

β -PIKOLIN MOLEKULASI AGREGATSIYALARINI KVANTO-KIMYOVIY HISOBLASHLAR YORDAMIDA O'RGANISH

**A.Jumabayev, U.N.Tashkenbayev, X.A.Xushvaqto'v, Z.U.Mamatov,
B.G'.Xudoyberdiyev, Q.Toshpo'latov, V.Ubaydullayeva**

Samarqand davlat universiteti, Samarqand, 140104,
Universitet xiyoboni,15, e-mail: bekozod@samdu.uz

Ushbu maqolada Gaussian-98W dasturida β -pikolin molekulasini agregatsiyalarini kvanto-kimyoviy hisoblashlar yordamida o'rganish haqida ma'lumotlar yoritilgan.

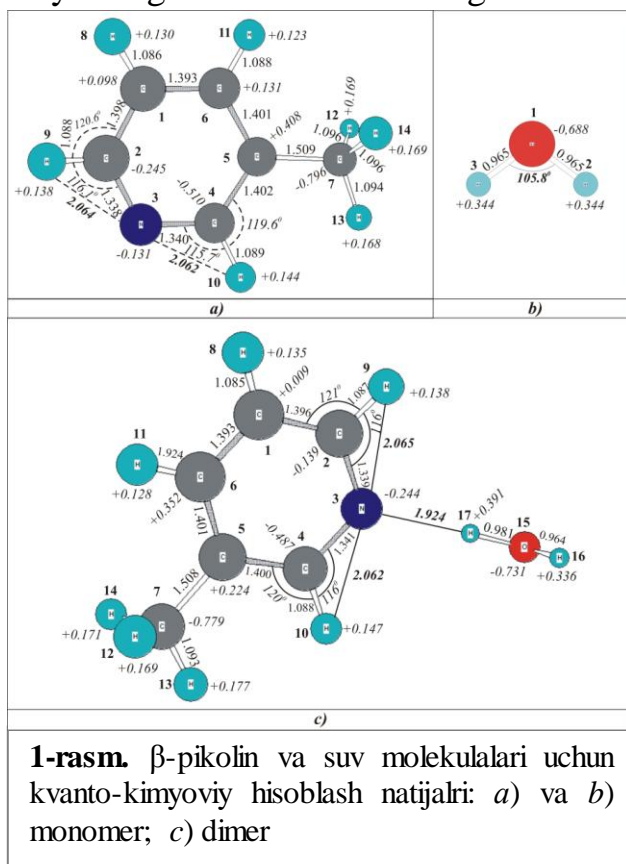
Molekyulalararo vodorod bog'lanishni o'rganishda molekulyar spektroskopiya muhim ro'l o'ynaydi. Molekyulalararo vodorod bog'lanishning hosil bo'lishi aynan spektroskopiyada o'rganiladi. Ko'pincha vodorod bog'lanish protonoakseprot xususiyatiga ega bo'lan piridin, pikolinlar, piridin o'rnidagi brom va xlor, asetonitril va boshqa molekulalarning ishtiroki tufayli hosil bo'ladi. Ushbu keltirilgan fikrlarga asoslangan holda ushbu tadqiqot ishida ham molekula xossalari va ular orasidagi o'zaro ta'sirlarni o'rganish uchun β -pikolin molekulasini tanlab oldik. Pikolin va ularning eritmalarining kombinatsion sochilish spektrlari va boshqa spektroskopik usullar orqali molekulalararo o'zaro ta'sirining yuzaga chiqish xususiyatlari o'rganilgan [1-3]. β -pikolin molekulasining protonodonor xususiyatiga ega bo'lgan molekulalar bilan molekulalararo vodorod bog'lanish hosil qilish natijasidagi qonuniyatlarni aniqlash, xarakterli va qat'iy agregatlarni ajratish suyuqliklarning molekulyar tuzilish mexanizmlarini o'rganish muhim ahamiyat kasb etadi. β -pikolin va uning eritmalarida sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchini o'rganish uchun kvanto-kimyoviy hisoblashlar o'tkazdik.

