

АЙРИМ ГИДРОКСИКИСЛОТАЛАРНИНГ МОЛЕКУЛАЛАРИДА ЭЛЕКТРОН ЗАРЯДНИНГ ТАҚСИМЛАНИШИ ВА УНИНГ МОДДАНИ ФИЗИК-КИМЁВИЙ ХОССАЛАРИГА ТАЪСИРИ

Солиев Махаммаджон Исматуллаевич

Наманган муҳандислик-технология институти

Кимё кафедраси ўқитувчиси

E-mail: muhammadbey@mail.ru

Тел: (97) 410-7006.

Нурмонов Сувонкул Эрхонович

Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети
Умумий ва ноорганик кимё кафедраси мудири, т.ф.д., профессор

E-mail: se_nurmonov@mail.ru

Тел: (93) 552-1568.

Охундадаев Абдуғани Комилжон ўғли

Наманган муҳандислик-технология институти

Кимё кафедраси ўқитувчиси, тел: (94) 172-4368

Абидов Иброхимжон

Наманган муҳандислик-технология институти

Кимё кафедраси доценти, т.ф.н. тел: (34) 498-4515

Аннотация

Ушбу мақолада айрим гидроксикислоталар: оксалат кислотаси, узум кислотаси, олма кислотаси, лимон кислоталари молекулаларида электрон заряд тақсимоти ярим эмпирик усулда HyperChem Pro дастурида ZINDO1 методи билан ҳисоблаб, аниқланган. Олинган натижалар асосида молекулаларнинг реакцион қобилияти ва айрим физик-кимёвий хоссалари ҳақида назарий хулосалар чиқарилган.

Таянч сўзлар: гидроксикислота, оксалат кислотаси, узум кислотаси, олма кислотаси, лимон кислотаси, электрон заряд тақсимоти, ярим эмпирик усул, HyperChem Pro дастури, ZINDO1 методи.

Аннотация

В этой статье был исследован некоторые гидроксикислоты: определен распределение заряда электрона в молекулах щавелевой кислоте, винной кислоте, яблочной кислоте и лимонной кислоты, полуэмпирическим методом с использованием метода ZINDO1 в программе HyperChem Pro. На основе полученных результатов были сделаны теоретические выводы об реактивной способности и некоторых физико-химических свойствах молекул.

Ключевые слова: гидроксильная кислота, щавелевая кислота, винная кислота, яблочная кислоты, лимонная кислота, распределение заряда электронов, полуэмпирический метод, программа HyperChem Pro, метод ZINDO1.

Annotation

In this article, some hydroxy acids were investigated: the electron charge distribution in molecules of oxalic acid, tartaric acid, malic acid, and citric acid was determined using the semi-empirical method using the ZINDO1 method in the HyperChem Pro program. Based on the results obtained, theoretical conclusions were made about the reactivity and some physicochemical properties of molecules.

Keywords: hydroxylic acid, oxalic acid, tartaric acid, malic acid, citric acid, electron charge distribution, semi-empirical method, HyperChem Pro program, ZINDO1 method.

Маълумки, кимёгарлар томонидан йилига 100 дан 200 минггача янги моддалар синтез қилинади, ажратиб олинади ва тавсифлаб берилади. Ушбу моддаларнинг аксарияти бирор турдаги биологик фаоллик таъсирига эга эканлигига оид дастлабки синовлардан ўтказилади. Дори моддаларига оид изланишнинг ушбу босқичи скрининг деб аталиб, бу жараён биологик лабораторияларда икки хил усулда: тирик тўқималарда, микроорганизмларда ёки тирик тўқима бўлакларида (in vitro) ва соғлом ёки махсус

касалантирилган ҳайвонлар – сичқонлар, каламушлар, денгиз чўчқалари, итлар, маймунларда (in vivo) олиб борилади. Скринингда юзлаб моддалардан энг фаол бўлган бир нечта препаратлар саралаб олинади ва чуқур текширувлар учун юборилади. Агар модданинг юқори фаоллиги тасдиқланса, унинг токсиклиги ва кўшимча эффектлари ҳар томонлама ўрганилади. Моддада бу хусусиятлар йўклиги ёки зарарсиз даражада эканлиги маълум бўлса, бемор одамларда клиник синовлар амалга оширилади. Бу босқичдан муваффақиятли ўтган моддалар саноат миқёсида ишлаб чиқарилиб, даволаш амалиётларида қўлланилади [1].

