



UNIVERSUM: ХИМИЯ И БИОЛОГИЯ

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

Выпуск: 1(115)

Январь 2024

Часть 2

Москва
2024

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;

Гусев Николай Федорович, д-р биол. наук;

Даминова Шахло Шариповна, д-р хим. наук, проф;

Ердаков Лев Николаевич, д-р биол. наук;

Кван Ольга Вилориевна, канд. биол. наук;

Кадырова Гульчехра Хакимовна, 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;

Муковоз Пётр Петрович, канд. хим. наук;

Рублева Людмила Ивановна, канд. хим. наук;

Саттаров Венер Нуруллоевич, д-р биол. наук;

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

Ткачева Татьяна Александровна, канд. хим. наук;

Харченко Виктория Евгеньевна, канд. биол. наук;

Яковлев Иван Геннадиевич, канд. хим. наук.

U55 Universum: химия и биология: научный журнал. – № 1(115). Часть 2., М.,
Изд. «МЦНО», 2024. – 80 с. – Электрон. версия печ. публ. –
<http://7universum.com/ru/nature/archive/category/1115>

ISSN : 2311-5459

DOI: 10.32743/UniChem.2024.115.1

Учредитель и издатель: ООО «МЦНО»

ББК 24+28

© ООО «МЦНО», 2024 г.

Содержание	
Статьи на русском языке	5
Химические науки	5
Математическая и квантовая химия	5
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА ПУТЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИНТЕЗА МЭЭ-1	5
Махсумов Абдухамид Гафурович Мухиддинов Баходир Фахриддинович Машаев Элдор Эргашвой угли Исмаилов Бобурбек Махмуджанович Хакимова Гузал Рахматовна	
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ МОЛЕКУЛЫ МЭЭ-1	12
Махсумов Абдухамид Гафурович Мухиддинов Баходир Фахриддинович Машаев Элдор Эргашвой угли Исмаилов Бобурбек Махмуджанович Абсалямова Гулноза Маматкуловна	
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ГЕОМЕТРИИ МОЛЕКУЛЫ ТИЕНОПИРИМИДИНОНА	18
Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович Кодиров Абдуахад Абдурайимович Хамраева Камола Избасарова Гулноза Элмурадов Бурхон Жураевич	
Медицинская химия	22
ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ МЕТОДАМИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО СКРИНИНГА	22
Алиходжаева Мадина Ильясовна Атаханов Алишер Шавкатович Жалилов Фазлиддин Садыкович	
РАЗРАБОТКА СОСТАВА СИРОПА С ЭКСТРАКТОМ ЛАВРА	26
Искандаров Аброр Искандар угли Эргашев Нурбек Зокир угли Автина Наталья Валерьевна	
ИЗУЧЕНИЕ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ СУБСТАНЦИИ МЭЭ-2	32
Махсумов Абдухамид Гафурович Мухиддинов Баходир Фахриддинович Машаев Элдор Эргашвой угли Абсалямова Гулноза Маматкуловна Исмаилов Бобурбек Махмуджанович	
МАКРО- И МИКРОЭЛЕМЕНТЫ РАСТЕНИЯ <i>Fritillaria severzovii</i>	36
Хужаева Нафисахон Тоштемировна Абдуганиев Бахтиёржон Ёрмахаматович Хужаев Вахобжон Умарович	
Органическая химия	41
СРАВНЕНИЕ ГЛБ И ПОВЕРХНОСТНОЙ АКТИВНОСТИ НЕИОНОГЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ПРИРОДНЫХ МАСЕЛ	41
Болтаева Гулсанам Хасановна Очилов Акбаржон Мамаюнусович Абдикамалова Азиза Бахтияровна Кодиров Орифжон Шарипович Нурманов Суванкул Эрхонович Эшметов Иззат Дусимбатович	
Физическая химия	46
ТЕРМОДИНАМИКА АДСОРБЦИИ МОЛЕКУЛЫ Н-ГЕПТАНА ГИБРИДНЫМ БИОНАНОКОМПОЗИТОМ ДИАЦЕТАТЦЕЛЛЮЛОЗА-КРЕМНЕЗЕМ	46
Яркулов Ахрор Юлдашевич Сагдуллаев Бахтияр Убайдуллаевч Акбаров Хамдам Икромович	

Papers in english	51
Biological sciences	51
General biology	51
Botany	51
BIOLOGY FLOWERING <i>Salvia officinalis</i> L. (LAMIACEAE) IN THE CONDITIONS OF INTRODUCTION Mekhriniso Nasriddinova	51
Physico-chemical biology	56
Biochemistry	56
SYNTHESIS AND STUDY OF THE METHYLATION REACTION OF 2-METHYLQUINAZOLIN-4-TIONE Foziljon Saitkulov Burkhon Elmuradov Kuchkar Giyasov Doniyor Ruziboev	56
Chemistry sciences	60
Analytical chemistry	60
DETERMINATION OF WATER SOLUBLE VITAMINS IN <i>Ziziphora clinopodioides</i> L. PLANT Marvaroy Akbarova Ibrokhim Askarov Zulaykho Smanova Kamola Donieva	60
Inorganic chemistry	63
INTERACTIONS OF MONOETHANOLAMMONIUM MONOSUBSTITUTED ACETIC ACID WITH POTASSIUM CHLORIDE Marguba Abdullaeva	63
Organic chemistry	66
6-ACEETHYL-1-THIOXROMANE AND 7-ACEETHYL-6-METHYL-1-THIOXROMANE ACETIC ETHER CONDENSATION REACTIONS WITH Guzal Rakhmatova	66
IMPROVEMENT OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF TECHNICAL GLYCERIN Shaxlo Ahmedova Ahror Abdurakhimov Akbarali Ruzibayev Sanobar Achilova	69
DETERMINATION OF THE QUANTITY OF THE BINDING COMPONENT OF THE SELECTED CATALYST FOR THE PROCESS OF HEATING MONOCHLOROMETHANE AT A HIGH TEMPERATURE Normurot Fayzullaev Jonibek Javharov	74

СТАТЬИ НА РУССКОМ ЯЗЫКЕ

ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ И КВАНТОВАЯ ХИМИЯ

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16555

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СИНТЕЗА
ПУТЕМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СИНТЕЗА МЭЭ-1*Махсумов Абдухамид Гафурович*

*д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: maxsumovag@bk.ru*

Муриддинов Баходир Фахриддинович

*д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология”,
Навоийский государственный горно-технологический университет,
Республика Узбекистан, г. Навои*

Машаев Элдор Эргашовой угли

*докторант, ст. преп.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: eldor.mashayev@mail.ru*

Исмаилов Бобурбек Махмуджанович

*д-р филос. в обл. техн. наук, PhD,
кафедра “Химическая технология переработки газа”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: boburbek.89@mail.ru*

Хакимова Гузал Рахматовна

*ст. преподаватель кафедры «Общая химия»
Ташкентского химико-технологического института,
Республика Узбекистан, г. Ташкент*

DETERMINATION OF OPTIMAL SYNTHESIS CONDITIONS BY MATHEMATICAL
MODELING OF SYNTHESIS MEE-1*Abduhamid Makhsumov*

*Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology of Oil refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Bakhodir Mukhiddinov

Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology,
Navoi State Mining and Technology University,
Republic of Uzbekistan, Navoi

Eldor Mashaev

PhD student, senior lecturer,
Department of Chemical Technology of Oil Refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Boburbek Ismailov

Doctor of Philosophy in Technical Sciences, PhD,
department of Chemical technology of gas refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Guzal Khakimova

Senior teacher
of the department of General Chemistry,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

В данной статье с целью дальнейшей оптимизации процесса синтеза вещества N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата] т.е. МЭЭ-1 были проведены математические расчеты путем объединения двух программ как Maple 2023.0 и MATLAB R2021A. В результате определены оптимальные требования, необходимые для реакции, включая температуру, время, скорость реакции и условия оптимального выхода. Также было выявлено, что, МЭЭ-1 и его производные получают с наибольшим выходом при проведении реакции в диметилформамидном растворителе при температуре 35–40 °С и в течение 4–6 часов времени.

ABSTRACT

In this article, in order to further optimize the process of synthesis of the substance N,N'-hexamethylene-bis-[(o-cresolyl)-carbamate], i.e. MEE-1 mathematical calculations were carried out by combining two programs like Maple 2023.0 and MATLAB R2021A. In doing so, the optimal conditions required for the reaction, including temperature, time, reaction rate, and conditions for optimal yield are determined. As a result, it is revealed that MEE-1 and its derivatives are obtained with the highest yield when the reaction is carried out in a dimethylformamide solvent at a temperature of 35-40 °C and for 4-6 hours.

Ключевые слова: бис-карбамат, синтез, реакция, скорость, выход продукта, математическое моделирование, оптимизация, наименьшие квадраты, алгоритм.

Keywords: bis-carbamate, synthesis, reaction, rate, product yield, mathematical modeling, optimization, least squares, algorithm.

Введение. В настоящее время понятия «Компьютерная химия» или «Математическая химия» быстро развиваются. В компьютерной химии вещества (молекулы) моделируются по молекулярным графам, с формальными операциями по изменению веществ (химическими реакциями). В химии такой подход существенно упрощает алгоритмизацию химических задач, сводит их к типичным задачам комбинаторики и дискретной математики, позволяет искать решения с помощью компьютерных программ [3; 7; 8; 11]. Авторами данной работы были синтезированы более трех бис-карбаматов, а также, более пятнадцать их производных [2; 4; 5; 6; 9; 10]. Но им предстоит получить ещё больше производных. В связи с этим, авторы с помощью программ как Maple 2023.0 и MATLAB R2021A, провели математические расчеты N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата]

т.е. МЭЭ-1, чтобы сократить количество реакций, найти оптимальные условия синтеза, получить продукты с высокой эффективностью и тем самым добиться экономической эффективности.

Материалы и методы исследования. Для проведения исследования мы использовали программы Maple 2023.0 и MATLAB R2021A. На основе процесса синтеза МЭЭ-1 и результатов эксперимента было проведено математическое моделирование в программе Maple 2023.0 методом наименьших квадратов $f(x, a_1, a_2, \dots, a_k)$. С помощью компонента Curve fitting tool программы MATLAB R2021A исследована зависимость выхода реакции от времени и температуры.

Результаты исследования и их обсуждение. Как упоминалось выше, мы использовали программы Maple 2023.0 и MATLAB R2021A, чтобы сократить количество реакций, найти оптимальные условия синтеза, получить продукты с высокой эффективностью и тем самым добиться экономической эффективности [10]. На основе процесса синтеза МЭЭ-1 и результатов эксперимента было проведено математическое моделирование в программе Maple 2023.0 методом наименьших квадратов $f(x, a_1, a_2, \dots, a_k)$ и построены следующие зависимости [1; 2]. Смещения квадратов результата $y = f(x, a_1, a_2, \dots, a_k)$ в размере единицы должны быть меньше смещений в $Y_i = f(x, a_1, a_2, \dots, a_k)$.

Поскольку теоретическая часть математического моделирования занимает много места, была отведена расчетная часть. На основе приведенной выше

системы были рассчитаны параметры зависимости $Y = a_1 + a_2x + a_3x^2 + \dots + a_{k+1}x^k$.

t25e1 [1] := 1	y25e1 [1] := 45.6
t25e1 [2] := 2	y25e1 [2] := 61.6
t25e1 [3] := 4	y25e1 [3] := 71.5
t25e1 [4] := 6	y25e1 [4] := 72.4

Здесь; t25e1 – время, y25e1 – производительность.

Математические расчеты проведены на основании результатов таблицы 1, с учетом того, что продолжительность реакции образования МЭЭ-1 в присутствии крезолов и гексаметилендиизоцианата 1–6 часов с высоким выходом.

Таблица 1.

Влияние природы растворителей и продолжительности реакции на выход МЭЭ-1

№	Температура °С	Выход продукта, %	
		Растворитель ДМФА	Растворитель ДМСО
Продолжительность реакции, 1 час			
1.	25	45,6	41,8
2.	35	58,5	52,4
3.	40	61,3	58,7
4.	45	53,7	49,9
Продолжительность реакции, 2 часа			
1.	25	61,6	57,7
2.	35	73,2	69,9
3.	40	80,1	75,8
4.	45	72,3	66,4
Продолжительность реакции, 4 часа			
1.	25	71,5	66,8
2.	35	90,1	84,7
3.	40	97,6	89,9
4.	45	83,4	75,2
Продолжительность реакции, 6 часов			
1.	25	72,4	67,5
2.	35	91,7	86,3
3.	40	98,3	90,1
4.	45	84,6	79,2

При синтезе МЭЭ-1 результаты зависимости продолжительности реакции и выхода продукта обрабатывали следующим образом: t_i – 2, 4, 6, 7; u_i – 45.6, 61.6, 71.5, 72.4.

Здесь: t_i – продолжительность реакции, u_i – выход МЭЭ-1.

После введенных значений генерируются следующие уравнения:

$$S(a_1, a_2, \dots, a_k) = \sum_{i=1}^4 [u_i - U_i]^2 = \sum_{i=1}^4 [u_i - f(t_i, a_1, a_2, a_3, a_4)]^2 \rightarrow \min$$

$$f(t_i, a_1, a_2, a_3, a_4) = a_1 + a_2t_i + a_3t_i^2 + a_4t_i^3$$

Выполним расчет приведенной выше системы линейных уравнений (A, B, C) матричным методом.

$A25e1 := \text{Matrix}([\text{sum}(t25e1[i]^6, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^5, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^4, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^3, i=1..4)], [\text{sum}(t25e1[i]^5, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^4, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^3, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^2, i=1..4)], [\text{sum}(t25e1[i]^4, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^3, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^2, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i], i=1..4)], [\text{sum}(t25e1[i]^3, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i]^2, i=1..4), \text{sum}(t25e1[i], i=1..4), 4]])$

$$A_{25e1} := \begin{bmatrix} 50817 & 8833 & 1569 & 289 \\ 8833 & 1569 & 289 & 57 \\ 1569 & 289 & 57 & 13 \\ 289 & 57 & 13 & 4 \end{bmatrix}$$

Находится $A * C = B$:

$B_{25e1} := \text{Matrix}([\text{sum}(y_{25e1}[i]) \cdot (t_{25e1}[i]^3), i=1..4], [\text{sum}(y_{25e1}[i]) \cdot (t_{25e1}[i]^2), i=1..4], [\text{sum}(y_{25e1}[i] \cdot t_{25e1}[i]), i=1..4], [\text{sum}(y_{25e1}[i], i=1..4)])$

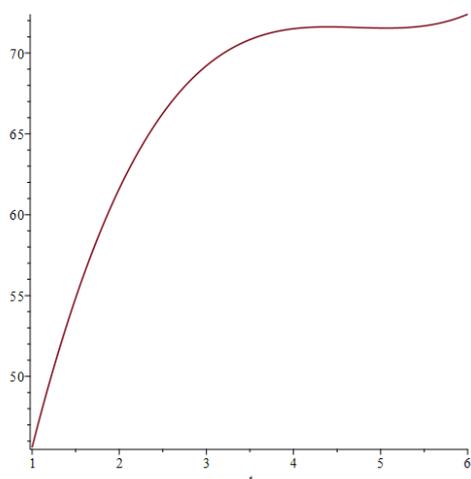
$$B_{25e1} := \begin{bmatrix} 20752.8 \\ 4042.4 \\ 889.2 \\ 251.1 \end{bmatrix}$$

$C := \text{Matrix}([a], [b], [c], [d])$

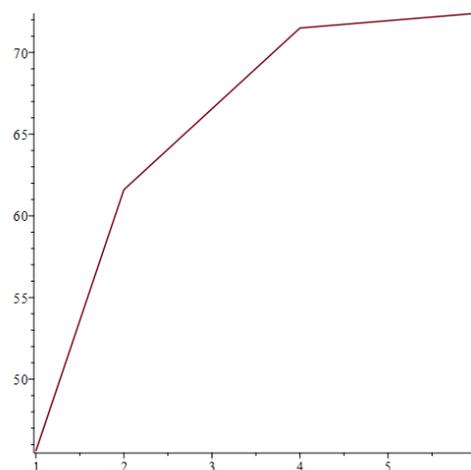
$C_{25e1} := A_{25e1}^{-1} \cdot B_{25e1}$ позволяет найти значение матрицы C по формуле:

$$C_{25e1} := \begin{bmatrix} 0.5116666666666867 \\ -7.265000000000121 \\ 34.213333333333339 \\ 18.139999999999978 \end{bmatrix}$$

$\text{plot}(C_{25e1}[1][1] \cdot t^3 + C_{25e1}[2][1] \cdot t^2 + C_{25e1}[3][1] \cdot t + C_{25e1}[4][1], t = 1..6)$
 $\text{plot}([t_{25e1}[1], y_{25e1}[1]], [t_{25e1}[2], y_{25e1}[2]], [t_{25e1}[3], y_{25e1}[3]], [t_{25e1}[4], y_{25e1}[4]])$



(а) график математического моделирования



(б) график результатов эксперимента

Рисунок 1. Графики выхода

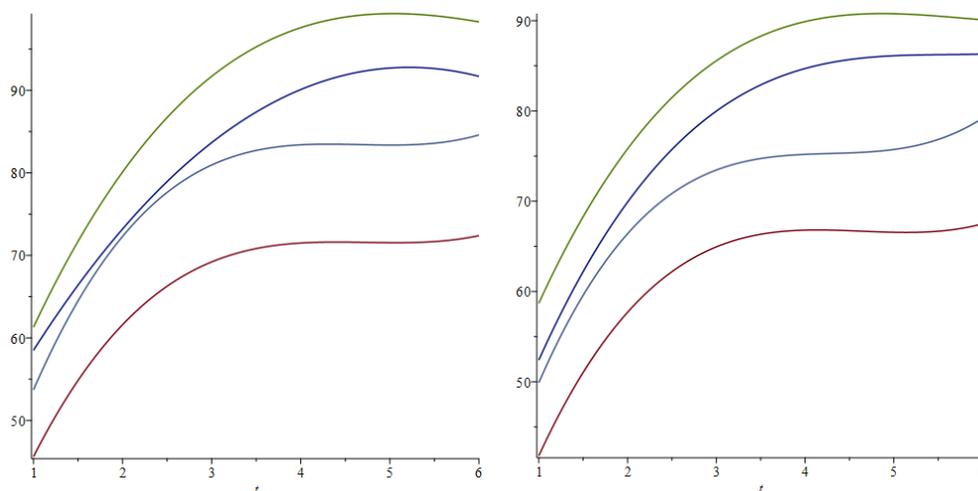
Вышеуказанные этапы были рассчитаны на 1–6 часов, температура 25–45 °С, растворители ДМФА и ДМСО для влияния на выход продукта. Остальные значения не вошли в модельную часть

этих расчетов из-за их большого размера. Математические уравнения для растворителей ДМФА и ДМСО были рассчитаны путем анализа изменения выхода реакции с течением времени.

$$\text{plot}([t^3 \cdot C25e1[1][1] + t^2 \cdot C25e1[2][1] + t \cdot C25e1[3][1] + C25e1[4][1], t^3 \cdot C35e1[1][1] + t^2 \cdot C35e1[2][1] + t \cdot C35e1[3][1] + C35e1[4][1], t^3 \cdot C40e1[1][1] + t^2 \cdot C40e1[2][1] + t \cdot C40e1[3][1] + C40e1[4][1], t^3 \cdot C45e1[1][1] + t^2 \cdot C45e1[2][1] + t \cdot C45e1[3][1] + C45e1[4][1]], t = 1 \dots 6)$$

$$\text{plot}([t^3 \cdot C25e2[1][1] + t^2 \cdot C25e2[2][1] + t \cdot C25e2[3][1] + C25e2[4][1], t^3 \cdot C35e2[1][1] + t^2 \cdot C35e2[2][1] + t \cdot C35e2[3][1] + C35e2[4][1], t^3 \cdot C40e2[1][1] + t^2 \cdot C40e2[2][1] + t \cdot C40e2[3][1] + C40e2[4][1], t^3 \cdot C45e2[1][1] + t^2 \cdot C45e2[2][1] + t \cdot C45e2[3][1] + C45e2[4][1]], t = 1 \dots 6)$$

Выше мы привели уравнение для наиболее оптимальной ситуации по условиям реакции.



(а) График для ДМФА

(б) График для ДМСО

Рисунок 2. Обобщенные графики для всех температур

В результате вышеописанных действий были определены скорости реакций для растворителей ДМФА и ДМСО (см. табл. 2).

Таблица 2.

Влияние температуры, продолжительности и скорости реакции на выход МЭЭ-1

№	Температура °С	Выход продукта, %		Скорость реакции, %/час	
		Растворитель ДМФА	Растворитель ДМСО	Растворитель ДМФА	Растворитель ДМСО
Продолжительность реакции, 1 час					
1.	25	45,6	41,8	21.218	21.323
2.	35	58,5	52,4	16.885	21.896
3.	40	61,3	58,7	22.900	21.417
4.	45	53,7	49,9	24.817	22.593
Продолжительность реакции, 2 часа					
1.	25	61,6	57,7	11.293	11.023
2.	35	73,2	69,9	12.548	13.446
3.	40	80,1	75,8	14.950	13.105
4.	45	72,3	66,4	13.005	11.093
Продолжительность реакции, 4 часа					
1.	25	71,5	66,8	0.653	0.263
2.	35	90,1	84,7	4.488	2.726
3.	40	97,6	89,9	3.550	2.285
4.	45	83,4	75,2	0.585	0.453
Продолжительность реакции, 6 часов					
1.	25	72,4	67,5	2.293	2.623
2.	35	91,7	86,3	-2.751	0.246
3.	40	98,3	90,1	-1.849	-0.794
4.	45	84,6	79,2	3.105	6.293

С помощью компонента Curve fitting tool программы MATLAB R2021A исследована зависимость выхода реакции от времени и температуры. На основании полученных результатов дано математическое выражение зависимости для растворителей ДМФА и ДМСО раздельно.

Для определения зависимости выхода МЭЭ-1 от времени и температуры при проведении реакции в растворителе ДМФА были последовательно проведены следующие математические операции (см. табл. 3).

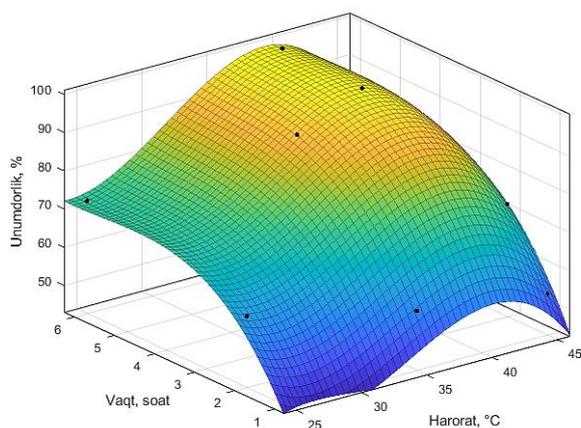
Таблица 3.

Математические операции зависимости выхода МЭЭ-1 от времени и температуры при проведении реакции в ДМФА

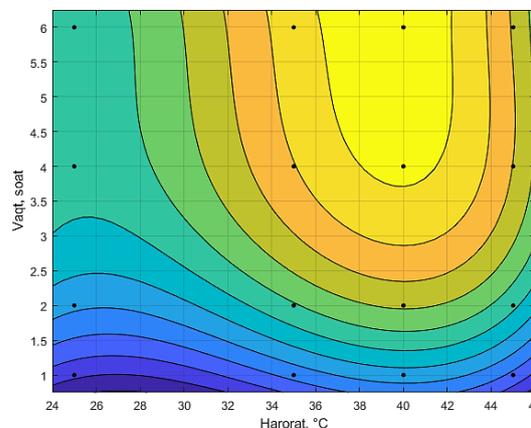
Линейная модель Poly 33:	Коэффициенты (с доверительной границей 95 %):	Степень соответствия:
$f(x,y) = p00 + p10 \cdot x + p01 \cdot y + p20 \cdot x^2 + p11 \cdot x \cdot y + p02 \cdot y^2 + p30 \cdot x^3 + p21 \cdot x^2 \cdot y + p12 \cdot x \cdot y^2 + p03 \cdot y^3$	<p>p00= 569.4 (264, 874.9) p10= -51.68 (-78.73, -24.63) p01= 7.709 (-15.21, 30.63) p20= 1.58 (0.8021, 2.359) p11= 1.239 (0.3033, 2.174) p02= -5.119 (-9.305, -0.9319) p30= -0.01556 (-0.02287, -0.008256) p21= -0.01496 (-0.02723, -0.002679) p12= -0.02058 (-0.07497, 0.03382) p03 = 0.3559 (0.00846, 0.7033)</p>	<p>SSE: 17.5 R – квадрат: 0.9953 Скорректированный R – квадрат: 0.9883 RMSE: 1.708</p>

Математическое представление уравнения времени реакции и температурной зависимости выхода продукта реакции при проведении реакции в растворителе ДМФА:

$$f(T,t) = 569.4 - 51.68 \cdot T + 7.709 \cdot t + 1.58 \cdot T^2 + 1.239 \cdot T \cdot t - 5.119 \cdot t^2 - 0.01556 \cdot T^3 - 0.01496 \cdot T^2 \cdot t - 0.02058 \cdot T \cdot t^2 + 0.3559 \cdot t^3$$



(а) 3D-график для ДМФА

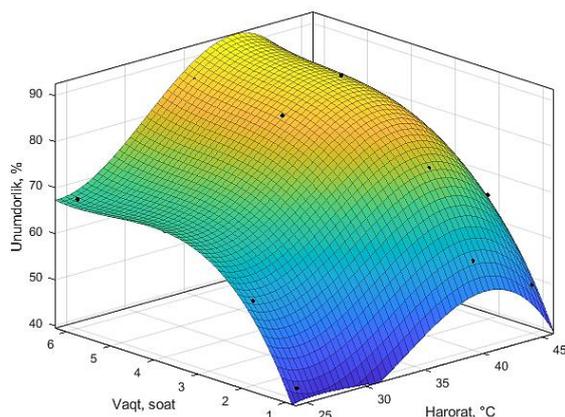


(б) Контурный график для ДМФА

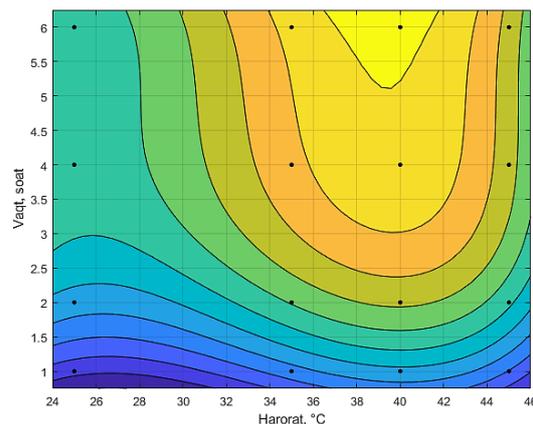
Рисунок 3. Иконограммы времени реакции и температурной зависимости выхода продукта образования в ДМФА

Для определения зависимости от времени и температуры выхода МЭЭ-1 при проведении реакции в растворителе ДМСО были проведены выше

представленные математические операции в таблице 3. В результате получены следующие значения (см. рис. 4).



(а) 3D-график для ДМСО



(б) Контурный график для ДМСО

Рисунок 4. Иконограммы времени реакции и температурной зависимости выхода продукта образования в ДМСО

Заключение. Выявлено, что результаты, полученные при объединении двух математических программ поиска и изучения оптимальных условий синтеза МЭЭ-1, полностью соответствуют результатам изучения процесса синтеза в лаборатории.

Установлено, что МЭЭ-1 и его производные получают с наибольшим выходом при проведении в растворителе ДМФА при температуре 35–40 °С и в течение 4–6 часов.

Список литературы:

1. Абдуллаев Д.У. [и др.]. Математическое моделирование процесса синтеза изо-бутанола // *Universum: химия и биология : электрон. научн. журн.* – 2021. –2(80). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/11203> (дата обращения: 10.12.2023).
2. Блинов А.О. Приложение метода наименьших квадратов к задачам моделирования и оптимизации // *Вестник российских университетов. Математика.* – 2007. – №4. – С. 412–414.
3. Клопман Г. Реакционная способность и пути реакций. – М.: Мир, 1977. – 341 с.
4. Махсумов А.Г., Абдукаримова С.А., Машаев Э.Э., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производного - N,N'-гексаметилен бис- [(орто-крезолило)-карбамата] и его применение // *Universum: химия и биология.* 2020. № 10 (76). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/10783> (дата обращения: 10.12.2023).
5. Махсумов А.Г., Жагфаров Ф.Г., Арипджанов О.Ю., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производных мета-крезолило-карбаматов, их биологическая активность // *НефтеГазХимия.* – 2022. – №3.
6. Махсумов А.Г., Машаев Э.Э., Холбоев Ю.Х., Уразов Ф.Б., Зохиждонов С.А. N,N'-гексаметилен бис [(м-крезолило)-карбамат] и его физико-химические свойства // *Life Sciences and Agriculture.* – 2022. – № 1 (9).
7. Нейланд О.Я. Органическая химия : учебник. – М.: Высшая школа, 1990. – 751 с.
8. Karimov K., Turahodjaev N., Akhmedov A., Tashbulatov Sh. A mathematical model of the technology of extraction of copper from industrial slag // *E3S Web of Conferences.* 2021. – Vol. 264. – 04077. doi: 10.1051/e3sconf/202126404077.
9. Mashayev E., Ismailov B., Ergashev J., Omonov Sh., Makhsumov A. Research of N,N'-hexamethylene bis-[(o-cresolyl)-carbamate] in international chemicals databases // *International bulletin of applied science and technology* – 2023. – Vol. 11 (3) – P. 397–401). <https://doi.org/10.5281/zenodo.10209951>
10. Shu Y, McCauley J. GISAID: Global initiative on sharing all influenza data—from vision to reality // *Eurosurveillance.* – 2017. – Vol. 22. P. 30494. doi: 10.2807/1560-7917.ES.2017.22.13.30494.
11. Sutoris V., Sunak J., Cipinova H. Получение этилиловых эфиров и карбаматов и изучение их пестицидного действия // *Chemistry vesti.* – 1969. – № 11 (23). – С. 47–48.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЁТЫ МОЛЕКУЛЫ МЭЭ-1**Махсумов Абдухамид Гафурович**

д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: maxsumovag@bk.ru

Мухиддинов Баходир Фахриддинович

д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология”,
Навоийский государственный горно-технологический университет,
Республика Узбекистан, г. Навои

Машаев Элдор Эргашвой угли

докторант, ст. преп.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: eldor.mashayev@mail.ru

Исмаилов Бобурбек Махмуджанович

д-р филос. в обл. техн. наук, PhD,
кафедра “Химическая технология переработки газа”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: boburbek.89@mail.ru

Абсалямова Гулноза Маматкуловна

доцент
кафедры «Химическая технология переработки газа»
Ташкентского химико-технологического института,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

QUANTUM-CHEMICAL CALCULATIONS OF THE MEE-1 MOLECULE**Abduhamid Makhsumov**

Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology of Oil refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Bakhodir Mukhiddinov

Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology,
Navoi State Mining and Technology University,
Republic of Uzbekistan, Navoi

Eldor Mashaev

PhD student, senior lecturer,
Department of Chemical Technology of Oil Refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Boburbek Ismailov

*Doctor of Philosophy in Technical Sciences, PhD,
 department of Chemical technology of oil and gas refining,
 Tashkent Institute of Chemical Technology,
 Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Gulnoza Absalyamova

*Doctor of Philosophy in Chemical Sciences, PhD,
 department of Chemical technology of gas refining,
 Tashkent Institute of Chemical Technology,
 Republic of Uzbekistan, Tashkent*

АННОТАЦИЯ

В данной работе проведен квантово-химический анализ зарядов атомов реагирующих веществ в рамках схемы NBO в программе Gaussian 09. По результатам квантово-химического расчета указанных молекул было выявлено, что связь $-N=C$ в реакции ослабляется сильнее, чем связь $-C=O$. Эти и другие факты свидетельствуют о том, что связь $-N=C$ более поляризуема, чем $-C=O$, а связь $-N=C$ легче разрывается при атаке группы диизоцианата нуклеофильными реагентами. А также, было обнаружено, что атом азота, а аминной группе является реакционным центром, который позволяет протекать процессу (S_N).

ABSTRACT

In this work, a quantum chemical analysis of the charges of the atoms of the reacting substances was carried out within the framework of the NBO scheme in the Gaussian 09 program. Based on the results of the quantum chemical calculation of these molecules, it was revealed that the $-N=C$ bond in the reaction is weakened more strongly than the $-C=O$ bond. These and other facts indicate that the $-N=C$ bond is more polarizable than $-C=O$, and the $-N=C$ bond is more easily broken when the diisocyanate group is attacked by nucleophilic reagents. And also, it was discovered that the nitrogen atom and the amine group is the reaction center that allows the process (S_N) to occur.

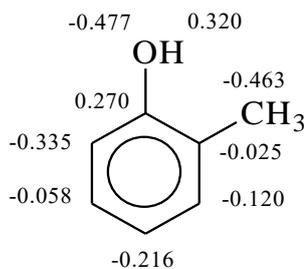
Ключевые слова: орто-крезол, гексаметилендиизоцианат, карбамат, МЭЭ-1, Гауссиан, квантовая химия, МЭП, ГО, ВЗМО, Малликен.

Keywords: ortho-cresol, hexamethylene diisocyanate, carbamate, MEE-1, Gaussian, quantum chemistry, MEP, GO, HOMO, Mulliken.

Введение. На сегодняшний день уже произведен поиск многих производных карбаматных препаратов. Открытие новых высокоэффективных и малотоксичных биологически активных соединений на их основе постоянно продолжается, о чем свидетельствует большое количество публикаций в мировой научной и патентной литературе [4; 9; 11]. Карбаматы используются в качестве консервантов и инсектицидов, селективных гербицидов, регуляторов роста растений, смазочных добавок, полупродуктов при синтезе олигомеров, различных полиуретановых покрытий и подобных им [1; 3; 5; 7]. Как видно из вышесказанного, тот факт, что карбаматы используются для разных целей в разных областях, свидетельствует о том, что они биологически активны и мало изучены. Поэтому развитие данной области органической химии считается наиболее актуальной задачей и требует новых разработок синтеза, технологий и научно обоснованных подходов. С целью подробного изучения молекулы синтезированного авторами МЭЭ-1 или N,N'-гексаметилен-бис-[(о-крезолило)-карбамата] были проведены квантово-химические расчеты [3].

