

7universum.com
UNIVERSUM:
ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

UNIVERSUM:
ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Научный журнал
Издается ежемесячно с декабря 2013 года
Является печатной версией сетевого журнала
Universum: технические науки

Выпуск: 11(80)

Ноябрь 2020

Часть 3

Москва
2020

СОЗДАНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ АМИНОАЛКИЛАКРИЛАТОВ С ГАЛОИДСОДЕРЖАЩИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ ДЛЯ МОДИФИКАЦИИ ЦЕЛЛЮЛОЗНЫХ ВОЛОКОН	51
Исмаилов Алишер Исраилович Хасанов Охунжон Хасанович Балтабаев Камил Каримбердиевич Исмаилов Ровшан Исраилович	
ТЕХНОЛОГИЯ ПОЛУЧЕНИЯ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГИДРОИЗОЛЯЦИОННОГО МАТЕРИАЛА	57
Кадыров Абдусамик Абдувасикович Кадыров Нодир Абдусамикович Ходжаев Мохирходжа Тохирович	
РАЗРАБОТКА ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ГРАНУЛИРОВАННОГО АНИОННОГО ПОВЕРХНОСТНО АКТИВНОГО ВЕЩЕСТВА	60
Кадыров Абдусамик Абдувасикович Кадыров Нодир Абдусамикович Шералиева Озода Анваровна Оманова Умида Мадаминжон кизи Кораев Сарвар Эгамназар угли	
БИНАРНЫЕ БУРОВЫЕ РАСТВОРЫ НА ОСНОВЕ ПАВ И АКРИЛОВЫХ ПОЛИМЕРОВ	64
Кадыров Абдусамик Абдувасикович Кадыров Нодир Абдусамикович Шералиева Озода Анваровна Артыкова Жадыра Куанышевна Эшмухамедов Мурод Азимович	
ВЛИЯНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ДО ПОСЕВНОЙ ОБРАБОТКИ НА АГРОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЧВЫ	68
Маматожиев Шарип Икромович Мамаюсипова Мукаддамхон Дилмурод кизи	
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ФЕНОЛОФОРМАЛЬДЕГИДНО-ФУРАНОВЫХ СВЯЗУЮЩИХ	72
Матякубов Рўзибой Муродович Урмонов Солижон Мусаевич Исмоилов Муминжон Юсупович Ўктамова Донахон Олимжоновна	
ИССЛЕДОВАНИЕ ГОССИПОЛОВОЙ СМОЛЫ, ЕЕ ФРАКЦИИ И НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ НА ПРОЦЕСС ТЕРМООКИСЛИТЕЛЬНУЮ ДЕСТРУКЦИЮ КАУЧУКА	77
Мирвалиев Зоид Зохидович	
БИОЛОГИЯ СОРТОВ САХАРНОЙ СВЕКЛЫ, ВРЕДИТЕЛЕЙ, БОЛЕЗНЕЙ И СПОСОБЫ БОРЬБЫ С НИМИ	81
Мирзаева Мутабар Азамовна Акрамов Шохрух Шухратжан угли	
ПЕРЕРАБОТКА СУХИХ И СМЕШАННЫХ СОЛЕЙ ОЗЕРА КАРАУМБЕТ С ПОЛУЧЕНИЕМ ОЧИЩЕННЫХ РАСТВОРОВ	84
Мирзакулов Холтура Чориевич Тожиев Рустам Расулович Бобокулова Ойгул Соатовна Рахматова Нодира Шавкатовна	
ВЛИЯНИЕ ФОРМ АЗОТНЫХ УДОБРЕНИЙ НА УРОЖАЙНОСТЬ ХЛОПКА СОРТА «АНДИЖАН 37»	90
Мирзакулова Гавхарой Муйдиновна	
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ИК- СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВОЙ ХИМИИ КРОТОНИЛИДЕНИМИН-О-БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ	93
Назаров Нурулло Ибодуллоевич Бекназаров Хасан Сойибназарович Раззоқов Ҳасан Қаландарович Назаров Сайфулло Ибодуллоевич	

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ МЕТОДАМИ ИК- СПЕКТРОСКОПИИ И КВАНТОВОЙ ХИМИИ КРОТОНИЛИДЕНИМИН-О-БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ**Назаров Нурулло Ибодуллоевич**

