GIDROXINON ASOSIDA SINTEZ QILINGAN KREMNIYORGANIK OLIGOMERNING KVANT-KIMYOVIY TAHLILI

Raximov Firuz Fazlidinovich, Xoliqova Gulhayo Qo'ldoshevna
Buxoro muhandislik-texnologiya instituti

Annotatsiya: Ushbu maqolada Gaussian Interface dasturi asosida gidroxinon, formalin va metasilikat kislota asosida sintez qilingan kremniy organik moddaning kvant-kimyoviy tahlili keltirligan. Kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida reagentlar va mahsulotning hosil bo'lish energiyasi, hosil bo'lish issiqligi, elektron energiyasi, bog uzunligi, bog'lar orasidagi burchak va uning turi, zaryad taqsimoti, elektron taqsimoti qiymatlari olingan. Tahlillar asosida olingan natijalar umumiy qonuniyatlarga mos ekanligi aniqlangan.
Kalit so'zlar: Gidroxinon, formalin, metasilikat kislota, elektron energiyasi, bog uzunligi, bog'lar orasidagi burchak, zaryad taqsimoti, elektron taqsimoti.

Аннотация: В статье представлен квантово-химический анализ кремнийорганического вещества, синтезированного на основе гидрохинона, формалина и метакремниевой кислоты в программе Gaussian Interface. В результате квантово-химических расчетов были получены значения реагентов и продуктов, таких как: энергия образования, теплота образования, энергия электрона, длины связи, угла между связями и ее типа, распределения зарядов, распределения электронов. На основании анализа установлено, что результаты соответствуют общим закономерностям.
Ключевые слова: Гидрохинон, формалин, метакремниевая кислота, энергия электронов, длина связи, угол между связями, распределение заряда, распределение электронов.

Abstract: The article presents a quantum chemical analysis of an organosilicon substance synthesized on the basis of hydroquinone, formalin and metasilicic acid in the Gaussian Interface program. As a result of quantum chemical calculations, the values of reagents and products were obtained, such as: energy of formation, heat of formation, electron energy, bond length, angle between bonds and its type, charge distribution, electron distribution. Based on the analysis, it was established that the results correspond to general patterns.
Key words: Hydroquinone, formalin, metasilicic acid, electron energy, bond length, angle between bonds, charge distribution, electron distribution.

Barchaga ma'lumki, molekulalarning kimyoviy xossalari va reaksion qobiliyati ularning elektron strukturasi va energetik xarakteristikalariga bog'liq bo'ladi.

Hozirgi vaqtda kvant kimyoviy hisoblash usullari jadallik bilan rivojlanmoqda. Natijada, molekulalarning geometriyasini baholash, oraliq va o'tish holatining

