



ИЗУЧЕНИЕ ЭНЕРГИИ РАЗЛИЧНЫХ КОНФОРМАЦИИ МОЧЕВИННО ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОДУКТОВ ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ

Бахтиёр Шукуруллоевич Ганиев, Гуляйра Кулдошевна Холикова

Ассистент, Бухарский государственный университет

Ферангиз Садилловна Аслонова

Студент, Бухарский государственный университет

Abstract: Даны рекомендации по использованию пакета химических приложений ChemOffice в преподавании химии в школе и для проведения научных физико-химических исследований. Показано, что данный программный пакет включает такие специализированные приложения как ChemDraw, позволяющее составлять и редактировать структурные формулы, Chem3D-программу для визуализации пространственного строения соединений, а также проведения физико-химических расчетов. На примере мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты рассмотрены различные конформации, обусловленные поворотом вокруг одинарных сигма-связей и двумерных сигма-пи связей.

Ключевые слова: ChemOffice, Chem3D, образовательный процесс, компьютерные технологии.

В настоящее время компьютерные технологии, по праву, играют всё возрастающую роль в образовательном процессе. В них, в частности, заложены практически неисчерпаемые возможности для качественно нового уровня преподавания и изучения дисциплин химико-биологического цикла; компьютер становится таким же инструментом исследования, как привычный химический или физический эксперимент. Сформировался значительный контингент исследователей, преподавателей, инженеров, для которых применение компьютеров, например, в химии, стало основной областью приложения творческих сил. Появились новые журналы, например, «Компьютерная химия», целиком посвящённые компьютерному моделированию в химии [1-5].

В программе Chem3D заложены большие возможности для изучения конформаций молекул – геометрических форм, возникающих в результате вращения (поворота) вокруг одинарных связей на угол φ (торсионный). Для изображения конформаций часто используют проекции Ньюмена. Обычно более устойчивыми являются *анти* (заторможенная) – и *гош* (скошенная) – конформации. В них минимальны Ван-дер-Ваальсово и торсионное напряжения. Ряд факторов (внутримолекулярные водородные связи, ионные взаимодействия) способны дополнительно стабилизировать гош-конформацию и делать ее наиболее устойчивой. Длинные углеродные цепи могут принимать нерегулярную, клешневидную, зигзагообразную конформации.

Изучим зависимость потенциальной энергии конформаций мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты, возникающих в результате поворота вокруг триазинового гетероцикла некоторых связи C-N-C-N или C-N и неспаренного электрона азота и кислорода, от угла φ .



Для этого в рабочем окне ChemDraw воспользуемся контекстным меню заготовок, вызываемых кнопкой «Templates» главной панели. Можно нарисовать и вручную. Скопируем конформацию и вставим в рабочее окно Chem3D. Генерируемую таким образом пространственную модель для большей наглядности представим в форме «Sticks» (стержни) (пункт меню View/Model Display/Display Mode/). Проведем оптимизацию геометрии с помощью метода молекулярной механики (функция MM2, пункт меню Calculations/MM2/Minimize Energy). Для конформационного анализа выделим связь C2–C3 и запустим программу расчета зависимости энергии конформации от угла ϕ (пункт меню «Calculations/Dihedral Driver»).

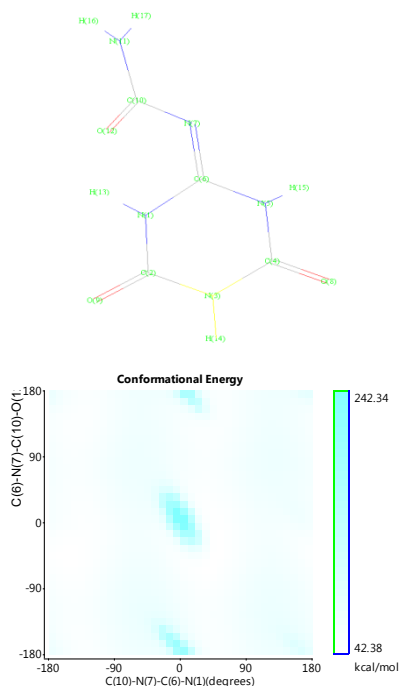


Рис.1. Структура монозамещенного продукта (СуМ1) и энергия сюжета с двойным углом

