

# ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МАЛОНОИЛГИДРАЗОН САЛИЦИЛОВОГО АЛЬДЕГИДА С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

*Абдурахмонов Сайфиддин Файзуллаевич*  
базовый докторант

*Бухарский государственный университет,  
ул. М. Икбол 11, 200117, г. Бухара, Узбекистан*

**Умаров Бако Бафоевич**

д.х.н. профессор

*Бухарский государственный университет,  
ул. М. Икбол 11, 200117, г. Бухара, Узбекистан*

**Худоярова Эйтибор Ахадовна**

преподаватель

*Бухарский государственный университет,  
ул. М. Икбол 11, 200117, г. Бухара, Узбекистан*

**Ганиев Бахтиёр Шукуруллаевич**

преподаватель

*Бухарский государственный университет,  
ул. М. Икбол 11, 200117, г. Бухара, Узбекистан*

## SYNTHESIS AND INVESTIGATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF MALONOYL HYDRAZONE SALICYLIC ALDEHYDE USING QUANTUM CHEMICAL METHODS CALCULATIONS

*Abdurakhmonov Sayfiddin*

Doctorant of Bukhara State University

*M. Ikbol 11, 200117, Bukhara, Uzbekistan*

**Umarov Bako**

Doctor of Chemistry, Professor of Bukhara State University

*M. Ikbol 11, 200117, Bukhara, Uzbekistan*

**Khudoyarova Etibor**

Teacher of Bukhara State University

*M. Ikbol 11, 200117, Bukhara, Uzbekistan*

**Ganiyev Bakhtiyor**

Teacher of Bukhara State University

*M. Ikbol 11, 200117, Bukhara, Uzbekistan*

### АННОТАЦИЯ

В статье приведены результаты квантово-химических расчетов проведенных для выяснения пространственной, а также электронной структуры N'1,N'3-бис-((E)-2-гидроксибензилиден) малонилгидразида, произведенного согласно программы Gaussian. Использовали композитные методы семейства Gaussian (G4), а также методы теории функционала плотности (DFT) (BLYP/6-311+G(d,p)).

### ABSTRACT

The article presents the results of quantum-chemical calculations carried out to clarify the spatial as well as the electronic structure of N'1, N'3-bis - ((E) -2-hydroxybenzylidene) malonoylhydrazide, produced according to the Gaussian program. Composite methods of the Gaussian family (G4) and density functional theory (DFT) methods (BLYP / 6-311 + G (d, p)) were used.

**Ключевые слова:** молекула, заряд, структура, квантово-химические расчеты .

**Key words:** molecule, charge, structure, quantum-chemical calculations.

### Введение

В настоящее время квантово-химические методы расчета являются наиболее важным и удобным способом изучения электронной структуры вещества. На основании квантово-химических расчетов возможно изучение электронной структуры сложных соединений. Это также позволяет прогнозировать конкурирующие донорные центры комплексообразующегося полидентантного, полифункционального лиганда.

С помощью методов квантовой химии можно спрогнозировать многие свойства соединений в принципе с любой точностью, то есть можно рассчитать такие характеристики, как геометрические параметры молекул, определяющие равновесную структуру, потенциальные поверхности, электронные спектры, энергии разрыва межатомных связей [1-4] и т.д.

### Экспериментальная часть

**Синтез малоноилгидразона салицилового альдегида (H<sub>4</sub>L).** К 1,22 г (0,01 моля) свежеперегнанного салицилового альдегида в 50 мл метанола добавляли при перемешивании суспензию 0,66 г (0,005 моля) дигидразида малоновой кислоты в 100 мл метанола. После 0,5 часового нагревания с обратным холодильником, наблюдается сначала помутнение реакционной смеси, а затем во всем объеме выпадает осадок. Реакционную смесь оставили в течении 2 суток при комнатной температуре. Через 2 суток выпавшие кристаллы отфильтровывали, промывали небольшим количеством метанола, диэтилового эфира и гексаном. После перекристаллизации из метанола получили 2,82 г (83 %) малоноилгидразона салицилового альдегида (H<sub>4</sub>L) с т. плав. 254°C.

### Результаты и исследования

Изучение электронной структуры лиганда N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксипенцилиден)малоноилгидразида было выполнено квантово-химическим расчетом с применением программы Gaussian методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP и применением псевдопотенциального базиса LanL2DZ [5]. Квантово-химические исследования проводились в несколько этапов: разработка теоретической модели исследуемого вещества, оптимизация и расчет физико-химических параметров, обработка и визуализация полученных результатов [6,7]. Результаты квантово-химического исследования N'1,N'3-бис ((E)-2-гидроксипенцилиден)малоноилгидразида представлены в таблице 1.

