

GETEROPOLIKONDENSATSION POLIMER FRAGMENTLARINI MODELASHTIRISH SOHASIDAGI IZLANISHLAR

Laylo Axmatova

Magistr, O`zbekiston milliy universiteti

Tohir Raximov

k.f.d., prof., O`zbekiston milliy universiteti

E-mail: tohir@mail.ru

ANNOTATSIYA

Ushbu tadqiqot ishida kengaytirilgan haqiqat (AR) texnologiyalari va hisoblash usullaridan foydalangan holda geteropolikondensatsiya polimerlarini modellashtirish va tahlil qilishni o'rganadi. Tadqiqot polimerlarning konformatsion tahlilini yaxshilash uchun AR-ga asoslangan 3D vizualizatsiya vositalarining integratsiyasini o'rganadi, bu ularning molekulyar xatti-harakatlarini o'rganishning intuitiv va interaktiv usulini ta'minlaydi. Asosiy topilmalar polimer zanjiri tuzilishi va fazoviy orientatsiyaning fizik va kimyoviy xossalarga ta'siri va molekulyar dinamikani tahlil qilishning samarali usullarini ishlab chiqishni o'z ichiga oladi. Ish materialshunoslik, biotibbiyot va atrof-muhit texnologiyasida potentsial qo'llanilishi bilan polimerlarning xatti-harakatlari bo'yicha ilmiy tushunchalarni yaxshilashda ilg'or modellashtirish platformalarining rolini ta'kidlaydi.

Kalit so`zlar: Geteropolikondensatsion polimerlar, Kengaytirilgan haqiqat (AR), 3D molekulyar modellashtirish, polimerlarning konformatsion tahlili

ABSTRACT

This study investigates the modelling and analysis of heteropolycondensation polymers using augmented reality (AR) technologies and computational methods. The research explores the integration of AR-based 3D visualization tools to enhance the conformational analysis of polymers, providing an intuitive and interactive way to study their molecular behaviour. Key findings include the influence of polymer chain structure and spatial orientation on physical and chemical properties and the development of efficient methods for analyzing molecular dynamics. The work highlights the role of advanced modelling platforms in improving scientific insights into polymer behaviour, with potential applications in material science, biomedicine, and environmental technology.

Keywords: Heteropolycondensation polymers, Augmented reality (AR), 3D molecular modeling, polymer conformational analysis



KIRISH

Polikondensatsion polimer va sopolimerlarning konformatsion tahlili

Makromolekulyar strukturalarni, xususan, geteropolikondensatsion polimerlarni o'rganish zamonaviy analitik va modellashtirish xususan 3D modellashtirish va kengaytirilgan reallik (AR) usullari orqali o'rganish hozirda dolzarb mavzulardan biri hisoblanadi. Ikki yoki undan ortiq turdagi monomerlarning funksional guruhlari hisobiga kondensatsiyasi natijasida bir nechta monomer zvenolaridan tashkil topgan geteropolikondensatsion polimerlar kimyoviy bog'lanishlarning o'zgarishi, fazoviy oriyentatsiyasi va monomer zvenolarining fizik xususiyatlari tufayli murakkab va turli xil konformatsiyalarni namoyon qila oladi (Rasm-1). Ularning konformatsion xatti-harakatlarini tushunish - ularning molekulyar darajada qanday yig'ilishini, cho'zilishini va o'zaro ta'sirini tushunish - ularni materialshunoslik, biotibbiyot qurilmalari va ekologik texnologiyalar kabi sohalarda samarali qo'llash uchun muhimdir.

MATERIALLAR VA METODLAR

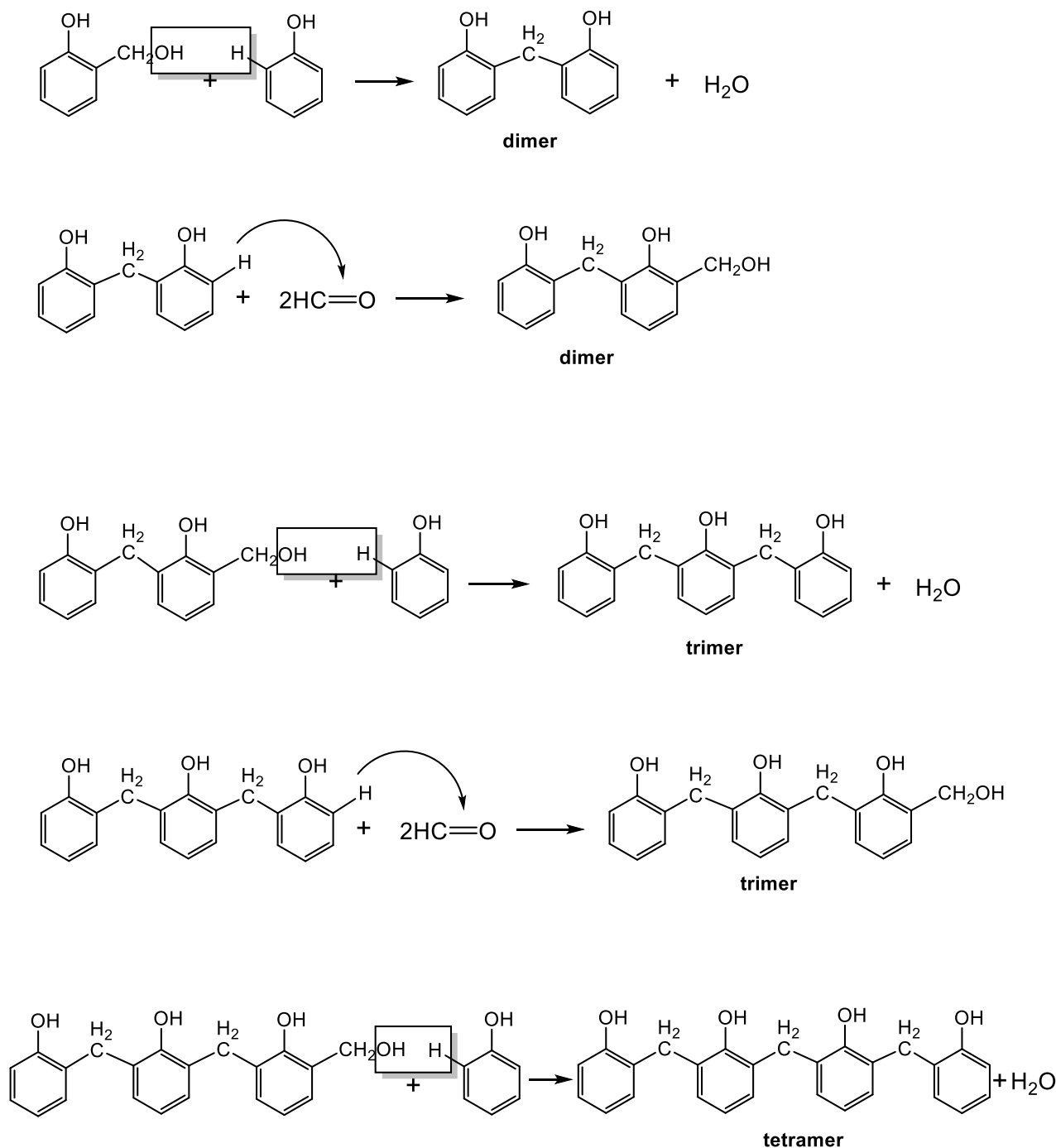
Ushbu bo'limda polikondensatsion polimerlar va sopolimerlarda konformatsion tahlilning hozirgi holati ushbu tuzilmalarni vizualizatsiya qilish va tahlil qilishning yangi yondashuvi sifatida to'ldirilgan reallikni (AR) 3D modellashtirishga alohida e'tibor qaratgan holda ko'rib chiqiladi.

