

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI



URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI
TABLATSHUNOSLIK VA GEOGRAFIYA FAKULTETI

«UMUMIY KIMYO» KAFEDRASI

TANGRIYEVA XURSHIDA ERKINBAYEVNA

5140500 KIMYO ta'lim yo'nalishi bo'yicha
bakalavr darajasini olish uchun

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

MAVZU: 6-XLORSULFONILBENZOTIAZOLIN-2-ONLARNI
GIDROLIZLASH VA ALKOGOLLASH

Ilmiy rahbar:

k.f.n. Taxirov Y.R.

Urganch 2015 yil



O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI
URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI

TABIATSHUNOSLIK VA GEOGRAFIYA FAKULTETI
«UMUMIY KIMYO» KAFEDRASI

Mavzu: 6-XLORSULFONILBENZOTIAZOLIN-2-ONLARNI
GIDROLIZLASH VA ALKOGOLLASH

Bajaruvchi:

Tangriyeva X. E.

Rahbar:

k.f.n. Tahirov Y.R.

Urganch shahri

2015-yil

URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI
TABIATSHUNOSLIK VA GEOGRAFIYA FAKULTETI

«UMUMIY KIMYO» KAFEDRASI

BITIRUV MALAKAVIY ISHNI BAJARISH BO‘YICHA

TOPSHIRIQLAR REJASI:

1. Talaba Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna Universitet rektorining «№ 217-T» §3- sonli 20.12.2014 dagi buyrug‘i bilan bitiruv malakaviy ish bajarish uchun «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash» mavzusi tasdiqlangan.
2. Kafedra majlisining qaroriga binoan k.f.n. Tahirov.Y.R. bitiruv malakaviy ishini bajarishga rahbar qilib tayinlangan.
3. Bitiruv malakaviy ishining tarkibiy tuzilmasi: kirish, adabiyotlar sharhi, olingan natijalar muhokamasi, tajriba qismi, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yhati va ilovalardan iborat.
4. Bitiruv malakaviy ish uchun ma’lumotlar ilmiy maqolalardan, adabiyotlardan va internetdan olindi.
5. Bitiruv malakaviy ishga - kvant kimyoviy xisoblash natijalari ilova qilindi.

Bitiruv malakaviy ishni bajarish jadvali

<i>№</i>	<i>Bajarilgan ishning mazmuni</i>	<i>Bajarish muddati</i>
1	Kirish.	14.01.2015
2	Adabiyotlar sharhi.	16.02.2015
3	Eksperimental qism.	15.03.2015
4	Olingan natijalar asosida qilingan xulosalar	22.04.2015
5	Bitiruv malakaviy ishini elektron shaklini yaratish	20.05.2015
6	Me'yoriy hujjatlarni rasmiylashtirish	28.05.2015

Bitiruv malakaviy ish rahbari: k.f.n. Tahirov.Y.R. _____

Bajaruvchi talaba: Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna _____

2014 yil «14» noyabr

Topshiriqlar rejasi va jadvali kafedra majlisida 14 noyabr 2014 yil tasdiqlandi.

(«6» - sonli bayonnoma)

Kafedra mudiri: k.f.n. dots. Hasanov.Sh _____

BITIRUV MALAKAVIY ISH BO'YICHA RAHBARNING MULOHAZALARI

Talaba: Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna

Bitiruv malakaviy ish mavzusi «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash»

Bitiruv malakaviy ish xajmi: 49 bet.

Tushuntirish qismi: 47 bet

Ilovalar soni: - 2

Mavzuning dolzarbligi: Hozirgi kunda sintez qilinayotgan biologik faol moddalarning ko'pchilik qismini organik birikmalar, shu jumladan, geterohalqali birikmalar tashkil qilmoqda. Geterohalqali birikmalar orasidan muhim ahamiyat kasb qiladigan moddalar izlash va ularni sintez qilish yo'llarini topish, shuningdek, geterohalqali birikmalar olishning iqtisodiy jihatdan qulay bo'lgan manbalarini topish kimyogarlarning oldida turgan dolzarb vazifalardan biridir.

Hozirgi kungacha nukleofil almashinish reaksiyalari aromatik birikmalar misolida keng o'rganilgan. Aromatik halqa bilan tutashgan besh azoli geterohalqali birikmalar - 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlar uchun nukleofil almashinish reaksiyalari aksincha, umuman o'rganilmagan. Shuning uchun 6-xlorsulfonil-benzotiazolin-2-onlarning nukleofil agentlar bilan almashinish reaksiyalarini o'rganish dolzarb vazifalaridan biri hisoblanadi.

Bitiruvchi umumkasbiy va maxsus tayyorgarligining tavsifi:
X.E. Tangriyeva kimyo yo'nalishi bo'yicha fanlarni mukammal o'zlashtirdi.

Bitiruvchi talabaning mustaqil ishni bajarish layoqati, mahsus adabiyotlardan foydalanish qobiliyati va shaxsiy xususiyatlari

X.E. Tangriyeva o'qish davomida olgan bilimlari asosida oldiga qo'yilgan kimyoviy muammolarni mustaqil yecha oladi. Internetdan foydalana oladi. X.E. Tangriyeva qobiliyati, muomilasi, bilimga tirishqoqliligi bilan kursdoshlari orasida havas qilgudek o'ziga xos shaxsiy xususiyatlarga ega.

Bitiruv malakaviy ishning ijobiy tomonlari Ilk bor 6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol va suv bilan alkogollash, gidrolizlash reaksiyalari amalga oshirilgan. Tadqiqotlar natijasida benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar va ularning efirlarini sintez qilish usullari ko'rsatilgan.

Sintez qilingan mahsulotlarning tuzilishi HyperChem va ChemBio3D Ultra 11.0 programmalari yordamida kvant-kimyoviy hisoblashlar qilingan va ularning fazoviy tuzilishi, elektron zichligi, molekulalarning IQ-spektrlari topilgan.

Bitiruv malakaviy ishga qo'yilgan talablarning bajarilishi darajasi:
ish bitiruv malakaviy ishga qo'yilgan talablar asosida bajarilgan.

Bitiruv malakaviy ish rahbari:

k.f.n. Tahirov.Y.R.

2015 yil «06» Iyun

Urganch Davlat Universiteti Tabiatshunoslik va geografiya fakulteti
kimyo ta'lim yo'nalishi talabasi Tangriyeva Xurshida Erkinboyevnaning

Bitiruv malakaviy ishiga

T A Q R I Z

Malakaviy ish mavzusi «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash»

Malakaviy ishning hajmi 49 bet

a) tushuntirish qismi varaqlar soni: 47 sahifadan iborat

b) ilovalar soni: - 2

Bitiruv malakaviy ish mavzusining dolzarbligi va berilgan topshiriqqa mosligi Ushbu bitiruv malakaviy ishi 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash reaksiyalarini o'rganish, reaksiyalarning borish yo'nalishini va sharoitlarini aniqlashga bag'ishlangan.

Ish «Umumiy kimyo» kafedrasida tasdiqlangan reja asosida bajarilgan.

Bitiruv malakaviy ishning «Kirish» qismida va ilova qilingan materiallarning tarkibi va bajarilish sifati: Bitiruv ishining kirish qismida mavzuning dolzarbligi, ishning maqsadi, ishni bajarish uchun oldiga qo'yilgan vazifalar aniq qilib qo'yilgan. Ishni bajarishda olingan natijalar, qilingan xulosalar talaba tomonidan oldiga qo'yilgan maqsad va vazifalarni to'liq bajarilganligini tasdiqlaydi.

Malakaviy ishda ilmiy manbalar. Fan-texnika innovatsiya yutuqlari natijalaridan foydalanilganligi: Tadqiqotchi bitiruv malakaviy ishini bajarishda 30 ta ilmiy adabiyotlar, mavzuga oid ilmiy maqolalardan foydalangan.

Bitiruv malakaviy ishning ilmiy-uslubiy va texnik iqtisodiy jihatdan asoslanganligi: Ishda foydalanilgan adabiyotlardan ma'lum bo'ldiki qator olimlar tomonida nafaqat chet ellarda balki O'zbekistonda ham yirik olimlar tomonidan benzazolin-2-onlar xosilalarini sintez qilish va ular orasida biologik faol moddalar izlash ustida ilmiy ishlar olib borilmoqda.

Bitiruv malakaviy ishning ijobiy tomonlari. Berilgan tavsiyalarni ishlab chiqarishda va ta'lim-tarbiya jarayonida foydalanish imkoniyatlari: Bitiruv malakaviy ishida Ilk bor 6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol va suv bilan alkogollash, gidrolizlash reaksiyalari amalga oshirilgan. Tadqiqotlar natijasida benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar va ularning efirlarini sintez qilish usullari ko'rsatilgan.

Sintez qilingan mahsulotlarning tuzilishi HyperChem va ChemBio3D Ultra 11.0 programmalarida yordamida kvant-kimyoviy hisoblashlar qilingan va ularning fazoviy tuzilishi, elektron zichligi, molekulalarning IQ-spektrlari topilgan.

Bitiruv malakaviy ishidagi kamchiliklar: Ishda ayrim orfografik va imloviy kamchiliklar mavjud.

Tangriyeva Xurshida Erkinboyevnaning bitiruv malakaviy ishi hajmi, ilmiy yangiligi, amaliy ahamiyati jihatidan, bitiruv malakaviy ishlariga qo'yiladigan talablarga javob beradi va u muvaffaqiyatli himoya qilinishiga ishonaman.

Taqrizchi: UrDU qoshidagi 3-son akademik

litseyning kimyo fani o'qituvchisi:

X.Abdullayeva

2015 yil «10» iyun

Bitiruv malakaviy ishni DAK tomonidan baholash mezonlari

№	Baholanadigan bo'limlar	Eng yuqori ko'rsatkich ball hisobida
1	BMI ning "Kirish" qismida mavzuning dolzarbligi, maqsad va vazifalarning yoritilishi	10
2	Ishning asosiy (tushuntirish) qismining Nizom talablariga mos xolda bajarilishi	35
3	"Xulosa" qismida ilmiy-nazariy va amaliy tavsiyalarning mavjudligi	10
4	Ishni bajarishda mavzuga oid manbaalarning tahlili. Chet el adabiyotlaridan va internet materiallaridan foydalanish	15
5	Ishdagi ilovalarning mavzu mazmuniga mosligi Ishni bajarishda grammatika qoidalariga amal qilinganligi	10
6	Himoyaga ish mazmunini bayon qila bilganligi. Savollarga berilgan javoblar darajasi	15
7	BMI mavzusi bo'yicha ilmiy-nazariy seminarlar va konferentsiyalarda ma'ruza (axborot) bilan ishtiroki, maqola (tezis) nashr qilinganligi	5

Eslatma: har bir kafedraning xususiyatlari e'tiborga olingan holda baholash mezonlariga o'zgartirishlar kiritish maqsadga muvofiq.

Urganch Davlat Universiteti Tabiatshunoslik va geografiya fakulteti kimyo yo'nalishining bitiruvchisi Tangriyeva Xurshida Erkinboyevnaning «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash» mavzusida bajarilgan bitiruv malakaviy ishi DAK ning «____» « iyun» 2015 yil dagi majlisida himoya qilinadi.

Davlat attestatsiya komissiyasi bitiruv malakaviy ishga quyidagi o'zlashtirish ko'rsatkichlarini belgilaydi.

№	Baholanadigan bo'limlar	Eng yuqori ko'rsatkich ball hisobida	Komissiya belgilagan foiz
1	BMI ning “Kirish” qismida mavzuning dolzarbligi, maqsad va vazifalarning yoritilishi	10	
2	Ishning asosiy (tushuntirish) qismining Nizom talablariga mos xolda bajarilishi	35	
3	“Xulosa” qismida ilmiy-nazariy va amaliy tavsiyalarning mavjudligi	10	
4	Ishni bajarishda mavzuga oid manbaalarning tahlili. Chet el adabiyotlaridan va internet materiallaridan foydalanish	15	
5	Ishdagi ilovalarning mavzu mazmuniga mosligi Ishni bajarishda grammatika qoidalariga amal qilinganligi	10	
6	Himoyaga ish mazmunini bayon qila bilganligi. Savollarga berilgan javoblar darajasi	15	
7	BMI mavzusi bo'yicha ilmiy-nazariy seminarlar va konferentsiyalarda ma'ruza (axborot) bilan ishtiroki, maqola (tezis) nashr qilinganligi	5	
Jami:			

Davlat attestatsiya komissiyasi majlisining qarori:

1. Tangriyeva Xurshida Erkinboyevnaning «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash» mavzusida bajargan bitiruv malakaviy ish uchun _____ lik o'zlashtirish ko'rsatkichi belgilansin va «_____» deb baholansin.

2. _____

DAK raisi: dots., k.f.n. Qulimov A.K. _____

A`zolari: dots., p.f.n. Eshchanov E.U. _____

_____ dots., k.f.n. Hasanov Sh.B. _____

_____ dots., k.f.n. Azizjanov X.M. _____

_____ k.f.n. Baltayeva M.M. _____

_____ k.f.n. Abduraxmanova T.R. _____

_____ Masharipov A. _____

2015 yil «_____» _____

Urganch Davlat Universiteti Tabiatshunoslik va geografiya fakulteti

Umumiy kimyo kafedrası

Bitiruv malakaviy ish _____sonli tartib raqam
bilan qayd qilindi.

Bitiruv malakaviy ishni bajaruvchining ismi-sharifi

Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna

Bitiruv malakaviy ishning mavzusi

«6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash»

Ilmiy rahbar (maslahatchi) ning ismi-sharifi

Tahirov Yo'ldosh Rajabovich

Bitiruv malakaviy ish kafedraning 2015 yil «_____»_____da
o'tkazilgan majlisi qaroriga muvofiq DAK majlisida himoya qilindi.

Bitiruv malakaviy ishga taqrizchi qilib UrDU qoshidagi 3-akademik
litsey kimyo fani o'qituvchisi X.Abdullayeva tayinlandi.

Kafedra mudiri: _____ k.f.n. dots. Hasanov SH.B.

Kafedraning bitiruv malakaviy ishni DAK majlisida himoya qilish
bo'yicha tavsiyasiga roziman.

Fakultet dekani: _____ k.f.n. dots. Polvonov X.Q.

Urganch Davlat Universiteti Tabiatshunoslik va geografiya fakulteti
“Umumiy kimyo” kafedrası Kimyo yo’nalishi 5140500 - ta’lim yo’nalishi
bo’yicha bakalavr darajasini olish uchun

«Tasdiqlayman» fakultet dekani
_____ dots. Polvonov X.Q.

“ ____ ” _____ 2015 y.

BITIRUV MALAKAVIY ISH BO’YICHA TOPSHIRIQ

Talaba Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna

1. **Ishning mavzusi:** «6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni gidrolizlash va alkogollash».

«20» dekabr 2014 yil universitet rektorining № 217-T §3-sonli buyrug’i bilan tasdiqlangan.

2. **Ishni topshirish muddati:** “10” iyun 2015 y.

3. **Mavzu bo’yicha dastlabki ma’lumotlar beruvchi adabiyotlar ro’yxati**

1. Марч Дж. Органическая химия. В 4-х т. Пер.с англ. -М.: Мир. 1987. Т.2. С.340-344.
2. Ҳ.С.Тожимуҳамедов, Ҳ.М.Шахидоятов. Органик бирикмаларнинг тузилиши ва реакцион қобилияти. II қисм. Органик реакцияларнинг механизмлари. -Т.: Абу Али ибн Сино. 2001. –с. 119-125.
3. Ахмедов Қ.Н., Йўлдошев Х.Й. Органик кимё усуллари. -Ташкент: Университет. 1993. I. С.155.
4. Нейланд О.Я. Органическая химия. -М.: Высшая школа. 1990. С.353-367.
5. А.Е.Агрономов. Избранные главы органической химии. -М.: Химия. 1990. С.364-372.
6. П.Сайкс. Механизмы реакций в органической химии. Пер. с англ. под ред. проф. Варшавского Я.М. -М.: Химия. 1977.-С.146.

4. **Ishning maqsadi:** . 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni sintezini amalga oshirish va ularning gidrolizlash hamda alkogollash reaksiyalarini tadqiq qilish, reaksiya yo'nalishi va borishini aniqlash.

5. **Chizma materiallar ro'yxati:**

6. **Maslahatchilar:** k.f.n. dots. Sh. Hasanov

Bo'limlar	Maslahatchi F.I.Sh.	Imzo, sana	
		Topshiriq berdi	Topshiriq qabul qildi
Kirish	Y.Tahirov	01.12.2014	10. 01. 2015
Adabiyotlar sharhi	Y.Tahirov	20.12.2014	11. 02. 2015
Eksperimental qism	Y.Tahirov	11.01.2015	19. 03. 2015
Olingan natijalar muxokamasi	Y.Tahirov Sh. Hasanov	23.03.2015	22. 04. 2015
Hulosalar	Y.Tahirov	23.04.2015	28. 04. 2015

Ishga taqriz yozuvchi: UrDU qoshidagi 3-akademik litsey kimyo fani o'qituvchisi X.Abdullayeva.

7. **Ilmiy rahbar:** k.f.n. Tahirov Yo'ldosh Rajabovich _____

BMI bajaruvchi talaba: Tangriyeva Xurshida Erkinboyevna _____

Kafedra mudiri: k.f.n. dots. Hasanov Shodlik Bekpo'latovich _____

**O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI**



**URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI
TABIATSHUNOSLIK VA GEOGRAFIYA FAKULTETI
«UMUMIY KIMYO» KAFEDRASI**

TANGRIYEVA XURSHIDA ERKINBAYEVNA

**5140500 KIMYO ta'lim yo'nalishi bo'yicha
bakalavr darajasini olish uchun**

BITIRUV MALAKAVIY ISHI

**Mavzu: 6-XLORSULFONILBENZOTIAZOLIN-2-ONLARNI
GIDROLIZLASH VA ALKOGOLLASH**

Ilmiy rahbar:

k.f.n. Taxiroy Y.R.

Urganch 2015 yil

MUNDARIJA

	KIRISH	3
1-BOB	AROMATIK VA GETEROSIKLIK BIRIKMALARNI SULFOLASH VA XLORSULFONILLASH REAKSIYALARI	5
1.1.	Sulfolash va xlorsulfonillash reaksiyalarining mexanizmlari...	5
1.2.	Aromatik va geterosiklik birikmalarni sulfolash va xlorsulfonillash reaksiyalari	12
1.3.	Sulfobirikmalarning kimyoviy o'zgarishlari.	21
1.4.	Aromatik va geterohalqali birikmalarning nukleofil almashinish reaksiyalari.	25
2-BOB	6-XLORSULFONILBENZOTIAZOLIN-2-ONLARNING SUV VA ETANOL BILAN O'ZARO TA'SIRI	31
2.1.	Kaptaksni ishqoriy sharoitda kaliy permanganat bilan oksidlash	31
2.2.	Benzotiazolin-2-onlarning xlorsulfon kislotasi bilan o'zaro ta'siri	32
2.3.	6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning gidrolizlanishi	34
2.4.	6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol bilan o'zaro ta'siri	37
3-BOB	TAJRIBA QISMI	41
3.1.	Dastlabki moddalarning sintezi	41
3.2.	6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning olinishi	42
3.3.	6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning suv bilan reaksiyalari .	43
3.4.	6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol bilan reaksiyalari	43
	XULOSALAR	45
	FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI	46
	ILOVALAR	49

KIRISH

Mavzuning dolzarbligi. Hozirgi kunda sintez qilinayotgan biologik faol moddalarning ko'pchilik qismini organik birikmalar, shu jumladan, geterohalqali birikmalar tashkil qilmoqda. Geterohalqali birikmalar orasidan muhim ahamiyat kasb qiladigan moddalar izlash va ularni sintez qilish yo'llarini topish, shuningdek, geterohalqali birikmalar olishning iqtisodiy jihatdan qulay bo'lgan manbalarini topish kimyogarlarning oldida turgan dolzarb vazifalardan biridir.

