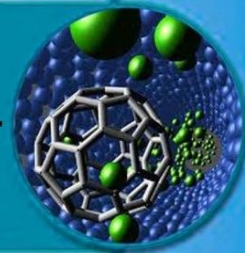


**ФАН ВА ТЕХНОЛОГИЯЛАР
ТАРАҚҚИЁТИ**
**РАЗВИТИЕ НАУКИ И
ТЕХНОЛОГИЙ**



1
2023

Бош муҳаррир:

ДЎСТОВ Ҳ.Б.

кимё фанлари доктори, профессор

Тахририят ҳайъати раиси:

БАРАКАЕВ Н.Р.

техника фанлари доктори, профессор

Муовини:

ШАРИПОВ М.З.

физика-математика фанлари доктори

Тахрир ҳайъати:

МУҚИМОВ К.М.

ЎЗР ФА академиги (ЎЗМУ)

ЖАЛИЛОВ А.Т.

ЎЗР ФА академиги (Тошкент кимё-технология
ИТИ)

НЕГМАТОВ С.Н.

ЎЗР ФА академиги (“Фан ва таракқиёт” ДУК)

РИЗАЕВ А.А.

т.ф.д., профессор (ЎЗР ФА Механика ва зилзила-
бардошлилик ИТИ)

БАҲОДИРОВ Ғ. А.

т.ф.д., профессор, ЎЗР ФА бош илмий котиби

МАЖИДОВ Қ.Х.

техника фанлари доктори, профессор

АСТАНОВ С.Х.

физика-математика фанлари доктори, профессор

РАХМОНОВ Х.Қ.

техника фанлари доктори, профессор

ВОХИДОВ М.М.

техника фанлари доктори, профессор

ЖЎРАЕВ Х.Ф.

техника фанлари доктори, профессор

САДУЛЛАЕВ Н.Н.

техника фанлари доктори, профессор

ФОЗИЛОВ С.Ф.

техника фанлари доктори, профессор

ИСАБАЕВ И.Б.

техника фанлари доктори, профессор

АБДУРАҲМОНОВ О.Р.

техника фанлари доктори, профессор

НИЗОМОВ А.Б.

иқтисод фанлари доктори, профессор

ТЕШАЕВ М.Х.

физика-математика фанлари доктори

ЮНУСОВА Г.С.

фалсафа фанлари доктори

ХАМИДОВ О.Х.

иқтисод фанлари доктори, профессор

ХОШИМОВ Ф.А.

т.ф.д., профессор (ЎЗР ФА Энергетика институти)

АХМЕТЖАНОВ М.М.

педагогика фанлари номзоди, профессор

АЗИМОВ Б.Ф.

иқтисод фанлари номзоди, доцент

(махсус сонлар учун масъул)

Муҳаррирлар:

БАРАКАЕВА Д.Ф., ОРТИҚОВА С.Ж.

ИСТАМОВА Г.Х.

Мусахҳихлар:

БОЛТАЕВА З.З., САЙИТОВА К.Х.

ФАН ВА ТЕХНОЛОГИЯЛАР

ТАРАҚҚИЁТИ

ИЛМИЙ – ТЕХНИКАВИЙ ЖУРНАЛ

РАЗВИТИЕ НАУКИ И

ТЕХНОЛОГИЙ

НАУЧНО – ТЕХНИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

*Журнал Ўзбекистон матбуот ва ахборот
агентлиги Бухоро вилояти бошқармасида
2014 йил 22-сентябрда № 05-066-сонли
гувоҳнома билан рўйхатга олинган*

Муассис:

Бухоро муҳандислик-технология институти

*Журнал Ўзбекистон Республикаси Вазирлар
Маҳкамаси ҳузуридаги ОАК Раёсатининг
2017 йил 29-мартдаги №239/5- сонли қарори
билан диссертациялар асосий илмий
натижаларини чоп этиши тавсия этилган
илмий наشرлар рўйхатида киритилган.*

Тахририят манзили:

*200100, Бухоро шаҳри, Қ. Муртазоев
кўчаси, 15-уй,*

*Бухоро муҳандислик-технология институти
биринчи биноси, 2-қават, 206-хона.*

Тел: 0(365) 223-92-40

Факс: 0(365) 223-78-84

Электрон манзил:

E-mail: fantt_jurnal@umail.uz

*Журналнинг тўлиқ электрон варианты
билан <https://journal.bmti.uz/>
сайти орқали танишиши мумкин.*

*Ушбу журналда чоп этилган материаллар
тахририятнинг ёзма рухсатисиз тўлиқ ёки
қисман чоп этилиши мумкин эмас.
Тахририятнинг фикри муаллифлар фикри
билан ҳар доим ҳам мос тушмаслиги
мумкин. Журналда ёритилган
материалларнинг ҳаққонийлиги учун
мақолаларнинг муаллифлари ва реклама
берувчилар масъулдирлар.*

МУНДАРИЖА - СОДЕРЖАНИЕ – CONTENT

ТЕХНИКА, ТЕХНОЛОГИЯ ВА ЖИҲОЗЛАР	
Набиев М.Б. Расчетно-конструктивный анализ автоматических клиноременных вариаторов мототранспортных средств	4
Набиев М.Б. Возможная область регулирования автоматических клиноременных вариаторов мототранспортных средств	9
Азизов Б.А. Бухоро вилояти тупроқ-иклим шароити учун комбинациялашган плуг роторининг тури ва параметрларини асослаш	15
Бердиев Д.М., Ибодуллаев Т.Н., Абдуллаев А.Х., Камилова Г.М. Совершенствование технологии термоциклической обработки для повышения износостойкости зубчатых колес	20
Бафоев Д.Х. Силлик цилиндрлик қўзғалмас бирикмаларнинг умрбоқийлигини ошириш	26
Аноров Р.А., Рахмонов О.К., Усмонов С.Б., Салиханова Д.С., Адизов Б.З. Гилли бурғилаш эритмалари тайёрлаш учун гилли композицияларни олиш ва уларнинг хоссаларини ўрганиш	33
Бобоев А.А. Перспективные технологии очистки сточных вод хвостохранилищ золотодобычи в Узбекистане	39
Шарипов Н.З., Гафуров К.Х. Соя уруғини чақиш жараёнини назарий асослари ва пичоғни танлаш	48
КИМЁ ВА КИМЁВИЙ ТЕХНОЛОГИЯЛАР	
Факеров Г.М., Эркаев А.У., Шарипова Х.Т., Мирзоев Б. Исследование процесса получения органоминеральных удобрений азотнокислотным окислением углей Шурабского месторождения	53
Юлдашев Т.Р., Махмудов М.Ж. Метилдиэтанолламин ва метил спирти эфирлари ишлаб чиқаришда технологик режим танлашни асослаш	58
Бабаев Ж.О., Фозилов С.Ф., Мавланов Б.А., Мустафоев Х.М., Фозилов Ҳ.С., Шарипов Б.З. 2-меркаптобензоксазол эфирларини олиш ва уларни дизель ёқилғилари турли хоссаларига таъсирини ўрганиш	65
Астанов С.Х., Нишоннов Н., Вахобова М.А., Ашуров З.Р., Касимова Г.К. Спектроскопия гипохромного эффекта в растворах стильбена и его производных	69
Хусенов К.Ш., Умаров Б.Б., Тургунов К.К., Ганиев Б.Ш., Ибрагимов Б.Т. Кристаллическая структура и анализ поверхности Хиршфельда комплекса бромида цинка(II) с 2-аминогиадиазолом-1,3,4	75
Юлчиева С.Т., Сманова З.А. Иммуобилизованные органические люминесцентные реагенты для определения некоторых тяжелых металлов	85
Умаров Б.Б., Сулаймонова З.А., Мирзоева Г.А. Синтез и оптические свойства лигандов на основе β-дикарбонильных производных ферроцена	94
Шадиева Ш.Ш., Нурова О.У., Амонов М.Р. Юқори самарали оҳорловчи полимер композициялар таркибини ишлаб чиқиш ва уларнинг хоссалари	99
МАШИНАСОЗЛИК ВА ЭНЕРГЕТИКА	
Sadullayev N.N., Muzaffarov F.F. Yordamchi yuzali vertikal o‘qli shamol turbinasining tuzilishi umumiy tahlili va boshqa turbinalardan farqli jihatlari.	104
Hamroyev H.H. Shodiyev Z.O. Mexanik ishlov berishda aniqlikni oshirish tahlili	109
Амиров С.Ф., Юлдашев Н.Р., Мухсимов Ш.С. Бурчак силжишини ўлчовчи янги трансформатор ўзгартиргичнинг қўшимча хатолик манбалари	114
Хамроев Х.Х., Савриев Й.С., Тураева У.Х., Рузимуратова З.А. Особенности высокоскоростного фрезерования.	120

