

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ**

ТЕРМИЗ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

**“АНАЛИТИК КИМЁ ФАНИНИНГ ДОЛЗАРБ
МУАММОЛАРИ”
IV РЕСПУБЛИКА ИЛМИЙ-АМАЛИЙ АНЖУМАНИ**

ИЛМИЙ МАҚОЛАЛАРИ ТЎПЛАМИ

II QISM

1-3 май 2014 йил

ТЕРМИЗ-2014 й

Торсион бурчак, °	3,771	3,249	2,894	2,771
-------------------	-------	-------	-------	-------

Ўртача абсолют хатолик-(Mean absolute error-MAE) [4]:

f_i -назарий ҳисобланган геометрик параметрлар,
 y_i -РТТ да аниқланган геометрик параметрлар

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |f_i - y_i|$$

Ҳисоблаш натижаларига кўра энг кам ЎАХ нозмпирик усулида топилди. Яримэмпирик усуллардан РМ6 ва РМ7 РМ1 методига нисбатан камроқ ЎАХ кўрсатиши аниқланди. Олинган маълумотлар бетулин ҳосилаларини математик моделлаш изланишларида қўлланилиши мумкин.

Адабиётлар

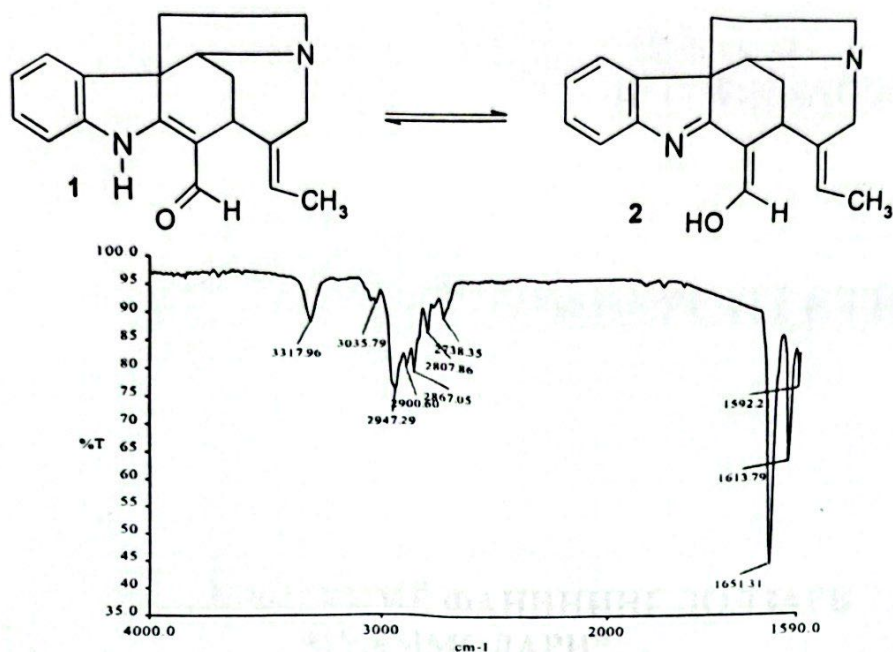
1. J.J.P. Stewart. Mopac-2012 program package for Windows. www.openmopac.net
2. Alex A. Granovsky, Firefly version 8.0.1, <http://classic.chem.msu.su/gran/gamess/index.html>
3. Т.Н.Дребущак, М.А.Михайленко, М.Е.Брезгунова, Т.Р.Шахтшнейдер, С.А.Кузнецова, Журн. Структур. Хим.- 2010. Т.510.-С. 823.
4. G.B. Rocha, R.O. Freire, A.M. Simas, J.J.P. Stewart, J.Comput.Chem.- 2006.Vol.27.-P. 1101-1111.

