



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA ELMİN İNKİŞAFI FONDU

**Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondunun Gənc alim və mütəxəssislərin
4-cü birgə “Mənim ilk qrantım” müsabiqəsinin
(EİF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə**

YEKUN ELMİ-TEXNİKİ HESABAT

Layihənin adı: **Çoxfunksiyalı aşqarların və patoloji proseslərə qarşı rol oynayan bioaktiv maddələrin kompüter sintezi və canlı orqanizmlərdə immun müdafiə sistemlərinə təsiri**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Məmmədyarova Xədicə Nizami**

Qrantın məbləği: **50 000 manat**

Layihənin nömrəsi: **EİF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)-19/05/4-M-07**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **06 aprel 2018-ci il**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **12 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01 may 2018-ci il – 01 may 2019-cü il**

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

Diqqət! Uyğun məlumat olmadığı təqdirdə müvafiq bölmə boş buraxılır

Hesabatda aşağıdakı məsələlər işıqlandırılmalıdır:

1 Layihənin həyata keçirilməsi üzrə yerinə yetirilmiş işlər, istifadə olunmuş üsul və yanaşmalar

Layihənin mövzusunə uyğun olaraq qarşıya qoyduğumuz əsas məqsəd sürtkü materialları üçün yüksək təsirə malik çoxfunksiyalı yeni aşqarların, eləcə də canlı orqanizmlərdə baş verən bəzi patoloji proseslərə qarşı rol oynayan bioaktiv birləşmələrin müasir kompüter proqram təminatlarının imkanlarından istifadə edərək məqsədyönlü sintezi, həmçinin, alınacaq maddələrin immun müdafiə sistemlərinə təsirinin öyrənilməsi sahəsində məqsədyönlü və sistemli tədqiqatlar aparmaqdan ibarət olmuşdur. Ötən bir il ərzində aşağıdakı nəzəri-təcrübi elmi tədqiqatlar həyata keçirilmişdir:

I. Çoxfunksiyalı yeni alkilfenolyat aşqarların sintezi

Müasir texnika üçün motor yağlarının yaradılması müxtəlif funksional təsirə malik effektiv aşqarların hazırlanmasını tələb edir. Dünya praktikasında bu sahədə daha çox yayılmış və yüksək yuyuculuq xassələrinə malik metal tərkibli detergent aşqarlardan olan alkilfenolyatlardır. 90-cı illərin ortalarına qədər buraxılan alkilfenolyat aşqarlarının (БФК, ИХП-101, ЦИАТИМ-339 və s.) əksəriyyəti küllülüyünə və istismar xassələrinə görə müasir tələblərə cavab verməyən, yüksək qələviliyə malik olmayan xarici analoqlardan (Amoko-9230, Paranox-51 və s.) geri qalan və tərkibində barium olan məhsullardır.

Alkilfenolyat aşqarının qələviliyinin aşağı və küllülüynün yuxarı olması, mənəvi cəhətdən köhnəlmiş bu aşqarların istehsal həcmünün azalmasının məhz əsas səbəblərindəndir.

Bununla əlaqədar olaraq alkilfenolyat aşqarlarının çeşidinin yenilənməsi və keyfiyyətinin artırılmasına kəskin zərurət yarandı. Son 10 ilin elmi-texniki və patent ədəbiyyatının analizi göstərir ki, tərkibində

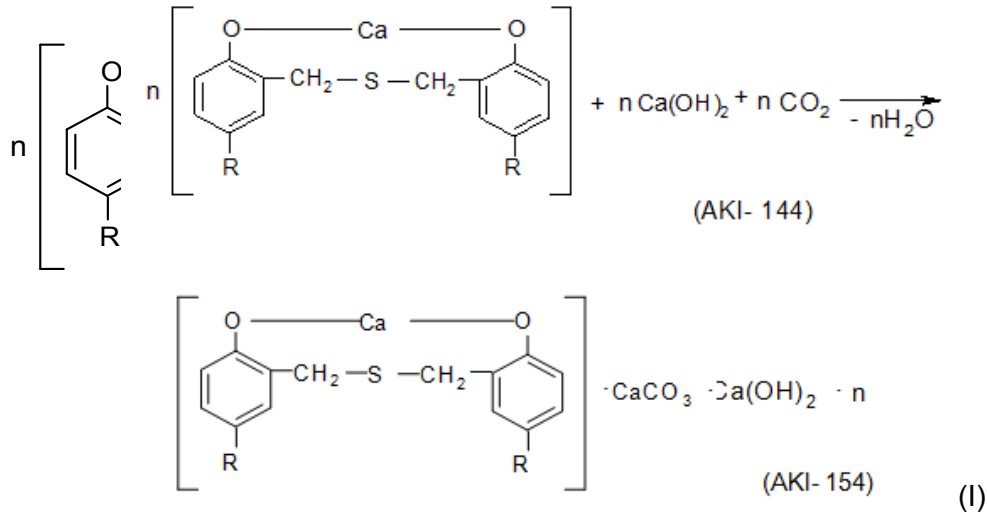
stexiometrik nisbətdən artıq metal (ən çox kalsium) olan yüksək qələvili karbonatlaşdırılmış alkilfenolyatlar istiqamətində aparılan elmi-tədqiqat işləri daha çox aktualıq kəsb edir.

Qələvi ədədi yüksək olan aşqarlar yüksək neytrallaşma xassələrinə malik olurlar, yağın oksidləşməsindən əmələ gələn turşuları neytrallaşdıraraq aşqarların oksidləşmə və korroziyaya qarşı davamlılıqlarını artırır.

1.1. Dodesilfenolun formaldehid və natrium sulfidin kondensləşmə məhsulunun karbonatlaşdırılmış kalsium duzu – AKİ-154d aşqarı

AKİ-154d aşqarının ilkin mərhələləri AKİ-144d aşqarı ilə uyğundur, yalnız karbonatlaşma prosesi ilə fərqlənir. AKİ-154d aşqarının alınması neytrallaşma prosesinə qədər ətraflı öyrənilmişdir. AKİ-154d aşqarını sintez edərək neytrallaşma prosesində stexiometrik nisbətdən artıq kalsium hidroksid istifadə olunur, promotor əlavə edilir və karbonatlaşma aparılır. Promotor həm neytrallaşma, həm də karbonatlaşma prosesində verile bilər. 5-6 saat neytrallaşmadan sonra karbon qazı 85°C-də 4-4.5 saat verilir. Karbonatlaşma məhsulu qurudulur və mexaniki qarışıqlardan sentrifuqa ilə ayrılır. AKİ-154d aşqarının qələvi ədədi 140-165 mqKOH/q, sulfat külü 13.5-16.8%, özlülüyü 60-70 mm²/s, kalsiumun miqdarı 4.0-5.5%, kükürdü 2.0-3.0%-dir. Yüksək qələvili aşqarlar promotorsuz alınmırlar.

AKİ-154d aşqarının alınma sxemi aşağıdakı kimidir:



Burada, R = -C₁₂(I)

AKİ-154d aşqarının fiziki-kimyəvi və funksional xassələrinə promotorların təsiri cədvəl 1-də verilmişdir.