преподаватель,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара
E-mail: nazarov.nurullo@list.ru

Бекназаров Хасан Сойибназарович

д-р техн. наук,
Ташкентский научно- исследовательский институт химической технологии
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Раззоқов Хасан Қаландарович

канд. техн. наук, доцент
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара

Назаров Сайфулло Ибодуллоевич

канд. техн. наук, доцент,
Бухарский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Бухара

SYNTHESIS AND INVESTIGATION BY IR-OF SPETROSCOPY AND QUANTUM CHEMISTRY CROTONYLENE-O-BENZOIC ACID (CBA)**Nurullo Nazarov**

Teacher Bukhara state University
Uzbekistan, Bukhara

Khasan Beknazarov

doctor of technical Sciences,
Tashkent research Institute of chemical technology
Uzbekistan, Tashkent

Khasan Razzoqov

candidate of technical sciences, associate professor,
Bukhara state University
Uzbekistan, Bukhara

Sayfullo Nazarov

candidate of technical sciences, associate professor,
Bukhara state University
Uzbekistan, Bukhara

АННОТАЦИЯ

В статье описан синтез кротонилиденимин-о-бензойной кислоты (КБК). Синтезированное соединение исследовано с применением методов элементного анализа, ИК-спектроскопии и квантово-химических расчетов, произведенных в программах Avogadro, Gaussian и ChemCraft 1.8.

ABSTRACT

This article describes the synthesis of crotonylidenimine-o-benzoic acid (CBA). The synthesized compound was studied using the methods of elemental analysis, IR spectroscopy, and quantum-chemical calculations performed in the Avogadro, Gaussian and ChemCraft 1.8 programs.

Ключевые слова: кротонилиденимин-о-бензойная кислота, квантово-химический расчет, ИК-спектроскопия, основание Шиффа.

Keywords: crotonylene-*o*-benzoic acid, quantum-chemical calculations, IR spectroscopy, Schiff base.

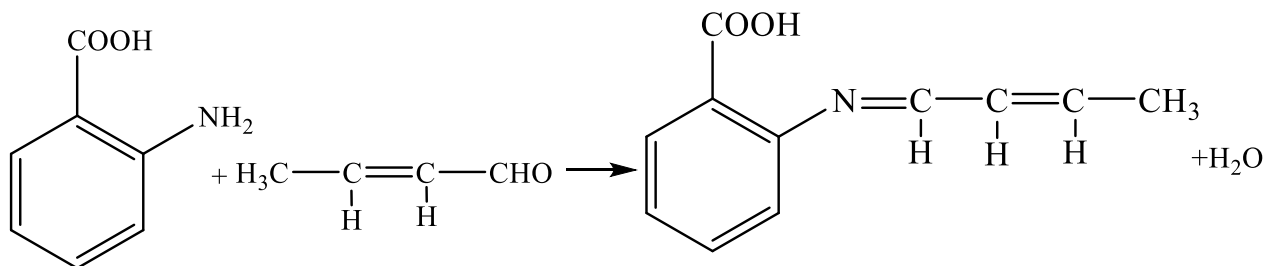
Введение. Поливинилхлорид (ПВХ) является одним из наиболее важных термопластичных полимеров, используемых в нашей повседневной жизни, поскольку он имеет большое техническое и экономическое значение. Но у него все еще есть некоторые проблемы из-за его плохой термостабильности, приводящей к его деструкции в результате реакции дегидрохлорирования [1].

В этом исследовании изучено основания Шиффа полученные по реакции конденсации *o*-аминобензойной кислоты и кротонового альдегида, а также комплексы ионов металлов Mn(II), Co(II), Ni(II) и Cu(II) на их основе и охарактеризованы комплексные соединения. Кроме того, основания Шиффа и его комплексы были исследованы как термостабилизаторы и совместные стабилизаторы для ПВХ. Комплексы обладают более высокой термостабильностью, чем у свободного основания Шиффа.

Нами синтезирован кротонилиденимин-*o*-бензойной кислоты (КБК), который был исследован методом ИК-спектроскопии. Экспериментальные данные сравнены квантово-химическими расчетами, которые произведены в программах Avogadro и Gaussian.

Программа Avogadro предлагает семантический химический конструктор и платформу для визуализации и анализа.

