

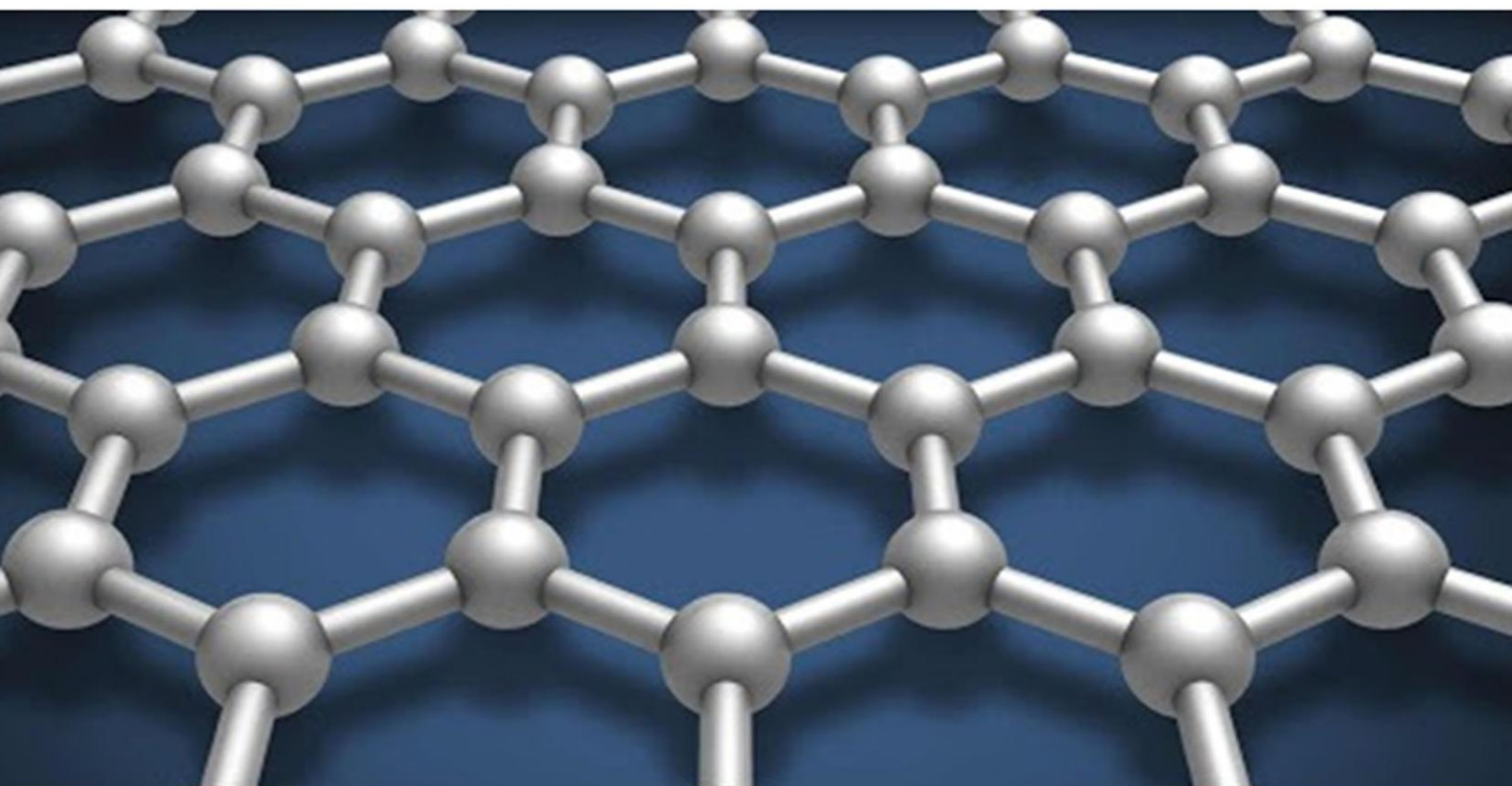
ISSN 2091-5527

№ 3/2025

O'zbekiston

Kompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал

Композиционные материалы

UCHLAMCHI AMINLAR ASOSIDA SINTEZ QILINGAN TO'RTLAMCHI AMMONIY TUZLARINI KVANT-KIMYOVIY HISOBLASHLARNI AMALGA OSHIRISH

¹Bo'rixonov Baxtiyor Xolmirzayevich, ¹Rajabova Gulnoza Rustam qizi,
²Berdimurodov Elyor Tuxliyevich, ³Panjiyev Arziqul Xolliyevich

