

β -(N-БЕНЗОКСАЗОЛИН-2-ТИОН)ПРОПИОН КИСЛОТА ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИНИ DFT УСУЛИДА ЎРГАНИШ

Аманов Баходир Шарифович

Термиз муҳандислик-технология институти, илмий бўлим бошлиғи

АННОТАЦИЯ

Замонавий назарий ҳисоблаш усули - B3LYP/6-31G(d,p) ёрдамида β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота электрон тузилиши бензоксазолин-2-тион ва β -аланин молекулаларига таққослаган ҳолда ўрганилди. Ҳисоблашлар бензоксазолин-2-тион ва β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота квант-кимёвий кўрсаткичлари қарийб бир хил эканлигини кўрсатди. Электростатик потенциал сатҳи таҳлили молекулалараро таъсирлашувларда β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота COOH гуруҳи ва гетероҳалқа O ва S атомлари боғланмаган электрон жуфтлари орқали қатнашиши мумкинлиги аниқланди.

Калит сўзлар: β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота, бензоксазолин-2-тион, β -аланин, DFT, квант-кимёвий кўрсаткичлар, ЭСП сатҳи.

ABSTRACT

Using the modern theoretical calculation method - B3LYP/6-31G(d,p), the electronic structure of β -(N-benzoxazolin-2-thione)propionic acid was studied in comparison with benzoxazolin-2-thione and β -alanine molecules. Calculations showed that the quantum chemical parameters of benzoxazolin-2-thione and β -(N-benzoxazolin-2-thione)propionic acid are almost the same. Electrostatic potential level analysis revealed that β -(N-benzoxazolin-2-thione)propionic acid SOON group and heteroring O and S atoms can participate in intermolecular interactions through unbonded electron pairs.

Keywords: β -(N-benzoxazolin-2-thione)propionic acid, benzoxazolin-2-thione, β -alanine, DFT, quantum chemical parameters, ESP level.

АННОТАЦИЯ

С использованием современного теоретического метода расчета - B3LYP/6-31G(d,p) изучено электронное строение β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропионовой кислоты в сравнении с молекулами бензоксазолин-2-тиона и β -аланина. Расчеты показали, что квантово-химические параметры бензоксазолин-2-тиона и β -(N-бензоксазолин-2-тиона)пропионовой кислоты

практически совпадают. Анализ уровня электростатического потенциала показал, что β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропионовая кислота группы SOON и атомы O и S гетероцикла могут участвовать в межмолекулярных взаимодействиях через несвязанные электронные пары.

Ключевые слова: β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропионовая кислота, бензоксазолин-2-тион, β -аланин, ТФП, квантово-химические параметры, уровень ЭСП.

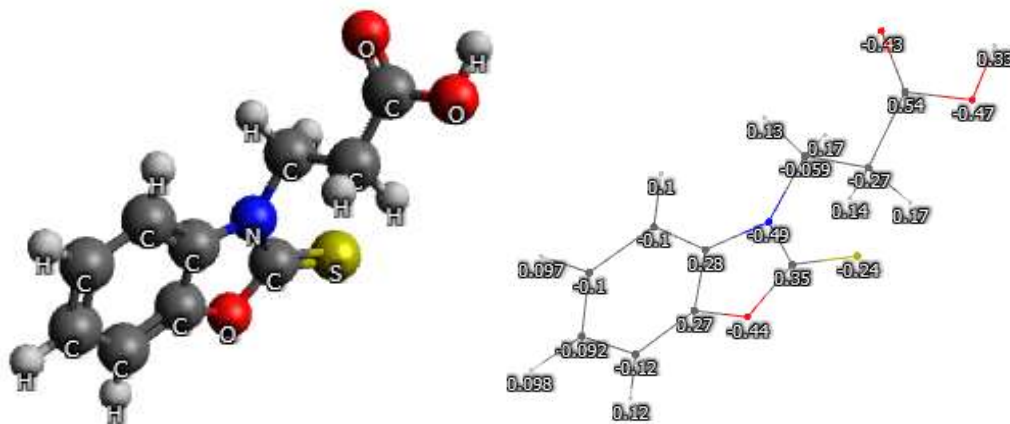
KIRISH

Маълумки, бензоксазолин-2-тион (БТ) ҳосилалари кенг спектрдаги биологик фаолликларни эга. Шу жумладан, унинг N-алмашган ҳосилалари ҳам фармакологик изланишларда бир нечта фаолликларга эга эканлиги аниқланган [1]. Таркибида бензоксазолин-2-тион (БТ) ва β -аланин каби биологик фаол фрагментларни тутган β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота (БПК) ҳам истиқболли биологик фаол бирикмалардан бири ҳисобланади [2].

