UNIVERSUM: ХИМИЯ И БИОЛОГИЯ

Научный журнал
Издается ежемесячно с ноября 2013 года
Является печатной версией сетевого журнала
Universum: химия и биология

Выпуск: 11(89)

Ноябрь 2021

Часть 2

Москва
2021

УДК 54+57
ББК 24+28
U55

Главный редактор:

Ларионов Максим Викторович, д-р биол. наук;

Члены редакционной коллегии:

Аронбаев Сергей Дмитриевич, д-р хим. наук;

Безрядин Сергей Геннадьевич, канд. хим. наук;

Борисов Иван Михайлович, д-р хим. наук;

Винокурова Наталья Владимировна – канд. биол. наук;

Гусев Николай Федорович, д-р биол. наук;

Ердаков Лев Николаевич, д-р биол. наук;

Козьминых Владислав Олегович, д-р хим. наук;

Козьминых Елена Николаевна, канд. хим. наук, д-р фарм. наук;

Кунавина Елена Александровна, канд. хим. наук;

Левенец Татьяна Васильевна, канд. хим. наук;

Муковоз Пётр Петрович, канд. хим. наук;

Рублева Людмила Ивановна, канд. хим. наук;

Саттаров Венер Нуруллович, д-р биол. наук;

Сулеймен Ерлан Мэлсулы, канд. хим. наук, PhD;

Ткачева Татьяна Александровна, канд. хим. наук;

Харченко Виктория Евгеньевна, канд. биол. наук;

U55 Universum: химия и биология: научный журнал. – № 11(89). Часть 2. М., Изд. «МЦНО», 2021. – 92 с. – Электрон. версия печ. публ. – <http://7universum.com/ru/nature/archive/category/1189>

ISSN : 2311-5459

DOI: 10.32743/UniChem.2021.89.11-2

Учредитель и издатель: ООО «МЦНО»

ББК 24+28

© ООО «МЦНО», 2021 г.

Содержание

Математическая и квантовая химия	5
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОГО ПРЕПАРАТА ФЕНИБУТ	5
Аскарров Ибрагим Рахманович Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович Обидова Шохсанам Акрамжон кизи	
Неорганическая химия	8
СИНТЕЗ КОМПЛЕКСА НИКЕЛЯ (II) НА ОСНОВЕ БЕНЗОИЛГИДРАЗОН 3,3-ДИМЕТИЛБУТАНОНА	8
Камолова Зулхумор Кудратуллаевна Турабаева Наргиса Бекмурадовна	
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КООРДИНАЦИОННОГО СОЕДИНЕНИЯ СУКЦИНАТА НИКЕЛЯ С НИКОТИНАМИДОМ	11
Мукумова Гулвар Жумаевна Жумаева Зулхумор Эргашевна Касимов Шерзод Абдузаирович	
ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МЕТА- НИТРОБЕНЗОИЛГИДРАЗОНА ФЕРРОЦЕНОИЛАЦЕТОНА И ЕГО КОМПЛЕКСА С ИОНОМ МЕДИ(II)	15
Сулаймонова Зилола Абдурахмановна Умаров Бако Бафаевич Кодирова Зулфия Кобиловна	
ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЗАГУЩАЮЩИХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ ПЕЧАТАНИЯ ТКАНИ НА ОСНОВЕ СМЕСОВЫХ ВОЛОКОН	19
Эшдавлатова Гулрух Эшмаматовна Амонов Мухтар Рахматович Равшанов Казакмурад Асадович	
Органическая химия	24
СИНТЕЗ ПРОП-2-ИНОКСИБЕНЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ В ПРИСУТСТВИИ ПРОПАРГИЛА БРОМИДА	24
Ахтамов Дилшод Тулкинович Мухиддинов Баходир Фахриддинович Махсумов Абдулхамид Гафурович Вапоев Хуснитдин Мирзоевич Бекназаров Хасан Сойибназарович	
РЕАКЦИЯ НАТРИЕВОЙ СОЛИ АНТРАНИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ЭФИРАМИ ХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ	29
Ёдгоров Чинмурот Гуломович Холиков Турсунали Суюнович Таджимухамедов Хабибулла Сайфуллаевич	
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХЕЛАТООБРАЗУЮЩЕГО СОРБЕНТА НА ОСНОВЕ КАРБАМИДА, ФОРМАЛЬДЕГИДА И 2,4-ДИНИТРОФЕНИЛГИДРАЗИНА	33
Йулчиева Маргуба Гафуржоновна Касимов Шерзод Абдузаирович Тураев Хайит Худайназарович Турсунов Отабек Холикул угли	
ИК - СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЕРОСОДЕРЖАЩЕГО СОРБЕНТА	37
Чориева Нигора Бароталиевна Касимов Шерзод Абдузаирович, Тураев Хайит Худайназарович Худойбердиев Бахриддин Бахтиёрович	
ТЕМПЛАТНЫЙ АМИНО-ГУМИНОВЫЙ СОРБЕНТ НА ОСНОВЕ ОТХОДОВ УГЛЕДОБЫЧИ	41
Жакина Алма Хасеновна Василец Евгений Петрович Арнт Оксана Васильевна Кудрявцева Елизавета Васильевна Альжанкызы Арайлым	

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ П-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ	46
Гапуров Умурбек Улугбекович	
Ниязов Лазиз Нурхонович	
МАКРО- И МИКРОЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ НЕКОТОРЫХ ВИДОВ – PHLOMOIDES ПРОИЗРАСТАЮЩИХ В УЗБЕКИСТАНЕ	49
Хайдарова Дилрабо Рахимжоновна	
Сиддиков Гопуржон Усмонович	
Абдуллаев Шавкат Вохидович	
АМАРАНТ - ПРИРОДНЫЙ РЕСУРС, БОГАТЫЙ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ	53
Аскарлов Иброхим Рахмонович	
Юлчиева Нафиса Тожиддиновна	
Радиохимия	57
ИЗУЧЕНИЕ СТЕПЕНИ СВЯЗЫВАНИЯ РАДИОНУКЛИДА ЙОД-125 С РАЗЛИЧНЫМИ БИОЛОГИЧЕСКИМИ МАКРОМОЛЕКУЛАМИ	57
Хажиев Лазизбек Озодович	
Садиков Илхом Исмоилов	
Абдукаюмов Аюбхон Мелисович	
Усаров Зафар Омонович	
Физическая химия	61
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИНТЕЗИРОВАННЫХ СОЛЕЙ ЧЕТВЕРТИЧНОГО АММОНИЯ	61
Бурихонов Бахтиёр Холмирзаевич	
Холиков Турсинали Суюнович	
Тажимухамедов Хабибулла Сайфуллаевич	
Papers in english	70
Biological sciences	70
General biology	70
Entomology	70
CULTIVATION OF THE MEDICINAL PLANT AMARANTH AND ITS ENTOMOFAUNA	70
Nodirbek Tufliov	
Shaxodatxon Talatbek kizi Saidganieva	
Physico-chemical biology	74
Physiology and biochemistry of plants	74
THE EFFECT OF SALT STRESS AND BIOSTIMULANTS BASED ON GLYCYRRHIZIC ACID ON COTTON PHOTOSYNTHETIC PIGMENTS	74
Sanjar Navruzov	
Nigora Khashimova	
Akhunov Ali Akhunov	
Chemistry sciences	79
Bioorganic chemistry	79
COMPLEX COMPOUND OF THE MONOAMMONIUM SALT OF GLYCYRRHIZIC ACID WITH THIOUREA AND THE OF ITS TOXICITY	79
Yusuf Isaev	
Doston Egamberdiev	
Ibragim Askarov	
Sanzhar Rustamov	
Natalya Vypova	
Petrochemistry	85
PRODUCTION AND USE OF CORROSION INHIBITORS ON THE BASIS OF TWO-ATOMIC PHENOLS AND LOCAL RAW MATERIALS	85
Bobir Olimov	
Vokhid Akhmedov	
Gulnoz Gafurova	

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12465

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНОГО ПРЕПАРАТА ФЕНИБУТ*Аскарров Ибрагим Рахманович**д-р. хим. наук, профессор,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: stek@inbox.ru**Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович**PhD, доцент,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: muhamatdin@mail.ru**Обидова Шохсанам Акрамжон кизи**магистрант, кафедра Химии,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан*RESEARCH OF THE ELECTRONIC STRUCTURE
OF THE BIOLOGICALLY ACTIVE PREPARATION PHENIBUT*Ibragim R. Askarov**DSc, professor, Department of chemistry,
Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan**Mukhamatdin Kh. Mamarakhmonov**PhD, Associate professor, department chemistry,
Andijan State University
Republic of Uzbekistan, Andijan**Shokhsanam Obidova**Second course Master, Department Chemistry
Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan*

АННОТАЦИЯ

Современным методом квантовой химии изучено электронное строение препарата Фенибут, широко применяемого при нервных расстройствах живого организма. Установление реакционной способности может помочь в изучении биологической активности.

ABSTRACT

The electronic structure of the drug Phenibut, which is widely used in nervous disorders of a living organism, has been studied by the modern method of quantum chemistry. Establishing reactivity can help in the study of biological activity.

Ключевые слова: фенибут, нервные расстройства, биологическая активность, квантово-химический расчет, метод DFT-D3LYP, геометрия молекулы, электронная структура.

Keywords: phenibut, nervous disorders, biological activity, quantum-chemical calculation, DFT-D3LYP method, geometry, electronic structure.

Объектом данного исследования является Фенибут (β -фенил- γ -аминомасляная кислота) **1**, биологически активное вещество, производное γ -аминомасляной кислоты. Активен в отношении А- и В-рецепторов γ -аминомасляной кислоты, а также рецепторов фенилэтиламина [1]. Биологическая активность молекулы определяется нахождением в молекуле ароматического кольца и двух важных функциональных групп для живых организмов: карбоксильной и аминогрупп. Препарат зарегистрирован в медицинской практике как анксиолитическое и ноотропное средство; его применяют при различных нервных расстройствах, таких как беспокойство, бессонница, посттравматический стресс, депрессия, заикание и др. [1, 2].

Представляет большой теоретический интерес изучение перераспределения с высокой точностью

электронных зарядов на атомах, которое обуславливает реакционную способность вещества.

Нами использован квантово-химический метод B3LYP с базисным набором 3-21G, использованный нами ранее для исследования гетероароматических систем [3-6]. В ходе расчетов все геометрические параметры молекулы были подвергнуты полной оптимизации. Полученные численные данные представлены в тысячных единицах, для удобства сопоставления и точного вывода результатов.

Ароматическая группа в оптимизированной молекуле имеет плоскую форму, о чем свидетельствуют рассчитанные торсионные углы ароматического фрагмента. На рисунке 1, показана условная нумерация и перераспределение атомных зарядов в молекуле фенибут в схематичном виде, для удобства анализа данных.

Рисунок 1. Нумерация атомов и распределение заряда на атомах в молекуле

Например, торсионные углы углеродного скелета этой группы $\tau(\text{C6-C1-C2-C3})$, $\tau(\text{C1-C2-C3-C4})$, $\tau(\text{C2-C3-C4-C5})$ и $\tau(\text{C4-C5-C6-C7})$ соответственно равны -0.116° , -0.236° , 0.059° и 0.472° ; а также ароматические атомы водорода тоже лежат в этой

плоскости. Их торсионные углы $\tau(\text{C6-C1-C2-H})$, $\tau(\text{C1-C2-C3-H})$, $\tau(\text{C2-C3-C4-H})$, $\tau(\text{C3-C4-C5-H})$ и $\tau(\text{C4-C5-C6-H})$ соответственно равны -178.320° , 179.975° , -179.993° , -179.800° и 178.892° , которые свидетельствуют об ароматичности кольца.

Таблица 1.

Заряды на атомах, длина связей и валентные углы молекулы Фенибут

№	Атом	q, e	Длина связи	d, Å	Валентный угол	ϕ , град.
1	C1	-0.267	C1-C2	1.404	C1-C2-C3	120.709
2	C2	-0.228	C2-C3	1.398	C3-C4-C5	119.266
3	C3	-0.186	C3-C4	1.394	C5-C6-C1	120.708
4	C4	-0.188	C4-C5	1.397	C1-C7-C8	112.691
5	C5	-0.189	C5-C6	1.394	C8-C9-O10	126.538
6	C6	-0.203	C1-C7	1.538	C8-C9-O11	110.844
7	C7	-0.267	C7-C8	1.548	C7-C12-N13	120.920
8	C8	-0.469	C8-C9	1.511	C1-C2-H	120.630
9	C9	0.645	C9-O10	1.224	C2-C3-H	119.438
10	O10	-0.478	C7-C12	1.557	C5-C6-H	121.534
11	O11	-0.547	C12-N13	1.482	C1-C7-H	108.512
12	C12	-0.205	C2-H	1.082	C7-C8-H	108.124
13	N13	-0.651	C3-H	1.084	C9-O10-H	126.538
14	H2	0.192	C4-H	1.084	C7-C12-H	108.278
15	H3	0.178	C5-H	1.085	C12-N13-H	111.794

№	Атом	q, e	Длина связи	d, Å	Валентный угол	φ, град.
16	H4	0.178	C6-H	1.084		
17	H5	0.178	C7-H	1.100		
18	H6	0.226	C8-H	1.090		
19	H7	0.231	C8-H'	1.099		
20	H8	0.231	O11-H	0.999		
21	H8'	0.229	C12-H	1.106		
22	H11	0.362	C12-H'	1.094		
23	H12	0.163	N13-H	1.024		
24	H12'	0.214	N13-H'	1.023		
25	H13	0.270				
26	H13'	0.272				

Согласно табличным данным, атомы кислорода O10, O11, карбоксильной группы и атом азота N13 аминогруппы несут максимальные отрицательные

заряды равные -0.478e, -0.547e и -0.651e, соответственно.

Рисунок 2. Граничные Орбитали (ГО) молекулы

Энергия ГО Фенибута составляет: $E_{VZMO} = -0,217\text{эВ}$, $E_{HSMO} = 0,004\text{эВ}$. Энергетическая щель между ГО равна $\Delta E_{ГО} = 0,221\text{эВ} < 1\text{эВ}$. В целом, распределение зарядов (см. таблицу) и вид ГО (Рис. 2.)

указывают на высокую реакционную способность реагентов в отношении к аминогруппе и карбоксильной группам, согласно зарядового и орбитального типа контроля реакций.

Список литературы:

1. Matthew I. Hardman, Juraj Sprung, Toby N. Weingarten.// Bosnian Journal of Basic Medical Sciences. — 2019. — Vol. 19, No. 2. — С. 125–129.
2. Аскарлов И.Р., Исаев Ю.Т., Махсумов А.Г., Киргизов Ш.М. Органическая химия. / Т.: изд-во Г. Гулям. - 2012. - 608 с.
3. M.J.F. Frisch and etc. / Gaussian 98. Revision A.5, Gaussian Inc.- Pittsburg (PA), 1998.
4. И.Р. Аскарлов, Ш.М.Киргизов, М.Х. Мамарахмонов, С.А. Алимбоев. Синтез и квантово-химическое изучение реакции ацетилферроцена с изомерами аминобензойной кислоты. / Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 1(67). Стр 42-44.
5. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, А.М. Джураев, Н.Д. Чувылкин, И.Р. Аскарлов. Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 1. Реакции арилирования с аминобензойными кислотами // Изв. АН. Сер. хим. – Москва, 2017. - №4. С. 721-723.
6. М.Х. Мамарахмонов, Л.И. Беленький, Н.Д. Чувылкин, И.Р. Аскарлов Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Сообщение 2. Реакции арилирования с аминифенолами // Изв. АН. Сер. хим. – Москва, 2017. - №4. С. 724-726.

НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

 СИНТЕЗ КОМПЛЕКСА НИКЕЛЯ (II) НА ОСНОВЕ
БЕНЗОИЛГИДРАЗОН 3,3-ДИМЕТИЛБУТАНОНА

Камолова Зулхумор Кудратуллаевна

*ст. преподаватель,
Каршинский инженерно-экономический институт,
Республика Узбекистан, г. Карши
E-mail: zulxumorkamolova2277@gmail.com*

Турабаева Нургиса Бекмуродовна

*ассистент,
Каршинский инженерно-экономический институт,
Республика Узбекистан, г. Карши.
E-mail: nargisaturabayeva55@gmail.com*

 SYNTHESIS OF THE NICKEL (II) COMPLEX ON BASED
OF THE BENZOYLHYDRAZONE OF THE 3,3-DIMETHYLBUTANONE

Zulxumor Kamolova

*Teacher
of Karshi economical-engineering institute,
Republic of Uzbekistan, Karshi*

Nargisa Turabayeva

*Teacher
of Karshi economical-engineering institute,
Republic of Uzbekistan, Karshi*

АННОТАЦИЯ

В представленной статье описан синтез бензоилгидразон 3,3-диметил-бутанона и его комплекс с ионами никеля (II). Взаимодействием спиртовых растворов 3,3-диметилбутанона и бензоилгидразида в соотношении 1:1 получен лиганд. На основе этого лиганда синтезировано комплексное соединение с ионами никеля (II). Методами элементного анализа, ИК-, ¹H ЯМР-спектроскопии установлены состав и строение полученного лиганда и его комплекса (NiL₂).

ABSTRACT

This article describes the synthesis of dimethylbutanone benzoylhydrazone and its complex with nickel (II) ions. The ligand was obtained by the interaction of alcohol solutions of 3,3-dimethylbutanone and benzoylhydrazide in a 1:1 ratio. The composition and structure of the obtained ligand and ligand's complex (NiL₂). Were established by the methods of elemental analysis, IR-, ¹H NMR-spectroscopy.

Ключевые слова: темплатный синтез, бензоилгидразон, 3,3-диметилбутанон, ИК-, ¹H ЯМР-спектроскопия.
Keywords: template synthesis, benzoylhydrazone, 3,3-dimethylbutanone, IR-, ¹H NMR-spectroscopy.

Целью нашей работы является синтез лигандов HLⁿ, где HLⁿ – продукты конденсации монокарбонильных соединений с бензоилгидразидом (n = 1, 2...), их исследование спектральными методами. В предыдущих работах [5; 1] нами исследованы строение и кристаллическая структура бензоилгидразона 3,3-диметилбутанона и его комплекса с ионом никеля (II).

Комплексное соединение NiL₂ получено методом темплатного синтеза. К спиртовому раствору 2,5 г (0,01 моля) 3,3-диметилбутанона в 20 мл этанола добавляли раствор 3,4 г (0,025 моля) бензоилгидразида

в 40 мл этанола. Реакционную смесь нагревали с обратным холодильником и оставляли при комнатной температуре. Получали кристаллы бензоилгидразона 3,3- диметилбутанона. На 2,18 г полученного кристалла добавляли 30 мл спиртово-аммиачный раствор 0,88 г ацетата никеля (II). Через 2 суток отогнали часть растворителя, оставили, потом выпавшие кристаллы отделяли и высушивали в вакуум-эксикаторе (табл. 1) [5; 1]. Полученный лиганд фактически находится в форме ZE`Z``(A), ZE`E``(B) гидразона, а в реакциях комплексообразования принимает форму α-оксизина (B).

Таблица 1.

Выход и результаты элементного анализа синтезированного лиганда и комплексного соединения

Соединение	Выход, %	Найдено, %				Брутто формула	Вычислено, %			
		С	Н	Н	М		С	Н	Н	М
HL	74	71,27	8,09	12,95	–	C ₁₃ H ₁₆ N ₂ O	71,53	8,31	12,83	–
NiL ₂	20	62,89	6,79	11,81	11,51	NiC ₂₆ H ₃₄ N ₄ O ₂	63,31	6,95	11,36	11,90

Спектры ПМР раствора лиганда показывают, что он находится в линейной гидразонной структуре. В спектре ПМР раствора лиганда в DMSO-d₆ в области δ 1,88 и δ 1,07 м.д. CH₃- и C(CH₃)₃- группы дают синглетные сигналы с интенсивностью 1:3 и находятся в син-состоянии и в транс-состоянии относительно связи C=N. Одиночный сигнал в слабом поле δ 10,20 м.д. интенсивностью, равной одному протону, принадлежит протону связи N=H. Протоны фенильной группы с общей интенсивностью пять протонов дают мультиплетный сигнал в области δ 7,44 и δ 7,74 м.д.

Синтезированное комплексное соединение обладает диамагнитными свойствами. Если проанализировать спектр ПМР раствора этого комплексного соединения иона никеля (II) в DMSO-d₆, C(CH₃)₃- группы дают синглетный сигнал с интенсивностью 18 протонов в области δ 1,08 м.д. В области δ 1,87 м.д. наблюдаются синглетные сигналы CH₃-группы с интенсивностью 6 протонов. Кроме того, в области δ 7,44–7,74 м.д. протоны фенильных групп (10 H) в бензоилгидразидном фрагменте в поле дают мультиплетные сигналы. Результаты спектра ПМР показывают, что комплексное соединение имеет плоско-квадратную структуру (рис. 1).

Рисунок 1. ПМР-спектр комплексного соединения бензоилгидразона 3,3-диметилбутанона с ионами никеля (II) (DMCO- d_6)

Мы изучили структуру синтезированного лиганда с помощью физико-химических методов исследования. Линии поглощения в ИК-спектрах лиганда в областях 3215, 3225, 1630–1645, 1285–1290 и 1025–1035 см^{-1} специфичны для ν_s - и ν_{as} -колебаний связей N-H, C=N, C-N, N-N соответственно. Кроме того, в ИК-спектре лиганда в области 1660–1670 см^{-1} можно наблюдать линии поглощения, специфичные для амидной группы в гидразоновом фрагменте.

В ИК-спектре комплексного соединения NiL_2 (здесь L – бензоилгидразон 3,3-диметилбутанона)

с КВг можно наблюдать линии поглощения связи $\nu(\text{N}=\text{C}=\text{N})$ в области 1600 см^{-1} и связи $\nu(\text{C}=\text{N})$ в области 1625 см^{-1} . Слабые интенсивные линии 1548 см^{-1} характерны для валентных колебаний системы $\nu(\text{N}=\text{C}-\text{O}-)$. Слабые интенсивные линии в области 1085 см^{-1} относятся к связи $\nu(\text{N}-\text{N})$, а частоты валентных колебаний связей $\nu(\text{C}-\text{H})$ в комплексе соответствуют площадям 2975 см^{-1} .

Таким образом, при помощи ИК-, ^1H ЯМР-спектроскопии установлены и доказаны состав и строение полученного лиганда и его комплекса (NiL_2).

Список литературы:

1. Умаров Б.Б., Турсунов М.А., Минин Б.Б. Комплексы с производными кетоальдегидов и кетоэфиров. – Ташкент : Нишон-ношир, 2016. – 350 с.
2. Якимович С.И., Зерова И.В. Таутомерия в ряду ацилгидразонов ароилуксусных альдегидов // Журнал орг. химии. – 1993. – Т. 29. – № 5. – С. 905–910.
3. Якимович С.И., Зерова И.В. Таутомерия в ряду ацилгидразонов формилпинаколина // Журнал орг. химии. – 1991. – Т. 27. – № 5. – С. 959–965.
4. Якимович С.И., Николаев В.Н. Вопросы физической органической химии. – Л. : Изд. ЛГУ, 1984. – № 2. – С. 137–154.
5. ^1H NMR Spectra and Cristal Structure of the Nickel (II) Complex with Ethyl 5,5 dimethyl-2,4-Dioxohexanoate Aroylhydrazones / M.A. Tursunov, K.G. Avezov, B.B. Umarov, N.A. Parpiyev // Russian Journal of coordination Chemistry. – 2017. – Vol. 43, № 2. – P. 93–96.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ КООРДИНАЦИОННОГО СОЕДИНЕНИЯ СУКЦИНАТА НИКЕЛЯ С НИКОТИНАМИДОМ

Мукумова Гулвар Жумаевна

канд. хим. наук, доцент,
Термезский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Жумаева Зулхумор Эргашевна

канд. техн. наук, доцент,
Термезский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Термез

Касимов Шерзод Абдузаирович

канд. хим. наук, доцент,
Термезский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

SYNTHESIS AND STUDY OF THE COORDINATING COMPOUND OF NICKEL SUCCINATE AND NICOTINAMIDE

Gulvar Mukumova

Candidate of chemical sciences, associate professor,
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termiz

Zulxumor Jumayeva

Candidate of Technical Science, associate professor,
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termiz

Sherzod Kasimov

Candidate of chemical sciences, associate professor,
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termiz

АННОТАЦИЯ

В работе изучен синтез координационных соединений сукцината Ni(II) с АНК (никотинамид) и исследованы ИК спектры. Определены термические характеристики в образующихся координационных соединениях дериватографическим методом и установлена термическая устойчивость.

ABSTRACT

The paper studied the synthesis of the coordination compounds of succinate Ni(II) with ANC (nicotinamide) and investigated IR spectra. The thermal characteristics of the resulting coordination compounds have been determined by a derivative method and thermal stability has been established.

Ключевые слова: координационные соединения, никотинамид, сукцинаты металлов, ИК-спектроскопия, дериватографический анализ, термическая устойчивость.

Keywords: coordination compounds, nicotinamide, metal succinates, IR spectroscopy, derivatographic analysis, thermal stability.

Введение

В литературе встречается много данных по синтезу и исследованию координационных соединений

галогенидов, сульфатов, нитратов, роданидов, формиатов и ацетатов различных металлов с никотинамидом, где органический лиганд независимо от природы металлов, кислотных остатков и состава

комплексов проявляет монодентатный характер, координируясь через гетероатом азота пиридинового кольца. Однако сведений о комплексных соединениях никотинамида, содержащих в качестве ацида лигандов анионы дикарбоновых кислот, очень мало.

Синтез комплексных соединений сукцинатов металлов с никотинамидом, в водных и водно-органических средах не увенчался успехом. Отсутствие взаимодействия между амидами и сукцинатами металлов объясняется большим размером сукцинатного дианиона и его конкурентной способностью в координации центрального иона, а также координационной способностью молекул воды. Условия синтеза однороднолигандных комплексов пальмитатов, олеатов, стеаратов ряда 3d-металлов с ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом и никотинамидом приводятся в работах [1-10].

В ряде работ было показано, что карбамид при реакциях с кислотами выступает как основание. Исследованию реакции взаимодействия карбамида с органическими солями различных металлов и их анализу, посвящена монография К. Сулаймонкулова [14]. В настоящее время известно большое количество комплексов металлов с карбамидом, содержащих различные ацидолиганды, таких как галогениды, псевдогалогениды, сульфаты, нитраты и другие.

Целью исследования является синтез и установление строения смешанных координационных соединений сукцинатов ряда переходных металлов с амидами кислот. С этой целью предстояло решить ряд задач:

разработать условия синтеза координационных соединений сукцинатов никеля с амидами; изыскать пути синтеза новых высокоэффективных и малотоксических биоактивных соединений. При этом для объекта исследования использованы никотинамид и никотинамидные сукциаты Ni(II) в качестве органических лигандов.

В настоящей статье приводятся результаты синтеза и исследования координационного соединения сукцината никеля с АНК.

Экспериментальная часть

Для синтеза координационного соединения использовали $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, NaOH и никотиновую кислоту, марки «ч.д.а.» и «х.ч.». Тиокарбамид ($\text{CS}(\text{NH}_2)_2$) (ТК), и никотинамид ($\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$) (АНК) марки «чда» использовали в качестве лигандов. Синтез никотината металла проводили согласно [11] следующим образом: 2,47 г (0,01 моля) сукцината никеля $\text{Ni}(\text{OOC})_2(\text{CH}_2)_2$ растворяют в 100 мл воды и постепенно по порциям добавляют 2,44 г (0,02 моля) АНК. Реакционную массу нагревают при 70°C и перемешивают магнитной мешалкой в течение 4 ч. Образовавшийся осадок отделяют от маточного раствора и промывают в 40 мл этилового спирта, затем высушивают в вакуум-эксикаторе над CaCl_2 при комнатной температуре. Соединение растворимо в воде, в метаноле, в этаноле и хуже в ацетоне.

Количество металла в синтезированном соединении определяли согласно [12]. Азот определялся по микрометоду Дюма [13], углерод, водород и сера сжиганием в токе кислорода.

ИК-спектры поглощения записывали на спектрометре Specord-75 (400-4000 cm^{-1}) с использованием методики прессования в виде таблеток с KBr. Термический анализ проводили на дериватографе системы Паулик-Паулик-Эрдей [15] со скоростью 10 град/мин и навеской – 0,1г при чувствительности гальванометров Т-900, ТГ-100, ДТА-1/10, ДТГ-1/10. Запись проводили при атмосферных условиях с постоянным удалением газовой среды с помощью водоструйного насоса. Держателем служил платиновый тигель диаметром 7 мм без крышки. В качестве эталона использовали Al_2O_3 .

Результаты и их обсуждение

Результаты элементного анализа комплексов приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Результаты элементного анализа сукцинатов Ni (II) с никотинамидом

Соединение	М %		N%		С %		Н %	
	Найдено	Вычислено	Найдено	Вычислено	Найдено	Вычислено	Найдено	Вычислено
$\text{Ni}(\text{OOC})_2(\text{CH}_2)_2 \cdot 2\text{АНК}$	13,86	14,02	13,28	13,37	46,11	45,86	4,01	3,85
$\text{Ni}(\text{OOC})_2(\text{CH}_2)_2 \cdot 2\text{АНК} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	12,02	11,96	10,11	11,42	38,97	39,16	5,01	4,93

Таким образом, состав полученного соединения отвечает формуле:

Для установления способов координации никотинамида и сукцинатного дианиона исследуемого соединения изучены его ИК-спектры поглощения и для сравнения – исходных компонентов. Результаты ИК-спектров поглощений АНК (I), $\text{Ni}(\text{OOC})_2(\text{CH}_2)_2$ (II) и также $\text{Ni}(\text{OOC})_2(\text{CH}_2)_2 \cdot 2\text{АНК} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ (III) представлены в таблице 2.

