INDENNI FIZIK VA KIMYOVIY XOSSALARI, INDEN MOLEKULASIDA ELEKTRON BULUTI VA ZARYAD TAQSIMOTI

Dadaxanova Gulnoza Ahmadjonovna
Namangan davlat-texnika unversiteti doktoranti
E-mail: gulnoza84@gmail.com
Soliyev Maxammadjon Ismatullayevich
Namangan davlat-texnika unversiteti Kimyo kafedrasi mudiri
E-mail: muhammadbey@mail.ru

Annotasiya. Ushbu maqolada indenni fizik va kimyoviy xossalari elektron buluti va zaryad taqsimoti bilan chambarchas bog‘liq. Kvant kimyoviy tahlillar inden molekulasining elektron tabiatini chuqur o‘rganish, uning reaksion qobiliyatini yaratish va yangi organik hamda polimer materiallar yaratish muhim ahamiyatga ega. Inden-1 karbon kislotasini kvant-kimyosini o‘rganish va biologik faolligini baholashni asosiy maqsadlaridan biridir. Inden-1 karbon kislotasining molekulyar tuzilishi, geometriyasi, atomlaridagi zaryad taqsimoti va boshqa kvant-kimyoviy hossalari yarim emperik usulda aniqlangan.

Kalit so‘zlar. Inden, karbon kislota, kvant kimyosi, molekula, zaryad taqsimoti, elektron tuzilishi, benzol.

Abstract. This article examines the physical and chemical properties of indene, closely related to its electron cloud and charge distribution. Quantum chemical analysis is important for a thorough understanding of the electronic nature of the indene molecule, its reactivity, and the creation of new organic and polymeric materials. One of the main goals of studying the quantum chemistry of indene-1-carboxylic acid and assessing its biological activity is to study its molecular structure, geometry, atomic charge distribution, and other quantum chemical properties using a semiempirical method.

Key words. Indene, carboxylic acid, quantum chemistry, molecule, charge distribution, electronic structure, benzene.

Аннотация. В данной статье рассматриваются физические и химические свойства индена, тесно связанные с его электронным облаком и распределением заряда. Квантово-химический анализ важен для глубокого понимания электронной природы молекулы индена, её реакционной способности и создания новых органических и полимерных материалов. Одной из основных целей изучения квантовой химии инден-1-карбоновой кислоты и оценки её биологической активности является изучение её молекулярной структуры, геометрии, распределения атомного заряда и других квантово-химических свойств полуэмпирическим методом.

Ключевые слова. Инден, карбоновая кислота, квантовая химия, молекула, распределение заряда, электронная структура, бензол. Ключевые слова. Инден, карбоновая кислота, квантовая химия, молекула, распределение заряда, электронная структура, бензол.

