

**MOLEKULALARNING FAZOVIIY VA DINAMIK HOLATINI O'RGANISHDA MATEMATIK  
ALGORITMLAR VA RAQAMLI USULLARDAN FOYDALANISH**

**Ibragimov Izzatjon Asrorjon o'g'li**

**Xaliqulov Xamro Jasur o'g'li**

*1-Pastdarg'om tuman 48- maktab matematika fani o'qituvchisi*

*2-O'zbekiston – Finlandiya pedagogika instituti xodimi*

*3-Pastdarg'om tuman 84 – maktab kimyo fani o'qituvchisi*

**Anotatsiya:** *Molekulalarning fazoviy holatini o'rganish davomida turli matematik algoritmlar va turli usullar orqali bayon etish. Ma'lumki molekulalarning fazodagi o'lchami uni matematik tahlil qilish hammaga qiziq bo'lgan mavzudir. Molekulalarning fazoviy va dinamik holatini tahlil qilishda asosiy yondashuvlardan biri ularning harakatini matematik modellar yordamida ifodalashdir. Ushbu modellar orasida klassik mexanik modellar, kvant mexanikasi modellar, va statistik mexanika modellar mavjud. Molekulalarning fazoviy va dinamik holatini o'rganish mobaynida mashhur olimlar nazariyalariga asoslanib ifodalashga harakat qilindi.*

**Kalit so'zlar:** *Molekulalar, fazoviy holat, dinamik holat, matematik algoritmlar, raqamli usullar, molekulyar dinamika, mexanik model, kvant mexanikasi, Monte-Karlo usuli, integral usullar, simulatsiya.*

**THE STUDY OF THE SPATIAL AND DYNAMIC STATES OF MOLECULES USING  
MATHEMATICAL ALGORITHMS AND NUMERICAL METHODS**

**Ibragimov Izzatjon Asrorjon o'g'li**

**Xaliqulov Xamro Jasur o'g'li**

*1 – Mathematics Teacher at Pastdargom District, School No. 48*

*2 - Staff member of the Uzbekistan-Finland Pedagogical Institute*

*3 - Chemistry Teacher at Pastdargom District, School No. 84*

**Abstract:** *In the study of the spatial state of molecules, various mathematical algorithms and methods are used for representation. As is well known, the size of a molecule in space and its mathematical analysis is a topic of interest for everyone. One of the main approaches to analyzing the spatial and dynamic states of molecules is to express their motion using mathematical models. These models include classical mechanical models, quantum mechanical models, and statistical mechanics models. In the course of studying the spatial and dynamic states of molecules, efforts were made to express them based on the theories of famous scientists.*

**Keywords:** *Molecules, spatial state, dynamic state, mathematical algorithms, numerical methods, molecular dynamics, mechanical model, quantum mechanics, Monte Carlo method, integral methods, simulation.*

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ АЛГОРИТМОВ И ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ ПРОСТРАНСТВЕННОГО И ДИНАМИЧЕСКОГО СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛ

**Ибрагимов Иззатжон Асроржон угли**

**Халиқулов Хамро Жасур угли**

1 – Учитель математика , школа № 48, Пастдаргомский район

2 - Сотрудник Узбекистано-Финляндского педагогического института

3 - Учитель химии, школа № 84, Пастдаргомский район

**Аннотация:** *В процессе изучения пространственного состояния молекул используются различные математические алгоритмы и методы. Как известно, размер молекул в пространстве и их математический анализ — это тема, интересная для всех. Одним из основных подходов к анализу пространственного и динамического состояния молекул является выражение их движения с помощью математических моделей. Среди этих моделей имеются классические механические модели, модели квантовой механики и модели статистической механики. В процессе изучения пространственного и динамического состояния молекул предприняты попытки выразить их на основе теорий известных ученых.*

**Ключевые слова:** *молекулы, пространственное состояние, динамическое состояние, математические алгоритмы, численные методы, молекулярная динамика, механическая модель, квантовая механика, метод Монте-Карло, интегральные методы, симуляция.*

### KIRISH

Molekulalar va ularning harakatini o'rganish, ilmiy va sanoat sohalarida muhim ahamiyatga ega bo'lib, ko'plab yangi materiallar va texnologiyalarni yaratish imkonini beradi. Molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini tahlil qilish uchun matematik algoritmlar va raqamli usullar keng qo'llaniladi. Ushbu maqolada molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini modellashtirishda qo'llaniladigan asosiy matematik metodlar va algoritmlar tahlil qilinadi. Maqsadimiz molekulyar harakatlar, ularning o'zaro ta'sirlarini va umumiy tizim xususiyatlarini tushunishga yordam beruvchi samarali va aniq usullarni ko'rsatishdir.

