



SIANUR KISLOTA SEMIKARBAZONINING ^1H VA ^{13}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 ^1H va ^{13}C spektrlari tahlili keltirilgan.

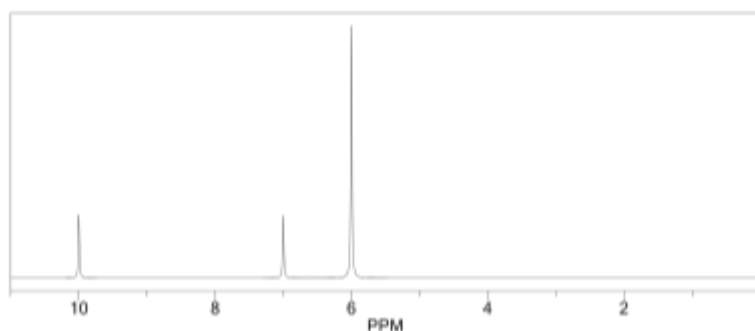
Kalit so`zlar: Chem Draw Professional 16.0, Chem3D 16.0, Gaussian 09w, kvant-kimyoviy tadqiqotlar, ^1H , ^{13}C , spektroskopiya.

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 ^1H – 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 ^1H spektrlari identifikatsiyalangan.

Ushbu maqolada sianur kislota semikarbazonining turli erituvchilarda ^1H va ^{13}C spektrlaridan olingan ma`lumotlarni tahlil keltirilgan.

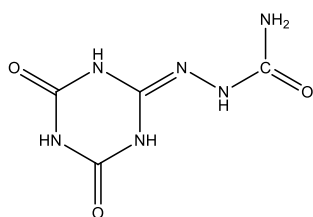
Sianur kislota semikarbazonining ^1H eritmadagi spektrlarida faqat monosiklik shaklga (C) mos keladigan signallar mavjud, spektrlarning turi vaqt o`tishi bilan ham o`zgarmaydi. Ligandning bog`lanish spektridagi amid va imin guruhi proton signallari maxsus ma`lumotlarga ega (1-rasm). Ular odatda 6,08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



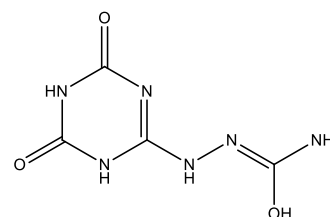
1-rasm. Sianur kislota semikarbazonining CDCl_3 eritmasidagi olingan YaMR- ^1H spektri

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

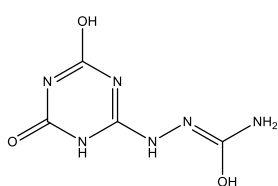
Sianur kislota bilan semikarbazidning kondensatlanish mahsuloti – semikarbazonning eritmadagi 4 xil tautomeriyasi o'rganildi va ulardan sianur halqasiga bog'langan semikarbazidagi keto-guruhning yenol- holatga o'tishi eritma muhitiga ko'ra o'rganildi.



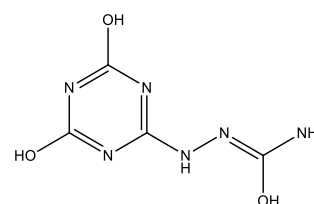
A) 2-(4,6-dioxo-1,3,5-triazin-2-ylidene)hydrazinecarboxamide



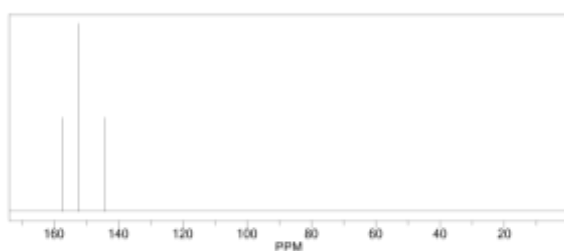
B) (Z)-N'-(4,6-dioxo-1,4,5,6-tetrahydro-1,3,5-triazin-2-yl)carbamohydrazonic acid



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}C spektri



Sianur kislota semikarbazonining DMSO eritmasidagi olingan YaMR-¹³C 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 |
|-------------------------------|----------------------|--------------------|--------------------|---------------------|
| Parametrlar | 0.3065 | 0.4913 | 0.4343 | 0.4023 |
| Kengayuvchanlik | 5.4504 | 4.4746 | 4.2657 | 3.1684 |
| Buriluvchanligi | 0.0438 | -0.0022 | 0.0291 | 0.0030 |
| Sterik-Buriluvchanligi | 9.3529 | 4.9200 | 0.8400 | 0.0160 |
| Torsion qiymati | -1.9163 | -2.3810 | -2.7916 | -3.0005 |
| Non-1,4 VDW | -6.9144 | 1.4374 | 6.1543 | 9.3533 |
| 1,4 VDW | -20.7114 | -6.0702 | -4.5543 | 5.2488 |
| Dipol / Dipol | -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-КИМЁВИЙ 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.