

ФУРФУРОЛИДЕНДИКАРБАМИД МОЛЕКУЛАСИНИНИНГ КВАНТ-КИМЁВИЙ ХИСОБИ

Мухаммедов Саидмурод Боходиржон ўғли

Фарғона политехника институти таянч докторанти

E-mail: saidmurod2378@gmail.com

Исақов Хаятулла

Андижон давлат университети кимё кафедраси профессори

Аннотация: Ушбу мақолада фурфурол ва карбамид реакцияси натижасида олинган фурфуролидендикарбамид молекуласининг электрон тузилиши, геометрик параметрлари, атом зарядлари ва ИҚ-спектрини замонавий услуб квант-кимёвий хисоблаш орқали олинган маълумотлар келтирилган.

Калит сўзлар: фурфурол, карбамид, Gaussian98, квант-кимёвий хисоб, атом заряди, ИҚ-спектр, фурфуролидендикарбамид

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATION OF FURFUROLIDENDIUREA MOLECULE

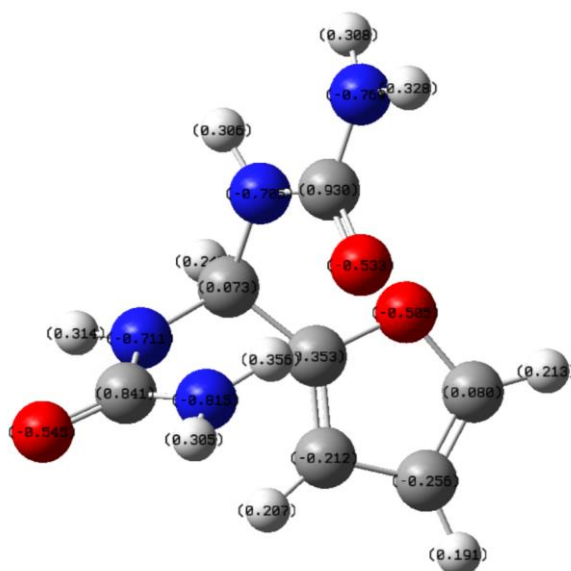
Abstract: This article presents the electronic structure, geometrical parameters, atomic charges and IR spectra of the furfuralidendiurea molecule obtained by the reaction of furfural and urea by modern methods of quantum chemical calculations.

Key words: furfural, urea, Gaussian98, quantum chemical calculation, atomic charge, IR spectrum, furfuralidendiurea

Маълумки, моддаларнинг реакция қобилятилари кўп омилларга боғлиқ бўлиб, бир қатор функционал гуруҳларининг мавжудлиги умумий тушунча

ҳисобланади ва ҳозирги кунда замонавий квант-кимёси доирасида мазкур масаланинг фундаментал тушунчаларини ойдинлаштириш зарурати вужудга келди.[1] Молекулаларнинг физик-кимёвий хусусиятлари ва реакцияга киришиш фаоллиги уларнинг электрон тузилиши ва энергия хоссалари билан боғлиқ. Бугунги замонавий кимёда модда молекуласининг атомлараро ва молекулалараро таъсирлашувчанлиги, унинг фазовий тузилишларини аниқлаш бўйича квант-кимёвий ҳисоблаш усули кенг қўлланилмоқда. Квант-кимёвий ҳисоблаш мураккаб органик модда молекуласининг хоссаларини аниқлашда энг тезкор, аниқ ва қулай бўлган усулдир [2]. Квант кимёси органик бирикмаларнинг реактивлиги ҳақидаги экспериментал маълумотларни тушунтириш ва юзага келиши мумкин бўлган реакцияларни назарий жиҳатдан аниқлаш имконини беради. Ушбу ҳисоблашларни амалга оширишда Gaussian98 дастуридан кенг фойдаланилмоқда. Ушбу дастури кимёгарлар орасида квант-кимёвий ҳисобларини амалга ошириш учун энг машҳур воситадир. Бунинг асосий сабаблари – ушбу дастурнинг қамровининг кенглиги, тезкорлиги, юқори самарадорлик ва фойдаланувчи учун қулайлигидир. Дастур квант механикасининг асосий қонунларига асосланиб, молекуляр тизимларнинг энергиялари, молекуляр тузилмалари ва тебраниш частоталарини каби хусусиятлардан келиб чиқадиган молекулаларнинг бошқа кўплаб хусусиятларини аниқлаш имконини беради. Олинган натижалар асосида ўрганилган модда молекуласининг бошқа бирикмаларини олиш бўйича назарий жиҳатдан аниқ ва ишончли хулосаларга эга бўлишга ёрдам беради. [3]