Сафаров А.М. Повышения чувствительности преобразователя постоянного тока, на основе магнитных полей с различными частотами	128
Эгамов Д.А. Электр энергия таъминотининг узлуксизлигини таъминлаш чоралари учун мўлжалланган “Кўчма АВР – 04 кВ” ни қўллаш самараси	133
Жураева К.К. Исследование влияния дестабилизирующих факторов на характеристики магнитоупругих преобразователей механических величин	136
Рахманов И.У., Курбонов Н.Н., Нематов Л.А. Автоматизированная система управления электропотребления промышленных предприятий	141
ИНФОРМАТИКА ВА АХБОРОТ-КОММУНИКАЦИОН ТИЗИМЛАР	
Шоимкулов А.А., Турдибеков К.Х., Файзуллаев Ж.С. Выбор диагностических параметров и алгоритма функциональной диагностики тяговых асинхронных двигателей	146
Ботирова Н.К. Касбий кўникмаларни шакллантиришда ахборот таълим муҳитидан фойдаланиш	154
Мирзаева Ш.У., Увайзов С.К. Математическая модель процесса извлечения компонентов экстракцией из лакричного корня углекислотой	158
ОЗИҚ-ОВҚАТ САНОАТИ ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ	
Авизов С.Р., Садыков И.Ш., Саломов Б.Х. Влияние термической обработки на биохимический состав (белковый, углеводный, липидный и витаминный) <i>chlorella vulgaris</i>	169
Азизов А.Ш, Абдураззоқова М.Н, Рахимжонова М.Д, Рахимжонов Ж.Д. Асаларига озуқа тайёрлашда шарбат олиш ускунасининг ишлаш принципи ва параметрлари	173
Oltiyev A.T., Haydarova M.F., Bozorova D.N. Maqsadli sukat mahsulotlari ishlab chiqarish texnologiyasini yaratish	178
ТЎҚИМАЧИЛИК ВА ЕНГИЛ САНОАТ ТЕХНОЛОГИЯЛАРИ	
Тошпулотов Л.И., Танибердиев Ф.Р., Хамраева С.А. Рогоз толасининг тузилиши ва таркиби.	183
Юсупбеков Н.Р., Беккулов Ж.Ш. Синтез системы адаптивного регулирования процесса сушки минеральных удобрений в барабанной сушилке	187
Kuliyeva D.R., Avezov M.F. Bazalt matosining tikish imkoniyatlarini takomillashtirish maqsadida mato sirtiga yelimli suyuqlik bilan ishlov berish	195
Ражабова Г.Ж., Турсунова З.Н. Оқимда ташкилий операцияларни комплекшлаш шартлари	199
Юлдашев Ж.А., Хакимов Ш.Ш. Пахта тозалаш жараёнининг асосий ишчи органи аррачаларнинг қаттиқлигини ошириб ишлаш муддатини узайтириш	202
Ҳамитов А.А., Ахмедов Б.Б. Пойабзал устки чарми ишлаб чиқаришда тайёрлов ва ошлаш жараёнлари тадқиқоти	210
Эрдонов А.М., Росулов Р.Х., Ахмедов К.И., Сайиткулов С.О. Пахта тозалагичнинг тўрли юзасини такомиллаштириш	216
Исмойилов Ф.Б., Қўлдошев Э.И., Сагтарова Н.Н. Жунни дастлабки ишлашда винтли тозалагичлардан фойдаланишнинг аҳамияти	219
Обидов А.А., Мамажанов Ш.О. Ифлослик таркибидан пахта хом ашёсини регенерациялашнинг назарий асослари	225
Вафаева З.С., Матякубова Ж.Б., Мансурова М.А. Тикув машинасидаги резина втулканинг пластмасса бармоқчалари ва ечиладиган иплар орасидаги ишқаланишга найча параметрларининг таъсири	231
Демидова М.А., Рыклин Д.Б., Кузнецов А.А. Оценка адгезии нановолокнистых материалов к подложкам	236

АНИҚ ВА ИЖТИМОЙ-ИҚТИСОДИЙ ФАНЛАР

Nurmurodova Sh.I. Zamonaviy tilshunoslikda frazeologizmlarning mohiyati	244
Хакимова Н., Низамов А., Мухаммадиева Л. Ёғ-мой саноатини илмий-технологик модернизациялаш омиллари ва йўналишлари	248
Azimova N.F. Yozuvchi ijodiy konsepsiyasi va hayotiy haqiqatlar uyg'unligi	257
Акромов I.I. Aphoristic written records in old english texts: the aspect of phraseology	261
Орзиева Л.Н. Организация и проведение педагогических экспериментов	269
Мажидов Қ.Х., Рахимов Ф.Ф., Акмалов.М.Ғ. Қишлоқ хўжалик чиқиндилари асосидаги композициялардан қурилиш материаллари ишлаб чиқаришда фойдаланиш . . .	274
Gaybullaev Z.X., Azizov B.A. Silindrik qobiqlarda erkin to'liqlarning tarqalishi	278
Sharipova M.Sh. "Educational assessment and evaluation in language teaching"	284
Казимова Г.Х. Анализ ситуации и проблем обучения русскому языку студентами технических ВУЗов	293
Жураева К.К. Исследование влияния дестабилизирующих факторов на характеристики магнитоупругих преобразователей механических величин	298
Жумаев М.Р., Шарипов М.З., Ризоқулов М.Н., Саидов Қ.С., Файзиев Ш.Ш. Необычная лазерно-индуцированная динамика спинов	303
Do'stov N.B., Sevinov U.B. Yarimo'tkazgichlarga diffuziya, ionlar va epitaksiya usullari bilan kirishmalar kiritish	307
Жўраева М.М. Француз ва ўзбек эртақларининг концептуал ва миллий-маданий хусусиятлари	315