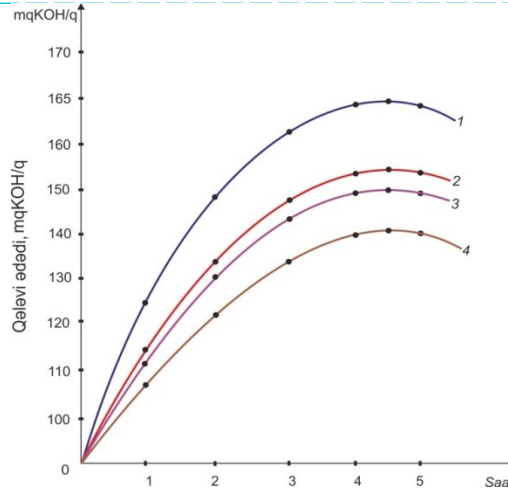
Cədvəl 1

AKİ-154d aşqarının fiziki-kimyəvi və funksional xassələrinə promotorların təsiri

AKİ-154d Aşqarı	Promotorlar	Aşqarların analizi		M-8 yağı 5% aşqarla		
		Kinematik özlülük, 100°C-də, mm ² /s	Qələvi ədədi, mq KOH/q	Korroziyalıq (qurğuşun lövhəciklərdə), q/m ²	Oksidləşmə stabilliyi (ИПО üzrə), 30 saat, cöküntü, %	Yuyuculuq xassəsi (ПЗВ üzrə), ball
1	Sirkə turşusu (1%)	60.1	140.4	2.2	0.8	0.5
2	Qliserin (3 %)	70.02	154.6	4.0	1.1	0.5
3	Dietanolamin(3%)	68.5	164.8	1.5	0.4	0-0.5
4	Etilenqlikol (3%)	60.4	150.0	5.1	0.85	0.5

Aşqarın alınması müxtəlif promotorlarla – sirkə turşusu, qliserin, etilenqlikol və dietanolaminlə aparılmışdır.

Promotorların AKİ 154d aşqarının qələvi ədədinə təsiri isə şəkil 1-də öz əksini tapmışdır.



Promotor: 1. dietanolamin; 2. qliserin; 3. etilenqlikol; 4. sirkə turşusu.

Şək. 1 Promotorların aşqarın qələvi ədədinə təsiri.

Cədvəl 1 və şəkil 1-dən görünür ki, promotor kimi dietanolamindən istifadə edəndə aşqarın funksional xassələri bir qədər, qələvi ədədi isə daha üstündür.

Cədvəl 2 (a) və (b)-də AKİ-154d aşqarının AKİ-144d aşqarından üstünlüyü görünür. Həmçinin, cədvəldə AKİ-154d aşqarı ilə müqayisəli xarici sənaye aşqarlarının – ВНИИ НП-714 və ОЛОА-218А göstəriciləri verilmişdir. Nəticələrdən aydın olur ki, AKİ-154d aşqarının korroziya qarşı xassələri xarici analoqlardan, oksidləşməyə, korroziyaya qarşı və yuyuculuq xassələri isə AKİ-144d aşqarından üstündür.

Cədvəl 2(a)

AKİ-154d aşqarının fiziki-kimyəvi və funksional xassələri

Keyfiyyət göstəriciləri	Aşqarlar			
	AKİ-144d	AKİ-154d	ВНИИ НП-714	ОЛОА-218А
Kinematik özlülük, 100°C-də, mm ² /s	65-75	55-65	–	–
Sulfat külü, %	6.5-8.0	13.5-16.2	20.5	17.6
Qələvi ədədi, mq, KOH/q	60-75	140-165	155	140
Kalsium %	1.8-2.2	4.2-5.8	5.5	4.8
Kükürd %	3.5-4.0	2.5-3.0	–	–

Cədvəl 2(b)

Bakı neftindən alınmış M-8 yağının, 5 % AKİ-144d, AKİ-154d, ВНИИ НП-714 və ОЛОА-218А aşqarları ilə göstəriciləri				
Qurğuşun lövhəciklərin korroziyalığı, q/m ²	4.5-5.0	1.5-2.0	7.5	9.8
*Oksidləşmə stabilliyi, (ИПО üzrə), 30 saat, çöküntü, %	0.4-0.6	0.2-0.4	0.5	0.45
Yuyuculuq xassələri, (ПЗВ üzrə), ball	0.5	0-0.5	0.5	0.5
Yağda həllolma	Tam	tam	Tam	Tam

*çöküntü 0.5% qədər davam gətirir hesab olunur.

II. Salisiliden tiosemikarbazon və qliksiliden tiosemikarbazonun keçid metal komplekslərinin sintezi, onların elektron spektrləri, maqnit momentlərinin və bioloji aktivliklərinin tədqiqi

Tiosemikarbazidin müxtəlif aldehidlər əsasında alınmış keçid metalları ilə kompleksləri tibbin ən aktual

problemlərindən olan malyariya, şiş, mikrob əleyhinə fəaliyyəti potensial faydalı kimyaterapiya xassələri diqqəti cəlb edir. Bu tiosemikarbazidin kimyəvi tərkibi ilə əlaqəlidir ki, dəyişkən mühitin bioloji təsiri sturuktur müxtəlifliyi və ion-zondlama qabiliyyəti göstərir.

2.1. Salisiliden tiosemikarbazon və qlioksiliden tiosemikarbazonun keçid metal komplekslərinin sintezi

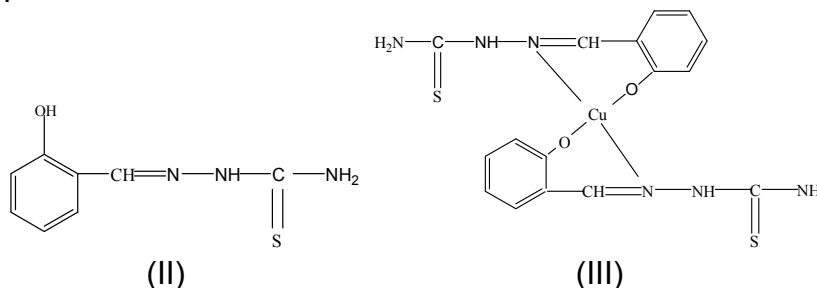
Tiosemikarbazid adətən keçid metal ionları ilə özünü xelat kimi aparır bu da tərkibindəki N və S atomlarının sayəsində mümkün olur, lakin bəzi vaxtlarda da özünü birmənalı liqand kimi göstərir ki, bunu kükürdün keçid metalları ilə geniş spektr verməsiylə kompleksin farmakoloji fəaliyyətinin bərpası sübut edir.

Tiosemikarbazon liqandının 3 komponentli olması ilə ONS əlaqədar qeyri adi quruluşda polimer növü və ya maqnit xassəsi göstərə bilər.

Tiosemikarbazidin salisil aldehydi ilə reaksiyası neytral mühitdə otaq temperaturunda aparılır. Bunun üçün salisil aldehydinin və tiosemikarbazidin uyğun miqdarları hesablanır, metanolda həll edilib su hamamında əks soyuducu ilə 2 saat müddətində reaksiya davam etdirilir.