Konformatsion tahlilning an'anaviy usullari

Polimerlarning an'anaviy konformatsion tahlili rentgen kristallografiyasi, yadro magnit rezonansi spektroskopiyasi (YaMR) va molekulyar dinamikani modellashtirishga (MD) asoslangan. Rentgen kristallografiyasi, ayniqsa, kristall polimerlar uchun aniq strukturaviy ma'lumotlarni beradi, ammo amorf yoki yarim kristall materiallarni tahlil qilishda cheklovlarga ega (Stuart et al., 2021). "YaMR-spektroskopiyasi eritmadagi polimer tuzilishlarini aniqlashda samarali bo'lib, yon guruhlarning yo'nalishini, zanjirlarning harakatchanligini va molekulalararo o'zaro ta'sir dinamikasini aniqladi" (Van Horn et al., 2019). Biroq, ikkala usul ham murakkab polimer tuzilmalarni, ayniqsa, bir nechta takrorlanuvchi zvenolarni o'z ichiga olgan polimerlar bilan ishlashda to'liq uch o'lchovli interaktiv tushunishni taqdim etish uchun yetarli bo'lmasligi mumkin.

Molekulyar dinamikani modellashtirish vaqt o'tishi bilan polimerning xatti-harakatini har tomonlama tushunishga imkon beruvchi muqobilikni taqdim etadi. Ushbu modellashtirishlar energiyani minimallashtirish bilan konformatsiyalarni hisoblash va harorat va bosim kabi atrof-muhit omillariga reaksiyalarni modellashtirish uchun Nyuton mexanikasidan foydalanadi (Allen & Tildesley, 2017). Molekulyar dinamikani

modellashtirish, ayniqsa, monomerlarning turli ketma-ketligiga ega bo'lgan polikondensatsion polimerlar uchun foydali, chunki u ketma-ketlik va yo'nalishning makromolekulalarning umumiy xatti-harakatiga qanday ta'sir qilishini batafsil kuzatish imkonini beradi. Biroq, o'zining afzalliklariga qaramay, an'anaviy usullar interaktiv rejimda konformatsion o'zgarishlarni vizualizatsiya qilish qobiliyati bilan cheklangan, bu esa ushbu cheklovlarni bartaraf etish uchun ilg'or 3D modellashtirish vositalarini qabul qilishga olib keladi.



Rasm-1. Fenol va formaldegid molekulasining kondensatsiya reaksiyasi natijasida, oligomerlarning hosil bo'lish reaksiya sxemalari

Geteropolikondensatsion polimerlarni konformatsion modellashtirishda erishilgan yutuqlar

Kompyuterli modellashtirish va 3D vizualizatsiya sohasidagi so‘nggi yutuqlar geteropolikondensatsion polimerlarning konformatsion tahlilini o‘zgartirdi. Augmental reallik (AR) va 3D molekulyar modellashtirish uchun dasturiy ta‘minotdan (masalan, **ARKit** bilan **ChimeraX**, **MolAR** va **Unity 3D**) foydalangan holda, tadqiqotchilar endi murakkab makromolekulyar tuzilmalarning 3D modellarini yaratishlari va o‘zaro ta‘sir qilishlari mumkin, bu esa fazoviy xabardorlikni va molekulyar konformatsiyalarni intuitiv tushunishni yaxshilaydi. Ushbu modellar polimerlanishning turli bosqichlarida molekulyar fragmentlarni vizualizatsiya qilishga yordam beradi, bu esa tadqiqotchilarga zanjirga qo‘shimcha monomer birliklar qo‘shilishi bilan konformatsiyalarning qanday rivojlanishini tahlil qilish imkonini beradi.

Konformatsion tahlilda fokuslashning asosiy sohasi turli xil monomer birliklarining ketma-ketligi va fazoviy yo‘nalishi polimerning umumiy konfiguratsiyasiga qanday ta‘sir qilishini tushunishdir. Masalan, ikki yoki undan ortiq takrorlanuvchi birliklarga ega bo‘lgan sopolimer sistemalarda konformatsion xossalar bu birliklarning aniq joylashuvi va o‘zaro ta‘siriga bog‘liq bo‘ladi. Polimer zanjirining holati vodorod bog‘lari, sterik to‘siqlar va turli segmentlar o‘rtasidagi Van-der-Vaals o‘zaro ta‘sirilariga bog‘liq bo‘lib, ularning barchasi uning yakuniy tuzilishiga hissa qo‘shadi. Ushbu ketma-ketlikka bog‘liq konformatsiyalarni tadqiq qilish uchun **Monte-Karlo modellashtirish** (MC) va o‘z-o‘zidan muvofiqlashgan maydon nazariyasi (Self-consistent field-SCFT) tobora ko‘proq qo‘llaniladi, bu esa geteropolikondensatsion polimerlarning fizik va kimyoviy xususiyatlariga strukturaviy joylashuvi qanday ta‘sir qilishi haqida tasavvur beradi.

