MAHALLIY APIS MELLIFERA XITOZANI ASOSIDA OLINGAN SHIFF ASOSINING FIZIK-KIMYOVIY TAHLIL NATIJALARI

A.S.Mengliyev

Alfraganus university

Annotatsiya. Mahalliy *Apis Mellifera* xitozani bilan N-3-metoksi-4-gidroksibenzaldegidining poliazometin (Shif asosi) sintez qilindi va sintez qilish optimal sharoyiti o‘rganildi. Olingan mahsulotning spektral xususiyatlari IQ Phyre spektroskopiya usuli yordamida aniqlandi, Termogravimetrik tahlil yordamida uning termal barqarorligi baholandi hamda HOMO–LUMO Energiyalari asosida birikmaning kvant kimyoviy tahlili o‘rganildi.

Kalit so‘zlar: *Apis Mellifera*, xitozan, aldegid, Shiff asoslari, IQ spektroskopiya, termogravimetriya, HOMO–LUMO Energiyalari, tahlil.

Аннотация. С использованием местного хитозана *Apis Mellifera* синтезирован полиазометин (основание Шиффа) N-3-метокси-4-гидроксибензальдегида и изучены оптимальные условия синтеза. Спектральные свойства полученного продукта определяли методом ИК-спектроскопии, термостабильность оценивали с помощью термогравиметрического анализа, а квантово-химический анализ изучали на основе энергий HOMO-LUMO соединения.

Ключевые слова: *Apis Mellifera*, хитозан, альдегид, основания Шиффа, ИК-спектроскопия, термогравиметрия, HOMO-LUMO энергии, анализ.

Annotation. Polyazomethine (the base of the Schiff) of N-3-methoxy-4-hydroxybenzaldehyde was synthesized with the local Apis Mellifera chitosane, and the synthesis optimal sharoyite was studied. The spectral properties of the resulting product were determined using the IR Phyre spectroscopy method, its thermal stability was assessed using thermogravimetric analysis, and quantum chemical analysis of the compound based on HOMO–LUMO Energies was studied.

Keywords: Apis Mellifera, chitosan, aldehyde, Schiff bases, IQ spectroscopy, thermogravimetry, HOMO–LUMO energies, analysis.

Kirish

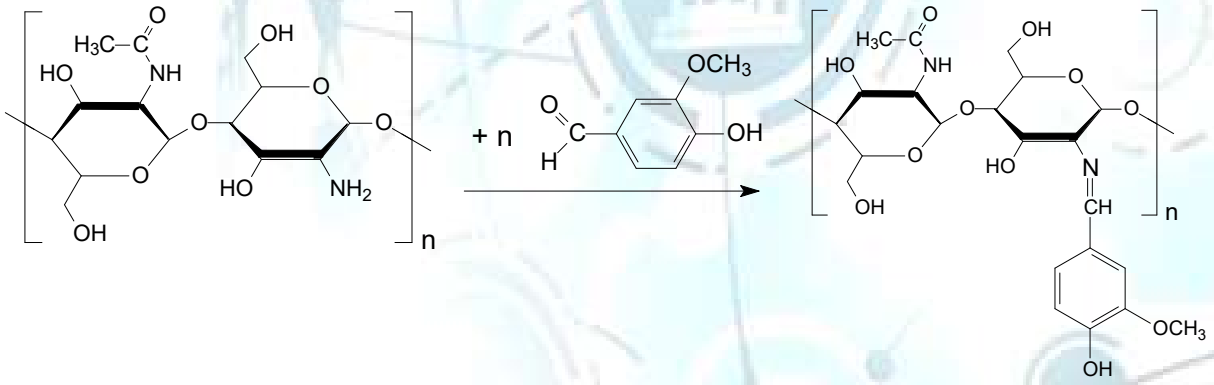
Tarkibida -CH=N- guruh elementini o‘z ichiga olgan Shiff asoslari (azometin birikmalari) bir qator qimmatli amaliy xususiyatlarga ega va hazirgi kunda juda keng sohalarda qo‘llanilmoqda. Ular polimer fotostabilizatorlari [1], tibbiyotda va farmatsevtikada [2], metall kompleks birikmalarni sintez qilishda [3] ishlatiladi. Shiff asoslari va ularning hosilalarining fizik-kimyoviy xossalari keyingi vaqtlarda faol o‘rganilib kelinmoqda [4]. Taqdim etilgan ishning maqsadi mahalliy Apis Mellifera xitozani bilan ayrim aldegidlarning poli azometin (Shif asoslari)