УДК 54.386:546.05,47:548.314

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И АНАЛИЗ ПОВЕРХНОСТИ ХИРШФЕЛЬДА КОМПЛЕКСА БРОМИДА ЦИНКА(II) С 2-АМИНОТИАДИАЗОЛОМ-1,3,4¹Хусенов К.Ш., ²Умаров Б.Б., ³Тургунов К.К., ²Ганиев Б.Ш., ⁴Ибрагимов Б.Т.¹Навоийский государственный горно-технологический университет, ²Бухарский государственный университет, ³Институт химии растительных веществ им. С.Ю. Юнусова АН Республики Узбекистана, ⁴Институт биоорганической химии им. А.С. Садыкова АН Республики Узбекистана

Аннотация. Синтезировано и исследовано комплексное соединение бромида цинка(II) с 2-аминотиадиазолом-1,3,4 (L). Методами элементного анализа, ИК-спектроскопии и рентгеноструктурный анализ (РСА) установлены состав и строение полученного комплекса. В кристалле комплекса $[ZnL_2Br_2]$ центральный ион имеет искаженную тетраэдрическую координацию из двух атомов азота тиадиазольных циклов и двух атомов брома. Также в работе представлены результаты проведенного анализа поверхности Хиршфельда этого комплекса.

Ключевые слова: бромид цинка(II), 2-аминотиадиазол-1,3,4, синтез, кристаллическая структура, поверхности Хиршфельда.

RUX(II) BROMIDINI 2-AMINOTIADIAZOL-1,3,4 BILAN KOMPLEKSINING KRISTALL TUZILISHI VA XIRSHFELD YUZASINI TAHLIL QILISH¹Husenov Q.Sh., ²Umarov B.B., ³Turg'unov K.K., ²G'aniyev B.Sh., ⁴Ibragimov B.T.¹Navoiy davlat konchilik va texnologiyalar universiteti, ²Buxoro davlat universiteti, ³O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasining S.Y. Yunusov nomli O'simlik moddalar kimyosi instituti, ⁴O'zbekiston Respublikasi Fanlar Akademiyasining O.S.Sodiqov nomli Bioorganik kimyo instituti

Annotatsiya. Rux(II) bromidning 2-aminotiadiazol-1,3,4 (L) bilan kompleks birikmasi sintez qilindi va tadqiq qilindi. Element tahlil, IQ-spektroskopiya va rentgenostruktura tahlili (RSA) usullari bilan olingan kompleksning tarkibi va tuzilishi aniqlandi. $[ZnL_2Br_2]$ kompleks birikmasining markaziy ioni ikki tiadiazol siklining azot atomi va ikki brom atomidan iborat o'zargan tetraedrik koordinatsiyaga ega. Shuningdek, ishda kompleks Hirshfeld yuzasining tahlil natijalari keltirilgan.

Kalit so'zlar: rux(II) bromid, 2-aminotiadiazol-1,3,4, sintez, kristall tuzilishi, Hirshfeld yuzasi.

CRYSTAL STRUCTURE AND ANALYSIS HIRSHFELD SURFACE OF THE ZINC(II) BROMIDE COMPLEX WITH 2-AMINOTHIADIAZOLE-1,3,4¹Khusenov K.Sh., ²Umarov B.B., ³Turgunov K.K., ²Ganiyev B.Sh., ⁴Ibragimov B.T.¹Navoi State Mining and Technological University, ²Bukhara State University, ³Chemistry of Plant Substances Institute named after S.Yu. Yunusov Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan, ⁴Institute of Bioorganic Chemistry named after A.S. Sadykov Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan

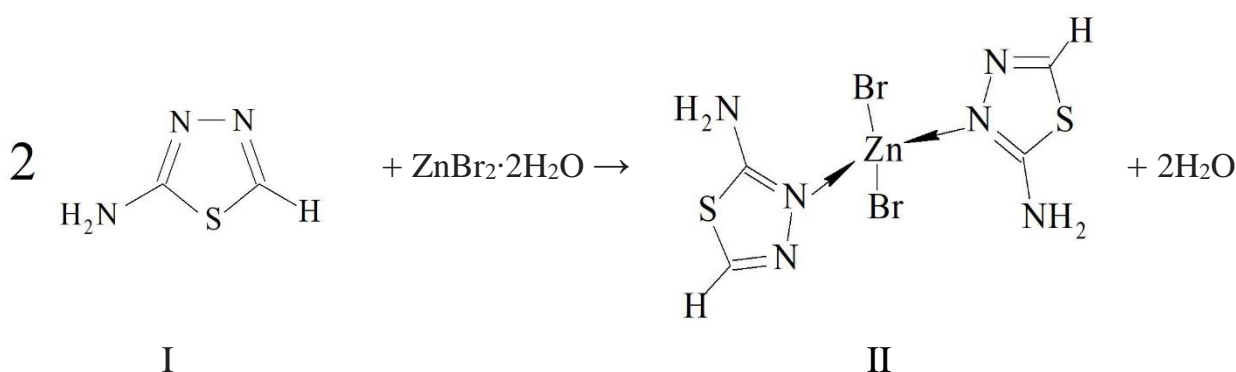
Annotation. A complex compound of zinc(II) bromide with 2-aminothiadiazole-1,3,4 (L) was synthesized and studied. Elemental analysis, IR spectroscopy, and X-ray diffraction analysis (XRD) have been used to determine the composition and structure of the obtained complex. In the crystal of the $[ZnL_2Br_2]$ complex, the central ion has a distorted tetrahedral coordination of two nitrogen atoms of thiadiazole cycles and two bromine atoms. The results of the analysis of the Hirschfeld surface of this complex are also presented in the work.

Key words: zinc(II) bromide, 2-aminothiadiazole-1,3,4, synthesis, crystal structure, Hirschfeld surfaces.

Введение. В последнее время пятичленные гетероциклические соединения нашли широкое применение во многих отраслях науки с широким спектром действий, например 1,3,4-тиадиазолы с анальгетической [1, 2], противоэпилептической и обезболивающей активностью [3], а также для гидрометаллургического извлечения золота из руды. В частности, это касается области выщелачивания золота, где для выщелачивания применяют окислитель и лиганд, в качестве активатора растворения используют гетероциклическое ароматическое соединение, содержащее в цикле атомы азота или серы, как 2-аминотиадиазола-1,3,4.

Гетероатом серы и/или азота гетероциклического кольца способны к образованию координационной связи с поверхностью нерастворенного металлического золота [4].

Ранее нами сообщалось о синтезе и структуре комплекса хлорида цинка (II) [5] и иодида цинка (II) [6] с 2-аминотиадиазолом-1,3,4 ($L=C_2H_3N_3S$) состава ZnL_2X_2 (где $X=Cl, I$). В кристалле комплекса центральный ион имеет искаженную тетраэдрическую координационную сферу, состоящую из двух координированных атомов азота тиадиазольных колец двух L и двух атомов галогенида, а также нитрата цинка (II) [7] с 2-аминотиадиазолом-1,3,4 (L) состава $ZnL_3(NO_3)_2$, в которой центральный ион имеет тригонально-бипирамидальную координационную сферу, в экваториальной плоскости которой координированы атомы азота трех молекул L , а аксиальные позиции полиэдра занимают два атома кислорода двух нитратных анионов. В отличие с предыдущей работы [7], настоящая работа посвящена результатам синтеза и изучению кристаллической и молекулярной структуры комплекса бромиды цинка (II) с 2-аминотиадиазолом-1,3,4 (I) состава $ZnC_4H_6N_6S_2Br_2$ (II), синтезированного по уравнению:



Экспериментальная часть. В работе использовали лиганд – 2-аминотиадиазол-1,3,4 (L), бромид цинка(II) (“х.ч.”), а также растворитель $EtOH$ (“х.ч.”, перегнанный).

