

## 2-GIDROKSIMETILBENZIMIDAZOL MOLEKULASINI KVANT-KIMYOVIY HISOBLASHLAR ORQALI ELEKTRON TUZILISHINI O'RGANISH

*Gapurova Lobar Narzullayevna*

*O'zbekiston Milliy universiteti o'qituvchisi*

[lobar\\_gapurova@mail.ru](mailto:lobar_gapurova@mail.ru)

*Raxmonova Dilnoza Salamovna*

*O'zbekiston Milliy universiteti noorganik kimyo kafedrasini mudiri, k.f.n., dotsent*

[d.rakhmonova81@mail.ru](mailto:d.rakhmonova81@mail.ru)

*Kadirova Shaxnoza Abduxalilovna*

*O'zbekiston Milliy universiteti kimyo fakulteti dekani, k.f.n., prof.*

[kadirova.shaxnoza@mail.ru](mailto:kadirova.shaxnoza@mail.ru)

*Olimova Manzura Ilhomovna*

*O'zR FA O'simlik moddalar kimyosi instituti katta ilmiy xodimi, PhD*

[olimova\\_manzura@gmail.com](mailto:olimova_manzura@gmail.com)

### Аннотация

Kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasining elektron tuzilishi va reaksiya qobiliyati, raqobatdosh donor markazlari hamda energetik, elektron xususiyatlari, burchak va bog' uzunlik qiymatlari aniqlandi.

### Калит so'zlar

2-gidroksimetilbenzimidazol, ligand, donor markaz, manfiy effektiv zaryad qiymati, molekulyar elektrostatik potensial.

### Аннотация

С помощью квантово-химических расчетов определены электронная структура и реакционная способность молекулы 2-гидроксиметилбензимидазола, конкурирующие донорные центры и энергия, электронные свойства, значения угла и длины связи.

### Ключевые слова

2-гидроксиметилбензимидазол, лиганд, донорный центр, отрицательный эффективный заряд, молекулярный электростатический потенциал.

### Abstract

By means of quantum chemical calculations, the electronic structure and reactivity of the 2-hydroxymethylbenzimidazole molecule, competing donor centers and energy, electronic properties, values of the angle and bond length were determined.

### Keywords

2-hydroxymethylbenzimidazole, ligand, donor center, negative effective charge, molecular electrostatic potential.

Benzimidazol asosidagi fiziologik faol birikmalar molekulasida elektrofil va elektrofob reaksiya markazlar bilan kuchli qutblangan guruhlar hosil qiladi va bu bilan ular biologik faollikni namoyon etib, fermentlar yoki boshqa retseptik hujayralarni o'rab olish uchun dastlabki reagent vazifasini o'taydi [1-2]. Keltirilgan ma'lumotlar aniq nazariy ahamiyatga ega bo'lib, sintez qilingan koordinatsion birikmalarning elektron, stereokimyoviy, kinetik va termodinamik xususiyatlari hamda xossalari o'rganish sohasini aniqlab beradi.

Hozirgi kunda kvant-kimyoviy hisoblash usullari moddalarning elektron tuzilishini o'rganish uchun eng muhim va qulay usul hisoblanadi. Kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida murakkab tuzilishga ega bo'lgan birikmalarning elektron tuzilishini o'rganish mumkin. Shuningdek, polifunksional ligandlarning koordinatsiyaga uchraydigan raqobatdosh donor markazlarni oldindan aytib berish imkonini beradi.

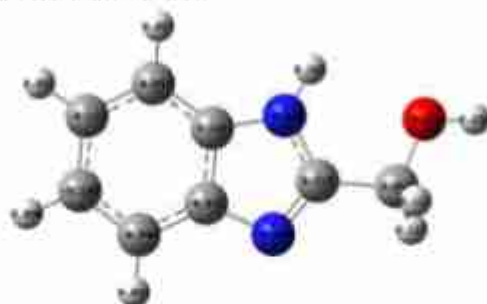
Ishdan maqsad, ligand 2-gidroksimetilbenzimidazolni (L) kvant-kimyoviy hisoblashlar orqali geometrik va elektron tuzilishini o'rganishdan iborat.