ISSN 3030-3907

hosilalarini sintez qilish, olingan Shiff asoslarining fizik-kimyoviy xossalarini o‘rganishdan iborat.

Daslab, tegishli usullar bilar mahalliy Apis Mellifera xitinidan xitozan sintez qilindi [5]. Olingan 1 g xitozan 50 ml li konussimon shlifli kolbaga solinib, ustiga aralashtirilib turgan holda 10 ml metanol solindi, so‘ngra 60-65 ^{0}C haroratda aralashma ustiga 1:4 nisbatda, ya’ni 4 g N-3-metoksi-4-gidroksibenzaldegidi solindi, reaksiya davomiylagi 180 minutni tashkil qildi. Hosil bo‘lgan och jigar rangli kristall mahsulot dastlab metanol, so‘ngra etanol bilan yuvildi, so‘ngra filtrlandi va cho‘kma quritildi. Moddaning individualligi yupqa qatlamli xromatografiya bilan isbotlangan (R_f= 0,79). Sintez qilingan birikmaning rangi och jigar rang kukun bo‘lib, organik erituvchilarda eriydi. O‘rtacha unum 89,5 % ni tashkil etdi [6].

N-3-metoksi-4-gidroksibenzilimino-xitozan sintezi quyidagi sxema orqali amalga oshirildi:



1-rasm. N-3-metoksi-4-gidroksibenzilimino-xitozan sintezi

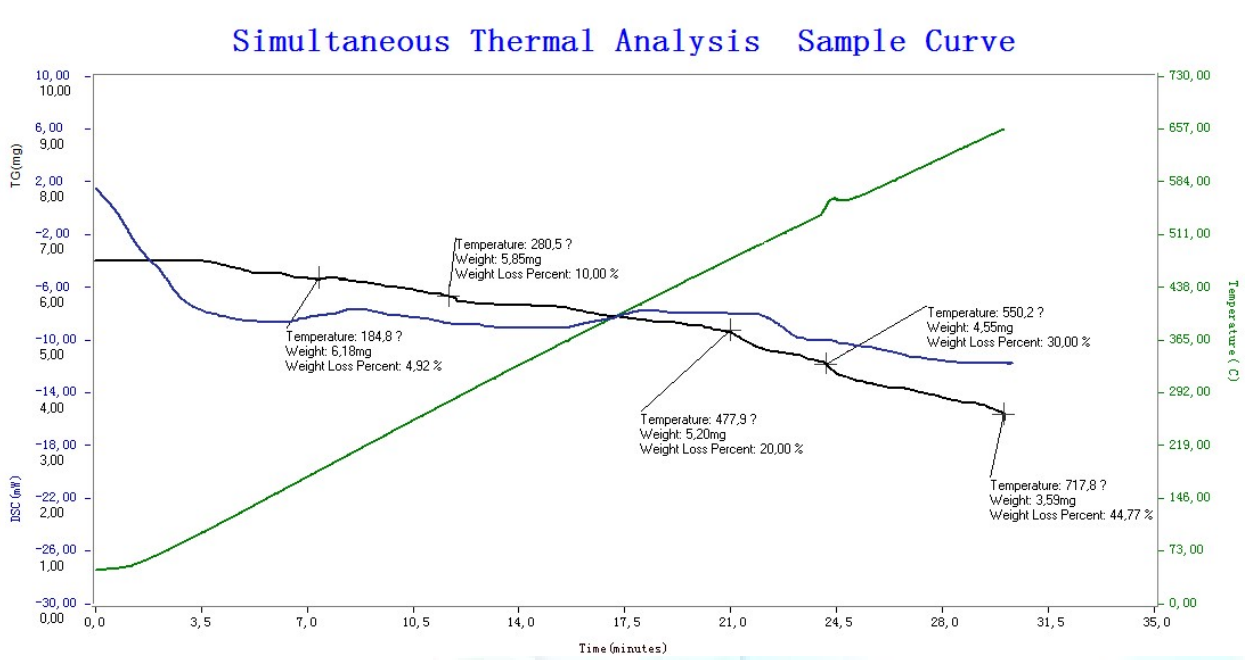
2-rasmda termik gravimetrik (TGA) analiz natijalari ko‘rsatilgan. Barcha o‘lchashlar azot atmosferasida 50 ml/min azot oqimi tezligida olib borildi. Tahlil, o‘lchashlarning harorat intervali 50 ° C dan 750 °C gacha bo‘lgan harorat oralig'ida o‘tkazildi, namunani isitish tezligi 20 °K/min. Termogrammani qayta ishlash original Ther-moscan* dasturi va Microsoft Excel elektron jadvallari yordamida amalga oshirildi.

