

O'zbekiston

Kompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал
Композиционные материалы

УДК 631.811.98

ИЗУЧЕНИЕ ИК-СПЕКТРОВ БИС-КАРБАМАТА МЭЭ-1

Э.Э. Машаев, А.Г. Махсумов, Б.Ф. Мухиддинов, О.О. Кодиров.

Введение. В последние годы возросший интерес к бис-карбаматным соединениям связан с возможностью использования в самых разных областях [1,2]. Авторами были синтезированы более 18 бис-карбаматных соединений и использованы в качестве ингибитора коррозии металлов, антиоксиданта топлив и биостимулятора растений [3,4]. Несмотря на малую токсичность этих соединений для человеческого организма, некоторые из них очень важны для рострегулирования и активности против вредителей растений [5]. С другой стороны, широко известно применение бис-карбаматных соединений, благодаря своей биологической активности, возможность применения во многих областях и т. д. [6]. Целью настоящего исследования является изучение строения синтезированного N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата] т.е. МЭЭ-1 и реагентов реакции методом ИК спектроскопии.

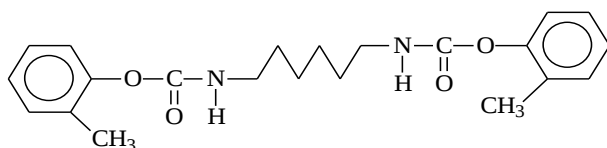


Рис. 1. Структурная формула МЭЭ-1

На рисунке 2 рассчитаны длины связей молекулы МЭЭ-1, где длина двойной связи C1=C6 в ароматическом кольце равна 1,40 Å, длина связи C1-H7 равна 1,08 Å, длина связи C2-C11, связанной с метильным радикалом кольца, составляет 1,49 Å, длина связи C3-O15 1,40 Å. Длина связи O15-C16 эфирной группы 1,40 Å. Длина двойной связи карбонильной группы C16=O19 равна 1,20 Å, длина связи атома углерода C16-N17 карбонильной группы – 1,39 Å. Длина связи N17-H18 аминогруппы - 1,02 Å, длина связи атома азота N17-C20 аминогруппы -

Материалы и методы исследования. N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата] т.е. МЭЭ-1, гексаметилендиизоцианат, орто-крезол. ИК спектры МЭЭ-1 были записаны на спектрометре Nicolet iS50 (Th.scientific, USA) методом НПВО. Сходства изучались с использованием баз данных HR Nicolet Sampler Library, HR Aldrich Hydrocarbons и Aldrich Vapor Phase Sample Library. Для создания трехмерной структуры и изучения длин связей молекулы МЭЭ-1 было использовано программа Gaussian 09.

Результаты исследования и их обсуждение. При анализе молекулы МЭЭ-1 также были проведены квантово-химические расчеты. Мы отсылаем вас к небольшой части этого анализа. Причина в том, что типы, длины и силы связей очень важны при изучении спектров молекул. На рисунках 1 и 2 представлены структурная формула и трехмерный вид молекулы МЭЭ-1 с расчетами длин связей атомов:

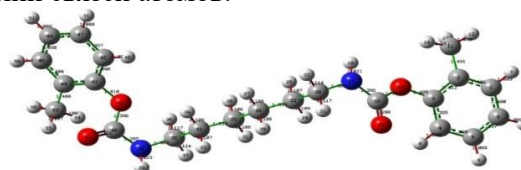


Рис. 2. Длины связей молекулы МЭЭ-1

1,48 Å. Длина связи C20-C23 в гексаметилене равна 1,53 Å, а длина связи C20-H21 в гексаметилене равна 1,11 Å. Поскольку реакционным центром в молекуле МЭЭ-1 является аминогруппа, следует отметить, что длина связи N17-H18 составляет 1,02 Å, а энергия разрыва 93 ккал/моль.

