

## Noempirik hisoblashlar yordamida $\alpha$ -pikolin molekulasida agregatsiyalarini o'rganish

**X.A.Xushvaqtoy, B.G'.Xudoyberdiyev,  
V.Ubaydullayeva, L.Djumanov, N.Jumayeva**

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

*Maqolada azotli molekulalardan yana biri  $\alpha$ -pikolin va uning eritmalarida sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchini o'rganish uchun noempirik hisoblashlar o'tkazish. Noempirik hisoblashlar Gaussian-98W dasturida B3LYP yaqinlashish 6-31G<sup>++</sup>(d, p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirish haqida fakir va muloxazalar yoritiladi.*

Azotli molekulalarning tabiati va ularda sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchlari bo'yicha juda ko'plab ilmiy tadqiqot ishlari olib borilgan bo'lib, ularning kombinatsion sochilish spektrlaridagi spektral chiziqlari murakkab ko'rinishga ega ekanligi bo'yicha xulosalar chiqarilgan [1-2]. Ushbu tadqiqot ishida azotli molekulalardan yana biri  $\alpha$ -pikolin va uning eritmalarida sodir bo'ladigan molekulalararo ta'sir kuchini o'rganish uchun noempirik hisoblashlar o'tkazdik.

Noempirik hisoblashlar Gaussian-98W dasturida B3LYP yaqinlashish 6-31G<sup>++</sup>(d, p) funksiyalar to'plami negizida amalga oshirildi.

$\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -pikolinlar eritmalarining kombinatsion sochilish spektrlaridagi molekulalararo o'zaro ta'sirining yuzaga chiqish xususiyatlari o'rganilgan [3]. Protonodonorli erituvchilar (suv, metil va etil spirti) da pikolinlarning yuqorida sanab o'tilgan erituvchi bilan molekulalararo vodorod bog'lanishining spektral namoyon bo'lishi o'rganilgan bo'lib, bunda pikolin molekulasidagi azot atomlari ishtirokidagi atomlarning ba'zi bir tebranish polosalari ikkita polosaga ajratiladi: monomerlar polosasiga va agregatlar polosasiga, bunda agregatlar polosasining chastotasi monomerlar chastotasidan katta bo'ladi. Agregatsiyalanishlarning bunday spektral namoyon bo'lishi ko'pgina azotli molekulalar uchun xarakterlidir.

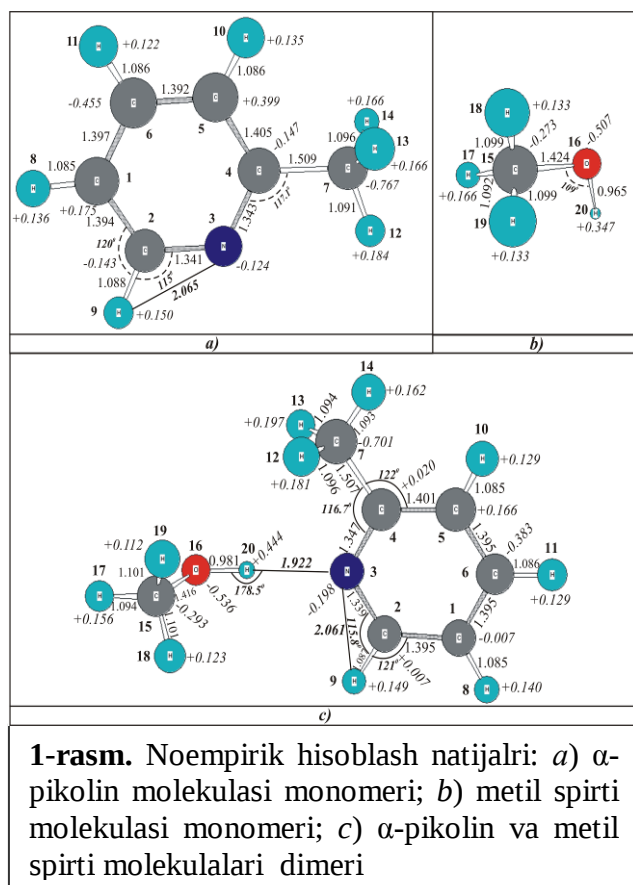
O'tkazilgan noempirik hisoblash natijalari 1-rasmda keltirilgan. 1 *a* va *b* rasmda  $\alpha$ -pikolin hamda metil spirti molekulasida monomerlari keltirilgan bo'lib,  $\alpha$ -pikolin molekulasidagi H<sup>9</sup>N<sup>3</sup> atomlar orasidagi masofa 2,065 Å ga teng. Shuningdek, H<sup>9</sup>C<sup>2</sup>N<sup>3</sup> atomlar orasidagi burchak 115<sup>0</sup> ga teng bo'lsa, C<sup>1</sup>C<sup>2</sup>H<sup>9</sup> atomlar orasidagi burchak 120<sup>0</sup> ga tengdir. Demak, azot atomiga qo'shni turgan H<sup>9</sup> atomi azot atomi bilan kuchli o'zaro ta'sirlashadi va bog' uzunligi vodorod bog' uzunligiga mos kelgani uchun molekula ichida ichki molekulyar vodorod bog'lanish mavjud degan xulosaga olib keladi.