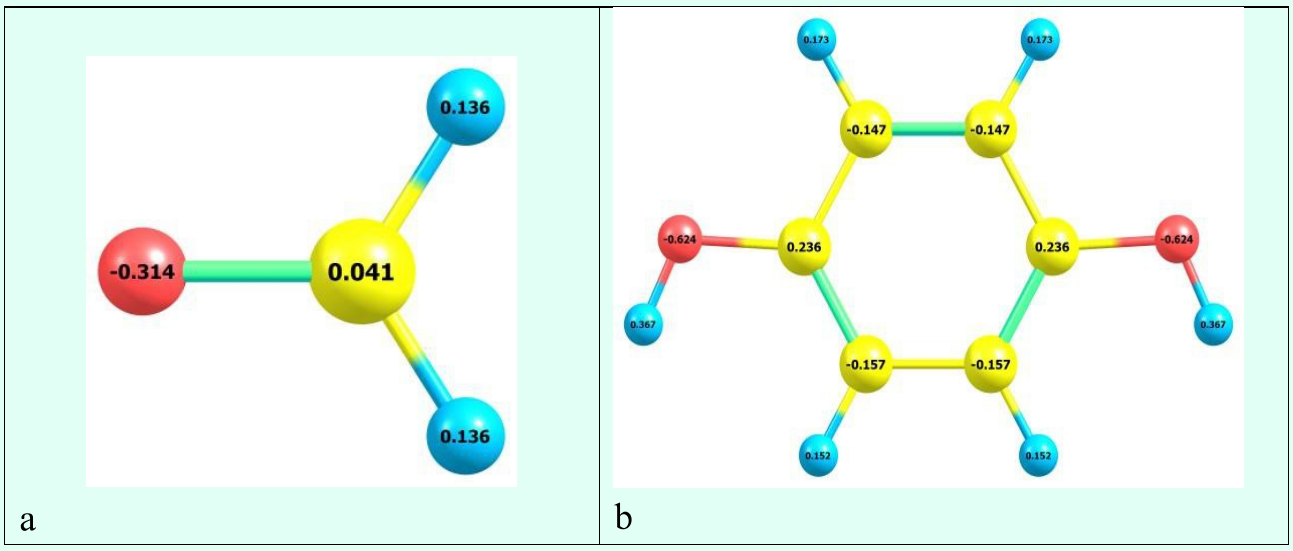
barqarorligini hisoblash mumkin. Ko‘pgina reaksiyalar uchun bunday natijalarni eksperimental ravishda hisoblashda ko‘p bosqichli jarayon bilan bir vaqtning o‘zida oraliq bosqichlarning paydo bo‘lishi va oraliq mahsulotlarning juda qisqa vaqtda mavjud bo‘lishi natijasida kelib chiqadigan qiyinchiliklar bilan bog‘liq. Kvant kimyosini hisoblash usullarining jadal rivojlanishi va kuchli kompyuter vositalari va dasturlarining paydo bo‘lishi murakkab organik birikmalarning ko‘plab xususiyatlarini aniqlash imkonini berdi. Shu sababli, kvant-kimyoviy va molekular-dinamik tadqiqotlar hozirgi vaqtda organik birikmalar sintezining ba’zi qonunlari va mexanizmlarini yaratish uchun zarur bo‘lgan ma’lumotlarni olishda fizik-kimyoviy tadqiqot usullari muhim hisoblanadi[1,2].

Organik birikmalarning reaksion faolliginini eksperimental baholashda va tushintirishda kvant kimyosi yaqindan yordam beradi va borishi mumkin bo‘lgan reaksiyalarni bashorat qilishga imkon beradi. Zamonaviy kvant kimyosining asosi Shredinger tenglamasi bo‘lib, odatda statsionar holatlar uchun adibatik jarayonda yechiladi.

Kvant kimyosi usullarini qo‘llash natijasida elektron holatlarning zichligi, elektron zichligining tarqalishi, mumkin bo‘lgan reaksiya yuzalari va turli xil spektroskopik miqdorlarning hisob-kitoblari to‘g‘risida ma’lumotlar olinadi. Hozirgi vaqtda kvant kimyosi usullari molekulalarning elektron tuzilishini o‘rganish uchun arzon, qulay va universal usullardir. Shunga qaramay, moddalarni o‘rganish uchun ananaviy eksperimental usullardan butunlay voz kechib bo‘lmaydi[3,4].

