



5,5,-ДИМЕТИЛ-2,4-ДИОКСОГЕКСАН КИСЛОТА МЕТИЛ ЭФИРИНИ КВАНТ-КИМЁВИЙ ҲИСОБЛАШ

Кароматов Сардор Аминович

Ўқитувчи, Бухоро давлат университети

Турсунов Мурод Амонович

к.ф.ф.д., (PhD), доцент, Бухоро давлат университети

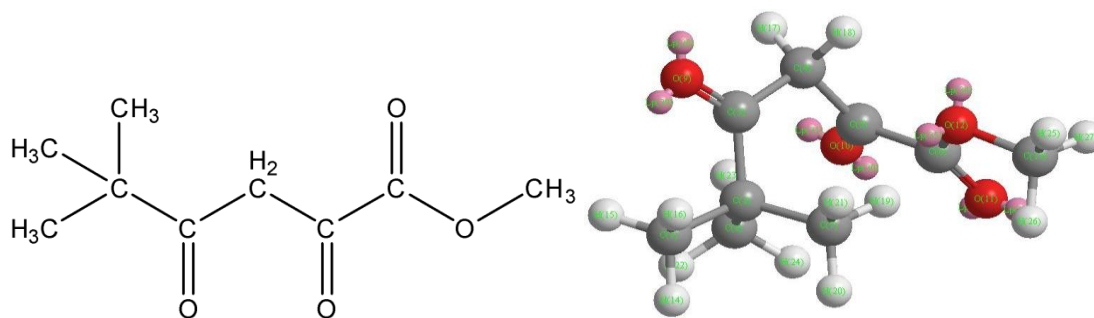
Аннотация: Chem Draw Ultra 16.0 ва Chem3D Pro 16.0 дастурининг эмпирик и яримэмпирик методлари ёрдамида 5,5,-диметил-2,4-диоксогексан кислота метил эфири молекуласи орбиталларининг хоссалари ҳисобланди. Мақолада молекуланинг боғ узунлиги, молекуланинг энергиясини ҳисоблаш ва оптималлаштириши ҳамда ўрганилаётган молекуланинг ММ2 усули ёрдамида квант-кимёвий ҳисоблашлар кўрсатилган.

Калит сўзлар: 5, 5,-диметил-2, 4-диоксогексан кислота метил эфири, молекула, заряд, структура, квант-кимёвий ҳисоблашлар, дипол моменти.

5, 5,-диметил-2, 4-диоксогексан кислота эфирлари ва уларнинг роилгидразонлари биостимуляторлар ва гербицидлар ишлаб чиқаришда қўлланилади. 5, 5,-диметил-2, 4-диоксогексан кислота метил эфири ва у асосидаги комплекс бирикмалар биостимуляторлар ишлаб чиқаришда ишлатилади [1-3]. 5, 5,-диметил-2,4-диоксогексан кислота эфирлари асосида олинган комплекс бирикмалар кўп жиҳатдан ўрганилмоқда [4-7].

Ушбу маълумотлар асосида биз илмий ишимизда 5, 5,-диметил-2,4-диоксогексан кислота метил эфирини координациаланиш хоссасини ўрганишни ўз олдимизга мақсад қилиб қўйдик. Алкиллаш жараёнида реакция дастлаб қайси элемент атомига кимёвий ҳужум билан бошланишини назарий жиҳатдан квант-кимёвий ҳисоблашлар натижасида ўргандик.

Chem3D Pro 16.0 дастурида моддаларни ҳосил бўлиш иссиқлик энергиясини Молекуляр Механика (ММ) усулида оптимизация қилиб топилди. Бунда қуйидаги натижалар олинди (1-жадвал).



1-жадвал



Calculation started

Stretch:	0.1153
Bend:	0.8019
Stretch-Bend:	-0.0186
Torsion:	-5.5800
Non-1,4 VDW:	-0.9196
1,4 VDW:	2.2643
Dipole/Dipole:	0.1230
Total:	-3.2137

Модда таркибидаги ҳар бир элемент атоми атрофидаги электрон зичлик қийматларини ҳисоблаш бу Хюккел методида Chem3D Pro 16.0 дастурида амалга оширилади. 5,5,-диметил-2,4-диоксогексан кислота метил эфирида реакцияда кимёвий хужум кетиши мумкин бўлган эҳтимоллиги юқори элемент атоми – бу кислород, ундан сўнг эса C(5), C(1), C(3) элемент атомлари зканлиги назарий жиҳатдан квант кимёвий ҳисоблашлар натижасида ўрганилди. Натижалар қуйидаги 2-жадвалда келтирилган:

2-жадвал. Молекула таркибидаги атомларнинг Хюккел методи орқали ҳисобланган зарядлар қиймати

C -0.127 [C(1)]	H 0.034 [H(14)]
C 0.059 [C(2)]	H 0.035 [H(15)]
C 0.542 [C(3)]	H 0.035 [H(16)]
C -0.137 [C(4)]	H 0.066 [H(17)]
C 0.460 [C(5)]	H 0.068 [H(18)]
C 0.640 [C(6)]	H 0.156 [H(19)]
C -0.127 [C(7)]	H 0.038 [H(20)]
C -0.128 [C(8)]	H 0.035 [H(21)]
O -0.534 [O(9)]	H 0.038 [H(22)]
O -0.511 [O(10)]	H 0.053 [H(23)]
O -0.712 [O(11)]	H 0.038 [H(24)]
O -0.193 [O(12)]	H 0.024 [H(25)]
C 0.101 [C(13)]	H 0.024 [H(26)]
	H 0.023 [H(27)]

