



ATSETOATSETANILIDNING ATSETIL GIDRAZONINING SPEKTRAL TADQIQOTI VA HIRSHFELD YUZASI TAHLILI

H.S.Aminova

Buxoro davlat universiteti

S.Z. Sattorova

Buxoro davlat universiteti

S.F. Abduraxmonov

Buxoro davlat universiteti

E.A. Xudoyarova

Buxoro davlat universiteti

B.B. Umarov

Buxoro davlat universiteti

Annotatsiya: Ushbu maqolada asetoasetanilid atsetilgidrazonning RSA natijalari, tuzilishi va Hirshfeld yuza tahlili muhokama qilinadi. Olingan yangi moddaning RSA natijalariga asosan moddaning kristall tuzilishi va geometrik hamda energetik parametrlari yoritilgan. Kristall tuzilishga asoslanib, Hirshfeld yuzasi tahlil qilindi. Kvant-kimyoviy hisoblash natijalariga ko'ra molekuladagi eng ko'p (HOMO) va eng kam (LOMO) ishg'ol qilingan molekulyar orbitallar energiyalari hisoblandi.

Kalit so'zlar: Hirshfeld yuza tahlili, RSA, HOMO, LOMO

Аннотация: В данной статье рассматриваются синтез, структура и свойства ацетилгидразона ацетоацетанилида. Проанализированы результаты термогравиметрического анализа (ТГА) полученного нового вещества. Структура вещества определено с использованием методов ИК- и УФ-спектроскопии.

Ключевая слова: Температура плавления, ТГА, внутримолекулярная водородная связь (ВМВС), лиганд, кетоэфир, кетоальдегид, дикетоамид, таутомерия.

Annotation: This article discusses the synthesis, structure and properties of acetylhydrazone acetoacetanilide. The results of thermogravimetric analysis (TGA) of the obtained new substance are analyzed. The structure of the substance is elucidated using IR and UV spectroscopy.

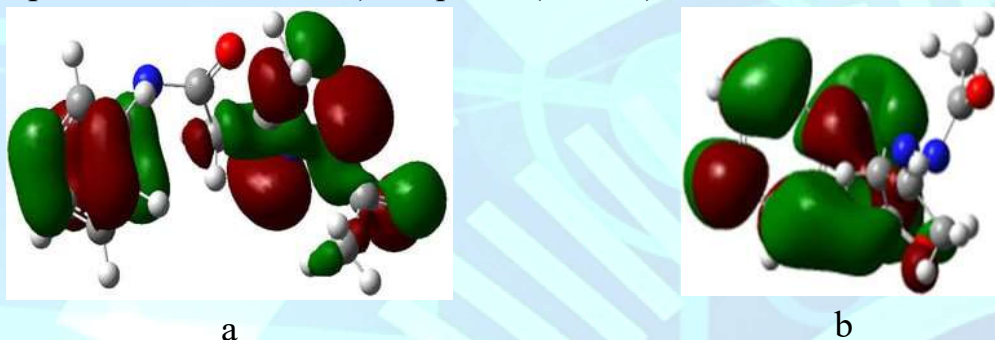
Key words: Melting point, TGA, intramolecular hydrogen bond (IMHB), ligand, ketoester, ketoaldehyde, diketoamide, tautomerism.

Kirish

Sintez qilingan moddaning nazariy modelini ishlab chiqish, fizik-kimyoviy ko'rsatkichlarni optimallashtirish va hisoblash, olingan natijalarni qayta ishlash va vizuallashtirish kvant-kimyoviy tadqiqotlar yordamida amalga oshirildi. Bu izlanishlarni Gaussian16W va Avogadro dasturlari yordamida amalga oshirdik.