Синтез лиганда L был проведён в соответствии методикой, опубликованной в [8] и была перекристаллизована из этанола.

	C	H	N	S
Найдено, мас. %:	23.76	3.13	41.51	28.76
Для $C_2H_3N_3S$				
Вычислено, мас. %	23.75	3.00	41.56	31.69

Синтез комплекса $[ZnL_2Br_2]$. Для синтеза данного комплекса, к горячему раствору 0,606 г (0.006 моля) лиганда L в 50 мл этанола добавляли при постепенном перемешивании, горячий раствор 0,68 г (0.003 моля) бромиды цинка(II) в 35 мл этанола, затем нагревали с обратным холодильником в течение 1 час, отфильтровывали и оставили для кристаллизации. Через двое суток выпавшие кристаллы бежевого цвета отфильтровывали и высушивали на воздухе. Выход $[ZnL_2Br_2]$ – 1,08 г (84%).

Элементный анализ соединений на C, H, N, S, Br выполняли на приборе EA 1108 фирмы “Carlo Erba”, Zn определяли на приборе 3030В фирмы “Perkin Elmer”.

	Zn	C	H	N	S
Найдено, мас. %:	15.43	11.04	1.40	19.29	14.89
Для $ZnC_4H_6N_6S_2Br_2$					
Вычислено, мас. %	15.29	11.24	1.41	19.66	15.00

ИК спектры поглощения записывали на спектрометре Shimadzu IRTracer-100 в области $400-4000\text{ см}^{-1}$ в таблетках KBr .

Рентгеноструктурный анализ провели на дифрактометре CCD Xcalibur Ruby (Oxford Diffraction) [9] с использованием $CuK\alpha$ излучения (графитовый монохроматор, ω -сканирование): кристаллы моноклинные с параметрами: $a = 7.9997(6)$, $b = 13.4283(8)$, $c =$

11.4598(8) Å, $\beta = 94,711(6)^\circ$, $V=1226.88(15) \text{ Å}^3$, $d_{\text{выч.}}=2.314 \text{ г/см}^3$, пространственная группа $P2_1/n$.

Структура расшифрована прямым методом с использованием комплекса программ SHELXS-97 [10]. Расчеты по уточнению структуры выполнены по программе SHELXL-2014/7 [11]. Все неводородные атомы уточнены методом наименьших квадратов (по F^2) в полноматричном анизотропном приближении. Положения атомов водорода при атоме углерода выявлены геометрически и уточнены с фиксированными параметрами изотропного смещения $U_{\text{iso}}=nU_{\text{eq}}$, где $n=1.2$, а U_{eq} – эквивалентный изотропный параметр смещения соответствующих атомов углерода. Окончательное значение фактора расходимости $R_1=0.047$, $wR_2=0.105$ по 1690 отражениям с $I>2\sigma(I)$ и $R_1=0.078$, $wR_2=0.123$ по всему массиву (2478).

Основные кристаллографические данные и параметры уточнения структуры приведены в табл.1, значения координат атомов и их тепловые факторы – в табл.2; межатомные расстояния и валентные углы – в табл.3;

Результаты и их обсуждение. В настоящей работе обсуждается изучение состава, строения внутрикомплексного соединения бромида цинка(II).

Частота $\nu_{(N-N)}$ не изменяется (свободного лиганда – 1022 см^{-1} , комплекса $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]$ – 1022 см^{-1}). Валентные колебания аминогрупп также остаются неизменными, располагаясь в области $3270\text{--}3430 \text{ см}^{-1}$. ИК–спектр комплексного соединения $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]$ отличается от спектра лиганда L [7] тем, что в нем полоса валентного колебания связи $>\text{C}=\text{N}$ 1620 см^{-1} расщепляется на две интенсивные полосы (рис.1), которого можно объяснить неравноценностью связей $>\text{C}=\text{N}$ в молекуле лиганда, координированного через атом азота триадиазольного цикла. Во многом ИК–спектр комплекса $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]$ идентичен с ИК–спектрами изученных ранее комплексных соединений цинка(II) [5-7].

Результаты элементного анализа и ИК–спектрального исследования были подтверждены методом рентгеноструктурного анализа (РСА) (табл.3).

Таблица 1.

Основные кристаллографические данные и параметры уточнения структуры $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]$

Параметр	Значение	Параметр	Значение
M	427.46	$\mu, \text{мм}^{-1}$	13.44
Температура, К	228-30	Размеры кристалла, мм	0.3x0.25x0.15
Сингония	Моноклинная	Область сканирования по θ , град	5.0–76.0
Пр.гр.	$P2_1/n$	Область индексов h, k, l	$-9 \leq h \leq 10, -16 \leq k \leq 14, -8 \leq l \leq 14$
$a, \text{Å}$	7.9997(6)	Собрано отражений	4842
$b, \text{Å}$	13.4283(8)	Независимых отражений (R_{int})	2478 (0.047)
$c, \text{Å}$	11.4598(8)	Отражений с $I > 2\sigma(I)$	1690
α , град	90	Число уточняемых параметров	152
β , град	94,711(6)	GOOF (F^2)	1.014
γ , град	90	$R_1, wR_2 (I > 2\sigma(I))$	0.047, 0.105
$V, \text{Å}^3$	1226.88(15)	R_1, wR_2 (все отражения)	0.078, 0.123
Z	4	$\Delta\rho_{\text{max}}, \Delta\rho_{\text{min}} (e \text{ Å}^{-3})$	0.67, -1.27
$\rho(\text{выч.}), \text{г/см}^3$	2.314		

Выводы о строении комплекса с монодентатной координацией лиганда, сделанные по результатам ИК спектра доказано методом РСА (рис.1).

Координационный полиэдр комплекса $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]$ представляет собой искаженную тетраэдрическую структуру, искажение которого обусловлены отсутствием влияния природы центрального атома (сферически симметричная d^{10} -оболочка [Гиллеспи]) природой ацидо- и

монодентатного лигандов, а также особенностями упаковки мономерных полиэдров в кристаллической структуре (рис. 1).

