



ISSN (E): 2181-4570

NIKEL ATSETATNING MELAMIN VA SISTEIN ASOSIDAGI ARALASH LIGANDLI KOMPLEKS BIRIKMALARINI KVANT-KIMYOVIY HAMDA IQ SPEKTRASKOPIYASI ANALIZI USULIDA TAHLIL QILISH

**Buvrayev Erali Ravshanovich,* Safarov Rahamonqul Uktam o'g'li,*
Buvrayev Nurali Ravshan o'g'li,* Kasimova Xurshida Rajabboyevna.****

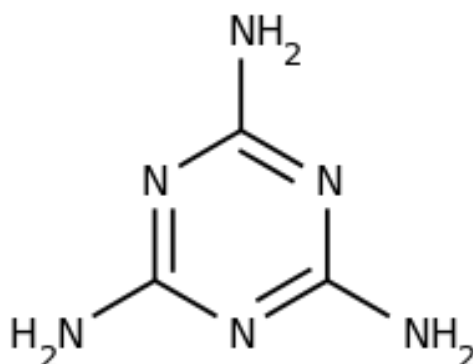
**Sh.Rashidov nomidagi Samarqand davlat universiteti*

***O'zFin pedagogika inistituti*

erali.buvrayev.89@mail.ru

So'nggi yillarga kelib triazin hosilalari, aminokislotalar hamda d-metallar sistemasidan iborat aralashligandli komplekslar deyarli o'rganilmagan. Triazin hosilalari va aminokislotalarning yuqori biologik faolligini e'tiborga olgan holda bioelementlar bilan kompleks birikmalarining sintezini olib borish, tarkibi va tuzilishini tadqiq qilish koordinatsion birikmalar kimyosini dolzarb muammolarini hal qilib qolmasdan, balki amaliyotga tadbiiq qilish mumkin bo'lgan moddalar yaratishda dolzarb masala hisoblanadi. 1,3,5-Triazinlar 200 yildan beri ma'lum birikmalar hisoblanadi [2]. Ularni quyidagi maqsadlarda ishlatishadi: gerbitsidlar, pestitsidlar, peptitsidlar sintezida kondensirovchi birikmalar, modifikatorlar, antioksidantlar, termostabilizatorlar, antipirenlar, oqlovchi moddalar, bo'yoklar boshka moddalar sintezida baza sifatida ishlatiladi [1-2]. Aniqlanishicha 1,3,5- triazinlar ayrim tabiiy manbalarda ham uchraydi, masalan metioritlarda va suvo'tlarda [2]. Melamin organik asos, ssianamidning trimeri bo'lib, uning strukturasi asosida 1,3,5-triazin-2,4,6-triamin (2,4,6-triamino-1,3,5-tiazin) yotadi. Melamin rangsiz kristallar hisoblanadi (suvdan monoklin prizmalar) 354°S va undan yuqori haroratga qizdirilganda melamin o'zidan ammiakni chiqarib melemaga (2,4,10-triamino-simm-geptazin) aylanadi. Melaminga hos xossalardan biri bu nukleofillar ta'sirida aminogruppalarni almashinishi hisoblanadi.





Kvant kimyoviy hisoblashlarning rivojlanishi tufayli koordinatsion kimyo sohasidagi ishlarni oldindan rejalashtirish imkoniyati tug'ildi va kvant-kimyoviy xisoblashlar natijalariga asoslanib polifunksional ligandlarda konkurent koordinatsiyaga uchray oladigan markazlarni oldindan bashorat qila olish imkoni yaratildi.

