

UDK 544.543(29)

GOMOVERATRILAMIN BILAN TRIPTOFAN O'RTASIDAGI KONDENSATLANISH VA SIKLLANISH REAKSIYALARINING BORISHINI KVANT-KIMYOVIY O'RGANISH

¹Ishankulov A.F., ¹Saidov A.Sh., ¹To'xtayev D.B.,

¹Muxamadiev N.Q., ¹Xolmurodov T.A.

¹Samarqand davlat universiteti, E-mail: Ishankulov-alisher@mail.ru

Annotatsiya. Gomoveratrilamin bilan triptofan o'rtasida boradigan kondensatlanish va sikllanish reaksiyalarining borishi kvant-kimyoviy, reaksiya energetik kesimlarini tuzish orqali o'rganilgan. Reaksiya mahsulotlarining strukturasi tajribaviy va hisoblangan IQ-spektrlarining moslik darajasi bo'yicha baholangan.

Kalit so'zlar: gomoveratrilamin, triptofan, kondensatsiya, siklizatsiya, kvant-kimyoviy hisoblash, energetik kesim, IQ-spektrlar.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ХОД РЕАКЦИИ КОНДЕНСАЦИИ И ЦИКЛИЗАЦИИ ГОМОВЕРАТИЛАМИНА С ТРИПТОФАНОМ

Аннотация. В работе методом квантовой химии изучены реакции конденсации и циклизации гомовератиламина с триптофаном построением энергетического профиля реакции. Структура синтезированных продуктов сравнено оценкой соответствия экспериментально полученных и расчетных ИК-спектров.

Ключевые слова: гомовератрилamin, триптофаном, конденсации, циклизации, квантово-химический расчет, энергетический профил, ИК-спектр

QUANTUM CHEMICAL STUDY THE PROGRESS OF THE REACTIONS OF CONDENSATION AND CYCLIZATION OF HOMOVERATRILAMIN WITH TRYPTOPHAN

Abstract. In the work the reactions of condensation and cyclization of homoveratrilamin with tryptophan building energy profile of the reaction have been studied by the method of quantum chemistry. The structure of the synthesized products was compared with the conformity assessment of experimentally obtained and calculated IR spectra.

Keywords: homoveratrilamin, tryptophan, condensation, cyclization, quantum-chemical calculations, the energy profile, IR spectra.

Kirish. Bugungi kunda turlicha biologik faollikni namoyon qiladigan juda ko'plab izoxinolin hosilalari ma'lum bo'lib, ularning ba'zilar klinik tekshirishlarning turli bosqichlarida bo'lsa, ba'zilar dori vositasi sifatida qo'llaniladi [1-4]. Shuning uchun ham potensial biologik faollikni namoyon qiladigan yangi izoxinolin qatori moddalarni izlashni davom ettirish maqsadga muvofiq. Shu nuqtai nazardan aromatik halqaga yangi farmakofor fragmentlarni kiritib keyinchalik ularni modifikatsiyalash,

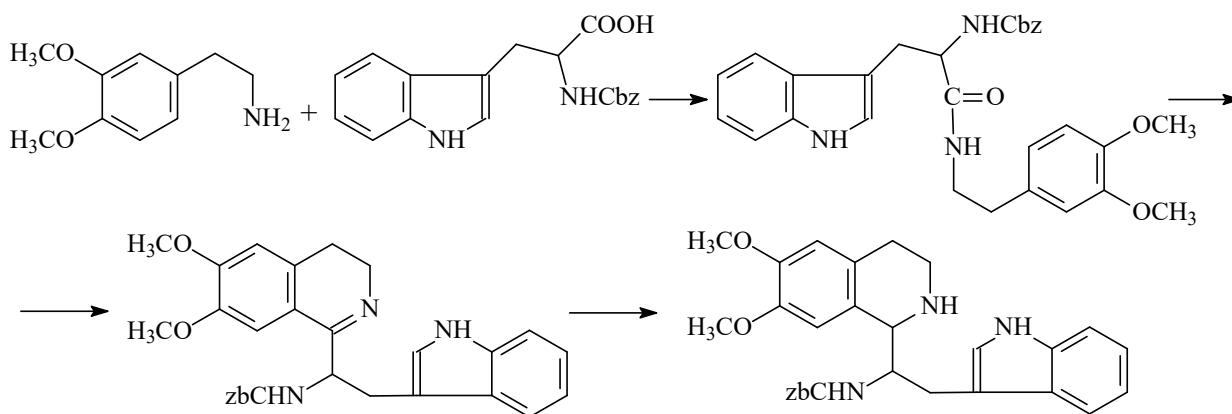
hamda aromatik yadrodagi bir yoki bir necha uglerod atomini azot atomiga almashtirish yoki bo'lmasa gomoveratrilaminning aromatik karbon kislotalar bilan kondensatlanish va sikllash reaksiyalari asosida izoxinolin hosilalarini sintez qilish borasida olib borilayotgan ishlar juda qiziq va muhimdir [5-7,10]. Shuning uchun ham oldingi ishlarda [8,9] gomoveratrilamin bilan glitsin va fenilalaninlarning kondensatlanish va sikllanish reaksiyalarining borishi abinitio usulida hisoblashlar yordamida asoslangan.