После были изучены спектры реагентов гексаметилендиизоцианата (ГМДИ) и орто-крезола вступающие в реакцию для синтеза МЭЭ-1 рисунки 3 и 4:

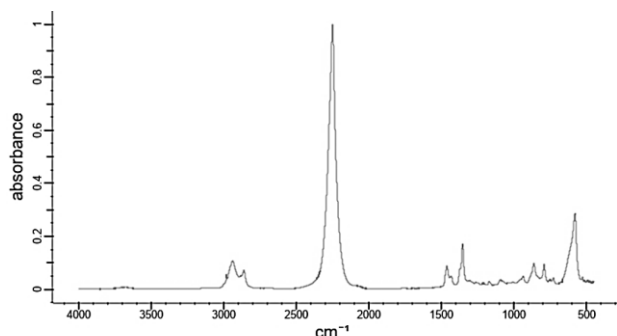


Рис. 3. ИК-спектр гексаметилендиизоцианата

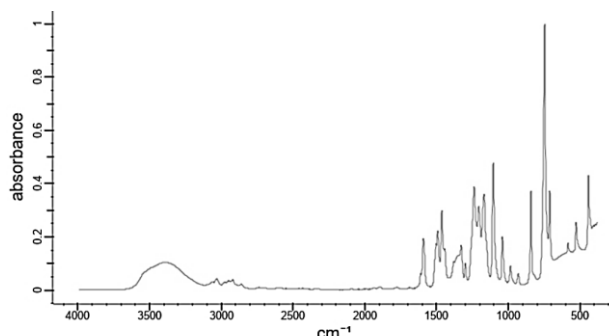


Рис. 4. ИК-спектр орто-крезола

В ИК-спектре ГМДИ (Рис. 3.) присутствует высокоинтенсивная полоса 2270 см^{-1} и полоса 1350 см^{-1} , соответствующие ассиметричным и симметричным колебаниям $\text{N}=\text{C}=\text{O}$ связи. Также наблюдаются полосы поглощения CH_2 - групп, соответствующие ассиметричным и симметричным колебаниям в областях 2950 см^{-1} и 2850 см^{-1} . В ИК-спектре орто-крезола (Рис. 4.) присутствие OH -группы подтверждается характеристическими полосами в области 3400 см^{-1} и 3200 см^{-1} , в области частот более 3000 см^{-1} имеется пик, соответствующий $\text{C}-\text{H}$ -связям в ароматическом кольце. Валентные колебания $\text{C}=\text{C}$ связей бензольного кольца характеризуются полосами $1620, 1350\text{ см}^{-1}$. Наличие интенсивной полосы при 1470 см^{-1} и низкой интенсивности полосы поглощения бензольного кольца при 1500 см^{-1} характерно для крезолов с орто-заместителями. Наличие метильной группы в этом соединении подтверждается полосами деформационных симметричных колебаний в области 1310 см^{-1} .

После, нами был проведен анализ подобия ИК-спектра соединения МЭЭ-1 с использованием библиотечных баз данных. На рисунке 5 представлено «Лоразепам» со сходством 21,59%, это соответствует к ароматическому кольцу, аминной группе и карбонильной группе бис-карбамата. «Полиуретановая смола» со сходством 19,78%, то есть соединение, содержащее несколько

уретановых (карбаматных) $\text{N(R)}-(\text{CO})\text{O}$ - групп. Также, «Поликарбонат, бисфенол А» со сходством 18,53% говорит о наличии нескольких фенольных и карбонильной $\text{Ar}-\text{O}-\text{CO}$ - связи также как и в молекуле бис-карбамата. На рисунке 6 со сходством 26,42% выявлено «2,2'-диметилбибензил» с чем, можно предположить о наличии ароматического кольца и аминной группы. «4-фенилтолуол» со сходством 25,30% показывает о наличии метила в ароматическом кольце. Также, со сходством 21,98% представлено «1,6-диизодегексан» это указывает на наличия гексана в молекуле бис-карбамата. Присутствие «Вербенона» и «изофорона» со сходством 28,60% и 20,51% на рисунке 7 указывает на то, что в молекуле МЭЭ-1 имеется карбонильная группа и метильная группа в ароматическом кольце. Вы также можете увидеть «4-пропилфенол» со сходством 26,53%, он соответствует о наличии связи $\text{H}_3\text{C}-\text{Ar}-\text{O}$ - в молекуле бис-карбамата. А также, «Пиразол» со сходством 20,74% свидетельствует о наличии аминной группы МЭЭ-1. На рисунке 8 проверены схожести пиков и выявлены пики «Алифатических ацетатных эфиров» свидетельствующие о наличии карбонильной $\text{C}=\text{O}$ и $\text{C}-\text{O}-\text{C}$ эфирной группы в молекуле бис-карбамата. Также, пики «Алифатических вторичных аминов» доказывающие о наличии аминной группы $\text{N}-\text{H}$ в молекуле бис-карбамата.

