



Journal of Natural Science

№4
(2021)

<http://natscience.jspi.uz>



<u>ТАХРИР ХАЙЪАТИ</u>	<u>ТАХРИРИЯТ АЪЗОЛАРИ</u>
<p>Бош муҳаррир – У.О.Худанов т.ф.н., доц.</p> <p>Бош муҳаррир ёрдамчиси-Д.К.Мурадова, PhD, доц.</p> <p>Масъул котиб- Д.К.Мурадова</p>	<ol style="list-style-type: none">1. Худанов У – Табиий фанлар факултети декани, т.ф.н., доц.2. Шылова О.А.-д.х.н., профессор Института химии силикатов им. И.В. Гребенщикова Российской академии наук (ИХС РАН)3. Кодиров Т- к.ф.д, профессор4. Абдурахмонов Э – к.ф.д., профессор5. Султонов М-к.ф.д, доц6. Яхшиева З- к.ф.д, проф.в.б.7. Рахмонкулов У-б.ф.д., проф.8. Хакимов К –г.ф.н., доц.9. Азимова Д- б.ф.н.10. Мавлонов Х- б.ф.д., доц11. Юнусова Зебо – к.ф.н., доц.12. Гудалов М- фалсафа фанлари доктори (география фанлари бўйича) (PhD)13. Мухаммедов О- г.ф.н., доц14. Хамраева Н- фалсафа фанлари доктори (биология фанлари бўйича) (PhD)15. Рашидова К- фалсафа фанлари доктори (кимё бўйича) (PhD), доц16. Мурадова Д- фалсафа фанлари доктори (кимё фанлари бўйича) (PhD), доц
<p>Муассис-Жиззах давлат педагогика институти</p>	
<p>Журнал 4 марта чикарилади (хар чоракда)</p>	
<p>Журналда чоп этилган маълумотлар аниқлиги ва тўғрилиги учун муаллифлар масъул</p>	
<p>Журналдан кўчириб босилганда манбаа аниқ кўрсатилиши шарт</p>	

Жиззах давлат педагогика институти Табиий фанлар факултети

Табиий фанлар-Journal of Natural Science-электрон журнали

[/http://www.natscience.jspi.uz](http://www.natscience.jspi.uz)

**ИСЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ СИНТЕЗИРОВАННЫХ
АЛИФАТИЧЕСКИХ И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ**

¹К.Х.Рашидова, ²Ш.Рузимурадова, С.Абдуалиева

¹Джизакский государственный педагогический институт

Аннотация. В данной работе рассматриваются структура кванто механическим методом синтезированных веществ и исследование веществ методом ИК-спектроскопии.

Ключевые слова: коррозия металлов, защита от коррозии, ингибитор коррозии, процесс работы ингибиторов коррозии, ПМФК п(иперидин-1 илметилеиенфосфоновая кислота), НПМФ(3-нитрофенил пиперидин 1-ил метилеиенфосфоновая кислота).

Annotation. In this work, the structure of the synthesized substances by the quantum-mechanical method and the study of substances by the method of IR spectroscopy are analyzed.

Keywords: metal corrosion, corrosion protection, corrosion inhibitor, corrosion inhibitor operation process, PMPK (piperidin-1 ylmethylene phosphonic acid), NPMF (3-nitrophenyl piperidine 1-yl methylene phosphonic acid).

Квантовая химия является теоретической основой всех разделов химии и изучает строение и свойства химических соединений. Квантовая химия успешно решает многие научные задачи; квантовая теория строения молекул, квантовая теория химических связей и межмолекулярных взаимодействий исследуются механизмы протекания химических реакций.

Структура синтезированных веществ подтверждена методами ИК-спектроскопии и квантово-химическим методом. Параметры элементарной ячейки кристалла гидрохлорида пиперидина 1-илметилеиенфосфоновой кислоты определены и уточнены на дифрактометре CCD Xcalibur Ruby (Oxford Diffraction) с использованием CuK α - излучения, графитого монохроматора (T=288 K) [2]. Поправка на поглощение вводилась по программе SADABS .

