



**Илмий – амалий конференция  
материаллари**

**ИЛМ - ФАН  
ВА  
ИННОВАЦИЯ**

**Қ а р ш и**

## КИМЁВИЙ БИРИКМАЛАРНИНГ ТУЗИЛИШИ ВА ХОССАЛАРИНИ ЎРГАНИШДА КВАНТ-КИМЁВИЙ ҲИСОБЛАШЛАРНИНГ АҲАМИЯТИ

*Нефт ва газ кимёси ва технологияси  
мутахассислиги магистранти Мусурмонов О.  
Илмий раҳбар: Кодиров А.*

Кейинги пайтларда илмий нашрларда кимёвий бирик-маларнинг турли хоссаларини математик моделлаш ёки улар-нинг хоссаларини квант-кимёвий ҳисоблашлар орқали ўрганиш бўйича кенг қўламдаги ишлар олиб борилмоқда [1].

Кимёвий бирикмаларнинг тузилиши ва хоссаларини ўрганишнинг квант-кимёвий ҳисоблашлар орқали тавсифлашда кўплаб компьютер дастурлари ва мажмуалари ҳамда ёрдамчи мажуалари ишлатилади.

ChemOffice программасида кимёвий бирикмаларнинг ПМР-спектрларини ва бир қанча физик катталикларини (суюқ-ланиш ва қайнаш ҳароратларини) назарий жиҳатдан маълумо-тини олишимиз мумкин.

Ҳисоблашларни амалга ошириш учун молекуланинг тузилиш формуласи ChemWin мажмуаси ёрдамида ёзиб олиниб тегишли ёрдамчи ва асосий мажмуаларларга киритилади, асосий мажмуада ушбу моддага тегишли барча физик-кимёвий катталикларнинг ҳолатлари оптимал ҳолатга келтирилади ва молекуланинг тузилишини вертуал ҳолатда кузатишимиз мумкин бўлади.

Энг биринчи яратилган ва машҳур ҳисоблаш мажмуа-ларидан бири Попл томонидан яратилган GAUSSIAN ҳисоб-лаш мажмуасидир [2]. Бугунги кунда ушбу усулнинг шахсий компьютерларга мўлжалланган Windows ҳамда Linux операцион системаларида ишлайдиган вариантлари яратилган. GAUSSIAN ҳисоблаш мажмуаси кенг имкониятга эга бўлиб, кимёнинг деярли барча соҳаларидаги муаммоларни енишга мўлжалланган ва ўз ичига айрим ярим эмпирик ҳамда жуда кўп ноемпирик ҳисоблаш усулларини камраб олган.

GAMESS Гордон гуруҳи томонидан яратилган квант кимёвий ҳисоблаш усули саналади. Бу мажмуанинг кимёда

қўлланилиши GAUSSIAN 19 программасига нисбатан анча чегараланган. Бунинг сабаби GAMESS ҳисоблаш программасининг бепуллиги билан изоҳлаш мумкин. GAUSSIAN программаси кўпгина лицензияга эга бўлган (пуллик) программаларни ўз ичига олган. Масалан, Zindo/S программасини, NPA ва AIM атом зарядларини ҳисоблаш усуллари ва б. GAUSSIAN ва GAMESS программаларида ҳисоблашлар учун дастлабки геометрик катталикларни махсус шаклда - input файл кўринишида киритилади ва ҳисоблаш натижалари визуализация қилиб берувчи интерфейслар ёрдамида амалга оширилади [3].

Шуни алоҳида таъкидлаш керакки, жуда тартибли ва сезгирлик билан ишлаш ҳам олинган маълумотларнинг тўлиқ тўғри маълумот эканлигининг кафолатини бера олмайди. Шунингдек, олинаётган маълумотлар бир канча омишларга боғлиқ бўлади, улар эса ҳисоблашларга турли даражада хатолик киритиши ёки хатолик даражасини ошириши мумкин [4].

Квант-кимёвий ҳисоблашлар алгебраик тенгламалар тизимидан ташкил топган Хартри-Фок-Рутан тенгламаси асосида ҳисоблаб топиловчи молекуляр орбиталлар бўйича атом орбиталларининг тақсимланиш коэффициентини топиши асосида амалга оширилади. Хартри-Фок-Рутан тенгламаси ечимларига нисбатан ёндошувларга боғлиқ ҳолатда квант - кимёвий усуллар ноемпирик ва ярим эмпирик турларга ажратилади.

Ярим эмпирик усулларда Хартри-Фок-Рутан тенгламаси молекула таркибидаги электронларнинг фақат бир қисми (р-электронлар ёки валент электронлар) ўртасидаги ўзаро таъсирлашишларни инобатга олган ҳолда, бир қатор соддалаштиришлар асосида ҳисобланилади. Бу кўринишлага соддалаштиришларнинг ўрни гамилтониан тузиб чиқиляётганда таъриба маълумотлари асосида танлаб олинган эмпирик параметрлар билан тўлдирилади (компенсацияланади) [4].