Termogravimetriya (TGA) egri chizig‘ining tahlili shuni ko‘rsatadiki, TGA egri chizig‘i asosan tekshirilayotgan birikma 5 ta intensiv parchalanadigan temperatura oralig‘ida ega bolib, taqdim etilgan termogrammada harorat oshishi bilan birikma bilan sodir bo‘ladigan turli jarayonlarga mos keladi, bu harorat oralig'ida massaning yengil o‘zgarishi mavjud bo‘lib, bu adsorbsiyalangan namlik yoki namunada mavjud bo‘lgan boshqa uchuvchi moddalarni olib tashlash bilan bog'liq bo‘ladi. Bu jarayondan so‘ng, deyarli doimiy massaga ega bo‘lishini

ISSN 3030-3907

kuzatishimiz mumkin, bu namunada endi bu haroratda bug'lanishga qodir bo‘lgan uchuvchi moddalar yo‘qligini ko‘rsatadi.

TGA analiz natijalariga tahlili yana shuni ko‘rsatadiki, jarayonning turli harorat oralig‘i uchun kinetik parametrlar aniqlandi. Uning afzalligi bir qator o‘lchovlar va bitta namunadan reaksiyalarning butun harorat oralig‘ida kinetik xususiyatlarni hisoblandi. Massa yo‘qotish darajasi (vm) TGA egri chizig‘ini grafik farqlash usuli bilan aniqlandi.

