

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАЛОНОИЛГИДРАЗОН САЛИЦИЛОВОГО АЛЬДЕГИДА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

Абдурахмонов Сайфиддин Файзуллаевич

базовый докторант,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара
E-mail: abdu_sayfiddin@mail.ru

Умаров Бако Бафоевич

д-р хим. наук, профессор,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара

Ганиев Бахтиёр Шукуруллаевич

преподаватель,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара
E-mail: b.ganiyev1990@gmail.com

Худоярова Эйтибор Ахатовна

преподаватель,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара

Салимов Фуркат Гайрат угли

студент,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара

STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF MALONOYLHYDRAZONE SALICYL ALDEHYDE USING QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS

Sayfiddin Abdurakhmonov

Doctorant of Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara

Bako Umarov

Doctor of Chemistry, Professor of Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara

Bakhtiyor Ganiyev

Teacher of Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara

Etibor Khudoyarova

Teacher of Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara

Furqat Salimov

Student of Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara

АННОТАЦИЯ

В статье представлены квантово-химические расчеты N¹,N³-бис ((E)-2-гидроксibenзилиден) малонилгидразон-зона, произведенных в программах ChemCraft 1.8 и Gaussian. Используются композитные методы семейства Gaussian (G4), а также методы теории функционала плотности (DFT) (BLYP/6-311+G (d,p)).

Библиографическое описание: Исследование электронной структуры малонилгидразон-салицилового альдегида с помощью квантово-химических расчетов // Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. Абдурахмонов С.Ф. [и др.]. 2020. 12(78). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/10999>

ABSTRACT

This article presents quantum-chemical calculations of N'1,N'3-bis ((E)-2-hydroxybenzylidene) malonoilhydrazone produced in the ChemCraft 1.8 and Gaussian programs. Composite methods of the Gaussian family (G4) and density functional theory (DFT) methods (BLYP / 6-311 + G (d, p)) were used.

Ключевые слова: молекула, заряд, структура, квантово-химический расчет.

Keywords: molecule, charge, structure, quantum-chemical calculations.

Введение

Гидразоны играют важную роль в неорганической, органической, аналитической химии и медицине из-за их способности образовывать большое количество разнообразных стабильных соединений и комплексов при координации с различными ионами переходных металлов. Гидразоны, благодаря своему строению и потенциальной способности, выполнять функции биядерных гексадентатных лигандов при комплексообразовании, а также высокой биологической активности, обуславливающая противовоспалительные, антиоксидантные, противоопухолевые и противовирусные свойства, привлекают в настоящее время все большее внимание [1,2]. При этом простота синтеза таких лигандов на основе дигидразонов различных карбонильных соединений, их характерное геометрическое строение, практическая универсальность, позволяет получать на их основе многие координационные соединения с переходными металлами, которые обладают многофункциональными, а порой, уникальными свойствами [3,10].

В настоящее время квантово-химические методы расчета являются наиболее важным и удобным способом изучения электронной структуры вещества. На основании квантово-химических расчетов возможно изучение электронной структуры сложных соединений. Это также позволяет прогнозировать конкурирующие донорные центры, в которых координируются полифункциональные лиганды [4-6,9].

Целью настоящего исследования является изучение электронной структуры малоноилгидразона салицилового альдегида с помощью квантово-химических расчетов. В частности, проведены расчеты

зарядов Малликена, распределение потенциальной энергии (PED) в соответствии с теорией функционала плотности (DFT), разницы энергий между высокой занятой орбиталью (НОМО) и низкой незанятой (свободной) молекулярной орбиталью (LUMO). Результаты расчета НОМО-LUMO использовались для интерпретации информации о переносе заряда внутри молекулы.

Экспериментальная часть

N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксibenзилиден) малоноилгидразон был синтезирован взаимодействием спиртового раствора дигидразида малоновой кислоты со спиртовыми растворами эквимолярным количеством соответствующего свежерегнанного салицилового альдегида по [7,8].