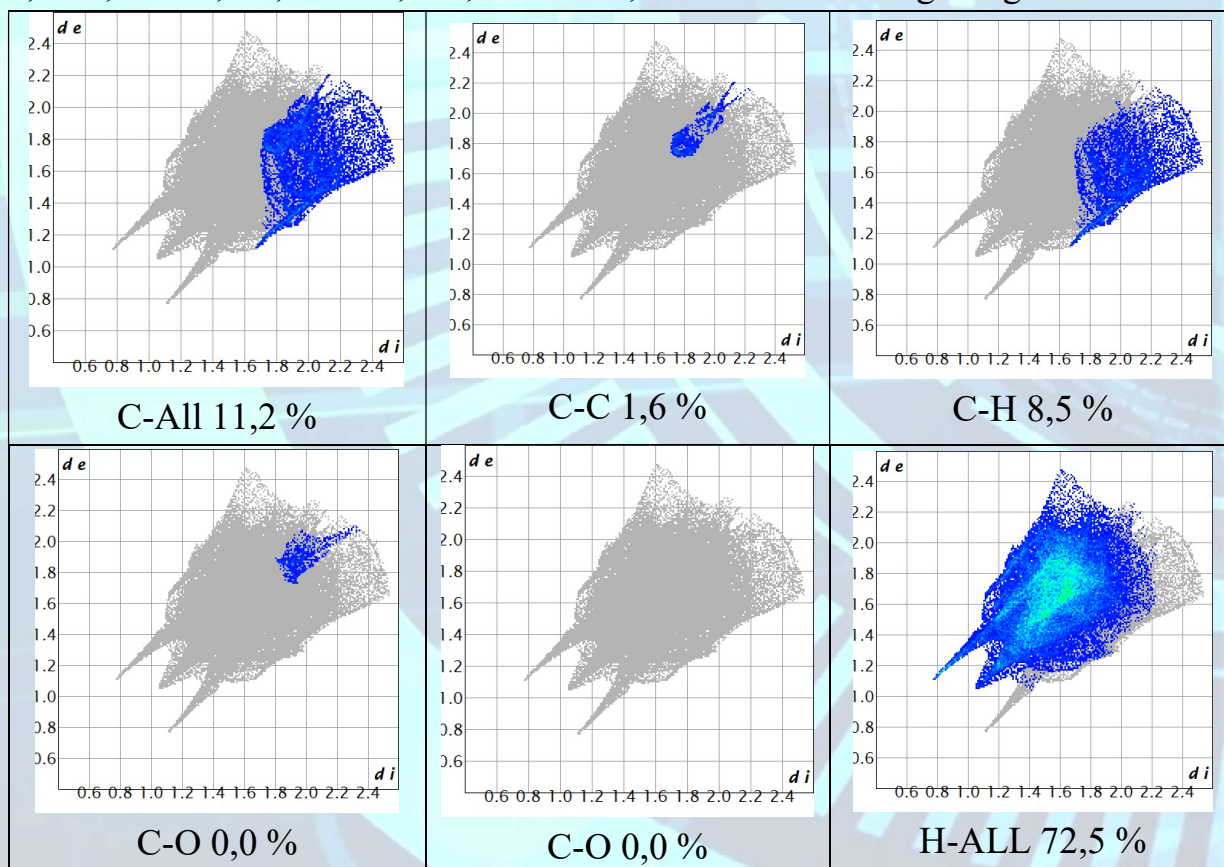


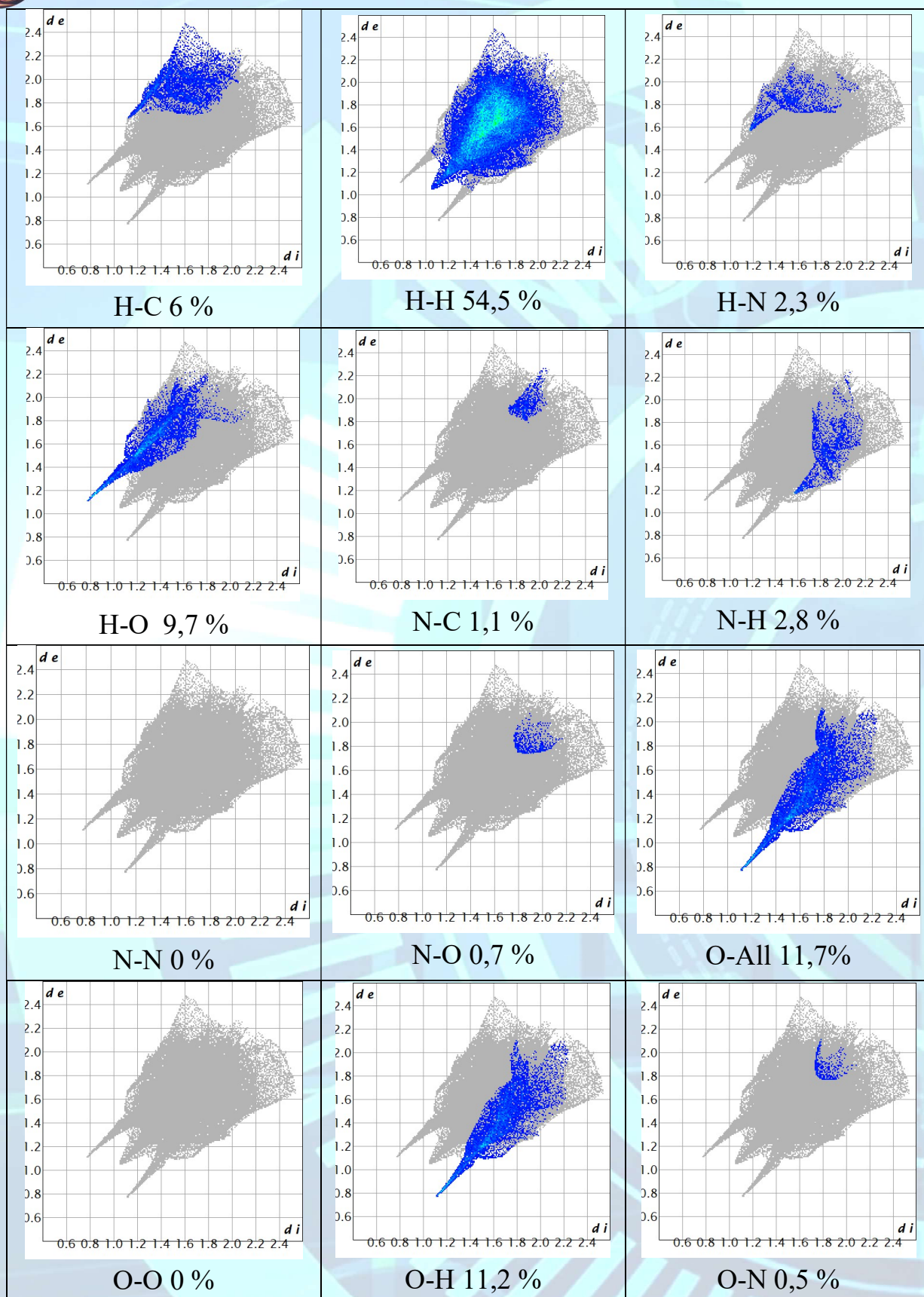
Molekulada eng ko'p ishlg'ol qilingan (HOMO - Highest occupied molecular orbital) va eng kam ishlg'ol qilingan molekulyar orbitall (LUMO- Lowest unoccupied molecular orbital) aniqlandi (7-rasm):



7-rasm. Eng ko'p ishlg'ol qilingan molekulyar orbitallar (HOMO) – a, eng kam ishlg'ol qilingan molekulyar orbitallar (LUMO) – b tasviri.

Ma'lumki RSA modda tuzilishi haqida eng aniq ma'lumot beradigan fizikaviy tadqiqot usuli hisoblanadi. Quyida atsetoatsetanilid atsetilgidrazonining CrystalExplorer dasturida yordamida moddalarning kristall struktura ma'lumotlaridan Hirshfeld yuzasi tahlili o'tkazildi. Molekuladagi o'zaro ta'sirlarning foiz hissalarini ko'rsatuvchi ikki o'lchovli barmoq izlari maydoni tasvirlari olindi va atomlararo ta'sirlarning ulushlari hisoblandi. Molekulada eng katta ulush ichki molekulyar (H-H 54,5%) va molekulalararo vodorod bog'lanishlar (H-ALL 72,5%,) hissasiga to'g'ri keladi. Eng kam ulushlar esa, C-O 0,0 % , N-C 1,1%, N-O 0,7 %, N-N 0 %, O-O 0 % ta'sirlarga to'g'ri keladi.





8-rasm. (E)-3-(2-atsetilgidrazinileden)-N-fenilbutanamidning Hirshfeld yuza tasviri.



1-jadval.