¹Qarshi davlat universiteti, ²O'zbekiston milliy universiteti, ³Qarshi davlat texnika universiteti

Annotatsiya: Mazkur maqolada piridin va N-butilmorfolin asosida sintez qilingan to'rtlamchi ammoniy tuzlarining kvant-kimyoviy xossalari B3LYP metodi va 6-311G(d,p) bazis to'plamidan foydalangan holda DFT (density functional theory) usulida hisoblab chiqildi. Molekulalarning kimyoviy qattqlik, elektromanfiylik, elektron kimyoviy potensial, elektrofillik va kimyoviy yumshoqlik kabi parametrlar aniqlandi. Energiya farqi (HOMO–LUMO) orqali birikmalarning reaktivlik darajalari baholandi.

Kalit so'zlar: to'rtlamchi ammoniy tuzlari, kvant kimyo, DFT, HOMO, LUMO, elektrofillik, kimyoviy qattqlik, termodinamik parametrlar.

Kirish. To'rtlamchi ammoniy tuzlari zamonaviy kimyo va farmatsevtikada keng qo'llanilayotgan birikmalar sirasiga kiradi. Ularning yuqori biologik faolligi, ionli tuzilishi, eruvchanligi va selektivligi tufayli antibakterial, antifungal va antiviral vositalar sifatida keng o'rganilmoqda. Bundan tashqari, bunday birikmalar ion almashuvchi qatlamlar, membranalar va funksional kompozitsion materiallar tarkibida ham ishlatiladi. [1,2]

Zamonaviy kvant-kimyoviy hisoblashlar, xususan, zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosidagi metodlar, organik va noorganik birikmalarning struktura-reaktivlik bog'lanishini chuqur o'rganish imkonini bermoqda. Bu usullar molekulaning HOMO-LUMO energiya farqlari, kimyoviy qattqlik, elektrofillik, elektromanfiylik kabi xossalarni aniq baholashga yordam beradi. [3] Ayniqsa, yangi sintez qilingan moddalarning reaksiyon faolligini va barqarorlik darajasini nazariy jihatdan tahlil qilish, ularning amaliy qo'llanilish istiqbollarini belgilashda muhim ahamiyatga ega. [4, 5]

Ushbu maqolada piridin va morfolin hosilalari asosida sintez qilingan to'rtlamchi ammoniy tuzlarining kvant-kimyoviy xossalari B3LYP/6-311G(d,p) darajasida hisoblab chiqildi. Olingan natijalar molekulalarning reaktivligi, elektron tuzilmasi va termodinamik barqarorligi haqida chuqur tahlil imkonini beradi. [7,8]

Tajriba uslubi. Piridin va N-butilmorfolin asosida olingan to'rtlamchi ammoniy tuzlarini kvant kimyoviy xossalarni B3LYP metodi va 6-311G (d, p) bazis setlari yordamida xisoblandi. Molekularning ba'zi bir kvant xossalari masalan, kimyoviy qattqlik, elektromanfiylik, elektron kimyoviy potensial, elektrofillik qiymati va kimyoviy yumshoqliklari aniqlandi. Kvant kimyoviy usullar yordamida tahlil qilingan birikmalarni quyidagi tartibda nomerladik.

1. 4-Butil-4-(2-(noniloksi)-2oksoetil)morfolin-4-ammoniyxlorid

2. 4-(2-(Benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-ammoniy xlorid

3. 4-Butil-4-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)morfolin-4-ammoniy xlorid

4. 1-(2-(Noniloksi)-2-oksoetil)piridin-1-ammoniy xlorid

5. 1-(2-Okso-3-fenilpropil)piridin ammoniy xlorid

6. 1-(2-Okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)piridin-1-ammoniy xlorid

Kvant kimyoviy hisoblashlar boshlashdan oldin o'rganilayotgan moddalar optimizatsiya qilindi, va bog'lovchi (LUMOs) va bo'shashtiruvchi (HOMOs) orbitallarning energiyalaridan foydalanib kvant kimyoviy hosalarininng qiymatlari topildi. Olingan natijalar quyidagi (1-5) formulalar orqali ifodalandi va 3.3-jadvalda keltirildi.

