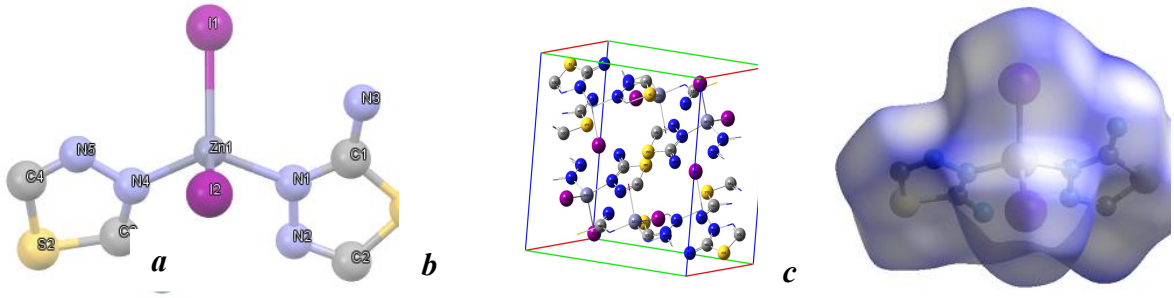
БИС (2-АМИНО-1,3,4-ТИАДИАЗОЛ-N) ДИЙОДИД РУХ(II) КОМПЛЕКСИНИНГ ХИРШФЕЛЬД ЮЗАСИ ТАҲЛИЛИ

[1]Ганиев Б.Ш.
[1]Умаров Б.Б.
[1]Шодиева Д.И.
[2]Ҳусенов Қ.Ш.
[1]Бухоро давлат университети,
[2]Навоий давлат кончилик ва технологиялар университети

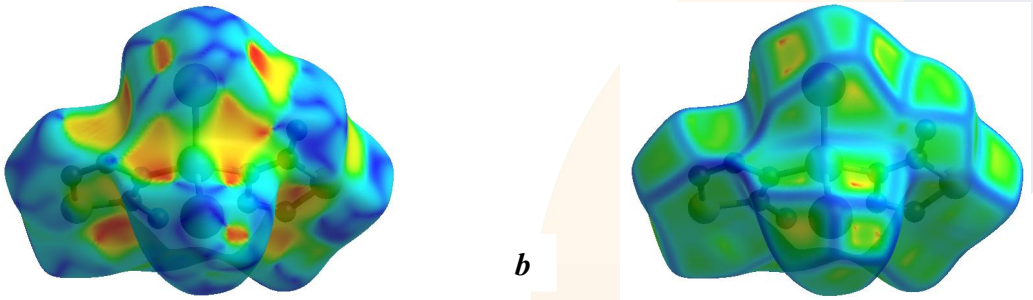
Рух йодид ва 2-амино-1,3,4-тиадиазол иштирокида дастлаб синтез қилинган монокристалнинг $C_4H_6I_2N_6S_2Zn$ таркибга эга эканлиги РТТ ёрдамида исботланган ва [1] ишда ўрганилган бўлиб, ушбу ишда унинг Хиршфельд юзаси таҳлили амалга оширилган. Бу моноклин кристалл элементар ячейкасининг параметрлари: фазовий гуруҳи $P2_1/n$, a=7,997(2), b=13,985(3), c=11,896(2) Å, β=95,51(2)°, V=1324,28 Å^3, Z = 4, $2\theta_{max}$ = 67° R=0,0554 (1**a,b**-расм).



a *b* *c*

1-расм. бис(2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дийодид рух(II) **a-** кристалл тузилиши, **b-** кристалл тахлами, **c**-Хиршфельд юзаси таҳлили

Кристаллл таркибидаги молекулалараро ўзаро таъсирларнинг табиати, CrystalExplorer 17.5 дастури ёрдамида Хиршфельд юзаси таҳлил қилиш ва икки ўлчовли бармоқ излари майдонлари ёрдамида аниқланди [2]. dnorm майдони ташқи (de) ва ички (di) масофаларни энг яқин ядрогача ҳисоблаш йўли билан аниқланди ва ҳажми 322,93 Å^3 да ва юзаси 293,89 Å^2 майдонда қурилди, ўлчамлари −0,1104 (қизил) 1,4761 гача (кўк) (1**c**-расм). Шакл-индекс ва эгри чизиқлар жадваллари мос равишда −0,9954 дан 0,9975 а.б. ва −4.0 дан 4.0 а.б. гача ҳосил қилинди (2**a,b**)-расм).