### METODOLOGIYA

Molekulalarning fazoviy va dinamik holatini tahlil qilishda asosiy yondashuvlardan biri ularning harakatini matematik modellar yordamida ifodalashdir. Ushbu modellar orasida klassik mexanik modellar, kvant mexanikasi modellar, va statistik mexanika modellar mavjud.

Matematik algoritmlar va raqamli usullarni ishlatish orqali ushbu modellarni real tizimlarga qo'llash mumkin.<sup>[2]</sup>

Klassik mexanik model – Bu modelda molekulalar o'rtasidagi o'zaro ta'sirlar kuchlar yordamida hisoblanadi va ular Nyutonning harakat qonunlari bo'yicha aniqlanadi.<sup>[3]</sup> Molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyalari shu modelga asoslanadi, bunda har bir atom yoki molekula bir-biri bilan o'zaro ta'sir qiladi va vaqt o'tishi bilan harakat qiladi.<sup>[4]</sup>

Kvant mexanikasi model – Bu modelda molekulaning energetik holatlari va elektron o'zgarishlari kvant mexanikasi asosida modellashtiriladi. Ushbu modeldan foydalanib, molekulyar orbitalar va boshqa kvant xususiyatlar hisoblanadi. Kvant kimyosi metodlari, masalan, Hartree-Fock (HF) va Density Functional Theory (DFT) keng qo'llaniladi.<sup>[5]</sup>

Statistik mexanika – Molekulyar tizimlarning makroskopik xususiyatlarini aniqlash uchun statistik mexanika metodlari qo'llaniladi. Bu metodlar tizimning mikroskopik holatlari (atomlar va molekulalar) bilan bog'liq bo'lib, ulardan makroskopik fazoviy va termodinamik xususiyatlar chiqariladi.<sup>[6]</sup>

Raqamli usullarni qo'llash uchun turli algoritmlar ishlatiladi. Ularning asosiylari quyidagilardan iborat:

🚦 Molekulyar dinamika simulyatsiyasi – Nyutonning harakat qonunlariga asoslangan raqamli usul bo'lib, molekular tizimning vaqt bo'yicha harakatini kuzatadi.

🚦 Monte-Karlo usuli – Probabilistik usul bo'lib, tasodifiy namunalash yordamida tizimning statistik xususiyatlarini hisoblaydi.

🚦 Integral usullar – Tizimlarning harakatini yuqori aniqlik bilan hisoblash uchun turli xil integral tenglamalarini yechish.<sup>[7]</sup>

### Natijalar

Molekulyar dinamika simulyatsiyalaridan foydalanib, molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik xususiyatlarini o'rganish imkonini beradi. Bunday simulyatsiyalar orqali molekulalar orasidagi o'zaro ta'sirlarni va ularga ta'sir etuvchi kuchlarni aniq tasvirlash mumkin.

Molekula	ReaxFF	ab-initio	experimental [21]
C-H Bog'	$1.09 \pm 0.01$	1.100	$1.118 \pm 0.006$
C-C Bog'	$1.57 \pm 0.01$	1.533	$1.533 \pm 0.003$
<C-C-C	$108.0 \pm 2.9$	114.2	$111.9 \pm 0.4$
<C-C-H	$111.0 \pm 0.0$	109.5	$109.5 \pm 0.5$
<H-C-H	$106.6 \pm 0.0$	106.5	–
qC-tip	-0.171	-0.205	–
qC-mid	-0.080	0.033	–
qH-tip	0.040	0.047	–
qH-mid	0.040	-0.10 ~ 0.10	–

1 – rasm. 1 Eksperimental natijalar bilan solishtirganda turli xil simulyatsiya usullari (ReaxFF, reaktiv kuch maydoni va CPMD, ab-initio MD usuli) orqali olingan geksan molekulalarining strukturaviy xususiyatlari.<sup>[1]</sup>