$\alpha$ -pikolin molekulasini metil spirti molekulasiga bilan molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilish ekan (1c-rasm). Molekulalararo vodorod bog'lanish  $\alpha$ -pikolin molekulasidagi N<sup>3</sup> atomi bilan metil spirtining O-H guruhidagi H<sup>20</sup> atomi orasida

vujudga keladi, bu bog' uzunligi 1,922 Å ga teng. Dimer hosil bo'lish energiyasi 5,8 kkal/molni tashkil etar ekan.  $\alpha$ -pikolin va metil spirti molekulari atomlari orasidagi masofalarning o'zgarganligini va zaryadlar qayta taqsimlanganligini kuzatdik.

Demak,  $\alpha$ -pikolin va metil spirti molekulari molekulararo vodorod bog'lanish hosil qilishi natijasida ochiq strukturali dimer hosil qilishi bilan birgalikda spektral chiziqlarning yuqori chastota tomonga siljishiga olib kelar ekan.

1. S.Schlucker, R.K.Singh, B.P.Asthana, J.Popp, W.Kiefer // J. Phys. Chem. A, 2001, 105 (43), pp. 9983-9989.
2. F.H.Tukhvatullin, B.G.Hudayberdiev, A.Jumabaev, H.A.Hushvaktov, A.A.Absanov // J. Mol. Liq. 2010, 155, pp. 67-70.



3. Э.В.Сагитова, Ф.Х.Тухватуллин, А.Қ.Атаходжаев // Оптика и спектроскопия. 1970, Т. 28, В. 3, С. 465-470.

**Ishtirokchi haqida  
MA'LUMOT**

Familiyasi: *Djumanov*  
Ismi: *Lutfillo*  
Otasining ismi: *Xayrullayevich*  
Ilmiy darajasi: *magistr*  
Ilmiy unvoni: *-*  
Mansabi: *laborant*  
Tashshkilot nomi: *Samarqand davlat universiteti*  
Pochta manzili: *Samarqand shahar, Universiteti hiyoboni 15, 140104.*  
e-mail: *bekzod@samdu.uz*  
Qaysi yo'nalish bo'yicha ma'ruza qilinadi: *№ 4*

Ma'ruza mavzusi: *Noempirik hisoblashlar yordamida  $\alpha$ -pikolin molekulasi agregatsiyalarini o'rganish*

Muallif (yoki mualliflar): *X.A.Xushvaqtov, B.G'.Xudoyberdiyev, V.Ubaydullayeva, L.Djumanov, N.Jumayeva*

**Ishtirokchihaqida  
MA'LUMOT**

Familiyasi: *Jumayeva*  
Ismi: *Nigora*  
Otasining ismi: *Xasanovna*  
Ilmiy darajasi: *magistrant*  
Ilmiy unvoni: *-*  
Mansabi: *-*  
Tashkiloti: *Samarqand davlat universiteti*  
Pochta manzil: *Samarqand shahar, Universiteti xiyoboni 15, 140104*  
e-mail: *bekzod@samdu.uz*  
Qaysi yo'nalish bo'yicha ma'ruza qilinadi: *№ 4*

Ma'ruza mavzusi: *Noempirik hisoblashlar yordamida  $\alpha$ -pikolin molekulasi agregatsiyalarini o'rganish*

Muallif (yoki mualliflar): *X.A.Xushvaqtov, B.G'.Xudoyberdiyev, V.Ubaydullayeva, L.Djumanov, N.Jumayeva*