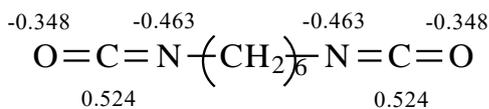
Материалы и методы исследования. Для проведения квантово-химических расчетов сначала был осуществлен квантово-химический анализ зарядов атомов реагирующих веществ в рамках схемы NBO в программе Gaussian 09. Ранее квантово-химические расчеты молекул в основном проводились методами гибридного функционала B3LYP и теории функционала плотности (DFT). Авторами данной статьи был выбран гибридный функциональный расчет M06-2X потому, что по сравнению с B3LYP точность термодинамического расчета наблюдалась выше. Расчет энергии, содержащейся в молекуле, определялся по программе Гаусса в энергиях Хартри (а.е.), полученные результаты можно перевести в кДж/моль, умножив полученное значение на 2625,5. Первоначально на основе PM6 была оптимизирована молекулярная структура исследуемого вещества и визуализирована частота колебаний молекулы [2; 8; 9; 10].

Результаты исследования и их обсуждение. Первым делом был проведен квантово-химический анализ зарядов атомов реагирующих веществ в рамках схемы NBO в программе Gaussian 09, что позволяет выдвинуть гипотезу о направлении нуклеофильной атаки атома кислорода в орто-крезоле на атом углерода в диизоцианате (рисунок 1).



o-крезол

E= 0.046135



Гексаметилендиизоцианат

E= 0.096500

Рисунок 1. Распределение атомных зарядов в o-крезоле и ГМДИ по схеме NBO, значения энергии в (E, а.е.)

Как видно из схемы NBO, структура продуктов зависит от стабильности катионных интермедиатов. По результатам квантово-химического расчета указанных молекул было замечено, что связь $-N=C$ в реакции ослабляется сильнее, чем связь $-C=O$. При сближении реагирующих частиц наблюдалось больше переносов электронов в $-N=C$, чем в $-C=O$.

Отрицательный заряд на атоме азота резко возрастает по сравнению с атомом кислорода в группе $-C=O$. Эти факты свидетельствуют о том, что связь $-N=C$ более поляризуема, чем $-C=O$, а связь $-N=C$ легче разрывается при атаке группы $-N=C+O$ нуклеофильными реагентами.

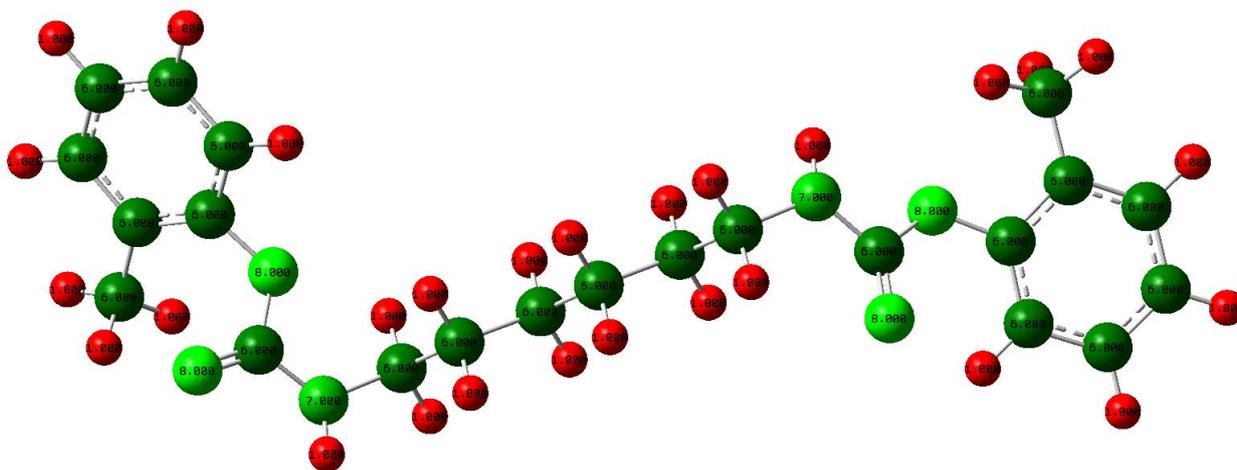


Рисунок 2. Трехмерный вид и свойства атомов молекулы МЭЭ-1

По рисунку 2, можно видеть внешний вид молекулы МЭЭ-1, также приведены заряды атомов. Здесь показано, что заряд атома Н равен 1, заряд атома С

– 6, заряд атома N – 7, заряд атома О – 8. Всего 56 атомов и состоят они из 206 электронов.

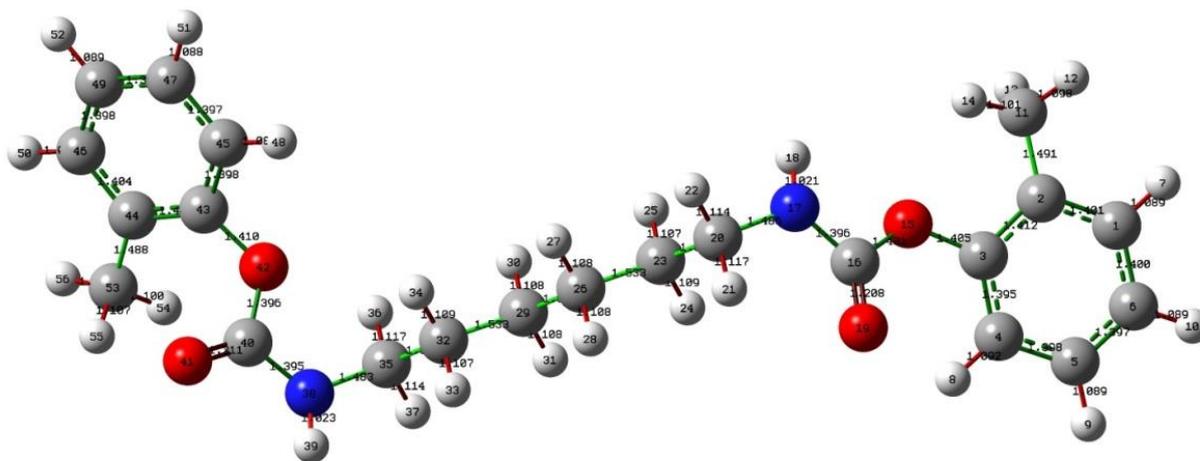


Рисунок 3. Длины связей молекулы МЭЭ-1

На рисунке 3 рассчитаны длины связей молекулы МЭЭ-1, где длина двойной связи C1=C6 в ароматическом кольце равна 1,40 Å, длина связи C1-H7 равна 1,08 Å, длина связи C2-C11, связанной с метильным радикалом кольца, составляет 1,49 Å, длина связи C3-O15 1,40 Å. Длина связи O15-C16 эфирной группы 1,40 Å. Длина двойной связи карбонильной группы C16=O19 равна 1,20 Å, длина связи атома углерода C16-N17 карбонильной группы – 1,39 Å.

Длина связи N17-H18 аминогруппы – 1,02 Å, длина связи атома азота N17-C20 аминогруппы – 1,48 Å. Длина связи C20-C23 в гексаметилене равна 1,53 Å, а длина связи C20-H21 в гексаметилене равна 1,11 Å. Поскольку реакционным центром в молекуле МЭЭ-1 является аминогруппа, следует отметить, что длина связи N17-H18 составляет 1,02 Å, а энергия разрыва 93 ккал/моль.

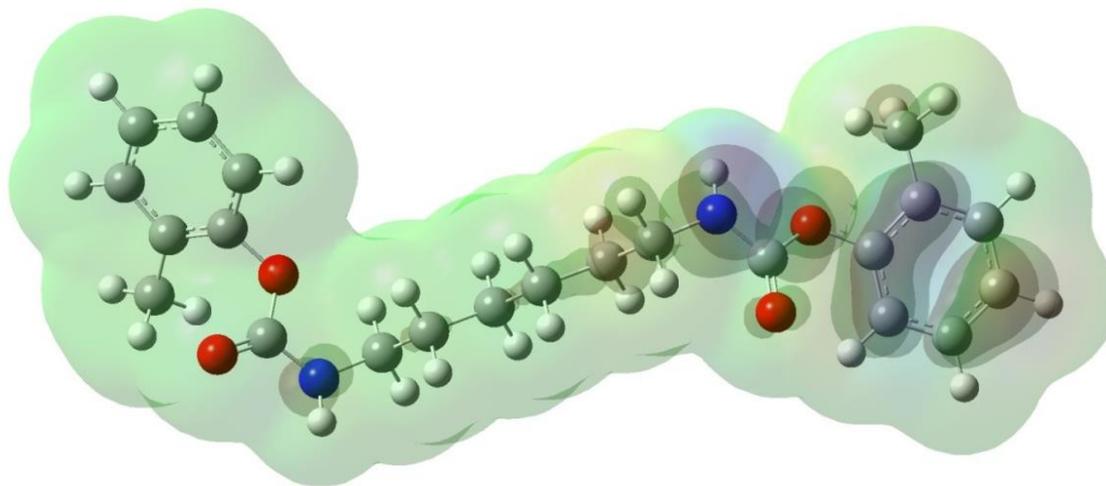


Рисунок 4. Электронно-потенциальный вид поверхности молекулы МЭЭ-1

В ходе квантово-химических исследований также анализировались карты электростатического потенциала, которые показывают трехмерное распределение зарядов молекул (см. рисунок 4). Эти карты позволяют нам визуализировать чередующиеся заряженные области молекулы. Поверхность молекулярного электростатического потенциала (МЭП) показывает электростатический потенциал положительно и отрицательно заряженных молекул. Красный цвет с отрицательным значением указывает на минимальный электростатический потенциал (он слабо

связан или имеет избыток электронов) и действует как электрофильный агент. Зеленый цвет указывает на максимальный уровень электростатического потенциала, который имеет противоположный эффект. Чтобы просмотреть все поверхности МЭП, каждую поверхность можно нарисовать в виде контура вокруг молекулы. На рисунке 4 показано, что каждый контур вокруг молекулы представляет собой поверхность МЭП; внешний контур имеет более низкое значение изоповерхности, а внутренний контур имеет более высокое значение изоповерхности.

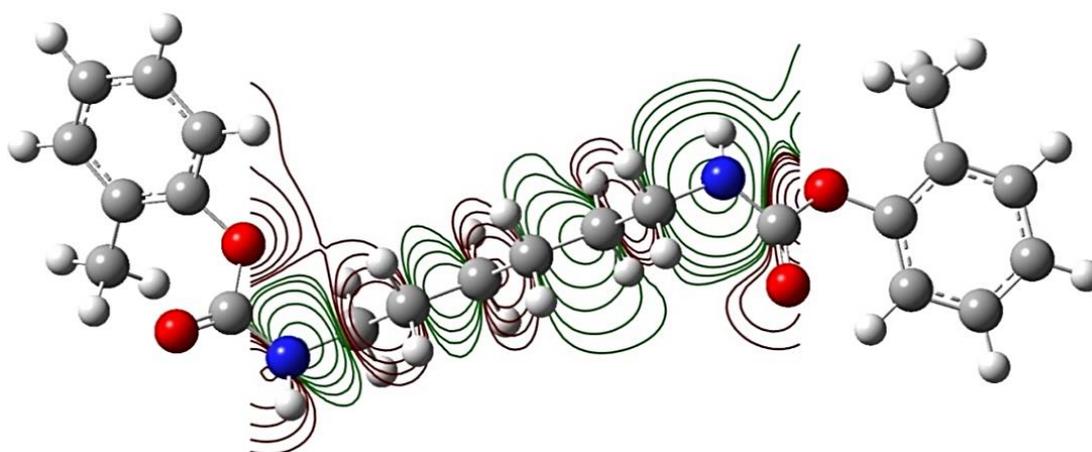


Рисунок 5. Контур электростатического потенциала молекулы МЭЭ-1

Таблица 1.

Результаты квантово-химических расчетов МЭЭ-1

№	Свойства	Значение	Единица	Значение	Единица
1.	Температура	298,150	Кельвин (К)	25	Г.Ц-я °С
2.	Давление	1,00000	атм	-	-
3.	Частота, по масштабированию	1,0000	эВ	-	-
4.	Электронная энергия (ЭЭ)	-0,243180	Хартри	-638,469	кЖ/моль
5.	Энергия регулировки нулевой точки	0,433277	Хартри	1137,568	кЖ/моль
6.	Термическая коррекция энергии	0,463432	Хартри	1216,740	кЖ/моль
7.	Термическая поправка к энтальпии	0,464376	Хартри	1219,219	кЖ/моль
8.	Термическая коррекция свободной энергии	0,361811	Хартри	949,9347	кЖ/моль
9.	ЭЭ + энергия нулевой точки	0,190097	Хартри	499,0996	кЖ/моль
10.	ЭЭ + Коррекция тепловой энергии	0,220252	Хартри	578,2716	кЖ/моль
11.	ЕЕ + Коррекция тепловой энтальпии	0,221196	Хартри	580,7500	кЖ/моль
12.	ЕЕ + Коррекция свободной тепловой энергии	0,118631	Хартри	311,4656	кЖ/моль
13.	Е (Термальный)	290,808	Ккал/моль-кельвин	-	-
14.	Теплоемкость (Cv)	109,227	Ккал/моль-кельвин	-	-
15.	Энтропия (S)	215,866	Ккал/моль-кельвин	-	-
16.	Поляризация (α)	211,11233	а.у.	-	-
17.	Спин	singlet	-	-	-
18.	Прогнозируемое изменение энергии	-3,92e-09	Хартри	-10291,9	кЖ/моль
19.	Дипольный момент (D)	3,174443	Дебай	-	-

Заключение. В результате научного исследования проведены квантово-химические расчеты использованных исходных реагентов и образованного соединения МЭЭ-1. Изучены: структура молекулы, распределение зарядов и электронная плотность в атомах молекулы, общая энергия молекулы, энергия

образования, теплота образования, энергия электрона, дипольный момент и являющийся важным заряд атома азота, где происходит электрофильное присоединение других атомов для получения производных бис-карбамата.

Список литературы:

1. Клопман Г. Реакционная способность и пути реакций. – М.: Мир. 1977. –341 с.
2. Мамарахмонов М.Х., Беленький Л.И., Джураев А.М., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р. Квантово-химическое изучение производных ферроцена. Реакции арилирования с аминокислотными кислотами // Известия Академии Наук. Серия: химическая. – Москва, 2017. – №4. – С. 721–723.
3. Махсумов А.Г., Абдукаримова С.А., Машаев Э.Э., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производного - N,N'-гексаметилен бис- [(орто-крезолило) -карбамата] и его применение // Universum: химия и биология. – 2020. – № 10 (76).
4. Махсумов А.Г., Абсалямова Г.М., Исмаилов Б.М., Машаев Э.Э. Синтез и свойства производного N,N'-гексаметилен бис-[(орто-аминоацетилфенокси)]-карбамата и его применение // Universum: Химия и биология. – Москва, 2019. – № 3(57). – С.65–72
5. Махсумов А.Г., Жагфаров Ф.Г., Арипджанов О.Ю., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производных мета-крезолило-карбаматов, их биологическая активность // НефтеГазХимия. – 2022. – №3.
6. Махсумов А.Г., Машаев Э.Э., Холбоев Ю.Х., Уразов Ф.Б., Зохиджонов С.А. N,N'-гексаметилен бис [(м-крезолило)-карбамат] и его физико-химические свойства // Life Sciences and Agriculture. – 2022. – №1 (9).
7. Нейланд О.Я. Органическая химия. – М.: Высшая школа, 1990. – 751 с.
8. Abu Abdou, Omran A. Omran, Ayman Nafady, Igor S. Antipin. Structural, spectroscopic, FMOs, and non-linear optical properties exploration of three thiacaix(4)arenes derivatives. // Arabian journal of chemistry. – Vol. 15. – Issue 3. –March 2022. – P.103-656.
9. Frisch M.J.F. Gaussian 98. Revision A.5, Gaussian Inc.- Pittsburg (PA), 1998.
10. Mashayev E., Ismailov B., Ergashev J., Omonov Sh., Makhsuov A. Research of N,N'-hexamethylene bis-[(o-cresolyl)-carbamate] in international chemicals databases // International bulletin of applied science and technology. – 2023. – Т.3. – Вып. 11. – С. 397–401. <https://doi.org/10.5281/zenodo.10209951>
11. Patent 105160/04 of Russia. Derivatives of carbamate and fungicide of agriculture. Ozakt macati, fukhmoto sumitiro. VGR7C 07C 27/20; F01 №47/12; declared on August 3, 2000. Published on November 20, 2003.

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16607

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ
И ГЕОМЕТРИИ МОЛЕКУЛЫ ТИЕНОПИРИМИДИНОНА****Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович**

PhD, доцент
кафедра химии,
Андижанский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: muhamatdin@mail.ru

Кодиров Абдурахад Абдурайимович

канд. хим. наук, доц., зав. кафедрой химии,
Каршинский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Карши
E-mail: kodirov.abdduaxad@mail.ru

Хамраева Камола

соискатель,
Каршинский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Карши

Избасарова Гулноза

магистр
Каршинский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Карши

Элмуратов Бурхон Жураевич

д-р хим. наук, проф.,
Институт химии растительных веществ АН РУз,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: b_elmuradov@mail.ru

**QUANTUM CHEMICAL STUDY OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND GEOMETRY
OF THE THIENOPYRIMIDINONE MOLECULE****Mukhamatdin Mamarakhmonov**

PhD, Associate professor
Department of Chemistry, Andijan State University
Republic of Uzbekistan, Andijan

Abduakhad Kodirov

Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor,
Head of the Department of Chemistry,
Karshi State University,
Republic of Uzbekistan, Karshi

Katola Khamrayeva

Researcher
Karshi State University,
Republic of Uzbekistan, Karshi

Gulnoza Izbasarova

Researcher
Karshi State University
Republic of Uzbekistan, Karshi

Burkxon Elmuradov

*Doctor of Chemical Sciences, Professor,
The Institute of Chemistry of Plant Substances,
AS Republic of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

АННОТАЦИЯ

В данной статье проведены квантово-химические расчеты, методом DFT с базисным набором 3-21G для изучения структуры тиенопиримидинона. Авторами исследования рассчитаны геометрические данные: длина связей, валентные и торсионные углы, распределение электронных зарядов на атомах. На основе обработки полученных теоретических данных обобщены итоги квантово-химического вычисления структуры тиенопиримидинона. Полученные результаты соответствуют литературным данным. Распределение электронных зарядов на атомах молекулы дает возможность сделать вывод об оценке реакционной способности последнего согласно зарядового контроля реакции более мягких условиях.

ABSTRACT

In this article, quantum chemical calculations were carried out using the DFT method with the 3-21G basis set to study the structure of thienopyrimidinone. We calculated geometric data: bond length, bond and torsion angles, distribution of electronic charges on atoms. Based on the processing of the obtained theoretical data, the results of quantum chemical calculation of the structure of thienopyrimidinone are summarized. The results obtained correspond to the literature data. The distribution of electronic charges on the atoms of a molecule makes it possible to draw a conclusion about the assessment of the reactivity of the latter according to the charge control of the reaction under milder conditions.

Ключевые слова: тиенопиримидин, биологическая активность, квантово-химический расчет, метод DFT/B3LYP, геометрия, длина связей, валентные углы, торсионные углы, ароматичность, электронная структура, реакционная способность, зарядовый контроль, мягкие условия, принцип жестких и мягких кислот и оснований (ЖМКО).

Keywords: thienopyrimidinone, biological activity, quantum chemical calculation, DFT/B3LYP method, geometry, bond length, bond angles, torsion angles, aromaticity, electronic structure, reactivity, charge control, mild conditions, principle of hard and soft acids and bases (HSAB).

Введение. Производные тиенопиримидинов являются важными классами биологически активных производных пиримидина [9]. Из этих соединений получили ряд биологически активных препаратов, используемых в медицине и сельском хозяйстве [4; 8]. В статье нами приведены данные квантово-химического исследования 2,3-дигидро 9,10 диметилтиенопиримидин-4-она. В структуре молекулы рассматриваемого вещества содержатся экзоциклические заместители метильных групп в положениях 10 и 11 у тиофенового кольца и карбонильная группа у пиримидинового цикла, которые влияют на перераспределение электронных зарядов, тем самым

определяя ее реакционную способность и биологическую активность.

Для точного определения геометрии и электронного строения молекулы нами проведен квантово-химический расчет по программе Gaussian [11], по методу DFT-B3LYP с базисным набором 3-21G, с использованием полной оптимизации всех геометрических данных.

Процесс расчета осуществлен для газовой фазы; при этом нумерация на атомах – условная. Для удобства обсуждения геометрии и электронного распределения, данные расчетов приведены как в схематическом, так и в табличном виде, ниже.

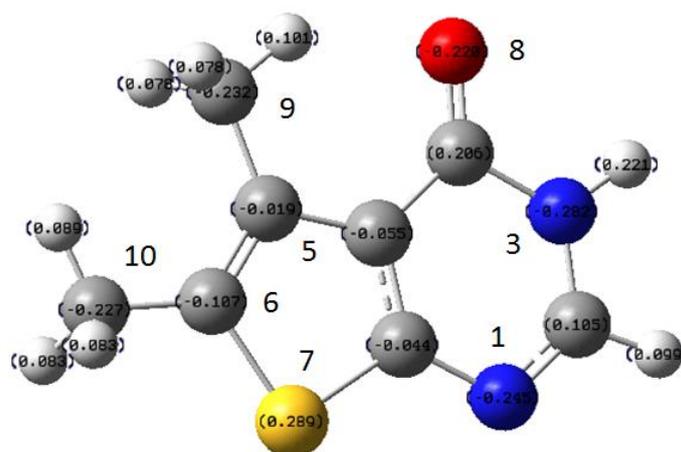


Рисунок 1. Схема электронного распределения и нумерация на атомах молекулы

Методика исследования. На рисунке показано распределение электронных зарядов на атомах тиенопиримидинона, согласно результатам квантово-химических расчетов, методом B3LYP, базисным набором 3-21G, так как успешное использование этого подхода изложено в научной литературе ранее [1]. Выбранная нумерация на атомах дает возможность удобства обсуждения полученных данных.

Результаты и обсуждения. Результаты таблицы показывают, согласно величинам торсионных углов тиенопиримидинового кольца, так и заместителей, что все атомы лежат в одной плоскости (правило Хюккеля), и это является одним из требований

ароматичности. Нами теоретически рассчитанные валентные углы пиримидинового и тиофенового колец лежат в пределах литературных данных и соответствуют правильной гибридизации вышеприведенных атомов [7; 10; 12].

Максимальные отрицательные электронные заряды равны $q = -0,245e$, $-0,282e$ у атомов азота пиримидинового кольца N1, N3, соответственно. При этом у атома серы S7, тиофенового кольца накоплен максимальный положительный заряд равный $q = +0,289e$. Экзоциклические атомы карбонильной группы O8, и атомы углерода метильных групп у тиофенового кольца C9, C10 несут отрицательные электронные заряды, равные $q = -0,220e$, и $q = -0,232e$, $-0,227e$ соответственно.

Таблица 1.

Геометрия и распределения электронных зарядов на атомах молекулы

Тип атома	Электронный заряд, q (e)	Связь	Длина связи, Å
N1	-0,245	N1-C2	1.344
C2	0,105	C2-N3	1.409
N3	-0,282	N3-C4	1.485
C4	0,206	C4-C4'	1.491
C5	-0,019	C4'-C5	1.457
C6	-0,107	C5-C6	1.381
S7	0,289	C6-S7	1.773
H2	0,099	S7-C1'	1.762
H3	0,221	C2-H2	1.106
O8	-0,220	N3-H3	1.047
C9	-0,232	C4-O8	1.257
C10	-0,227	C5-C9	1.534
H9	0,078	C6-C10	1.528
H10	0,09	C9-H9	1.102
		C10-H10	1.100
Валентный угол,	Градус, °	Торсионный угол	Градус, °
N1-C2-N3	126.451	N1-C2-N3-C4	0.003
C2-N3-C4	124.605	C2-N3-C4-C4'	-0.005
C4-C4'-C1'	109.051	C4-C4'-C5-C6	-179.994
C4'-C1'-C1	120.948	C4'-C5-C6-S7	-0.003
C4-C4'-C5	127.884	C5-C6-S7-C1'	0.003
C4'-C5-C6	111.723	C4-N3-C2-H2	-179.997
C5-C6-S7	112.898	N1-C2-N3-H3	179.998
C6-S7-C1'	90.787	C2-N3-C4-O8	179.994
N3-C2-H2	114.852	C4-C4'-C5-C9	0.007
C2-N3-H3	118.247	C4'-C5-C6-C10	-179.984
N3-C4-O8	120.948	C4'-C5-C9-H9	-0.026
C4'-C5-C9	121.600	C5-C6-C10-H10	-0.322
C5-C6-C10	127.439		
C5-C9-H9	107.972		
C6-C10-H10	109.849		

Атомы водорода метильных групп у атома C9 более поляризованы, чем у метильной группы C10, причиной чего является относительно близкое расположение к первым, электроотрицательного атома кислорода O8 карбонильной группы у пиримидинового кольца.

Ранее в работе [6], нами на основе расчетных данных, была изложена мысль о влиянии удобного,

пространственно близкого расположения карбонильной группы к атомам водорода метильной группы у атома C9, к результатам прохождения реакций ипсо-замещения в схожих системах.

Является перспективным, согласно современной орбитальной теории [10, 11], проведение квантово-химических расчетов ряд условных, модельных структур (см. рис. 2).

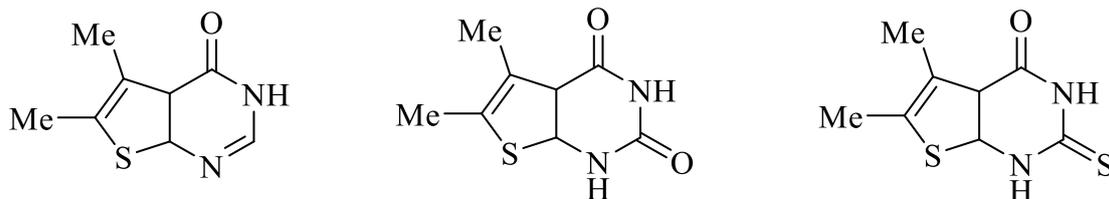


Рисунок 2. Производные тиенопиримидинона

При этом структуры несколько различаются друг от друга группами заместителей у пиримидинового кольца. В дальнейшем данные расчета этих структур могут дополнить наши знания о реакционной способности рассматриваемых систем.

Заключение. В целом, результаты наших теоретических квантово-химических исследований по определению точной геометрии и электронной

структуры молекулы дают нам дополнительную информацию для оценки центров электрофильной атаки. Например, из литературы известно [5], что атомы субстрата, носящие максимальные отрицательные электронные заряды при мягких условиях, подвергаются интенсивной атаке электрофильными реагентами; в противном случае, центры электрофильной атаки могут совсем не совпадать с указанными нами выше, с учетом внешних условий.

Список литературы:

- Беленький Л.И., Субботин А.Н., Чувылкин Н.Д. Квантово-химические исследования азолов. Сообщение 5. Эффект базиса на расчетные термодинамические параметры электрофильного замещения в тетразоле и 1,2,4-триазоле по схеме отщепления–присоединения без предварительного образования N-протонированных азольевых солей // Известия Академии наук. – 2015. – № 11. С. 2610.
- Волков А.И. Метод молекулярных орбиталей. – М.: Новое знание. – 2006. – 136 с.
- Дьюар М. Теория молекулярных орбиталей в органической химии. М.: Мир. – 1972. – 592 с.
- Захидов К.А. Синтез 2-оксо-, тиоксо-, селеноксо-, аминопиримидинонов-4 и алкилирование их полидентных анионов.: дисс. канд. хим. наук. – Ташкент. – 1993.
- Клопман Г. Реакционная способность и пути реакций: пер. с англ. – М.: Мир. – 1977. – 384 с.
- Мамарахмонов М.Х., Беленький Л.И., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р. // Квантово-химические исследования пиримидин-4-онов. Сообщение 6. Об особенностях реакций с нитрующими агентами некоторых карбоновых кислот ряда тиено[2,3-d]пиримидин-4-она и их сложных эфиров // Известия Академии наук. – 2016. – № 3. – С. 654–657.
- Реутов О.А., Курц А.Л., Бутин К.П. Часть 2 // Органическая химия. – М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2004. – С. 328–367.
- Шахидоятов Х.М. Хинозолон-4 и их биологическая активность. – Ташкент.: Фан. – 1988. – 137 с.
- Шахидоятов Х.М., Хаджаниязов Х.У. Функционально-замещенные пиримидины. – Ташкент.: Фан. – 2017. – 308 с.
- Ewa D. Raczyńska, Mariusz Sapuła, Katarzyna Zientara-Rytter, Katarzyna Kolczyńska, Tomasz M. Stępniewski, Małgorzata Hallmann DFT studies on the favored and rare tautomers of neutral and redox cytosine // Structural chemistry. – 2016 – Vol. 27. – P. 133–143.
- Frisch M.J.F. Gaussian 98. Revision A.5. – Gaussian Inc. – Pittsburg (PA), 1998.
- Saracoglu Murat, et. al. "Synthesis and DFT Quantum Chemical Calculations of Novel Pyrazolo[1,5-c]pyrimidin-7(1H)-one Derivatives." // Journal of the Chemical Society of Pakistan. – Vol. 41. – No. 3. – 30 June 2019. – P. 479.

МЕДИЦИНСКАЯ ХИМИЯ

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16562

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ НЕКОТОРЫХ АНТИАРИТМИЧЕСКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ
МЕТОДАМИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО СКРИНИНГА****Алиходжаева Мадина Ильясовна**

д-р фармацевт. наук,
доц. кафедры Фармацевтики и химии,
Университет Альфраганус,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: alikhodjaeva_madina@gmail.com

Атаханов Алишер Шавкатович

соискатель
кафедры Фармацевтики и химии,
Университет Альфраганус,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Жалилов Фазлиддин Садыкович

проф.,
зав. кафедрой Фармацевтики и химии,
Университет Альфраганус,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: dr.fazliddin@gmail.com

**DETERMINATION OF SOME ANTIARRHYTHMIC DRUGS VIA CHROMATOGRAPHIC
SCREENING METHODS****Madina Alikhodjaeva**

Doctor of science, professor assistant,
Department of pharmaceutic and chemisty,
University Alfraganus,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Alisher Atahanov

Researcher,
Department of pharmaceutic and chemisty,
University Alfraganus,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Fazliddin Jalilov

Professor,
Department chair of pharmaceutic and chemisty,
University Alfraganus,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Антиаритмические лекарственные средства (ЛС) – это препараты, которые нормализуют нарушенный ритм сердечной деятельности. В ряде случаев возникает необходимость в комбинировании антиаритмических ЛС различных классов, в том числе при резистентных формах нарушений ритма. Разработаны методики определения антиаритмических ЛС методами тонкослойной хроматографии, подобраны оптимальные условия для хроматографического скрининга амиодарона, аллапинина, атенолола, пропafenона и этацизина для определения их в биологических жидкостях.

ABSTRACT

Antiarrhythmic drugs (medicines) are drugs that normalize the disturbed rhythm of cardiac activity. In some cases, it becomes necessary to combine antiarrhythmic drugs of various classes, including in resistant forms of rhythm disorders. Methods for the determination of antiarrhythmic drugs by thin-layer chromatography have been developed; optimal conditions have been selected for chromatographic screening of amiodarone, allapinine, atenolol, propafenone and etacizine to determine them in biological fluids.

Ключевые слова: тонкослойная хроматография (ТСХ), амиодарон, аллапинин, атенолол, пропafenон, этацизин, кровь, моча.

Keywords: thin-layer chromatography (TLC), amiodarone, allapinine, atenolol, propafenone, etacizine, blood, urine.

Сердечно-сосудистые заболевания являются одной из основных причин смертности и инвалидизации населения большинства стран мира. Так, считается, что не менее 80 % смертности от инфаркта миокарда приходится на осложнение его течения сердечными аритмиями [17]. Среди антиаритмических лекарственных средств наиболее часто используют амиодарон, аллапинин, атенолол, этацизин, пропafenон и др.

Применяющиеся в клинике противоаритмические средства обладают многочисленными недостатками, имеют большое количество побочных реакций. Наиболее опасным среди них является возникновение аритмий (проаритмогенное действие) [7].

Необходимость в комбинировании препарата Аллапинин с другими антиаритмическими препаратами возникает при резистентных формах нарушений ритма. Выбор доз при данной комбинации осуществляется индивидуально для конкретного больного и независимо для каждого препарата. Антиаритмические лекарственные средства неоднократно были причинами хронических и острых отравлений [13; 15]. В связи с этим химико-токсикологическое изучение и разработка экспресс анализа антиаритмических препаратов является актуальной задачей.

Целью настоящего исследования является разработка методик определения антиаритмических ЛС методами тонкослойной хроматографии, подобрать оптимальные условия хроматографического скрининга амиодарона, аллапинина, атенолола, пропafenона и этацизина для определения их в биологических жидкостях.

Методы. Изучение антиаритмических ЛС проводили методом тонкослойной хроматографии (ТСХ). Использовали пластинки “Merck” (Германия). Были приготовлены стандартные растворы лекарственных веществ в 96% этаноле, содержащие аллапинин (1 мг/мл), амиодарон (8 мг/мл), атенолол (4 мг/мл), пропafenон (6 мг/мл) и этацизин (2 мг/мл). В качестве системы растворителей были использованы хлороформ-ацетон-30 % уксусная кислота – этиловый спирт (16:4:1:9), хлороформ-ацетон-30 % уксусная кислота – этиловый спирт (18:2:1:7), хлороформ-ацетон-30 % уксусная кислота-этиловый спирт (18:2:1:9). В качестве реагентов для обнаружения зон локализации препарата на хроматографических пластинках применяли следующие проявители реагенты: реактив Драгендорфа, модифицированный по Мунье, спиртовой раствор бромтимолового синего, УФ-облучение при 254 и 366 нм. [3; 4; 5; 14]. Результаты исследований приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Результаты хроматографирования (Значения Rf) антиаритмических ЛС методом ТСХ

№	Системы растворителей	Аллапинин	Амиодарон	Атенолол	Пропafenон	Этацизин
1	Хлороформ-ацетон- 30% уксусная кислота- этиловый спирт (16:4:1:9)	0,48	0,73	0,17	0,75	0,63
2	Хлороформ-ацетон- 30% уксусная кислота- этиловый спирт (18:2:1:7)	0,37	0,63	0,12	0,54	0,45
3	Хлороформ-ацетон- 30 % уксусная кислота- этиловый спирт (18:2:1:9)	0,28	0,70	0,18	0,53	0,41

Наряду с этим, была изучена экстракция антиаритмических ЛС из водных растворов с целью определения исследуемых препаратов в биологических жидкостях [2; 6; 8; 12]. Для этого готовили смесь из стандартных рабочих растворов антиаритмических препаратов (раствор «А»). 1 мл раствора «А» содержал амиодарона 1 мг/мл, аллапинина 0,25 мг/мл, атенолола 1 мг/мл, пропafenона 0,75 мг/мл и этацизина 0,5 мг/мл. Для экстракции набирали 1 мл раствора А и помещали в коническую колбу объемом 50 мл,

добавляли 9 мл ацетатного буферного раствора для создания pH 3,5-4,0 и перемешивали. Экстракцию проводили с хлороформом (10 мл), смесь центрифугировали (3000 об/мин) в течение 5 мин. Смесь переносили в делительную воронку и держали несколько минут для разделения слоев. Слой органического растворителя отделяли и пропускали через фильтр, содержащий 3,0 г безводного сульфата натрия. Экстракцию хлороформом повторяли ещё два раза.