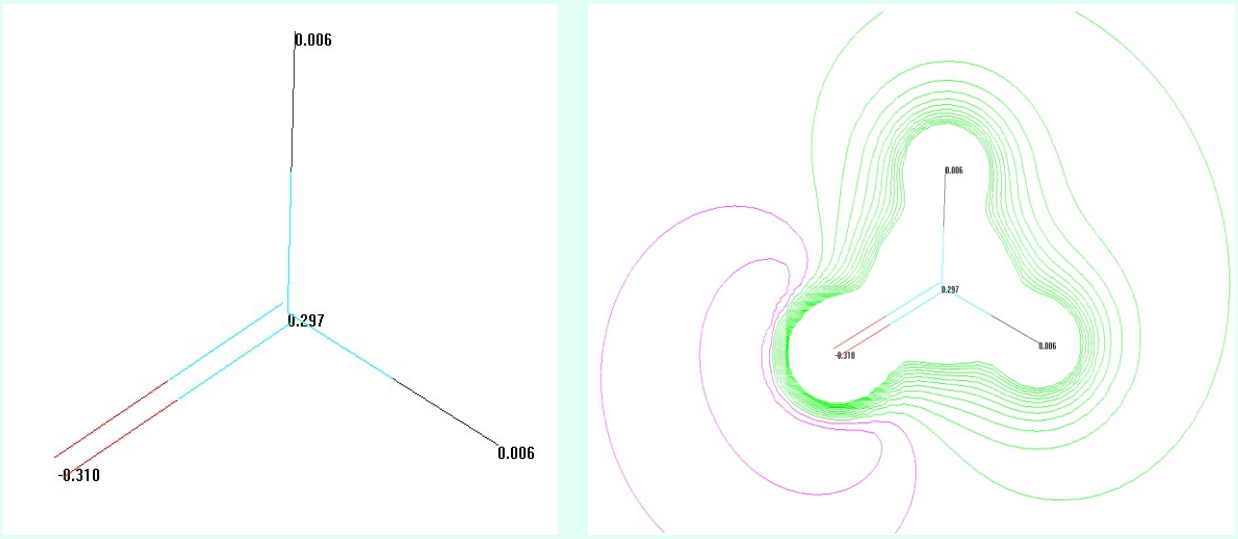
Har qanday reaksiyalarda molekulaning faolligi asosan uning tuzilishi va energiya xususiyatlariga bog‘liq. Hisoblashning kvant kimyoviy usullari rivojlanishi bilan kimyogarlar eksperimental ishlarni rejalashtirish va mahsulotlarning maqsadli sintezini amalga oshirish va belgilangan xossali moddalar olish imkoniga ega bo‘lishdi[5].

Yuqoridagilardan kelib chiqib, ilmiy tadqiqot ishida ishlatilgan va ba’zi oraliq moddalarni elektron tuzilishi o‘rganildi, kvant-kimyoviy hisoblashlari olib borildi. Dastlabki moddalar пidroxinon va formalinning RMZ va AM1 yarim empirik usullari yordamida olingan fazoviy geometriyasi va elektron tuzilishi to‘g‘risida olingan natijalar keltirildi (1,2-rasmlar).



a b

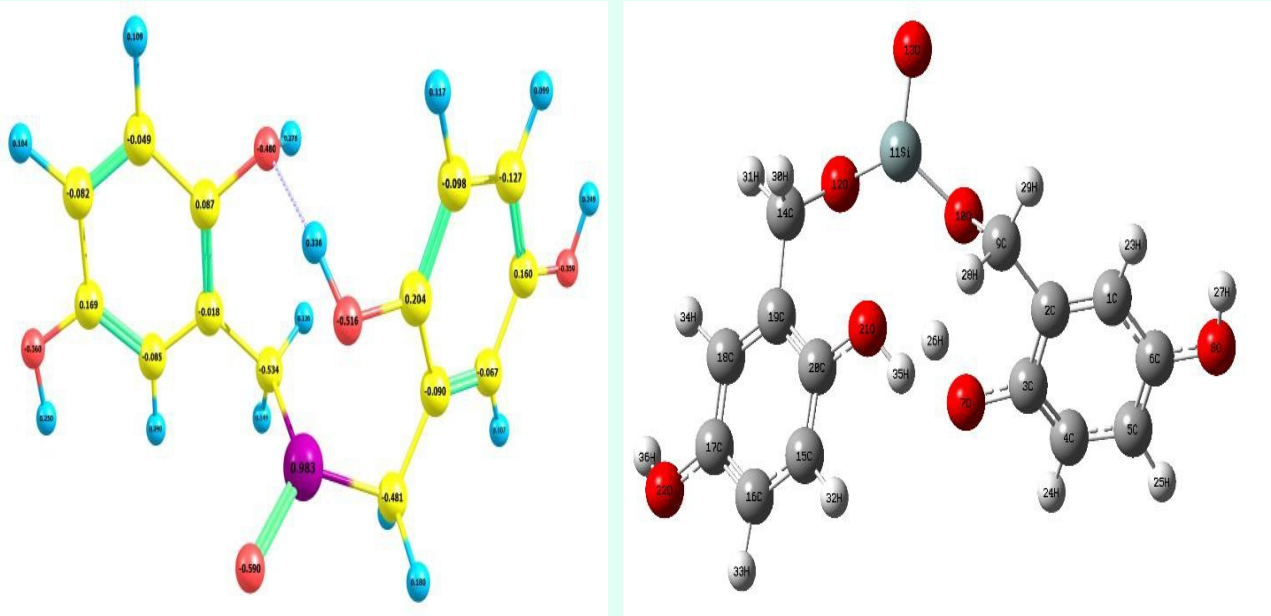
1 - rasm. a- formalin molekulasidagi zaryadlarning taqsimlanishi
a- gidroxinon molekulasidagi zaryadlarning taqsimlanishi



