hisobga olish uslubiga bog'liq. Juda past tebranish chastotalarida yuqori xatolar mavjud. Molekullarning tebranish spektrlari tasmalarining intensivligi eng kam aniq hisoblangan.

Elektron zichligi juda noaniq tavsiflangan va populyatsiya tahlilini hisoblash uslubiga bog'liq. -10% aniqlikka erishish uchun eng yaxshi hisob-kitoblar hisoblanadi.

Dipol momentlari odatda hisoblash yo'li bilan yuqori baholanadi va hisoblashning yuqori darajasi katta xatolikka olib kelishi mumkin.

Molekullarning elektron yutilish spektrlari HF usuli uchun qiyin mavzu, chunki ular hayajonlangan holatlarni va korrelyatsiya ta'sirini hisobga olishni talab qiladi.

Biroq, yadro magnit-rezonansining spektrlari etarlicha keng asoslar uchun yaxshi takrorlanadi.

1.3. Xartri-Fok usuli.

Hartree-Fock usuli va uning asosida olingan elektron korrelyatsiyasini hisobga olishning yanada murakkab HOC / T-Hartree-Fock usullari odatda 10 dan ortiq atomlardan iborat bo'lgan tizimlarni hisoblashning yuqori aniqligi talab qilinadigan ishlarda afzalroqdir. DFT usuli kattaroq tizimlarni ko'rib chiqish va hisob-kitoblarning aniqligi talablari unchalik katta bo'lmagan hollarda mos keladi. Bu Hartree - Fock usuli uchun elektronlarning korrelyatsiyasini hisobga olgan holda hisoblangan vaqt beshdan ettinchi darajalarda ($\sim N^5 - N^7$) o'rnatilgan bazaning kattaligiga to'g'ridan-to'g'ri mutanosib ekanligidan kelib chiqadi va DFT usuli juda kam vaqtni talab qiladi ($\sim ML$). Bunday holda, DFT usuli, makromolekulalar, echimlar, materialshunoslik muammolari, kataliz va boshqalarni o'rganish uchun alohida qiziqish uyg'otadigan molekulyar tizimlarning (100-200 atom) hisob-kitoblariga yaqinlashishga imkon beradi, bundan tashqari, Shredinger to'lqin tenglamasining echimi, asosan, ma'lum darajada har qanday molekulyar tizim uchun olinishi mumkin. aniqlik. Amalda, cheklovlar faqat kompyuterning kuchi bilan belgilanadi. Ammo DFT usuli bunday imkoniyatga ega emas, chunki almashinuv-korrelyatsion energiya funktsional shaklini muntazam ravishda takomillashtirish usullari noma'lum.

DFT usuli bilan olingan molekulyar geometriyalar HF ramkasida joylashganlardan sezilarli darajada yaxshiroq va MP2 / HF yaqinlashuvida olingan natijalarga yaqin. Metod, funktsionallarni gradient tuzatishlari bilan ishlatishda vodorodning yaxshi bog'lanishini tavsiflaydi. DFT an'anaviy ravishda Xartri-Fok usuli uchun qiyin bo'lgan FOOF, FON, organometalik va noorganik birikmalar kabi qiyin bo'lgan molekulalarni hisoblashda muvaffaqiyat qozonmoqda. Shu munosabat bilan, agar ab initio usuli qoniqarli natija bermasa, u holda DFT usulini qo'llash kerakligi ta'kidlangan. Ammo organik reaksiyalarning o'tish holatlari ko'pincha

"sof" DFF usuli bilan ko'paytiriladi, garchi u organometalik reaksiyalar uchun mos bo'lsa.

DFF usuli 10 kJ / mol aniqlikdagi 55 ta molekula (G2 to'plami) standart to'plamining eksperimental atomizatsiya energiyasini tavsiflashga imkon beradi. Dissotsilanish energiyalarini hisoblash natijalari, hatto gradient tuzatishlarisiz ham HF usulidan ancha yaxshi. To'g'ri, agar Hartree - Fock usuli past baholasa, u holda DFT usuli majburiy energiyani ortiqcha baholaydi. LDA yaqinlashuvidagi DFT natijalarining sifati MP2 / HF usuli bilan bir xil. Gradient tuzatishlarining kiritilishi DFT usulini dissotsilanish energiyalariga Hartree - Fock usuli bilan MPA dan elektron korrelyatsiyasini hisoblash yoki konfiguratsion o'zaro ta'sir bilan olib keladi.

Ionlanish energiyasi, elektronga yaqinlik va protonga yaqinlik DFTdagi gradient tuzatishlari bilan oqilona tarzda qayta ishlab chiqariladi.

Tebranish chastotalari DFT usuli bilan yaxshi takrorlanadi va gradient tuzatishlarini hisobga olgan holda tajriba bilan kelishuv yanada yaxshilanadi. Shunday qilib, bir qator molekular uchun HF / 6-31G ** usulidagi normal tebranishlar chastotalarini to'g'rilash koeffitsienti 0,895 ni tashkil etdi, shu bilan DFT usuli birlikka ancha yaqin qiymatlarni beradi: 0,995 (BLYP almashinuvi korrelyatsiyasi funksional uchun), 0,991 (BP86), 0,961 (B3LYP) va 0,957 (B3PW91).

Bundan tashqari, HF usuli bilan taqqoslaganda, elektron yutilish spektrlarining D / T-hisoblari (tavsiya etilgan 6-311 ++ G ** asosda) va molekularning yadro magnit-rezonans spektrlari.

Molekularning dipol momentlari ham Xartri - Fok usuli bilan taqqoslaganda DFT usuli bilan yaxshiroq tavsiflanadi. Masalan, dastlabki uch davr elementlari atomlaridan kichik molekular uchun B3LYP / 6-31G ** usuli bo'yicha dipol momentini hisoblashda o'rtacha absolyut xato 0.11 D ni tashkil etdi. 34 A.

Yarim empirik usullar molekularning ba'zi xususiyatlarini ko'paytiradigan tarzda parametrlanadi. Shuning uchun, bitta parametrlar to'plamiga asoslangan

barcha xususiyatlarni hisoblash odatda amalga oshirilmaydi. MNDO yaqinlashishiga asoslangan eng mashhur usullar ushbu qoidadan qisman istisno qilishni anglatadi. 1-jadvaldagi ma'lumotlar ularni molekularning xususiyatlarini hisoblashning to'g'riligini ko'rsatadi. 17.2. Organik molekular uchun MNDO usulining uchta versiyasi ham taxminan bir xil natijalarni berishi aniq. Anorganik birikmalarga o'tishda xatolar bir necha bor ortadi. Bu erda eng yaxshi natijalar s/p - orbitalarni (MNDO / d) o'z ichiga olgan usul bilan ko'rsatilgan. Bu gipervalentli birikmalar hosil bo'lishining entalpiyalarini ko'rib chiqishda juda muhimdir, buning uchun bir qator usullarda hisoblash xatolari: MNDO, AM 1, RMZ, MNDO / d 26 martadan ko'proq kamayadi.

Umuman olganda, xatolarning statistik tahlili shuni ko'rsatadiki, ab initio bilan taqqoslaganda, yarim molekulyar MNDO usullarini juda kam kompyuter vaqtida ko'plab molekularni hisoblash uchun etarlicha aniqlikda qo'llash mumkin. Ularning hosil bo'lish entalpiyalarini hisoblashdagi xatoliklar DFT usulining quyidagi funktsiyalari bilan xatolari bilan taqqoslanadi (va hattoki kamroq): BLYP; VR86, LDA (SVWN), ammo B3LYP yarimempirik funktsiyasi bilan hisoblashdagi xatolar ikki-uch baravar yuqori.

CNDO / S va INDO / S usullari bilan to'yinmagan molekularlarda o'tishning $a \rightarrow k^*$ va $n \rightarrow k$ energiyalari 10% xato bilan hisoblanadi.

Yarimempirik usullar bilan hisoblangan samarali atom zaryadlari tanlangan uslubga juda bog'liq va ularning mutlaq va ma'lum darajada nisbiy qiymatlarini muhokama qilish uchun amalda foydalanib bo'lmaydi. Biroq, obligatsiyalar bo'yicha buyurtmalar ko'pincha bir-biriga va ab initio hisob-kitoblari natijalariga mos keladi.

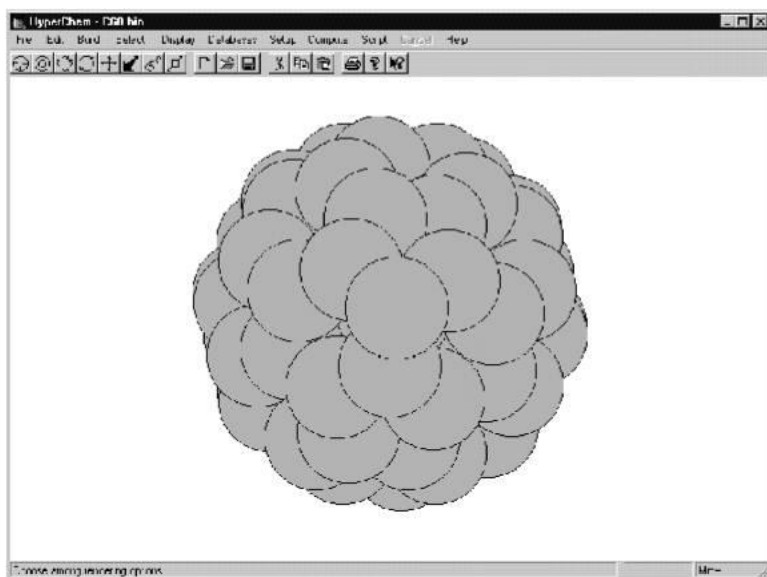
Empirik usul - ko'plab organik molekular uchun molekulyar mexanika usuli hosil bo'lish entalpiyasini -8-10 kJ / mol aniqlikda aniqlashga imkon beradi.

1.4. HYPERCHEM-da modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish.

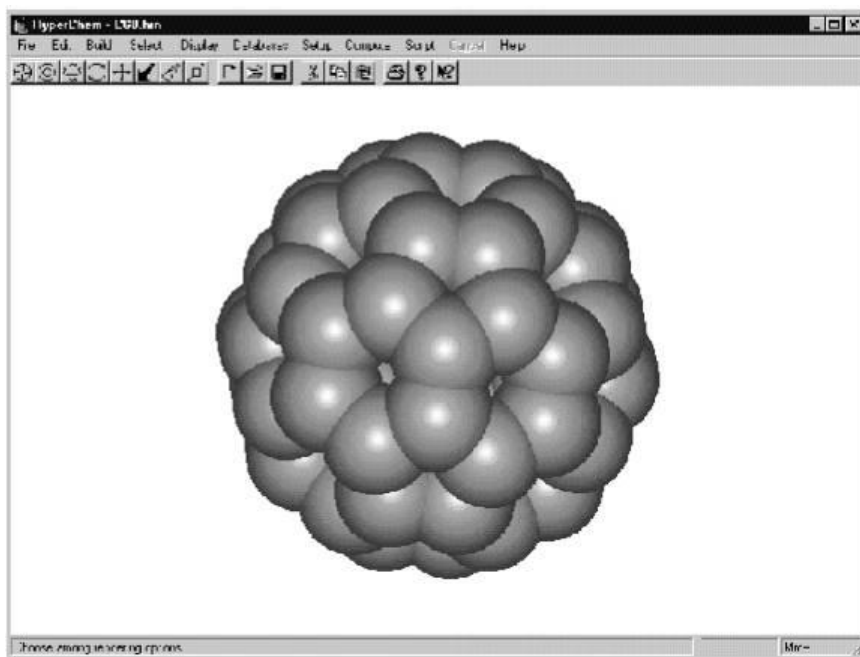
Modellashtirish natijalarini vizualizatsiya qilish, shuningdek, kuchli qidiruv vositasi bo'lib xizmat qiladi. HYPERCHEM kabi zamonaviy kvant kimyo dasturlari molekulyar tuzilmalarni qurish, tahrirlash va modellashtirish natijasida olingan ma'lumotlarni ingl. Xususan, ularning yordami bilan oqsil molekularining

murakkab molekulyar tuzilmalari vizual ravishda o'rganiladi, elektron tarqalish xarakteristikalari xaritalari, energiya va molekulyar diagrammalar, molekulyar orbital shakllar va boshqalar namoyish etiladi. Bularning barchasi ma'lumotlarni qayta ishlashning tezlashishiga, ishonchligiga va izlanayotgan qonuniyatlarning aniqlanishiga yordam beradi.

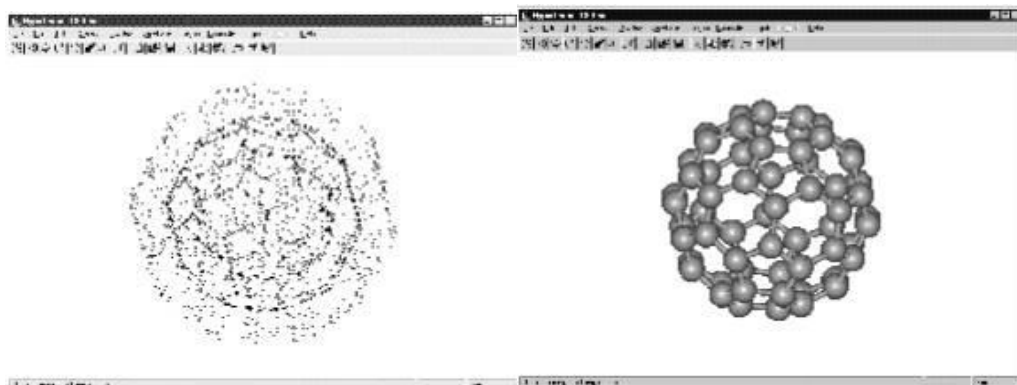
Agar siz *Shading* belgisini () olib tashlab, OK tugmasini bosgan bo'lsangiz, molekulaning taxminiy, ammo tezkor ishlov berilgan 3D tasvirini olasiz.



Agar siz *Shading*-ni belgilab, so'ng OK tugmasini bosgan bo'lsangiz, bu bo'shliq bilan to'ldirilgan tasvirni beradi.



Agar siz dialog oynasidagi Sticks & Dots (Tayoqchalar va ochkolar) ni tanlasangiz. Ushbu vakillik molekula shaklini yaxshi namoyish etadi.



[F2] tugmachasini bosish molekulaning avval tanlangan tasvir parametrlarini tiklaydi. Bu display menyusidan Last Rendering-ni tanlashga teng.