Molekulaning kvant-kimyoviy hisoblashlari Gaussian 09 dasturiy paketida VZLYP nazariyasi doirasida LanL2DZ bazisida to'liq geometrik parametrlarni optimallashtirish bilan o'rganildi [2]. Bu



usulga ko'ra 2-gidroksimetilbenzimidazolni elektron tuzilishi va reaksiyon qobiliyati, raqobatdosh donor markazlari hamda ligand molekulasining energetik, elektron xususiyatlari, burchak va bog' uzunlik qiymatlari aniqlandi.

2-gidroksimetilbenzimidazolning optimizatsiyalangan strukturasi benzol halqasida p,  $\pi$  elektronlar hamda unga tutashgan imidazol halqasidagi azot atomlarining taqsimlanmagan elektron juftlari hisobiga konyugirlanish kuzatiladi. Natijada imidazol halqasidagi azot atomlarida birmuncha yuqori manfiy effektiv zaryad qiymatiga (-0.438 va -0.334) ega bo'ladi (1- rasm). Gidroksil guruhidagi kislorod (O1) atomida esa (-0,398) manfiy effektiv zaryad qiymatiga teng. Bu esa mazkur atomlarning koordinatsion bog' hosil qilish imkoniyatlarini ko'rsatib beradi. Shunday qilib, 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasidagi manfiy effektiv qiymatlari bo'yicha N4 va O1 hisobiga bidentatlikni namoyon qilishi ehtimolligi juda yuqori. Bundan, 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasidagi azot va gidroksil guruhidagi kislorod atomlari bidentatlikni namoyon etib koordinatsiyada ishtirok etadi degan nazariy xulosaga kelish mumkin.



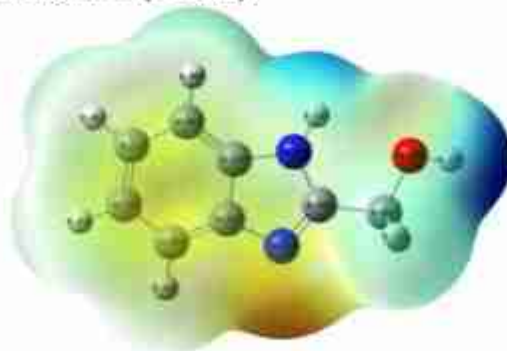
1- rasm. L molekulasidagi atomlarning manfiy effektiv zaryad qiymati

L molekulasidagi molekulyar elektrostatik potentsialidagi (MEP) qizil va ko'k sohalari mos ravishda manfiy va musbat elektrostatik potentsiallarni ifodalaydi (2-rasm). MEP uchastkasining rang sxemasida qizil maydon manfiy elektrostatik potentsialga ega atomlarni ko'rsatadi,

qizil < to'q sariq < sariq < yashil < ko'k.

Rang intensivligi potentsial energiyaning mutloq qiymatiga proporsionaldir. Musbat elektrostatik potentsiallar ko'k sariq maydonda ko'rsatilgan va E-H bog'lanishlarida vodorodni xarakterlaydi. Yashil maydonlar molekulaning elektrostatik potentsiallari nolga yaqin bo'lgan qismlari (C-C va C-N) bog'lanishlarini ifodalaydi.

MEPning manfiy qizil joylari nukleofil reaktivlik bilan, musbat (ko'k) esa elektrofil reaktivligi bilan bog'liqdir. Liganddagi manfiy (qizil) hududlar molekuladagi endosiklik azot atomi va musbat hududlar (ko'k) esa vodorodlar atrofida joylashgan. Shunday qilib, ligand elektrofil azot atomiga ustunlik bilan hujum qilishini taxmin qilish mumkin (2-rasm).