2 - Rasm. Formaldegid molekulasining elektron taqsimot

O‘rganilgan molekulalarda zaryadlarning atomlarda taqsimlanishi shuni ko‘rsatadiki, boshlang‘ich moddalar molekulalarining manfiy va musbat zaryadi taqsimoti asosida ularning reaksion qobiliyati yuqori va turli xil birikmalar bilan reaksiyaga kirisha oladi.

Yuqoridagilarga asoslangan holda karbamidning formaldegid bilan hosil qilgan monometilol hosilasiga tetraetoksisilan birikishi biz o‘tkazgan tajribalarda oraliq holat hisoblanishini e’tiborga olgan holda elektron tuzilishi va zaryad taqsimlanishi o‘rganildi (3-rasm).



3-расм. Sintez qilingan kremniyorganik birikmadagi zaryad taqsimoti.

Organosilikon moddalar sintezi uchun tanlangan moddalarni kvant-kimyoviy hisoblashlari o‘rganildi va olingan natijalar quyidagi 1 -jadvalda keltirildi. Tanlangan molekulalarning elektron tuzilishi va energetik xossalari (umumiy energiyasi, hosil bo‘lish energiyasi, hosil bo‘lish issiqligi, elektron energiyasi, yadro energiyasi, dipol momenti, kislorod atomining zaryadi) va ulardagi reaksion markaz oldidan aniqlash imkonini beradi[6].

1 - jadval

Kvant-kimyoviy hisoblashlar tahlili

Atom	**Atom bog‘i**	**Bog‘ uzunligi (°A)**	**Atom burchagi**	**Burchak (°)**	**Ikkinchi atom burchagi**	**Ikkinchi burchak (°)**	**Ikkinchi burchak turi**
C(1)							
C(2)	C(1)	1.341					
C(3)	C(2)	1.358	C(1)	118.646			
C(4)	C(3)	1.341	C(2)	117.461	C(1)	-9.540	Ikki burchakli
C(5)	C(4)	1.376	C(3)	124.298	C(2)	12.853	Ikki burchakli

C(6)	C(1)	1.380	C(2)	123.423	C(3)	0.682	Ikki burchakli
O(7)	C(3)	1.367	C(2)	123.269	C(4)	118.156	Pro-R
O(8)	C(6)	1.350	C(1)	120.037	C(5)	121.983	Pro-R
C(9)	C(2)	1.538	C(1)	124.842	C(3)	116.510	Pro-R
O(10)	C(9)	1.380	C(2)	107.720	C(1)	121.698	Ikki burchakli
Si(11)	O(10)	1.651	C(9)	124.003	C(2)	173.662	Ikki burchakli
O(12)	Si(11)	1.628	O(10)	115.503	C(9)	-136.555	Ikki burchakli
O(13)	Si(11)	1.532	O(10)	115.485	O(12)	119.452	Pro-R
C(14)	O(12)	1.409	Si(11)	119.844	O(10)	116.692	Ikki burchakli
C(19)	C(14)	1.543	O(12)	118.086	Si(11)	-94.732	Ikki burchakli
C(18)	C(19)	1.339	C(14)	118.020	O(12)	-121.268	Ikki burchakli
C(20)	C(19)	1.324	C(14)	123.039	C(18)	118.921	Pro-S
C(15)	C(20)	1.347	C(19)	120.203	C(14)	175.098	Ikki burchakli
C(16)	C(15)	1.380	C(20)	118.703	C(19)	11.416	Ikki burchakli
C(17)	C(18)	1.343	C(19)	123.279	C(14)	177.125	Ikki burchakli
O(21)	C(20)	1.340	C(15)	118.523	C(19)	120.672	Pro-S
O(22)	C(17)	1.360	C(16)	118.716	C(18)	124.182	Pro-R
H(23)	C(1)	1.057	C(2)	122.967	C(6)	113.371	Pro-R
H(24)	C(4)	1.056	C(3)	117.799	C(5)	117.653	Pro-S

