

O'zbekiston

Kompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал
Композиционные материалы

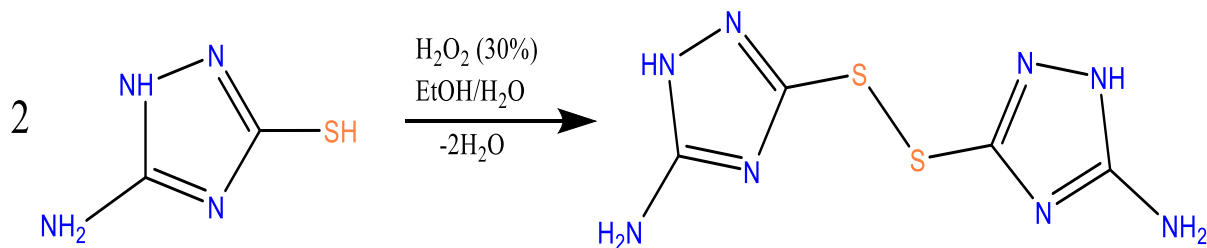
3,3'-DISULFANIDILBIS (1H-1,2,4-TRIAZOL-5-AMIN) KRISTAL TUZILISHI TADQIQOTI

G'.U. Xayrullayev, E.O. Ergashova, Sh.D. Karajanova, B.S. Torambetov, Sh.A. Kadirova

Kirish. 1,2,4-triazol hosilalari antibakterial, o'smaga qarshi, virusga qarshi, insektitsid, va begona o'tlarga qarshi preparatlar sifatida keng biologik faollikka ega. 1,2,4-triazoldan asosidagi birikmalar kimyoterapevtik ta'sirga ega, shu jumladan dori-darmonlarga chidamli patogenlarga qarshi potentsial antibakterial faollikka ega. 1,2,4-triazol hosilalari yangi dori vositalarini yaratish uchun yuqori salohiyatni namoyon etadi. 1,2,4-triazolni boshqa antibakterial farmakoforlar bilan

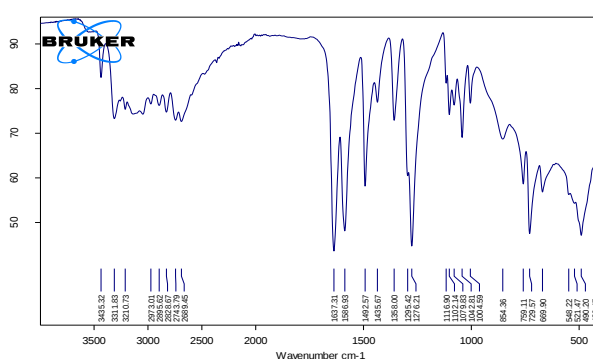
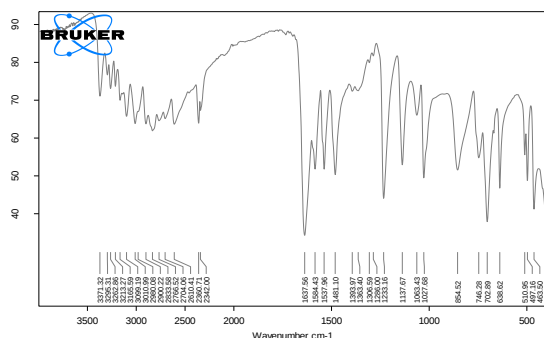
gibridlash orqali yanada samarali antibakterial preparatlarni olish mumkin. 3-amino-5-merkaptol-1,2,4-triazolning (AMT) o'zi ham yangi preparatlar olishda boshlang'ich birikma hisoblanadi [1-4].