В ИК-спектре аинофосфоновых кислот в имеющейся литературе полоса поглощения характерный для P=O наблюдается в области 1120-1144см⁻¹, в нашем случае полоса поглощения для данной группы наблюдался в области 1121см⁻¹. (рис.1)

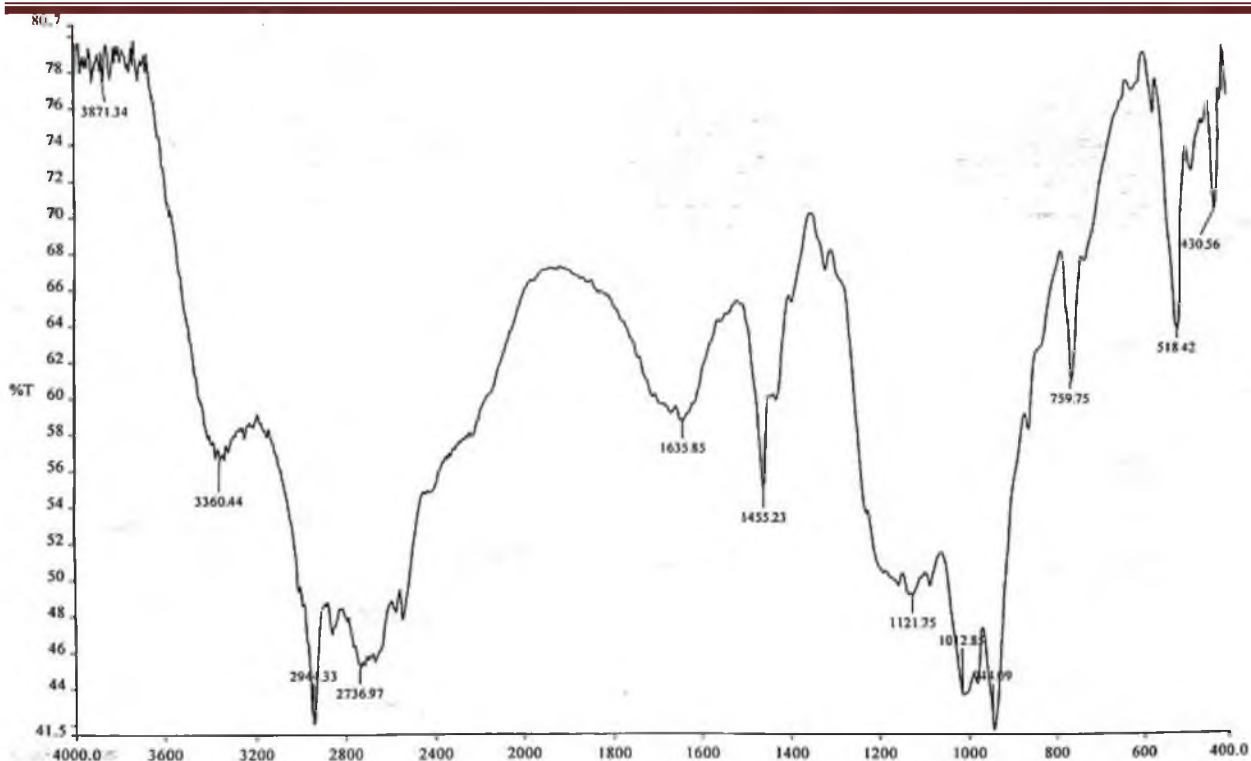


Рис.1. ИК-спектр пиперидин 1-илметиленфосфоновой кислоты

Результатом применения методов квантовой химии является информация о плотностях электронных состояний, распределении электронной плотности, потенциальных поверхностях реакций и барьерах перегруппировок, расчет различных спектроскопических величин, таких как колебательные спектры, электронные и рентгеновские спектры, оптические спектры, параметры спектров ядерного и электронного магнитного резонансов. В настоящее время квантовая химия является, пожалуй, самым дешевым, доступным и универсальным методом исследования атомной и электронной структур веществ.