Ishning maqsadi: Gomoveratrilaminning triptofan bilan kondensatlanish va sikllanish reaksiyalari borishini kvant-kimyoviy tadqiq etish.

Tadqiqot ob'ekti: gomoveratrilamin, triptofan, kvant-kimyoviy hisoblash dasturlari, IQ-spektrlar.

Tadqiqot usullari: IQ-spektraskopiya, kvant-kimyoviy hisoblash usullari, GAUSSIAN 09 dasturi.

Gomoveratrilaminning triptofan bilan kondensatlanish va sikllanish reaksiyalari quyidagi mexanizm bo'yicha boradi:



Qayd etilgan reaksiyalarning har bir bosqichi alohida-alohida kvant-kimyoviy usulda tahlil etildi. Shu bilan bir qatorda kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida solishtirish uchun reagentlar va reaksiya mahsulotlarning IQ-spektrlari olindi.

Kvant kimyoviy hisoblarlash valent-ajratilgan VZLYP/6-31G(d,r) bazisini qo'llab, funksional zichlik usulida amalga oshiriladi [9,11].

Olingan natijalar va ularning muhokamasi. O'rganiladigan reaksiyalar reagentlar va mahsulotlar hamda energetik xarakteristikalar va reaksiya tezliklarining doimiy qiymatlari 1-jadvalda berilgan.

1-jadval

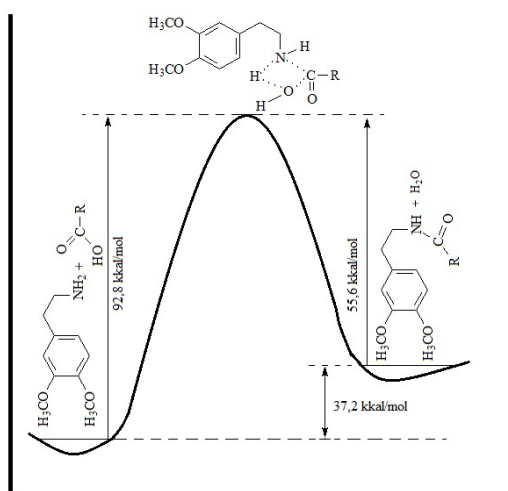
Reaksiyalarning energetik xarakterikalari va tezlik doimiysi

N	Energiya	Amin	Amid	Izoxinolin
1	$E_{el} + E_0$	-96.15	-288.49	-304.14
2	$E_{el} + E_t$	-96.85	-289.20	-321.534
3	$G = E_{el} + G_t$	-115.292	-369.45	-354.857
4	k_i	$1.56 \cdot 10^{-42}$		$2.36 \cdot 10^{-31}$

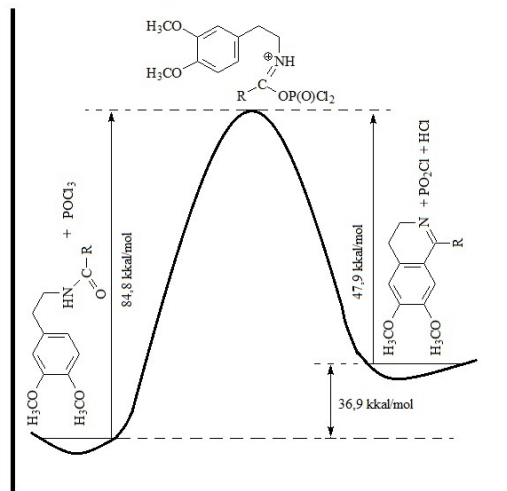
Jadvaldagi ma'lumotlardan ko'rinib turibdiki kondensatlanish reaksiyasi sikillanish reaksiyasiga qaraganda ancha qiyin boradi va ketma-ket boruvchi reaksiyada ushbu bosqich (1-chi bosqich) limitlovchi vazifasini o'taydi.

