

AURIN MOLEKULASINI CHEMOFFICE DASTURI YORDAMIDA YAMR (C13, H1) VA IQ SPEKTRLARINI NAZARIY TAHLIL QILISH

M.R.Yuldasheva

O'zbekiston Milliy universiteti k.f.d,dotsent

F.M.Sobirjonov

O'zbekiston Milliy universiteti magistranti

Annotatsiya: Ushbu izlanishimizda ChemOffice dasturi yordamida ayrinting YaMR-H1 va YaMR-C13 natijalari, IQ spektr yani Raman spektrlari o'rganish natijalari keltirilgan.

Kalit so'z : Aurin, ChemOffice dasturi, YaMR-H1, YaMR-C13, IQ spektr, Raman spektr, grafik funksiyalar.

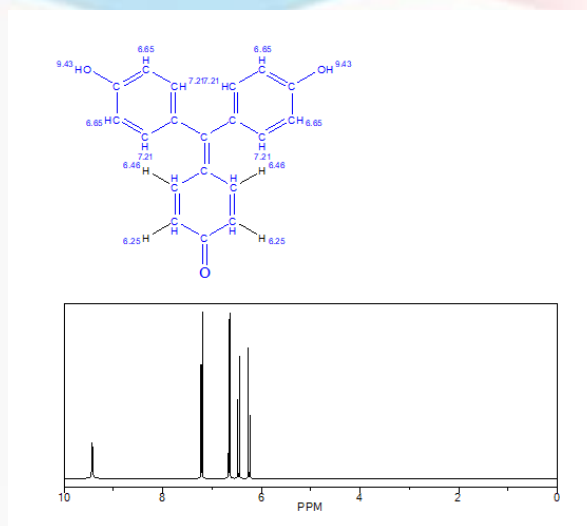
KIRISH

ChemOffice dasturlar jamlanmasi yordamida modda tuzilishini chizib, uning YaMR va PMR spektrlarini olib ularni qayta ishlash bilan shug'ullanadi. . Aurin oksalat kislotadan xosil bo'lgan chumoli kislota va fenolning kondensatsiyalanish reaksiyasidan xosil bo'ladi Organik birikmalarning reaksiyon qobiliyatini tushuntirishda ularning nisbiy zichligidan foydalaniladi. Organik reaksiyalarda esa ko'pincha eski kovalent bog'larning uzilishi va yangilarining hosil bo'lishi kuzatiladi. Organik reaksiyalar juda murakkab bo'lib, bir necha bosqichlarda borishi, hatto sxemadagi tasvirlashga mos kelmaslihi mumkin. Kimyoviy reaksiyaning yo'nalishi ta'sirlashuvchi molekulalardagi elektronlarning qanday taqsimlanganligiga bog'liq. Molekuladagi elektron zichlikning taqsimlanishi va yangi bog' hosil bo'lish imkoniyatlarini jamlagan omillar kimyoviy reaksiyalarning borishiga asosiy sabab bo'ladi. ChemOffice keng imkoniyatlarga ega bo'lib, kimyogarlarga to'liq ko'makchi vazifasini o'tay oladigan dastur. Dastur ikki o'lchamli birikma geometriyasini uch o'lchamli(3D) holatga o'tkaza oladi. Dasturning imkoniyatlari:

- a) Kimyoviy tuzilmalar va uskunlarni yaratish hamda tahlil qilish;
 - b) Kengaytirilgan grafik funksiyalar;
 - c) Moddalar nomini tuzulishga va birikmaning nomi orqali tuzulishga aylantirish xususiyati;
 - d) YaMR spektrlarini simulatsiya qilish;
 - e) Kimyoviy formulalar va tuzilmalarni tekshirish vositalari va hokazo[1-5]
- Olingan natijalar tahlili

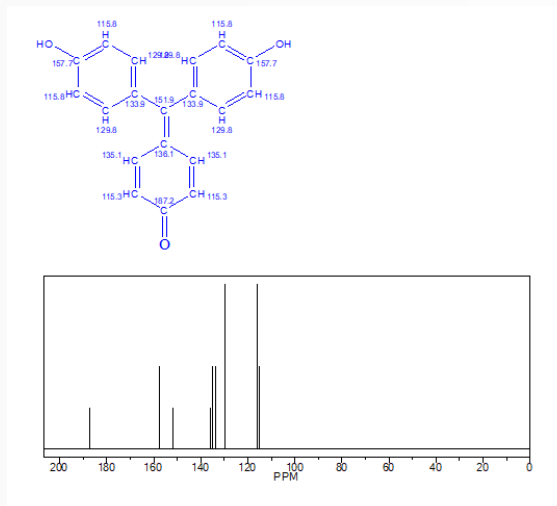
Aurinning reaksiyon faolligini o'rganishda ChemOffice dasturidan foydalandik. Hisoblash jarayonlari molekulyar mexanika usulida olib borildi. Olingan natijalar quyidagi spektrlarda keltirilgan. Aurin moddasining ayrim fizik-kimyoviy doimiyliklarini o'rganish bilan bir qatorda, tuzilishini o'rganish maqsadida ChemOffice dasturi yordamida turli kvant kimyoviy hisob-kitob ishlarini olib bordik.