M. Chenning tushuntirishicha, "Polimer fragmentlarining AR modellari tadqiqotchilarga fazoviy tuzilmalarni o‘rganish va statik 2D yoki 3D tasvirlarda talqin qilish qiyin bo‘lgan molekulyar o‘zaro ta‘sirlarni aniqlash imkonini beradi" (Chen, 2019). Turli xil monomerlar noyob sterik va elektron xususiyatlarga hissa qo‘shadigan geteropolikondensatsion polimerlar holatida, AR uzilish kuchi, elastiklik va termik barqarorlik kabi xususiyatlarga ta‘sir qiluvchi o‘zaro ta‘sirlarni o‘rganish uchun kengaytirilgan imkoniyatlarni taqdim etadi.

Geteropolikondensatsion polimerlarning konformatsion xarakteri

Geteropolikondensatsion polimerlarda konformatsion xulq-atvor ko‘p jihatdan alohida monomer birliklarining fazoviy joylashuvi bilan bog‘liq bo‘lib, ular o‘ziga xos buralish patternlari va molekulararo o‘zaro ta‘sirlarni hosil qiladi. Sopolimer tizimlarda - ayniqsa monomerlarning navbatma-navbat ketma-ketliklari bilan - monomer birliklarining ketma-

ketligi va yoʻnalishi zanjirning qattiqligi va eruvchanligi kabi xususiyatlarga taʼsir qilib, makromolekulyar tuzilishni sezilarli darajada oʻzgartirishi mumkin. Ushbu polimerlar uchun eng barqaror konformatsiyalarni aniqlashda vodorod bogʻlanishlar, Van-der-Vaals kuchlari va elektrostatik oʻzaro taʼsirlar hal qiluvchi rol oʻynaydi.

A. Patelning tadqiqotida "Monte-Karlo modellashtirish (MK) va oʻz-oʻzidan muvofiqlashgan maydon nazariyasi (SCFT) monomerlar ketma-ketligining sopolimerning egiluvchanligi va zanjirning buralishiga taʼsiri haqida tasavvur beradi. Ushbu usullarning kombinatsiyasi monomerning oriyentatsiyasi va sterik toʻsiqlar eritmadagi va hajmiy fazalardagi makromolekulyar tuzilishga qanday taʼsir qilishini toʻliqroq tushunishga imkon beradi. SCFT, shuningdek, aniq belgilangan mikrostrukturalarga boʻlinishi mumkin boʻlgan turli xil kimyoviy tarkibga ega segmentlardan tashkil topgan blok-sopolimerlarning oʻz-oʻzidan yigʻilishi qonuniyatlarini tushunish uchun qimmatli boʻlib chiqdi (J. Anderson).

AR asosidagi konformatsion tahlilning tatbiqlari va cheklovlari

3D AR modellari polimer fanining turli sohalarida, jumladan materiallarni loyihalash, biotibbiyot ilovalari va taʼlim vositalarida qoʻllanilmoqda. AR modellarining interaktiv tabiati tadqiqotchilarga monomerlarning maʼlum ketma-ketligi va konfiguratsiyasi yuqori egiluvchanlik, mustahkamlik yoki termik barqarorlik kabi kerakli xususiyatlarga qanday olib kelishini aniqlashga yordam beradi. Masalan, biotibbiyot ilovalarida AR modellari biomaslashuvchan polimerlarni loyihalashda yordam beradi, ularning tuzilish xususiyatlari biologik toʻqimalar bilan oʻzaro taʼsiriga qanday taʼsir qilishini vizualizatsiya qiladi.

Biroq, geteropolikondensatsion polimerlar uchun aniq AR modellarini ishlab chiqishda muammolar mavjud. Modellarining aniqligi koʻp jihatdan MD modellashtirish yoki kvant-mexanik (QM) hisoblashlar kabi asosiy matematik va hisoblash usullariga bogʻliq. Hisoblash quvvati yana bir cheklovdir, chunki koʻp sonli monomer birliklarga va murakkab tarmoqlanish sxemalariga ega murakkab polimerlar AR muhitlarida real vaqt rejimida oʻzaro taʼsir qilish uchun sezilarli hisoblash quvvatini talab qiladi. Bundan tashqari, AR modellari real fizik oʻzaro taʼsirlarni aks ettirishi va molekulyar xatti-harakatlarni soddalashtirmasligini taʼminlash AR asosidagi konformatsion tahlilda muhim muammo boʻlib qolmoqda.

AR ga asoslangan konformatsion tahlil muammolari va istiqboldagi yoʻnalishlari

Konformatsion tahlilda 3D AR modellarining sezilarli afzalliklariga qaramay, ushbu modellarining aniqligini taʼminlash bilan bogʻliq muammolar saqlanib qolmoqda. Real vaqt rejimida AR modellashtirish katta hisoblash quvvatlarini talab qiladi, ayniqsa murakkab tuzilishli katta makromolekulalar uchun, molekulyar oʻzaro taʼsirlarni aniq aks



ettirish uchun ilg'or hisoblash quvvatlarini talab qiladi. Bundan tashqari, MD modellashtirish va kvant-mexanik (QM) hisoblashlar kabi AR vizualizatsiyasiga asos bo'lgan matematik modellar fizik xatti-harakatlarni buzishi mumkin bo'lgan haddan tashqari soddalashtirishning oldini olish uchun puxta kalibrlanishi kerak.

Kelajakka nazar tashlasak, sun'iy intellekt (AI) va mashinaviy o'rganish (ML) sohasidagi yutuqlar polimer fanlari uchun DR modellarining bashorat qilish kuchini oshirishi mumkin. SI algoritmlari avvalroq modellashtirilgan tuzilmalar asosida polimerlarning barqaror konformatsiyalarini tanib olish va bashorat qilishni o'rgatishi mumkin, ML usullari esa energetik hisob-kitoblarni tezlashtirish orqali hisoblash samaradorligini optimallashtirishi mumkin. Bundan tashqari, DR bulutli platformalari tadqiqotchilarga yuqori aniqlikdagi modellarga masofadan kirish imkonini berib, hisoblash cheklovlarini yumshatishi kutilmoqda.

Texnologiyalarning rivojlanishi bilan AI va kengaytirilgan reallikdagi bulutli hisoblashlarning integratsiyasi, ehtimol, geteropolikondensatsion polimerlarning konformatsion tahlilini ilgari surishda muhim rol o'ynaydi. Polimer tuzilmalarni real vaqt rejimida intuitiv ravishda o'rganish va boshqarish imkoniyati polimer fanida innovatsiyalarni rag'batlantirishda davom etadi va ko'plab ilg'or ilovalar uchun individual xususiyatlarga ega yangi materiallarni ishlab chiqishga imkon beradi.