Kondensatlanish va sikillanish reaksiyalari mahsulotlarining hisoblangan va tajribada olingan IQ-spektrlarining moslik darajasi qisqa kvadratlar usulida korrelatsiya koeffitsientini hisoblash orqali baholandi. Unga ko'ra korrelatsiya koeffitsientining qiymati mos ravishda amin uchun $r = 0,9844$ amid uchun $r = 0,9954$ izoxinolin hosilasi uchun esa $r = 0,9184$ ni tashkil etdi. Bu qiymatlar hisoblangan va tajribada olingan qiymatlarni bir-biriga mosligini hamda hisoblashlarning to'g'ri bajarilganligini, hamda moddalar strukturasi to'g'ri aniqlanganligini isbotlaydi.

O'rganilgan reaksiyalarning mexanizmini kvant-kimyoviy o'rganishda TS usulida uning energetik kesimini tadqiq etish reaksiya faollanish energiyasini aniqlash no'qtaiy nazarida juda muhim. Shuning uchun ham kondensatlanish va sikillanish reaksiyalarining energetik kesimlari 1 va 2-rasmlarda berilgan.



1-rasm. Kondensatlanish reaksiyasining energetik kesimi



2-rasm. Sikillanish reaksiyasining energetik kesimi

Reaksiyalarda keltirilgan ma'lumotlardan shuni qayt etish kerakki, kondensatlanish reaksiyasi uchun ΔH 37,2 kkal/mol ni sikillanish reaksiyasi uchun esa 36,9 kkal/mol ni tashkil etadi.

Xulosalar

1. Gomoveratrilamin bilan triptofan o'rtasida boradigan kondensatlanish va sikillanish reaksiyalarining borishi kvant-kimyoviy, reaksiya energetik kesimlarini tuzish orqali o'rganilgan.
2. Reaksiya mahsulotlarining strukturasi tajribaviy va hisoblangan IQ-spektrlarining qisqa kvadratlar usulida aniqlangan moslik darajasi bo'yicha baholangan.

Adabiyotlar

1. Шкляев Ю.В. Синтез алкалоидов изохинолинового ряда // Химия и компьютерное моделирование. Бутлеровские сообщения. – № 7. – 2002. С. 21-34
2. Mixaylovskiy A.G. Cyclic azomethines and their hydrogenated derivatives // Chemistry of Heterocyclic Compounds. – 2013. – №. 5. – S. 579-604.

3. Халтурина В. В. и др. Синтез, анальгетическая и противовоспалительная активность (2Z, 5Z)-1-арил-3-гидрокси-5-(3, 3-диалкил-3, 4-дигидроизохинолин-1 (2H)-илиден) пент-2-ен-1, 4-дионов //Химико-фармацевтический журнал. – 2009. – Т. 44. – №. 11. – С. 7-9.
 4. Дормидонтов М.Ю. и др. Синтез, антиагрегантная и гипотензивная активност производных изохинолина //Химико-фармацевтический журнал. – 1990. – Т. 22. – №. 12. – С. 22-24.
 5. Saidov A.Sh., Levkovich M. G., Vinogradova V. I. Synthesis of 1-Alkyltetrahydroisoquinolines //Chemistry of natural compounds. – 2013. – Т. 49. – №. 5. – С. 897–901.
 6. Саидов А.Ш., Виноградова В.И. Синтез тетрагидроизохинолинов на основе гомовератриламина и пиридиновых кислот //Узбекский химический журнал. – 2014. – №2. – С. 16-19.
 7. Saidov A.Sh., Uzoqov J.R., Muxamadiyev N.Q., Astanova D., Vinogradova V.I. Gomoveratrilamin bilan olein kislota o'rtasidagi kondensatlanish va sikllanish reaksiyalarining borishini kvant-kimyoviy o'rganish // SamDU axborotnomasi, 2016. – N 3 (97), 146-150 betlar.
 8. Ishankulov A.F., Saidov A.Sh., To'xtayev D.B., Muxamadiyev N.Q., Vinogradova V.I. Gomoveratrilamin bilan fenilalanin o'rtasida boradigan kondensatlanish va sikllanish reaksiyalarining borishi kvant-kimyoviy o'rganish// SamDU axborotnomasi, 2017. – N 3 (102), 85-88 betlar.
 9. Ishankulov A.F., Saidov A.SH., To'xtayev D.B., Muxamadiyev A.N.,Muxamadiyev N.Q.,Study of gomoveratrilamine with glycine // international journal of engineering sciences & research technology.- (2017).-V.6.-N 8.-P. 130-34.
 10. Крилов О.В. Гетерогенный катализ. - М.: Академкнига, 2004, 679 с.
 11. Цирельсон В. Г. Квантовая химия. Молекулы, молекулярные системы и твердые тела. 2-е издание //М.: Бином. Лаборатория знаний. – 2012.
- Ish OT-F7-83 davlat granti doirasida bajarilgan.