Синтез қилиб олинган янги моддаларни дастлабки синовлардан ўтказиш жуда муҳим ҳисобланади. Бугунги кунда бир неча миллион хилдаги янги моддалар синтез қилинган бўлса, таъкидлаш жоизки, биологик фаоллик ва касалликларнинг тури бир неча мингга ташкил этади. Табиийки, барча янги моддаларни керакли (фойдали) турдаги биологик ёки физиологик фаолликларини синаш имконияти етарли эмас. Шунинг учун кўплаб кимёгар ва биолог мутахассислар компьютер техникасининг беминнат ёрдамига таянмоқда. Компьютер дастурлари синтез қилинган моддаларни тажрибада синаш билан бирга уларнинг биофаоллик потенциални ЭХМ да таҳлил қилиб аниқлаш имкониятини беради. Муаммога бундай ёндошишда аввалдан маълум бўлган моддаларни тузилишига ёки намоён этувчи биофаоллик турига кўра гуруҳлаб, катта массивдаги дори моддаларини кластерли анализига асосланиш мумкин. Бундан ташқари компьютер дастурлари воситасида дори моддаларининг биорецепторлар билан таъсир механизмларини ёки “бионишон” лар билан эмпирик алоқаларини моделлаштириш мумкин. Бунда текширилувчи модданинг ўзи талаб этилмайди, балки модда ҳақидаги ахборотлар (таркиби, тузилиши) ни билиш ва уни компьютер дастурига киритишни билиш етарлидир. Таҳлилдан сўнг дастурдан олинган маълумотларга таяниб, ушбу модда бирор турдаги фаоллик учун синашга яроқли ёки яроқсизлиги ҳақида хулоса қилиш мумкин. Шунингдек, дори моддаларини аниқлашда ЭХМ лардан фойдаланиш вақтни, материалларни ва ишчи кучини тежаш билан бошқа усуллардан афзал ҳисобланади. Бироқ умуман янги турдаги фаоллик ёки доривор гуруҳларнинг аниқланиши учун узок вақт давом этувчи тажрибалар ва тадқиқотчининг интуициясига асосланилади [1, 2].

Потенциал биологик фаол моддаларни олишда кимёгарлар учун биологик фаоллик билан органик моддаларнинг кимёвий ва стереокимёвий тузилиши ўртасидаги боғлиқликни синчиклаб, чуқур текшириб, сўнгра синтезни амалга ошириш мақсадга мувофиқдир. Шу билан бирга маълум бўлган синтетик ва табиий доривор моддаларнинг тузилишини кимёвий модификациялаш орқали ҳам янги биофаол модда олиш мумкин. Бунда маълум моддаларнинг биофаоллиги янги бирикмаларга қандай узатилиши ёки қандайдир даражада ўзгариши ўрганилади. Асосан, янги бирикмаларда биофаолликнинг кучайиши кузатилади.

Ҳозирги вақтда модданинг физик-кимёвий хоссаларини олдиндан айтиш имкониятини берадиган “структура-хосса” муносабатидан кенг фойдаланилмоқда [3].

Кислота-асос (протолитик) мувозанати кимё ва биологияда энг кўп тарқалган реакция турларидан бири ҳисобланади. Кўпгина органик бирикмаларнинг кимёвий, физик-кимёвий ва биологик хоссалари уларнинг кислотали, ишқорий ёки амфотерлик хусусиятлари билан чамбарчас боғлиқ [4].

Молекуланинг асосий физик-кимёвий хоссалари – геометрик тузилиши, электрон зичлигининг жойлашуви, термодинамик ва энергетик хоссалари (энтропия, энтальпия, иссиқлик сифими, Гиббс эркин энергияси, реакция тўсиқлар ва конформацион ўзгаришлар)ни тадқиқ қилиш модданинг реакция қобилияти ва биологик фаоллигини ўрганиш ҳамда метаболик босқичлар занжирини моделлаштиришга имкон яратади [5, 6].