Nazorat savollari:

1. Atom-molekulyar tizimlarning elektron tuzilishi va xususiyatlarini hisoblashning empirik, yarimempirik va noempirik kvant-kimyoviy usullari o'rtasidagi farq nima? Suv molekulasida usullarning qisqacha tavsifini bering.
2. Orbitallarning modifikatsiyasi nimani anglatadi?
3. Atom orbital va bazis funktsiya o'rtasidagi farq haqida tushuncha bering.
4. Slater va Gaussning bazis funktsiyalari matematik jihatdan qanday farq qiladi?
5. Slater qoidalariga va Berns qoidalariga ko'ra, kremniy atomining $3p$ - JIO yadrosining effektiv zaryadini hisoblang.
6. Ko'p elektron tizimlarda atom ichidagi elektronni ekranlashning fizik modelini Hund qoidasiga muvofiq barqarorligini qanday tushuntiradi?
7. Nima uchun atomning effektiv zaryadini oshishi (kamayishi) bilan, Slater orbitali yadrosining effektiv zaryadlanishi ba'zan kamayishi (ko'payishi) mumkin?
8. Orbitallarning relaksatsiyasi nima?
9. Orbitallarning relaksatsiyasi bu fizik hodisani yoki matematik usulmi?
10. H_2S vodorod sulfid molekulasini hisoblash uchun bazis to'plamlar berilgan: $STO-6G'$, $3-21G$, $6-31(7^*)$, $6-31 <7^*$, $(3s2p/1s)$, $[3s2p/1s]$, $[6sApld/2slp]$. Mustaqil bazis funktsiyalar soni bo'yicha ularni tasniflang.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. W. J. Hehre, W. A. Lathan, R. Ditchfield, M. D. Newton, and J. A. Pople, Gaussian 70, Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 2005).
 2. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, P. C. Hariharan, R. Seeger, J. A. Pople, W. J. Hehre, and M. D. Newton, Gaussian 76(Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, PA, 2000).
 3. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, R. Krishnan, R. Seeger, D. J. Defrees, H. B. Schlegel, S. Topiol, L. R. Kahn, and J. A. Pople, Gaussian 80 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2003).
 4. J. S. Binkley, M. J. Frisch, D. J. Defrees, R. Krishnan, R. A. Whiteside, H. B. Schlegel, E. M. Fluder, and J. A. Pople, Gaussian 82 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2002).
- M. J. Frisch,. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 2000.-382с.

2- ma'ruza. Molekulyar mexanika. (MM)

Reja:

1. Bir nuqtada energiyasini hisoblashning klassik Nyuton usuli.
2. Molekulyar mexanikaning dialog oynasi MM + Variantlar.
3. Kuch maydoni dialog oynasini (Force Field Options Dialog Box)

***Kalit so'zlar:** bog'lanish uzunligi, bog'lanish burchagi, torsion burchagi, kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sir, davriy panjara, bo'shliqning dielektrik konstantasi.*

2.1. Bir nuqtada energiyasini hisoblashning klassik Nyuton usuli

Setup menyusida molekulyar mexanikaga mos keladigan elementni tanlash kvant-mexanik yondashuv o'rniga (yarim empirik usullardan biri yoki Xartri-Fokning ab initio usuli) bir nuqtaning energiyasini, muvozanat geometriyasini va ob'ektlarning molekulyar dinamikasini hisoblash uchun klassik Nyuton usulidan foydalanishga imkon beradi.

Molekulyar mexanika usulida atomlar bir-birlari bilan ba'zi bir empirik potentsial maydonlari orqali ta'sir o'tkazadigan Nyuton zarralari sifatida qaraladi. Potensial ta'sir o'tkazish energiyasi bog'lanish uzunligiga, bog'lanish burchaklariga, burilish burchaklariga va kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarga (shu jumladan van der Vaals kuchlari, elektrostatik o'zaro ta'sirlar va vodorod aloqalari) bog'liqdir. Ushbu hisob-kitoblarda atomlarga ta'sir qiluvchi kuchlar atomlarning koordinatalari funktsiyalari sifatida ifodalanadi.

Agar ish maydonida tizimning faqat bir qismi tanlangan bo'lsa, hisoblashda faqat tanlangan qismning o'zaro ta'siri kiradi. Geometriyani optimallashtirishda va molekulyar dinamikasi usuli bilan hisoblashda bu holda faqat tanlangan qism atomlari fazodagi o'rnini o'zgartiradi, tanlanmaganlari esa o'zgarmaydi, tizimning qismlari orasidagi potentsial o'zaro ta'sirlar hisob-kitoblarda hisobga olinadi.



Molekulyar mexanika hisob-kitoblarini boshlash uchun dialog oynasida Force field-ni tanlang - hisoblash uchun potentsial funktsiya. Tanlashning to'rtta usuli mavjud (**MM +**, **AMBER**, **BIO +**, **OPLS**), ularning havolarini dialog oynasida ko'rish mumkin.

Organik molekulalar uchun **MM+** usuli ishlab chiqilgan. Hisoblanayotgan tizimning barcha atomlari tomonidan hosil bo'lgan potentsial maydonlarni hisobga oladi va hisoblash masalalarini aniq masalaga qarab egiluvchan o'zgartirish imkoniyatini beradi, bu esa uni bir tomondan eng umumiy qiladi va boshqa tomondan molekulyar mexanikaning boshqa usullari bilan taqqoslaganda kerakli resurslarni keskin oshiradi. Ushbu usul parametrlarini o'zgartirish uchun bir qator imkoniyatlarni *Kuch maydonni* tanlash elementidagi *Options* tugmachasini tanlash orqali olish mumkin.

AMBER usuli oqsillar va nuklein kislotalar uchun ishlab chiqilgan. Unda barcha atomlarni alohida hisobga olish variantini yoki birlashtirilgan atom variantini tanlash imkoniyati mavjud, bu bir xil xususiyatlarga ega ekvivalent atomlar guruhini anglatadi. Ikkinchi holda, bir nechta atomlar yoki ularning guruhlari bitta turdagi bitta atom sifatida ko'rib chiqiladi.

BIO+ biologik makromolekulalar uchun ishlab chiqilgan va ko'p jihatdan AMBERni takrorlaydi.

OPLS oqsillar va nuklein kislotalarga mo'ljallangan. U AMBERga o'xshaydi, ammo kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni aniqroq boshqaradi.

2.2. Molekulyar mexanikaning dialog oynasi MM + Variantlar



MM + dialog oynasida tegishli kuch maydoni uchun sozlamalar to'plami mavjud.

Elektrostatik (Elektrostatik). Kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlar dipol tipidagi o'zaro ta'sirlar yoki qisman atom zaryadlari yordamida hisoblanadi.

Ö Bond dipollari kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlarni hisoblash uchun ishlatiladi. Ushbu parametrning qiymati MM+ parametr faylida aniqlanadi.

Ö atom zaryadlari kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlarni hisoblash uchun ishlatiladi. Siz Build menyusi, Set Charge elementi orqali qisman (qisman) atom zaryadlarini o'rnatishingiz mumkin yoki avval Mulliken usuli yordamida har bir atom uchun qisman zaryadlarni hisoblash orqali yarim empirik yoki ab initio hisob-kitoblarni amalga oshirishingiz mumkin.

Ochirish. Ushbu parametr kovalent bo'lmagan ta'sir o'tkazish uchun minimal masofani belgilaydi.

Switched davriy qutidagi molekullarni hisoblashda silliqlash funksiyasini kiritadi. Ushbu yondashuv zaif sferikalarni nolga teng ravishda pasaytirib, ichki sferadan tashqi tomonga o'tishga imkon beradi. Bunday holda **HyperChem** Switched parametrini va Ichki va tashqi sharlar qiymatlarini o'rnatadi.

yo'q. Ushbu parametr vakuumdagi tizimlarni hisoblash uchun o'rnatiladi.

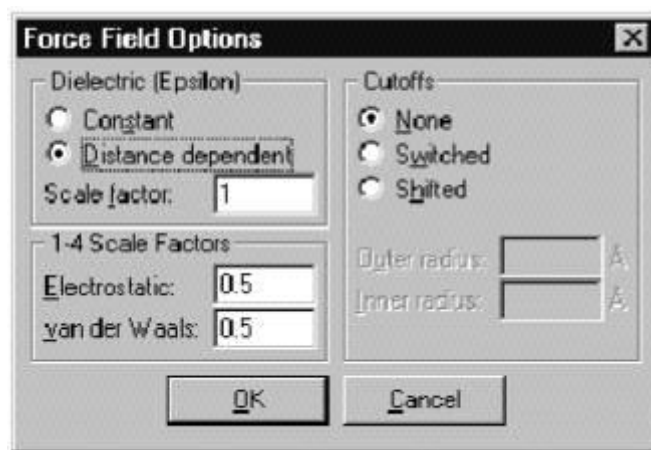
Shifted 0 dan tashqi shargacha bo'lgan butun bo'shliqqa ta'sir qiladigan tekislash funksiyasini joriy etadi. Ushbu funktsiya kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni 0 ga teng ravishda kamaytirishga imkon beradi.

O'chirilgan va almashtirilgan parametrlar uchun tashqi radius kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarning 0 ga teng bo'lishining minimal masofasini belgilaydi. Odatda bu qiymat ichki radiusdan kamida 4 angstrom kattaroq tanlanadi. Davriy chegara shartlari uchun bu qiymat davriy qutining minimal o'lchamining yarmiga teng.

Ö Ichki radius faqat o'tish tugmachalari o'rnatilganda tanlanadi. Bu kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni to'liq hisobga olish uchun maksimal atomlararo masofa. Vaqti-vaqti bilan chegara shartlari tanlanganda, bu qiymat 4 angstrom davriy qutining minimal kattaligining yarmidan kamiga yoki 0 ga qadar, ya'ni yangi molekula ish maydoniga joylashtirilgandan so'ng chiqib ketish sozlamalari o'zlarining asl qiymatlariga qaytadi.

2.3. Field Options dialog oynasini majburlash

Ushbu oyna **AMBER, BIO +** va **OPLS** kuch maydonlarining parametrlarini tanlash uchun ishlatiladi. **HyperChem** bu parametrlarning qiymatlarini, Cutoffs parametrlarini hisobga olmaganda, Registry yoki chem.ini faylida saqlaydi va undan keyingi hisob-kitoblar uchun foydalanadi.



Dielektrik o'tkazuvchanlik (epsilon) Doimiy yoki Masofaga bog'liq parametrlar dielektrik doimiyligi epsilon ning qanday hisoblanishini aniqlaydi, bu zaryadlarning o'zaro ta'sirini o'zgartiradigan omil (va elektrostatik potentsial).

doimiy. Ushbu parametрни tanlash dielektrik konstantani doimiy qiladi va Periodic Boxning davriy chegara shartlariga javob beradi. Ushbu elementni tanlash gaz fazasidagi yoki ideal eritmadagi moddaga to'g'ri keladi.

Masofaga bog'liq. Ushbu parametрни tanlash epsilon ni atomlararo masofaga mutanosib qiladi. Ushbu yondashuv ideal erituvchi bo'lmagan taqdirda solvatlanish ta'siriga yaqinlashadi va hisob-kitoblarni tezlashtirishga imkon beradi. Ushbu parametр OPLS usuli bo'yicha hisob-kitoblarda foydalanish uchun tavsiya etiladi. Ushbu parametр hal qiluvchi mavjudligini simulyatsiya qilganligi sababli, simulyatsiya qilingan tizimda erituvchi molekulalari mavjud bo'lganda uni ishlatmaslik kerak.

Agar Konstant tanlansa, $\epsilon = (\text{bo'sh joyning dielektrik sobitligi}) * (\text{shkala koeffitsienti})$. Masofaga bog'liq epsilon (ϵ) = (bo'sh joy dielektrik konstantasi) * (o'lchov koeffitsienti) * (atomlararo masofa) tanlanganida. O'lchov koeffitsienti >= 1 bo'lishi kerak. Odatiy bo'lib, u 1 ga teng deb hisoblanadi, bu hisoblangan tizimlarning aksariyati uchun qoniqarli.

1-4 Shkalali omil To'liq uchta bog'lanish bilan ajratilgan atomlar orasidagi kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlar ushbu omilga ko'paytiriladi.

Elektrostatik (Elektrostatik) uchta bog'lanish bilan ajratilgan atomlar orasidagi zaryadlarning o'zaro ta'sir kuchini o'zgartiradi. Ushbu parametр 0 dan 1 gacha

o'zgaradi. AMBER va OPLS kuch maydonlari uchun 0,5 dan foydalanish kerak, BIO + 1,0 uchun 0,5 yoki 0,4 boshqa parametrlar to'plamiga qarab tavsiya etiladi.

Van-der-Vaals (Van der Waals) van der Vaalsning uchta bog'lanish bilan ajratilgan atomlari o'rtasidagi o'zaro ta'sirini o'zgartiradi, 0 dan 1 gacha o'zgaradi. AMBER kuch maydoni uchun siz 0,5, OPLS uchun - 0,125, BIO + - uchun foydalanishingiz kerak. 1.0.

Chiqib ketish nuqtalari atomlar orasidagi kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni e'tiborsiz qoldiradigan masofani belgilaydi. Davriy qutidagi hisob-kitoblarda qo'shnilar bilan o'zaro munosabatlarni hisobga olishdan saqlanish uchun uni kiritish kerak.

Nazorat savollari

- 1.Molekulyar – kinetik nazariyaning asosiy goyalari nimalardan iborat?
- 2.Issiklik mashinalarida ishchi jismning kandy energiyasi xisobiga ish bajaradi?
- 3.F.I.K 25% bulgan issiklik mashinasi sovitgichga 600 J issiklik beradi.U kandy foydali ish bajaradi?
- 4.Universal gaz doimiysini kiymati nechaga teng?
- 5.Temperatura nima?
- 6.Issiklik mikdori kandy kattalik bilan ulchanadi?
- 7.Molekulyarkinetik nazariyaning asosiy koidalari kaysi javobda tugri kursatilgan?
- 8.Ichki energiya nima?
- 9.Jism ichki energiyasi kandy usullar bilan uzgartirish mumkin?
10. Sistemaga berilgan issiklik mikdori nima?

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. W. J. Hehre, W. A. Lathan, R. Ditchfield, M. D. Newton, and J. A. Pople, Gaussian 70, Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 2005).
2. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, P. C. Hariharan, R. Seeger, J. A. Pople, W. J. Hehre, and M. D. Newton, Gaussian 76(Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, PA, 2000).
3. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, R. Krishnan, R. Seeger, D. J. Defrees, H. B. Schlegel, S. Topiol, L. R. Kahn, and J. A. Pople, Gaussian 80 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2003).
4. J. S. Binkley, M. J. Frisch, D. J. Defrees, R. Krishnan, R. A. Whiteside, H. B. Schlegel, E. M. Fluder, and J. A. Pople, Gaussian 82 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2002).
5. M. J. Frisch,. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 2000.-382с.

3-ma'ruza. Elektron strukturani hisoblashning yarim empirik usullari (yarim empirik).