Хлороформные извлечения объединяли, и органический растворитель упаривали на водяной бане при 40 °С до сухого остатка. Сухой остаток растворяли в 3,0 мл этиловым спирте (раствор «Б») и проводили анализ методом ТСХ. Для этого на стартовую линию хроматографической пластинки наносили раствор «Б», а также рядом стандартные растворы исследуемых препаратов, затем пластинку помещали камеру, насыщенную системой растворителей. После проведения хроматографирования зоны локализации веществ смотрели под УФ-лампой (254 нм) [10; 11; 16].

Для изолирования антиаритмических препаратов из биологических жидкостей поступали следующим образом: к 10 мл мочи (5 мл крови), содержащий 1 мл раствора А, определенное количество антиаритмических препаратов, помещали в коническую колбу объемом 50 мл, добавляли 9 мл ацетатного буферного раствора для создания рН 3,5-4,0 и 1 мл 10 % раствора натрия хлорида и перемешивали. Экстракцию проводили с хлороформом (10 мл), смесь центрифугировали (3000 об/мин) в течение 5 мин. Смесь переносили в делительную воронку и держали несколько минут для разделения слоев. Слой органического растворителя отделяли и пропускали через фильтр, содержащий 3,0 г безводного сульфата натрия. Экстракцию хлороформом повторяли ещё два раза. Хлороформные извлечения

объединяли, и органический растворитель упаривали на водяной бане при 40 °С до сухого остатка. Сухой остаток растворяли в 3,0 мл этиловым спирте и проводили анализ методом ТСХ, вышеуказанных условиях. Водную часть подщелачивают 10 % раствором аммония гидроксида до рН 9,0 и экстрагируют хлороформом трижды (по 10 мл). Хлороформный слой после отделения от водной фазы фильтруют через безводный натрия сульфат. Экстракцию хлороформом повторяли ещё два раза. Хлороформные извлечения объединяли, и органический растворитель упаривали на водяной бане при 40 °С до сухого остатка. Сухой остаток растворяли в 3,0 мл этиловым спирте и проводили анализ методом ТСХ, вышеуказанных условиях [1].

Результаты. Как видно из таблицы, при использовании в качестве системы растворителей смеси хлороформ-ацетон-уксусная кислота-этиловый спирт (16:4:1:9) происходит разделение компонентов смеси, но значения R_f пропafenона и амиодарона были очень близки друг к другу (0,73 и 0,75). При хроматографировании в системе растворителей хлороформ-ацетон-уксусная кислота-этанол (18: 2:1:7) были получены следующие результаты: аллапинин $R_f=0,37$, амиодарон $R_f=0,64$, пропafenон $R_f=0,54$, этацицин $R_f=0,45$ и атенолол $R_f=0,12$. Результаты анализа представлены на рис. 1 (а).

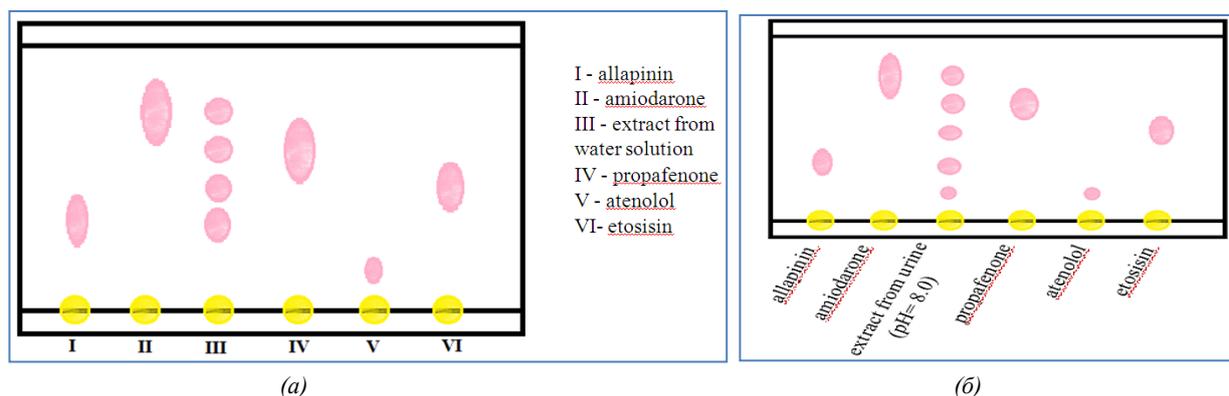


Рисунок 1. Хроматограммы антиаритмических ЛС и экстракта, полученного из водного раствора (а), а также экстракта, полученного из мочи (б)

Хроматографический анализ экстрактов, полученных из водных растворов показал, что при рН 4,0 хорошо экстрагируются амиодарон, аллапинин, пропafenон и этацицин, которые образуются в виде пятен на пластинке и имеют одинаковые значения R_f со стандартными образцами. Отсутствие пятна атенолола показывает, что препарат плохо экстрагируется в кислой среде. В случае анализа экстрактов, полученных из щелочной среды, в системе растворителей хлороформ – ацетон – уксусная кислота – этиловый спирт (18:2:1:9), наряду с другими веществами: аллапинин $R_f=0,28$, амиодарон $R_f=0,70$, пропafenон $R_f=0,53$, этацицин $R_f=0,41$, обнаруживается также атенолол $R_f=0,18$, что доказывает его щелочного характера. Рис. 1, (б).

Выводы. Разработаны методики анализа антиаритмических ЛС амиодарона, аллапинина, пропafenона, этацицина и атенолола методом ТСХ. Выбраны оптимальные условия хроматографического скрининга, для этого лучшей системой растворителей является хлороформ-ацетон- 30 % уксусная кислота-этиловый спирт (18:2:1:7), где наблюдается наилучшее разделение компонентов: аллапинин $R_f=0,37$, амиодарон $R_f=0,64$, пропafenон $R_f=0,54$, этацицин $R_f=0,45$ и атенолол $R_f=0,12$. Проведенные опыты изолирования антиаритмических ЛС из биологических жидкостей показали пригодность выбранных условий экстракции и анализа методом ТСХ. Разработанная методика изолирования и определения антиаритмических ЛС (таких как, амиодарон, аллапинин, пропafenон, этацицин, атенолол) из биологических жидкостей, рекомендуется для хроматографического скрининга при химико-токсикологических исследованиях.

Список литературы:

1. Алиходжаева М.И. Исследование некоторых синтетических диуретиков методом термодесорбционной поверхностно-ионизационной спектроскопии // Вопросы биологической, медицинской и фармацевтической химии. – 2009. – №. 1. – С. 61–63.
2. Алиходжаева М.И. Контроль качества, стандартизация и химико-токсикологическое исследование фуросемида. – 1991.
3. Алиходжаева М.И. Фармакокинетические исследования амиодарона // Фармацияда таълим, фан ва ишлабчиқаришнинг долзарб масалалари, илмий амалий анжуман материаллари. – Тошкент. – 2009. – Б. 207.
4. Алиходжаева М.И., Атаханов А.Ш., Сим С. Ориентировочное распределение амиодарона во внутренних органах отравленных животных // Фармацевтический журнал. – 2012. – №1. – С.34–37.
5. Алиходжаева М.И., Попков В.А. Экспресс-анализ некоторых диуретиков в биологических жидкостях // Фармация Казахстана. – Алматы, 2009. – №1. – С. 27–28.
6. Алиходжаева М.И., Симонов Е.А., Киричѐк А.В., Попков В.А. Хромато-масс-спектрометрическое определение некоторых диуретиков в биологических жидкостях // Судебно-медицинская экспертиза. – 2009. – Т. 52. – №. 5. – С. 27–29.
7. Голицын С.П. Грани пользы и риска при лечении желудочковых нарушений ритма сердца // Международный журнал медицинской практики. – 2000. – Вып. 10. – С. 56–64.
8. Жалилов Ф.С. Флувоксаминни биологик суюкликлар таркибидан ажратиб олиш жараёнини ўрганиш // Farmatsevtika jurnali.–Тошкент. – 2020. – Т. 4. – С. 38–43.
9. Жалилов Ф.С., Зокирова Г.Р., Мустафаев У.Г., Бекчанов Б.С. Определение сертралина из крови методом тонкослойной хроматографии // Вестник науки и образования. – 2019. – №. 23-1 (77). – С. 108–110.
10. Жалилов Ф.С., Султонова Г.М., Тожиев М.А. Депрес дори воситасини юпка катламли хроматография усулида тахлилини ўрганиш // Ўзбекистон фармацевтик хабарномаси. – Тошкент. – 2009. – Т. 2. – С. 22–25.
11. Жалилов Ф.С., Таджиев М.А. Способы обнаружения флуоксетина из биологических жидкостей // Фармация.–Санкт-Петербург. – 2016. – С. 587–590.
12. Искандаров А.И., Пулатова Л.Т. Современные возможности судебно-токсикологической экспертизы наркотических средств, прекурсоров и их структурных аналогов // Вопросы криминологии, криминалистики и судебной экспертизы. – 2020. – №. 1. – С. 129–135.
13. Юнусходжаева А.Н., Шоисломов Б.Ш., Алиходжаева М.И. Осложнения лекарственной терапии // Фармацевтический журнал. – 2014. – №. 3. – С. 365.
14. Alikhodjaeva M., Atahanov A., Xamdamov M. Development of Methodology for the Isolation and Determination of Propafenone in Blood Samples via HPLC //Journal of US-China Medical Science. – 2015. – Т. 12. – С. 163–171.
15. Franck Clarot, Jean Pierre Goull, Marline Horst, Emmanuelle Vaz, Christian Lacroix, Bernard Proust. Fatal Propafenone Overdoses: Case Reports and A Review of the Literature //Journal of Analytical Toxicology. – 2003. – Vol. 27. P. 595–599.
16. Tairhanovna P.L., Iskandarov A.I., Aripova T.U., Polyarush S.V., Sirov V.N. Development of improved methods of thin-layer chromatography and UV-spectrophotometry at expertise of paroxetine // European science review. – 2018. – № 7–8. – С. 303–309.
17. Zipes D.P., Camm A.J., Borggrefe M. ACC/AHA/ ESC 2006 guidelines for management of patients with ventricular arrhythmias and the prevention of sudden cardiac death: a report of the American College of Cardiology. American Heart Association Task Force and the European Society of Cardiology Committee for Practice Guidelines (Writing Committee to Develop Guidelines for Management of Patients With Ventricular Arrhythmias and the Prevention of Sudden Cardiac Death) // Circulation. – 2006. – Vol. 114. – P. 385–484.

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16612

РАЗРАБОТКА СОСТАВА СИРОПА С ЭКСТРАКТОМ ЛАВРА**Искандаров Аброр Искандар угли**

ассистент

кафедры точных и естественных наук,
Самаркандский государственный университет,
Каттакурганский филиал,
Республика Узбекистан, г. Самарканд

Эргашев Нурбек Зокир угли

ассистент

кафедры точных и естественных наук,
Самаркандский государственный университет,
Каттакурганский филиал,
Республика Узбекистан, г. Самарканд

Автина Наталья Валерьевна

доц. кафедры фармацевтической технологии,
Белгородский государственный национальный
исследовательский университет,
РФ, г. Белгород

E-mail: iskandarabror@gmail.com**DEVELOPMENT OF THE COMPOSITION OF SYRUP WITH LAUREL EXTRACT****Abror Iskandarov**

Assistant

of the Department of Exact and Natural Sciences,
Samarkand State University, Kattakurgan branch,
Republic of Uzbekistan, Samarkand

Nurbek Ergashev

Assistant

of the Department of Exact and Natural Sciences,
Samarkand State University, Kattakurgan branch,
Republic of Uzbekistan, Samarkand

Natalia Avtina

Ph.D., Scientific director/associate professor
of the department pharmaceutical technology,
Belgorod State National research university,
Russia, Belgorod

АННОТАЦИЯ

В статье проведен анализ ассортимента лекарственных препаратов на основе лекарственного растительного сырья, применяемый для лечения верхних дыхательных путей. В статье описывается способ получения густого экстракта из листьев лавра благородного. Также в статье представлен состав сиропа, полученного из густого экстракта листьев лавра благородного. В качестве стабилизатора используется лимонная кислота. Измельчение лавровых листьев производилось в мельницах двух типов: дисковых и шаровых. Подобрали оптимальную степень измельчения лаврового листа и тип измельчителя, а за оптимальное время измельчения приняли 10 минут. Кроме того, в статье приведена последовательность различных биологических веществ, содержащихся в составе лавра благородного.

ABSTRACT

This article analyzes the range of medicinal products based on medicinal plant raw materials used for the treatment of the upper respiratory tract. The article mentions a method for obtaining a thick extract from the leaves of bay laurel. The article also presents the composition of the syrup obtained from a thick extract of bay laurel leaves. Citric acid is used

as a stabilizer. The grinding of bay leaves was carried out in two types of mills: disk and ball. We selected the optimal degree of bay leaf grinding and the type of grinder, and took 10 minutes as the optimal grinding time. In addition, the article provides a sequence of various biological substances contained in *Laurus nobilis*.

Ключевые слова: лавровый лист, лавр благородный, сахарный сироп, экстракт, технологии сиропа с экстрактом листьев Лавра, лечения диабета, метод получения густого экстракта, экстракт лавра, лекарственной формы, лечения заболеваний верхних дыхательных путей.

Keywords: Bay leaf, bay laurel, sugar syrup, extract, technology of syrup with laurel leaf extract, treatment of diabetes, method of obtaining a thick extract, laurel extract, dosage form, treatment of upper respiratory tract diseases

Актуальность темы. В настоящее время существует потребность в эффективных и безопасных средствах для лечения верхних дыхательных путей и бронхолегочной системы. Для лечения такого рода заболеваний часто прибегают к возможностям фитотерапии, поскольку такие препараты имеют комплексное воздействие на организм больного. Таким образом, разработка новой лекарственной формы на основе экстракта из листьев лавра для лечения заболеваний дыхательных путей является на наш взгляд значимой, актуальной и перспективной задачи современной науки.

Цель работы состоит в разработке состава и технологии сиропа с экстрактом листьев Лавра благородного.

Лавр благородный (*Laurus nobilis* Linnaeus, 1753) – вечнозелёное растение (дерево или кустарник) высотой до 12–15 м. Естественными местами обитания этого вечнозелёного растения являются территории стран Средиземноморья с высоким годовым уровнем осадков [20].

Химический состав Лавра благородного благоприятствует его использованию в фармацевтической промышленности. В нем содержатся эфирные масла, главным компонентом которого является 1,8-цинеол (25-70%), в качестве второстепенных компонентов лавр содержит α -терпинил ацетат, линалоол, α - и β -пинены, β -элемен, α -терпинеол, эвгенол, метилэвгенол, карвакрол и сабинен – эти соединения известны своей антимикробной активностью [7]. Химический профиль гидролатов характеризовался 1,8-цинеолом (65,1%) в качестве основного компонента *L. nobilis* [22].

Антибактериальная активность извлечений, по мнению некоторых исследователей, связана с присутствием терпеновых и фенольных веществ. Противогрибковый потенциал эфирного масла из листьев лавра в отношении видов, принадлежащих к родам *Eurotium*, *Aspergillus* и *Penicillium*, был доказан Guynot с соавторами [18]. Эфирные масла лавра продемонстрировали значительную антибактериальную активность, метод диффузии агара и испытание в паровой фазе показали активность эфирных масле с наибольшим диаметром галонгибирования против *A. bohemicus* и *B. Cereus* [22].

Листья лавра также входят в состав сборов и лекарственных средств для лечения диабета [10]. В многочисленных экспериментах на крысах было показано, что экстракт листьев *L. nobilis* оказывает

ощутимое влияние на уровень глюкозы в крови и улучшает регенерацию островков поджелудочной железы, а также восстанавливает измененные ферменты печени, мочевины, креатинкиназу, уровни общего белка, кальция и ферритина почти до нормального [21]. Известны публикации, в которых изучался эффект эфирного масла лавра как потенциального противоопухолевого агента в лечении раковых заболеваний. Так, исследования *in vitro* продемонстрировали ингибирование роста раковых клеток обработанными продуктами из лаврового листа в линиях раковых клеток человека HT-29, HCT-116, Caco-2 и SW-480, что сопровождалось различными уровнями повышенного апоптоза [12].

Что касается оценки антиоксидантной активности, определяемой с помощью анализов FRAP, DPPH и ORAC, то оптимальными условиями для экстракции были 50% этанола, 150°C, один цикл экстракции и 5 минут времени. Полифенольный экстракт, полученный при оптимальных условиях PLE, содержал 29 идентифицированных соединений, среди которых флавонолы (рутин и кверцетин-3-глюкозид) преобладали. Результаты анализов антиоксидантной активности показали, что PLE является эффективным экологически чистым методом получения богатых полифенолами экстрактов лаврового листа с относительно высокой антиоксидантной активностью [18].

Кроме явных терапевтических эффектов, у лавра есть положительное влияние на снятие тревожности. Потребление чая *Laurus nobilis* значительно снижало концентрацию кортизола в плазме ([кортизол] D0 = 93,5 ± 43,01 нг / мл, D11 = 72,23 ± 25,37, p = 0,001) [22].

Таким образом, спектр лекарственного применения Лавра благородного, достаточно широк (от антимикробной до цитотоксической активности), и до конца не изучен. В этой связи важно находить новые лекарственные формы и стараться использовать потенциал данного лекарственного растения на максимальном уровне.

Экспериментальная часть. Материалы и методы исследования. Материалом исследования послужил густой экстракт из листьев лавра благородного (*Laurus nobilis* Linnaeus, 1753).

Действующие вещества и их характеристики. В листьях лавра благородного содержится много активных веществ (Таблица-1).

Таблица 1.

Количественное содержание разных групп фенольных соединений в листьях лавра благородного

Соединения	Извлечения		
	Водное	Спиртоводное (вода-этанол (1:1))	Спиртовое
Фенольные соединения, мг/г (в пересчёте на галловую кислоту)	14,37±0,79	43,03±0,35	31,09±0,31
Флавоноиды, мг/г (в пересчёте на эпикатехин)	14,12±0,93	30,15±0,25	20,88±0,88
(+)-Катехин	0,41*	0,58*	0,04*
(-)-Эпикатехин	0,99*	3,44*	0,67*
Сумма мономеров	1,40*	4,02*	0,71*
Димерные проантоцианидины	1,49*	16,97*	5,25*
Тримерные проантоцианидины 1	0,48*	1,24*	0,32*
Тримерные проантоцианидины 2	1,73*	5,05*	2,46*
Тетрамерные проантоцианидины	1,02*	1,16*	0,32*
Сумма флаван-3-олов	6,12*	28,44*	9,06*

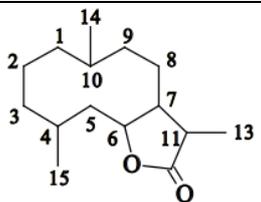
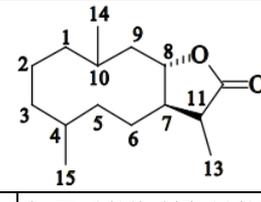
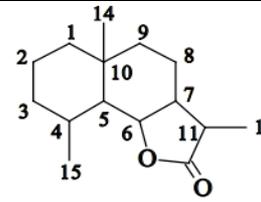
* – концентрации даны в мг/г в пересчёте на эпикатехин и сухой вес.

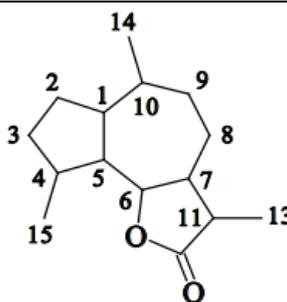
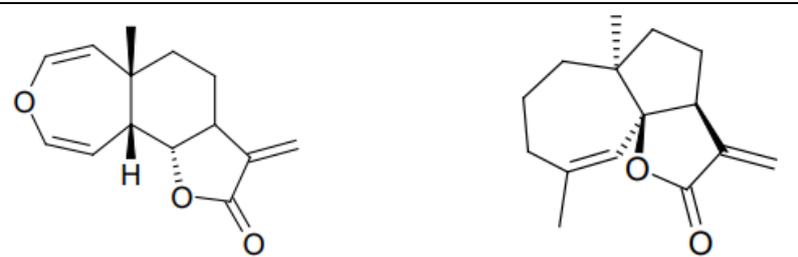
В основном это фенольные соединения, такие как фенольные кислоты и флавоноиды. Их в общем счете около 99,7 г/кг (в пересчете на галловую кислоту).

Сесквитерпеновые лактоны, выделенные из листьев *Laurus nobilis*, представлены в таблице-2.

Таблица 2.

Сесквитерпеновые лактоны, обнаруженные в лавре благородном

№ п/п	Тривиальное название	Положение заместителей
Гермакран-12,6-олиды		
		
1	Ангидропероксикостунолид	1-оксо; 4(5),11(13),10(14)-триен; 6β,7α – Н
2	Артеморин	1(10),4(5),11(13)-триен; 6β,7α – Н
3	Верлоторин	1β-ООН; 4(5),11(13),10(14)-триен; 6β,7α – Н
4	Костунолид	1β-ОН; 4(5),11(13),10(14)-триен; 6β,7α – Н
5	Люцентолид	1α-ОН; 4(5),11(13),10(14)-триен; 6β,7α – Н
Гермакран-12,8-олиды		
		
6	Дезацетиллауренобиолид	6α-Н; 1(10),4(5),11(13)-триен; 7α,8β – Н
Эвдесман-12,6-олиды		
		

№ п/п	Тривиальное название	Положение заместителей
7	Без тривиального названия	1,2 α /3,4 α -диэпокси; 11-ен; 4 α ,5 α ,6 β ,7 α ,10 α – Н
8	Без тривиального названия	1 α ,2 β -диОН; 3,11-диен; 5 α ,6 β ,7 α ,10 α – Н
9	Без тривиального названия	1 β -ОН; 4 α -ОСН ₃ ; 11-ен; 5 α ,6 β ,7 α ,10 α – Н
10	Без тривиального названия	1 β ,4 β -диОН; 11-ен; 5 α ,6 β ,7 α ,10 α – Н
11	Без тривиального названия	1 β -ОН,2 β -ОАс; 4,11-диен; 5 α ,7 α ,10 α – Н
12	10-эпигазаниолид	1,3,11(13)-триен; 5 α ,10 β – Н
13	13-дегидросантонин	3-оксо; 1,4,11(13)-триен; 4 α -СН ₃ ; 6 β ,7 α ,10 α -Н
14	Без тривиального названия	1 β ,2 β -диОН; 4(15),11(13)-диен; 5 α ,6 β ,7 α -Н
15	Без тривиального названия	1 β ,15-диОН; 3,11(13)-диен; 5 α Н,7 α ,10 α -Н
16	Без тривиального названия	3 α -АсО; 1,4(15),11(13)-триен; 5 α ,6 β ,7 α ,10 α -Н
17	Газаниолид	1,3,11(13)-триен;10 α -Н
18	Магнолиалид	1 β -ОН; 4(5),11(13)-диен; 3 α ,6 β ,7 α ,10 α -Н
19	Гидропероксид магнолиалида	1 β -ОН; 4 α -ООН; 4(15),11(13)-диен; 7 α ,10 α -Н
20	3 α -пероксиармефолин	1 β -ОН; 3 α -ООН; 4(5),11(13)-диен; 6 β ,7 α ,10 α -Н
21	Рейнозин	1 β -ОН; 4(15),11(13)-диен; 5 α ,7 α ,10 α -Н
22	Сантамарин	1 β -ОН; 3,11(13)-диен; 5 α ,7 α ,10 α -Н
23	Тубиферин	3-оксо; 1,11(13)-диен; 4 β ,5 α ,6 β ,7 α ,10 α -Н
Гвайан-12,6-олиды		
		
24	Дегидрокостус лактон	4(15),11(13),10(14)-триен; 1 α ,5 α ,6 β ,7 α – Н
25	3 β -хлордегидрокостус лактон	3 β -Cl; 4(15),11(13),10(14)-триен; 1 α ,5 α ,6 β ,7 α – Н
26	Залузанин D	3 β -ОАс; 4(15),11(13),10(14)-триен; 1 α ,5 α ,6 β ,7 α – Н
27	Залузанин С	3 β -ОН; 4(15),11(13),10(14)-триен; 1 α ,5 α ,6 β ,7 α – Н
28	Эремантин	4(15),11(13),9(10)-триен; 1 α ,5 α ,6 β ,7 α – Н
Другие типы лактонов		
		
Спирофолид Без тривиального названия		

Представленные в таблице-2 соединения обладают разными фармакологическими активностями: антибактериальной, противогрибковой, антидиабетической, противовоспалительной.

Соединения, содержащиеся в лавре благородном, обладают противовоспалительными (сесквитерпеновые лактоны, морфин, пироксикам), противогрибковыми (сесквитерпеновые лактоны, фенольные соединения), антимикробными (сесквитерпеновые

лактоны, фенольные соединения, карвакрол, алифатический спирт линалоол, метилэвгенол, сабинен), антиоксидантными (флавоноид изокверцитрин) и многими другими (например, противоэпилептическими – метилэвгенол, эвгенол, пинен) свойствами.

Вспомогательные вещества и их характеристики. В качестве вспомогательных веществ в сиропе, как известно, выступает сахароза, и в нашем случае лимонная кислота, играющая роль консерванта. Лимонная

кислота является универсальным промежуточным продуктом метаболизма растений и животных. Это химическое сырье, которое перерабатывается и широко используется во всем мире в качестве превосходного фармацевтического наполнителя.

Метод получения густого экстракта из листьев лавра благородного (*Laurus nobilis* Linnaeus, 1753). Технология получения экстракта прописана в Фармакопее, XIV издание, Т.П. Сырье для экстрактов должно отвечать требованиям, предъявляемым к лекарственному растительному сырью в фармакопейных статьях и иметь соответствующую документацию. Вспомогательные вещества (в нашем случае – сахара и лимонная кислота, также должны быть разрешены для применения). Получение экстракта осуществляется в несколько стадий: необходимо подготовить лекарственное сырье (высушить, измельчить), экстрагенты, получение первичной вытяжки, ее очистка, в случае

густого экстракта – выпаривание, стандартизация и упаковка.

Методы экстрагирования принято делить на статические и динамические. В статических методах лекарственное сырье заливают экстрагентом и подвергают настаиванию. В динамических методах происходит постоянная смена экстрагента или сырья. Среди динамических известны непрерывные (с непрерывной подачей лекарственного сырья: проточные и противоточные, методы с законченным циклом и методы с незаконченным циклом, методы с делением сырья на равные части, интенсивные методы экстрагирования).

Экстракт лавра получали следующим образом. Измельчение сырья проводили на двух типах мельниц: на дисковой и на шаровой. Время измельчения составило 5, 10 и 20 минут. Результаты степени измельчения растительного сырья представлены в таблице (Табл. 3).

Таблица 3.

Выход продукта при использовании разного типа мельниц для измельчения лекарственного сырья

Оборудование	Время, минут	Вес до измельчения, грамм	Степень измельчения, мм		
			более 5	3 - 5	менее 0,1
			Вес после измельчения, грамм		
Дисковая мельница	5	30,0	8,6	21,2	0,2
	10	30,0	2,7	27,0	0,3
	20	30,0	9,6	5,2	15,2
Шаровая мельница	5	10,0	4,0	4,8	1,2
	10	10,0	3,4	5,2	1,4
	20	10,0	4,2	2,7	3,1

Анализируя результаты, можно сделать вывод об оптимальной степени измельчения листьев лавра и выборе типа измельчителя. Выявлено, что измельчение необходимо осуществлять с помощью дисковой мельницы.

При измельчении в течение 5 мин наблюдается недоизмельчение растительного сырья, при измельчении сырья в течение 20 минут, наблюдается процесс конгломерации, т.е. склеивания измельченных частиц между собой. Оптимальным временем для измельчения листьев лавра является 10 мин, рабочая фракция составляет размер частиц от 3 до 5 мм.

После выбора оптимального режима измельчения – 10 мин на дисковой мельнице, к измельченному сырью добавляли 70% этанол в соотношении 1:5 и оставляли настаиваться в течении суток для получения спиртового извлечения (использовали статический метод).

После настаивания в течение суток сырье подвергали дополнительной ультразвуковой обработке в течение 45 минут. Клеточная стенка при этом разрушается, и происходит выход биологически активных веществ. Влияние ультразвука на процесс экстракции не ограничивается разрушением растительной клеточной стенки и увеличением выхода биологически активных веществ, ультразвук также оказывает антисептическое действие и увеличивает срок хранения экстрактов.

Полученное спиртовое извлечение профильтровали (очистка от сырья) и сгущали при помощи вакуум-выпарного аппарата. Полученный густой экстракт по внешнему виду представлял собой массу коричневого цвета, плотной, вязкой консистенции.

Методы анализа сиропа с экстрактом из листьев лавра благородного (*Laurus nobilis* Linnaeus, 1753). В полученном растворе определяли флавоноиды. Для определения флавоноидов нам необходимы $AlCl_3$ и 5% раствор уксусной кислоты CH_3COOH . Пропорции были следующие: к 5 мл $AlCl_3$ прибавляли 1 мл 5% раствор CH_3COOH , 3 мл жидкого экстракта и 100 мл 70% этанола. Через 45 минут воздействия ультразвука смотрели оптическую плотность на спектрофотометре.

Для изготовления сиропа с экстрактом лавра, первоначально изготавливали сироп сахарный, в котором последовательно растворяли экстракт густой и кислоту лимонную.

Анализ полученного сиропа проводят на основании методик, прописанных в общих фармакопейных статьях действующей Фармакопеи 14 издания. Методика проведения испытаний сиропа следующая, согласно ОФС «Сиропа».

Заключение. В ходе исследовательской работы разработаны состав лекарственной формы в виде сиропа на основе экстракта лавра для лечения заболеваний дыхательных путей. Определены современные требования, предъявляемые к лекарственной форме в виде сиропа из листьев лавра благородного.

Проведен анализ ассортимента лекарственных препаратов на основе лекарственного растительного сырья, применяемых для лечения верхних дыхательных путей. Разработан состав сиропа из густого экстракта листьев лавра благородного на основе сахарного сиропа. В качестве стабилизатора используется лимонная кислота.

Список литературы:

1. Marzouki, H. Essential oil composition and variability of *Laurus nobilis* L. growing in Tunisia, comparison and chemometric investigation of different plant organs / H. Marzouki et al. // *Natural Product Research*. – 2009. – V. 23, №4. – P. 343- 354.
2. Коновалов Д.А. Фенольные соединения лавра благородного (обзор) / Д.А. Коновалов, Н.М. Алиева // *Фармация и фармакология*. – 2019. – №7(5). – С. 244-259.
3. Ovidi, E. *Laurus nobilis*, *Salvia sclarea* and *Salvia officinalis* Essential Oils and Hydrolates: Evaluation of Liquid and Vapor Phase Chemical Composition and Biological Activities. / E. Ovidi, V. Laghezza Masci, M. Zambelli, A. Tiezzi, S. Vitalini, S. Garzoli // *Plants (Basel)*. – 2021. – V. 10(4). – P. 707.
4. Guynot, M.E. Antifungal activity of volatile compounds generated by essential oils against fungi commonly causing deterioration of bakery products / M.E. Guynot, A.J. Ramos, L. Seto, P. Purroy, V. Sanchis, S. Marin // *Journal of Applied Microbiology*. – 2003. – Vol. 94. – P. 893-899.
5. Насухова Н.М. Биологически активные вещества листьев лавра благородного / Н.М. Насухова, Л.А. Логвиненко, А.Л. Харченко, Д.А. Коновалов // *Фармация и фармакология*. – 2017. – № 3. – С. 200-221.
6. Mohammed, R.R. Biomedical effects of *Laurus nobilis* L. leaf extract on vital organs in streptozotocin-induced diabetic rats: Experimental research / R.R. Mohammed, A.K. Omer, Z. Yener, A. Uyar, A.K. Ahmed // *Ann Med Surg*. – 2020. – V. 61. – P. 188-197.
7. Bennett, L. Molecular size fractions of bay leaf (*Laurus nobilis*) exhibit differentiated regulation of colorectal cancer cell growth in vitro. / L. Bennett L et al. // *Nutr Cancer*. – 2013. – V. 65(5). – P. 746-764.