Mobil va planshet qurilmalarining o'quv jarayoniga AR texnologiyalarini joriy etishning nisbatan arzonligi tez virtual mavjud bo'lish imkonini beradi, bu esa 2010 yildan beri ta'limga oid AR ilovalarining jadal o'sishiga olib keldi (O'zdemir, Sahin, Arcagok va Demir, 2018). Biroq, o'zining dastlabki davridagi texnologiya sifatida AR keng qabul qilinishi va qabul qilinishidan oldin bir nechta to'siqlarni yengib o'tishi kerak. Bularga dasturiy ta'minotdan foydalanish mumkinligi (Akçayir, Akçayir, Pektaş va Ocak, 2016), o'qituvchining qarshiligi (Li, 2012), kognitiv resurslarning haddan tashqari yuklanishi (Akçayir va Akçayir 2017; Turan, Meral va Sahin, 2018) va texnologik cheklovlar (Fraga- Lamas, Fernandes-Karames, Blanco-Novoa va Vilar-Montesinos, 2018; Palmarini, Erkoyuncu, Roy va Torabmostaedi, 2018). AR tizimlari odatda quyidagi yondashuvlardan biri yoki kombinatsiyasidan foydalangan holda kengaytirilgan tajribalarni yaratadi va qo'llab-quvvatlaydi:

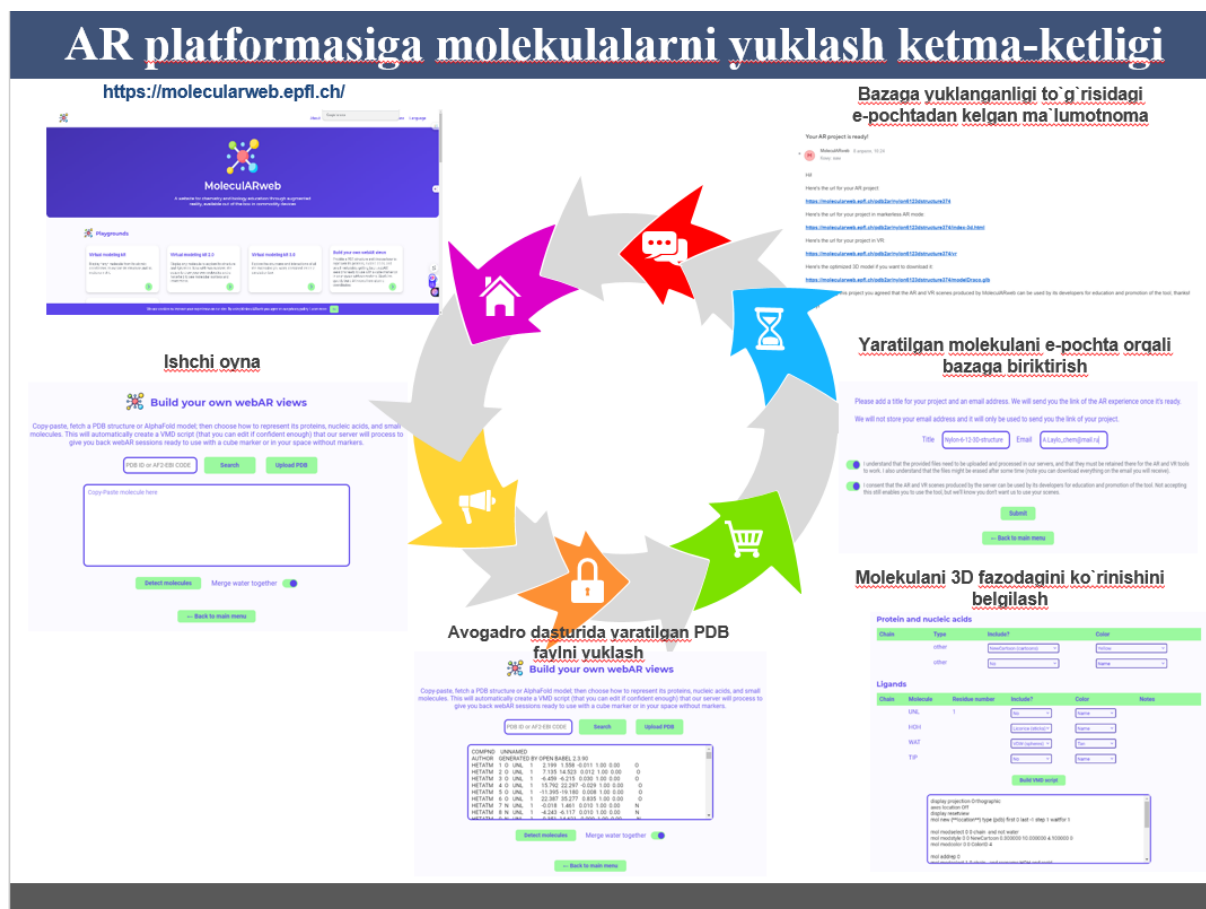
1. markerga asoslangan
2. belgilar yo'q
3. joylashuvga asoslangan

Markerga asoslangan yondashuv qurilma kamerasi tomonidan aniqlangan tasvirdan tabiiy xususiyatlarni ajratib oladi va ularni maqsadli resurslarning ma'lum ma'lumotlar bazasi bilan taqqoslaydi (Image Targets | VuforiaLibrary, 2022). Ushbu maqsadli resurslar maqsadli tasvirlar deb ataladi va AR tizimi tomonidan aniqlanishi uchun



yetarli tafsilotlarni ta'minlaydigan har qanday planar tasvirlar bo'lishi mumkin. Maqsadli tasvir aniqlangandan so'ng, AR tizimi uning joylashuvi, yo'nalishi va harakatini kuzatish orqali ushbu tasvir bilan bog'liq tarkibni kengaytiradi.

CSBEIAR-portal <https://molecularweb.epfl.ch/> butun dunyo bo'yicha yagona ochiq, portal bo'lib undan foydalanish ancha qulay hamda bepul. **Molecularweb** - bu web-kamera bilan jihozlangan kompyuter, smartfon yoki planshetda faqat web-brauzeringizda foydalanishingiz mumkin bo'lgan portal. Bu portal Shvetsariyadagi École Polytechnique Fédérale de Lozanna (EPFL) institute tomonidan joylashtirilgan CSBEIAR (Computational and Structural Biology Enhanced by Immersive Augmented Reality) biomolekulyar modellashtirish laboratoriyasidan Fabio Kortes Rodrigues va Lusiano A. Abriata tomonidan guruhning bir qancha hamkorlari, shuningdek, boshqa institutlar tadqiqotchilari va o'qituvchilari yordamida ishlab chiqilgan va dasturlashtirilgan. Portal foydalanuvchilarga murakkab molekulyar tuzilmalar, shu jumladan geteropolikondensatsiya polimerlarining fragmentlarini vizualizatsiya qilish va o'zaro ta'sir qilish imkonini beradigan augmental reallik(AR) vositalarini taqdim etadi (Rasm-2).