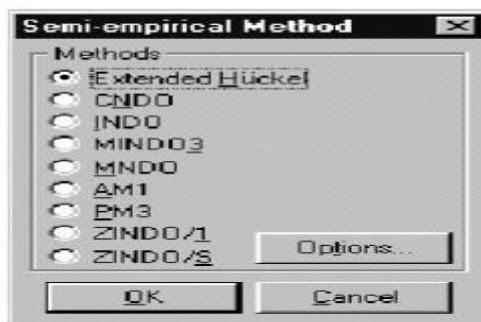
Reja:

1. Shredinger tenglamasini yarimempirik usulda echish.
2. Yarim empirik usul dialog oynasi
3. Boshqa yarim empirik usullar uchun dialog oynasi

Kalit so'zlar: yarim empirik hisoblash usullari, bir-birining ustiga chiqadigan integrallar, geometriyani optimallashtirish, simli kimyoviy hisoblash, yarim empirik usul, inversiya, bog'lanish uzunligi, dipol momenti, elektrostatik potentsial, hisobni faollashtirish, konfiguratsiyaning o'zaro ta'siri, dialog oynasi.

3.1. Shredinger tenglamasini yarimempirik usulda echish.

HyperChem dasturida o'rganilayotgan molekularning elektron tuzilishini quyidagi usullar bilan hisoblash mumkin: Setup menyusida tanlov qilish orqali yarim empirik hisoblash usullari yoki - ab initio Hartree-Fock usuli.



Hisoblash menyusidagi hisob-kitoblarning barcha turlari uchun yarim empirik hisoblash usullaridan foydalanish mumkin. Yarim-empirik usullar ba'zi yaqinlashishlar va soddalashtirishlar yordamida atomlar va molekular uchun Shredinger tenglamasini echadi. Ushbu guruhning barcha usullari quyidagilar bilan tavsiflanadi: hisoblash faqat valentlik elektronlari uchun amalga oshiriladi; ma'lum o'zaro ta'sirlarning integrallari e'tiborsiz qoldiriladi; elektron orbitallarning standart optimallashtirilmagan bazaviy funktsiyalari ishlatiladi va tajribada olingan ba'zi parametrlardan foydalaniladi. Eksperimental parametrlar bir qator miqdorlarni hisoblash va noto'g'ri taxminiy natijalarni tuzatish zaruratini yo'q qiladi. Shuni esda tutish kerakki, HyperChem-dagi yarimempirik usullar davriy jadvalning barcha elementlarini qayta ishlay olmaydi, faqat parametrlari parametr fayllariga

kiritilganlar.

HyperChem-da mavjud bo'lgan yarim empirik usullarning aksariyati protsessor vaqtini juda ko'p vaqt talab qiladigan hisob-kitoblarni yo'q qilish sxemasini o'z ichiga oladi, asosan bir-birining ustiga chiqadigan integrallarni hisoblaydi va **INDO** (Differentsial qoplanishning oraliq e'tiborsizligi) usuli (quyida ko'rib chiqing) ham itarilish integrallarini hisoblamaydi. kichik bo'lishi kerak.

HyperChem shuningdek, aralash hisoblash usullari yordamida tizimning faqat bir qismining elektron tuzilishini hisoblash imkonini beradi. Masalan, oqsil va erituvchi molekulalarining qolgan qismini molekulyar mexanika metodi doirasida hisobga olgan holda, oqsilning faol uchastkasining elektron tuzilishini o'rganish mumkin. Buning uchun hisoblashni boshlashdan oldin Select menyu vositalari yordamida tizimning kerakli qismini tanlang, so'ngra O'rnatish va Hisoblash menyularining mos parametrlarini kiriting. Ta'kidlash kerakki, bunday hisob-kitoblarni faqat tizimning tanlangan qismi ulanmagan bo'lsa amalga oshirish mumkin. molekulyar tizimning qolgan qismi bilan rasmiy kimyoviy bog'lanishlar. (Masalan, oqsilning modelini tuzish orqali biz elektron tuzilishini o'rganishimiz kerak bo'lgan faol saytning tegishli kimyoviy bog'lanishlarini olib tashlashimiz mumkin, so'ngra Select menyusining turli xil usullari yordamida faol saytni tanlashimiz mumkin. Masalan, molekulalar parametrini tanlang va bir marta bosish bilan faol markazni tanlang yoki kerakli qismdan bitta atomni tanlang, so'ngra Tanlash menyusidagi Extend to sp³ elementini tanlang, bu tanlangan atomni o'z ichiga olgan butun molekulyar tizimni ajratib turadi. Bunday holda, HyperChem dasturi kvant-kimyoviy usulda atomlarning faqat tanlangan qismini hisoblab chiqadi, qolganlarini esa faqat ma'lum potentsial sifatida ko'rib chiqadi. Geometriyani optimallashtirish jarayonida atomlarning tanlanmagan qismining koordinatalari aniqlanadi va hisoblash paytida o'zgarmaydi.

Kengaytirilgan gekel usuli (PMX) molekulyar orbitallarni hisoblash uchun mo'ljallangan va geometriyani optimallashtirish va molekulyar dinamikani hisoblash imkonini bermaydi. U o'zaro ta'sir qilmaydigan elektronlarning yaqinlashuvidan foydalanadi va o'z-o'ziga mos keladigan maydon (SCF)

yaqinlashuvidan foydalanmaydi.

Differentsial ustma-ust tushishning to'liq e'tiborsizligi (CNDO) usuli eng oddiy SCF usuli hisoblanadi. Ochiq va yopiq qobiqlarga ega tizimlarning elektron xarakteristikalarining asosiy holatini hisoblash, geometriya va umumiy energiyani optimallashtirish uchun foydalaniladi.

INDO usuli (Differentsial qoplanishning oraliq e'tiborsizligi) bir atom markazida elektronlarning itarilishini hisobga olgan holda CNDO usulini takomillashtiradi. Ochiq va yopiq qobiqlar bilan tizimlarning asosiy holatini hisoblash, geometriya va umumiy energiyani optimallashtirishga imkon beradi. Bu SCF usuli.

MINDO3 usuli (O'zgartirilgan INDO, 3-versiya, takomillashtirilgan INDO usuli, 3-versiya) - bu INDO uslubining yanada rivojlanishi va kengayishi. Ko'pgina o'zaro ta'sirlar uchun u tegishli hisob-kitoblar o'rniga empirik parametrlardan foydalanadi. Ushbu usul ochiq va yopiq qobiqlar bilan tizimlarning asosiy holatini hisoblashda, geometriya va umumiy energiyani optimallashtirishda yirik organik molekulalar uchun yaxshi natijalarga erishishga imkon beradi. Bu SCF usuli.

MNDO usuli bu MINDO3 usulining keyingi rivojlanishi bo'lib, unda bir qator xatolar tuzatilgan. 1 va 2 asosiy kichik guruhlarning atomlarini o'z ichiga olgan organik molekulalarning elektron va atom tuzilmalarining sifatli hisob-kitoblarini amalga oshirishga imkon beradi (lekin o'tish elementlari atomlarini emas). Ushbu usul tizimning elektron xususiyatlarini va hosil bo'lish issiqligini hisoblashda yirik organik molekulalar uchun yaxshi natijalarga erishishga imkon beradi. Bu SCF usuli.

AM1 usuli bu MNDO usulini takomillashtirishdir. Eng aniq usullardan biri. Davriy jadvalning 1 va 2 asosiy kichik guruhlari elementlarini o'z ichiga olgan organik molekulalar uchun ishlatiladi. Ehtimol, bu usul azot va kislorodni o'z ichiga olgan molekulalar uchun MNDO usuli bilan taqqoslaganda yuqori sifatli natijalarga erishishga imkon beradi. Elektron strukturani hisoblab chiqadi, geometriyani optimallashtiradi, umumiy energiya va hosil bo'lish issiqligini hisoblaydi. Bu SCF usuli.

PM3 usuli AM1 usulining bir versiyasidir. PM3 AM1 dan faqat parametrlar

jihatidan farq qiladi. PM3 uchun parametrlar ko'p sonli va tajriba turlarini hisoblangan natijalar bilan taqqoslash orqali olingan. Odatda, PM3 ning kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlari AM1 ga qaraganda kamroq jirkanchdir. PM3 dastlab organik molekular uchun hisob-kitoblarga mo'ljallangan edi, ammo keyinchalik u boshqa bir qator elementlar guruhlari, xususan, o'tish metallari uchun parametrlashtirildi. Bu SCF usuli.

ZINDO / 1 usuli - bu o'tish elementlari atomlarini o'z ichiga olgan molekularni hisoblash uchun moslashtirilgan INDO usulining bir variantidir. INDO / 1 uslubining so'nggi versiyasiga teng, u doimiy ravishda orbital ko'rsatkichlar yordamida aslidan farq qiladi. ZINDO / 1 o'tish metallarini o'z ichiga olgan molekularning energetikasi va geometriyasini hisoblash imkonini beradi.

ZINDO / S usuli - bu INDO uslubining bir zarracha qo'zg'alishi bilan konfiguratsion o'zaro ta'sirini (CI) hisoblashda ultrabinafsha va ko'rinadigan optik o'tishlarni ko'paytirish uchun parametrlangan versiyasidir. UV va ko'rinadigan spektrlarni taxmin qilish uchun foydali, ammo geometriya yoki molekulyar dinamikani optimallashtirish uchun foydali emas.

CNDO, INDO

H																					He	
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

MINDO3

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

MNDO

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

AM1

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

PM3

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

ZINDO/1

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

ZINDO/S

H																						He
Li	Be																					
Na	Mg																					
K	Ca																					
Rb	Sr																					

Yarim empirik hisob-kitoblarning parametrlarini o'rnatish uchun tanlangan yarim empirik usulning dialog oynasini oching. Ushbu dialog menyusining ikkita versiyasi mavjud (keyingi bo'limlarga qarang).

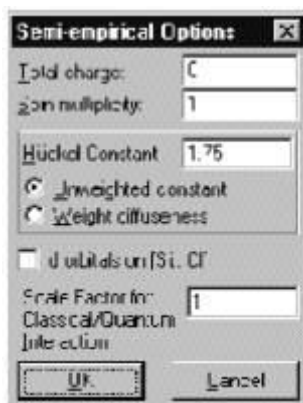
Ushbu jadvallarda u yoki boshqa yarim empirik usul bilan hisoblash mumkin bo'lgan kimyoviy elementlar ko'rsatilgan. Jadvalda elementning belgisi mavjud bo'lsa, demak, bu HyperChem dasturida ushbu yarim empirik usul uchun ushbu elementning valentlik elektronlarini tegishli bosh va orbital kvant raqamlari bilan bog'liq bo'lgan integrallarni hisoblash uchun qism mavjud. Ammo, hozirgi vaqtda u yoki bu yarim empirik usulning dasturiy ta'minoti mavjud bo'lgan barcha atomlar, parametrlar to'plami ma'lum emas. Agar ular ma'lum bo'lsa, tegishli parametrlar

fayllarini o'zgartirish mumkin. Parametrlari ma'lum bo'lgan va tegishli parametr fayllariga kiritilgan elementlar ushbu jadvallarda soyali.

3.2. Yarim empirik usul dialog oynasi

PMX usuli dialog menyusi

engaytirilgan Hückel usuli barcha boshqa yarimemirika usullaridan farqli dialog oynasidan foydalanadi.



Umumiy zaryad tizimdagi elektronlarning umumiy soni va yadrolarning umumiy zaryadi orasidagi farq sifatida hisoblanadi. Kationlar uchun butun va butun musbat, anionlar uchun manfiy.

Spin ko'pligi $2S + 1$ sifatida hisoblanadi, bu erda S - tizimning umumiy aylanishi. Har bir juftlanmagan elektronning aylanishi $1/2$ ga teng. Yopiq qobiqli tizimlar (singlet) ko'plikka ega. 1 ga teng, bitta juft bo'lmagan elektronga (dublet) va ikkita (tripletga) mos ravishda 2 va 3. Ushbu dialog oynasiga 1 dan 6 gacha bo'lgan qiymatlarni kiritish mumkin.

Gekel sobit Diagonal va diagonal bo'lmagan matritsa elementlari orasidagi mutanosiblik. Standart qiymat 1,75 ga teng. Yuqori qiymatlar umumiy energiyani aniqlashda ustma-ust keladigan atom orbitallarining og'irligini oshiradi, pastroq qiymatlar esa bitta elektron energiyasini oshiradi.

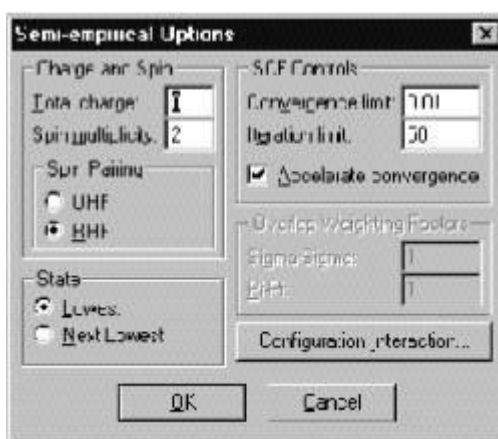
Unweightet doimiysi Ushbu elementni tanlab olish, hisoblashda Hückel doimiysi o'zgarishsiz ishlatilishini anglatadi.

Og'irlik diffuziyasi, Gyckel konstantasini atom orbitallarining diffuziyasini hisobga oladigan koeffitsientga ko'paytiradi, bu atomlar va asosiy kichik guruhlardan tashkil topgan organik molekular va molekular uchun juda kam uchraydi.

d-orbitallar... (d-orbitallar) bo'yicha ushbu element Si, P, S, Cl atomlari uchun d-orbitallarni hisobga olishga imkon beradi.

Aralash (molekulyar-mexanik va kvant-kimyoviy) hisob-kitoblar jarayonida klassik qisman zaryadlarning kiritilishini shkalali ko'lam miqyosi (batafsil ma'lumot uchun HyperChem hisoblash kimyosi, nazariyasi va usullari).

3.3. Boshqa yarim empirik usullar uchun dialog oynasi



Yuqorida sanab o'tilgan yarim empirik usullardan birini tanlaganingizda (PMXdan tashqari), tegishli dialog oynasi paydo bo'ladi.

Zaryadlash va aylantirish

Ö Umumiy zaryad tizimdagi elektronlarning umumiy soni va yadrolarning umumiy zaryadi o'rtasidagi farq sifatida hisoblanadi. Kationlar uchun butun va butun musbat, anionlar uchun manfiy.

Spin ko'pligi $2S + 1$ sifatida hisoblanadi, bu erda S - tizimning umumiy aylanishi. Har bir juftlanmagan elektronning spin $\frac{1}{2}$ ga ega. Yopiq qobiqli tizimlar (singlet) ko'plikka ega. 1 ga teng, bitta juft bo'lmagan elektronga (dublet) va ikkita (tripletga) mos ravishda 2 va 3. Ushbu dialog oynasiga 1 dan 6 gacha bo'lgan qiymatlarni kiritish mumkin.

Shtat. Ushbu parametr tizimdagi valentlik elektronlarining hayajonlangan holatlarini tavsiflaydi.