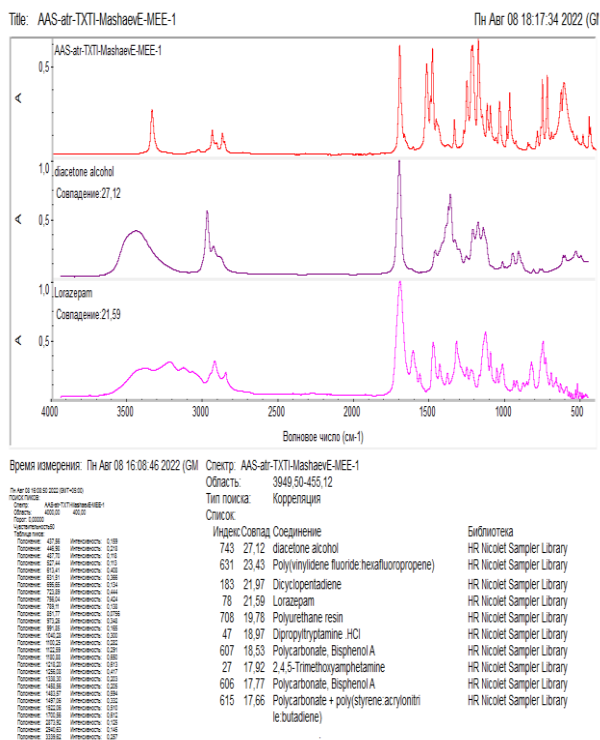
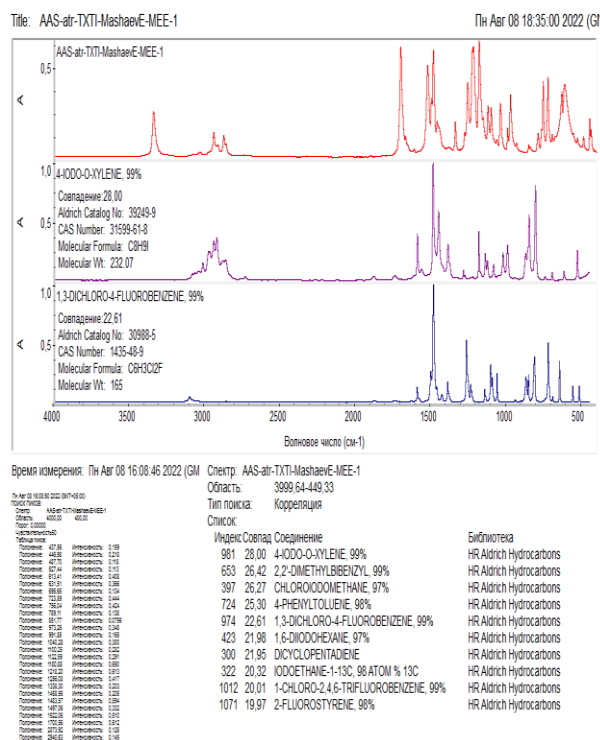