Rasm-2. Geteropolikondensatsion polimer fragmentlarini PDB formatga o'zkazgan holda Molecularweb saytida polimer modellarining 3D Augmental realliklarini yaratish ketma-ketligi

Kondensatsiya reaksiyalari orqali bog'langan turli xil monomer birliklaridan tashkil topgan ushbu polimerlar strukturaviy va konformatsion jihatdan murakkab bo'lib, ularni AR-kuchaytirilgan tadqiqotlar uchun ideal nomzodga aylantiradi. CSBEIARning AR imkoniyatlari orqali tadqiqotchilar, o'qituvchilar va talabalar ushbu polimerlarning murakkab strukturaviy tafsilotlari va konformatsion xatti-harakatlarini tahlil qilish uchun intuitiv, real vaqt rejimida usulga ega bo'ladilar.

Markersiz tizim AR tajribasini qo'llab-quvvatlash uchun geografik joylashuv yoki qurilma yo'nalishi kabi omillarni aniqlash uchun xususiyatlar kombinatsiyasidan foydalanadi va virtual shovqinlarni boshlash uchun jismoniy nishonlarni qo'lga kiritish zaruratini yo'q qiladi. Shunday qilib, tajribani boshqalar bilan osongina baham ko'rish mumkin, shu bilan birga AR dan foydalanganda o'rtacha harakat oralig'i sezilarli darajada oshadi. Biroq, virtual ob'ektlarni muvaffaqiyatli ko'rsatish uchun markersiz yondashuvlar birinchi navbatda tekis, teksturali sirlarga tayanadi (Schechter, 2022). Va nihoyat, joylashuvga asoslangan AR tizimlari maqsadli tasvir o'rniga raqamli kontentni ishga tushirish uchun global joylashishni aniqlash tizimi (GPS) va xaritalash texnologiyalaridan foydalanadi. Qurilma ma'lum geografik joylashuvga yaqinlashganda, kengaytirilgan tajriba faollashadi. Moslashuvchanlikni ta'minlash uchun MoleculAR web ham markerga asoslangan, ham markersiz yondashuvlarga moslash uchun ishlab chiqilgan. Talabalar ma'lum virtual ob'ektning yaratish uchun o'quv resursiga kiritilgan maqsadli tasvirni skanerlashi mumkin. Shu bilan bir qatorda, virtual ob'ektlar MoleculAR web ning o'rnatilgan inventarizatsiyasi yordamida yaratilishi mumkin, bu maqsadli tasvirga ehtiyojni yo'q qiladi.

Polikondensatsion polimerlar makromolekulalari uchun matematik modellar

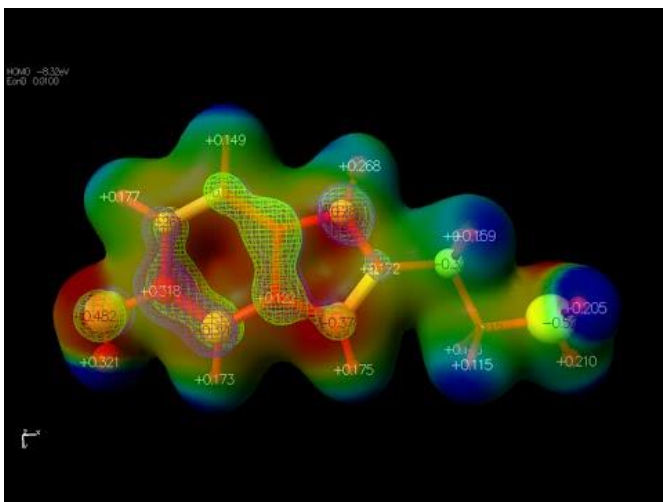
Matematik modellashtirish polikondensatsiya polimerlaridagi makromolekulalar tuzilishi va harakatini tushunish uchun muhim yondashuvdir. Monomerlarning bosqichma-bosqich polimerizatsiyasi natijasida hosil bo'lgan polikondensatsiya polimerlari ko'pincha murakkab molekulyar arxitekturani, jumladan, chiziqli zanjirlar, tarmoqlangan tuzilmalar va o'zaro bog'langan tarmoqlarni namoyish etadi. Muammo eng barqaror konformatsiyalarni bashorat qilish va bu yirik makromolekulalarning mexanik, termal va kimyoviy xususiyatlarini tushunishda, ayniqsa zanjir uzunligi oshgani va strukturaning murakkablashishi bilan bog'liq.

1. Molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyalari

Polikondensatsiya polimerlarida makromolekulalar harakatini modellashtirishning eng keng tarqalgan usullaridan biri molekulyar dinamikani (MD) simulyatsiya qilishdir. Ushbu usulda atomlar va molekulalarning vaqt o'tishi bilan harakatini modellashtirish uchun Nyuton mexanikasi qo'llaniladi. MD simulyatsiyalari polikondensatsiya



polimerlari uchun ayniqsa qimmatlidir, chunki ular harorat, bosim va erituvchining o'zaro ta'siri kabi turli sharoitlarda makromolekulalar qanday harakat qilishini o'rganishga imkon beradi.



MD simulyatsiyalari vaqt o'tishi bilan ularning traektoriyalarini bashorat qilish uchun o'zaro ta'sir qiluvchi zarralar (atomlar yoki molekular) tizimi uchun harakat tenglamalarini echish orqali ishlaydi. Polikondensatsiya polimerlari holatida asosiy e'tibor termodinamik jihatdan eng barqaror tuzilmalarga mos keladigan energiya minimallashtirilgan konformatsiyalarni hisoblashga

qaratilgan. Ushbu simulyatsiyalar turli xil kuchlarni, jumladan, van der Waals o'zaro ta'sirini, elektrostatik kuchlarni va vodorod bog'larini ko'rib chiqadi, bularning barchasi polimer makromolekularining konformatsiyasiga sezilarli ta'sir qiladi. Misol uchun, poliamidlarda amid guruhlari orasidagi vodorod aloqalari qisqaroq uzunlikdagi kengaytirilgan zanjir konformatsiyasiga olib keladi, ammo zanjir uzunligi oshgani sayin, sterik ta'sir zanjirlarning spiral yoki zigzag tuzilmalariga burmalanishiga olib kelishi mumkin. MD simulyatsiyalari polimerdagi atomlarning eng barqaror joylashuvini hisoblash orqali ushbu konformatsion o'zgarishlarni tasavvur qilishda yordam beradi.