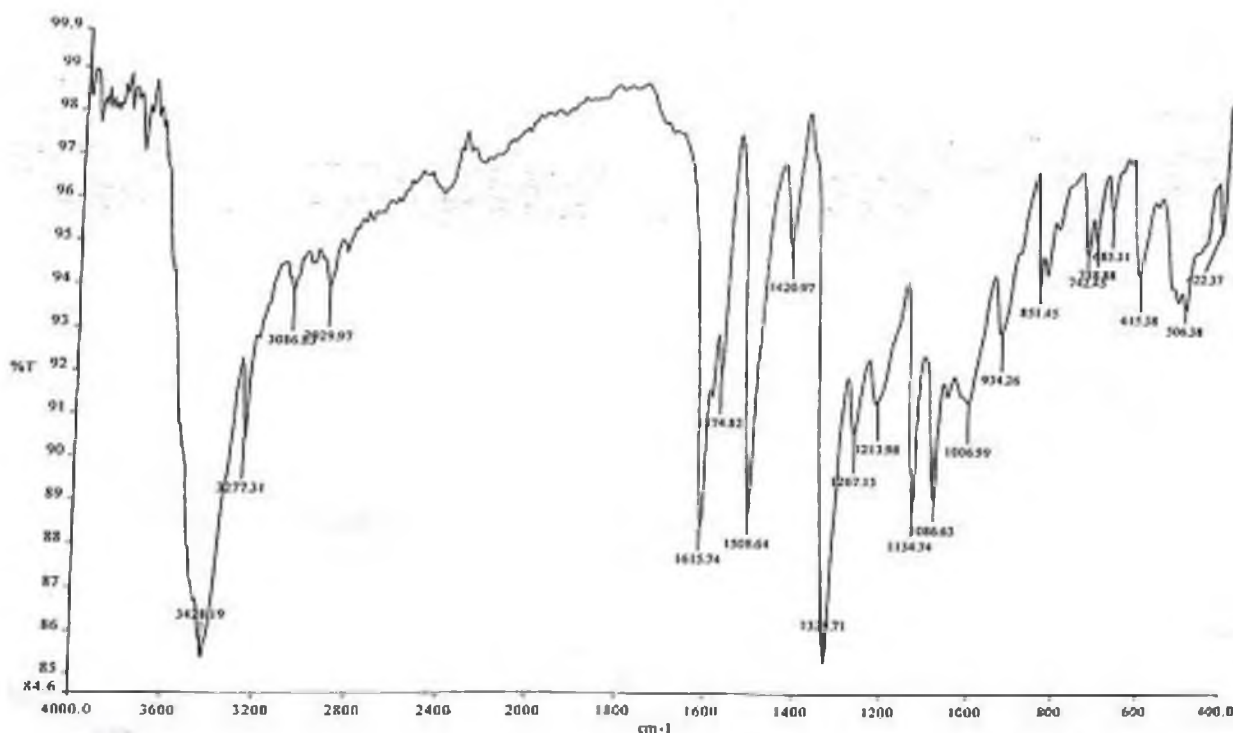


Рис.2. ИК-спектр 3-нитрофенил пиперидин -илметилеифосфоновой кислоты

В ИК-спектре аминофосфоновых кислот в имеющейся литературе полоса поглощения характерный для C=N наблюдается в области $1420\text{--}1422\text{cm}^{-1}$, в нашем случае полоса поглощения для данной группы наблюдался в области 1420cm^{-1} . (рис.2)

На сегодняшний день в мире функционирует достаточно много современных вычислительных комплексов, реализующих методы квантовой химии и молекулярной динамики, однако, для широкого круга пользователей наиболее доступно использование этих методов обеспечивается известной квантово-химической и молекулярно-динамической программой HyperChem. Результаты молекулярно-динамического моделирования, представленные в данной работе, получены с использованием версии HyperChem 7.0 в полуэмпирическом приближении PM-3 [3].