Рис. 5. Спектры сходства МЭЭ-1 в библиотеке HR Nicolet Sampler Library



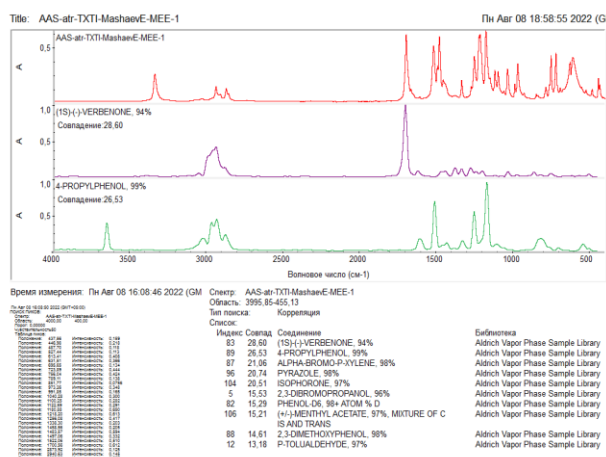


Рис. 7. Спектры сходства МЭЭ-1 в библиотеке Aldrich Vapor Phase Sample Library

Но учитывая, что точность этих сравнений очень низкая, мы отдельно

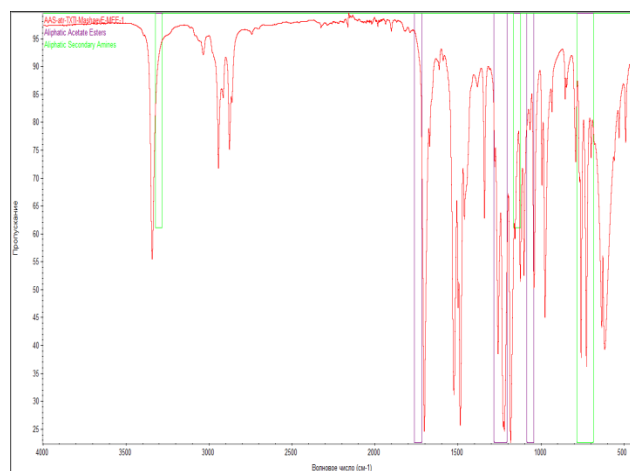


Рис. 8. Сопоставление пиков сходства бис-карбамата МЭЭ-1

проанализировали спектр бис-карбамата (Рис. 9).

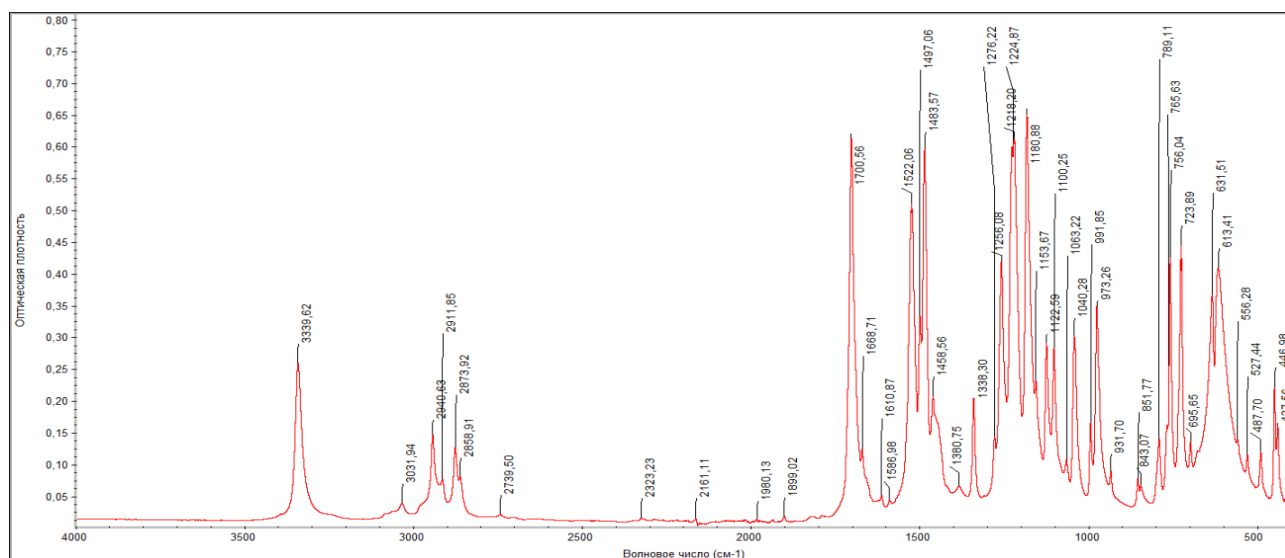


Рис. 9. ИК-спектр N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата] т.е. МЭЭ-1

