



UDK: 543.6 (31.8)

**Zuhra ASROROVA,**

*Jizzax davlat pedagogika universiteti tayanch doktoranti*

*E-mail: asrorova96@list.ru*

**Zuhra YAXSHIYEVA,**

*Jizzax davlat pedagogika universiteti professori*

**Marhabo JURAYEVA,**

*Abu Ali ibn Sino nomidagi Jizzax jamoat salomatligi texnikumi o'qituvchisi*

**Dilnoza SAIDMIRZAYEVA,**

*Jizzax pedagogika instituti assistent o'qituvchisi*

*JizPi dotsenti D.Xadjiboyev taqrizi ostida*

## 2-AMINO-5-ETHYL-1,3,4-THIADIAZOLE THERMOCHEMICAL ANALYSIS

*Annotation*

Today, the identification of complexes formed by heavy metals with organic compounds is widely used. For this purpose, the chosen substance must meet the reagent requirements. In this article, the thermodynamic analysis of 2-amino-5-ethyl-1,3,4-thiadiazole, a complex organic compound, was conducted, and the results obtained were compared with the literature [1,2]. Thermochemical research on 2-amino-5-ethyl-1,3,4-thiadiazole aims to identify possible correlations for evaluating the energy properties, structural characteristics, and stability of the compounds[3].

**Key words:** 2-amino-5-ethyl-1,3,4-thiadiazole, reagent, HOMO, LUMO, bond energy, metal complex, electrostatic potential.

## 2-АМИНО-5-ЭТИЛ-1,3,4-ТИАДИАЗОЛ: ТЕРМОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

*Аннотация*

На сегодняшний день для определения комплексов, образованных тяжёлыми металлами с органическими веществами, широко используется этот метод. Для этого выбранное вещество должно соответствовать требованиям реактива. В данной статье проведён термодинамический анализ 2-амино-5-этил-1,3,4-тиадиазола, сложного органического соединения, и полученные результаты были сопоставлены с литературными данными [1,2]. Термохимическое исследование 2-амино-5-этил-1,3,4-тиадиазола направлено на выявление возможных корреляций для оценки энергетических свойств, структурных характеристик и стабильности соединений [3].

**Ключевые слова:** 2-амино-5-этил-1,3,4-тиадиазол, реактив, HOMO, LUMO, энергия связи, металлический комплекс, электростатический потенциал.

## 2-AMINO-5-ETIL-1,3,4-TIADIAZOLNING TERMOKIMYOVIY TAHLILI

*Annotatsiya*

Bugungi kunga kelib og'ir metallarni organik moddalar bilan hosil qilgan komplekslari asosida aniqlash keng qo'llanilmoqda. Buning uchun tanlangan modda reagent talablariga javob berishi kerak. Ushbu maqolada 2-amino 5-etil- 1,3,4-tiadiazol murakkab organik birikma termodinamik tahlil qilindi va olingan natijalar adabiyotlar bilan taqqoslandi [1.2]. 2-amino-5-etil-1,3,4-tiadiazolni termokimyoviy tadqiq qilish - bu birikmalarning energiya xossalari va strukturaviy xususiyatlari va barqarorligini baholash uchun mumkin bo'lgan bog'liqlikni aniqlashga qaratilgan [3].

**Kalit so'zlar:** 2-amino-5-etil-1,3,4-tiadiazol, reagent, HOMO, LUMO, bog' energiyasi, metall kompleks, elektrostatik potentsial.

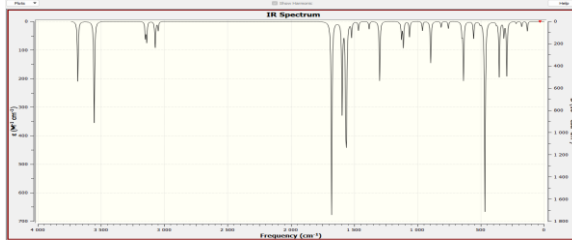
**Kirish. 2-amino-5-etil-1,3,4-tiadiazol** – bu geterotsiklik birikma bo'lib, tiadiazol halqasi bilan bog'langan amino guruh va C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>- guruhini o'z ichiga oladi. Bu birikma, ko'pincha biologik faol moddalar yoki farmatsevtika va analik kimyo tadqiqotlari uchun muhim bo'lishi mumkin. Xususan uning og'ir metall atomlari bilan kompleks birikmalar hosil qilishi ushbu metallarni aniqlash va tahlil qilishda ahamiyatlidir.

