

FƏRQLİ FORMALI KİMYƏVİ BİRLƏŞMƏLƏRİN- KONFORMASIYALARIN KOMPUTER VASİTƏSİLƏ ALINMASI ALQORİTMLƏRİNİN TƏDQIQI

Şəfiyeva G.M.

(BDU, Tətbiqi riyaziyyat və kibernetika fakültəsi)

shefiyevagunay@gmail.com

Xülasə. Əksər molekullar birdən çox konformasiyalara (forma, quruluş) və ya molekulyar həndəsəyə malik ola bilər. Konformasiya analizi atom əlaqələri ətrafında fırlatma vasitəsilə yaranan dəyişikliklərin baxılan molekulun xassələrinə təsiri arasında əlaqəni modelləşdirməyə çalışır. Bu məqsədlə molekulyar mexanika və dinamika üsullarından istifadə edilir. İşdə konformasiyaların komputer vasitəsilə alınması üçün alqoritm və üsullar tədqiq olunmuşdur.

Açar sözlər: MD alqoritmləri, konformasiya analizi, konformasiyalar fəzası, MD simulyasiyaları, şəbəkə axtarış.

Molekulyar dinamika (MD) simulyasiyaları atomların cari vəziyyət və sürətlərinə əsaslanaraq onların gələcək vəziyyət və sürətlərini hesablamağa imkan verir. Əksər molekullar birdən çox konformasiyalara (forma, quruluş) və ya molekulyar həndəsəyə malik ola bilər. Bu isə fırlana bilən əlaqələr ətrafında fırlanma nəticəsində yaranır. Beləliklə, molekulun fərqli konformasiyası atomların fəzada fərqli düzülüşü ilə bağlıdır. Lakin, bu zaman konfigurasiya yəni, atomların və əlaqələrin sayı eyni qalır. Onlar özünə çevrilə biləndirlər.

Hər bir konformasiya molekulun potensial enerji səthində bir nöqtəyə uyğun gəlir. Bu isə o deməkdir ki, müəyyən həndəsənin təsviri üçün enerjinin konformasiya parametrlərindən asılılığından istifadə edilir. Qeyd edək ki, enerji həmişə molekulun bütün $3N-6$ sayda olan daxili koordinatlarından asılıdır. Buna görə də əksər molekullar üçün potensial enerji səthi çox yüksək ölçülü funksiyalardır və bəzən onlara hipersəthlər deyilir. Məsələn, su molekulu 3 daxili koordinata malikdir və deməli enerji 3 parametrdən asılı funksiyadır və nəticələr 4 ölçülü potensial səthdir.

Potensial enerji səthi adətən bir qlobal minimuma malikdir. Bu isə ən kiçik enerjiyə malik həndəsəyə – konformasiyaya uyğun gəlir. Bundan başqa müxtəlif lokal minimumlar kiçik enerjiyə malik konformasiyalar müşahidə oluna

bilər. Bu minimum enerjiyə malik strukturlar fırlanan sədlər (aralıq konformasiyalara uyğun enerjilər) vasitəsilə bir-birindən ayrılır.

Müxtəlif həndəsələrin qurulması, öyrənilməsi və onların potensial enerjiləri avtomatik konformasiya yaradan alqoritmlərin inkişafına səbəb olub. Bu alqoritmlər molekulun verilmiş 3D modelindən istifadə edərək konformasiyalar çoxluğu yaradır və qurur. Molekulun mümkün konformasiyalarının sayı konformasiya fəzası adlanır. Potensial enerji səthinin mürəkkəbliyi və çoxölçülü olması bütün konformasiya fəzalarının qurulmasını əksər hallarda mümkünsüz edir. Buna görə də çox hesablama üsulları molekulun konformasiyalarını almaq istədikdə konformasiyaları sadələşdirir. Yəni konformasiya fəzasında geniş şəkildə axtarış aparmaqla mümkün lokal minimumu tapır (kiçik enerjili konformasiyaları) və global minimumu təyin edir. Beləliklə, konformasiyalar çoxluğu onların daxili enerjisi vasitəsilə alınır.

Konformasiya analizi üçün əsasən şəbəkə axtarış üsulu, təsadüfi və ya stoxastik generasiya, genetik alqoritmlər, molekulyar dinamika (MD), Monte Karlo simulyasiyası və digər simulyasiya üsulları istifadə edilir. COBRA, CORINA, MIMUMBA kimi proqramlar konformasiya analizi aparan proqramlardır. Bu proqramlar Cambridge Structural Database (CSD) və Torsion Angle Library (TALibrary) bazalarındakı məlumatlardan istifadə edir. Bunlar histqramlar şəklində saxlanır və sonra enerji funksiyaları qurulur və kiçik enerji qiymətlərinə uyğun konformasiyalar müqayisə edilir.

Molekulyar dinamika (MD) simulyasiyaları atomların cari vəziyyət və sürətlərinə əsaslanaraq onların gələcək vəziyyət və sürətlərini hesablamağa imkan verir. MD simulyasiyaları molekulların trayektoriyalarını çox kiçik nanosaniyələrdə hesablaya bilir, bu isə çox kiçik zamanda dəyişən xassələri öyrənməyə imkan verir. Molekulyar dinamika simulyasiyaları üçün kompüter vaxtı sistemdə olan atomların sayının kvadratı qədər artır. Bu isə potensial enerji funksiyalarındakı bondsuz əlaqələr hesabına baş verir. Bu vaxtı azaltmaq üçün düsturlarda bir sıra sadələşmələr aparılır, müəyyən parametrlər nəzərdən atılır. Eyni zamanda MD simulyasiyalarını hesablamaq üçün güclü kompüterlər və alqoritmlər tələb olunur. MD praktikada mutasiyaların alınmasında istifadə olunur.

Ədəbiyyat

1. Joyce Cox, Joan Lambert, Curtis Frye, Step by Step Microsoft Office Professional 2010, Microsoft Press , 2011.
2. Johann Gasteiger, Thomas Engel Chemoinformatics: A Textbook, 2003, 680p.
3. Leach, Andrew R., Gillet, V.J. [An Introduction to Chemoinformatics](#), 2007.