НОРФЛУОРОКУРАРИН АЛКАЛОИДИНИНГ КЕТО-ЕНОЛ ТАУТОМЕРЛАРИНИ ИҚ-УСУЛИ ЁРДАМИДА ЎРГАНИШ

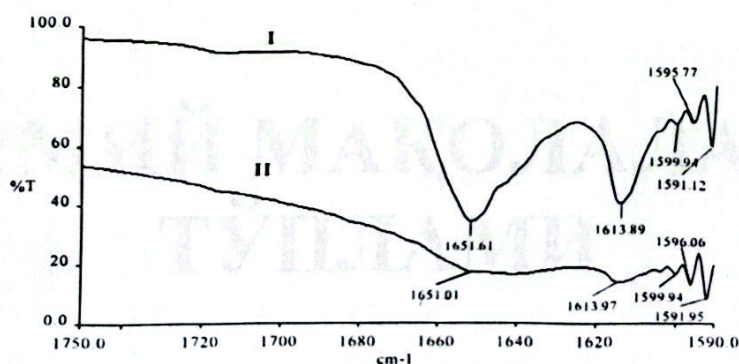
*А.Г. Ешимбетов, М.М. Мирзаева, П.Х. Юлдашев, Б. Таиҳоджаев
 ЎзР ФА С.Ю. Юнусов номидаги Ўсимлик моддалари кимёси институти.*

Норфлуорокурарин алкалоиди нейтрал ва кислотали муҳитда кето (1) таутомер ҳолатида бўлади. Ишқорий муҳитда кето таутомер ҳолатидан енол (2) ҳолатига ўтади [1]. Норфлуорокурариннинг кето формадан енол формага ўтишини ИҚ-усули ёрдамида ўрганиш мақсадида бирикманинг спектрини CCl_4 эритувчида ўргандик (1-расм). Лекин, ишқорнинг CCl_4 эритувчида эримаганлиги сабабли кейинги изланишлар эритмага бир томчи метанол қўшиш орқали давом эттирилди. Бу ҳолат фақат бошланғич ва охириги спектрларнинг $1590 - 1700 \text{ см}^{-1}$ соҳасидаги ўзгаришларни солиштириш имконини берди (2-расм).

Изланишлар натижасида ишқорий муҳитда $C=O$ гуруҳи валент тебранишлари натижасида юзага келган соҳа (1651 см^{-1}) ва $N-C=C$ -гуруҳига тегишли соҳа (1613 см^{-1}) интенсивлигининг кескин камайганлиги ҳамда $1590 - 1600 \text{ см}^{-1}$ -даги соҳалар интенсивлигининг ўзгармаганлиги кузатилди. Бу ҳолат норфлуорокурарин алкалоидининг кето таутомер ҳолатидан енол ҳолатига ўтишини ИҚ-усули ёрдамида ўрганиш мумкинлигини кўрсатди.



1-Расм. Норфлуорокурариннинг ИҚ-спектри. CCl_4 эритувчида ютиш қаватининг қалинлиги 2.73 мм бўлган KRS-5 кюветасида олинган.



2-Расм. Норфлуорокурариннинг CCl_4 ва MeOH аралашмасидаги ИҚ-спектри (I). II-эритмага ишқор қўшгандан кейинги ИҚ-спектри.

ИНГИБИРОВАНИЕ КОРРОЗИИ МЕТАЛЛОВ НА ОСНОВЕ АМИНО И ФОСФОРСОДЕРЖАЩИХ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЛЕЙ ДЛЯ ОБОРОТНОГО ВОДОСНАБЖЕНИЯ

Эшмаматова Н.Б., Акбаров Х.И., Ниязметов А.Р., Михлибаева Д. Ж., Батыршина Н. НУУз, г.Ташкент

Ингибиторы, применяемые в системах оборотного водоснабжения, наряду с высокой эффективностью защиты теплообменного оборудования от коррозии и отложений солей жесткости должны обладать низкой токсичностью. Осаждение защитных пленок на аппаратах можно применять лишь в том случае, когда они не служат для теплопередачи или когда осаждаемые пленки не ухудшают теплопередачу [1].