В ИК-спектре бис-карбамата МЭЭ-1 (Рис. 9.) кольцевое колебание ароматического кольца проявлялось в районе 1483 см^{-1} , среднее валентное колебание, характерное для связи C-N кольца, находилось в районе 3032 см^{-1} , а деформационное колебание проявилось в районе 631 см^{-1} . Сильно асимметричное валентное колебание метильной группы (CH_3) в ароматическом кольце наблюдалось в районе $2940,63 \text{ см}^{-1}$. Метиленовые группы о-крезолило карбамата ($-\text{CH}_2$) имеют высокое асимметричное валентное колебание в области 2941 см^{-1} , симметричное валентное колебание в области 2858 см^{-1} , слабое резкое деформационное валентное колебание в области 1458 см^{-1} , в спектрах наблюдалось соответственно веретённый и маятниковые колебания в области 1338.30 и $723,89 \text{ см}^{-1}$. Высокие валентные колебания к аминогруппе (NH) наблюдались в области 3340 см^{-1} , а

валентные колебания, характерные для связи C-N, наблюдались в области 1181 см^{-1} . Интенсивные линии поглощения карбонильной группы (C=O) наблюдались в районе 1700 см^{-1} . Очень сильные валентные колебания эфирной связи (C-O-C) по интенсивности наблюдались в области поглощения 1256 см^{-1} .

Закключение. Поскольку сравнение спектров бис-карбамата МЭЭ-1 в базах электронных библиотек не дало желаемого результата, использовались различные пособия, предназначенные для интерпретации ИК-спектров, и по результатам спектра определялась колебания молекулы. Наличие спектров метильных, карбонильных, аминных и карбаматных групп в области $\text{N-(CO)-O-} 1224,87 \text{ см}^{-1}$ доказывает, что синтезированное вещество является N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамат].