Для разработчиков его можно легко расширить с помощью мощного механизма плагинов для поддержки новых функций в органической химии, неорганических комплексов, лекарств, материалов, биомолекул и симуляции [2].



Для вычислений использовали программное обеспечение Gaussian и Avogadro [6,7,8].

Экспериментальная часть

Кротонилиденимин-*o*-бензойной кислоты (КБК) синтезирован из 2-бутенала и *o*-аминобензойной кислоты. Основание Шиффа получали путем добавления по каплям 2-бутенала (10 ммоль) в 40 мл этанола при непрерывном перемешивании к раствору *o*-аминобензойной кислоты в этаноле (10 ммоль). Смесь перемешивали при комнатной температуре в течение 30 минут, а затем получали желтое твердое вещество, т.пл. = 210 °С, выход 95%, и КБК собирали фильтрованием, промывали этанолом и перекристаллизовывали из ДМФА.

Для построения начальной геометрии и визуализации рассчитанных структур в работе использовался молекулярный редактор Avogadro. Это расширенный молекулярный редактор, разработанный для использования на нескольких платформах, в частности на ОС Windows, применяемый в вычислительной химии, молекулярном моделировании. Avogadro – бесплатная 43 система проектирования и моделирования, которая подходит как для небольших молекул, так и для биомолекул, содержащих в структуре несколько тысяч атомов. Химический редактор Avogadro снабжен комплектами заготовок сложных формул и рисунков, наиболее часто употребляемых в работе (аминокислоты, пептиды, углеводы, стереоизомеры, нуклеотиды, лабораторное оборудование и прочее). Avogadro позволяет выполнять следующие функции:

- создавать на экране химические структурные формулы, схемы реакций, лабораторные установки;
- рассчитывать энергетические и пространственные параметры системы (распределение электронной плотности, энергию и длину связей, валентные углы);
- рассчитывать энергию молекулы в стационарном и возбужденных состояниях на основе классической механической модели атомов;
- рассчитывать другие молекулярные характеристики и вероятность пути прохождения химических реакций [3, 4].

Квантово-химические параметры производной кротонового альдегида изучены на примере синтезированного кротонилиденимин-*o*-бензойной кислоты (КБК).

Найдено, %: С 69,84; Н 5,82; N 7,41; О 16,93. Для C₁₁H₁₁NO₂ вычислено, %: С 69,78; Н 5,80; N 7,37; О 16,9 [9].

Результаты исследования

ИК-спектроскопическое исследование проводили в Ташкентском научно-исследовательском институте химической технологии. Инфракрасные спектры с IRAffinity-1S преобразованием для высушенных веществ были записаны с помощью ИК-спектрофотометра Shimadzu в диапазоне от (4000–400 см⁻¹) [2-4]. Подготовленные основания Шиффа (КБК), и их структуры характеризуются с помощью ИК-спектроскопии.

В ИК-спектре кротонилиденимин-*o*-бензойной кислоты (КБК) показал пик в 1575,84 см⁻¹, которое

можно отнести к растяжению азотиновой группы $C=N$. Сдвиг в этой полосе к более низкому волновому числу ($1543-1554\text{ см}^{-1}$) указывает на то, что азотиновая группа основания Шиффа (КБК) координирована с ионами металлов во всех комплексах.

Основание Шиффа (КБК) содержит бензойного ядро, пик при $1654,92\text{ см}^{-1}$ можно отнести к $C=N$ растяжению бензольного кольца [10]. Никаких существенных изменений в инфракрасных спектрах комплексов не наблюдается, это указывает на то, что $C=N$ бензольного кольца не участвует в хелатировании.

В ИК-спектре кротонилденимин-о-бензойной кислоты (КБК) (рис.1-4) колебательная частота $\nu(C=N)$ ($1575,84\text{ см}^{-1}$) по сравнению с ИК-спектром расчета в программном пакете Avogadro (полоса поглощения $\nu(C=N)$ (10 см^{-1}) смещена в область низких частот на $6,08\text{ см}^{-1}$ [11].