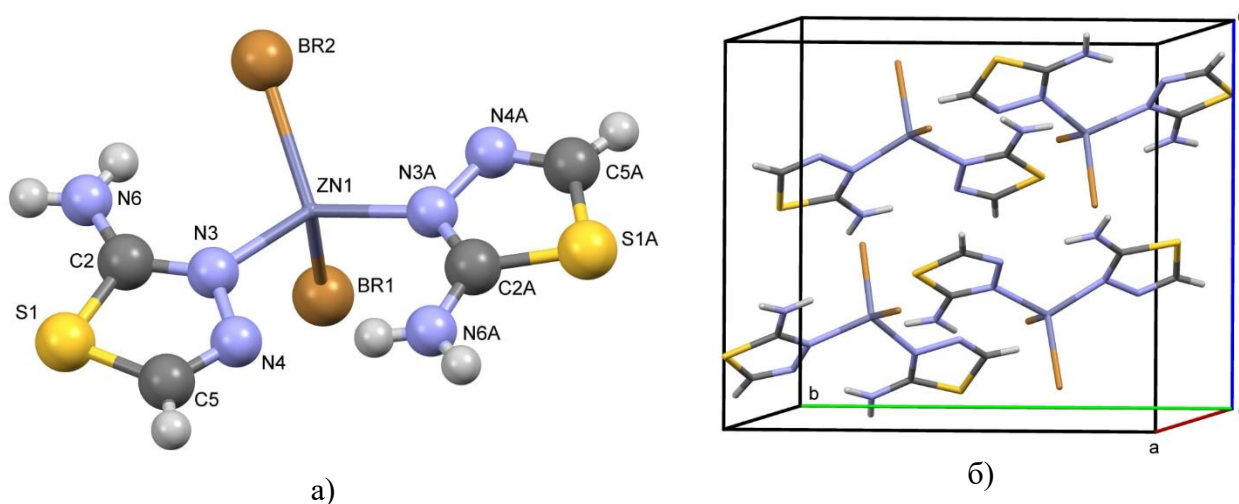


Рис. 1. Кристаллическая структура комплексного соединения II (а) и проекция кристаллической упаковки молекул (II) на плоскость *ob-ac* (б).

Таблица 2.

Координаты неводородных ($\times 10^4$), водородных ($\times 10^3$) атомов* и эквивалентные изотропные тепловые параметры ($\text{\AA}^2 \times 10^3$) (для атомов водорода ($\text{\AA}^2 \times 10^2$)) в структуре $[\text{ZnL}_2\text{Br}_2]^*$

Атом	X	Y	z	U^{**}
Br1	0.37092(10)	0.33432(5)	0.07655(7)	0.0365(3)
Br2	0.80994(9)	0.32879(5)	0.27149(8)	0.0404(3)
Zn1	0.51110(11)	0.33768(6)	0.26988(8)	0.0304(3)
S1	0.4204(2)	0.65991(12)	0.36886(19)	0.0362(6)
S1A	0.2490(2)	0.08367(13)	0.44338(16)	0.0389(6)
N4	0.3112(7)	0.4832(4)	0.3939(5)	0.0342(19)
N3	0.4548(7)	0.4731(4)	0.3382(5)	0.0296(19)
N6	0.6707(8)	0.5684(5)	0.2666(6)	0.064(3)
N4A	0.4954(8)	0.1315(4)	0.3261(5)	0.0350(19)
N3A	0.4233(7)	0.2208(4)	0.3567(5)	0.0317(17)
N6A	0.2014(8)	0.2817(4)	0.4569(6)	0.043(2)
C5	0.2808(9)	0.5749(5)	0.4153(6)	0.039(2)
C2	0.5304(9)	0.5583(5)	0.3189(6)	0.033(2)
C5A	0.4179(9)	0.0566(5)	0.3631(7)	0.039(2)
C2A	0.2931(8)	0.2075(5)	0.4179(6)	0.028(2)
HA6A	0.18820	0.59420	0.45390	0.0470
HB6A	0.44980	-0.00850	0.34810	0.0470
H5A	0.72060	0.51670	0.24190	0.0770
H5	0.71220	0.62670	0.25720	0.0770
HA6	0.22650	0.34250	0.44230	0.0520
HB6	0.11730	0.26870	0.49660	0.0520

*Атомам водорода присвоены номера связанных с ними неводородных атомов.

** $U = (\sum_i \sum_j U_{ij} a_i \cdot a_j \cdot a_i a_j) / 3$

Расстояния Zn(1)-Br(1) 2.3999(12) и Zn(1)-Br(2) 2.3922(12) приблизительно одинаковые (табл. 2), а длины связей Zn(1)-N(3A) 2.016 (6) и Zn(1)-N(3) 2.044 (5) согласуются с аналогичными расстояниями других тетраэдрических комплексов цинка(II) [5-7]. Валентные углы NZnBr в структуре исследованного соединения (105.63(15)° – 110.23(16)°) близки к значениям в других тетраэдрических комплексах цинка. Углы Br(1)Zn(1)Br(2) и N(3A)Zn(1)N(3) увеличены до 113.4 (4)° и 114.0 (2)° соответственно (табл.3) [5–6].

Таблица 3.

Длины связей и валентные углы в структуре комплекса [ZnL₂Br₂]

Связь	d, Å	Связь	d, Å
Br(1)–Zn(1)	2.3999 (12)	Zn(1)–N(3A)	2.016 (6)
Br(2)–Zn(1)	2.3922 (12)	Zn(1)–N(3)	2.044 (5)
S(1A)–C(2A)	1.729 (7)	S(1A) – C(5A)	1.734 (8)
N(3)–C(2)	1.322 (8)	N(3)–N(4)	1.366 (7)
N(3A)–C(2A)	1.314 (8)	N(3A)–N(4A)	1.389 (8)
N(4)–C(5)	1.284 (9)	N(4A) –C(5A)	1.272 (9)
N(6A)–C(2A)	1.336 (8)	C(2)–N(6)	1.322 (8)
C(2)–S(1)	1.746 (7)	C(5)–S(1)	1.712 (7)
Угол	ω, град.	Угол	ω, град.
N(3A)Zn(1)N(3)	114.0 (2)	N(4A)N(3A)Zn(1)	112.3 (4)
N(3A)Zn(1)Br(2)	110.23 (16)	C(5)N(4)N(3)	111.4 (6)
N(3)Zn(1)Br(2)	107.03 (15)	C(5A)N(4A)N(3A)	112.0 (6)
N(3A)Zn(1)Br(1)	106.61 (17)	N(3)C(2)N(6)	125.6 (6)
N(3)Zn(1)Br(1)	105.63 (15)	N(3)C(2)S(1)	111.8 (5)
Br(2)Zn(1)Br(1)	113.40 (4)	N(6)C(2)S(1)	122.5 (5)
C(2A)S(1A)C(5A)	86.2 (3)	N(3A)C(2A)N(6A)	123.9 (6)
C(2)N(3)N(4)	114.0 (5)	N(3A)C(2A)S(1A)	113.7 (5)
C(5)N(3)Zn(1)	126.0 (5)	N(6A)C(2A)S(1A)	122.4 (5)
N(4)N(3)Zn(1)	119.2 (4)	N(4)C(5)S(1)	116.2 (6)
C(2A)N(3A)N(4A)	112.4 (6)	N(4A)C(5A)S(1A)	115.7 (6)
C(2A)N(3A)Zn(1)	133.8 (5)	C(5)S(1)C(2)	86.6 (3)

Сравнение данных свободного лиганда с комплексным соединением где длины связи C(2)-N(2) равна 1.30(1) Å [7], а комплексе бромиды цинка связи C-N несколько удлинены – до 1.314(8) Å C(2A)–N(3A) и 1.322(8) Å C(2)-N(3). Это объясняется тем, что координация лиганда идёт через атомы азота N(3) и N(3A), такая координация умеренно влияет на эндоциклические валентные углы N(4)N(3)C(2) и N(4A)N(3A)C(2A).