ИЗУЧЕНИЕ ОСТРОЙ ТОКСИЧНОСТИ СУБСТАНЦИИ МЭЭ-2**Махсумов Абдухамид Гафурович**

д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент,
E-mail: maxsumovag@bk.ru

Мухиддинов Баходир Фахриддинович

д-р хим. наук, проф.,
кафедра “Химическая технология”,
Навоийский государственный горно-технологический университет,
Республика Узбекистан, г. Навои

Машаев Элдор Эргашовой угли

докторант, ст. преп.,
кафедра “Химическая технология переработки нефти”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: eldor.mashayev@mail.ru

Абсалямова Гулноза Маматкуловна

доцент
кафедры «Химическая технология переработки газа»
Ташкентского химико-технологического института,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Исмаилов Бобурбек Махмуджанович

д-р филос. в обл. техн. наук, PhD,
кафедра “Химическая технология переработки нефти и газа”,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент,
E-mail: boburbek.89@mail.ru

STUDY OF ACUTE TOXICITY OF THE MEE-2 SUBSTANCE**Abduhamid Makhsumov**

Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology of Oil refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Bakhodir Mukhiddinov

Doctor of Chemical Sciences, professor
of the department of Chemical technology,
Navoi State Mining and Technology University,
Republic of Uzbekistan, Navoi

Eldor Mashaev

PhD student, senior lecturer,
Department of Chemical Technology of Oil Refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Gulnoza Absalyamova

*Doctor of Philosophy in Chemical Sciences, PhD,
department of Chemical technology of oil and gas refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Boburbek Ismailov

*Doctor of Philosophy in Technical Sciences, PhD,
department of Chemical technology of oil and gas refining,
Tashkent Institute of Chemical Technology,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

АННОТАЦИЯ

Исследование биологически активных веществ является перспективным направлением в химии, фармакологии, медицине и сельском хозяйстве, где определенное место принадлежит к бис-карбаматам. Цель данной исследовательской работы является изучение острой токсичности бис-карбамата серии МЭЭ. Острую токсичность исследуемой субстанции «МЭЭ-2» т.е. N,N'-гексаметилен-бис-[(м-крезолило)-карбамата] изучали общепринятым методом, описанным в литературе, однократным введением лекарственных препаратов с определением класса токсичности. Для эксперимента использовали белых беспородных мышей самцов и самок в количестве 30 голов. В результате выяснилось что субстанция «МЭЭ-2» относится к III классу токсичности умеренно токсичным.

ABSTRACT

The research of biologically active substances is a promising direction in chemistry, pharmacology, medicine and agriculture, where a certain place belongs to bis-carbamates. The purpose of this research work is to study the acute toxicity of MEE series bis-carbamate. The acute toxicity of the test substance "MEE-2" i.e. N,N'-hexamethylene-bis-[(m-cresolyl)-carbamate] was studied by the generally accepted method described in the literature, a single administration of drugs with determination of the toxicity class. For the experiment, 30 white outbred male and female mice were used. As a result, it turned out that the substance "MEE-2" belongs to toxicity class III, moderately toxic.

Ключевые слова: бис-карбамат, субстанция МЭЭ-2, острая токсичность, мыши, фармакология, метанол, ДМСО, физиология, классификация.

Keywords: bis-carbamate, substance MEE-2, acute toxicity, mice, pharmacology, methanol, DMSO, physiology, classification.

Введение. В настоящее время изучение карбаматов и бис-карбаматов имеет большое значение. В частности, карбаматы и бискарбаматы используются в медицине, химической промышленности, нефтегазовой промышленности и сельском хозяйстве [1-2, 4, 8]. Изученный в данной работе N,N'-гексаметилен-бис-[(м-крезолило)-карбамат], т.е. МЭЭ-2 был синтезирован авторами впервые в мире, а также изучены их физико-химические свойства и области применения [3, 5, 9]. Учитывая использование этих веществ исследователями в сельскохозяйственных сферах, важно изучить их острую токсичность. В связи с этим, цель этой работы, является изучение острой токсичности субстанции «МЭЭ-2», разработанного в Ташкентском химико-технологическом институте в эксперименте на белых мышах.

Материалы и методы исследования. Острую токсичность исследуемой субстанции «МЭЭ-2»

изучали общепринятым методом, описанным в литературе, однократным введением лекарственных препаратов с определением класса токсичности [6-7]. Для эксперимента использовали белых беспородных мышей самцов и самок в количестве 30 голов, массой тела 19 – 21 г, выдержанных на карантине в течение 14 дней. До и в период экспериментов мыши находились в виварии при температуре воздуха +20 - 22°C, влажности не более 50%, объёме воздухообмена (вытяжка: приток) - 8:10, в световом режиме - день - ночь. Мышей размещали в стандартных пластиковых клетках и содержали на стандартном рационе. С целью изучения острой токсичности и определения ЛД₅₀, из сравнимых препаратов приготовили 1,5 % раствора (30 мг + 1,5 мл метанол). Для проведения эксперимента животных разделили на 5 групп по 6 голов. Раствор субстанции «МЭЭ-2» вводили однократно внутривентриально белым мышам следующим образом (таблица 1):

Таблица 1.

Введение раствора субстанции «МЭЭ-2» белым мышам

№ групп	Число ж-х	Путь введения	Доза в мг/кг	Доза в мл
1	6	Per os	75	0,1
2	6	Per os	112,5	0,15
3	6	Per os	150	0,2
4	6	Per os	187,5	0,25
5	6	Per os	225	0,3

Результаты исследования и их обсуждение.

В первый день эксперимента за животными вели наблюдение ежечасно в условиях лаборатории, при этом регистрировали показатели внешнего вида (состояние шерсти, слизистых оболочек и т. д.); функционального состояния (выживаемость в течение опыта, общее состояние, возможные судороги и гибель) и поведения. Далее ежедневно, в течение 2-х недель в условиях вивария, у животных всех групп наблюдали за общим состоянием и активностью. Особенности поведения, реакцией на тактильные, болевые, звуковые и световые раздражители, частотой и глубиной дыхательных движений, ритмом сердечных сокращений, состоянием волосяного и кожного покрова, положением хвоста, количеством и консистенцией фекальных масс, частотой мочеиспускания, изменением массы тела и др. показателями. Все подопытные животные содержались в одинаковых условиях и на общем рационе питания со свободным доступом к воде и пище [3,4]. При изучении острой токсичности субстанции «МЭЭ-2» были получены следующие данные:

1 группа (доза 75 мг/кг): после введения препарата в течение дня мыши оставались активными, изменений в поведении и функциональном состоянии не наблюдалось. Состояние шерсти и кожных покровов обычное без изменений, от пищи и воды не отказывались, гибели мышей не наблюдалось. На второй день и в последующий период наблюдения патологических изменений в поведении и физиологических показателях мышей не было. Употребление воды и корма в норме, отставание в росте и развитии не наблюдалось. Гибели мышей в течение 14 дней не было.

2 группа (доза 112,5 мг/кг): после введения препарата у мышей наблюдалась вялость, малоподвижность. У двух мышей наблюдалось боковое положение. В течение дня эти мыши погибли. На вторые сутки, оставшиеся в живых мыши стали активными, потребление воды и пищи в норме. На третьи сутки и в остальной период наблюдения у мышей в поведении и физиологических показателях отклонений не наблюдалось. Гибели остальных мышей не наблюдалось (таблица 2).

Таблица 1.

Результаты изучения острой токсичности субстанции «МЭЭ-2»

Группа животных	Субстанция «МЭЭ-2»			Путь введения	Результат
	Доза				
	мг/кг	мл			
1	75	0,1	Per os	0/6	
2	112,5	0,2	Per os	2/6	
3	150	0,3	Per os	4/6	
4	187,5	0,4	Per os	5/6	
5	225	0,5	Per os	6/6	
ЛД ₅₀		145 (118-178) мг/кг			

3 группа (доза 150 мг/кг) - после введения препарата у мышей наблюдалась вялость, малоподвижность. У четырех мышей наблюдалось боковое положение. В течение дня эти мыши погибли. На вторые сутки, оставшиеся в живых мыши, оставались вялыми, потребление корма и воды пассивное. На третьи сутки и в остальной период наблюдения у мышей в поведении и физиологических показателях отклонений не наблюдалось. Гибели остальных мышей не наблюдалось.

4 группа (доза 187,5 мг/кг) — введение препарата вызвало боковое положение у всех мышей в этой группе, в течение дня погибло 5 мышей. На вторые и третьи сутки оставшаяся мышь оставалась вялой. На четвертые сутки и в последующие дни и у мыши в поведении и физиологических показателях отклонений и гибели не наблюдалось.

5 группа (доза 225 мг/кг) - в этой группе от признаков интоксикации погибли все мыши (таблица 2).

Заключение. ЛД₅₀ субстанции «МЭЭ-2», разработанной в Ташкентском химико-технологическом институте, составила дозу 145(118 - 178) мг/кг. Согласно классификации токсичности веществ субстанции «МЭЭ-2» относится к III классу токсичности умеренно токсичным. Но мы считаем, что токсичность раствора была бы ниже, если бы мы приготовили его в ДМСО вместо ядовитого метанола. Также этот результат неплох, поскольку препарат МЭЭ-2 в концентрации 0,001 процента показал высокую активность при применении препарата МЭЭ-2 в качестве биостимулятора для хлопка, что позволяет использовать его в очень небольшом количестве в больших площадях, таким образом, его токсичность снижается.

Список литературы:

1. Вязьмин С.Ю., Березина С.Е., Ремизова Л.А., Домнин И.Н., Гляйтер Р. Синтез новых сопряженных дииннов, содержащих карбаматных группы, и изучение их свойств. // Журнал органической химии. – Москва. 2002.- № 6.- С. 817-829.
2. Махсумов А.Г., Абдукаримова С.А., Машаев Э.Э., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производного - N,N'-гексаметилен бис- [(орто-крезолило) -карбамата] и его применение // Universum: химия и биология. 2020. № 10-2 (76).

3. Махсумов А.Г., Машаев Э.Э., Холбоев Ю.Х., Уразов Ф.Б., Зохиджонов С.А. N,N'-гексаметилен бис [(м-крезолило) -карбамат] и его физико-химические свойства // Life Sciences and Agriculture. 2022. №1 (9).
4. Махсумов А.Г., Жагфаров Ф.Г., Арипджанов О.Ю., Азаматов У.Р. Синтез и свойства производных мета-крезолило-карбаматов, их биологическая активность // НефтеГазоХимия. 2022. № 3.
5. E.Mashayev, B.Ismailov, J.Ergashev, Sh.Omonov, A. Makhsumov. Research of N,N'-hexamethylene bis-[(o-cresolyl)-carbamate] in international chemicals databases // International Bulletin of Applied Science And Technology UIF=8.2 SJIF=5.955, IBAST ISSN: 2750-3402 (г. 2023, Т. 3, Выпуск 11, сс. 397–401). <https://doi.org/10.5281/zenodo.10209951>
6. Гуськова Т.А. Токсикология лекарственных средств. Москва, 2008. — С. 27- 30.
7. Стефанов А.В. Доклинические исследования лекарственных средств., Киев 2002. — С. 91.
8. Makhsumov A., Holboyev Y., Valeeva N., Ismailov B., Askarov I. Synthesis of 1-nicotinoylo-3-(meta-nitrophenyl)-thiourea derivatives with anti-inflammatory activity // J. E3S Web of Conferences, EDP Sciences 434, ICECAE 2023, p. 02032. <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202343402032>.
9. Janet Bahri, Remi Bliciek, Bassem Jamoussi, Marc Taillefer and Florian Monnier. Hydroamination of terminal alkynes with secondary amines catalyzed by copper: regioselective access to amines.// Chemical Communications.- 2015. 51 (56). –P. 11210-11212.

МАКРО- И МИКРОЭЛЕМЕНТЫ РАСТЕНИЯ *Fritillaria severzovii***Хужаева Нафисахон Тоштемировна**

базовый докторант

Кокандского государственного педагогического института

Республика Узбекистан, г. Коканд

E-mail: nafisaxonxudjaeva@gmail.com**Абдуганиев Бахтиёржон Ёрмахаматович**

д-р.хим.наук., Таможенный институт

Государственного таможенного комитета

Республика Узбекистан, г. Ташкент

Хужаев Вахобжон Умарович

д-р хим.наук, проф,

Кокандский государственный педагогический институт,

Республика Узбекистан, г. Коканд

E-mail: xujayev_030@mail.ru**MACRO AND MICROELEMENTS OF THE PLANT *Fritillaria severzovii*****Nafisakhan Khojaeva**

Doctoral student

of the Kokand State Pedagogical Institute,

Republic of Uzbekistan, Kokand

Bakhtiyorjon Abduganiyev

Doctor of chemical science,

Customs Institute of the State Customs Committee,

Republic of Uzbekistan, Tashkent

Vakhobjon Khojaev

Doctor of chemical science, Professor.,

Kokand State Pedagogical Institute,

Republic of Uzbekistan, Kokand

АННОТАЦИЯ

В статье представлены сведения об основных макроэлементах, встречающихся в живых организмах, их суточных нормах, а также их классах по спектру воздействия на организм. Описаны многие виды растений, принадлежащие к роду *Fritillaria*, а также прежнее наименование растения *Fritillaria sewerzowii* и причины изменения его названия. Также, представлены исследования и их анализ по изучению макро- и микроэлементного состава новых запасов надземной и корневой частей растения *Fritillaria sewerzowii*. Также, сравнивались различия в химическом составе нового образца корня с его предыдущей формой. Приведены результаты сравнения макро-и микроэлементов в надземной части растения с химическими элементами в корневой части. Освещены полезные элементы в растении *Fritillaria sewerzowii* и их место в организме человека.

ABSTRACT

The article provides information about the main macroelements found in living organisms, their daily requirements, as well as their classes according to the spectrum of effects on the body. Many plant species belonging to the genus *Fritillaria* are explained, as well as the former name of the plant *Fritillaria sewerzowii* and the reasons for the change in its name. Research and analysis are presented to study the macro- and microelemental composition of new reserves of the aerial part and root part of *Fritillaria sewerzowii* plants. You also compared the differences in the chemical composition of the new cornea image with the previous cornea image. The results of a comparison of macro- and microelements of the above-ground part of the plant with chemical elements and the root part are presented. The useful elements in the *Fritillaria sewerzowii* plants and their place in the human body are highlighted.

Ключевые слова: *Fritillaria sewerzowii*, макро- и микроэлементы, автосэмплер, биологически активная добавка, Berghof (Speed Wave Xpert).

Keywords: *Fritillaria sewerzowii*, macro- and microelements, autosampler, dietary supplement, Berghof (Speed Wave Xpert).

Введение. Макроэлементы являются полезными для организма веществами, а суточная норма для организма человека составляет 200 мг. Из научных источников известно, что в организме человека насчитывается около 60 химических элементов [2]. Тело человека на 96–97 % в основном состоит из следующих 4 макроэлементов (кислород – 65 %, азот – 3%, водород – 10 % и углерод – 18 %). 3–4 % в организме замещается другими макроэлементами (кальций – 1,7 %, фосфор – 1,25 %, натрий – 0,2 %, хлор – 0,2 %, магний – 0,05 %, калий – 0,25 % и сера – 0,3 %) [11]. Микроэлементы встречаются в организме человека в количестве до 0,001–0,00001 %, но важны для биохимических процессов в организме. Микроэлементы делятся на три типа: важные для жизни (V, Fe, I, Co, Si, Li, Ni, Mn, Mo, Cu, As, Se, F, Cr и Zn), условно важные (B, Br, Cd, Pb, Sr и Ti) и вредных и менее изученных (Ba, Be, Bi, Ga, Ge, La, Sn, Ra, Rb, Ag, Sc, Th, U, Cs и Zr) [12].

К токсичным и малоизученным относится большая группа элементов, всегда присутствующих в организме в следовых количествах, но их биологическая роль еще недостаточно изучена. Поскольку многие из этих элементов относительно токсичны, внимание обычно акцентируют на их вредном воздействии на организм. Токсичные и малоизученные микроэлементы не входят в число эссенциальных микроэлементов. Поскольку макро- и микроэлементы имеют такое большое значение в деятельности живого организма, важно изучение химического состава пищевых продуктов, т.е. растений, являющихся их источником. Корни растения *Korolkovia Severzovii*, который мы изучаем, признан богатым источником как макро-, так и микроэлементов [5].

Ранее нами сообщалось, что растение *Korolkovia Sewerzowii*, принадлежащее к семейству *Liliaceae*, то есть луковых, в настоящее время именуется как *Fritillaria Sewerzowii*. Данные, из научных источников, показывают, что по всему миру насчитывается около 150 видов растений, относящихся к роду *Fritillaria*, из них 8 видов указаны в современной флоре Узбекистана. Местное название растения также соответствует смыслу названия нового рода, т.е. *Fritillaria (Korolkovia) sewerzowii*. Все 8 виды растений рода *Fritillaria*, произрастающих в Узбекистане, богаты различными химическими компонентами и имеют выраженное практическое значение [3; 9; 10]. Корень растения *Fritillaria Sewerzowii* используется в народной медицине для лечения гепатита. Наша главная цель – определить причину такой особенности растения путем анализа химического состава корня и надземной части растения, его научной интерпретации и разработка БАД.

Объект и методы исследования. Химические элементы, находящиеся в живых организмах, можно разделить на 3 важные категории в зависимости от процесса их воздействия на организм. Важные для

жизни, условно важные и вредные, которые довольно мало изучены. Третья категория токсичных и малоизученных включает в себя большую группу элементов, всегда присутствующих в организме в следовых количествах. Эти микроэлементы не входят в число незаменимых микроэлементов. В наших предыдущих статьях были проанализированы результаты изучения макро- и микроэлементов корней *Korolkovia Severzovii* [1; 5; 6]. В ходе дальнейших исследований изучен состав макро- и микроэлементов корней, листьев, стеблей и цветков *Fritillaria sewerzowii*.

Количество микро- и макроэлементов в подготовленной пробе определяли с помощью ИСП ОЭС Avio-200 в оборудовании Berghof в лаборатории Экспериментальной биологии Гулистанского государственного университета. Для подготовки пробы к анализу 0,1000 г образца количественно переносят в тefлоновые автоклавы. К нему добавляли 3 мл очищенной концентрированной азотной кислоты (HNO_3) и 2 мл очищенной перекиси водорода (H_2O_2). Горловину автоклава закрывали и помещали микро-волновый дезинтегратор Berghof (Speed Wave Xpert) или (аналогичную). В данном случае была дана команда на распаковку на основе конкретной программы в интерфейсе устройства. В этом методе количество указанных автоклавов, а также температура и давление внутри них автоматически контролируются устройством. Информация о процессе контролируется жидкокристаллическим дисплеем. Его проводили при влажном разложении в течение 35–45 мин. в условиях минимальной температуры Т (500 °С) и максимальной температуры Т (2300 °С), давления R max 40 (бар) внутри автоклавов.

Автоклавы охлаждали до комнатной температуры и находящуюся в них жидкую смесь разливали в мерные колбы вместимостью 50 или 100 мл (до метки). В этом случае автоклавы промывают 2–3 раза, а затем наполняют до линии колбы бидистиллированной водой. Раствор тщательно перемешивают, переливают в пробирку автосамплера и помещают на автосамплер в определенное пронумерованное место. В программе вводится положение каждой пробирки, изъятая масса и коэффициент разбавления. Это связано с тем, чтобы устройство могло автоматически рассчитать концентрацию.

Минерализованный раствор количественно анализируется с помощью масс-спектрометра ISP-MS (Nexion 2000) Perkin Elmer с индуктивно-связанной плазмой в сравнении со стандартным образцом, содержащим количество макро- и микроэлементов, солей тяжелых металлов и редких металлы. Можно использовать аналоговое устройство. Аналитические результаты автоматически рассчитывают значения прецизионности и стандартного отклонения (RSD) путем пересчета результатов на основе массы образца и значений разбавления в конце процесса.

Для нормального функционирования организма важны все микроэлементы, некоторые в меньшем количестве, а некоторые, например калий, нужны организму больше, чем железо или цинк. Калий отвечает за нормальное функционирование сердечно-сосудистой системы. Если не следить за содержанием калия в пище, результатом могут стать проблемы с сердцем вплоть до инсульта. Недостаток калия в организме приводит к снижению артериального давления и увеличению количества холестерина в крови. Могут развиваться сердечно-сосудистые и психические заболевания. Кости становятся хрупкими, ухудшается функция почек. Поэтому любые пищевые добавки, приготовленные из растения *Fritillaria severzovii*, оказывают положительное воздействие на организм и предотвращают вышеперечисленные заболевания. Фосфор присутствует в живых клетках в виде орто- и пирофосфорных кислот, входит в состав нуклеотидов, нуклеиновых кислот, фосфопротеинов, фосфолипидов, коферментов и ферментов. Кости человека состоят из гидроксилатапата $3\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2 \cdot \text{Ca}(\text{OH})_2$. Зубная эмаль состоит из фтор-апатита. Печень играет основную роль в обмене соединений фосфора у человека и животных.

Недостаток магния, который важен для сердца, мышц, синтеза белка, улучшения работы кишечника и проведения нервных импульсов, вызывает сердечно-сосудистые заболевания, метаболические синдромы (ожирение, гипертония, диабет, ишемическая болезнь сердца). Его прием нормализует уровень инсулина, глюкозы и гемоглобина. Следует признать, что корневая часть растения *Fritillaria Severzovii* богата магнием и используется при лечении диабета, а также гепатита в народной медицине.

Корень *Fritillaria severzovii* используется в народной медицине для лечения заболеваний печени [4; 7]. Высокое количество элемента фосфора в цветке растения свидетельствует об актуальности готовящегося БАД.

Результаты исследования и их обсуждение

Весной 2022 года в Институте биоорганической химии Академии наук Республики Узбекистана был проведен анализ состава макро- и микроэлементов в образцах корней *Fritillaria Severzovii*, собранных в Ангренских горах Ташкентской области. Весной 2023 года все образцы растения *Fritillaria Severzovii*, собранные в окрестностях села Эрташ, расположенного в Ангренских горах Ташкентской области, были проанализированы на состав макро- и микроэлементов. Исследование проводилось в лаборатории экспериментальной биологии Гулистанского государственного университета. Выборки элементов в этом исследовании были немного небольшими, но достаточными для получения основных данных и сравнения. В качестве примера приведем спектры серы и магния (рис.1).

Достаточное количество меди и цинка, и особенно железа, из важных для жизни микроэлементов, свидетельствует о важности и актуальности изучаемого ресурса. В то же время к вредным и малоизученным микроэлементам относятся такие элементы, как барий, олово, свинец и серебро, и их количество находится ниже норм (таблица 1). Поэтому, нами продолжено комплексное изучение объекта исследования – *Fritillaria Severzovii*.

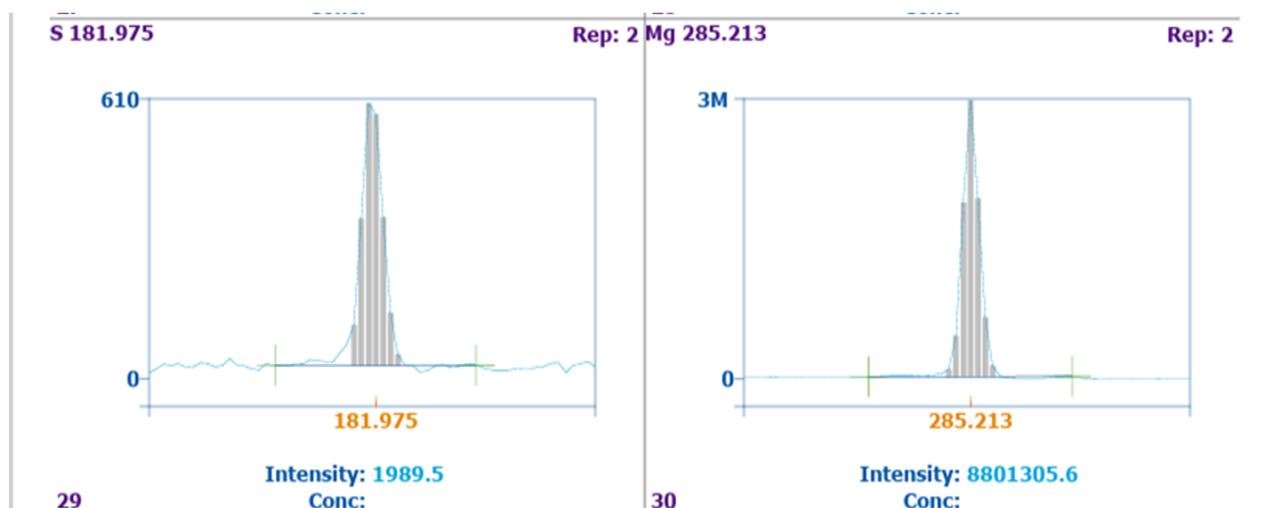


Рисунок 1. Спектры S и Mg в образцах *Fritillaria severzovii*

Таблица 1.

Макро- и микроэлементы корней и надземной части *Fritillaria severzovii*

№	Химические элементы	Длина волн, нм	Образцы органов растений, mg/10 г			
			Q1 корни	Q2 стебли	Q3 листья	Q4 цветки
1	Li	670.784	0,035	0,014	0,021	0,013
2	Sb	206.836	0	0	0	0
3	Sn	283.998	0	0,008	0	0,007
4	K	766.490	153,355	179,691	375,777	393,446
5	Ba	233.527	0,583	0,327	0,149	0,029
6	Cr	267.716	0,050	0,036	0,029	0,018
7	Mn	257.610	1,232	0,174	0,411	0,226
8	B	249.677	0,119	0,089	0,211	0,111
9	As	193.696	0	0	0	0,013
10	Na	589.592	1,837	2,954	1,332	1,637
11	Pb	220.353	0,095	0,036	0,043	0,008
12	Cd	228.802	0,010	0,008	0	0,001
13	Zn	206.200	0,479	0,328	0,256	0,526
14	Cu	327.393	0,104	0,055	0,045	0,062
15	Ca	317.933	37,78	33,06	45,21	5,64
16	Fe	238.204	16,286	27,575	0,175	0
17	As	193.696	0	0	0	0,013
18	Ag	328.068	0	0	0	0
19	Hg	253.652	0	0	0	0
20	Co	228.616	0,003	0	0	0
21	P	213.617	12,643	8,115	8,987	38,689
22	S	181.975	0,528	0,174	0,474	1,033
23	Mg	285.213	12,970	4,063	11,638	8,742

Выводы. Результаты анализа макро- и микроэлементов из всех органов растения *Fritillaria Severzovii* показывают, что количество таких макроэлементов, как калий, кальций, магний и железо, относительно выше во всех частях растения. Видно, что количество калия уменьшается по мере его продвижения от корня к стеблям, от листа к цветку. Элементы кальций и магний имеют большее содержание в корне и листе растения, по сравнению со

стеблем и цветком. Однако количество железа уменьшается по мере перехода от корня к листу, и в цветке растения оно вообще не обнаруживается. В составе растения отсутствуют вредные для организма человека сурьма, олово, мышьяк и ртуть, напротив, элемента магния в корневой части растения достаточно, что доказывает актуальность научной работы над изучаемым объектом исследования.

Список литературы:

1. Исроилова Х.В., Умархонов Х.В., Хўжаева Н.Т., Абдуганиев Б.Ё. Анализ макро и микроэлементов из корней KOROLKOVA SEWERZOWII // Международный молодежный форум «Парадигмы естественно научного образования и наука в целях устойчивого развития». – Казгистан – 24. 11. 2022. – С. 7-9.
2. Кукушкин Ю.Н. Химические элементы в организме человека // Соросовский образовательный журнал. – № 5. – 1998. – С. 54–59.
3. Пратов У.П., Одилов Т.О. Ўзбекистон юксак ўсимликлари оилаларининг замонавий тизими ва ўзбекча номлари. – Тошкент, 1995. – 396 с.

4. Хўжаева Н.Т., В.У. Хўжаев, ҚўРҒОШИН ГУЛ KOROLKOVIA SEWERZOWII ўсимлиги таркибидаги флавоноидлар ва витаминлар тахлили // Товарлар кимёси ҳамда халқ табобати муоммолари ва истиқболлари. – Том 2. – № 1. – 2023. – 288–299 бетлар.
5. Хўжаева Н.Т., Исроилова Х.В. ва Абдуганиев Б.Ё. Korolkowia sewerzowii ўсимлигининг алкалоидлари ва уларни физиологик фаолликлари // Кимё ва кимё таълими муаммолари республика илмий амалий анжумани. – Қўқон, 2022 йил 20-сентябрь 308–310 бетлар.
6. Хўжаева Н.Т., Хўжаев В.У., Абдуганиев Б.Ё. KOROLKOVIA SEWERZOWII ўсимлигининг ер ости қисмидаги кимёвий компонентларини аниқлаш // ҚўқонДПИ илмий хабарлари 2023 йил. – № 3. – сон 236–240 бетлар.
7. Хўжаева Н.Т., Хўжаев В.У., Умархонов Х.В. Количественное содержание флавоноидов в корнях растения KOROLKOVIA SEWERZOWII // Биоорганик кимё ривожининг долзарб муоммолари халқаро илмий анжуман. – Тошкент –2023 йил. – 13–14 ноябр.
8. Хўжаева Х.В., Исроилова Х.В., Абдуганиев Б.Ё. KOROLKOVIA SEWERZOWII ўсимлигининг биологик таснифи ва кимёвий таркиби тахлили // Товарлар кимёси ҳамда халқ табобати муоммолари ва истиқболлари IX – халқаро илмий ва амалий конференция. – Андижон, 2022й. 14–15 сентябр, 199–201 бетлар.
9. Шретер А.И., Крилова И.Л., Борисова Н.А. Методика определения запасов сырья лекарственных растений. – М., 1986.
10. Юнусов С.Ю. Алкалоиды. – 3-е изд. – Ташкент, 1981.
11. Freitas Jr., Robert A. Nanomedicine (итал.). – Landes Bioscience, 1999. – С. Tables 3–1 & 3–2.
12. Kaim W., Schwederski B. Bioinorganic Chemistry: Inorganic Elements in the Chemistry of Life. – Chichester: John Wiley and Sons, 1994. – 401 p.

ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16591

СРАВНЕНИЕ ГЛБ И ПОВЕРХНОСТНОЙ АКТИВНОСТИ НЕИОНОГЕННЫХ
ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ПРИРОДНЫХ МАСЕЛ**Болтаева Гулсанам Хасановна**

соискатель,
Национальный университет Узбекистана,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: hgulsanam@gmail.com

Очилов Акбаржон Мамаюнович

аспирант,
Наманганский инженерно технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Наманган
E-mail: ochilovakbarjon95@gmail.com

Абдикамалова Азиза Бахтияровна

д-р хим. наук,
Институт общей и неорганической химии,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: aziza.abdik@gmail.com

Кодиров Орифжон Шарипович

канд. фармацевт. наук,
Национальный университет Узбекистана,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: oqsh@bk.ru

Нурманов Суванкул Эрхонович

д-р техн. наук,
Национальный университет Узбекистана,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: nurmonov_se@mail.ru

Эшметов Иззат Дусимбатович

д-р хим. наук,
Институт общей и неорганической химии,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: Izzat.dusimbatovich@gmail.com

COMPARISON OF HLB AND SURFACE ACTIVITY OF NONIONIC SURFACTANTS
FROM FATTY ACIDS OF NATURAL OILS**Gulsanam Boltaeva**

Applicant,
National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Akbarzhon Ochilov

Postgraduate,
Namangan Institute of Engineering and Technology,
Republic of Uzbekistan, Namangan

Aziza Abdikamalova

*Doctor of Chemistry,
Institute of General and Inorganic Chemistry,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Orifjon Kodirov

*Candidate of Pharmaceutical Sciences,
National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Suvankul Nurmanov

*Doctor of Technical Sciences,
National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Izzat Eshmetov

*Doctor of Technical Sciences,
Institute of General and Inorganic Chemistry,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

АННОТАЦИЯ

В данной статье представлены результаты исследования гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) и поверхностной активности неионогенных поверхностно-активных веществ (ПАВ), синтезированных из жирных кислот различных природных масел. Статья освещает экспериментальные методы извлечения жирных кислот и их взаимодействия с диэтаноламином для создания эффективных ПАВ. Результаты исследования предоставляют новые сведения о свойствах и потенциальном применении неионогенных ПАВ, что может оказаться полезным в различных промышленных областях, включая косметическую, фармацевтическую и химическую промышленность.

ABSTRACT

This article presents the results of a study of the hydrophilic-lipophilic balance (HLB) and surface activity of nonionic surfactants synthesized from fatty acids of various natural oils. The article highlights experimental methods for extracting fatty acids and their interaction with diethanolamine to create effective surfactants. The study results provide new insights into the properties and potential applications of nonionic surfactants, which may be useful in a variety of industrial applications, including cosmetics, pharmaceuticals and chemicals.

Ключевые слова: неионогенные поверхностно-активные вещества, жирные кислоты, диэтаноламин, критическая концентрация мицеллообразования, ПАВ.

Keywords: nonionic surfactants, fatty acids, diethanolamine, critical micelle concentration, surfactant.

Введение

В последние десятилетия наблюдается возрастающий интерес к изучению и разработке экологически безопасных и биоразлагаемых неионогенных поверхностно-активных веществ (ПАВ), производных жирных кислот природных масел. Эти соединения представляют собой значительный интерес для широкого спектра промышленных приложений, включая косметику, фармацевтику, пищевую промышленность и нефтегазовую отрасль. Основным параметром, определяющим эффективность и область применения ПАВ, является их гидрофобно-липофильный баланс (ГЛБ), который напрямую влияет на поверхностные и коллоидно-химические свойства этих соединений[1-3].

Данная статья посвящена сравнительному анализу ГЛБ и поверхностной активности неионогенных ПАВ, синтезированных из различных жирных кислот природных масел. Основное внимание уделяется изучению влияния структурных особенностей жирных кислот на ГЛБ и поверхностные

свойства получаемых из них ПАВ. В работе рассматриваются такие ключевые аспекты, как методы синтеза ПАВ, их характеристики, поверхностное натяжение растворов и их способность к образованию мицелл[4, 5].

Исследование направлено на получение глубокого понимания взаимосвязи между химической структурой жирных кислот и функциональными свойствами производных ПАВ, что важно для разработки новых эффективных и экологически безопасных ПАВ для различных промышленных приложений.

Экспериментальная часть

В процессе получения ПАВ в качестве исходных материалов применялись различные растительные масла, включая подсолнечное, хлопковое и кокосовое, а также животные жиры, такие как курдючный и внутренний жиры. Использованный диэтаноламин, соответствует ТУ 2423-178-00203335-2007, характеризуется как вязкая прозрачная жидкость с массовой долей активного вещества не менее 98,0%

и показателем преломления n_D^{20} , находящимся в диапазоне 1,476-1,478.

В дополнение к этому, для реализации определенных этапов процесса использовались гидроокись натрия (Florida Laboratories) с массовой долей не менее 99,0% и серная кислота (Sigma Aldrich) с концентрацией 95,5%, KCl 99,9% по DIN ISO 9001.

Для получения жирных кислот из животного жира был выполнен следующий процесс. Сначала растворили 95,1 г NaOH в 1000 мл воды и нагрели до 70 °С. После этого добавили 740 г жира и продолжили нагревание с интенсивным перемешиванием на протяжении 6 часов. Затем приготовили 20%-ный раствор серной кислоты из 122,0 г концентрированной серной кислоты и 461,0 г воды.