Geterohalqali birikmalar qatoridagi nukleofil almashinish reaksiyalarini amalga oshirish ushbu vazifalarni bajarishning asosiy usullaridan biri hisoblanadi. Nukleofil almashinish reaksiyalari deganda manfiy zaryadlangan ion hujumi bilan boradigan reaksiyalar tushuniladi. Nukleofil almashinish reaksiyalariga alkogollash, aminlash, gidrolizlash kabi reaksiyalarni misol qilib olsak bo'ladi.

Hozirgi kungacha nukleofil almashinish reaksiyalari aromatik birikmalar misolida keng o'rganilgan. Aromatik halqa bilan tutashgan besh azoli geterohalqali birikmalar - 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlar uchun nukleofil almashinish reaksiyalari aksincha, umuman o'rganilmagan. Shuning uchun 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning nukleofil agentlar bilan almashinish reaksiyalarini o'rganish dolzarb vazifalaridan biri hisoblanadi.

Benzotiazolin-2-on va uning hosilalari tadqiqotlar olib borish uchun istiqboli bor geterohalqali birikmalar bo'lib, ular orasidan elektron sanoati, qishloq xo'jaligida qo'llaniladigan moddalar topilgan. Shuning uchun bu sinf birikmalarini o'rganish alohida qiziqish uyg'otdi.

Ishning maqsadi. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni sintezini amalga oshirish va ularning gidrolizlash hamda alkogollash reaksiyalarini tadqiq qilish, reaksiya yo'nalishi va borishini aniqlash.

Ishning vazifalari:

-benzotiazolin-2-on va 3-metilbenzotiazolin-2-onlar sintezini amalga oshirish;

-benzotiazolin-2-onlar molekulasining 6-holatiga xlor-sulfon kislota ta'sirida xlor-sulfonil guruhini kiritish;

-6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-on va 3-metil-6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning gidrolizlash va alkogollash reaksiyalarining yo'nalishini aniqlash;

Ishning yangiligi. Ilk bor 6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarni suv va etil spirti bilan reaksiyalari tadqiq qilinib, tegishli benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar va ularning efirlari sintez qilindi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati. Ilk bor 6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol va suv bilan alkogollash, gidrolizlash reaksiyalari amalga oshirildi. Tadqiqotlar natijasida benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar va ularning efirlarini sintez qilish usullari ko'rsatildi.

Himoya ishiga kiritildi:

-benzotiazolin-2-on va 3-metilbenzotiazolin-2-onlarning olinishi;

-benzotiazolin-2-onlarning xlor-sulfon kislota bilan reaksiyalarini o'rganish va 6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning sintez usullari;

-6-xlor-sulfonilbenzotiazolin-2-onlarning suv va etanol bilan o'zaro ta'sirini o'rganish natijalari va benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar va ularning efirlarini sintez usullari;

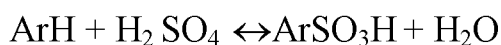
Bitiruv malakaviy ishning tuzilishi va hajmi.

Bitiruv malakaviy ish 54 varaqdan iborat. Kirish, adabiyotlar sharhi, olingan natijalar muhokamasi, tajribalar qismi, xulosalar va ilovalardan iborat bo'lib, 2 ta jadval, 8 ta rasm va 30 ta nomdagi foydalanilgan adabiyotlar ro'yxatini o'z ichiga oladi.

1-BOB. ADABIYOTLAR SHARHI

AROMATIK VA GETEROSIKLIK BIRIKMALARNI SULFOLASH VA XLORSULFONILLASH REAKSIYALARI

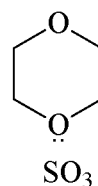
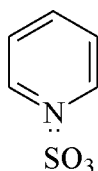
Aromatik birikmalar molekulasi tarkibiga sulfoguruh ($-\text{SO}_3\text{H}$) kiritish reaksiyasiga sulfolash deb ataladi. Aromatik birikmalarni sulfolash sulfat kislota, oleum, sulfat angidrid, xlorosulfon kislota, $\text{SO}_2 + \text{HCl}$ va AlCl_3 piridinsulfotrioksid, dioksansulfo-trioksidlar bilan olib boriladi. Sulfolash elektrofil o'rin almashinish reaksiyasi bo'lib, uni umumiy holda quyidagicha yozish mumkin.



1.1.Sulfolash va xlorosulfonillash reaksiyalarining mexanizmlari

Sulfolash reaksiyasining mexanizmi xlorlash, nitrolash reaksiya mexanizmlari kabi batafsil o'rganilgan emas. Adabiyotlardagi malumotlardan malumki, hali shu kungacha sulfolovchi elektrofil agentlarning tabiati to'g'risida umumiy fikr keltirilmagan. Reaksiyaning kinetik o'lchash natijalari ham malum bir javob bera olmaydi, chunki suvli va suvsiz sulfat kislota tarkibida elektrofil agentlar soni ko'p bo'ladi. Ularning bir-biriga nisbatan konsentrasiyasi $\text{H}_2\text{O}/\text{SO}_3$ munosabatga bog'liq. Ehtimol, asosiy sulfolovchi reagent vazifasini tutaydigan sulfat kislota dagi sulfat angidridi bajaradi.

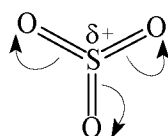
Sulfolovchi agentlar sifatida kuporos moyi - 92-94% - li sulfat kislota, monogidrat - 98-100% li sulfat kislota, odatdagi temperaturada suyuq holda bo'lgan 20-25% li yoki 60-65% li oleum, xlorosulfon kislota - $\text{Cl-SO}_2\text{OH}$, sulfat angidridi - SO_3 hamda sulfat angidridning piridin yoki dioksan bilan xosil qilgan komplekslari ishlatiladi.



Sulfolash reaksiyasida ishlatiladigan oleumning foizi sulfat angidridning monogidrat (H_2SO_4) dagi eritmasining massa ulushidir. Masalan, 25% li oleum - 25g SO_3 va 75g H_2SO_4 dan iborat 100 g eritmadir.

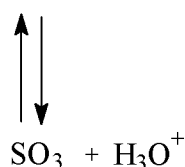
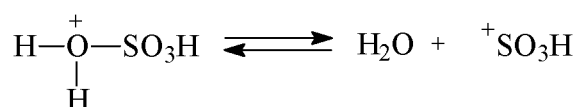
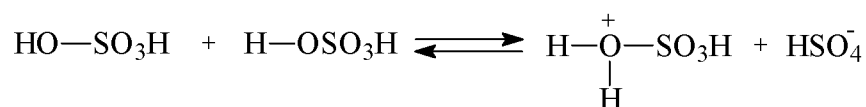
Sulfolovchi agentlardan xosil bo'ladigan elektrofil zarrachalarni quyidagicha tasavvur qilish mumkin:

Sulfat angidridi - SO_3 . Bu molekuladagi S-O bog'lari qutbli bo'lganligi uchun oltingugurt atomi atrofida elektron zichlik keskin kamayadi va u qisman musbat zaryadlanadi:



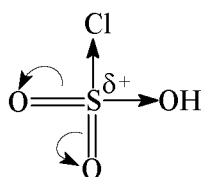
Shuning uchun SO_3 elektrofil zarracha va Lyuis kislotasi xisoblanadi.

Monogidrat, ya'ni 100% li sulfat kislotasida esa quyidagi elektrofil zarrachalar xosil bo'lishi mumkin:

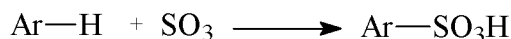


Oleumda - SO_3 va $\text{SO}_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$, ya'ni $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ kabi sulfolovchi agentlar mavjud bo'lishi mumkin.

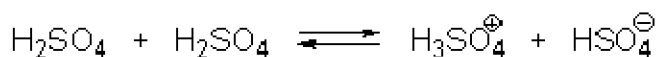
Xlorsulfon kislotadagi elektrofil zarrachani quyidagicha tasavvur qilish mumkin:



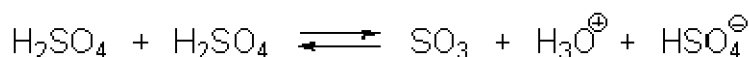
Turli konsentrasiyalı sulfat kislota bilan sulfolash qaytar reaksiya bo'lsa, sulfat anhidrid bilan sulfolash esa qaytmadir:



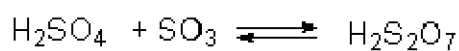
Sulfat kislota ning konsentrasiyasi 80% dan past bo'lgan hollarda asosan quyidagi muvozanat qaror topadi [1]:



yoki



Sulfat kislota ning konsentrasiyasi yuqori bo'lgan holatlarda, yani 85-98% bo'lganda uning eritmadagi holatini quyidagi reaksiya ko'rinishida ifodalash mumkin:



100% li sulfat kislota va oleumda $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ dan tashqari boshqa polisulfat kislota hollari - $\text{H}_2\text{S}_3\text{O}_{10}$; $\text{H}_2\text{S}_4\text{O}_{13}$ ham bo'ladi. Bular sulfolash reaksiyasi mexanizmini reaksiyaning kinetikasi orqali tushuntirishni qiyinlashtiradi.

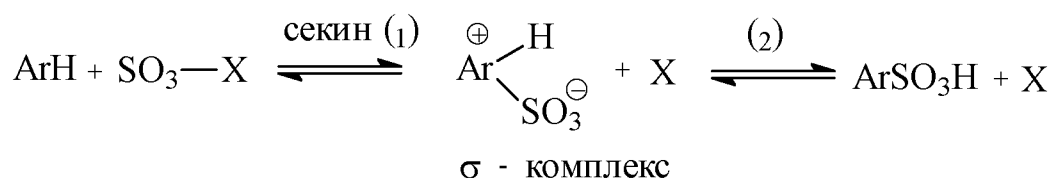
Konsentrasiyasi 80% bo'lgan sulfat kislota da sulfolash reaksiyasi tezligi H_3SO_4^+ ionining aktivligi bilan chiziqli bog'liqlikka ega.

Sulfat kislota ning 85% dan katta bo'lgan konsentrasiyasida sulfolash reaksiyasining tezligi $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ ning hosil bo'lish aktivligiga bog'liq bo'ladi. Bu ikkita zarracha aromatik birikmalarni suvli sulfat kislota ishtirokida sulfolashda asosiy elektrofil agentlar hisoblanadi.

Ularni SO_3 molekulası bilan H_3O^+ ioni yoki sulfat kislota birgalikda kordinasiyalangan deb olish mumkin. Sulfat kislota ni konsentrasiyasini 85% dan 100% gacha oshirilganda H_3O^+ ioni konsentrasiyasi kamayadi, H_2SO_4 konsentrasiyasi oshadi. 91% sulfat kislota da $[\text{H}_3\text{SO}_4^+] = [\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7]$ bo'ladi, lekin $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ ($\text{SO}_3 \cdot \text{H}_2\text{SO}_4$) H_3SO_4^+ ($\text{H}_3\text{O}^+\text{SO}_3$)ga nisbatan kuchli elektrofil agent

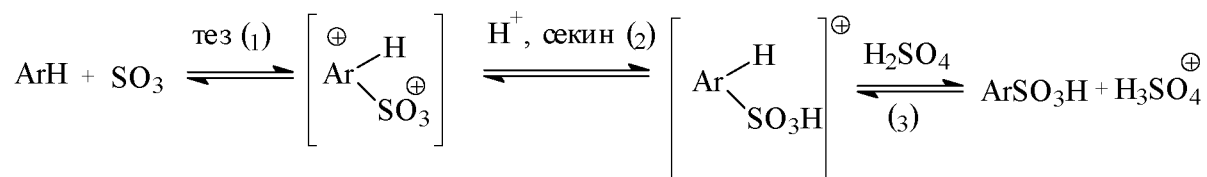
bo'lgani uchun, u nafaqat 91% li sulfat kislota holida balki 85% li sulfat kislota ham ustunlik qiladi.

Shunday qilib, sulfolash mexanizmini quyidagicha tasavvur qilishimiz mumkin [1-5]:



Kinetik izotop effektini $k_{\text{H}}/k_{\text{D}}$ 95% dan past konsentrasiyadagi sulfat kislota uchun hisobga olmasa ham bo'ladi. Lekin sulfolashni 98-100% li H_2SO_4 yoki oleum ishtirokida olib borilganda, kinetik izotop effektini $k_{\text{H}}/k_{\text{D}}$ 1,15-1,7 sohada kuzatish mumkin va reaksiyaning tezligini (2) bosqich belgilab beradi. Sulfat kislota 95% dan kam bo'lgan konsentrasiyasida proton σ -kompleksdan gidrosulfat-ioni HSO_4^- tasirida ajraladi, sulfat kislota 95% dan yuqori konsentrasiyasida kuchsiz asos xossasini sulfat kislota o'zi o'ynaydi. Shuning uchun (2) bosqichning reaksiya tezligi birdan kamayadi va kinetik izotop effektini kuzatiladi.

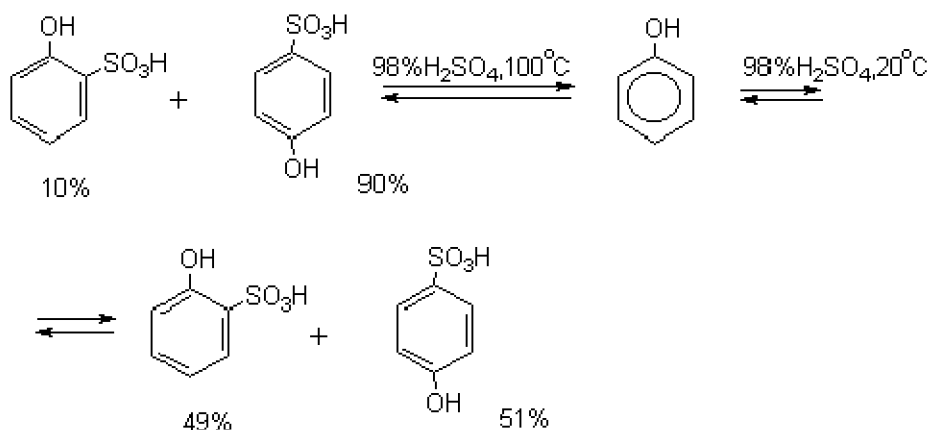
Sulfolovchi agent sifatida oleum qo'llanilganda sulfolash reaksiyasining tezligi birdan ortadi. Ushbu holda elektrofil agent sifatida kompleksga bog'lanmagan SO_3 aromatik yadroga ta'sir qiladi. Reaksiyaning sekin boradigan bosqichi (2) hisoblanadi [2,3].



Sulfolash reaksiyalarida bir nechta sulfolovchi agent ishtirok qilishi mumkinligini reaksiya tezligining turlicha o'zgarishidan tashqari, ularni sulfat kislota yoki oleum bilan sulfolanganda orientasiyasini turlicha bo'lishi bilan ham

aniqlash mumkin. H_3SO_4^+ kationi va $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ lar SO_3 ga qaraganda yuqori selektivlikka ega bo'lishi kerak.

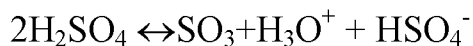
Tajriba natijalari shuni ko'rsatdiki, sulfolash reaksiyalari mahsulotlarining izomer tarkiblarini taqsimlanishi reaksiyaning kinetikasiga bog'liq bo'lmasdan, ular reaksiyaning termodinamik holatiga bog'liq holda o'zgarar ekan. Shuning uchun temperatura o'zgarganda orto-, meta- va para-izomerlarning nisbati sulfolash reaksiyasi tezligining konstantasi o'zgarishiga bog'liq bo'lganligi uchun turli izomerlari hosil bo'ladi. Lekin shuni bilish kerakki, moddalarning turli izomerlarini hosil bo'lishi sulfolash reaksiyalari uchun temperaturaga juda bog'liq. Masalan, fenolni monosulfokislotagacha sulfolanganda orto- va para-gidroksibenzolsulfokislotalar aralashmasi hosil bo'ladi. 20°C haroratda orto- va para-izomerlarning teng mol miqdorlarida mahsulot sintezi amalga oshiriladi. Lekin fenolni sulfolash reaksiyasining haroratini 100°C ga ko'tarilganda para-izomer mahsuloti ko'p miqdorda hosil bo'ladi. Fenoldan hosil bo'ladigan orto- va para-gidroksibenzolsulfokislotalar aralashmasini 80-90% li sulfat kislota qo'shib qizdirilganda para-izomerning miqdori oshadi. Buni orto-izomerning protodesulfolash reaksiyasining tezligini para-izomernikidan katta bo'lishi bilan tushuntiriladi. orto-Gidroksibenzolsulfokislota nafaqat tez hosil bo'ladi va balki u fenolgacha ham yuqori tezlikda oson parchalanadi; para-gidroksibenzolsulfokislota esa sekin hosil bo'ladi va sekin parchalanadi. Fenolni 92-98%-li sulfat kislota bilan 0°C da sulfolashdan orto-izomerni hosil bo'lishi, teskari - protodesulfolash reaksiyasi tezligini ushbu sharoitda juda kichik qiymatga ega bo'lishini ko'rsatadi. Shunday qilib, fenolni sulfolash reaksiyasining haroratga bog'liq holida para-izomerning hosil bo'lishi termodinamik nazorat paytida asosiy mahsulot hisoblanadi [2-6].



Shunga o'xshash toluol 0°C haroratda 100% li sulfat kislota bilan sulfolanganda 43% orto-, 4% meta- va 53% para-toluolsulfokislotalar hosil bo'ladi, lekin ushbu reaksiya 100°C haroratda olib borilganda toluolsulfokislotalarning izomerlarini tarkibi foiz jihatdan quyidagicha bo'ladi: 13% orto-, 8% meta- va 79% para-toluolsulfokislota.

Benzolni sulfolash tutaydigan sulfat kislota bilan olib boriladi. Sulfolash jarayoni benzol molekulasining bir juft elektronlarini sulfat angidridning oltingugurt atomiga berishdan boshlanadi. Ikki sababga ko'ra oltingugurt elektron juftlarining akseptori vazifasini o'taydi. Birinchidan oltingugurt atomining elektromanfiyligi kislorodga nisbatan kichik bo'lganligi uchun unda elektron buluti zichligining kamomati mavjud. Ikkinchidan hosil bo'ladigan SO_3 -guruhlanishning rezonons barqarorligida bo'ladi.