Eng past - Ushbu parametrni tanlash shuni anglatadiki, dastur berilgan spin ko'pligi bilan tizimdagi barcha mumkin bo'lgan elektron holatlarning eng pastini tanlaydi.

Keyingi eng past - Ushbu parametrni tanlash dastur dastlabki spinli ko'plik bilan birinchi hayajonlangan elektron holatni hisoblashini anglatadi.

yaqinlashish chegarasi. SCF hisob-kitobi keyingi ikki takrorlanishning umumiy energiyasidagi farq ma'lum bir oldindan belgilangan qiymatdan kichikroq bo'lganda tugaydi. Odatiy bo'lib, bu qiymatga 0,01 kkal / mol qiymat beriladi. Ushbu parametr 1 dan 0,001 gacha o'zgarishi mumkin. 1 kkal / molning konvergensiya parametri juda qo'pol va 0,001 kkal / mol har doim ham erishib bo'lavermaydi, chunki yarimemirik usullarning muntazam xatosi taxminan bir xil qiymatga etadi. Vaqtinchalik holatni izlashda minimal konvergensiya parametrini o'rnatish tavsiya etiladi.

takrorlanish chegarasi. Ushbu parametr o'z-o'zini tutish bosqichida maksimal takrorlanish sonini aniqlaydi. Tavsiya etilgan raqam 50 ga teng, ammo sekin yaqinlashganda 100 yoki 200 tartibda, masalan, o'tish holatini qidirish holatida kattaroq sonni qo'yish mumkin.

yaqinlashishni tezlashtirish. Ushbu parametrni tanlash SCF hisob-kitoblarning yaqinlashishini tezlashtiradi. Biroq, HyperChem tarkibiga Iterative Subspace (DIIS) ning to'g'ridan-to'g'ri inversiyasi deb nomlangan protsedura kiritilgan (batafsil ma'lumot uchun HyperChem hisoblash kimyosiga qarang).

Spin juftligi. Molekulalarning spin holatini hisoblashning ikkita usulini tanlash mumkin. Birinchisi, Cheklanmagan Xartri-Fok usuli (UHF) va Cheklangan Xartri-Fok usuli (RHF).

UHF a va b orbitallar uchun har xil fazoviy taqsimotli spin orbitallarni ko'rib chiqadi. Ushbu usul ochiq va yopiq elektron qatlamlari bo'lgan tizimlarni o'rganish uchun ishlatiladi. Shunday qilib, ikkinchisi uchun u dissotsilanish reaksiyalarini yaxshi tavsiflaydi. Biroq, orbitallar sonining ikki baravar ko'payishi sababli, ushbu usul yordamida hisoblash vaqti ikki baravarga oshiriladi. Ushbu usul uning asoslari bilan bog'liq boshqa cheklovlarga ega.

RHFda spinasi har xil bo'lgan elektronlar, fazoviy taqsimot, orbitallar bo'yicha bir

xil egallaydi. Bunday holda, juft bo'lmagan elektronlar alohida orbitallarni ham egallashi mumkin. Ushbu usul ochiq va yopiq elektron to'siqlarga ham tegishli.

Og'irlik omillarining bir-birini qoplashi. Σ va π obligatsiyalarning hissalarini o'zgartirishga qodir bo'lgan ikkita ZINDO usuli uchun qo'shimcha parametrlar. Ushbu parametr HyperChem hisoblash kimyosi, nazariyasi va metodlarida batafsilroq tavsiflangan.

Sigma-Sigma atomlar orbitallarining s-lar bilan qoplanishini aniqlaydi. Odatda ZINDO / 1 uchun 1,0 va ZINDO / S uchun 1,67 ga teng.

Pi-Pi s-larning ustma-ust keladigan atom orbitallarining og'irligini aniqlaydi. ZINDO / 1 uchun 1,0 ga teng. ZINDO / S uchun bu parametr o'tish metall komplekslarini hisoblashda 0,640 va organik molekulalarni hisoblashda 0,585 ga teng.

Konfiguratsiyaning o'zaro ta'siri. Ushbu parametr konfiguratsiyaning o'zaro ta'sirini hisoblashni faollashtirish uchun ishlatiladi va tegishli dialog oynasini ochadi. Ushbu yondashuv ko'rinadigan diapazonda ultrabinafsha va optik spektrlarni hisoblashda qo'llanilishi kerak. Ushbu parametrni tanlash hisoblash vaqtini sezilarli darajada oshiradi.

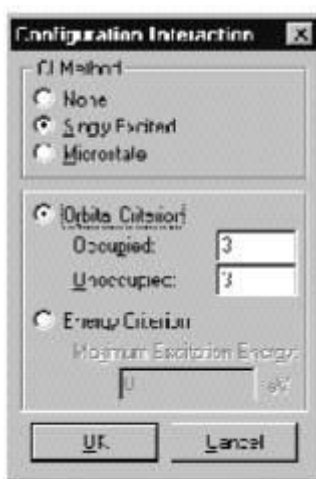
Konfiguratsiyaning o'zaro aloqa qutisi

Konfiguratsiyaning o'zaro ta'sirini hisobga olgan holda to'lqin funktsiyasi va holatning energiyasini yaxshilash uchun foydalanish mumkin. O'z-o'ziga mos keladigan maydon (SCF) yaqinlashuvidagi barcha hisob-kitoblar bitta elektronli modelga asoslangan bo'lib, uning mohiyati shundaki, har bir elektron boshqa barcha elektronlar tomonidan hosil bo'lgan o'rtacha maydonda harakat qiladi. Elektronlar bir zumba ta'sir o'tkazadi va Pauli printsipiga ko'ra bir-biridan qochishga moyil ekanligiga ishonishadi. Ushbu o'zaro bog'liqlik o'rtacha elektronlararo repulsiyaning pasayishiga va o'z navbatida holat energiyasining pasayishiga olib keladi. SCF yondashuvida hisoblangan umumiy energiya bilan aynan norelativistik yondashuvda olingan energiya o'rtasidagi farq korrelyatsiya energiyasi deb ataladi. Elektron korrelyatsiyalarning ikki turi mavjud: statik va dinamik. Statik korrelyatsiyalar ma'lum bir holatning energetik degeneratsiyasi bilan va dinamik

korrelyatsiyalar - elektronlarning bir-biridan qochish tendentsiyasi bilan bog'liq bo'lib, bu cheksiz yuqori tezlikda sodir bo'ladi.

CV (CI) hisob-kitoblari, ehtimol SCF yondashuvidan tashqarida eng keng tarqalgan usul hisoblanadi. SCF hisob-kitobi natijasida bitta elektron sathlari qat'iy ravishda elektronlar bilan to'ldirilgan holat konfiguratsiyasiga olib keladi. Boshqa konfiguratsiyalar elektronlarning ishg'ol qilinganidan virtual (bo'sh) orbitallarga qo'zg'alishi yordamida o'z-o'ziga mos keladigan hisob-kitobda olingan konfiguratsiyadan tuzilishi mumkin. CV hisob-kitobining natijasi yaxshilangan holatlar to'plamidir, ularning har biri bunday konfiguratsiyalarning chiziqli kombinatsiyasi bilan ifodalanadi. HF hisob-kitoblarini geometriyani optimallashtirish rejimida bajarish mumkin emas. Ushbu yondashuv PMX usulida ham amalga oshirilmaydi.

HV hisoblash parametrlarini o'rnatish uchun Configuration Interaction dialog oynasi ishlatiladi. Buning uchun yarim empirik usullar dialog oynasida tegishli tugmani tanlang.



Keyin variantlardan birini tanlashingiz kerak: Hech biri (Hech biri), Yagona chiqish (Bir marta hayajonlangan) yoki Mikrostat (Mikrostat).

Ö Yo'q - hech qanday konfiguratsiya shovqinlari hisoblanmaydi.

Ö Singly Exited - hisoblashda faqat bitta hayajonlangan holatlar hisobga olinadi.

Ö Microstate shuni anglatadiki, hisoblashda, bitta hayajonlangan holatlardan tashqari, barcha mumkin bo'lgan ko'p holatlar hisobga olinadi.

orbital mezon. Ushbu parametrni tanlash o'zaro ta'sirli konfiguratsiyalarni tashkil etadigan va qaysi elektron qo'zg'alishlar sodir bo'ladigan orbitallar oralig'ini aniqlaydi.

Ishg'ol qilingan orbitallar maydonini belgilaydi, orbitallar qo'zg'aladigan eng yuqori molekulyar orbital (HOMO) dan boshlanadi.

Bo'sh (eng kichik) orbital (LUMO) dan boshlab elektron qo'zg'alishlar sodir bo'ladigan bo'sh (virtual) orbitallarning maydonini belgilaydi.

Energiya mezonlari - bu o'zaro ta'sir qiladigan konfiguratsiyalar to'plamini yaratishda energiya chegaralarini belgilaydigan Orbital Criterion uchun imkoniyatdir. Ushbu parametr faqat Bir marta qo'zg'aladigan konfiguratsiyalar uchun mavjud.

Maksimal Chiqish CI hisob-kitobiga kiritilgan ishg'ol qilingan va bo'sh orbitallar orasidagi eVdagi eng katta energiya farqini aniqlaydi. Umuman olganda, yuqori energiya konfiguratsiyalari asosiy holat konfiguratsiyasi bilan kuchli ta'sir o'tkaza olmaydi. Ushbu parametr qanchalik baland bo'lsa, shuncha ko'p konfiguratsiyalar CI hisoblashiga kiritiladi.

Konfiguratsiya o'zaro ta'sirining amaliy qo'llanmalari.

CI hisob-kitoblari hisob-kitoblarda ishlatilishi mumkin:

- ultrabinafsha va ko'rinadigan spektrlar,
- hayajonlangan davlatlarning energiyasi,
- kimyoviy bog'lanishlarning paydo bo'lishi yoki uzilishi (masalan, H₂ ajralishi), spin holatidagi o'zgarishlar,
- Londonning tarqatuvchi kuchlari ta'sirini o'rganish,

De Degeneratsiya yoki deyarli buzilib ketadigan holatlarning tavsiflari,

Sing Singlet-triplet parchalanishini yuqori darajada o'rganish.

Mikrostat usuli qo'zg'algan holatlar singari o'zaro bog'liq bo'lmagan holatdagi energiyani pasaytiradi. Faqatgina hayajonlangan CI usuli faqat UV va VIS hisob-kitoblari uchun mo'ljallangan va energiyani yaxshilamaydi. Asosiy holat (Brillouin teoremasi).

Nosimmetrik tizimlar uchun orbital mezonidan foydalanganda to'g'ri natijalarga erishish uchun degeneratsiya qilingan orbitallar to'plamlarini to'liq yoki umuman qo'shmaslik kerak. Bundan tashqari, energiya mezonidan ehtiyotkorlik bilan foydalanish kerak. Ushbu mezon ish'ol qilingan va bo'sh bo'lgan orbitallar orasidagi energiya farqidan kattaroq bo'lishi kerak.

Katta tizimlarda, qoida tariqasida, kichik energiya diapazonlarida juda ko'p orbitallar mavjud. Binobarin, CI matritsasining kattaligi energiya mezonining kattaligiga juda sezgir bo'lishi mumkin. Hisoblash vaqti CI matritsasining kattaligiga juda bog'liq bo'lganligi sababli, kerakli hisoblash manbai, ayniqsa MNDO, AM1 yoki PM3 usullaridan foydalansangiz, qabul qilinishi mumkin bo'lmagan darajada katta bo'lishi mumkin. Bunday vaziyatni oldini olish uchun RHF hisoblash natijalarini diqqat bilan tahlil qilish kerak.

Nazorat savollari:

1. Shredinger tenglamasini yarimempirik usulda echishga qisqacha tavsifini bering?
2. HyperChem dasturida o'rganilayotgan molekulalarning elektron tuzilishini qaysi usullar bilan hisoblash mumkin?
3. Kengaytirilgan gekel usuli haqida tushuncha bering?
4. MNDO usuli bu MINDO3 usulining keyingi rivojlanishini tushuntirib bering?
5. Ö yaqinlashish chegarasi tushuntirib bering?
6. Ö UHF a va b orbitallar uchun har xil fazoviy taqsimotli spin orbitallarni ko'rib chiqadi. Ushbu usul wanda y tizimlar uchun ishlatiladi?
7. Konfiguratsiyaning o'zaro aloqa qutisi qayerlarda foydalanish mumkin? mumkin?
8. INDO usuli nima?
9. UV va VIS nimalar uchun mo'ljallangan?
10. Nosimmetrik tizimlar uchun orbital mezonidan foydalanganda to'g'ri natijalarga erishish uchun nimalar qilish kerak?

ADABIYOTLAR

1. W. J. Hehre, W. A. Lathan, R. Ditchfield, M. D. Newton, and J. A. Pople, Gaussian 70, Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 2005).
2. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, P. C. Hariharan, R. Seeger, J. A. Pople, W. J. Hehre, and M. D. Newton, Gaussian 76(Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, PA, 2000).
3. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, R. Krishnan, R. Seeger, D. J. Defrees, H. B. Schlegel, S. Topiol, L. R. Kahn, and J. A. Pople, Gaussian 80 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2003).
4. J. S. Binkley, M. J. Frisch, D. J. Defrees, R. Krishnan, R. A. Whiteside, H. B. Schlegel, E. M. Fluder, and J. A. Pople, Gaussian 82 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2002).
5. M. J. Frisch,. Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 2000.-382с.

4-ma'ruza. Aralash rejimdagi hisob-kitoblar

Reja:

1. Aralash rejimdagi hisob-kitoblar
2. Ab initio Xartri-Fok usuli
3. Ab initio Advanced options dialog oynasi

*Kalit so'zlar: geometriyani optimallashtirish, bir-birining ustiga chiqadigan integrallar, Xartri-Fok usuli, Ab initio usuli, 6-31G * asos, bitta elektron to'lqin funktsiyalari to'plami.*

4.1. Aralash rejimdagi hisob-kitoblar (kvant mexanikasi / kvant kimyosi).

Aralash rejimdagi hisob-kitoblarda Hyper Chem dasturi tizimning tanlangan qismini kvantni mexanik, qolganini esa mexanik ravishda hisoblab chiqadi. Dastur bunday hisob-kitoblarni barcha yarim empirik kvant kimyoviy usullaridan foydalangan holda amalga oshirishga imkon beradi. Shuni esda tutish kerakki, tizim geometriyasini optimallashtirishda atomlarning faqat tanlangan qismi optimallashtirish paytida koordinatalarini o'zgartiradi. Qolgan atomlar faqat ularga hisoblangan yoki

ularga tayinlangan zaryadlar natijasida hosil bo'lgan statik maydonning bir turi sifatida yordam beradi.