**Mavzuga oid adabiyotlar tahlili.** Peter Atkins va Ronald Friedmanlarning "Molecular Quantum Mechanics" kitobida molekuladagi bog'lanishlarning vibratsion holatlari IQ spektroskopiya yordamida o'rganiladi. 2-amino-5-etil-1,3,4-tiadiazol molekulasidagi amin guruhlarning va etil guruhining qanday bog'lanishlarni ifodalashini kvant kimyo yordamida hisoblash mumkin [4] deyilgan. Shunga ko'ra o'rganish uchun olingan modda molekulasi IQ spektroskopiyada tahlil qilindi (1-rasm). David Young o'zining "Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems" kitobida IQ spektroskopik tahlilni qanday o'tkazish hamda amin va etil guruhlarning IQ spektridagi o'zgarishlarini hisoblash haqida ko'rsatmalar berib o'tgan. 2-amino-5-etil-1,3,4-tiadiazol molekulasida ham yuqorida keltirilgan funksional guruhlar mavjud [5]. Isha Singx, Lamy H Al-Vahaibi va boshqalar biz tanlagan moddaga yaqin xossalarga ega 2-amino-5-triflorometil-1,3,4-tiadiazolning TD-DFT natijalari bilan hisoblangan o'tish to'lqin uzunliklari eksperimental ma'lumotlarga yaxshi mos kelishini aytib o'tganlar hamda birikmaning monomeri N-H N vodorod aloqalari orqali dimerlarni hosil qilish uchun qo'shilganligi sababli, biz vodorod bog'ining kuchini baholash va tizim ichidagi zaryad o'tkazuvchanligini (molekulyar va molekulalararo) baholash uchun monomer bilan bir qatorda tabiiy bog'lanish orbital (NBO) tahlilini o'tkazganlari haqida ilmiy maqolalarida habar berishgan [6].

**Tadqiqot metodologiyasi.** Ushbu ishda boshqa olimlarning tadqiqotlari, ilmiy maqolalar, monografiyalar, va kvant kimyo metodlari asosida 5-etil-1,3,4-tiadiazol-2-amino molekulasining tuzilishi, spektral xususiyatlari, bog' uzunligi va zaryad taqsimoti

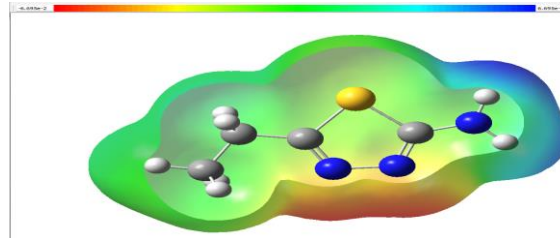
haqidagi mavjud ma'lumotlar yig'iladi. Molekulaning elektron strukturasi, zaryad taqsimotini va bog' uzunliklarini o'rganish uchun kvant kimyo va molekulyar simulyatsiya metodlarini qo'llash zarurdir. Kerakli adabiyotlar tahlilidan so'ng Density Functional Theory (DFT) yoki boshqa kvant kimyo metodlari yordamida molekuladagi elektron struktura va orbitalar tahlili amalga oshiriladi. DFT metodini ishlatish uchun HOMO va LUMO shuningdek IQ spektroskopik tahlili va ushbu moddada bog' uzunligi va molekulada zaryadning taqsimlanishi ko'rib chiqiladi.

**Tahlil va natijalar.** Dastlab 5-etil-1,3,4-tiadiazol-2-aminomolekulasi IQ spektroskopik tahlildan o'tkazildi (1-rasm). Ushbu tahlil bu turdagi birikmalarning strukturasi aniqlashda juda muhimdir. IQ spektroskopik tahlil molekuladagi alifatik va aromatik guruhlarning mavjudligini aniqlash, funksional guruhlarning joylashuvini va turini belgilash, kimyoviy tuzilishdagi o'zgarishlarni aniqlash, shu jumladan molekulada ichidagi bog'lanishlarning yutilish chastotalarining farqlanishini o'rganish, kompozitsiyaning to'g'riligini tekshirishda muhim ahamiyatga ega.



**1-rasm.** 5-etil 1,3,4-tiadiazol 2-aminoning IQ-spektrometrik tahlili.

Elektrofil va nukleofil jarayonlar uchun reaktiv markazlarni bashorat qilish uchun optimallashtirilgan B3LYP/6-311G(d,p)/Lan12DZ geometriyasida elektrostatik sirt potentsiallari olindi. Sirdagi elektrostatik potentsialning turli qiymatlari turli xil ranglar bilan ifodalanadi, va potentsial quyidagi tartibda ortadi: qizil < to'q sariq < sariq < yashil < ko'k. Molekulyar elektrostatik potentsial (MEP) ning salbiy qizil hududlari elektrofil reaktivligi va ijobiy (ko'k) hududlari nukleofil reaktivligi bilan bog'liq. Molekulaning MEP tahlilidan ko'rinib turibdiki, tiadiazol halqasining azotlari ko'proq salbiy potentsialga ega, aminokislotalarning vodorodlari esa ijobiydir (2-rasm).