Для обратного превращения мыла в жирные кислоты использовали 583,0 г этого раствора. Процесс завершили, когда лакмусовая бумага показала красный цвет.

Реакция между диэтаноламином и жирными кислотами проводилась в безрастворительной си-

стеме при соотношении 1:1. Добавили 3% катализатора Al_2O_3 от массы жирных кислот и провели реакцию в круглодонной колбе в атмосфере азота. Смесь нагревали до 70 °С на 30 минут, затем до 140 °С, перемешивая при 200 об/мин. Реакция длилась 3 часа. Выход продукции составил 93-97%.

Синтезированные ПАВ были условно названы, соответственно SSUNO, SCOTO, SCOCO, STAIF, SCAUF для ПАВ полученных на основе подсолнечного, хлопкового, кокосового масел и курдючного и внутреннего жира, соответственно.

Для определения ГЛБ синтезированных ПАВ было проведено исследования по данным [6, с 30-33]. Определение поверхностного натяжения ПАВ проводилось по методу Дью Нуи (метод отрыва кольца) [7, с 354-366].

Результаты и обсуждение

На основе экспериментальных исследований были получены значения ГЛБ для синтезированных ПАВ, которые приводятся в табл. 1.

Таблица 1.

Значения ГЛБ и молекулярной массы синтезированных ПАВ

ПАВ	ГЛБ		Молекулярная масса
	Экспериментальное	Расчётное	
SSUNO	15.6	15.9	368.1
SCOTO	15.0	15.1	361.6
STAIF	14.8	14.6	360.9
SCAUF	14.9	14.5	361.1
SCOCO	9.9	9.4	308.8

Для всех изученных ПАВ наблюдается хорошее согласие между экспериментальными и расчётными значениями ГЛБ. Это указывает на достоверность экспериментальной методики и на то, что использованные теоретические подходы для расчёта ГЛБ адекватно отражают реальные свойства ПАВ.

Значения ГЛБ для большинства ПАВ находятся в диапазоне от 14.5 до 15.9, за исключением SCOCO, который имеет значительно более низкое значение ГЛБ (9.4-9.9). Это может указывать на различие в гидрофобных и гидрофильных свойствах SCOCO по сравнению с другими изученными ПАВ. Низкие значения ГЛБ обычно свидетельствуют о более высокой гидрофильности ПАВ.

Молекулярные массы ПАВ варьируются в пределах от 308.8 до 368.1. SCOCO, который имеет наименьшее значение ГЛБ, также обладает наименьшей молекулярной массой. Это может указывать на корреляцию между структурными особенностями

молекулы ПАВ (которые влияют на молекулярную массу) и их гидрофильно-гидрофобными свойствами.

Значения ГЛБ и молекулярные массы синтезированных ПАВ предоставляют важную информацию об их химической структуре и потенциальных применениях. ПАВ с более высоким ГЛБ, как правило, обладают более сильными гидрофобными свойствами и, следовательно, могут быть более эффективными в таких приложениях, где требуются повышенные гидрофобные взаимодействия, например, в эмульсионных системах. ПАВ с более низким ГЛБ, такие как SCOCO, могут быть предпочтительны в приложениях, требующих более высокой гидрофильности, например, в системах для повышения смачивания или диспергирования.

Кривая зависимости поверхностного натяжения от концентрации растворов синтезированных ПАВ с концентрацией от 0 до 2% по массе изображена на рис. 1.

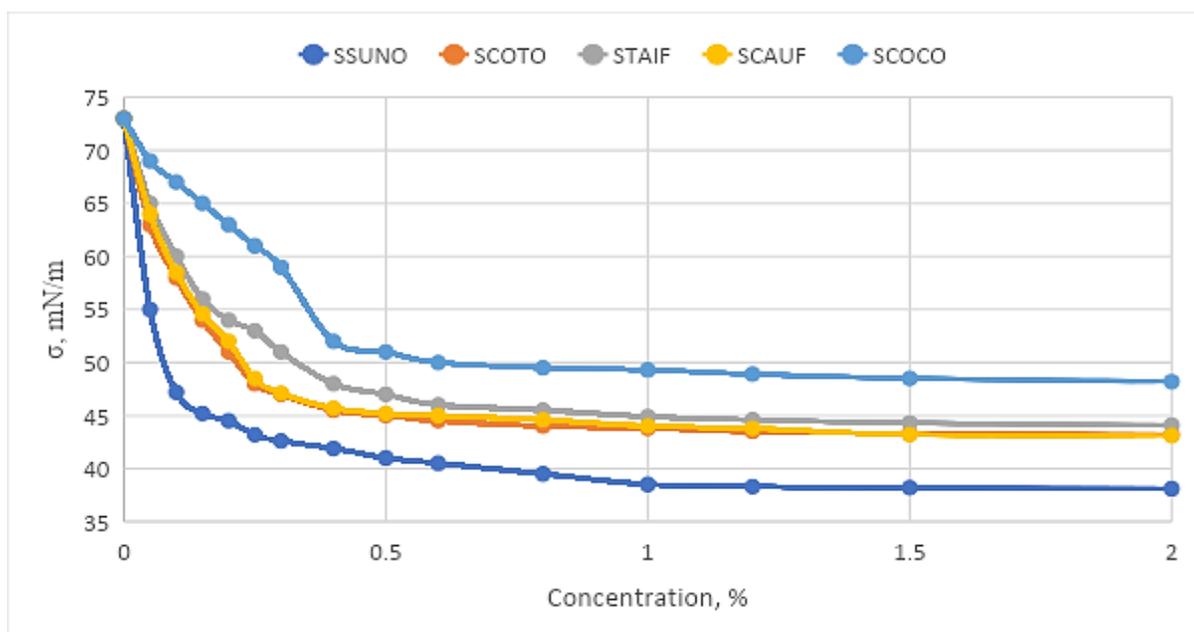


Рисунок 1. Изменение поверхностного натяжения растворов ПАВ (25°C)

График, представленный на рисунке 1, показывает постепенное уменьшение поверхностного натяжения воды с повышением концентрации ПАВ. Это снижение связано с усиленной адсорбцией молекул ПАВ на границе вода-воздух, в результате чего поверхностное натяжение стабилизируется на уровне 38.1, 43.2, 44.1, 43.1 и 48.2 мН/м для SSUNO, SCOTO, STAIF, SCAUF и SCOCO, соответственно.

Среди исследованных соединений SCOCO показывает самое высокое значение поверхностного натяжения, подчеркивая важность размера гидрофобной алкильной цепи в контексте ее воздействия на снижение поверхностного натяжения. Экспериментальные данные также показывают, что с увеличением длины алкильной цепи наблюдается снижение поверхностного натяжения, что свидетельствует о влиянии длины цепи на свойства ПАВ.

Поверхностное натяжение и критическая мицеллярная концентрация (КМЦ) синтезированных

ПАВ уменьшаются с увеличением длины алкильной цепи, что подтверждает важность липофильно-липофильного баланса (ГЛБ). Высокий ГЛБ указывает на более сильную тенденцию амфифильных молекул к уменьшению поверхностного натяжения системы. В результате, синтезированное ПАВ SSUNO демонстрирует наивысшую эффективность в снижении поверхностного натяжения, тогда как SCOCO показывает наименьшую способность в этом отношении.

Анализ связи между ККМ и другими свойствами ПАВ, такими как их способность к пенообразованию или стабильность пены, начинается с оценки ККМ для различных образцов ПАВ. Используя зависимость поверхностного натяжения от логарифма концентрации ПАВ в растворе, были определены значения ККМ (выраженные в мг/л) для каждого образца, которые представлены в табл. 2.

Таблица 2.

ККМ синтезированных ПАВ

Образец	SSUNO	SCOTO	STAIF	SCAUF	SCOCO
ККМ ₁	18,7	15,6	17,1	23,5	15,3
ККМ ₂	36,7	31,2	36,9	73,2	28,8

В таблице представлены два различных значения ККМ для каждого ПАВ. Исходя из таблицы, SCOCO показывает наименьшие значения ККМ₁ и относительно низкие значения ККМ₂, что может указывать на лучшую способность к мицеллообразованию в более разбавленных растворах по сравнению с другими ПАВ.

SCAUF демонстрирует самые высокие значения ККМ₁ и ККМ₂, что может свидетельствовать о том, что для образования мицелл требуется большая кон-

центрация ПАВ, возможно, из-за более высокой молекулярной массы или меньшей поверхностной активности.

Если предположить, что более низкие значения ККМ коррелируют с лучшими пенообразующими свойствами и более высокой поверхностной активностью, то можно ожидать, что SCOCO будет лучше всего работать как пенообразователь в растворах с низкой концентрацией, в то время как SCAUF может потребовать более высоких концентраций для достижения аналогичного эффекта.

Существует обратная зависимость между значениями ККМ и поверхностной активностью ПАВ: чем ниже ККМ, тем выше поверхностная активность и, соответственно, лучше пенообразующие и мицеллообразующие свойства ПАВ. Это подтверждается сравнением с характеристиками пенообразования и стабильности пены, представленными ранее. ПАВ с более низкими значениями ККМ обычно показывают лучшие результаты в флотационных процессах.

Заключение

Экспериментальные исследования показали, что синтезированные неионогенные поверхностно-активные вещества (ПАВ) демонстрируют различные значения гидрофильно-липофильного баланса (ГЛБ) и поверхностной активности, что коррелирует с их молекулярной массой и структурой.

Проведенное исследование критической концентрации мицеллообразования (ККМ) различных образцов ПАВ показало, что ККМ изменяется в зависимости от химической структуры и свойств ПАВ. Это дает возможность прогнозировать поведение ПАВ в различных системах и их применение в соответствии с потребностями.

Список литературы:

1. El-Shamy O.A.A., Khid T.T., Doheim M.M. (2011) Effect of ethoxylate chain length on the pour point depressant of middle distillate fuel oil. *J Dispers Sci Technol* 32:654–658.
2. Channouf R.B., Souissi N., Zanna S., Ardelean H., Bellakhal N., Marcus P. (2018) Surface characterization of the corrosion product layer formed on synthetic bronze in aqueous chloride solution and the effect of the adding of juniperuscommunis extract by X-ray photoelectron spectroscopy analysis. *Chem Afr* 1:167–174.
3. Khalfallah A. (2023). Structure and Applications of Surfactants. IntechOpen. doi: 10.5772/intechopen.111401.
4. Nagtode V.S., Cardoza C., Yasin H.K.A., Mali S.N., Tambe S.M., Roy P, Singh K., Goel A., Amin P.D., Thorat B.R., Cruz J.N., Pratap A.P. Green Surfactants (Biosurfactants): A Petroleum-Free Substitute for Sustainability-Comparison, Applications, Market, and Future Prospects. *ACS Omega*. 2023 Mar 24;8(13):11674-11699. doi: 10.1021/acsomega.3c00591. PMID: 37033812; PMCID: PMC10077441.
5. Kent, J.A. (2003). Soap, Fatty Acids, and Synthetic Detergents. In: Kent, J.A. (eds) *Riegel's Handbook of Industrial Chemistry*. Springer, Boston, MA. https://doi.org/10.1007/0-387-23816-6_27.
6. Кузнецов С.А., Кольцов Н.И. Определение гидрофильно-липофильного баланса ПАВ на основе растительных масел и полиэтиленгликолей // *Вестник ЧувГУ*. 2006. №2. С. 30-33.
7. Lunkenheimer K., Wantke K.D. Determination of the surface tension of surfactant solutions applying the method of Lecomte du Noüy (ring tensiometer). *Colloid & Polymer Sci* 259, 354–366 (1981). <https://doi.org/10.1007/BF01524716>.

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ**ТЕРМОДИНАМИКА АДСОРБЦИИ МОЛЕКУЛЫ Н-ГЕПТАНА ГИБРИДНЫМ
БИОНАНОКОМПОЗИТОМ ДИАЦЕТАТЦЕЛЛЮЛОЗА-КРЕМНЕЗЕМ****Яркулов Ахрор Юлдашевич**

д-р хим. наук,
доц. кафедры физической химии,
Национальный университет Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент
E-mail: a.yarkulov80@gmail.com

Сагдуллаев Бахтияр Убайдуллаевич

доцент
кафедры физической химии
Национального университета Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Акбаров Хамдам Икромович

д-р хим. наук, профессор,
зав. кафедры физической химии
Национального университета Узбекистана
имени Мирзо Улугбека
Республика Узбекистан, г. Ташкент

**THERMODYNAMICS OF ADSORPTION OF N-HEPTANE MOLECULES
BY HYBRID BIONANOCOMPOSITE DIACETATECELLULOSE-SILICA****Akhror Yarkulov**

DSc, docent of the Physical chemistry
Chair of Mirzo Ulugbek National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Baxtiyor Sagdullaev

Docent of the Physical chemistry
Chair of Mirzo Ulugbek National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Khamdam Akbarov

DSc, professor, Physical chemistry head
of Chair of Mirzo Ulugbek National University of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

АННОТАЦИЯ

Исследованы изотерма, термокинетика, энтропия адсорбции молекулы н-гептана при температуре 303 К на гибридном бионаноконпозите ДАЦ-кремнезем. Изотерма адсорбции характеризовалась трехчленным уравнением теории объемного заполнения микропор (ТОЗМ) от начальной части до насыщения, при замедлении начальной адсорбции исходных молекул н-гептана время установления равновесия составляло 5,5 часов, а конечное время равновесия составляло 0,5 часа. Кривая дифференциальной молярной энтропии показала, что молекулы паров н-гептана находятся в твердом состоянии в адсорбенте до 0,55 ммоль/г. При увеличении количества адсорбированных паров н-гептана (после 0,55 ммоль/г) установлено, что молекулы адсорбата подвижны на поверхности адсорбента.

ABSTRACT

Isotherms of adsorption, thermokinetics, entropy of adsorption of heptane molecules at 303 K on hybrid bionanocomposite diacetatecellulose-silica (DAC-silica) have been investigated. Isotherm of adsorption can be described by three-member equation of theory of volume filling of microspores (TVFM) from the initial part before filling, at deceleration of initial adsorption of n-heptane molecules final the time of equilibrium achievement was equaled 5,5h, and time of equilibrium was equaled 0,5h. On the base of curve of differential molar entropy has been shown that molecules of n-heptane are in solid state in adsorbent before 0,55 mmol/g. With an increase in the amount of adsorbed n-heptane vapor (after 0.55 mmol/g), it was found that the adsorbate molecules are mobile on the surface of the adsorbent.

Ключевые слова: диацетатцеллюлоза, кремнезем, n-гептан, бионаноконпозиция, адсорбция, изотерма, ТОЗМ, термокинетика, энтропия.

Keywords: diacetatecellulose, silica, n-heptane, bionanocomposition, adsorption, isotherm, TVFM, thermokinetics, entropy.

Введение

На сегодняшний день очень широки сферы применения полисахарид-кремнеземных нанокомпозитов, полученных золь-гель методом и применение которых рассматриваются как гибридные материалы нового поколения, как сорбенты, сенсоры, мембраны в оптике, электронике, энергетике, при очистке сточных вод от ионов тяжелых металлов, а также для медицинских целей [1-3]. Определение активных центров, прочности и энергетической природы адсорбентов остается одной из задач современной физической и коллоидной химии, особенно при изучении их пористых структур большое значение имеет изучение адсорбционных свойств [4-6].

Экспериментальная часть

Прецизионные адсорбционно-калориметрические исследования проводились на универсальной высоковакуумной объемной установке, позволяющей проводить дозировку адсорбата объемно-жидкостным методом и подключенным к нему изотермического дифференциального автоматического микрокалориметра типа Тиана-Кальве. Адсорбционные измерения проводились на универсальной высоковакуумной объемной установке, позволившей проводить адсорбционные измерения и дозировку адсорбата с высокой точностью. Перед началом опыта адсорбенты откачивались в течение 10 ч до высокого вакуума 10^5 - 10^6 Па [7].

Основное уравнение ТОЗМ выражает зависимость степени заполнения микропор $\theta = a/a_0$ от работы адсорбции

$$\theta = \exp \left[- \left(A / E \right)^n \right]; A = RT \ln P_i / P_i^0 \quad (1)$$

$$a = a_0 \exp \left[- \left(A / E \right)^n \right] \quad (2)$$

Это уравнение можно представить в линейной форме:

$$\lg a = \lg a_0 - \left(A^n / E^n \right) \quad (3)$$

где a_0 - предельная адсорбция, E и n константы.

Результаты и их обсуждение

На основе изучения адсорбционных свойств гибридных бионаноконкомпозитов ДАЦ-кремнезем, структуры пористости, количества активных центров (гидрофильных/гидрофобных), их сил и природы в высоковакуумном адсорбционном микрокалориметре получено много информации, которая служит для достижения практических и научных результатов. Как известно, гептан нормального строения (n-гептан – C_7H_{16} – неполярная молекула с линейным строением и дипольным моментом, равным нулю D) является одним из основных парафинов всех видов нефти. Поэтому изучение адсорбционных свойств адсорбента, полученного из молекулы n-гептана, имеет как практическое, так и теоретическое значение [8-10].

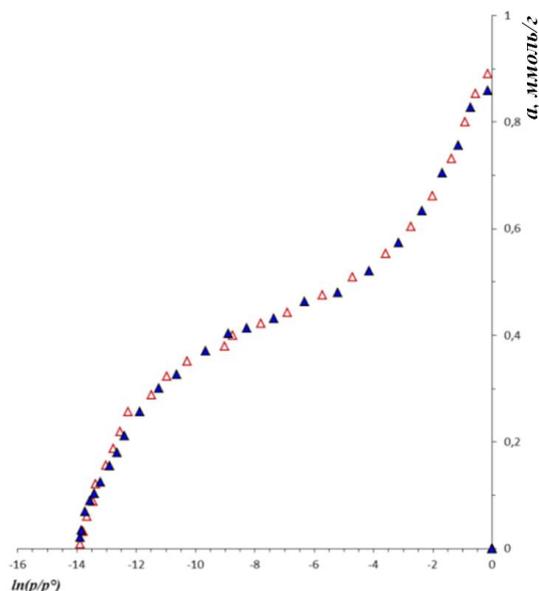


Рисунок 1. Изотерма адсорбции n-гептана на диацетатцеллюлоза-кремнеземном гибридном био-наноконпозиционном материале при 303К. Синие точки – рассчитаны с помощью ТОЗМ

На рис. 1 представлены изотермы адсорбции n-гептана на ДАЦ-кремнеземных гибридных бионаноконпозиционных материалах в полулогарифмических координатах. При относительно низких

давлениях изотерма н-гептана поднимается практически линейно до $\ln(p/p_0)=-11,78$, с увеличением давления изотерма имеет вогнутый вид, и достигает насыщения 0,89 ммоль/г. Полученную изотерму анализировали по уравнению теории объемного заполнения микропор [11]. Как видно из рисунка 1, значения, рассчитанные по этому уравнению, хорошо согласуются с экспериментальными результатами.

Изотерма адсорбции паров н-гептана хорошо описывается трехчленным уравнением согласно ТОЗМ:

$$a = 0,358 \exp [-(A/33,07)]^6 + 0,167 \exp [-(A/21,72)]^5 + 0,403 \exp [-(A/1,70)]^3$$

где: a – адсорбция в микропорах, ммоль/г; A – дифференциальная мольная работа адсорбции, кДж/моль; Параметры уравнения: доля первого члена $a_{01}=0,358$ ммоль/г, $E_{01}=33,07$ кДж/моль, $p_1=6$; доля второго члена $a_{02}=0,167$ ммоль/г, $E_{02}=21,72$ кДж/моль, $p_2=5$; доля третьего члена $a_{03}=0,403$ ммоль/г, $E_{03}=1,70$ кДж/моль, $p_3=3$.

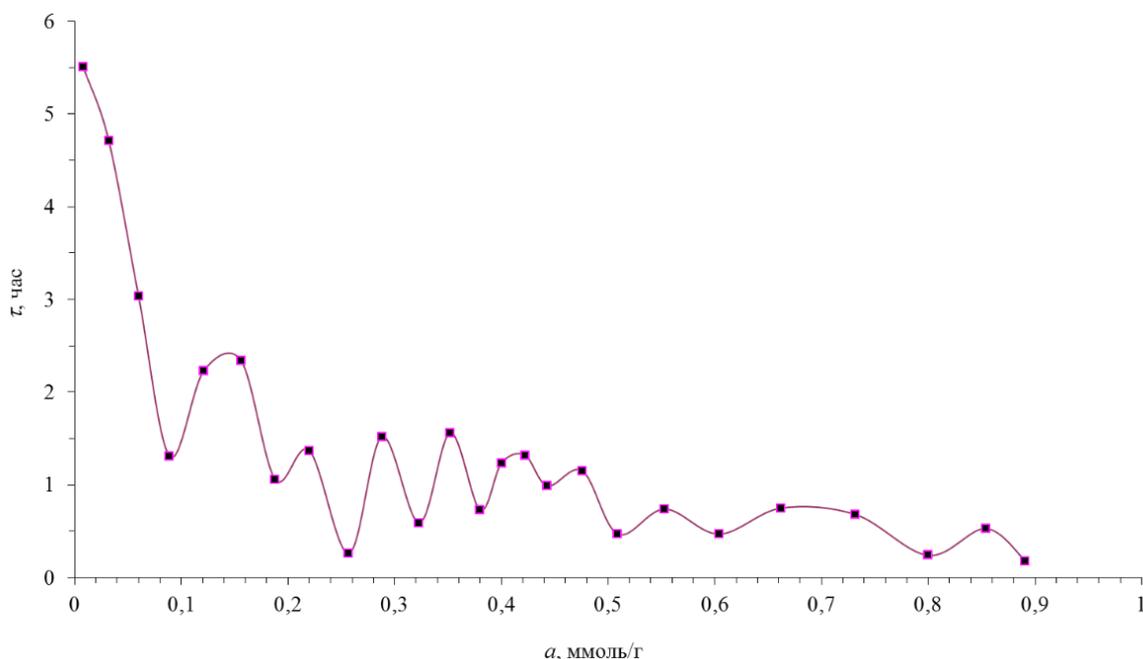


Рисунок 2. Время установления адсорбционного равновесия в зависимости от величины адсорбции паров н-гептана в гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем

Время установления равновесия составляло 5,5 ч при замедлении начальной адсорбции молекул н-гептана и уменьшалось до 1,3 ч при количестве адсорбата, равном 0,09 ммоль/г. Далее время установления адсорбционного равновесия меняется волнообразно и конечное время равновесия составляло 0,5 часа.

Известно, что при адсорбции молекул адсорбата для определения разности энергии взаимодействия активных центров адсорбента помимо теплоты адсорбции имеют значение и их энтропия. Энтропия представляет собой движение молекул адсорбата в

ТОЗМ показал, что адсорбция паров н-гептана на гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем в основном протекает в трех типах адсорбционных фаз. Трехчленное уравнение ТОЗМ показало, что в 1-й и 2-й адсорбционные фазы гибридного бионанокompозита ДАЦ-кремнезем содержат поры со сходной структурой пор, но с разной энергией. Адсорбция паров н-гептана на гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем в этих порах составляет около 38,6 % на первой адсорбционной фазе и около 18 % на второй адсорбционной фазе.

Другой важной характеристикой явления адсорбции является его кинетика. При этом исследуется время, за которое молекулы адсорбата, адсорбированные на адсорбенте, достигают равновесия. На рис. 2 показано, зависимость времени установления адсорбционного равновесия (τ) от количества адсорбции молекул н-гептана на гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем.

адсорбенте [12]. По уравнению Гиббса-Гельмгольца рассчитали дифференциальную мольную энтропию адсорбции (ΔS_d) паров н-гептана на гибридных ДАЦ-кремнеземных бионанокompозиционных материалах. На рис. 3 показано изменение дифференциальной энтропии при адсорбции пара н-гептана на гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем и ее зависимость от количества адсорбции (энтропия жидкого н-гептана считается равной нулю).

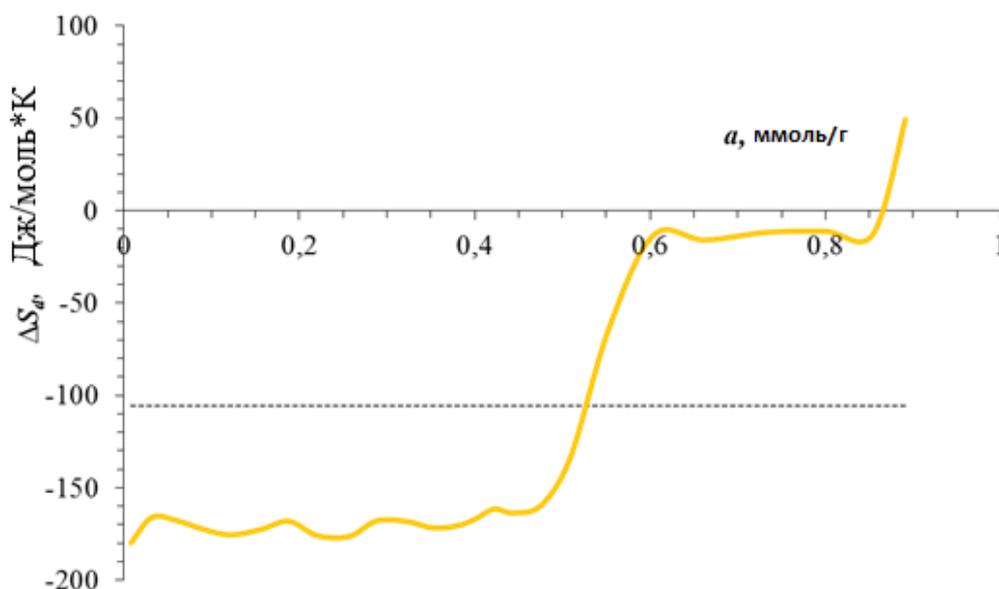


Рисунок 3. Дифференциальная энтропия адсорбции паров н-гептана на гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем при 303 К. Штриховая линия – средняя молярная интегральная энтропия. Энтропия жидкого н-гептана считается равной нулю

Средняя молярная интегральная энтропия паров н-гептана, адсорбированных на бионанокompозите ДАЦ-кремнезем составляет -105,6 Дж/моль·К. Кривая дифференциальной молярной энтропии показала, что молекулы паров н-гептана находятся в твердом состоянии в адсорбенте до 0,55 ммоль/г. При увеличении количества адсорбированных паров н-гептана (после 0,55 ммоль/г) установлено, что молекулы адсорбата подвижны на поверхности адсорбента.

Выводы

1. Исследованы изотермы и термокинетика адсорбции паров н-гептана гибридными ДАЦ-кремнеземными бионанокompозиционными материалами на прецизионной адсорбционной-калориметрической установке;

2. Изотерма адсорбции паров н-гептана были доказаны на основе трехчленных математических уравнений теории объемного заполнения микропор;

3. Термокинетика адсорбции паров н-гептана в ДАЦ-кремнеземных бионанокompозитах показывает, что время установления адсорбционного равновесия замедлено и доходит до 5,5 часов. Далее кривая термокинетики меняется волнообразно и при достижении равновесия устанавливается за 0,5 часа;

4. Кривая дифференциальной молярной энтропии показала, что состояние молекул паров н-гептана в гибридном бионанокompозите ДАЦ-кремнезем находится в стабильном состоянии до 0,55 ммоль/г. Установлено, что при увеличении количества адсорбированных паров н-гептана (после 0,55 ммоль/г) молекулы адсорбата подвижны на адсорбенте.

Список литературы:

1. Ahmed Salama. Polysaccharides/silica hybrid materials: New perspectives for sustainable raw materials // Journal of Carbohydrate Chemistry. -2016. V.35(3). -P. 131-149. DOI:10.1080/07328303.2016.1154152.
2. Yury Shchipunov, Irina Postnova. Cellulose Mineralization as a Route for Novel Functional Materials // Advanced functional Materials. -2018. -V.28(27). -P. 176-203. doi.org/10.1002/adfm.201705042
3. Vandana Singh, Preeti Srivastava, Angela Singh, Devendra Singh, Tulika Malviya. Polysaccharide-Silica Hybrids: Design and Applications // Journal of Polymer Reviews. -2016. -V.56(1). -P. 113-136. DOI: 10.1080/15583724.2015.1090449.
4. Sequeira S, Evtuguin D.V, Portugal I. Preparation and properties of cellulose/silica hybrid composites // Journal of Polymer Composites. -2009. -V.30(9). -P. 1275-1282. DOI:10. 1002/pc.20691
5. Sónia Sequeira, Dmitry V. Evtuguin, Inês Portugal, Ana P. Esculcas. Synthesis and characterisation of cellulose/silica hybrids obtained by heteropoly acid catalysed sol-gel process // Materials Science and Engineering: C. -2007. -V.27(1). -P. 172-179. DOI:10.1016/j.msec.2006.04.007
6. A.I. Suvorova, A.L. Suvorov, M.V. Ivanenko, E.I. Shishkin. Nanocomposite membrane films on the basis of ether of cellulose and tetraethoxysilan. Nanotechnologies in Russia 2009, № 4(1-2) P. 102-108. DOI:10.1134/S199507800901011X
7. Адсорбция неполярных и полярных молекул бионанокompозициями диацетатцеллюлоза-кремнезем// Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. Умаров Б.С. [и др.].2022.7(97).URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/14031>.

8. Inês Portugal, Vânia M. Dias, Rui F. Duarte, Dmitry V. Evtuguin. Hydration of Cellulose/Silica Hybrids Assessed by Sorption Isotherms // *J. Phys. Chem. B*. -2010. -V.114(11). -P. 4047-4055. DOI:10.1021 /jp911270y
9. Takeru Iwamura, Kenzo Akiyama, Taiki Hakozaiki, Masahiro Shino, Kaoru Adachi. Synthesis of cellulose/silica gel polymer hybrids via in-situ hydrolysis method // *Polymer Bulletin*. -2017. -V.74. -P. 4997–5009.
10. Hua Zou, Shishan Wu, Jian Shen. Polymer/Silica Nanocomposites: Preparation, Characterization, Properties, and Applications // *Chemical Reviews*. -2008. -V.108(9). -P. 3893-3957. DOI: 10.1021/cr068035q
- A. Yarkulov, B. Umarov, F. Rakhmatkariyeva, N. Kattaev, Kh. Akbarov, E. Berdimurodov. Diacetate Cellulose-Silicon Bionanocomposite Adsorbent for recovery of Heavy Metal ions and Benzene Vapours: An Experimental and Theoretical Investigation// *Biointerface Research in Applied Chemistry- Open-Access Journal (ISSN: 2069-5837)*. Volume 12, -Issue 3, -2022, -P. 2862-2880. doi.org /10.33263 /BRIAC123.28622880
11. A.Yu. Yarkulov, B.U. Sagdullayev, B.S. Umarov, F.G. Rakhmatkariyeva, Kh.I. Akbarov. Precision Adsorption–Calorimetric Investigations Of Thermodynamic Properties Of Hybrid Nanocompositions Of Diacetate Cellulose–Silica. *International Journal of Advanced Science and Technology* Vol. 29, №. 12s, (2020), P. 2936-2943. sersc. Org/journals/ index.php/IJAST/article/view/25024

PAPERS IN ENGLISH

BIOLOGICAL SCIENCES

GENERAL BIOLOGY

BOTANY

DOI - 10.32743/UniChem.2024.115.1.16600

BIOLOGY FLOWERING *Salvia officinalis* L. (LAMIACEAE)
IN THE CONDITIONS OF INTRODUCTION

Mekhriniso Nasriddinova
PhD in Biological Sciences,
Karshi State University
Republic of Uzbekistan, Karshi
E-mail: m.nasriddinova@mail.ru

БИОЛОГИЯ ЦВЕТЕНИЯ *Salvia officinalis* L. (LAMIACEAE)
В УСЛОВИЯХ ИНТРОДУКЦИИ

Насриддинова Мехринисо Рахматуллаевна
канд. биол. наук,
Каршинский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Карши

ABSTRACT

The article presents the results of studying the phenology and diurnal dynamics of flowering of *S. officinalis* in the conditions of the Karshi oasis. It was established that the plant entered the generative phase in the second year of vegetation in the conditions of the Karshi oasis, and that flowering lasted 52-59 days. The diurnal dynamics of flowering were studied, and it was observed that flowers open from 8:00 to 11:00 hours, and the peak of flowering occurs at 11:00 hours.

АННОТАЦИЯ

В статье представлены результаты изучения фенологии и суточной динамики цветения *S. officinalis* в условиях Каршинского оазиса. Установлено, что в генеративную фазу растение вступил на второй год вегетации в условиях Каршинского оазиса, что цветение длилось 52-59 дней. Изучена динамика суточного цветения, и наблюдали, что цветы раскрываются с 8⁰⁰ до 11⁰⁰ часов, а пик цветения наступает в 11⁰⁰ часов.

Keywords: medicinal sage, generative phase, flowering, petal, sepal, pistil, stamen, inflorescence, flowering dynamics.

Ключевые слова: шалфей лекарственный, генеративная фаза, цветение, венчик, чашечка, пестик, тычинка, соцветие, динамика цветение.

Introduction. *Salvia officinalis* L. – medicinal sage is a valuable medicinal plant, containing a large amount of essential oil and has long been used in medicine. Essential oils are collected in plant leaves from 1-2,5%, in the above-ground green parts and flowering branches from 0,32% to 0,40% [1, pp. 37-42; 2, pp. 63-68]. In medicine, the leaves of the plant are included in herbal teas used for inflammation of the throat, chest,

upper respiratory tract, stomach diseases, and diarrhea. In medicine, it is used as a disinfectant and anti-inflammatory agent [1, pp. 37-42; 3, pp. 215-221].

Considering its valuable medicinal properties and as an essential oil plant, it was introduced into the Botanical Garden of Uzbekistan, and was identified as a promising plant under these conditions [4, pp. 110-125].

In the conditions of the Karshi oasis, *S. officinalis* was first introduced in 2012 from seedlings grown in the conditions of the Tashkent Botanical Garden. Under these conditions, the seeds were planted in 2014 and its ontogeny was studied. The studies carried out showed that the plant went through all stages of ontogenesis in new conditions [5, pp. 6-8; 6, pp. 93-96]. The biology of flowering *S. officinalis* that went through a generative period in the conditions of the Karshi oasis was studied.

Flowering biology is a part of plant reproductive biology where it is important to study. The main phase of plant ontogenesis is the flowering phase. The flowering phase is an important system that shows the interdependence of all phenophases and the adaptation of the plant to a new environment [7, pp. 10-55].