$$\text{Kimyoviy qattqlik, } \eta \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{Bog'lovchi orbital}} \text{ energiyasi (LUMO) (eV)} - E_{\text{HOMO}} \text{ (eV)}}{2} \quad (1)$$

$$\text{Elektronaktivlik, } \chi \text{ (eV)} = \frac{-(E_{\text{LUMO}} \text{ (eV)} - E_{\text{HOMO}} \text{ (eV)})}{2} \quad (2)$$

$$\text{Kimyoviy elektron potensial, } \mu \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{LUMO}} \text{ (eV)} + E_{\text{HOMO}} \text{ (eV)}}{2} \quad (3)$$

$$\text{Global electrophilicity Index, } \omega \text{ (eV)} = \frac{\mu^2 \text{ (eV)}}{2\eta \text{ (eV)}} \quad (4)$$

$$\text{Kimyoviy yumshoqlik, } s \text{ (eV)} = \frac{1}{2\eta \text{ (eV)}} \quad (5)$$

Kvant kimyoviy nazariyalarda bog'lovchi orbitallarning energiyasi (LUMOs) elektronga moyil molekulalarning moyililigini ko'rsatadi. Bo'shashtiruvchi orbitallar energiyasi (HOMOs)

esa aksincha holatni tushuntiradi. Nazariy hisoblashlar natijasida (2-6) birikmalarda boshqa birikmalarga nisbatan elektron moyilligi nisbatan yuqoriroq ekanligi aniqlandi va $2 > 6 > 5 > 1 > 3 > 4$

tartibda joylashtirildi. (2-6) birikmalarda elektronga moyillikgini COO⁻, C₆H₅ guruhlar hisobiga elektronga moyilligini oshiradi deb izohlash mumkin.

Ionizatsiya potentsiali natijalari tahlil qilinganda quyidagi tartibda joylashtirildi **2>1>3>4>6>5**. (2-1) birikmalar boshqa birikmalarga nisbatan ionizatsiya potentsiali yuqoriroq ekanligi ma'lum buldi, bunga, sabab C₄H₉, S₆H₅ kuchli ionlanish radikallar hisobiga yuzaga keladi.

Kvant kimyoviy nazariyalarga binoan bog'lovchi orbitallarning energiyasi (LUMOs) va bo'shashtiruvchi orbitallar energiyasi (HOMOs) energiyasi farqining qiymati qanchalik kichkina bo'lsa molekullarning barqaror va beqarorligini ifodalaydi. YA'ni farq qanchalik kichik bo'lsa molekula shunchalik barqaror bo'ladi va reaksiya qobiliyati pastroq bo'ladi. Aksincha bo'lsa reaksiya qobiliyati yuqori bo'ladi. Umuman olganda olingan birikmalarning natijalari shuni ko'rsatdiki barcha molekullarni reaksiya qobiliyati yuqori chunki molekullarning energiya farqi 0,3 eV dan kam ekanligi aniqlandi va natijalarga qarib quyidagi tartibda joylashtirildi **2<1<3<5<6<4** bunda 2,1 va 3 tarkibidagi N atomlari kiritilganda bu N atomiga CH₂ radikallari bilan bog'langanda elektron-akseptor guruhlar qisman molukulani manfiy zaryadlaydi.

Bog'lovchi orbitallar nazaryasi (LUMOs) va bo'shashtiruvchi orbitallar nazaryalari (HOMOs) quyidagi keltirilgan (1-10) rasmlarda ifodalangan. Bu rasmlardan ko'rish mumkinki bog'lovchi orbitallari (LUMOs) elektron-akseptor valent elektronlarni tasvirleydi.

Kimyoviy qattqlik va kimyoviy yumshoqlik.

Kimyoviy qattqlik va kimyoviy yumshoqlik-molekulani deformatsion o'zgarishiga kimyoviy qarshiligini ko'rsatadi. Kimyoviy yumshoqlik shuning teskarisini ko'rsatadi. Olingan natijalardan ma'lumki sintez qilingan to'rtlamchi ammoniy tuzlarining barchasi kimyoviy yumshoq molekullardir ya'ni deformatsion qobiliyati yuqori.

Elektrofilitikligi-olingan birikmalarning elektrofilitik qiymati Lyus kislotaligi xossasini ko'rsatadi. U molekullarning tuzilishiga fizik-kimyoviy xossalarini ya'ni depol momentiga, polezizatsiya xossasiga va eruvchanlikga bog'liqligini o'rganilganda sintez qilingan birikmalarning barchasi elektrofilitik qiymatlari 0,3 yeV dan kam ekanligi aniqlandi. Shunday qilib bu birikmalar kuchsiz lyus kislotalar ekanligi aniqlandi va quyidagi tartibda kuchlilik darajasiga qarab joylashtirildi **3>6>5>1>4>2**.