Sulfat angidrid oleumda erkin holda va sulfat kislotadan quyidagicha hosil bo'ladi.



Sulfat angidrid benzol bilan quyidagicha reaksiyaga kirishadi.

Reaksiya natijasida hosil bo'lgan σ -kompleks biqutublangan ion bo'lib, boshqa elektrofil o'rin almashinish reaksiyalaridagi α - kompleks esa karbokationdan iborat.

Sulfolash boshqa elektrofil o'rin almashinish reaksiyalaridan farq qiladi. Birinchidan, u qaytar jarayon, ikkinchidan esa reaksiya uchun ozgina miqdorda izotop effekt mavjudligi xarakterli hisoblanadi. Bu reaksiyaning asosiy xususiyati

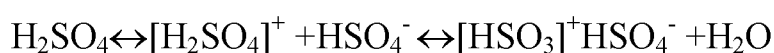
yaxshiroq tushinish uchun uning energetik profilini ko'zdan kechirish lozim. Sulfolash reaksiyasida SO_3 ni benzol - SO_3 adduktidan tortib olish uchun energetik to'siq juda kam energiya talab etadi, chunki reaksiya qaytar va σ -kompleksning ikki tomonidagi energetik to'siq balandligi taxminan bir xil. Demak, o'tish holatlari energiyalari ham bir xil bo'ladi.

Biqutblangan σ -kompleksdan protonni tortib olish boshqa σ -kompleksdan protonni tortib olishga qaraganda qiyinroq bo'ladi. Buning sababi shuki, biqutblangan σ -kompleksdan protonni tortib oladigan qarshi anion $:\text{O}^-\text{SO}_3\text{H}$ ni kompleksga yaqinlashishi qiyin, chunki bu anion bilan kompleksdagi SO_3 - guruhning manfiy zaryadi orasidagi bir-birini itarish sodir bo'ladi.

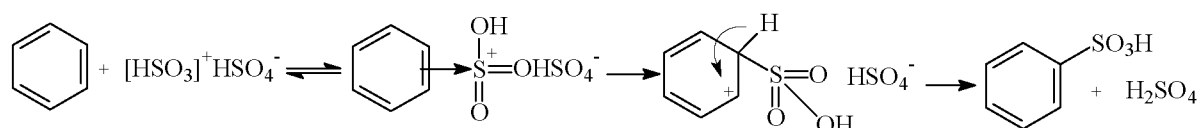
Shunday qilib, reaksiyaning oxirgi bosqichida σ -kompleksdagi C-H bog'dan protonni tortib olish nitrolash va galogenlash reaksiyalaridagiga nisbatan sekin boradi, buning natijasida qisman izotop effekt sodir bo'ladi.

σ -Kompleksdagi C-H bog'ni uzishga qaraganda C-D bog'ni uzish uchun energiya ko'proq talab etiladi. Demak, har gal molekula oxirgi o'tish holatlari orqali o'tganda C-D bog'ni uzish uchun C-H bog'ga nisbatan energiyasi ko'p sarf bo'ladi.

Protonlashgan sulfat angidrid sulfat kislotadan hosil bo'ladi va kislota qoldig'i bilan ion juftini beradi.



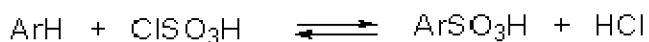
Ion jufti benzol halqasiga hujum qiladi va o'tish komplekslarini (π -yoki ZKK hamda σ -yoki zich ion jufti) hosil qiladi.



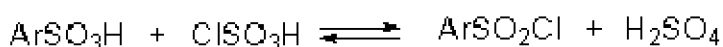
Sulfolash reaksiyasining boshqa elektrofil reaksiyalardan farqi shuki, bu reaksiya qaytardir, yani sulfolash jarayonida hosil bo'lgan suv sulfobirikmani gidrolizlaydi. Shu sababli oleum tarkibida sulfat angidridning miqdori qancha ko'p bo'lsa, reaksiya shuncha yaxshi boradi.

Sulfat angidrid bilan vodorod xloridning o'zaro ta'siridan olinuvchi xlorosulfon kislota effektiv sulfolovchi agent sifatida qo'llaniladi. Aromatik birikmalarni xlorosulfon kislota bilan sulfolash reaksiyasi 2 ta bosqichda boradigan jarayon hisoblanadi.

Birinchi bosqichda sulfokislota hosil bo'ladi.

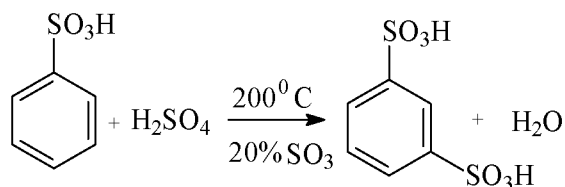


Ikkinchi bosqichda ushbu sulfokislota xlorosulfon kislota bilan tasirlashib sulfoxlorid hosil bo'ladi[4-9]:



1.2. Aromatik va geterosiklik birikmalarni sulfolash va xlorosulfonillash reaksiyalari

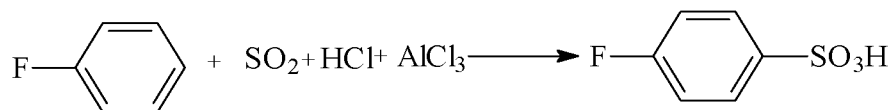
Benzol halqasiga birinchi sulfoguruh kiritish past haroratda boradi. Lekin ikkinchi sulfoguruhni kiritish uchun esa 200 °C dan yuqorida 20 % li oleum bilan qizdirish talab qilinadi.



Sulfobirikmalar olishning ikkinchi usulida bir mol aromatik birikmaga 2 mol xlorosulfon kislota ta'sir ettiriladi.



Bu usulning afzalligi shundaki, hosil bo'lgan sulfoxlorid suvda yomon eriydi va shuning uchun uni osonlik bilan ajratib olinadi. Sulfokislota olishning 3-usulida aromatik birikmalarga oltingugurt (IV)-oksidi konsentrlangan xlorid kislota va AlCl_3 ta'sir ettiriladi.

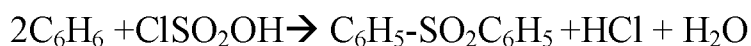
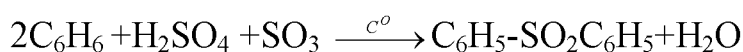


Aromatik birikmalarni sulfolashda turli reaksiyalar boradi:

Birinchi reaksiya-sulfolash reaksiyasining qaytar reaksiya ekanligidir.

Ikkinchi qo'shimcha reaksiya - oksidlash bo'lib, bu yuqori haroratda tezlashadi. Bunda reaksiya aralashmasi butunlay ko'mirga aylanadi va sulfat angidrid ajralib chiqadi.

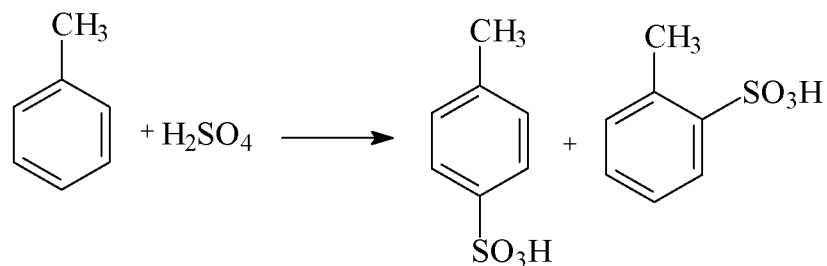
Uchinchi qo'shimcha reaksiya-sulfonlar hosil bo'ladi:



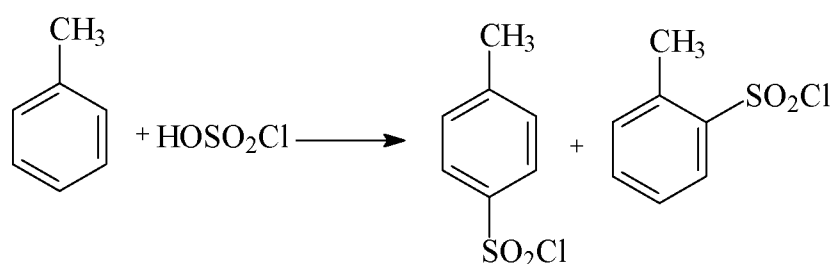
Benzolga nisbatan uning gomologlari osonroq sulfolanadi. Bu reaksiya 110°C da konsentrlangan sulfat kislota bilan boradi va asosan para-hamda ozgina miqdorda orto-toluolsulfokislota hosil bo'ladi.

Toluol 94-96% li sulfat kislota bilan uy temperaturasida sulfolanganda 50% o- va 50% p-toluolsulfokislotalar olingan, m-toluolsulfokislota esa xosil bo'lmagan. Reaksiyaning bu sharoiti kinetik nazorat sharoiti bo'lib, aynan shu o- va p-xolatlardagi reaksiyaning tezligi benzol halkasidagi metil guruhi ta'sirida katta bo'ladi. Shu reaksiya 120-150°C da olib borilsa 85-90% p-, 10-15% o-toluolsulfokislotalar va juda oz miqdorda m-toluolsulfokislota xosil bo'ladi.

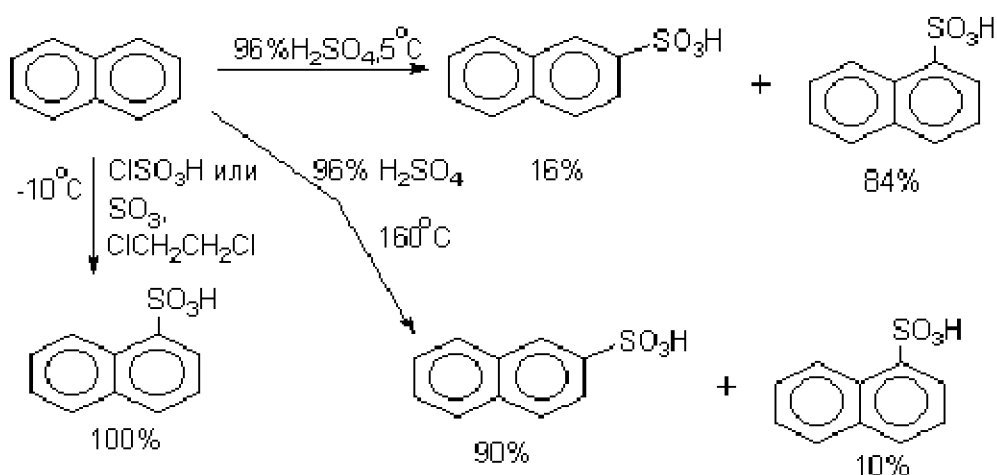
Sulfolash uchun 90% li sulfat kislota olib reaksiya 180-200°C da o'tkazilganda, 41% p-, 55% m- va 4% o-toluolsulfokislotalar xosil bo'ladi. Reaksiyaning bu sharoiti termodinamik nazorat sharoiti bo'lib, barqaror p- va m-toluolsulfokislotalar xosil bo'lishiga sabab bo'ladi. Huddi shu sharoitda o- yoki p-toluolsulfokislotalar alohida-alohida qizdirilganda xam huddi shunday aralashma xosil bo'ladi. Bunga sabab, o- yoki p- toluol-sulfokislotalar desulfolanishga uchrab, aralashmada barqaror m- toluolsulfokislota ko'payib boradi.



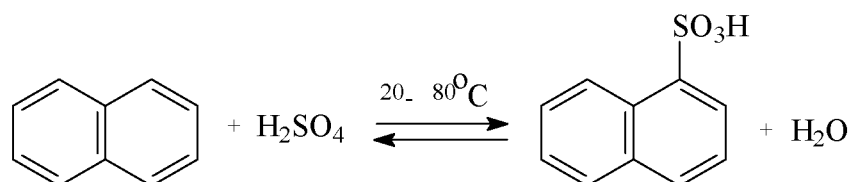
Toluolni sulfoxlorlash saxarin olishning bir bosqichi hisoblanadi. Sulfoxlorlash xlorosulfon kislota bilan olib boriladi. Reaksiya natijasida para- va orto-toluolsulfoxloridlarning aralashmasi hosil bo'ladi.



Naftalinni sulfolaganda reaksiya sharoitiga qarab, α - yoki β -naftalin-sulfokislotalar hosil bo'ladi. Past haroratda asosan, α -, yuqori haroratda esa β - naftalinsulfokislotalar hosil bo'ladi.



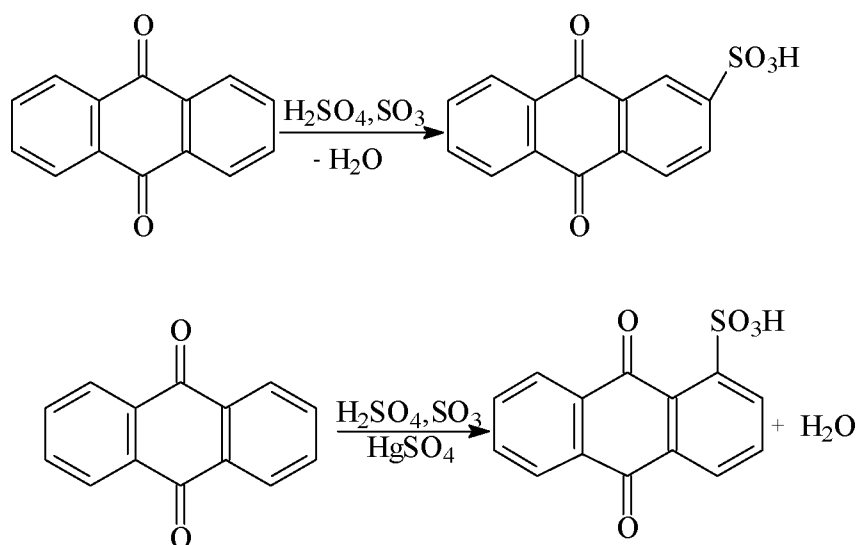
Naftalinni 100% li sulfat kislota (monogidrat) bilan $20-80^\circ\text{C}$ da sulfolanganda α -naftalinsulfokislota hosil bo'ladi:



Agar reaksiya 120-160°C da olib borilsa yoki α -naftalin sulfokislota sulfat kislota monogidрати bilan shu temperaturada qizdirilsa, β -naftalinsulfokislota hosil bo'ladi.

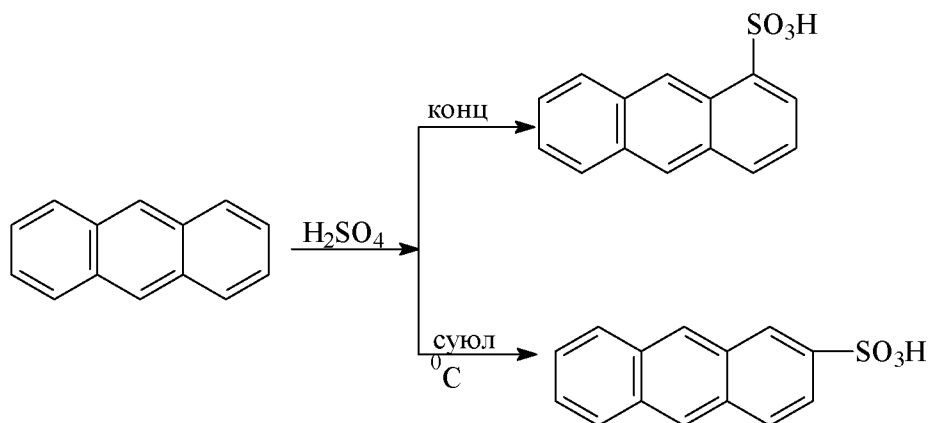
Huddi toluolning o- va p-holatlari kabi naftalinning α -holati uning β -holatiga nisbatan reaksiya qobiliyati katta. Shuning uchun past temperaturada (kinetik nazorat sharoitida) α -naftalinsulfokislota hosil bo'ladi. α -Naftalinsulfokislota yuqori temperaturada va sulfat kislota ta'sirida β -izomerga nisbatan oson protonlanadi va desulfolanish reaksiyasi sodir bo'ladi. Shuning uchun yuqori temperaturada (termodinamik nazorat sharoitida) termodinamik barqaror β -naftalinsulfokislota hosil bo'lishi kuzatiladi.

Antroxinon sulfolanganda β -antroxinonsulfokislota hosil bo'ladi. Ammo reaksiyada katalizator sifatida simob sulfat (M.A.Ilinskiy 1891 yil) qo'llanilsa, asosan α -izomer chiqadi.



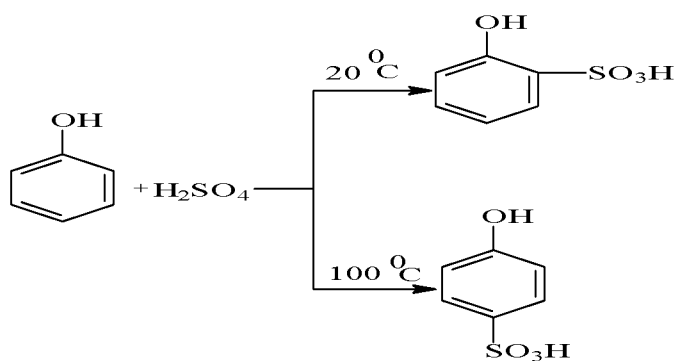
Katalizator antroxinonning α -holati hisobiga simob organik birikma hosil qiladi va u sulfat angidrid ta'sirida α - antroxinonsulfokislota aylanadi.

Antrasenni sulfolash esa haroratga va sulfat kislotaning konsentrasiyasiga bog'liq bo'ladi. Past harorat va konsentrlangan sulfat kislotada asosan α -antrasensulfokislota, yuqori harorat va suyultirilgan kislotada β -antrasensulfokislota hosil bo'ladi.



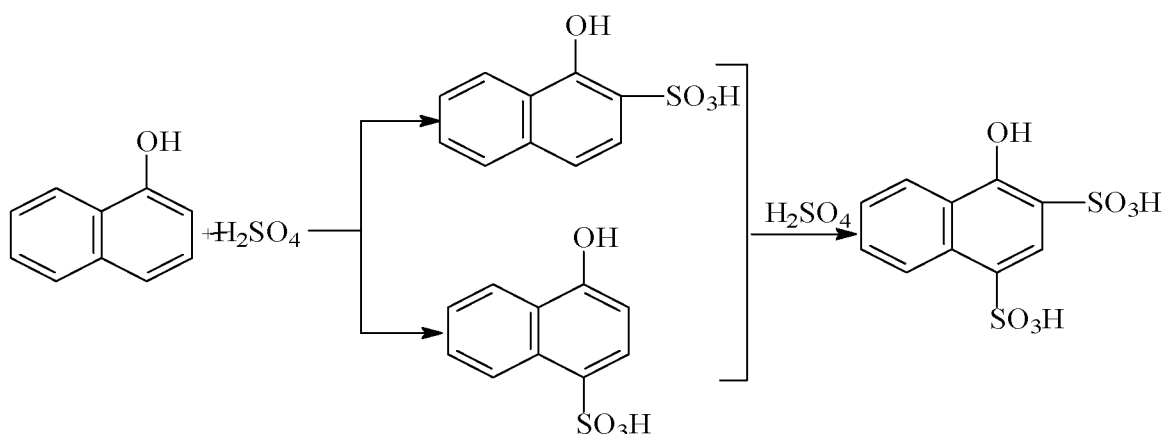
Fenol va naftollarni sulfolash katta ahamiyatga ega, chunki ulardan olinadigan bo'yoqlarning suvda eruvchanligi yuqoridir.