Misol uchun, MD simulyatsiyasida, molekula yoki atomlar bir-biriga qarab harakatlanadi, ular o'zaro bog'lanadi va fazoviy joylashuvlarini o'zgartiradi.<sup>[8]</sup> Monte-Karlo usuli esa, molekulyar tizimlarning makroskopik xususiyatlarini o'rganishda samarali bo'ladi, chunki u

tizimning mikroskopik holatlarining tasodifiy taqsimotini hisoblaydi. Bu usul ayniqsa katta tizimlar uchun qulaydir, chunki har bir atomning harakati hisoblanmaydi, balki tizimning umumiy holati hisobga olinadi.<sup>[9]</sup>

Kvant mexanikasi modellari esa, yuqori aniqlik bilan molekulyar tizimlarning energetik xususiyatlarini aniqlash imkonini beradi. DFT metodini qo'llash orqali atomlarning elektron bulutlarini va molekular bog'lanishlarni hisoblash mumkin. Bunday hisob-kitoblar molekulyar dizayn va yangi materiallarni yaratishda muhim rol o'ynaydi.

Molekulalarning fazoviy va dinamik holatini o'rganishda matematik tenglamalar va hisoblash usullari muhim rol o'ynaydi. Ushbu jarayonlar ko'plab fizikaviy va matematik modellarni talab qiladi. Quyida molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini o'rganishda qo'llaniladigan asosiy matematik tenglamalar va yondashuvlar keltirilgan.<sup>[10]</sup>

### 1. Molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyasidagi asosiy tenglamalar

Molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyasida tizimning harakati klassik mexanika asosida tasvirlanadi. Molekulalarning har birining holati vaqtga bog'liq ravishda quyidagi tenglama bilan tavsiflanadi:

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i$$

Bu yerda:

$m_i$  – molekula yoki atomning massasi,

$\vec{r}_i$  – atomning fazoviy koordinatalari,

$\vec{F}_i$  – atomga ta'sir etuvchi kuch.

Har bir atomning kuchi, uning o'zaro ta'siri boshqa atomlar bilan hisobga olinadi. Kuchlar potensial energiyalaridan kelib chiqadi, ya'ni:

$$\vec{F}_i = -\nabla U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$$

Bu yerda  $U(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n)$  – tizimning potensial energiyasini bildiradi,  $\vec{r}_i$  esa atomlarning fazoviy koordinatalarini ifodalaydi. Molekulyar dinamika simulyatsiyasi yordamida atomlar o'rtasidagi kuchlar va energiyalar vaqt davomida hisoblanadi.

### 2. Kvant mexanika va molekulyar orbitalar

Kvant mexanikasida molekular tizimlarning energiyasini hisoblash uchun Schrödinger tenglamasi asosiy hisoblanadi. Bu tenglama tizimning to'liq kvant holatini tasvirlaydi va vaqtga bog'liq yoki vaqtga bog'liq bo'lmagan shaklda yozilishi mumkin.

- Vaqtga bog'liq Shredinger tenglamasi:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \Psi(\vec{r}, t)$$

Bu yerda:

$\hbar$  – o'tkazilgan Planck doimiysi,

$\Psi(\vec{r}, t)$  – to'liq kvant holatining to'lqin funksiyasi,

$H$  – Hamilton operatori, tizimning energiyasini tasvirlaydi.

Vaqtga bog'liq bo'lmagan Schrödinger tenglamasi:

$$\hat{H}\Psi(r) = E\Psi(r)$$

Bu yerda  $E$  tizimning energiya o'zgarishidir,  $\Psi(r)$  esa elektronning to'liq funksiyasi yoki molekulyar orbitalar.

Molekulyar orbitalar (MO) yondashuvi kvant kimyosida muhim bo'lib, molekular energiya holatlari va elektronlarning taqsimlanishini tushunish uchun ishlatiladi. Bu yondashuvda molekula atomi orasidagi elektronlar o'zaro ta'sir qiladi, va bu ta'sirlar kvant mexanikasi asosida hisoblanadi.