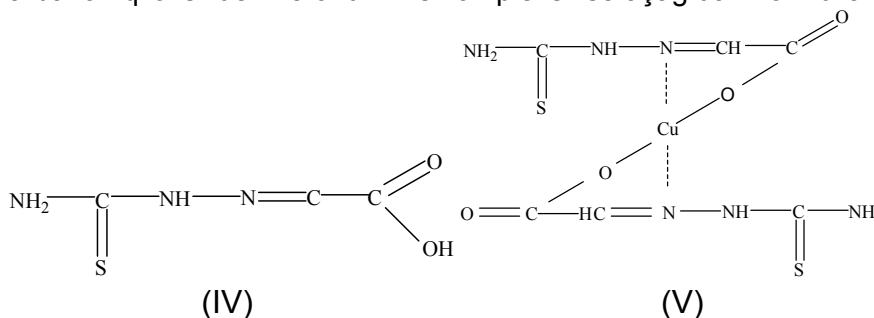
Aparılan sintezin sonunda alınan çöküntü süzülür, metanoldan yenidən kristallaşdırılır və vakuumda qurudulur. Metal komplekslərinin alınması üçün metal:liqand 1:1 və 1:2 nisbətində hazırlanır və hər biri ayrılıqda metanolda həll edilir.

Metal kationun təbiətindən asılı olaraq əks soyuducu ilə təchiz olunmuş su hamamında aparılan reaksiyanın saati dəyişə bilər. Alınmış kompleks süzülüb bir neçə dəfə metanolda yuyulur və vakuumda qurudulur. Sintez olunmuş tiosemikarbazon salisiliden və onun Cu kompleksi aşağıdakı kimyəvi formullarla ifadə olunur:



Tiosemikarbazid ilə qlioksil turşusunun reaksiyası eyniyə əvvəlki təcrübədə olduğu kimi aparılır. Bunun üçün qlioksil turşusunun və tiosemikarbazidin uyğun miqdarları hesablanır, suda həll edilib su hamamında əks soyuducu ilə 2 saat müddətində reaksiya davam etdirilir. Aparılan sintezin sonunda alınan çöküntü süzülür, DMF də yenidən kristallaşdırılır və vakuumda qurudulur.

Metal komplekslərinin alınması üçün metal:liqand 1:1 və 1:2 nisbətində hazırlanır və hər biri ayrılıqda suda həll edilir. Komplekslər reaksiyanın qoyulma vaxdından 1 gün sonra otaq şəraitində alınır. Alınan tiosemikarbazon qlioksiliden və onun mis kompleksi isə aşağıdakı formullara malikdir:



2.2. Sintez olunmuş (II-V) birləşmələrin elektron spektrləri və maqnit momentinin tədqiqi

Liqand və kompleks üçün elektrik keçiriciliyi müxtəlif temperaturlarda ölçülmüşdür. Alınan nəticələr komplekslərin polikonduktivliyini, faza keçidlərini izah etməyə imkan verir. Maqnit momenti Faradey üsuluna əsasən hesablanmışdır. Co kompleksi üçün 4,57 B.M, Ni kompleksi üçün 3 B.M, Cu üçün isə 1.8 B.M. maqnit momenti hesablanmışdır. Kolibrant kimi Hg[Co(SCN)₄] istifadə edilmişdir.

Tiosemikarbazon salisilidenin C=N₁ fraqmentinə uyğun olaraq n-π* keçidinə əsasən 389 nm dalğa uzunluqlu elektron spektri verir. Eyni zamanda 411 nm dalğa uzunluqlu liqanda uyğun olmayan dalğa uzunluqda verir. Bu komplekslərlə əlaqəlidir. UB spektrinə göstəricisinə əsasən π-π* keçidi ilə əlaqədar C=S rabitəsi 238 nm də tiol formada olduğunu göstərir. 343 nm və 332 nm dalğa uzunluqlarında n-π*

keçidiylə bağlı xromofor azometin qrupunun olduğu aydın görsənir. Liqand və onun kompleksləri 20-180° C temperatur intervalda 0-400 volt gərginlikdə ardıcılıqla ölçülmüşdür.

Alınan nəticələr Om qanununa uyğun gəldiyini göstərir. Ölçmə zamanı neticənin nümunədən nümunəyə dəyişdiyi müşahidə olunur. Əgər nümunəyə verilən gərginliyi çox az miqdar artırısaq bu zaman gərginliyin ani anda çox yüksəldiyini müşahidə edəcəyik, bu da temperaturun funksiyasıyla əlaqəlidir. Sintez olunmuş birləşmələrin elektron spektrləri və maqnit momenti cədvəl 3-də öz əksini tapmışdır:

Cədvəl 3

Birləşmələr	Udma zolağı ν , sm^{-1}				
	OH ν	C=N ν	COO ν	C=S ν	C=N-N-C C=S ν
Liqand	3500	1644-1532	1621-1708	1165-837	1532-721

2.3. Sintez edilmiş birləşmələrin bioloji aktivliklərinin tədqiqi

Hesabat dövründə ilkin test disk diffuziya üsulu ilə həyata keçirilmişdir. Filtr diskləri (Disk №1) 1 saat müddətində 120°C də avtoklavda sterilizasiya edilir. Steril disk Petri çəşkasında mikroorqanizmin bərk soyuq səthinin ortasında yerləşdirilir sonra isə 28° C də inhibitorlaşdırılır və 24 saatdan sonra mikroorqanizmlərin ölçüləri hesablanır.

Liqand DMSO kimi antimikrob xassəsini göstərir, bu o deməkdir ki, qram-müsbət və ya qram-mənfi bakteriyalar üçün heç bir aktivlik göstərmir. Lakin Cu və Ni kompleksləri qram-müsbət və qram-mənfi bakteriyalara qarşı çox yüksək antimikrob aktivliyi göstərir.

Tiosemikarbazonun Cu(II), Ni (II), Co(III) kompleksləri daha aktiv fəaliyyət göstərir. Cədvəl 4 (a)-dan görüldüyü kimi nə liqand nə də komplekslər göbələklərə qarşı aktivlik göstərmirlər.

Cədvəl 4 (a).

Tiosemikarbazon salisilidenin və onun komplekslərinin antimikrob aktivliyinin ilkin nəticələri

Birləşmələr	Qram+və	Qram-və	Göbək
	Bacillus subtilus	Escherichia Coli	Candida Libolica
Liqand	6.0	7.0	6.0
Cu kompleksi	16.0	16.0	6.0
Co kompleksi	9.0	8.1	6.0
Ni kompleksi	11.0	9.0	6.0
DMSO	6.0	6.0	6.0

Eynilə aparılan test tiosemikarbazon qliksiliden üçündə həyata keçirilmişdir. (Cədvəl 4(b)).