Таблица 2.

**Некоторые колебательные частоты (см⁻¹) в ИК-спектрах поглощения
никотинамида, сукцината никеля и их комплексного соединения**

Отнесение к соединению	АНК	NiC ₄ H ₄ O ₄ ·2L·4H ₂ O	NiC ₄ H ₄ O ₄ ·4H ₂ O
$\nu(\text{H}_2\text{O})$	-	3405	3380
$\nu(\text{NH}_2)$	3350	3280	-
$\nu(\text{CN})$	3055	3090	3080
$\nu(\text{CH})$ сукц.	-	2970	2960
$\nu(\text{CO})$	1670	1654	-
$\nu(\text{кольца})$	1584	1591	-
$\nu_{\text{as}}(\text{COO})$	-	1560	1540
$+\delta(\text{CCN})^+$	-	1438	-
$\nu_s(\text{COO})$	-	-	1408
$\nu(\text{CH}), \delta(\text{CCH})$	-	1358	1370
$\delta(\text{CCH})$	1191	1190	1160
$\nu(\text{NH}_2)+\nu(\text{CO})$	1146	1140	-
$\nu(\text{CC})$ сукц.	928	910	935
$\nu(\text{CC}), \delta(\text{CCC})$	820	820	-
$\delta(\text{CCN}), \delta(\text{CO})$	691	743	706
$\delta(\text{CO}), \delta(\text{CNC})$	632	641	660
$\delta(\text{CO}), \delta(\text{CCC})$	500	508	520
$\nu(\text{M-O})$ сукц.	401	395	350
$\nu(\text{MN}), \delta(\text{CCC})_{\text{св}}$	-	-	-
$\delta(\text{CCC})_{\text{св}}$	-	235	235
$\delta(\text{M-C})$	220	215	215

При сравнении ИК-спектров поглощения некоординированного АНК и его комплекса с сукцинатом никеля видно, что частоты валентных колебаний связи N—H повышены по сравнению со свободным лигандом, в области полос поглощения «амид-1» существенных изменений не наблюдается. Следовательно, исключается координация лиганда через атом кислорода карбонильной и азота аминной групп [16, 17, 18]. Следует полагать, что АНК координирован через гетероатом азота пиридинового кольца. В таком случае должны повышаться частоты ν_{C} . В спектре свободного никотинамида указанные частоты отмечаются при 1584 см⁻¹, которые в случае комплекса сдвинуты на 4 см⁻¹ в высокочастотную область. Другие полосы при 1024 и 700 см⁻¹, относящиеся к колебаниям кольца, расщеплены и появляются высокочастотная компонента. В низкочастотной области спектра комплекса проявляется несколько частот в виде полос, плеч и перегибов, из них в области 240—265 см⁻¹ преимущественна связь Ni ← N / и полосы в районе 340—390 см⁻¹ соответствуют валентному колебанию связей металл — кислород сукцинатной группы. Эти изменения могут свидетельствовать о координации АНК с ионом никеля через атом пиридинового кольца.

Для установления термического поведения синтезированного комплекса мы провели дериватографическое исследование на дериватографе системы Паулик — Паулик — Эрдей (Венгрия).

На кривой нагревания комплекса Ni(OOC)₂(CH₂)₂·2АНК·4H₂O наблюдается эндоэффекты при 124, 170, 295, 353°C и экзоэффекты при 375, 430, 455°C. Первые два эффекта обусловлены ступенчатым удалением 4 молекул воды с образованием безводного комплекса. Природа последующих термоэффектов связана с разложением координированного никотинамида горением продуктов термолитиза с образованием оксида никеля.

Заключение

Сукцинатный дианион в зависимости от состава комплексов проявляя себя би- или тетраденатным с мостовым способом координации. Молекула АНК в комплексе никеля (II) выступает в роли моноденатного лиганда, координируясь через гетероатом азота. Комплексы АНК разлагаются со ступенчатым удалением органического лиганда. Стабильность термолитиза соединений существенно зависит от способа координации амидолигандов, центрального иона и характера строения. Показано, что деаквации соединений сопровождается повышением денатности сукцинатного дианиона.

Список литературы:

1. Азизов О.Т. Комплексные соединения пальмитатов, олеатов, стеаратов ряда 3d-металлов с некоторыми амидами // Дис....канд. хим. наук.- Ташкент: 2006. - 168 с.
2. Азизов О.Т, Исмаилов Д.Н, Шарипов Х.Т. Комплексные соединения олеата никеля (II) с некоторыми амидами кислот // Химия и химическая технология. - Ташкент, 2004. -№3-4. -С.50-52
3. Азизов О.Т. Комплексные соединения пальмитата цинка с некоторыми амидами // Фарм. журн.,- Ташкент, 2004.-№3- С. 42-44.
4. Азизов О.Т, Шарипов Х.Т. Координационные соединения стеарата кобальта (II) с некоторыми амидами // Узб. хим. журн.-Ташкент, 2004.-№6.- С. 3-6.
5. Азизов О.Т., Азизов Т.А., Шарипов Х.Т. Координационные соединения стеарата меди (II) с некоторыми амидами кислот // Химия природ. соедин. - Ташкент, 2002. -спец. вып.- С. 64-65.
6. Азизов О.Т., Комплексные соединения пальмитатов, олеатов, стеаратов ряда 3d-металлов с некоторыми амидами // Сборник тезисов научной конференции посвященной памяти академика С.Ю Юнусова: Тез.докл.-Т., 2005.-С. 49.
7. Азизов. О.Т., Мелдебекова С.У., Азизов Т.А. Смешанные амидокарбоксилатные координационные соединения ряда металлов // Тр. Междунар. Конф. Посвящ. 50-летию ОшГУ и 60-летию акад. Б.М. Мурзубраимова. -Ош, 2000.-С. 15-17.
8. Азизов. О.Т, Мелдебекова С.У, Азизов Т.А. О возможности использования карбоновых кислот для очистки сточных вод от ионов тяжелых металлов // Матер.междунар.науч-техн.конф. «Наука, образование, -производство в решении экологических проблем»: Тез.докл. -Уфа, 2002. - С. 255-257.
9. Azizov O.T., Meldebekova S.U., Azizov T.A. About the opportunity of using carbon acids for sewage treatment from ions of heavy metals // Coordination chemistry division of inorganic chemistry. The 228th ACS National meeting. Philadelphia, august 22-26. 2004. P. 459.
10. Азизов О.Т, Шарипов Х.Т, Азизов Т.А. Синтез и исследование координационных соединений солей жирных кислот с некоторыми амидами // Химическая наука и технология в Узбекистане: Тез.докл. Респ. научно-практической конф. 28-29 ноябрь 2002.- Ташкент, 2002.- С. 62-63.
11. Азизов О.Т. Комплексные соединения пальмитатов, олеатов, стеаратов ряда 3d-металлов с некоторыми амидами: Дис....канд. хим. наук.- Ташкент: 2006. - 168 с.
12. Пришибл П. Комплексоны в химическом анализе. - Москва: ИЛ. 1960. -72 с.
13. Климова В.А. Основы микрометода анализа органических соединений. - М.: Химия, 1967. - 19 с.
14. Сулайманкулов К. Соединений карбамида с неорганическими солями //Фрунзе:Илим. -1976. -223 с.
15. Paulik F., Paulik J., Erdey L. Derivatograph. I Mitteilung Ein automatisch registrierender Apparat zur gleichzeitigen Auswertung der Differential — thermogravimetrischen Untersuchungen // Z. Anal. Chem. 1958. V. 160. № 4. — P. 241–250.
16. Мукумова Г.Ж. Синтез и исследование координационных соединений сукцинатов некоторых 3d- металлов с амидами // Автореф. дис..... канд. хим. наук. - Ташкент. 1999. - С. 35-38.
17. Мукумова Г.Ж.,Чориева Н.Б.,Зарипова Р.Ш.,Абдувалиева М.Ж.Аллабердиев Ф.Х. Исследование координационные соединения Fe(II), Co (II), Ni (II) и Cu (II) сукцинатов с формамидом // Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. - 2018.- № 5 (47). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/5848>
18. Синтез и свойства координационные соединения Cu (II), Ni (II), Co (II) и Zn (II) ацетамида // Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. Мукумова Г.Ж. [и др.]. 2019. № 6 (60). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/7431> (дата обращения: 16.10.2021).

**ТЕРМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МЕТА- НИТРОБЕНЗОИЛГИДРАЗОНА
ФЕРРОЦЕНОИЛАЦЕТОНА И ЕГО КОМПЛЕКСА С ИОНОМ МЕДИ(II)****Сулаймонова Зилола Абдурахмановна***ст. преподаватель**Бухарского государственного университета,**Республика Узбекистан, г. Бухара**E-mail: sulaymonovaza@mail.ru***Умаров Бако Бафаевич***д-р хим. наук, профессор**Бухарского государственного университета,**Республика Узбекистан, г. Бухара**E-mail: umarovbako@mail.ru***Кодирова Зулфия Кобировна***ст. преподаватель**Бухарского государственного университета,**Республика Узбекистан, г. Бухара**E-mail: godirovazulfiya@mail.ru***THERMAL BEHAVIOR OF FERROCENOYLACETONE META-NITROBENZOYLHYDRAZONE
AND ITS COMPLEX WITH COPPER(II) ION****Zilola Sulaymanova***Senior Lecturer**of Bukhara state University,**Uzbekistan, Bukhara***Bako Umarov***Professor, doctor of chemical sciences**of Bukhara state University**Uzbekistan, Bukhara***Zulfiya Kodirova***Senior Lecturer**of Bukhara state University,**Uzbekistan, Bukhara***АННОТАЦИЯ**

Синтезирован комплекс меди(II) состава $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ на основе конденсации ферроценоиلائцетона с гидразидом мета-нитробензойной кислоты. Изучены термостабильные свойства полученных лиганда – мета-нитробензоил-гидразона ферроценоиلائцетона и его комплекса.

Из полученных термограмм видно, что наиболее существенные изменения массы для лиганда - производного ферроцена - бензоилгидразона ферроценоиلائцетона (H_2L) происходят при $T_{d,\text{max}}=260^\circ\text{C}$, когда скорость потери массы достигает максимальной величины, а для комплекса $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ аналогичная температура составляет – 180°C . Определены энергии активации для лиганда H_2L и его комплекса $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$, которые равны 36,32 кДж/моль, 5,367 кДж/моль, соответственно.

ABSTRACT

A copper (II) complex with the composition $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ was synthesized based on the condensation of ferrocenoylacetone with meta-nitrobenzoic acid hydrazide. The thermal properties of the obtained ligand-meta-nitrobenzoylhydrazone ferrocenoylacetone and its complex were studied.

From the obtained thermograms, it is clearly seen that the most significant mass changes for the ligand-ferrocene derivative-meta-nitrobenzoylhydrazone ferrocenoylacetone (H_2L) occur at $T_{d,\text{max}}=260^\circ\text{C}$, when the mass loss rate reaches its maximum value, and for the $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ complex, a similar temperature is 180°C .

Ключевые слова: лиганд, комплекс, термический анализ, дериватограмма, энергия активации.

Keywords: ligand, complex, thermal analysis, derivatogram, activation energy.

Производные ферроцена, особенно β -дикарбонильные соединения, привлекают внимание исследователей, так как подобные соединения характеризуются рядом важных преимуществ в практике применения. Практическое значение этих соединений подчеркивается особой ролью комплексов гидразонов в составе противоопухолевых антивирусных, антибактериальных, антиканцерогенных и канцеропрокторных агентов [1-3].

Нами взаимодействием спиртового раствора *мета*-нитробензоилгидразона ферроценоилацетона (H_2L) водно-аммиачным раствором ацетата меди(II) в соотношении 1:1 получен комплекс $CuL \cdot NH_3$ [4, 5].

На рис. 1-2 показаны экспериментальные кривые дифференциального термического анализа (ДТА), термогравиметрии (ТГ) и термогравиметрии по производной (ТГП) исходных веществ – лиганда H_2L (рис.1) и его комплекса $CuL \cdot NH_3$ (рис. 2)

Результаты термического анализа показывают, что термическое разложение H_2L и его комплекса $CuL \cdot NH_3$ происходит ступенчато в несколько стадий, с разложением веществ, одновременным выгоранием органической части молекулы, окислением продуктов разложения и формированием оксидов металлов [6-9].

При рассмотрении термограммы лиганда H_2L (рис.1) на кривой ТГП в интервале температур от комнатной до $120^\circ C$ можно увидеть первую стадию потери масс и составляют 7,8% от исходной.

Анализ дериватограммы комплекса $CuL \cdot NH_3$ показал, что термическая деструкция органической части молекулы начинается при $100^\circ C$ и заканчивается $800^\circ C$.

Рисунок 1. Термограмма *мета*-нитробензоилгидразона ферроценоилацетона

Вторая стадия потери массы на кривой ТГП обозначается в интервале температур $120-340^\circ C$. На термограмме лиганда в этой области обнаружены эндоэффекты и потери массы до 41% относящиеся к отщеплению ароматического радикала от молекулы лиганда. Следующие кривые с эндотермическим явлением происходят вследствие потери массы при

разрушения дикетонных фрагментов при температуре $280^\circ C$. Участок теплового сканирования в отрезке температур 200 до $340^\circ C$ на всех двух термограммах характеризуется очень резкими изменениями. Нижняя крайняя точка пика при $260^\circ C$ соответствует максимальной скорости потери массы (табл. 1).

Таблица 1.

Данные анализа параметров стадий термической деструкции исследованных образцов

№	Наименование образца	Температурный интервал (по стадиям), $^\circ C$	Величина потери массы, %	Температура максимальной скорости потери массы, $^\circ C$
1	H_2L	20-120	7,8	120
		120-340	41	200, 260
		340-600	59,4	400, 460
2	$CuL \cdot NH_3$	20-100	8,3	100
		100-220	20,1	180
		220-640	70,6	250, 320

Третья стадия потерь охватывает интервал температур 340-600°C, обусловленная потерями (59,4÷70,6%), связанными с процессами горения.

Иное термическое поведение наблюдается при нагревании комплекса $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ (рис.2). Судя по

кривой ТГП, термическое разложение комплекса происходит тоже в три стадии, но в отличии от лиганда H_2L , в других температурных интервалах: $\Delta T_1=20\div100^\circ\text{C}$, $\Delta T_2=100\div220^\circ\text{C}$, $\Delta T_3=220\div640^\circ\text{C}$ (табл. 1).

Рисунок 2. Термограмма комплекса $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$

На кривой ДТА $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$ отмечается четыре экзотермических эффекта при 200, 295, 380, 820 и три эндотермических эффекта при 215, 340, 638°C. Природа термических эффектов связана разложением органической части комплекса, горением продуктов термораспада и образованием оксидов меди(II) и Fe(III).

По набору имеющихся экспериментальных данных есть возможность оценки термической стабильности исследованных объектов двумя разными способами: во-первых, по характеристическим температурам T_{10} , T_{20} , T_{50} и во-вторых, по значениям энергии активации термоокислительной деструкции (табл. 2).

Таблица 2.

Сравнительные результаты оценки термостойкости изученных образцов по характеристическим температурам и активационным параметрам

№	Наименование образца	Характеристическая температура, °C			Энергия активации, кДж/моль	Коэффициент корреляции R^2	°C
		T_{10}	T_{20}	T_{50}			
1	H_2L	230	255	435	36,32 5,348 74,94	0,9905 0,9365 0,9807	100-120 330-350 580-600
2	$\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$	150	230	380	5,367 18,52 2,079	0,9999 0,9672 0,9983	40-60 330-350 530-550

Если производить оценку термической стабильности образцов по характеристическим температурам,

то термическая стабильность лиганда H_2L выше, чем его комплекса $\text{CuL}\cdot\text{NH}_3$.

Список литературы:

1. L.V. Snegur, Yu.S. Nekrasov, N.S. Sergeeva, Zh.V. Zhilina, V.V. Gumenyuk, Z.A. Starikova, A.A. Simenel, N.B. Morozova, I.K. Sviridova, V.N. Babin. Ferrocenylalkyl azoles: bioactivity, synthesis, structure. Appl. Organomet. Chem. **2008**, 22, 139-147.
2. L.V. Popova (Snegur), V.N. Babin, Yu.A. Belousov, Yu.S. Nekrasov, A.E. Snegireva, N.P. Borodina, G.M. Shaposhnikova, O.B. Bychenko, P.M. Raevskii, N.M. Morozova, A.I. Ilyina, K.G. Shitkov. Antitumor effects of binuclear ferrocene derivatives. Appl. Organometal. Chem. **1993**, 7, 85-94.
3. Умаров Б.Б., Сулаймонова З.А., Тиллаева Д.М. Синтез лигандов на основе производных ферроцена с гидразидами моно- и дикарбоновых кислот // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 3(69). -С. 19-22 URL: <http://7universum.com/ru/nature/archive/item/8966>

4. Умаров Б.Б., Сулаймонова З.А., Тиллаева Д.М. Комплексные соединения переходных металлов на основе конденсации производных ферроцена с гидразидами карбоновых кислот. Научный вестник Наманганского государственного университета, 2020.- Выпуск: 9. - С. 58-63.
5. Кукушкин Ю.Н., Ходжаев О.Ф., Буданова В.Ф., Парпиев Н.А. Термолиз координационных соединений. – Ташкент: Фан. 1986 -198 с.
6. Топор Н.Д., Огородова Л.П., Мельчанова Л.В. Термический анализ минералов и неорганических соединений. – М.: МГУ. 1987. -190 с.
7. Юнусов Т.К., Зайнутдинов У.Н., Утениязов К.У., Салихова Ш.И. Кимёда физикавий усуллар. Учебное пособие. – Ташкент: Университет. – 2007. -331 с.
8. Уэндландт У. Термические методы анализа. /Пер. с англ. – М.: Мир, 1978. – 528 с.

ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЗАГУЩАЮЩИХ КОМПОЗИЦИЙ ДЛЯ ПЕЧАТАНИЯ ТКАНИ НА ОСНОВЕ СМЕСОВЫХ ВОЛОКОН

Эшдавлатова Гулрух Эшмаматовна

ассистент кафедры Общей химии
Каршинского инженерно-экономического института,
Республика Узбекистан, Кашкадаринская область, г. Карши
E-mail: ziyotax2020@mail.ru

Амонов Мухтар Рахматович

д-р техн. наук, проф. кафедры Общей и неорганической химии
Бухарского государственного университета,
Республика Узбекистан, Бухарская область, г. Бухара

Равшанов Казакмурад Асадович

канд. хим. наук, доц. кафедры Общей и неорганической химии
Бухарского государственного университета,
Республика Узбекистан, Бухарская область, г. Бухара

STUDY OF RHEOLOGICAL PROPERTIES OF THICKENING COMPOSITIONS FOR FABRIC PRINTING ON THE BASIS OF MIXED FIBERS

Gulrukh Eshdavlatova

Assistant of the Department of General Chemistry,
Karshi Engineering Economic Institute,
Uzbekistan, Bukhara region, Bukhara

Mukhtar Amonov

Doctor of Technical Sciences,
Professor of the Department of General and Inorganic Chemistry,
Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara region, Bukhara

Kazakmurad Ravshanov

Candidate of Chemical Sciences,
Associate Professor of the Department of General and Inorganic Chemistry,
Bukhara State University,
Uzbekistan, Bukhara region, Bukhara

АННОТАЦИЯ

Изучено влияние компонентов композиции на реологические свойства загущающих систем. Определено влияние времени варки на электрокинетический потенциал, на степень связывания загустки. Установлено влияние природы компонентов на степень связывания активного красителя 5СХ загущенными полимерными композициями.

ABSTRACT

Studied the rheological properties of thickening compositions depending on the constituent components of the composition. The influence of the cooking time on the electrokinetic potential, on the degree of binding of the thickener was determined. The effect of the nature of the components on the degree of binding of the active dye 5CX by thickened polymer compositions was established.

Ключевые слова: композиция, окисленный крахмал, полиакриламид, загуститель, время варки, краситель, набивка ткани, модификация.

Keywords: compositions, oxidized starch, polyacrylamide, thickener, cooking time, dye, fabric stuffing, modification.

Одной из основных экономических реформ, проводимых в Узбекистане, является развитие предприятий текстильной промышленности и производство недорогой продукции на основе переработки местного сырья. В стадии отделки ткани, т.е. при набивке узора на ткань, в качестве загустителя применяются дорогостоящие компоненты, такие, как соли альгиновой кислоты, полипринт, эмпринт, что приводит к резкому повышению стоимости готовой продукции. В целях решения этой задачи, разработка технологии получения загущающей композиции на основе местного сырья – окисленного крахмала, полиакриламида (ПАА) и К-4, и применение их в текстильной промышленности в процессе отделки смесовых волокон в качестве загустителя печатных красок является актуальной проблемой [1-3].

В данной статье приводятся результаты исследований реологических свойств загущающих

полимерных композиций, предназначенных для печатания тканей на основе смесовых хлопковых и нитронных волокон.

Изучено влияние компонентов загущающих композиций на реологические свойства композиции в зависимости от их концентрации. Полученные данные приведены в табл.1.

Из полученных данных (табл.1) видно, что с возрастанием количества ПАА в составе окисленного крахмала его вязкость, степень тиксотропного восстановления, предел текучести существенно изменяются.

При добавлении 1,0 % полиакриламида по отношению к массе окисленного крахмала при концентрации 5 % его вязкость составляет 83,4 Па·с; при увеличении концентрации окисленного крахмала до 6% вязкость композиции повышается и становится равной 85,9 Па·с.

Таблица 1.

Изменение реологических свойств загущающие композиции в зависимости от концентрации ОК и ПАА.

Содержание К-4 во всех опытах составляло 1,5%

Окисленный крахмал, %	ПАА (от веса крахмала, %)	Степень тиксотропного восстановления, %	Предел текучести, Р _m , г/см ²
5	0,5	81,6	54,76
5	1,0	83,4	51,48
5	1,5	84,7	50,72
5	2,0	86,3	43,65
6	0,5	83,6	49,74
6	1,0	85,9	46,37
6	1,5	88,7	41,28
6	2,0	89,6	34,63
7	0,5	87,8	43,82
7	1,0	91,2	40,64
7	1,5	93,4	32,25
7	2,0	97,6	27,41

При изучении зависимости степени тиксотропного восстановления и предела текучести загущающих композиций, в зависимости от концентрации составляющих установлено, что увеличение концентрации компонентов композиции способствует увеличению степени тиксотропного восстановления, и она достигается до 97,6 %. А в свою очередь предел текучести композиции уменьшается от 54,76 г/см² до 27,41 г/см².

Таким образом, установлено, что в результате разработки нового состава загущающей композиции ее физико-химические и реологические свойства по отношению к загустителям, содержащих крахмал, карбоксиметилкрахмал и Na-KMЦ становятся высокими.

По отношению к загустителям альгината натрия и солвизоты реологические свойства разработанной композиции становятся близкими. При добавлении к раствору 6,0%-ного окисленного крахмала 1,0 %-ной ПАА раствор имеет более высокую вязкость, при этом степень тиксотропного восстановления составляет 85,9 %, а предел текучести – 46,37 г/см².

На основе полученных данных, возникает возможность применения разработанной композиции в качестве загустителя печатных красок в текстильной промышленности для набивки смесовых тканей.

Для приготовления загущающей композиции исключительно важную роль играет такой показатель, как продолжительность разварки. С целью установления оптимального времени варки были использованы следующие характеристики разработанной загустки:

- степень расщепления окисленных крахмальных зерен;
- динамическая вязкость;
- динамическая устойчивость структуры (ДУС);
- электрокинетические свойства;
- степень связывания активного красителя.

Химическая модификация окисленного крахмала, с целью снижения его способности взаимодействовать с активными красителями, основана на придании коллоидным частицам загустки отрицательного электрокинетического потенциала путём модификации поверхности частиц окисленного крахмала ПАА и препаратом К-4.

Электрокинетические свойства коллоидных частиц в загустке определялись на установке, по общеизвестной методике [6]. Для измерения электрокинетического потенциала в ходе разварки отбирались пробы, которые разбавлялись горячей водой (80-90 °С) для предотвращения слипания частиц, после чего эти растворы охлаждались, и измерялась скорость перемещения заряженных частиц окисленного крахмала в направлении положительного электрода.

На рис.1 представлена зависимость ξ -потенциала частиц окисленного крахмала от времени варки. Наличие отрицательного заряда на поверхности коллоидных частиц вызывает электростатическое отталкивание отрицательно заряженных молекул красителя, что обуславливает снижение способности крахмала связывать активные красители. Для оценки степени связывания активных красителей разработанными составами загустки была использована методика окрашивания плёнок загущающих композиций.

Рисунок 1. Влияние времени варки на электрокинетический потенциал загущающей композиции

Концентрация окисленного крахмала, % масс.: 1- 5, 2- 6 и 3- 7.
 Концентрация ПАА 1,0 % от веса окисленного крахмала

Рисунок 2. Влияние времени варки на степень расщепления модифицированной загустки

Концентрация окисленного крахмала, % масс.: 1- 5, 2- 6 и 3- 7
 Концентрация ПАА 1,0% от веса крахмала.

Рисунок 3. Влияние времени варки на степень связывания модифицированной загустки

Концентрация окисленного крахмала, % масс.: 1- 5, 2- 6 и 3- 7

Концентрация ПАА 1,0 % от веса крахмала

В таблице 2 приведены значения степени связывания красителя активного красного 5 СХ и значения ξ -потенциала загущенными полимерными композициями.

Таблица 2.

Влияние природы компонентов на степень связывания активного красителя загущенными полимерными композициями

Концентрация окисленного крахмала, %	Модификатор	Концентрация модификатора, % (от веса крахмала)	Степень связывания красителя, %	ξ-потенциал, мВ
5	ПАА	0,5	28,5	14,23
		1,0	25,7	14,87
		1,5	23,8	15,64
		2,0	22,6	15,87
	Препарат К-4	0,5	29,1	13,87
		1,0	27,2	14,12
		1,5	25,9	14,68
		2,0	24,7	15,03
6	ПАА	0,5	29,7	15,47
		1,0	26,3	15,83
		1,5	24,6	16,41
		2,0	23,8	16,77
	Препарат К-4	0,5	31,6	14,28
		1,0	29,4	14,67
		1,5	26,8	15,06
		2,0	25,4	15,27
Базовая немодифицированная загустка (9 масс. % окисленного крахмала)			56,6	7,84

Следует отметить, что степень связывания активного красителя может определяться также присутствием некоторых катионов в системе. Так, например, несмотря на высокую концентрацию окисленного крахмала в загустке, степень связывания активного красителя низкая, а ξ -потенциал высокий. Это можно объяснить тем, что отрицательный заряд на поверхности окисленных крахмальных зерен нейтрализуется присутствием положительно заряженного катиона, который способен координационно связываться с амидными группами. Данные таблицы дают основания заключить, что введение фосфатных групп позволяет придать коллоидным частицам загустки отрицательный потенциал, и тем самым снизить ее способность связывать активный краситель.

Из представленных данных (табл. 2) видно, что введение ПАА и препарата К-4 в состав окисленного крахмального клейстера приводит к значительному снижению степени связывания активного красителя (в среднем в 2 раза). По-видимому, этот экспериментальный факт можно объяснить неравномерностью распределения модификаторов в объеме и наличием элементов структуры с повышенным их содержанием. Это связано с тем, что при гетерогенной низкотемпературной модификации окисленного крахмала лимитирующей стадией является диффузия реагентов, а глубокого проникновения реагентов можно добиться лишь при длительном проведении процесса модификации и дробном многократном введении модификатора [4-5].

В нашем случае, образующиеся загущающие композиции при гетерогенной модификации окисленного крахмала, в основном, локализованы на поверхности и приповерхностном слое зерен окисленного крахмала. Готовая загустка – это микрогетерогенная система, в которой коллоидно-дисперсная фаза распределена в растворе молекулярно растворенной фракции окисленного крахмала. Дисперсная фаза

образована как фрагментами разрушенных зерен окисленного крахмала, так и нерасщепленными зёрнами. Эти частицы за счёт возникновения электростатического барьера исключаются из взаимодействия с отрицательно заряженными молекулами активного красителя. Исключаются из взаимодействия и макромолекулы молекулярно растворенной фракции окисленного крахмала, продиффундировавшие в раствор из приповерхностных слоёв набухших зерен при заварке. На рисунках 1, 2 и 3 представлена зависимость ξ -потенциала, степени расщепления и степени связывания активного красителя от времени варки для разработанной загущающих систем. Как видим из рисунков 1, 2 и 3 вначале с увеличением времени варки происходит увеличение ξ -потенциала и уменьшение способности загустки связывать краситель, что, по-видимому, обусловлено продолжением процесса модификации и в приповерхностном слое. После 30 минут варки начинается резкий рост степени расщепления зерен окисленного крахмала. После достижения степени расщепления окисленного крахмала 80-85 % скорость этого процесса снижается, что связано с неоднородностью окисленного крахмала и наличием трудно расщепляемой фракции. При достижении степени расщепления крахмала, превышающей 80-85 %, ξ -потенциал коллоидных частиц не увеличивается и становится постоянной величиной, а способность окисленного крахмала взаимодействовать с активным красителем вновь начинает увеличиваться. Это можно объяснить тем, что с увеличением расщепления окисленных крахмальных зерен увеличивается доля частиц, способных взаимодействовать с активным красителем. Таким образом, с точки зрения способности связывать активный краситель оптимальным временем варки является 30-40 минут, при котором достигается степень расщепления 80-85 %.