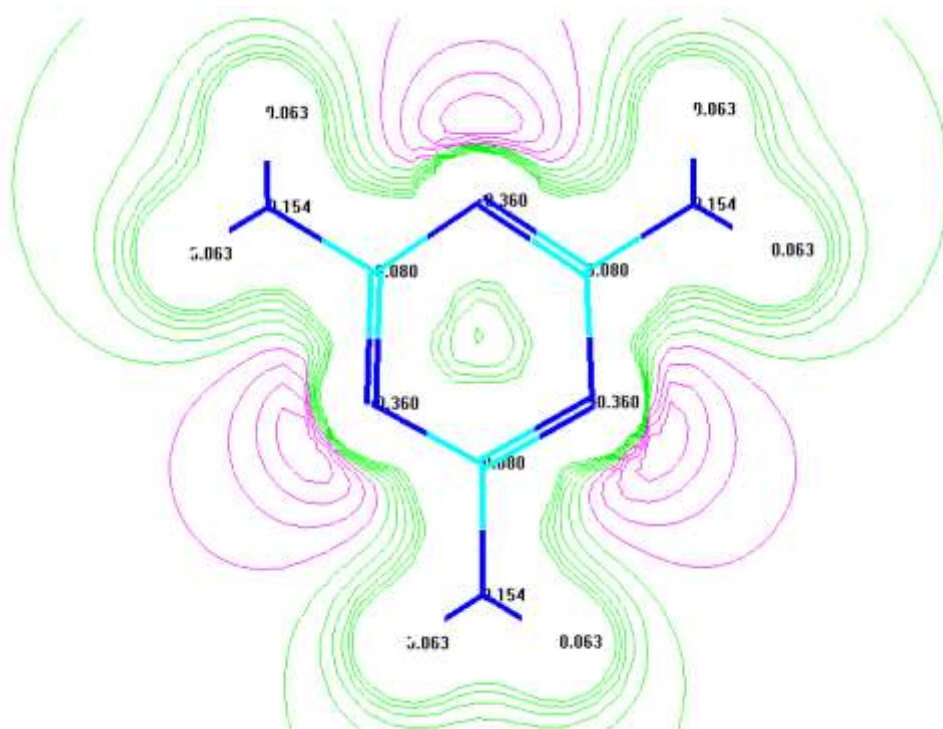
ChemOffise o'zida kimyoviy strukturalarni chizish imkoniyatiga ega. Struktura hakidagi malumotlar asosida u orbitallar va modellarni har xil o'lchamlarda kursatish imkoniyatlariga ega.

ChemOffise Ultra 2006 quyidagi programmalarga ega: ChemDraw E-Notebook Ultra, ChemFinder, CombiChem, Invenry, BioAssy va bir butun yg'ilma shaklidagi The Merck Index qullanmasiga ega. Micrasoft Offise bilan integratsiyalash uchun ChemDrav/Excel va ChemFinder/Word modullari ishlatiladi. Ligandlarning kvant-kimyoviy analizi matematik modelashtirish ChemOffise Ultra programmasida olib borildi.



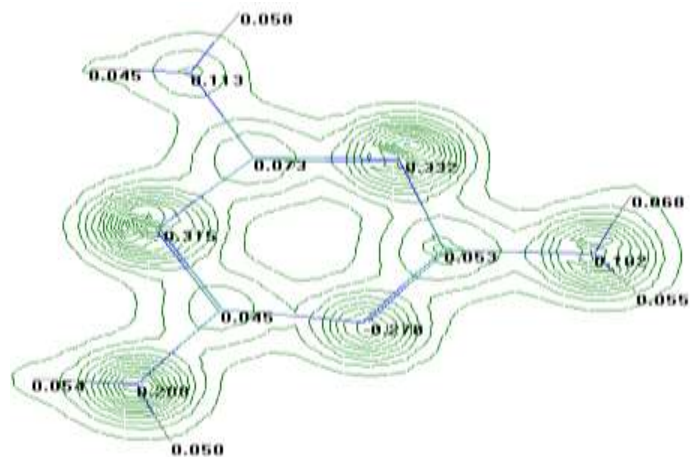


Kvant-kimyoviy hisoblashlar natijalariga ko'ra xulosa qilib shuni aytish mumkinki melamin kompleks hosil bo'lishida o'zining manfiy zaryadi eng yuqori (-0.332 eV) bo'lgansikldagi azot bilan donor- akseptor bog'lanishda ishtirok etadi. Sistein kompleks hosil kiluvchi ion bilan aminogruppadagi manfiy zaryadi eng yukori (-0.326 eV) bulgan azot bilan ishtirok etadi. Olingan nazariy natijalar keyinchalik tanlangan metallarning melamin va Sistein bilan aralash ligandli komplekslarini tarkibi va tuzilishini rentgenfazaviy analizida va IQ spektrlari taxlili asosida tekshiriladi.

