ILMIY TADQIQOTLAR VA JAMIYAT MUAMMOLARI
nomli ko'p tarmoqli masofaviy,onlayn respublika konferensiyasi

Sayt havolasi:https://e-conference.uz/index.php/itjm Oktabr,2026

2-АМИНО-1,3,4-ТИАДИАЗОЛНИНГ ХИРШФЕЛЬД ЮЗАСИ ВА КВАНТ-КИМЁВИЙ ҲИСОБЛАШЛАР ТАҲЛИЛИ

Ганиев Бахтиёр Шукуруллоевич
Бухоро давлат университети,
«Органик ва физколлоид кимё» кафедраси докторанти,

Ҳусенов Қахрамон Шайимович
к.ф.н., Навоий давлат кончилик ва технологиялар университетининг «Кимёвий технология» кафедраси доценти,

Умаров Бако Бафоевич
к.ф.д., Бухоро давлат университетининг
«Органик ва физколлоид кимё» кафедраси профессори

Ашуров Жамшид Менгнорович,
ЎзР ФА О.С.Содиқов номидаги Биоорганик кимё интитути профессори
ЎзР ФА академиги, О.С.Содиқов номидаги Биоорганик кимё интитути

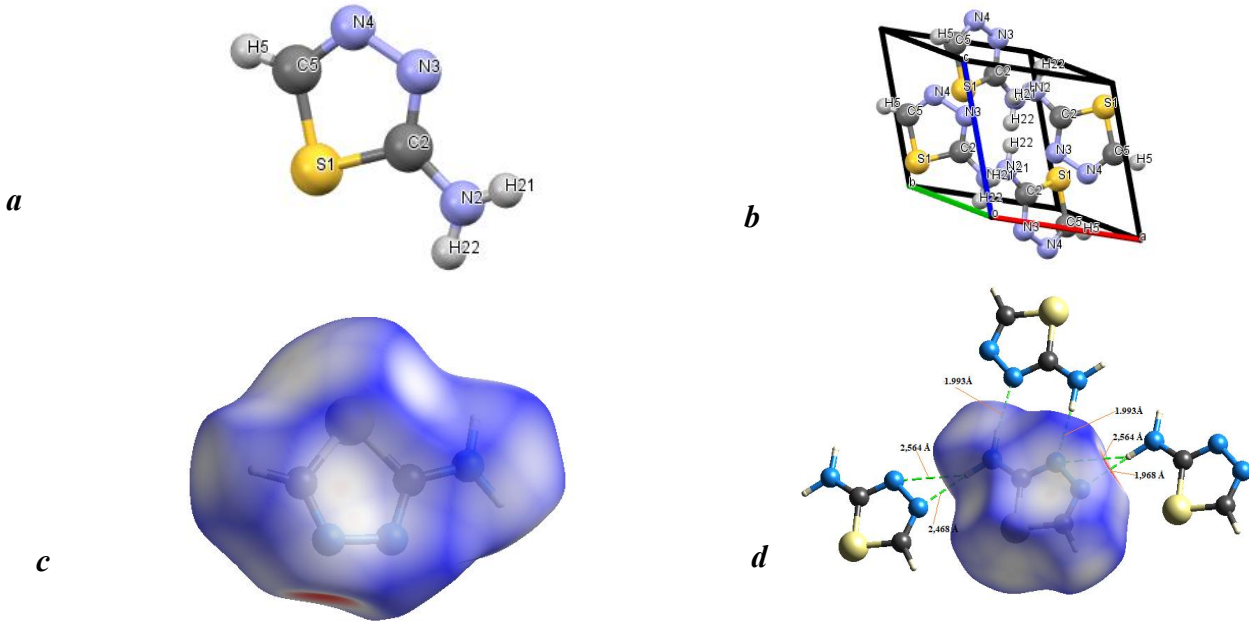
Шодиева Дилфуза Илҳомжоновна,
«Органик ва физколлоид кимё» кафедраси магистранти.

Аннотация: 2-амино-тиадиазол-1,3,4 бирикмасинининг рентгенструктур ва Хиршфельд юзаси таҳлиллари тасвирланган. 2-амино-тиадиазол-1,3,4 бирикмаси қуршаган молекулалар аро водород боғланиш (МАВБ) 1,993; 1,968; 2,468 ва 2,564 Å га тенглиги ва молекулалар аро таъсир энергиялари ўрганилган.

Калит сўзлар: Комплекс бирикма, 2-амино-тиадиазол-1,3,4, лиганд, тузилиш, рентгеноструктур анализ, Хиршфельд юзаси.