Список литературы:

1. Михайловская А.П., Серова Н.Е., Калугина М.С. Крашение целлюлозных текстильных материалов активными красителями // Инновации молодежной науки: тез. докл. Всерос. науч. конф. молодых ученых. – СПб.: ФГБОУ ВПО «СПГУТД», 2014. – С. 208-209.
2. Третьякова А.Е., Сафонов В.В., Юсина А.Ю. Исследование процессов крашения полиуретановых волокон красителями различных классов // Химические волокна. – 2012. – № 5. – с. 24-27.
3. Михайловская А.П., Калугина М.С., Серова Н.Е., Киселев А.М. Разработка интенсифицированных технологий крашения хлопчатобумажной пряжи активными красителями // Современные тенденции развития химии и технологии полимерных материалов: тез. докл. Междунар. науч. конф. – СПб: СПГУТД, 2015. – С. 130-131.
4. Захарченко А.С., Козлова О.В. Перспективы использования отечественных полимеров в отделке текстиля: сб. тез. докл. междунар. научно-практ. конф. «Текстильная химия – 2011», ИХР РАН, Иваново, 2011. – С. 83-84.
5. Ниёзов Э.Д., Шарипов М.С., Амонов М.Р., Абдиева Ф.И. Новый загуститель на основе карбоксиметилкрахмала и водорастворимых полимеров для набивки хлопчатобумажных тканей // Пластические массы. – Москва, 2010. – № 11. – С. 48-50.
6. Щукин Е.Д., Перцов А.В., Амелина Е.А. Коллоидная химия. – М.: Высш. шк., 2006. – С. 139 – 154, 172 – 190.

ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

СИНТЕЗ ПРОП-2-ИНОКСИБЕНЗОЛА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ
В ПРИСУТСТВИИ ПРОПАРГИЛА БРОМИДА**Ахтамов Дилишод Тулкинович**

докторант кафедры “Химическая технология”
Навоийского государственного горного института,
Республика Узбекистан, г. Навои
E-mail: dilshod.axtamov.89@mail.ru

Мухиддинов Баходир Фахриддинович

д-р хим. наук, проф. кафедры “Химическая технология”,
Навоийский государственный горный институт,
Республика Узбекистан, г. Навои

Махсумов Абдулхамид Гафурович

проф. кафедры “Химическая технология переработки нефти и газа”, д-р хим. наук
Ташкентского химико-технологического института,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Вапоев Хуснитдин Мирзоевич

зав. кафедры “Химическая технология”, д-р техн. наук
Навоийского государственного горного института,
Республика Узбекистан, г. Навои

Бекназаров Хасан Сойибназарович

д-р техн. наук,
Ташкентский научно-исследовательский институт химической технологии,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

SYNTHESIS OF PROP-2-INOXIBENZENE AND ITS DERIVATIVES
IN THE PRESENCE OF PROPARGIL BROMIDE**Dilshod Akhtamov**

Doctoral student of the Department of Chemical Technology
Navoi State Mining Institute,
Republic of Uzbekistan, Navoi

Bakhodir Mukhiddinov

Professor of the Department of Chemical Technology,
Doctor of Chemical Sciences, Navoi State Mining Institute,
Republic of Uzbekistan, Navoi

Abdulhamid Makhsuov

Professor of the Department of Chemical Technology of Oil and Gas Processing,
Doctor of Chemical Sciences,
Tashkent Chemical-Technological Institute,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Khusnitdin Vapoev

Professor of the Department of Chemical Technology,
Doctor of Chemical Sciences,
Navoi State Mining Institute,
Uzbekistan, Navoi

Hasan Beknazarov

Doctor of Technical Sciences,
 Tashkent Scientific Research Institute of Chemical Technology,
 Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Различно замещенным производным фенола и анилина дали возможность взаимодействовать с пропаргилбромидом в присутствии соли K_2CO_3 и ацетона в качестве растворителя. Производные фенола дали хорошие выходы по сравнению с производными анилина. Поскольку апротонные полярные растворители благоприятствуют реакциям типа S_N2 , ацетон обеспечивает лучшую сольватацию для реакций.

ABSTRACT

Variously substituted phenol and aniline derivatives were allowed to react with propargyl bromide in the presence of K_2CO_3 base and acetone as solvent. The phenol derivatives gave good yields compared to the aniline derivatives. Since aprotic polar solvents favor S_N2 -type reactions, acetone provides better solvation for reactions. K_2CO_3 has proven useful for synthesis.

Ключевые слова: пропаргилбромид, катализатор, температура, ацетон, анилин, растворитель, концентрация, диметилформамид, диметилсульфоксид, ЯМР, ИК-спектроскопия.

Keywords: propargyl bromide, catalyst, temperature, acetone, aniline, solvent, concentration, dimethylformamide, dimethyl sulfoxide, NMR, IR spectroscopy.

Введение

Пропаргилбромид находит применение в качестве алкилирующего агента для введения пропаргильной группы в молекулы различных соединений, в синтезе Гриньяра и т.д. Он служит важным исходным материалом для производства различных биологически активных веществ, ингибиторов коррозии металлов и средств защиты растений [1].

Известен способ получения пропаргилбромида из пропаргилового спирта и трибромида фосфора в присутствии пиридина. В присутствии полученного пропаргилбромида можно проводить синтез проп-2-инооксибензольных соединений. Проп-2-инооксибензол является важным соединением с широким спектром синтетических применений [2]. Синтетические методы органической химии показывают, что алкиновые группы являются наиболее реакционноспособными, т.е. образующееся соединение важно для получения различных сложных органических продуктов. Структура проп-2-инооксибензола, в основном, обнаруживается в соединениях, имеющих медицинское значение, особенно имеющих противомикробное значение. Основная цель настоящей работы синтез производных проп-2-инооксибензола с использованием известных методик [3–6], и

определение оптимальных критериев протекания реакции - выбор растворителя, концентрации оснований, установок и условий синтеза.

Экспериментальная часть

Синтез фенилпропаргилового эфира

(I)-метод: 0,01 моль (0,94 г) фенола добавляли к 0,013 моль (1 мл) пропаргилабромида и 0,02 моль (2,76 г) K_2CO_3 в ацетоне (15 мл). Реакцию проводили при 80 °С в течение 5 часов, и полученные результаты проверяли с помощью тонкослойной хроматографии. По завершении реакцию смесь охлаждали до комнатной температуры и растворитель удаляли при низком давлении. Остаток растворяли в дистиллированной воде и для экстракции использовали смесь 60 мл гексана и 40 мл этилацетата. Органический слой отделяли и сушили безводным сульфатом магния. Растворитель удаляли при низком давлении с получением желаемого продукта. Полученные продукты представляли собой бесцветную жидкость проп-2-инооксибензол (2а) 1,17 г (выход 89%), 4-бромпроп-2-инооксибензол (2б) светло-желтую жидкость 1,92 г (выход 91%). Побочные продукты образуются 11% 2-пропаргилфенола и 9% 4-бром-2-пропаргилфенола и бромоводород.

(II)-метод: 0,02 моль (1,88 г) фенола и 0,035 моль (1,4 г) NaOH смешивали в 10 мл чистого ДМФА при комнатной температуре в течение примерно 1 часа. Постепенно добавляли к смеси 0,053 моль (4 мл) пропаргилбромид в течение примерно 15 минут. Реакционную смесь нагревали при 45 °С в атмосфере азота в течение 8 часов. Окончание реакции контролировали с помощью ТСХ, и время реакции варьировалось в зависимости от состояния продукта. По завершении реакции растворитель удалили при низком давлении. Остаток растворили в воде, органический слой разделили на две части. Избыток воды удалили, добавляя $MgSO_4$. Растворитель удалили при низком давлении. Полученные продукты представляли собой бесцветный или светло-желтый проп-2-иноксибензол (2a) 2,16 г (выход 82%), 4-бром-проп-2-иноксибензол (2b) 3,67 г (выход 87%).

Мы кратко описали синтез проп-2-иноксибензола и 4-бром-проп-2-иноксибензола в присутствии пропаргилбромид при различных условиях реакции. В приведенных условиях синтез названных соединений проводится впервые. Полученные продукты являются готовыми ингибиторами коррозии металлов. Мы подобрали оптимальные условия процесса относительно по температуры, растворителей, оснований и концентраций для синтеза соединений (2a-3b). Было обнаружено, что последовательное добавление различных оснований, солей и растворителей способствует хорошему количественному выходу (73-91%) синтезированных соединений.

Физико-химический анализ синтезированного арилпропаргилового эфира

Температуру плавления определяли с использованием прибора для определения точки плавления Buchi B 540. Спектры ЯМР регистрировали на спектрометре JNM-ECZ400R (Jeol, Япония) при рабочей частоте 400 МГц для 1H в растворе $CDCl_3$. В качестве внутреннего стандарта в спектрах 1H ЯМР использовали TMS (0 м.д.). В спектрах ЯМР ^{13}C в качестве внутреннего стандарта использовался химический

(III)-метод: К раствору фенола 0,02 моль (1,88 г), в диметилсульфоксиде (20 мл) добавили $NaHCO_3$ 0,022 моль (1,84 г), перемешивали в течение 30 минут при комнатной температуре. К реакционной смеси добавили пропаргилбромид 0,022 моль (2 мл) в диметилсульфоксиде (5 мл) и перемешивали реакционную смесь в течение 6 часов при температуре 50 °С. Смесь разбавили холодной водой (50 мл) и экстрагировали гексаном (три раза по 10 мл). Органическую фракцию промывали водным раствором $NaHCO_3$ (2 г на 20 мл воды), сушили Na_2SO_4 , растворитель удаляли на ротонном испарителе, остаток сушили в вакууме до постоянной массы. Получали 2,4 г (выход 73%) чистого проп-2-иноксибензола (3a) и 3,3 г (выход 78%) 4-бром-проп-2-иноксибензола (3b) в виде бесцветных или светло-желтых жидкостей. Побочные продукты представляют собой 27% 2-пропаргилфенол и 22% 4-бром-2-проп-2-инилфенол и бромоводород.

сдвиг $CDCl_3$ (77.16 м.д. относительно ТМС). Химический сдвиг дан в м.д. и константа взаимодействия в Гц.

Для колоночной хроматографии использовали силикагель (70–230 меш) и силикагель (230–400 меш). Контроль синтеза осуществляли с помощью ТСХ с использованием карт Merk Silicagel 60PF254. Соединения визуализировали УФ-лампой (254, 365).

Полученный продукт определяли с привлечением спектральных данных ЯМР. Полное отнесение спектров ЯМР 1H и ^{13}C было выполнено с использованием 1D- и 2D-ЯМР спектров (проп-2-иноксибензол) в случае 2a. В частности, спектры проп-2-иноксибензола (2a) подтверждают предложенную структуру. Сигналы протонов H-8 и H-8', генерируемые при 4.616 и 4.609 м.д., связаны с метиленовым углеродом (C-8) при 55.801 м.д. Кроме того, связь между сигналами протонов H-2 и H-6 в спектре проп-2-иноксибензола при 6.898–6.920 м.д. и сигналами протонов H-3 и H-5 при 7.164–7.254 м.д. подтверждает предложенную структуру. Другие корреляции также согласуются со структурой проп-2-иноксибензола.

Рисунок 1. Спектр ^1H ЯМР синтезированного проп-2-иноксибензола Рисунок 2. Спектр ^{13}C ЯМР синтезированного проп-2-иноксибензола

Ниже приводится общая сокращенная форма спектра ЯМР продукта.

Спектр ЯМР проп-2-иноксибензола (2a)

Бесцветная жидкость, М.р. 28 °С, 89% Yield, ¹H-NMR (400 MHz, CDCl₃): δ=6.89-6.92 (d, J=2.4 Hz, 1H-Ar), 7.16 (п, 1H-Ar), 7.21-7.25 (d, J=8.7 Hz, 1H-Ar), 4,61 (d, J=2.4 Hz, 2H-CH₂), 2.44 (t, 1H-acetylene). ¹³C-NMR (100 MHz, CDCl₃+CD₃OD): δ= 157.6, 129.6, 121.6, 114.9, 75.5, 55.8.

Заключение

Мы изучен синтез проп-2-инооксибензола и его галогенированных соединений, эффективных для получения ингибиторов коррозии металлов.

Использование нескольких методов помогло сравнить условия реакции и выбрать наилучший из них.

Нами показано, что синтез проп-2-инооксибензола и его производных следует проводить в присутствии карбоната калия, который обеспечивает вывод из зоны реакции бромистого водорода. В качестве растворителя следует использовать растворитель апротонного полярного типа – ацетон, способствующий протеканию реакций SN2-типа.

Список литературы:

1. Юсупов Д., Кадыров Х.И., Нигмонходжаев Н.А., Керемьяцкая Л.В. “Синтез и исследование свойств новых ингибиторов коррозии”. // Узбек. Журн. нефти и газа, 2006, №1, 40-42-с.
2. “Process for producing propargyl bromide” Inventors: Christopher L. Mero, State College, PA (US); Hassan Y. Elnager, Baton Rouge, LA (US); Robert C. Herndon, Jr., Baton Rouge, LA (US). Date of Patent: US 2004/0044259 A1 Mar. 4, 2004
3. Pal M, Parasuraman K, Yeleswarapu KR (2003) “Palladium-catalyzed cleavage of O/N-Propargyl protecting groups in aqueous media under a copper-free condition”. Organic Letters 5: 349–352.
4. Samai S, Nadi GN, Singh MS (2010) “An efficient and facile one pot synthesis of propargylamines by three-component coupling of aldehydes, amines and alkynes via C-H activation catalyzed by NiCl₂”. Tetrahedron Letters 51: 5555–5558.
5. Сычева Е.С., Асылханов Ж.С., Сактаганов А.Е., Курманкулов Н.Б., Ержанов К.Б. Синтез и химические модификации 1,5-ди(проп-2-иноокси)нафталина // Материали за VI Международна научна практична конференция «Новини за модерна наука – 2010». София, 17-25.2010. «Бял ГРАД-БГ» ООД – Т. 19. – С. 11-14.
6. Хамраев К.Ш., Гуро В.П., Махсумов А.Г., Мухиддинов Б.Ф., Умрзаков А.Т. “Разработка ингибитора коррозии углеродистой стали на основе пропаргилового спирта” Материалы международной научно-технической конф “Горно-металлургический комплекс: достижения, проблемы и современные тенденции развития”, г. Навои, 2015 г., 19-21 ноября, 367-с. 6.

РЕАКЦИЯ НАТРИЕВОЙ СОЛИ АНТРАНИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ЭФИРАМИ ХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Ёдгоров Чинмурот Гуломович

докторант

Национального университета Узбекистана им. Мирзо Улугбека,

Республика Узбекистан, г. Ташкент

E-mail: Chinmurot-chem@mail.ru

Холиков Турсунали Суюнович

д-р хим. наук, доцент

Национального университета Узбекистана им. Мирзо Улугбека,

Республика Узбекистан, г. Ташкент

E-mail: t.Xoliqov@nuu.uz

Таджимухамедов Хабибулла Сайфуллаевич

канд. хим. наук, доцент.

Национального университета Узбекистана им. Мирзо Улугбека,

Республика Узбекистан, г. Ташкент

E-mail: habibulla44@mail.ru

REACTIONS OF ANTHRANYLIC ACID SODIUM SALT WITH CHLOROACETIC ACID ESTERS

Chinmurot Yodgorov

Base doctoral student,

National University of Uzbekistan,

Uzbekistan, Tashkent

Tursunali Xoliqov

Doctor of chemical sciences, dosent,

National University of Uzbekistan,

Uzbekistan, Tashkent

Habibulla Tadjimukhomedov

Candidate of Chemical Sciences, dosent,

National University of Uzbekistan,

Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Реакции нуклеофильного замещения алифатических и ароматических эфиров монохлоруксусной кислоты натриевой солью антраниловой кислоты проводили в присутствии апротонного растворителя диметилформамида. В результате реакций были получены сложные эфиры антраниловой кислоты, содержащие две сложноэфирные связи. Строение полученных эфиров подтверждено методами ИК- и ^1H ЯМР-спектроскопии, изучены их физические свойства.

ABSTRACT

The reactions of nucleophilic displacement with aliphatic and aromatic esters of monochloroacetic acid of the sodium salt of anthranilic acid were carried out in the presence of an aprotic solvent DMF. As a result of the reactions, esters of anthranilic acid were obtained containing two ester bonds. The structure of the esters obtained was confirmed by IR and ^1H NMR spectroscopy, and their physical properties were studied.

Ключевые слова: антраниловая кислота, алкилгалогениды, сложные эфиры, нуклеофильное замещение, диметилформамид.

Keywords: anthranilic acid, alkyl halides, esters, nucleophilic substitution, dimethylformamide.

Введение

Из литературных данных известно, что метиловый, этиловый, амиловый эфиры антраниловой кислоты используются в пищевой промышленности и парфюмерии в качестве необходимых добавок. Эти эфиры придают запах цитрусовых фруктов [1-2]. Наряду с этим многие эфиры антраниловой кислоты применяются в медицине и фармацевтике для получения антисептических средств, при синтезе лекарственных препаратов и гетероциклических соединений а также азокрасителей. Некоторые производные антраниловой кислоты используются как ненаркотические анальгетические средства [3-4]. Есть данные, что они обладают антимикробными и противомикробными свойствами. Соединения полученные на основе ацилгидразид N-адамантоил (фураноил-2)-5-бромо (йод) – антраниловой кислоты, а также

моно и диэфиры N-ацилантраниловой кислоты [5-6]. На основе вышесказанного можно предположить, что синтез новых эфиров антраниловой кислоты представляет теоретический и практический интерес. На основе приведенных опытов получены новые производные антраниловой кислоты содержащие две диэфирные группы.

Результаты и обсуждение

В начале опытов для дальнейшего использования синтезировали метиловый-, этиловый-, пропиловый-, бутиловый-, изоамиловый-, гексиловый- и бензиловый эфиры хлоруксусной кислоты на основе методик приведенной в литературе, этерификацией хлоруксусной кислоты с указанными спиртами в присутствии концентрированной серной кислоты в качестве катализатора:

Выход продуктов составил 80-84%. Определены физические константы полученных эфиров и сопоставлены с литературными данными, чистота полученных продуктов определены хроматографическими методами.

Антраниловую кислоту, для использования в следующих опытах очищали методом перекристаллизации из технической кислоты, физические данные

полученной кислоты соответствуют литературным данным. Из полученной антраниловой кислоты получен ее натриевая соль, взаимодействием карбоната натрия с антраниловой кислотой, полученная соль очищена перекристаллизацией из спирта.

Реакции натриевой соли антраниловой кислоты эфирами хлоруксусной кислоты проводили в присутствии ДМФА в качестве растворителя.

Результаты проведенных опытов показали что, оптимальным условием для этих реакций является в соотношения реагентов и растворителя 1:1,5:5 и

температура 153-157 °С в течение 4 часов. Результаты опытов приведены в следующей таблице.

Таблица 1.

**Влияние продолжительности реакции на выход продуктов
в реакции натриевой соли антраниловой кислоты с эфирами хлорукснй кислоты**

Продолжительность реакции, (час)	Выход продуктов, %						
	Карбметокси-метилантранилат,	Карбэтокси-метилантранилат,	Карбпроокси-метилантранилат,	Карббутокси-метилантранилат,	Карбизопентокси-метил антранилат	Карбгексокси-метилантранилат	Карббензилокси-метилантранилат
1	35	34	34	33	32	31	30
2	56	55	53	52	49	48	47
3	71	70	68	66	60	60	65
4	88	87	85	84	80	79	76
5	87	85	84	82	79	77	78
6	85	84	82	81	76	75	76
R _f (система,гексан: этилацетат=5:2).	0.73	0.70	0.68	0.66	0.65	0.63	0.69
Температура кипения (°C, 5 мм.р.с.)	165	174-175	181-182	190	186	213-214	219

Все опыты проводились на основе методик разработанной на кафедре органической химии НУУз [7-8]. Полученные эфиры антраниловой кислоты маслообразные жидкости с желтым светом, Карбгексокси- метилантранилат и карббензоксиметил антранилаты кристаллические вещества бледно желтого света, все эфиры хорошо растворяются в

полярных растворителях как ДМФА, ДМСО, ацетон, и плохо растворяются в неполярных растворителях и воде.

Данная реакция является реакцией нуклеофильного замещения второго порядка, на основе литературных данных механизм реакции можно представить следующим образом:

Экспериментальная часть

Строение полученных эфиров доказаны методами ИК- и ¹H ЯМР спектроскопией.

Интенсивные полосы поглощения в области 3378 см⁻¹, 3374 см⁻¹, 3373 см⁻¹ соответствуют валентным колебаниям -NH₂ группы, в области 3061 см⁻¹, 3025 см⁻¹, 3022 см⁻¹ наблюдаются менее интенсивны

полосы поглощения =C-H связи ароматического. В области 2959 см⁻¹, 2959 см⁻¹ наблюдаются асимметрические валентные колебания -CH₃ группы, полосы поглощения в области 2873 см⁻¹, 2873 см⁻¹ соответствуют симметрическим валентным колебаниям -CH₂- группы. Сигналы в области 1752 см⁻¹, 1697 см⁻¹ указывают присутствию в молекуле диэфирных групп, они относятся интенсивным валентным

колебаниям $>C=O$ групп, сигналы средней интенсивности в области 1619,1591,1589 cm^{-1} соответствуют ароматического кольца. В области 1113-1209 cm^{-1} наблюдаются сигналы валентных колебаний $-C(O)-O-CH_2$, $(-C-O-C)$ связям. В ИК спектре бензилоксиметил антранилат наблюдаются повышения интенсивности сигналов относящихся к ароматическому кольцу.

В ЯМР 1H спектрах полученных соединений наблюдаются следующие сигналы: карбалкилоксиметилловых эфирах антраниловой 0,90 м.д. триплетные сигналы $-CH_3$ группы, 1,60-4,10 м.д. появляются мультиплетные сигналы $-CH_2-$ группы, синглетные сигналы в области 4,77 м.д. соответствует $-OCH_2$ группе, расширенные сигналы в области 4,82 м.д. указывает наличие в молекуле $-NH_2$ группы. Атомы водорода ароматического кольца дают сигналы в области 7,35 м.д. в виде триплетов, 6-водород (1H)

1,2-дизамещенного ароматического кольца проявляются в области 7,85 м.д. в виде дублетов, 4-водород 1,2-дизамещенного ароматического кольца дает сигналы в области 7,25 м.д. в виде тридублетов сигнал, 3,5-водороды 1,2-дизамещенного ароматического кольца дает сигналы в области 6,65-6,70 м.д. в виде сопряженных тридублетов и дидублетов.

Выводы

Изучены реакции натриевой соли антраниловой кислоты с эфирами хлоруксусной кислоты. В результате опытов получены эфиры антраниловой кислоты содержащие две сложноэфирных групп. Строение полученных эфиров доказаны физико-химическими методами. Предложенными методиками можно синтезировать другие эфиры с высокими выходами.

Список литературы:

1. Xu Qi-hai, Liu Wan-yi, Chen Bao-hua, Ma Yong-xiang. "An improved method for the esterification of aromatic acids with ethanol and methanol". Synth. Commun. N 14, 2001, т.31, p.2113-2117
2. G. D. Yadav* and M. S. Krishnan. An Ecofriendly Catalytic Route for the Preparation of Perfumery Grade Methyl Anthranilate from Anthranilic Acid and Methanol. Organic Process Research & Development 1998, 2, p.86-95.
3. Н.А. Власова [и др.]. Синтез, свойства и противовоспалительная активность этиловых эфиров NH-ацил-5-йод(бром)антраниловой кислоты. Вестн. Перм. гос. фармацев. акад. – 2007. – № 2. – С. 69–72.
4. YAN Tao, YU Guan-ping, LIU Peng-fei, XIONG Li-xia, YU Shu-jing and LI Zheng-ming*. Synthesis, Crystal Structure and Biological Activities of Novel Anthranilic(Isophthalic) Acid Esters. Chem. Res. Chinese universities 2012, 28(1), 53—56.
5. Е.Р. Курбатов, Т.А. Чупина, Л.М. Коркодинова, Т.Ф. Одегова. Синтез, свойства и противомикробная активность ацилгидразидов п-адамантил(фураноил-2)-5- бром(йод)антраниловых кислот. ВЕСТНИК ВГУ, СЕРИЯ: ХИМИЯ. БИОЛОГИЯ. ФАРМАЦИЯ, 2013, № 2 С. 45-48
6. К.В. Андрюков, Е.Р. Курбатов, Л.М. Коркодинова, М.В. Томилов, Т. Ф. Одегова, Ю.В. Кожевников. Синтез, свойства и противомикробная активность сложных эфиров моно- и дигалогензамещенных производных п-ацилантраниловых кислот. Вестник ВГУ, серия: химия. биология. фармация, 2007, № 1. С 132-134.
7. Холиков Т.С., Ёдгоров Ч.Г., Тожимухамедов Х.С., Абдушукуров А.К., Ибодуллаева З.. Реакции натриевых солей п-замещенных бензойных кислот с хлористым бензилом. ДАН РУз. 2016 №3 с 43-45.
8. Ёдгоров Ч.Г., Холиков Т.С., Холёров Ш. Синтез эфиров салициловой кислоты. UNIVERSUM: химия и биология. Выпуск 1(79) . Москва 2021 Часть 2.-С 4-7.

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ХЕЛАТООБРАЗУЮЩЕГО СОРБЕНТА НА ОСНОВЕ КАРБАМИДА, ФОРМАЛЬДЕГИДА И 2,4-ДИНИТРОФЕНИЛГИДРАЗИНА

Йулчиева Маргуба Гафуржоновна

преподаватель Термезского филиала
Ташкентского государственного технического университета имени И. Каримова,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: margubayulchiyeva86@gmail.com

Касимов Шерзод Абдузаирович

доц. кафедры,
Термезский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Тураев Хайит Худайназарович

д-р хим. наук, профессор,
Термезский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: hhturaev@rambler.ru

Турсунов Отабек Холикул угли

студент Термезского филиала
Ташкентского государственного технического университета имени И. Каримова,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

SYNTHESIS AND RESEARCH OF A CHELATE FORMING SORBENT BASED ON CARBAMIDE, FORMALDEHYDE AND 2,4-DINITROPHENYLHYDRAZINE

Marg'uba Yulchiyeva

Lecturer at the Termez branch of the Tashkent
State Technical University named after I. Karimov,
Republic of Uzbekistan, Termez

Sherzod Kasimov

Associate professor of the department,
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termez

Khayit Turaev

Doctor of Chemistry, Professor,
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termez

Otabek Kholuqul Ugli Tursunov

Student of the Termez branch
of the Tashkent State Technical University named after I. Karimov,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

В статье исследуется синтез хелатного сорбента на основе мочевины, формальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина. Влияние температуры и мольного соотношения исходных материалов было изучено для определения некоторых свойств хелатного сорбента. Исследована обменная способность ионов Cu (II), Zn (II), Ni (II) и определена структура образующегося хелатного сорбента методом ИК-спектроскопии.

ABSTRACT

The article investigates the synthesis of a chelated sorbent based on urea, formaldehyde and 2,4-dinitrophenylhydrazine. The effect of temperature and molar ratio of the starting materials was studied to determine some of the properties of the chelated sorbent. The exchange capacity of Cu (II), Zn (II), Ni (II) ions was studied, and the structure of the resulting chelate sorbent was determined by IR spectroscopy.

Ключевые слова: хелатообразующий сорбент, ИК-спектроскопия, структура, статическая обменная емкость, насыпной вес.

Keywords: chelating sorbent, IR spectroscopy, structure, static exchange capacity, bulk density.

Введение. В настоящее время в соответствии с современными тенденциями, для очистки вод различной природы предпочтение отдается сорбционным технологиям [1]. Сорбционное извлечение ионов тяжелых, цветных и благородных металлов [2]. получен анионит на основе тиомочевина, эпихлоргидрина и меламина [3]. синтезированы и изучены сорбционные свойства серосодержащего хелатирующего сорбента на основе карбамида, формальдегида и гидразина гидрата [4], а также 3-нитро-4-сульфо аминобензола [5]. Также синтезированы хелатообразующие сорбенты на основе ковалентного закрепления [6], дитизона [7]. В статье [8] исследован полученный лиганд, ковалентно закрепленным способом [9]. Таким образом, целью исследования является синтез и исследование ионита, полученного поликонденсацией на основе карбамида, формальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина и изучение его сорбционных свойства.

Экспериментальная часть. Объектом исследования является полученный сорбент на основе карбамида, формальдегида, 2,4-динитрофенилгидразина (КФ2,4ДНФГ) и изучение его сорбционных свойств.

В работе применялись реактивы марки «ч» и «х.ч.». Растворы реактивов готовились растворением точной навески в известном объеме растворителей.

Синтез сорбента КФ2,4ДНФГ. В трёхгорлую колбу, снабжённую обратным холодильником и механической мешалкой помещали 12 г карбамида (0.2 моль) предварительно растворённого в 39,5 мл (0.5 моль) формалина при температуре 40°C. После чего добавили 3.96 г (0.02 моль) 2,4-динитрофенилгидразина при интенсивном перемешивании.