Чем ниже энергия НВМО молекул органических веществ, тем легче они принимают электроны d-орбиталей металла и тем выше их ингибиторная способность. Другими важными рассчитываемыми электронными характеристиками являются эффективные заряды на атомах по Малликену (CHARGES) и энергия системы. Рассчитанные энергетические параметры, позволяющие судить об устойчивости молекулы, приведены в таблице 1.

Рассчитанные энергетические параметры молекул по методу PM-3

Соединение	E общ., ккал/моль	Эффективные заряды на атомах, эВ		
		qO, (P=O)	qN	qO, (O-H), (qH)
Пропиламинометиле́нфосфо́ная кислота	-68898.69	-0,808 -0,729	-0,815	-0,603 (+0,217) -0,589(+0,216) -0,568(+0,226) -0,595(+0,240)
бутиламинометиле́н- фосфо́ной кислоты.	-60077.37	-0,658	0,085	-0,742(+0,193) 0,753(+0,192) -0,758(+0,198) -0,745(+0,192)

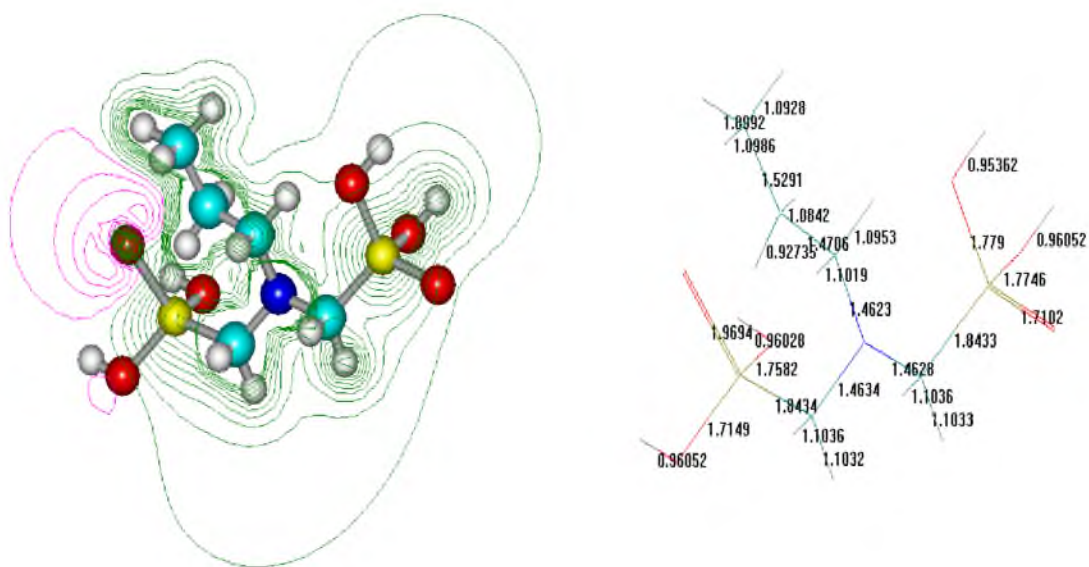


Рис.3. Длина связи пропиламинометиле́нфосфо́ной кислоты

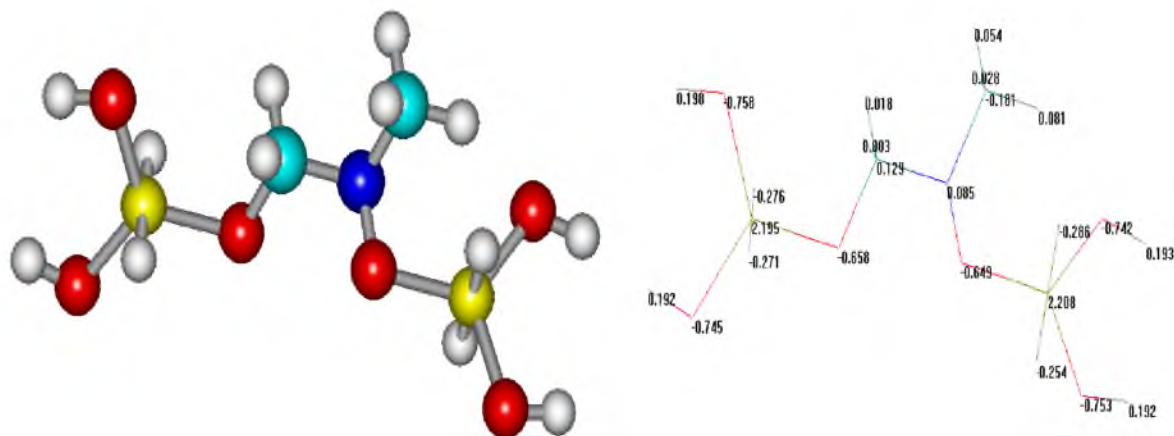


Рис.4. Распределение зарядов в молекуле бутиламинометилен-фосфоновой кислоты

Результаты квантово-химических расчетов по исследованию электронной структуры синтезированных соединений были подтверждены методом рентгеноструктурного анализа.

