

Как видно из таблицы в составе углеводов присутствуют полисахариды арабиноглюкогалактаны – перспективные биополимеры для применения в медицине и других отраслях народного хозяйства. Наличие остатка уроновых кислот также характеризует о возможно высокой биологической активности углеводных компонентов корня Ревеня татарского.

ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ МОЛЕКУЛЫ N'- (4,6-ДИОКСО-1,3,5-ТРИАЗИНАН-2-ИЛИДЕН) -3-НИТРОБЕНЗОГИДРАЗОНА

Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Салимов Ф.Г.

Бухарский государственный университет

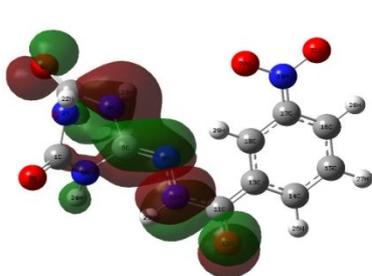
Благодаря развитию компьютерной технологии и теоретических методов изучения и расчета параметров распределения электронной плотности между атомами в сложных молекулах появились и развиваются программные обеспечения, позволяющие осуществления сложных квантово-химических расчетов (КХР) электронного строения и подробного исследования реакционной способности молекул химических веществ. На основании таких расчетов стало возможным изучение и точное установление электронного строения сложных соединений, а также прогнозировать реакционную способность в химических превращениях и предпочтительную конкуренцию донорных атомов, вновь синтезированных полифункциональных органических веществ в качестве лигандов [1-3].

Целью настоящего исследования является изучение электронной структуры и электронно-донорных возможностей вновь синтезированного N'-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)-3-нитробензогидразида с помощью КХР с применением программы Gaussian 09 методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP и применением псевдопотенциального базиса LanL2DZ. Использование данного метода осуществлены расчеты зарядов на атомах по Малликену, разницы энергий между высокой занятой (НОМО) и низкой незанятой (свободной или вакантной) молекулярных орбиталей (LUMO). Результаты расчета разницы НОМО-LUMO использовались для интерпретации результатов переноса заряда внутри молекулы [2].

По составу синтезированного соединения наиболее электронно избыточными, т.е. потенциально реакционно способными являются 3 (N2,N4,N6) эндоциклические гетероатомы азота цианурового кольца, 2 (N8,N10) гидразинного фрагмента атомы азота, 2 (O7, O9) экзоциклические и 1 (O12) периферийный карбонильные, а также 2 (O21, O22) нитритные атомы кислорода.

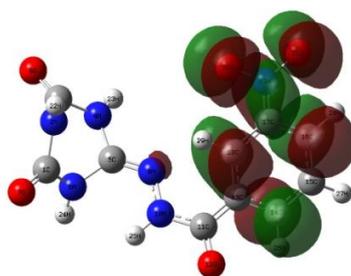
Полученные результаты свидетельствуют о том, что атом (O12) гидразонной группы имеет наиболее высокий отрицательный заряд (-0.539), за ним следуют циануровые карбонильные (O7, -0,495; O9, -0,479) и атомы кислорода (O21,-0,360; O21, -0,367) нитро-группы. Анализ распределения зарядов на атомах азота таково, что более высокие отрицательные заряды локализованы на атомах азота цианурового кольца (N2, -0,874; N6, -0,866) и далее на имидном атоме азоте (N10,-0,725) гидразонной группы. Но на втором атоме азота данного фрагмента заряд резко заниженный (N8,-0,155), а атом азота нитрогруппы имеет слабый положительный заряд (N19, +0,074), что свойственно этой группе. Из этого следует что, хотя атомы кислорода являются более электроотрицательными и поэтому, предположительно, должны были предпочтительно более реакционно способными центрами, однако, судя по результатам КХР таковыми являются атомы азота цианурового гетероцикла и имидный атом азота гидразонной части молекулы.

Результатами КХР выявлены фронтальные (граничные) молекулярные орбитали в основном и возбужденном состояниях синтезированного соединения.