Изучение электронной структуры лиганда N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксibenзилиден) малоноилгидразона было выполнено квантово-химическим расчетом с применением программы Gaussian 09 методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP и применением псевдопотенциального базиса LanL2DZ [1]. Квантово-химические исследования проводились в несколько этапов: разработка теоретической модели исследуемого вещества, оптимизация и расчет физико-химических параметров, обработка и визуализация полученных результатов [2].

Результаты исследования

Результаты квантово-химических расчетов N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксibenзилиден) малоноилгидразона представлены в таблице.

Таблица 1.

Результаты квантово-химических расчетов

Вещество	$E_{\text{сис}}, \text{Ha}$	$\mu_{\text{общий}}, \text{дебай}$	$\mu_x, \text{дебай}$	$\mu_y, \text{дебай}$	$\mu_z, \text{дебай}$	Conv
H ₄ L	-1177.22	4.966	4.3809	-2.3385	0.0577	0.658D-08

В ходе исследований было изучено распределение заряда по Малликену молекулы N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксibenзилиден) малоноилгидразона.

Теоретические квантово-химические исследования выявили фронтальные (граничные) молекулярные орбитали в основном и возбужденном состоянии лиганда (рис.1.).

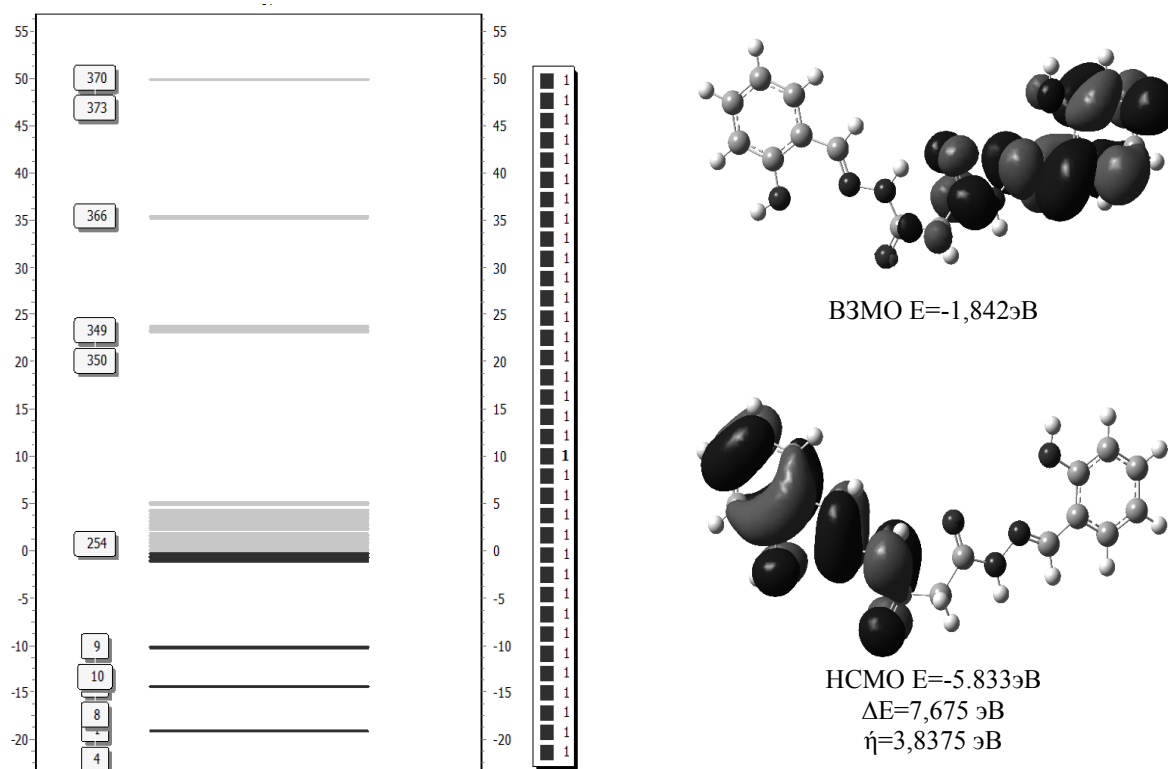


Рисунок 1. Диаграмма энергетических уровней МО (ВЗМО-НСМО) N¹,N³-бис-((E)-2-гидроксибензилиден) малонилгидразона