Ushbu rejimda hisob-kitoblarni amalga oshirish uchun molekula atomlarining mexanik ravishda kvant hisoblanadigan qismini tanlash kerak. Agar ba'zi molekularlar qisman ajratilgan bo'lsa, chegara atomlari qolgan sp^3 -bog'lanishlar bilan bog'langanligiga ishonch hosil qilish kerak. Buni tekshirish uchun, yarim empirik hisoblashni boshlashdan oldin, Select menyusidagi Extend to sp^3 parametridan foydalanishingiz mumkin. Ushbu parametr, hisoblangan maydon tanlovini tanlov molekulaning oxiriga yetguncha yoki sp^3 - sp^3 bog'lanishini topguncha har tomonga yoyadi.

4.2. Ab initio Xartri-Fok usuli

O'rnatish menyusida ab initio parametrini tanlash ob'ektlarning elektron va atom tuzilmalarini ab initio hisoblash imkonini beradi. Ab initio Hartree-Fock usuli molekulyar mexanik va yarimempirik usullardan farqli o'laroq, hisoblash uchun biron bir empirik parametrlarni bilishni talab qilmaydi, masalan, alohida bog'lanishlarning kuchi va uzunligi, bir-birining ustiga chiqadigan integrallarning qiymatlari va boshqalar O'rnatish menyusida ushbu element uchinchi hisoblanadi.

Ab initio usuli uning hisob-kitoblari uchun molekulyar-mexanik va yarim empirik usullarga qaraganda ancha ko'proq hisoblash manbalarini talab qiladi. Bu, ayniqsa, geometriyani optimallashtirish yoki molekulyar dinamikani hisoblash uchun to'g'ri keladi. Geometriyani optimallashtirish uchun, dastlabki bosqichda, ozroq yoki oqilona boshlang'ich geometriyani olish uchun molekulyar mexanikani, so'ngra yarim empirik usullardan birini qo'llash tavsiya etiladi. Shu bilan birga, bir qator noorganik tizimlar uchun molekulyar-mexanik va yarim empirik hisob-kitoblar noto'g'ri natijalar beradi, shuning uchun boshlang'ich geometriyasini kamroq yoki kamroq darajada olish uchun Model Bilder parametridan foydalanish tavsiya etiladi.

Asosiy to'plamni tanlash

Bir elektronli to'lqin funktsiyalarining har qanday to'plami LCAO (atom orbitallarining chiziqli birikmasi, inglizcha qisqartma - LCAO) yaqinlashuvi uchun

asoslar to'plami (yoki oddiygina asos sifatida) xizmat qilishi mumkin. Biroq, aniq belgilangan asos, tizimning elektron xususiyatlarini yomon aniqlanganidan ko'ra ko'proq atamalardan foydalangan holda bashorat qiladi. Shuning uchun, ab initio hisoblashda belgilangan eng mos asosni tanlash natijalarning aniqligi va asosliligi uchun juda muhimdir. Hyper Chem bir qator standart bazaviy to'plamlarni o'z ichiga olgan bazaviy to'plam fayl formatini (kengaytma * .BAS) aniqlaydi. Shu bilan birga, foydalanuvchi hisob-kitoblar uchun zarur bo'lgan asosiy to'plamlarni o'zi belgilashi mumkin.

HyperChem-da ko'plab keng tarqalgan va keng qo'llaniladigan asosiy ma'lumotlar avtomatik ravishda qo'llab-quvvatlanadi. Ushbu to'plamlarga quyidagilar kiradi:

- STO-1G and STO-1G* (H do He) [1] ;
- STO-2G and STO-2G* (H do Xe) [1] ;
- STO-3G and STO-3G* (H do Xe) [1] ;
- STO-4G and STO-4G* (H do Xe) [1] ;
- STO-5G and STO-5G* (H do Xe) [1] ;
- STO-6G and STO-6G* (H do Xe) [1] ;
- 3-21G, 3-21G*, and 3-21G** (H do Ar) [2] ;
- 4-21G, 4-21G*, and 4-21G** (H do Ne) [3] ;
- 6-21G, 6-21G*, and 6-21G** (H do Ar) [2] ;
- 4-31G, 4-31G*, and 4-31G** (H do Ne) [3] ;
- 5-31G, 5-31G*, and 5-31G** (H do F) [3] ;
- 6-31G, 6-31G*, and 6-31G** (H do Ar) [3] ;
- 6-311G, 6-311G*, and 6-311G** (H do Ar) [4] ;
- D95, D95* and D95** (H do Cl) [5] .

Ab initio usuli dialogi



HyperChem-da ko'plab asosiy to'plamlardan foydalanish mumkin. Ushbu dialog oynasida, Apply Basis Set-ni tanlagan asosni yoki butun ob'ekt uchun, yoki tanlangan qism uchun, agar bunday tanlov amalga oshirilgan bo'lsa. Masalan, ba'zi og'ir atomlarni 6-31G asosi (d funktsiyasiz), boshqalari esa 6-31G * asosi (d funktsiyalari hisobga olingan holda) bilan tavsiflanishi kerak. Dialog menyusining "Basis Set" parametri tegishli asosni butun molekulaga yoki tanlangan qismga belgilaydi.

NoBasis Set parametrini tanlash ushbu atomga asosiy funktsiya berilmasligini anglatadi. Ushbu parametr faqat qo'shimcha asosiy funktsiyalar yordamida tizimni yoki tanlangan qismni tavsiflash zarur bo'lganda ishlatilishi mumkin.

Minimal (STO-3G) minimal STO-3G asosini belgilaydi. Ushbu menyudagi boshqa tugmalar ushbu ro'yxatdagi asosiy to'plamlarni tanlaydi.

Other sizga boshqa asosiy to'plamlardan foydalanish uchun (ushbu menyuda ko'rsatilmagan) boshqa asoslarni belgilash tugmachasini faollashtirishga imkon beradi.

Boshqa asoslar to'plamini tayinlang. Ushbu tugmani bosish bilan tegishli menyu paydo bo'ladi, unda asosiy to'plamlarning to'liq ro'yxati mavjud (oldingi menyuda ko'rsatilganlardan tashqari).

Qo'shimcha asos funktsiyasi. Ushbu tugmani bosish tegishli menyu paydo bo'lishiga olib keladi, bu tanlangan atomlar uchun qo'shimcha asosiy funktsiyalarni kiritish imkonini beradi.

Tanlovlar. Ushbu tugmachani bosish bilan tegishli dialog oynasi chaqiriladi, uning yordamida ab initio hisoblashning asosiy parametrlari o'rnatiladi.

Kengaytirilgan parametrlar hisoblash jarayoniga ta'sir qiluvchi parametrlarni o'z ichiga olgan tegishli menyuni chaqirish uchun ishlatiladi.

Aply Basis Set tugmasi avval tanlangan asosni butun molekulaga yoki atomlarning tanlangan qismiga belgilaydi. OK tugmasi tanlangan parametrlarni saqlash va dialog oynasini yopish uchun ishlatiladi. Bekor qilish tugmasi tanlangan parametrlarni saqlamasdan dialog oynasini yopadi. Avval aytib o'tganimizdek, HyperChem dasturida hisoblangan tizimning turli qismlari uchun har xil tayanch to'plamlarini aniqlash mumkin.

Boshqa asoslarni belgilash uchun dialog oynasini tayinlang



Ushbu dialog oynasidan foydalanish Ab Initio Method dialog oynasida allaqachon ko'rsatib o'tilganlar bundan mustasno, bazaviy to'plamlarning to'liq ro'yxatini chaqirishga imkon beradi.

Ushbu asoslardan birini tanlab, so'ngra OK tugmachasini bosish tegishli Ab Initio Method oynasida tanlangan matnni identifikatsiyalashga olib keladi. Barcha standart tayanch to'plamlari, avval aytib o'tganimizdek, .BAS kengaytmasi bo'lgan tegishli fayllarda saqlanadi. Ushbu dialog oynasida sizning asosingizga mos havolani yaratish uchun [basisset] Registry bo'limida yoki tegishli CHEM.INI faylida unga kirish nuqtasini yaratishingiz kerak.

Ab initio Options dialog oynasi

Ushbu dialog oynasi ab initio hisoblash uchun asosiy parametrlarni tanlash uchun ishlatiladi. Ushbu parametrlar yuqorida tavsiflangan yarim empirik usullarga o'xshashdir.



Gradient gradyanlarni hisoblashni aniqlaydi (atom koordinatalariga nisbatan umumiy energiyaning birinchi hosilalari). RMS gradienti hisoblangan ob'ektning optimal geometriyasidan og'ish haqida fikr beradi. Ushbu parametr faqat bitta nuqtani hisoblash rejimida mavjud. Buning sababi shundaki, ushbu parametrlarni hisoblash uchun juda ko'p ikki elektronli integrallarni va ularning hosilalarini hisoblash kerak, bu juda ko'p protsessor vaqtini talab qiladi va bu rejimda bunday hisob-kitoblar kerak bo'lmasligi mumkin. Ab initio hisob-kitoblarini bajaradigan HyperGauss protsedurasi har doim geometriyani optimallashtirish, molekulyar dinamikani hisoblash va molekulyar tebranish hisob-kitoblarida gradyanlarni hisoblab chiqadi.

MP2 o'zaro bog'liqlik energiyasi ikkinchi darajali Moller-Plesset bezovtalanish nazariyasi bo'yicha korrelyatsiya energiyasini hisoblashni aniqlaydi. Ushbu parametr faqat bitta nuqtani hisoblash uchun ham faoldir. Bunday hisob-kitoblar protsessor vaqtini, kerakli operativ xotirani va ishlatilgan disk maydonini ko'paytiradi, chunki bu atom orbitallaridagi ikki elektron integrallardan molekulyar orbitallarda allaqachon hisoblab chiqilganlarga o'tishni talab qiladi.

Ushbu dialog oynasida "Charge" va "Spin" ko'pligi parametrlari mavjud. Ular tizimning umumiy elektron zaryadini o'rnatishga xizmat qiladi, bu elektronlar soni va umumiy yadro zaryadi o'rtasidagi farq sifatida aniqlanadi va tizimning ko'pligi

2S + 1 deb belgilanadi va singlet (1), dublet (2), uchlik (3) bo'lishi mumkin. va kvartet (4).

CF boshqaruvlari (SCF hisoblash parametrlari bo'limi)

Muloqot menyusining ushbu qismi SCF to'lqin funktsiyasini hisoblash uchun zarur bo'lgan aniqlikni va ushbu aniqlikka erishish uchun maksimal takrorlanish sonini belgilash uchun ishlatiladi.

Konvergenstiya (Limit Convergence limit) ikki ketma-ket takrorlanish o'rtasidagi energiya farqi berilgan qiymatdan kichikroq bo'lganda SCF protsedurasini to'xtatishga xizmat qiladi. Ab initio hisob-kitoblari uchun bu qiymat odatda 0,00001 kkal / mol ga teng tanlanadi va ishlatiladigan parametr 1 dan 0,00000001 kkal / mol gacha bo'lishi mumkin. Shunga qaramay, agar bu parametr $10^{** - 10}$ dan kam bo'lsa, yaqinlashishga erishilmasligi mumkin, chunki Hartree-Fock usulining o'zi mutanosib xatoga yo'l qo'yadi. Vaqtinchalik holatlarni izlashda qat'iyroq konvergenstiya mezonlaridan foydalanish tavsiya etiladi.

takrorlanish chegarasi SCF hisoblash data takrorlanishning maksimal sonini aniqlaydi.

Agar dastur belgilangan takrorlash sonini bajargan bo'lsa va yaqinlashishga erishmagan bo'lsa, hisoblash to'xtaydi. Bunday holda, hisoblash natijasi to'g'ri bo'lmasligi mumkin, chunki energiya haqiqatdan uzoqroq bo'lishi mumkin yoki hisoblash paytida tebranadi. 50 ta takrorlash ko'p holatlarda oqilona ko'rinadi, ko'proq (masalan, 200 tagacha) belgilash o'tish holatlarini hisoblashda oqlanishi mumkin. Hisoblash ko'p sonli takrorlash bilan ham yaqinlasha olmasa, bu, qoida tariqasida, takrorlanishlar sonining yanada ko'payishi o'zgarmasligini anglatadi, chunki tizim yaqinlashmaydi. Faqat ba'zi hollarda Ö Tezlashtiring.

Konvergenstiya vaziyatni yaxshilashi mumkin.

Ushbu parametrni tanlash SCF hisob-kitoblarining yaqinlashishini tezlashtiradi. Ammo HyperChem tarkibiga Iterativ subspazaning to'g'ridan-to'g'ri teskari yo'nalishi (DIIS) deb nomlangan protsedura kiradi (qo'shimcha ma'lumot uchun HyperChem hisoblash kimyosiga qarang), bu ko'proq xotira talab qilishi mumkin. Ushbu parametrni yoqish bitta yineleme uchun vaqtni ko'paytirishi mumkin, chunki bu yondashuvda Fock matritsasi joriy Fock matritsasi va Fock

matritsalarining oldingi takrorlashlardan chiziqli kombinatsiyasi sifatida hisoblanadi. Odatda, ushbu yondashuv talab qilinadigan takroriy sonlarning umumiy sonini kamaytiradi.

Spin juftligi. Molekulalarning spin holatini hisoblashning ikkita usulini tanlash mumkin. Birinchisi, Cheklanmagan Xartri-Fok usuli (UHF) va Cheklangan Xartri-Fok usuli (RHF).

UHF a - va b-orbitallar uchun har xil fazoviy taqsimotli spin orbitallarni ko'rib chiqadi. Ushbu usul ochiq va yopiq elektron qatlamlari bo'lgan tizimlarni o'rganish uchun ishlatiladi. Shunday qilib, ikkinchisi uchun u dissotsilanish reaksiyalarini yaxshi tasvirlaydi. Biroq, orbitallar sonining ikki baravar ko'payishi sababli, ushbu usul yordamida hisoblash vaqti ikki baravarga oshiriladi. Ushbu usul uning asoslari bilan bog'liq boshqa cheklovlarga ega.

RHFda spinasi har xil bo'lgan elektronlar, fazoviy taqsimot, orbitallar bo'yicha bir xil egallaydi. Bunday holda, juft bo'lmagan elektronlar alohida orbitallarni ham egallashi mumkin. Ushbu usul ochiq va yopiq elektron to'siqlarga ham tegishli.

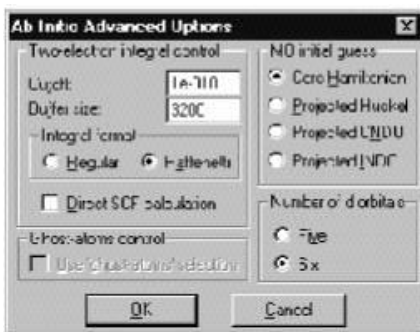
Konfiguratsiyaning o'zaro ta'siri Ushbu parametr konfiguratsiyaning o'zaro ta'sirini hisoblashni faollashtirish uchun ishlatiladi va tegishli dialog oynasini ochadi. Ushbu yondashuv ko'rinadigan diapazonda ultrabinafsha va optik spektrlarni hisoblashda qo'llanilishi kerak. Ushbu parametrni tanlash hisoblash vaqtini sezilarli darajada oshiradi.