Kirish

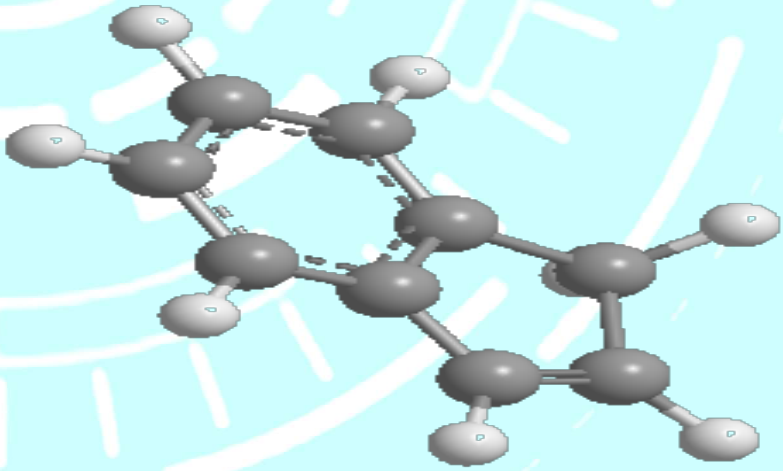
ISSN 3030-3907

Jahonda neft-gaz sanoatining jadal rivojlanishi natijasida hosil bo‘ladigan ikkilamchi mahsulotlarni qayta ishlashning nazariy asoslarini ishlab chiqish, ular asosida hosil bo‘ladigan yangi mahsulotlarni olish usullarini tavsiya etish bo‘yicha ilmiy tadqiqot ishlari olib borilmoqda. Xususan, Inden-aromatik uglevadarod bo‘lib, uning molekulasi bitta benzol halqasi va bitta siklopentadiyen halqasidan iborat. Bu ikkala halqa qo‘shilgan bo‘lib, umumiy ikkita uglerod atomiga ega. Shuning uchun u polisiklik aromatik birikma hisoblanadi. U tabiiy ravishda ko‘mir smolasi va xom neft tarkibida mavjud bo‘lib ruda yoqilg‘isi va shunga o‘xshashlarni to‘liq yondirilmaganda inden xam ajralib chiqadi. Inden 1890 yilda “kraemer” tomonidan ko‘mir smolasidan topilgan. Inden rangsiz yoki och sariq suyuqlik toza holatda rangsiz, saqlanishi davomida ozgina ranglanishi mumkin. Hidi: Kuchli, o‘ziga xos aromatik hidga ega. Molekulyar formulasi: C9H8. Molekulyar massasi 116.16 g/mol, erish harorati: -5^{0}C, Qaynash harorati: 181-182 ^{0}C (normal bosimda), Zichligi (25^{0}C da): taxminan 0.996 g/cm^3, suvdagi eruvchanligi: juda past (amalda suvda erimaydi), organik erituvchilardagi eruvchanligi: efir, etanol, benzol va boshqa organik erituvchilarda yahshi eriydi. Indenni kimyoviy xossalari Inden molekulalari yuqori kimyoviy faol olefin birikmalarini o‘z ichiga oladi va polimerlanish yoki qo‘shilish reaksiyalariga moyil. Inden xona haroratida, isitish yoki kislotali katalizator ishtirokida polimerizatsiya qilinishi mumkin, polimerizatsiya tezligini keskin oshiradi. Inden polimerlanadi atrof muhit haroratida va qorong‘uda, sharoitga qarab osongina polimerlanish xosil qiladi. Polimerizatsiya issiqlik, kislota va Friedel-Crafts katalizatorlari bilan tezlashadi. Chunki inden kabi birikmalarning kimyoviy reaksiyalari, ayniqsa polimerlanish yoki substitutsiya (o‘rin bosish) reaksiyalari, Friedel-Crafts katalizatorlari ishtirokida tezroq va samaraliroq bo‘ladi. Friedel-Crafts katalizatori qanday ishlaydi. 1. Inden kabi birikmalarning karbokation yoki komplekslar hosil qilishini tezlashtiradi. 2. Polimer zanjirning boshlanishi va davom etishi osonroq bo‘ladi. Polimerizatsiya issiqlik, kislota va Friedel-Crafts katalizatorlari bilan tezlashadi. Chunki inden kabi birikmalarning kimyoviy reaksiyalari, ayniqsa polimerlanish yoki substitutsiya (o‘rin bosish) reaksiyalari, Friedel-Crafts katalizatorlari ishtirokida tezroq va samaraliroq bo‘ladi. Friedel-Crafts katalizatori qanday ishlaydi. 1. Inden kabi birikmalarning karbokation yoki komplekslar hosil qilishini tezlashtiradi. 2. Polimer zanjirning boshlanishi va davom etishi osonroq bo‘ladi. Tadqiqot ishlarida indenni fizik kimyoviy xossalari ilmiy va amaliy ahamiyatga ega.[1]. Shuning uchun indenni fizik va kimyoviy xossalarini tarkibini to‘g‘ri tahlil qilish muhim hisoblanadi. Hozirgi kunda komp’yuter dasturlari asosida tadqiqot usullari ham kimyo fanida katta ahamiyat kasb etmoqda. Bu talaba va tadqiqotchilarga molekulaning xossalarini tushunishni osonlashtiradi. Nafaqat, nazariy kimyo emas, balki ilm-fan va texnologiyaning eng ilg‘or yo‘nalishidir. U tajriba vaqtini qisqartiradi, xavfni kamaytiradi, natijalarni aniq qiladi va yangi ilmiy kashfiyotlarga yo‘l ochadi.[2.3]. Inden molekulasi kvant-kimyoviy hisoblashlardan foydalanib kimyoviy reaksiya mexanizmlarini nazariy

ISSN 3030-3907

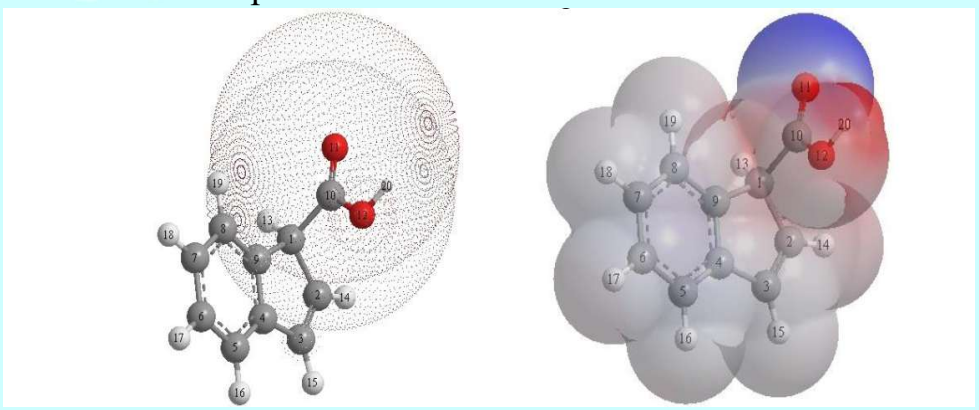
asoslash, molekulaning elektron zichligi, orbitallari va geometriyasini 3d formatda ko‘rish, dastur orqali energiya minimumini topish, zaryad taqsimoti, reaktiv markazlarini aniqlash, tajriba o‘rnini bosuvchi xavfsiz usullardan foydalanish, tajriba natijalarini bashorat qilish, yangi moddalar yaratishda yordam beruvchi, fanlararo integratsiya, birikmaning reaksion qobiliyatini baholash, eksperimental ishni kamaytiradi va xatolikni pasaytiruvchi, uning geometrik elektron tuzilishini o‘rganish davomida talaba va tadqiqotchilarga molekulaning xossalarini tushunishni osonlashtiradi.[4.5.6].

