

Квантовая химия: исследования строения и классификация производных ферроцена и пиримидин-4-онов

М. Х. Мамарахмонов^{а*}, Л. И. Беленький^б

*^аАндижанский государственный университет им. З.М. Бабура, Республика Узбекистан,
100170 Андижан, ул. Университетская 129, E-mail: muhamatdin@mail.ru*

*^бИнститут органической химии им. Н.Д.Зелинского Российской академии наук,
Российская Федерация, 119991 Москва, Ленинский проспект, 47, E-mail: libel31@mail.ru*

Квантовая химия - является молодой, но тем самым быстро развивающийся отраслью мировой науки. Она тесно связана с химией, информатикой, теоретической математикой и физикой. Ее теоретической основой является теория химического строения, методы МО ЛКАО, операторы квантовой механики, уравнения Шрёдингера, принцип неопределенностей Гейзенберга, принцип Паули и постулаты Бора об атомных и молекулярных орбитах [1,2] и многое др.

Учеными-химиками ведущих научно-исследовательских институтов мира, в частности, России (акад. Н.С. Зефилов, проф. Л.И. Беленький), США (М. Дьюар, А.Р. Катрицкий); Германии (Тим Кларк, Дж. Попл); Великобритании и Японии, созданы школы квантовой химии. В мире насчитывается сотни научных журналов по квантовой химии. Она является неотъемлемой частью методов физико-химического исследования и носит название “универсального спектрометра” для определения строения и классификации химических соединений. С помощью специальных программ можно рассчитывать энергию, переходные состояния, электронное строение, оптимизировать геометрию, получить теоретические ИК, УФ и ПМР спектры как в газовой фазе, так в среде различных растворителей.

В годы независимости, с развитием компьютерной техники, программирования и интернета; международных связей с учеными ближнего и дальнего зарубежья в Узбекистане этот отрасль науки стал бурно развиваться. В частности, молодые ученые-химики Андижанского Государственного Университета во главе проф. И.Р. Аскарлова в последние годы интенсивно пользуются методами квантовой химии для изучения электронного строения и классификации соединений ферроцена и пиримидин-4-она. Международное

сотрудничество кафедры общей химии с учеными Института Органической химии РАН проф. Л.И. Беленьким и Н.Д. Чувылкином в исследовании производных пиримидин-4онов привело к плодотворным результатам[3,4].

Нужно подчеркнуть, что научная литература по квантовой химии на узбекском языке для студентов ВУЗов и специалистов недостаточна, почти что, нет. Первые источники (книги, научные журналы, сборники) в основном на английском и на русском языках [5,6]. Для полноценного развития химии в Узбекистане недавно проф. И.Р. Аскарковым было предложено ВАК при КМ РУз включить в список химических дисциплин специальность 02.00.17 - «Квантовая химия». Благодаря этому, наши ученые будут иметь возможность эффективно использовать методы квантовой химии в своих научных исследованиях.

Надо отметить, что в 1997 г. проф. И.Р. Аскарковым и Т.Рискиевым предложена и ВАКом одобрена введение новой специальности 02.00.09- «Классификация и сертификация товаров на основе химического состава» в список химических дисциплин. В настоящее время в Узбекистане по этой специальности защищена 1 докторская [7] и более 2-х кандидатских диссертаций [8,9]. Во многих странах мира начались научные исследования по этой специальности.

Список литературы

1. Pople J.A., Beveridge D.L., Approximate Molecular Orbital Theory, McGraw-Hill, New York, 1970.
2. S. Nagakura, T. Nakajima, Quantum theory in chemistry, Tokyo, Ivanami Sh., 1982.
3. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, Н.Д. Чувылкин, М.А. Аширматов, Х.М. Шахидоятов, Изв. АН, Серия Химическая, 2014, №9, С. 1986-1992.
4. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, Н.Д. Чувылкин, и др., Изв. АН, Серия Химическая, 2015, №3, С. 534-539.
5. Вудворд Р., Хоффман Р., Сохранение орбитальной симметрии, М.: Мир, 1971.
6. Тим Кларк, Компьютерная химия, М.: Мир, 1990 (перевод с немецкого).
7. К.М. Каримкулов, Автореф. Д.т.н., Ташкент, 2012.
8. Н.Х. Тухтабаев, Автореф. Дисс. канд.т.н., Ташкент, 2002.
9. Л. Пулатова, Автореф. К.т.н., Ташкент, 2012.