OK tugmasi tanlangan parametrlarni saqlash va dialog oynasini yopish uchun ishlatiladi. Bekor qilish tugmasi tanlangan parametrlarni saqlamasdan dialog oynasini yopadi. Avval aytib o'tganimizdek, HyperChem dasturida hisoblangan tizimning turli qismlari uchun har xil tayanch to'plamlarini aniqlash mumkin.

Shuni ta'kidlash kerakki, HyperChem ab initio darajasida Open Shell Systems (ROHF) uchun cheklangan Hartree Fock-ni qo'llab-quvvatlamaydi.

4.3. Ab initio Advanced options dialog oynasi

Ushbu dialog oynasi ab initio hisob-kitoblari parametrlarini aniq sozlash uchun ishlatiladi.



Integral Format

Regular ikki elektronli integralni yozish uchun muntazam formatdan foydalanishni belgilaydi. HyperChem integrallarning har birini yozish uchun 16 baytdan foydalanadi. Dastlabki 8 bayt integralning 4 indeksini, oxirgi 4 ta esa uning qiymatini saqlaydi. Dastur bu qiymatlarni faqat integralning absolyut qiymati Cutoff parametridan katta yoki unga teng bo'lgan taqdirdagina saqlaydi. Qarama-qarshi holatda, bu integralning qiymati 0 ga teng.

Regular opsiyasi tanlanganda ikki elektronli integrallar va ularning indeksleri diskka o'zgartirilmasdan saqlanadi va StartLog menyusida QuantumPrintLevel parametri tanlanganda .log faylga yozilishi mumkin.

Raffenetti Raffenetti formatidan foydalanishni belgilaydi (R.C. Raffenetti, Chem.Phys.Lett., 20, 335 (1973)), bu SCF hisob-kitoblari paytida Fock matritsasini shakllantirishni osonlashtiradi. Ushbu format odatda ko'proq xotira va ko'proq disk maydonini talab qiladi, ammo tezroq hisoblash imkonini beradi. Ushbu formatni MP2 hisob-kitoblari uchun ishlatib bo'lmaydi.

Cutoff parametri diskda faqat absolyut qiymati ko'rsatilgan parametrga teng yoki undan katta bo'lgan integrallarni saqlashga imkon beradi. Odatiy bo'lib, u $10^{**} - 10$ Hartree. Ushbu parametr SCF yinelemelerinin amalga oshirilishini, to'lqin funksiyalari va energiyasining aniqligini nazorat qiladi, chunki u hisoblangan ikki elektronli integrallarning sonini kamaytiradi.

Buffer size parametri operatsion xotiraning hajmini belgilaydi (ikki aniqlikdagi so'zlarda, bitta so'z uchun 8 bayt), bu ikki elektronli integralni qattiq diskka vaqtincha yozishdan oldin saqlash uchun zarur (bu diskni tanlash menyuda bo'lishi mumkin) File / Preferences / Path). Buferning kattaroq hajmi dastur diskka kamdan-

kam kirishi sababli taxmin qilingan vaqtni qisqartirishi mumkin. Agar bu bufer etarlicha katta bo'lsa, HyperChem diskka umuman kira olmaydi. Shuni ta'kidlash kerakki, dastur kompyuterning ishlamay qolishi sababli yoki boshqa noto'g'ri sabablarga ko'ra to'xtab qolsa, ushbu vaqtinchalik fayl diskda qoladi. Bu joyni bo'shatish uchun uni qo'lda olib tashlash kerak.

To'g'ridan-to'g'ri SCF hisob-kitobi SCF qadamidan bir marta emas, balki har bir iteratsiyada ikkita elektron integralni hisoblaydi, go'yo u holda. Bunday hisoblash, albatta, ancha sekinroq, ammo bu sizga ko'p miqdordagi integrallar uchun disk maydoni va operatsion xotiradan foydalanmaslikka imkon beradi. Ushbu parametrni yoqish kichik diskli va xotirali kompyuterlarda katta tizimlarni hisoblashda talab qilinadi.

Arvoh-atomlarni boshqarish (arvoh atomlaridan foydalanish). Ushbu parameter ma'lumatolarning asosiy funktsiyalari tayinlangan markazlarga kirishga imkon beradi, shu bilan birga tizimga qo'shimch ayadrolar ham, qo'shimcha elektronlar ham kiritilmaydi. Ushbu parameter sizga kosmosning istalgan nuqtasida markazlashtirilgan qo'shimcha qo'shimcha funktsiyalarni kiritish imkonini beradi. Shuni esda tutish kerakki, bunday "virtual" atomlardan foydalanish ba'zi artefaktlarga olib kelishi mumkin. Masalan, asosiy to'lqin funktsiyalari mavjud bo'lganligi sababli, mos keladigan markazlarga yo'naltirilgan Mulliken to'lovlari ham bo'ladi. Ushbu xususiyatdan foydalanish uchun Tanlash menyusida tegishli tanlovni o'tkazgandan so'ng, Ismni tanlash elementini tanlang va Boshqa elementni tanlab, unga sharpa-atomlar nomini bering. Shundan so'ng, Ghost-atomlar Control elementi Ab Initio Method / Advanced Options dialog menyusida faollashadi. Ushbu yondashuv bir qator noodatiy kimyoviy bog'lanishlarni tavsiflashda samarali bo'lishi mumkin. Ushbu parametr faqat bitta nuqta hisoblash uchun faol.

MO dastlabki taxmin molekulyar orbital koeffitsientlarining dastlabki to'ldirilishini yadro Hamiltoniyani diagonalizatsiya qilish orqali aniqlaydi. Proektsiyalangan Gekel parametri tanlanganda, ushbu parametrlar Gekel usuli bilan aniqlanadi. Boshlang'ich koeffitsientlar xuddi shu tarzda Projected CNDO (CNDO usuli) va Projected INDO (INDO usuli) parametrlarini tanlashda aniqlanadi.

D Orbitallar soni. Ushbu parametr hisoblashda ishlatiladigan d-orbitallarning turini aniqlaydi. Besh (beshta) orbitalni tanlash Hermit orbitallari (d_0 , d_1 , d_{-1} , d_2 , d_{-2}) yordamida hisoblanishga va oltita (oltita) tanlov dekartiyadagi d-orbitallar yordamida hisoblashga mos keladi (d_{xx} , d_{yy} , d_{zz} , d_{xy} , d_{xz} , d_{yz}).

Nazorat savollar

1. Aralash rejimdagi hisob-kitoblarda Hyper Chem dasturi nima ish bajaradi?
2. Agar ba'zi molekularlar qisman ajratilgan bo'lsa, chegara atomlari qolgan sp^3 -bog'lanishlar bilan bog'langanligiga ishonch hosil qilish uchun nima qilish kerak?
3. Ab initio Hartree-Fock usuli molekulyar mexanik va yarimempirik usullardan nimasi bilan farq qiladi?
4. Noorganik tizimlar uchun molekulyar-mexanik va yarim empirik hisob-kitoblar noto'g'ri natijalar beradi, shuning uchun boshlang'ich geometriyasini kamroq yoki kamroq darajada olish uchun qaysi parametridan foydalanish tavsiya etiladi?
5. Dialog menyusining "Basis Set" parametri nima ish bajaradi?
6. NoBasis Set parametrini qachon ishlatilish mumkin?
7. Aply Basis Set tugmasi nima ish bajaradi?
8. Ab initio Options dialog oynasi nima uchun ishlatiladi?
9. Muloqot menyusining qanday qismi to'lqin funktsiyasini hisoblash uchun zarur bo'lgan aniqlikni va ushbu aniqlikka erishish uchun maksimal takrorlanish sonini belgilash uchun ishlatiladi?
10. Molekulalarning spin holatini hisoblashning ikkita usulini tanlash mumkin. Ular qanday usullar?

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. W. J. Hehre, W. A. Lathan, R. Ditchfield, M. D. Newton, and J. A. Pople, Gaussian 70, Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 2005).
2. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, P. C. Hariharan, R. Seeger, J. A. Pople, W. J. Hehre, and M. D. Newton, Gaussian 76(Carnegie-Mellon University, Pittsburgh,

PA, 2000).

3. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, R. Krishnan, R. Seeger, D. J. Defrees, H. B. Schlegel, S. Topiol, L. R. Kahn, and J. A. Pople, Gaussian 80 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2003).

4. J. S. Binkley, M. J. Frisch, D. J. Defrees, R. Krishnan, R. A. Whiteside, H. B. Schlegel, E. M. Fluder, and J. A. Pople, Gaussian 82 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2002).

5. М. J. Frisch, Т. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 2000.-382с.

IV. AMALIY MASHG'ULOT MATERIALLARI

1- amaliy mashg'ulot: Klasterli strukturani kvant kimyoviy va molekulyar dinamikali sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish va ishga tushirish.

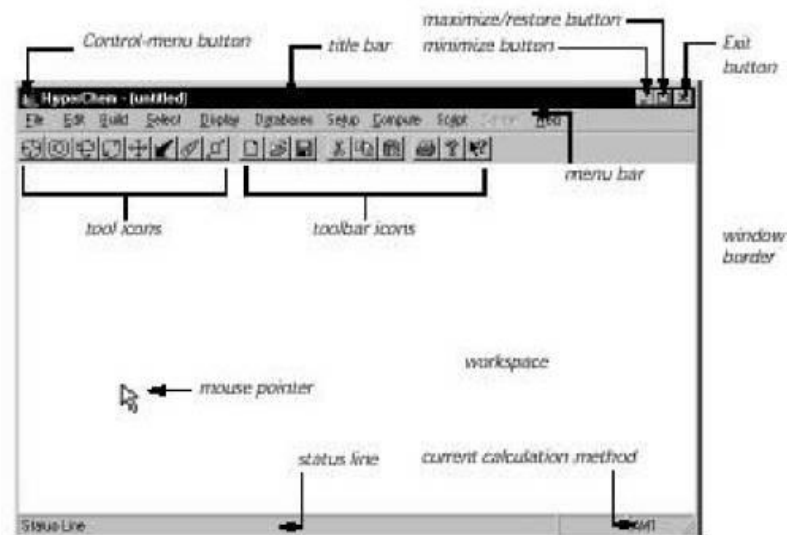
Ishning maqsadi: Klaster tuzilishini kvant kimyoviy va molekulyar dinamikasini sonli hisoblash uchun dastur paketini o'rnatish va ishga tushirish

Ishni bajarish uchun zarur bo'lgan ma'lumotlar

Hozirgi kunda dunyoda kvant kimyosi va molekulyar dinamikani amalga oshiradigan ko'plab zamonaviy hisoblash komplekslari mavjud, ammo foydalanuvchilarning keng doirasi uchun ushbu usullardan eng qulay foydalanish HyperChem kvant kimyoviy va molekulyar dinamikasi dasturi tomonidan ta'minlanadi. Ushbu multimedia kitobida keltirilgan molekulyar dinamikani modellashtirishning barcha natijalari ushbu dasturning turli xil versiyalari yordamida olingan. O'quvchi ushbu dasturning bepul demo versiyasini Hypercube Corporation veb-saytidan (www.hyper.com) olishlari mumkin.

HyperChem hujjatlari ingliz tilida CDK.pdf, GetStart.pdf, Referenc.pdf fayllarida joylashgan. Kvant kimyosi va molekulyar dinamikaning usullari va dasturlari bilan umuman tanish bo'lmagan o'quvchilar uchun ushbu bob HyperChem dasturi bilan ishlashni osonlashtiradigan "yosh qiruvchi kurs" ni taqdim etadi.

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



Строка названия siz ishlayotgan fayl nomini ko'rsatadi. Agar siz yangi yaratilgan faylda ishlayotgan bo'lsangiz, ism sarlavhasiz ko'rinadi.

Menyu satrida boshqa HyperChem **Строка меню** mavjud

File Файл,

Edit Редактирование,

Build Построение объектов,

Select Выделение,

Display Отображение,

Databases Базы данных,

Setup Установки,

Compute Расчет,

Cancel Отмену,

Script Сценарий,

Help Подсказку.

Asboblari paneli

Asboblari panelining chap tomonida atom yoki molekulani qurish, tanlash, ko'rsatish va harakatlantirish uchun foydalanadigan sakkizta asbob tugmachalari joylashgan (Quyidagi sichqonchani ishlatish).

Строка состояния hozirgi vaqtda ko'rsatilgan molekuladagi atomlar soni, hisoblash holati, energiya yoki gradient kattaligi kabi dolzarb ma'lumotlar ko'rsatiladi. Menyu elementini tanlaganingizda, holat satrida elementning qisqacha tavsifi paydo bo'ladi.

Кнопки управления меню tugmachalari hajmini o'zgartirishga, ko'chirishga, kengaytirishga va HyperChem oynasini yopishga imkon beradigan buyruqlarni o'z ichiga oladi. Ular shuningdek, boshqa oynalarni faollashtirishga imkon beradigan Key buyrug'ini o'z ichiga oladi.

2-amaliy mashg'ulot: Atrofdagi atomlar bilan kristalli panjara uchastkasini kvant kimyoviy usuli bilan qurish va tahrirlash.

Ishning maqsadi: kvant kimyoviy usuli bilan atrofdagi atomlar bilan kristall panjarali tugunni qurish va tahrirlash ko'nikmalarini olish.

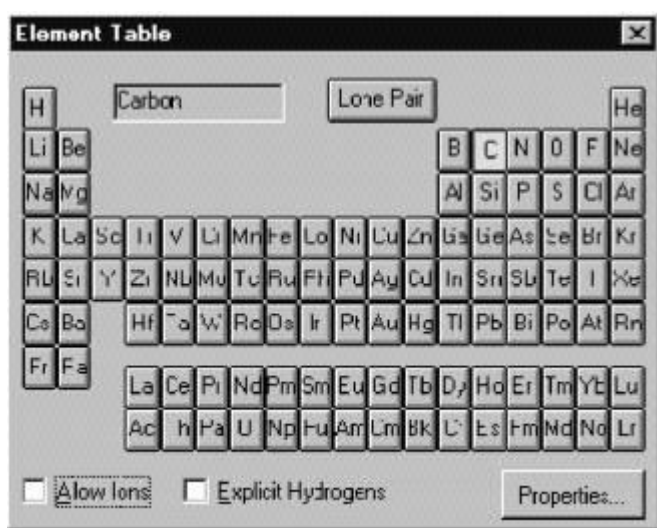
Ishni bajarish uchun zarur bo'lgan ma'lumotlar

Ob'ektlarni qurish va tahrirlashning asosiy texnikasi

HyperChem-ni ochgandan so'ng, oynani to'liq ekranga kengaytirish maqsadga muvofiqdir. Katta ish joyida molekulalarni qurish ancha qulaydir.

