DEGIDROASETIK KISLOTA ATSETIL GIDRAZONINING HIRSHFELD YUZA TAHLILI VA SPEKTRAL TADQIQOTI

Ramazonov Sanjar Halim o‘g‘li
Xorazm Ma’mun akademiyasi tayanch doktaranti
E-mail: sanjar3505ramazonov@gmail.com
Tursunov Murod Amonovich
Buxoro davlat universiteti professori, k.f.f.d., professor
E-mail: tursunovma@mail.ru
Xudoyberganov Oybek Ikromovich,
Xorazm Ma’mun akademiyasi katta ilmiy xodimi, k.f.f.d., dotsent
E-mail: oybek_hudoyberganov@mail.ru

Annotatsiya: Mazkur maqolada degidroasetik kislotasi atsetilgidrazonining rentgen strukturaviy analiz natijalari hamda Hirshfeld yuzasi tahlili o‘rganilgan. Olingan yangi birikmaning rentgen strukturaviy analiz (RSA) hisoblashlari asosida uning kristall tuzilishi, geometrik va energetik xususiyatlari aniqlanib, batafsil yoritilgan. Kristall tuzilma ma’lumotlariga tayanib, Hirshfeld yuzasi bo‘yicha o‘zaro ta’sirlarning tabiati va ulushi tahlil qilingan. Shuningdek, kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida molekuladagi eng yuqori (HOMO) va eng past (LUMO) ishg‘ol qilingan molekulyar orbitallarning energiya darajalari aniqlanib, ularning elektronik xususiyatlarga ta’siri baholangan.

Kalit so‘zlar: Hirshfeld yuza tahlili, strukturaviy analiz (RSA), HOMO, LUMO

Аннотация: Данной статье изучены результаты рентгеноструктурный анализ и анализ поверхности Хиршфельда для ацетилгидразона дегидроацетовой кислоты. На основе расчётов рентгеноструктурный анализ (РСА) подробно охарактеризованы кристаллическая структура, геометрические и энергетические параметры полученного нового соединения. Используя данные кристаллической структуры, проведён анализ природы и доли межмолекулярных взаимодействий с применением поверхности Хиршфельда. Кроме того, в результате квантово-химических расчётов определены энергии наиболее заселённой (HOMO) и наименее заселённой (LUMO) молекулярных орбиталей, а также оценено их влияние на электронные свойства соединения.

Ключевые слова:, Анализ поверхности, Хиршфельда, рентгеноструктурный анализ (РСА) HOMO, LUMO

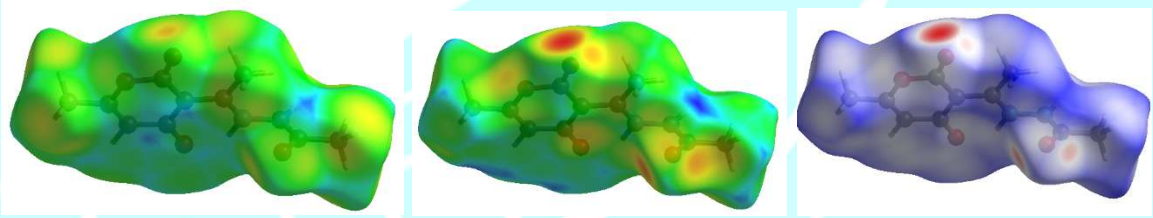
Abstract: In this study, the X-ray diffraction analysis results and Hirshfeld surface analysis of dehydroacetic acid acetylhydrazone have been investigated. Based on the X-ray diffraction analysis (XRD) calculations, the crystal structure, geometric, and energetic parameters of the newly obtained compound have been thoroughly characterized. Using the crystallographic data, the nature and contribution of

intermolecular interactions were analyzed through the Hirshfeld surface approach. Furthermore, quantum chemical calculations revealed the energy values of the highest occupied (HOMO) and lowest unoccupied (LUMO) molecular orbitals, and their influence on the electronic properties of the compound was evaluated.