Tajriba qismi. 2,32 g AMT 20 ml etil spirt va 10 ml distillangan suv aralashmasida eritildi. Eritmaga xona haroratida 30 % li 5 ml vodorod peroksid eritmasi qo'shib, 2 soat magnitli aralashtirgichda aralashtirib qo'yildi. Reaksiya unumi 90 % ni tashkil etdi. $T_s=250^{\circ}\text{C}$

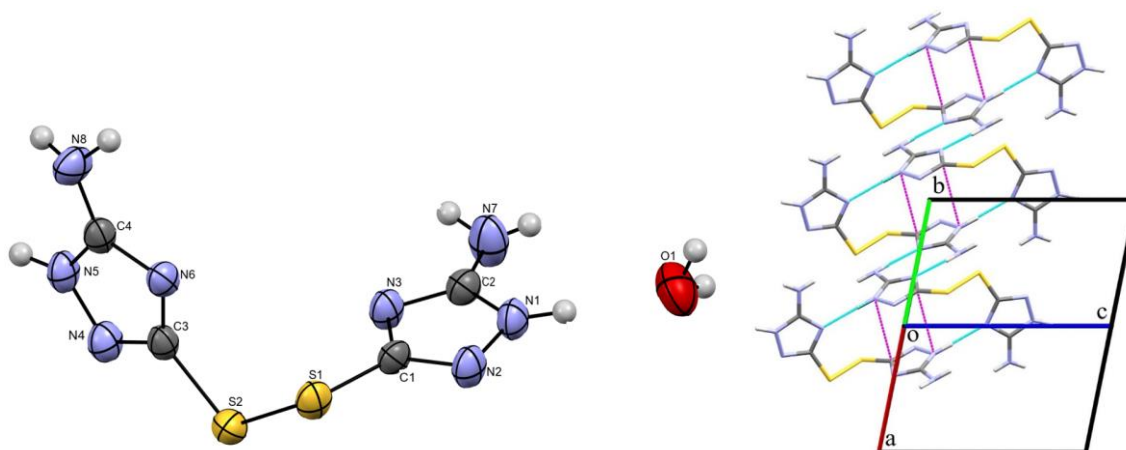


Boshlang'ich modda va mahsulotning reaksiya yo'nalishini aniqlash maqsadida IQ spektrlari o'rganildi. IQ spektrlarining asosiy farqi AMT dagi S-H guruhining yo'qolishi hisoblanadi. AMT da kuzatiladigan juda kuchsiz 2610.41 cm^{-1} sohadagi yutilish 3,3'-disulfanidilbis(1H-1,2,4-triazol-5-amin) (DTA) spektrida kuzatilmadi[5]. DTA spektrida eng asosiy farq S-S bog'ining 426 cm^{-1} sohadagi valent tebranishidir. DTA ning yana

bir o'ziga xos spektral xususiyati AMT da 3371 cm^{-1} sohada kuzatiladigan NH bog'i valent tebranishining yutilishi disulfidlanishda hosil bo'lgan yangi elektron zichlik hisobiga $3435,32\text{ cm}^{-1}$ sohaga ko'chganini ko'rishimiz mumkin. Shu bilan birgalikda AMT da $3295\text{--}3262\text{ cm}^{-1}$ sohada kuzatilgan NH_2 funksional guruhini DTA spektrida $3311\text{--}3210\text{ cm}^{-1}$ sohada namoyon bo'ladi (1-rasm).



1-rasm. AMT ning IQ spektri (a) DTA ning IQ spektri (b)



2-rasm. DTA monogidratining molekulyar tuzilishi. Elipsoidlik joylashuv darajasi 50%.

Kristallografik ma'lumotlari

kristal:	Sariq blok shakilli	$\theta_{\max}$, completeness:	34.6°, >99%
Hajmi:	0.21 × 0.08 × 0.04 mm	$N(hkl)_{\text{measured}}$, $N(hkl)_{\text{unique}}$, R_{int} :	6011, 3756, 0.052
To'liq uzunligi:	Mo $K\alpha$ radiation (0.71073 Å)	Criterion for I_{obs} , $N(hkl)_{\text{gt}}$:	$I_{\text{obs}} > 2\sigma(I_{\text{obs}})$, 2735
μ :	0.53 mm ⁻¹	$N(\text{param})_{\text{refined}}$:	161
Diffraktometer, scan mode:	Xcalibur, ω	Programmalar:	CrysAlis ^{PRO} [1], SHELX [2, 3], OLEX2 [4]