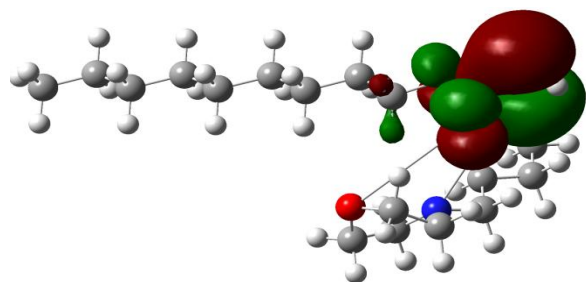
Teoritik termodinamika hossalari-bunda dipol momenti qutblanuvchanligi issiqlik energiyasi, issiqlik sig'imi va entropiyasi aniqlanadi. Natijalar shuni ko'rsatdiki barcha tuzlar yaxshi qutblanuvchanlikka ega ekanligi, molekulada dipol ta'sirlanishi aniqlandi. Qutblanuvchanligi quyidagi ketma-ketlikda joylashtirdik **6.8 (2) > 3.8 (4) > 3.7 (5) > 3.4 (6) > 2.5 (3) > 2.3 (1)**

Issiqlik sig'imi va entropiyasi quyidagi tartibga ega **(103) 1 > (85) 3 > (77) 4 > (61) 2 > (59) 6 > (56) 5** natijalar shuni ko'rsatdiki 4-Butil 4-Butil-4-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)morfolin-4-ammoniy xloridda yuqori issiqlik sig'imiga ega ekanligi aniqlandi. Sababi siklik halqa va katta alifatik radikallar mavjudligidir.

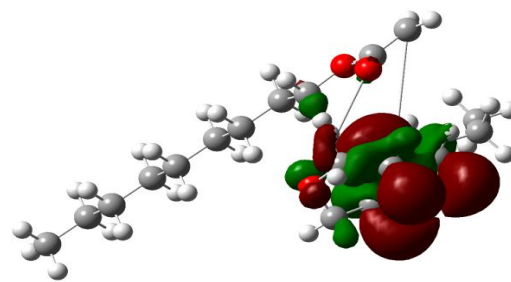
Jadval 1.

4-butil-4-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)morfolin-4-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	4-butil-4-(2-(noniloksi)-2-oksoetil) morfolin-4-iyum xlorid
E _{LUMO} , eV	-0.12
E _{HOMO} , eV	-0.19
E _g , eV	0.07
Elektron qobiliyati, eV	-0.12
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.19
Kimyoviy qattqlik, η, eV	0.035
Elektronegativlik, χ, eV	-0.035
Elektron kimyoviy potentsial, μ, eV	-0.155
Global elektrofilitik indeksi, ω, eV	0.343
Kimyoviy yumshoqlik, s, eV	14.285
Dipol momenti, Debay	2.331
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari (a.u.)	217.009
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-1026.989
Termal energiya, kcal/mol	368.358
Issiqlik sig'imi (C _v), cal/mol-kelvin	103.726
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	206.171



Rasm 1. 4-butil-4-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)morfolin-4-iyum xloridining LUMO orbitalari

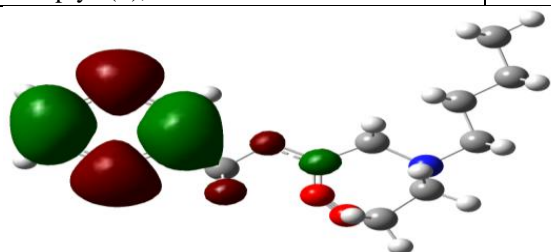


Rasm 2. 4-butil-4-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)morfolin-4-iyum xloridining HOMO orbitalari