Fenol sulfosulfolaganda, o- va p-fenolsulfokislotalarning aralashmasi hosil bo'ladi, uy haroratida o-izomer, $100^\circ C$ da esa p-izomer hosil bo'ladi:

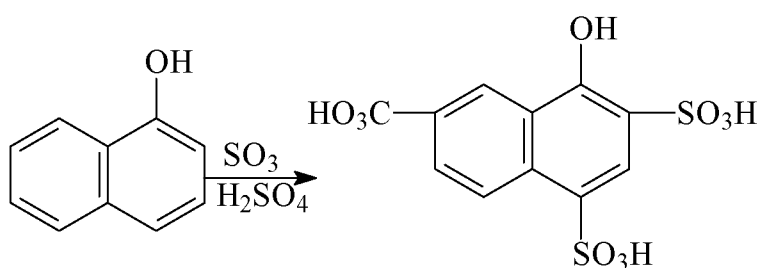


Fenolga mayin ta'sir etadigan sulfolash agentlaridan piridinsulfotriooksid yoki dioksansulfotriooksid ta'sir etilsa, faqat p-fenolsulfokislota hosil bo'ladi.

α -Naftol sulfolansa, dastlab 1-naftol-2- va 1-naftol-4-sulfokislotalarni hosil qiladi. Agar naftolni sulfat kislota bilan sulfolash uzoqroq vaqt ichida olib borilsa, 1-naftol-2,4-disulfokislota hosil bo'ladi[9]:

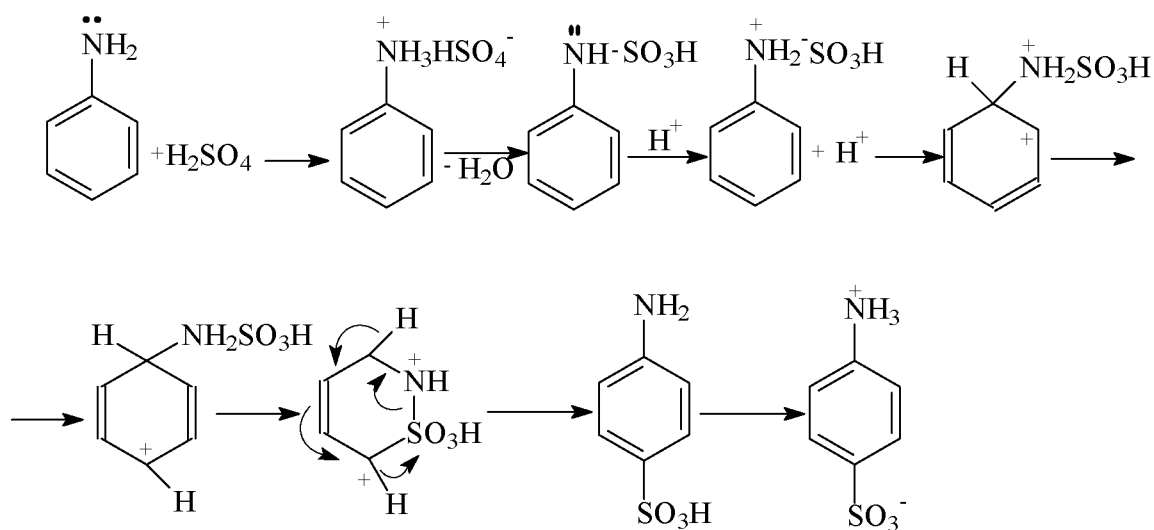


Tutaydigan sulfat kislota yordamida sulfolansa, faqatgina bitta modda - 1-naftol-2,4,7-trisulfokislota hosil bo'ladi:

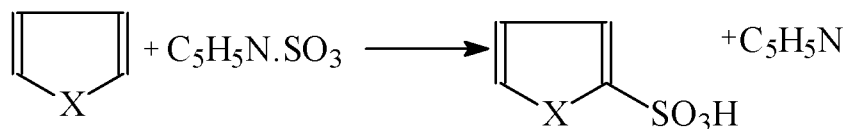
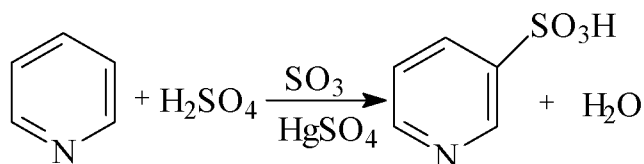


Anilin sulfat kislota bilan reaksiyaga kirishib tuz beradi.

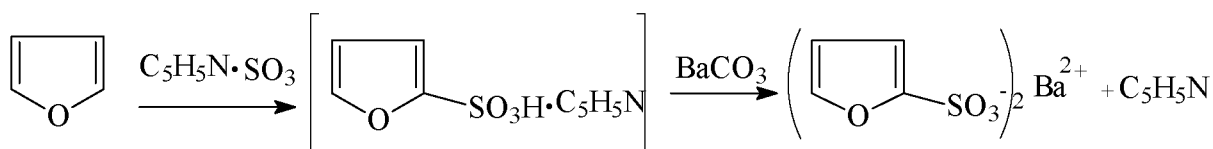
Ammo yangi tayyorlangan tuz 180-190 °C da bir necha soat davomida qizdirilsa, *p*-anilinsulfokislota (sulfanil kislota) aylanadi. Reaksiya quyidagicha boradi[10]:



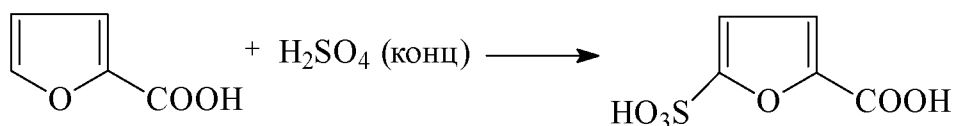
Geterohalqa tutgan birikmalar - piridin, furan, tiofen, pirrol, piridin sulfotrioksid va boshqalar tasirida oson sulfolanadi [11]:



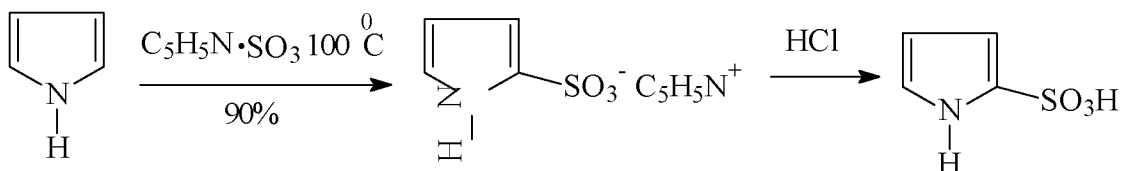
A.P. Terentev va uning xodimlari tomonidan sulfolashda yumshoq sulfolovchi agent - piridinsulfotriksidin qo'llashni metodikasi ishlab chiqilgan [11].



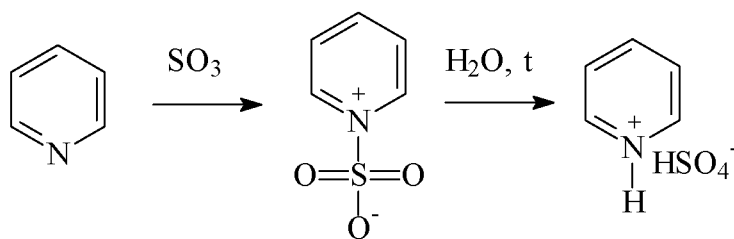
Furan xalqasida elektronoakseptor o'rinbosarlar turganda sulfolashni konsentrlangan sulfat kislota ishtirokida olib borish mumkin. Masalan furan-2-karbon kislotaga ta'sir qilinganda furan-2- karbon-5-sulfokislota hosil bo'lishi aniqlangan.



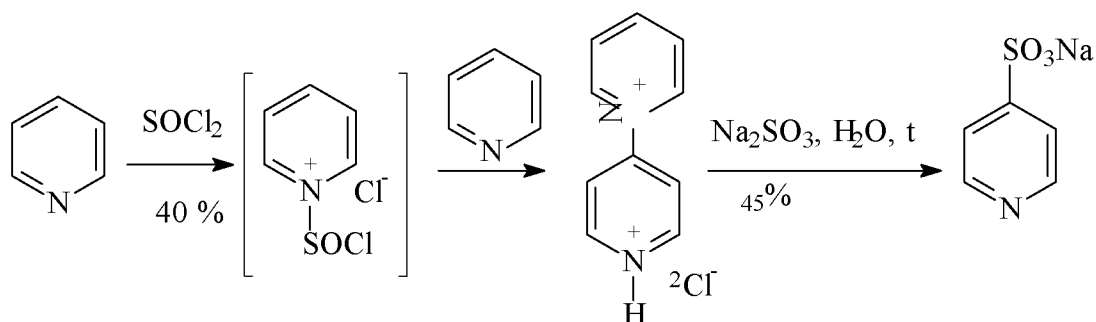
Mualliflar [11] pirrolni sulfolash uchun yumshoq sulfolovchi agent - piridinsulfotriksidni qo'llashgan va pirrol osongina pirrol-2-sulfonatga aylangan.



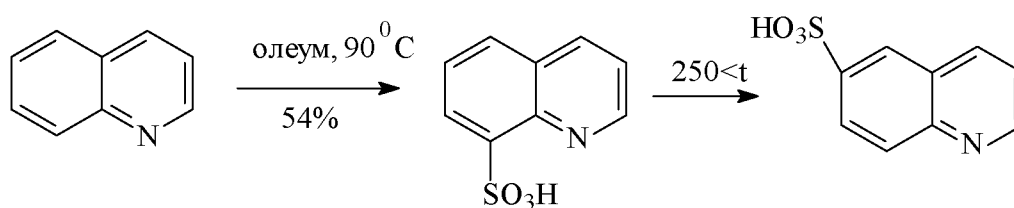
Piridinni oltingugurt (VI)-oksid bilan o'zaro ta'siridan kristal holdagi piridinsulfotriksid kompleksi yuqori unumda hosil bo'lishi aniqlangan [8]. Bu mahsulot suv tasirida gidrolizlanganda sulfat kislota va piridin hosil bo'ladi.



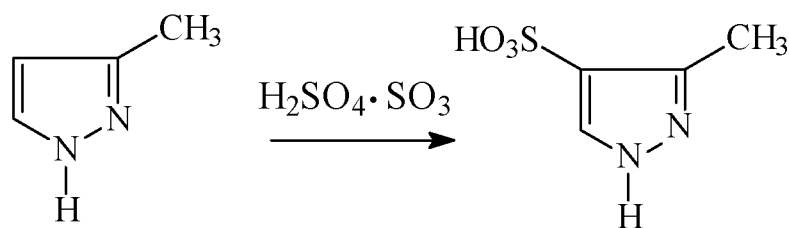
Piridinni 20 °C da tionilxlorid bilan reaksiyasidan sintetik jihatdan muhim birikma sintez qilinadi. U osongina piridin-4-sulfokislota tuziga aylanishi mumkin [11].



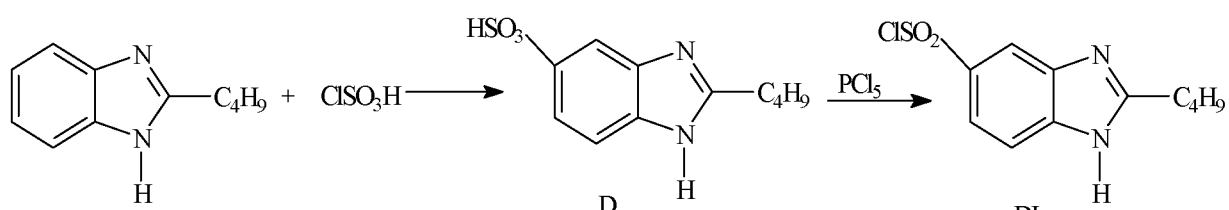
Xinolini 30 % li oleum bilan 90 °C da sulfolanganda 54 % unum bilan xinolin-8-sulfokislota sintezi amalga oshadi. Shunday reaksiya izoxinolin uchun qilinganda sulfogruх 5-holatga yoʻnaladi [5]. Ushbu reaksiyalar yuqori haroratda olib borilganda xinolin-8-sulfokislota va izoxinolin-5-sulfokislotalar izomerlanib, 6-sulfokislotalar chiqishi aniqlangan [12].



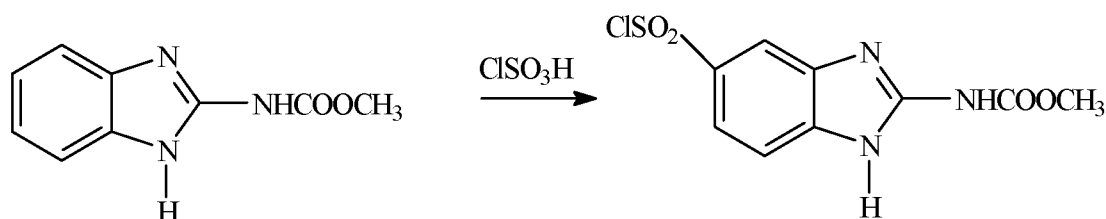
Pirazol molekulasini sulfolash reaksiyalari qattiq sharoitda boradi. 3-metilpirazolni 100 °C da 6 soat davomida 20% li oleum ishtirokida olib boriladi va sulfolovchi agent molekulaning 4-holatiga taʼsir qiladi va 3-metilpirazol-4-sulfokislota sintez qilinadi [13].



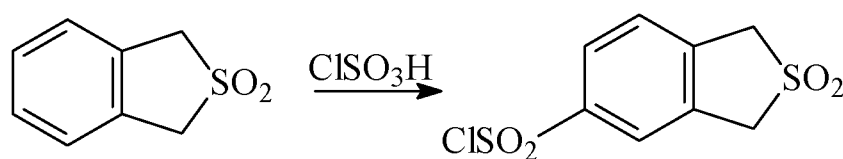
D.V.Fedyuk va boshqalar [14] tomonidan 2-butylbenzimidazolning xlorulfon kislotasi bilan reaksiyasidan yuqori unum bilan 2-butylbenzimidazol-5-sulfokislota sintez qilingan. Unga PCl_5 tasirida sulfoxlorid ajratib olingan. Bu reaksiya sharoitida elektrofil agent 5-holatga borishi ko'rsatilgan.



Benzimidazol hosilasi bo'lgan benzimidazol karbamin kislotasining metil efiri xlorulfon kislotasi bilan ta'sirlashtirilganda 5-xlorulfonilbenzimidazol karbamin kislotasining metil efiri hosil bo'lishi aniqlangan. Bu xlorulfonillash reaksiyasi uchun optimal sharoit topilgan. Reaksiya mahsuloti unumi past temperaturalarda ($2-5^\circ\text{C}$) yuqori (89,2%) bo'lgan [15].

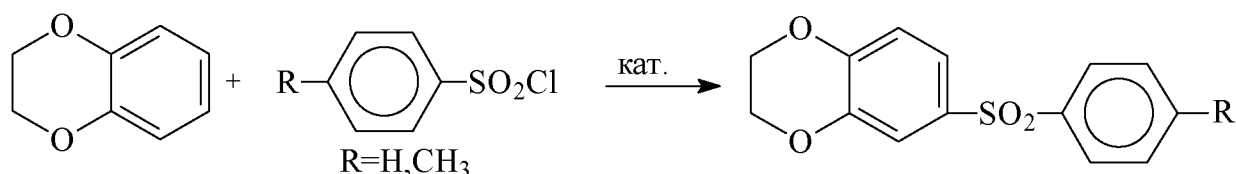


5-Xlorulfonil-1,3-digidrobenzo[c]tiofen-2,2-dioksid olishda elektrofil reagent sifatida xlorulfon kislotasi ishlatilgan [16]. Reaksiya $120-125^\circ\text{S}$ temperaturada o'tkazilgan.



Q.N.Ahmedov va hammualliflari tomonidan [17] benzodioksan-1,4 ning arilsulfoxloridlar bilan oz miqdordagi katalizatorlar ishtirokidagi reaksiyalari

o'rganilgan. Natijada arilsulfoxloridlar tarkibiga kirgan CH_3 -guruhi ularning reaksiyaga kirishish qobiliyatini va mahsulot unumini pasaytiradi degan xulosaga kelishgan.



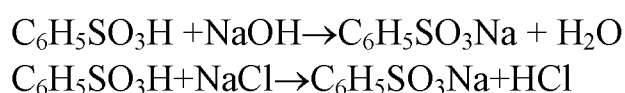
1.3. Sulfobirikmalarning kimyoviy o'zgarishlari

Sulfokislotalar oq, suv tortib oluvchi moddalar bo'lib, suvda juda yaxshi eriydi, ammo natriyli tuzi deyarli erimaydi.

Sulfokislotalar, karbon kislotalarga o'xshab, galogenangidridlar, angidridlar, amidlar va murakkab efirlar hosil qiladi. Ushbu kimyoviy o'zgarishlarni amalga oshirish xuddi karbon kislotalar hosilalarini olishga o'xshash usullarda olib boriladi va sulfokislotalarning hosilalari sintez qilinishi mumkin [2].

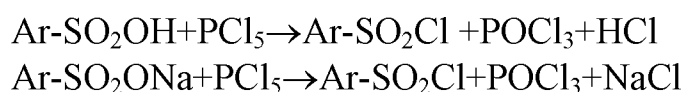
Sulfokislotalardan turli organik birikmalar sintez qilinadi:

1. Sulfokislotalarni tuzga aylantirish uchun ularga osh tuzi, ishqor tasir ettiradi:



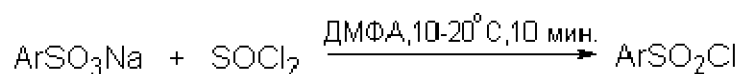
Sulfokislotalarning ishqorli tuzlarini qattiq holdagi kaliy va natriyning ishqori qo'shib suyuqlantirilganda, fenollar hosil bo'ladi.

2. Sulfokislota yoki uning uning tuzlariga fosfor (V)-xlorid ta'sir ettirilsa sulfoxloridlar hosil bo'ladi:



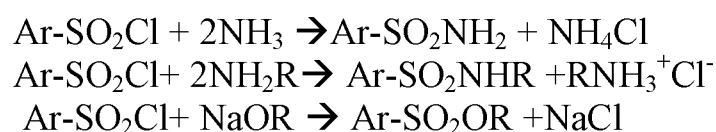
Sulfokislotalarning xlorangidridlarini (sulfoxloridlar) olishning shunday usullaridan biri bu - quruq sulfokislotalarning natriyli tuzini tionilxlorid yoki

fosfor (V)-xlorid bilan dimetilformamid (DMFA) eritmasidagi reaksiyalari orqali sintez qilish hisoblanadi.