Ярим эмпирик усулларда параметрларнинг аниқ тартибда танлаб олиниши ҳисобига молекуланинг айрим физик - кимёвий хусусиятларини тўғри ифодалашга муваффақ бўлинади, жумладан, уларнинг гомологик бирикмалар катори бўйича ўзгаришларини аниқлаш имкони туғилади.

Ушбу квант-кимёвий ҳисоблашлар орқали биз молекуладаги атомлар ўртасидаги боғ узунликлари, конформацион ва таутомер ҳолатлари, уларнинг бурчаклари (валент ва торсион), ҳар бир боғнинг энергияси, боғларнинг ҳосил бўлиш энергиялари, шунингдек молекуланing ҳосил бўлиш иссиқлиги (тепота образoвания) тўғрисидаги маълумотларни олишимиз мумкин.

Бундан ташқари, моддаларнинг тузилиш формулаларини тегишли интерфайслар орқали Nuperc hem программасига киритиб ҳар қандай кимёвий бирикмаларнинг УФ- ва ИК-спектрларини назарий жиҳатдан олишимиз мумкин. Бу эса олинган моддаларнинг тузилишларини ўрганишда ва таҳлил қилишда катта аҳамиятга эга.

#### Адабиётлар

1. Лужков В.Б., Богданов Г.Н. Квантовохимические расчеты в изучении противоопухлевых соединений. Успехи химии.-Москва, 1996.-Т.55. - С.3-28.
2. Young D.C. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems. New-York: Wiley-Interscience, 2001. 38 p.
3. Кобзев Г.И. Применение неэмпирических и полуэмпирических методов в квантово-химических расчетах. Москва.1985
4. Кларк Т. «Компьютерная химия» Перевод с английского Москва.1985.

### ШЎРТАНГАЗКИМЁ МАЖМУАСИ ЧИҚИНДИСИ АЛЮМИНИЙ ОКСИДИНИ ТОЗАЛАШ ВА УНДАН АЛЮМИНИЙ ГИДРОКСИД ОЛИШ

*Нефт ва газ кимёси ва технологияси йўналиши  
магистранти Ражабова М.  
Илмий раҳбар: Л.Камолов*

Истиқболи порлоқ полимер композитли материаллардан (ПКМ) бири қийин ёнувчан пластиклар ҳисобланади. Қийин ёнувчан пластикларнинг юқори мустаҳкамлиги, кичик солиш-тирма оғирликни таъминлаши ва уларни конструкциялаш ишларининг турли хил соҳаларида муваффақиятли қўллани-

лиши, айниқса, иктисодий арзонлиги уларга бўлган талабни ошшига сабаб бўлмоқда.

Ҳозирги кунда ёнишни камайтирувчи материал сифатида Шўртангазкимё мажмуаси (ШГКМ) чиқиндиси асосида олинган алюминий (III)-гидроксиддан фойдаланиш долзарб муаммолар ҳисобланади. Алюминий (III)-гидроксиднинг муҳим хоссалари температурага чидамлилиги ва солиштирма мустаҳкамлигини юқори бўлиши жуда катта аҳамиятга эга. Арзон ва юқори температурага чидамlilik хоссалари алюминий (III)-гидроксидда мавжудлиги полимер композитнинг 40% ни ташкил қилиши ҳамда олинадиган полимер композитининг арзон ва сифатли бўлишини таъминлайди.

Шўртангазкимё мажмуаси чиқиндиси алюминий оксидни тозалаш [1] ва ундан алюминий (III)-гидроксид тўлдирувчисини олиш мақсадида илмий тадқиқот иши олиб борилди.

Шўртангазкимё мажмуаси чиқиндиси алюминий оксидининг таркибидаги органик моддалар ва кристаллизацион сувни қуриштириш учун чиқинди ҳисобланган алюминий оксидни  $m(\text{Al}_2\text{O}_3) = 75.05$  г ни фарфорли тигелда муфел печида  $T = 600^\circ\text{C}$ , 1 соат мобайнида қуйдирилди. Алюминий оксидни яшил-малла ранги оқ рангга айланди. Қуйдиришдан кейин алюминий оксидни  $w(\text{Al}_2\text{O}_3) = 84.82\%$  ни ташкил қилади, модда таркибидаги  $w(\text{H}_2\text{O}) = 15.18\%$  сув йўқотилади.

Майдалаш учун каттиқ алюминий оксид (оқ рангли) ва суюқ натрий гидроксиднинг 32.1% NaOH эритмаси (концентрацияси  $C_{\text{Na}_2\text{O}} = 300\text{г/л}$  ёки  $C_{\text{NaOH}} = 387.1\text{г/л}$ ) дан тайёрланди.

Бунда 63.66 г чиқинди алюминий оксид грануласи (оқ рангли) га 82.9 г (ёки  $61.41\text{ см}^3$ ) 32.1% ли натрий гидроксид эритмасидан қўшилди. Майдалашда модуль  $J : T = 1.9$  бўйича. Майдалашда шариклар  $\varnothing 1.02\text{ см} - 5$  дона,  $\varnothing 2.02\text{ см} - 4$  дона,  $\varnothing 3.02 = 1$  дона. Майдалаш вақти 1 соат давом эттирилди.