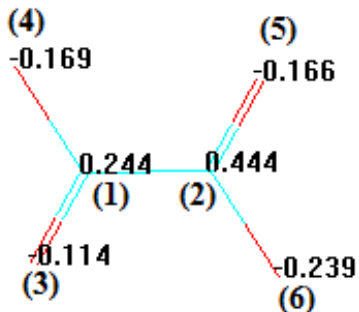
QSAR ва QSPR моделларида модданинг биологик фаоллигини баҳолаш ёки “тузилиш-хосса” муносабатида миқдорий корреляциялаш учун “drug design” топшириғи дескриптор сифатида атом зарядлари қийматидан фойдаланади. Аниқроқ айтганда, ушбу

характеристика сифатида молекуладаги атомнинг эффектив заряди (“эффектив” атомдаги ҳисоблаб топилган электрон зичлик йиғиндиси)дан фойдаланилади [7]. Молекулага бириккан (x) фрагментнинг молекула билан ўзаро электроманфийлик фарқи ундаги электрон зичликларнинг қайта тақсимланиши ҳамда нуклеофил ва электрофил соҳаларнинг пайдо бўлишига олиб келади. x -фрагмент атрофга таъсир кўрсатувчи заряд сифатида миқдорий ўлчов вазифасини бажарса, унга бошқа атом гуруҳларининг бирикиши натижасида заряднинг ўзгариши орқали бирикаётган элементнинг заряд қийматини x билан таққослаш мумкин.

Шу мулоҳазаларга асосланиб оксалат кислота – HOOC-COOH , олма кислота - $\text{HOOC-CH(OH)-CH}_2\text{-COOH}$, узум кислота - $\text{HOOCCH(OH)-CH(OH)COOH}$ ва лимон кислота $(\text{HOOCCH}_2)_2\text{C(OH)COOH}$ ларнинг электрофил ва нуклеофил қисмларини ҳисоблаб чиқамиз. Мазкур кислоталар косметологияда, тери парвариши ва шикастланган тўқималарни тикловчи воситалар сифатида кенг қўлланилади. Улардаги фаол водород атоми ҳисобига ацетилен асосида виниллаш реакцияларини бориши илмий жиҳатдан аҳамиятлидир. Ушбу ишнинг мақсади юқорида келтирилган кислоталардаги -ОН функционал гуруҳлари электроманфийликларининг сифат шкаласини аниқлашдан иборат.

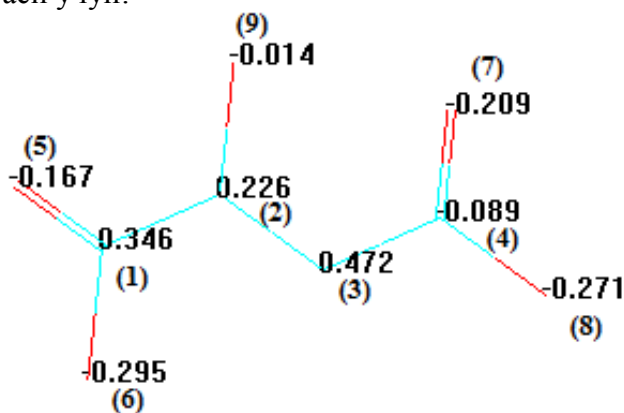
Атомларда электрон зарядининг тақсимланиши ярим эмпирик усулда HyperChem Pro дастурида ZINDO1 методи билан ҳисобланди. Гидроксил гуруҳлар электроманфийлик қийматларини сифат жиҳатдан таққослаш гуруҳдаги кислород атоми зарядларининг қиймати асосида амалга оширилди ва қуйида шаклда электроманфийлик шкаласи тузилди:

1) оксалат кислотаси учун:



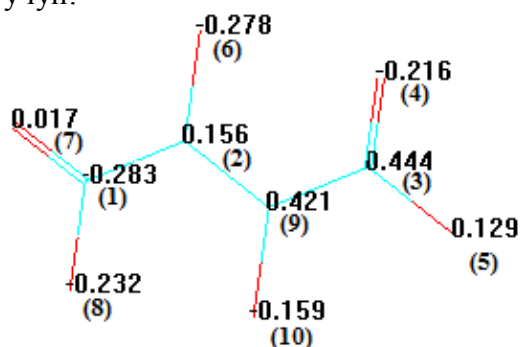
$$x=0.444 (\text{C}(2)) > x=0.244 (\text{C}(1)) > x=-0.114 (=O(3)) > > x=-0.166(=O(5)) > x=-0.169 (-O-(4)) > x=-0.239 (-O-(6))$$

2) олма кислотаси учун:



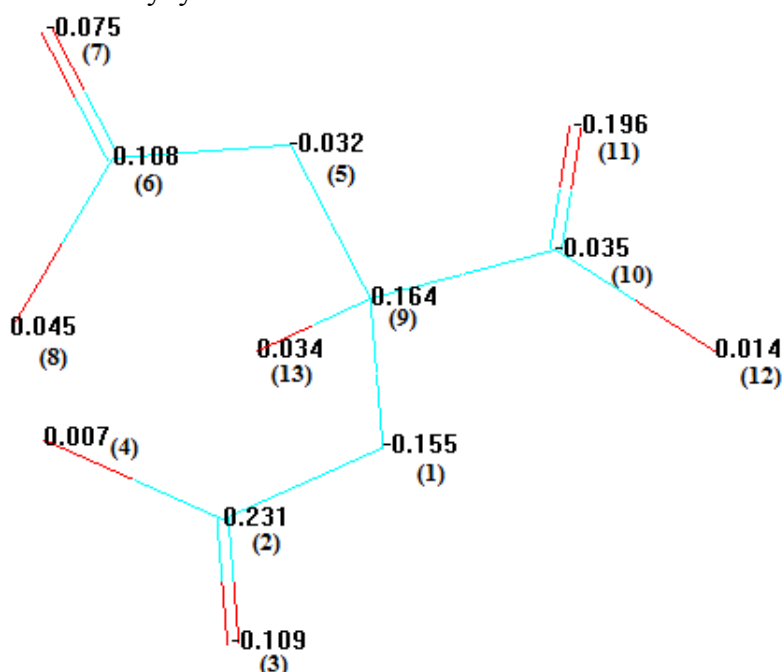
$$x=0.472 (\text{C}(3)) > x=0.346 (\text{C}(1)) > x=0.226 (\text{C}(2)) > > x=-0.014(-O-(9)) > x=-0.089(\text{C}(4)) > x=-0.167(=O(5)) > > x=-0.209 (=O(7)) > x=-0.271 (-O-(8)) > x=-0.295 (-O-(6))$$

3) узум кислотаси учун:



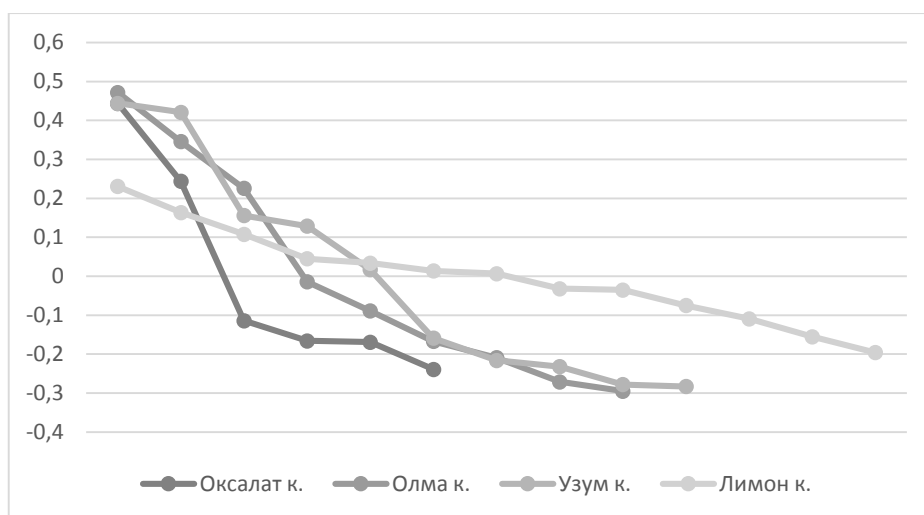
$$x=0.444 (C(3)) > x=0.421 (C(9)) > x=0.156 (C(2)) > x=0.129(-O-(5)) > x=0.017(=O(7)) > \\ x=-0.159(-O-(10)) > x=-0.216(=O(4)) > x=-0.232 (-O-(8)) > \\ > x=-0.278 (-O- (6)) > x=-0.283 (C (1))$$