Studying the biology of plant flowering under conditions of introduction allows us to characterize them ecologically and biologically [8, pp. 9-19]. Flowering and seed formation of a species introduced into new conditions are an important indicator of adaptation [9, pp. 20-40]. This plant blooms, produces seeds and leaves offspring in new conditions only if the requirements of the introduced species for environmental factors are adapted to the new conditions. Proof of this is scientific research conducted to study the biology of flowering of the species under conditions of introduction [3, pp. 215-221; 5, pp. 6-8; 10, pp. 7596-7602; 11, pp. 396-402].

Research methods. To study the diurnal flowering dynamics of *S. officinalis* in the conditions of the Karshi oasis, the number of flowers opening every 2 hours from 5:00 in the morning to 19:00 in plants of the generative phase was counted, the number of open flowers during the day and the time of oblique flowering on one plant, during beginning, mass and end of flowering [10, pp. 9-19]. The morphological features of the flower are given according to generally accepted criteria [12, 352 p]. The results were analyzed statistically [13, 424 p].

Research results. *S. officinalis* flowers are bisexual, blue-violet, zygomorphic. The flowers are collected in a panicle formed at the tips of the main and lateral branches. The flowers are located on the axis of the inflorescence with pedicels covered with glandular hairs and 7,03±0,32 mm long. The sepals are deep, five-toothed, green, covered with glandular hairs. The sepals do not

fall off and remain until the fruit ripens. The petals are bluish-violet, two-lipped, the upper lip consists of two petals, the lower one - of three petals bent downwards. Pistil 1, apex of stigma bilobed, ovary superior, four-locular, green. The flower has 2 stamens attached to the tapered base of the corolla. The stamen filaments return from the base, the upper part is arched, white, smooth. Anther slightly bent.

When formed, plant buds are initially very small (2,0-3,0 mm). After 10-12 days, the buds open, the buds grow to 7,09±0,33 mm, the upper part of the sepals opens, and the petals begin to appear between the teeth of the sepals. At first, the petals are light purple, and when the bud fully opens, they become blue-violet. The buds ready to open during flowering are larger than others. Flower opening was observed when the plant buds were fully formed, when the sepal length was 9,02±0,27 mm, the petal length was 13,9±0,33 mm. A fully opened flower has petals twice as long as the sepals, length 18,2±0,59 mm. Flower opening occurs acropetally. Plant flowers are pollinated by entomophiles, mainly with the help of representatives of the bee family. The fruit is a coenobium, consisting of a nut formed by the growth of 4 sepals (Fig. 1).

According to the research conducted, the formation of generative organs was observed in *S. officinalis* in the second year of the growing season in the conditions of the Karshi oasis. In the second year of the growing season, the plant produces 8-10 flowers, in the third year – 150-200, in the fourth year – 120-180 [5, pp. 6-8]. The flowers are arranged in 6-7 rings on the axis of the inflorescence, with up to 10-16 flowers in one ring. Research has shown that one *S. officinalis* flower blooms for 2-3 days, one inflorescence blooms for 10-15 days, and one plant blooms for 52-59 days. *S. officinalis* is a light-loving plant, and the plant can be classified as a group of plants whose flowers open during the day [8, pp. 9-19; 14, pp. 548-557].

In our studies, the beginning of flowering occurred mainly in the first ten days of April, and mass flowering occurred in the period from the second ten days of April to the second ten days of May. The flowering period lasts 52-59 days, mass flowering is observed 8-10 days after the flowers begin to open (Table 1).

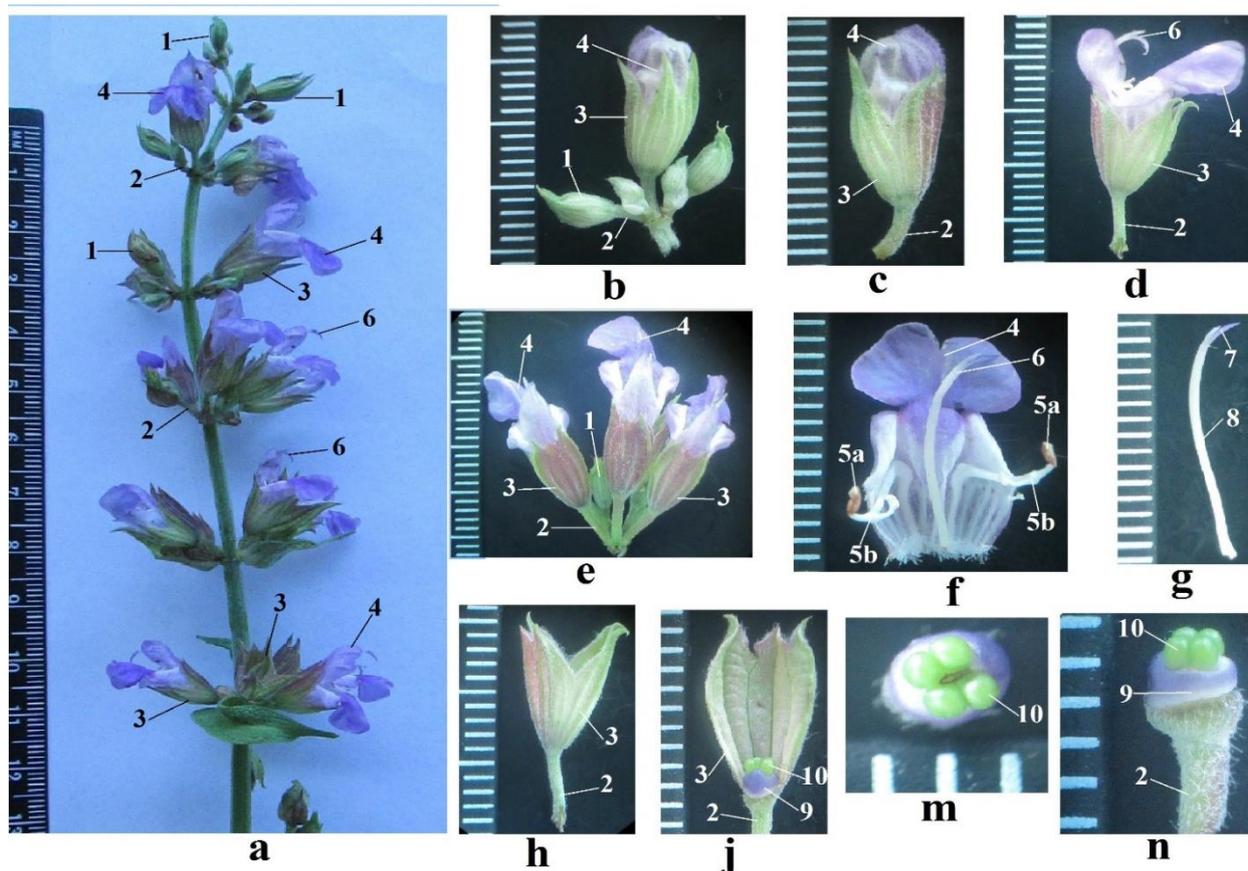


Figure 1. Inflorescence and flower *S. officinalis*: a – fragment of paniculate inflorescences; b – small inflorescences in bud state; c – the bud is ready to open; d – fragments of flowers; e – small inflorescence in open state; f – longitudinal section of a flower; g – fragment of pistil; h – fragment of sepal; j – longitudinal section of a sepal; m, n – ovary; 1 – bud; 2 – peduncle; 3 – sepal; 4 – petal; 5 – stamen (5a – anther, 5b – filament); 6 – pistil; 7 – stigma; 8 – style; 9 – ovary; 10 – ovule.

Table 1.

Phenology of flowering *S. officinalis* in the conditions of the Karshi oasis

Observed years	Budding	Flowering period			
		beginning of flowering	mass flowering	end of flowering	duration (days)
2015	03.04	13.04	21.04–19.05	04.06	52
2016	27.03	05.04	18.04–20.05	02.06	58
2017	29.03	08.04	17.04–22.05	06.06	59

The diurnal dynamics of *S. officinalis* flowering were studied in the third year of plant growing season (2016) (Table 2). To do this, the number of open flowers in each bush was counted.

At the beginning of flowering, when the dynamics of daily flowering is observed, at 5:00 o'clock in the morning the air temperature is +8°C, the relative humidity air is 56%, not a single flower has blossomed on the plant. At 7:00 o'clock the temperature is +10°C, the relative air humidity is 55%, the plant has 17 flowers,

at 9:00 o'clock the air temperature is +11°C, the relative air humidity is 51%, 23 flowers, at 11:00 the air temperature is +15°C, the relative air humidity is 48%, 26 flowers, at 13:00 the air temperature is +18°C, the relative air humidity is 46%, 9 flowers, at 15:00 the air temperature is +19°C, the relative air humidity is 30%, 15 flowers, at 17:00 the air temperature is +17°C, the relative air humidity is 42%, 7 flowers, have blossomed. During the day 97 flowers bloomed on one plant (Fig. 2).

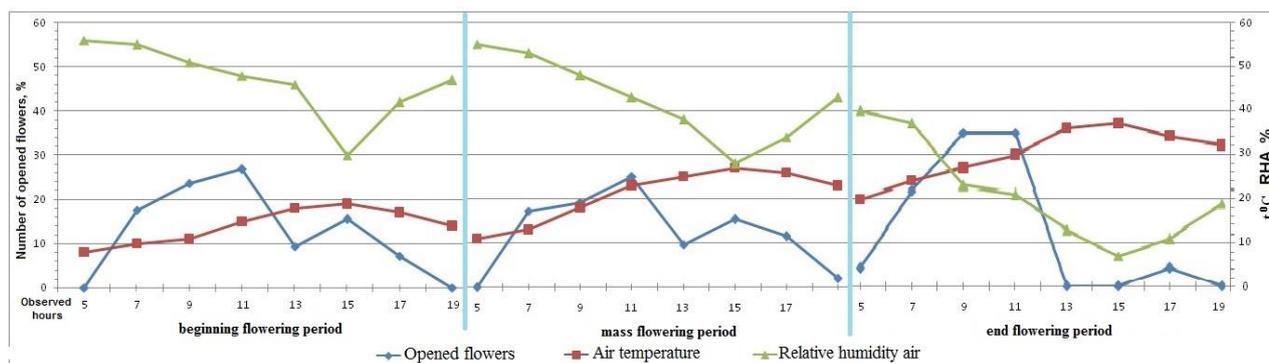


Figure 2. Diurnal dynamics of flowering of *S. officinalis* in the conditions of the Karshi oasis

During the period of massive flowering, 81 flowers bloomed at 6:00-7:00 o'clock in the morning at an air temperature of +13°C, a relative humidity of 53%. At 9:00 o'clock the air temperature was +18°C, relative humidity air 48%, 90 flowers, at 11:00 the air temperature was +23°C, relative humidity air 41%, 117 flowers, at 13:00 the air temperature was +25°C, the relative air humidity 37%, blooming of 45 flowers, 15:00 the air temperature was +27°C, the relative air humidity 28%, blooming of 72 flowers, 17:00 the air temperature was +26°C, the relative air humidity 34%, blooming of 54 flowers, 19:00 the air temperature was +23°C, the relative air humidity 43%, blooming of 9 flowers, was observed. During the period of massive flowering, 468 flowers bloomed on one plant during the day (Fig. 2).

At the end of the *S. officinalis* flowering during the day from 5:00 to 13:00 hours, only 22 flowers opened. During the hottest time of the day, from 12:00 to 16:00, the flowers did not open; only one flower opened at 17:00. At the end of the entire day's flowering, 23 flowers opened, with the most opened flower occurring at 9-11 o'clock. At this time, the air temperature was +30°C, the relative air humidity was 21% (Fig. 2).

In our studies, it was noted that the daily operating time lasts from 7:00 to 19:00 hours. During the day, the beginning of flowering, mass flowering and at the end of flowering, the most opened flower was observed from 8:00 to 11:00 o'clock, and the flowering process reached its peak at 11:00 o'clock (Table 2).

Table 2.

Diurnal flowering dynamics *S. officinalis*

Flowering period	Opened flowers	Observed hours								In a day
		5 ⁰⁰	7 ⁰⁰	9 ⁰⁰	11 ⁰⁰	13 ⁰⁰	15 ⁰⁰	17 ⁰⁰	19 ⁰⁰	
Beginning 10.04.2016	number	–	17	23	26	9	15	7	–	97
	%		17,5	23,7	26,8	9,3	15,5	7,2		100
Mass 25.04.2016	number	–	81	90	117	45	72	54	9	468
	%		17,3	19,2	25	9,6	15,4	11,5	2	100
End 27.05.2016	number	1	5	8	8	–	–	1	–	23
	%	4,3	21,8	34,8	34,8			4,3		100

Conclusion. According to the results of our observations, *S. officinalis* entered the generative phase in the second year of vegetation in the conditions of the Karshi oasis, the flowering duration was 52-59 days. In one plant, at the beginning of flowering, up to 97 flowers bloom during the day, up to 468 in mass flowering and

up to 23 at the end of flowering. Flowers bloom in large numbers between 8⁰⁰ and 11⁰⁰ hours (air temperature +15+20°C, relative humidity air 45-50%), and at 9⁰⁰ hours flowering reaches its peak. It has been established that the flowers of *S. officinalis* belong to the group of plants that bloom during the day.

References:

1. Baykova E.V., Korolyuk E.A., Tkachev A.V. Component composition of essential oils of some species of the genus *Salvia* L. grown in the conditions of Novosibirsk (Russia) // Chemistry of plant raw materials, 2002. – No. 1. pp. 37-42. [In Russian].
2. Gorlacheva Z.S., Kustova O.K. Phenotypic variability of morpho-biological features of *Salvia officinalis* L. during introduction // Introduction of plants. – 2013. – No. 2. pp. 63-68. [In Russian].
3. Dzhambetova M.U., Batukaev A.A., Biology of the development of *Salvia officinalis* during introduction in the conditions of the Chechen Republic // "Bulletin of ChSU" Grozny, 2010. Vol. 1. pp. 215-221. [In Russian].

4. Khodzhaev K.Kh. Experience of introducing some essential oil plants into the Botanical Garden of the Academy of Sciences of the UzSSR // Introduction and acclimatization of plants. – Tashkent, 1972. Вып. 9. pp. 110-125. [In Russian].
5. Nasriddinova M.R., Yaziyev L.Kh. Growth and development of *Salvia officinalis* L. under the oasis of Karshi // European Sciences review. Vienna, 2019. № 3–4. pp. 6-8. [in English].
6. Nasriddinova M. Features of fertilization of medicinal plants and their seeds introduced into the Karshi oasis // Plant introduction: achievements and prospects. Materials of the VI Republican Scientific and Practical Conference. – Tashkent, 2013. pp. 93-96. [in Uzbek].
7. Levina, R.E. Reproductive biology of seed plants. – M.: Science, 1981. pp. 10-55. [In Russian].
8. Ponomarev, A.N. Study of flowering and pollination of plants // Field Geobotany. In 5 and so T. 2. – M.-L.: 1960. pp. 9-19. [In Russian].
9. Rabotnov, T.A. Methods for Studying Seed Reproduction of Herbaceous Plants in Communities // Field Geobotany. In 5 and so. – M.-L.: 1960. –Т. 1. pp. 20-40. [In Russian].
10. Nasriddinova M.R., Yaziyev L.Kh. Biology flowering *Thymus vulgaris* L. in the conditions oasis of Karshi // Annals of the Romanian Society for Cell Biology. Vol. 25, Issue 4, 2021. pp. 7596-7602. [in English].
11. Shklyarov A.P. Results of the introduction of sage officinalis (*Salvia officinalis* L. ssp. major Gams.) // Vegetable production: collection of scientific works. National Academy of Sciences of Belarus, RUP Institute of Fruit Growing. – Minsk, 2010. Issue 17. pp. 396-402. [In Russian].
12. Fedorov, A.I., Artyushenko, Z.T. Atlas of descriptive morphology of higher plants. Flower. – L.: Science, 1975. – 352 p. [In Russian].
13. Zaitsev, G.N. Mathematical statistics in experimental botany. –M.: Science, 1984. – 424 p. [In Russian].
14. Shamurin, V.F. Daily rhythm and ecology of flowering of some steppe plants // Botanical journal. 1958. Т. 43. №4. pp. 548-557. [In Russian].

PHYSICO-CHEMICAL BIOLOGY

BIOCHEMISTRY

SYNTHESIS AND STUDY OF THE METHYLATION REACTION
OF 2-METHYLQUINAZOLIN-4-TIONE**Foziljon Saitkulov**

*Cand. chemical Sciences,
Faculty of Chemistry Chemical Senior Lecturer,
Tashkent State Agrarian University,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Burkhon Elmuradov

*Doctor of Chemical Sciences, Chief Researcher,
Institute of Chemistry of Plant Substances
Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Kuchkar Giyasov

*Candidat chemical Sciences,
Faculty of Chemistry Chemical Senior Lecturer,
Tashkent State Agrarian University,
Republic of Uzbekistan, Tashkent*

Doniyor Ruziboev

*Candidate of Chemical Sciences, Researcher,
Institute of Chemistry of Plant Substances
Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan,
Republic of Uzbekistan, Tashkent
E-mail: fsaitkulov@bk.ru*

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ МЕТИЛИРОВАНИЯ 2-МЕТИЛХИНАЗОЛИН-4-ТИОНА

Сайткулов Фозилжон Эргашевич

*канд. хим. наук,
ст. преподаватель химического факультета,
Ташкентский государственный аграрный университет,
Республика Узбекистан, г. Ташкент*

Элмуратов Бурхон Жураевич

*д-р хим. наук, гл. науч. сотр.,
Институт химии растительных веществ
Академии наук Республики Узбекистан,
Республика Узбекистан, г. Ташкент*

Гиясов Кучкар

*канд. хим. наук,
ст. преподаватель химического факультета,
Ташкентский государственный аграрный университет,
Республика Узбекистан, г. Ташкент*

Рузбобоев Дониёр Маъмурович

канд. хим. наук, научн. сотр.,
 Институт химии растительных веществ
 Академии наук Республики Узбекистан,
 Республика Узбекистан, г. Ташкент

ABSTRACT

This research investigates the synthesis of 2-methylquinazolin-4-thione and explores its reactivity in the methylation reaction. The study aims to elucidate the reaction mechanisms involved in the methylation process and characterize the resulting methylated product. The two-stage synthesis and methylation reactions of 2-methylquinazolin-4-thione with "soft" (methyl iodide) and "hard" (dimethyl sulfate, methyl tosylate) methylation agents were studied. It has been established that the methylation reaction, depending on the agent, solvent, and temperature, proceeds with the formation of alkyl products at the N³- and S⁴-reaction centers. This indicates the ambident character of the 2-methylquinazolin-4-thione anion.

АННОТАЦИЯ

В этом исследовании изучается синтез 2-метилхинозаолин-4-тиона и исследуется его реакционная способность в реакции метилирования. Целью исследования является выяснение механизмов реакций, участвующих в процессе метилирования, и характеристика образующегося метилированного продукта. Изучены двух стадийный синтез и реакции метилирования 2-метилхинозаолин-4-тиона «мягкими» (йодистый метил) и «жесткими» (диметилсульфат, метилтозилат) агентами метилирования. Установлено, что реакция метилирования в зависимости от агента, растворителя и температуры протекает с образованием алкильных продуктов на N³- и S⁴-реакционных центрах. Это свидетельствует об амбидентном характере аниона 2-метилхинозаолин-4-тиона.

Keywords: phosphorus pentasulfide, 2-methylquinazolin-4-thione, ambident anion, methyl iodide, dimethyl sulfate, methyl tosylate, reaction center, solvent, temperature, alkyl product.

Ключевые слова: фосфор пентасульфид, 2-метилхинозаолин-4-тион, амбидентный анион, йодистый метил, диметилсульфат, метилтозилат, реакционный центр, растворитель, температура, алкильный продукт.

Introduction

When alkylation of compounds containing an amide group in most organic substances, the reaction proceeds in two directions. Therefore, in such compounds the reaction occurs either upon bonding with an oxygen atom or with a nitrogen atom [1-3].

Similar systems exist in the form of amide, enol, and imino tautomers. Therefore, when alkylating such compounds, the alkylation reactions are directed towards the oxygen atom. Quinazolin-4-ones, like other heterocyclic compounds, have an amide group, and for the formation of anions in chemical reactions, this negative charge belongs equally to all three atoms [4-7].

Therefore, in chemical processes, the chemical reaction is directed towards O⁴ or N³ atoms. Determining the reaction direction of these compounds is of great theoretical and practical interest. Analysis of the

quinazolin-4-ones and their homologues substituted in the second case shows that the course of the reaction depends on the nature of the solvent and the nature of the substituents on the aromatic ring in the alkylating agents.

In this case, deprotonation of the molecule under the action of a base leads to the formation of an anion. In the second case, the anion formed as a result of deprotonation in quinazolin-4-ones containing a heteroatom is distributed according to its ambient character, i.e., according to its negative charge O⁴-----C⁴-----N³ or N¹-----C²-----X² atoms, or polydentally O⁴-----C⁴-----N³-----C²-----X² character, i.e. fragments.



Methylation of substances of this class, determination of its direction, determination of the resulting ratios O⁴/N³ or O⁴/X² or N¹/X² have been properly studied in the department of organic synthesis of the Institute of Chemistry of Plant Substances. It should be said that these systems are complex, and it is difficult to determine the influence of one or another fragment. Therefore,

we decided to take as an object quinazolin-4-ones, which do not contain a heteroatom, but have a methyl group, and study the course of their reactions.

Experimental part

1. N-acetylanthranilic acid.

0.1 mol of anthranilic acid was dissolved in 70 ml of benzene. Benzene was heated to boiling in a water bath,

then 0.05 mol of acetic anhydride was added dropwise until white crystals formed. The mixture is cooled, filtered, the residue on the filter is washed 2-3 times with benzene, then dried at 100°C for 1.5 hours. 17.58 g of N-acetylanthranilic acid were obtained with a yield of 92%. Melting temperature:

$T_c = 178-181^\circ\text{C}$. $R_f=0.275$, system (chloroform: ethanol - 6:4).

2. 2-Methylquinazolin-4-one. Method A.

A 0.1 mol N-acetylanthranilic acid mixture with 0.8 mol NH_4Cl was heated and cooled at 210-220°C for 4-5 hours using a reflux condenser. Then it was dissolved in parts with boiling water, the solutions were combined, neutralized with NH_4OH to pH 7-8 and cooled. The resulting precipitate was filtered off and dried at room temperature. 2-methylquinazolin-4-one was obtained $T_s=238^\circ\text{C}$ $R_f=0.134$. system (chloroform:ethanol - 6:4).

Method B: A mixture of 0.1 mol anthranilic acid and 0.1 mol acetamide was heated at 210-220°C for 2 hours using a reflux condenser, cooled, filtered and dried. 2-methylquinazolin-4-one was obtained. $T_s=238^\circ\text{C}$ $R_f=0.134$. system (chloroform:ethanol - 6:4).

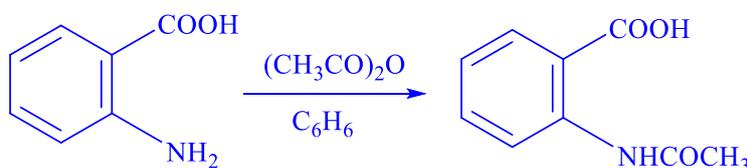
3. 2-Methylquinazoline-4-thione. 0.005 mol of 2-methylquinazolin-4-one (0.005 mol) was refluxed with P_2S_5 in absolute m-xylene for 4 s. The reaction mixture was filtered, the filter residue was washed with m-xylene and treated with 7 ml of 10% NaOH . The resulting precipitate was filtered off, washed with water and dried.

Recrystallize from hexane. 15 g of 2-methylquinazolin-4-thione were obtained with a yield of 90%.

4. Methylation of 2-methylquinazolin-4-thione. 1.6 g (0.01 mol) of 2-methylquinazolin-4-thione (2), 0.56 g (0.01 mol) KOH and 25 ml of ethanol were added to a round-bottom flask and heated in a water bath at 60-65°C for 30 minutes. The reaction mixture was cooled to 25-30°C. Then 1.704 g (0.012 mol, $d=2.28$ g/ml) of methyl iodide was added and boiled in a water bath at 75-80°C for 6 hours. After completion of the reaction, the mixture was washed with 5% NaOH , followed by extraction with chloroform. The extract was dried over anhydrous sodium sulfate, chloroform was removed in vacuo, and the precipitate was filtered off. The precipitate was recrystallized from methanol to obtain 1.54 g (80%) of product (4), 104-106°C, $R_f=0.65$ (chloroform: methanol- 10:1). ^1H ЯМР (CD_3OD , 400 МГц): 8.09 (1H, дд, $J=1.5$, $J=8.0$, H-5), 7.71 (1H, дт, $J=1.5$, $J=8.5$, H-7), 7.49 (1H, дд, $J=1.2$, $J=8.0$, H-8), 7.41 (1H, дт, $J=1.1$, $J=8.1$, H-6), 3.54 (3H, с, N- CH_3), 2.56 (3H, с, 2- CH_3).

Results and Research

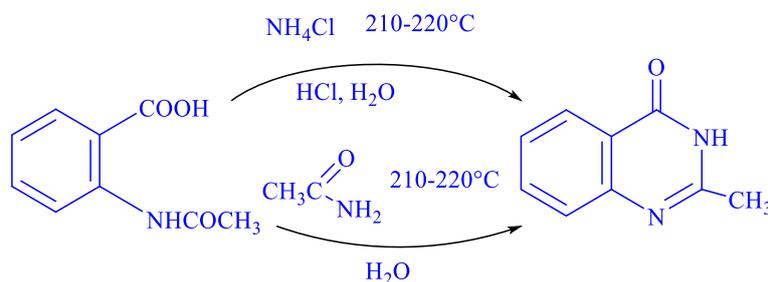
In the synthesis of 2-methylquinazolin-4-ones, N-acetylanthranilic acid is used as the main raw material. In the literature, this compound was synthesized by various methods with a product yield of 90-96%. Heat to a boil so that all anthranilic acid dissolves, then add 1.75 equivalents of acetic anhydride and the mixture, allow to cool, obtain white N-acetylanthranilic acid:



N-acetylanthranilic acid is formed in high yield (92%)

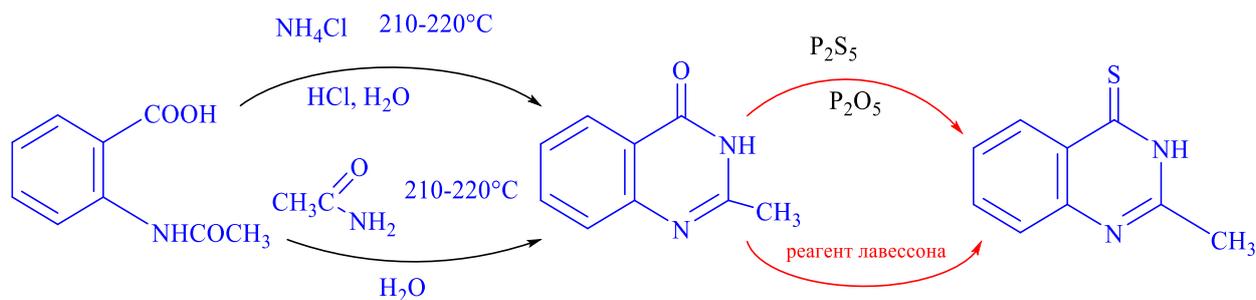
The synthesis of 2-methylquinazolin-4-one, necessary for research, is carried out in two ways (A and B). According to method A: a mixture of the starting reagents

N-acetylanthranilic acid and ammonium chloride in a ratio of 1:7 is heated at 210-220°C for 4 hours. The yield of 2-methylquinazolin-4-one is 73%:



According to method B: anthranilic acid and acetamide were used as starting materials. In this case, a mixture of reagents in a ratio of 1:4 is heated at 210-220°C for 2 hours. The yield of 2-methylquinazolin-4-one obtained by this method is 92%. That is, the reaction in method B is carried out at a much lower temperature (compared to method A) and in a relatively short time, and obtaining the expected product in almost quantitative yields means that method B is more efficient than method A.

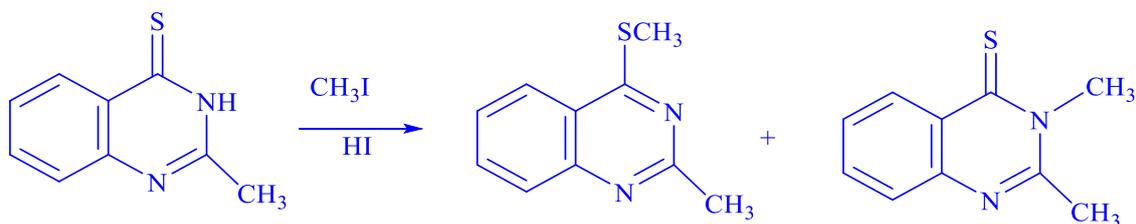
The resulting 2-methylquinazolin-4-one was reacted with P_2S_5 . 2-Methylquinazolin-4-one and P_2S_5 were boiled in absolute m-xylene for 3 hours. The reaction mixture was filtered, the residue was washed with xylene on the filter and treated with 7 ml of 10% NaOH . The precipitate was filtered off, washed with water and dried, 2-methylquinazolin-4-thione was obtained in 94% yield, 2-methylquinazolin-4-thione was obtained in 96% yield using Lawesson's reagent.



Reaction of 2-methylquinazolin-4-thione with methylating agents

2-Methylquinazolin-4-thione is dissolved in 50 ml of an absolute solvent (alcohol, DMF, DMSO, acetonitrile), 0.05 mol NaH is added and shaken for 30 minutes,

methyl iodide (methyl tosylate, dimethyl sulfate) is added to the resulting mixture. Stir for 24 hours at room temperature and reflux in a water bath. Heated at 80-90°C for 3-4 hours, cooled, added 50 ml of cold water and filtered the precipitate.



Conclusion

When methylating 2-methylquinazolin-4-thiones with methyl iodide, dimethyl sulfate, methyl tosylate, the reaction is carried out with a "soft" alkylating agent (methyl iodide) to a "soft" center (N³ or S-atom), it was

found that a "hard" alkylating agent (methyl tosylate) goes to the "hard" (S⁴ or N³) center. It has been established that the ratio of N³/O⁴ isomers formed depends on the nature of these agents.

References:

1. Giyasov K., Saitkulov F.E., Elmuradov B. Zh. Methylation of 2-methylquinazolin-4-one with "soft" and "hard" methylating agents // *Universum: chemistry and biology*. – 2022. – No. 11-2 (101). – pp. 49-51
2. Elmuradov B. Zh., Giyasov K., Saitkulov F.E., alkylation of quinazolin-4-one with "soft" and "hard" alkylating agents // *Universum: chemistry and biology: electron. scientific magazine* – 2022. – T. 1. – No. 103. – pp. 53-57.
3. Saitkulov F.E. et al. 2, 3-Dimethylquinazolin-4 (3H)-one // *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. – 2014. – T. 70. – No. 7. – P. o788-o788.
4. Saitkulov F. et al. alkylation reactions of quinazolin-4-one // *Theoretical aspects in the development of pedagogical sciences*. – 2023. – T. 2. – No. 1. – pp. 157-163.
5. Ergashevich S.F. et al. Photochemical Processes Photosynthesis Pathway On House Plants Leaves" Black Prince" // *Texas Journal of Agriculture and Biological Sciences*. – 2022. – T. 10. – C. 76-78.

CHEMISTRY SCIENCES

ANALYTICAL CHEMISTRY

DETERMINATION OF WATER SOLUBLE VITAMINS
IN *Ziziphora clinopodioides* L. PLANT**Marvaroy Akbarova**

PhD student,
National University of Uzbekistan
named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent
E-mail: marvaroy1995@mail.ru

Ibrokhim Askarov

Doctor of chemical sciences, professor,
National University of Uzbekistan
named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Zulaykho Smanova

Doctor of chemical sciences, professor,
National University of Uzbekistan
named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Katola Donieva

PhD student,
National University of Uzbekistan
named after Mirzo Ulugbek,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ВИТАМИНОВ
В РАСТЕНИИ *Ziziphora clinopodioides* L.**Акбарова Марварой**

PhD студент,
Национальный университет Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Аскарлов Иброхим

д-р хим. наук, профессор,
Национальный университет Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Сманова Зулайхо

д-р хим. наук, профессор,
Национальный университет Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Дониева Камола

*PhD студент,
Национальный университет Узбекистана
имени Мирзо Улугбека,
Республика Узбекистан, г. Ташкент*

ABSTRACT

This article describes the determination of water-soluble vitamins in the plant *Ziziphora clinopodioides* L. by High-Performance Liquid Chromatography (HPLC), information about the importance of the identified vitamins in the human body.

АННОТАЦИЯ

В статье описано определение водорастворимых витаминов в растении *Ziziphora clinopodioides* L. методом высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ), приведены сведения о значении выявленных витаминов в организме человека.

Keywords: *Ziziphora clinopodioides* L., essential oils, flavanoids, macro and micronutrients, vitamins, food additive.

Ключевые слова: *Ziziphora clinopodioides* L., эфирные масла, флавоноиды, макро- и микроэлементы, витамины, пищевая добавка.

Introduction

Ziziphora clinopodioides L. is a perennial herb about 40 cm tall, belonging to the family of sedums. It blooms in June-July, bears fruits in July-August, grows on the slopes of the mountain district, on gravel and stony brown soil at an altitude of up to 2400 meters above sea level. Mainly the above-ground part of the plant (grass) is used. It is better than black pepper and laurel in its healing and pleasant taste. [1] This plant has been used in folk medicine since ancient times. It is found almost everywhere in the world. There are 7 species of it in our country, and it grows in mountainous regions of Tashkent, Samarkand, Jizzakh, Namangan, Kashkadarya and Surkhandarya regions [2]. Tincture of *Ziziphora clinopodioides* L. is used as an expectorant, anti-cold, analgesic, sedative, anthelmintic. One of the reasons for the widespread use of *Ziziphora clinopodioides* L. is its importance in the natural treatment of hypertension, which affects almost 60% of the population. Bod is an effective tool in the treatment of rheumatism, and in the elimination of flu viruses, which are considered to be highly contagious, and which flare up in the spring and autumn months [3].