2-амино-1,3,4-тиадиазолнинг қайта кристаллаш билан олинган $C_2H_3N_3S$ таркибга эга эканлиги РСА ёрдамида исботланган [1,2]. Ушбу ишда монокристалнинг Хиршфельд юзаси таҳлили амалга оширилган. Бу моноклин кристалл элементар ячейкасининг параметрлари: фазовий гуруҳи P $2_1/n$, a=5,5718(5), b=13,4573(17), c=5,7875(5) Å, β=109,984(6)°, V=407,826 Å^3, Z = 4, $2\theta_{max}$ = 67° R=0,0384 (1**a,b**-расм).

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



1-расм. 2-амино-1,3,4-тиадиазол **a-** кристалл тузилиши, **b-** кристалл тахлами, **c-** Хиршфельд юзаси таҳлили, d-молекулалар аро водород боғланиши

2-амино-1,3,4-тиадиазолнинг қуршаган молекулалар аро водород боғланиш (МАВБ) 1**d**-расмда келтирилган бўлиб, улар 1,993; 1,968; 2,468 ва 2,564 га тенг бўлиши CrystalExplorer 17.5 дастури ёрдамида ўрганилди ва адабиётларда келтирилган натижалар билан таққосланди.

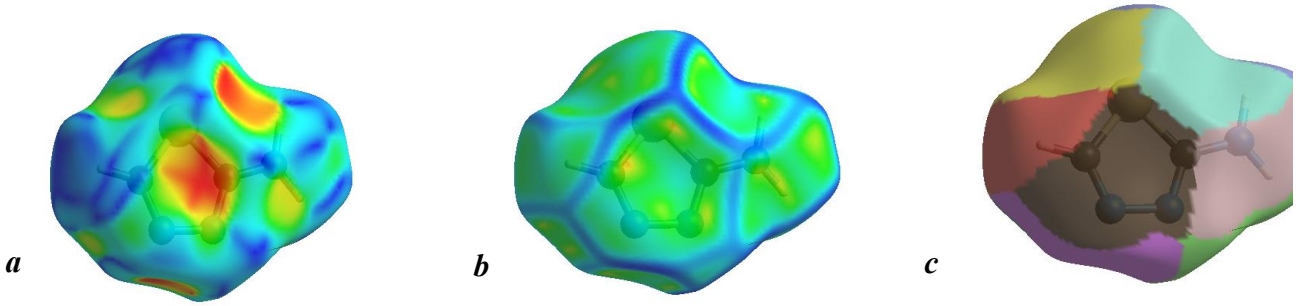
1-жадвал

2-амино-1,3,4-тиадиазол молекуласидаги водород боғлар геометрияси (Å, ^{O})

D-H···A	Симметрия элементи	Distance, Å			Angle DHA, deg.	Ref
		D-H	H···A	D···A		
N(2) – H(21) ··· N3	-x+1, -y+1, -z+1	0,87	2.13	2.999(3)	175	[1]
N(2) – H(22) ··· N4	x, y, z-1	0,89	2.08	2.969(2)	172	[2]
N(2) – H(22) ··· N4	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	0,91	1.968	2.564	171	Уш бу ишда

Кристаллл таркибидаги молекулалараро ўзаро таъсирларнинг табиати, CrystalExplorer 17.5 дастури ёрдамида Хиршфельд юзаси таҳлил қилиш ва икки ўлчовли бармоқ излари майдонлари ёрдамида аниқланди [3]. dnorm майдони ташқи (de) ва ички (di) масофаларни энг яқин ядрогача ҳисоблаш йўли билан аниқланди ва ҳажми 98,22 Å^3 да ва юзаси 390,94 Å^2 майдонда қўрилди, ўлчамлари −0,887 (қизил) 0,079 гача (кўк) (1**c**-расм). Шакл-индекс ва эгри чизиқлар жадваллари мос равишда −0,9944 дан 0,9963 а.б. ва −3.1874 дан 0.2011 а.б. гача ҳосил қилинди (2**a,b**)-расм).

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



2-расм. 2-амино-1,3,4-тиадиазол **а-шакл кўрсаткичлари** майдони, **b-**ўзаро таъсир ҳудудларини кўрсатадиган **эгри чизиқ** майдони ва қисмларга бўлиниш майдони тасвири

Асосий энергияни квантлаш, кристалл таркибидаги молекулаларнинг ўзаро таъсири топологиясини тушунишнинг энг яхши усулларидан бири ҳисобланади [4]. Ушбу усул турли хил энергия таркибий қисмларини ҳисоблашга ва таққослашга имкон беради, яъни жуфтлик билан молекулараро ўзаро таъсир энергиялари топологиясининг анизотропиясига асосланган репулсия (E_rep), электр (E_ele), дисперсия (E_dis), қутбланиш (E_pol) ва умумий (E_tot) энергия [5] (2-жадвал). 1x1x1 катак бирлиги учун молекуляр кластер муҳити алмашинуви ва потенциал функциялар Хатри Фок (HF) билан белгиланган HF/STO-3G асосида DFT усули ёрдамида янги тўлқин функцияларини яратиш орқали олинган бирикманинг энергия доирасини ҳисоблашда фойдаланилган [6]