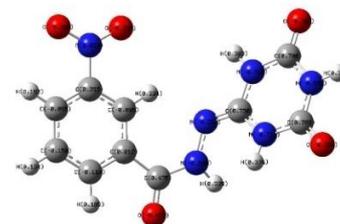
$$E_{(\text{HOMO})} = -0.28143 \text{ эВ}$$

Электронная строение молекулы ВЗМО



$$E_{(\text{LUMO})} = -0.14442 \text{ эВ}$$

Электронная строение молекулы НСМО



Распределение заряда по Малликену молекулы

На основе полученных результатов КХР сделан вывод, что изучаемая молекула обладает различными реакционными центрами электрофильного и нуклеофильного взаимодействия в процессах органического синтеза, а также конкурентно способными донорными N,O-атомами в качестве лиганда различной функцией при взаимодействии электроноакцепторными металл-ионами. Видимо, в последнем немаловажную роль будут играть не только электронный фактор донорных атомов, но и их пространственное расположение и доступность в донорно-акцепторных взаимодействиях, а также конфигурация и природа акцептирующих электронных орбиталей центрального иона. Результаты более детального и глубокого исследования этих особенностей будут предметом наших последующих сообщений.

Список литературы:

1. C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, Phys. Rev. B 1988, 37, 785.
2. N.Q. Мухамадиев. Математическое моделирование структуры и свойств химических соединений // - Ташкент. НМИУ имени Чолпона. 2016 г. 103-106 г. (узб).
3. Pereira F. et al. Machine learning methods to predict density functional theory B3LYP energies of HOMO and LUMO orbitals //Journal of chemical information and modeling. – 2017. – Т. 57. – №. 1. – С. 11-21.

OKSIETILIDENDIFOSFON KISLOTA SINKATI СИНТЕЗИ ВА ҚЎЛЛАНИЛИШ

Давлятова З.М., Qodirov X.E.

Fargona politexnika instituti

Respublikamizda OEDF va NTF рух комплексонатлари олишнинг барча имкониятлари бор. OEDF-Zn синтез қилишнинг биз таклиф etayotgan usuli ko'p atomli spirtlar initsiatorligi bilan suvli eritmalarda amalga oshiriladi. Buning uchun 24,9 g suvda 0,1 g ko'p atomli spirt hamda 5,3 g oksietilidendifosfon kislota eritib olinib, so'ngra unga avvaldan hisoblangan miqdordagi rux oksidi (yoki gidroksidi) qo'shiladi. Muntazam aralashtirish rux oksidi to'liq erigunicha va shaffof eritma hosil bo'lguncha davom ettiriladi. Eritmani aralashtirishni to'xtatmay turib, bosqichma-bosqich maydalangan ishqor qo'shiladi va jarayon harorati nazorat qilinadi. Olingan mahsulot avval xona xaroratigacha sovutilib, so'ngra quritiladi. Bunda shaffof, suvda yaxshi eriydigan gelsimon mahsulot hosil bo'ladi. Mahsulot quritilib, maydalanadi. Reaksiya unumi 98,0 % va mahsulot sofliги 99,8 % ni tashkil etdi.

Kompozitsiyalarni tayyorlash uchun quritish va maydalash bosqichlari o'rni, olingan mahsulotni sovutib, avvaldan 1 : 1 xajm nisbatlarida tayyorlab olingan monoetanolaminni vakuumda haydash kub qoldig'i (yoki poliaminokrotonol) va ekstraksiон fosfor kislotasi aralashmasini qo'shish bilan almashtiriladi.

Metall kompleksонатлари синтези nozik organik синтез bo'lib, bunda reagentlarning qo'shilish ketma-ketligiga, ularning nisbati, miqdori, reaksiya sharoitiga qat'iy rioya qilinishi kerak.

OEDF рух комплексонатининг hosil bo'lish tezligini 3 bosqichga bo'lib o'rganish maqsadli: 1-bosqich – OEDF eritmasini tayyorlash; 2-bosqich – eritmaning rux oksidi (gidroksidi) bilan ta'sirlashuvi; 3-bosqich – o'yuvchi ishqorning reaksiyasi.