Одна NH₂-группа в структуре [ZnL₂Br₂], участвует в образовании слабой внутримолекулярной водородной связи (ВМВС) N-H...Br (N(6)-H(B6A) 0.90(9) Å, H(B6A)...Br(2) 2,57(9) Å. Другой ВМВС связывает два тиадиазольных кольца. При этом в качестве донора выступает аминогруппа второго тиадиазольного кольца. В качестве акцептора – некоординированный атом азота первого гетероцикла N(6A)-H(B6A) 0.89(5) Å, H(B6A)...N(4) 2,08(5) Å. А также, в кристаллической структуре встречается несимметричные межмолекулярные водородные связи (ММВС) (табл.4).

Длины связей и валентные углы в двух независимых лигандах L в [ZnL₂Br₂] достаточно хорошо согласуются между собой (табл.2). Расстояния S-C лежат в обычных пределах (1.712(7)-1.746(7) Å) [12], расстояния N-N находятся в интервале 1.366(7) и 1.389(8) Å и соответствует стандартным значениям для одинарных связей в пятичленном гетероцикле [13]. Межатомные расстояния N-C (C(2)-N(6) 1.322(8) Å и C(2A)-N(6A) 1.336(8)) преимущественно одинарные, а длины циклических связей C=N (C(5)-N(4), C(2)-N(3) и C(5A)-N(4A), C(2A)-N(3A)) усреднены и соответствуют промежуточным значениям между двойными и одинарными связями за счет сопряжения системы связей гетероцикла.

Анализ длины связей азометиновых групп (C=N) свободного лиганда и комплексного соединения показывает, что у свободного лиганда C=N связи более одинаковые (1.297(8) Å и 1.28(1) Å) [5], а комплексе координированный азометиновый C=N связь более удлиненны

(C(2)-N(3) 1,322(8) Å и C(2A)-N(3A) 1.314(8) Å), чем некоординированный (C(5)-N(4) 1.284(9) Å и C(5A)-N(4A) 1.272(9) Å) азотинный связь C=N (табл.3.).

Таблица 4.

Характеристика водородных связей в структуре [ZnL₂Br₂] (D-донор, A-акцептор)

D-H...A	Коды симметрии	Расстояние, Å			Угол DNA, град.
		D-H	H...A	D...A	
BMBC					
N(6) – H(B6A) ... Br(2)	x, y, z	0.90(9)	2.57(9)	3.404(8)	154(7)
N(6A) – H(B6A)...N(4)	x, y, z	0.89(5)	2.08(5)	2.956(9)	168(5)
MMBC					
N(6) – H(A6A)...Br(2)	3/2-x,1/2+y,1/2-z	0.76(7)	2.89(7)	3.531(8)	144(6)
N(6) – H(A6A)...N(4A)	3/2-x,1/2+y,1/2-z	0.76(7)	2.54(6)	3.080(9)	129(6)
N(6A)–H(A6A)... Br(1)	-1/2+x,1/2- y,1/2+z	0.88(9)	2.74(10)	3.442(7)	138(9)

Сопоставление структурных данных тиadiaзольных циклов соединения [ZnL₂Br₂] и 2-амино-5-(R)-тиadiaзола-1,3,4 [5,12] показывает, что отмечается несколько меньшее отклонение атомов от «средней» плоскости (табл.5).

Таблица 5.

Отклонение атомов от «средних» плоскостей в структуре [[ZnL₂Br₂]]

Атом и его отклонение, Å								
N(3)	N(4)	C(5)	C(2)	S(1)	N(6)*	Zn(1)*	Br(1)*	Br(2)*
-0.004	-0.003	0.007	0.008	-0.007	0.009	-0.333	-2.717	0.790
N(3A)	N(4A)	C(5A)	C(2A)	S(1A)	N(6A)*	Zn(1)*	Br(1)*	Br(2)*
0.000	0.007	-0.008	-0.004	0.006	-0.022	-0.385	-2.752	0.911

Помимо этого, в этой работе были изучены значения некоторых торсионных углов молекулы комплекса [ZnL₂Br₂]. Анализ значений торсионных углов в находится удовлетворительном согласии с величинами «усредненной» плоскости пятичленных гетероциклов и углами полиэдра атома комплексообразователя цинка(II) (табл.6).

Таблица 6.

Основные торсионные углы в структуре комплекса [ZnL₂Br₂]

Углы (торсионные)	ω, град.	Углы (торсионные)	ω, град.
Br(1)Zn(1)N(3)C(2)	-81.3 (5)	N(3A)Zn(1)N(3)N(4)	-30.0 (5)
Br(1)Zn(1)N(3)N(4)	86.8 (4)	N(3A)Zn(1)N(3)C(2)	162.0(5)
Br(1)Zn(1)N(3A)C(2A)	-86.8 (6)	Br(2)Zn(1)N(3)N(4)	-152.1 (4)
Br(1)Zn(1)N(3A)N(4A)	77.9 (4)	Br(2)Zn(1)N(3)C(2)	39.9(5)
N(3)Zn(1)N(3A)N(4A)	-165.8 (4)	Br(2)Zn(1)N(3A)N(4A)	-45.5 (4)
N(3)Zn(1)N(3A)C(2A)	29.4(7)	Br(2)Zn(1)N(3A)C(2A)	149.7(6)

А также, в работе был проведен анализ поверхности Хиршфельда данного комплекса (рис. 2).

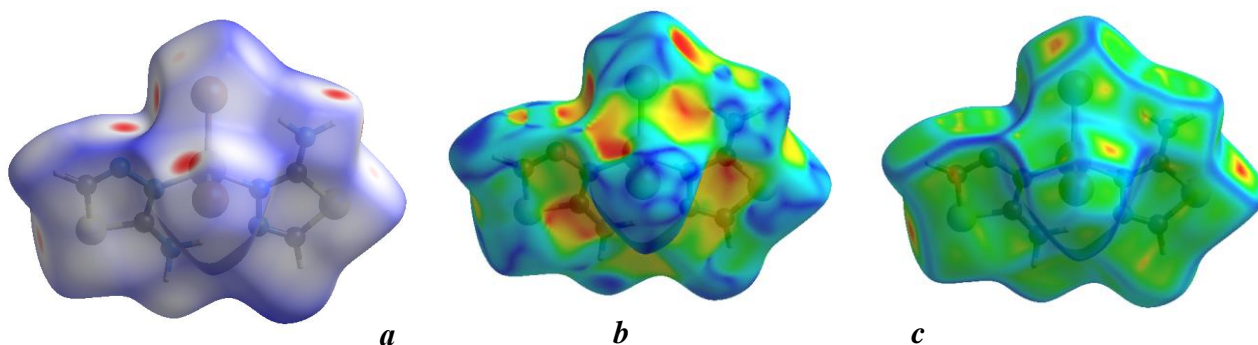


Рис. 2. Анализ поверхности Хиршфельда бис (2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дибромиди цинка(II) (a), площадь показателей формы (b) и кривой линии площадей указывающая зоны взаимодействия бис (2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дибромиди цинка (II) (c)