Key words: Hirshfeld surface analysis, X-ray diffraction analysis (XRD), HOMO, LUMO

Kirish

Ma’lumki, rentgen strukturaviy analiz moddalar tuzilishini aniqlashda eng ishonchli fizikaviy tadqiqot usullaridan biri hisoblanadi[1-5]. Ushbu tadqiqotda degidroasetik kislota atsetil gidrazonining kristall tuzilma ma’lumotlari asosida CrystalExplorer dasturi yordamida Hirshfeld yuzasi tahlili amalga oshirildi. Molekula tarkibidagi o‘zaro ta’sirlarning nisbiy foiz hissalarini aks ettiruvchi ikki o‘lchovli barmoq izi (fingerprint) diagrammalari tuzildi hamda atomlararo ta’sirlarning ulushlari aniqlanib, tahlil qilindi (1-rasm).



d_i d_e d_{norm}

1-rasm. Degidroasetik kislota atsetil gidrazonining d_i-(distance internal) Hirshfeld yuzadan molekulaning eng yaqin atomigacha bo‘lgan masofa, d_e-(distance external) Hirshfeld yuzadan molekulaning qo‘shni atomigacha bo‘lgan masofa, d_{norm}-(distance normalized) d_i va d_e bir-biriga nisbatan yaqinligini ko‘rsatadi.

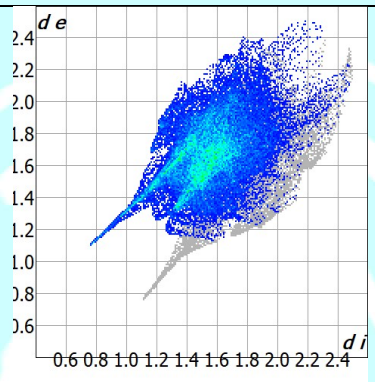
Yuqoridagi ma’lumotlarga asoslanib shuni bilish mumkinki, molekulaning kristall panjarada egallagan fazoviy joyi 259,4 Å^3, Hirshfeld yuzaning maydoni 254,79 Å^2, molekulaning sferaga o‘xshashlik darajasi 0,772 va molekulaning sferadan qanchalik farq qilish darajasi 0,309 ekanligini ko‘rish mumkin (1-jadval).

1-jadval.

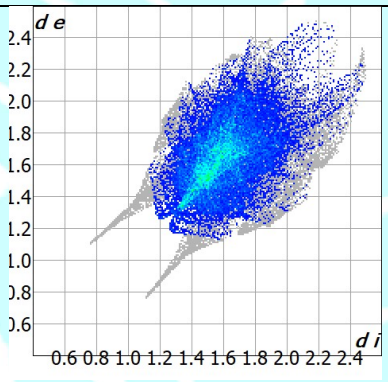
Degidroasetik kislota atsetil gidrazonini molekulasining fazoviy joyi va sferaga o‘xshashlik qiymatlari