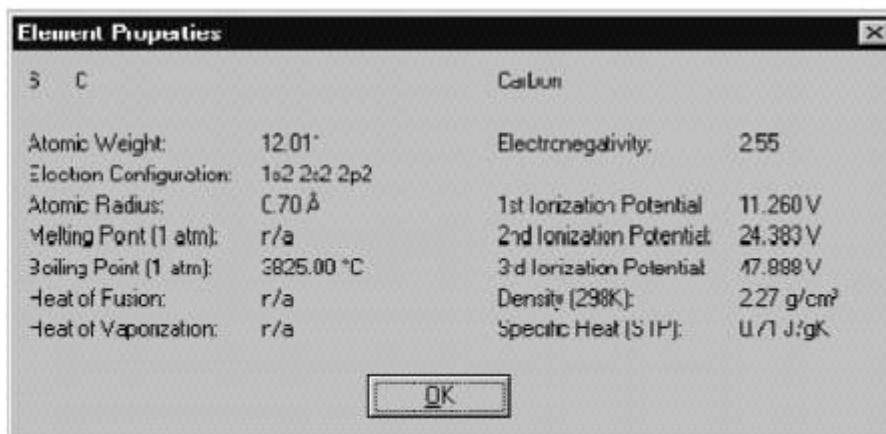
Alohida atomlarni chizish:

1. Qurilish menyusining standart elementini oching. Unda Element Table dialog menyusi - D. I. Mendeleev elementlarining davriy jadvali mavjud.



2. Elementni tanlash uchun sichqoncha kursorini kerakli element ustiga siljiting va chap tugmani bosning.

3. Agar Xususiyatlar ... tugmachasini bosgan bo'lsangiz, tanlangan elementning fizik xususiyatlari haqidagi ma'lumotlarni o'z ichiga olgan oyna ochiladi.



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

4. Shuningdek, check Ion-larga ruxsat berish yoki aniq gidrogenlarni tekshirish mumkin.

5. Elementni tanlagandan so'ng, Elementlar jadvalini yoping.

6. Kursorni ish joyiga o'tkazing. Shu bilan birga, u ko'rish shaklini oladi

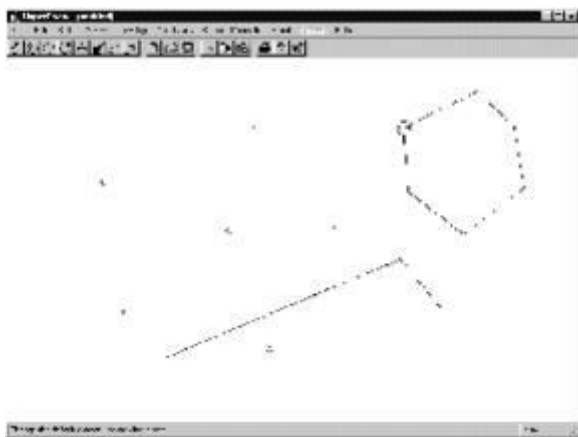
7. Tanlangan atomni sichqonchani chap tugmachasini bir marta bosish orqali qurilish maydoniga joylashtiring. Shunday qilib, bitta elementning cheksiz ko'p atomlarini bir-biridan istalgan masofada joylashtirishingiz mumkin.

8. Elementni o'zgartirish uchun yana Standart elementni oching va sichqonchani chap tugmasi bilan ustiga bosning.



9. Ikki atomni bir-biri bilan bog'lash uchun sichqonchani "ko'rish" □ (chizish) ni atom ustiga o'tkazing va chap tugmachani (L-broach) qo'yib yubormasdan, boshqa atomga chiziq torting. Shunday qilib, kosmosda joylashgan barcha atomlarni kimyoviy aloqalar orqali bitta molekulaga birlashtirish mumkin.

10. Molekula qurishning yana bir usuli bor. Siz bitta atomni qurilish maydoniga qo'yganingizdan so'ng, chap tugmachani (L-broach) qo'ymasdan, undan ikkinchi atom bo'lishi kerak bo'lgan joyga chiziq torting va sichqoncha tugmachasini qo'ymasdan bir marta bosning. Bu ikkinchi atomning pozitsiyasi.



11. Molekulalarni qurishda ularning hammasi ham tekis tuzilishga ega emasligini hisobga olish kerak, shuning uchun fazoda alohida atomlarni bir-biriga nisbatan ma'lum burchak ostida joylashtirish uchun molekulani sichqoncha ko'rsatgichini tanlash orqali aylantirish mumkin.

12. Kimyoviy bog'lanishni ko'p (ikki, uch, bir yarim) qilish uchun ko'rish □ bitta bog'lanishni ifodalovchi chiziq yoniga qo'yilishi va sichqonchanning chap tugmachasini bir marta (ikki marta) bosish kerak.

13. Bog'lanishlarni yoki atomlarni olib tashlash uchun sichqonchanning o'ng tugmachasini bosning (R tugmasini bosning).

Tanlangan atomlar (molekulalar) bilan ishlash

Siz tanlaganingizdan so'ng bir vaqtning o'zida bir nechta atomlarni yoki butun molekulani yo'q qilishingiz yoki nusxalashingiz mumkin. Buning uchun □ tugmasi ishlatiladi (bir-birining ichiga joylashtirilgan juft doiralar).

1. Avval Tanlash menyusidan tanlov variantlarini tanlashingiz kerak. Siz ikkala alohida atomlarni, qoldiqlarni va butun molekulalarni alohida yoki birgalikda tanlashingiz mumkin.

2. Tanlash parametrlarini (masalan, atom) sozlaganingizdan so'ng, kursorni ish joyidagi tanlangan ob'ekt ustiga olib o'tishingiz va sichqoncha tugmachasi bilan L tugmachasini bosishingiz kerak.

3. Ikki atom orasidagi bog'lanishni xuddi shu tarzda ajratish mumkin. Bunday holda, Atomlar tanlov parametrlarida belgilanishi kerak.

Belgilangan qismlar o'chirilishi yoki keyinchalik buferdan chiqarilishi bilan buferga saqlanishi mumkin (menyudagi mos tugmalar yoki Tahrirlash menyusidagi bo'limlar).

Tanlangan fragmentlarni ishchi maydonchada tegishli asboblarni tanlash va sichqonchaning o'ng tugmachasini bosib ushlab turish orqali alohida-alohida ko'chirish yoki aylantirish mumkin (faqat buning uchun Fail / Preferences / Tool menyusidagi barcha molekulyar tarjimini bekor qilishingiz kerak).

Tanlovni bekor qilish uchun kursorni ekranning bo'sh joyiga qo'ying va sichqonchaning chap tugmachasini bosing. Alohida atom, fragment yoki bog'lanishni tanlash uchun kursori tanlangan ob'ekt ustiga qo'yiladi va sichqonchaning o'ng tugmasi bilan bir marta bosiladi.

Atomlar guruhini tanlash

Atomlar guruhini tanlayotganda ular to'rtburchak ichiga joylashtirilgan

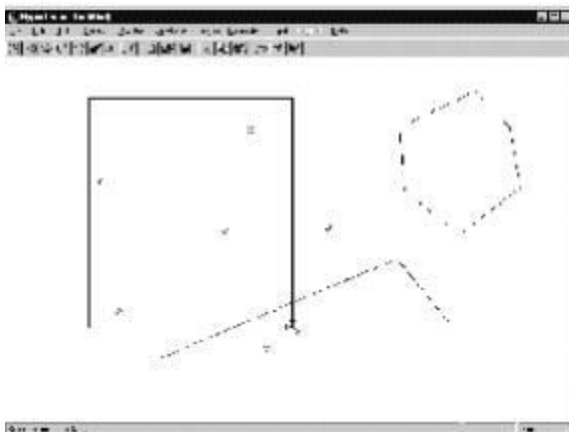
1. Select menyusida Select Sphere belgilanmasligi kerak.

2. Tanlangan atomlarga sichqonchaning chap va o'ng tugmachalarini (LR-drag) ushlab turganda, ish joyining bo'sh qismida nuqta tanlang, undan chiziq torting. Bunda tanlov maydoni chegarasini aks ettiruvchi to'rtburchak chiziladi.

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

Xuddi shu oynada siz atomlarning ikkinchi guruhini tanlashingiz mumkin. Buning uchun Tanlash menyusida () bir nechta tanlovni belgilang. Keyin, xuddi shu

tarzda, to'rtburchaklar ichida yana bir atomlar guruhini yoping. Bunday holda, tanlangan yangi atomlar oldingilariga qo'shiladi.



Barcha atomlarni tanlash uchun siz o'z kursorini ish joyining bo'sh joyiga qo'yishingiz va sichqonchaning chap tugmachasini bir marta bosishingiz kerak. Barcha tanlovlarni bekor qilish uchun kursor ish joyining bo'sh joyida bo'lganida sichqonchaning o'ng tugmachasini bir marta bosib.

Atomlarni olib tashlash

Bitta atom yoki bog'lanishni olib tashlash uchun:

1. *Asboblardagi asboblarning rasmini (Draw) -ni bir marta bosib.*
2. *Kursorni o'chiriladigan ob'ekt ustiga surib va R tugmasini bosib. Atom yoki bog'lanish yo'qoladi.*

Bir nechta atomlarni yoki bog'lanishlarni olib tashlash uchun:

To'rtburchak ichidagi bo'shliqda olib tashlanishi kerak bo'lgan atomlar va bog'lanishlarni yopish uchun LR-pull-dan foydalaning

Tartibga solish menyusidan Tozalash-ni tanlang. Muloqot oynasi paydo bo'ladi, u erda savol beriladi: "Tanlovni o'chirmoqchimisiz?". Siz "Ha" tugmachasini bosishingiz kerak.

Atomni buferga nusxalash:

1. *Select menyusida Atoms ni belgilang.*
2. *Ish joyidagi chap tugmani bosish orqali atom yoki bog'lanishni tanlang.*
3. *Edit (Tartibga solish) menyusidan Copy (Nusxalash-ni) tanlang. Atom yoki bog'lanishning nusxasi buferda saqlanadi.*

4. Ob'ektlarni almashish buferidan ish joyiga joylashtirish uchun tahrirlash menyusidan *Past* buyrug'ini tanlang.

***HyperChem* Ish joyini tozalash:**

Fayl menyusidan Yangisini tanlang. "Ushbu faylga kiritilgan o'zgarishlarni saqlamoqchimisiz?"

Siz "Yo'q" ni tanlashingiz kerak. HyperChem ish joyini tozalaydi.

3-amaliy dars: Klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini sonli hisoblash.

Ishning maqsadi: Klasterning zaryad holatini va elektrostatik potentsialini raqamli hisoblashda ko'nikmalarga ega bo'lish.

Ishni bajarish uchun zarur bo'lgan ma'lumotlar

Setup menyusini hisoblash usulini o'rnatadi. Bu quyidagilar bo'lishi mumkin: molekulyar mexanika, yarim empirik kvant-kimyoviy usullar (kengaytirilgan Gyckel usulidan PM3 uslubigacha bo'lgan 10 ta variant) va ab initio Xartree-Fok usuli turli asoslarda.

Setup menyusini molekulyar mexanik va kvant kimyoviy hisob-kitoblari uchun molekulyar tizimlarning energiyasini, geometrik va elektron parametrlarini o'z ichiga oladi. O'rnatish menyusida kerakli variantni tanlagandan so'ng, kerakli ishlash hisob-kitoblarini bajarish uchun Hisoblash menyusidan foydalaning.

HyperChem dasturi to'rtta model potentsiali (MM +, AMBER, BIO + va OPLS), to'qqizta yarimempirik kvant kimyoviy usullari yordamida tizimlarning energiyasini va ularning muvozanat geometriyasini molekulyar mexanika bilan hisoblashi mumkin. (Kengaytirilgan Hückel usuli, CNDO, INDO, MINDO3, MNDO, AM1, PM3, ZINDO / 1 va ZINDO / yoki turli asoslarda kvant kimyosining ab initio usuli.

Elektrostatikalar Kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlar dipol tipidagi o'zaro ta'sirlar yoki qisman atom zaryadlari yordamida hisoblanadi.

Ö Bond dipollari kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlarni hisoblash uchun ishlatiladi. Ushbu parametrning qiymati MM + parametr faylida aniqlanadi.

Ö atom zaryadlari kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlarni hisoblash uchun ishlatiladi. Siz Build menyusi, Set Charge elementi orqali qisman (qisman) atom zaryadlarini o'rnatishingiz mumkin yoki avval Mulliken usuli yordamida har bir atom uchun qisman zaryadlarni hisoblash orqali yarim empirik yoki ab initio hisob-kitoblarni amalga oshirishingiz mumkin.

Kesilishlar Ushbu parametr kovalent bo'lmagan ta'sir o'tkazish uchun minimal masofani belgilaydi.

Switched davriy qutidagi molekullarni hisoblashda silliqlash funksiyasini kiritadi. Ushbu yondashuv zaif sferikalarni nolga teng ravishda pasaytirib, ichki sferadan tashqi tomonga o'tishga imkon beradi. Bunday holda HyperChem Switched parametrini va Ichki va tashqi sharlar qiymatlarini o'rnatadi.

yo'q. Ushbu parametr vakuumdagi tizimlarni hisoblash uchun o'rnatiladi.

Shifted 0 dan tashqi shargacha bo'lgan butun bo'shliqqa ta'sir qiladigan tekislash funksiyasini joriy etadi. Ushbu funktsiya kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni 0 ga teng ravishda kamaytirishga imkon beradi.

O'chirilgan va almashtirilgan parametrlar uchun tashqi radius kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarning 0 ga teng bo'lishining minimal masofasini belgilaydi. Odatda bu qiymat ichki radiusdan kamida 4 angstrom kattaroq tanlanadi. Davriy chegara shartlari uchun bu qiymat davriy qutining minimal o'lchamining yarmiga teng.

Ichki radius faqat o'tish tugmachalari o'rnatilganda tanlanadi. Bu kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni to'liq hisobga olish uchun maksimal atomlararo masofa. Vaqti-vaqti bilan chegara shartlari tanlanganda, bu qiymat 4 angstrom davriy qutining minimal kattaligining yarmidan kamiga yoki 0 ga qadar, ya'ni yangi molekula ish maydoniga joylashtirilgandan so'ng chiqib ketish sozlamalari o'zlarining asl qiymatlariga qaytadi.

Klasterli tuzilishga ega bo'lgan asosiy panjara uchun uchastkaning zarur xususiyatlarini (zaryad holatini) hisoblash uchun molekulyar mexanika usuli va yarimempirik kvant-kimyoviy usul qo'llaniladi.

Shuni ta'kidlash kerakki, bu zaryadlar yadroning musbat zaryadi bilan elektronlarning zaryadi o'rtasidagi farqni anglatadi. Zaryad neytral tizim uchun "nol", kation uchun musbat haqiqiy raqam va anion uchun salbiy haqiqiy raqam.