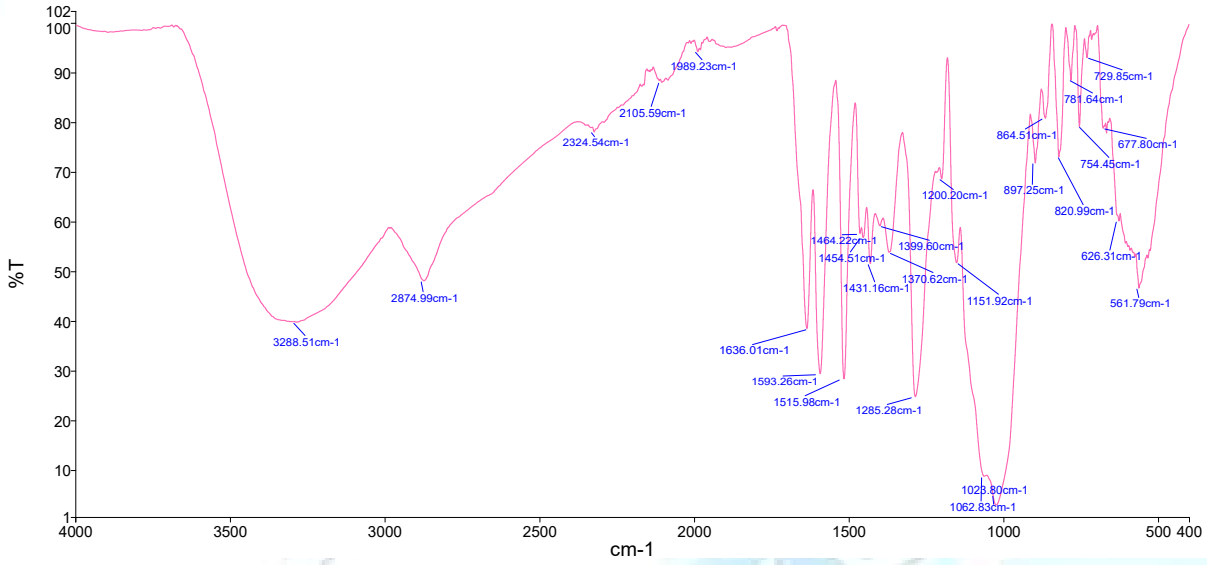


2-rasm. Moddaning termo-gravimetrik analiz (TGA) egri chizig’i

№	Harorat,°C	Yuqotilgan massa, %	Moddaning parchalanish tezligi, mg/min	Sarflangan enegiya miqdori (µV*s/mg)
1	104	1.3	0.0695	1.02
2	185	5	0.07251	1.244
3	281	10	0.0729	2.72
4	478	20	0.0852	3.57
5	550	30	0.108	4.10
6	718	45	0.125	4.3

Birikmaning IR-Furye spektri kaliy bromidli tabletka ko‘rinishida FSM-1201 spektrometr uskunasida 400-4000 sm $^{-1}$ to‘lqin soni oralig'ida qayd etilgan. Asosiy xarakterli chiziqlarning joylashuvi va ularning taqsimlanishi quyida keltirilgan:

ISSN 3030-3907



3-rasm. N-3-metoksi-4-gidroksibenzilimino-xitozan IK spektri

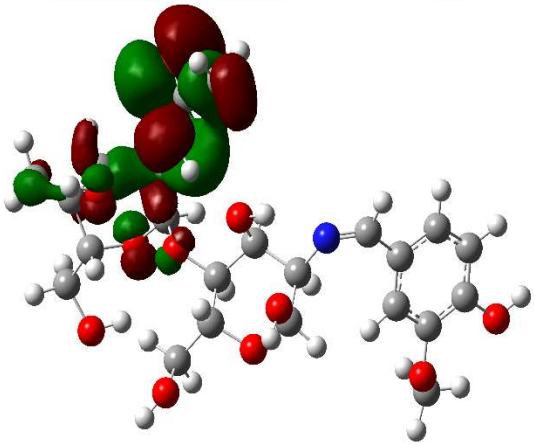
Birikmaning IQ spektrida (3-rasm) struktura tuzilishi bo'yicha 1636,01 sm^{-1} sohada - C =N- bog'lanishi mavjudligi bilan tasdiqlanadi. 1062,83 sm^{-1} sohada esa glyukopiranozaning yutilish zonasi - C - O - C - bog'i ko'rsatilgan.

IQ spektrida shuningdek, quyidagi xarakterli yutilish signallarini o'z ichiga oladi, sm^{-1}: 1151,9 va 897,25 – da -OH guruhining egilish tebranishlari; 1285,28 sohada C-H bog'ining egilish tebranishlari, 2874,99 da -OCH_3 bog'ining yutilish chastotasi, 1515, 98 da aromatik C-C va C=C bog'lari hamda 1636.01 sohasidagi intensiv yutilish signali sintezlangan Schiff bazasining azometin -HC=N- bog'i hosil bo'lishini ko'rsatdi.