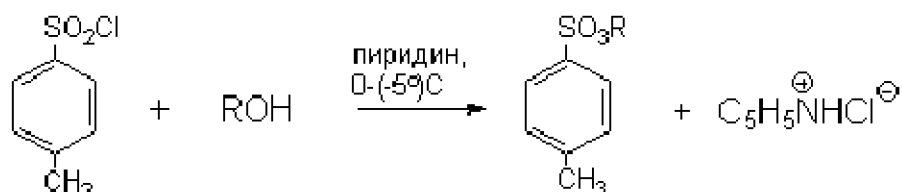


Arenlarga 4-5 barobar ko'p miqdordagi xlorisulfon kislota tasirida sulfolash reaksiyasi amalga oshiriladi va natijada sulfoxloridlar olinadi. Bu usuldan sanoatda sulfoxloridlarni olishda qo'llaniladi.

3. Sulfoxloridlar ammiak yoki aminlar bilan sulfokislotalarning amidlari, alkolyatlar bilan murakkab efirlarni hosil qiladi:

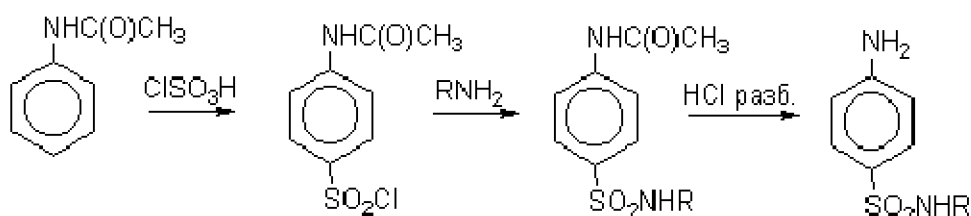


Sulfoxloridlardan sulfokislotalarning amidlari va murakkab efirlarini oson sintez qilish mumkin.



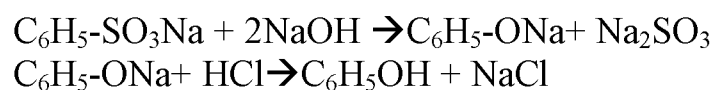
Sulfokislotalarning amidlari yoki ularning galogenli birikmalari dizenfeksiya qiluvchi moddalar va dorivor preparatlar sifatida ishlatiladi.

Sulfanil kislotasining amidlarining hosilalarini (sulfamid preparatlari; antimikrob ta'siriga ega bo'lgan dori moddalari) quyidagi sxema bo'yicha sintez qilish mumkin:

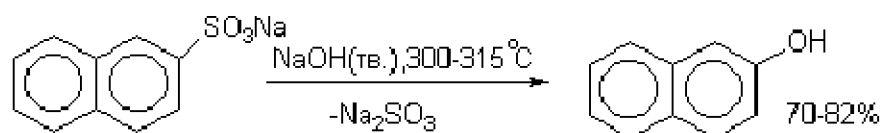
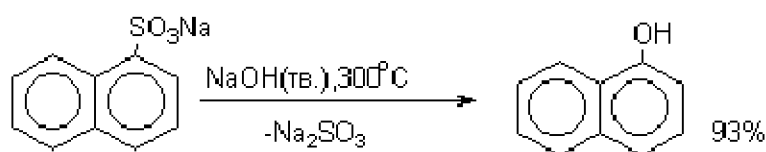
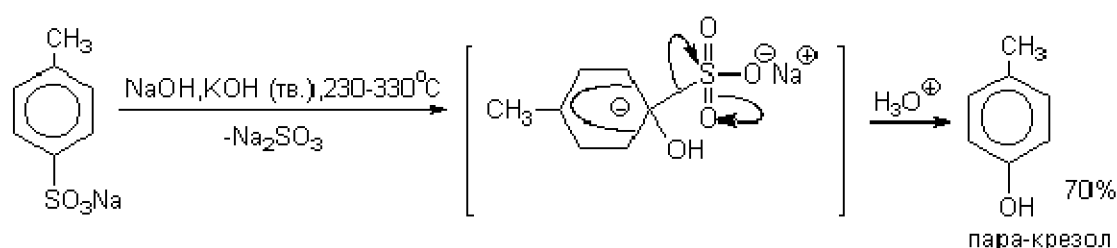


R=H bo'lganda oq streptosid tushuniladi.

Sulfokislota sulfoguruhini o'zini ham turli nukleofil reagentlar bilan almashtirish mumkin. Sulfokislotaning natriyli tuzi ishqorlar bilan qizdirilganda fenol hosil bo'ladi:



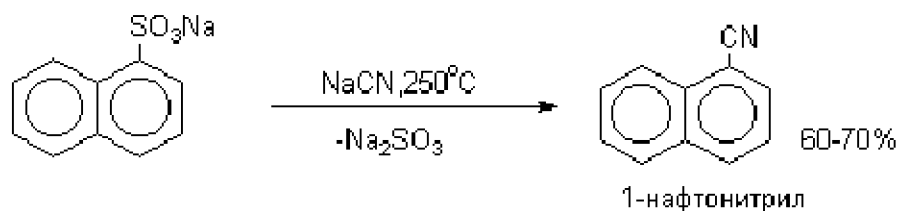
Organik sintezda muhim ahamiyat kasb etadigan reaksiyalardan biri bu sulfoguruhning nukleofil almashinish reaksiyasiga kirishish qobiliyati hisoblanadi.



Sulfoguruhning o'rniga nitril guruh kiritish mumkin:

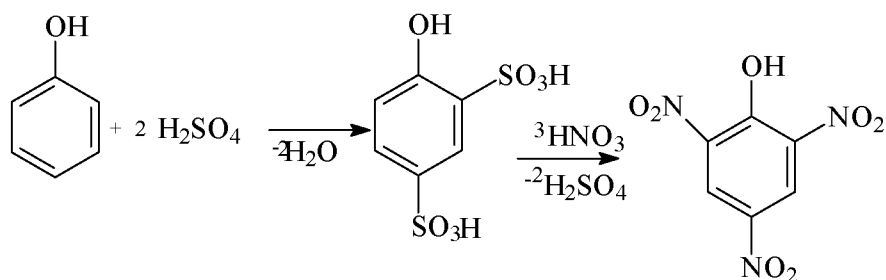


Sulfokislotalarning ishqorli tuzlarini qattiq holdagi kaliy va natriyning sianidi qo'shib suyuqlantirilganda, nitrillar hosil bo'ladi (arilsianidlar).



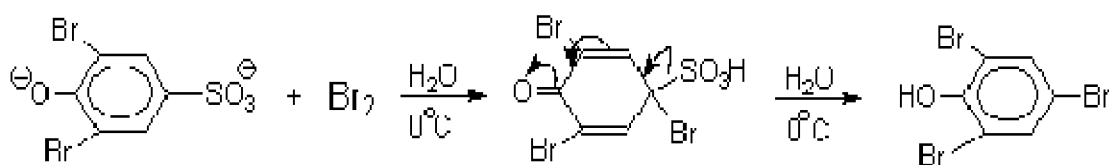
Shuningdek, sulfoguruh nitroguruh yoki galogenga almashinishi mumkin. Ushbu elektrofil reaksiyalar *ipso*-almashinish deb nomlanadi va organik sintezda keng qo'llaniladi, masalan, pikrin kislota sintezida. Buning uchun oldin fenol

sulfolanadi va keyin nitrolovchi agent ishtirokida *ipso*-elektrofil almashinish reaksiyasi ketadi.



Bu misolda ikkita sulfoguruh nitroguruhga almashadi va hatto uchinchi nitroguruh fenolning 6-holatiga kiradi.

Sulfoguruhning galogenga almashinishiga 2,4,6-tribromfenolni sintezini misol qilishimiz mumkin, unda ham *ipso*-elektrofil almashinish reaksiyasi ketadi.



Adabiyotlar sharhining tahlilidan ma'lum bo'ldiki, sulfolash reaksiyalari ko'pchilik hollarda qaytar reaksiyalar turiga kirib, reaksiya yo'nalishini teskari tomonga ketishiga olib kelar ekan. Shuningdek, sulfolash reaksiyalarini olib borish haroratga va sulfolovchi agentlar turiga ham bog'liq. Haroratga bog'liq holda sulfokislotalarning turli xil izomerlari hosil bo'ladi. Sulfokislotalar ko'pchilik sintezlarda oraliq moddalar sifatida qo'llanilishi mumkinligini ko'rib chiqdik.

Umuman, sulfokislota va uning hosilalari turli sohalarda ishlatiladi. Ayniqsa, tibbiyotda qo'llaniladigan bakterisidlar sulfokislotalarning amidlaridir. Masalan, oq va qizil streptosidlar, sulfidin, saxarin, norsulfazol, disulfan, sulfopiridin, sulfazin va boshqalar.

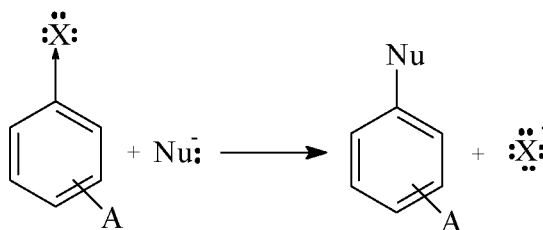
Adabiyotlar sharhidan ma'lumki, sulfolash reaksiyalari benzotiazolin-2-onlar uchun o'rganilmagan. Shuning uchun ushbu sinf birikmalarini o'rganish, ularda bo'ladigan o'zgarishlar va qonuniyatlarni tahlil qilish muhim ahamiyat kasb etadi.

1.4. Aromatik va geterohalqali birikmalarning nukleofil almashinish reaksiyalari

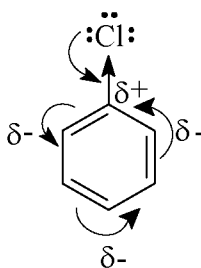
O'tgan davr ichida organik kimyogarlar aromatik birikmalar faqat elektrofil almashinish reaksiyalariga emas, balki yana nukleofil almashinish reaksiyalariga kirishishi mumkinligini tan olishdi. Bu reaksiyalarning mexanizmi turlicha bo'lib, molekulaning aromatik qismi substratning va nukleofil tabiatiga hamda reaksiya sharoitiga bog'liqdir.

Umumiy holda, aromatik qatorda boradigan nukleofil almashinish reaksiyalari turli xil bo'lishi mumkin.

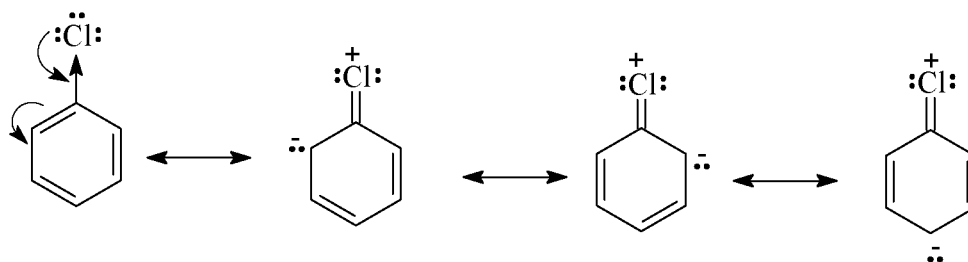
S_NAr (S_N2) mexanizmda boradigan reaksiyalar [2,3]:



Galogen benzol xalqasida joylashgan bo'lsa, uning faol emasligini shunday tushuntirish mumkin. Galogen atomi kuchli elektromanfiy element bo'lganligi uchun $-I$ induksion ta'sirga ega va undan tashqari galogenning elektron juftlari benzol halqasining π -elektronlari bilan ta'sirlashishi, ya'ni $+M$ ta'siri mavjud.

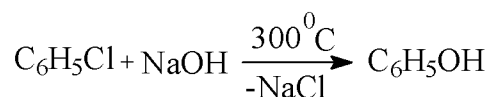


Xullas xlor benzol molekulasida (p , π -tutashish) konyugirlangan ta'sirlashish mavjud bo'lib, xlor kam harakatchan bo'ladi [3]:

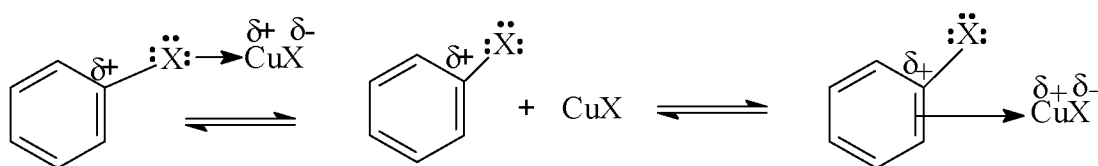


Shu ta'sirlar sababli galogen va uglerod orasidagi masofa qisqaradi va natijada galogen nukleofil reagentlar bilan almashinish reaksiyasiga qiyin kirishadi.

Shuning uchun galogen arenlar bilan nukleofil reagentlar reaksiyasi qattiq sharoitda boradi:



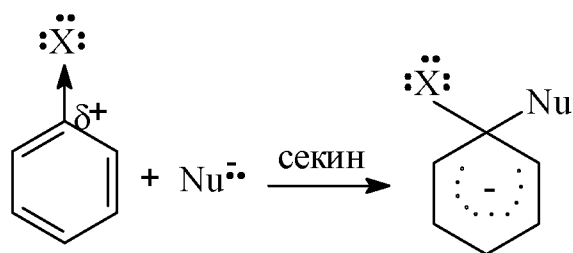
Bu reaksiya mis, bir valentli mis tuzlari ishtirokida boradi va fenol hosil bo'ladi. Mis tuzlarining vazifasi to'la aniqlangan emas. Ammo taxmin qilinishicha, mis ioni faol zarracha bo'lib, akseptor sifatida ishtirok etadi va galogen bilan yoki benzol halqasining π -elektronlari hisobiga zaryad ko'chgan kompleks hosil qiladi.



Ikkala holatda ham uglerod atomida elektronlar zichligi kamayadi va natijada reaksiya borishi nisbatan yengillashadi.

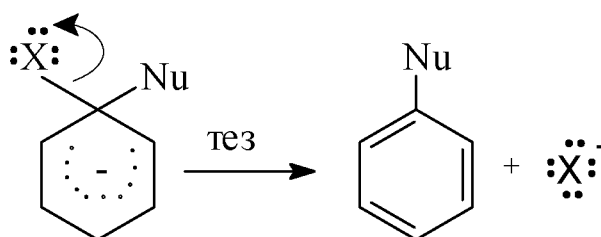
Galogenarenlarning nukleofil almashinish reaksiyalariga va ularning mexanizmiga to'xtalamiz.

Galogenarenlarda boradigan nukleofil almashinish reaksiyalari $\text{S}_{\text{N}}2$ ($\text{S}_{\text{N}}\text{Ar}$) mexanizmida ketadi. Bu reaksiya ikki bosqichda boradi. Birinchi bosqichida nukleofil galogen bog'langan uglerod (sp^2) atomiga hujum qiladi va oraliq mahsulot - anionni hosil qiladi:



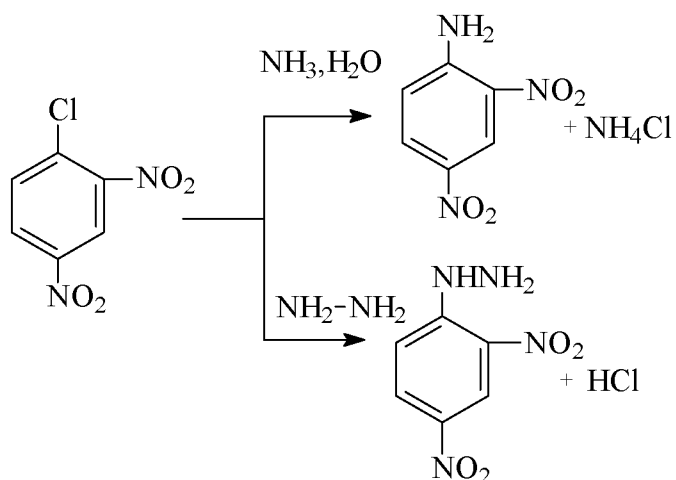
Bunday anionda aromatik halqaning π -elektronlar buluti sistemasi buziladi va reaksiya markazidagi uglerod atomining gibrirlanishi sp^2 dan sp^3 ga o'zgaradi.

Ikkinchi bosqichda esa anion $:X:^-$ chiqib ketadi va natijada halqaning sekstet elektronlar buluti tiklanadi va nukleofil almashinish sodir bo'ladi.

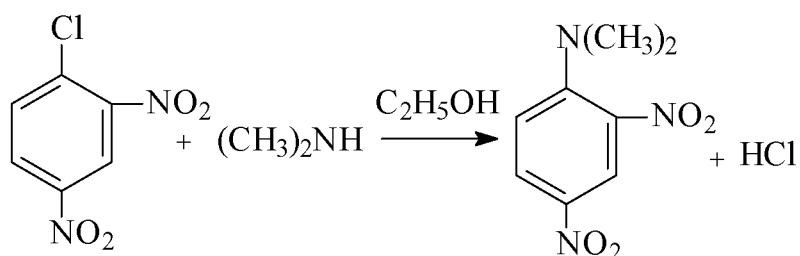


S_N2 (S_NAr) reaksiyalarning borishiga elektronodonor va elektronoakseptor o'rinbosarlar turlicha ta'sir qiladi.

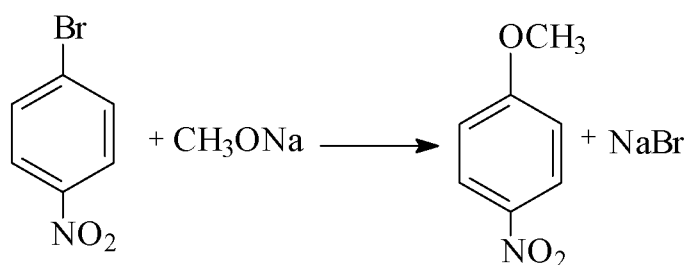
Aromatik halqada elektronoakseptor o'rinbosarlar $-NO_2$, $-N=O$, $-C\equiv N$, $-NH_2R$ galogenga nisbatan o- va p-holatlarda joylashganda galogenarenlarning nukleofil almashinish reaksiya tezligini oshiradi. Masalan 2,4-dinitro-1-xlorobenzoldagi xlorni turli nukleofillarga oson almashtirish mumkin [3]:



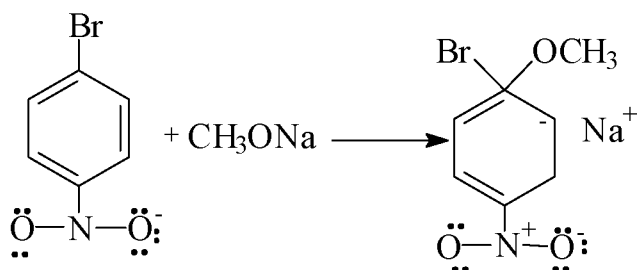
2,4-dinitro-1-xlorbenzolning asoslik xossasi kuchli bo'lgan aminlar bilan reaksiyasi natijasida uchlamchi sintez qilish mumkin. Masalan, 2,4-dinitro-1-xlorbenzolning dimetilamin bilan reaksiyasi 25⁰C va spirt eritmasida juda oson boradi. Bu reaksiyaning tezligi xlorbenzolga nisbatan 10⁸ marta katta [2]:



Demak, elektronoakseptor o'rinbosarlar oraliq holatda hosil bo'ladigan birikmaning barqarorligini oshiradi va S_NAr nukleofil almashinish reaksiyasining borishini osonlashtiradi. Masalan, p-bromnitrobenzolning metilat ion bilan reaksiyasida hosil bo'ladigan oraliq mahsulotdagi manfiy zaryadning qiymatini kamaytirishda nitrogurux qatnashadi [2]:

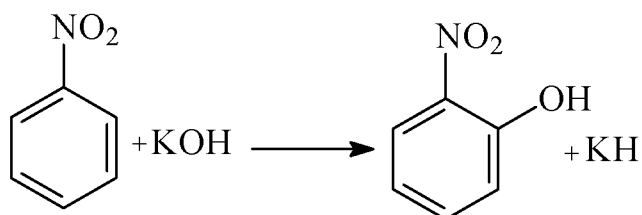


Bu reaksiyaning rezonans tuzilishini yozilsa, nitroguruhning ishtiroki yaqqol ko'rinadi.