### 3. Density Functional Theory (DFT)

Density Functional Theory (DFT) molekulyar tizimlarning kvant xususiyatlarini hisoblashda qo'llaniladi. DFT asosiy g'oyasi shundan iboratki, molekulaning energetik holatini uning elektron zichligi orqali ifodalash mumkin. DFTning asosiy matematik tenglamasi quyidagicha yoziladi:

$$E = T_s[\rho] + \int v_{\text{ext}}(\vec{r})\rho(\vec{r})d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}_1)\rho(\vec{r}_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 + E_{\text{xc}}[\rho]$$

$E$  – tizimning umumiy energiyasi,

$T_s[\rho]$  – kinetik energiya,

$v_{\text{ext}}(\vec{r})$  – tashqi potensial,

$\rho(\vec{r})$  – elektron zichligi,

$E_{\text{xc}}[\rho]$  – to'liq sxematik energiya.

DFT metodi molekulyar tizimlarning energetik holatlarini va molekulyar orbitalarini aniqlashda keng qo'llaniladi. Bu usulda tizimning energiyasini minimal qilish uchun elektron zichligi  $\rho(\vec{r})$  optimallashtiriladi.

### 4. Statistik mexanika

Statistik mexanika metodlari molekulyar tizimlarning makroskopik xususiyatlarini aniqlash uchun qo'llaniladi. Ushbu usulda tizimning makroskopik holati mikroskopik holatlar (molekulalar va atomlar) yordamida hisoblanadi. Tizimning erkin energiyasi va entropiyasini hisoblash uchun termodinamik potenciallar, masalan, Zeroth Law, First Law, Second Law, va Third Law ishlatiladi.

Partition funksiyasi:

Bu yerda:

$Z$  – partition funksiyasi,

$E_i$  – tizimning  $i$ -chi holatidagi energiya,

$\beta = 1/k_B T$  – inverse termodinamik harorat (bu yerda  $k_B$  – Boltsman doimiysi,  $T$  – harorat).

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i}$$

Partition funksiyasi tizimning makroskopik holatlarini aniqlash uchun kerakli barcha mikroskopik xususiyatlarni hisoblash imkonini beradi. Tizimning barcha energiya holatlari bo'yicha summasi orqali tizimning erkin energiyasi  $F$  va boshqa makroskopik xususiyatlar hisoblanadi:

$$F = -k_B T \ln Z$$

## 5. Monte-Karlo usuli

Monte-Karlo usuli molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik xususiyatlarini hisoblashda probabilistik yondashuvni qo'llaydi. Ushbu usulda tizimning holati tasodifiy ravishda tanlanadi va statistik tahlil yordamida tizimning umumiy xususiyatlari aniqlanadi. Molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini o'rganishda matematik tenglamalar va raqamli usullar yordamida molekulalarning harakati, o'zaro ta'siri va energetik xususiyatlarini aniq tahlil qilish mumkin. Molekulyar dinamika, kvant mexanikasi, DFT va statistik mexanika kabi metodlar molekulyar tizimlarni modellashtirishda samarali qo'llaniladi. Bular orqali yangi materiallar, dori vositalari va texnologiyalarni yaratish mumkin.

## MUHOKAMA

Molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini o'rganishda matematik algoritmlar va raqamli usullar muhim o'rin tutadi. Ular orqali nafaqat molekulalarning harakati, balki tizimning termodinamik xususiyatlari, reaksiyalar va boshqalar aniq tahlil qilinadi. Shuningdek, bu usullar yordamida yangi materiallar, dori vositalari va texnologiyalarni yaratish mumkin.

Biroq, raqamli simulyatsiyalarni amalga oshirishda ba'zi cheklovlar mavjud. Masalan, yuqori aniqlikdagi hisoblashlar katta hisoblash resurslarini talab qiladi va ba'zan real tizimlar bilan mos kelmasligi mumkin. Shuning uchun, yanada samarali va tezkor algoritmlarni ishlab chiqish dolzarb masala hisoblanadi.