В табл.2 приведены основные параметры рентгеноструктурных экспериментов и расчетов уточнения структуры гидрохлорида пиперидин 1-ил метилефосфоновой кислоты [4]. Атомы водорода локализованы геометрически и уточнены изотропно. Факторы достоверности: $R_1 = 0.0509$ и $wR_2 = 0.1280$ для отражений с $I > 2\sigma(I)$. Остаточная электронная плотность $\Delta\rho_{\max}/\Delta\rho_{\min} = 0.529/-0.287$ $e/\text{\AA}^{-3}$. Построение молекулярной графики осуществляли программой XP в пакете программ SHELXTL-Plus [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Сикачина А.А. Квантово-химическое моделирование адсорбции органических соединений на стали углеродистой конструкционной. // Интернет-журнал «Науковедение», 2015. -Т.7. -№4.-С.1-9.
2. Сикачина А.А. Квантово-химическое моделирование реакции различных форм 2-аминопропановой кислоты с атомами железа. // Вестник Кузбасского гос. тех. универ.- 2015.-№6.-С.102-106.
3. Х.И.Акбаров, К.Х.Рашидова, Разработка двухкомпонентных ингибиторов коррозии на основе полиэлектролита и гетероциклических соединений, *Universum, химия и биология*, № 11 (65), 2019г.