**(E)-3-(2-atsetilgidrazinileden)-N-fenilbutanamidning Hirshfeld yuza tahlili
barmoq izi sohasida atomlararo ulushlar**

Bog'lanishlar	C-All	C-C	C-H	C-N	C-O	H-All	H-C	H-H	H-N
Ulushlar	11,2	1,6	8,5	1,1	0,0	72,5	6	54,5	2,3
Bog'lanishlar	H-O	N-C	N-H	N-N	N-O	O-All	O-C	O-H	O-N
Ulushlar	9,7	1,1	2,8	0	0,7	11,7	0	11,2	0,5

Xulosa qilib aytganda, atsetoatsetanilidning atsetilgidrazonini olishning metodikasi ishlab chiqildi. Molekulaning eng ko'p band qilingan va eng kam band qilingan orbitallarining energiyalari kvant-kimyoviy hisoblash usullari yordamida hisoblandi. Kristall struktura ma'lumotlaridan foydalanib Hirshfeld yuza tahlili o'tkazildi. Olingan natijalar ko'ra, molekulada eng katta ulushlar ichki vodorod bog'lanish va molekulalararo vodorod bog'lanishlar hissasiga to'g'ri kelishi o'z tasdig'ini topdi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR:

1. Tursunov M.A., Umarov B.B., Avezov K.G. Synthesis and Crystal Structure of Nickel (II) and Zinc (II) Complexes with Benzoylacetic Aldehyde Derivatives // Moscow university chemistry bulletin.- 2019.- T. 74.- C.138-142.
2. Бобоева Б.Т. Синтез и исследование координационных соединений цинка (II) с парааминобензойной кислотой и ацетазоламидом. Дис. канд. хим. наук. Душанбе. ИХ АН РТ. 2012. 124 с.
3. Ишанходжаева М.М., Умаров Б.Б., Хусенов К.Ш., Парпиев Н.А. Влияние природы ацидолиганда на геометрическую структуру комплексов цинка (II) с 2-амино-1,3,4-тиадиазолом // Журнал общей химии.- 1998.- Т. 68. - №8.- С. 1368-1373.
4. Adiguzel R., Ergin Z., Sekerci M. Synthesis and Structural Characterization of Ni(II), Cu(II), Zn(II) and Cd(II) Complexes of bis(2-amino-1,3,4-thiadiazole) // Asian Journal of Chemistry.- 2010.- V. 22.- №5.- P.3895-3902.
5. Хусенов К.Ш., Умаров Б.Б., Ишанходжаева М.М., Парпиев Н.А., Талипов С.А., Ибрагимов Б.Т. Кристаллическая структура 2-амино-1,3,4-тиадиазола и его комплекса цинком (II) // Координационная химия. - Москва.- 1997.- Т.23.- №8.- С. 596-600.
6. Khusenov K.Sh., Umarov B.B., Ishankhodzhaeva M.M., Parpiev N.A., Talipov S.A., Ibragimov B.T. Crystal and molecular structure of a complex of zinc(II) nitrate with 2-aminol,3,4-thiadiazole // Журнал неорганической химии.- 1998. - № 43(12). - С.1976-1981.



7. Ишанходжаева М.М., Хусенов К.Ш., Умаров Б.Б., Парпиев Н.А., Александров Г.Г. Кристаллическая структура комплекса иодида цинка (II) с 2-амино-1,3,4-тиадиазолом // Журнал неорганической химии.- Москва.- 1998.- Т.43.- №11.- С. 1837-1839.
8. Умаров Б.Б., Абдурахмонов С.Ф., Худоярова Э.А., Сулаймонова З.А., Гайбуллаев Х.С. Парпиев Н.А. Биядерные комплексы никеля(II) с продуктом конденсации бензоилгидразида субериновой кислоты // Научный вестник БГУ-№3 (59) Бухара.-2015. 28-32 стр.
9. Худоярова Э.А., Абдурахмонов С.Ф. Двух ядерные комплексы никеля(II) с продуктом конденсации бензоилгидразида субериновой кислоты // Учёной XXI века международной журнал.- №2-1.- Москва.-2016.- С. 15-20
10. Турсунов М.А. Умаров Б.Б., Худоярова Э.А. Таутомерия в ряду бензоилгидразонов этилового эфира 2,4-диоксопентановой кислоты // “O`zbekistonda analitik kimyoning rivojlanishi istiqbollari” Respublika ilmiy-amaliy anjumani Toshkent-2018. 102-105 betlar.
11. Xudoyarova E.A., Abduraxmonov S.F., Umarov B.B. Para-[bis-1,4-(4,4,4-triflorbutandion-1,3)]-benzolning sintezi va spektral tadqiqotlari // Fan va texnologiyalar taraqqiyoti.- BuxMTI.- 2022.- №3. -92-99- betlar.