

HYPERCHEM DASTURIDA 2(1H-BENZOTRIAZOL-1-IL)-SIRKA
KISLOTASINING ATOMLARI ZARYAD QIYMATI VA AYRIM ENERGETIK
PARAMETRLARINI O'RGANISH

Mirzayeva Robiya Abdurauf Qizi,
Muradova Dilafruz Kadirovna
Jizzax Davlat Pedagogika Universiteti
mirzayevarobiya052@gmail.com

MAQOLA
MALUMOTI

ANNOTATSIYA:

MAQOLA TARIXI:

Received: 22.08.2026

Revised: 23.08.2026

Accepted: 24.08.2026

KALIT SO'ZLAR:

2(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotasi,
MM+, AMBER, BIO+
va OPLS MM, IQ-
spektr, AM1, RM1,
PM3

Ushbu maqolada HyperChem dasturi yordamida 2-(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotasining zaryad qiymatlari, hosil bo'lish issiqligi va IQ-spektrlari yarim empirik (AM1, RM1, PM3) hamda molekulyar mexanika (MM+, AMBER, BIO+, OPLS) usullari asosida nazariy o'rganildi. Hosil bo'lish issiqlik energiyasi BIO+(CHARMM) usulida maksimal, MM+ usulida esa minimal qiymatga ega bo'lgani aniqlandi, bu esa energetik parametrlarni hisoblashda BIO+(CHARMM) usulining samaraliroq ekanligini ko'rsatadi. Atomlarning zaryad qiymatlarida usullar o'rtasida ozgina farqlar kuzatilgan bo'lsa, tebranish spektrlarida sezilarli farq aniqlanmadi, faqat kichik kimyoviy siljish qayd etildi.

Kirish. Hozirgi kunda kvant kimyosi va molekulyar dinamika usullari molekulyar, kristall va o'tish (nano) o'lchamdagi murakkab tizimlarning elektron va atom tuzilmalarini raqamli simulyatsiya qilishda keng qo'llaniladi. Bu tegishli dasturiy ta'minotning texnologik rivojlanishi bilan bog'liq [1]. Dunyoda kvant kimyosi va sun'iy intellekt usullarini amalga oshiradigan juda ko'p zamonaviy hisoblash komplekslari mavjud, ammo bu usullardan foydalanuvchilarning keng doirasi uchun foydalanish eng qulay hisoblanadi. Shu maqsadda kvant mexanikasi va sun'iy intellekt usullarini aralashtirishning ahamiyatini ochib beradi. U kvant mexanikasi orqali kashf etilgan yangi dori vositasining samaradorligi va xavfsizligini baholash uchun model taqdim etadi [2]. HyperChem programmalar majmuasida, xuddi Avogadro programmasidek, "Draw" vositasidan foydalanib birikma strukturasini chizish va uni Mopac hamda boshqa kvant-kimyoviy hisoblash usullari uchun input fayllar tayyorlash mumkin. HyperChemda birikmalarni molekulyar mexanika, yarim empirik, noempirik hamda DFT usullari bilan hisob-kitoblar qilish mumkin. Infraqizil va ultrabinafsha spektrlarini hisoblash mumkin. Ham yarim empirik ham noempirik, yana shuningdek molekulyar mexanika usullarida hisob-kitob o'tqazish imkoniyatini beruvchi

majmualardan biri HyperChem dasturi hisoblanadi. HyperChem dasturiga MM+, AMBER, BIO+ va OPLS MM usullari kiritilgan [3-4].