4. Pech-Canul M.A., Bartolo-Perez P. Inhibition effects of N-phosphono-methyl-glycine/Zn²⁺ mixtures on corrosion of steel in neutral chloride solutions. // Surface and Coatings Technology.- 2004.- V.184.- № 2-3.- P.133-140.
5. Sheldrick, G.M. A Short History of SHELX. Acta Crystallographica.- 2018.- С.64-112.
6. Rashidova, K. (2020). УДК 541: 543: 544: 546: 547: ЗАЩИТА МЕТАЛЛОВ ОТ КОРРОЗИИ ИНГИБИТОРОМ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ. Архив Научных Публикаций JSPI.
7. Rashidova, K. (2020). УДК: 541.128. 1 КОРРОЗИЯ МЕТАЛЛОВ И ЗАЩИТА ОТ КОРРОЗИИ С ПОМОЩЬЮ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ИНГИБИТОРОВ. Архив Научных Публикаций JSPI.
8. Rashidova, K. (2020). ISSN 2575-7999 АНТИКОРРОЗИОННЫХ с во й ств ра зра б о т а н н ы х ИНГИБИТОРОВ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИМИ МЕТОДАМИ И ГРАВИМЕТРИЧЕСКИ ИССЛЕДОВАНИ. Архив Научных Публикаций JSPI.
9. Rashidova, K. (2020). ISBN 978-4-9783419-8-3 ЭФФЕКТИВНОСТИ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ИНГИБИТОРОВ. Архив Научных Публикаций JSPI.
10. Rashidova, K. (2020). ISSN 2072-0297 Селективные полупроводниковые сенсоры для определения содержания фтористого водорода. Архив Научных Публикаций JSPI.
11. Rashidova, K. (2020). ISSN: 1475-7192 Quantitative Evaluation of the Efficiency of Two Component Inhibitors based on Polyelectrolytes. Архив Научных Публикаций JSPI, 1-6.
12. Rashidova, K. (2020). ISSN: 2311-5459 КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АЛКИЛЕНФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ. Архив Научных Публикаций JSPI.
13. Rashidova, K. (2020). Ўзбекистон Миллий университети СИНТЕЗ И УСТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУР ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ АМИНОМЕТИЛЕНФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ. Архив Научных Публикаций JSPI.
14. Rashidova, K. (2020). ISSN 2091-5446 Электрохимические свойства алкиламинометиленфосфоновых ингибиторов. Архив Научных Публикаций JSPI.
15. Rashidova, K. (2020). УДК 574.372. 850 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ РАЗРАБОТАННЫХ МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ

ИНГИБИТОРОВ В СЕТЯХ ВОДОСНАБЖЕНИЯ И ЦИРКУЛИРУЮЩИХ ВОДАХ. Архив Научных Публикаций JSPI.

16. Rashidova, K. (2020). ISBN 978-4-9783419-8-3 ИССЛЕДОВАНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТИ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ИНГИБИТОРОВ. Архив Научных Публикаций JSPI.

17. Rashidova, K. (2020). МИРЗО УЛУГБЕК НОМИДАГИ УЗБЕКИСТ КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОДНЫХ ПРОЦЕССОВ В ПРИСУТСТВИИ АЛИФАТИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДНЫХ АМИНОМЕТИЛЕНФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ. Архив Научных Публикаций JSPI.

18. Rashidova, K. (2020). : <http://7universum.com/ru/natur> РАЗРАБОТКА ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТА И ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ. Архив Научных Публикаций JSPI.

19. Rashidova, K. (2020). ISSN раками: 2181-6131 КИМЁ ФАНИНИ УКИТИЩДА КУЛЛАНИЛАДИГАН ИНТЕРФАОЛ УСЛУБЛАР. Архив Научных Публикаций JSPI.

20. Рашидова, К. Х., Акбарова, О. Ж., Бердиёрова, А. И., & Акбаров, Х. И. (2020). ЭФФЕКТИВНОСТЬ ДВУХКОМПОНЕНТНЫХ ИНГИБИТОРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ. In *НОВЫЕ ВЫЗОВЫ НОВОЙ НАУКИ: ОПЫТ ТЕОРЕТИЧЕСКОГО И ЭМПИРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА* (pp. 119-122).

21. Рашидова, К. Х., & Акбаров, Х. И. (2020). КОЛИЧЕСТВЕННАЯ ОЦЕНКА ЭФФЕКТИВНОСТИ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АЛКИЛЕНФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ. *Universum: химия и биология*, (11-2 (77)).

22. Рашидова, К. (2021). КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ СИНТЕЗИРОВАННЫХ СОЕДИНЕНИЙ. *Журнал естественных наук*, 1(2). извлечено от <https://natscience.jspi.uz/index.php/natscience/article/view/1330>

23. Рашидова, К. (2020). СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ. *Журнал естественных наук*, 1(1). извлечено от <https://natscience.jspi.uz/index.php/natscience/article/view/741>