Затем температуру повысили до 85-90 °C и при этой температуре через 1,5-2 часа образовывалась смолообразная масса. Высушенный полимер измельчали, отмывали от низкомолекулярных веществ 5%-ным раствором NaOH, затем дистиллированной водой до нейтральной реакции. Полученный продукт представляет собой мелкие, пористые, белые гранулы. Выход 90%.

Определили влажность синтезированного сорбента по ГОСТ 10898.1–84, насыпной вес по ГОСТ 10898.2–84, плотность сорбента в гидратированном состоянии по ГОСТ 10898.3–84, удельный объём набухшего сорбента по ГОСТ 10898.4–84, статическую обменную ёмкость – ГОСТ 20255.1–89.

ИК- спектроскопические исследования проводили на инфракрасном ИК-Фурье спектрометре IRTracer-100 SHIMADZU (Япония) (диапазон 400-4000 см⁻¹, разрешение 4 см⁻¹), порошкообразным методом.

Результаты и их обсуждение. Проведены исследования по изучению влияния температуры на процесс поликонденсации карбамида, формальдегида, 2,4-динитрофенилгидразина. Процесс поликонденсации изучали при температурах: 75, 85, 90 и 100°C. При этом установили продолжительность реакции, удельный объём сорбента в воде и величину статической обменной емкости (СОЕ) по 0.1 N раствору NaOH. Из данных табл. 1 следует, что за оптимальную температуру поликонденсации приняли 90°C, время реакции при этом составляет 1,5-2 часа, течение реакции более равномерное и величина обменной емкости по 0.1 н раствору NaOH достигает 4,1 мг-экв/г.

Таблица 1.

Влияние температуры поликонденсации на сорбент

№	Температура реакции t, °C	Продолжительность реакции τ, час	Удельный объём набухшего в воде сорбента в Н-форме, мл/г	Обменная ёмкость СОЕ, по 0,1 N р-ру NaOH мг-экв/г
1.	75	2,5-3	1,63	2
2.	80	2-2,5	1,62	3
3.	90	1,5-2	1,41	4,1
4.	100	1-1,5	1,22	3,4

Реакцию поликонденсации проводили при мольном соотношении реагирующих веществ: карбамида, формальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина

от 1:2:0,1 до 2:5:0,3 соответственно. Результаты исследований приведены в табл.

Таблица 2.

Зависимости сорбционных свойств ионита от соотношения реагирующих веществ

Соотношение карбамида: формальдегида: 2,4- динитрофенилгидразина, в молях	Насыпной вес, г/мл	Статическая обменная ёмкость по 0.1 N растворам, мг-экв/г:		
		Cu ²⁺	Zn ²⁺	Ni ²⁺
2:5:0,1	0.71	3.7	3.6	3.5
2:5:0,2	0.78	4.0	3.9	3.8
2:5:0,3	0.82	3.8	3.7	3.9

На основании проведенных исследований иониты с лучшими показателями получены при соотношении 2:5:0,2 карбамида, формальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина соответственно.

ИК спектры полученного соединения содержат полосы в области 3352 см⁻¹, соответствующие валентным колебаниям первичных амидогрупп (R₂-NH).

Появление полос в области, 3047 см⁻¹ (R)NH₃ 1625 см⁻¹ свидетельствует о связанной группе –C=O, а в области 1547 см⁻¹ мы наблюдаем разрешенные резонансы групп –CH₂. А также имеются ароматические аминовые группы на полосе 2360-2341 см⁻¹

Рисунок 1. ИК-спектр координационного соединения 2,4-динитрофенилгидразина с полученной смолой с ионом цинка (II)

Согласно полученным результатам выполненных исследований и литературным данным [10], реакция синтеза ионита может быть представлена следующим образом: Количество добавляемого в эксперименте

карбамида варьируется в зависимости от структуры сорбента. Химическая реакция сорбента с 2 моль карбамида, 2моль формалина и 2,4 дифенилгидразина.

Выводы. Получен хелатообразующий сорбент на основе реакции поликонденсации карбамида, формальдегида и 2,4-динитрофенилгидразина.

Определены оптимальные условия синтеза сорбента и исследованы влияния мольных соотношений

исходных веществ на состав и физико-химические свойства синтезированного сорбента. Предложены структуры и реакции образование хелатообразующего сорбента.

Список литературы:

1. Yan R. Adsorbenty: osnovy i primeneniye / R.T. Yan // N'yu-York: John Wiley & Sons, 2003. - S. 410.
2. Бобылев А.Е. Синтез, структура и функциональные свойства композиционных сорбентов «Катионит КУ-2х8 - MeS (Me-Cu (II), Zn, Pb)»: дисс. Канд.хим.наук., Екатеринбург, - 2016, -160 с.
3. Эшкурбонов Ф.Б., Джалилов А.Т., Чорьева Н.Б., Абдувалиева М.Ж., Эшкурбонова М.Б. Исследование процесса сорбции ионов молибдена синтезированным комплексообразующим ионитом // Университет и биология. - 2018. - №. 7 (49).
4. Тураев Х.Х., Касимов Ш.А., Чорьева Н.Б., Йулчиева М.Г. Исследование комплексообразования ионов некоторых 3d-металлов хелатообразующим сорбентом // Программа XXI Менделеевского съезда по общей и прикладной химии –Санкт-Петербург -2019,- 321 с.
5. Абилова У.М., Гашимова Э.Н., Чырагов Ф.М. Концентрирование и исследование палладия (II) сорбентом, содержащим фрагменты 3-нитро-4-сульфо аминокислоты //Modern Science. – 2020. – №. 8-2. – С. 25-31.
6. Faustova ZH.V., Slizhov YU.G., Gavrilenko M.A. Khromatograficheskiye issledovaniya sorbentov, modifitsirovannykh atsetilatsetonatami i benzoilatsetonatami RZE //Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Khimiya. – 2016. – № 2 (4).
7. Эрмуратова Н.А., Касимов Ш.А., Тураев Х.Х. Синтез и исследование хелатообразующего сорбента на основе карбамида, формальдегида и 2-аминопентандиовой кислоты // Универсум: технические науки: электрон. научн. журн. 2021. 4 (85). URL: <https://7universum.com/ru/tech/archive/item/11533>
8. Касимов Ш.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т., Чорьева Н.Б., Амонова Н.Д. ИК спектроскопические исследования и квантово-химические характеристики азот и фосфорсодержащий биохимический полимерно // Электронный журнал. научн. журн. 2019. № 6 (60). URL: <http://7universum.com/ru/nature/archive/item/7400>
9. Касимов Ш.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т., Аликулов Р.В., Мукумова Г.Ж. ИК-спектроскопические и термические характеристики ковалентного иммобилизованного серосодержащего лиганда и его координационных соединений с медью (II) // ISJ Теоретическая и прикладная наука, -2021. – 1.09 (101), - с. 234-238. <https://dx.doi.org/10.15863/TAS>
10. Касимов Ш.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т. Исследование процесса комплексообразования ионов некоторых двухвалентных 3d-металлов, синтезированных хелатообразующим сорбентом // Универсум: химия и биология: электрон. научн. журн. 2018. № 3 (45).

ИК - СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СЕРОСОДЕРЖАЩЕГО СОРБЕНТА

Чориева Нигора Бароталиевна

ст. преподаватель Термезского филиала
Ташкентского государственного технического университета
им. И. Каримова,
Республика Узбекистан, г. Термез

Касимов Шерзод Абдузаирович

доц. кафедры неорганической и аналитической химии
Термезского государственного университета,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: sh_kasimov@rambler.ru

Тураев Хайит Худайназарович

д-р хим. наук, профессор, декан факультета химии
Термезского государственного университета,
Республика Узбекистан, г. Термез
E-mail: hhturaev@rambler.ru

Худойбердиев Бахриддин Бахтиёрович

студент Термезского филиала
Ташкентского государственного технического университета
им. И. Каримова,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

IR SPECTROSCOPIC AND THERMAL CHARACTERISTICS OF SULFUR-CONTAINING SORBENT

Nigora Chorieva

Senior lecturer of the Termez branch
of the Tashkent State Technical University named after I. Karimov,
Republic of Uzbekistan, Termez

Sherzod Kasimov

Associate Professor of the Department of Inorganic
and Analytical Chemistry Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termez

Hayit Turaev

Doctor of Chemistry, Professor, Dean of the Faculty of Chemistry
Termez State University,
Republic of Uzbekistan, Termez

Bakhtiyorovich Bakhriddin

Student of the Termez branch
of the Tashkent State Technical University named after I. Karimov,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

В данной статье приведены ИК-спектроскопические и термические характеристики полученного сорбента на основе карбамида, формальдегида и дифенилтиокарбазона, обладающего комплексобразующими свойствами с катионами d-металлов. На основе результатов ИК-спектроскопических и термических исследований предложена структура полученного сорбента.

ABSTRACT

This article presents the IR spectroscopic and thermal characteristics of the obtained sorbent based on urea, formaldehyde and diphenylthiocarbazone, which has complexing properties with d-metal cations. Based on the results of IR spectroscopic and thermal studies, the structure of the obtained sorbent was proposed.

Ключевые слова: сорбент, карбамид, формальдегид, дифенилтиокарбазон, ИК-спектроскопия, термические характеристики, структура.

Keywords: sorbent, urea, formaldehyde, diphenylthiocarbazone, IR spectroscopy, thermal characteristics, structure.

Введение. Хелатообразующие сорбенты широко используются для концентрирования и разделения микроэлементов. Дальнейшее развитие их применения обусловлено высокой селективностью и эффективностью концентрации ионов d-металлов из растворов сложного химического состава. Использование сорбентов, обладающих высокой селективностью по отношению к ионам цветных металлов, является одним из перспективных направлений в практике очистки сточных вод. Синтез новых комплексообразующих сорбентов, разделение с их помощью переходных металлов из растворов сорбционными методами, изучение состава, строения, физико-химических свойств координационных соединений, образующихся в процессе сорбции, является важной задачей аналитической и прикладной химии.

Ранее в литературе описывался синтез комплексообразующего полифункционального полимерного сорбента на основе поликонденсации мочевины, формальдегида, фосфорной кислоты [1, 2]. Был получен анионит на основе тиомочевины, эпихлоргидрина и меламина [3].

Также приводится описание получения сорбента поликонденсацией карбамида, формальдегида и 2-аминопентандиовой кислоты и изучены его сорбционные свойства [4]. Сорбционно-фотометрическим методом были определены ионы кобальта с помощью иммобилизованного реагента 4-амил-2-нитрозо-1-нафтола [5], а также определены оптимальные условия для обнаружения ионов свинца (II) с использованием недавно синтезированного сорбента РРА 1, иммобилизованного с помощью сульфарсазенового реагента; в качестве сорбентов выбраны сорбенты ППА-1 и СМА-1 [6].

Несмотря на большой ассортимент промышленных марок сорбентов, многие из них обладают рядом недостатков, которые ограничивают возможности и сферы их применения. Для улучшения кинетических и сорбционных свойств сорбентов целесообразно осуществлять их синтез из многофункциональных соединений, содержащих электронодонорные функциональные группы. Контроль за эффективностью осуществления синтеза и эксплуатационных характеристик нового сорбционного материала традиционно осуществляют с использованием методов ИК-спектроскопии и дифференциального термического

анализа, которые дают наиболее полную информацию о физико-химических свойствах получаемого продукта.

Целью исследования является изучение ИК-спектроскопических и термических характеристик полученного сорбента на основе карбамида, формальдегида и дифенилтиокарбазона.

Экспериментальная часть

Определяли статическую обменную ёмкость сорбента по ионам меди (II) – ГОСТ 20255.1–89. ИК-спектры снимали на ИК-Фурье спектрометре IRTracer-100 SHIMADZU (Япония) (диапазон 400–4000 см^{-1} , разрешение 4 см^{-1}), порошковым методом. Термоаналитические исследования проводились на приборе Netzsch Simultaneous Analyzer STA 409 PG (Германия), с термопарой К-типа (Low RG Silver) и алюминиевыми тиглями. Все измерения были проведены в инертной азотной атмосфере со скоростью потока азота 50 мл/мин. Температурный диапазон измерений составлял 25–370°C, скорость нагрева составляла 5К/мин. Количество образца на одно измерение 5–10 мг. Измерительная система калибровалась стандартным набором веществ KNO_3 , In, Bi, Sn, Zn.

Исследования проводили на инструментальной базе Ташкентского научно-исследовательского института химической технологии.

Сорбент был модифицированием карбамид-формальдегидной смолы с дифенилтиокарбазоном. Синтез сорбента выполняли в течение 1,5–2 часов при температуре 85–90 °C до образования смолообразной массы коричневого цвета [7].

Результаты и их обсуждение. С целью установления структуры полученного сорбента была использована ИК-спектроскопия. ИК спектры полученного соединения содержат полосы в области 3329 см^{-1} , соответствующие валентным колебаниям первичные амидо-групп. Появление полос в области 1622 см^{-1} свидетельствует о связанной группе $\text{C}=\text{O}$, а в области 1556 см^{-1} мы наблюдаются $-\text{NH}-$ группы. При этом связанные с циклической структурой вторичные аминогруппы дитизона появляются в области 1250 см^{-1} , что свидетельствует о наличии группы $\text{C}=\text{S}$ (рис.1).

Рисунок 1. ИК спектр полученного сорбента

Согласно результатов выполненных исследований, реакция синтеза сорбента может быть представлена следующим образом:

По результатам анализа дифференциально сканирующей калориметрии проанализированы различные экзотермические и эндотермические эффекты,

наблюдаемые при изменении массы в результате разрушения структуры соединений при нагревании сорбента.

Рисунок 2. ДСК-ТГ-ДТГ график сорбента

Изучение графиков DSK-TG-DTG сорбента (рис.2.) показывает три эндотермических пика в диапазоне температур 191–364 °С. На первом показано плавление сорбента при температуре 140 °С. Разложение началось при 244,86 °С. В интервале температур 224–309 °С уменьшение массы образца составило 68,1%. Этому процессу соответствуют два эндотермических пика. Полная энтальпия распада составляет $\Delta Q = -513,54$ Дж/г.

Выводы.

Проведенные исследования позволили прийти к следующим выводам:

ИК-спектроскопия выявила в составе синтезированного сорбента на основе карбамида, формальдегида и дифенилтиокарбазона, потенциально ответственных за селективность и эффективность сорбции ионов d-металлов. Термогравиметрический анализ позволил определить температурный диапазон эксплуатации синтезированного сорбента с учетом его термической деструкции, которая уже наблюдается при температуре 191°С.

Список литературы:

- Касимов Ш.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т. Исследование процесса комплексообразования ионов некоторых двухвалентных 3d-металлов с хелатообразующим сорбентом // *Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн.* -2018. -№3 (45).
- Касимов Ш.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т., Чориева Н.Б., Амонова Н.Д. ИК спектроскопические исследование и квантово-химические характеристики азот и фосфорсодержащего полимерного лиганда // *Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн.* 2019. № 6(60). URL: <http://7universum.com/ru/nature/archive/item/7400>
- Эшкурбонов Ф.Б., Тураев Х.Х., Эшкурбонова М.Б., Чориева Н.Б., Абдувалиева М.Ж. Синтез комплексообразующего ионита на основе гидролизованного полиакрилонитрила // *Universum: химия и биология : электрон. научн. журн.* Эшкурбонов Ф.Б. [и др.]. 2018. № 7 (49). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/6115>
- Эрмуратова Н.А., Касимов Ш.А., Тураев Х.Х. Синтез и исследование хелатообразующего сорбента на основе карбамида, формальдегида и 2-аминопентандиовой кислоты // *Universum: технические науки: электрон. научн. журн.* 2021. 4(85). URL: <https://7universum.com/ru/tech/archive/item/11533>
- Инатова М.С., Сманова З.А., Нурмухамедов Ж., Гафуров А.А. Сорбционно-фотометрическое определение ионов кобальта с помощью иммобилизованного реагента 4-амил-2-нитрозо-1-нафтола // *European research.* – 2016. – №. 8 (19).
- Ermuratova O.A., Bobomurodova M.S., Smanova Z.A., Gofurova D.A., Shahidova D.N. Development of a Sorption-spectroscopic Method for the Determination of Lead Ions by Immobilized Sulfarsarsen // *Annals of the Romanian Society for Cell Biology.* – 2021. – С. 596-604.
- Nigora Chorieva; Nilufar, Ermuratova; Khayit, Turaev; and Sherzod, Kasimov (2021) "Synthesis and research of chelate forming sorbent based on carbamide, formaldehyde, ditizone // *Chemistry and Chemical Engineering: Vol. 2020: No. 4 , Article 4.* DOI: 10.51348/RWHC6586

ТЕМПЛАТНЫЙ АМИНО-ГУМИНОВЫЙ СОРБЕНТ НА ОСНОВЕ ОТХОДОВ УГЛЕДОБЫЧИ

Жакина Алма Хасеновна

канд. хим. наук, зав. лабораторией «Химии полимеров»
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК»,
Республика Казахстан, г. Караганда
E-mail: alzhakina@mail.ru

Василец Евгений Петрович

магистр педагогических наук, научный сотрудник
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК»,
Республика Казахстан, г. Караганда

Арнт Оксана Васильевна

магистр технических наук, научный сотрудник
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК»,
Республика Казахстан, г. Караганда

Кудрявцева Елизавета Васильевна

бакалавр естественных наук, инженер
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК»,
Республика Казахстан, г. Караганда

Альжанкызы Арайлым

магистр химических наук, младший научный сотрудник
ТОО «Институт органического синтеза и углехимии РК»,
Республика Казахстан, г. Караганда

TEMPLATE AMINO-HUMIC SORBENT BASED ON COAL MINING WASTE

Alma Zhakina

Candidate of Chemical Sciences,
Head of the Laboratory of Polymer Chemistry
LLP "Institute of Organic Synthesis and Carbon Chemistry of the Republic of Kazakhstan",
Kazakhstan, Karaganda

Yevgeniy Vassilets

Master of Pedagogical Sciences, research scientist
LLP "Institute of Organic Synthesis and Carbon Chemistry of the Republic of Kazakhstan",
Kazakhstan, Karaganda

Oxana Arnt

Master of Technical Sciences, research scientist
LLP "Institute of Organic Synthesis and Carbon Chemistry of the Republic of Kazakhstan",
Kazakhstan, Karaganda

Yelizaveta Kudryavtseva

Bachelor of Natural Sciences, engineer
LLP "Institute of Organic Synthesis and Carbon Chemistry of the Republic of Kazakhstan",
Kazakhstan, Karaganda

Arailym Alzhankyzy

Master of Chemical Sciences, junior research scientist
LLP "Institute of Organic Synthesis and Carbon Chemistry of the Republic of Kazakhstan",
Kazakhstan, Karaganda

Работа выполнена в рамках грантового финансирования КН МОН РК Грант № BR10965230 «Разработка «зеленых» технологий получения полифункциональных материалов на основе глубокой переработки органоминерального сырья Казахстана».

АННОТАЦИЯ

В статье рассмотрена проблема полезного применения отходов угледобычи путем получения гуминовых кислот. Предложен и описан способ получения избирательного сорбента методом Molecular Imprinting. Индивидуальное изучение морфологии поверхности синтезированных продуктов проведено при помощи микроскопического анализа с использованием растрового электронного микроскопа MIRA 3 фирмы TESCAN, чем было подтверждено наличие пор в полученных продуктах.

ABSTRACT

The article considers the problem of the useful use of coal mining waste, proposes and describes a method for obtaining a selective sorbent by Molecular Imprinting. An individual study of the morphology of the surface of the synthesized products was carried out using microscopic analysis using a MIRA 3 scanning electron microscope from TESCAN, which confirmed the presence of pores in the obtained products.

Ключевые слова: гуминовые вещества, гуминовая кислота, темплатный синтез, темплат, амид акриловой кислоты, сорбент, полимеры.

Keywords: humic substances, humic acid, molecular imprinting synthesis, template, acrylic acid amide, sorbent, polymers.

В настоящее время актуальным направлением химии является направленная химическая модификация природных соединений. В этой связи перспективна разработка методов структурного модифицирования гуминовых веществ как продуктов переработки отходов угледобычи и, следовательно, доступных и дешевых природных веществ, путем введения в состав их макромолекул новых функциональных фрагментов, исследование их физико-химических свойств с целью создания новых видов эффективных продуктов с заданными свойствами и расширения областей их применения. Отходы угледобычи являются сырьем для получения различных композитных материалов с последующим полезным применением [2].

Выделение гуминовых кислот (ГК) и их солей из непригодных угольных остатков является одним из наиболее полезных видов, так называемой, «утилизации» данного вида отходов. Гуминовые кислоты – это группа темноокрашенных гумусовых кислот, свойством которых является хорошая растворимость в щелочах и плохая растворимость в кислотах. Описать ГК одной формулой невозможно, так как под этим общим названием скрывается целая смесь из высокомолекулярных природных соединений, образующихся в почве при разложении погибших растений. В сухом состоянии они представляют собой темно-коричневый неплавкий порошок. Они входят в состав органической массы торфа, углей, некоторых почв.

Гуминовые кислоты выделяли из образцов окисленного угля Шубаркольского месторождения при щелочном импрегнировании, вызванных интеркарированием в него гидроксида натрия. Метод щелочного импрегнирования включал следующие стадии: смешивание высушенного угля с водным раствором щелочи с концентрацией, обеспечивающей заданное соотношение NaOH/субстрат; нагревание (100°C, 2 ч) при перемешивании и выдержка при комнатной температуре; отделение жидкой фазы от остаточного угля с дальнейшей нейтрализацией минеральной кислотой (pH=1-2). Выпавший осадок отфильтровывали, промывали до нейтральной

среды, сушили до воздушно-сухого состояния [3]. Выход продукта составил 75%.

Гуминовые кислоты из окисленных Шубаркольских углей имеют следующие усредненные характеристики, %: W^a – 12,13, A^a – 22, 0, C^r – 36,32, H^r – 3,73, N^r – 0,00, S^r – 1,02, O^r – 26,20, сумма COOH+OH^r – 4,0±0,2 ммоль-экв/г. Элементный анализ на содержание углерода, водорода, азота, серы и кислорода проведен на элементном анализаторе Elementar Unicube.

Для получения продукта, а именно аминокуминового сорбента, был использован метод Molecular Imprinting, заключающийся в осуществлении взаимодействия полимера – гуминовой кислоты, аминокислотных соединений и сорбируемого иона – (Cu²⁺) в условиях, когда звенья макромолекул гуминовой кислоты еще имеют достаточную подвижность, в последующей фиксации возникающих оптимальных для сорбции конформаций путем сшивания комплекса полимера с металлом и удаления ионов металла из сшитого сорбента [1]. Предложенный способ дает возможность получать продукты с анионо- и катионообменными свойствами благодаря наличию карбоксильных (–COOH), фенольных (–OH), –NH и –NH₂-групп и селективных для связывания целевых металлов [4]. Данный вид синтеза в последние годы обрел немалую популярность, так как позволяет «программировать» будущий продукт – сорбент. В более широком смысле под темплатным синтезом подразумевают процессы, протекающие под воздействием факторов управления структурой с помощью своеобразного шаблона – темплата, представленного в виде части определенной формы и размера. В этом качестве, в основном, используют пористые полимерные или оксидные материалы. В нашей работе в качестве темплата была использована гуминовая кислота Шубаркульского месторождения, полученная преобразованием из гумата натрия. Темплатный синтез сопровождается темплатным эффектом. Темплатный эффект – многократное увеличение выхода в реакции синтеза супрамолекулярного комплекса за счет введения в реакционную систему темплата.

При получении композитных материалов на основе продукта переработки углеводородного сырья – гуминовой кислоты, селективных для связывания целевого металла – Cu (II) в качестве темплата использовали CuSO_4 , в качестве функционального сополимера «настроенных» сорбентов выбран амид акриловой кислоты (ААК), а в качестве сшивающего агента – формалин [5].

Рисунок 1. Амид акриловой кислоты

Синтез композитных материалов на основе продукта переработки углеводородного сырья – гуминовой кислоты осуществлен в соотношении ГК: ААК=2:1 с включением ионов металлов (Cu^{2+}) и сшитые формальдегидом. Полученные металлосодержащие композиты (ГК-М-ААК) высушивали и анализировали.

Для получения «настроенных» сорбентов полученные металлосодержащие композиты подвергли кислотному гидролизу. Для этого навески металлосодержащего композита заливали 0,1 н раствора HCl и нагревали при 50°C в течение 15 минут. Затем смесь «настроенных» сорбентов отфильтровывали и промывали 50 мл 0,1 н раствором HCl , затем многократно дистиллированной водой до полного удаления ионов хлора и высушивали [3].

Таблица 1.

Характеристики полученного темплатного композита

Образец	C ^r , %	H ^r , %	N ^r , %	S ^r , %
До гидролиза				
ГК-М-ААК	44,5	3,57	0,25	0,97
После гидролиза				
ГК-ААК	48,9	3,21	0,00	0,91

а – $\times 1\,630$

б – $\times 5\,530$

Результаты химических исследований «настроенных» композитных сорбентов подтверждаются данными элементного анализа и кондуктометрий.

Для индивидуального изучения морфологии поверхности синтезированных продуктов проведен микроскопический анализ с использованием растрового электронного микроскопа MIRA 3 фирмы TESCAN. Растровый электронный микроскоп (РЭМ) оснащен системой детекторов, которые регистрируют различные сигналы, образующиеся в результате взаимодействия пучка электронов с поверхностью образца. Детектор вторичных электронов (SE – Secondary Electrons) позволяет получать изображения с топографическим контрастом. А система рентгеновского энергодисперсионного микроанализа X-Act (Oxford Instruments) позволяет локально определять элементный состав на поверхности образца. Исследования для полученных продуктов проводились при ускоряющем напряжении 20 кВ. Рентгеновский энергодисперсионный микроанализ проводился методом квартования в различных областях поверхности образца. При выполнении определения учитывалось то, что исследование проводилось на углеродном скотче и содержание углерода не учитывалось. За результат бралось среднее значение проведенных исследований. На рисунках (2, 3) приведены топографические изображения поверхности композитных материалов, полученных темплатным методом. При анализе микроснимков композитных материалов, выявлено, что введение в состав композита темпланта значительно меняет структуру сорбента

Детальное исследование морфологии поверхности темплатного композита (ГК-М-ААК), полученного методом Molecular Imprinting, показало, что поверхность образца неоднородная. Вкрапленные в состав гуминовой кислоты частицы меди имеют слоистую структуру, образованную параллельно расположенными слоями. Возможно, взаимодействие частиц металла с гуминовой кислотой, приводит к конформационному «распрямлению» макромолекул с последующим уплотнением структуры [6].

Рисунок 2. Топографические изображения поверхности, ЭДС-карта и суммарный спектр карты инактивированного темплатного композита ГК-М-ААК

На рисунке 2 приведены микроснимки поверхности инактивированного темплатного композита (ГК-М-ААК), полученного методом Molecular Imprinting. На снимке *а* видна одна большая частица и несколько маленьких. Большая частица имеет слоистое строение, при этом слои огибают контуры частицы. Данное строение объясняется ступенчатой поликонденсацией аминного реагента и формальдегида на поверхности ГК. На снимке *б* видна относительно ровная поверхность, на которой различимы как бы наложенные одна на другую плотно прилегающие пластинки, при этом толщина пластинок незначительная, пор или значительных зазоров нет.

При увеличении в 20 300 раз можно увидеть довольно ровную поверхность, покрытую небольшими равномерными по размерам выступами. Также здесь виден стык двух пластинок, края одной из них, похоже, более тонкие, чем ее центральная часть и слегка отшелушиваются от подлежащей пластинки. Увеличение в 52 500 раз показывает гораздо более неровную поверхность, отдельные частицы не очень сильно отличаются по размерам, но срastaются с поверхностью под разными углами, что и создает впечатление значительной шероховатости, хотя зазоры между элементами структуры неглубокие.

Рисунок 3. Топографические изображения поверхности, ЭДС-карта и суммарный спектр карты темплатного композита ГК-ААК

На рисунке 3 приведены микроснимки поверхности темплатного композита (ГК-ААК), полученного методом Molecular Imprinting. На снимке *a* хорошо видна отдельная частица, обладающая многослойной структурой. Четких сколов нет, так как, похоже, каждая из пластинок раскалывается по-отдельности, что создает определенный пластинчатый рельеф почти по всей поверхности. На снимке *б* хорошо видны наложенные одна на другую тонкие пластинки с относительно ровной поверхностью. Создается впечатление, что по краям верхние пластинки отслаиваются от нижних на значительное расстояние, образуя явный зазор. При увеличении в 20 100 раз (снимок *в*) видна

шероховатая поверхность со скругленными структурами. Острых углов нет, но видны зазоры между отдельными частицами или выступами, которые уходят вглубь. На снимке *г* можно заметить довольно значительные по глубине зазоры между отдельными элементами, которые кажутся довольно глубокими, при этом сами элементы кажутся сглаженными и имеют как бы оплавленные грани. Исходя из данных ЭДС-карт обоих темплатов можно сделать вывод, что в инактивированном темплатном композите содержится больше меди, чем в темплате, прошедшем активацию кислотным гидролизом, что подтверждает вывод о вымывании ионов меди и освобождении пор.