Ziziphora clinopodioides L. contains triterpene, saponins, ursol, oleanol, chlorogen, flavonoids, coumarins [4],

oxycoumarins [5], amino acids, macro and micro elements (Ca, Si, Al, Fe, Mg, Co, Zn, Cu, Mn, Mo, Cr and selenium accumulates) [6,7]. In addition, *Ziziphora clinopodioides* L. contains essential oils [8], GC-MS analysis shows pulegone (5.19% - 57.85%), limonene (0.26% - 12.79%), 1,8-cineole (up to 27.4%), bornylacetate (0.47% - 9.37%), piperitone (0.70% - 9.05%) and menthol derivatives [9].

The aim of our research is to determine the vitamins contained in *Ziziphora clinopodioides* L. by the HPLC (high-performance liquid chromatography) method.

Experimental part

Acetate buffer system and acetonitrile were used as an eluent in the determination of water-soluble vitamins with the HPLC. Chromatographic conditions:

- Chromatograph Agilent-1200 (equipped with an autodoser)
- Column Exlipse XDB C 18 (obraschenno-faznyy), 5 μ m, 4.6 x 150mm
- Diode array detector (DAD), 204 nm, 254 nm, 290 nm identified.
- Selection of eluent (Flow rate 1ml/min., time, thermostat temperature 250° C, n=5, S=5 μ l)

Table 1.

The buffer systems ratio is acetonitrile with acetate	Time, min.
96:4	0-5
90:10	6-8
80:20	9-15
96:4	15-17

5-10 g of leaves of *Ziziphora clinopodioides* L. are taken on an analytical scale and placed in a 300 ml flat flask. It is extracted with 50 ml of 40% ethanol solution. The extract was heated under magnetic stirrer under reflux for 1 h with vigorous stirring and then stirred at room temperature for 2 h. The mixture is cooled and filtered. 25 ml of 40% ethanol was added to the remaining part and re-extracted 2 times. The filtrates were combined and filled to the mark with 40% ethanol (5-10%) in a 100 ml volumetric flask. The resulting solution is

centrifuged at 7000 rpm for 10 minutes. The resulting solution was taken from the top for analysis. Working solutions of water-soluble vitamins with a concentration of 1 mg/ml were prepared. For this purpose, 50.0 mg of each vitamin standard is accurately drawn on an analytical balance and dissolved in 40% ethanol in a 50 ml volumetric flask and filled to the mark. First, working standard solutions and then prepared working solutions were introduced into the chromatograph. The obtained results are presented in Figure 1 and Table 2.

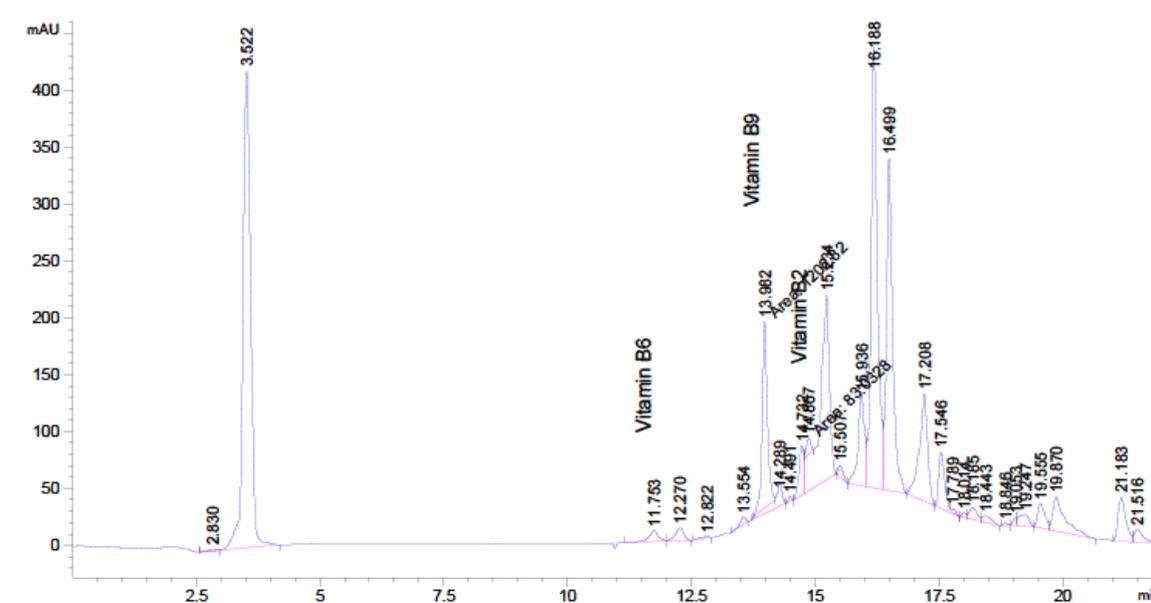


Figure 1. Chromatogram of water-soluble vitamins in *Ziziphora clinopodioides L.* plant

Table 2.

Vitamins determined by the obtained chromatogram spectra

№	Vitamins	Concentration mg/g
1.	B-2	1,3522
2.	B-6	3,0601
3.	B-9	58,294

Results

Based on the above, vitamin B-9 dominates among water-soluble vitamins in *Ziziphora clinopodioides L.* plant. This vitamin is needed in the human body to maintain red and white blood cells (blood production), convert carbohydrates into energy (metabolism), and synthesize and maintain the body's genetic building blocks (DNA and RNA). In addition, it is necessary to ensure the healthy, normal development of the fetus and to prevent some serious birth defects.

Conclusion

Ziziphora clinopodioides L. plant contains water-soluble vitamins B₂, B₆, B₉, vitamin B₉ is the most abundant, and vitamin B₂ is the least. creation of food supplements made from used holly serves to satisfy people's need for vitamins, to strengthen their health and to extend their life.

References:

1. Askarov I.R. "Tabobat qomusi". Tashkent "MUMTOZ SO'Z" 2019.
2. I.F. Karimova, G.A. Salimova "Kiyik o't (zizifora)ning morfologiyasi, dorivorlik xususiyatlari va madaniylashtirish asoslari". Scientific Journal Impact Factor 2021: 5.723
3. Askarov I.R. "Sirli tabobat". Tashkent "Fan va texnologiyalar nashriyot-matbaa uyi" – 2021
4. K. Cmejkal, M. Malanik, K. Zhaparkulova, Z. Sakipova, L. Ibragimova, G. Ibadullaeva, M. Zemlicka. "Kazakh *Ziziphora* Species as Sources of Bioactive Substances" *Molecules journal* 2016, 21, 826
5. Franc, ois Senejoux, C. Girarda, P. Kerramb, Haji Akber Aisac, A. Berthelota, Franc, oise Bévalota, C. Demougeota, "Mechanisms of vasorelaxation induced by *Ziziphora clinopodioides* Lam. (Lamiaceae) extract in rat thoracic aorta". *Journal of Ethnopharmacology* · October 2010.
6. Kasymov F.U., Kyazimov I.M., Dembitsky A.D. and other. Компонентный состав эфирных масел видов Зизифора // *Химия природных соединений*. -1988.- № 23 (5) - P. 636-637.
7. Woolf A. Essential oil poisoning // *J Toxicol Clin Toxicol*. - 1999. - № 37(6). - P. 721-727.
8. Senejoux F., Demougeot C., Kerram P. et al. Bioassay-guided isolation of vasorelaxant compounds from *Ziziphora clinopodioides* Lam. (Lamiaceae)//*Fitoterapia*. - 2012. - № 83. - P. 377-382.
9. Aghajani Z., Assadian F., Masoudi Sh et al. Cemical composition and In Vitro Antibacterial Activities of The Oil *Ziziphora clinopodioides* and *Z. capitata* SUBSP. *capitata* from Iran// *ChemNat Comp*. - 2008. - № 44(3) - P. 387-389.

INORGANIC CHEMISTRY

 INTERACTIONS OF MONOETHANOLAMMONIUM MONOSUBSTITUTED ACETIC ACID
 WITH POTASSIUM CHLORIDE
Marguba Abdullaeva

*Doctor of Philosophy (PhD)
 in technical sciences, senior lecturer,
 Tashkent Medical Academy,
 Republic of Uzbekistan, Tashkent
 E-mail: Abdullaevam067@gmail.com*

 ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОДНОЗАМЕЩЕННОГО УКСУСНОКИСЛОГО
 МОНОЭТАНОАММОНИЯ С ХЛОРИДОМ КАЛИЯ
Абдуллаева Маргуба Толибжоновна

*д-р филос. (PhD) по техн. наукам, ст. преп.,
 Ташкентская медицинская академия,
 Республика Узбекистан, г. Ташкент*

ABSTRACT

The mutual influence of the components in the $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ system, studied by the isomolar series method, showed that the isotherms of crystallization temperature, viscosity, density and pH of the medium revealed branches of the existence of the original components and new chemical compounds.

АННОТАЦИЯ

Взаимное влияние компонентов в системе $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$, изученное методом изоляльных серий показало, что на изотермах температуры кристаллизации, вязкости, плотности и pH среды выявлены ветви существования исходных компонентов и новых химических соединений.

Keywords: physiologically active substances, liquid fertilizers, potassium chloride, monosubstituted monoethanolammonium acetate.

Ключевые слова: физиологически активные вещества, жидкое удобрения, хлорид калия, однозамещенный уксуснокислый моноэтаноламмоний.

The significance of the study lies in the fact that the growth of the world population leads to an increase in demand for basic food products while simultaneously reducing the resource of free global arable land per person, which necessitates the intensification of agriculture, the development and implementation of new technologies. As a result, the needs of agricultural producers for mineral fertilizers are growing, and their quality characteristics are also changing [1].

As is known, the coefficient of nutrient utilization by plants for phosphorus does not exceed 15-20%, for nitrogen and potassium - 40-50%.

As is known, the coefficient of nutrient utilization by plants for phosphorus does not exceed 15-20%, for nitrogen and potassium - 40-50%. One of the ways to increase the yield of agricultural crops and increase the efficiency of fertilizers is to introduce physiologically active substances into their composition [2].

Physiologically active substances have a beneficial effect on the growth, development and fruiting of plants, significantly increase resistance to various diseases and improve product quality [3,4].

To obtain high yields with good qualities, physiologically active substances (auxins, kinins, gibberelens, succinic acid, monoethanolamine, thiocarbamide and others) are widely used today. One of them is monosubstituted monoethanolammonium acetate, which is a physiologically active substance. As noted in the literature review, monoethanolamine and its derivatives in the composition of preparations enhance the effect of the active components, while simultaneously eliminating the negative effects of the preparations on plants. It has been established that when monoethanolamine reacts with acetic acid, monosubstituted monoethanol ammonium acetate is formed [5,6].

Potassium chloride is one of the most popular basic fertilizers in private farming. This is due to the availability and speed of migration in the soil compared to other potash plants, which makes it possible to promptly feed annuals with potassium chloride during the season. However, the same speed of migration and the presence of chlorine ions, which are contraindicated for many garden crops, require the use of potassium chloride with caution.

Potassium chloride can be used to feed plants that do not like chlorine, such as potatoes, carrots, pumpkins and others, you just need to know how and when.

At the same time, potassium chloride, which contains up to 47% chlorine, is used as a source of potassium in most industrially produced complex fertilizers [7].

Depending on the type and quality of various chemical compounds (microelements, physiologically active substances) introduced into the potassium fertilizer KCl, its efficiency can be increased. In this regard, it was necessary to study the mutual influence of the components in a system consisting of monosubstituted monoethanoammonium acetate, the results of which can serve as a physicochemical basis for the technology for producing new liquid nitrogen fertilizers containing a physiologically active substance.

Target. In order to theoretically substantiate the process of producing fertilizer based on potassium chloride containing PAS, the mutual influence of the components in the $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ system was studied in a wide temperature and concentration range using the isomolar series method [8].

For the study, the starting components were potassium chloride, recrystallized from an aqueous solution, grade "pure grade", monosubstituted monoethanol ammonium acetate, synthesized on the basis of acetic acid and monoethanolamine taken in a molar ratio of 1:1 [6].

Research methods. To establish the mechanism of interaction of potassium chloride with monosubstituted monoethanolammonium acetate, the system potassium chloride – monosubstituted monoethanolammonium acetate – water was studied using the isomolar series method. For this purpose, the concentration of aqueous solutions of potassium chloride and monosubstituted monoethanolammonium acetate was 2 mol/l. All measurements were carried out in a water thermostat at $(20\pm 0.1)^\circ\text{C}$ [8].

The kinematic viscosity of solutions was determined using a capillary viscometer VPZh-2 with a capillary diameter of 1.16-2.75 mm. The accuracy of the results is $\pm 0.0001 \cdot 10^{-1} \text{ m}^2/\text{s}$ [9].

Relative density was determined by the pycnometric method. To determine the density, the pycnometers were filled with distilled water, thermostated at 20°C and weighed. Knowing the weight of a dry pycnometer, the density of water at 20°C , the weight of a filled pycnometer, and its volume was calculated. Weighing was carried out with an accuracy of $\pm 0.00005 \text{ g}$. The results are presented with an accuracy of $\pm 0.1 \text{ kg}/\text{m}^3$ [10]. The pH of the solutions was measured according to the method on a METTLER TOLEDO FE 20/FG pH meter [11]. The crystallization temperatures, viscosity, density and pH of the solution environment of this system were determined depending on the ratio of the components. (1. Table)

Table 1.

Changing the properties of the system in molar ratio

Ratio OУК.К.МЭА:KCl	pH	d, gr/cm ³	η, мм ² /с	Tem cr. T°C.
100	7,00	1,0256	13,00	-1,8
90:10	7,00	1,0280	12,70	-1,8
80:20	6,98	1,0300	12,36	-1,9
70:30	7,00	1,0328	11,95	-1,9
60:40	7,05	1,0352	11,52	-2,0
50:50	7,05	1,0378	11,19	-2,0
40:60	7,10	1,040	10,62	-2,1
30:70	6,98	1,410	10,52	-2,2
20:80	6,98	1,439	10,31	-2,2
10:90	7,00	1,462	10,02	-2,2
100	7,00	1,483	9,050	-2,3

Based on the data obtained, a "composition-properties" diagram of the system $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ was constructed. Laying the properties (density, pH of the medium, viscosity and crystallization temperature) on the ordinate axis, and the compositions of solutions on the abscissa. It has been established that in isomolar solutions a compound with a molar ratio is not formed. On the isotherms of the refractive index, density, viscosity and pH of the composition-property diagram of the studied system, one bend is observed, corresponding to the branches

of existence of the initial components. According to the diagram, it occurs in the concentration range of 70.0÷30.0% $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}$ and KCl substances are present together.

Conclusion. The mutual influence of the components in the $\text{CH}_3\text{COOH}\cdot\text{H}_2\text{NC}_2\text{H}_4\text{OH}-\text{KCl}-\text{H}_2\text{O}$ system, studied by the isomolar series method, showed that the isotherms of crystallization temperature, viscosity, density and pH of the medium revealed branches of the existence of the original components and new chemical compounds.

References:

1. Beglov B.M. State and prospects for the production and use of mineral fertilizers in Uzbekistan // Chemical industry today. –Moscow, 2003. –No. 2. -WITH. 25-30.
2. Wildfusch I.R. Batyrshaev E.M. //The influence of the combined use of UAN with microfertilizer "Vitamar-3" and the plant growth regulator Epin on the photosynthetic activity of winter triticale crops, yield and grain quality.// Proceedings of the International Scientific and Practical Conference and the IV Congress of Soil Scientists. –Minsk. 2010. July 26-30 – Ch. 2. –S. 29-31
3. Japan Patent No. 50-2902. Plant growth stimulants. / Sigzaki V., Ekiaki H // - Publ. In RZHH 1975, 046 P.
4. Adilova M.Sh., Narkhodzhaev A.Kh., Tukhtaev S., Talipova L.L. Study by physicochemical methods of complex formation in the systems monoethanolamine - malic acid - water and monoethanolamine - citric acid - water at 200 // Reports of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan. -2006. -No. 3, -P. 49-51.
5. Adilova M.Sh., Narkhodzhaev A.Kh., Tukhtaev S. Study of the interaction of monoethanolamine with malic and citric acids in aqueous solutions at 200C // Current problems of modern science. Proceedings of the 1st International Forum of the 6th International Conference. Samara.2005, September 12-15. P. 11 – 12.
6. Abdullaeva M.T. Reaction of monoethanolamine with acetic acid. // Uzb. chem. magazine – Tashkent, 2008. – No. 3. - WITH. 5-7.
7. Anosov V.Ya. et al. Fundamentals of physical and chemical analysis. - M.: Nauka, 1976. - P. 255.
8. Frolov Yu.G. Colloidal chemistry course // Surface phenomena and disperse systems. – M.: Nauka, 1982. – S. 117-124.
9. Zdanovsky A.B. Hallurgy. –L.: Chemistry, 1972. – P. 572.
10. Gorabachev S.V. Workshop on physical chemistry. –M.: Higher School, 1974. – P. 310.

ORGANIC CHEMISTRY

**6-ACETETHYL-1-THIOXROMANE AND 7-ACETETHYL-6-METHYL-1-THIOXROMANE
 ACETIC ETHER CONDENSATION REACTIONS WITH**
Guzal Rakhmatova

*Doctor of philosophy (PhD),
 Karshi Enginerering Economics Institute,
 Republic of Uzbekistan, Karshi
 E-mail: raxmatova85guzal@mail.ru*

**РЕАКЦИИ КОНДЕНСАЦИИ 6-АЦЕТИЛ-1-ТИОХРОМАНА
 И 7-АЦЕТИЛ-6-МЕТИЛ-1-ТИОХРОМАНА С ЭТИЛОВЫМ ЭФИРОМ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ**
Рахматова Гузал Ботировна

*канд. техн. наук,
 Каршинского инженерно-экономического института,
 Республика Узбекистан, г. Карши*

ABSTRACT

The condensation reactions of acetyl derivatives of the thiochroman series with ethyl acetic acid have been studied. As a result of the reaction, it was established that compounds of the acetylthiochroman series result in the reaction with good yield of the corresponding thiochromanoyl acetones.

АННОТАЦИЯ

Изучены реакции конденсации ацетилпроизводных ряда тиохромана с этиловым эфиром уксусной кислоты. В результате реакции установлено, что соединения ряда ацетилтиохромана в результате реакции с хорошим выходом образуются соответствующие тиохроманоилацетоны.

Keywords: thiochroman, acylthiochroman, circaethyl ether, diketone, sodium chromanoylacetone.

Ключевые слова: тиохроман, ацилтиохроман, циркуэтиловый эфир, дикетон, хроmanoилацетон.

Introduction

It is known that the condensation reactions of complex esters with ketones lead to the formation of β -diketones. Most ketones can easily undergo enol tautomerization in the presence of bases or acids if they have hydrogen atoms on the α -carbon atom relative to the keto group. For diketones and ketones, the amount of enols at equilibrium is stabilized by the additional unsaturation groups in their enol form. The amount of enols formed from ketones depends strongly on the structure of the ketone and the nature of the solvent used. [1; 82-86 p].

Materials and methods**Synthesis of 6-thiochromanoylacetone (I)**

For the synthesis of 6-thiochromanoylacetone molecule, we equipped a 50 ml round-bottomed, two-necked flask with a refrigerator and a bifurcated flask with the upper part of the refrigerator fixed with a tube of dehydrated calcium chloride, and added 1.92 g (0.01 mol) of 6-acetyl-1-thiochroman and Add 20 ml of dry circaethyl ether and 10 ml of absolute ether. After that, we slowly add 0.2 g of sodium metal cut thinly from the

second neck of the flask and keep the reaction mixture in a boiling water bath for 45 minutes. Then let the reaction mixture in the flask cool to room temperature. We filter the resulting sodium chromanoyl acetone. Then we wash the resulting sodium chromanoyl acetone with a small amount of circaethyl ether. Then squeeze it dry between two filter papers. Put the obtained product in a glass, dissolve it in a small amount of water and pass it through a filter. Cool the filtrate with ice and acidify in a 50% acetic acid solution to an acidic medium. The precipitate falls. The formed crystals are filtered, washed in cold water and dried in a desiccator. The yield of the product, 6-thiochromanoylacetone, is 1.5 g or 64%. Liquefaction temperature is 41-42 °C. Elemental analyses, found, % : S 71.80; N 6.54. Calculated for the formula $C_{13}H_{14}O_2S$, %: S 71.61; N 6.46.

Synthesis of 6-methyl-7-thiochromanoylacetone (II)

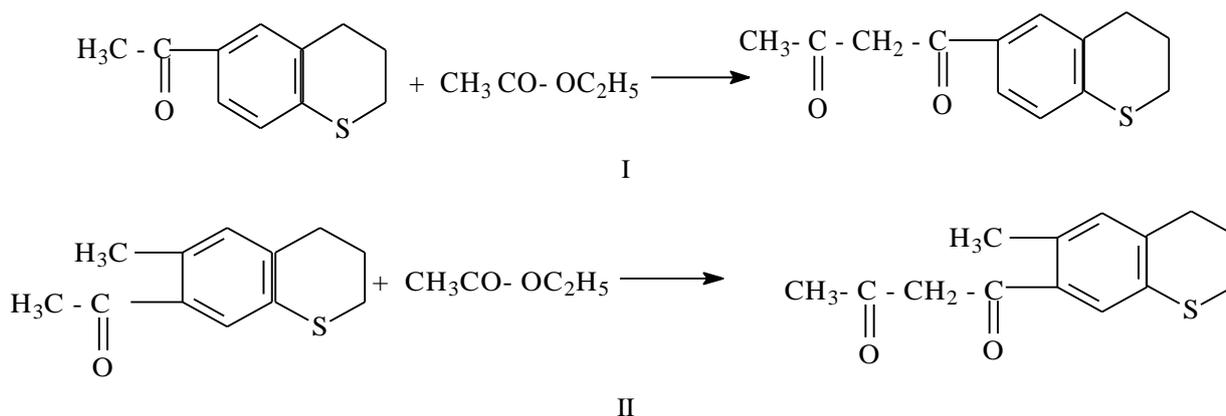
The synthesis of this substance was carried out in the same way as the synthesis of substance 1 above. A solution of 2.2 g (0.096 mol) of 6-methyl-7-acetyl-1-thiochromene and 20 ml of dry circaethyl ether in 10 ml of absolute ether was taken for the reaction. The yield of

the product, 6-methyl-7-thiochromanoylacetone, was 1.4 g or 56%. Liquefaction temperature 38-39 °C. Elemental analysis, found, % : S 67.91; N 6.58. Calculated for the formula C₁₄H₁₆O₂S, %: S 67.76; N 6.45.

Results

To synthesize β-diketones of the acetylthiochroman series, we conducted condensation reactions of complex esters. Condensation reactions of 6-acetyl-1-thiochroman and 7-acetyl-6-methyl-1-thiochroman molecules with circaethyl ether were studied for the reaction. The reaction was carried out for 40-45 minutes in the presence of metallic sodium in an absolute ether environment in equimolecular proportions of reacting reagents.

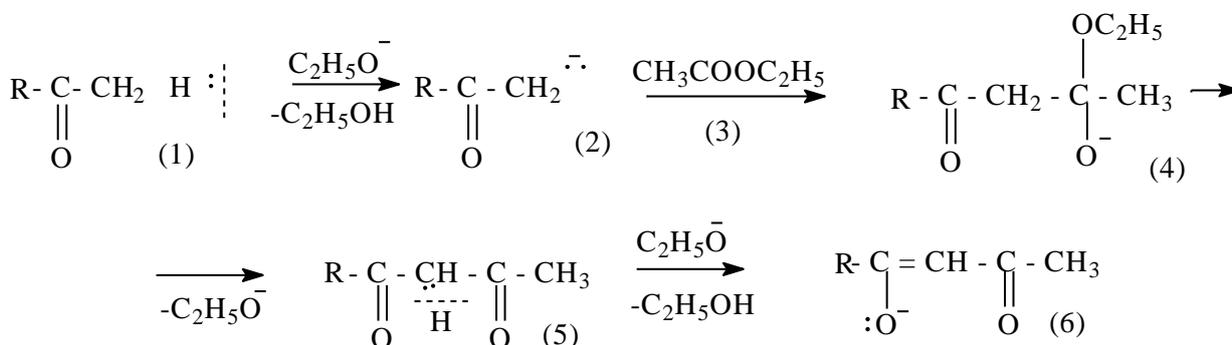
The reaction takes place with acetylthiochroman derivatives in the presence of sodium metal in the form of dry circaethyl ether in an absolute ether environment. First, the reaction mixture was left in a boiling water bath for 45 min and then allowed to cool to room temperature. The resulting sodium chromanoylacetone was dissolved in a little water, acidified in a 50% acetic acid solution to an acidic medium, and collected as a precipitate. The yield of the product, i.e. 1-thiochromanoylacetone (I) is 64%. By treating the last products, i.e. sodium chromanoylacetones with 50% acetic acid solution, the corresponding β-diketones with a symmetrical structure were obtained:



As it can be seen from the above reaction scheme, 6-methyl-7-thiochromanoylacetones (II) were synthesized in 56% in the same reaction under the same conditions. As it can be seen from the yields of the reaction products, it was found that in the reaction of the above compounds with circaethyl ether, the productivity of the monosubstituted derivatives is slightly higher than that of the disubstituted derivatives of the aromatic ring. This indicates that the acetyl group on the aromatic ring reduces the electron density of the aromatic ring, which in turn facilitates the attack of nucleophilic reagents on the aromatic ring. However, although the above compound

II has an electron acceptor group that increases the attack of nucleophilic reagents on the aromatic ring, the adjacent methyl group increases the internal electron density of the aromatic ring due to its positive inductive effect. It can be seen that the presence of both electron-donating and electron-accepting groups in the aromatic ring of one molecule affects the yield of the product in any reaction.

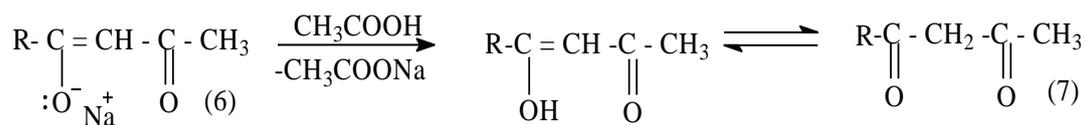
The resulting compounds are crystalline substances, soluble in organic solvents, but insoluble in water. The mechanism of the condensation reaction of ketones of the acetylthiochroman type with circaethyl ether can be expressed in the following order:



R= thiochromene molecule.

The catalyst (ethylate anion) removes a proton from ketone (1), which is a methylene component. The resulting highly reactive carbanion (2) attacks the partially positively charged carbon atom of ethyl ether (3) of acetic acid, which is a carbonyl component. As a result,

anion (4) is formed, and thiochromanoylacetone (5) is obtained due to the separation of the ethylate ion. This compound exists as the enolate form (6) in alkaline media. The reaction mixture is acidified to isolate thiochromanoylacetones:



The structure of the synthesized compounds was determined using IR- and PMR-spectra, and the composition was determined using the method of elemental combustion analysis. Monitoring the progress of the reaction and determining the purity of the obtained substances was carried out using the thin-layer chromatographic method on the 'Silufol' plate [2; pp. 7322-7328, 3; pp. 5229-5233, 4; 8160-8169 b].

In the PMR-spectrum of 2-methyl-1-thiaindanoylacetone (I), protons of the methyl group in the sixth position appear as a singlet at 1.27 m.u. show their signals in the signals of methylene group protons are 2.13 m.u. in the form of a complex multiplet and 2.32 m.u. gives its signals, while the signals of protons in the aromatic ring are 8.28 m.u. and 8.32 m.u. appears. The characteristic aspect of the spectrum of this substance lies in the presence of a strong internal molecular hydrogen bond in compounds with this structure. As the acidity of β -diketones in the form of enol increases, the shift of the signals of the hydroxyl group indicates that the dark area shifts to the side. A similar appearance is shown by the enol-form molecule of 1-thiochroman β -diketones in the complex multiplet form of the proton

in the hydroxyl group at 2.08 m.u. manifestation and the signals of the proton in the SN group of α -carbon atom are 7.12 m.u. can be seen in their manifestations.

In the IR-spectrum of the synthesized thiochromane series β -diketones, broad absorption lines of the OH group in the form of enol can be seen in the region of 3570-3420 cm^{-1} . Also, the absorption lines belonging to the broad carbonyl group can be observed in the region of 1600 cm^{-1} , and the absorption lines in the region of 1310-1360 cm^{-1} indicate that they belong to CH_3CO . It shows the characteristic absorption lines belonging to the methylene group at 1445 cm^{-1} , and the absorption lines at 1100, 1065 and 1010 cm^{-1} belong to the $\text{C}=\text{C}$ double bond in the enol form. Absorption lines of characteristic vibrations of CH bonds in the benzene ring are observed in the region of 840 cm^{-1} , while absorption lines corresponding to valence vibrations of hydrogen atoms in the benzene ring can be observed in the region of 930 and 950 cm^{-1} . From the obtained results, it can be said that in these compounds, the lifetime of the structure in the enol form is much better than in the keto form.

The table below presents the physicochemical data of the β -diketones of the thiochromane series.

Table 1.

Thiochromane series β -diketones physical and chemical data

O/N	Percent, %	Liquidus temperature °C.	Found, %		Gross formula	Calculated, %	
			C	H		C	H
I	64	41-42	71,85 71,80	6,59 6,54	$\text{C}_{13}\text{H}_{14}\text{O}_2\text{S}$	71,61	6,46
II	56	38-39	67,91 67,87	6,58 6,55	$\text{C}_{14}\text{H}_{16}\text{O}_2\text{S}$	67,76	6,45

Conclusion

As it can be seen from the above information, it was found that in the reaction of 6-acetyl-1-thiochroman and 6-methyl-7-acetylthiochroman molecules with circaethyl ether, the reactivity of 6-acetyl-1-thiochroman molecule is slightly higher than that of 6-methyl-7-acetylthiochroman molecule. The main reason for this can be attributed

to two factors. The first factor is the steric effect of the methyl group in the 6-position. The second factor can be explained by the influence of electron-donor and electron-acceptor groups in the aromatic ring. Thus, it turned out that semi-aromatic sulfur-containing bicyclic compounds, like aliphatic and aromatic ketones, are well suited to complex ether condensation reactions.

References:

- Rakhmatova G.B., Kurbanov M.Zh., Ruziboev M.T., Synthesis and study of the rate of acylation reaction of 1-thiandanes and 1-thiochromanes. *Universum: Chemistry and biology Issue: 12(66)December 2019 Moscow 2019*. PP. 82-86.
- Vyacheslav Ya Sosnovskiyx, Dmitriy V. Sevenard, Vladimir S. Moshkin, Viktor O. Iaroshenko, Peter Langer. Reactivity of 3-formyl- and 3-cyanothiochromanes toward some N- and C-nucleophiles. *Novel synthesis of 3-substituted 2-aminothiochromanes*. *Tetrahedron*. Volume 66, Issue 36. 4 September, 2010. PP. 7322-7328.
- Kamol M. Dovud. Regio- and stereoselective synthesis of bis-spiropyrazoline-5,3'-spiropyrazoline(thiochroman)-4-one derivatives via bis-nitrilimines. *Tetrahedron*. Volume 61. Issue 22, 30 may, 2005. PP. 5229-5233.
- Lara Bianchi, Massimo Makagno, Giovanni Petrillo, Fernando Sankassan, Domenico Spinelli, Cinzia Tavani. Access to 2,3-diaril-4-nitrothiochroman S,S-dioxides from 3-nitrobenzo[b]thiophene. *Tetrahedron*. Volume 67, Issue 42, 21 October 2011. PP. 8160-8169.

IMPROVEMENT OF PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF TECHNICAL GLYCERIN**Shaxlo Ahmedova**

PhD student,
Urgench State University,
Republic of Uzbekistan, Urgench

Ahror Abdurakhimov

Doctor technical sciences, docent,
Tashkent Chemical-Technological Institute,
Republic of Uzbekistan, Tashkent

Akbarali Ruzibayev

PhD,
Tashkent Chemical-Technological Institute,
Republic of Uzbekistan, Tashkent
E-mail: akbar216@mail.ru

Sanobar Achilova

PhD,
Urgench State University,
Republic of Uzbekistan, Urgench

УЛУЧШЕНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПОКАЗАТЕЛЕЙ ТЕХНИЧЕСКОГО ГЛИЦЕРИНА**Ахмедова Шахло Икрамовна**

докторант,
Ургенчский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Ургенч

Абдурахимов Ахрор Анварович

д-р техн. наук, доц.,
Ташкентский химико-технологический институт
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Рузобаев Акбарали Турсунбаевич

канд. техн. наук,
Ташкентский химико-технологический институт,
Республика Узбекистан, г. Ташкент

Ачилова Санобар Собировна

PhD,
Ургенчский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Ургенч

ABSTRACT

The article presents the results of research on obtaining glycerin without distillation of technical glycerin obtained from hydrogenated cottonseed oil. Technical glycerin obtained for the study contains 78.5% glycerin, 2.1% moisture and volatile matter, 8.9% ash and 10.5% non-volatile organic residue. After treatment with phosphoric acid, the amount of glycerin is from 78.5% to 88.3%, moisture and volatile matter increased from 2.1% to 2.4%, ash content from 8.9% to 4.1%, and non-volatile organic residue content from 10.5% to 5.2% decreased to %. After refining with cationite, the glycerin content increased to 98.1%, the mass fraction of moisture and volatile matter decreased to 1.7%, and the amount of ash and non-volatile organic residue decreased to 0.1%. It has been found that refined glycerin can be obtained by refining technical glycerin with phosphoric acid and cationite.

АННОТАЦИЯ

В статье представлены результаты исследований по получению высококачественного глицерина без перегонки технического глицерина, полученного из хлопкового саломаса. Технический глицерин, полученный для исследования, содержит 78,5 % глицерина, 2,1 % влаги и летучих веществ, 8,9 % золы и 10,5 % нелетучего органического остатка. После обработки фосфорной кислотой количество глицерина составляет от 78,5 % до 88,3 % содержание влаги и летучих веществ увеличилось с 2,1% до 2,4%, а содержание нелетучих органических остатков снизилось с 10,5% до 5,2 % и зольность с 8,9% до 4,1%. После очистки катионитом содержание глицерина увеличилось до 98,1 %, массовая доля влаги и летучих веществ снизилась до 1,7 %, а количество золы и нелетучего органического остатка снизилось до 0,1 %. Установлено, что высококачественный глицерин можно получить очисткой технического глицерина фосфорной кислотой и катионитом.

Keywords: glycerin, ash content, distillation, refining, cationite, phosphoric acid.

Ключевые слова: глицерин, зольность, дистилляция, очистка, катионит, фосфорная кислота.