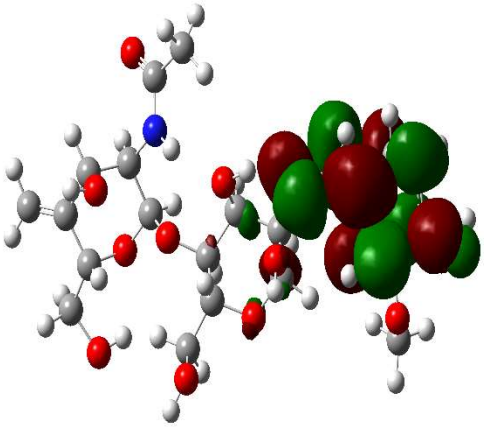
Sintez qilingan birikmaning HOMO–LUMO Energiyalari asosida kvant kimyoviy tahlili ham o'rganildi.

HOMO-LUMO energiyalari (Hartree birlikda) Gaussian 16 dasturida RB3LYP/6-311G hisoblash darajasida olingan. Bu energiyalar molekulalarning elektron xossalari va reaktivligiga oid muhim malumot beradi. HOMO (Highest Occupied Molecular Orbital) va LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital) molekulaning elektron tuzilishini tahlil qilishda asosiy tushunchalardir. Ular molekuladagi eng yuqori band va eng quyi bo'sh orbitalalarni tavsiflaydi.

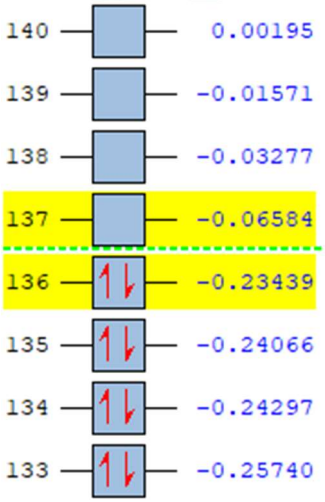
ISSN 3030-3907



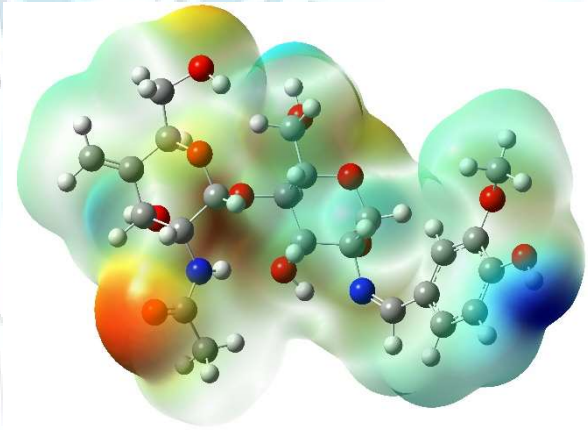
4-Rasm. Olingan birikma strukturasining optimallashtirilgan HOMO tuzilishi.



5-Rasm. Birikma strukturasining optimallashtirilgan LUMO ko'rinishi.



6-Rasm. Strukturaning optimallashtirilgan orbital energiyasi.



7-Rasm. Strukturaning optimallashtirilgan ESP natijasi

Struktur	HOMO (Hartree)	LUMO (Hartree)	ΔE (Hartree)	Izoh
3	−0.23439	−0.06584	≈ 0.16855	Eng kichik ΔE, ya'ni yuqori aktivlik.

Elektron xossalar va dipol momentlar asosida tizimlarning taqqoslamali tahliliga ko'ra optimallashtirilgan strukturaning Gaussian 16 dasturi yordamida RB3LYP/6-311G hisoblash darajasida olingan natijalarga ko'ra, ushbu birikma energetik jihatdan eng barqaror strukturadir (4- va 5-rasmlar). Uning umumiy

ISSN 3030-3907

elektron energiyasi −1832.500994 Hartree ga teng bo‘lib, bu energiya ancha kichik bo’lib, termodinamik barqarorlikni anglatadi (6-rasm). Shu bilan birga, bu mahsulotning dipol momenti 6.50 Debye bo‘lib, reaktivga nisbatan sezilarli pasayishni ko‘rsatadi. Bu esa mahsulotda molekulyar qutblanish kamayganini va ehtimoliy vodorod bog‘larining yo‘qolganini yoki qayta tashkil topganini anglatadi.