Список литературы:

1. Ветрова О.В., Бурметьева М.С., Гавриленко М.А. Закрепление гуминовых кислот на поверхности силикагеля через слой полиметилenguанидина // Известия Томского политехнического университета. – 2013. – Т. 322. – №3. – С.18-21.
2. Каирбеков Ж.К., Кишибаев К.О., Ермолдина Э.Т., Малибекова Г.А. Изучение свойств гуминовых препаратов угля месторождения «Ой-Карагай» // Вестник КазНУ. Сер. хим. – 2010. – № 2 (58). – С. 125-129.
3. Касимова Э.Д., Кыдралиева К.А. Синтез сорбентов на основе гуминовых кислот, ориентированных на целевые металлы // Universum: химия и биология: электронный научный журн. – 2015. – № 12 (19). URL: <http://7universum.com/ru/nature/archive/item/2805>
4. Касимова Э.Д., Кыдралиева К.А. Определение структурно – группового состава гуминовых кислот и ионитов // Известия НАН РК. – 2013. – № 2. – С. 32-36.
5. Лиштван И.И., Капущкий Ф.Н., Янута Ю.Г., Абрамец А.М., Мониц Г.С., Стригуцкий В.П., Глухова Н.С., Алейникова В.Н. Взаимодействие гуминовых кислот с ионами металлов и структура металлгуминовых комплексов // Вестник БГУ. – Сер. 2. – 2012. – № 2. – С. 12-16.
6. Юдина Н.В., Савельева А.В., Мальцева Е.В., Ломовский О.И. Твердофазные механохимические реакции гуминовых кислот // Химия в интересах устойчивого развития. – 2016. – № 24. – С. 263-268.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ И ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ ПРОИЗВОДНЫХ П-АМИНОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Гапуров Умурбек Улугбекович

*соискатель, ассистент кафедры медицинской химии,
Бухарский государственный медицинский институт,
Республика Узбекистан, г. Бухара
E-mail: umurbekgafurov@mail.ru*

Ниязов Лазиз Нурхонович

*PhD, доцент, зав. кафедрой медицинской химии,
Бухарский государственный медицинский институт,
Республика Узбекистан, г. Бухара
E-mail: laziznn@mail.ru*

QUANTUM CHEMICAL PARAMETERS AND PREDICTING THE BIOLOGICAL ACTIVITY OF P-AMINOBENZOIC ACID DERIVATIVES

Umurbek Gapurov

*Degree-seeking student, Assistant of Medical Chemistry Chair,
Bukhara State Medical Institute,
Uzbekistan, Bukhara*

Laziz Niyazov

*PhD, associate professor, Head of Medical Chemistry Chair,
Bukhara State Medical Institute,
Uzbekistan, Bukhara*

АННОТАЦИЯ

В статье исследуются квантово-химические параметры синтезированных веществ, способность комплексообразования и потенциальная биологическая активность. Исследования показали, что молекулы обладают рядом потенциальной биологической активности, также с точки зрения получения перспективных комплексных соединений.

ABSTRACT

The article investigates the quantum-chemical parameters of synthesized substances, the ability of complex formation and potential biological activity. Studies have shown that the molecules have a number of potential biological activities, also in terms of obtaining perspective complex compounds.

Ключевые слова: оксибензойные кислоты, парааминобензойная кислота, молекула, активность, структура
Keywords: hydroxybenzoic acids, para-aminobenzoic acid, molecule, activity, structure

В последнее время интерес к карбоксилатным соединениям в целом и производным бензойной кислоты в частности продолжает расти из-за их химических и биологических свойств [1], а также синтезу новых производных гидроксibenзойных кислот [2-3]. Особенно перспективными являются работы в области синтеза производных с парааминобензойной кислотой (ПАБК). Как известно, ПАБК производится бактериями и широко распространена в природе. Производные ПАБК известны своей антиоксидантной, офтальмологической, антибактериальной и противовирусной активностью [4]. ПАБК также используется как биоактивный компонент в солнцезащитных кремах [5], которые уменьшают от повреждения УФ-лучей [6]. Сообщалось, что производные ПАБК обладают более высокой

противораковой активностью у мышей SCID (самки) в отношении ксенотрансплантатов яичников человека (A2780) по сравнению с цисплатиной [7,8].

Кроме этого в работе [9], производные 4-аминобензойной кислоты и салицилальдегидов, идентифицированные как сильнодействующие противомикробные агенты, показали подавляющие свойства, прежде всего, грамположительных кокков. Авторы в [10] синтезировали наногибриды для адресной доставки лекарств которые не только обладают хорошими индивидуальными свойствами, но также обладают новыми физико-химическими свойствами и повышают селективность, безопасность и эффективность противоопухолевых препаратов. ПАБК служит биоактивным линкером (связывающего агента) из-за того, что она присутствует во многих патогенах

человека. п-аминосалициловая кислота [11], производное ПАБК, используется для лечения активного туберкулеза с лекарственной устойчивостью вместе с другими противотуберкулезными препаратами. Также были синтезированы ряд новых антимикробных агентов с ПАБК в качестве связывающего агента [12].

Так как гидрофобная часть парааминобензойной кислоты создает межмолекулярные взаимодействия для улучшения совместимости с лекарствами и гидрофобными участками клеточных мембран [13], целенаправленное изучение и синтез новых производных обладающими новыми свойствами является

актуальной задачей. Исходя из этого нами были синтезированы вещества (рис.1.) по методике, указанной в [2], вместо таурина выбрали ПАБК, а также изучены квантово-химические параметры (GaussView) и потенциальная биологическая активность (PassOnline). Так как металлы, введенные в состав молекул, могут проявлять как индивидуальные свойства, так и проявлять синергизм, усиливая характеристики молекулы [14], была изучена способность синтезированных веществ к комплексообразованию исходя из их строения.

Рисунок 1. Формулы и названия веществ

б)

Рисунок 2. Распределение зарядов и электронной плотности в молекулах

Изучение рассчитанных квантово-химических параметров показали активность молекул и комплексообразование за счет гидроксильных (фенольных) групп, так как заряд кислорода более отрицателен, чем у кислорода карбоксильной группы. Прогноз активности соединений показал, что

вещества обладают свойствами ингибитора метилентетрагидрофолатредуктазы, агониста целостности мембраны, ингибитора пролиламинопептидазы, ингибитора убихинол-цитохром-с редуктазы и ингибитора тауриндегидрогеназы.

Список литературы:

1. Гапуров У.У., Ниязов Л.Н. Актуальные вопросы получения производных салициловой кислоты с п-аминобензойной кислотой для фармацевтики //Universum: химия и биология. – 2021. – №. 8 (86). – С. 64-66.
2. Брель А.К. и др. Синтез, антиагрегационная и антитромботическая активности новых производных гидроксibenзойных кислот с тауриновым фрагментом //Фармация и фармакология. – 2021. – Т. 9. – №. 3. – С. 222-234.
3. Литвинов Р.А. и др. Нейросетевая модель антигликирующей активности п-гидроксibenзоил производных тимина и урацила // Молекулярные и Биологические аспекты Химии, Фармацевтики и Фармакологии. – 2020. – С. 62-62.
4. Patel H.M. et al. Quinoxaline-PABA bipartite hybrid derivatization approach: Design and search for antimicrobial agents //Journal of Molecular Structure. – 2019. – Т. 1184. – С. 562-568.
5. Shah S.R. et al. Group II complexes of N-and O-donors Mixed-ligands as anticancer agents //Polyhedron. – 2021. – Т. 209. – С. 115455.
6. Flindt-Hansen H., Thune P., Larsen T.E. The inhibiting effect of PABA on photocarcinogenesis //Archives of dermatological research. – 1990. – Т. 282. – №. 1. – С. 38-41.
7. Findlay V.J. et al. Tumor cell responses to a novel glutathione S-transferase-activated nitric oxide-releasing prodrug // Molecular pharmacology. – 2004. – Т. 65. – №. 5. – С. 1070-1079.
8. Townsend D.M. et al. A glutathione S-transferase π -activated prodrug causes kinase activation concurrent with S-glutathionylation of proteins //Molecular pharmacology. – 2006. – Т. 69. – №. 2. – С. 501-508.
9. Krátký M. et al. 4-Aminobenzoic acid derivatives: converting folate precursor to antimicrobial and cytotoxic agents // Biomolecules. – 2020. – Т. 10. – №. 1. – С. 9.
10. Laksee S. et al. New organic/inorganic nanohybrids of targeted pullulan derivative/gold nanoparticles for effective drug delivery systems //International journal of biological macromolecules. – 2020. – Т. 162. – С. 561-577.
11. Mitchison D.A. Role of individual drugs in the chemotherapy of tuberculosis // The international journal of tuberculosis and lung disease. – 2000. – Т. 4. – №. 9. – С. 796-806.
12. Malasala S. et al. Synthesis and evaluation of new quinazoline-benzimidazole hybrids as potent anti-microbial agents against multidrug resistant Staphylococcus aureus and Mycobacterium tuberculosis //European Journal of Medicinal Chemistry. – 2021. – Т. 212. – С. 112996.
13. Muddineti O.S., Ghosh B., Biswas S. Current trends in using polymer coated gold nanoparticles for cancer therapy // International journal of pharmaceutics. – 2015. – Т. 484. – №. 1-2. – С. 252-267.
14. L.N.Niyazov, A.K.Brel, H.Q.Bahromov Salitsil kislota hosilasi, uning natriyli va kaliyli tuzlari sintezi hamda xossalari //Илмий хабарнома. Серия: Кимё тадқиқотлари. – 2020. – №7(51). – С. 28-38

**МАКРО- И МИКРОЭЛЕМЕНТНЫЙ СОСТАВ НЕКОТОРЫХ ВИДОВ –
PHLOMOIDES ПРОИЗРАСТАЮЩИХ В УЗБЕКИСТАНЕ****Хайдарова Дилрабо Рахимжоновна**

докторант,
Наманганский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Наманган:
E-mail: dilrabo_khaydarova@mail.ru

Сиддиков Гопуржон Усмонович

д-р философии по химии, доцент,
Наманганский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Наманган
E-mail: ximiya@list.ru

Абдуллаев Шавкат Вохидович

д-р химических наук, профессор,
Наманганский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Наманган
E-mail: abdullaev_sh_v@mail.ru

**MACRO- AND MICRO-ELEMENTAL COMPOSITION OF SOME SPECIES -
PHLOMOIDES GROWING IN UZBEKISTAN****Dilrabo Khaydarova**

Doctoral student,
Namangan State University,
Uzbekistan, Namangan

Gopurjon Siddikov

Doctor of Philosophy in Chemistry, Associate Professor,
Namangan State University,
Uzbekistan, Namangan

Shavkat Abdullaev

Doctor of Chemical Sciences, Professor,
Namangan State University,
Uzbekistan, Namangan

Нейтронно-активационный анализ элементов этого растения был проведен сотрудниками лаборатории экологии и биотехнологии Института ядерной физики Академии наук Узбекистана, за что мы выражаем им искреннюю благодарность.

АННОТАЦИЯ

Впервые изучен макро- и микроэлементный состав надземной части и надземных органов Phlomoides, произрастающих в Узбекистане. Было определено нейтронно-активационным методом количество макро- и микроэлементов, таких как Ag, As, Au, Ba, Br, Ca, Cd, Cl, Co, Cr, Cs, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, Rb, Se, Sr, Zn, U, Th, Y, Yb, Ce, Sm, Eu, Hf, Rb, Ta, La.

ABSTRACT

For the first time, the macro- and microelement composition of the aboveground part and aboveground organs of Phlomoides growing in Uzbekistan has been studied. The amount of macro- and microelements was determined, such as Ag, As, Au, Ba, Br, Ca, Cd, Cl, Co, Cr, Cs, Cu, Fe, Hg, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, Rb, Se, Sr, Zn, U, Th, Y, Yb, Ce, Sm, Eu, Hf, Rb, Ta, La.

Ключевые слова: Phlomoides, макро- и микроэлементы, нейтронно-активационный анализ.

Keywords: Phlomoides, macro- and microelements, neutron activation analysis.

Целью данной работы является исследование макро- и микроэлементного состава некоторых видов – *Phlomoidea*, произрастающих в Узбекистане.

Введение

Дикорастущие растительное сырье требует нормирования различных токсических соединений и элементов в условиях экологического неблагополучия. Микроэлементы являются составной частью или активаторами ферментов, гормонов, витаминов и других биологически активных соединений. Они принимают участие в синтезе нуклеиновых кислот, обеспечивают взаимосвязь между выработкой протеинов и передачей генетической информации. Недостаток или избыток их приводит к нарушению важнейших функций организма.

Многие виды растений используются в медицине не только благодаря содержанию основных биологически активных веществ, но и из-за их элементного состава. Установлено что для нормального функционирования иммунных механизмов необходим определенный уровень цинка, селена, лития, меди, марганца, железа, кобальта [1-3].

В данной работе для анализа был использован инструментальный нейтронно-активационный метод анализа. Образцы растений были собраны в фазах цветения и до цветения. В дикорастущих растениях *Phlomoidea* 35 наименований элементов экспериментально определены с использованием данного метода. Минеральные компоненты растения подчеркивают его терапевтическую значимость и позволяют использовать данные виды в дальнейшем для комплексного создания лекарственных средств.

Экспериментально исследованы макро- и микроэлементный состав трав: – *Phlomoidea Speciosa*; *Phlomoidea isochila*; *Phlomoidea nuda* произрастающих в Узбекистане [4-8].

Объектами исследования служила воздушно - сухая измельченная трава зопников заготовленных

в Наманганской области Узбекистана в 2018-2020 гг. В период цветения и до цветения.

Исследование содержания макро- и микроэлементов в образцах этих растений проводили в научной лаборатории «Экологии и биотехнологий» ИЯФ АН Р Уз, (г. Ташкент) [9, 10].

Методика

Пробы для анализа очищали от посторонних примесей, камней, промывали сначала водопроводной водой, затем дистиллированной водой. Сушили в сушильном шкафу при температуре 60⁰ С до постоянного веса. После сушки измельчали. Навеску образцов брали массой по 100мг, которые герметично упаковывались в полиэтиленовые пакетики и помещали в специальный контейнер из алюминия для облучения на потоке нейтронов атомного реактора. Облучение образцов проводили нейтронным потоком атомного реактора типа ВВР-СМ ИЯФ АН Р Уз. По навешенной активности образцов нейтронно-активационным методом определяли основные макро- и микроэлементы. Для сравнения использовали аттестованные стандартные образцы и эталоны.

Результаты и их обсуждение

Результаты анализа представлены в таблице 1 определены содержание 35 элементов. Данные также свидетельствуют об отсутствии или очень незначительном содержании токсичных элементов в сырье (свинца, мышьяка, олова, ртути, стронция и др.), что говорит о его экологической чистоте.

Содержание биологически активных элементов (кальция, магния, меди, марганца, цинка, кобальта), необходимых для нормальной жизнедеятельности организма, находится в пределах допустимых концентраций.

Таблица 1.

**Содержание макро- и микроэлементов в растениях из Наманганской области (мкг/г).
Нейтронно-активационный анализ проведен: июнь 2021 г.**

Элементы	Номера образцов					
	№ 1	№ 2	№ 3	№ 4	№ 5	№ 6
Ag	0, 015	0,018	0,012	0,031	0,023	0,019
As	0,42	0,24	0,37	0,33	0,31	0,18
Au	0,0042	0,0027	0,0043	0,0028	0,0038	0,0019
Ba	38,4	64,3	33,6	29,5	37,6	18,8
Br	2,7	8,3	8,8	6,9	4,7	11,6
Ca	9300	11500	8600	6900	9600	7500
Cd	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01	<0,01
Cl	6100	4200	860	2100	1900	1400
Co	0,16	0,27	0,33	0,28	0,42	0,61
Cr	0,57	0,77	0,89	0,58	0,46	0,41
Cs	0,04	0,08	0,04	0,03	0,05	0,05
Cu	8,2	4,3	4,8	3,9	11,2	5,6
Fe	272,4	171,8	412,3	526,3	242,3	377,5

Элементы	Номера образцов					
	№ 1	№ 2	№ 3	№ 4	№ 5	№ 6
Hg	0,003	0,004	0,003	0,004	<0,001	0,002
K	11500	14500	16400	14800	17200	19100
Mg	2400	1850	1830	1960	1580	2350
Mn	33,4	25,4	82,3	29,6	37,3	38,2
Mo	1,95	1,88	2,86	2,87	1,99	3,12
Na	121,2	78,3	104,5	69,2	92,8	96,4
Ni	4,2	1,8	1,9	3,9	2,7	4,2
Rb	7,4	8,3	9,2	9,4	5,8	6,3
Se	0,86	1,05	0,76	0,82	1,08	1,09
Sr	16,7	14,8	13,6	11,7	11,4	12,4
Zn	24,5	19,5	20,6	23,7	21,8	17,2
U	0,12	0,12	0,09	0,14	0,14	0,15
Th	0,08	0,12	0,09	0,10	0,10	0,12
Y	0,3	0,3	0,4	0,7	0,4	0,4
Yb	0,035	0,028	0,061	0,038	0,056	0,056
Ce	1,05	1,21	1,8	1,06	1,09	1,04
Sm	0,045	0,043	0,051	0,062	0,065	0,033
Eu	0,02	0,03	0,04	0,05	0,07	0,03
Hf	0,08	0,07	0,12	0,09	0,11	0,06
Rb	7,5	6,8	5,5	4,8	6,4	7,3
Ta	0,01	0,02	0,07	0,03	0,04	0,05
La	0,34	0,44	0,67	0,38	0,61	0,51

Наименование образцов:

№ 1 – *Phlomoides Speciosa* (в период цветения);

№ 2 – *Phlomoides Speciosa* (до цветения);

№ 3 – *Phlomoides isochila* (до цветения)

№ 4 – *Phlomoides isochila* (в период цветения);

№ 5 – *Phlomoides nuda* (в период цветения);

№ 6 – *Phlomoides nuda* (до цветения);

Выводы

Таким образом, в результате проведенной работы была определена концентрация 35 макро- и микроэлементов растения *Phlomoides*, собранного в территории Янгикурганского района Наманганской области.

Определены содержание макро- и микроэлементного состава растения *Phlomoides*, произрастающей на территории Узбекистана. В надземной части растения *Phlomoides Speciosa* до цветения и в период цветения (табл. 1) наблюдалось снижение количественного содержания макро- и микроэлементов: Ag, Ba, Br, Sa, Co, Cr, Cs, Hg, K, Mg, Mn, Rb, Se, Ce, Eu, Rb, Ta, La.

В надземной части растения *Phlomoides Speciosa* наблюдается увеличение количественного содержания макро и микроэлементов до цветения и в периоды цветения: As, Au, Cl, Cu, Fe, Mo, Na, Ni, Sr, Zn, U, Th, Ym, Yb, Sm, Hf.

В надземной части растения *Phlomoides Isochila* в периоды до и после цветения наблюдалось снижение количественного содержания макро- и микроэлементов: As, Au, Ba, Br, Sa, Co, Cr, Cs, Cu, K, Mn, Na, Sr, Yb, Ce, Hf, Rb, Ta, La

В надземной части растения *Phlomoides Isochila* наблюдалось увеличение количественного содержания макро и микроэлементов до цветения и в периоды цветения: Ag, Cl, Fe, Hg, Mg, Mo, Ni, Rb, Se, Zn, U, Th, Y, Sm, Eu.

В надземной части растения *Phlomoides Nuda* в периоды до и после цветения наблюдалось снижение количественного содержания макро- и микроэлементов: Br, Co, Fe, Hg, K, Mg, Mn, Mo, Na, Ni, Rb, Se, Sr, Th.

В надземной части растения *Phlomoides Nuda* наблюдалось увеличение количественного содержания макро и микроэлементов до цветения и в периоды цветения: Ag, As, Au, Ba, Sa, Cl, Cr, Cs, Cu, Zn, U, Y, Yb, Ce, Sm, Eu, Hf, Rb, Ta, La

Список литературы:

1. Флора Узбекистана. – Ташкент : Изд. АН Уз ССР, 1955. – С. 43.
2. Растительные ресурсы СССР: Цветковые растения, их химический состав, использование. СПб.: Наука, 1991. 352 с.
3. П.К. Игамбердиева, Е.А. Данилова, Н.С. Осинская. Исследование содержания химических элементов в лекарственных растениях южной Ферганы и перспективы применения их при лечении заболеваний. // Журнал: Микроэлементы в медицине, 2016, № 17(3): стр.48-53.
4. Попов А.И. Макро- и микроэлементы чаги, заготовленной в Кемеровской области и республике Тыва / А.И. Попов, Д.Н.Шпанько// Фармация на современном этапе-проблемы и достижения: сб.науч.тр.-Москва, 2000.-Т.ХХХІ 4.ІІІ/-С/251-253.
5. Патогенетическое применение некоторых микроэлементов при лечении анемии / И.Ю.Попова [и др.] // Экспериментальная и клиническая фармакология.-1996.-Т.59, № 3.- С. 72-73.
6. Иммуномодуляторы растительного происхождения /А.Д.Бакуридзе [и др.] // Хим.-фармац.журн.-1993.- № 8.- С. 43-47.
7. АА. Круглая. Макро-и Микроэлементный состав травы зопника колючего и зопника клубненосного, произрастающих на Северном Кавказе. Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация, 2006, № 2- С. 294-296.
8. Определение металлов Ca, Ti, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Zn, Sr, Ba, Pb в лекарственных растениях методом рентгенофлуоресцентного анализа/ Е.В. Чупарина [и др.] // Аналитика и контроль. – 2008. – Т. 12, №1–2. – С. 2–10.
9. Микроэлементы в обмене веществ растений. – Киев: Наук. думка, 1976. – 08 с.
10. Xaydarova D., Abdullaev Sh.V. Letuchie komponenti Scutellaria comosa. Nauchniy vestnik Samarkandskogo gosudarstvennogo universiteta 2018,5(111), 142-146 str.

АМАРАНТ - ПРИРОДНЫЙ РЕСУРС, БОГАТЫЙ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ

Аскарлов Иброхим Рахмонович

д-р хим. наук, профессор
Андижанского Государственного Университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан

Юлчиева Нафиса Тождидиновна

преп. кафедры химии
Андижанского государственного университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: nafisa.yulchiyeva@bk.ru

AMARANTH IS A NATURAL RESOURCE RICH IN BIOLOGICALLY ACTIVE COMPOUNDS

Ibrokhir Askarov

Dr. chem. scientist, professor
of Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andizhan

Nafisa Yulchieva

Teacher of the Department of Chemistry
of Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andizhan

АННОТАЦИЯ

Статья содержит информацию об амаранте и его биологически активных соединениях. Также в статье кратко представлено о целебных свойствах этих соединений.

ABSTRACT

The article contains information about amaranth and its biologically active compounds. The article also briefly describes the healing properties of these compounds.

Ключевые слова: амарант, биологически активные вещества, сквален, аминокислоты, беталаин.

Keywords: amaranth, biologically active substances, squalene, amino acids, betalaine

Известно, что со второй половины XX века произошло резкое рост населения мира. По мере роста населения возникают и различные демографические проблемы. Одна из таких проблем – продовольственная проблема. Сегодня растет потребность в натуральных продуктах, которые имеют необходимые для человеческого организма компоненты, т.е. богатые качественными белками, углеводами, витаминами, микроэлементами и другими биологически активными соединениями, а также обладают высокими лечебными свойствами. Употребление натуральных лекарственных средств не только укрепляет иммунную систему человеческого организма, но и играет важную роль в устранении различных заболеваний.

Одним из растений, обладающих такими полезными свойствами и широко применяемых в современной медицине и народной медицине, является амарант.

У этого вида растений 29-45% поверхностного покрова составляют листья, 30-35% стеблевая часть

и 18-25% соцветия. За счет сухой массы в листьях амаранта может накапливаться до 30% высококачественного белка [1].

Во многих странах растения семейства *Amaranthus L* используются в декоративных, пищевых, кормовых и технологических целях в сельском хозяйстве, фармацевтике, пищевой промышленности и других областях.

В настоящее время существует 75 видов, принадлежащих к роду *Amaranthus L*, которые растут в основном в жарком и умеренном климате земного шара.

Компоненты амаранта, такие как цветы, семена, стебли и листья, отличаются от других родственных растений своей высокой питательной ценностью [2].

Биологическая ценность этого растения была еще больше повышена, когда исследования этого растения показали, что семена содержат сквален, незаменимые аминокислоты, антиоксиданты, высококачественные эфирные масла, токоферолы, витамины и минералы, которые очень полезны для человеческого

организма. Эти биологически активные соединения играют важную роль в поддержании здоровья человека.

Тот факт, что это растение может расти даже на почвах с низким плодородием, говорит о том, что это перспективное растение.

Листья амаранта содержат больше незаменимых аминокислот, таких как лизин, валин, гистидин, триптофан, фенилаланин, лейцин, изолейцин и метионин, чем другие части. В частности, лизин, который в небольших количествах присутствует в аминокислотах растительных белков, содержится в этом растении в количестве от 4,73% до 6,17% (таблица 1) [3].

Таблица 1.

Некоторые аминокислоты, входящие в состав листьев амаранта

Аминокислота	Массовая доля аминокислот, %
Аргинин	25,10
Аспарагиновая кислота	14,42
Глутамин	10,92
Глутаминовая кислота	5,60
Лизин	5,34
Фенилаланин	4,85
Аланин	4,71
Тирозин	3,71
Валин	3,55
Серин	3,47
Лейцин	2,73
Глицин	2,17
γ -Аминомасляная кислота	1,78
Изолейцин	1,44
Фосфосерин	1,36
Метионин	1,23
Треонин	1,11
Этаноламин	0,90
Аспарагин	0,80
Орнитин	0,66
Аминоадипиновая кислота	0,33
Пролин	0,16

Амарант содержит терпеноиды, эфирные масла, сквален, фитостеролы, фенольные соединения и многие другие типы биологически активных соединений, которые важны для поддержания здоровья человека [4].

Препараты на основе растения амаранта широко используются в фитотерапии. В организме они ак-

тивно участвуют в обмене веществ, укрепляют иммунную систему и предотвращают риск развития хронических заболеваний, вызванных свободно-радикальным окислением.

В листьях этого растения обнаружены основные метаболиты-антиоксиданты, такие как амарантин, аскорбиновая кислота, сквален и каротиноиды [5].

Амарантин

Сквален содержится в масле амаранта в количестве до 10%, в зависимости от вида амаранта и метода экстракции. Количество сквалена в растительных маслах, используемых ежедневно, очень мало.

Сквален - это полиненасыщенный тритерпен, один из биологически активных соединений, который является основным компонентом масляного слоя кожи человека с высоким содержанием антиоксидантов. Сквален усиливает защитную функцию кожи (особенно функцию защиты от солнечных лучей). Количество сквалена в липидах кожи человека зависит от возраста, т.е. количество сквалена в коже человека с возрастом уменьшается [6].

Было обнаружено, что общее количество антиоксидантов в амаранте может быть меньше в несформированных молодых листьях и больше в сформированных листьях. Водные экстракты листьев амаранта содержат высокоактивные антиоксидантные соединения: арбутин (гидрохинонгликозид), феруловую кислоту, хлороген, оксibenзойную (галловую) кислоту [7].

Арбутин

Феруловая кислота

Масло амаранта содержит сложные биологически активные соединения, такие как токоферолы, полиненасыщенные жирные кислоты, витамины, фитостеролы и сквален, которые используются при лечении и профилактике многих заболеваний. Масло амаранта содержит больше токоферолов и сквалена, чем другие вещества. Он имеет полезные свойства в предотвращении метаболических нарушений в организме и повышении иммунитета.

Масло амаранта богато ненасыщенными жирными кислотами, такими как линолевая и линоленовая, которые играют важную роль в биосинтезе липидов.

Амарантовое масло также содержит больше тетрациклических спиртов-фитостеринов, чем другие растения, которые являются одним из основных компонентов клеточной мембраны. Они также являются соединениями, играющими важную роль в метаболизме клеток. Фитостеролы замедляют перенос холестерина в кровотоки и снижают риск сердечно-сосудистых заболеваний [8].

В соцветиях и листьях почти всех представителей видов растений, принадлежащих к семейству Amaranthaceae, присутствуют пигменты беталаина разного цвета, и эта биомасса растений является важной альтернативой источников беталаинов.

В беталаиновых пигментах составных частей амаранта присутствуют такие пигменты, как допамин, бетаксантин (Мираксантин V), 3-метокситирамин-бетаксантин и (S)-триптофанбетаксантин, амарантин, изоамарантин, гомфренин I, бетаксантин [9].

В пищевой промышленности эти растительные экстракты очень эффективны в качестве натуральных пищевых красителей.

В современной медицине и народной медицине амарант применяется при лечении и профилактике гипертонии, ишемической болезни сердца, остеопороза, снижении холестерина в крови, остановке роста раковых клеток, катаракте, блефарите, конъюнктивите, катаракте, респираторных заболеваниях, заболеваниях полости рта и кожи.

Лечебные свойства амаранта очень широки, он не только лекарство от вышеперечисленных заболеваний, но и активно участвует в поддержании баланса витаминов в организме.

Одной из важных задач, стоящих сегодня перед отраслью, является изучение химического состава и биологической активности продуктов с высокими лечебными свойствами, полученных в результате переработки сортов амаранта, внедренных в нашей стране, и на их основе создание и внедрение новых видов пищевых добавок.