1-rasm. Aurin molekulasining YaMR-H1 spektri



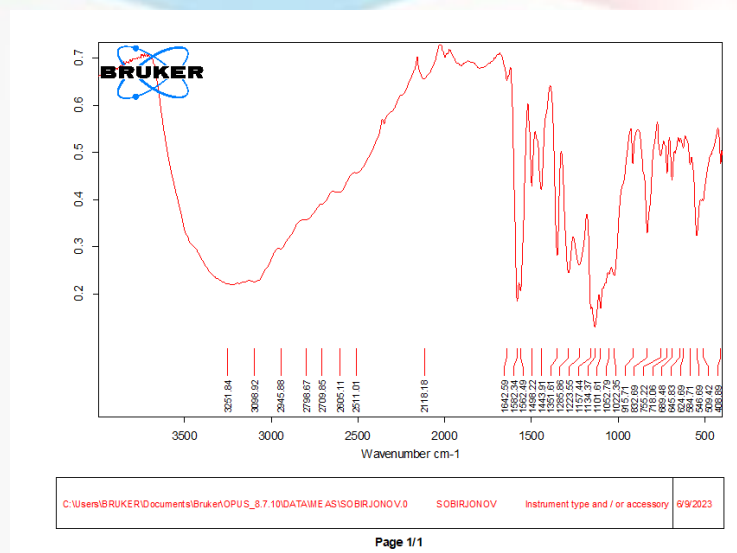
ChemDraw dasturi yordamida Aurinning YaMR – H1 spektr natijasiga ko'ra A2 ,B2 ,C4 , D4, F2 sohalarda signal berdi.3va 5- uglerod atomidagi vodorod atomlari bir-biriga ekvivalent bo'lgani sababli 6.25 m.u sohada dublet signal, 2 va 6 - uglerod atomidagi vodorod atomlari bir-biriga ekvivalent bo'lgani sababli 6.46 m.u sohada dublet signal ,11-13 va 17-18- uglerod atomidagi vodorod atomlari bir-biriga ekvivalent bo'lgani sababli 6.65 m.u sohada dublet signal, 10-14 va 15-16- uglerod atomidagi vodorod atomlari bir-biriga ekvivalent bo'lgani sababli 7.21 m.u sohada dublet signal, halqalardagi gidroksil guruhidagi vodorod atomlari bir-biriga ekvivalent bo'lgani sababli 9.43 m.u sohada singlet signallar oldik.

2-rasm. Aurin molekulasining YaMR-C13 spektri



YaMR – C13 spektr natijasini tahlil qilsak, Aurin tarkibidagi 3 va 5- uglerod atomlari 115.3 m.u sohada, 11-13 va 17-18- uglerod atomlari 115.8 m.u sohada,10 va 15-- uglerod atomlari 129.8 m.u sohada, 8va 9-uglerod atomlari 133.9 m.u sohada, 1- uglerod atomlari 136.1 m.u sohada, 7- uglerod atomlari 151.9 m.u sohada, 12 va 19- uglerod atomlari 157.7 m.u sohada, 4- uglerod atomlari 187.2 m.u sohada signallar kuzatildi.

3-rasm. Aurinning ChemOffice dasturida olingan IQ spektri



Tajriba qism

Aurinning YaMR (H1 , C13) va IQ spektrlari ChemOffice dasturi yordamida o'rganildi.

XULOSA

Aurinning ChemOffice dasturi yordamida olingan YaMR va IQ spektrlarini tahlil qilindi. Bunda hosil bo'lgan signallar qaysi funksional guruhlarga tegishli ekanligi ko'rsatildi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI:

1. Соловьев, М. Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М. Соловьев. Москва : СОЛОН-Пресс, 2005. – 536 с.
2. D.J. Bekchanov, R.A. Eshchanov, A.X. Xaitboyev, A.G. Eshimbetov Kompyuter kimyo o'quv qo'llanma, Toshkent-2020. 184 b.
3. A.X. Xaitboyev, X.S. Toshev, S.A.Maulyanov Organik birikmalarni UB va IQ spektr usullari yordamida tahlil qilish o'quv qo'llanma, Toshkent-2020.