1-жадвал

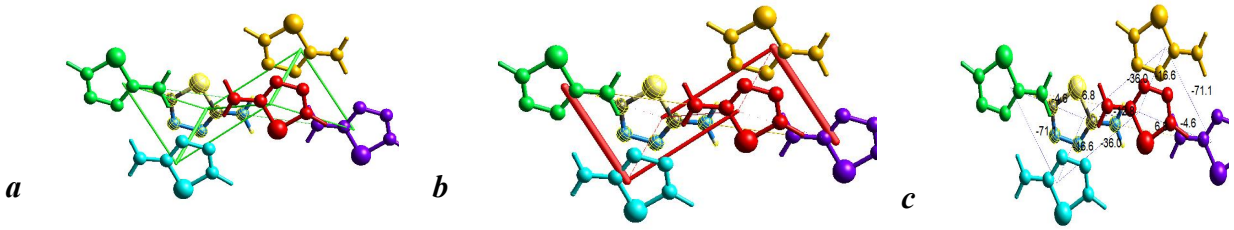
2-амино-1,3,4-тиадиазол танланган молекуласининг ва бошқа рангли молекулалар орасидаги ўзаро таъсир энергияси (ккаль/моль)

	N	Symop	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot
	1	-x, -y, -z	5.21	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-7.3	-1.7	-10.6	8.8	-12.8
	2	x, y, z	5.79	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-42.3	-9.3	-9.5	38.5	-36.0
	2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	5.79	B3LYP/ 6-31G(d,p)	2.2	-0.9	-6.7	6.0	-0.5
	2	x, y, z	5.57	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-0.7	-0.9	-8.4	6.8	-4.6
	1	-x, -y, -z	3.84	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-5.0	-3.9	-20.5	15.5	-16.6
	2	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	4.74	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-5.9	-1.5	-12.1	15.5	-8.3

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

1	-x, -y, -z	8.07	B3LYP/ 6-31G(d,p)	9.5	-1.3	-2.9	0.4	6.8
1	-x, -y, -z	5.54	B3LYP/ 6-31G(d,p)	-85.5	-19.3	-13.1	72.9	-71.1
				-135				

Ҳисоб-китоблар натижалари шуни кўрсатдики, дисперсия ўзаро таъсирлари узуклар орқали тахминан стул шаклидаги энергия топологияларини намойиш этади ва максимал энергия қиймати −64,5 кЖ/мол га тенг (3а-расм). Бошқа энергия компонентлари ўзаро итаришиш, электростатик ва қутбланиш энергиялари учун мос равишда 32.1 кЖ/мол, −33.9 кЖ/мол ва −8.9 кЖ/мол қийматларига эга. Тўртала асосий компонентлар натижасида ҳосил бўлган ўзаро таъсирнинг умумий энергияси −75,2 кЖ/мол



3-расм. 2-амино-1,3,4-тиадиазол танланган молекуласининг ва бошқа рангли молекулалар орасидаги ўзаро таъсир энергияслари: **a** –дисперсион таъсир, **b** – электростатик ва **c** – умумий

Фойдаланилган адабиётлар

1. Khusenov, K. S., Umarov, B. B., Ishankhodzhaeva, M. M., Parpiev, N. A., Talipov, S. A. & Ibragimov, B. T. (1997). Russ. J. Coord. Chem. 23, 555±559.
2. Boechat, N., Ferreira, S. B., Glidewell, C., Low, J. N., Skakle, J. M., & Wardell, S. M. (2006). 2-Amino-5-trifluoromethyl-1, 3, 4-thiadiazole and a redetermination of 2-amino-1, 3, 4-thiadiazole, both at 120 K: chains of edge-fused R22 (8) and R44 (10) rings, and sheets of R22 (8) and R66 (20) rings. Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications, 62(1), o42-o44.
3. 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.
4. N.Q. Muhamadiyev. Kimyoviy birikmalar tuzilishi va xossalarini matematik modellash, T. "Cho'lpon", 2016. 260 б.
5. Turner, M. J., Thomas, S. P., Shi, M. W., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A. Energy frameworks: insights into interaction anisotropy and the mechanical properties of molecular crystals//Chemical Communications. – 2015. – T. 51. – №. 18. – P. 3735-3738.
6. Mackenzie, C. F., Spackman, P. R., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A. CrystalExplorer model energies and energy frameworks: Extension to metal coordination compounds, organic salts, solvates and open-shell systems. //IUCrJ. – 2017. – T. 4. – №. 5. – P. 575-587.

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