Cədvəl 4(b)

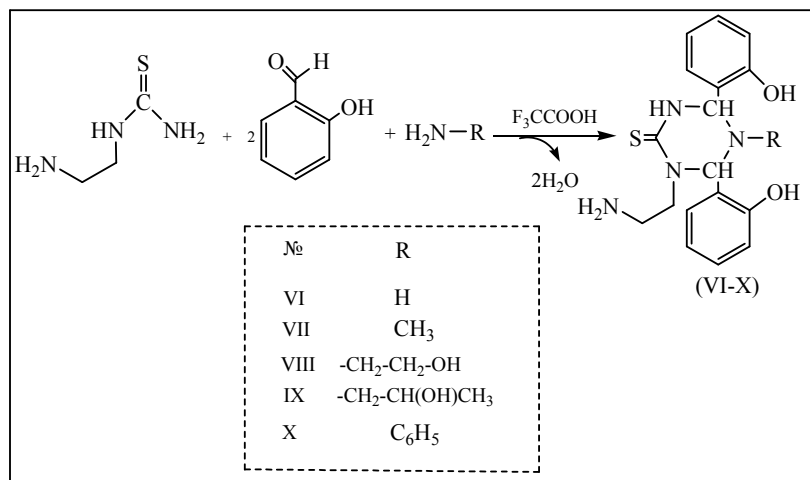
Tiosemikarbazon qliksiliden və onun komplekslərinin antimikrob aktivliyinin ilkin nəticələri

Birləşmələr	Qram+və	Qram-və	Göbək
	Bacillus subtilus	Escherichia Coli	Candida Libolica
Liqand	6.0	7.0	6.0
Cu kompleksi	13.0	13.0	6.0
Co kompleksi	10.0	9.0	6.0
Ni kompleksi	11.0	9.0	6.0
DMSO	6.0	6.0	6.0

III. Bəzi heksahidro-1,3,5-triazintionların sintezi və tədqiqi

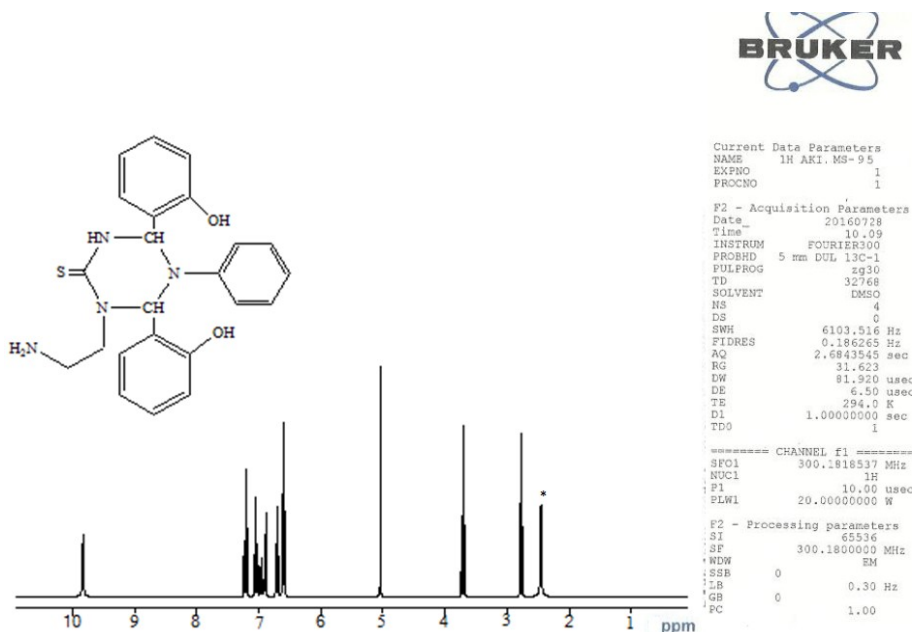
3.1. 1-(2-aminoetil)tiokarbamid əsasında 1-(aminometil)-5-(2-hidroksi-alkil)-4,6-difenil-1,3,5-triazin-2-tionların sintezi

1-(Aminetil)tiokarbamidin triflüor sirkə turşusu katalizatoru iştirakında salisil aldehidi və müxtəlif aminlərlə bir mərhələdə üçkomponentli kondensləşməsi reaksiyası nəticəsində 1-(aminometil)-5-(2-hidroksi-alkil)-4,6-difenil-1,3,5-triazin-2-ionların (VI-X) 60-70% çıxımla effektiv sintez üsulu işlənmişdir:



Reaksiya zamanı arzu olunmayan əlavə məhsulun analizi göstərir ki, tiokarbamidin və ya aminlərin aldehidlərlə birləşməsindən uyğun azometinlər də alınır, onlar da əsas məhsulun təkrar kristallaşması yolu ilə reaksiya qarışığından kənarlaşdırılır.

Alınmış birləşmələrin quruluşu İQ və NMR spektroskopiyaya üsulları ilə təsdiq edilmişdir. Bu birləşmələr içərisində (VII) birləşməsinin ¹H NMR spektrində ən qüvvətli 2.27 *m.h.* sahəsinə metil qrupunun 3 protonunun sinqlet siqnalları uyğun gəlir. Həmin birləşmənin metilen (CH₂-N) qrupunun hidrogen protonları 2.77; 3.71 *m.h.*-də; metin (CH) qrupunun isə müvafiq protonları 5.04 *m.h.*-də açıq zolaq verir. (IX) Birləşməsinin molekulundakı hidroksil (OH) qruplarının protonları müvafiq olaraq 7.34 *m.h.* (OH-CH₂-) və 9.83 *m.h.* (OH-Ph) sahəsində aşkarlanır. (X) Birləşməsinin üç aromatik nüvədə olan CH qrupunun protonlarının siqnalları 6.59, 6.96, 7.21 *m.h.* sahəsində aydınlaşır (şəkil 2).



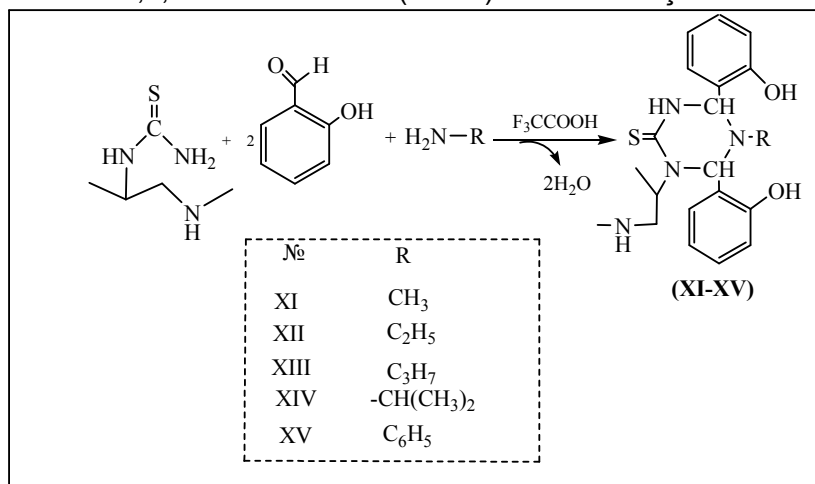
Şək.2. (X) birləşməsinin ¹H NMR spektri.

Sintez edilmiş (VIII) birləşməsinin ¹³C NMR spektrində 38.5 (CH₃), 46.9 (CH₂), 52.9 (CH₂), 59.3 (CH₂), 70.9, 72.7 (CH-triazin), 115.6 (CH), 119 (C), 121.1, 128.7, 128.8 (CH), 130.2 (CH), 177.3 (C=S) *m.h.* sahəsində pikləri müxtəlif elektron sıxlığına malik karbonları xarakterizə edir.

(VI-X) Birləşmələri ağ rəngli tozvari maddələrdir. Onlar etil spirtində və asetonunda qızdırılmaqla, dimetilsulfoksiddə isə adi şəraitdə asanlıqla həll olurlar.