2-rasm. L molekulasi molekulyar elektrostatik potentsial taqsimoti

Nazariy kvant-kimyoviy tadqiqotlar doirasida 2- gidroksimetilbenzimidazolning asosiy va qo'zg'algan holatlaridagi molekulyar orbitallari holati va elektron qo'zgalishlarning energetik ko'rsatkichlari aniqlandi. Jadvalda frontal (chegaraviy) molekulyar orbitallar (MO) asosiy holatdagi eng yuqori 6 ta va qo'zg'algan holatdagi eng quyi 6 ta MO energiyalari keltirilgan. Jadvaldan ko'rinib turibdiki, 35-MO, ya'ni elektron bilan to'lgan eng yuqori band molekulyar orbital (HOMO) va 36-MO esa qo'zg'algan (elektron bilan qoplanmagan) holatning eng quyi vakant molekulyar orbitali (LUMO) hisoblanadi (Jadval).

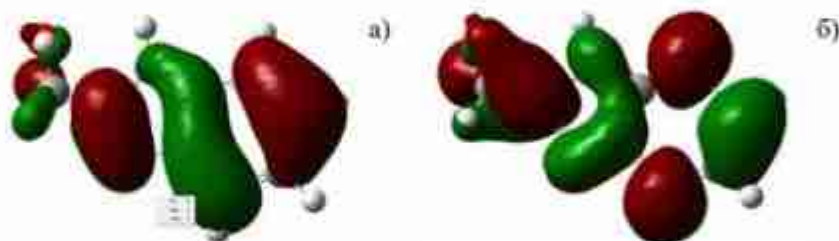
Adabiyotlardan ma'lumki, HOMO – LUMO farqi ta'qiqlangan zona yoki elektron egallashi mumkin bo'lmagan energetik holat deyiladi. Hisoblashlarning ko'rsatishicha, 2-gidroksimetilbenzimidazol uchun HOMO – LUMO farqi, ya'ni asosiy holatdagi eng yuqori MO (35) dan qo'zg'algan holatdagi eng quyi MO (36) ga o'tish uchun talab etiladigan energiya miqdori 4,4432 eV ni tashkil etadi.

Jadval

2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasidagi chegaraviy molekulyar orbitallar energiyalari

MO raqami	HOMO/LUMO	Energiyasi, eV
30	HOMO+5	-9,5791
31	HOMO+4	-8,8747
32	HOMO+3	-7,7531
33	HOMO+2	-7,0519
34	HOMO+1	-6,1565
<b>35</b>	<b>HOMO</b>	<b>-4,5778</b>
<b>36</b>	<b>LUMO</b>	<b>-0,1346</b>
37	LUMO+1	0,5289
38	LUMO+2	1,4302
39	LUMO+3	1,9177
40	LUMO+4	2,6820
41	LUMO+5	3,0142

3-rasmda 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasining 35 MO (HOMO) va 36 MO (LUMO) keltirilgan.



3-rasm. 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasi uchun frontal molekulyar orbitallar: a – HOMO, b – LUMO

Molekulyar elektrostatik potentsial taqsimoti bo'yicha ham 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasida elektron zichlikning azot va kislorod atomlarida ko'proq lokallashganini ko'rish mumkin (2-rasm). Shunday qilib, kvant-kimyoviy hisoblashlardan olingan natijalarga ko'ra, 2-gidroksimetilbenzimidazol molekulasidagi azot va kislorod atomlari koordinatsiyada ishtirok etadi degan nazariy xulosaga kelish mumkin.

#### ADABIYOTLAR

1. Wang X.J., Xi M.Y., Fu J.H., Zhang F.R., Chengn G.F., Yin D.L. Synthesis, biological evaluation and SAR studies of benzimidazole derivatives as H<sup>1</sup>-antihistamine agents // Chin. Chem. Lett., 2012. Vol.23. -P.707-710.
2. Singla P., Luxami V., Paul K. Benzimidazole-biologically attractive scaffold for protein kinase inhibitors // RSC Adv., 2014. Vol. 4. -P.12422-12440.
3. Серба П.В., Блинов Й.Ф., Мирошниченко С.П. Квантово-химические расчеты в программе Гауссиан по курсу "Физика низкоразмерных структур". -Таганрог: Издательство ТТИ ЙУФУ, - 2012. -С.100.