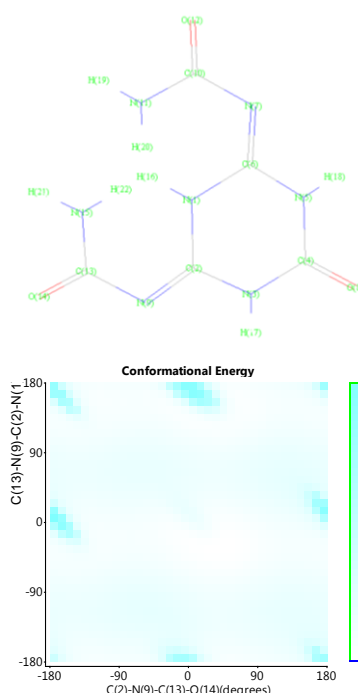


Рис.2. Структура дизамещенного продукта (СуМ2) и энергия сюжета с двойным углом

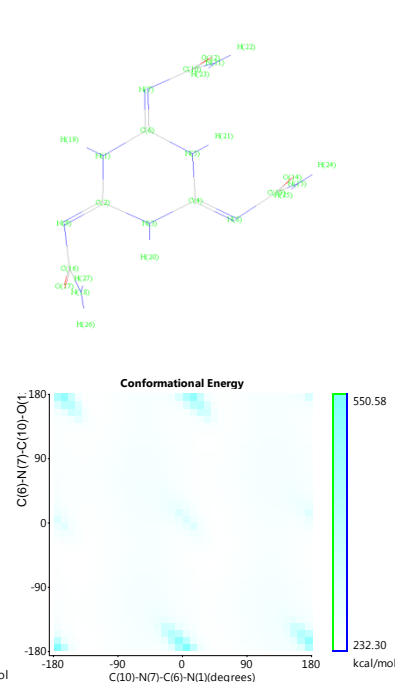


Рис.3. Структура тризамещенного продукта (СуМ3) и энергия сюжета с двойным углом

Найденному из графика (рис.1-3) минимуму и максимуму энергии сюжета с двойным углом для мочевино замещенных продуктов составляет как представленным таблицам 1.

Таблица 1 Энергия сюжета с двойным углом для мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты

Энергия сюжета с двойным углом для монозамещенного продукта	Энергия сюжета с двойным углом для дизамещенного продукта	Энергия сюжета с двойным углом для тризамещенного продукта
242,34 макс	300,38 макс	550,58 макс
42,38 мин	128,40 мин	232,30 мин

Ниже представленных рисунках 4-5 показано конформационный анализ – производных циануровой кислоты конформирующая вокруг триазинового гетероцикла некоторых связи



C-N-C-N или C-N и неспаренного электрона азота и кислорода и зависимость энергии от внутреннего угла