СОДЕРЖАНИЕ

1. Химия и физикохимия композиционных материалов и нанокмпозитов

С.С. Негматов, Н.Б. Эрниеков, К.С. Негматова, М.Э. Икрамова, А.Н. Бозоров, Д.Н. Раупова. Извлечение драгоценных металлов (золота и серебра) в процессе цианирования и сорбции.....	3
Д.Й. Хакимова, С.С. Негматов, М.Э. Икрамова, Ж.Н. Негматов, Н.С. Абед. Извлечение марганцевого концентрата из руд месторождения Дауташи	5
З.З. Яхшиева, Р.М. Калонов, Х.Б. Жураев, Г.Б. Карабаева, Н.К. Мадусманова, З.Х. Асророва, А.А. Бакахонов, Ф.А. Умаров. Электрохимическое поведение ионов сурьмы(III) и висмута(III) при одновременном их присутствии в растворах.....	7
С.Я. Инагамов, У.А. Асроров, А.М. Эшматов, Г.И. Мухамедов, Ф.Ж. Абед. Структура и свойства поликомплексов и поликомплексных гелей на основе натрия-карбоксиметилцеллюлозы с различными поликатионами и их применение.....	9
F.F. Fayzullayeva, Q.T. Siddiqova, B.Yu. Ruziyeva, Sh.Sh. Daminova. Kamyob-yer elementlarining 2-aminobenzimidazol asosidagi kompleks birikmalar sintezi va tadqiqoti.....	15
M.E. Ziyadullayev, R.K. Karimov, Sh.Sh. Sagdullayev. 2-metil- 3(h)-6-aminoxinazolin-4-onni atsillash reaksiyalari.....	20
Э.Э. Машаев, А.Г. Махсумов, Б.Ф. Мухиддинов, О.О. Кодиров. Изучение ИК-спектров бис-карбамата МЭЭ-1.....	26
С.Э. Кораев, Р.И. Муяссарова, Ж.А. Рахмонов, Н.Т. Каттаев, Х.И. Акбаров. Структурно-капиллярная характеристика нового бентонит-кремнеземного композита.....	29
А.Ш. Хусенов, Д.С. Камалова, Б.У. Зокиров, Г. Рахманбердиев. Химическое включение аминогрупп в структуру производных инулина	32
М.Н. Мейлиева, З.А. Сманова, У.Г. Ахмаджонов, А.А. Эрматова. Сув ресурсларидан нефть махсулотларини колонка хроматография ёрдамида ажратиш олиш усулини баҳолаш.....	35
D.Q. Adinaeva, D.O'. Alimova, X.I. Akbarov, N.T. Kattayev. Divinilbenzol va akrilonitril asosida olingan sopolimerning turli xil aminlar bilan modifikatsiyalangan anionitlarning sorbsion xossalari.....	38
Ш.Т. Адизова, М.Р. Амонов, Н.Р. Очилова. Бентонитларни термик ва кимёвий фаоллаштириш орқали сорбцион хossalарини ўзгариши.....	40
Д.К. Назарбекова, А.А. Юсупов. Зависимости кинетики деформации расширения от физико-химических процессов, происходящих в тампонажных смесях.....	42
Н.Ш. Ражабалиев, Ж.А. Рахмонов, М.Ж. Нигматиллаева, Ю.Н. Ражабов, Э.Т. Бердимуродов, Х.И. Акбаров. Термодинамическое и кинетическое исследование антикоррозионных свойств дициандиамида.....	46

2. Физико-механика и трибология композиционных материалов

Д.Н. Ходжаева, С.С. Негматов, Н.С. Абед, К.С. Негматова, Д.К. Холмуродова, Ш.Н. Жалилов. Технология производства трудногорючих композиционных плитных материалов из стеблей хлопчатника и модифицированных мочевиноформальдегидных полимерных связующих с антипиренами.....	48
Д.Н. Ходжаева, С.С. Негматов, Н.С. Абед, К.С. Негматова, Ш.Н. Жалилов. Организация выпуска и проведение опытно-производственных испытаний и внедрение в ООО «Dinex» созданных трудногорючих композиционных древесно-пластиковых плитных материалов.....	50
С.Р. Отаджонов, Ж.А. Рахмонов, Х.И. Акбаров, Н.Т. Каттаев. Исследование термостойкости электропроводящих полимеров на основе поливинилимидазола.....	53
М.Р. Содикова, З.А. Таджиходжаев. Спектрометрическая идентификация сырьевых материалов для амфотерных ионитов на основе вторичного сырья	56
М.Р. Содикова, З.А. Таджиходжаев. Синтез, исследование и спектрометрическая идентификация амфотерных ионитов на основе вторичного сырья	58

3. Разработка и технология получения композиционных материалов

С.Р. Гелчинова, Г.Н. Шарифов, У.О. Худанов, И.С. Седалова. Свойства ПАВ и получения новых поверхностно-активных добавок на основе госсиполой смолы в качестве интенсификаторов помола цемента.....	63
Ф.М. Юсупов, Н. Ёдгаров, Д.З. Нуриддинова, Г.А. Байматова, Б.Ш. Хурсанов, Ю.Р. Яхшиева, Р. Ёлдашев. Разработка технологии ионитов для очистки промышленных сточных вод на основе местного сырья.....	68
С.С. Самадов, Б.Ф. Мухиддинов, С.С. Негматов, Д.Т. Ахтамов. Исследование термического отверждения эпоксидных полимеров.....	70
Т.О. Камолов, К.М. Рузикулов. Хомаки вельц оксиди фракцияси ўлчамларининг қиздирилиш таъсирида ўзгаришини ўрганиш	74