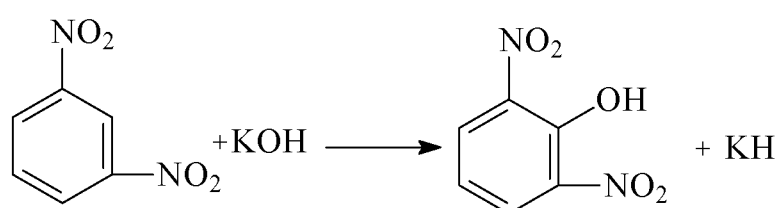


Benzol halqasida elektronodonor o'rinbosarlar bo'lsa, halqa vodorodini nukleofilga almashinishi kamdan-kam holatlarda ro'y berishi mumkin. Ammo elektronoakseptor o'rinbosarlar tutgan aromatik birikmalarning o- va p-holatidagi

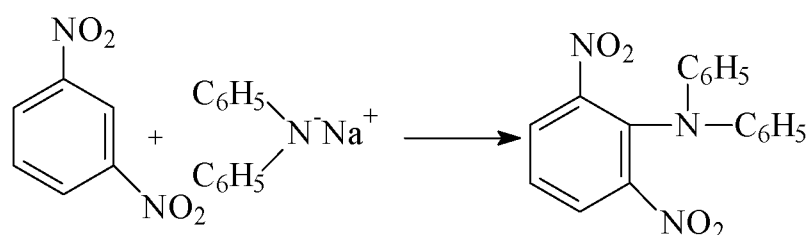
vodorodini-gidrid ion(N^-) holatda siqib chiqarishi mumkin. Masalan, nitrobenzolni KOH ishtirokida qizdirilsa, undan o-nitrofenol hosil bo'ladi [18]:



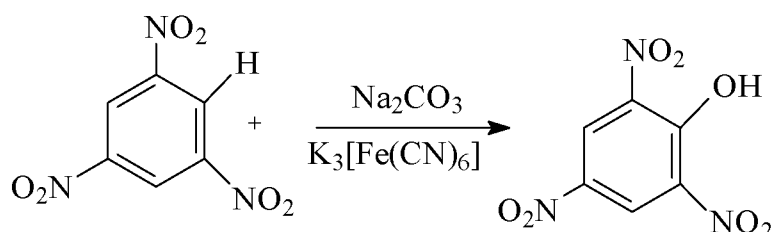
Ayniqsa, dinitrobenzol va trinitrobenzollardagi vodorod kuchli nukleofil reagentlar ta'sirida almashinish reaksiyasiga oson kirishadi:



Uning natriy difenilamin bilan reaksiyasi natijasida trifenilamin birikmalarining hosilasini olish mumkin [18]:



2,4,6-Trinitrobenzolga sodaning suvli eritmasi bilan sariq qon tuzi $\text{K}_3[\text{Fe}(\text{CN})_6]$ ta'sir ettirilsa, pikrin kislota hosil bo'ladi [19]:



Sariq qon tuzi gidrid (H^-) ionini oksidlash uchun qo'llaniladi. Agar nukleofil reagent sifatida natriy piperidin olinsa, gidrid ion piperidin qoldig'iga almashadi.

Adabiyotdagi ma'lumotlar tahlilidan ma'lumki, 6-xlorsulfonil-benzotiazolin-2-onlarning alkogollash va gidrolizlash reaksiyalari o'rganilmagan. Ushbu reaksiyalarning yo'nalishi va borishini aniqlash, yangi benzotiazolin-2-on asosidagi moddalar sintez qilish va nukleofil almashinish reaksiyalariga kirishish qobiliyatini aniqlash muhim ahamiyat kasb etishi mumkin. Chunki benzotiazolin-2-on hosilalari orasidan kuchli biologik faollikka ega bo'lgan moddalar topilgan.

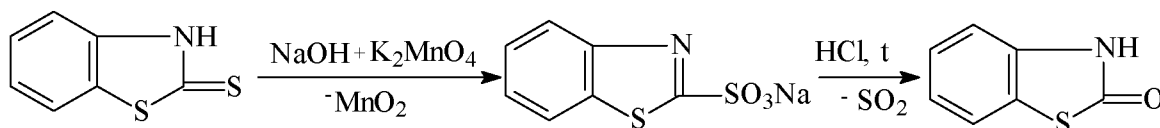
2-BOB. 6-XLORSULFONILBENZOTIAZOLIN-2-ONLARNING SUV VA ETANOL BILAN O'ZARO TA'SIRI

Adabiyotlardagi ma'lumotlar tahlili shuni ko'rsatadiki, sintez natijasida olinadigan 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlar molekulalarining gidroliz va alkogoliz reaksiyalarining yo'nalishi va borishi adabiyotlarda yoritilmagan. Shuning uchun 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni sintezini amalga oshirish, ularning nukleofil reagentlar bilan o'zaro ta'sirini, nukleofil almashinish reaksiyalarining borishi va yo'nalishini aniqlashni o'z oldimizga maqsad qilib qo'ydik.

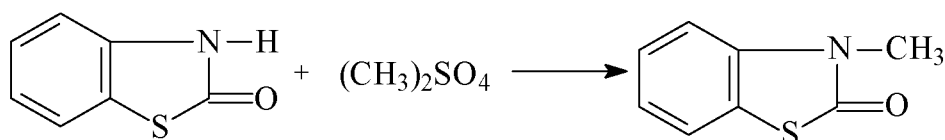
Nukleofil agentlar sifatida suv va etanol olindi.

2.1. Kaptaksni ishqoriy sharoitda kaliy permanganat bilan oksidlash

6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning sintezini amalga oshirish uchun dastlabki modda sifatida benzotiazolin-2-on zarur bo'ladi. Biz benzotiazolin-2-on sintez qilish uchun kaptaksni ishqoriy sharoitda kaliy permanganatni oksidlash orqali sintez qildik [29]:



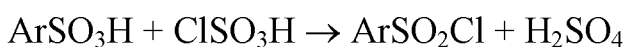
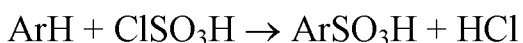
Sintez qilingan benzotiazolin-2-onni ishqoriy muhitda dimetilsulfat bilan metillash natijasida esa 3-metilbenzotiazolin-2-on olindi [30].



Sintez kilingan dastlabki benzotiazolin-2-onlarning fizik-kimyoviy konstantalari adabiyotlarda keltirilganiga mos keladi.

2.2. Benzotiazolin-2-onlarning xlorsulfon kislota bilan reaksiyalari

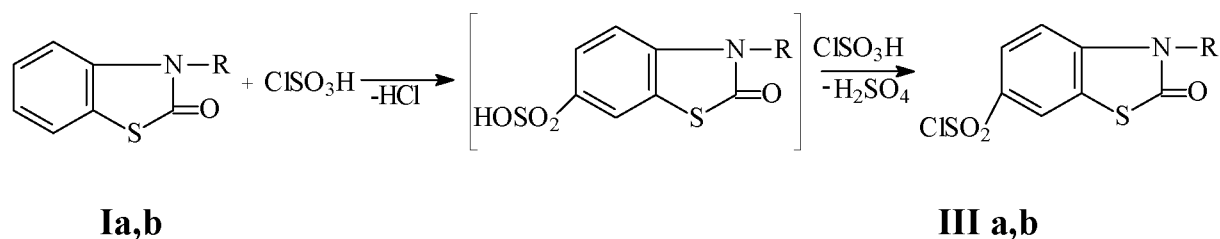
Adabiyotlardagi ma'lumotlardan ma'lumki, aromatik birikmalarning xlorsulfon kislota bilan reaksiyalari natijasida tegishli sulfokislotalar va qo'shimcha mahsulot sifatida sulfonlar hosil bo'ladi. Sulfokislotalar suvda yaxshi eriydi va kuchli kislota xossasiga ega bo'lib, ular sulfolovchi agentning ortiqcha miqdorida ham eriydi. Shuning uchun ko'pchilik hollarda aromatik birikmalarni suvda kam eruvchan sulfoxloridlar ko'rinishida sintez qilinadi [20-25].



Reaksiya sxemasidan ko'rinib turibdiki, sulfoxloridlar olish uchun xlorsulfon kislotadan kamida 2 mol olish kerak bo'ladi. Reaksiya qobiliyati suv bo'lgan birikmalar uchun sulfonlar hosil bo'lishini bartaraf qilish maqsadida xlorsulfon kislota ko'p miqdorda ishlatiladi.

Benzoksazolin-2-onlarning xlorsulfon kislota (XSK) bilan reaksiyalari o'rganilib, 6-xlorsulfonilbenzoksazolin-2-on yuqori unum bilan olingan [26,27]. Reaksiya mahsulotlarining eng yuqori unumi reagentlarning 1:5 nisbatida reaksiya aralashmani 4 soat 50-60°C haroratda qizdirish holatida kuzatilgan.

Ushbu optimal sharoitda benzotiazolin-2-onlarning (Ia,b) xlorsulfon kislota bilan reaksiyalarini amalga oshirdik va tegishli 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni (IIIa,b) yuqori unum bilan sintez qildik [28].

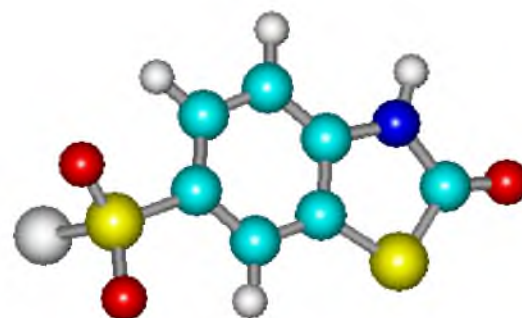
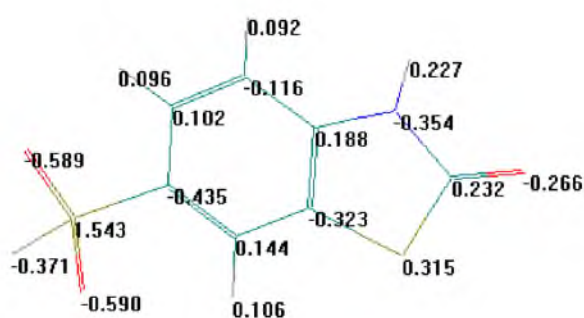


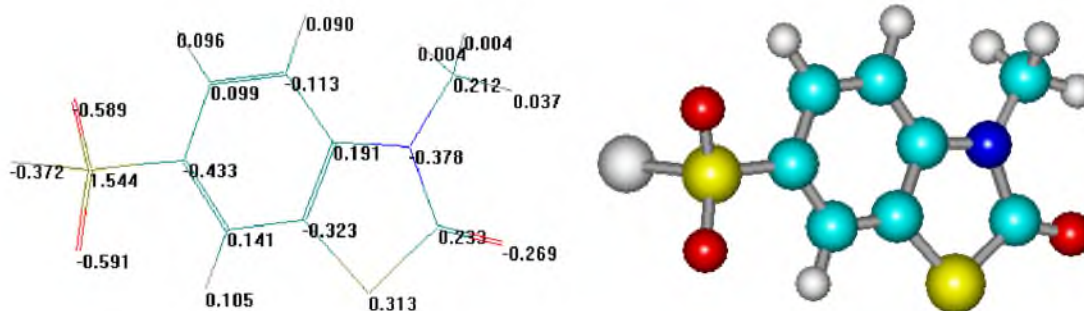
6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning (IIIa,b) fizik-kimyoviy tavsiflari

Birikma	Brutto Formula	Mass-spektr, m/z, M^Q	IQ-cpektr, $\nu(\text{SO}_2)$, sm^{-1}	Suyuqlanish harorati, $^{\circ}\text{C}$	Unum, %
IIIa	$\text{C}_7\text{H}_4\text{ClNO}_3\text{S}_2$	249/251	1180	168-170	83
IIIb	$\text{C}_8\text{H}_6\text{ClNO}_3\text{S}_2$	263/265	1175	151-152	87

Sintez qilingan 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning (IIIa,b) tuzilishi zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari yordamida tasdiqlandi. Ularning IQ-spektrlarida 6-holatdagi SO_2 guruhining valent tebranishlariga xos yutilish chiziqlari ($1170\text{--}1190\text{ cm}^{-1}$) hamda 1,2,4-uchalmashigan benzol halqasining CH fragmentini notekis deformasion tebranish-lariga xos yutilish chiziqlarining ($805\text{--}825$ va $870\text{--}885\text{ cm}^{-1}$) namoyon bo'lishi o'ziga xosdir. IIIa,b moddalarning mass-spektrlarida taklif etilgan tuzilishni tasdiqlovchi molekulyar ionlarning va tegishli fragmentlarning cho'qqilari borligi malum bo'ldi.

6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-on va 3-Metil-6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning tuzilishini HyperChem programmasi yordamida qilingan kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasiga ko'ra molekuladagi elektron zaryadlarning taqsimlanishi va molekulaning fazoviy shakli quyidagicha tasvirga ega.



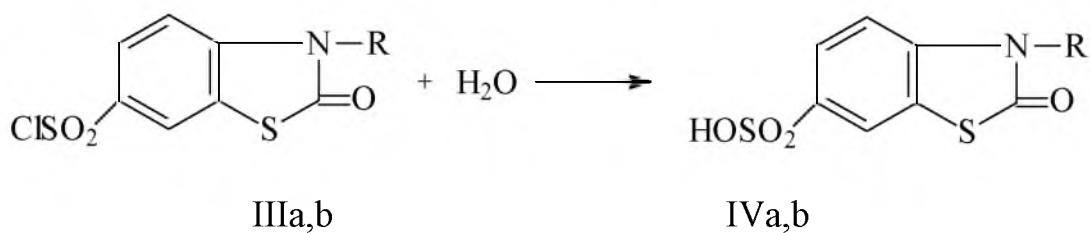


Yuqoridagi natijalardan malumki, benzotiazolin-2-on molekulasiga metil guruhning kiritilishi benzotiazol yadrosining elektron zichligini oshirgan shuningdek, xlorsulfonil guruhidagi xlor atomining qutbliligini oshirgan. Molekulada qutblanish qancha yuqori bo'lsa, reaksiyani ion almashinish mexanizmi bo'yicha bo'lishiga sabab bo'ladi. Molekuladagi xlor atomining qutblanishi uning uzilishini osonlashtiradi, ya'ni nukleofil almashinish reaksiyasini oson borishini ta'minlaydi, Bu holatni mahsulot unumining ko'p bo'lishi bilan kuzatishimiz mumkin.

2.3. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning gidrolizlanishi

Adabiyotlarda malumotlar tahlilidan ma'lumki, organik moddalarning gidrolizlanish reaksiyalari nukleofil almashinish reaksiyasi mexanizmida boradi. Bunda moddalar neytral, ishqoriy va kislotali muhitda gidrolizlanadi.

Benzotiazolin-2-onlarning xlorsulfon kislotasi bilan reaksiyasini o'rganish jarayonida tegishli benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar hosil bo'lmasdan, ularning xlorangidridlari (IIIa,b) hosil bo'lishini aytib o'tgan edik. Benzotiazolin-2-onlar asosida suvda eruvchan birikmalarni sintez qilish, tegishli benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarni olish, reaksiya yo'nalishi va borishini aniqlash maqsadida 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning suv bilan o'zaro ta'sirini turli xil sharoitda amalga oshirdik va yuqori unum bilan erkin sulfokislotalar (IVa,b) olindi. Ular suvda yaxshi eriydi, shuning uchun asetonda qayta kristallash yordamida toza holda ajratib olindi (2-jadval) [28].

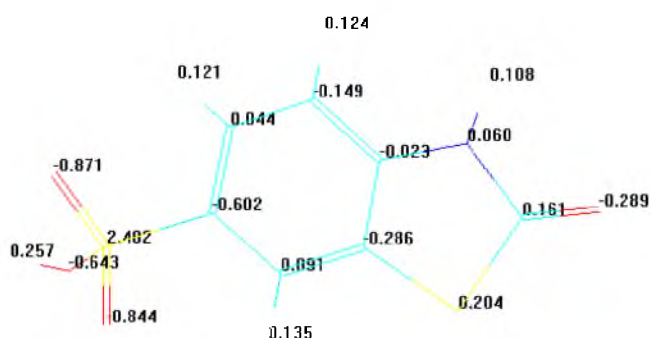


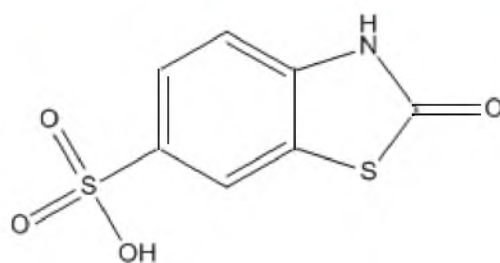
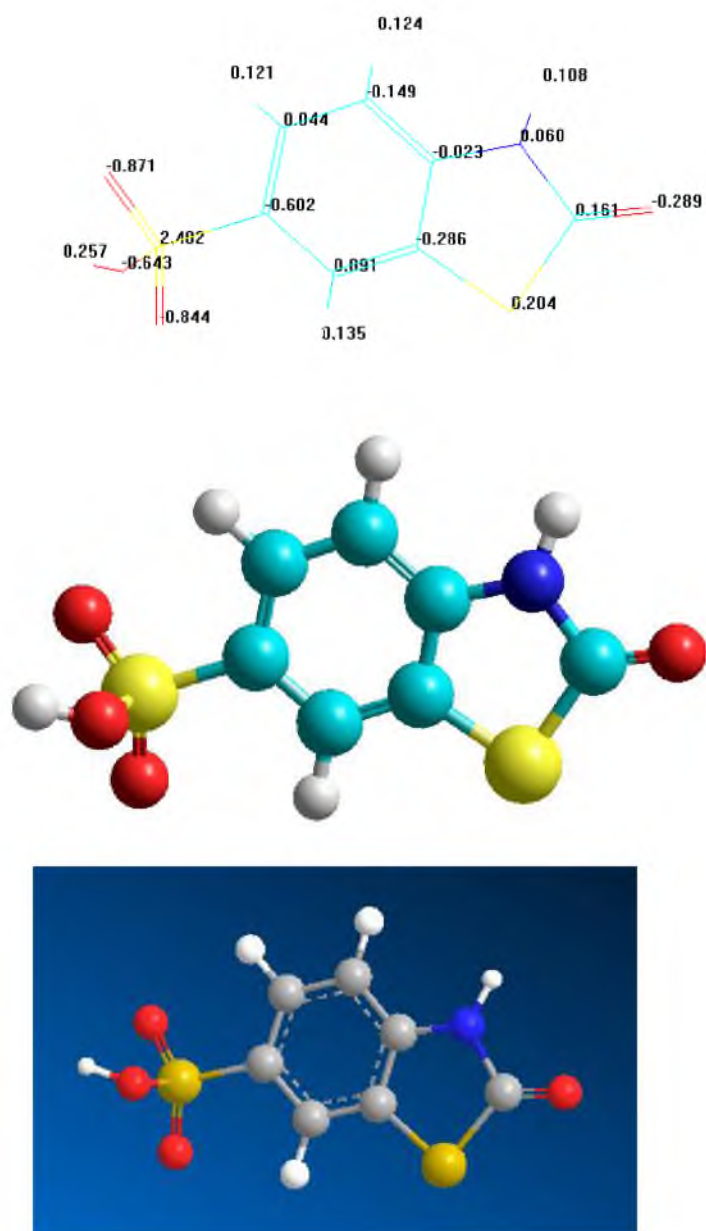
Sintez qilingan IVa,b moddalarining tuzilishi zamonaviy fizik-kimyoviy usullar yordamida o'rganildi (2-jadval). Ularning IQ-spektrlarida 6-holat SO_2 guruhining valent tebranishlariga xos yutilish chiziqlari ($1150\text{--}1200\text{ cm}^{-1}$) namoyon bo'ldi. Ularning mass-spektrlarida taklif etilgan tuzilishlarni tasdiqlovchi molekulyar ionlar va fragmentlarning cho'qqilari mavjudligi topildi.