На ИК спектре кротонилденимин-о-бензойной кислоты (КБК) нет полос, отвечающих валентным колебаниям NH (рис. 2). Данная структура определяется, исходя из молекулярной формулы и наличия в спектре полос ароматического амина и группы $C=N$. Характерным также является наличие валентных колебаний $C=N$ групп в интервале 3350 см^{-1} , а также деформационных колебаний $C=N$ групп, выраженных при $1575, 1602$ и 1654 см^{-1} ; эти пик можно доказать обменом $C=O$ группы на $C=N$ группу, обмен доказывается исчезновением в интервале 1725 см^{-1} и 1000 см^{-1} соответствующих валентных и деформационных колебаний альдегидной группы и появлением новой полосы при 1654 см^{-1} , соответствующей $C=N$ группе. В области 1435 см^{-1} и 1454 см^{-1} выраженные полосы в виде дублета относятся к деформационным колебаниям $=C-CH_3$ метильных групп кротонического альдегида. Полосы в области $1207-1232\text{ см}^{-1}$ обусловлены асимметричными валентными колебаниями $-COOH$ групп аминокарбоновых соединений.

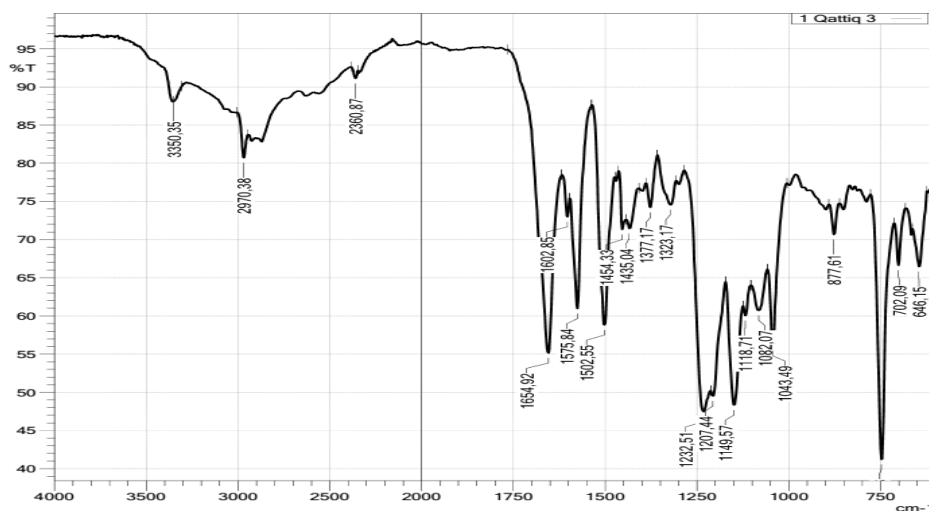


Рисунок 1. ИК-спектр кротонилденимин-о-бензойной кислоты (КБК), полученный с помощью ИК-спектрофотометра

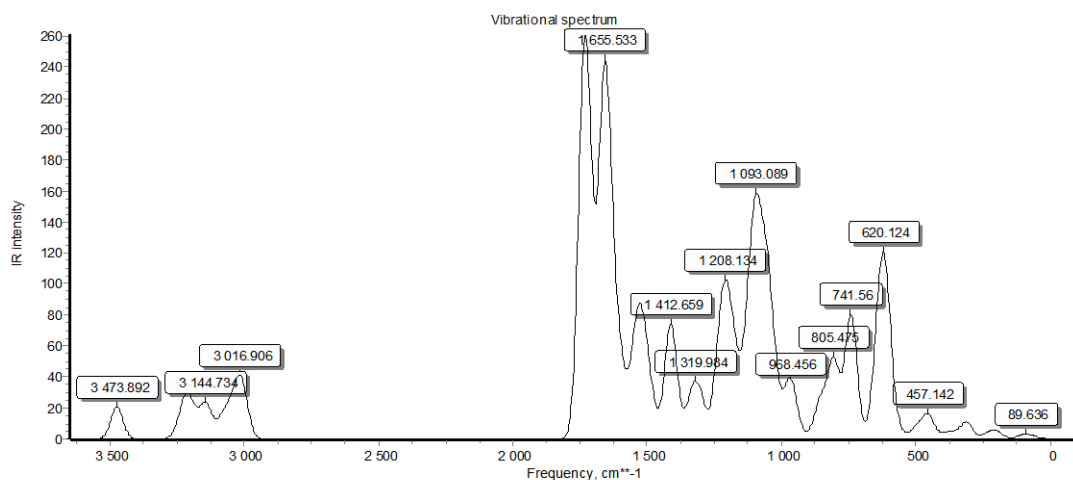


Рисунок 2. ИК-спектр кротонилденимин-о-бензойной кислоты (КБК), рассчитанный с помощью программы CHEMCRAFT 1.8