2. Monte-Karlo simulyatsiyalari

MD simulyatsiyalaridan tashqari, Monte-Karlo (MC) simulyatsiyalari ko'pincha polikondensatsiya polimerlarining konformatsion harakatlarini modellashtirish uchun ishlatiladi. MC simulyatsiyalarida polimer zanjirlarining mumkin bo'lgan konformatsiyasini o'rganish va statistik termodinamikaga asoslangan har bir konformatsiyaning ehtimolini aniqlash uchun tasodifiy namuna olish usullari qo'llaniladi.

Monte-Karlo usullari, ayniqsa, polidispers tizimlar (polimerlar bir qator molekulyar og'irliklarga ega bo'lgan tizimlar) va tarmoqlangan yoki o'zaro bog'langan polimerlar kabi murakkab topologiyaga ega tizimlarni modellashtirishda foydalidir. Bunday hollarda zanjir uzunligi va dallanma nuqtalari polimerning fizik xususiyatlariga, jumladan uning moslashuvchanligi, mustahkamligi va termal degradatsiyaga chidamliligiga keskin ta'sir qilishi mumkin.

MC simulyatsiyalarining asosiy afzalligi shundaki, ular tadqiqotchilarga ko'p sonli tasodifiy konfiguratsiyalarni yaratish

orqali polikondensatsiya polimerlari uchun mumkin bo'lgan konformatsiyalarning keng doirasini o'rganishga imkon beradi. Statistik tortishni qo'llash orqali simulyatsiya tizim energiyasini minimallashtiradigan eng mumkin bo'lgan konformatsiyalarni tanlaydi.

3. Kvant mexanik hisoblashlar

Atom darajasida batafsilroq modellashtirish uchun kvant mexanik (QM) usullari MD va MC kabi klassik simulyatsiyalarni to'ldirish uchun ishlatilishi mumkin. Ushbu usullar, ayniqsa, polikondensatsiya polimerlarining elektron tuzilishini tushunish uchun muhimdir, bu ularning kimyoviy reaktivligini, bog'lanish hosil bo'lishini va umumiy barqarorligini aniqlash uchun juda muhimdir.

Zichlik funktsional nazariyasi (Density functional theory-DFT) kabi QM hisob-kitoblari tadqiqotchilarga polikondensatsiya polimerlarida energiya darajasini, molekulyar orbitallarni va zaryad taqsimotini hisoblash imkonini beradi. Bu, ayniqsa, kuchli o'zaro bog'lanish va yuqori kimyoviy qarshilik bilan ajralib turadigan fenol-formaldegid qatronlari yoki amino-formaldegid qatronlari kabi heteroatomlarni o'z ichiga olgan yoki murakkab elektron shovqinlarni o'z ichiga olgan polimerlar uchun foydalidir.

KM hisoblarini MD yoki MC simulyatsiyalari bilan birlashtirib, tadqiqotchilar polikondensatsiya polimerlarining ham makroskopik, ham atom darajasida qanday harakat qilishini to'liqroq tushunishlari mumkin.

4. Coarse-Grained modellari

Juda uzun polimer zanjirlari yoki murakkab tarmoqlarni o'z ichiga olgan keng ko'lamlı simulyatsiyalar uchun hisoblash talablarini soddalashtirish uchun ko'pincha qo'pol taneli modellar qo'llaniladi. Qo'pol taneli modellarda atomlar guruhları bitta "zarracha" yoki birlik sifatida ifodalanadi, bu hisoblash kerak bo'lgan o'zaro ta'sirlarning umumiy sonini kamaytiradi. Bu simulyatsiyalarga alohida atom o'zaro ta'sirlariga emas, balki polimerning kattaroq strukturaviy xususiyatlariga, masalan, zanjirning chigallashishi yoki fazalarni ajratishga e'tibor qaratish imkonini beradi.

Coarse-Grained modellashtirish, ayniqsa, poliuretan yoki polikarbonatlar kabi polikondensatsiya polimerlarining massaviy xususiyatlarini o'rganish uchun foydalidir, bu erda polimer harorat yoki kimyoviy muhitga qarab turli xil fazalar yoki domen tuzilmalarini namoyish qilishi mumkin. Ushbu modellar materialshunoslikda qo'llanilishi uchun juda muhim bo'lgan elastiklik, valentlik va qattqlik kabi mexanik xususiyatlar haqida tushuncha beradi.

5. O'z-o'zidan izchil maydon nazariyasi (Self-consistent field-SCFT)

Polikondensatsiya polimerlarini modellashtirishning yana bir ilg'or usuli - o'z-o'zidan izchil maydon nazariyasi (SCFT). Ushbu usul polimer zanjirlarining ma'lum hajmdagi



taqsimlanishini tavsiflovchi maydon tenglamalarini echish orqali polimerlarning muvozanat tuzilishini taxmin qilish uchun ishlatiladi. SCFT, ayniqsa, turli monomer birliklari alohida mikrofazalarga (masalan, lamellar, silindrlar yoki sharlar) ajraladigan murakkab arxitekturaga ega bo'lgan blok-sopolimerlarni va boshqa polimerlarni o'rganish uchun foydalidir.

SCFT tadqiqotchilarga polimerning kimyoviy tarkibi va zanjir uzunligiga qarab ushbu mikrofazalar qanday shakllanishi va rivojlanishini bashorat qilish imkonini beradi. Masalan, poliesterlar va polikarbonatlarda SCFT polimerning turli segmentlari ularning optik va mexanik xususiyatlarini aniqlash uchun zarur bo'lgan tartibli tuzilmalarni hosil qilish uchun qanday ajratilishini modellashtirishi mumkin.

6. Augmental reallik (AR) bilan integratsiya

Polikondensatsiya polimerlarini modellashtirishdagi eng hayajonli ishlanmalardan biri bu matematik modellarning 3D augmental reallik(AR) muhitiga integratsiyalashuvidir. AR tadqiqotchilarga real vaqt rejimida murakkab makromolekulyar tuzilmalarni vizualizatsiya qilish va ular bilan o'zaro ta'sir qilish imkonini beradi, bu zanjir uzunligi, shoxlanishi va boshqa strukturaviy xususiyatlar polimer xususiyatlariga qanday ta'sir qilishini yanada intuitiv tushunish imkonini beradi.

