AMINOMETILLASH REAKSIYASI MEXANIZMINI KVANT KIMYOVIY O`RGANISH

U.M.Halimov, M.X.Mamarahmonov, Sh.M.Qirg‘izov

Propin molekulasining aminometillash reaksiyasi mexanizmi zamonaviy kvant kimyo usullarida o‘rganildi. Birikmalar tarkibidagi azot atomi bilan bog‘langan radikallarning energetik va geometrik kattaliklari hisoblandi. Ammiak molekulasiga taqqoslash natijasida olingan sintez mahsulot geometriyasi nazariy hisob natijalariga mos keladi.

***Kalit so‘zlar**: propin, kvant kimyo metodlari, aminometillash reaksiyasi.*

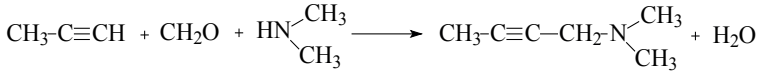
С помощью современных квантово-химических методов изучен механизм реакции аминометилирования молекулы пропина. Вычислены энергетические и геометрические параметры радикалов, связанных с атомом азота соединений. В результате сопоставления выявлено соответствие теоретически полученных данных с геометрией продукта синтеза.

***Ключевые слова:** пропин, квантово-химические методы, реакция аминометилирования*

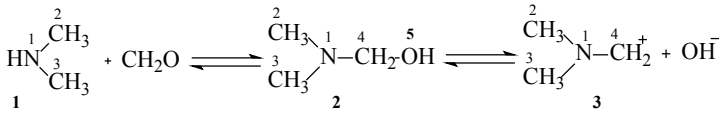
With modern quantum chemical methods the article studies the mechanism of the aminomethylation reaction of propyne molecule. Energetic and geometrical parameters of radicals linked to the nitrogen atom of compounds were calculated. As a result of comparison corresponding of the theoretical data with the geometry of the synthesis product was found.

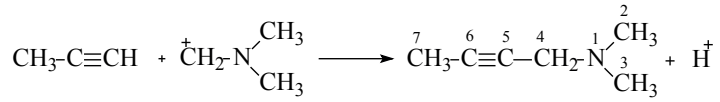
***Key words**: propyne, quantum chemical methods, aminomethylation reaction.*

Aminometillash reaksiyasi asosan uchta komponent: harakatchan vodorod atomi tutuvchi organik modda, formaldegid va aksariyat holda ikkilamchi amin ishtirokida boradi. Ushbu maqolada harakatchan vodorod atomi tutgan modda sifatida propin molekulasi hamda ikkilamchi aminlardan dimetilamin asos qilib olingan.



Ushbu reaksiya birinchi marta buyuk nemis kimyogari K.Mannix tomonidan 1912-yilda kashf qilingan va o‘rganilgan [1]. Shuning uchun bunday kimyoviy o‘zgarish Mannix reaksiyasi deyiladi. Mazkur reaksiya kashf qilinganiga uzoq vaqt bo‘lgan bo‘lsa-da, hali-hanuz organik birikmalarning turli sinflariga bir vaqtning o‘zida ham metilen, ham amino gruppani kiritishning eng qulay usuli bo‘lib qolmoqda. Avvalgi maqolamizda turli adabiyotlardagi Mannix reaksiyasiga doir ma’lumotlar to‘planib, reaksiyalar bir-biri bilan taqqoslangan edi [2]. Reaksiyaning mexanizmi quyidagicha [4]:





Dastlabki, oraliq, oxirgi hosilalarning hamda ammiak molekulasining geometriyasi, zaryad taqsimoti, valent burchaklari va energetik kattaliklari Gaussian98W dasturida DFT/B3LYP metodining 3-21G bazasida olib borildi. Olingan natijalar 1 va 2-jadvallarda ko‘rsatilgan.