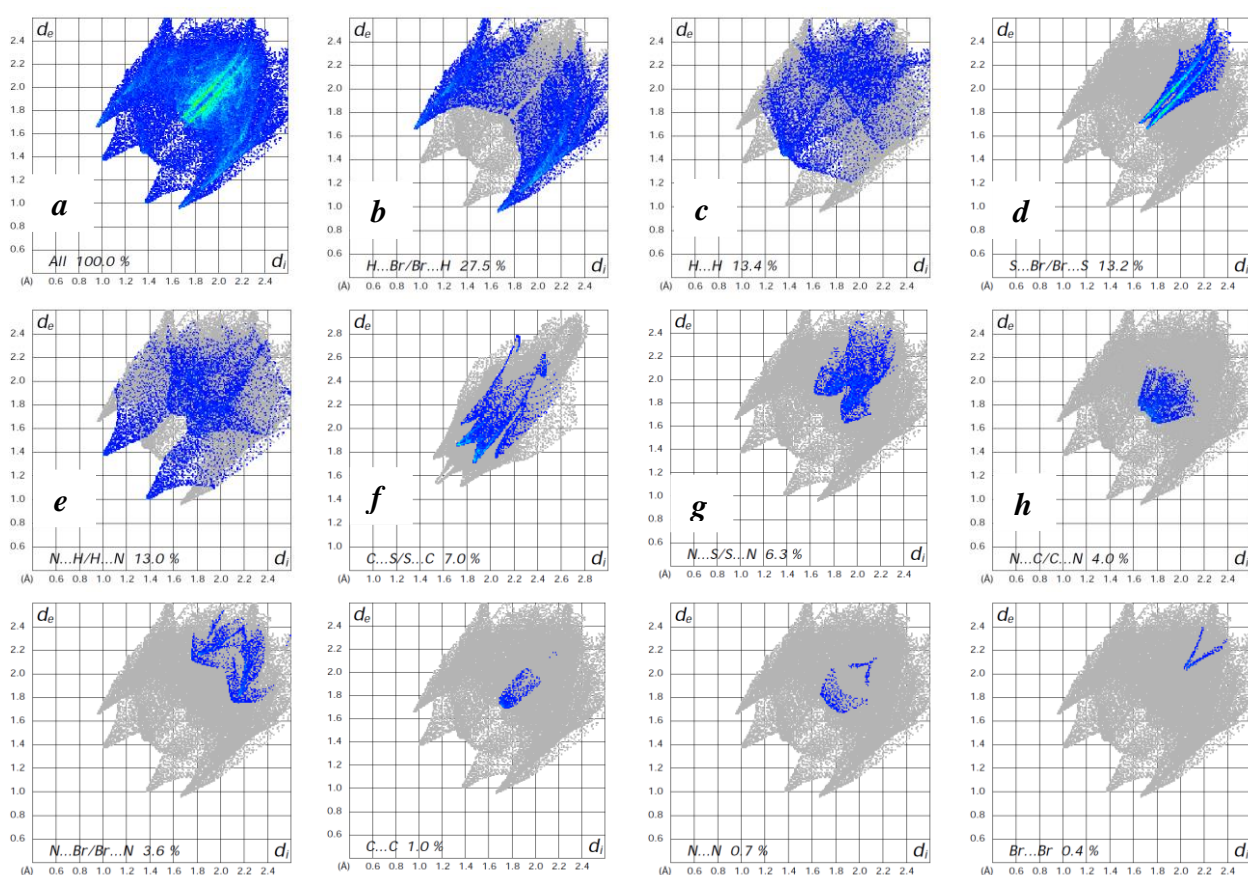


Рис. 3. Двухмерные поля отпечатков пальцев молекулы бис (2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дибромиди цинка(II) и их относительный вклад в поверхность Хиршфельда

Обнаружена природа межмолекулярных взаимодействий в составе кристалла, анализ поверхности Хиршфельда с помощью программы Crystal Explorer 17.5 и поля следов двухмерного пальца [14]. Для построения поверхностей использовалось нормированное расстояние контакта (d_{norm}), которое рассчитывалось следующим образом:

$$d_{norm} = \frac{d_i - r_i^{VdW}}{r_i^{VdW}} + \frac{d_e - r_e^{VdW}}{r_e^{VdW}},$$

где d_i и d_e — расстояние от поверхности до ближайшего атома внутри и вне поверхности соответственно, r^{VdW} — ван-дер-ваальсов радиус атома.

Величина d_{norm} позволяет идентифицировать области, играющие большую роль в межмолекулярных взаимодействиях. Трехмерные карты поверхности Хиршфельда (d_{norm}) отражают короткие контакты, ван-дер-ваальсовы контакты и длинные контакты. Были также построены двумерные развертки поверхности Хиршфельда с использованием расстояний d_e и d_i .

Площадь d_{norm} определена путем расчета внешних (d_e) и внутренних (d_i) расстояний до ближайшего ядра и построена на площади $286,94 \text{ \AA}^3$ и поверхности $273,69 \text{ \AA}^2$, размеры – 0,1306 (красный) до 1,4499 (синий) (рис. 3b). Графики формы-индекса и кривых линий – 0,9915 до 0,9978 а.б. и – от 4.0 до 0.4 а.б. (рис. 4).

Кроме того, были изучены расстояния взаимодействия отдельных атомов в кристаллическом составе молекулы данного комплексного соединения (поля двухмерных отпечатков пальцев и их относительные доли в поверхности Хиршфельда) (рис.5).

Энергии взаимодействия (ккал/моль) между выбранной молекулой и другими окрашенными молекулами рассчитана в модели HF/3-21G в программе Crystal Explorer (рис. 4, табл. 7).

При сравнении геометрических характеристик по данным РСА и расчетным квантово-химическим данным установлено, что расчетные и экспериментальные данные согласуются, что свидетельствует о правильности техники выполнения расчетов и применимости их в априорном предсказании вероятных донорных центров в реакциях комплексообразования.

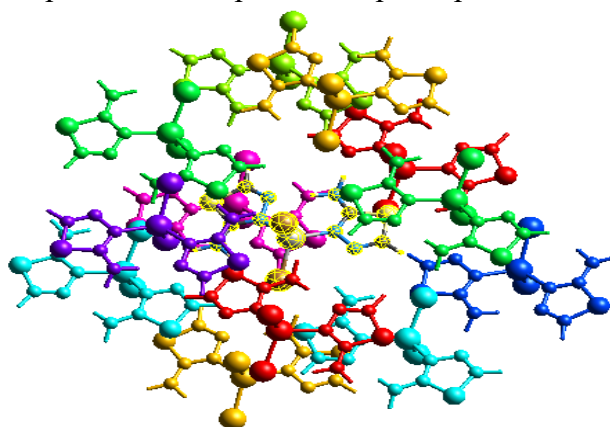


Рис. 4. Молекулы вокруг выбранной (сетчатый желтого света) молекулы показаны разными цветами.

Таблица 7. Энергии взаимодействия (ккал/моль) между выбранной молекулой и другими окрашенными молекулами.