4) лимон кислотаси учун:



$$x=0.231 (C(2)) > x=0.164 (C(9)) > x=0.108 (C(6)) > x=0.045(-O-(8)) > \\ > x=0.034(-O-(13)) > x=0.014(-O-(12)) > x=0.007(-O-(4)) > x=-0.032 (C(5)) > \\ > x=-0.035 (C (10)) > x=-0.075 (=O (7)) > x=-0.109 (=O (3)) > \\ > x=-0.155 (C (1)) > x=-0.196 (=O (11))$$

Ҳисоблаш натижаларидан кўринадики, молекулаларнинг нуклеофил қисмлари (манфий зарядли атомлар) қиймати олма кислотасида энг юқори даражада (-0.295) бўлиб, бу 1-углеродга бириккан –ОН гуруҳнинг кислород атомига тегишли. Энг юқори электрофил марказ ҳам олма кислотасида бўлиб, у 3-углерод атомида 0.472 ни ташкил этади. Заряд тақсимооти қийматларини таққослашни осонлаштириш учун қуйидаги графикка эътибор қаратамиз:



Юқоридаги натижалардан хулоса қилиб айтиш мумкинки, танланган бирикмаларда дипол қиймати мавжуд ва карбоксил гуруҳи сони (лимон кислотасида) ва молекуляр массаси (узум кислотасида) ортганда унинг миқдори камаяди.

Ушбу мақола ФЗ-2017101413 рақамли давлат фундаментал гранти доирасида тайёрланди.

Адабиётлар

1. А.Т.Солдатенков, Н.М.Колядина, И.В.Шендрик. Основы органической химии лекарственных веществ. –М, Химия, 2001. 192 стр.
2. В.Л.Белобородов, СЭ.Зурабян, А.П.Лузин, Н.А.Тюкавкина. Органическая химия. –М. Дрофа, 2003. 640 стр.
3. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H. B., et. al. //Gaussian 03 (Revision E0.1). - Pittsburgh PA, Gaussian Inc., 2007. 330 pages.
4. Бейдер Р. Атомы в молекулах: Квантовая теория. -Москва. Дрофа, 2001. 532 стр.
5. Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. Москва. СОЛОН-Пресс, 2005. -536 стр.
6. Нурманов С. Э., Солиев М. И., Мирхамитова Д. Х. Электронная структура ароматических ацетиленовых спиртовых и моделирование их винилирования //Современные научные исследования и инновации. Электрон. научн. журнал. – 2015. №3.
7. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование: Идеи. Методы. Примеры. //— 2-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005. - 320 с.

АЙРИМ ГИДРОКСИКИСЛОТАЛАРНИНГ МОЛЕКУЛАЛАРИДА ЭЛЕКТРОН ЗАРЯДНИНГ ТАҚСИМЛАНИШИ ВА УНИНГ МОДДАНИ ФИЗИК-КИМЁВИЙ ХОССАЛАРИГА ТАЪСИРИ

мавзусидаги мақола муаллифлари ҳақида маълумот:

1. Солиев, Муҳаммаджон Исматуллаевич. Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси ўқитувчиси.
2. Нурмонов, Суворкул Эрхонович. Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети Умумий ва ноорганик кимё кафедраси мудир, техника фанлари доктори, профессор. **Тел.:** 93-552 15 68. **e-mail:** nurmonov_se@mail.ru.
3. Охундадаев Абдуғани Комилжон ўғли, Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси ўқитувчиси

4. Абидов, Иброҳимжон. Наманган муҳандислик-технология институти Кимё кафедраси доценти.