Kristall tuzilish tarkibida asimmetrik birligi bitta DTA va bitta suv molekulalarini o'z ichiga oladi (1-rasm). Ushbu birikmalardagi bog' uzunliklari va burchaklari kutilgan diapazonlarda bo'lishi aniqlandi. S1–S2 bog'ining uzunligi 2.0347(8) Å teng. Bu qiymat Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasidagi [8] 3,3'-disulfandiilbis (1H-1,2,4-triazol) hosilalari uchun o'rtacha qiymatga (1,945 (31) Å) nisbatan biroz cho'zilgan va [7] adabiyotdagi bog' uzunligi qiymatiga (2.039(1) Å) mos kelishi aniqlandi. S1–C1–N3 va S2–C3–N6 ning bog' burchaklari 120° normal qiymatiga solishtirganda biroz kattalashganligini (125,9(2)° va 127,6(2)°) ko'rishimiz mumkin.

Triazol halqalari bir-biriga nisbatan aylangan holatda joylashadi. C1–S1–S2–C3 torsion burilish burchagi -96,7(1)° teng, halqalar tekisliklari oprasidagi burchak 88,6 ° bo'lib orthogonal burchak qiymatiga yaqin. Bu tuzilishdagi C1–S1–S2–C3 torsion burchagi unga uxshash bo'lgan tuzilishdagidan [7] (-83.6(2)°) kattaroq. C2 atomidagi amino guruhi tekis, C4 atomidagi amino guruhi esa bir oz pyramidal holatda bo'lib, N8 atomidagi bog'lanish burchaklarining yig'indisi 351(7)° ga teng. Buning sababi N7 atomi vodorod bog'ida hosil bo'lishida faqat donor sifatida, N8 atomi N7–H7B...N8 molekulalararo vodorod bog'ida ($H\cdots A = 2,38(3)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 157(3)^\circ$), $x + 1$, y , $z + 1$) akseptor sifatida ishtirok etadi..

Kristal tuzilishdagi vodorod atomlaridan boshqa barcha atomlar uchun adabiyotda [30] taklif qilingan Van Der Vals radiuslari tayanch qiymatlari asosida hisobga olindi, molekulalararo ta'sirlar tahlili natijasida uch hil turdagi vodorod bog'lari mavjudligi aniqlandi: N–H...N, N–H...O va O–H...N.

Ushbu vodorod bog'lari simmetrik ekvivalentlari $-x+1$, $-y+1$ va $-x+1$, $-y+2$, $-z$ bo'lgan ikki turdagi dimerlarni hosil qiladi. N5–H5...N3 ($H\cdots A = 1.97(3)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 166(3)^\circ$)da vodorod bog'i triazol halqasining π – π birikishi hosil bo'lishida ishtirok etadi. Ikkinchi turdagi dimer N8–H8A...N6 ($H\cdots A = 2.11(3)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 172(3)^\circ$) vodorod bog'lari orqali hosil bo'ladi. Bu dimerlar asosiy kristallografik b yunalish (2-rasm. ko'k

rangda vodorod bog'lar, qizg'ish rangda triazol halqalar orasidagi qisqa bog'lanishlar) bo'ylab zanjir xosil qiladi.