Volume	259,4 Å^3	Globularity	0,772
Area	254,79 Å^2	Asphericity	0.309

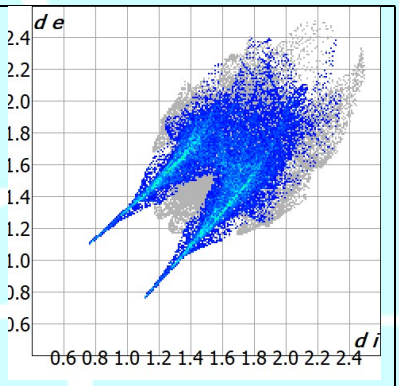
ISSN 3030-3907



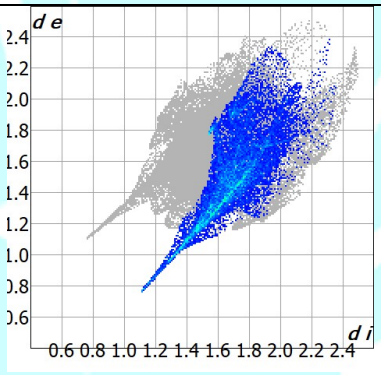
H…All 65,2%



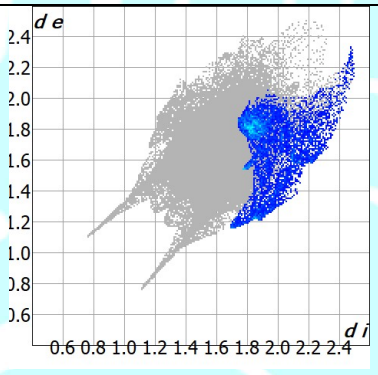
H…H 43,5%



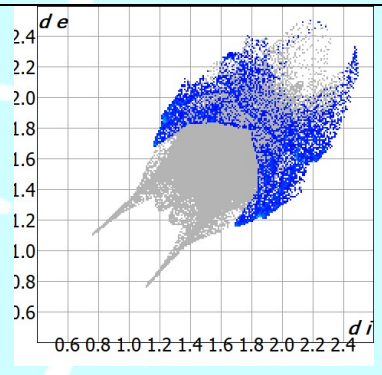
H…O/O…H 37,5%



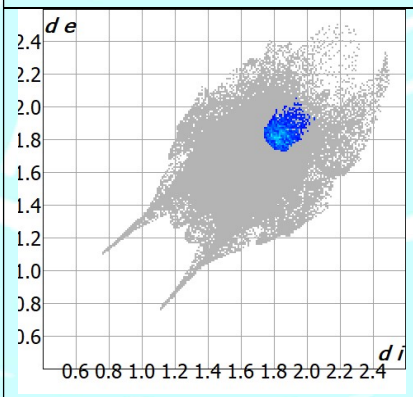
O…All 23 %



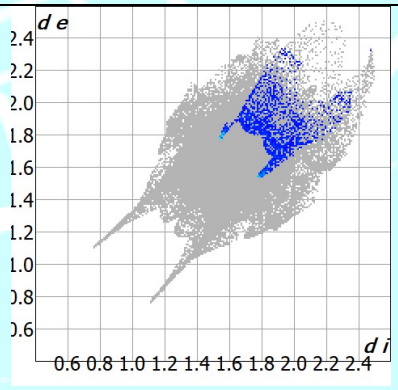
C…All 10,7%



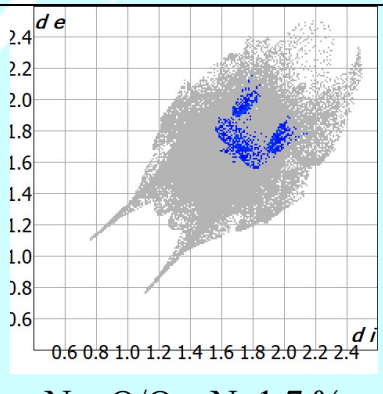
C…H/H…C 10,3 %



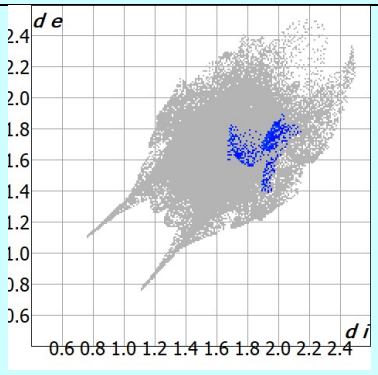
C…C 3,1 %



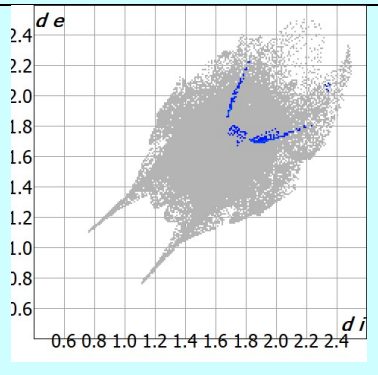
C…O/O…C 3%



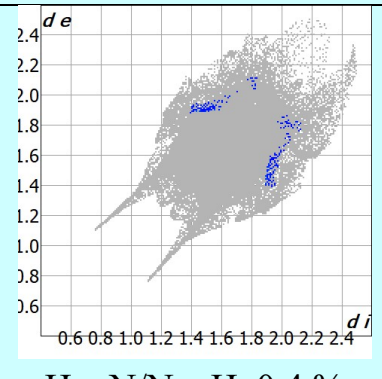
N…O/O…N 1,7 %



N…All 1,1 %

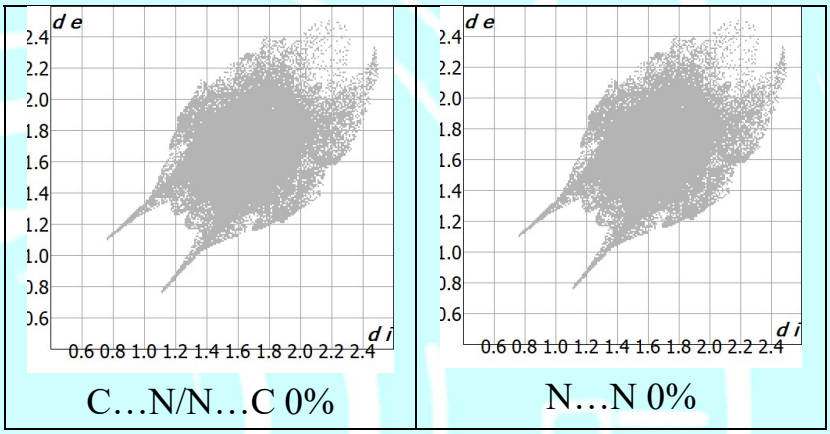


O…O 0,6 %



H…N/N…H 0,4 %

ISSN 3030-3907



2-rasm. Degidroasetik kislota atsetil gidrazonining Hirshfeld yuza tasviri.