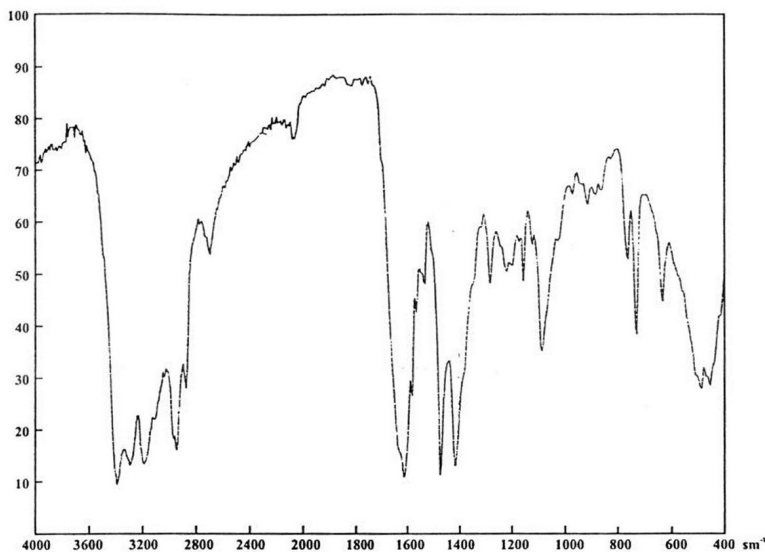
3.2. N-Alkilamino-4,6-difenil-heksahidro-1,3,5-triazin-2-tionların sintezi

N-əvəzli tiokarbamidlər müasir üzvi sintezdə müxtəlif heterotsiklik sistemlərin alınmasında da geniş istifadə olunan ən münasib sintonlardır. Bunu nəzərə alaraq, 1-[1-metil-2-(metilamino)etil]-tiokarbamidin salisil aldehydi və müxtəlif aminlərlə birgə üçkomponentli kondensləşməsi benzol (və ya izopropil spirti) iştirakında, 70-80°C-də, 3-6 saat müddətində tərəfimizdən aparılmış və nəticədə 75-80% çıxımla N-Alkilamino-4,6-difenil-heksahidro-1,3,5-triazin-2-tionlar (XI-XV) sintez edilmişdir:



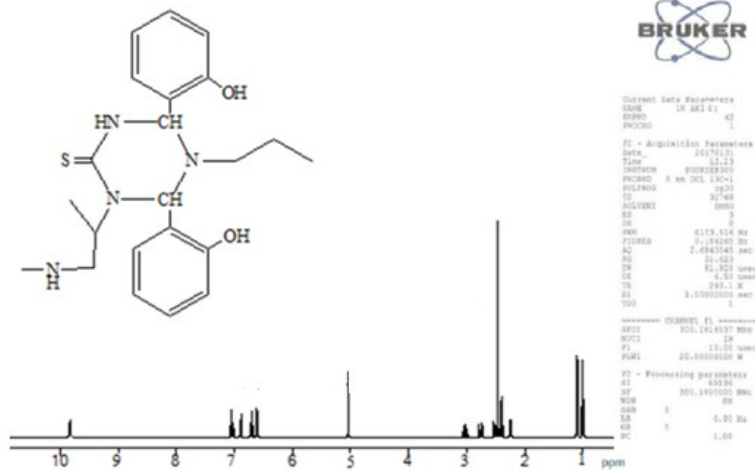
Bu reaksiya zamanı da arzu olunmayan əlavə məhsullar əmələ gəlir.

Yeni birləşmələrin quruluşu da müasir fiziki-kimyəvi analiz üsulları ilə təsdiq edilmişdir. 1-Alkilamino-4,6-difenil-heksahidro-1,3,5-triazin-2-tionların (XI-XV) İQ spektrlərində C=S əlaqəsinin valent rəqsləri 1205-1180 sm^{-1} sahəsində müşahidə olunur. 3465 sm^{-1} udulma zolağı NH əlaqəsinin sərbəst valent rəqslərinə, 3235 sm^{-1} zolağı isə NH əlaqəsinin assosiasiya olunmuş valent rəqslərinə uyğun gəlir. (şəkil 3).



Şək. 3. (XIII) birləşməsinin İQ spektri.

(XI-XV) ¹H NMR spektrlərində iki aromatik nüvədə olan protonların siqnailləri 6.61-7.04 *m.h.* sahəsində aydınlaşır (şəkil 4).

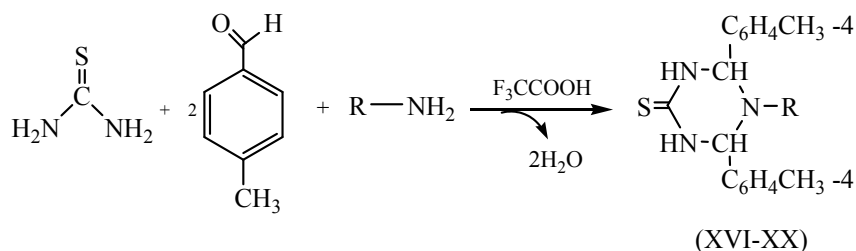


Şək. 4. (XII) birləşməsinin ^1H NMR spektri.

Sintez edilmiş (XI) birləşməsinin ^{13}C NMR spektrində 16.4 (CH_3), 33.0 (CH_3), 36.2 (CH_3), 50.8 (CH), 55.4 (CH_2), 72.4, 73.1 (CH), 115.6 (CH), 121.1 (CH), 128.7 (CH), 130.2 (CH), 176.9 ($\text{C}=\text{S}$) *m.h.* sahələrində pikləri müxtəlif elektron sıxlığına malik karbonları xarakterizə edir. (2.29-2.33) birləşmələri ağ tozvari maddələrdir. Onlar etil spirtində və asetonada qızdırılmaqla, dimetilsulfoksiddə isə adi şəraitdə asanlıqla həll olurlar.

3.3. Alkil(aril)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionların sintezi

4-Metilbenzaldehydin, tiokarbamidin və müxtəlif amin birləşmələrinin birgə üçkomponentli kondensləşməsi benzol (və ya izopropil spirti) iştirakında, 70-80°C-də, 3-6 saat müddətində aparılmış və nəticədə 70-80% çıxımla 1-alkil(aril)-2,6-bis(*p*-tolil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionlar (XVI-XX) alınmışdır.