Таблица 1

Вещество	E <sub>сис</sub> , Ha	μ <sub>общий</sub> , дебай	μ <sub>x</sub> , дебай	μ <sub>y</sub> , дебай	μ <sub>z</sub> , дебай	Convq
H <sub>4</sub> L	-1177.22	4.966	4.3809	-2.3385	0.0577	0.658D-08

В ходе исследований было изучено распределение заряда по Малликену молекулы N'1,N'3-бис ((E)-2-

гидроксипенцилиден)малоноилгидразида (Рис.1) [8, 9].

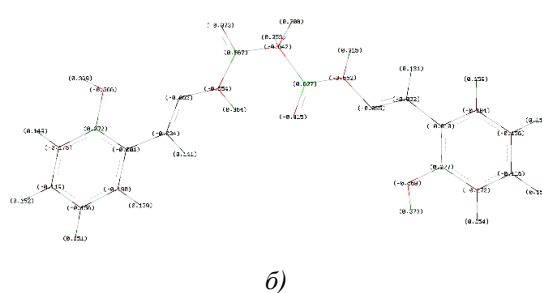
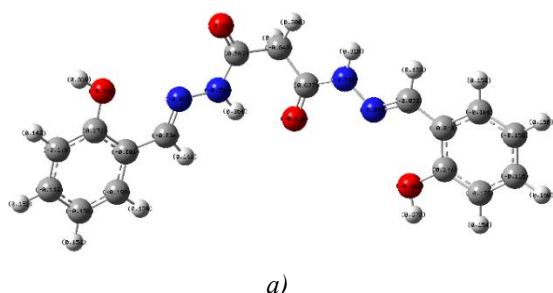


Рис. 1. Анализ заселенности по Малликену  
а) 3D структура б) распределение зарядов молекулы

Атом кислорода гидроксильной группы связанный с бензольным кольцом имеет более высокий отрицательный заряд (-0,566 эВ). Кроме того, атомы азота также имеют относительно высокую электронную плотность (N35=-0,562 эВ, N37=-0,554 эВ). Из данных видно, что в N'1,N'3-бис-((E)-2-гидрокси-бензилиден)малоноилгидразида наблюдается сопряжение, осуществляемое за счет π-электронов в бензольном кольце и имидных (-NH), иминных (= N), гидроксо (= O) групп в гидразоновом лице, которые имеют неподеленные электронные пары (положительный мезомерный эффект (-M)). В результате сопряжения наблюдается перераспределение электронной плотности (Рис.2).

Теоретические квантово-химические исследования выявили фронтальные (граничные) молекулярные орбитали в основном и возбужденном состояниях лиганда. Метод молекулярных орбиталей основан на том, что для каждого из электронных состояний молекулы как много электронной системы полная волновая функция составляется из произведений волновых

функций электронов в соответствии с электронной конфигурацией системы. При использовании метода молекулярных орбиталей полная волновая функция молекулы строится из волновых функций, описывающих поведение отдельных электронов в поле создаваемом остальными электронами и ядрами всех атомов.

Подобно атомным орбиталям, МО изучаемого соединения H<sub>4</sub>L представляет собой одноэлектронную функцию, включающую пространственную и спиновую компоненты спин-орбитали. Каждая спин-орбиталь характеризуется своим значением энергии, определяющим последовательность заполнения МО в молекуле [10-14].

С методом Ли (Lee)-Янг (Yang)-Парра (Parr) были оптимизированы геометрия и рассчитаны общие энергии (E<sub>t</sub>), энергии граничных молекулярных орбиталей и энергетическая щель между граничными МО (ΔE). А также, были рассчитаны распределение общего заряда на атомах и распределение заряда в верхней занятой

МО (ВЗМО) и нижней свободной МО (НСМО) (Рис.3.) [6, 15-17].