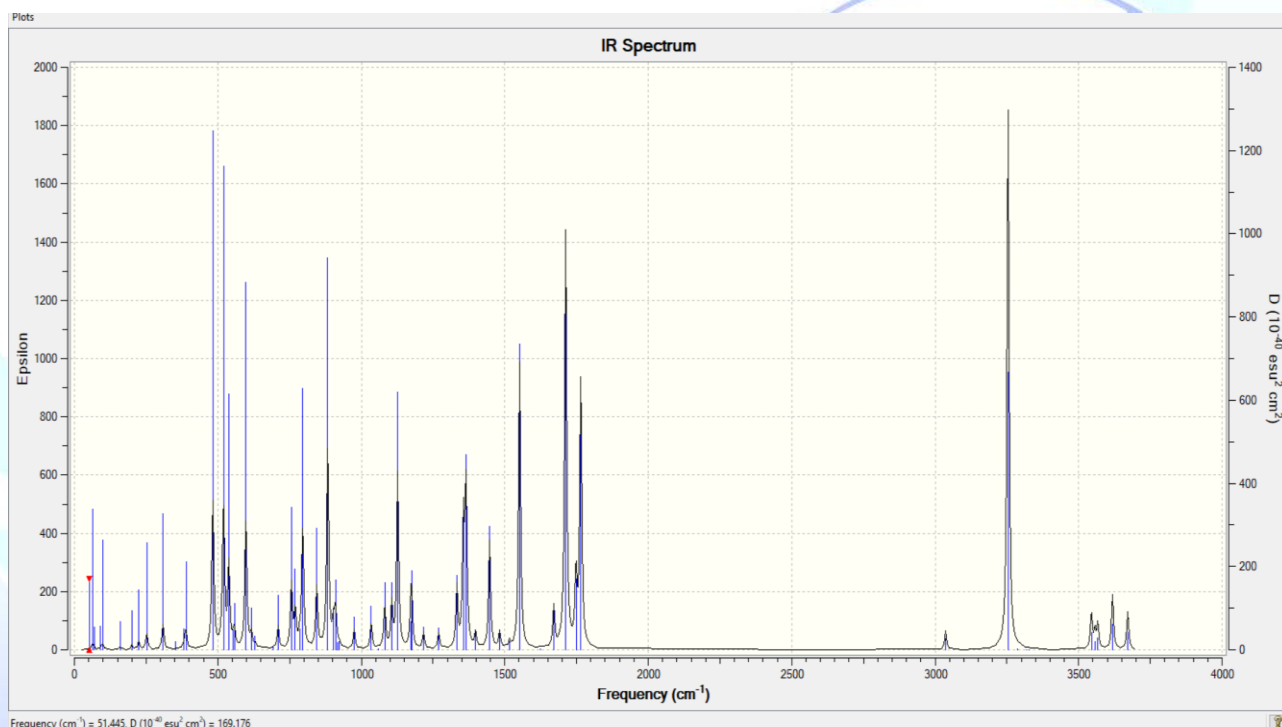
Фурфуролидендикарбамид молекуласини геометрик параметрларини топиш учун квант-кимёвий ҳисоблар компютер дастури Gaussian 98 да зичлик функционали DFT/B3LYP усулида 3-21 G базис тўплами билан амалга оширилди [4]. Фурфуролидендикарбамид молекуласининг оптималлаштирилган геометриясини топилди. Натижада молекулани ташкил этган атомларининг зарядлари, атомлараро боғ узунликлари аниқланди. Қуйидаги 1-расмда молекуланинг атомлар зарядлари келтирилган.



1-расм. Фурфуролидендикарбамиднинг электрон заряд тақсимоти

Ушбу тасвирдан кўриниб турибдики, услерод атомларида энг юқори атом зарядлари $q \approx 0,930; 0,841e$ ларни ташкил этган бўлса, энг паст зарядлар азот атомида $q \approx -0,818; -0,769 e$ ни кўрсатди.

Дастур ёрдамида оптимал холатга келтирилган фурфуролидендикарбамид молекуласини ИҚ-спектроскопияда қайд этиши мумкин бўлган тегишли ютилиш частоталари аниқланди. Қуйидаги 2-расмда молекуланинг ИҚ-спектр тасвири келтирилган.



2-расм. Фурфуролидендикарбамиднинг ИҚ-спектр тасвири

Дастур ёрдамида аниқланган молекуланинг ИҚ-спектрида кўришимиз мумкинки, тегишли частоталарда молекулани ташкил этган функционал гуруҳларнинг натижалари келтирилган. Фурфуролидендикарбамидни ташкил этган NH_2 ва NH функционал гуруҳларнинг ютилиш частоталари 3250 ва 3500 см^{-1} , $\text{C}=\text{O}$ эса 1600 см^{-1} да, NH_2 деформацион ҳолати 1500 см^{-1} , $\text{C}-\text{N}$, фуран ҳалқаси, $\text{C}-\text{C}$, $\text{C}-\text{H}$, $\text{N}-\text{C}-\text{N}$ каби боғланишлар тегишли равишда 1300 см^{-1} , 1000 см^{-1} , 900 см^{-1} , 700 см^{-1} , 600 см^{-1} ларда намоён бўлиши аниқланди.

Хулоса. Фурфуролидендикарбамид молекуласининг электрон тузилиши, ИҚ-спектри, атомларда электрон зарядлар тақсимооти ҳамда геометрик катталиклари Gaussian дастури ёрдамида юқори аниқликда ҳисобланди. Фурфуролидендикарбамиднинг комплексларини олиш бўйича молекула атомларнинг реакцион қобилиятлари аниқланди. Олинган натижалар асосида реакциянинг эҳтимолий ҳосилалари баҳоланди ва фурфуролидендикарбамид асосида олинадиган маҳсулотларнинг юқори унум билан чиқиши назарий жиҳатдан асосланди.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. М., 2001. 532с
2. Аскарлов И.Р., Киргизов Ш.М., Мамарахмонов М.Х., Алимбоев С.А. Синтез и квантово-химическое изучение реакции ацетилферроцена с изомерами аминокислоты. // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 1(67). Стр 42-44.
3. QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF FURFURAL MOLECULE// Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. Askarov I. [и др.]. 2022. 5(95). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/13417>
4. M.J.F. Frisch and etc. / Gaussian 98. Revision A.5, Gaussian Inc.- Pittsburg (PA), 1998.