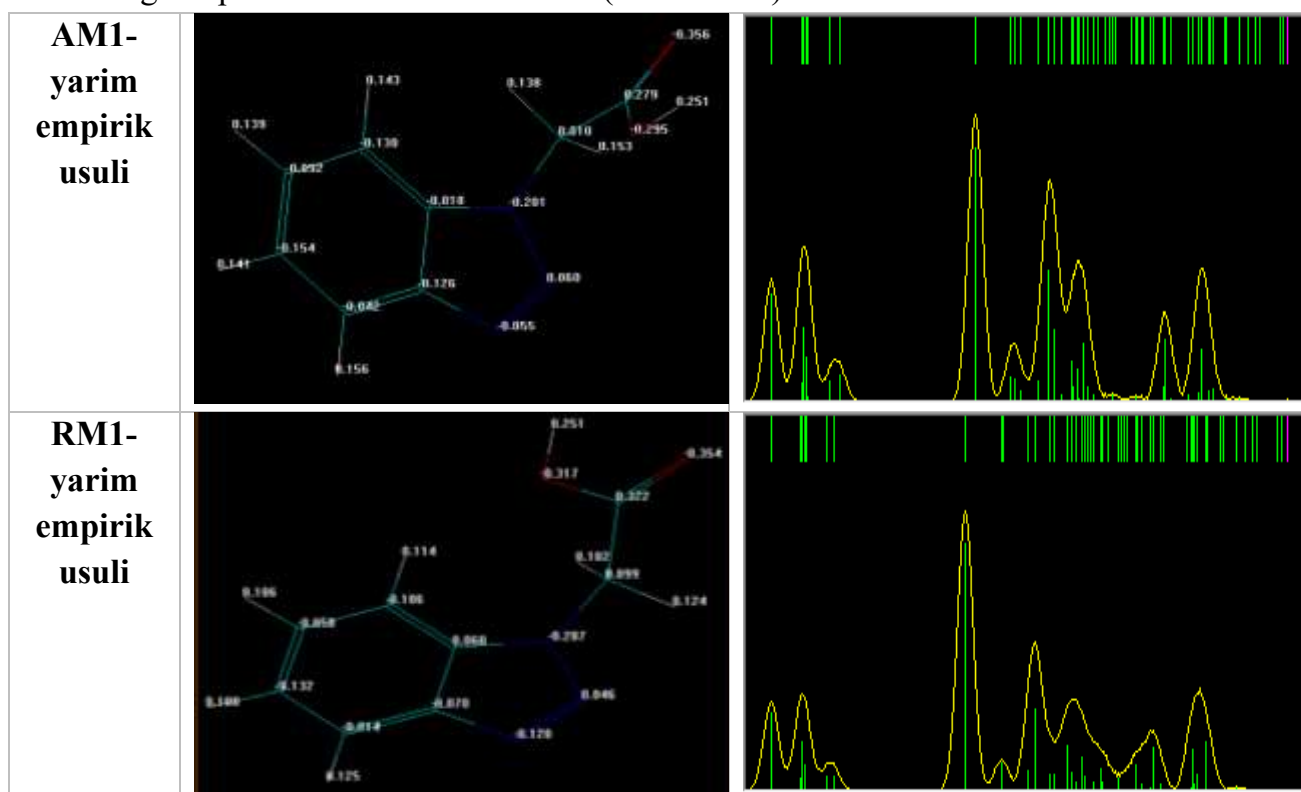
Olingan natijalar tahlili. 2(1H-benzotriazol-1 -il)-sirka kislotasining hosil bo'lish issiqlik energiyalari, zaryad qiymatlari va tebranish spektri o'rganildi. Hisoblash jarayoni HyperChem dasturining AM1, RM1, PM3 yarim empirik usullari va MM+, AMBER, BIO, OPLS kabi molekulyar mexanika usullarida bajarildi.

