

KİMYƏVİ HESABLAMALARDA İSTİFADƏ EDİLƏN ALQORİTM VƏ ÜSULLARIN TƏDQİQİ

Şəfiyeva G.M.

(BDU, Tətbiqi riyaziyyat və kibernetika fakültəsi)

shefiyevagunay@gmail.com

Xülasə: İşdə kimyəvi birləşmələrin xassələrinin kompüterdə hesablanması üçün alqoritm və üsullar tədqiq olunmuşdur. Müasir kimyəvi paketlər kimyəvi hesablamalar üçün molekulyar mexanika (MM) və molekulyar dinamika (MD) üsulları istifadə edir. MM üsulları molekulun enerjisinin təsviri üçün empirik tənliklərdən və ya funksiyalardan istifadə edir.

Açar sözlər: kimyəvi hesablama üsulları, MM alqoritmləri, MM üsulları.

Kimyanın hesablama kimyası qolu (eyni zamanda nəzəri kimya da adlanır) kvant mexanikasıdan nəzəri termodinamik hesablamalara, mövcud və hətta hipotez olan kimyəvi maddələrin kinetik xassələrinə qədər sahəni əhatə edir. Bu iş isə mütləq hesablamalar tələb edir və kimya öyrənənlər üçün nəzərdə tutulan çoxsaylı multimedia proqram paketlərini Internetdən pullu və ya pulsuz şəkildə əldə etmək mümkündür. Bu paketlər molekulların vizual modellərini özündə saxlayır, sonuncular isə istifadəçilər tərəfindən fırladıla, çevrilə bilər, eyni zamanda bu paketlərdə kimyəvi reaksiyaların vizual modelləri mövcuddur. Bakalavr və aspirantlar üçün beynəlxalq kimya kitabları bu gün kitaba uyğun belə modelləri özündə saxlayan CD ilə təmin olunur. Bu paketlər tədqiqatçıların öz vizual modellərini yaratmağa və ya mövcud olanı dəyişməyə imkan vermir. Bunun əksinə şkilçəkmə paketləri məsələn, CambridgeSoft Corporation tərəfindən hazırlanan ChemBioOffice Ultra, HyperChem, MestRenova və s. kimi kimyəvi və bioloji modeləşdirmədə istifadə edilən proqram təminatları birləşmələrin molekulyar strukturunun; fiziki-kimyəvi xassələrin riyazi hesablanması zamanı; həndəsi strukturun bilavasitə analizinin, hərəkət dinamikasının tədqiqi; kimyəvi birləşmələrin 3D-modellərinin hazırlanmasında mütəxəssislərə kömək edə bilər. Bu istiqamətdə mövcud üsullar molekulyar mexanika (MM) və molekulyar dinamika (MD) üsullarıdır. Bu proqramlar da əsasən MM və MD üsullarından istifadə edir.

MM (molekulyar mexanika) üsulları molekulun enerjisinin təsviri üçün empirik tənliklərdən və ya funksiyalardan istifadə edir. MM klassik mexanikanın “Qüvvət sahələri” (QS) adlanan prinsipindən istifadə edərək molekulun enerjisini hesablayır. Bu yanaşmada molekula müxtəlif elastiklik parametrlərinə (qüvvət sabitlərinə) malik kimyəvi əlaqələrlə (bondlarla) birləşən fiziki obyektlərin (atomların) yığılması kimi baxılır. Atomları molekulda bir yerdə saxlayan qüvvələr potensial qüvvə funksiyaları vasitəsilə təsvir oluna bilər. Potensial qüvvə funksiyaları struktur parametrlərdən asılıdır: əlaqə uzunluğu, valent bucağı, müxtəlif qeyri-kovalent qarşılıqlı əlaqələr və s. bu potensial enerji funksiyalarının kombinasiyası qüvvət sahələri adlanır. Molekulyar sistemin potensial enerjisi QS-də potensialın fərdi komponentlərinin cəminə bərabərdir. Tipik molekulyar mexanika (MM) QS-nin riyazi düsturu aşağıdakı şəkildədir [1]:

$$V_{PEF} = V_{\text{elaqeli}} + V_{\text{elaqesiz}} \quad (1)$$

Bu funksiya eyni zamanda Potensial enerji funksiyası (PEF) də adlanır: əlaqəli və əlaqəsiz halların müxtəlif formalarını özündə cəmləşdirir. MM üsulları həm də (Force Field) Qüvvət sahəsi üsulları da adlanır. MM molekul və ya molekullar qrupunun statik xassələrinin hesablanmasıdır: struktur, enerji və ya elektrostatik xassələr.

Qeyd edək ki, mövcud MM alqoritmləri tətbiq sahəsindən asılı olaraq (1)-də verilən funksiyaların müxtəlif modifikasiyalarından, daha yüksək tərtiblərindən istifadə edir. Məsələn, əlaqəli hal istifadə edən MM alqoritmləri bio molekulyar QS-ləri Huk qanunundan və kvadratik funksiyaadan istifadə edir. (AMBER, CHARMM, GROMOS alqoritmləri) [1,2]. Böyük molekullar-protein, DNA-lar üçün Morze potensialı ilə müqayisədə Huk qanunu daha yaxşı nəticə göstərir. Harmonik potensialın performansını artırmaq üçün yuxarı tərtiblərdən istifadə olunur. Bu cür düzəlişlər MM3/MM4, MMFF və CFF alqoritmlərində istifadə olunur, bunlar isə kiçik üzvi molekullar üçün bond əlaqəsini daha yüksək dəqiqlikdə hesablayır.

Ədəbiyyat

1. Johann Gasteiger, Thomas Engel Chemoinformatics: A Textbook, 2003, 680p.
2. Leach, Andrew R., Gillet, V.J. [An Introduction to Chemoinformatics](#), 2007