Список литературы:

1. Зеленков В.Н., Гулышина В.А., Терешкина Л.Б. Амарант. Агробιοлогический портрет. М.: Изд.«РАЕН». 2008. 101 с.
2. Гинс В.К., Гинс М.С., Торрес Миньо К.Х., Пивоваров В.Ф., Кононков П.Ф. Функциональные продукты питания из семян и листьев амаранта. М.: ВНИИССОК, 2015.
3. Слонов Л.Х., Шугушева Л.Х. Содержание белка и аминокислот в органах растений амаранта // Современные проблемы науки и образования. 2015. № 2. С. 577.

4. Marcone, M.F., Kakuda, Y., and Yada, R.Y. (2003). Amaranth as a rich dietary source of beta-sitosterol and other phytosterols. *Plant Foods Hum. Nutr.* 58: 207–211.
5. O. Araceli López-Mejía et al. Antioxidant capacity of extracts from amaranth (*Amaranthushypochondriacus* L.) seeds or leaves. *Industrial Crops and Products* 53 (2014) 55–59.
6. RamakrishnanRameshkumar et al. Production of squalene with promising antioxidant properties in callus cultures of *Nilgiranthus ciliatus* *Industrial Crops and Products* Volume 126, 15 December 2018, Pages 357-367
7. F.F. Dinssa et al . Effect of leaf harvest on grain yield and nutrient content of diverse amaranth entries. *Scientia Horticulturae* 236 (2018) 146–157.
8. Л.А. Михеева, Г.Т. Брынских, А.Р. Якубова. Экстракция амарантового масла и изучение его физико-химических свойств. *Ульяновский медико-биологический журнал.* № 3, 2014. С. 127-132.
9. Yi-Zhong Caia , Mei Sunb and Harold Corkea .Characterization and application of betalain pigments from plants of the *Amaranthaceae*. *Trends in Food Science & Technology* 16 (2005) 370–376.

РАДИОХИМИЯ**ИЗУЧЕНИЕ СТЕПЕНИ СВЯЗЫВАНИЯ РАДИОНУКЛИДА ЙОД-125
С РАЗЛИЧНЫМИ БИОЛОГИЧЕСКИМИ МАКРОМОЛЕКУЛАМИ****Хажиев Лазизбек Озодович**

соискатель PhD степени Института ядерной физики АН РУз,
инженер-технолог ГП «Радиопрепарат»,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: hajiyev.lazizbek@mail.ru

Садиков Илхом Исмоилович

доц. тех. наук, профессор,
директор Института ядерной физики АН РУз,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Абдукаюмов Аюбхон Мелисович

канд. тех. наук, директор Предприятия «Радиопрепарат»
Институт ядерной физики АН РУз,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Усаров Зафар Омонович

канд. тех. наук,
Начальник ОКП Предприятия «Радиопрепарат»,
Институт ядерной физики АН РУз,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

**STUDY OF THE DEGREE OF BINDING OF IODINE-125 RADIONUCLIDE
WITH VARIOUS BIOLOGICAL MACROMOLECULES****Lazizbek Khajiev**

Independent aspirant Institute of nuclear physics AS RUz
and engineer-technologist State Enterprise «Radiopreпарат» INP AS RUz,
Tashkent, Uzbekistan

Ilhom Sadikov

Doctor of Science, professor,
Director Institute of nuclear physics AS RUz,
Tashkent, Uzbekistan

Ayubkhan Abdukayumov

Candidate of Science,
Director State Enterprise «Radiopreпарат» INP AS RUz,
Tashkent, Uzbekistan

Zafar Usarov

Candidate of Science,
Head PCD State Enterprise «Radiopreпарат» INP AS RUz,
Tashkent, Uzbekistan

АННОТАЦИЯ

Статья посвящена исследованию степени связывания радионуклида йод-125 без носителя с биологическими макромолекулами методом жидкостного электрофореза и гамма-радиометрии. В качестве носителя использована смесь йодида, йодата и гидрокарбоната натрия, а в качестве электролита фосфатный буферный раствор с pH $7,0 \pm 0,2$. Показано, что степень связывания йод-125 с макромолекулами использованных в экспериментах составила более 90 %.

ABSTRACT

The article is devoted to the study of the degree of binding of the iodine-125 radionuclide without a carrier to biological macromolecules by liquid electrophoresis and gamma radiometry. A mixture of iodide, iodate and sodium bicarbonate was used as a carrier, and a phosphate buffer solution with a pH of 7.0 ± 0.2 was used as an electrolyte. It was shown that the degree of binding of iodine-125 with macromolecules used in the experiments was more than 90%.

Ключевые слова: макромолекула, гамма-радиометр, лактопероксидаза адренкортикотропин гипоталамуса, реактив Болтон-Хантера, буферный раствор.

Keywords: macromolecule, gamma radiometer, lactoperoxidase adrenocorticotroping, hypothalamus, Bolton-Hunter reagent, buffer solution.

Введение

Соединения, меченные радиоизотопами йода, являются тонким инструментом исследований в различных областях ядерной медицины, а также в диагностике и лечении при различных онкологических заболеваниях.

Среди радиоактивных изотопов йода самым популярным для исследовательских работ в науке и медицине является йод-125. Это связано с тем, что йод-125 имеет удобный для исследований период полураспада и энергию ядерного излучения. Исследования с йодом-125, в основном, проводятся в присутствии белков и пептидов, которые широко используются для иммунологических, рецепторных, гормональных и др. исследований. При йодировании белка его физико-химические и био-физиологические свойства практически не меняются, что очень важно для последующего использования меченого препарата.

Использование ^{125}I в радиоиммунном анализе и радиорецепторном тестировании позволяет определить количество вещества не только в плазме или сыворотке крови, но и в любой биологической жидкости, выяснить его физиологические свойства, его иммунореактивность и биологическую активность. Как химическая модификация, радиойодирование используется для исследования локализации тирозиновых и гистидиновых остатков в белковой макромолекуле, их участия в функционировании белка, при проведении фармакокинетических исследований, для оценки скорости выведения из организма различных антибиотиков, соматотропных, психотропных и других лекарственных препаратов. Достоверность получаемой информации в существенной степени зависит от качества используемого радиолиганда [1]. Радиойодирование белков, нуклеиновых кислот и их компонентов широко применяется при изучении их метаболизма, рецепции, локализации в надмолекулярных структурах, для радиотестирования *in vitro* и *in vivo* в медицине [2-4].

В настоящей работе приведены результаты экспериментов по исследованию степени связывания радионуклида йода-125 без носителя с различными биологическими макромолекулами методом жидкостного электрофореза.

Экспериментальная часть

Связывание радионуклида йода-125 с биологическими макромолекулами определяли методом жидкостного электрофореза. В качестве носителя

использовали смесь йодида, йодата и гидрокарбоната натрия, а в качестве электролита фосфатный буферный раствор с pH $7,0 \pm 0,2$. Измерение распределения активности ^{125}I по длине хроматографической полоски проводили с использованием четырехканального γ -радиометрического устройства NP-424L.

Реактивы: хлорамин-Т, адренкортикотропин гипоталамуса (АКТГ), реактив Болтона-Хантера (БХ), лактопероксидаза (ЛП) - (SigmaAldrich (США)), гидрокарбонат натрия (NaHCO_3), йодат калия (KIO_3), йодид калия (KI), калий фосфорнокислый однозамещенный (KH_2PO_4), натрий фосфорнокислый двузамещенный безводный (Na_2HPO_4) – квалификации «хч».

Методика эксперимента: для определения связывания радионуклида йод-125 с биологическими макромолекулами в три конические пробирки Эппендорфа (объем 0,5 мл) вносили по 5 мкл и субстанции йодида натрия, меченого йодом-125. В первую и вторую пробирку вносили по 10 мкл раствора хлорамина-Т, а в третью пробирку 15 мкл раствора ЛП (2 мг/мл) и хорошо перемешивали. Через 2-3 мин в первую пробирку добавили 15 мкл раствора АКТГ (2 мг/мл), во вторую пробирку 20 мкл реактива БХ (2 мг/мл) и в третью пробирку 15 мкл раствора АКТГ (2 мг/мл) и вновь тщательно перемешивали.

Реакционную смесь помещали в термостат с температурой 37°C на 15 мин. Затем в каждую реакционную смесь добавляли 250 мкл дистиллированной воды.

Полоски хроматографической бумаги готовили следующим образом. Бумагу марки «С» разрезали на полоски размером 15 x 250 мм. Отступив от одного края на 50 мм (стартовая линия), наносили 10-20 мкл раствора носителя (состав носителя - 100 мг йодида калия, 200 мг йодата калия и 1 г бикарбоната натрия в 100 мл бидистиллированной воде). После высушивания раствора на воздухе, на то же место наносили 1 мкл раствора макромолекулы, меченой ^{125}I (активность 0,96 МБк).

Полоску увлажняли фосфатным буферным раствором с pH $7,0 \pm 0,2$ и помещали в камеру прибора для электрофореза так, чтобы линия старта располагалась со стороны катода. Разделение проводили в течение 50 мин в охлажденной камере при градиенте потенциала 16 В/см. В качестве электролита использовали фосфатный буферный раствор с pH $7,0 \pm 0,2$.

Полученную электрофореграмму высушивали при комнатной температуре, обклеивали с двух сторон полиэтиленовой пленкой с липким слоем (ГОСТ 20477-86) и измеряли скорость счета отдельных участков электрофореграммы шириной по 1 см, начиная от линии старта к финишу радиометрическим методом.

По проявленной электрофореграмме определяли степень связывания ^{125}I в макромолекулу измерением с помощью γ -радиометрического устройства в течение 10 с. Доля макромолекулы, меченого йодом-125 в реакционной смеси должна быть не менее 85,0 % от общей радиоактивности, а значение R_f в пределах 0,0-0,4, в то время как значение R_f не связанных ионов йода-125 в пределах $0,9 \pm 0,02$. Перед измерениями гамма активности измеряли фон, 3 раза по 10 с. Результат усредняли.

По соотношению площадей пиков, соответствующих основной ^{125}I -макромолекуле и примесным формам йода-125 ионов вычисляли степень связывания:

$$D_{\text{св}} = \frac{\sum_{\text{пик}}}{\sum_{\text{общ}}} \times 100\%$$

где:

$\sum_{\text{пик}}$ – сумма импульсов ^{125}I -макромолекулы в пике;

$\sum_{\text{общ}}$ – общая сумма импульсов;

$D_{\text{св}}$ – степень связывания.

Результаты измерений приведены в таблице 1 и рисунке 1.

Таблица 1.

Результаты измерений мечения радионуклида йода-125, без носителя с различными биологическими макромолекулами

№	Наименование биологической макромолекулы		
	АКТГ с ХЛТ	БХ с ХЛТ	АКТГ с ЛП
1	10182	10141	11447
2	64346	53770	46587
3	29495	11734	20463
4	4549	2188	3308
5	306	388	315
6	257	220	289
7	281	267	276
8	320	240	231
9	1031	261	466
10	3070	656	1410
11	1150	229	265
12	210	215	218
$D_{\text{св}}$	94,5 %	97,4 %	96,3%

Рисунок 1. Гистограмма распределения ^{125}I -макромолекулы по длине электрофореграммы

Заключение

Методом жидкостного электрофореза и гамма-радиометрии исследована степень связывания ради-

онуклида йод-125 при мечении им различных макромолекул белков и пептидов. Экспериментально установлено, что степень связывания йода-125 со всеми тремя исследованными макромолекулами составляет более 90%.

Список литературы:

1. Макаренко М.В., Усанов С.А. Синтез и тестирование [^{125}I]-маркеров для аналитических целей: Проблемы и новые подходы // Институт биоорганической химии НАНБ. Минск, 2006. №1.-С. 268-279.
2. Миролубова О.Ю., Макаренко М.В., Климович В.Б., и др. Распределение [^{125}I]-моноклональных антител к белкам Бенс-Джонса в организме животных// Мед. радиология.-1990. Т. 35, №6.- С. 25-27.
3. Макаренко М.В. Ферментативный способ получения [^{125}I]-меченных белковых антигенов и моноклональных антител// Вести НАН Беларуси. Сер. хим. н.-1992. №5-6.-С. 79-84.
4. Дрожденюк А.П., Макаренко М.В., Сенчук Ю.В., Усанов С.А., Мороз И.Н. Специфическое микроопределение ретинол-связывающего белка человека в биологических жидкостях // VI Менделеевский съезд общей прикладной химии. Москва, 1998.-С. 44-45.

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СИНТЕЗИРОВАННЫХ СОЛЕЙ
ЧЕТВЕРТИЧНОГО АММОНИЯ**Бурихонов Бахтиёр Холмирзаевич**

д-р философии по химии,
Каршинский государственный университет,
Республика Узбекистана, г. Карши
E-mail: borixonov90@mail.ru

Холиков Турсинали Суюнович

д-р хим наук, доцент,
Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистана, г. Ташкент
E-mail: tursunali72@mail.ru

Тажимухамедов Хабибулла Сайфуллаевич

канд.хим. наук, доцент,
Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистана, г. Ташкент

QUANTUM-CHEMICAL PROPERTIES OF SYNTHESIZED SALTS
OF QUATERNARY AMMONIUM**Bakhtiyor Burikhonov**

Doctor of Philosophy in Chemistry
Karshi State University,
Republic of Uzbekistan, Karshi

Tursinali Kholikov

Doctor of Chemical Sciences, Professor
National Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Khabibulla Tadjimukhamedov

Candidat of chemical Sciences, assistant professor
National Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Квантово-химические свойства новых солей четвертичного аммония, синтезированных на основе N-бутилморфолина, рассчитаны с использованием метода B3LYP и 6-311G (d, p) сет. Были идентифицированы некоторые квантовые свойства молекул, такие как химическая твердость, электроотрицательность, электронный химический потенциал, электрофильность и химическая мягкость. Из результатов видно, что полученные соли четвертичного аммония можно использовать в качестве катализаторов.

ABSTRACT

The quantum-chemical properties of new quaternary ammonium salts synthesized on the basis of N-butylmorpholine were calculated using the B3LYP and 6-311G (d, p) set method. Several quantum properties of molecules have been identified, such as chemical hardness, electronegativity, electronic chemical potential, electrophilicity, and chemical softness. It can be seen from the results obtained that the obtained quaternary ammonium salts can be used as catalysts.

Ключевые слова: ион, энтропия, химическая связь, электронная активность, потенциал, ионизация, орбитали, квантово-химические теории.

Keywords: ion, entropy, chemical bond, electronic activity, potential, ionization, orbitals, quantum chemical theories.

Соли четвертичного аммония сегодня широко используются во многих областях, включая диамины геминальной структуры. [1; 630-638 с], триамины [2; 506–516 с], азофенотиазины [2; 774-806 с.], тетрагидропиридины [3; 97-106 с], □-карболины [4; 447-461 с] показано, что полученные на их основе соли четвертичного аммония могут применяться против различных заболеваний и патогенных микроорганизмов. Полученные четвертичные аммониевые соли бензалкония представляют собой биоциды, детергенты и межфазные катализаторы по Grillitsch et al. [5; 11-118 с.], гидрофобные и гидрофильные агенты [6; 313–320 с.], А Дебрецем и Местян используют эти соли в качестве консервантов, офтальмологических, назальных и внутривенных препаратов [7; С. 313-320].

Результаты и их анализ

Мы пронумеровали соединения, проанализированные квантово-химическими методами, в следующем порядке.

1.4-Бутил-4- (2- (нонилокси) -2оксоэтил) морфолин-4-аммоний хлорид

2.4-(2-(Бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-аммоний хлорид

3.4-Бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил) морфолин-4-аммоний хлорид

4.1-(2-(Нонилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-аммоний хлорид

5.1-(2-Оксо-3-фенилпропил)пиридинаммоний хлорид

6.1-(2-Оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-аммоний хлорид

Перед началом квантово-химических расчетов изучаемые вещества были оптимизированы, и значения квантово-химических свойств были найдены с использованием энергий связывания (LUMOs) и разрыхления (HOMOs) орбиталей. Полученные результаты были выражены следующими формулами (1-5) и представлены в таблице 1.1.

$$\text{Химическая связь, } \eta \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{Энергия связывающих орбиталей (LUMO) (eV)} - E_{\text{НОМО (eV)}}}{2} \quad (1)$$

$$\text{Электронная активность, } \chi \text{ (eV)} = \frac{-(E_{\text{LUMO (eV)}} - E_{\text{НОМО (eV)}})}{2} \quad (2)$$

$$\text{Химический электронный потенциал, } \mu \text{ (eV)} = \frac{E_{\text{LUMO (eV)}} + E_{\text{НОМО (eV)}}}{2} \quad (3)$$

$$\text{Глобальный индекс электрофильности, } \omega \text{ (eV)} = \frac{\mu^2 \text{ (eV)}}{2\eta \text{ (eV)}} \quad (4)$$

$$\text{Химическая Мягкость, } s \text{ (eV)} = \frac{1}{2\eta \text{ (eV)}} \quad (5)$$

В квантово-химических теориях энергия связывающих орбиталей (HUMO) указывает на склонность электронно-склонных молекул.

Энергия релаксирующих орбиталей (HOMOs) объясняет обратное. В результате теоретических расчетов (2-6) было обнаружено, что соединения имеют относительно высокое сродство к электрону по сравнению с другими соединениями и были расположены в порядке $2 > 6 > 5 > 1 > 3 > 4$. (2-6) можно объяснить тем, что сродство к электрону в соединениях увеличивает сродство к электрону за счет групп COO^- , $\text{-C}_6\text{H}_5$.

При анализе результатов установлено, что потенциалы ионизации располагались в следующем порядке: $2 > 1 > 3 > 4 > 6 > 5$. Было обнаружено, что соединения (2-1) имеют более высокий потенциал ионизации, чем другие соединения, из-за сильных ионизационных радикалов C_4H_9 , C_6H_5 .

Согласно квантово-химическим теориям, меньшее значение разницы между энергией связывающих орбиталей (LUMO) и энергией высвобождающихся орбиталей (HUMOs) представляет стабильность и нестабильность молекул. То есть, чем меньше разница, тем стабильнее молекула и ниже ее реакционная способность. В противном случае реактивность будет высокой. В целом результаты полученных соединений показали, что все молекулы обладают высокой реакционной способностью, поскольку разница энергий между молекулами оказалась меньше 0,3 эВ,

и результаты были расположены в следующем порядке: $2 < 1 < 3 < 5 < 6 < 4$ При связывании с атомом N радикалами CH_2 электроноакцепторные группы частично заряжают молекулу отрицательно. Теория связывающих орбиталей (LUMO) и теория свободной орбиты (HOMOs) интерпретируется рисунками 1–10 ниже. Как видно из этих изображений, связывающие орбитали (HUMOs) описывают электроноакцепторные валентные электроны. **Химическая твердость и химическая мягкость.**

Химическая твердость и химическая мягкость показывают химическую стойкость молекулы к изменению деформации. Химическая мягкость показывает обратное. Из полученных результатов известно, что все синтезированные соли четвертичного аммония являются химически мягкими молекулами, т.е. обладают высокой деформирующей способностью.

Электрофильность. Электрофильность полученных соединений указывает на кислотность по Льюису. Когда он изучал зависимость физико-химических свойств от структуры молекул, то есть, момента деполяризации свойств и растворимости, было обнаружено, что все синтезированные соединения имели значения электрофильности менее 0,3 эВ. Таким образом, эти соединения оказались слабыми литическими кислотами и были расположены в следующем порядке в зависимости от уровня силы $3 > 6 > 5 > 1 > 4 > 2$.

Теоретические термодинамические свойства – в которых полярность дипольного момента определяет тепловую энергию, теплоемкость и энтропию. Результаты показали, что все соли имеют хорошую полярность с дипольным эффектом на молекулу. Мы разместили полярности в следующей последовательности: 6,8 (2) > 3,8 (4) > 3,7 (5) > 3,4 (6) > 2,5 (3) > 2,3 (1)

Теплоемкость и энтропия имеют следующий порядок (103) 1 > (85) 3 > (77) 4 > (61) 2 > (59) 6 > (56) 5. Результаты показывают, было обнаружено, что хлорид - (2 - (нонилокси) -2-оксоэтил) морфолин-4-аммония обладает высокой теплоемкостью. Причина - наличие циклического кольца и крупных алифатических радикалов.

Таблица 1.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил) морфолин-4-иума (298,150 K)

Параметры	4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорид
E_{LUMO} , eV	-0.12
E_{HOMO} , eV	-0.19
E_g , eV	0.07
Электронное сродство, eV	-0.12
Потенциал ионизации, eV	-0.19
Потенциал ионизации, η , eV	0.035
Электроотрицательность, χ , eV	-0.035
Электронный химический потенциал, μ , eV	-0.155
Глобальный индекс электрофильности, ω , eV	0.343
Химическая мягкость, s , eV	14.285
Дипольный момент, Debye	2.331
Поляризуемость (α), a.u.	217.009
$E(UB3LYP)$, Hartree	-1026.989
E (Thermal), kcal/mol	368.358
Теплоемкость (C_v), cal/mol-kelvin	103.726
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	206.171

Рисунок 1. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорида

Рисунок 2. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-(нонилокси)-2-оксоэтил)морфолин-4-иум хлорида

Таблица 2.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иума (298,150 К)

Параметры	4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-хлорид иум
E_{LUMO} , eV	0.023
E_{HOMO} , eV	-0.040
E_g , eV	0.063
Электронное сродство, eV	0.023
Потенциал ионизации, eV	-0.040
Потенциал ионизации, η , eV	0.0315
Электроотрицательность, χ , eV	-0.0315
Электронный химический потенциал, μ , eV	-0.0085
Глобальный индекс электрофильности, ω , eV	0.00114
Химическая мягкость, s , eV	15.873
Дипольный момент, Debye	6.844
Поляризуемость (α), а.е.	256.624
$E(UB3LYP)$, Hartree	-943.056
E (Thermal), kcal/mol	260.100
Теплоемкость (C_v), cal/mol-kelvin	61.915
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	122.084

Рисунок 3. Орбитали LUMO хлорида 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иум

Рисунок 4. LUMO-орбитали 4-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)-4-бутилморфолин-4-иум хлорида

Таблица 3.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси) этил)морфолин-4-хлорида алюминия (298,150 К)

Параметры	4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)морфолин-4-иум хлорид
E_{LUMO} , eV	-0.115
E_{HOMO} , eV	-0.195
E_g , eV	0.08
Электронное сродство, eV	-0.115
Потенциал ионизации, eV	-0.195
Потенциал ионизации, η , eV	0.04
Электроотрицательность, χ , eV	-0.04
Электронный химический потенциал, μ , eV	-0.155
Глобальный индекс электрофильности, ω , eV	0.3
Химическая мягкость, s , eV	12.5
Дипольный момент, Debye	2.528
Поляризуемость (α), a.u.	173.706
$E(UB3LYP)$, Hartree	-869.772
E (Thermal), kcal/mol	292.364
Теплоемкость (C_v), cal/mol-kelvin	85.510
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	178.488

Рисунок 5. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)морфолин-4-иум хлорида

Рисунок 6. LUMO-орбитали 4-бутил-4-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси) этил) морфолин-4-иум хлорида

Таблица 4.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил) пиридин-1-иума (298, 150 K)

Параметры	Хлорид 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-иума
E_{LUMO} , eV	-0.022
E_{HOMO} , eV	-0.244
E_g , eV	0.222
Электронное сродство, eV	-0.022
Потенциал ионизации, eV	-0.244
Потенциал ионизации, η , eV	0.111
Электроотрицательность, χ , eV	-0.111
Электронный химический потенциал, μ , eV	-0.133
Глобальный индекс электрофильности, ω , eV	0.16
Химическая мягкость, s , eV	4.5
Дипольный момент, Debye	3.7
Поляризуемость (α), а.е.	154.83
$E(\text{UB3LYP})$, Hartree	-746.866
$E(\text{Thermal})$, kcal/mol	167.636
Теплоемкость (C_v), cal/mol-kelvin	56.803
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	138.503

Рисунок 9. LUMO Орбитали хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил)пиридин-1-иума

Рисунок 10. LUMO-орбитали хлорида 1-(2-(бензилокси)-2-оксоэтил) пиридин-1-иума

Таблица 5.

Энергетические значения глобальной реакционной способности и термодинамические параметры для 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-хлорида (298, 150 K)

Параметры	Хлорид 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-иума
E_{LUMO} , eV	-0.013
E_{HOMO} , eV	-0.243
E_g , eV	0.230
Электронное сродство, eV	-0.013
Потенциал ионизации, eV	-0.243
Потенциал ионизации, η , eV	0.115
Электроотрицательность, χ , eV	-0.115
Электронный химический потенциал, μ , eV	-0.256
Глобальный индекс электрофильности, ω , eV	0.285
Химическая мягкость, s , eV	4.347
Дипольный момент, Debye	3.432
Поляризуемость (α), a.u.	134.878
$E(UB3LYP)$, Hartree	-673.092
E (Thermal), kcal/mol	188.553-
Теплоемкость (C_v), cal/mol-kelvin	58.999
Энтропия (S), cal/mol-kelvin	137.442

Рисунок 11. LUMO Орбитали хлорида 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-иума

Рисунок 12. LUMO-орбитали хлорида 1-(2-оксо-2-(пентан-2-илокси)этил)пиридин-1-

Заключение

Пиридин, н-бутилморфолин, диэтиланилин, диметиланилин, диэтиленоламин, диметилбензиламины из третичных аминов использовались при образовании четвертичных солей. По результатам

экспериментов была сравнена реакционная способность третичных аминов, и мы расположили их в следующем порядке.

Список литературы:

1. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Guobao Xu, Aboubakr M. Abdullah, Morteza Hosseini, New anti-corrosion inhibitor (3ar,6ar)-3a,6a-di-ptolyltetrahydroimidazo[4,5-d]imidazole-2,5(1 h,3h)-dithione for carbon steel in 1 M HCl medium: gravimetric, electrochemical, surface and quantum chemical analyses, Arabian Journal of Chemistry (2020) 13, 7504–7523. <https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2020.08.025>
2. A.R. Shahmoradi, M. Ranjbarghanei, A.A. Javidparvar, L. Guo, E. Berdimurodov, BahramRamezanzadeh, Theoretical (atomic-DFT&molecular-MD), surface/electrochemical investigations of walnut fruit green husk extract as effective-biodegradable corrosion mitigating materials of a steel electrode in 1M HCl electrolyte, Journal of Molecular Liquids 338 (2021) 116550. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116550>
3. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Lei Guo, Inhibition properties of 4,5-dihydroxy-4,5-di-p-tolylimidazolidine-2-thione for use on carbon steel in an aggressive alkaline medium with chloride ions: Thermodynamic, electrochemical, surface and theoretical analyses, Journal of Molecular Liquids 327 (2021) 114813. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114813>
4. Dakeshwar Kumar Verma, MohsinKazi, Mohammed S. Alqahtani, Rabbani Syed, Elyor Berdimurodov, Savas Kaya, Rajae Salim, Ashish Asatkar, Rajesh Haldhar, N-hydroxybenzothioamide derivatives as green and efficient corrosion inhibitors for mild steel: Experimental, DFT and MC simulation approach, Journal of Molecular Structure 1241 (2021) 130648. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130648>

5. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, Lei Guo, Aboubakr M. Abdullah, Mustafa Elik, A gossypol derivative as an efficient corrosion inhibitor for St2 steel in 1 M HCl + 1 M KCl: An experimental and theoretical investigation, *Journal of Molecular Liquids* 328 (2021) 115475. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.115475>
6. Mohamed Rbaaa, Asmaa Oubihi, Halima Hajji, Burak Tüzünd, Abdelhadi Hichar, El Hassane Anouar, Elyor Berdimurodov, Mohammed Aziz Ajana, Abdelkader Zarrouk, Brahim Lakhrissi, Synthesis, bioinformatics and biological evaluation of novel pyridine based on 8-hydroxyquinoline derivatives as antibacterial agents: DFT, molecular docking and ADME/T studies, *Journal of Molecular Structure* 1244 (2021) 130934. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130934>
7. Elyor Berdimurodov, Abduvali Kholikov, Khamdam Akbarov, I.B. Obot, Lei Guo, Thioglycoluril derivative as a new and effective corrosion inhibitor for low carbon steel in a 1 M HCl medium: Experimental and theoretical investigation, *Journal of Molecular Structure* 1234 (2021) 130165. <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2021.130165>
8. Dilfuza Nuriddinova, Farkhod Yusupov, Elyor Berdimurodov, Normahmat Yodgorov and Murod Mamanazarov, Adsorption Equilibrium, Kinetics, Thermodynamics and Dynamic Separation of Magnesium and Calcium Ions from Industrial Wastewater by New Strong Acid Cation Resin of SPVC, *Pak. J. Anal. Environ. Chem.* Vol. 22, No. 1 (2021) 127 – 138. <http://doi.org/10.21743/pjaec/2021.06.13>
9. E. Berdimurodov, A. Kholikov, K. Akbarov, L. Guo, Experimental and theoretical assessment of new and eco-friendly thioglycoluril derivative as an effective corrosion inhibitor of St2 steel in the aggressive hydrochloric acid with sulfate ions, *Journal of Molecular Liquids* 335 (2021) 116168. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116168>
10. Akhror Yarkulov, Bakhrom Umarov, Feruza Rakhmatkarieva, NuritdinKattaev, Khamdam Akbarov, Elyor Berdimurodov, Diacetate Cellulose-Silicon Bionanocomposite Adsorbent for Recovery of Heavy Metal Ions and Benzene Vapours: An Experimental and Theoretical Investigation, *Biointerface Res. Appl. Chem.*, Volume 12, Issue 3, 2022, 2862 – 2880. <https://doi.org/10.33263/BRIAC123.28622880>
11. BahgatRadwan A., Mannah C.A., Sliem M.H. et al. Electrospun highly corrosion-resistant polystyrene–nickel oxide superhydrophobicnanocomposite coating. *J ApplElectrochem* (2021). <https://doi.org/10.1007/s10800-021-01603-8>
12. Berdimurodov E., Akbarov K., Kholikov A., 2019. Electrochemical frequency modulation and reactivation investigation of thioglycolurils in strong acid medium. *Adv. Mater. Res.* 1154, 122–128.
13. Berdimurodov Elyor, Wang J., Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Burikhonov, Bakhtiyor, Umirov, Nurbik, 2016. Investigation of a new corrosion inhibitor cucurbiturils for mild steel in 10% acidic medium. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 18, 21.
14. Berdimurodov, Elyor, Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Nakhatov, Innat, KhJurakulova, Nigora, Umirov, Nurbek, 2017. Adsorption isotherm and SEM investigating of cucurbit [n]urils based corrosion inhibitors with gossypol for mild steel in alkaline media containing chloride ions. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 23, 13.
15. Berdimurodov, Elyor, Kholikov, Abduvali, Akbarov, Khamdam, Nuriddinova, D., 2018. Polarization resistance parameters of anti-corrosion inhibitor of cucurbit [N] urils and thioglycolurils in aggressive mediums. *Adv. Eng. Forum, Trans Tech Publ.* 26, 74.
16. E.N. Khurramov, A.K. Abdushukurov, D.M. Buriyeva, E.T. Berdimurodov, & I. Nakhatov, Synthesis of new amides based on the n-hydroxyacetylation of ptoluidine, *International Journal of Mechanical and Production Engineering Research and Development*, Vol. 10, Issue 3, Jun 2020, 6001–6016.
17. Bakhtiyor Burikhonov, Tursinali Kholikov, Elyor Berdimurodov, Habibulla Tajimuhamedov & Shahabuddin Memon, Synthesis of new quaternary ammonium salts based on monochloroacetic acid esters, *International Journal of Mechanical and Production Engineering Research and Development*, Vol. 10, Issue 3, Jun 2020, 6017–6034.