AR dan foydalangan holda, olimlar polimer zvenolarini manipulyatsiya qilishlari, zanjir uzunligi oshgani sayin konformatsion o'zgarishlarni kuzatishlari va turli strukturaviy elementlar polimerning umumiy barqarorligi va xatti-harakatlariga qanday hissa qo'shishini o'rganishlari mumkin. Ushbu texnologiya, ayniqsa, ta'lim maqsadlarida va hamkorlikdagi tadqiqotlar uchun foydali bo'lib, jamoalarga umumiy virtual makonda molekulyar modellarni o'rganish uchun birgalikda ishlash imkonini beradi.

Polimer tizimlarini tanlash 3D kengaytirilgan haqiqat (AR) modellari yordamida geteropolikondensatsiya polimerlarini o'rganishda muhim qadamdir. Tanlov kimyoviy xilma-xillik, tuzilmaviy murakkablik va ularning materialshunoslik, biomeditsina va atrof-muhit texnologiyalarida qo'llanilishiga aloqadorligi kabi omillarga asoslanadi. Ushbu tadqiqot uchun tadqiqot o'zining noyob xususiyatlari va xilma-xil monomerik kompozitsiyalari bilan mashhur bo'lgan geteropolikondensatsiya polimerlariga qaratilgan bo'lib, ularni AR-ga asoslangan vizualizatsiya va tahlil qilish uchun ideal nomzod qiladi.

3D molekulyar modellashtirish sohasidagi yutuqlar molekulyar tuzilmalarni o'rganish, o'rgatish va tushunish usullarini inqilob qildi. Ushbu ishlanmalar orasida kengaytirilgan haqiqat (AR) raqamli molekulyar modellarni jismoniy muhit bilan uyg'unlashtirish qobiliyati tufayli ajralib turadigan usul sifatida paydo bo'ldi va foydalanuvchilarga

immersiv va interaktiv tajriba taqdim etadi. Ushbu innovatsion yondashuv virtual haqiqatga (VR) nisbatan ko'plab afzalliklarni beradi, ayniqsa uni ta'lim va hamkorlikdagi tadqiqotlarda qo'llashda.

AR ning eng muhim afzalliklaridan biri uning tabiiy aloqa va o'zaro bog'lanishni saqlab qolish qobiliyatidir. Eshitish vositalarini talab qilish orqali foydalanuvchilarni atrof-muhitdan ajratib turadigan VRdan farqli o'laroq, AR talabalar va o'qituvchilarga umumiy jismoniy makonda molekulyar modellar bilan o'zaro ta'sir o'tkazish imkonini beradi. Bu hamkorlikda o'rganish tajribasini osonlashtiradi, darslarni yanada qiziqarli va intuitiv qiladi. Bundan tashqari, AR vositalari foydalanuvchilarga modellarni xuddi jismoniy ob'ektlar kabi boshqarishga imkon beradi, bu esa fazoviy tushunish va tanqidiy fikrlashni kuchaytiradigan interaktiv tajribani rivojlantiradi. Bu fazilatlar AR ni ta'limning barcha darajalarida oqsil qatlamlari, molekulyar o'zaro ta'sirlar yoki polimer zanjiri konformatsiyasi kabi murakkab tushunchalarni tushuntirish uchun ayniqsa samarali qiladi.

3D molekulyar modellashtirish sohasida vizualizatsiya va molekulyar tuzilmalar bilan o'zaro aloqani yaxshilash uchun bir nechta platformalar ishlab chiqilgan. Ular orasida kengaytirilgan haqiqat (AR) platformalari murakkab molekulyar modellarni intuitiv manipulyatsiya qilish imkonini beruvchi raqamli va jismoniy bo'shliqlarni bartaraf etish qobiliyati tufayli tobora ommalashib bormoqda. **CSBEIAR AR** bilan takomillashtirilgan molekulyar vizualizatsiya uchun yetakchi portal sifatida ajralib tursa-da, uni **Mol (MolStar)**, **Nanome** va **UnityMol** kabi boshqa mashhur platformalar bilan qanday solishtirishini tushunish kerak.

Xususiyat	CSBEIAR	Mol (MolStar)	Nanome	UnityMol
Asosiy yo'nalish	AR asosidagi molekulyar modellashtirish va manipulyatsiya	Web-dastur asosida molekulyar vizualizatsiya	VR/AR uchun molekulyar hamkorlik	3D molekulyar vizualizatsiya va skriptlash
Mos keluvchi qurilmalar	Smartfonlar, planshetlar, noutbuklar, AR qurilmalar	Brauzerlar orqali ishlaydi	VR/AR quloqchinlari, kompyuter	kompyuter
Foydalanish qulayligi	Intuitiv interfeys; minimal qurilma talab qilinadi	Juda oson; hech qanday qo'shimcha o'rnatish shart emas	O'rtacha; VR qurilmasi talab qilinadi	O'rtacha; tizim sozlamalari talab qilinadi

Hamkorlik xususiyatlari	Ko'p foydalanuvchi uchun real vaqt AR manipulyatsiyasi	Cheklangan	Real vaqtli VR/AR hamkorlik	Cheklangan
Integratsiya	ChimeraX, PyMOL, molekulyar dinamik vositalar	PDB va veb-struktura bazalari	VR-ga mos, PDB va SDF fayllar bilan ishlaydi	PDB mosligi va Python skripti qo'llab-quvvatlaydi
Maqsadli auditoriya	O'qituvchilar, talabalar, tadqiqotchilar	Tadqiqotchilar, o'qituvchilar	Tadqiqot guruhi va farmatsevtika mutaxassislari	Tadqiqotchilar va o'qituvchilar

Ushbu sharhda geteropolikondensatsiya polimerlarining makromolekulalari uchun modellashtirish va tahlil qilishning hozirgi holati ko'rib chiqildi, bunda kengaytirilgan haqiqat (AR) va konformatsion tahlilda ilg'or hisoblash vositalarining roliga e'tibor qaratildi. Murakkab arxitekturasi va xilma-xil monomerik kompozitsiyalari bilan mashhur bo'lgan geteropolikondensatsiya polimerlari o'ziga xos strukturaviy va funktsional xususiyatlarni namoyish etadi, ular chuqur tahlil qilish uchun murakkab modellashtirish usullarini talab qiladi.

