

XOLESTERILFORMIATDAGI MOLEKULYAR ASSOSIATLARNI KVANTOXIMIYAVIY HISOBLASHLAR USULI BILAN O'RGANISH

Mamatqulov Bahodir, Xayrullayev Asliddin

Mutaxassislik: 5A140202-Fizika (yo'nalishlar bo'yicha)

1-2 bosqich

Ishda kvantoximiyaviy hisoblashlar usuli bilan xolesterilformiatning molekulyar strukturasi va molekulalararo o'zaro ta'sirlari o'rganilgan. Hisoblashlar xolesterilformiat molekulalari vodorod bog'lanishlar orqali dimerlarga birlashishini ko'rsatadi.

Xolesterin alkanoatlari (XA) xolesterik suyuq kristallarning eng muhim vakillaridan biri bo'lib, ular amalda keng qo'llaniladi va muhim biologik ob'yektlardan biri sanaladi. Lekin hozirgacha ularning molekulalararo o'zaro ta'sirlari va bu ta'sirlarning mezofaza hosil bo'lishdagi roli to'liq ochilmagan. Shuning uchun XA dagi molekulalararo o'zaro ta'sirlarni sistemali ravishda o'rganish dolzarb masaladir.

Xolesterilformiat (XF) XA gomologik qatorining birinchi a'zosidir. [1] ishda XF infraqizil (IQ) spektroskopiya usuli bilan o'rganilib, unda buralma izomerlar va vodorod bog'lanish orqali hosil bo'lgan assosiatlar mavjudligi haqida xulosalar chiqarilgan edi.

Ushbu ishda XF ning vodorod bog'lanish orqali hosil bo'lgan assosiatlari (dimerlari) va XF ning buralma izomerlari tuzilishiga, hamda ularning infraqizil spektrlariga aniqlik kiritish uchun XF energiyasi, dipol momenti va normal tebranishlari kvantokimyoviy usul bilan hisoblandi. XF molekulasida juda ko'p (76 ta) atomlardan tuzilgan murakkab molekula bo'lgani uchun kvantoximiyaviy hisoblashlarning yarimempirik usuli tanlandi. Hisoblashlar MOPAC dasturida AM1 usul yordamida o'tkazildi. AM1-bu Dyuar xodimlari bilan ishlab chiqqan yarimempirik usul bo'lib [2], unda ikki atomli differensial qoplanish hisobga olinmaydi (NDDO yaqinlashish).

Avvalo XF molekulasining trans- va sis-izomerlari, hamda dimeri modellari tuzildi. Molekula xossalari hisoblashlarga o'tishdan oldin shu model energiyasining minimumi izlandi, boshqacha aytganda, energiya minimizatsiya qilindi. XF molekulasining trans- va sis-izomerlari va dimeri strukturalari hisoblandi. Keyin esa spektral tahlil o'tkazildi, ya'ni XF molekulasida atomlarining normal tebranishlari chastotalari hisoblandi. Hisoblash natijalarining ba'zilar 1-jadvalda keltirilgan. Taqqoslash uchun shu jadvalda tajribada [1] olingan C=O

valent tebranish chastotasi ham keltirilgan. 1-jadvaldagi natijalarni muhokama qilamiz.

XF dagi vodorod bog'lanish. Hisoblashlar avvalo dimer hosil bo'lishi energiyada 6 kkal/mol miqdorda yutuq berishini ko'rsatadi (bu energiya ikkita monomerning hosil bo'lish energiyasidan dimer hosil bo'lish energiyasini ayirib topildi: $\Delta E = 2(-157,8) - (-321,6) = 6$). Bu energiya dimyerdagi ikkita vodorod bog'lanishga to'g'ri keladi, shuning uchun bitta vodorod bog'lanish energiyasi 3 kkal/mol ga teng ekanligini topish mumkin. Bu tajribada [1] topilgan 2,9 kkal/mol ga mos tushadi. Dimer hosil bo'lganda C=O bog' uzunligi bir oz oshadi (1-jadval). Bu esa bog'lanish kuch doimiysining kamayishiga olib keladi. Shuning uchun C=O valent tebranish chastotasi monomernikiga qaraganda past chastotalar tomonga siljishi kerak. Hisoblash ham, tajriba ham shu natijani beradi (1-jadval).

XF monomerlari va dimerining ba'zi parametrlari. 1-jadval.

	Hosil bo'lish energiyasi, kkal/mol	Dipol momenti, D	C=O bog' uzunligi, Å	C=O valent tebranish chastotasi, sm^{-1}	
				Hisoblash	Tajriba
Monomer, trans-izomer	-157,850643	1,3	1,227079	2053,78	1725
Monomer, sis-izomer	-155,245836	5,0	1,228882	2039,26	1740
Dimer	-321,584074	3,4	1,227536	2042,24	1705
			1,228900	2034,97	

Hisoblash natijalariga ko'ra, dimerning C=O valent tebranishi ikkiga ajraladi, ulardan birining dipol momenti o'zgarishi nolga teng va shuning uchun IQ spektrda aktiv emas. Tajribada [1] bitta polosa kuzatilishi buni tasdiqlaydi.

XF ning buralma izomerlari. Hisoblashlar XF ning trans- va sis-izomerlari uchun C=O valent tebranish chastotasi $14,52 \text{ sm}^{-1}$ ga farq qilishini ko'rsatadi (1-jadval). Tajribada esa bu farq 15 sm^{-1} ga teng, ya'ni hisoblash natijasi tajribaga mos tushadi.

Shunday qilib, hisoblashlar XF molekulalari vodorod bog'lanishlar orqali dimerlarga birlashishini hamda XF molekulasining ikkita buralma izomeri borligini

va ularning C=O valent tebranishlari chastotalari 15 sm^{-1} ga farq qilishini ko'rsatadi va tajriba [1] xulosalarini tasdiqlaydi.

Adabiyotlar

1. Yakubov A., Majidov X., Kudratova B. Xolesterilformiatdagi molekulalararo o'zaro ta'sirlarni infraqizil spektroskopiya usuli bilan o'rganish // Замонавий физиканинг долзарб муаммолари: Республика илмий-амалий конференция материаллари тўплами. Бухоро, 2012. 44-46 б.

2. Dewar M.J.S., Zebisch E.G., Helay E.F., Stewart J.P AM1: A new general-purpose quantum mechanical molecular model // J. Am. Chem. Soc. 1985. V.107. P.3902-3909.

Ilmy rahbar: dots. A.A.Yakubov

Magistrantlarning XIV ilmiy konferensiyasi materiallari-2014