3-жадвал. Internal Coordinates таҳлили натижалари

C(3)							
C(2)	C(3)	1.509					
C(1)	C(2)	1.523	C(3)	108.585			
C(7)	C(2)	1.523	C(1)	110.298	C(3)	108.628	Pro-S
C(8)	C(2)	1.523	C(1)	110.307	C(3)	108.634	Pro-R
C(4)	C(3)	1.509	C(2)	116.136	C(1)	-178.404	Dihedral
O(9)	C(3)	1.208	C(2)	121.929	C(4)	121.935	Pro-R
Lp(28)	O(9)	0.600	C(3)	120.000	C(2)	180.000	Dihedral
Lp(29)	O(9)	0.600	C(3)	109.000	C(2)	0.000	Dihedral
C(5)	C(4)	1.509	C(3)	110.623	C(2)	3.722	Dihedral
H(17)	C(4)	1.113	C(3)	109.118	C(5)	109.125	Pro-S
H(18)	C(4)	1.113	C(3)	109.123	C(5)	109.117	Pro-R
C(6)	C(5)	1.500	C(4)	114.831	C(3)	-89.426	Dihedral



O(10)	C(5)	1.208	C(4)	122.336	C(6)	122.832	Pro-R
Lp(30)	O(10)	0.600	C(5)	120.000	C(4)	180.000	Dihedral
Lp(31)	O(10)	0.600	C(5)	109.000	C(4)	-0.000	Dihedral
O(12)	C(6)	1.338	C(5)	121.200	C(4)	-1.960	Dihedral
O(11)	C(6)	1.208	C(5)	119.901	O(12)	118.899	Pro-R
Lp(32)	O(11)	0.600	C(6)	120.000	C(5)	180.000	Dihedral
Lp(33)	O(11)	0.600	C(6)	109.000	C(5)	0.000	Dihedral
C(13)	O(12)	1.396	C(6)	109.908	C(5)	-176.849	Dihedral
H(14)	C(1)	1.113	C(2)	109.976	C(3)	179.474	Dihedral
H(15)	C(1)	1.113	C(2)	109.968	H(14)	108.970	Pro-R
H(16)	C(1)	1.113	C(2)	109.966	H(14)	108.968	Pro-S
H(19)	C(7)	1.113	C(2)	109.968	C(1)	179.096	Dihedral
H(20)	C(7)	1.113	C(2)	109.970	H(19)	108.968	Pro-R
H(21)	C(7)	1.113	C(2)	109.970	H(19)	108.970	Pro-S
H(22)	C(8)	1.113	C(2)	109.966	C(1)	0.679	Dihedral
H(23)	C(8)	1.113	C(2)	109.968	H(22)	108.968	Pro-S
H(24)	C(8)	1.113	C(2)	109.972	H(22)	108.969	Pro-R
H(25)	C(13)	1.111	O(12)	108.268	C(6)	-179.491	Dihedral
H(26)	C(13)	1.111	O(12)	108.271	H(25)	110.645	Pro-S
H(27)	C(13)	1.111	O(12)	108.271	H(25)	110.645	Pro-R
Lp(34)	O(12)	0.600	C(6)	109.340	C(13)	109.340	Pro-S
Lp(35)	O(12)	0.600	C(6)	109.224	C(13)	109.223	Pro-R

Хулоса. Биз ўрганаётган 5,5,-диметил-2,4-диоксогексан кислота метил эфирини координацион бирикмалар ҳосил қилиш жараёнида кимёвий ҳужум кислород атомлари орқали бориши мумкинлиги назарий жиҳатдан ўрганилди.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Tursunov, M. A., Umarov, B. B., Abdiyev, B. S., & Ganiyev, B. S. (2021). Synthesis, IR, ¹H NMR spectroscopy and X-RAY diffraction analysis of benzoylacetic aldehyde aroylhydrazones. *Elementary Education Online*, 20(5), 7246-7246.
2. Umarov, Baqo, et al. "Learning with EPR and IR-A structure of the copper (ii) in formylpinacoline and benzoylacetic aldehyde aroylhidrazones." *Scientific Bulletin of Namangan State University* 1.1 (2019): 37-43.
3. Umarov, B. B., M. A. Tursunov, and V. V. Minin. "Kompleksy s proizvodnymi ketoal'degidov i ketoefirov." (2016).
4. Турсунов, М. А., & Умаров, Б. Б. (2018). Таутомерия в ряду ацилгидразонов этилового эфира 5, 5-диметил-2, 4-диоксогексановых кислот. *Universum: химия и биология*, (3 (45)), 41-44.
5. Tursunov, M. A., B. B. Umarov, and K. G. Avezov. "Copper (II) complexes with aroylhydrazones of ethyl ether 5, 5-dimethyl-2, 4-dioxohexanoic acid." *Development of science and technology. Scientific and technical journal 2* (2018): 71-75.
6. Турсунов, М. А., et al. "Синтез и кристаллическая структура комплекса никеля(II) с ароилгидразоном этилового эфира 5,5-диметил-2,4-диоксогексановой кислоты." (2020): 78-90.



-
7. Amonovich, T. M., Nematovna, S. D., Giyasovich, A. K., Bafayevich, U. B., Shukurullayevich, G. B., & Qizi, S. N. Q. (2020). Synthesis and ESR Spectroscopy Complexes of Copper (II) with Acyl-and Aroylhydrazones of Methyl Ester of 5, 5-Dimethyl-2, 4-Dioxohexanoic Acid. *American Journal of Heterocyclic Chemistry*, 6(2), 24-29.