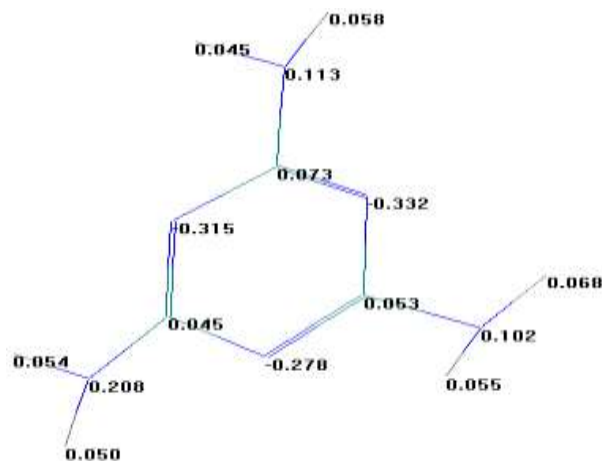


L¹(melamin) Ligand elektron zichligi taqsimoti sxemasi PM3 da





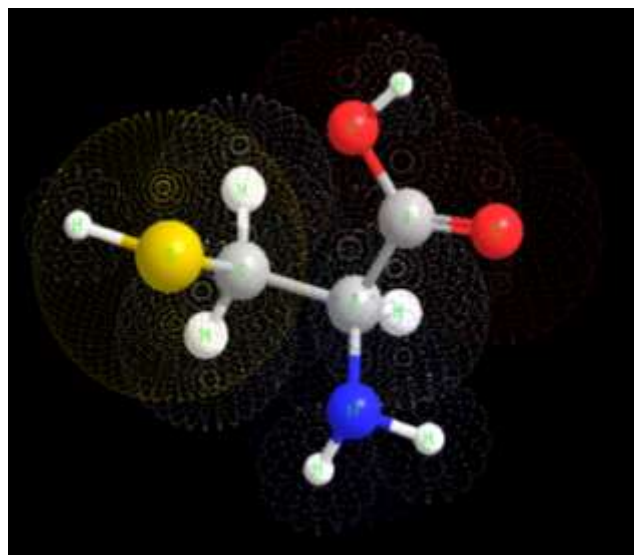
b)



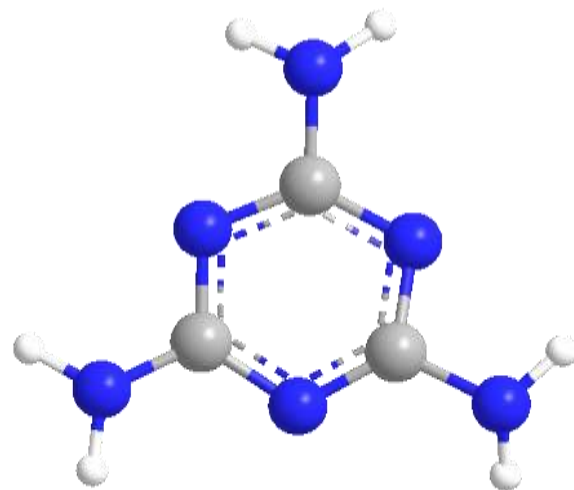
a)

a) Melamin molekulasida elektron zichligining tarqalishi

b) Melamin molekulasida atomlarda zaryatlarining taqsimlanishi



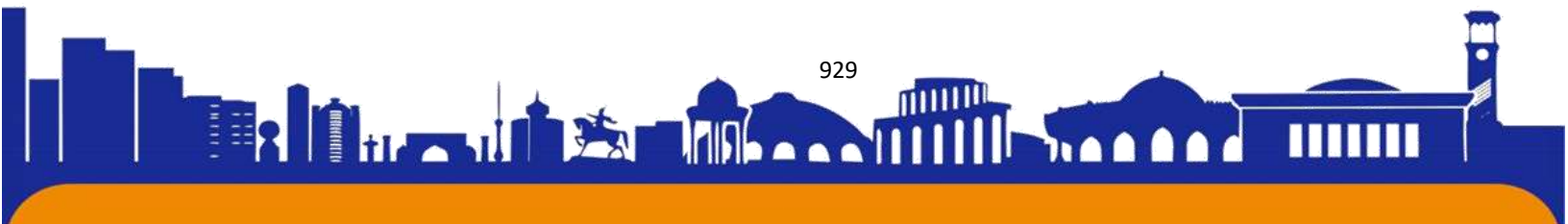
a)



b)

a) Sisteinning geometrik konfiguratsiyasining modeli

b) Melaminning geometrik konfiguratsiyasining modeli





Kvant-kimyoviy hisoblashlar natijalariga ko'ra sistein kompleks hosil bo'lishida o'zining tarkibidagi atomlarning elektron zichligi eng yuqori bo'lgan 8- oltingugurt atomi bilan donor atomi sifatida bog'lanishi mumkin degan xulosaga kelishimiz mumkin.