Kvanto-kimyoviy hisoblashlar Gaussian-98W dasturida B3LYP yaqinlashish 6-31G⁺⁺(d, p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi.

Kvanto-kimyoviy hisoblash natijalarini tahlil qilib chiqamiz. 1a rasmda β -pikolin molekulasini monomeri keltirilgan bo'lib, barcha vodorod atomlari musbat zaryadlangan azot atomi esa manfiy zaryadlangan, bunda azot atomiga qo'shni turgan H⁹, H¹⁰ va CH₃ guruhidagi vodorod atomlari zaryadlari katta H⁹N³ va H¹⁰N³ atomlar orasidagi masofalar 2,064 va 2,062 Å ga teng. Shuningdek, H⁹C²N³ atomlar orasidagi burchak 116,1⁰ ga teng bo'lsa, H¹⁰C⁴N³ atomlar orasidagi burchak 115,7⁰ ga teng. C¹C²H⁹ atomlar orasidagi burchak 120,6⁰ ga teng bo'lsa, va H¹⁰C⁴C⁵ atomlar orasidagi burchak 119,6⁰ ga tengdir.

Demak, azot atomiga qo'shni turgan H⁹ va H¹⁰ atomlar azot atomi bilan kuchli o'zaro ta'sirlashadi va bog' uzunliklari ham vodorod bog' uzunligiga to'g'ri

keladi. Bu esa molekula ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud degan xulosaga olib keladi. 1b-rasmda suv molekulasining monomeri keltirilgan bo'lib, bu yerda ham vodorod atomlari musbat zaryadlangan, kislorod atomi esa manfiy zaryadlangan. Atomlar orasidagi burchak $105,8^{\circ}$ C ga teng.



$C^1C^2H^9$ atomlar orasidagi burchak esa 121° ga teng bo'lsa, $H^{10}C^4C^5$ atomlar orasidagi burchak 120° ga tengdir. Demak, dimer holida ham azot atomiga qo'shni turgan H^9 va H^{10} atomlar azot atomi bilan kuchli o'zaro ta'sirlashadi va bog' uzunliklari vodorod bog' uzunligiga mosligi saqlangani uchun dimer holida ham molekula ichida ichki molekulyar vodorod boglanish mavjud degan xulosaga olib keladi.

1. Сагитова Э.В., Тухватуллин Ф.Х., Атаходжаев А.К. // Опт. и спектр. 1970. Т.28. В. 3. С. 465-470.
2. Wawer I., Warycha S. // Polish J. Chem. 1985, 59, pp. 565-572.
3. Sabirov L.M., Semenov D.I., Khaidarov Kh.S. // Opt. and spectros., 2007, 103, 3, pp. 490-495.

Kvanto-kimyoviy hisoblashlar β -pikolin molekulasini va suv molekulari dimeri uchun ham o'tkazildi (1c rasm). Rasmdan ko'rinib turibdiki, molekulararo vodorod bog'lanish β -pikolin molekulasidagi 3N atomi bilan suvning 17H atomi orasida vujudga keladi, bu bog' uzunligi $1,924 \text{ \AA}$ ni tashkil etadi. Molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilgan $3N17H15O$ atomlar orasidagi burchak 179° ga teng. Dimer hosil bo'lish energyyasi $5,3 \text{ kkal/mol}$ ni tashkil etadi. β -pikolin molekulasida atomlar orasidagi masofa sezilarli ravishda o'zgargan. Zaryadlar taqsimotining o'zgarishi ham kuzatildi. H^9N^3 va $H^{10}N^3$ atomlar orasidagi masofalar $2,065$ va $2,062 \text{ \AA}$ ga teng. Shuningdek, $H^9C^2N^3$ va $H^{10}C^4N^3$ atomlar orasidagi burchak 116° ga teng.