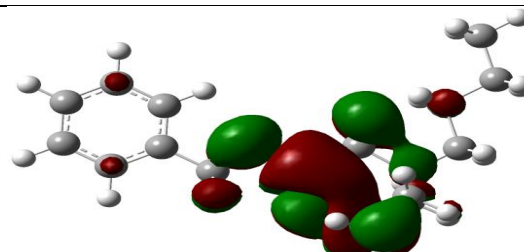
Jadval- 2

4-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	4-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-iyum xlorid
E_{LUMO} , eV	0.023
E_{HOMO} , eV	-0.040
E_g , eV	0.063
Elektron qobiliyati, eV	0.023
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.040
Kimyoviy qattqlik, η , eV	0.0315
Elektronegativlik, χ , eV	-0.0315
Elektron kimyoviy potentsial, μ , eV	-0.0085
Global elektrofillik indeksi, ω , eV	0.00114
Kimyoviy yumshoqlik, s , eV	15.873
Dipol momenti, Debay	6.844
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari	256.624
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-943.056
Termal energiya, kcal/mol	260.100
Issiqlik sig'imi (C_v), cal/mol-kelvin	61.915
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	122.084



3-Rasm. 4-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-iyum xloridining LUMO orbitalari

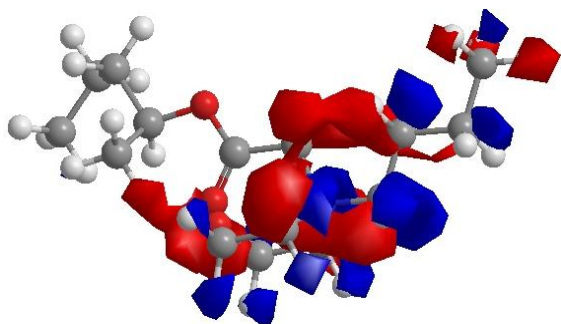


4-Rasm 4-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-iyum xloridining HOMO orbitalari

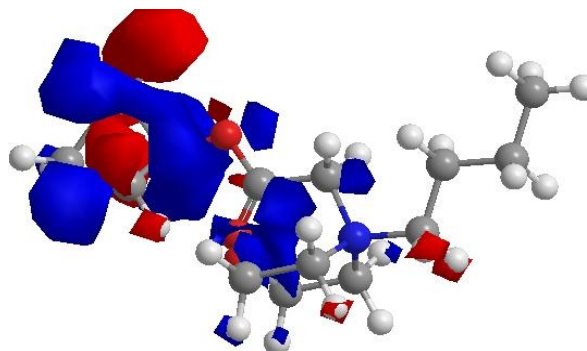
3-jadval

4-butil-4-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)morfolin-4-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	4-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)-4-butilmorfolin-4-iyum xlorid
E_{LUMO} , eV	-0.115
E_{HOMO} , eV	-0.195
E_g , eV	0.08
Elektron qobiliyati, eV	-0.115
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.195
Kimyoviy qattqlik, η , eV	0.04
Elektronegativlik, χ , eV	-0.04
Elektron kimyoviy potentsial, μ , eV	-0.155
Global elektrofillik indeksi, ω , eV	0.3
Kimyoviy yumshoqlik, s , eV	12.5
Dipol momenti, Debay	2.528
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari	173.706
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-869.772
Termal energiya, kcal/mol	292.364
Issiqlik sig'imi (C_v), cal/mol-kelvin	85.510
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	178.488



Rasm 5. 4-butil-4-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)morfolin-4-iyum xloridining LUMO orbitalari

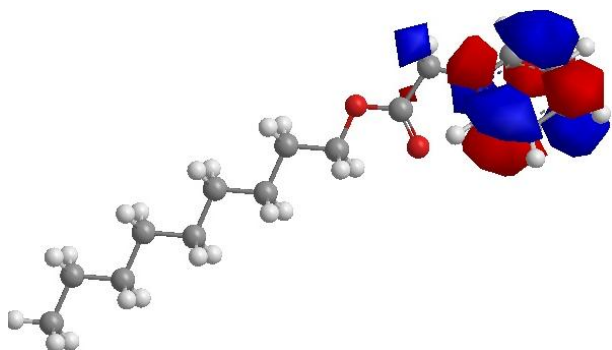


Rasm 6. 4-butil-4-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)morfolin-4-iyum xloridining HOMO orbitalari

