



## SIANUR KISLOTA SEMIKARBAZONINING YAMR-<sup>1</sup>H VA YAMR-<sup>13</sup>C SPEKTROSKOPIYASI

*Baxtiyor Shukurulloyevich Ganiyev*

Assistent, Buxoro davlat universiteti

*Hasan Tillayevich Avezov*

Kimyo fanlari nomzodi, dotsent, Buxoro davlat universiteti

*Furqat G`ayrat o`g`li Salimov*

Magistrant, Buxoro davlat universiteti

**Annotatsiya:** Ushbu maqolada sianur kislota semikarbazonining ChemDraw Professional 16.0, Chem3D 16.0, Gaussian 09w kabi dasturlari asosida nazariy va Agilent 400,13 MHz spektrometrida olingan amaliy YaMR-<sup>1</sup>H va YaMR-<sup>13</sup>C spektrlari tahlili keltirilgan.

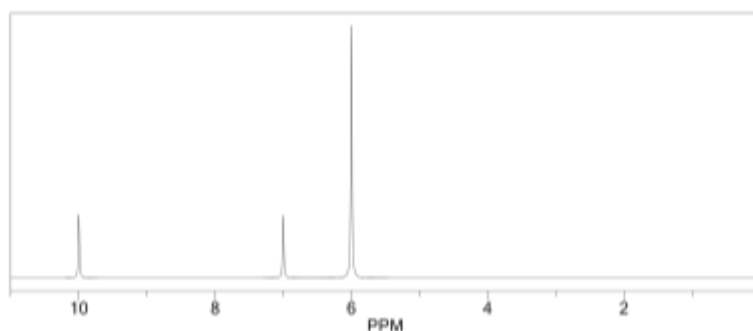
**Kalit so`zlar:** Chem Draw Professional 16.0, Chem3D 16.0, Gaussian 09w, kvant-kimyoviy tadqiqotlar, YaMR-<sup>1</sup>H, YaMR-<sup>13</sup>C, spektroskopiya.

Hozirgi zamonaviy texnologiyalar asrida, oddiy komputer dasturlari orqali fizikaviy tadqiqot usullari haqidagi bilimlarni egallashimiz, bor bilimlarimizni mustahkamlashimiz, hamda ulardan nazariy xulosalar chiqarishimiz mumkin. Buning uchun avvalo o`rganmoqchi bo`lgan yo`nalishimiz bo`yicha adabiyotlardan va internet ma`lumotlaridan foydalanib bilim va ko`nikmamizni shakllantirib olishimiz zarur [1-3]. Mavjud bilimlarimizni yanada mustahkamlash va yangi bilim olish uchun quyidagi dasturlardan foydalanamiz: ChemDraw Professional 16.0, Chem3D 16.0, Gaussian 09w.

Har bir sintez qilingan organik moddalarning identifikatsiyalash uchun YaMR – yadro magnit rezonans spektrlari olinadi va ular nazariy (kvant-kimyoviy hisoblash orqali) hamda amaliy jihatdan tahlil etiladi. Yuqorida keltirilgan dasturlar orqali moddalarning nazariy spektrlarini hisoblab topish mumkin bo`lsa, amaliy spektrlari ma`lum spektrometrlarda o`rganiladi. Bizning ishimizda Moskva davlat universiteti Kimyo fakultetidagi AGILENT 400.13 MHz spektrometrida, sianur kislota semikarbazonining YaMR spektrlari identifikatsiyalangan.

Ushbu maqolada sianur kislota semikarbazonining turli erituvchilarda YaMR-<sup>1</sup>H va YaMR-<sup>13</sup>C spektrlaridan olingan ma`lumotlarni tahlil keltirilgan.