## XULOSA

Molekulyar tizimlarning fazoviy va dinamik holatini o'rganishda matematik algoritmlar va raqamli usullar muhim vositadir. Ular molekulalarning harakatini va o'zaro ta'sirlarini, energetik holatlarini aniq modellashtirishga yordam beradi. Bunday usullar, ayniqsa, yangi materiallar yaratish, molekulyar dizayn va biotexnologiya sohalarida katta ahamiyatga ega. Kelajakda, bu usullarni takomillashtirish va hisoblash samaradorligini oshirish, ilmiy tadqiqotlar va amaliy ilovalar uchun yangi imkoniyatlar yaratadi. Molekulalarning fazoviy va dinamik holatlarini o'rganish – zamonaviy ilm-fanning muhim yo'nalishlaridan biridir. Bu sohada matematik algoritmlar va raqamli usullar yordamida amalga oshiriladigan tahlillar, molekulalarning harakatini va o'zgarishini aniqlashda katta ahamiyatga ega. Molekulyar dinamika, klassik mexanika, kvant mexanikasi va statistik mexanika kabi modellardan foydalanish orqali molekulalarning o'zaro ta'sirlarini va ularning vaqt o'tishi bilan qanday o'zgarishini yanada chuqurroq tushunish mumkin. Shuningdek, Monte-Karlo usuli, integral usullar va simulatsiya texnikalari kabi zamonaviy metodlar molekulalarning fazoviy va dinamik holatlarini tadqiq etishda samarali vositalar sifatida ishlatilmoqda.

Kelajakda bu usullarni yanada rivojlantirish va yanada kompleks tizimlar uchun tatbiq etish molekulalar, materialshunoslik, biotexnologiya va boshqa sohalarda yangi kashfiyotlar qilish imkoniyatlarini yaratadi. Matematik modellar va algoritmlar yordamida molekularning harakati, ularning xususiyatlari va boshqa dinamik xususiyatlarini aniq va ishonchli tarzda aniqlash imkoniyatlari kengaymoqda, bu esa ilmiy tadqiqotlar va amaliy qo'llanmalar uchun katta ahamiyatga ega.

#### FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Wittenberg H., Neumann P. Transient two-way molecular-continuum coupling with OpenFOAM and MaMiCo: A sensitivity study //Computation. – 2021. – T. 9. – №. 12. – C. 128.
2. Barker J. et al. Localized Coulomb descriptors for the Gaussian approximation potential //arXiv preprint arXiv:1611.05126. – 2016.
3. Xayrullo o'g P. U. et al. The essence of the research of synthesis of natural indicators, studying their composition and dividing them into classes //fan va ta'lim integratsiyasi (integration of science and education). – 2024. – T. 1. – №. 3. – C. 50-55.
4. Xayrullo o'g P. U. et al. The importance of improving chemistry education based on the STEAM approach //fan va ta'lim integratsiyasi (integration of science and education). – 2024. – T. 1. – №. 3. – C. 56-62.
5. Pardayev U. et al. the effects of organizing chemistry lessons based on the finnish educational system in general schools of uzbekistan //Journal of universal science research. – 2024. – T. 2. – №. 4. – C. 70-74.
6. Xayrullo o'g P. U. et al. Using natural plant extracts as acid-base indicators and pKa value calculation method //fan va ta'lim integratsiyasi (integration of science and education). – 2024. – T. 1. – №. 3. – C. 80-85.
7. Utashova S., Xoliqulov H., Tilyabov M. conducting laboratory classes in chemistry on the basis of the steam education program //Medicine, pedagogy and technology: theory and practice. – 2024. – T. 2. – №. 4. – C. 801-808.
8. Narzullayev M. et al. Application of generalized methods in chemistry classes. organization of effective lessons based on kimbift //Modern Science and Research. – 2024. – T. 3. – №. 5. – C. 643-648.
9. Jasur o'g'li X. H., Umurzokovich M. T. Elektron doskalarni maktab jamoasiga tadbig' etish. di mendeleyev davriy sisteamsining elektron modeli. zamonaviy pedagogikani yangicha talqini orqali o' quvchini jalb etish. virtual laboratoriya bo' yicha tajribalar to' plami //eng yaxshi xizmatlari uchun. – 2023. – T. 1. – №. 6. – C. 650-659.
10. Xayrullo o'g'li U. et al. maktab laboratoriyalarida haydash usuli yordamida azeotrop bo 'lmagan aralashmalarni ajratish. haydash asbob-usukunalari bilan ishlashda o 'ziga xos imkoniyatlardan foydalanish //scholar. – 2023. – T. 1. – №. 30. – C. 110-116.