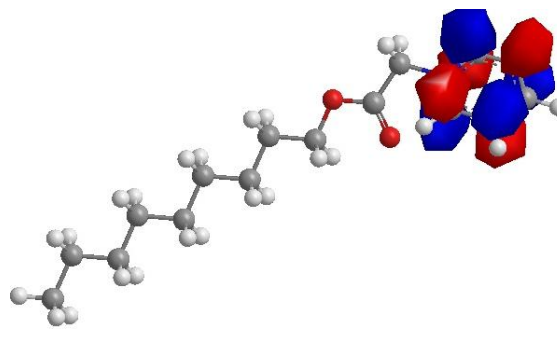
Jadval- 4

1-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	1-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xlorid
E_{LUMO} , eV	-0.134
E_{HOMO} , eV	-0.243
E_g , eV	0.377
Elektron qobiliyati, eV	-0.134
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.243
Kimyoviy qattqlik, η , eV	0.188
Elektronegativlik, χ , eV	-0.054
Elektron kimyoviy potentsial, μ , eV	-0.188
Global elektrofillik indeksi, ω , eV	0.094
Kimyoviy yumshoqlik, s , eV	2.652
Dipol momenti, Debay	3.683
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari	180.533
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-830.303
Termal energiya, kcal/mol	264.389
Issiqlik sig'imi (Cv), cal/mol-kelvin	77.357
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	167.919



Rasm 7. 1-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining LUMO orbitalari

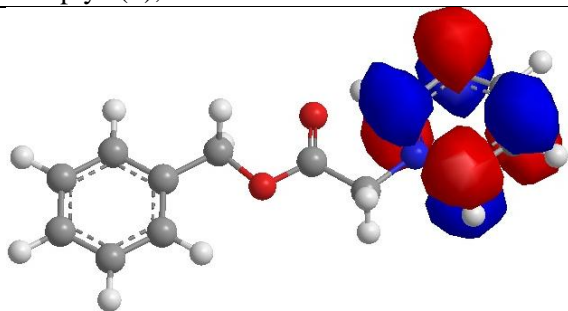


Rasm 8. 1-(2-(noniloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining HOMO orbitalari

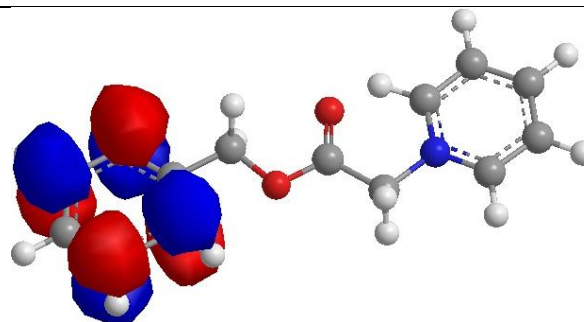
Jadval- 4

1-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	1-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xlorid
E_{LUMO} , eV	-0.022
E_{HOMO} , eV	-0.244
E_g , eV	0.222
Elektron qobiliyati, eV	-0.022
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.244
Kimyoviy qattqlik, η , eV	0.111
Elektronegativlik, χ , eV	-0.111
Elektron kimyoviy potentsial, μ , eV	-0.133
Global elektrofillik indeksi, ω , eV	0.16
Kimyoviy yumshoqlik, s , eV	4.5
Dipol momenti, Debay	3.7
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari	154.83
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-746.866
Termal energiya, kcal/mol	167.636
Issiqlik sig'imi (Cv), cal/mol-kelvin	56.803
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	138.503



Rasm 9. 1-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining LUMO orbitalari



Rasm 10. 1-(2-(benziloksi)-2-oksoetil)piridin-1-iyum xloridining HOMO orbitalari

Jadval- 4

1-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)piridin-1-iyum xloridining (298.150 K) global reaktivlik va termodinamik parametrlarining energiya qiymatlari

Ko'rsatkichlar	1-(2-okso-2-(pentan-2-iloksi)etil)piridin-1-iyum xlorid
E_{LUMO} , eV	-0.013
E_{HOMO} , eV	-0.243
E_g , eV	0.230
Elektron qobiliyati, eV	-0.013
Ionizatsiya potentsiali, eV	-0.243
Kimyoviy qattqlik, η , eV	0.115
Elektronegativlik, χ , eV	-0.115
Elektron kimyoviy potentsial, μ , eV	-0.256
Global elektrofillik indeksi, ω , eV	0.285
Kimyoviy yumshoqlik, s , eV	4.347
Dipol momenti, Debay	3.432
Polyarizabiliklik (α), atom birliklari	134.878
E(UB3LYP), Hartree birligida energiya	-673.092
Termal energiya, kcal/mol	188.553-
Issiqlik sig'imi (Cv), cal/mol-kelvin	58.999
Entropiya (S), cal/mol-kelvin	137.442