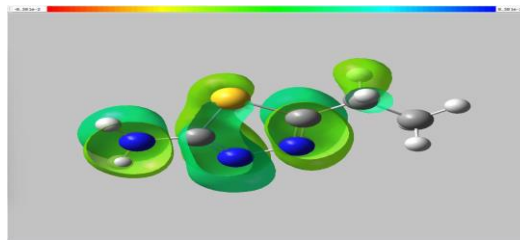


**2-rasm.** 5-etil 1,3,4-tiadiazol 2-aminoning optimallashtirilgan B3LYP/6-311G(d,p)/Lan12DZ geometriyasida elektrostatik sirt potentsiallari.

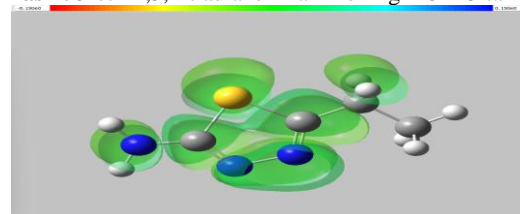
Frontier Molekular Orbital (FMO) tahlili.

HOMO energiyasi elektronlarni berish qobiliyatini, LUMO elektronlarni qabul qilish qobiliyatini va HOMO va LUMO orasidagi bo'shliq molekulaning kimyoviy barqarorligini tavsiflaydi. DFT/B3LYP/6-311G(d,p)/Lan12DZ molekulasi uchun HOMO-LUMO energiya va energiya bo'shlig'i (DE) va natijalar 1-jadvalda keltirilgan.

Ijobiy faza qizil, salbiy faza yashil. Rasmdan ko'rinib turibdiki, HOMO asosan gidroksil guruhlarning kichik hissasi bilan piridin halqasida lokalizatsiya qilingan. Boshqa tomondan, LUMolar asosan uglerod-azot va uglerod-kislorod aloqalarida lokalizatsiya qilinadi. Elektronlarning HOMO va LUMO dan o'tishi hisobiga asosiy holatdan qo'zg'aluvchan holatga elektron o'tish asosan p - p\* o'tish hisobiga sodir bo'ladi.



**3-rasm.** 5-etil 1,3,4-tiadiazol 2-aminoning HOMO tahlili.



**4-rasm.** 5-etil 1,3,4-tiadiazol 2-aminoning LUMO tahlili.

PMO ning hisoblangan dipol momenti, qutblanish qobiliyati va energiyalari

Dipol momenti (Debye)	Polarizatsiya (a.u.)	Energiya HOMO	Energiya LUMO	Energiya $\Delta E$
3,125667	70,62892	-0,22502	-0,00639	0,21863

1-jadval

Jadvaldagi natijalarga ko'ra tanlangan moddani reagent sifatida qo'llash mumkin. 5-etil 1,3,4-tiadiazol 2-aminoning Cu(II), Zn(II), Mn(II), Co(II), Cr(III) va Cd(II) kabi metallar bilan ma'lum sharoitlarda kompleks birikmalar hosil qilishi o'rganilgan [7]. Termokimyoy. Ushbu dastur yordamida termodinamik parametrlar ham hisoblab chiqilgan.

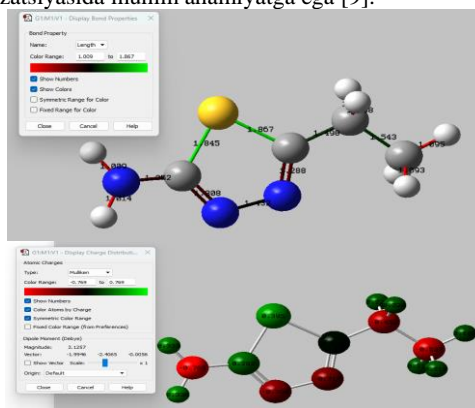
## 2-jadval

Ligand molekulasini 2-(5-metil-[1,3,4]tiadiazol-2-ilsulfo) sirka kislotasining termodinamik xususiyatlari

Xususiyatlari	Qiymati	O'lchov birligi
Nol nuqtali energiya	64,845	Kkal/mol
Ichki energiya	70,674	Kkal/mol
Entalpiya (H)	71,267	Kkal/mol
Gibbs bo'sh energiya (G)	43,141	Kkal/mol
Issiqlik sig'imi (CV)	33,623	kal/Mol-Kelvin
Entropiya (S)	94,333	kal/mol * Kelvin

2-jadvalda ko'rsatilgan natijalar o'rganib chiqildi va mavjud manbalar bilan taqqoslandi [8].