DFT-B3/LYP metodi diaminobrikmalar hamda tarkibida harakatchan vodorod atomi tutgan organik moddalarning energetik qiymatlari va geometriyasini, aminometillanish jarayonini o‘rganish uchun juda qulay. Ayniqsa, hisoblashlarda har ikki metodda ham reaksiyani kompyuterda modellashda IEFPCM modelining qo‘llanishi nazariy olingan natijalarni real sharoitda olingan natijalar bilan taqqoslashga imkon beradi. Har ikki: gaz fazada va etil spirtida olingan natijalar quyidagi jadvalda keltirilgan.

1-jadval

Ammiakning to‘la energiya qiymatlari E (kkal/mol), dipol momenti μ (D)

Birikma	DFT-B3LYP				HF			
	Gaz faza		Etil spirti		Gaz faza		Etil spirti	
	μ	E	μ	E	μ	E	μ	E
NH_3	1,8498	-35284,34	2,1065	-35288,04	1,7543	-35060,37	2,0343	-35064,04

Jadvalda keltirilgan ma’lumotlar ammiak molekulasining energiyasi va elektr xossalarini o‘rganishda qo‘l keladi. Masalan, nazariy hisoblar ushbu molekulaning qutbli ekanini ko‘rsatadi. Gaz fazadan erituvchiga o‘tganda, molekula qutbliligi DFT-B3LYP metodida 0,26D ga oshishini; HF metodida esa bu o‘zgarish 0,28D ga tengligini ko‘rish mumkin. Reagent va hosilalardagi azot atomi bilan bog‘langan radikallarning valent burchak qiymatlarini (2-jadval) ammiak molekulasining valent burchak qiymatiga taqqoslaylik.

2-jadval

Birikmalarning hisoblangan valent burchaklar qiymatlari φ (°)

DFT-B3LYP								
	Gaz fazada				Nisbiy burchak farqlari, Dj* (°)			
φ	1	2	3	4	1	2	3	4
C2-N1-C3	113,05	113,21	115,07	111,74	3,58	3,74	5,6	2,27
C3-N1-C4		113,28	122,45	111,93		3,81	12,98	2,46
N1-C4-O5		112,35				2,88		
N1-C4-C5				112,32				2,85
C4-C5-C6				179,31				
C5-C6-C7				179,53				

**- valent burchak qiymati 109,47° (DFT-B3LYP gaz faza uchun) [3]*

Ammiak molekulasi N-H bog‘lar orasidagi valent burchak qiymati - 109,47° va gibridlanish turi – sp^3. Natijalardan ko‘rinib turibdiki, nazariy hisoblangan valent burchaklar aniqligi juda yuqori va amalda o‘lchangan qiymatlarga mos keladi. Hisob natijalari azot atomi bilan bog‘langan uglerod atomlari orasidagi bog‘ – **σ**-bog‘ ekanligini ko‘rsatadi. Hosiladagi hisoblangan azot atominig gibridlanish turi ham sp^3 ekanligini jadval qiymatlari tasdiqlaydi. Olingan sintez mahsuloti va reaksiya mexanizmi to‘g‘ri va aniq ekanligini kvant kimyoviy o‘rganish orqali oson tushuntirish mumkin.

Adabiyotlar:

1. Asqarov I.R., Isayev Yu.T., Maxsumov A.G., Qirg‘izov Sh.M. Organik kimyo.- T.: G`afur G`ulom nomidagi nashriyot-matbaa ijodiy uyi, 2012.- 331 b.

2. Halimov U.M., Qirg‘izov Sh.M. Aminometillash reaksiyasi atsetilen uglevodorodlar misolida. // Ilmiy xabarnoma.- Andijon.- 2016.- №1.- B.18-20

3. Frisch M.J., etc, Gaussian 98, Revision A. 5, Gaussian Inc., Pittsburgh (PA), 1998.

4. http://www.krugosvet.ru/enc/наукаитехника/химия/РеакцияМанниха.html

Андижон давлат университети,
2016 йил 25 апрелда қабул қилинган
(Тақризчи: доц. Н.Тўхтабоев)