Негматов С.С., Исмаилов Р.И., Раупова Д.Н., Рахимов Х.Ю., Мусабеков Д.Х. Исследование процесса обессоливание нефтеемульсии в зависимости от вида и содержания деэмульгаторов	53
Неъматова С.Т., Каттаев Н.Т., Колядин В.Г., Акбаров Х.И. Получение оксида ванадия (V) на основе промышленных отходов	56
Якубов М.М., Суннатов Ж.Б., Максудходжаева М.С., Валиев Х.Р. Вовлечение в пирометаллургическую переработку золотосодержащих упорных руд и отходов обогатительных фабрик АО «Алмалыкский ГМК»	60
Эминов Аф.А., Эминов А.М., Кадырова З.Р. Обжиг тонкокерамических изделий: режимы и сущность процессов образования структуры	62
Турсунов А.С., Турдалиев У.М., Оразимбетова Г.Ж. Обогащения глауконитовых руд по методу простого отмучивания	68
Каршиев М., Файзиев М.М. Определение адгезионных свойств лабораторных образцов полученным газопламенным напылением с последующим оплавлением	70
Ochilov M., Mamatkulov N.N., Abdushukurov A.K. Fenil-4-metoksifenoksipropionat sintez usuli va uning texnologik sxemasini ishlab chiqish	73

4. Прикладные, экономические и экологические аспекты применения композиционных материалов

Абед Н.С., Негматов С.С., Нормуродов А.А., Туляганова В.С., Джабборов Б.Т., Бозорбоев Ш.А. Исследование электрофизических свойств разрабатываемых композиционных полимерных материалов и покрытий на их основе	76
Фузаилова К.Р. Исследование свойств композиционных материалов, использующихся в раскладках головного убора	79
Во'rixonov B.X., Rajabova G.R., Berdimurodov E.T., Panjiyev A.X. Uchlamchi aminlar asosida sintez qilingan to'rtlamchi ammoniy tuzlarini kvant-kimyoviy hisoblashlarni amalga oshirish	81
Махкамов В.Г'. Mahalliy xomashyodan sintez qilingan pan/vermikulit kompozitining Cu(II), Ni(II) ionlari bilan sorbsiyasi	86
Тошпулатова Г.Р., Хушвактова У.А., Абдурахимов К.Г., Дехканбаева С.А., Камолов Т.О. Исследование механизма окисления молибдена азотной кислотой	89
Xudoynazarov F.S. Piroliz qurumining termodinamik xossalari	93
Lutfullayev S.Sh., Sayfullayev T.X., Xayitov J.K. Qayta ishlangan polietilen asosidagi kompozitlarning mexanik xossaloriga somon tolalaring miqdori va o'lchami ta'siri	96
Негматов С.С., Мусабеков Д.Х., Исмаилов Р.И., Раупова Д.Н., Рахимов Х.Ю. Проведение опытно-производственные испытания разработанных композиционных химических деэмульгаторов для обезвоживания и обессоливания нефти в условиях ООО «Ферганский НПЗ»	99
Абдувалиева К.Х. Экологические аспекты интенсификации процесса извлечения платиноидов из техногенного сырья	102
Сайназаров А.М., Маткаримов С.Т., Мухаметджанова Ш.А., Носирходжаев С.К. Микроструктурное и фазовое исследование шлака донной корки кислородно-взвешенной плавки меди на стадии шлакоотвода	103

5. Методы исследования, приборов и оборудований композиционных материалов

Qarshiyev H.K., Xasanov A.S., Murashkeyevich S.M., Mirzanova Z.A. Eritmadan kobaltni oksidlab-cho'ktirishning zamonaviy holati va oksidlab cho'ktirishga ta'sir etuvchi omillarni tadqiq qilish.....	107
Во'rixonov B.X., Ahmadova R.S., Tojimuhamedov H.S., Panjiyev A.X. Etilenxlorgidrin asosida to'rtlamchi ammoniy tuzlari sintezi va ularni xitozan bilan modifikatsiyasi	113
Сидрасулиева Г.Б., Каттаев Н.Т., Акбаров Х.И. Синтез, идентификация и морфология поверхности нанокompозита O-g-C ₃ N ₄ /ZnO	116
Мнажов А.Н., Абылова А.Ж. Қорақалпоғистон республикаси устурт текислиги гипс минералларининг кимёвий, физик-кимёвий таҳлил натижалари	120