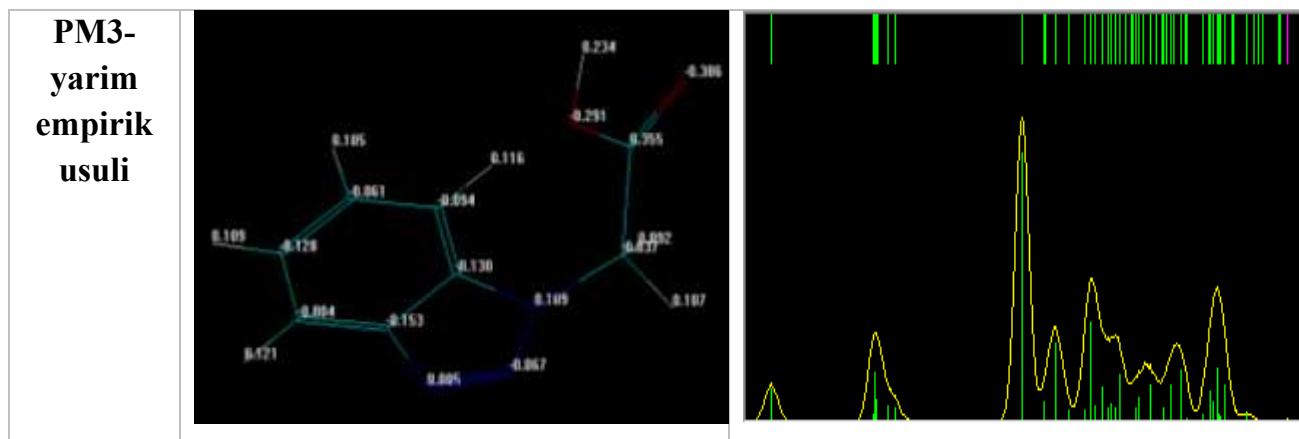
1-jadval

2(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotasining HyperChem dasturida olingan hosil bo'lish issiqlik energiyalari

MM+	AMBER	BIO+(CHARMM)	OPLS
7.0829 kkal/mol	20.8785 kkal/mol	52.4339 kkal/mol	13.9165 kkal/mol

Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, 2(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotasining hosil bo'lish issiqlik energiyasi BIO+(CHARMM) metodida optimizatsiya qilinganida maksimal qiymatga ega bo'ladi va MM+ metodida optimizatsiya qilinganida esa minimal qiymatga ega bo'ldi. Demak, 2(1H-benzotriazol-1 -il)-sirka kislota moddasi uchun energetik parametr hisoblashda BIO+(CHARMM) metodi samarali hisoblanadi.





1-Rasm. 2(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotali HyperChem dasturida yarim empirik usullarida olingan tebranish spektri va zaryad qiymatlari

2(1H-benzotriazol-1-il)-sirka kislotalining zaryad qiymatlariga nazar solsak, har uchala usulda ham atomlarning zaryad qiymatlari bir-biridan biroz farq qilishini ko‘rish mumkin, tebranish spektrlari deyarli farq qilmaydi faqat biroz kimyoviy siljish kuzatildi.

Xulosa

Hosil bo‘lish issiqlik energiyalari hisoblanganda eng minimal qiymat MM+ usulida kuzatildi. Zaryad qiymatlarida esa 3 ta usulda optimizatsiya qilinganda deyarli katta farqlar kuzatilmadi. Tebranish spektrlari ham 3 ta usulda optimizatsiya qilinganda bir xil sohada spektrlari mavjud, faqat biroz kimyoviy siljish bor. Zaryad qiymatlari AM1, RM1, PM3 usullarida katta farq qilmasligi usulning aniqligi yuqoriligidan dalolat beradi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati:

1. Caffery, Mary L.; Dobosh, Paul A.; Richardson, Diane M.: Laboratory Exercises Using HyperChem// J. Chem. Educ. (1999) 76 (8): 1065. <https://doi.org/10.1021/ed076p1065.1>
2. Mahdi, K.I.: Molecular Modelling of Diclofenac Derivatives as Potential Drugs Using Quantum Mechanics and AI Methods. In: García Márquez, F.P., Hameed, A.A., Jamil, A. (eds) Pattern Recognition and Artificial Intelligence. Lecture Notes in Networks and Systems, vol 1393. Springer, Cham. (2026). https://doi.org/10.1007/978-3-031-90893-4_60
3. D.J.Bekchanov, R.A.Eshchanov, A.X.Xaitbayev, A.G.Eshimbetov Kompyuter kimyo o‘quv qo‘llanma, Toshkent-2020. 184-b
4. Кларк Т. Компьютерная химия: Практическое руководство по расчетам структуры и энергии молекулы / Пер. с англ. под ред. В.С. Мاستрюкова, Ю.Н. Панченко. — М.: Мир, 1990. — 383 с.