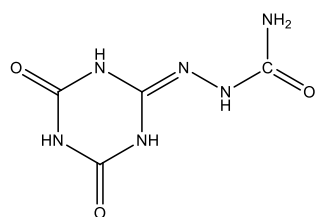
Sianur kislota semikarbazonining YaMR-<sup>1</sup>H eritmadagi spektrlarida faqat monosiklik shaklga (C) mos keladigan signallar mavjud, spektrlarning turi vaqt o`tishi bilan ham o`zgarmaydi. Ligandning bog`lanish spektridagi amid va imin guruhi proton signallari maxsus ma`lumotlarga ega (1-rasm). Ular odatda 6,08 va 9,97 7,20 m.h. da ikki asimmetrik dublet yagona signal AB – tizimini shakllantiradi.



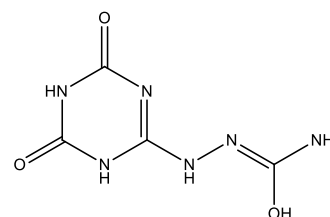
1-rasm. Sianur kislota semikarbazonining  $\text{CDCl}_3$  eritmasidagi olingan YaMR- $^1\text{H}$  spektri

Sianur kislota semikarbazonining tuzilishi va xossalari hamda tautomeriyasi YaMR –  $^1\text{H}$ , IQ-spektroskopiyalarida o'rganildi, ularning molekulyar mexanik xossalari kvant-kimyoviy hisoblash orqali aniqlandi [2, 4-7].

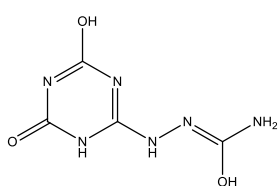
Sianur kislota bilan semikarbazidning kondensatlanish mahsuloti – semikarbazonning eritmadagi 4 xil tautomeriyasi o'rganildi va ulardan sianur halqasiga bog'langan semikarbazidagi keto-guruhning yenol- holatga o'tishi eritma muhitiga ko'ra o'rganildi.



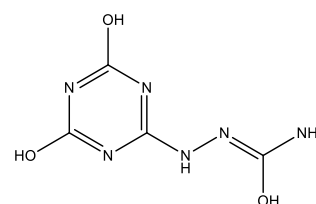
A) 2-(4,6-dioxo-1,3,5-triazin-2-ylidene)hydrazinecarboxamide



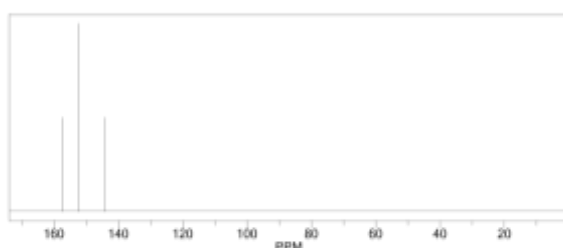
B) (Z)-N'-(4,6-dioxo-1,4,5,6-tetrahydro-1,3,5-triazin-2-yl)carbamohydrazonic acid



C) (Z)-N'-(4-hydroxy-6-oxo-1,6-dihydro-1,3,5-triazin-2-yl)carbamohydrazonic acid



D) (Z)-N'-(4,6-dihydroxy-1,3,5-triazin-2-yl)carbamohydrazonic acid



2-rasm. Sianur kislota semikarbazonining DMSO eritmasidagi olingan YaMR- $^{13}\text{C}$  spektri



Sianur kislota semikarbazonining DMSO eritmasidagi olingan YaMR-<sup>13</sup>C spektrini tahlil etganda 149,6 m.h. triazin halqadagi C atomiga xos va 96,7 m.h. da semikarbazid C atomiga xos kimyoviy siljishlar kuzatildi. Shuningdek, triazin halqasidan tashqi o`rinbosar bilan C=N bog`ining vujudga kelishi esa halqadagi bir uglerodning 121,6 m.h. da kimyoviy siljish bo`lishi isbotlandi.