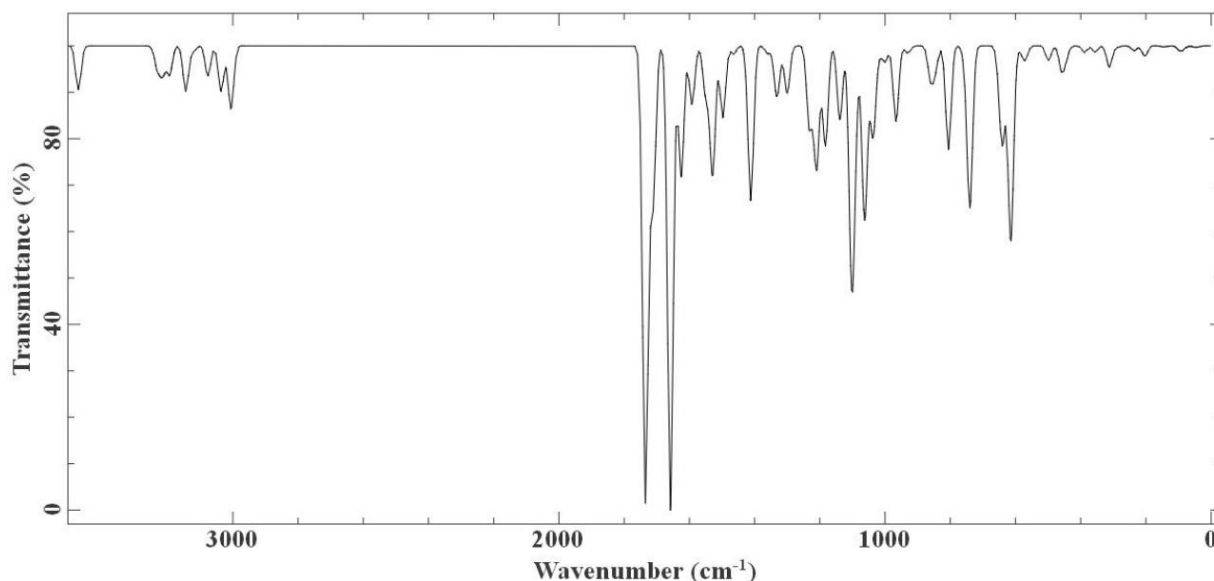


Рисунок 3. ИК-спектр кротонилиденимин-о-бензойной кислоты (КБК), рассчитанный с помощью программы AVOGADRO