Kovalent bo'lmagan elektrostatik o'zaro ta'sirlar dipol tipidagi o'zaro ta'sirlar yoki qisman atom zaryadlari yordamida hisoblanadi. Hisoblashda zaryadlarning o'zaro ta'sirini (va elektrostatik potentsialni) sozlaydigan dielektrik doimiy epsilon hisobga olinadi.

Model hisob-kitobida elektrostatik potentsial maydon elektron zaryadining yadro va yadro zaryadi atrofida taqsimlanish funksiyasi sifatida tasvirlangan. Shuni ta'kidlash kerakki, molekulaning zaryad holatlarini hisoblash uning tuzilishi geometriyasining o'zgarishini (molekuladagi atomlararo masofalar) hisobga olinmasdan amalga oshiriladi. Geometriyani optimallashtirish protsedurasini o'tkazish vaqtni sezilarli darajada yo'qotishiga olib keladi va kompyuter resurslaridan sezilarli va samarasiz foydalanishga olib keladi. Ko'p hollarda optimallashtirishdan so'ng tizimning umumiy energiyasi ko'tariladi. Bunday hollarda, dastlab qurilgan to'g'ri geometrik tuzilish uchun zaryad holatini va molekulyar tuzilmalarning boshqa parametrlarini hisoblash zarur.

Shu bilan birga, dastur sizga potentsial energiya xaritasini olishga imkon beradi, chunki buning uchun elektrostatik potentsial, zaryad holati, potentsial energiya sathining tasvirini samolyotda ham, fazoviy tasvirda ham tanlash mumkin.

Ko'p sonli hisoblangan molekulalar yoki atomlarga ega tizimlar ko'pincha parallel hisoblash vositalaridan foydalanishni yoki ko'proq vaqtni talab qiladi. Shuni ham ta'kidlash kerakki, elektrostatik potentsial xaritasini va zaryad holatining qiymatlarini hisoblashning turli usullarini tanlashda har xillari olinadi va ular orasidagi yaqinlashish etarli darajada emas. Shuni ta'kidlash kerakki, elektrostatik potentsial musbat zaryad birligining molekulyar energiya bilan o'zaro ta'sirining potentsial energiyasi sifatida hisoblanadi.

4-amaliy dars: Klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash. Ma'lumotlar bazasidagi eksperimental cho'qqilarni raqamli bilan taqqoslash.

Ishning maqsadi: Klaster tuzilishining tebranish spektri va orbitallarini hisoblash qobiliyatlarini olish.

Ishni bajarish uchun zarur bo'lgan ma'lumotlar

Konfiguratsiya o'zaro ta'sirining amaliy qo'llanmalari.

CI hisob-kitoblari hisob-kitoblarda ishlatilishi mumkin:

- ultrabinafsha va ko'rinadigan spektrlar,
- g'alaynlangan xolatlar energiyasi,
- kimyoviy bog'lanishlarning paydo bo'lishi yoki uzilishi (masalan, H₂ ajralishi), spin holatidagi o'zgarishlar,

- Londoning tarqatuvchi kuchlari ta'sirini o'rganish,

De Degeneratsiya yoki deyarli buzilib ketadigan holatlarning tavsiflari,

Sing Singlet-triplet parchalanishini yuqori darajada o'rganish.

Mikrostat usuli qo'zg'algan holatlar singari o'zaro bog'liq bo'lmagan holatdagi energiyani pasaytiradi. Faqatgina g'alayonlangan CI usuli faqat UV va VIS hisob-kitoblari uchun mo'ljallangan va energiyani yaxshilamaydi. Asosiy holat (Brillouin teoremasi).

No-simmetrik tizimlar uchun orbital mezonidan foydalanganda to'g'ri natijalarga erishish uchun degeneratsiya qilingan orbitallar to'plamlarini to'liq yoki umuman qo'shmaslik kerak. Bundan tashqari, energiya mezonidan ehtiyotkorlik bilan foydalanish kerak. Ushbu mezon ish'ol qilingan va bo'sh bo'lgan orbitallar orasidagi energiya farqidan kattaroq bo'lishi kerak.

Katta tizimlarda, qoida tariqasida, kichik energiya diapazonlarida juda ko'p orbitallar mavjud. Binobarin, CI matritsasining kattaligi energiya mezonining kattaligiga juda sezgir bo'lishi mumkin. Hisoblash vaqti CI matritsasining kattaligiga juda bog'liq bo'lganligi sababli, kerakli hisoblash manbai, ayniqsa MNDO, AM1 yoki PM3 usullaridan foydalansangiz, qabul qilinishi mumkin bo'lmagan darajada

katta bo'lishi mumkin. Bunday vaziyatni oldini olish uchun RHF hisoblash natijalarini diqqat bilan tahlil qilish kerak.

Konfiguratsiyaning o'zaro ta'siri Ushbu parametr konfiguratsiyaning o'zaro ta'sirini hisoblashni faollashtirish uchun ishlatiladi va tegishli dialog oynasini ochadi. Ushbu yondashuv ko'rinadigan diapazonda ultrabinafsha va optik spektrlarni hisoblashda qo'llanilishi kerak. Ushbu parametrni tanlash hisoblash vaqtini sezilarli darajada oshiradi.

Vibratsiyali spektrni va molekulyar orbitallarni (MO) hisoblash uchun yarimempirik ZINDO-S hisoblash usuli qo'llaniladi. IQning yutilish spektrlarini hisoblashda, odatda, ko'rinadigan yoki ultrabinafsha nurlanish diapazonlarini yutish paytida ro'y beradigan qo'zg'aladigan elektron o'tishlar bilan bog'liq bo'lmagan molekulaning IQ tebranish spektrlari hisoblab chiqilishini tushunish muhimdir. Ko'pincha, IQni yutish spektrlarining tebranish rejimlarining energiyalari kattalik tartibiga yoki qo'zg'aladigan o'tish energiyasidan ikki baravar kamroq bo'ladi. Bunda IQ tebranish yutilish spektrlari bo'yicha sonli hisoblash usuli bilan olingan ma'lumotlar molekulalarning aylanish spektrlarini yoki o'rganilayotgan tuzilmalarni ham hisobga oladi.

Elektron spektrni hisoblash ham yarimempirika usuli bilan, ham 6-31G asosli funktsiyalar to'plamiga ega cheksiz spin (UHF - yopiq qobiqli tizimlar uchun) Hartree - Fock usuli bilan amalga oshiriladi. O'rganilayotgan strukturaning dastlabki hisob-kitoblari jarayonida ushbu usul yarimempirika uslubiga, xususan MNDOga nisbatan bir necha barobar aniqroq ekanligi ma'lum bo'ldi [58; P.133-204] va boshqa tomondan, bizga DFT usuli talab qiladigan bir necha baravar kam vaqt va hisoblash resurslari kerak edi. Ammo, ba'zi tadqiqotchilarning fikriga ko'ra DFTning aniqligi bir necha foizga yuqori ekanligini hisobga olish kerak.

GLOSSARIY

Термин	O'zbek tilidagi ma'nosi	Definition in English
Quantum Mechanics Qvant mexanikasi	Kvant mexanikasi-elementar zarralar, atomlar, molekulalar, atom yadrolari, shuningdek, makroxodisalarin tasvirlash usullarini va harakat qonunlarini o'rganadigan fizikaning asosiy qismi. Kvant mexanikasining qonunlari ehtimollik xususiyatiga ega.	Quantum mechanics is the main branch of physics that studies the methods of describing and the laws of motion of elementary particles, atoms, molecules, atomic nuclei, and also macro phenomena. The laws of quantum mechanics are probabilistic in nature.
Main quantum number Asosiy kvant soni	Asosiy kvant soni-statsionar sharoitda vodorod atomining energiyasining mumkin bo'lgan qiymatlarini aniqlaydigan kvant soni. Asosiy kvant soni 1, 2, 3 va boshqalar.	The main quantum number is a quantum number that determines the possible values of the energy of a hydrogen atom in stationary states. The principal quantum number takes positive integer values of 1, 2, 3, etc.
Quantum of energy Kvant energiyasi	Energiya kvanti- (kvant o'tish xolatida), atomning holati bir o'zgarish akti bilan atom, molekula, atom yadrosi va boshqa microtizim tarqatadigan yoki yutishi mumkin bo'lgan energiya ma'lum miqdori	A quantum of energy is a finite amount of energy that can emit or absorb an atom, molecule, atomic nucleus, and other microsystem in one act of changing its state (during a quantum transition).
Quantum numbers Kvant soni	Kvant sonlari - kvant mexanikasi qonunlariga bo'ysunadigan tizimning energiya, impuls va impuls momentumining mumkin bo'lgan alohida sonli qiymatlarini aniqlaydigan to'liq yoki yarim sonlardir.	Quantum numbers are integer or half-integer numbers that define the possible discrete numerical values of the energy, momentum, and angular momentum of a system that obeys the laws of quantum mechanics.

<p>Quantum transition Kvant o'tish</p>	<p>Kvant o'tish-kvant tizimining atom, molekula va boshqa kvant tizimining energiya darajasidan ikkinchisiga o'tish.</p> <p>Yuqori darajadan pastroqqa o'tishda kvant tizimi energiyani chiqaradi.</p> <p>Past darajadan yuqori darajaga o'tishda kvant tizimi energiyani yutadi.</p>	<p>A quantum transition is a jump-like transition of a quantum system of an atom, a molecule, and another quantum system from one energy level to another. When moving from a higher level to a lower quantum system, it radiates energy. The transition from a lower level to a higher quantum system absorbs energy.</p>
<p>Planck's constant Plank doymiysi</p>	<p>Plank doymiysi – fundamental fizik doymiy (h):</p> <ul style="list-style-type: none"> - diskret xolatni ifodalaydi; - kvant mexanikasida fundamental o'rin egallaydi. <p>$h = 6.626176E-34 \text{ J*s.} = 4.136E-15 \text{ eV*s.}$</p> <p>Tez-tez ishlatiladigan qiymat $h/(2*\text{Pi}) = 1.05E-34 \text{ J*s.}$</p>	<p>Planck's constant is the fundamental physical constant (h):</p> <ul style="list-style-type: none"> - determining the discreteness of the action; and - playing a fundamental role in quantum mechanics. <p>$h = 6,626176E-34 \text{ J * s.} = 4.136E-15 \text{ eV * s.}$</p> <p>The value $h / (2 * \text{PI}) = 1.05E-34 \text{ J * s}$ is often used.</p>
<p>Principle of Pauli Pauli printsipi</p>	<p>Pauly printsipi tabiatning asosiy qonunidir, unga ko'ra kvant tizimida yarim to'liq spin bilan ikki yoki undan ortiq bir xil zarralar bir vaqtning o'zida bir xil holatda bo'lmaydi.</p>	<p>The Pauli principle is a fundamental law of nature according to which in a quantum system two or more identical particles with half-integer spin cannot simultaneously be in the same state.</p>
<p>Bohr Radius Bor radiusi</p>	<p>Bor radiusi-vodorod atomida elektron orbitasining minimal radiusi.</p> <p>Kvant mexanikasida bor radiusi atom yadrosidan masofa deb ta'riflanadi, unda eng katta ehtimollik bilan elektronni g'alayonlanmagan vodorod atomida aniqlash mumkin.</p>	<p>The Bohr radius is the minimum radius of the electron orbit in a hydrogen atom.</p> <p>In quantum mechanics, the Bohr radius is defined as the distance from the nucleus of an atom at which an electron is most likely to be found in an unexcited hydrogen atom.</p>

<p>Heisenberg's ratio</p> <p>Noaniqliklar nisbati</p>	<p>Noaniqliklar nisbati-klassik fizikaning qo'llanilishi chegaralarini belgilaydigan tengsizliklar:</p> <p>-1- mikrozarachalar koordinatalari qiymatlari va uning impulsining tegishli tarkibiy qismlarida noaniqlikni belgilovchi tengsizliklar;</p> <p>- 2- mikrozarachalar energiyasini va vaqt momentini o'lchashda noaniqlikni belgilovchi tengsizliklar.</p> <p>Noaniqlik munosabatlari har qanday moddiy narsalar uchun amal qiladi.</p>	<p>Uncertainty relations are inequalities that determine the limits of applicability of classical physics:</p> <p>-1- inequalities that specify the uncertainty in the coordinates of the microparticle and the corresponding components of its momentum;</p> <p>-2- inequalities that give uncertainty in measuring the energy of a microparticle and a point in time.</p> <p>The uncertainty relations are valid for any material objects.</p>
<p>Spin</p> <p>Spin</p>	<p>Spin-bu kvant tabiatiga ega bo'lgan va zarachaning butun harakati bilan bog'liq bo'lmagan mikro zarachaning momentumining o'ziga xos momenti.</p>	<p>Spin is the intrinsic angular momentum of a microparticle, which has a quantum nature and is not associated with the movement of a particle as a whole.</p>
<p>Tunnel effect</p> <p>Tunnel effekt</p>	<p>Tunnel effekti-zarachalarning potentsial to'siqlar orqali o'tishi (oqishi).</p> <p>Tunnel effekti zarachalarning to'lqin xususiyatlariga ega bo'lishiga bog'liq bo'lgan kvant-mexanik ta'sir.</p>	<p>The tunnel effect is the passage (percolation) of particles through potential barriers.</p> <p>The tunnel effect is a quantum-mechanical effect due to the fact that particles have wave properties.</p>

VII. FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI

I. Maxsus adabiyotlar

1. W. J. Hehre, W. A. Lathan, R. Ditchfield, M. D. Newton, and J. A. Pople, Gaussian 70, Quantum Chemistry Program Exchange, Program No. 237, 2005).
2. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, P. C. Hariharan, R. Seeger, J. A. Pople, W. J. Hehre, and M. D. Newton, Gaussian 76 (Carnegie-Mellon University, Pittsburgh, PA, 2000).
3. J. S. Binkley, R. A. Whiteside, R. Krishnan, R. Seeger, D. J. Defrees, H. B. Schlegel, S. Topiol, L. R. Kahn, and J. A. Pople, Gaussian 80 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2003).
4. J. S. Binkley, M. J. Frisch, D. J. Defrees, R. Krishnan, R. A. Whiteside, H. B. Schlegel, E. M. Fluder, and J. A. Pople, Gaussian 82 (Carnegie-Mellon Quantum Chemistry Publishing Unit, Pittsburgh, PA, 2002).
5. M. J. Frisch, T. Кларк. Компьютерная химия. - М.: Мир, 2000.-382с.

II. Internet resurslari

1. <http://russia.ni.com/multisim>
2. www.ni.com/russiaMultisimTM. User Guide, 2011.
3. <http://russia.ni.com/multisim>
4. <http://www.twirpx.com/library/comp/>
5. www.sgu.ru/files/nodes/30844/
6. <http://matlab.exponenta.ru/>
7. <http://www.ziyonet.uz>
8. www.arxiv.referat.uz
9. <http://www.eknigi.org>
10. <http://www.nashaucheba.ru>
11. <http://www.ni.ru>
12. www.allmathcad.com
13. www.skachat-vse-besplatno.ru/programma/labview