Шуларни инобатга олган ҳолда, β -(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота (БПК) электрон тузилишни ифодаловчи квант-кимёвий кўрсаткичлар (1-жадвал) B3LYP/6-31G(d,p) усулида ORCA 5.0 [3] дастурида ҳисобланди. Шунингдек, БПК таркибий қисмлари (БТ ва β -аланин) учун ҳам назарий кўрсаткичлар ҳисобланди ва БПК маълумотлари билан таққосланди.

MUHOQAMA VA NATIJALAR

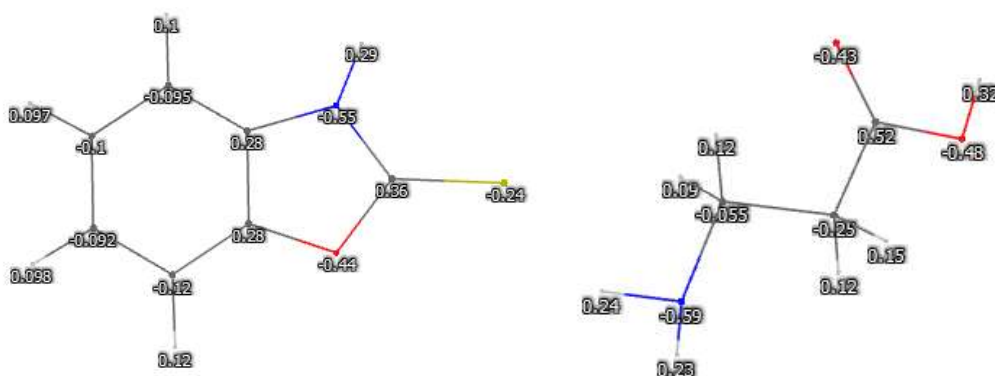
Назарий жиҳатдан БПК бир нечта реакцион марказларга эга. Бензол ҳалқаси бўйича электрофил алмашилиш реакциялари бориши мумкин. Карбоксил гуруҳи ҳисобидан карбон кислоталарга хос кимёвий ўзгаришларга учраши мумкин. Ундан ташқари, O ва S атомлари БЭЖлари ва $-COOH$ гуруҳи металл ионлари билан координация қилишда қатнашиши мумкин.



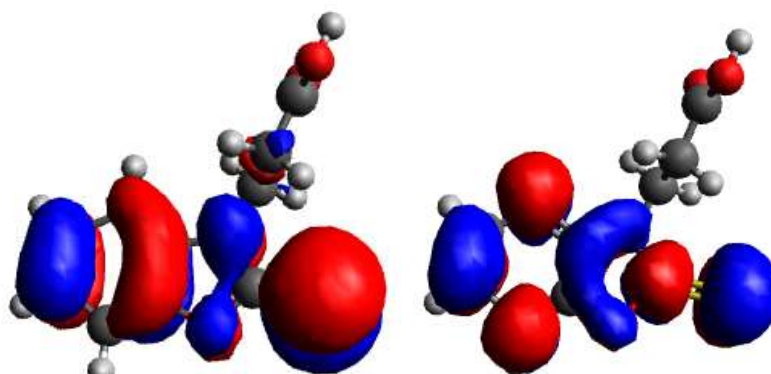
1-Расм. БПК фазовий тузилиши ва атомларидаги заряд тақсимоти

Атомлардаги заряд тақсимотлари таҳлили БПК S атоми ва кислород атомларида манфий зарядларнинг локаллашганини кўрсатди (1-расм). Бензоксазолин-2-тион (БТ) ва β -аланин атомларидаги заряд тақсимотлари қарийб БПК атомларида ҳам сақланиб қолганлигини кузатиш мумкин (1 ва 2-расмлар).

Маълумки, ЮБМО ва ҚБМО кимёвий реакцияларда ҳамда бирикмаларнинг биологик фаолликларини номоён қилишида муҳим аҳамият касб қилади [4]. Ҳисоблашлар таҳлили ушбу МОлардаги электрон зичликлар БПКнинг бензоксазолин-2-тион қисмида локаллашишини кўрсатди (3-расм).



2-Расм. БТ ва β -аланин атомларидаги заряд тақсимотлари.



3-Расм. БПК юқори банд (*чанда*) ва қуйи бўш (*ўнда*) молекуляр орбиталларидаги электрон зичлик тақсимотлари.