Атом кислорода гидроксильной группы лиганда имеет самый высокий отрицательный заряд (-0,566 эВ) в бензольном кольце. Кроме того, у атомов азота электронная плотность (N³⁵ = -0.562 эВ, N³⁷ = -0.554 эВ) тоже высока.

Из данных видно, что в N¹,N³-бис ((E)-2-гидроксибензилиден) малонилгидразона наблюдается сопряжение, осуществляемое за счет π-электронов в бензольном кольце и имидных (-NH), иминных (=N), гидроксо (=O) групп в гидразоне, которые имеют неподеленные электронные пары (положительный мезомерный эффект (-M)). В результате сопряжения наблюдается перераспределение электронной плотности.

Заключение

Из квантово-химических расчетов можно сделать вывод, что молекула N¹,N³-бис((E)-2-гидроксибензилиден) малонилгидразона будет координироваться с атомами азота и кислорода при синтезе комплексных соединений. А также образовывать комплексные соединения с некоторыми 3d-металлами (Cu²⁺, Ni²⁺ и др.) в соотношении 2:1, координируясь гетероатомами N-C=O, C=N-NH и C-O⁻ фенола, завершая координационное число металла-комплексообразователя до четырех молекулами аммиака или пиридина.

Список литературы:

1. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle-Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Physical review B. – 1988. – Т. 37. – №. 2. – С. 785.
2. Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Синтез и исследование методами ИК-спектроскопии и квантовой химии -6-((2,4-динитрофенил) гидразон-1,3,5-триазинан-2,4-диола // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 6(72). – С. 68-73.
3. Ахмедов В.Н., Олимов Б.Б., Назаров Ш.К. Электронная структура и квантово-химические расчёты виниловых эфиров фенолов // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 4(70). – С. 53-56.
4. Абдурахмонов С.Ф., Худоярова Э.А., Умаров Б.Б. Гетеробиядерные комплексы меди(II) и никеля(II) на основе бис-5-оксипиразолинов // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2019. № 10(64). С. 50-55.
5. Prabavathi N, Nilufer A, Krishnakumar V. Quantum mechanical study of the structure and spectroscopic (FT-IR, FT-Raman, 13C, 1H and UV), NBO and HOMO-LUMO analysis of 2-quinoxaline carboxylic acid. Spectrochimica acta. Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2012 Jun;92:325-335. DOI: 10.1016/j.saa.2012.02.105.
6. Ганиев Б.Ш., Умаров Б.Б., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г., Аслонова Ф.С. Синтез, строения, таутомрия и исследование некоторых квантово-химических параметров соединения 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразин-карбоксамид. // Евразийский Союз Ученых (ЕСУ) - 2020. - №. 7(76). – С. 65-68.

7. Современные проблемы синтеза и исследования органических соединений. Под ред. Р.Р. Костикова. - Л.: Изд-во Ленинградского госуниверситета, 1990.- 156 с.
8. Абдурахмонов С.Ф., Умаров Б.Б., Худоярова Э.А. Синтез и исследование методами ИК спектроскопии и квантовой химии малоноилгидраза салицилового альдегида //Universum: химия и биология. – 2020. – № 10-2 (76). - С. 5-9.
9. Худоярова Э.А., Абдурахмонов С.Ф. Двухядерные комплексы Ni(II) с продуктом конденсации бензоилацетона и дигидразида субериновой кислоты // Ученый XXI века.- 2016.- №. 2-1.- С. 15-19.
10. Ganiyev B., Ostonov F., Kholikova G., Salimov F. Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide // International Independent Scientific Journal. 2020. Vol.2. №. 16. P. 3-9.