Автоклавга майдаланган масса ва яна 188.59 мл 32.1% NaOH эритмасидан қўшилди. Автоклалда синтез вақтида  $T = 230^\circ\text{C}$ ,  $P = 28 - 30$  атм, вақт - 1 соатни ташкил қилди.

Автоклалда олинган оқ рангли эритмани центрифуга қилиниб, каттиқ моддаси ажратиб олинди. Қолган суюқ эритмани декомпозицион алюминатли эритма тайёрлаш учун

27	<i>Куйбокаров Н. Курбанов М.</i>	Реакция электрофильного замещения Бензо[b]тиофена	84
28	<i>Мусурмонов О. Кодиров А.</i>	Кимёвий бирикмаларнинг тузилиши ва хоссаларини ўрганишда квант-кимёвий ҳисоблашларнинг аҳамияти	86
29	<i>Ражабова М. Камолов Л.</i>	Шўртангазкимё мажмуаси чикиндиси алюминий оксидини тозалаш ва ундан алюминий гидроксид олиш	88
30	<i>Davronova G. Qurbonov M.</i>	Gazokondensat suvli dispersiyasi uchun deemulgatorlarni tanlash	90
31	<i>Қаланоаров Ф. Камолов Л.</i>	Полиэтиленнинг қийин ёнувчанлигини оширишда антипирен нанозаррачанинг таъсири	92
32	<i>Отамуродова Н. Камолов Л.</i>	Ориентацион-кристалланган полиэтиленнинг анизотропияси	94
33	<i>Қурбонов У., Содиқов М., Каримов О.</i>	Толуолни N-метилолфталимид билан сульфат кислота иштирокида амидоалкиллаш реакцияси	98
34	<i>Karimov O. Qurbonov U.</i>	Quyí molekulyar polietilen asosida alkilat va polimerbenzinlar olish	99
35	<i>Mamatova Sh., Safarova M.</i>	Matoga gul bosishda ishlatiladigan quyuglovchilar	102
36	<i>Умиров Н., Бердимуродов Э., Қурбонов У.</i>	Алюминий (III)-гидроксид ва полиэтилен асосида қийин ёнувчи полимер композиция олиш	104
37	<i>Никбаева Д.А. Некбаева Н.А.</i>	Состояния десны у детей 4-6 летнего возраста	106
38	<i>Амонов О., Хазраткулова Ш., Жураев Д., Дилмуродов Ш., Зияев З.</i>	Юмшоқ бугдойнинг совуққа чидамлилиқ хусусиятини баҳолаш	108
39	<i>Омонов О.</i>	Ҳисор тоғ тизмасининг Ўзбекистон "Қизил китоби"га киритилган реликт гур ўсимликлари	112
40	<i>Диллаев О. Ҳамидов Б. Омонов О.</i>	Биологияни ўқитишда педагогик технологиялардан фойдаланиш. Модулли таълим технологияси	115

41	<i>Тураева А.</i>	Инвазион касалликлар вакили - кичима кўтир кана	118
42	<i>Турсунова Л. Давронов Б.</i>	Малакология фанининг Ўрта Осиё ва Ўзбекистонда ривожланиш тарихи	120
43	<i>Ниёзова О.</i>	“Девону луғотит турк” асарида феъл майлларининг хусусиятлари	125
44	<i>То‘райева I.</i>	Abdulla Oripov she‘riyatida badiiy vosita-larning uyg‘unligi	129
45	<i>Жўраева О.</i>	Пиримкул Кодировнинг бадиалари ва ҳиссий бадий тафаккур	132
46	<i>Пирназарова С. Юлдошева Н.</i>	Пешлавҳалар — миллий маънавиятимиз кўзгуси	136
47	<i>Shodmonova D. Qahhorova Sh.</i>	Ishq vasl ila boqiy	139
48	<i>Chariyeva Sh.</i>	Qo‘sh ismli temuriylar	142
49	<i>Islomova Sh.</i>	Iboralarning yosh jihatidan xoslanishi	145
50	<i>Тожиева Г.</i>	Миллий ғоя атов бирликларининг тарихий-этимологик хусусиятлари	146
51	<i>Нафасова В.</i>	Равиш паронимлар	150
52	<i>Нуриддинов Ш.</i>	Хувайдо лирикаси бадиятига доир	152
53	<i>Хусанов Ж.</i>	“Муҳаббатнома” ва номачилик тараккиёти	155
54	<i>Намрайева М.</i>	“Portfolio” tushunchasi va interfaol metodlar	160
55	<i>Холов Л. . Эгамов З.</i>	Глобаллашув жараёнида ёшлар сиёсати ҳамда таълим-тарбиянинг ўрни	163
56	<i>Жабборов Э.</i>	Ирода инсон маънавиятнинг таркибий қисми сифатида	169
57	<i>Худойбердиев Л.</i>	Ўзбекистонда замонавий “Оммавий маданият”нинг тарқалиш сабаблари	170
58	<i>Sunatov D.</i>	Farosat ilmining falsafiy talqini	176
59	<i>Раҳмонқулова О.</i>	Қашқадарё воқеасида халқ амалий санъати ҳолати ва ривожланиши	179