H(25)	C(5)	1.079	C(4)	118.667	C(6)	124.097	Pro-S
H(32)	C(15)	1.085	C(16)	118.603	C(20)	122.508	Pro-R
H(33)	C(16)	1.145	C(15)	120.218	C(17)	118.106	Pro-R
H(34)	C(18)	1.087	C(17)	115.048	C(19)	121.434	Pro-R
H(28)	C(9)	1.115	C(2)	113.866	O(10)	106.500	Pro-S
H(29)	C(9)	1.088	C(2)	103.457	O(10)	112.054	Pro-R
H(30)	C(14)	1.105	O(12)	110.591	C(19)	108.844	Pro-S
H(31)	C(14)	1.133	O(12)	97.354	C(19)	118.197	Pro-R
H(26)	O(7)	1.229	C(3)	109.775	C(2)	-1.245	Ikki burchakli
H(27)	O(8)	0.964	C(6)	108.621	C(1)	-4.416	Ikki burchakli
H(35)	O(21)	0.989	C(20)	112.810	C(15)	28.667	Ikki burchakli
H(36)	O(22)	0.981	C(17)	113.197	C(16)	-157.576	Ikki burchakli

Xulosa qilib aytganda, kvant-kimyoviy tahlil qilingan reagent va mahsulotlarning umumiy energiyasi, hosil bo‘lish energiyasi, hosil bo‘lish issiqligi, elektron energiyasi, yadro energiyasi, dipol momenti, kislorod atomining zaryadi qiymatlari, bog uzunligi, bog’lar orasidagi burchak, zaryad taqsimoti, elektron taqsimoti natijalari umumiy qonuniyatlarga mos ekanligidan dalolat beradi. Kimyoviy reaksiyalarni rejalashtirishda, ayniqsa reaksiyalarni texnologik parametrlarini aniqlash va texnologiyasini ishlab chiqishda boshlang‘ich kimyoviy moddalarni kvant-kimyoviy hisoblashlarini amalga oshirish, olingan natijalarni matematik modellashtirishni amalga oshirish muhim hisoblanadi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Игнатов С. К. Квантово-химическое моделирование молекулярной структуры, физико-химических свойств и реакционной способности //Нижн. Новгород. – 2006. С. 35-37.
2. Рахимов Ф. Ф., Беков У. С. Квантово-химические расчёты зарядов кремниорганических соединений-как основа устойчивости промежуточного и переходного состояний //Universum: химия и биология. – 2022. – №. 5-2 (95). – С. 47-50.

3. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. – 2010. С. 26-28.
4. Бахромов Х. К., Ниязов Л. Н. Квантово-химический расчет производной салициловой кислоты с пиримидином //Universum: химия и биология. – 2020. – №. 3-2 (69). – С. 36-38.
5. Firuz R., Gulhayo X. Gidroxinonning va gidroxinon asosida olingan kremniyorganik birikmaning kimyoviy tahlili. – 2023. 2-6 b.
6. Frisch, M. J. Gaussian 09, Revision A.02, [electronic resource] // M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Adamo, Pomelli, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, V. G. Zakrzewski, G. A. Voth, P. Salvador, J. J. Dannenberg, S. Dapprich, A. D. Daniels, O. Farkas, J. B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D. J. Fox – Wallingford CT : Gaussian, Inc., 2009.