Molekuladagi zaryadlarning taqsimlanishida molekuladagi amino guruh, tiadiazol halqasi, oltingugurt atomi atomlarning elektron tuzilmasi va bog'larning polarizatsiyasida muhim ahamiyatga ega [9].



## 5-6-rasmlar. Bog' uzunligi va molekulada zaryadning taqsimlanishi

Bog' uzunligi molekulaning strukturasi va uning reaktivligini belgilovchi asosiy omil hisoblanadi. Zaryadning taqsimlanishi molekuladagi elektron zichligi va atomlar o'rtasidagi elektron taqsimoti bilan bog'liq bo'lib, uning HOMO va LUMO orbitalarining farqi yordamida aniqlanadi.

**Xulosa.** Ushbu tadqiqotda 2-amino-1,3,4-tiadiazol 5-etil molekulasi IQ-spektroskopik xususiyatlari, HOMO va LUMO orbitalari tahlil o'rganildi. Molekulaning spektral xususiyatlari va elektron strukturasi yanada chuqurroq tushunish uchun, molekulaning optik va elektron tahlillari olib borildi. IQ-spektroskopik tahlil natijalari molekulaning so'ngi energiya darajalaridagi o'tishlarni aniqlashga yordam berdi. Tadqiqot molekulaning elektron tuzilmasida 5-etil guruhining molekulaga kiritilishi bilan bog'liq spektroskopik o'zgarishlarni ko'rsatdi. Bu o'zgarishlar molekuladagi elektronlar uchun yangi o'tishlarni keltirib chiqargan bo'lib, uning optik va elektron xususiyatlarini kuchaytiradi. HOMO va LUMO orbitalari tahlili, molekulaning elektron qonuniyatlarini va uning reaktivligini chuqurroq tushunishga imkon berdi. HOMO orbitali bilan LUMO orbitali orasidagi energiya farqi ( $\Delta E$  0,21863) molekulaning elektron uzatish qobiliyatini ko'rsatadi. Tadqiqotda, 2-amino-1,3,4-tiadiazol 5-etil molekulasi  $\Delta E$  qiymati nisbatan kichik bo'lib, bu molekulani elektronlarni samarali qabul qilish va uzatishga qodir qiladi. Bu xususiyatlar undan og'ir metallarni aniqlash imkonini ham beradi.

## ADABIYOTLAR

- [https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2-Amino-5-ethyl-1\\_3\\_4-thiadiazole](https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/compound/2-Amino-5-ethyl-1_3_4-thiadiazole)
- Luísa MPF Amaral, Tânia MT Karvalyo va Mariya DMC Ribeiro da Silva "Amino-1,2,4-triazol hosilalarining termokimyosi" 2024 yil 03 may/ Termal tahlil va kalorometriya jurnali.
- Ana CMO Lima, Ana LR Silva, Xorxe M. Gonsalves va Mariya DMC Ribeiro da Silva ["2-amino-1,3,4-tiadiazol va ikkita alkil almashirilgan aminotiadiazollarning nisbiy barqarorligi bo'yicha termodinamik tadqiqot"] 25-sentabr 2024-yil/ Termal tahlil va kalorometriya jurnali.
- "Molecular Quantum Mechanics" by Peter Atkins and Ronald Friedman /Oxford University Press// 1970.
- "Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real-World Problems" David C. Young /Wiley-Interscience // ISBN: 978-0471373547 /2001.
- Singh I, Al-Wahaibi LH, Srivastava R, Prasad O, Pathak SK, Kumar S, Parveen S, Banerjee M, El-Emam AA, Sinha L. "DFT Study on the Electronic Properties, Spectroscopic Profile, and Biological Activity of 2-Amino-5-trifluoromethyl-1,3,4-thiadiazole with Anticancer Properties". ACS Omega. 2020 Nov 13;5(46):30073-30087. doi: 10.1021/acsomega.0c04474. PMID: 33251442; PMCID: PMC7689922.
- Nuralieva G.A., Aliyeva M. 2-AMINO 1,3,4-TIADIAZOLNING 3d-METALLAR VA GLUTAR KISLOTA BILAN MURAKKAL BIRIKMALARI // Universum: ximiya i biologiya : elektron. nauchn. jurn. 2023. 11(113). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/16087> (ma'lumotlar manzili: 26.02.2025).
- [https://www.chemicalbook.com/chemicalproductproperty\\_ru\\_cb2466196.htm](https://www.chemicalbook.com/chemicalproductproperty_ru_cb2466196.htm).
- "Introduction to Computational Chemistry" Frank Jensen // Wiley /2017 yil (3-nashr)