Rentgen nurli kristallografiya, YaMR spektroskopiyasi va molekulyar dinamika (MD) simulyatsiyasi kabi an'anaviy usullar uzoq vaqt davomida polimer konformatsiyasi haqida asosiy tushunchalarni taqdim etgan. Biroq, bu yondashuvlar, ayniqsa, katta yoki murakkab polimerlar uchun interaktiv, real vaqtda vizualizatsiyani ta'minlashda ko'pincha etishmaydi. Ushbu cheklov molekulyar tuzilmalarni chuqur o'rganish imkonini beruvchi yangi 3D modellashtirish vositalarini, jumladan ARni ishlab chiqishga turtki bo'ldi.

CSBEIAR kabi platformalarda ko'rinib turganidek, ARning geteropolikondensatsiya polimerlarini o'rganishga integratsiyalashuvi polimer parchalarini real vaqtda interaktiv manipulyatsiya qilish va tahlil qilish qobiliyatini oshiradi. AR-ni qo'llab-quvvatlaydigan polimer zanjirlarini manipulyatsiya qilish orqali foydalanuvchilar turli sharoitlarda fazoviy konfiguratsiyalar, molekulalararo o'zaro ta'sirlar va konformatsion o'zgarishlar haqida ko'proq intuitiv tushunchaga ega bo'ladilar. Bu qobiliyat nafaqat moddiy dizayn va tadqiqotlarni rivojlantirish uchun, balki AR talabalarga mavhum molekulyar tuzilmalarni o'rganish uchun aniq vositalarni taqdim etadigan ta'lim uchun ham bebahodir.

XULOSA

Xulosa qilib aytganda, AR va 3D modellashtirish molekulyar modellashtirishda mavjudlik va interaktivlikning yangi o'lchamini taklif qiluvchi geteropolikondensatsiya polimerlarini o'rganishda muhim yutuqlarni aks ettiradi. Kelajakdagi tadqiqotlar polimer fanida AR va hisoblash texnikasini qo'llashni kengaytirishni davom ettiradi, materialshunoslik, biomeditsina va atrof-muhitni muhofaza qilish sohasidagi innovatsiyalarni qo'llab-quvvatlaydi.

REFERENCES:

1. Akçayır, M., & Akçayır, G. (2017). Advantages and challenges associated with augmented reality for education: A systematic review of the literature. *Educational Research Review*, 20, 1–11.
2. Azuma, R. (1997). A survey of augmented reality. *Presence: Teleoperators and Virtual Environments*, 6(4), 355–385.
3. Azuma, R., Baillot, Y., Behringer, R., Feiner, S., Julier, S., & MacIntyre, B. (2001). Recent advances in augmented reality. *IEEE Computer Graphics and Applications*, 21(6), 34–47.
4. Azuma, R., Billingham, M., & Klinker, G. (2011). Special section on mobile augmented reality. *Computers & Graphics*, 35(4), vii–viii.
5. Bacca, J., Baldiris, S., Fabregat, R., Graf, S., & Kinshuk. (2014). Augmented reality trends in education: A systematic review of research and applications. *Journal of Educational Technology & Society*, 17(4), 133.
6. Billingham, M., Belcher, D., Gupta, A., & Kiyokawa, K. (2003). Communication behaviors in colocated collaborative AR interfaces. *International Journal of Human-Computer Interaction*, 16(3), 395–423.
7. Bond, M., & Buntins, K. (2018). An analysis of the Australasian journal of educational technology 2013–2017. *Australasian Journal of Educational Technology*, 34(4), 168–183.
8. Bressler, D. M., & Bodzin, A. M. (2013). A mixed methods assessment of students' flow experiences during a mobile augmented reality science game. *Journal of Computer Assisted Learning*, 29(6), 505–517.
9. Bujak, K. R., Radu, I., Catrambone, R., MacIntyre, B., Zheng, R., & Golubski, G. (2013). A psychological perspective on augmented reality in the mathematics classroom. *Computers & Education*, 68, 536–544.
10. Bursali, H., & Yilmaz, R. M. (2019). Effect of augmented reality applications on secondary school students' reading comprehension and learning permanency. *Computers in Human Behavior*, 95, 126–135.



11. Cai, S., Chiang, F.-K., Sun, Y., Lin, C., & Lee, J. J. (2017). Applications of augmented reality-based natural interactive learning in magnetic field instruction. *Interactive Learning Environments*, 25(6), 778–791.
12. Ceylan, S., & Ozdilek, Z. (2015). Improving a sample lesson plan for secondary science courses within the STEM education. *Procedia – Social and Behavioral Sciences*, 177, 223–228.
13. Chang, R.-C., Chung, L.-Y., & Huang, Y.-M. (2016). Developing an interactive augmented reality system as a complement to plant education and comparing its effectiveness with video learning. *Interactive Learning Environments*, 24(6), 1245–1264.
14. Chang, H. Y., Hsu, Y. S., Wu, H. K., & Tsai, C. C. (2018). Students' development of socio-scientific reasoning in a mobile augmented reality learning environment. *International Journal of Science Education*, 40(12), 1410–1431.
15. Chang, S., & Hwang, G. (2018). Impacts of an augmented reality-based flipped learning guiding approach on students' scientific project performance and perceptions. *Computers & Education*, 125, 226–239.
16. Chao, J., Chiu, J. L., DeJaegher, C. J., & Pan, E. A. (2016). Sensor-augmented virtual labs: Using physical interactions with science simulations to promote understanding of gas behavior. *Journal of Science Education and Technology*, 25(1), 16–33.
17. Chen, C.-H., Chou, Y.-Y., & Huang, C.-Y. (2016). An augmented-reality-based concept map to support mobile learning for science. *The Asia-Pacific Education Researcher*, 25(4), 567–578.
18. Chen, C., & Wang, C.-H. (2015). Employing augmented-reality-embedded instruction to disperse the imparities of individual differences in earth science learning. *Journal of Science Education and Technology*, 24(6), 835–847.
19. Chen, Y.-H., & Wang, C.-H. (2018). Learner presence, perception, and learning achievements in augmented–reality–mediated learning environments. *Interactive Learning Environments*, 26(5), 695–708.
20. Cheng, K.-H. (2018). Surveying students' conceptions of learning science by augmented reality and their scientific epistemic beliefs. *Journal of Mathematics, Science and Technology Education*, 14(4), 1147–1159.
21. Cheng, K.-H., & Tsai, C.-C. (2013). Affordances of augmented reality in science learning: Suggestions for future research. *Journal of Science Education and Technology*, 22(4), 449–462.
22. Chiang, T. H. C., Yang, S. J. H., & Hwang, G.-J. (2014). Students' online interactive patterns in augmented reality-based inquiry activities. *Computers & Education*, 78, 97–108.