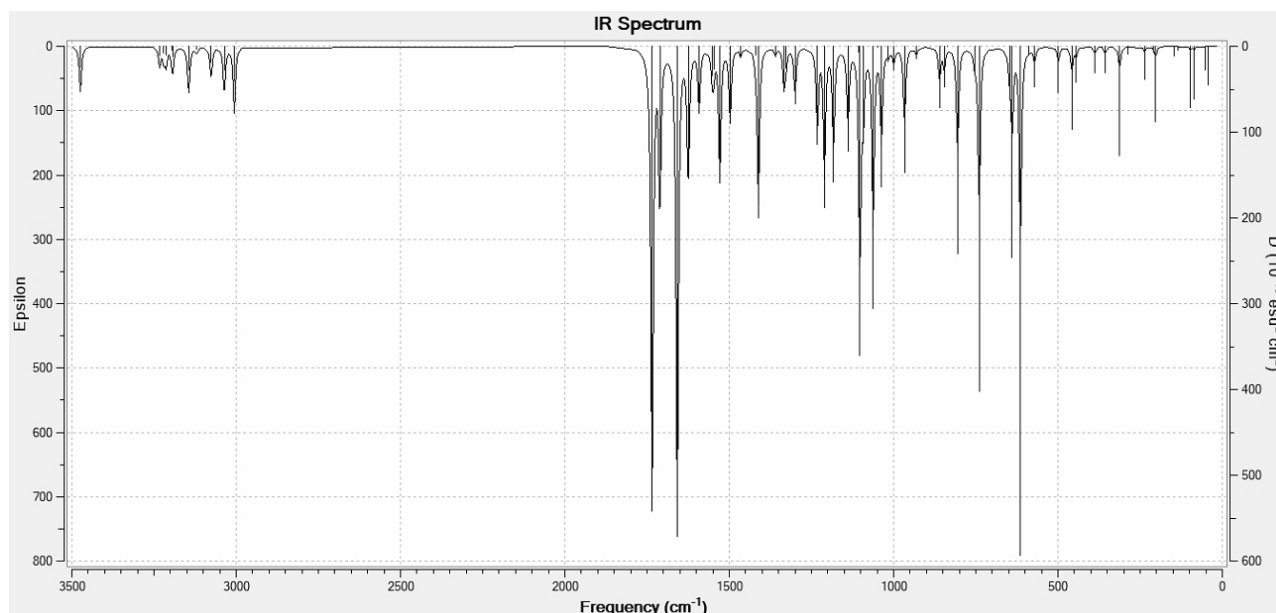


Рисунок 4. ИК-спектр кротонилиденимин-о-бензойной кислоты (КБК), рассчитанный с помощью программы GAUSSIAN

Заключение. Интерпретация экспериментальных спектров проводилась по сравнению с нормальными частотами и ИК интенсивности, рассчитанные на уровне DFT(B3LYP)/3-21G. Формы теоретически предсказанных нормальных колебаний были представлены с точки зрения распределения потенциальной энергии. Из исследований (квантово-химические расчет, элементный анализ и ИК-спектры)

можно сделать следующие выводы о относительно хелатирующих свойств основания Шиффа, а также стереохимии его соответствующих комплексов металлов. Основания Шиффа ведут себя как мононегативные бидентатные лиганды NO, координация происходит через азометиновый азот и депротонированные карбоксильные атомы кислорода в основания Шиффа.

Список литературы:

1. Braun D, Iva'n B, Kelen T, Tu"do"s F. Structural defects in poly(vinyl chloride). IV. Thermal degradation of vinyl chloride/acetylene copolymers. EurPolym J. 1986;22:1–4.
2. Hanwell M.D. Avogadro: An advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform / M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison // J. Cheminform.– 2012. – Vol. 4 (1). –P. 17.

3. Артюшенко П.В. Атомная и электронная структуры феромонов в основном и возбуждённом состояниях: Дис.....канд. физ-мат. наук. – Красноярск: ФИЦ КНЦ СО РАН, 2019. – 100 с.
4. Соловьев М.Е. Компьютерная химия / М.Е. Соловьев, М.М. Соловьев. – М.: Солон-Пресс, 2005. – 536 с.
5. Цирельсон В.Г. Квантовая химия: молекулы, молекулярные системы и твердые тела: учеб. пособие для студентов вузов, обучающихся по хим.-технолог. направлениям и специальностям.– М.:БИНОМ. Лаборатория знаний, 2010. – 496 с. Режим доступа :<http://www.biblioclub.ru/book/95498/>
6. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, et.al., GAUSSIAN 98, Revision A.11, Gaussian, Inc., Pittsburgh, PA, 2001.
7. N. Sundaraganesan, S. Ilakiamani, P. Subramanian, B.D. Joshua, Spectrochim. Acta 2007, 67A., 628-635
8. Zhurko G.A., and D.A. Zhurko. "ChemCraft version 1.6 (build 312)." (2013). C. Lee, W. Yang, R.G. Parr, Phys. Rev. B 1988, 37, 785.
9. Назаров Н.И., Бекназаров Х.С., Мирзаева Г.А. Синтез некоторых комплексов переходных металлов в качестве термостабилизаторов поливинилхлорида и их характеристика // Материалы международной научной конференции «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства». 1 ТОМ. 14-16 ноябр. Бухара, -2019. - С. 83-85.
10. Hawkins WL. Polymer stabilization. New York: Wiley Interscience;1972. p. 132.
11. Ganiyev B., Ostonov F., Kholikova G., Salimv F. Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide // International Independent Scientific Journal. Vol.2. №. 16. P. 3-9.