Introduction

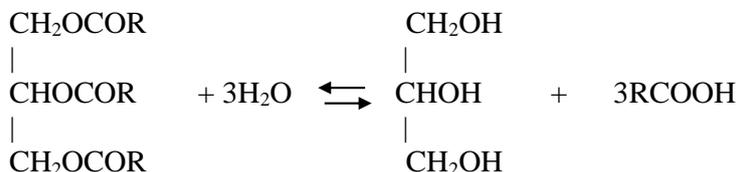
Glycerin is a triatomic alcohol that is a colorless liquid with a slightly sweet taste. It is more viscous than water and has a greater density than water. Glycerin is widely used in several industries. Therefore, it is in high demand. Glycerin is produced as a secondary product in soap production, and as a primary product in fat splitting [1-4].

Since natural glycerin is derived from oils and fats, it contains many impurities. These impurities can be fatty acids, triglycerides, mineral and organic salts, coloring agents and fat accompanying substances. The type and amount of impurities in glycerin directly depends on the method and sources of glycerin extraction [5]. Depending on the amount of these substances, glycerin is raw, technical and distilled. In all methods of obtaining glycerin, raw glycerin with a concentration of 10-35% is

obtained initially. This glycerin is refined, water content is reduced, and technical glycerin with a concentration of 78-86% is obtained from it. To obtain high-quality glycerin, glycerin is completely refined, and pure glycerin with a concentration of more than 98% is obtained [6-10]. In addition, low purity of technical glycerin its use in industry. The development of processes for the conversion of technical glycerin into other value-added products is being extensively studied, but is currently not widely used in industry.

In Uzbekistan, glycerin is mainly obtained by hydrolysis of fats. This method produces higher quality and more glycerin than by saponification of fats.

Hydrolysis of fats is a chemical process based on the reaction of three glycerides with water. Glycerine and fatty acid are formed.



Hydrolysis or saponification of oil is called oil splitting in industry. Hydrolysis is a stepwise process, with the formation of mono- and di-glycerides.

The glycerin obtained by splitting fat has low quality. Due to its dark and dull color and low concentration, it cannot be widely used. Therefore, glycerin must be refined and turned into a valuable product. There are several different ways to clean glycerin: evaporation, distillation, filtration, adsorption, ion exchange, etc [10]. By choosing several methods high efficiency refining of glycerin is achieved. For example, glycerine obtained by fat splitting is first chemically refined with limewater, filtered, water evaporated, glycerine distilled, adsorption using activated carbon and filtered again [4].

Technical glycerin obtained by evaporation of sweet water is first refined with lime water. Fatty acids, fat and other impurities are separated from the glycerin water. After separating the precipitate by filtration, water with glycerin is evaporated and technical glycerin is obtained. Its concentration is around 78-86%, and it contains traces of fatty acid, soap, alkali metal salts and other impurities of oil. These substances determine the color, ash content, density and clarity of glycerin. To obtain high-quality

glycerin, it is necessary to reduce the amount of impurities in technical glycerin. For this, technical glycerin is distilled and bleached in the industry. However, due to the high energy consumption, the price of glycerin increases and the competitiveness of glycerin decreases. Therefore, the development of resource-efficient technologies for glycerin refining is considered urgent.

Glycerin can also be refined by ion exchange [3]. The researchers tested the use of cations for the refining of glycerin and studied the effectiveness of the cations. These results indicated that impurities such as inorganic salts and free ions were removed when the ion exchange method was used.

Materials and methods

Technical glycerin obtained from JSC 'Urganch' by hydrolysis of hydrogenated cottonseed oil was used for the experiments. Cationite KU-2-8 was used for refining of glycerin by ion exchange method. An 85% solution of phosphoric acid was used in mineral acid treatment processes.

Determination of the mass fraction of glycerol.

Any concentration or relative amount of glycerin in a solution can be determined by the relative density of the solution and the refractive index. The density of glycerin was determined using a densimeter (DURAN) and the refractive index was determined using a refractometer (Refracto 30GS) [11,12].

Determination of ash content.

The mass fraction of ash characterizes the presence of mineral and mineral-organic compounds in glycerin. The method is based on the removal of water and glycerin from the product, making ash of the non-volatile residue and ash recovery [11,12].

Determination of the mass fraction of non-volatile organic residues

The difference between the amount of ash and the amount of ash remaining after removing water, glycerin and other volatile substances from the analyzed product under certain conditions is taken as the index [11,12].

Determination of mass fraction of moisture and volatile substances

The mass fraction of moisture and volatile substances in glycerin was determined by drying to a constant mass in a drying oven [11,12].

Results

Ion exchange technology was used to refine glycerin without distillation. For this, technical glycerin is treated with phosphoric acid and refined of its impurities. Then, metal salts contained in glycerin are separated with cationite.

The technical glycerin was refined with mineral acid. For this, technical glycerin put into the flask. The flask was then stirred and heated using a magnetic stirrer. Phosphoric acid was added to the flask and stirred at a constant speed of 200 rpm for 1 hour. The mixture separated into layers of free fatty acid, glycerin and inorganic salt. The first layer containing fatty acids was separated by decantation and the salt precipitate was removed by filtration. NaOH was added to the middle layer containing glycerin and neutralized. After that, obtained salts were separated.

The influence of technological parameters on the processing of technical glycerin with phosphoric acid was studied. In this case, the pH value was 2-6, the process temperature was 30-70 °C, and the reaction duration was 20-60 minutes. The obtained results are presented in Figure 1.

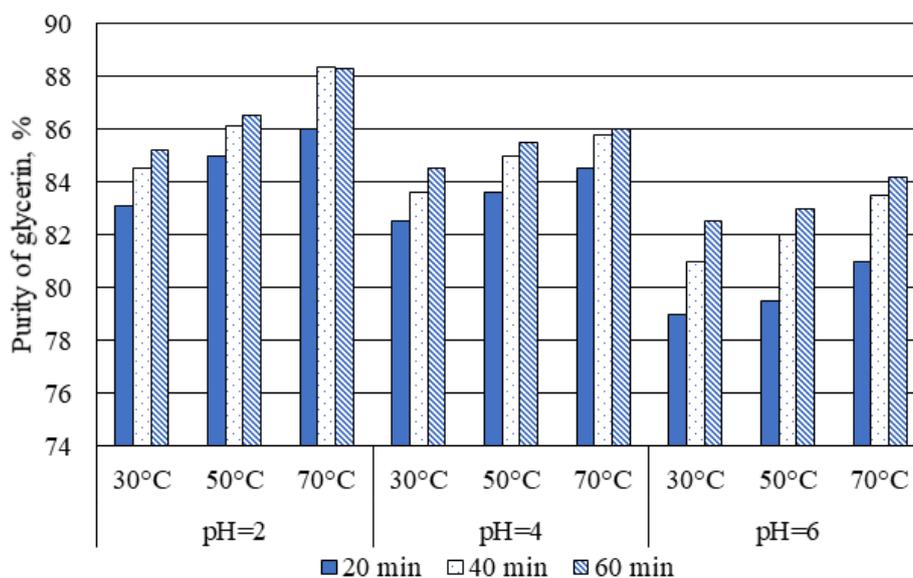


Figure 1. Effect of process parameters on the change of glycerin concentration during the treatment of glycerin with phosphoric acid

From the data in Figure 1, it can be seen that the pH significantly affects the acid treatment process and the quality of the obtained product. The highest values were achieved at a pH value of 2, a temperature of 70 °C and a process duration exceeding 40 minutes.

Conclusion

In the following experiments, the glycerin obtained under these conditions was refined by using a cationite. For this, KU-2-8 brand cationite was placed in a glass tube with a volume of 300 ml. The acid-treated glycerin was passed through the column (25 °C). Glycerin delivery rate was 20-60 ml/min and cation content were 20-60 g. The obtained results are given in Figure 2.

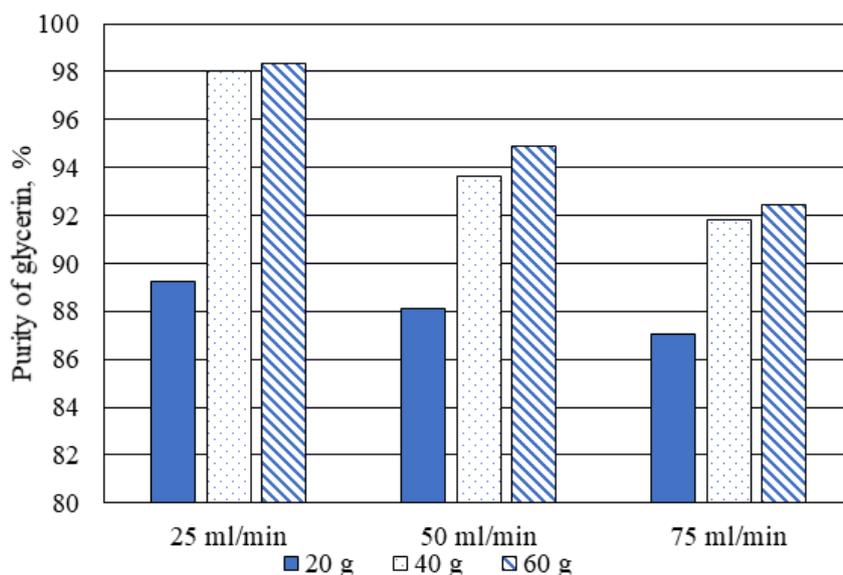


Figure 2. Effect of process parameters on the change of glycerin concentration during the treatment of acid-treated glycerin with cationite

From the data in Figure 2, it can be seen that the degree of purity of the obtained glycerin is inversely proportional to the flow rate of glycerin and directly proportional to the amount of cationite. Purity of glycerin increased from 89% to 98% when cation content increased from 20 g to 60 g. However, this increase value varied depending on the glycerin flow rate. When the glycerin flow rate increased from 25 mL/min to 75 mL/min

(20 g of cationite), the purity of the obtained glycerin decreased from 89% to 87%. In summary, the optimum amount of cationite in the process of refining glycerin was 40 g and the glycerin flow rate was 25 ml/min.

In order to evaluate the effectiveness of the conducted experiments, the physico-chemical properties of raw glycerin, acid-treated and cationite-treated glycerins were analyzed and compared (Table 1).

Table 1.

Physico-chemical properties of technical, acid-treated and cationite-treated glycerin

Indicators	Distilled glycerin (Control)	Technical glycerin	Acid treated	Cation treated
Glycerin content, %	98,4	78,5	88,3	98,1
Water and volatile substances content, %	1,1	2,1	2,4	1,7
Ash content, %	0,2	8,9	4,1	0,1
Color	Colorless	Brown	Yellowish	Colorless
Clarity	Turbid	Turbid	Turbid	Clear
Amount of non-volatile organic residue, %	0,3	10,5	5,2	0,1

It can be seen from Table 1 that technical glycerin contains 78.5% glycerin, but the ash content, water content and non-volatile organic residues are high. This glycerin corresponds to 3rd grade 2nd brand glycerin according to GOST 6823. After treatment with phosphoric acid, the glycerin content increased from 78.5% to 88.3% and the water content increased from 2.1% to 2.4%, the ash content increased from 8.9% to 4.1% and non-volatile the amount of organic residue decreased from 10.5% to 5.2%.

Physical and chemical characteristics/properties of glycerin were further improved after cleaning with cationite. In particular, the amount of glycerin increased to 98.1%, the water content decreased to 1.7%, and the amount of ash and non-volatile organic residues decreased to 0.1%. According to these indicators, it corresponds to the control glycerin. It can even be seen that it outperforms distilled glycerin in terms of color and clarity.

References:

- Hajek M. and Skopal F., Purification of the glycerol phase after transesterification of vegetable oils. 44 th International Petroleum Conference, Bratislava, Slovak Republic, September 21-22, 2009.
- Harutyunyan N.S. Fat processing technology. 1998. – PP. 235.
- Dosuna-Rodríguez, I. & Gaigneaux, Eric. (2012). Glycerol acetylation catalysed by ion exchange resins. Catalysis Today. 195. PP. 14–21.

4. Kadirov Yu., Ruzibayev A. Yog'larni qayta ishlash texnologiyasi. - T.: 'Fan va Texnologiya.' 2014. – PP. 320.
5. Achilova S.S., Ruzibaev A.T., Abdurakhimov S.A., Khodzhaev S.F. Refinement of food fats obtained from dark and light vegetable oils with an aqueous solution of sodium silicate // *Universum: technical sciences*. 2020. No. 3-2 (72).
6. Achilova S.S., Ruzibaev A.T., Abdurakhimov S.A., Khodzhaev S.F. Refinement of food fats obtained from dark and light vegetable oils with an aqueous solution of sodium silicate // *Universum: Technical Sciences: 2020*. No. 3 (72). - PP. 21-25.
7. Ruzibayev A.T., Kadirov Y.K., Rahimov D.P. Intensification of the hydrogenation process of vegetable oils with effective methods of detoxication of catalyst // *Europaische Fachhochschule*. – 2015. – №. 5. – PP. 58-61.
8. Ruzibaev A.T., Kadirov Yu.K. Intensification of the process of hydrogenation of vegetable oils // *Chemistry and chemical technology*. – 2015. – No. 4. – PP. 74-78.
9. Ruzibaev A.T. et al. An unconventional approach to the demetallization of lard for the margarine industry // *Universum: technical sciences*. – 2021. – No. 5-3 (86). – PP. 83-86.
10. Akhmedova Sh.I., Abdurakhimov A.A., Ruzibaev A.T., Achilova S.S. Increasing the efficiency of the glycerin bleaching process // *Universum: technical sciences*. 2022. No. 10-4 (103).
11. Laboratory workshop on fat processing technology. Harutyunyan N.S. Arisheva E.A., Yanova L.I. et al. - Moscow, Light and food industry, 1983. - PP. 151.
12. GOST 7482. Glycerine. Acceptance rules and test methods.

**DETERMINATION OF THE QUANTITY OF THE BINDING COMPONENT
OF THE SELECTED CATALYST FOR THE PROCESS OF HEATING
MONOCHLOROMETHANE AT A HIGH TEMPERATURE**

Normurot Fayzullaev

*Doctor of technical sciences, Professor
of Samarkand State University named after Sharof Rashidov,
Republic of Uzbekistan, Samarkand*

Jonibek Javharov

*Doctoral student
of Samarkand State University named after Sharof Rashidov,
Republic of Uzbekistan, Samarkand
E-mail: javharovjonibek844@gmail.com*

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВА СВЯЗЫВАЮЩЕГО КОМПОНЕНТА
ВЫБРАННОГО КАТАЛИЗАТОРА ПРОЦЕССА НАГРЕВА МОНОХЛОРОМЕТАНА
ПРИ ВЫСОКОЙ ТЕМПЕРАТУРЕ**

Файзуллаев Нормурат Ибодуллаевич

*д-р техн. наук, профессор
Самаркандского государственного университета
имени Шарофа Рашидова,
Республика Узбекистан, г. Самарканд*

Жавхаров Жонибек Жракул ўгли

*докторант
Самаркандского государственного университета
имени Шарофа Рашидова,
Республика Узбекистан, г. Самарканд*

ABSTRACT

In the work, the amount of the selected catalyst binding component was determined for the process of heating monochloromethane at high temperature in the absence of air. In order to determine the amount of the binding component that is selected for the heating process of monochloromethane at high temperature in the absence of air, and the amount of the binding component in the selective catalyst is selected for the purpose of determining the amount of the binding component in the selective catalyst, the amount of the binding component in the selective catalyst increases the concentration of the product and monochloromethane conversion. To implement the process, a catalyst bed reactor with a high catalytic activity and a selective catalyst layer was used at a temperature of 430°C and a volumetric rate of 1500 coat⁻¹. The amount of binding component in the selective catalyst with high catalytic activity selected for the implementation of the process was varied in the range of 30-70 mac.%. The physico-chemical properties of the synthesized, highly active and selective catalyst selected for the process were studied.

The purpose of the work is to select a component with high catalytic activity and a selective catalyst, which is selected for the process of heating monochloromethane at high temperature in the absence of air.

АННОТАЦИЯ

В работе определено количество выбранного связующего компонента катализатора для процесса нагрева монохлорметана при высокой температуре в отсутствие воздуха. Чтобы определить количество связующего компонента, который выбирают для процесса нагревания монохлорметана при высокой температуре в отсутствие воздуха, и количество связующего компонента в селективном катализаторе выбирают с целью определения количества связываемого компонента в селективном катализаторе, количество связующего компонента в селективном катализаторе увеличивает концентрацию продукта и конверсию монохлорметана. Для реализации процесса использовался реактор со слоем катализатора с высокой каталитической активностью и селективным слоем катализатора при температуре 430°C и объемной скорости 1500 слой⁻¹. Количество связующего компонента в селективном катализаторе с высокой каталитической активностью, выбранном для реализации процесса, варьировали в пределах 30-70 мас.%. Изучены физико-химические свойства синтезированного, выбранного для процесса высокоактивного и селективного катализатора.

Цель работы – подобрать компонент с высокой каталитической активностью и селективный катализатор, выбранный для процесса нагрева монохлорметана при высокой температуре в отсутствие воздуха.

Keywords: monochloromethane, selective, catalyst, ethylene, propylene, reactor, binder.

Ключевые слова: монохлорметан, селектив, катализатор, этилен, пропилен, реактор, связующее.

Introduction

Al_2O_3 , which is used as a binding component, exhibits catalytic activity when heating monochloromethane at high temperature in a vacuum [1]. Monochloromethane in Al_2O_3 has a high catalytic activity selected to carry out the convective process and is typical and 1.5% during 500 minutes of operation of the selective catalyst. Heating monochloromethane in Al_2O_3 at a high temperature in the absence of air results in the production of acocan methane (85 mol.%), the lower molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons that are precipitated, i.e. ethylene and propylene, and saturated hydrocarbons $\text{C}_2\text{-C}_{5+}$ in the amount of 15 mol.% does not increase [2-5].

Testing monochloromethane in airless, high temperature heating of Japan with microspheric YuKS-30/ Al_2O_3 composition with high catalytic activity and selective catalyst. Monochloromethane in airless high temperature heating in Japan is effective for lower molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons, i.e.

ethylene and propylene. It is advisable to use a reactor with a high catalytic activity and a selective catalyst layer, designed for the process [6-8]. Heating monochloromethane in an airless place at high temperature is selected for the process, which has a high catalytic activity and the development of a selective catalyst with an Al_2O_3 binder in an acocid with an Al_2O_3 binder equal to 70:30 YuKTs-30: Al_2O_3 is the process of the YuKTs-30 acoci. A selective catalyst with high catalytic activity was selected for implementation [9-13].

YuKTs-30/ Al_2O_3 microsphere with a volume of 40 cm³ was prepared as a catalyst for the process of heating monochloromethane in an airless place at high temperature [14]. A selective catalyst with high catalytic activity is selected for the process - 0.06-0.12 mm [15-16].

YuKTs-30/ Al_2O_3 mixture YuKTs-30-pure active ingredient and YuKTs-30/ Al_2O_3 with high catalytic activity selected for the implementation of the process and combined with a selective catalyst were brought (1- table [17].

Table 1.

Physico-chemical properties and composition of microspherical and YuKS-30/ Al_2O_3 selective catalyst with high catalytic activity selected for the process

No. t/p	Multiplier	Measurement beep	YuKTs-30 is a pure active ingredient	YuKTs-30/ Al_2O_3	microspherical YuKTs-30/ Al_2O_3
1	Shabasite phase scale	%	100	60	60
2	Linkage scope	% macc.	-	40	40
3	Zip surface	m ² /g	610	526	535
4	Pore size	cm ³ /g	0.33	0.35	0.35
5	Amount of acidic centers per unit volume	μmol/g	1860	1510	1120

The information given in Table 1 shows that YuKTs-30 with Al_2O_3 has a high catalytic activity selected for the process, and the surface area of the selective catalyst is much smaller than that of the pure active component of YuKTs-30. The binding component tightly weaves the YuKTs-30 microporous layer, as a result of which Al_2O_3 has a high catalytic activity selected for the process, and the surface of the selective catalyst layer is less dense than the pure active component. A decrease in the amount of acidic centers per unit volume is also associated with hyddi shy. Implementation of the process in YuKS-30/ Al_2O_3 microspheres in pseudo-dilution furnace allows for an increase in monochloromethane convection compared to the conversion in YuKS-30/ Al_2O_3 with a fixed layer [18-20].

Experimental part

The activity of the selective catalyst layer with high catalytic activity selected for the process decreases

to different values during 500 minutes of operation: in YuKTs-30/ Al_2O_3 mikpofepas –36.8%, in YuKTs-30/ Al_2O_3 –36.6% , which suggests a similarity in the deactivation of the cell.

The observed reduction of monochloromethane conversion in selective catalysts with high catalytic activity is associated with changes in the physico-chemical structure of YuKTs-30 due to the component of the binder and its gpanylation process. The combination of pure active ingredient - UKTs with high catalytic activity and selective catalyst acid group selected for the implementation of the process makes it possible to reduce the observed decrease in the activity of the product.

Mixing YuKTs-30 with a binding component does not lead to a significant change in the quality of the product, but when combined with YuKTs-30-pure active ingredient, it strongly affects the amount of clay per unit; the volume of YuKTs-30/ Al_2O_3 , it increased the initial concentration of monochloromethane to 66%.

In both cases, the activity of the catalyst with high catalytic activity selected for the implementation of the process, and with the increase in the selective catalyst operating time, the activity of the catalyst with high catalytic activity selected for the implementation of the catalytic oxidative chlorination process of methane in the presence of air oxygen in the presence of hydrogen chloride for the implementation of the process is observed. In YuKTS-30/ Al₂O₃ 500 minutes after the start of the experiment, monochloromethane concentration decreases to 42%, in YuKTS-30/SiO₂ it decreases to only 36%.

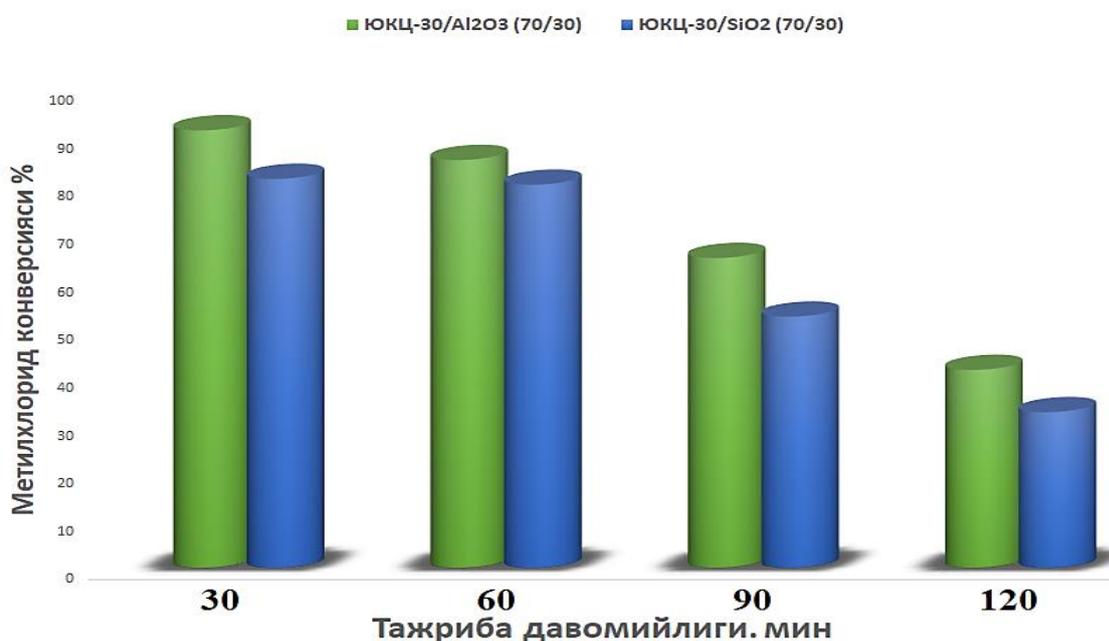
In YuKTS-30/Al₂O₃ and YuKTS-30/SiO₂ in sample the general selectivity for lower molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons, i.e. ethylene and propylene, has high catalytic activity selected for the process and

after 500 minutes of operation of the selective catalyst, 82 mol.% and reaches 75 mol.%.

Al₂O₃, which has high catalytic activity and selective catalyst, as a binding component, to carry out the heating process at high temperature in an airless place.

Experimental results and their discussion

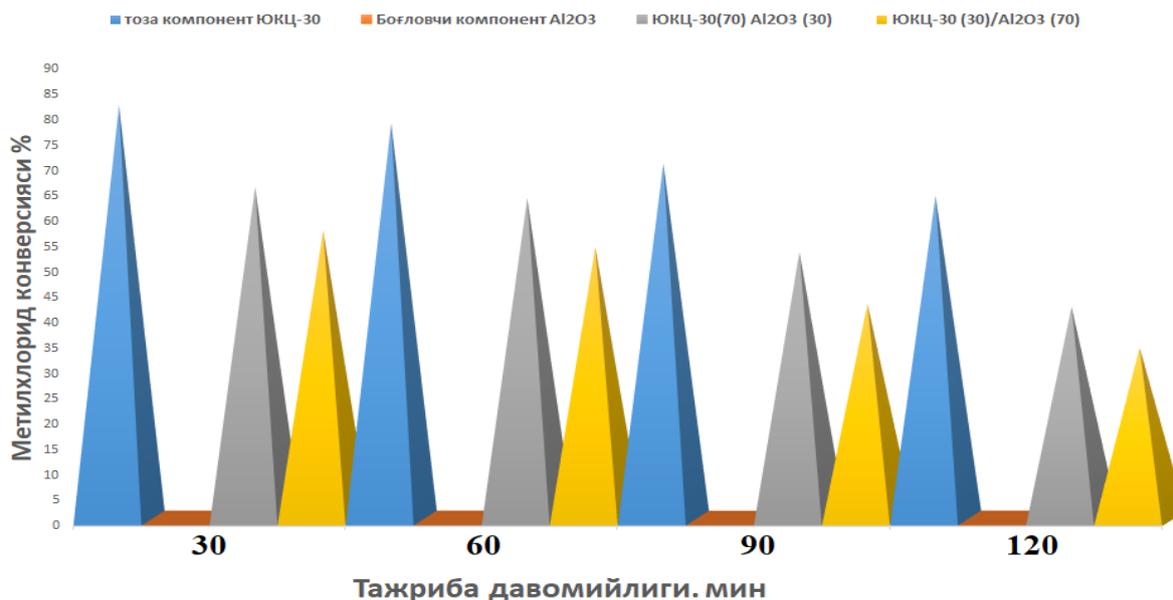
A series of experiments carried out a catalyst bed process with high catalytic activity selected for the catalytic oxidative chlorination of methane under the influence of hydrogen chloride in the presence of air oxygen to realize a stationary process at a temperature of 430°C and a volumetric rate of 1500 coat⁻¹ of monochloromethane. Information about laboratory experiments is in the following passage.



Temperature 430°C, volume speed – 1500 coat⁻¹
 1-YuKTS-30/Al₂O₃ (70/30); 2-YuKTS-30/SiO₂ (70/30)

Figure 1. The dynamics of CN₃Cl convective change depending on the duration of the experiment

Al₂O₃ binding agent, which has high catalytic activity and selected for the implementation of the process is added to the selective catalyst composition, which leads to a decrease in the activity of the catalyst.



1st pure component YuKTs-30; 2-Binding component Al₂O₃; 3-YuKTs-30(70)/Al₂O₃ (30) 4-YuKTs-30 (30)/Al₂O₃ (70)

Figure 2. Depending on the duration of the experiment, a catalyst with high catalytic activity and a selective catalyst, selected for the implementation of the type process, the binding component and the active component, are the dynamics of the change of the CN₃Cl condenser

According to the results of the research, the interaction process of YuKTs-30 with the binder does not cause a change in the product and its quality. Main products is C₂-C₄ lower molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons, i.e. ethylene and propylene, and secondary products is C₁-C₅₊ paraffinlap. High catalytic activity and selective YuKTs-30/Al₂O₃ composition were chosen for the implementation of the process in the catalyst, with a simultaneous decrease in the polypropylene concentration, a significant increase in the ethylene concentration is observed, but in this case, the decreasing tendency of the total concentration is reversed with an increase in the duration of the experiment.

It should be noted that increasing the amount of the binding component Al₂O₃ to 60 mac.% in a selective catalyst with a high catalytic activity selected for the implementation of the process causes a decrease in the selectivity of ethylene production by no more than 5 mol.%.

The general selectivity of low molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons, i.e. ethylene and propylene (ethylene, polypropylene) is present in YuKTs-30-pure active ingredient and YuKTs-30(60)/Al₂O₃ (40) is the

selected catalyst for the ongoing process and has a high catalytic activity and is 82 mol.% in 500 min of selective catalyst operation, the increase in the amount of the binding component leads to a significant decrease of the total selectivity to 79 mol.% for lower molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons, i.e., ethylene and propylene.

Conclusion

It was found that the catalyst used in Japan for heating monochloromethane at high temperature without air, using Al₂O₃ as a binding component, exhibits catalytic activity.

Al₂O₃ prepared on the basis of YuKTs-30 with catalytic activity and selective catalyst has a much smaller surface area than the pure active component of YuKTs-30.

The overall selectivity of low molecular unsaturated ethylene series hydrocarbons (ethylene, polypropylene) is 82 mol.% in 500 minutes of operation of the YuKTs-30-pure active component and YuKTs-30(60)/Al₂O₃ (40) catalyst. It is the increase in the amount of the binding component leads to a significant decrease of the total selectivity for ethylene and propylene lap up to 79 mol.%.

References:

- Chen J.Q., Vora B.V. Most recent developments in ethylene and propylene production from natural gas using the UOP/Hydro MTO process. // 7th Natural Gas Conversion Symposium. Dalian, China, June 6-10. - 2004. - abs. 1-01-071.
- Zhao T.S., Takemoto T., Tsubaki N. Direct synthesis of propylene and light olefins from dimethyl ether catalyzed by modified H-ZSM-5. // Catalysis Communications. - 2006. - Vol. 7. - PP. 647.
- Shevchuk V.U., Abadjev S.S., Pzikh I.P., Krupey T.I. Obtaining unsaturated hydrocarbons from methane through methyl chloride. // Chemistry of solid fuels. - 1993. - No. 2. - PP. 89.
- Treger Yu.A., Rozanov V.N., Timoshenko A.V. Production of lower olefins from natural gas through the synthesis and pyrolysis of methyl chloride // Gazokhimiya, 2010, No. 2. PP. 44–50.
- Wei Y., Zhang D., Liu Z., Su BL. Highly efficient catalytic conversion of chloromethane to light olefins over HSAPO-34 as studied by catalytic testing and in situ FTIR. // Journal of Catalysis. - 2006. - Vol. 238. - PP. 46.

6. Treger Yu.A., Rozanov V.N., Lunkov S.A., Murashova O.P., Dasaeva G.S. Catalytic pyrolysis methyl chloride for the production of ethylene and propylene. // *Kataliz v promyshlennosti*, 2009. - No. 2. - S. 14.
7. Moiseev I.I. Gas and ethylene. Alternative oil – est. // *Chem J. (Khimichesky magazine)*. 2008. No. 4. PP 28–31.
8. Wei Y., Zhang D. Highly efficient catalytic conversion of chloromethane to light olefins HSAPO-34 as studied by catalytic testing and in situ FTIR // *J. Catal.* 2006. Vol. 238. No. 1. PP. 46–57.
9. Svelle S., Aravinthan S., Bjørgen M., Lillerud K.P., Kolboe S., Dahl I.M., Olsbye U. The methyl halide to hydrocarbon reaction over H-SAPO-34 // *J. Catalysis*. 2006. Vol. 241. No. 2. PP. 243–254.
10. Wei Y., Zhang D. Methyl halide to olefins and gasoline over zeolites and SAPO catalysts: A new route of MTO and MTG // *Chin. J. Catal.* 2012. Vol. 33. No. 1. PP. 11–21.
11. Wei Y., Zhang D., Xu L., Chang F. Synthesis, characterization and catalytic performance of metal-incorporated SAPO-34 for chloromethane transformation to light olefins // *Catalysis Today*. 2008. Vol. 131. PP. 262–269.
12. Izadbakhsh A., Farhadi F., Khorasheh F., Sahebdehfar S., Asadi M., Feng Y.Z. //Effect of SAPO-34's composition on its physico-chemical properties and deactivation in MTO process // *Appl. Catal. A: General*. 2009. Vol. 364. PP. 48–56.
13. Treger Yu.A., Rozanov V.N., Flid M.R. Catalytic method processing methane. // Application No. 2008115140/04 (016915) from 22.04.2008.
14. Treger Yu.A., Rozanov V.N., Timoshenko A.V. Production of lower olefins from natural gas through the synthesis and perolysis of methyl chloride. // *Gazokhimiya*, 2010, No. 2. PP. 44–50.
15. Aslanov, SC, Bukharov, AQ, Faizullayev, NI Catalytic synthesis of S₂-S₄-alkenes from dimethyl ether// *International Journal of Engineering Trends and Technology*, 2021, 69(4), PP. 67–75.
16. Faizullaev N.I. et al. Catalytic change of C₁-C₄-alkanes // *International Journal of Control and Automation*. - 2020. - Vol. 13. – no. 2. - PP. 827-835.
17. Omanov B.S., Faizullaev N.I., Khatamova M.S. Vinyl acetate production technology// *International Journal of Advanced Science and Technology*, 2020, 29(3), PP. 4923–4930.
18. Tursunova N.S., Faizullaev N.I. Kinetics of the reaction of oxidative dimerization of methane// *International Journal of Control and Automation*, 2020, 13(2), PP. 440–446.
19. Fajzullaev N.I., Fajzullaev Kinetic regularities in the reaction of the oxidizing condensation of methane on applied oxide catalysts// *'Khimicheskaya Promyshlennost'*, 2004, (4), PP. 204–207
20. F.N. Temirov, J. Kh. Khamroyev, N.I. Faizullayev, G. Sh. Haydarov and M. Kh. Jalilov. Hydrothermal synthesis of zeolite HSZ-30 based on kaolin // *IOP Conference Series: Earth and Environmental Science*. - IOP Publishing, 2021. - Vol. 839. - no. 4. – S. 042099.

ДЛЯ ЗАМЕТОК

Научный журнал

**UNIVERSUM:
ХИМИЯ И БИОЛОГИЯ**

№ 1(115)
Январь 2024

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, 1

16+