Molekuladagi eng katta ulush malekulalararo vodorod bog‘lanishlar (H…All 65,2%) va ichki molekulyar vodorod bog‘lanish (H…H 43,5%) to‘g‘ri kelganligini ko‘rish mumkin. Eng kam ulushlar esa N…All 1,1%, O…O 0,6%, H…N/N…H 0,4 % kabi ta’sirlarga to‘g‘ri kelganligini ko‘rish mumkin (2-rasm).

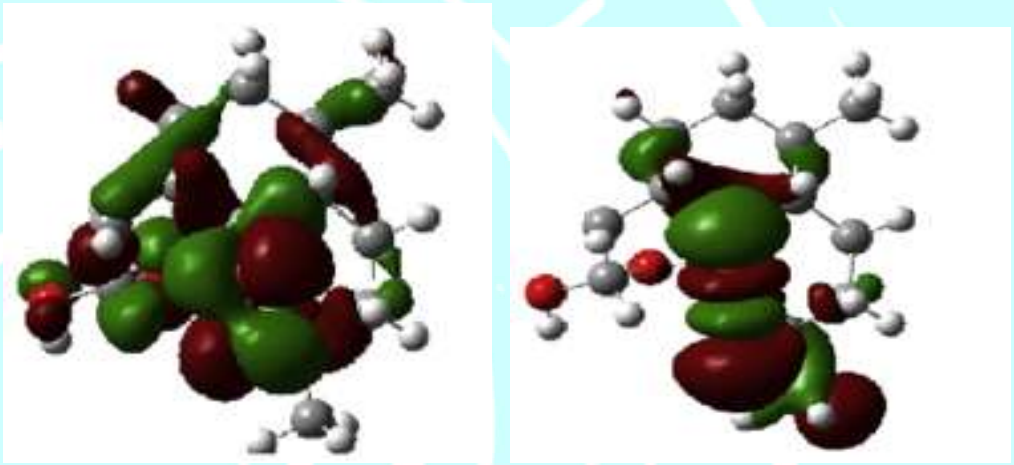
2-jadval.

Degidroasetik kislota atsetil gidrazonining Hirshfeld yuza tahlili barmoq izi sohasida atomlararo ulushlar

Bog‘lanishlar	H…All	H…H	H…O/O…H	O…All
Ulushlar	65,2%	43,5%	37,5%	23 %
Bog‘lanishlar	C…All	C…H/H…C	C…C	C…O/O…C
Ulushlar	10,7%	10,3 %	3,1 %	3%
Bog‘lanishlar	N…O/O…N	N…All	O…O	H…N/N…H
Ulushlar	1,7 %	1,1 %	0,6 %	0,4 %

Sintez qilingan moddaning nazariy modelini ishlab chiqish, fizik-kimyoviy ko‘rsatgichlarni optimallashtirish va hisoblash, olingan natijalarni qayta ishlash va vizuallash kvant-kimyoviy tadqiqotlar yordamida amalga oshirildi. Bu izlanishlarni Gaussian16W va Avogadro dasturlari yordamida amalga oshirdik. Molekulada eng ko`p ishg‘ol qilingan (HOMO - Highest occupied molecular orbital) va eng kam ishg‘ol qilingan molekulyar orbitall (LUMO- Lowest unoccupied molecular orbital) aniqlandi (3-rasm):

ISSN 3030-3907



a **b**

3-rasm. Eng ko`p ishg‘ol qilingan molekulyar orbitallar (HOMO) – a, eng kam ishg‘ol qilingan molekulyar orbitallar (LUMO) – b tasviri.

O‘tkazilgan tadqiqotlar natijasida degidroasetik kislota atsetilgidrazoni asosida olingan yangi moddaning kristall tuzilishi, ichki molekulyar o‘zaro ta’sirlar va elektron xususiyatlari o‘rganildi. Hirshfeld yuzasi tahlili natijalari molekuladagi vodorod aloqalari va boshqa zaif o‘zaro ta’sirlarning kristall panjarani barqarorlashtirishdagi ahamiyatini ko‘rsatdi[6-9]. Kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida aniqlangan HOMO va LUMO orbitallari energiya farqi (ΔE) molekulaning kimyoviy reaktivligi va elektron o‘tish qobiliyati haqidagi muhim ma’lumot tahlil qilindi (3-rasm). Olingan natijalar birikmaning elektron tuzilishi, barqarorligi hamda potensial funksional qo‘llanilish imkoniyatlarini baholashda ilmiy asos sifatida tadbiq qilinishi mumkin[10-13].