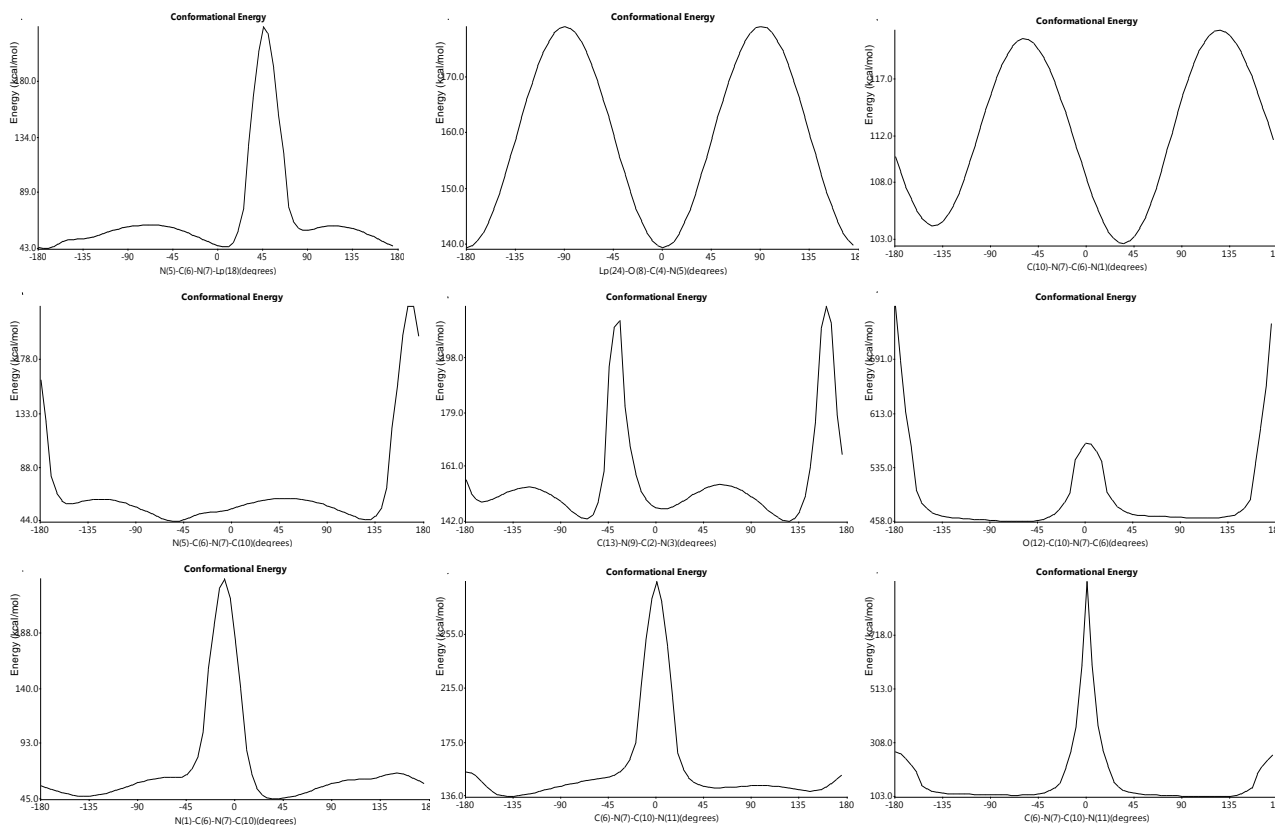


Рис.4. Зависимость энергии монозамещенного продукта (CyM1)

Рис.5. Зависимость энергии дизамещенного продукта (CyM2)

Рис.6. Зависимость энергии тризамещенного продукта (CyM3)

Литература

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. Erdemir, Fatoş, et al. "Synthesis, crystal structures, spectral investigations, conformational analysis and DFT studies of N-heterocyclic carbene precursors." Journal of Molecular Structure 1204 (2020): 127519.
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. "HYPERCHEM 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.
10. Ганиев, Бахтиёр Шукуруллаевич, and Гуляйра Кулдошевна Холикова. "Синтез и исследование методами ИК-спектроскопии и квантовой химии-6-((2,4-динитрофенил) гидразон-1,3,5-триазинан-2,4-диона." *Universum: химия и биология* 6 (2020): 68-73.
11. Абдурахмонов, Сайфиддин Файзуллаевич, Бако Бафоевич Умаров, Эътибор Ахадовна Худоярова, and Бахтиёр Шукуруллаевич Ганиев. "Синтез и исследование электронной структуры малоноилгидразон салицилового альдегида с помощью квантово-химических расчетов." *Евразийский союз ученых* 9-3 (2020): 54-57.
12. Ганиев, Бахтиёр Шукуруллаевич, Гуляйра Кулдошевна Холикова, Гулмира Гайбуллаевна Садуллаева, Фуркат Гайрат Угли Салимов, and Ферангиз Садиллоевна Аслонова. "Использование программы CHEMSKETCH в процессе изучения органической химии для повышения успеваемости учащихся." *Universum: психология и образование* 12 (90) (2021): 14-17.
13. Фатеев, Александр Владимирович, Евгений Валериевич Полицинский, and Олег Хемович Полещук. "Использование программного пакета chembiooffice'2010 в профильном химическом классе." *Бутлеровские сообщения* 34.3 (2013): b1-5.