PAPERS IN ENGLISH

BIOLOGICAL SCIENCES

GENERAL BIOLOGY

ENTOMOLOGY

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12429

CULTIVATION OF THE MEDICINAL PLANT AMARANTH AND ITS ENTOMOFAUNA

*Nodirbek Tufliiev**Professor
of Tashkent State Agrarian University,
Uzbekistan, Tashkent**Shaxodatxon Talatbek kizi Saidganieva**Doctoral student of the
Andijan Institute of Agriculture and Agrotechnologies
Uzbekistan, Andijan
E-mail: ssaidganiyeva@mail.ru*

ВЫРАЩИВАНИЕ ЛЕКАРСТВЕННОГО РАСТЕНИЯ АМАРАНТ И ЕГО ЭНТОМОФАУНА

*Туфлиев Нодирбек Хушвактович**профессор
Ташкентского государственного аграрного университета,
Республика Узбекистан, г. Ташкент**Сайдганиева Шаходатхон Талатбек кизи**докторант
Андижанского института сельского хозяйства и агротехнологий,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: ssaidganiyeva@mail.ru*

ABSTRACT

Currently, the demand for medicinal plants on the world market is growing day by day. Work is also underway on the cultivation of medicinal plants in the conditions of the Andijan region, as well as work is underway to popularize them throughout the republic. This article provides information about pests and beneficial insects encountered in the process of growing the medicinal plant amaranth.

АННОТАЦИЯ

В настоящее время спрос на лекарственные растения на мировом рынке растет день ото дня. В условиях Андижанской области тоже ведется работа по выращиванию лекарственных растений, а также ведется работа по популяризации их по всей республике. В данной статье представлена информация о вредителях и полезных насекомых, встречающихся в процессе выращивания лекарственного растения амарант.

Keywords: amaranth plant, agrotechnics, insects, pests, beet weevil, beet aphid, bedbugs.

Ключевые слова: растение амарант, агротехника, насекомые, вредители, свекловичный долгоносик, свекловичная тля, клопы.

In recent years, consistent reforms have been carried out in Uzbekistan in the field of protection of medicinal plants, rational use of natural resources, creation of plantations of medicinal and industrial plants and their processing. Similar reforms are being carried out at the Andijan Exhibition site of the Ministry of Innovation. Medicinal plants such as amaranth, stevia, and aloe, which occupy high positions in their medicinal properties, are grown at this exhibition site [1].

In recent years, a lot of attention has been paid to the amaranth plant in the republic, numerous experiments on its cultivation have been carried out. In the climatic conditions of the Andijan region, 19 species of the amaranth plant were tested as an example, of which 5 varieties were selected as promising [2].

The amaranth plant is a plant belonging to the amaranth family, which we popularly call *gultojihuroz* (comb-shaped flower). The homeland of the origin of this plant is South America, where it has been grown for seeds for 8000 years. China and India are considered to be the secondary homeland. Experiments on the cultivation of this plant have shown that, in addition to the fact that the cultivation of this plant is a source of high income for farmers, it can also be widely used in animal husbandry, poultry, food, pharmaceutical and cosmetic industries [3,4].

The amaranth plant is considered a heat-loving and light-loving plant. This corresponds to our climatic conditions and shows the prospects for further development of this direction. For our experiment on growing amaranth in 2020, the fields for planting amaranth were plowed in autumn to a depth of 25-28 cm. The land before plowing was signed with organic and mineral fertilizers. In early spring, the ground was leveled and cleared of weeds. Amaranth sowing was carried out in stable warm weather (the second decade of March), when the soil warmed up to 10-12 degrees Celsius at the depth to which the seeds fell. The correct determination of the conditions and timing of plant planting is considered a factor that ensures the simultaneous germination of amaranth seeds. The establishment of the planting dates of amaranth, of course, is considered inextricably linked with what kind of weather is planned. It should be borne in mind that the soil into which the seed has fallen must contain, in addition to heat, a sufficient amount of moisture so that the amaranth can germinate. Since the amaranth seed is covered with a hard shell,

it requires a sufficient amount of water. Therefore, if it is not planted in optimal time or the surface (up to 4 cm) soil layer has dried up, then germination of seedlings is not guaranteed in regions with a dry climate. The choice of methods of planting amaranth is one of the factors that positively affect the amount of harvest and its development. Amaranth, like other types of interstitial crops, is grown in aisles up to 60 cm wide. With the help of manual labor, such varieties of amaranth as Uzbekistan, Ulugnor, Marhamat and Andijan were sown, on average 1-2 kg of seeds per hectare. When sowing seeds in the soil, moistened, sifted sand, rotted manure, superphosphate and other products in a ratio of 1:10 or 1 were used as seed filler:5. After planting the plant, the earth was loosened, as well as cleaning from weeds. We know that in the spring months, hardenings form on any soil, which makes it difficult for amaranth seedlings to appear and develop. Therefore, 4-6 days after planting, the hardenings were softened with light softeners [5].

For the first 2-3 weeks after the emergence of amaranth seedlings on the surface, the work was focused on removing weeds, loosening row spacing and weeding. When the plants reached a height of 10-15 cm, in order to accelerate their development, along with work in the aisles, 40 kg of nitrogen and 20 kg of potash fertilizers were applied per hectare, and cultivation was carried out at a depth of 5-6 cm. When the plant reached a height of 30-35 cm, a second fertilization was carried out with nitrogen and phosphorus fertilizers of 30 kg per hectare. Top dressing of the plant was necessarily carried out before watering. After the plant was fed and watered, its growth and development accelerated.

During the growing of the amaranth plant from March to June, we witnessed the spread of harmful and beneficial species of entomofauna of this plant among them. In the period from the moment of planting the amaranth plant and before the appearance of its first 3-4 petals, we met 5-6 *Pyrrhocoris apterus* bugs per 1 m². After our plant became 10-15 cm tall, we practically did not meet these insects at experimental sites. We witnessed how the amaranth plant was infected with pest parasites as soon as it released 3-4 leaves. At our experimental site, we met crickets and beet weevils and observed that these pests cause serious harm to the amaranth plant. And since May, infection of the amaranth plant with beet aphids has been recorded (Fig.1).

a- *Pyrrhocoris apterus* bug; b-c- amaranth plant infected with beet aphids; d-f amaranth leaf infected with gnawing pests

Figure 1. Insects found on the amaranth plant and their harm

Beet aphids began to infect the plant at the time of the release of 8-10 leaves on the stem of the amaranth plant. This usually happens during the hot and dry season in hot regions. The infection of the amaranth plant with aphids in the conditions of the Andijan region occurred in May and June. The pest damaged the lower sides of the leaves and the growth points of the plant. So, aphids accumulate on the tops of the main and lateral shoots, which deform and dry up with a large number of pests. The quality of seeds of damaged plants is reduced, and this decrease in quality is 35%. When aphids propagate on fodder varieties, crop losses can reach 55%.

Beet aphid is an insect 2 mm long with a hard, convex, shiny body, the color of which depends on the type of aphid, which ranges from dark green or light brown to black. Beet aphids overwinter in the egg phase. Aphids begin to wake up in the spring, when the plants develop buds. Wingless forms of the first aphids appear,

and they lay eggs of the first generation on nearby plants. From these eggs, a winged aphid appears, which spreads to the surrounding plants. Before the appearance of winged aphids of the first generation, warm weather comes, which promotes further reproduction. In summer, 12-15 days are enough for the development of a full-fledged winged offspring. During the period when the average annual air temperatures are quite hot, aphids develop, giving 10-15 generations.

All species of aphids feed on amaranth in the same way. They suck the cellular juice from the cells of the leaves and stems, as a result of which the leaves curl along the central vein, and the stem weakens, loses strength and elasticity and shrinks under the influence of numerous pests. It is noted that they can lead to the death of the plant if a certain system of combating them is not applied (Table 1).

Table 1.

Types of pests and the degree of their occurrence in our experimental area of amaranth cultivation (Andijan region, Marhamat district, Andijan Experimental Exhibition Area of the Ministry of Innovation 2019-2020)

№	Type of entomophage	Latin name	Family	Order	Degree of occurrence
1.	Beet aphids	<i>Aphis fabae</i>	<i>Aphididae</i>	<i>Homoptera</i>	+++
2.	Beet flea	<i>Chaetocnema</i>	<i>Chrysomelidae</i>	<i>Coleoptera</i>	+++
3.	Beet weevil	<i>Aspropartenis punctiventris</i>	<i>Curculionidae</i>	<i>Coleoptera</i>	++
4.	Steppe (pasture) moth	<i>Loxostege sticticalis</i>	<i>Pyraustidae</i>	<i>Lepidoptera</i>	++
5.	Field crickets	<i>Gryllus campestris</i>	<i>Gryllidae</i>	<i>Orthoptera</i>	++
6.	Green Grasshopper	<i>Tettigonia viridissima</i>	<i>Tettigoniodea</i>	<i>Orthoptera</i>	++
7.	Short - horned grasshoppers	<i>Calliptamus barbarys</i>	<i>Acridoidae</i>	<i>Orthoptera</i>	++

Note: +++ a lot, ++ average, ++ rare.

During our scientific experiment, it was found that by August the amaranth plant was infected with locusts, beet fleas in small quantities, as well as beet weevil.

In conclusion, we can say that we have witnessed that these five pests are currently the most harmful species that cause damage to the amaranth plant in Uzbekistan. At the same time, it was noted that beet fleas, beet aphids were more common than other pests in our experimental field. It was found that parasites of pests belonging to the family Gryllidae, infecting the plant, cause less damage than the aforementioned pests.

It should also be noted that in our experimental field there was a high concentration of entomophages of these pests - golden-eyed, 7-point ladybug and ground beetles. Timely high-quality implementation of agrotechnical measures and biological control of these pests will create conditions for obtaining an environmentally friendly, rich harvest of medicinal amaranth and there will be no need for the use of chemicals. Then we will be able to preserve the entomophages found in nature.

References:

1. M. Amanova., U. Khurramov., B. Rustamov. "Charming amaranth flower" website of the Ministry of Agriculture of Uzbekistan.
2. SH.Ergashev "Amaranth - the opening of the XXI century "Narodnoe slovo" 10.07.2017
3. National Academy of Sciences. Amaranth: modern perspectives of ancient culture. Washington, DC: National Academy of Sciences; 1984
4. Saidganieva Sh.T., Tufliiev N.X. Biological properties of the amaranth plant and its importance in agriculture. Bulletin of Agrarian Science 1(85)2021
5. Saidganieva S.T. Q. (2021). Andijon viloyati sharoitida dorivor amarant oʻsimligini yetishtirish texnologiyasi. Science and Education, 2(5), 111-115.
6. Якубова З.А. (2020). Роль сои в народном хозяйстве и борьба с ее сосущими вредителями. Главный редактор, 19.
7. Saidganieva S.T. Q., & Yuldasheva S.N. Q. (2020). Measures against the damage of the insects of the nightshades family in the Soybean plant. Asian Journal of Multidimensional Research (AJMR), 9(8), 28-30.
8. Saidganieva Sh.T., Tufliiev N.X "Types of the main pests of the amaranth plant and the degree of their occurrence" international scientific and practical conference on "Innovative technologies of plant protection in food safety" 2021 (2) from 240.

PHYSICO-CHEMICAL BIOLOGY

PHYSIOLOGY AND BIOCHEMISTRY OF PLANTS

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12509

THE EFFECT OF SALT STRESS AND BIOSTIMULANTS BASED
ON GLYCYRRHIZIC ACID ON COTTON PHOTOSYNTHETIC PIGMENTS**Sanjar Navruzov***Junior researcher, Institute of Bioorganic Chemistry
of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Uzbekistan, Tashkent**E-mail: sanjarbeknavruzov@gmail.com***Nigora Khashimova***Doctor of Biological Sciences, Leading Researcher
Institute of Bioorganic Chemistry of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Uzbekistan, Tashkent**E-mail: nigora65@list.ru***Akhunov Ali Akhunov***Doctor of Biological Sciences, Professor,
Institute of Bioorganic Chemistry of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Uzbekistan, Tashkent**E-mail: ali.akhunov@gmail.com*ВЛИЯНИЕ СОЛЕВОГО СТРЕССА И БИОСТИМУЛЯТОРОВ
НА ОСНОВЕ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ХЛОПКОВЫЕ
ФОТОСИНТЕТИЧЕСКИЕ ПИГМЕНТЫ**Наврузов Санжар Ботирович***мл. науч. сотр.,
Институт биоорганической химии АН РУз.,
Республика Узбекистан, г.Ташкент
E-mail: sanjarbeknavruzov@gmail.com***Хашимова Нигора Рустамовна***д-р биол. наук, вед. науч. сотр.,
Институт биоорганической химии АН РУз.,
Республика Узбекистан, г.Ташкент
E-mail: nigora65@list.ru***Ахунов Али Ахунович***д-р биол. наук, профессор,
Институт биоорганической химии АН РУз.,
Республика Узбекистан, г.Ташкент
E-mail: ali.akhunov@gmail.com*

ABSTRACT

Changes in the number of photosynthetic pigments among physiological parameters can be considered as a reliable indicator in the assessment of salt resistance of cotton varieties. Quantitative changes in photosynthetic pigments under the influence of three different concentrations of NaCl (50 mM, 100 mM, 200 mM) in the cotton variety (Sultan) were detected. With an increase in the level of salt stress, the amount of chlorophyll decreased and the number of carotenoids increased in the leaves of 14 day-old cotton seedlings. We investigated the use of cotton growing and assessed the benefits

of foliar treatment with newly developed preparations based on glycyrrhizic acid - preparation DAG-1, copper diglycyrrhizinate ((GK)₂Cu), zinc diglycyrrhizinate (Zn(GK)₂). The results showed the effectiveness of the DAG-1 stimulant under salinity conditions in which the pigments of photosynthesis were increased, while the effect of Cu(GA)₂ and Zn(GA)₂ did not differ significantly from the control.

АННОТАЦИЯ

Изменения количества фотосинтетических пигментов среди физиологических параметров можно рассматривать как надежный индикатор при оценке солеустойчивости сортов хлопчатника. Выявлены количественные изменения фотосинтетических пигментов под влиянием трех различных концентраций NaCl (50 мМ, 100 мМ, 200 мМ) у сорта хлопчатник Султан. С увеличением уровня солевого стресса количество хлорофилла уменьшалось, а количество каротиноидов увеличивалось в листьях 14-дневных проростков хлопчатника. Мы исследовали возможности выращивания хлопка и оценили преимущества внекорневой обработки новыми препаратами на основе глицирризиновой кислоты - препаратом ДАГ-1, диглицирризинатом меди ((GK)₂Cu), диглицирризинатом цинка (Zn(GK)₂). Результаты показали эффективность стимулятора ДАГ-1 в условиях засоления, при которых пигменты фотосинтеза были увеличены, в то время как действие (GK)₂Cu и Zn (GK)₂ существенно не отличалось от контроля.

Keywords: cotton, saline stress, photosynthesis, chlorophyll, carotenoids, glycyrrhizic acid.

Ключевые слова: хлопчатник, солевой стресс, фотосинтез, хлорофилл, каротиноиды, глицирризиновая кислота.

Salt stress is one of the major abiotic factors that limiting the productivity of agricultural plants and negatively affecting their germination and viability [1]. Salinity is a serious threat for cotton growth, yield and fiber quality. Therefore, understanding of cotton response to salinity, its resistance mechanism and looking into management techniques may assist in formulating strategies to improve cotton performance under saline conditions.

Salt stress imposes specific ions toxicity, somatically induced water stress and nutrients imbalance which imparts adverse effects on plant growth, development and ultimately crop establishment [2]. It is known that the photosynthetic system of plants is very sensitive to the effects of high temperature and salts [3]. A decrease in the rate of photosynthesis in many plant species is a clear indication of salt stress. It has been reported that salt stress affects the process of photosynthesis due to disorientation of the chloroplast lamellar system and loss of chloroplast integrity, leading to a decrease in photosystem activity [4-6]. Therefore, changes in the composition of photosynthetic pigments among physiological parameters can be considered as a reliable indicator in the assessment of salt resistance of varieties [7].

Carotenoids are considered to be another important pigment of the photosynthetic mechanism involved in the accumulation of light energy during photosynthesis. Decreased expression of genes responsible for the biosynthesis of carotenoids during salt stress in plants is associated with a slowing of the rate of photosynthesis, resulting in decreased productivity [5]. Rafique et al [8] reported that carotenoid contents degradation is slower as compared to chlorophyll in salinity stress. In particular, the indicators of the photosynthetic apparatus of plants are informative, and the amount of pigment in the tissues determines their functional state, changes that occur during growth, development and stress.

The study of the mechanisms of salinity resistance of plants is one of the current theoretical and scientific problems, with a deep emphasis on the development of methods for the use of physiologically active substances in increasing the resistance of plants to salt stress and

their widespread application in agricultural production. The use of plant biostimulants on crop plants can generate multiple benefits with reported effects including enhanced rooting, higher crop and fruit yields, drought and salt tolerance, enhanced photo-synthetic activity [9]. Plant biostimulants include diverse formulations of compounds, substances and other products, such as microorganisms, trace elements, enzymes, plant growth regulators that are applied to plants to regulate and enhance the crop's physiological processes, thus making them more efficient. Consequently, the products can enhance nutrient availability, waterholding capacity, increase antioxidants, enhance metabolism and increase chlorophyll production in plants [10].

This study aimed to investigate the effects of salt stress on photosynthetic pigments of cotton leaves and to determine the effectiveness of leaf treatment with stimulant based on glycyrrhizic acid and its complex compounds to increase the resistance of cotton to salinity. The use of triterpene glycosides to assemble complexes with biologically active compounds is becoming more and more popular for the development of new transportable forms of low-dose preparations. Glycyrrhizic acid (GA) is the dominant triterpene glycoside from licorice (*Glycyrrhiza glabra* L.) roots. GA can act as a plant growth regulator, which is characteristic of phytohormones. GA at a concentration of 10⁻⁶ M caused weak cytokinin-like activity in amaranth sprouts [11]. High biological activity of individual GA and SA prompted the development of a method to enable practical use of the supramolecular complex in DAG-1 for agricultural purposes as a growth regulator and resistance inducer in cotton growing in saline soils. The glycyrrhizic acid copper – Cu(GA)₂, and zinc – Zn(GA)₂ complexes are also been synthesized.

Materials and methods

Seeds of cotton *G. hirsutum* cultivars Sultan was provided by the Scientific Research Institute of Cotton Breeding, Seed Production and Cultivation Agrotechnology of the Republic of Uzbekistan. Stimulant DAG-1, copper and zinc glycyrrhizinates were synthesized by

Institute of Bioorganic Chemistry of Academy Sciences of Republic Uzbekistan. The studies were conducted in the laboratory and the field conditions. Under laboratory conditions, the seeds were wrapped in filter paper, placed as controls in aqueous and NaCl solutions of three different concentrations (50 mM, 100 mM, 200 mM) and grown for 14 days at a temperature of 25°C in light and 17°C in dark conditions. In randomized field experiments, Sultan cotton seedlings in saline soils of Bayovut district of Syrdarya region were treated separately with leaves with DAG-1, glycyrrhizic acid copper – Cu(GA)₂, and zinc – Zn(GA)₂ complexes at a concentration of 10⁻⁷ M during six leaf stages and the number of photosynthetic pigments in the leaves was analyzed on day 3.

Isolation and chlorophyll determination. The chlorophyll concentration was determined in 80% acetone extract [12]. Briefly, 0.2 g of the sample was extracted in 80% cold acetone. The optical densities of total

chlorophyll (652 nm), chlorophyll a (663 nm), chlorophyll b (645 nm), and total carotenoids (470 nm) in the extracts were determined on a UV-1800 spectrophotometer (Shimadzu, Japan). The amount of chlorophyll and carotenoids was calculated using Lichtenthaler and Welburn formulas [13].

The results were processed using Excel. The mean deviation index ($\pm M$) and statistical reliability index (P) were determined, and results less than $P < 0.05$ were considered statistically significant.

Results and discussion

The results showed that with increasing saline stress levels the chlorophyll content was decreased and the number of carotenoids increased in 7-day old cotton seedlings (Table 1). The total chlorophyll content of the cotton seedlings at the salinity concentration of 50 mM, 100 mM, 200 mM decreased by 8.4%, 21%, 41.6% respectively.

Table 1.

Effect of salinity on photosynthetic pigments of cotton leave tissues (mg/g FW)

Treatment	Chl (a + b)	Chl a	Chl b	Carotenoids
Control	3.34 $\pm$ 0.14	1.97 $\pm$ 0.06	0.71 $\pm$ 0.02	3.64 $\pm$ 0.12
50 mM NaCl	3.06 $\pm$ 0.09	1.88 $\pm$ 0.06	0.55 $\pm$ 0.03	5.23 $\pm$ 0.14
100 mM NaCl	2.64 $\pm$ 0.08	1.85 $\pm$ 0.07	0.38 $\pm$ 0.01	5.83 $\pm$ 0.10
200 mM NaCl	1.95 $\pm$ 0.10	1.20 $\pm$ 0.04	0.45 $\pm$ 0.02	6.81 $\pm$ 0.17

When studying the amount of Chl a and Chl b, which are the main indicators of the photosynthetic system, Chl a compared to the control in cotton seedlings grown in solutions with a concentration of 50 mM, 100 mM, 200 mM was found to decrease by 4.6%, 6.1%, 39.1% respectively, Chl b decrease by 22.6%, 46.5%, and 36.7%, respectively. These results showed that the amount of Chl b was significantly reduced under the influence of salt relative to the amount of Chl a. It was found that the amount of carotenoids increased by 43.6%, 60.6%, and 80.7%, respectively, with increasing salinity.

Inhibition of photosynthesis under the influence of salt may be due in part to the closure of leaf openings, although there are also data on the direct effect of salt on certain biochemical and photochemical processes [15]. According to analyzes, NaCl concentrations of 100 and 200 mM reduced the quantitative values of photosynthetic pigments (Chl a and b). Meng et al. [16] reported that a decrease in photosynthesis is associated with a reduction in chlorophyll contents and alteration in ultrastructure of chlorophyll. Significant reduction in chlorophyll contents (a and b) was observed in cotton

cultivars with the increase in salinity level [17]. This may be due to inhibition of the activity of specific enzymes involved in chlorophyll synthesis.

The number of carotenoids was found to increase by 43.6%, 60.6%, and 80.7%, respectively, with increasing salinity. At different salinity levels, an increase in carotenoids, anthocyanins and flavones contents were recorded while at the same time other photosynthetic pigments i.e. Chl a and b were drastically decreased. Since there was no statistically significant difference between the samples grown in 50 and 100 mM concentrated solutions of NaCl relative to the control, the 100 mM concentration of NaCl was conditionally set as the tolerance limit to the saline environment for the Sultan variety of cotton.

In field experiments, Sultan cotton seedlings in saline soils of Buyout district of Syrdarya region were treated separately with leaves with DAG-1, glycyrrhizic acid copper – Cu(GA)₂, and zinc – Zn(GA)₂ complexes at a concentration of 10⁻⁷ M during six leaf stages and the number of photosynthetic pigments in the leaves was analyzed on day 3 (Table 2).

Table 2.

The content photosynthetic pigments of cotton leave tissues during foliar treatment with DAG-1, Cu(GA)₂, and Zn(GA)₂ (mg/g FW)

Treatment	Chl (a + b)	Chl a	Chl b	carotenoids
Control	4.17 ± 0.13	2.59 ± 0.12	1.21 ± 0.04	4.37 ± 0.18
DAG-1	5.00 ± 0.24	3.73 ± 0.11	1.31 ± 0.03	5.31 ± 0.21
(GK) ₂ Cu	3.61 ± 0.16	1.89 ± 0.08	1.31 ± 0.04	3.83 ± 0.16
Zn (GK) ₂	4.45 ± 0.09	1.63 ± 0.07	0.70 ± 0.02	3.90 ± 0.12

According to obtained results, the content of photosynthetic pigments in cotton leaves: total chlorophyll content, Chl *a*, Chl *b*, and carotenoids was found to be higher than the control in samples treated with DAG-1. The stimulant DAG-1 mainly stimulated an increase in total chlorophyll (*a* and *b*), Chl *a*, and carotenoids.

Specific response reactions in photosynthetic pigments were observed as a result of the treatment of cotton with leaves with copper and zinc diglycyrhizates. In samples treated with Cu(GA)₂ total chlorophyll was reduced by 14.43%, Chl *a* by 27.1%, carotenoids by 12.4%, and Chl *b* by 8.26% compared to controls. In samples treated with Zn(GA)₂ although total chlorophyll content increased by 6.71% compared to the control, Chl *a* decreased by 37.07%, Chl *b* by 42.15%, and carotenoids by 10.76%. Analysis of the results showed that under soil salinity, Cu(GA)₂ increased the amount of Chl *b* in cotton leaves by 8.26%, and (GA)₂Cu increased the total chlorophyll content by 6.71%. It is known that short-

wave pigment forms in plants not only collect light [18], but also perform a protective function that prevents the oxidation of chlorophylls during electron transfer in the presence of transient metals [19]. In our experiments, a significant decrease in carotenoids under the influence of copper and zinc diglycyrhizate may be due to their oxidation and, consequently, a protective antioxidant effect.

It is supposed that the integrity of plastids is maintained due to the activity of antioxidant systems that reduce the number of reactive oxygen species and resulting in increased photosynthetic activity in cotton leaf samples treated with DAG-1.

The results showed the effectiveness of the DAG-1 stimulant under salinity conditions in which the pigments of photosynthesis were increased, while the effect of Cu(GA)₂ and Zn(GA)₂ did not differ significantly from the control.