Lp – π ta'sirlashish (C3...S2: planar shaklgacha bo'lgan masofa, D_{ap} , is -3.44(1) Å va markazdan proyeksiya nuqtasigacha masofa, D_{cp} , 0.741 Å; N1...S2: $D_{ap} = 3.03(1)\text{Å}$ va $D_{cp} = 2.334\text{Å}$) qo'shimcha tarizda x , $-y+1$, $-z$ and $-x+1$, $-y+1$, $-z+1$ simmetrik ekvivalentlik bilan sodir bo'ladi. N8–H8B...N2 yagona vodorod bog'i ($H\cdots A = 2.30(3)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 162(3)^\circ$, x , y , $z - 1$) kristallografik c yunalishida molekulalarni bog'laydi. Bir qancha vodorod bog'lari sababli, keltirilgan kristal tuzilishli modda erituvchi molekulalariga joylashish uchun imkon yaratuvchi bo'shliqlar hosil qiladi (bo'shliq hajmi yacheyka hajimini 46.7 Å³/9.5% ni tashkil qiladi). Suv molekulalari bo'sh fazoni butunligicha to'ldiradi va strukturani qushimcha 3 ta vodorod bog'lari bilan barqarorlashtiradi: N1–H1...O1 ($H\cdots A = 1.84(3)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 169(3)^\circ$, $-x+2$, $-y+2$, $-z+1$), O1–H1A...N4 ($H\cdots A = 1.96(4)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 172(4)^\circ$, $-x+1$, $-y+1$, $-z$) va O1–H1B...N6 ($H\cdots A = 2.39(4)\text{Å}$, $D-H\cdots A = 171(4)^\circ$, $-x+1$, $-y+2$, $-z$). Bu bog'da, N1–H1...O1 bog'i vodorod va kislorod atomlari orasidagi masofani yuqori darajada qisqarishi ularning umumiy Van Der Vals kuchlarining yig'indisiga qaraganda strukturadagi eng kuchli bog' hisoblanadi (qisqarish qiymati 0.77 Åga teng). Qolgan ikkita vodorod bog'lari dimerlarning zanjirida rasmda ko'rsatilgan kristallografik b yunalishda qo'shimcha bog'lanish hosil qiladi.

Xulosa. AMT tarkibidagi -SH guruhi H₂O₂ tasirida yumshoq sharoitda oksidlanib, yuqori unum bilan DTA hosil qildi. AMT va DTA IQ spektrlari tahlil qilinganda AMT spektridagi 2640,1 sm⁻¹ sohadagi -SH guruhga tegishli valent tebranishlar DTA spektrida kuzatilmagligi, 426 sm⁻¹ sohada S–S guruhiga tegishli yangi yutilish chizig'i hosil bo'lganini ko'rdik. DTA monokristallarini Rentgen tuzilish tahlili orqali o'rganganimizda DTA molekulasini bitta suv molekulasini bilan monogitrat holatida kristallanganligi aniqlandi. Suv molekulalari kristall tuzilishni 3 ta vodorod bog'lari (N1–H1...O1, O1–H1A...N4 va O1–H1B...N6) bilan barqarorlashtirishda ishtirok etishi aniqlandi.

С.С. Негматов, Ю.К. Рахимов, Д.Н. Раупова, Х.Ю. Рахимов, Д.Х. Мусабеков. Исследование физико-химических свойств разработанного композиционного деэмульгатора на основе местного и вторичного сырья для разрушения нефтеэмульсии	223
Д.Н. Ходжаева, С.С. Негматов, Н.С. Абед, К.С. Негматова, Д.К. Холмуродова, Ш.Н. Жалилов. Исследование закономерности формирования физико-механических свойств трудногорючих древесно-пластиковых композиционных плитных материалов, обработанных огнестойкими добавками-антипиренами	225
G'U. Xayrullayev, E.O. Ergashova, Sh.D. Karajanova, B.S. Torambetov, Sh.A. Kadirova. 3,3'-disulfanidilbis(1h-1,2,4-triazol-5-amin) kristal tuzilishi tadqiqoti	229
Д.Д. Билалова, С.М. Туробжонов, Х.И. Кадилов. Ингибиторы серии IngXO-DB и их антикоррозионные свойства	231
Б.Б. Полатов, В.М. Мелиев. Зависимости виды обработки поверхности на адгезионная прочность напыляемого покрытия.	234
Б.Б. Полатов, В.М. Мелиев. Исследование объёмного износа зубчатых валов редуктора, полученным газопламенном напылением с последующим оплавлением	235
Д.У. Алимова, Д.К. Адинаева, Х.И. Акбаров, Н.Т. Катгаев. Исследование пористости новых гранулированных полимеров методом низкотемпературной адсорбции азота	238
Ю.У. Марданова, Д.И. Камалова. Исследование колебательного спектра композиционного материала на основе полистирола и сажи (0,03; 0,04)	241