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR

1. Умаров Б.Б., Турсунов М.А., Минин В.В. Комплексы с производными кетоальдегидов и кетоэфиров.- Ташкент.- Нишон-ношир.- 2016.- 350 с.

2. Турсунов М.А. Комплексы некоторых 3d-металлов на основе производных кетоальдегидов и кетоэфиров; их строение и свойства : Дис. … канд.хим.наук.- Т.: БГУ.- 2019.- 120 с.

3. Умаров Б.Б., Ларин Г.М., Якимович С.И., Минин В.В., Парпиев Н.А. Синтез и спектры комплексов меди(II) на основе ароилгидразонв формилпинаколина и метилового эфира 5,5-диметил-2,4-диоксогексановой кислоты // Узб. хим. журн.- 1993.- № 3.- С. 12-14.

4. Ramazonov S.H., Tursunov M.A., Xudoyberganov O.I. Degidroasetik kislotasi atsetil gidrazonining sintezi, tuzilishi va xossalari. Development of science 2025 / 10 issue 10. volume 5. p 170-175.

5. Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Якимович С.И., Севинчов Н.Г., Зерова И.В., Абдурахмонов С.Ф., Парпиев Н.А. Синтез и исследование *пара*-замещенных бензоилгидразонов этилового эфира 2,4-диоксопентановой кислоты //

ISSN 3030-3907

Современные технологии и инновации горно–металлургической отрасли.- НавГГИ, Навои. 14-15 июня. 2012.- С. 349-350.

6. Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Авезов К.Г., Якимович С.И., Абдурахманов С.Ф., Севинчов Н.Г., Парпиев Н.А. Синтез и стереоизомерия ацилгидразонов кетоэфиров // Наука и технологии. Т.1. Тр. Международного симпозиума по фундаментальным и прикладным проблемам науки". Глава 8.- М.: РАН.- 2012.- С. 158-178.

7. Турсунов М.А., Умаров Б.Б. Синтез и кристаллическая структура комплекса никеля(II) на основе бензоилгидразона метилового эфира 4-фенил-2,4-диоксобутановой кислоты // Universum: химия и биология: электрон. научн. журн.- 2018.- №12(54).- С. 50-53.

8. Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Бахронова Д.А. Темплатный синтез комплекса никеля(II) на основе бензоилгидразона метилового эфира 4-фенил-2,4-диоксобутановой кислоты // Международная конференция "Современные инновации: Химия и химическая технология ацетиленовых соединений. Нефтехимия. Катализ" Посвящается 100-летию Национального университета Узбекистана и 80-летию со дня рождения профессора Т.С. Сирлибаева.- 14-17 ноября. 2018.- Ташкент.- С. 305-306.

9. Nigina Qahramon Qizi Savriyeva, Murod Amonovich Tursunov, Bakhtiyor Shukrulloyevich Ganiev. Novel [5-Hdroxy-3-phenyl-5-(trifluoromethyl)-4,5-dihydro-1*H*-pyrazol-1-yl](phenyl)methanone: Synthesis, Characterization and Computational Analysis. Advanced Journal of Chemistry, Section A, 2026, 9(2), 192-207.

10. Ramazonov S.H., Tursunov M.A., Xudoyberganov O.I. Degidroasetik kislotasi atsetil gidrazonining sintezi, tuzilishi va xossalari. Development of science 2025 / 10 issue 10. volume 5. p 170-175.

11. Husenov Q.Sh., Tursunov M.A., Xudoyarova E.A., Ilhomov A.A. 4-fenil-2,4-dioksobutan kislota metil efiri aroilgidrazoni asosida Ni(II) va Cu(II) ionlarining kompleks birikmalar sintezi, tuzilishi va xossalari. International Journal of Advanced Technology and Natural Sciences Vol.3(6), 2025, IF=4.372, ICV 59.69. P. 31-39.

12. Tursunov M.A., Umarov B.B,. Tulisova N.Z. 2,4-dioksopentan kislota etil efirining aroilgidrazonlarining Cu(II) ioni bilan kompleks birikmalari. Development of science 2025 / oktyabr/10. volume 3. p 95-102.

13. Amonov M.M., Tursunov M.A., Boboqulova O.V. 4,4-diftor-1-fenil-1,3-butandion benzoilgidrazoni sintezi, tuzilishi va xossalari. Development of science 2025 / oktyabr/10. volume 3. p 208-214.

ISSN 3030-3907