References:

1. Bohnert HJ, Nelson DE, Jensen RG Adaptations to environmental stresses//The Plant Cell. 1995. - V. 7. - P.1099-1111.
2. Meloni DA, Oliva MA, Ruiz HA, Martinez CA Contribution of proline and inorganic solutes to osmotic adjustment in cotton under salt stress//J. Plant Nutr. 2001. - V. 24 (3).- P. 599 - 612.
3. Shabala S.N. Lew R.R. Turgor regulation in osmotically stressed Arabidopsis epidermal root cells. Direct support for the role of inorganic ion uptake as revealed by concurrent flux and cell turgor measurements // Plant Physiol. 2002. - V. 129. - P. 290–299.
4. Wang N et al. Relative contribution of Na⁺/K⁺ homeostasis, photochemical efficiency and antioxidant defense system to differential salt tolerance in cotton (*Gossypium hirsutum* L.) cultivars//Plant Physiol Biochem. 2017. - V.119. - P. 121–131.
5. Shah S, Houborg R, McCabe M. Response of chlorophyll, carotenoid and SPAD-502 measurement to salinity and nutrient stress in wheat (*Triticum aestivum* L.)//Agronomy. 2017. - V.7. - P.61.
6. Zhang L, Zhang G, Wang Y, Zhou Z, Meng Y, Chen B. Effect of soil salinity on physiological characteristics of functional leaves of cotton plants//J Plant Res. 2013. - V.126. - P.293–304.
7. Iram S., Saba A., Jehanzeb F., Muhammad R., Et al. Salinity stress in cotton: effects, mechanism of tolerance and its management strategies//Physiol Mol Biol Plants. 2019. - V.25 (4). - P.807–820.
8. Rafique A, Salim M, Hussain M, Gelani S. Morpho-physiological response of cotton (*Gossypium hirsutum* L.) cultivars to variable edaphic conditions//Pak J Life Soc Sci. 2003. - V.1. - P.5–8.
9. Sharma H.S.S., Fleming C., Selby C., Rao J.R., Martin T. Plant biostimulants: a review on the processing of macroalgae and use of extracts for crop management to reduce abiotic and biotic stresses//J Appl Phycol (2014) 26:465–490. doi:10.1007/s10811-013-0101-9
10. Khan W, Rayorath UP, Subramanian S, Jithesh MN, Rayorath P, Hodges DM, Critchley AT, Craigie JS, Norrie J, Prithviraj B (2009) Seaweed extracts as biostimulants of plant growth and development. J Plant Growth Regul 28:386–399

11. Davidyants E.S. Growth-regulating activity of triterpene glycosides *Silphium perfoliatum* (Asteraceae) // Plant resources. 2006. T. 42. No. 1. P. 127–136.
12. Arnon DI Copper enzymes in isolated chloroplasts. Polyphenoloxidase in *Beta vulgaris* // Plant Physiol. 1949.- V. 24.- R. 1-10.
13. Lichtenthaler H.K. A Welburn. R. Determination of total carotenoids and chlorophyll a and b of leaf extracts in different solvents // Biochem Soc Trans. 1983. - V. 11. - P. 591–592.
14. Steduto P., Albrizio R., Giorio P., Sorrentino G. Gas exchange response and stomatal and non-stomatal limitations to carbon assimilation of sunflower under salinity // Environ. Exp. Bot. 2000. - V.44. - P. 243-255.
15. Sultana N., Ikeda T., Itoh R. Effect of NaCl salinity on photosynthesis and dry matter accumulation in developing rice grains // Environ. Exp. Bot. 1999. - V.42. - P. 211- 220.
16. Meng Jiang Hua Lin SJ, XY, Li YL Guo, WL, Jiang L.X. Comparison between a tetraploid turnip and its diploid progenitor (*Brassica rapa* L.): the adaptation to salinity stress // Agric Sci China. 2011. - V.110. - P.363–375.
17. Chen K., Hu G., Keutgen N., Janssens MJJ, Lenz F. Effects of NaCl salinity and CO₂ enrichment on pepino (*Solanum muricatum* Ait.). II. Leaf photosynthetic properties and gas-exchange // Sci. Horticulturae. 1999. - V. 81. - P. 43- / 56.
18. Zhang L, Ma H, Chen T, Pen J, Yu S, Zhao X. Morphological and physiological responses of cotton (*Gossypium hirsutum* L.) plants to salinity. PLoS ONE. 2014. 9: e112807.
19. Lee M.H. et al. Divergences in morphological changes and antioxidant responses in salt-tolerant and salt-sensitive rice seedlings after salt stress // Plant Physiol Biochem. 2013. - V.70. - P.325–335.

CHEMISTRY SCIENCES

BIOORGANIC CHEMISTRY

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12507

COMPLEX COMPOUND OF THE MONOAMMONIUM SALT
OF GLYCYRRHIZIC ACID WITH THIOUREA AND THE OF ITS TOXICITY**Yusuf Isaev**

Candidate of Science, assistant professor, Department of Chemistry
of Andijan state university,
Uzbekistan, Andijan
E-mail: yusuffjon_67@inbox.ru

Doston Egamberdiev

PhD student, Department of Chemistry
of Andijan state university,
Uzbekistan, Andijan

Ibragim Askarov

Doctor of Chemistry, Professor of the Department of Chemistry
of Andijan state university,
Uzbekistan, Andijan

Sanzhar Rustamov

Doctor of Philosophy in Chemistry,
Senior Lecturer Department of Chemistry of Andijan state university,
Uzbekistan, Andijan
E-mail: sanjar.rustamov.2018@mail.ru

Natalya Vypova

Candidate of Biological Sciences,
Senior Researcher at the Institute of Bioorganic Chemistry,
Uzbekistan, Tashkent

КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ МОНОАММОНИЙНОЙ СОЛИ
ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ТИОМОЧЕВИНОЙ И ЕГО ТОКСИЧНОСТЬ**Исаев Юсуп Тождимаматович**

канд. хим. наук, зав. кафедрой химии
Андижанский Государственного Университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: yusuffjon_67@inbox.ru

Эгамбердиев Достон Усмонджон угли

докторант кафедры химии
Андижанского Государственного Университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан

Аскарлов Иброхим Рахмонович

д-р хим. наук, профессор
Андижанского Государственного Университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан

Рустамов Санжар Аширалиевич

ст. преподаватель кафедры химии
Андижанского Государственного Университета,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: sanjar.rustamov.2018@mail.ru

Выпова Наталья Леонидовна

канд. биол. наук, ст. науч. сотр.
Института Биоорганической химии,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

ABSTRACT

The development of new dosage forms based on local herbal raw materials is urgent. Currently, much attention is paid to one of the main active ingredients of licorice roots - glycyrrhizic acid and its derivatives. Due to its peculiar structure and properties, glycyrrhizic acid forms inclusion compounds with various organic substances. The article summarizes the results of the work carried out on the preparation of a supramolecular complex of the mono-ammonium salt of glycyrrhizic acid with thiourea, the study of some physicochemical parameters and the determination of the acute toxicity of the obtained compound. Thus, UV -, IR-spectroscopy and mass spectrometry characterized the nature of the intermolecular interaction of the components, conclusions about the composition of the complex were made using the methods of isomolar series and high-performance liquid chromatography. It follows from the spectral data that complexation occurs due to the formation of hydrogen bonds between hydrophilic groups of molecules. The stability constant and the change in the Gibbs energy of complex formation are calculated. Based on the results of the acute toxicity determination, it was revealed that the resulting complex belongs to safe substances of class IV. The resulting complex compound can be used as a starting substance in the development of new biostimulants for agriculture.

АННОТАЦИЯ

Разработка новых лекарственных форм на основе местного растительного сырья является актуальным. В настоящее время большое внимание уделяется одному из основных действующих веществ корней солодки - глицирризиновой кислоте и ее производным. Благодаря своеобразной структуре и свойствам глицирризиновая кислота образует соединения включения с различными органическими веществами. В статье обобщены результаты проведенных работ по получению супрамолекулярного комплекса моноаммониевой соли глицирризиновой кислоты с тиомочевинной, изучению некоторых физико-химических показателей и определению острой токсичности полученного соединения. Таким образом, методами УФ-, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии охарактеризован характер межмолекулярного взаимодействия компонентов, сделаны выводы о составе комплекса с использованием методов изомольных рядов и высокоэффективной жидкостной хроматографии. Из спектральных данных следует, что комплексообразование происходит за счет образования водородных связей между гидрофильными группами молекул. Рассчитаны константа устойчивости и изменение энергии Гиббса комплексообразования. По результатам определения острой токсичности установлено, что полученный комплекс относится к безопасным веществам IV класса. Полученное комплексное соединение может быть использовано в качестве исходного вещества при разработке новых биостимуляторов для сельского хозяйства.

Keywords: licorice, glycyrrhizic acid, isomolar series method, acute toxicity.

Ключевые слова: солодка, глицирризиновая кислота, метод изомольных рядов, острая токсичность.

Medicinal plants are a rich source of biologically active substances, including medicinal ones. Some plant substances are not directly used in medical practice, they are used as starting substances for the synthesis of effective medicines.

As you know, licorice is a medicinal plant, the roots of which are used to treat inflammatory diseases of the upper respiratory tract and gastrointestinal tract. One of the main active components of licorice root is a triterpene glycoside-glycyrrhizic acid (HA). The unique physical and chemical properties of this acid have made it a valuable object of research by specialists in various branches of science [1, 2].

Experimental. IR spectra were recorded on an IR Fourier spectrophotometer IRTracer-100 (Shimadzu), UV spectra were recorded on a Shimadzu-1280 spectrophotometer. Chromatography was performed on an Agilent 1200 chromatograph (Germany); the melting point

of substances was determined using an SMP10 instrument.

The stability constant and the ratio of the complex components were determined in a phosphate buffer medium ($\text{Na}_2\text{HPO}_4\text{-NaH}_2\text{PO}_4$, pH = 7.2).

Receiving the complex. 1.68 g (2 mmol) of MASGA was dissolved in 50 ml of 50% ethyl alcohol, 0.152 g of crystalline thiourea was added to the resulting solution, and the mixture was kept under constant stirring on a magnetic stirrer for 4-5 hours at 40-50 ° C. After that, the alcohol was distilled off in a rotary evaporator, the residue was dried on a freeze dryer. Pale yellow needles. Output 92%. T.m. = 186 ± 2 °C (with expansion).

For HPLC analysis, a sample of a standard solution prepared as follows: 1.0 g (accurately weighed) of thiourea was dissolved in 50 ml of warm water, the solution was quantitatively transferred into a volumetric flask with a volume of 100 ml. The volume of the solution

was brought to the mark with distilled water: solution A. 1 ml of solution A was diluted with the mobile phase. The solution thus obtained was centrifuged at 7000 rpm for 5 minutes before chromatography. A standard monoammonium salt (MASGA) solution was prepared in a similar way.

The most widely used derivative of GA is its (MASGA), a drug based on which called Glycyram is used in medicine for eczema, allergic dermatitis. In addition, this salt is part of some other medicines.

In the IR spectrum of the complex at 3381 cm^{-1} , there is a low-intensity absorption band related to associated OH and NH groups, and the absorption band of

the C=O group at 1712 cm^{-1} . The absorption band characteristic of NH_2 bending vibrations was not found. In addition, it was found that the intensity of the absorption band of stretching vibrations of this group sharply decreases (Fig. 1).

The changes noted above confirm that the COOH, OH, and NH_2 groups of MASGA and thiourea are involved in the intermolecular interaction in the complex. In addition to hydrogen bonds, ion-dipole bonds are likely to form.

Figure 1. Mass spectrum of the complex compound MASGA with thiourea

In the mass spectrum of the complex, one can see the signals of the ions of the complex in the form of a

monomer, dimer, and tetramer, and the signal of the ion in the form of a tetramer has the highest intensity (Table 1).

Table 1.

Mass Spectral Data of the MASGK complex with Thiourea

Ion	m/z	Intensity %
$[2\text{M}^{\text{GC}}+4\text{M}^{\text{TM}}-\text{M}^{\text{NH}_3}+\text{H}]^+$	1967,2000	95,0
$[4\text{M}^{\text{GC}}+4\text{M}^{\text{TM}}-2\text{M}^{\text{NH}_3}-4\text{H}]^{2+}$	1794,1000	100,0
$[5\text{M}^{\text{GC}}+5\text{M}^{\text{TM}}-\text{NH}_3+\text{H}]^{3+}$	1487,7000	13,2
$[2\text{M}^{\text{GC}}+\text{M}^{\text{GA}}+\text{M}^{\text{TM}}-6\text{H}]^+$	1107,0000	52,4
$[2\text{M}^{\text{GC}}+2\text{M}^{\text{TM}}+\text{Na}+\text{H}]^{2+}$	927,1000	35,3
$[\text{M}^{\text{GC}}+\text{M}^{\text{TM}}-\text{M}^{\text{NH}_3}+\text{H}]^{3+}$	299,7000	70,0

The composition of the complex was determined by the isomolar series method (Ostrmyssensky-Zhob method) and by HPLC.

The method of isomolar series is based on determining the ratio of isomolar concentrations of reagents corresponding to the maximum yield of the compound [4,5]. To determine the isomolar series, the optical

density of each series is measured and a graph of the optical density versus $\frac{c_1}{c_1+c_2}$, is plotted, the point of intersection of tangent lines is marked, which corresponds to the ratio of the components of the complex.

Figure 2. Change in the optical density of the components of the complex in the isomolar series at $\lambda = 254$ nm.

Using the found concentrations from the optical density, the equilibrium constant of complexation is calculated according to the following equation:

$$K = \frac{[MASGA - TU]}{[MASGA][TU]}$$

From the found value of the equilibrium constant, the change in the Gibbs energy can be calculated using the equation: $\Delta G = -RT \ln K$.

Figure 3. Curves of the optical density of solutions of the isomolar series

The composition of the resulting complex was determined by HPLC. The chromatographic analysis results are shown in the following table:

Table 2.

Quantitative composition of the MASGA complex by HPLC

Mass fraction, theoretical %		Mass fraction found %		Retention time (min)
MASGA	Thiourea	MASGA	Thiourea	
91,7	8,3	90,8	8,2	7,529

The systematic study of the biological activity of GA and its derivatives began in the 40s of the last century, when their anti-inflammatory activity was discovered in a combination of low toxicity [6]. The problem of low solubility and undesirable side effects of drugs can be solved with the help of substances that form inclusion compounds or molecular complexes of the "guest-host" type. It has been established that the pharmacotherapeutic and physico-chemical properties of

drugs are significantly improved in the composition of such complexes [7,8]. Thus, it was noted that complex compounds of GA with antiviral and antibacterial drugs, such as levomycitin, sulfapiridazine, salazodimethoxine, sulgin, resorcinol, increased the resistance of mice to diseases caused by *Staphylococcus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* bacteria and strengthen the immune system of animals [9].

Figure 4. HPLC chromatogram of the complex of MASGA with thiourea

Due to the peculiar chemical structure of GA and its monoammonium salt, they can form molecular complexes with various low-molecular pharmacones. It should be noted that MASGA can be easily obtained from licorice root extract, it dissolves better, and also MASGA is less toxic than GA.

In previous works, we obtained supramolecular complexes of MASGA with urea, methylolurea, and some sulfa drugs [10, 11]. In experiments to identify biological activity, antioxidant and antifungal activities of the above complexes were noted. In order to identify the pharmacological and biological characteristics of the obtained complex, its acute toxicity was studied by the Lichfield-Wilcoxon method [12]. Crystalline thiourea was used for the reference drug. The drugs were administered orally at 200, 250, 300, 400 and 600 mg / kg. With the introduction of thiourea at a dose of 200 and 250 mg / kg, after 5-10 minutes, excitation, a decrease in pupils and an increase in respiration were observed in the animals. After 2-3 hours, the condition of the animals returned to normal. No deaths were observed at a dose

of 200 mg / kg. At a dose of 250 mg / kg, the death of animals was noted every other day (2/6). With the introduction of thiourea at a dose of 300, 400, and 500 mg / kg, similar changes in the state of the animals were observed. The lethal outcome was observed after 1-3 days: at a dose of 300 mg / kg 3/6, at a dose of 400 mg / kg 4/6, at a dose of 500 mg / kg 6/6.

When thiourea was administered orally to mice, the LD₅₀ value was 306 mg/kg, LD₁₆ 250 mg / kg, and LD₈₄ 360 mg / kg. From these data, it follows that thiourea belongs to the 3rd class in terms of toxicity.

After oral administration of the complex compound MASGA with thiourea at a dose of 2000 and 2500 mg / kg on the third day, as a result of tachycardia, the lethal outcome of the animals was 5/6 and 6/6, respectively. at doses of 1300 and 1600 mg / kg, tachycardia was observed less frequently, and the lethal outcome was 2/6 and 3/6, respectively. At a dose of 1000 mg / kg, no lethal outcome was noted.

The results are presented in table 3.

Table 3.

The degree of toxicity of the complex compound MASGA with thiourea (I)

Drug	Dose, mg / kg	Number of dead animals	LD ₁₆ -M+M mg/kg	LD ₅₀ -M+M mg/kg	LD ₈₄ -M+M mg/kg
Thiourea	200	0/6	250	306 III group	360
	250	2/6			
	300	3/6			
	400	4/6			
	500	0/6			
I	1000	0/6	1300	1530 IV group	1800
	1300	2/6			
	1600	3/6			
	2000	5/6			
	2500	6/6			

Thus, it was revealed that the toxicity of the complex compound of MASGA with thiourea is 5 times less than the toxicity of thiourea.

Conclusions. For the first time a supramolecular compound of MASGA with thiourea was obtained and some of its physicochemical parameters were studied.

The composition of the obtained compound was determined by the method of isomolar series, and the

change in the change in the Gibbs energy of the complexation process was also determined.

The nature of the intermolecular interaction of the components of the obtained complex was characterized by UV and IR spectroscopy.

The acute toxicity of the complex obtained (IV class) was determined.

Reference:

1. V.I. Litvinenko, T.P. Popova. [Electronic resource]. Pharmacom. (2004). <http://farmacomua.narod.ru/licorice>.
2. G.A. Tolstikov, L.A. Baltina, V.P. Grankina, R.M. Kondratenko. Licorice Biodiversity, chemistry, application in medicine. Academic Publishing House "GEO". Novosibirsk. Russia. 2007. c. 311. (In Russian).
3. T.G. Tolstikova, A. G. Tolstikov, G. A. Tolstikov. Bulletin of the Russian Academy of Sciences. 77 (10); 2007: p. 867-874. (In Russian).
4. M.I. Bulatov, I.P. Kalinkin. Practical guide to photometric methods of analysis. 5th ed. Leningrad: Chemistry. 1986. 432 c. (in Russian).
5. Babko A.K. Physico-chemical analysis of complex compounds in solutions. Kiev, Publishing House of the Acad. of Sci. of the Ukr. SSR, 1955. 328 c. (in Russian).
6. Brovchenko B.V. Improvement of quality control methods for crushed raw materials and licorice preparations. Dissertation for the degree of candidate of pharmaceutical sciences. Moscow. Russia. 2020. 169 p.
7. L.A. Yakovishin, V.I. Grishkovets. Studies in Natural Products Chemistry. 2017. V.55, Chapter 11, P.351-383. DOI: 10.1016/B978-0-444-64068-0.00011-5
8. Yakovishin L.A., Grishkovets V.I., Korzh E.N. Scientific notes of the Crimean University named after V.I. Vernadsky. Biology. Chemistry. 2017; 3 (3); 270-277. (In Russian).
9. Kondratenko R.M. Glycyrrhizic acid and related licorice triterpenoids in the synthesis of promising biologically active compounds. Abstract of the dissertation of the doctor of chemical sciences. (2006). Ufa, Russia. 48 p. https://rusneb.ru/catalog/000200_000018_RU_NLR_bibl_1097850/
10. I.R. Askarov, Yu.T. Isaev, S.A. Rustamov, U.M. Yakubov. XIII Int. Symp. on the Chemistry of Natural Compounds (Shanghai, October 16-19, 2019). Shanghai, China. 2019. P. 62.
11. Isaev Yu. T., Rustamov S. A., Askarov I. R. "Bulletin of the Perm State Pharmaceutical Academy". Perm. Russia. 22 (2018). 34-35. (in Russian).
12. Mironov A.N., Bunyatyan N.D. and other. Guidelines for conducting preclinical studies of drugs. Part I, Grif and K. Moscow. Russia. (2012). p. 80-93.

PETROCHEMISTRY

DOI - 10.32743/UniChem.2021.89.11.12473

PRODUCTION AND USE OF CORROSION INHIBITORS ON THE BASIS
OF TWO-ATOMIC PHENOLS AND LOCAL RAW MATERIALS**Bobir Olimov**

assistant of the Department of Chemistry
of the Bukhara Institute of Engineering-Technology,
Uzbekistan, Bukhara
E-mail: chemistry2927@mail.ru

Vokhid Akhmedov

associate Professor of the Department of Chemistry
of the Bukhara Institute of Engineering-Technology,
Uzbekistan, Bukhara
E-mail: yohid7@mail.ru

Gulnoz Gafurova

Assistant of the Department of Chemistry
of the Bukhara Institute of Engineering-Technology,
Uzbekistan, Bukhara

ПРОИЗВОДСТВО И ПРИМЕНЕНИЕ ИНГИБИТОРОВ КОРРОЗИИ
НА ОСНОВЕ ДВУХАТОМНЫХ ФЕНОЛОВ И МЕСТНОГО СЫРЬЯ**Олимов Бобир Баходирович**

ассистент кафедры химии
Бухарского инженерно-технологического института,
Республика Узбекистан, Бухара
E-mail: chemistry2927@mail.ru

Ахмедов Вохид Низомович

доц. кафедры химии
Бухарского инженерно-технологического института,
Республика Узбекистан, Бухара
E-mail: yohid7@mail.ru

Гафурова Гулноз Алихоновна

ассистент кафедры химии
Бухарского инженерно-технологического института,
Республика Узбекистан, Бухара

ABSTRACT

The main part of corrosion inhibitors used in the oil and oil refining industry are complex organic compounds belonging to different classes. Soluble corrosion inhibitors in hydrocarbons are most effective for use in the oil and gas industry because they have a high protective effect and easy interaction with construction materials.

АННОТАЦИЯ

Основную часть ингибиторов коррозии, применяемых в нефтяной и нефтеперерабатывающей промышленности, составляют сложные органические соединения, относящиеся к разным классам. Растворимые ингибиторы коррозии в углеводородах наиболее эффективны для использования в нефтегазовой промышленности, поскольку они обладают высоким защитным действием и легко взаимодействуют со конструкционными материалами.

Keywords: inhibitor, diatomic phenols, monoethanolamine, corrosion rate, corrosion inhibitor effectiveness

Ключевые слова: ингибитор, двухатомные фенолы, моноэтаноламин, скорость коррозии, эффективность ингибитора коррозии.

Corrosion of metals is a complex process that leads to the absorption of metals as a result of their transition to an oxidized state with the disappearance of their specific properties. Due to mechanism of corrosion processes, there are the following types of corrosion of metals [1-6]:

- chemical corrosion is the result of the interaction of the metal surface with the environment;
- contact (electrochemical) corrosion occurs as a result of interaction of these – metals with galvanic elements and electrolytes;

And also microbiological corrosion, which is carried out as a result of the action of microorganisms.

The generally accepted laws of corrosion mechanism are all related to aqueous solutions. In this case, corrosion is considered an electrochemical process that occurs in the anode areas of the metal surface, where it occurs when iron ions pass into the solution:

In order for electrochemical corrosion to occur, the system must contain an oxidizer that pulls excess electrons from the metal surface. Basically, the role of oxidizer is performed by water-soluble oxygen or H^+ cations. When the concentration of hydrogen cations sharply decreases, the cathodic return of oxygen becomes the main reaction:

Corrosion inhibitors are chemical compounds or their compositions, and a small amount in an aggressive environment also slows the corrosion rate of metals. The advantage of corrosion inhibitors over other

methods of protection is its relative simplicity, low material consumption and low labor costs, the ability to simultaneously protect underground and surface metal structures, as well as access to any part of the corrosion environment [7-11].

The protective properties of organic compounds are significantly improved if they contain two pairs of undistributed electrons, and with the inclusion in the molecule of different functional groups containing heteroatoms, which can be electrodonated. At the junction of the protective property, the heteroatom is placed in the following sequence: O, N, S. Alternatively, in different functional groups, the electrodonuclear function of heteroatom changes [12-13].

The reaction is carried out in a three-stringed tube equipped with a thermometer and a mixer, monoethanolamine and formalin are placed in the tube in a ratio of 1:1,5 molar. The reaction mixture is mixed without heating for 30 minutes, after which the tube is connected to the refrigerator and the water is drained by means of a vacuum pump. Then add 1 mole vinyl ether of diatomic phenol from 95-98°C and mix for 14 hours. Control of the process flour is carried out depending on the solubility of the reaction product in an 8% aqueous solution of hydrochloric acid. The resulting reaction mass is dissolved in benzene and separated, after which the resulting benzene solution is washed 3-4 times with water. The reaction yield is 91%. The brutto formula of the substance is $\text{C}_{13}\text{H}_{17}\text{O}_3\text{N}$ and molecular mass 235 g/mole. Separated from the reaction mass, water contains 10-20% monoethanolamine and formaldehyde.

The results of the study showed that during the condensation of vinyl ether of diatomic phenol with formaldehyde and monoethanolamine, only when formaldehyde is used in paraform form, it is formed according to the following scheme:

Figure 1. IR spectrum of aminomethylated corrosion inhibitor

The resulting product is a viscous light yellow color resinous substance, insoluble in water, but well soluble

in organic solvents and acid solutions. Based on the results obtained, the study on the development of corrosion inhibitors shows the prospects.

Table 1.

Dependence of AMKI corrosion inhibitor on the concentration of anti-corrosion characteristics

Sample	S, 10 ⁻⁴ m ²	τ , hour	Mass, m ₀ , г	Mass, m, г	$\Delta m = m_0 - m$, г	Inhibitor concentration, %	Corrosion rate, m/S ² *c	Z, %	γ
1	17	72	6,635	6,052	0,583	-	4,763	-	-
2	17	72	6,618	6,435	0,183	0,001	1,496	68,6	3,18
3	17	72	6,756	6,611	0,144	0,01	1,181	75,2	4,03
4	17	72	6,698	6,618	0,079	0,05	0,652	86,3	7,3
5	17	72	6,652	6,577	0,074	0,03	0,609	87,2	7,8
6	17	72	6,682	6,637	0,0448	0,1	0,366	92,3	12,98

Figure 2. Dependence of steel corrosion rate on AMKI concentration

Figure 3. Dependence of corrosion inhibitor effectiveness on AMKI concentration

In conclusion, favorable conditions for the synthesis of aminomethylated and sulfomethylated corrosion inhibitors based on vinyl ether of diatomic phenols were identified and experimental data were presented. It was shown that the mechanism of corrosion protection of organic compounds containing sulfo and amino group

fragments is fundamentally different from the mechanism of action of other inhibitors. The use of inhibitors synthesized in water circulation systems of oil drilling and refining enterprises maintains a high level of protection in hydrogen sulfide and emulsified hydrocarbon systems.

References:

1. Назаров Шомурод, Ахмедов Вохид, Олимов Бобир, Ҳайтов Садулло синтез мономеров при участии винилацетилена из одноатомных фенолов содержащих ариловую группу // *Universum: химия и биология*. 2020. № 11-2 (77). URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/sintez-monomerov-pri-uchastii-vinilatsetilena-iz-odnoatomnyh-fenolov-soderzhaschih-arilovuyu-gruppu> (дата обращения: 16.04.2021).
2. Olimov B., & Akhmedov, V. (2020). The effect of reaction duration and catalyst on the synthesis of arylvinyl esters. *Збірник наукових праць ЛОГОС*, 33-37. <https://doi.org/10.36074/20.11.2020.v2.07>
3. Bahodirovich, Olimov B., et al. "Synthesis of Resorcinol Vinyl Ether in the Mono-position, Influence of the Catalyst, Temperature and Solvent on the Reaction Yield." *JournalNX*, 2020, pp. 44-51.
4. Б.Б. Олимов, В.Н. Ахмедов, Ш.К. Назаров. Электронная структура и квантово-химические расчёты виниловых эфиров фенолов. *U55 Universum: химия и биология: научный журнал*. – № 4(70). М., Изд. «МЦНО», 2020. – 53-57 с.
5. B.B. Olimov, V.N. Ahmedov, S. Hayitov. Ikki atomli fenollar asosida vinilli efirlarni olish usullari. *Fan va texnologiyalar taraqqiyoti ilmiy – texnikaviy jurnal*. - № 1/2020.
6. Мирхамитова Д.Х., Нурманов С.Э., Хабиев Ф.М., Худайберганава С.З., Тешабаев Б. Разработка катализаторов для синтез N-винилморфолина. // II Межд. науч. конф. «Современная химия: Успехи и достижения». -Чита. - 2016 г. -С. 282-283.
7. Зиядуллаев О.Э., Мирхамитова Д.Х., Нурманов С.Э. Турли усуллар ёрдамида ароматик ацетилен спиртлари синтези. // ЎзМУ Хабарлари журна. -Тошкент, -2012. -№3/1. -С. 25-29.
8. Мирхамитова Д.Х., Нурманов С.Э., Жураев В.Н. Каталитический синтез N-винилпиперидина. // *Журн. ХПС*. -Ташкент. -2001. -Спец. вып. - С. 86-87.
9. Мирхамитова Д.Х. Азот тутган гетероҳалкали бирикмаларни винилҳосилалари синтези ва хоссалари. // ЎзМУ Хабарлари журна. -Ташкент, -2012. -№3/1. - С. 79-84.
10. Б.Б. Олимов, В.Н. Ахмедов. Винилацетилен асосида фенолларнинг винил эфирлари синтези. “Замонавий ишлаб чиқаришнинг муҳандислик ва технологик муаммоларини инновацион ечимлари” Халқаро илмий анжуман материаллари Бухоро. 2019. 37-39 б.
11. В. Ахмедов, Б. Олимов, Г. Гафурова. Винилацетилен иштирокида винил эфирлар олиш. *НамДУ илмий ахборотномаси - Научный вестник НамГУ* 2021 йил 9-сон. 37-43 б.
12. B.B. Olimov, V.N. Akhmedov, G.A. Gafurova. Application of derivatives of diatomic phenols as corrosion inhibitors. *Euro Asian Conference on Analytical Research (Germany)* ISBN: 978-1-913482-99-2. 2021. 15 October. p. 136-138.

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК

ДЛЯ ЗАМЕТОК

Научный журнал

**UNIVERSUM:
ХИМИЯ И БИОЛОГИЯ**

№ 11(89)
Ноябрь 2021

Часть 2

Свидетельство о регистрации СМИ: ЭЛ № ФС 77 – 55878 от 07.11.2013

Издательство «МЦНО»
123098, г. Москва, улица Маршала Василевского, дом 5, корпус 1, к. 74
E-mail: mail@7universum.com
www.7universum.com

Отпечатано в полном соответствии с качеством предоставленного оригинал-макета в типографии «Allprint»
630004, г. Новосибирск, Вокзальная магистраль, 3

16+