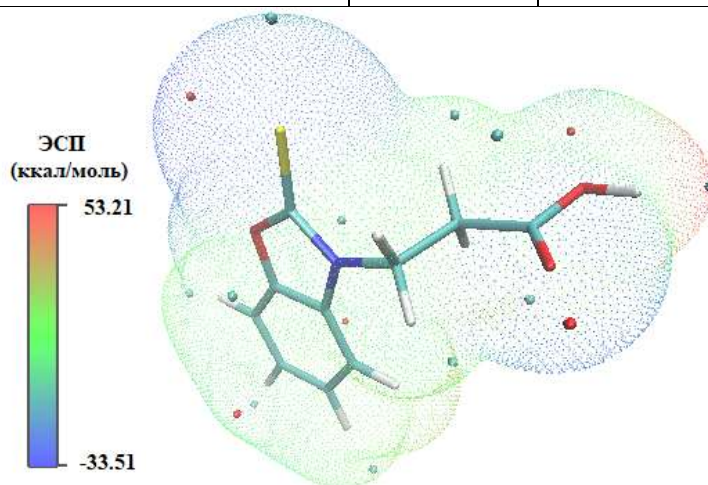
Бугунги кунда ЮБМО ва ҚБМО энергиялари асосида бирикмаларнинг барқарорлигини ($|\Delta E|$), қаттиқлиги (η) ва юмшоқлигини (σ), электроманфийлигини (χ) ифодаловчи назарий кўрсаткичлар билан бир қаторда электрофиллик индекси (ω) ҳам ҳисобланмоқда [5]. БПК учун ҳисобланган кўрсаткичларнинг унинг таркибий қисми бўлган БТ кўрсаткичлари билан қарийб бир хил эканлиги аниқланди.

XULOSA

Бирикмаларнинг электрон тузилишини, асосан электронодонор ва электроноакцептор марказларини аниқлашда электростатик потенциал сатҳи таҳлили кенг қўлланилади [6]. Шундан келиб чиққан ҳолда, БПК ЭСП сатҳи максимум ва минимумлари таҳлил қилинди (4-расм). Ҳисоблашлар натижасида БПК молекуласи учун 11та максимум ва 5та минимум мавжудлиги аниқланди. Энг катта максимум (53.21 ккал/моль) –COOH гуруҳи Н атоми атрофида локаллашиши, энг кичик минимум эса (-33.51 ккал/моль) БТ фрагменти О ва S атомлари яқинида локаллашиши аниқланди. Кейинги максимум (27.50 ккал/моль) –N-CH₂ гуруҳи Н атомлари атрофида, минимум (-27.15 ккал/моль) эса C=O гуруҳи О атоми атрофида локаллашишини кўрсатди.

1-Жадвал. β-(N-бензоксазолин-2-тион)пропион кислота (БПК) ва унинг таркибий қисмлар учун ҳисобланган квант-кимёвий кўрсаткичлар

Квант-кимёвий параметрлар	БТ	β-аланин	БПК
E _{ЮБМО} (эВ)	-5.83	-6.37	-5.80
E _{КБМО} (эВ)	-1.02	0.40	-1.02
ΔE = E _{ЮБМО} - E _{КБМО} (эВ)	4.81	5.97	4.78
Ионланиш потенциали, I = - E _{ЮБМО} (эВ)	5.83	6.37	5.80
Электронга мойиллик, A = - E _{КБМО} (эВ)	1.02	-0.40	1.02
Электроманфийлик, χ = (I + A)/2 (эВ)	3.43	2.98	3.41
Кимёвий қаттиқлик, η = (I - A)/2 (эВ)	2.41	3.38	2.39
Кимёвий потенциал, μ _p = - (I + A)/2 (эВ)	-2.41	-3.38	-2.39
Кимёвий юмшоқлик, σ = 1/(2η) (эВ ⁻¹)	0.21	0.17	0.21
Электрофиллик индекси, ω = μ _p ² /2η (эВ)	1.21	1.91	1.19
Диполь момент, μ (Дебай)	5.49	1.35	5.22



4-Расм. БПК молекуласи учун аниқланган ЭСП сатҳи максимум ва минимумлари.

LIST OF REFERENCES

1. N. D. Jayanna, H. M. Vagdevi, J. C. Dharshan, T. R. Prashith Kekuda, B. C. Hanumanthappa, and B. C. Gowdarshivannanavar. Synthesis and Biological Evaluation of Novel 5,7-Dichloro-1,3-benzoxazole Derivatives. J. Chem. 2013, doi.org/10.1155/2013/864385
2. B. Berk, Y.A. Tahirovic, E.F. Bülbül, S.N. Biltekin. The Synthesis, Antimicrobial Activity Studies, and Molecular Property Predictions of Novel Benzothiazole-2-Thione Derivatives. Acta Pharm. Sci. 2017, Vol.55, N3. DOI : 10.23893/1307-2080.APS.05516
3. Neese F. ORCA Program system. Comput. Mol. Sci. 2012, 2, 73.
4. Rauk A (2001) Orbital interaction. Theory of Organic chemistry. Wiley-Interscience, Hoboken, New Jersey
5. A.H. Pandith, S. Giri, P.K. Chattaraj. A Comparative Study of Two Quantum Chemical Descriptors in Predicting Toxicity of Aliphatic Compounds towards Tetrahymena pyriformi. Org. Chem. Intern. 2010, doi.org/10.1155/2010/545087
6. J.S. Murray, P. Politzer. The electrostatic potential: an overview. WIREs Comput. Mol. Sci. 2011, 153–163. DOI: 10.1002/wcms.19