Kvant-kimyoviy hisoblash yarim emperik usulda bajarilgan (1-rasm) da inden molekulasining molekulyar-mexanik optimallashtirishdan 3d modeli tasvirlangan bo‘lib, unda atomlarning tartib bilan joylashishi ko‘rsatilgan.[7.8.9]. Rasmdan ko‘rinadiki, molekulada sterik o‘zgarishlar mavjud hamda karboksil guruhi inden tekisligiga nisbatan perpendikulyar tarzda joylashgan. [10.11.12.].



1.-Rasm. Inden molekulasining 3D tuzilishi

Molekulaning bunday tuzilishi karboksil guruhidagi elektronlarning uglerod va kislarod atomlari bo‘ylab siljishini osonlashtiradi va umumiy zaryad zichligini (2-rasm) va elektrostatik potentsialida ko‘rishimiz mumkin.



2-rasm. **3-rasm.**

2-rasm: Umumiy zaryad zichligining taqsimlanish diagrammasi .

3-rasm: Elektrostatik potensialning molekulada taqsimlanish diagrammasi: ko‘k rangda musbat qiymatlar,qizil rangda manfiy qiymatlar tasvirlangan.

Molekulaning umumiy zaryad zichligini (3-rasm) da va elektrostatik potentsialini shu guruhda taqsimlanishiga imkon beradi. Molekulaning bog‘

ISSN 3030-3907

uzunligi va valent burchaklari kabi geometrik ko‘rsatkichlarini tavsiflovchi hisoblash natijalari.

1-jadval.

Inden molekulasidagi hisoblangan bog‘ uzunliklari va valent burchaklar qiymati

Atomlar		Bog‘ uzunligi, A^0	Atom	Bog‘ burchagi, grad	Atom	Ikki tomonlama burchak, grad
4 C						
9 C	C(4)	1.3941				
1 C	C(9)	1.5227	C(4)	109.1543		
8 C	C(9)	1.3737	C(1)	129.8258	C(4)	120.9903
3 C	C(4)	1.4784	C(9)	108.1452	C(1)	0.8818
5 C	C(4)	1.3782	C(3)	131.2942	C(9)	120.5585
6 C	C(5)	1.3888	C(4)	118.5612	C(3)	-179.4707
7 C	C(8)	1.3914	C(9)	118.5459	C(1)	178.5070
2 C	C(1)	1.5258	C(9)	101.6839	C(4)	-1.3584
10 C	C(1)	1.5044	C(2)	111.8187	C(9)	111.3844
12 O	C(10)	1.3506	C(1)	112.2719	C(2)	-55.9773
11 O	C(10)	1.2038	C(1)	125.3525	O(12)	122.3755
14 H	C(2)	1.06833	C(1)	122.1697	C(3)	126.6719
15 H	C(3)	1.0692	C(2)	126.1202	C(4)	124.0304
16 H	C(5)	1.0727	C(4)	120.9862	C(6)	120.4525
17 H	C(6)	1.0721	C(5)	119.5943	C(7)	119.5988

ISSN 3030-3907

18 H	C(7)	1.0711	C(6)	119.8061	C(8)	119.6596
19 H	C(8)	1.0724	C(7)	120.2932	C(9)	121.1607
13 H	C(1)	1.0810	C(2)	112.2702	C(9)	112.2132
20 H	O(12)	0.9689	C(10)	111.7573	C(1)	-178.1882

Molekuladagi atomlarning energetik ko‘rsatkichlari zaryad birliklarida hisoblab topildi va 2-jadvalda keltirildi.

2-jadval.

Inden molekulasi atomlardagi hisoblangan zaryad qiymati.