Spektrofotometrik analizda EMC-30PC-UV Spectrophotometer dan foydalanildi.

Olingan natijalar: To'lqin uzunligi 190-1000 nm oralig'ida tekshirildi

Olingan aralashma sovutilganda ba'zi reaksiya maxsulotlari cho'kma ko'rinishida, ba'zi maxsulotlar rangli birikmalar (jigarrang, siyohrang) ko'rinishida ajralib chiqdi. Kompleks birikma hosil bo'lgan yoki bo'lmaganligini aniqlash maqsadida ushbu rangli eritmalar hamda erkin melamin, amkinokislotaning, nikel tuzlari eritmalarining yutilish spektrlari (EMC-30PC-UV) o'lchandi. Olingan natijalar quyidagi jadval ko'rinishida keltirilgan;

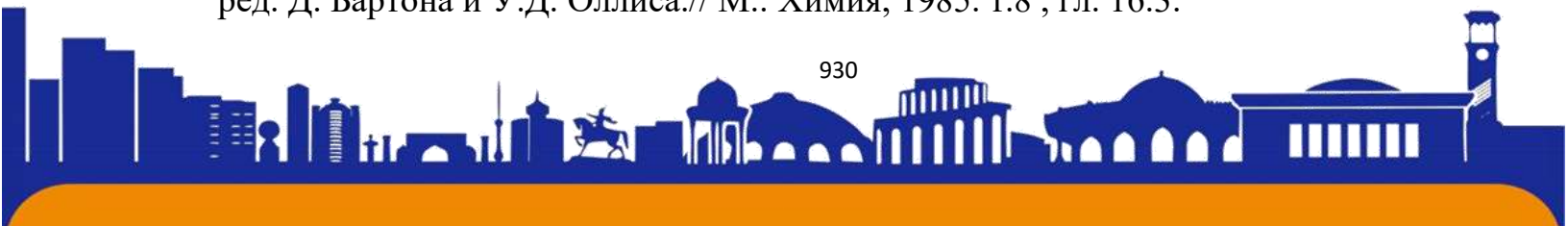
Kompleksning spektro fotometrik yutilish spektrlari

Aniqlanuvchi birikma	Yutilish maximumi λ , nm
Ni ²⁺ tuzlari	300
Co ²⁺ tuzlari	226
L-sistein	263
melamin	350
Ni ²⁺ tuzlari	264
L-sistein	268
melamin	375

Yuqorida keltirilgan ma'lumotlardan erkin holdagi komponentlar hamda ularning reaksiyasidan hosil bo'lgan maxsulotlar yutilish maksimumlarida keskin o'zgarish kuzatiladi. Bu esa eritmada ushbu komponentlar o'zaro ta'sirlashib, yangi tipdagi birikmalar hosil qiladi, degan xulosa chiqarish uchun asos bo'ladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Портер А.Т. Триазины и тетразины // Общая органическая химия, под ред. Д. Бартона и У.Д. Оллиса.// М.: Химия, 1985. т.8 , гл. 16.3.





2. Шастин А.В., Годовикова Т.И., Корсунский Б.Л. Нитропроизводные 1,3,5-триазины. Синтез и свойства // РАН Успехи химии, 2003.-Т.72.-С.311-350.

3. Jassem Mohamad Abd Al Hassien. // Journal of Natural Sciences Research. Vol.3, No.10, 2013. 32-41 r.

4 Buvrayev E.R., Tilyabov M.U., Samarova Sh.M., Buvrayev N.R. “Innovatsionnoe razvitie nauki i obrazovaniya” xalqaro konferensiya. Qozog’iston 2020 yil iyun

5. E.R. Buvrayev, A. KadirovaSh, Z.N. Normuradov, M. SamarovaSh, M.U. Tilyabov, A.S. Mamatov. Dynamical & Control systems vol.12, 05-Special Issue. 2020.