HOMO–LUMO energiyalarining tahlili yana shuni ko‘rsatadiki, olingan birikma yuqori kimyoviy faollikka ega. Bu uning reaksiyalarda asosiy rol o‘ynashini yoki katalitik jarayonlarda ishtirok etishini ko‘rsatadi. Bu esa selektiv reagentlar, katalizatorlar yoki biofaol moddalarning sintezi uchun muhim ko‘rsatkich hisoblanadi.

ESP (Electrostatic Potential) xususiyatlari (7-rasm) bo’yicha: –OH va –OCH_3 guruhlari borligi tufayli ESP bo‘yicha kuchli qizil joylar, ya’ni manfiy zaryad (elektronlar ko‘proq to‘plangan joylar) mavjudligini anglatadi. Faolligi bo’yicha, aromatik sistemasidagi elektron donor guruhlar molekulaning umumiy nukleofilligini oshirgan. Kimyoviy jihatdan antibakterial yoki antioksidant faol modda sifatida reaktsiyaga kirishishi mumkin.

Shunday qilib , tadqiqot natijalariga asoslanib, quyidagi xulosalar chiqarish mumkin.

I. Mahalliy *Apis Mellifera* xitozani bilan N-3-metoksi-4-gidroksibenzaldegid ishtirokida poliazometin hosilasi, ya’ni Shiff asosi sintez qilindi va uning ba'zi fizik-kimyoviy xususiyatlari o‘rganildi.

2. TGA ma'lumotlari asosida moddaning erish nuqtasi va uning termik degradatsiyasi shartlari aniqlandi.

3. IQ-spektroskopiya analiz usuli yordamida makromolekulaning tuzilishi tasdiqlandi.

4. Sintez qilingan birikmaning HOMO–LUMO Energiyalari asosida kvant kimyoviy tahlili o‘rganildi.

Adabiuotlar

1. Ahmad Ah.. Al-Mashhadani MH. Axmed DS, Ahmed Ah.A., Yusuf E.. Yusop RM UV-ga yaxshi qarshilik ko‘rsatadigan UV-absorber sifatida Shiff bazasini o‘z ichiga olgan polimer plyonkalarni tayyorlash Photoaging //Biointerface Research in applied Chemistry.- 2021.- V.11.-Iss.5. -P.12743-12749.

2. Степин С.Г., Железняк Н.В., Мыралов О.Г., Дикусар Е.А. Синтез и исслелование аитибактериальной активности полуаминалей и оснований

ISSN 3030-3907

Шиффа на основе сульфаниламида // Вестник фармации. - 2019. - №3 (85). -С.88-93.

3. Jamalinczhad A., Mohseni-Shahri F.S., Moeinpour F. Synthesis, characterization and Spectroscopic Studies on the Interaction Between beta-Casein and Co (II) Schiff Base Complex//Physical Chemistry Research. - 2021.- V.9. - Iss.I. - P.123-135.

4. Каро С.А., Габелло Г., Ланадаэта Е., Перес Дж., Загал Дж.Х., Лилло Л. Синтез, спектроскопические и электрохимические исследования производных оснований Шиффа хитозана // Журнал прикладной химии. - 2013. -Т.86. -Вып.11. -С.1843-1849.

5. A.S.Mengliyev, G.A.Ikhtiyarova Preparation of azometine derivatives (Schif Bases) chitosan *ApisMellifera*. Technical science and innovation. №4, 2022. pp. 24-29.

6. Менглиев А.С., Ихтиярова Г.А. Сравнительное исследования образцов хитозана полученных из местного сырья. Technical science and innovation. №1, 2023. pp. 44-51.

ISSN 3030-3907