Tadqiqotlar benzotiazolin-2-onlarni xlorulfon kislota bilan reaksiyasidan to'g'ridan-to'g'ri hosil bo'lmagan sulfokislotalarni gidrolizlash natijasida hosil qilish mumkinligini ko'rsatdi. Sintez qilingan xlorulfonilli hosilalardagi xlor atomining harakatchanligi tufayli suv ta'sirida tegishli sulfokislotalar hosil bo'lishi isbotlandi.

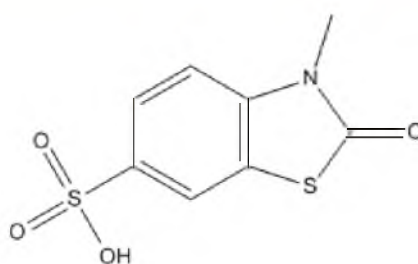
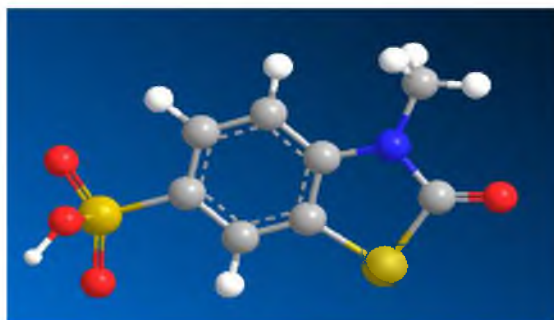
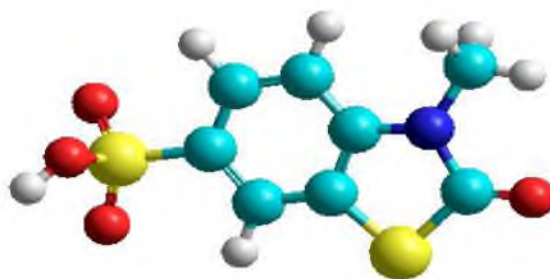
Sintez qilingan benzotiazolin-2-on-6-sulfokislota va 3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarning tuzilishini HyperChem programmasi yordamida qilingan kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasiga ko'ra molekuladagi elektron zaryadlarning taqsimlanishi va molekulaning fazoviy shakli quyidagicha tasvirga ega.

Benzotiazolin-2-on-6-sulfokislota





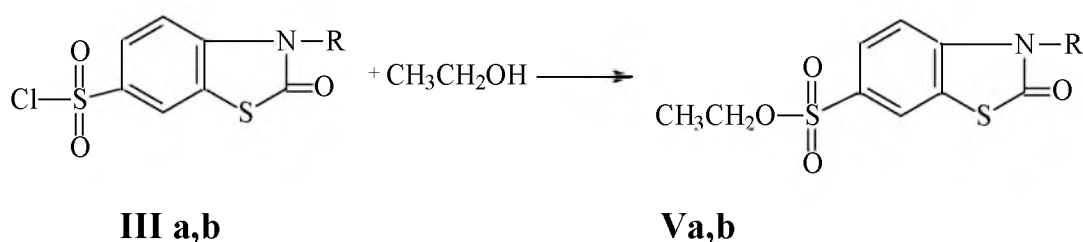
3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislota



2.4. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol bilan o'zaro ta'siri

Adabiyotlarda sulfokislotalarning efirlarini olish uchun sulfoxloridlarga spirtlar organik asoslar ishtirokida ta'sir ettiriladi [25].

6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarni (IIIa,b) etanol bilan reaksiyasi o'rganilib, benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarning etil efirlari (Va,b) yuqori unum bilan sintez qilindi. Ushbu reaksiyalarda degidrogalogenlovchi agentni ishlatishning hojatini yo'qligini 6-qlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlardagi (IIIa,b) xlor atomi geteroatomlarning ta'siri tufayli harakatchan bo'lib qolishi bilan tushuntirish mumkin (2-jadval) [28].



Benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar (IVa,b) va benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar efirlarining (Va,b), ayrim fizik-kimyoviy tavsiflari

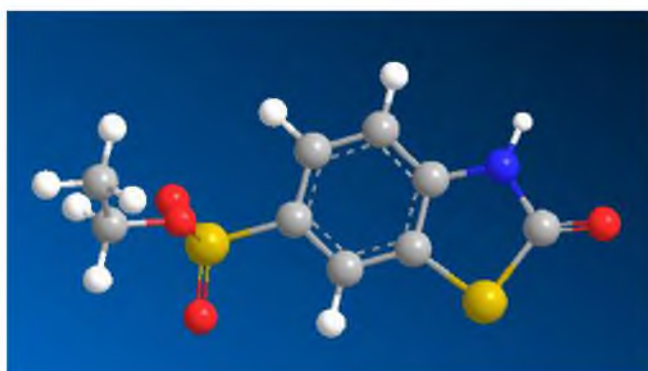
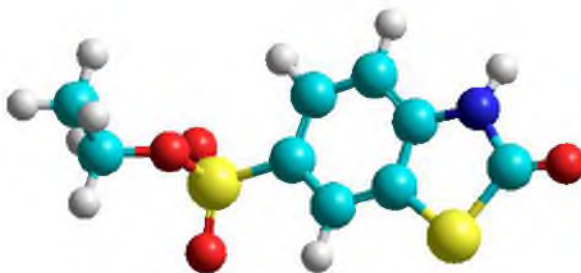
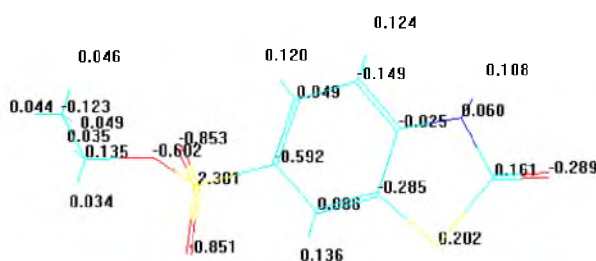
Birikma	Brutto formula	Mass-spektr, m/z, M ⁺	IQ-spektr, $\nu(\text{SO}_2)$, sm^{-1}	Suyuqlanish harorati, $^{\circ}\text{C}$	Unum, %
IVa	$\text{C}_7\text{H}_5\text{NO}_4\text{S}_2$	231	1170	238-240	91
IVb	$\text{C}_8\text{H}_7\text{NO}_4\text{S}_2$	245	1175	228-230	92
Va	$\text{C}_9\text{H}_9\text{NO}_4\text{S}_2$	259	1175	165-167	67
Vb	$\text{C}_{10}\text{H}_{11}\text{NO}_4\text{S}_2$	273	1180	156-158	68

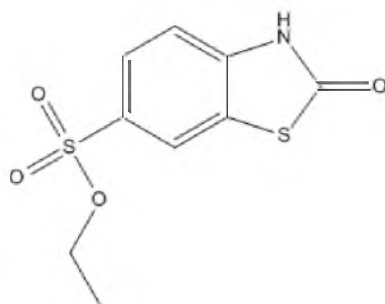
Sintez qilingan moddalarning tuzilishi zamonaviy fizik-kimyoviy usullar yordamida o'rganildi (1-jadval). Ularning IQ-spektrlarida 6-holat SO_2 guruhining valent tebranishlariga xos yutilish chiziqlari ($1150\text{-}1200\text{ sm}^{-1}$) namoyon bo'ldi. Ularning mass-spektrlarida taklif etilgan tuzilishlarni tasdiqlovchi molekulyar ionlar va fragmentlarning cho'qqilari mavjudligi topildi.

O'tkazilgan tadqiqotlar natijasida, sintez qilingan xlorosulfonilli hosilalardagi xlor atomining harakatchanligi tufayli etanol ta'sirida tegishli sulfokislotalarning efirlari hosil bo'lishi ko'rsatildi.

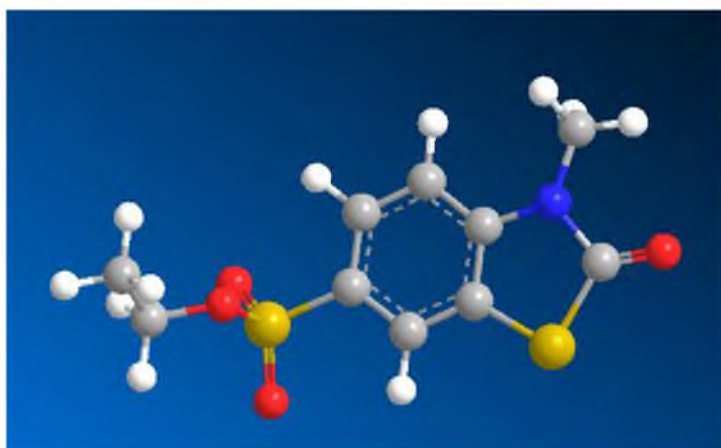
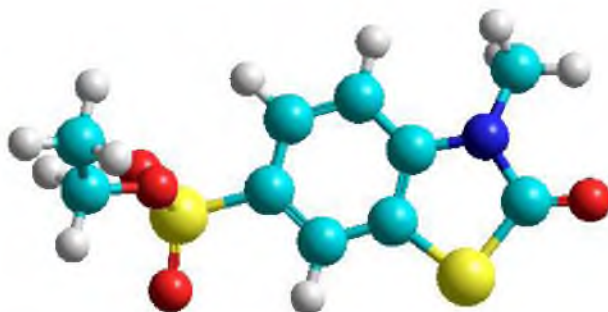
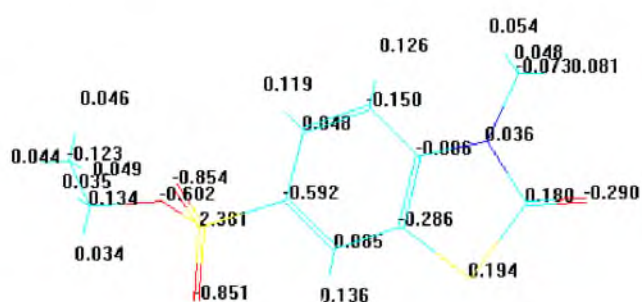
Sintez qilingan benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarning etil efirlari (Va,b) tuzilishini HyperChem programmasi yordamida qilingan kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasiga ko'ra molekuladagi elektron zaryadlarning taqsimlanishi va molekulaning fazoviy shakli quyidagicha tasvirga ega.

Benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarning etil efiri





3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislota ning etil efiri



3-BOB. TAJRIBA QISMI

Reaksiyalar borishini va moddalarning tozaligini yupqa qatlamli xromotografiya (YuQX) usuli bilan nazorat qilindi (Silufol UV-254, ochuvchi (proyavitel)–yod bug’lari yoki 1 g KMnO_4 + 4 ml kons. H_2SO_4 +96 ml H_2O).

Moddalarning IQ-spektrlari UR-20 spektrometrda KBr tabletkasida olindi.

Mass-spektrlar MS 25-RF (Kratos) spektrometri ion manbasiga namunani bevosita kiritish yo’li bilan olindi (ionlantiruvchi elektronlarning energiyasi 70eV, ion manbasining harorati 250⁰C, namunani kiritish tizimining harorati 200⁰C).

Benzotiazolin-2-on (Ia) [29] ga binoan olingan bo’lsa, uning 3-metilhosilasi [30] usul bilan olindi. Barcha foydalanilgan moddalarning tavsiflari adabiyotda keltirilganlariga mos keladi.

3.1. Dastlabki moddalar sintezi

1. Benzotiazolin–2–on (Ia).

Uch og’izli kolbaga 16,7 g (0,1 mol) benzotiazolin–2–tion (I), 8g (0,2 mol) NaOH va 250 ml suv solinib, eritma bir jinsli bo’lguncha aralashtirildi. So’ngra KMnO_4 ning 10% li 200 ml eritmasining 60 – 70⁰ C gacha qizdirilgan eritmasi ingichka oqim bilan qo’shiladi va reaksiyon aralashmaning harorati 20⁰C ga kelguncha aralashtiriladi. So’ngra hosil bo’lgan MnO_2 filtrlanib, cho’kma 3 marta qizdirilgan 150, 100 va 50 ml suv bilan yuviladi. Birlashtirilgan filtratlar HCl bilan pH 1 – 2 gacha ishlanadi va filtratni 30 % i qolguncha bug’latiladi. Ajralib chiqqan moysimon mahsulot sovutilgandan so’ng kristallanadi va 2,8 g (85 %) benzotiazolin – 2–on (Ia) olinadi, Suyuqlanish harorati 136 – 138⁰C, adabiyotda keltirilgani [29] 136 – 138⁰C.

2. 3-Metilbenzotiazolin-2-on (Ib).

Qaytarma sovitkich va aralashtirgich ulangan uch og'izli tubi yumaloq kolbada 7,55 g (0,05 mol) benzotiazolin-2-on 2 g (0,05 mol) natriy gidroksid bo'lgan 40 eritmada eritildi va 6,3 g (0,05 mol) dimetilsulfat tomchilatib quyildi. Reaksion aralashma 2 soat aralashtirildi. Hosil bo'lgan aralashma suv bilan ishlandi va cho'kma eritmada filtrlab ajratildi. 2 % li ishqor eritmasi va suv bilan neytral muhitgacha yuvildi. Ajratib olingan modda geksandan qayta kristallanib, 6,76 g (82%) 3-metilbenzotiazolin-2-on olindi. Suyuqlanish harorati 84-85 °C.

3.2. Benzotiazolin-2-onlarning xlorsulfon kislota bilan reaksiyalari

1. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-on (IIIa) sintezi.

Muzli suv yordamida 10-15 °C gacha sovutilgan 58 g (0,5 mol) xlorsulfon kislotasi ustiga aralashtirilgan holda 15,1 g (0,1 mol) benzotiazolin-2-on (Ia) oz-ozdan qo'shib borildi. So'ngra reaksiya aralashma 30 minut mobaynida xona haroratida aralashtirildi va 50-60°C da HCl ajralishi susayguncha 4 soat davomida qizdirildi. Reaksiya tugagach, aralashma muzga sekin-asta quyildi va hosil bo'lgan cho'kma filtrlab olindi, quritildi va 21g (83%) IIIa mahsulot olindi, suyuqlanish harorati 168-170°C (geptan). $C_7H_4ClNO_3S_2$.

Mass-spektr, m/z: 249/251 (M^+), 214 ($M-Cl$)⁺, 150 ($M-SO_2Cl$)⁺.

IQ-spektr, cm^{-1} : 1180 ($\nu_{SO_2} - 6$ holat), 1710 ($\nu_{CO} - 2$ holat), 3210 (ν_{NH}).

2. 3-Metil-6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-on (IIIb) sintezi.

Muzli suv yordamida 10-15 °C gacha sovutilgan 29 g (0,25 mol) xlorsulfon kislotasi ustiga aralashtirilgan holda 7,55 g (0,05 mol) 3-metilbenzotiazolin-2-on (Ib) oz-ozdan qo'shib borildi. So'ngra reaksiya aralashma 30 minut mobaynida xona haroratida aralashtirildi va 50-60°C da HCl ajralishi susayguncha 4 soat davomida qizdirildi. Reaksiya tugagach, aralashma muzga sekin-asta quyildi va

hosil bo'lgan cho'kma filtrlab olindi, quritildi va 11,46 g (87%) IIIb mahsulot olindi, suyuqlanish harorati 151-152 °S (geptan). $C_8H_6ClNO_3S_2$.

Mass-spektr, m/z: 263/265 (M^+),

IQ-spektr, cm^{-1} : 1175 (ν_{SO_2} – 6 holat), 1705 (ν_{CO} – 2 holat), 3215 (ν_{NH}).

3.3. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning suv bilan reaksiyalari

Benzotiazolin-2-on-6-sulfokislota sintezi (IVa).

Bir og'izli kolbaga 2,33 g (0,01 mol) 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-on (IIIa) va 10 ml distillangan suv solinib, aralashma 80-90°C da 2 soat davomida qizdiriladi. Eritmadan suv vakuum ostida uchirildi va qoldiq asetondan qayta kristallanib, 1,93 g (90%) benzotiazolin-2-on-6-sulfokislota (IVa) olindi, suyuqlanish harorati 175-177°C. $C_7H_5NO_5S$.

Mass-spektr, m/z: 215 (M^+).

IQ-spektr, ν , cm^{-1} : 1160 (SO_2).

3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislota (IVb) yuqorida keltirilgan usulda olindi (2-jadval).

3.4. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol bilan reaksiyalari

1)Benzotiazolin-2-on-6-sulfokislota ning etil efiri sintezi

Bir og'izli kolbada 2,5 g (0,01 mol) 6-xlorsulfonil-benzotiazolin-2-on (IIIa) va 25 ml etanol aralashmasi 70-80°C da qizdirilib, sovutildi, hosil bo'lgan kristallar filtrlanib olindi, quritildi va 1,73 g (67%) Va mahsulot olindi, suyuqlanish harorati 165-167°C (spirt). $C_9H_9NO_4S_2$.

Mass-spektr, m/z: 259 (M^+).

IQ-spektr, ν , cm^{-1} : 1175 (SO_2), 1710 (CO), 3230 (NH).