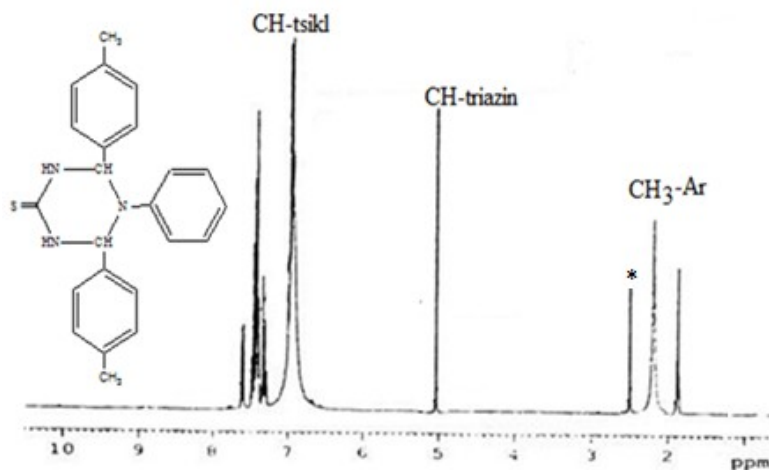


$\text{R}=\text{C}_{18}\text{H}_{37}$ (XVI), $\text{HOCH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2$ (XVII), HOCH_2CH_2 (XVIII), $\text{CH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$ (XIX), C_6H_5 (XX)

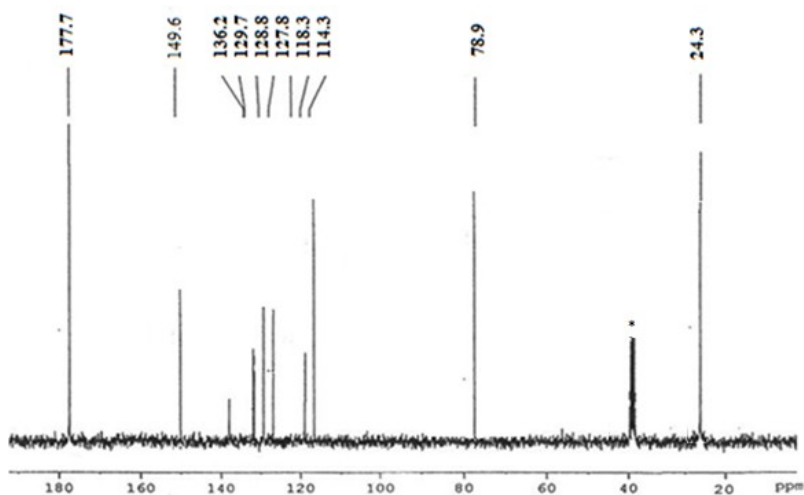
Sintez edilmiş (XVI-XX) İQ spektrlərində $\text{C}=\text{S}$ əlaqəsinin valent rəqsləri 1210-1185 sm^{-1} sahəsində müşahidə olunur. $\text{C}(\text{S})\text{NH}$ fraqmentinin rəqsləri 1345-1245 sm^{-1} sahəsində aydınlaşır. $\text{HNC}=\text{S}$ fraqmentinə 1525, 1508, 1200, 1030, 919, və 625 sm^{-1} tezliklərində olan rəqslər aiddir. 3465 sm^{-1} udulma zolağı NH əlaqəsinin sərbəst valent rəqslərinə, 3235 sm^{-1} isə NH əlaqəsinin assosiasiya olunmuş valent rəqslərinə uyğun gəlir.

(XVI-XX) birləşmələrin ^1H NMR spektrlərində 0.86 *m.h.* sahəsinə metil qrupu protonunun siqnalları uyğun gəlir. İki aromatik nüvədə olan protonların siqnalları 6.94-7.21 *m.h.* sahəsində aydınlaşır. Tərkibində (XI) birləşməsinin ^1H NMR spektrində fenil halqasına birləşmiş metil radikalının siqnalı 2.29 *m.h.-də* (CH_3 -Ph) sinqlet şəklindədir.

Sintez edilmiş (XVI) birləşməsinin ^{13}C NMR spektrində 24.3, 78.9, 114.3, 118.3, 127.8, 128.8, 129.7, 136.2, 149.6, 177.7 *m.h.* ($\text{C}=\text{S}$) sahələrində pikləri müxtəlif elektron sıxlığına malik karbonları xarakterizə edir. (XX) ^1H NMR spektrində metin protonunun sinqlet siqnalı 5.07 *m.h.* sahəsinə uyğun gəlir. Aromatik nüvədə olan protonların siqnalları isə 6.59-6.94 *m.h.* sahəsində aydınlaşır. Həmin birləşmənin ^{13}C NMR spektrində spesifik $\text{C}=\text{S}$ funksional qrupun karbon atomu 177.7 *m.h.-də* pik əmələ gətirir (şəkil 5 və şəkil 6).



Şək. 5. (XX) birləşməsinin ¹H NMR spektri.

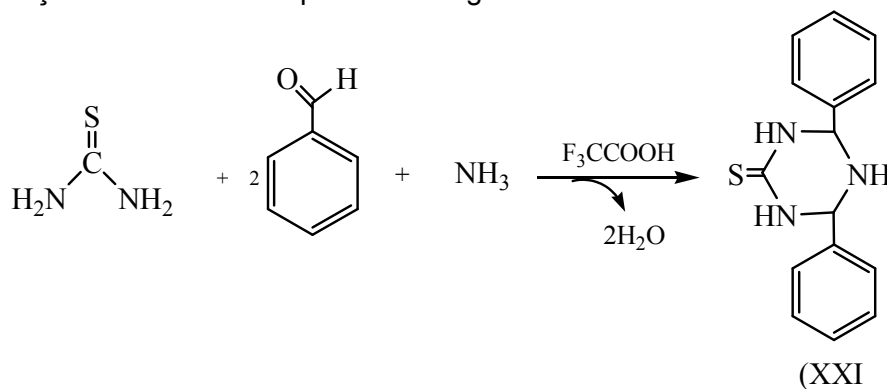


Şək. 6. (XX) birləşməsinin ¹³C NMR spektri.

Alınmış (XVI-XX) ağ tozvari maddələrdir. Onlar etil spirtində və asetonada qızdırılmaqla, dimetilsulfoksiddə isə adi şəraitdə asanlıqla həll olurlar.

3.4. 2,6-bis(aril)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun sintez prosesinin optimallaşdırılması

Üçkomponentli kondensləşmə reaksiyası ilə 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun sintezi nümunəsində optimal şərait tapılmışdır. Məlumat üçün qeyd edək ki, mürəkkəb proses olan üçkomponentli reaksiya zamanı məqsədyönlü maddə ilə yanaşı, kənar maddələrin alınması ehtimalı böyükdür. Konkret olaraq 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun sintezi gedişində azometinlər də əmələ gəlir ki, bu da əsas maddənin çıxımını azaldır. Lakin həmin reaksiya üçün tapılan optimal şərait 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun çıxımını 75-80 %-ə qədər artırmağa imkan verir.



Yuxarıdakı sxem üzrə prosesin getmə istiqamətlərini öyrənmək, eyni zamanda, məqsədyönlü maddənin çıxımını artırmaq məqsədilə tiokarbamid, benzaldehyd və ammoniyakın 33,5%-li suda məhlulu ilə birgə kondensləşmə reaksiyası ətraflı tədqiq edilmişdir. Bizə qədər aparılmış analoji reaksiyalarda çıxım 30-40%-dən çox olmamışdır. Bu fakt özlüyündə tiokarbamidin alifatik və ya aromatik aldehid və birli aminlər əsasında birmərhələli üçkomponentli kondensləşmə reaksiyasının aparılmasında fərqli yanaşma olmasını vacib edir. Bu amili nəzərə alaraq əvvəlki təcrübələrdən tam fərqli sistem qurulmuşdur. İlk mərhələdə 27 təcrübə qoyulmuşdur (cədvəl 5).

