[1] **Abdukarimov.A.SH**

[2] **Okmanov R.**

O'zbekiston Milliy universiteti

2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL NING BA'ZI GEOMETRIK VA ENERGETIK PARAMETRLARINI EKSPERIMENTAL O'RGANISH

Annotatsiya : Ushbu izlanishimizda Avagadro dasturi yordamida 2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL ning ayrim geometrik va energetik parametrlarini empirik hisoblash usullarida o'rganish natijalari keltirilgan.

Kalit so'z: Empirik usul, molekulyar mexanika, geometrik parametr, energetik parametr, hosil bo'lish issiqlik energiyasi, ideal bog' uzunligi.

Kirish

Molekulyar mexanika (MM) usullarida atomlar kuch maydonlarida joylashgan Nyuton zarrachalari deb qaraladi. Ularning o'zaro ta'siri potensial energiya bilan ifodalanadi. MM usuli empirik usul – tajribada olingan geometrik va boshqa kattaliklar asosida parametrlanadi. MM usuli kvant-kimyoviy usullarga nisbatan juda tezkor usul sanaladi

Olingan natijalar tahlili

2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL ning ba'zi geometrik va energetik parametrlarini eksperimental o'rganish uchun Avagadro dasturidan foydalandik. Ushbu dastur MM usulini o'rganishga juda qulay dastur hisoblanadi. Natijalar Chemical, MMFF94, MMFF94s, UFF metodlarida olindi. Har bir metodda qilingan optimizatsiya natijalari quyidagi jadvallarda keltirilgan (1-2 jadval):

1-Jadval

2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL *ning Avagadro dasturi yordamida olingan hosil bo'lish issiqlik energilari*

Chemical	MMFF94	MMFF94S	UFF
91,7868 kj/mol	87,099 kj/mol	87,1 kj/mol	288,324 kj/mol

Hisoblash natijalari shuni ko'rsatadiki, 2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL ning hosil bo'lishining issiqlik energiyasi UFF metodida optimizatsiya qilinganida maksimal qiymatga ega bo'ladi va MMFF94 metodida optimizatsiya qilinganida esa minimal qiymatga ega bo'ldi. Demak, 2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL moddasi uchun energetik parametr hisoblashda empirik hisoblash usullaridan MMFF94 metodi samarali.

2-Jadval

2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL *ning Avagadro dasturi yordamida olingan real bog' uzunliklari*

T/r	Bog'lar	Chemical	MMFF94	MMFF94S	UFF
1.	S – H1	1.008	1.408	1.009	1.340
2.	C1 – O1	1.113	1.311	1.112	1.367
3.	N1 – C1	1.346	1.345	1.345	1.316
4.	N2 –C2	1.344	1.348	1.345	1.319
5.	C1 – S1	1.770	1.789	1.770	1.731
6.	O1 – C2	1.111	1.313	1.112	1.371
7.	C2 – C3	1.481	1.476	1.397	1.457
8.	C3 – C4	1.396	1.405	1.396	1.404
9.	C4 – C5	1.396	1.398	1.398	1.398
10.	C5 – C6	1.396	1.397	1.395	1.393
11	C6 – C7	1.396	1.397	1.396	1.393
12	C7 – C8	1.396	1.399	1.396	1.397
13	C8 – C2	1.396	1.406	1.084	1.404
14	C3 – H2	1.084	1.083	1.085	1.088
15	C4 – H3	1.084	1.082	1.088	1.087
16	C5 – H4	1.085	1.082	1.085	1.087
17	C6 – H5	1.085	1.083	1.085	1.087
18	C7 – H6	1.084	1.082	1.084	1.089

BOVMEG ning ideal va real bog' uzunliklari nazariy MM usuli bilan o'rganilganda empirik usulning 4 ta metodida sezilarli farqlar kuzatilmadi.

Tajriba qism

2-TIO-5-ARIL-1,3,4-OKSODIAZOL ning ba'zi geometrik va energetik parametrlari empirik hisoblash usullari bilan o'rganildi. Hisoblash jarayoni Avagadro

dasturining Chemical, MMFF94, MMFF94s va UFF kabi molekulyar mexanika usullarida bajarilgan.

Xulosa

Hosil bo'lish issiqlik energiyalari hisoblanganda eng minimal qiymat MMFF94s usulida kuzatildi. Bog'lar orasidagi masofalarda esa 4 ta usulda optimizatsiya qilinganda deyarli katta farqlar kuzatilmadi. Bog'lar uzunligi ideal bog'lar uzunligidan katta farq qilmasligi usulning aniqligi yuqoriligidan dalolat beradi.

Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati

1. A.G. Yeshimbetov, A.X. Xaitbayev, S.A Maulyanov, H.S. Toshov. Kompyuter kimyosi, Toshkent-2015. 115 b.
2. D.J. Bekchanov, R.A. Eshchanov, A.X. Xaitbayev A.G. Eshimbetov Kompyuter kimyo o'quv qo'llanma, Toshkent-2020. 184 b.

WORDLY KNOWLEDGE