N	Коды симметрии	R	Электронный плотность	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot
2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	7.70	B3LYP/6-31G(d,p)	-36.7	-10.5	-20.4	41.2	-38.9
2	x, y, z	8.00	B3LYP/6-31G(d,p)	-3.9	-5.8	-10.2	7.4	-12.7
1	-x, -y, -z	10.33	B3LYP/6-31G(d,p)	19.8	-2.6	-4.6	0.4	15.2
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	7.68	B3LYP/6-31G(d,p)	-66.3	-17.7	-38.2	75.3	-69.9
2	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	8.05	B3LYP/6-31G(d,p)	-64.0	-14.3	-22.3	42.2	-71.6
1	-x, -y, -z	10.53	B3LYP/6-31G(d,p)	-7.3	-1.6	-9.8	7.2	-13.0
1	-x, -y, -z	7.75	B3LYP/6-31G(d,p)	-20.4	-5.7	-8.1	2.1	-31.5
1	-x, -y, -z	6.40	B3LYP/6-31G(d,p)	-39.7	-8.4	-54.1	44.6	-67.8

Квантово-химические исследования проводились в несколько этапов: разработка теоретической модели исследуемого вещества, оптимизация и расчет физико-химических параметров, обработка и визуализация полученных результатов. В результате сопряжения наблюдается перераспределение электронной плотности. Теоретические квантово-химические исследования выявили фронтальные (граничные) молекулярные орбитали в основном и возбужденном состоянии молекулы.

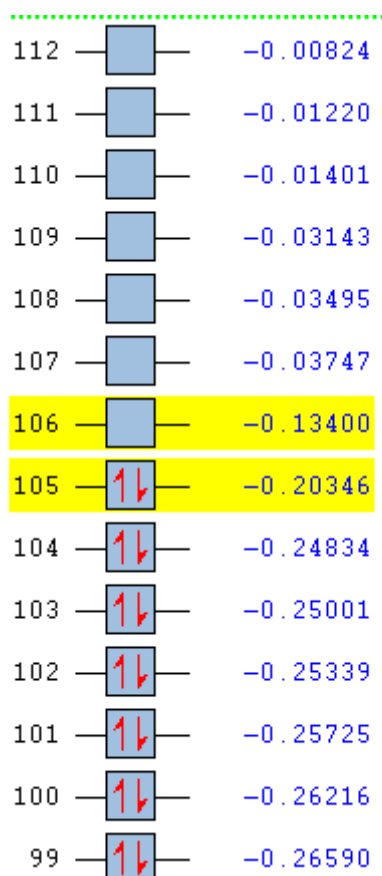
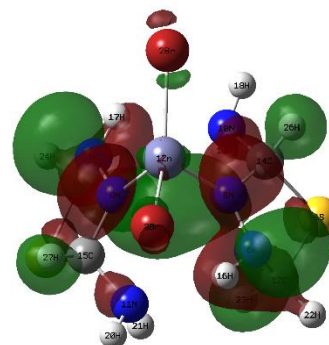
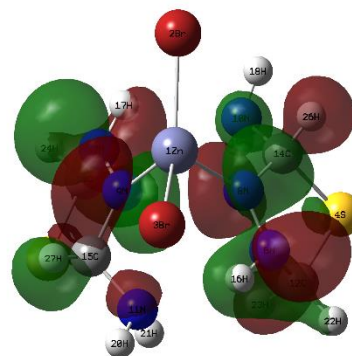


Диаграмма энергетических уровней
ВЗМО и НСМО



$E_{(HOMO)} = -0.13400$ эВ
Электронное строение молекулы
ВЗМО



$E_{(LUMO)} = -0.20346$ эВ
Электронное строение молекулы
НСМО

Выводы.

1. В результате исследований методами ИК-спектроскопии и РСА показано, тетраэдрическая структура комплекса цинка(II), окружённого двумя атомами брома и двумя эндоциклическими атомами азота, находящимися в α -положении к аминогруппе.

2. Согласно полученным данным, межмолекулярные взаимодействия на поверхности Хиршфельда в кристаллической решетке имеют долю: Н...Br/Br...Н (27.5%), Н...Н (13.4%), S...Br/Br...S (13.2%), N...H/H...N (13.0%), C...S/S...C (7.0%), N...S/S...N (6.3%), N...C/C...N (4.0%), N...Br/Br...N (3.6%). Установлена роль галогеновых связей Br-H, Br-N, BMBC и MMBC: N-H...Br, N...H в формировании кристаллической структуры.

Список литературы

1. Попов Н.С., Малыгин А.С., Демидова М.А. Экспериментальная оценка анальгетической активности нового аминокислотного производного 1,3,4-гиадиазолиламида // Врач-аспирант. – 2017. - № 6.4(85) – С. 483-490.

2. Казайшвили Ю. Г., Демидова М. А. Исследование анальгетической активности новых производных тиодиазона // *Современные проблемы науки и образования*. – 2012. – №. 6. – С. 741-741.
3. Салимов Т.М., Куканиев М.А., Сатторов И.Т., Осимов Д.М. Синтез и антимикробная активность 2-бром-7-метил-5-оксо-5Н-1,3,4-тиадиозоло[3,2-а] пиримидинов // *Хим.-фарм. журн.* – 2005. – Т39. - №6. – С.2829.
4. Кристьянсдоттир Сиграйдью Соул, Томпсон Джеффри Скотт Выщелачивание золота с помощью азот- и серосодержащих гетероциклических ароматических соединений // Патент RU 96 109 466 А. 1998.
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. 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.
7. 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-amino-1,3,4-thiadiazole // *Zhurnal Neorganicheskoy Khimii*. – 1998. – № 43(12). – С. 1976–1981.
8. Аоки Исао, Окада Иосиюки. Патент N:47-47028 (Япония)
9. CrysAlisPro. Oxford Diffraction Ltd, Yarnton, England, 2009.
10. G.M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.*, 2008, A64, 112.
11. G.M. Sheldrick, *Acta Crystallogr.*, 2015, A71, 3.
12. Умаров Б.Б., Хусенов К.Ш., Ишанходжаева М.М., Парпиев Н.А., Талипов С.А., Ибрагимов Б.Т. Синтез и кристаллическая структура продукта смешанной конденсации с 2-амино-5-этил-1,3,4-тиадиазола с салициловым альдегидом и ацетилацетоном // “Журнал органической химии”. - Санкт-Петербург. – 1999. – Т.35. – №4. – С. 624–627.
13. Грап С.Р., Кузьмина Л.Г., Порай-Кошиц М.А. и др. // “Координационная химия”. - Москва. – 1993. – Т.19. – №7. – С. 566.
14. M. Kinnon J.J., Jayatilaka D., Spackman M.A. Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces//*Chemical Communications*. – 2007. – №. 37. – P. 3814-3816.

Хусенов Кахрамон Шаимович – к.х.н., доцент кафедры химической технологии Навоийского государственного горно-технологического университета, E-mail: kahramon.husenov71@gmail.com

Умаров Бако Бафаевич – д.х.н., профессор кафедры органической и физколлоидной химии Бухарского государственного университета, E-mail: umarovbako@mail.ru

Тургунов Камбарали Кучкарович – к.х.н., старший научный сотрудник Института химия растительных веществ им. С.Ю. Юнусова Академии Наук Республики Узбекистан, E-mail: kambarali@mail.ru

Ганиев Бахтиёр Шукуруллоевич – докторант кафедры органической и физколлоидной химии Бухарского государственного университета, E-mail: b.ganiyev1990@gmail.com

Бахтиёр Туляганович Ибрагимов – д.х.н., акад., ведущий научный сотрудник Института биоорганической химии им. А.С. Садыкова Академии Наук Республики Узбекистан.