Ushbu sianur kislota semikarbazonining turli tautomerlarining ayrim elektron parametrlari Chem3D Pro 16.0 dasturida molekulyar mexanika va molekulyar dinamikasi usuli bo'yicha kvant-kimyoviy hisoblashlar amalga oshirildi. Buning uchun dastlab "Hisoblashlar" menyusidagi MM2 elementi tanlanib, so`ng esa molekulyar tizim geometriyasini optimallashtirish uchun Energiyani minimallashtirish moslamalari va molekulyar dinamikani boshqarish uchun molekulyar dinamik xossalari hisblash amalga oshirildi. Hisoblash natijalari 1-jadval shaklida keltirilgan.

1-jadval. **Chem3D Pro 16.0 dasturining** Minimize Energy amali orqali olingan natijalar ko`rsatkichlari

Birikma	A	B	C	D
<b>Parametrlar</b>	0.3065	0.4913	0.4343	0.4023
<b>Kengayuvchanlik</b>	5.4504	4.4746	4.2657	3.1684
<b>Buriluvchanligi</b>	0.0438	-0.0022	0.0291	0.0030
<b>Sterik-Buriluvchanligi</b>	9.3529	4.9200	0.8400	0.0160
<b>Torsion qiymati</b>	-1.9163	-2.3810	-2.7916	-3.0005
<b>Non-1,4 VDW</b>	-6.9144	1.4374	6.1543	9.3533
<b>1,4 VDW</b>	-20.7114	-6.0702	-4.5543	5.2488
<b>Dipol / Dipol</b>	-17.3859 kcal/mol	2.8699 kcal/mol	4.3777 kcal/mol	15.1912 kcal/mol

**Xulosa:** Sianur kislota semikarbazonining hosil bo`lganligi YaMR spektroskopiyasi orqali isbotlandi va uning 4 ta tautomeri holatining electron parametrlari kvant-kimyoviy hisoblash orqali topildi.

#### Foydalanilgan adabiyotlar

1. Литвак, М. М. "Компьютер как инструмент исследования при изучении химии и смежных дисциплин." *Вопросы журналистики, педагогики, языкознания* 21.6 (177) (2014): 230-237.
2. Fresno, Nieves, et al. "Multinuclear NMR Characterization of Cyanuric Fluoride (2, 4, 6-Trifluoro-1, 3, 5-triazine)." *Journal of Heterocyclic Chemistry* 49.5 (2012): 1257-1259.
3. Салимов, Фуркат Ғайрат Ўғли, Ферангиз Садиллоевна Аслонова, and Шахноза Наби Қизи Ражабова. "ЦИАНУР КИСЛОТА СЕМИКАРБАЗОНИНИ КВАНТ-КИМӨВИЙ ҲИСОБЛАШЛАР ОРҚАЛИ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИНИ ЎРГАНИШ." *Science and Education* 1.8 (2020): 130-134.
4. Ганиев, Бахтиёр Шукуруллаевич, et al. "Синтез, строения, таутомрия и исследование некоторых квантово-химических параметров соединения 2-(4, 6-диоксо-1, 3, 5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбоксиамида." *Евразийский Союз Ученых* 7-5 (76) (2020).



5. Ganiyev, B., et al. "Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide." *International independent scientific journal* 2.16 (2020): 3-9.
6. Ганиев, Б. Ш., Г. К. Холикова, and Ф. Г. Салимов. "Использование циануровой кислоты в качестве дезинфицирующих средств для окружающей среды." *Материалы международной научной конференции «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства*. Vol. 2. 2019.
7. Ganiyev, Вахтиёр. "НУПЕРСНЕМ ДАСТУРИДА ЦИАНУР КИСЛОТА СЕМИКАРБАЗОНИНИ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИ ТАҲЛИЛИ." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 2.2 (2020).
8. Ganiyev, Вахтиёр. "ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СЕМИКАРБАЗОНА ИЗОЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 1.1 (2020).
9. Ганиев, Б. Ш., et al. "РАСЧЕТЫ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ СОЕДИНЕНИЯ ИЗОЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ С СЕМИКАРБАЗИДОМ." *International Independent Scientific Journal* 16-2 (2020): 3-7.