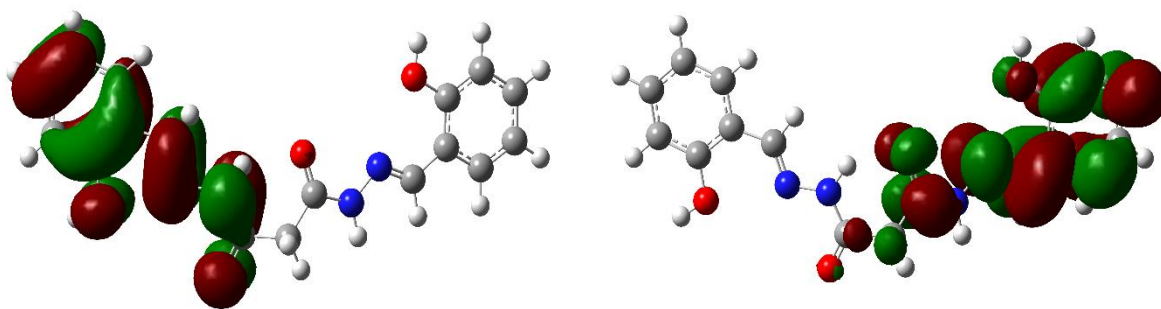


Рис. 2. Распределение заряда  
а) верхней занятой МО (ВЗМО) ( $E = -1,842$  эВ)  
б) нижней свободной МО (НСМО) ( $E = -5,833$  эВ)

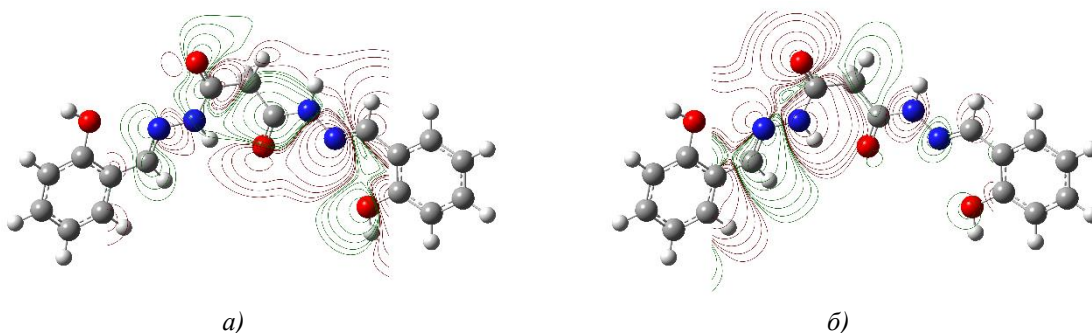


Рис. 3. Электронная плотность молекулы  
а) верхней занятой МО (ВЗМО)  
б) нижней свободной МО (НСМО)

### Заключение

Из квантово-химических расчетов можно сделать вывод, что молекула N'1,N'3-бис((E)-2-гидроксибензилиден)малоноилгидразида будет координироваться атомами азота и кислорода при синтезе комплексных соединений. А также образовавшиеся комплексные соединения с некоторыми 3d-металлами ( $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$  и др.) в соотношении 2:1, координируясь гетероатомами N=C=O, C=N-NH и фенольным C-O<sup>-</sup>, завершая координационного числа металл-комплексобразователя до четырех молекулой аммиака или пиридина.

### Благодарность

Авторы выражают благодарность заведующему лабораторией Института общей и неорганической химии АН РУз, доктору химических наук, профессору Тохир Азизович Азизову и доценту Самаркандского государственного университета, кандидату физико-математических наук Абдулла Куватову, а также сотрудникам Института биоорганической химии Академии наук Республики Узбекистан за оказанную практическую помощь при выполнении настоящей работы.

### Список литературы:

1. Берлин, А.А. Моделирование некоторых свойств жидкостей/ А.А. Берлин, Л. Ротенбург, Р.

Басэрст // Высокомолекулярные соединения. 1992. - Т. А 34. - С. 6 – 32.

2. Стариков А. Г. Квантово-химическое изучение внутримолекулярных спин-запрещенных перегруппировок хелатных комплексов переходных металлов //Российский химический журнал. – 2009. – Т. 53. – №. 1. – С. 115-127.

3. Соловьев, М.Е. Компьютерная химия / М. Е. Соловьев, М. М.Соловьев. – М. : Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

4. 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.

5. 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.

6. C. Lee, W. Yang, R. G. Parr, Phys. Rev. B 1988, 37, 785.

7. П. В. Серб, С. П. Мирошниченко, Ю. Ф. Блинов. Квантово-химические расчеты в программе GAUSSIAN по курсу «Физика низкоразмерных структур». Таганрог: Издательство ТТИЮФУ, 2012, 100с.

8. Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Синтез и исследование методами ИК-спектроскопии и квантовой химии -6-((2,4-динитрофенил) гидразон-1,3,5-триазиан-2,4-

диона // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 6(72). – С. 68-73.

9. Ахмедов В.Н., Олимов Б.Б., Назаров Ш.К. Электронная структура и квантово-химические расчёты виниловых эфиров фенолов // Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн. 2020. № 4(70). – С. 53-56.

10. Tukhvatullin R. F. et al. Synthesis and study of geometry and electronic density of sterically hindered phenols used as antioxidant additives to lubricating oils // Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. – 2018. – Т. 61. – №. 4-5. – С. 84-92.

11. Ganiyev B., Ostonov F., Kholikova G., Salimov F. Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide // International Independent Scientific Journal. 2020. Vol.2. №. 16. P. 3-9.

12. Ганиев Б.Ш., Умаров Б.Б., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г., Аслонова Ф.С. Синтез, строения, таутомрия и исследование некоторых квантово-химических параметров соединения 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразин-карбоксамид // Евразийский Союз Ученых (ЕСУ) – 2020. – № 7(76). Часть №5. – С. 65-68 doi: 10.31618/ESU.2413-9335.2020.5.76.930

13. Бабкин В. А. и др. Квантово-химические исследования механизма синтеза 2-метил (бензил)

тио-4-метил (бензил) оксипиримидина //Химическая физика и мезоскопия. – 2007. – Т. 9. – №. 3. С. 263-275

14. Попов Л. Д. и др. Синтез, физико-химическое исследование и квантово-химическое моделирование гидразонов на основе 2-гидразиноимидазолина //Журнал общей химии. – 2014. – Т. 84. – №. 4. – С. 596-601.

15. Салих С., Хасан М. Синтез и исследование структуры производных N-(4-сульфамоилфенил) амидов и соответствующих гидразонов //Химия и технология топлив и масел. – 2015. – №. 4. – С. 38-40.

16. Shul`gin V.F. Molecular structure of the binuclear samarium complex with malonic acid and 1-phenyl-3-methyl-4-formylpyrazolone-5 / V.F. Shul`gin, Z.Z. Bekirova, O.V. Konnic, G.G. Aleksandrov, I.L. Eremenko // Scientific Notes of Taurida V.Vernadsky National University. – Series: Biology, chemistry.– 2012. – Vol. 25 (64), No. 1. – P. 314-319.

17. Абдурахмонов С. Ф. и др. Синтез и исследование биядерных комплексов ванадила(II) на основе бис-5-оксипиразолинов //Universum: химия и биология. – 2019. – №. 12 (66). – С. 50-55.

---

## РАЗРАБОТКА КОМБИНИРОВАННОЙ ТЕХНОЛОГИИ ПОЛУЧЕНИЯ ТРОНЫ И ОЧИЩЕННОГО БИКАРБОНАТА НАТРИЯ

---

**Эркаева Назолат Актамовна**  
старший преподаватель

Ташкентского химико-технологического института  
100011, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Навои, 32

**Бегдуллаев Ахмет Кобейсинович**

ООО «Кунградский содовый завод»,  
230614, Республика Узбекистан,

г. Кунград, поселок Елабад

**Каипбергенов Атабек Тулепбергенович**

Заведующий кафедрой НГПИ,  
230011, Республика Узбекистан, г. Нукус, ул. Сеитов, б/н.

**Эркаев Ахтам Улашев**

д-р техн. наук, профессор

Ташкентского химико-технологического института  
100011, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Навои, 32

**Тоиров Закир Каландарович**

канд. техн. наук, доцент

Ташкентского химико-технологического института,  
100011, Республика Узбекистан, г. Ташкент, ул. Навои, 32

### АННОТАЦИЯ

Исследовано влияние технологических параметров на процессы получения сесквикарбоната и бикарбоната натрия газожидкостным способом.

Разработан способ получения сесквикарбоната и бикарбоната натрия, который включает стадии приготовления насыщенного раствора карбоната натрия в маточном растворе, смешивание раствора с бикарбонатом натрия и далее после отделения сесквикарбоната натрия маточный раствор карбонизируется с получением бикарбоната натрия.

Кальцинированную соду растворяли при температуре 95°C в маточном растворе бикарбоната натрия. При необходимости добавляется технический бикарбонат натрия. Образующаяся сесквикарбонатная суспензия фильтруется с получением влажного сесквикарбоната натрия. Полученный маточный раствор карбонизировали при температуре 90°C до степени карбонизации 170% и охлаждали до 35°C;