Atom	Zaryad qiymati, atom birligida	Atom	Zaryad qiymati, atom birligida
[C(1)]	-0.048	[O(11)]	-0.630
[C(2)]	0.006	[O(12)]	-0.178
[C(3)]	-0.099	[H(13)]	0.067
[C(4)]	0.027	[H(14)]	0.026
[C(5)]	-0.062	[H(15)]	0.029
[C(6)]	-0.054	[H(16)]	0.029
[C(7)]	-0.050	[H(17)]	0.029
[C(8)]	-0.069	[H(18)]	0.029
[C(9)]	0.084	[H(19)]	0.029
[C(10)]	0.628	[H(20)]	0.205

Tadqiqot natijalarini umumlashtirib, quyidagi xulosalar chiqarish mumkin. Indenni fizik va kimyoviy xossalarini tarkibini to‘g‘ri tahlil qilish hamda inden molekulasining kvant-kimyoviy tahlili uni reaktivlikni oldindan taxmin qilish, stabil modifikatsiyalar yaratish va yangi materiallar sintezida foydalanish imkonini beradi. Kvant kimyosi usullaridan foydalanib, inden-1 karbon kislota molekulasining tuzilishi o‘rganildi. Molekulyar yadro bir tekislik bilan ajralib turishi, karboksil guruhi qismida sterik buzilishlar mavjudligi aniqlandi. Natijada, umumiy zaryad zichligi va elektrostatik potensialning turlicha taqsimlanishi kuzatildi. Bog‘ uzunligi, bog‘ burchaklari va atomlardagi zaryadlar hisoblash yo‘li bilan aniqlandi.

ADABIYOTLAR

1. Griesbaum, K., Behr, A., Biedenkapp, D., Voges, H.-W., Garbe, D., Paetz, C.,Schmidt, R. *Hydrocarbons.Ullmann’s EncyclopediaofIndustrialChemistry* (2013).1-61 b.

ISSN 3030-3907

2. M. Soliev, O. Abdilalimov. Reactions of Thymol, Menthol, and 3-HydroxymethylChamazulene in a Superbase Medium // Spanish Journal of Innovation and Integrity. Volume: 05,2022. P. 625-628. http://sjii.indexedresearch.org
3. Structural, spectroscopic and quantum chemical analysis of an exocyclic extended doublebonded chalcone single crystal, with pharmaceutical scanning for breast cancer using MCF-7 cell line and EGFR domain target // Priya M.K. [et al.] // Journal of Molecular Structure. – 2022. –Vol.1270.
4. M.I.Soliev, A.K.Okhundadaev. Theoretical calculations of the electronic structure of the menthol and thymol molecules // Journal of Science and Education. No. 8 (20), 2018. Russia. Journal website: https://scientificpublication.ru.
5. Прогнозирование свойств модифицированных пептидов методом квантовой химии /А.А. Володькин [и др.] // Вестник технологического университета. – 2020. – Т.23 – №3. – С.23-26
6. Методы квантовой химии, спектроскопии ЯМР и монокристальной дифрактометрии в анализе путей протонирования 2-амино-4-бензилсульфанил-6-метилпиримидинов / А.В.Еркин [и др.] // Журнал общей химии. – 2019. – Т.89 – №1. – С.19-24
7. Изучение внутримолекулярных движений в молекуле 1,2,3-триэтилдиазиридина методами квантовой химии / Л.С. Хайкин [и др.] // Журнал физической химии. – 2020.– Т.94 –№9. – С.1372-1378
8. Оценка реакционной способности некоторых хроменопиразолов методами квантовой химии / И.Е. Меняйло [и др.] // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология. – 2022. – Т.22 – Вып.1. – С.26-32 (DOI: 10.18500/1816-9775-2022- 22-1-26-32)
9. Nurmanov S.E., Soliev M.I., Mirkhamitova D.Kh. Electronic structure of aromaticacetylene alcohols and modeling of their vinylation // Modern scientific research and innovations.2015. No. 3. Part 1 [Electronic resource]. URL: https://web.snauka.ru/issues/2015/03/43329 (date of access: 09/13/2022)
10. Soliev M.I., Abdilalimov O., Nurmonov S.E. The reaction for obtaining 3-vinyloxymethyl-chamazulene // Universum: chemistry and biology: electron. scientific magazine2020.1(79). URL: https://7universum.com/en/nature/archive/item/11051 (date of access: 09/26/2022).
11. Soliev M.I., Abdilalimov O., Nurmonov S.E. Technology for the production of vinylesters of menthol and thymol // Universum: technical sciences: electron. scientific magazine2021.9(90). URL: https://7universum.com/ru/tech/archive/item/12254 (accessed 26.09.2022).
12. Куликов М.А. Исследование арилиденового производного 2-тиобарбитуровойкислоты с применением компьютерных методов /

ISSN 3030-3907

Актуальные научные исследования: сборник статей IX Международной научно-практической конференции. В 2 ч. Ч. 1. Пенза: МЦНС «Наука и Просвещение». – 2022. – с. 17-21

ISSN 3030-3907