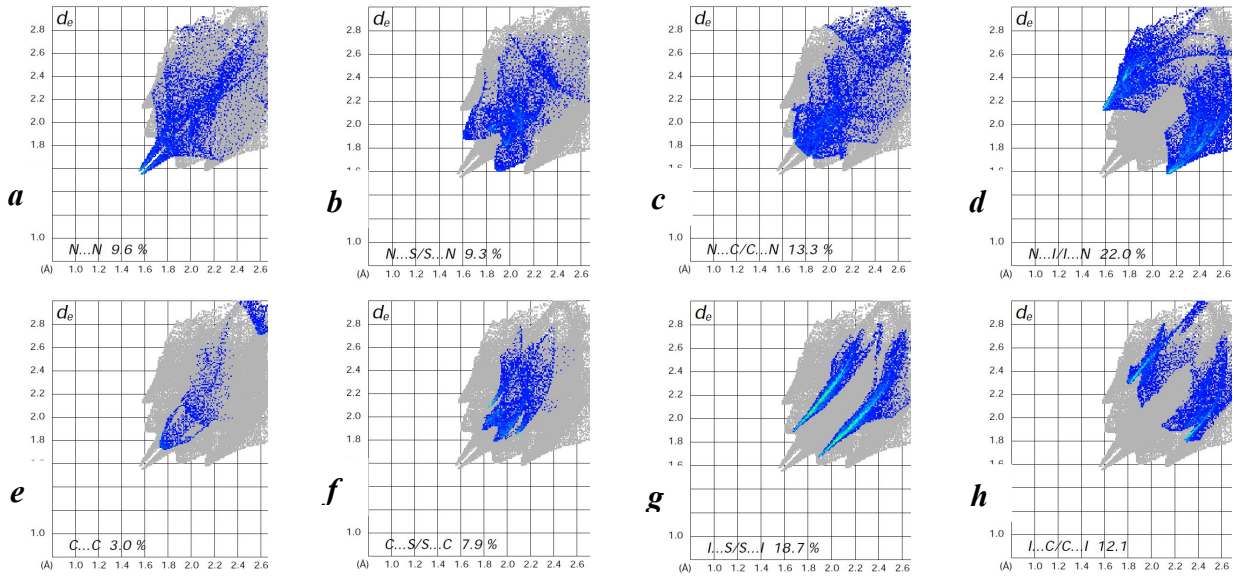
a *b*

2-расм. бис(2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дийодид рух(II) **а-шакл кўрсаткичлари**

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.

майдони ва **b**-ўзаро таъсир ҳудудларини кўрсатадиган **эгри чизиқ** майдони

Шунингдек, бис(2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дийодид рух(II) молекуласи кристалл таркибидаги айрим атомларнинг ўзаро таъсирлашиш масофалари (икки ўлчовли бармоқ излари майдонлари ва уларнинг Хиршфелд юзасига нисбий ҳиссалари) 3-расмда келтирилган.



3-расм. бис(2-амино-1,3,4-тиадиазол-N) дийодид рух(II) молекуласининг икки ўлчовли бармоқ излари майдонлари ва уларнинг Хиршфелд юзасига нисбий ҳиссалари

Дастлаб N···N атомлари орасида боғ таъсир юзаси ўрганилди (9.6 %) (3**a**-расм). Сўнгра молекуладаги азот атомига бошқа атомлар боғларининг таъсир нисбати ўрганилди. N···I/I···N боғларининг таъсир нисбати Хиршфельд юзасига энг катта ҳисса қўшганлигини кузатиш мумкин (22.0%) (3**d**-расм). Шунингдек азотнинг молекуладаги нисбий электроманфийликлари яқин бўлган, аммо электрон тузилиши бир-биридан фарқ қиладиган C ва S атомларининг ўзаро таъсири N···C/C···N 13.3 % ва N···S/S···N 9.3 % га тенг бўлиб, ушбу таъсирлар атомлар орасидаги масофа сифатида кристаллнинг тахланишига катта ҳисса қўшади. Олтингугуртдаги мавжуд электрон жуфти Хиршфельд юзасига нисбий таъсири бўлганлиги сабабли углероднинг нисбий таъсир қийматидан кичик ($13.3^{N\cdots C/C\cdots N} > 9.3^{N\cdots S/S\cdots N}$) эканлигигини кузатиш мумкин (3**b,c**-расм). Молекуладаги йод атомининг C ва S атомлари таъсир юзасини ўзаро таққослаб ўрганилганда, I···C/C···I 12.1 % ва I···S/S···I 18.7 % аксинча ҳолатни таҳлил этиш мумкин (3**g,h**-расм). C···C ўзаро таъсири атомлараро умумий таъсирнинг 3.0 % ни ташкил қилади (3**e**- расм). 3**f**-расмдаги Углерод ва олтингугурт боғларининг Хиршфельд юзасига нисбий таъсири 7.9 % ни ва C···S/S···C таъсирларига тегишли бўлган носимметрик бармоқ изларини ташкил этади (3**f**-расм).

Фойдаланилган адабиётлар

1. Ишанходжаева М.М., Хусенов К.Ш., Умаров Б.Б, Парпиев Н.А., Александров Г.Г. Кристаллическая структура комплекса иодида цинка (II) с 2-амино-1,3,4-тиадиазолом // "Журнал неорганической химии". - 1998. - Т.43. - №11. - С. 1837-1839.
2. M.Kinnon, J.J.; Jayatilaka, D.; Spackman, M.A. Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces//Chemical Communications. – 2007. – №. 37. – P. 3814-3816.

© Ushbu material Creative Commons Attribution 4.0 International (CC BY 4.0) litsenziyasi asosida tarqatiladi.