PMR-spektr, δ , m.u.: 7,23 (1H, d, 4-H), 7,76 (1H, dd, 5-H), 7,91 (1H, k.s., NH), 4,06 (2H, dd, CH_2), 1,25 (3H, t, CH_3).

2) 3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislotaning etil efiri (Vb) sintezi

Yuqorida qayd qilinganidek 2,64 g (0,01 mol) 6-xlorsulfonil-3-metilbenzoksazolin-2-on (IIIb) va 25 ml etanoldan 1,85 g (68%) Vb mahsulot olindi, suyuqlanish harorati 156-158⁰C (spirt). C₁₀H₁₁NO₄S₂.

Mass-spektr, m/z: 273 (M⁺).

IQ-spektr ν , sm⁻¹: 1180 (SO₂), 1710 (CO).

PMR-spektr, δ , m.u.: 7,13 (1H, d, 4-H), 7,86 (1H, dd, 5-H), 7,95 (1H, d, 7-H), 3,46 (3H, s, N-CH₃), 4,06 (2H, dd, CH₂), 1,25 (3H, t, CH₃).

XULOSALAR

1. Benzotiazolin-2-onlarni xlorsulfon kislota bilan reaksiyalari o'rganilib, tegishli 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlar olindi;
2. Birinchi marta 6-xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning suv bilan reaksiyalari o'rganilib, tegishli benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalar sintezi amalga oshirildi;
3. 6-Xlorsulfonilbenzotiazolin-2-onlarning etanol bilan reaksiyalari natijasida tegishli benzotiazolin-2-on-6-sulfokislotalarning efirlarini sintezi amalga oshirildi;
4. Sintez qilingan mahsulotlarning tuzilishi Hyper Chem va Chem Bio3D Ultra 11.0 programmalari yordamida kvant-kimyoviy hisoblashlar qilindi va ularning fazoviy tuzilishi, elektron zichliklari aniqlandi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. Марч Дж. Органическая химия. В 4-х т. Пер.с англ. М.: Мир. 1987. Т.2. С.340-344.
2. Ҳ.С.Тожимухамедов, Ҳ.М.Шахидоятов. Органик бирикмаларнинг тузилиши ва реакцион қобилияти. II қисм. Органик реакцияларнинг механизмлари. Т.: Абу Али ибн Сино. 2001. –с. 119-125.
3. Ахмедов Қ.Н., Йўлдошев Х.Й. Органик кимё усуллари. Ташкент: Университет. 1993. I. С.155.
4. Нейланд О.Я. Органическая химия. М.: Высшая школа. 1990. С.353-367.
5. А.Е.Агрономов. Избранные главы органической химии. М.: Химия. 1990. С.364-372.
6. П.Сайкс. Механизмы реакций в органической химии. Пер. с англ. под ред. проф. Варшавского Я.М. М.: Химия. 1977.-С.146.
7. Кери Ф., Сандберг Р. Углубленный курс органической химии. Пер. с англ. В двух книгах/Под редакцией В.М.Потапова Книга первая. Структура и механизмы. М.: Химия. 1981.С343-356.
8. Ингольд К. Теоретические основы органической химии. М.: Мир. 1973. С.228-318.
9. Беккер Г. Введение в электронную теорию органических реакций: Пер. с нем. М.: Мир. 1977. -658 с.
10. Несмеянов Н.А., Несмеянов А.Н. Начало органической химии. В 2-х т. М.: Химия. 1970. Т.2. С.149-162
11. Иванский В.И. Химия гетероциклических соединений. М.: Высшая школа. 1978. -559 с.
12. Пожарский А.Ф., Анисимова В.А., Цупак Е.Б. Практические работы по химии гетероциклов. Р.: Изд-во Ростовского университета. 1988. -158 с.
13. Тигце А., Айхер Т. Препаративная органическая химия. М.: Мир. 1959. С. 242-282.

14. Малетина И.И., Ягупольский Л.М., Федюк Д.В. Бензимидазолы с фторсодержащими заместителями // Укр. хим. журн. 1997. Т.63. №9–10. С.29–31.
15. Садиков Т., Хакимова Д.В., Нуриддинов Х.Р., Арипов Х.Н. О реакции сульфохлорирования метилового эфира бензимидазолил карбаминовой кислоты // Узб. хим. журн. 1999. №5-6. С.40-42.
16. Ташбоев Г.А., Жалолов С.С., Насыров Ч.М. Хлорангидрид 1,3-дигидро-бензо[с]тиофен-2,2-диоксид-5-сульфокислоты и некоторые его превращения // Известия АН. Тадж.ССР. ФМХГН. 1987. №1(103). С.41-45.
17. Ахмедов К.Н., Бердикулов А.Х. Сульфонилирование бензодиоксана–1,4 // Хим.природ.соедин. 1999. Спец.вып. 86-88
18. Марч Дж. Органическая химия. В 4-х т. Пер.с англ. М.: Мир. 1987. Т.2. С.340-344.
19. Цукерваник И.П. Исследования в области алкилирование ядра ароматических соединений. -Е.: Ереванский ун-т. 1955. -115 с.
20. Абдурасулева А.Р., Ахмедов К.Н., Уринов Х. Алкилирование фенолов и их эфиров // Журн. орг. химии. 1972. Т.8. №1. С.134-136.
21. Несмеянов Н.А., Несмеянов А.Н. Начало органической химии. В 2-х т. -М.: Химия. 1970. Т.2. С.149-162
22. Дж. Джоуль, К.Миллс. Химия гетероциклических соединений. М. «Мир». 2004. -728с.
23. Гиясов К., Алиев Н.А., Кадыров Ч.Ш. Алкилирование бензоксазолинонов и бензоксазолинтиона эфирами ароматических сульфокислот // Узб. хим. журн. 1978. №3. С.32
24. Душамов Д.А., Мухамедов Н.С., Алиев Н.А. Реакции бензазолин–2–онов с хлорсульфоновой кислотой и арилсульфохлоридами в условиях электрофильного замещения // Проблемы развития химии и технологии

органических соединений в Узбекистане: Сб. науч. тр. конф. Тошкент, 1998. С.1214.

25. Кост А.Н. Общий практикум по органической химии: Пер. с нем. М.: Мир. 1965. С.293.
26. Shoji Toyoshima, Nobumichi Morishita. Benzoheterocyclic compounds. III. Synthesis of benzoxazolinone and benzoxazinone derivatives // Yakugoku Zasshi. 1966. V.86. №3. P.203–209.
27. Lespagnol A., Vincent M., Lespagnol Ch. Action of benzoxazolone and its derivatives on the growth of the coli bacteria // Bull. Soc. Pharm. Lille. 1953. P.35–37.
28. Душамов Д.А., Мухамедов Н.С., Бобокулов Х.М., Алиев Н.А. Хлорсульфонилирование бензотиазолин-2-онов // Хим. природ. соед. Спец. вып. 2001. С.83-84.
29. Эфрос Л.С., Давиденко Л. Р. Получение 1-бензотиазолил-3-метил-5-пиразолона // Журн. общ. химии. 1951. Т. XXI. №7. С.2046-2050.
30. Гиясов К., Алиев Н.А., Кадыров Ч.Ш. Алкилирование бензоксазолинонов и бензоксазолинтиона эфирами ароматических сульфокислот // Узб. хим. журн. 1978. №3. С.32

I L O V A L A R

3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislolaning HyperChem programmasi yordamida kvant-kimyoviy hisoblash natijalari

HyperChem log start -- Tue May 26 13:14:47 2015.

Single Point, SemiEmpirical, molecule = (untitled).

PM3

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

RHF Calculation:

Singlet state calculation

Number of electrons = 80

Number of Double Occupied Levels = 40

Charge on the System = 0

Total Orbitals = 67

Starting PM3 calculation with 67 orbitals

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -63679.0469006 (kcal/mol)

Total Energy = -101.479008153 (a.u.)

Binding Energy = -2262.0461996 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -61417.0007010 (kcal/mol)

Electronic Energy = -339059.2099101 (kcal/mol)

Core-Core Interaction = 275380.1630095 (kcal/mol)

Heat of Formation = -46.1761996 (kcal/mol)

Gradient = 49.3639978 (kcal/mol/Ang)

MOLECULAR POINT GROUP C1

EIGENVALUES(eV)

Symmetry:	1 A	2 A	3 A	4 A	5 A
Eigenvalue:	-42.396551	-38.545627	-37.626473	-35.363479	-32.745441
Symmetry:	6 A	7 A	8 A	9 A	10 A
Eigenvalue:	-32.164911	-31.469022	-30.219352	-27.760360	-25.766712
Symmetry:	11 A	12 A	13 A	14 A	15 A
Eigenvalue:	-23.944845	-22.460790	-21.511459	-20.998407	-19.108331

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates(Angstrom)				Mass
			x	y	z		
1	6	-0.117807	-1.54776	-0.99511	-0.00587	12.01100	
2	6	0.002007	-0.36662	-1.63823	-0.00587	12.01100	
3	6	-0.052123	-1.54776	0.46194	-0.00587	12.01100	
4	6	-0.437528	0.89764	-0.89277	-0.00587	12.01100	
5	6	0.121268	0.89590	0.45037	-0.00587	12.01100	
6	6	-0.303545	-0.39296	1.12569	-0.00587	12.01100	
7	7	0.173780	-2.65353	1.21804	-0.00587	14.00700	
8	16	0.208076	-0.68758	2.87036	-0.00587	32.06400	
9	6	0.122423	-2.43949	2.53803	-0.00587	12.01100	
10	8	-0.325077	-3.31360	3.38911	-0.00587	15.99900	

11	6	-0.103742	-4.00453	0.63864	-0.00587	12.01100
12	16	1.643836	2.45249	-1.77965	-0.00587	32.06400
13	8	-0.657908	2.55045	-2.78526	-1.43474	15.99900
14	8	-0.665071	3.77665	-0.63550	-0.00587	15.99900
15	8	-0.473368	2.55045	-2.78524	1.42301	15.99900
16	1	0.125430	-2.47624	-1.54675	-0.00587	1.00800
17	1	0.119764	-0.34817	-2.71808	-0.00587	1.00800
18	1	0.149904	1.81959	1.01001	-0.00587	1.00800
19	1	0.058346	-4.13592	0.02319	0.88410	1.00800
20	1	0.093353	-4.74350	1.43990	-0.00587	1.00800
21	1	0.060090	-4.13592	0.02321	-0.89586	1.00800
22	1	0.257893	3.38434	-3.26088	1.42301	1.00800

ATOMIC GRADIENTS

Atom Z Gradients(kcal/mol/Angstrom)

		x	y	z
1	6	5.74998	-37.22759	0.19450
2	6	-50.41748	-18.31208	0.14804
3	6	-17.92211	150.84199	0.20035
4	6	14.91732	74.03799	-15.23345
5	6	51.54817	-45.31177	0.47830
6	6	-119.13696	-43.22697	0.94504
7	7	122.47637	52.58013	-0.21704
8	16	-38.32892	-0.93019	0.00020
9	6	-14.76499	-133.58936	0.19953
10	8	16.04286	-0.13127	-0.11824
11	6	1.07278	3.27804	0.05315
12	16	-113.63860	-0.01441	106.62563
13	8	6.75500	-72.74921	-124.33690
14	8	108.80917	93.08215	-12.28995
15	8	4.36745	-26.24385	41.80943
16	1	11.92175	4.85371	0.09526
17	1	-3.87740	12.84666	0.53453
18	1	-11.29970	-12.59878	-0.35474
19	1	3.35649	4.22683	-5.10641
20	1	7.96040	-2.42692	0.01200
21	1	3.37333	4.25567	5.13930
22	1	11.03508	-7.24078	1.22148

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-2.045	-0.085	1.365	2.460
sp Hybrid	-0.861	-0.992	-0.078	1.316
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.906	-1.078	1.288	3.356

HyperChem log stop -- Tue May 26 13:16:09 2015.

3-Metilbenzotiazolin-2-on-6-sulfokislota etil efirining HyperChem programmasi yordamida kvant-kimyoviy hisoblash natijalari

HyperChem log start -- Wed May 27 13:38:52 2015.

Single Point, SemiEmpirical, molecule = (untitled).

PM3

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

RHF Calculation:

Singlet state calculation

Number of electrons = 92

Number of Double Occupied Levels = 46

Charge on the System = 0

Total Orbitals = 79

Starting PM3 calculation with 79 orbitals

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -70563.0946880 (kcal/mol)

Total Energy = -112.449435249 (a.u.)

Binding Energy = -2810.0381150 (kcal/mol)

Isolated Atomic Energy = -67753.0565730 (kcal/mol)

Electronic Energy = -414122.9304064 (kcal/mol)

Core-Core Interaction = 343559.8357184 (kcal/mol)

Heat of Formation = -43.9801150 (kcal/mol)

Gradient = 43.5845398 (kcal/mol/Ang)

MOLECULAR POINT GROUP C1

EIGENVALUES(eV)

Symmetry:	1 A	2 A	3 A	4 A	5 A
Eigenvalue:	-42.349861	-38.893057	-38.430199	-35.354933	-32.709042
Symmetry:	6 A	7 A	8 A	9 A	10 A
Eigenvalue:	-32.179452	-31.923837	-31.378652	-30.148832	-27.699001
Symmetry:	11 A	12 A	13 A	14 A	15 A
Eigenvalue:	-25.727069	-23.958039	-23.067506	-22.410861	-21.526128
Symmetry:	16 A	17 A	18 A	19 A	20 A
Eigenvalue:	-20.954477	-19.122771	-18.487675	-18.024426	-17.534959

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

AO:	1 S C	1 Px C	1 Py C	1 Pz C	2 S C
	1.174490	0.990908	0.908362	1.044363	1.173328
AO:	2 Px C	2 Py C	2 Pz C	3 S C	3 Px C
	0.902856	0.979216	0.943518	1.169471	0.927509
AO:	3 Py C	3 Pz C	4 S C	4 Px C	4 Py C
	0.957198	0.999871	1.230368	1.000443	1.007790
AO:	4 Pz C	5 S C	5 Px C	5 Py C	5 Pz C
	1.197970	1.165499	0.949564	0.914981	0.850938
AO:	6 S C	6 Px C	6 Py C	6 Pz C	7 S N
	1.192772	0.977865	0.965470	1.165971	1.282159

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates(Angstrom)				Mass
			x	y	z		
1	6	-0.118122	-2.14036	-0.67669	-0.22109	12.01100	
2	6	0.001082	-0.95923	-1.31982	-0.22109	12.01100	
3	6	-0.054050	-2.14036	0.78035	-0.22109	12.01100	
4	6	-0.436572	0.30503	-0.57436	-0.22109	12.01100	
5	6	0.119019	0.30329	0.76879	-0.22109	12.01100	
6	6	-0.302077	-0.98556	1.44410	-0.22109	12.01100	
7	7	0.173999	-3.24614	1.53645	-0.22109	14.00700	
8	16	0.206726	-1.28019	3.18877	-0.22109	32.06400	
9	6	0.122590	-3.03209	2.85645	-0.22109	12.01100	
10	6	-0.103920	-4.59714	0.95705	-0.22109	12.01100	
11	8	-0.326364	-3.90621	3.70752	-0.22109	15.99900	
12	16	1.625810	1.85988	-1.46124	-0.22109	32.06400	
13	8	-0.660029	1.95785	-2.46685	-1.64996	15.99900	
14	8	-0.666904	3.18405	-0.31708	-0.22109	15.99900	
15	8	-0.420167	1.95784	-2.46682	1.20778	15.99900	
16	6	0.063921	3.19998	-3.17533	1.20778	12.01100	
17	6	-0.112385	3.28619	-4.06025	2.46520	12.01100	
18	1	0.124923	-3.06885	-1.22834	-0.22109	1.00800	
19	1	0.119619	-0.94078	-2.39966	-0.22109	1.00800	
20	1	0.150089	1.22698	1.32843	-0.22109	1.00800	
21	1	0.058142	-4.72853	0.34161	0.66888	1.00800	
22	1	0.093167	-5.33611	1.75832	-0.22109	1.00800	
23	1	0.060003	-4.72853	0.34162	-1.11108	1.00800	
24	1	0.062342	3.26099	-3.80169	0.31781	1.00800	
25	1	0.063061	4.02476	-2.46270	1.20777	1.00800	
26	1	0.057053	4.23300	-4.60031	2.46520	1.00800	
27	1	0.050211	3.22519	-3.43389	3.35517	1.00800	
28	1	0.048836	2.46142	-4.77289	2.46521	1.00800	

ATOMIC GRADIENTS

Atom	Z	Gradients(kcal/mol/Angstrom)		
		x	y	z
1	6	5.80438	-37.24863	0.16285
2	6	-50.50682	-18.42981	0.14068
3	6	-18.43534	150.95153	0.22192
4	6	15.67859	72.71292	-14.42359
5	6	51.47412	-44.84307	0.51795
6	6	-118.69864	-43.20330	0.85961
7	7	122.74390	52.04783	-0.22785
8	16	-38.31137	-0.91070	-0.00493
9	6	-14.83559	-133.09755	0.20900
10	6	1.01802	3.23021	0.06037
11	8	16.23943	-0.30540	-0.12343
12	16	-107.81700	-6.46624	111.54149
13	8	6.99619	-74.42139	-120.41258
14	8	107.61108	89.64109	-10.63564
15	8	3.79044	-18.52368	33.32673
16	6	4.98816	12.22022	-22.72924

17	6	11.43854	-19.92948	20.18114
18	1	11.90123	4.82385	0.10410
19	1	-3.88388	12.83023	0.58688
20	1	-11.33025	-12.53878	-0.31107
21	1	3.35317	4.22891	-5.09513
22	1	7.95305	-2.41966	0.01295
23	1	3.37238	4.25964	5.12972
24	1	-0.08583	6.15385	12.10594
25	1	-9.21487	-9.84120	1.42611
26	1	-3.20833	2.51160	-1.02293
27	1	-0.05591	1.44238	-7.02178
28	1	2.02115	5.12464	-4.57928

]

E=-2883.1740 kcal/mol Grad=0.163 Conv=NO(154 cycles 329 points) [Iter=1 Diff=0.00083]
 E=-2883.1745 kcal/mol Grad=0.190 Conv=NO(154 cycles 330 points) [Iter=1 Diff=0.00001]
 E=-2883.1746 kcal/mol Grad=0.182 Conv=NO(155 cycles 331 points) [Iter=1 Diff=0.00291]
 E=-2883.1732 kcal/mol Grad=0.458 Conv=NO(155 cycles 332 points) [Iter=1 Diff=0.00071]
 E=-2883.1754 kcal/mol Grad=0.104 Conv=NO(156 cycles 333 points) [Iter=1 Diff=0.00032]
 E=-2883.1756 kcal/mol Grad=0.146 Conv=NO(156 cycles 334 points) [Iter=1 Diff=0.00002]
 E=-2883.1757 kcal/mol Grad=0.085 Conv=YES(157 cycles 335 points) [Iter=1 Diff=0.00000]

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	-1.564	-1.180	1.756	2.631
sp Hybrid	-1.265	-1.201	-0.258	1.763
pd Hybrid	0.000	0.000	0.000	0.000
Sum	-2.829	-2.381	1.498	3.989

HyperChem log stop -- Wed May 27 13:42:06 2015.