Cədvəl 5

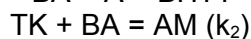
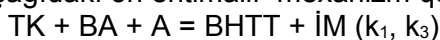
Müxtəlif *mol* nisbəti, temperatur və reaksiya müddətində aparılmış təcrübələrin nəticələri

No	t, °C	T (saat)	Komponentlərin mol nisbəti, (TK:BA:A)	K'_{TK}	Əsas maddə	Əlavə maddə
1	0	3	0.1:0.2:0.1	87.6	0.290	0.004
2	0	4	0.1:0.2:0.1	98.5	0.310	0.013
3	0	5	0.1:0.2:0.1	99.8	0.325	0.020
4	0	3	0.15:0.2:0.1	65.4	0.420	0.026
5	0	4	0.15:0.2:0.1	84.0	0.410	0.075
6	0	5	0.15:0.2:0.1	90.5	0.370	0.110
7	0	3	0.2:0.2:0.1	57.5	0.440	0.040
8	0	4	0.2:0.2:0.1	74.5	0.350	0.100
9	0	5	0.2:0.2:0.1	81.4	0.308	0.140
10	25	3	0.1:0.2:0.1	91.0	0.314	0.007
11	25	4	0.1:0.2:0.1	100	0.328	0.018
12	25	5	0.1:0.2:0.1	100	0.320	0.026
13	25	3	0.15:0.2:0.1	74.3	0.455	0.040
14	25	4	0.15:0.2:0.1	90.0	0.402	0.110
15	25	5	0.15:0.2:0.1	95.0	0.367	0.143
16	25	3	0.2:0.2:0.1	64.0	0.452	0.60
17	25	4	0.2:0.2:0.1	79.0	0.328	0.142
18	25	5	0.2:0.2:0.1	83.0	0.245	0.168
19	50	3	0.1:0.2:0.1	100	0.340	0.013
20	50	4	0.1:0.2:0.1	100	0.330	0.025
21	50	5	0.1:0.2:0.1	100	0.323	0.034
22	50	3	0.15:0.2:0.1	79.0	0.460	0.080
23	50	4	0.15:0.2:0.1	85.0	0.360	0.180
24	50	5	0.15:0.2:0.1	91.0	0.302	0.220
25	50	3	0.2:0.2:0.1	70.0	0.410	0.100
26	50	4	0.2:0.2:0.1	76.0	0.245	0.205
27	50	5	0.2:0.2:0.1	81.0	0.153	0.240

Belə ki, tiokarbamid (TK), benzaldehyd (BA) və ammoniyakın (A) suda məhlulunun ($\nu=0,1:0.1:0.2; 0.1:0.2:0.1$ və $0.15:0.2:0.1$ *mol* nisbətində), temperaturun ($t=0; 25; 50^{\circ}\text{C}$) və reaksiya müddətinin ($\tau=3, 4, 5$ saat) 3 müxtəlif qiymətlərində aparılan təcrübələrin nəticələri olaraq hər bir reaksiya zamanı götürülən tiokarbamidin çevrilmə ədədi müəyyənləşdirilmişdir (cədvəl 5). Əsas maddə kimi 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun (BHHT) yüksək çıxımla alınması üçün müxtəlif amillərin (temperaturun, reaksiya müddətinin, reaksiya üçün götürülən ilkin maddələrin *mol* nisbətləri və qatılıqları, katalizatorun miqdarının) sintez prosesinə təsiri ayrı-ayrılıqda tədqiq edilmiş və hər bir şəraitə uyğun göstəricilər hesablanmışdır.

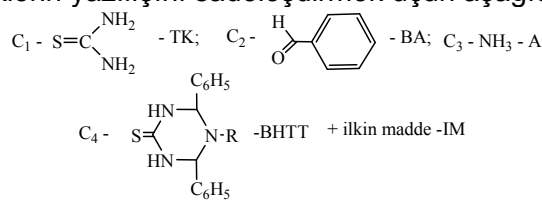
Bu istiqamətdə aparılan elmi araşdırmalardan məlum oldu ki, TK ilə BA və A-nın reaksiyası zamanı BHHT ilə yanaşı azometilen də (AM) əmələ gəlir, eyni zamanda ilkin maddələrin (İM) bir hissəsi reaksiya daxil olmur. Müxtəlif *mol* nisbətləri, temperatur və reaksiya müddəti əsasında təcrübələrin qoyulmasında əsas məqsəd bir tərəfdən əsas məhsulların çıxımını artırmaqla, əlavə məhsulların həcmi azaltmaq, digər tərəfdən isə kinetik model qurmaqla, sonrakı mərhələdə bu prosesi optimallaşdırmaqdan ibarət idi.

Prosesin riyazi modelinin qurulması üçün aparılmış kinetik təcrübələrin analizinə və ədəbiyyat mənbələrinin araşdırmalarına əsasən aşağıdakı ən ehtimalı mexanizm qəbul edilmişdir.



(1.1)

Reaksiyaların ümumi formulundan görüldüyü kimi triazintionların alınması zamanı müxtəlif əlavə məhsullar da alınır. Kinetik tənliklərin yazılışını sadələşdirmək üçün aşağıdakı işarələr qəbul edilmişdir:



Bu mexanizm üçün komponentlər üzrə material balans tənliklərini belə yazmaq olar:

$$\begin{aligned}
 \frac{dc_1}{d\tau} &= -k_1 c_1^{\alpha_1} c_2^{\alpha_2} \\
 \frac{dc_2}{d\tau} &= -k_1 c_1^{\alpha_1} c_2^{\alpha_2} - k_2 c_3^{\alpha_4} c_2^{\alpha_3} \\
 \frac{dc_3}{d\tau} &= k_1 c_1^{\alpha_1} c_2^{\alpha_2} - k_2 c_3^{\alpha_4} c_2^{\alpha_3} - k_3 c_3^{\alpha_5} c_4^{\alpha_6} \\
 \frac{dc_4}{d\tau} &= k_2 c_2^{\alpha_3} c_3^{\alpha_4} - k_3 c_4^{\alpha_6} c_3^{\alpha_5} \\
 \frac{dc_5}{d\tau} &= k_3 c_3^{\alpha_5} c_4^{\alpha_6}
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

Burada α_i -reaksiyanın komponentlərinə görə tərtibli; k_j -reaksiyaların sürət sabitləridir.

(1.2) kinetik modelin parametrlərini $[k_j, \alpha_i]$ tapmaq üçün qeyri-xətti proqramlaşdırma üsullarından olan Pauellin, Rozenbrokun, Mak-Kormikin alqoritmlərinin kombinasiyasından, (1.2) diferensial tənliklər sisteminin həlli üçün Kutta-Merson alqoritmindən istifadə olunmuşdur. Modelle hesablanmış qiymətlərin təcrübi qiymətlərlə müqayisəsi onu göstərdi ki, yuxarıdakı mexanizm əsasında qurulmuş kinetik model prosesi daha dəqiq ifadə edir. Parametrlərin tapılmış qiymətləri cədvəl 6-da verilmişdir.

Cədvəl 6

Kinetik modelin parametrlərinin müxtəlif temperaturlardakı qiymətləri

t, °C	k ₁	k ₂	k ₃	α ₁	α ₂	α ₃	α ₄	α ₅	α ₆
0	0.5678	0.5168	0.4772	0.1	0.2	0.1	0.5	0.2	0.2
25	0.6611	0.5578	0.5632	0.1	0.2	0.1	0.5	0.2	0.2
50	0.8738	0.6621	0.7823	0.1	0.2	0.1	0.5	0.2	0.2

Məlumdur ki, kimyəvi reaksiyanın sürət sabitinin temperaturdan asılılığı Arrenius tənliyi ilə ifadə olunur. Reaksiyanın sürət sabitlərinin müxtəlif temperaturlardakı qiymətlərindən (cədvəl 6) istifadə edərək, ən kiçik kvadratlar üsulunun köməyi ilə onların Arrenius parametrləri tapılmışdır. Bu parametrlərin qiymətləri cədvəl 7-də verilmişdir.

Cədvəl 7

Arrenius parametrlərinin tapılmış qiymətləri

Arrenius parametrləri	k ₁	k ₂	k ₃
ln k _{0j}	4.7176	2.5384	5.5401
E ₁ , $\frac{\text{kkal}}{\text{mol}}$	3.2	2.0	3.8

Cədvəl 6-da əks olunan reaksiyaların Arrenius parametrlərinin tapılmış qiymətlərini və cədvəl 7-də göstərilən reaksiyaların komponentlərə görə tərtiblərini kinetik modeldə (1.2) nəzərə alsaq, onda prosesin kinetik tənliyi aşağıdakı kimi olur:

$$\frac{dc_1}{d\tau} = -111.9e^{-\frac{3200}{RT}} c_1^{0.5} c_2^{0.6}$$

$$\frac{dc_2}{d\tau} = -111.9e^{-\frac{3200}{RT}} c_1^{0.5} c_2^{0.6} - 12.66e^{-\frac{2000}{RT}} c_2^{0.6} c_3$$

$$\frac{dc_3}{d\tau} = 111.9e^{-\frac{3200}{RT}} c_1^{0.5} c_2^{0.6} - 12.66e^{-\frac{2000}{RT}} c_2^{0.6} c_3 - 254.7e^{-\frac{3800}{RT}} c_3 c_4 \quad (1.3)$$

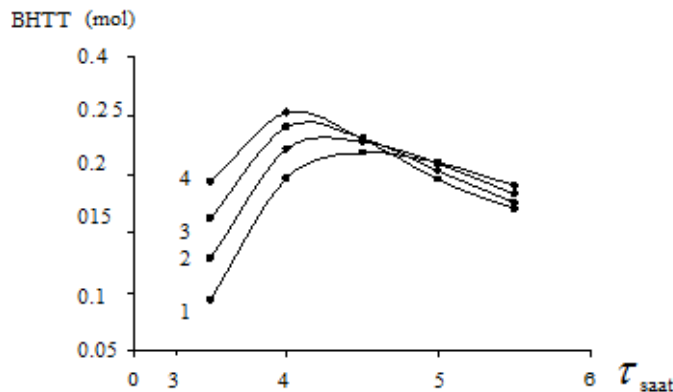
$$\frac{dc_4}{d\tau} = 12.66e^{-\frac{2000}{RT}} c_2^{0.6} c_3 - 254.7e^{-\frac{3800}{RT}} c_3 c_4$$

$$\frac{dc_5}{d\tau} = 254.7e^{-\frac{3800}{RT}} c_3 c_4$$

Burada R- universal qaz sabitidir; $R = 1.987 \frac{\text{kal}}{\text{mol} \cdot ^\circ K}$

Bu model əsasında TK, BA və A-dan BHTT-nin alınması prosesini optimallaşdırmaq olar. Bundan ötrü TK, BA və A əsasında BHTT-nin alınması prosesinin optimallaşdırılmasında texnoloji parametrlərin (τ , u , t) məhdudiyyətləri daxilində onların ayrı-ayrı qiymətlərindən istifadə edərək, çıxış parametrlərin 100 müxtəlif variantda (TK-nin çevrilmə dərəcəsi, BHTT-nin alınan miqdarı və seçiciliyi, AM-nin çıxımı və seçiciliyi) qiymətləri hesablanmış və həllər spektri alınmışdır.

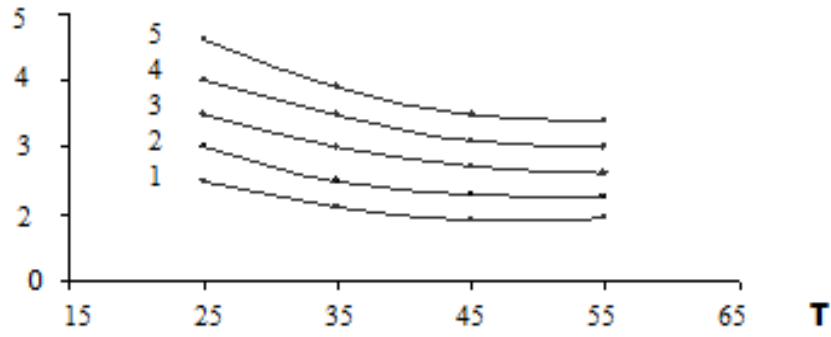
TK, BA və A əsasında BHTT-nin alınması prosesinin optimallaşdırılması məsələsinin həllində texnoloji parametrlərin qiymətlərinin dəyişmə intervallarını aşağıdakı kimi seçmişik: reaksiya zonasının temperaturu $t=0, 25, 50^\circ C$; reaksiya müddəti $\tau = 3, 4, 5$ saat ilkin maddələrin mol nisbəti $u=0.15; 0.1; 0.2$. Şəkil 7-də ilkin komponentlərin $0.1:0.2:0.1 mol$ nisbətində və müxtəlif temperaturlarda BHTT-nin çıxımının reaksiya müddətindən asılılıqları verilmişdir.



Şəkil 7. $u=0.1:0.2:0.1 mol$ nisbətində müxtəlif temperaturlarda BHTT-nin çıxımının müddətdən asılılığı:
1 - $t = 0^\circ C$; 2 - $t = 25^\circ C$; 3 - $t = 50^\circ C$; 4 - $t = 60^\circ C$

Müqayisəli təhlildən məlum olur ki, şəkil 2.6-da verilən ilkin maddələrin $0.1:0.2:0.1 mol$ nisbətində uyğun və sabit temperaturda BHTT-nin çıxımının reaksiya müddətindən asılılıq əyriləri maksimum nöqtələrindən keçir. Reaksiya müddəti də artdıqca əsas məhsulun çıxımı artmaqla, öz maksimum qiymətinə çatır. Lakin reaksiya müddətinin (τ) sonrakı artımı çıxımın azalması ilə müşahidə edilir. Çünki alınan əsas maddə artıq qalan ilkin maddələr ilə ikincili reaksiyaya girərək kənar məhsullara çevrilir.

Optimallaşdırmanın nəticələrinin analizini araşdırdıqda görünür ki, BHTT-nin optimal çıxımı temperaturdan, reaksiya müddətindən və komponentlərin mol nisbətindən asılıdır. Şəkil 7-də göstərilən kimi digər mol nisbətləri üçün də qeyd olunan çıxım əyrilərin maksimumlarını yazsaq və alınan nöqtələri t - τ sistemində göstərsək aşağıdakı şəkil 8-i alarıq:



Şək.8. Müxtəlif *mol* nisbətlərində BHTT-nin çıxımının maksimum qiymətlərinə uyğun gələn reaksiya müddətinin temperaturdan asılılığı:

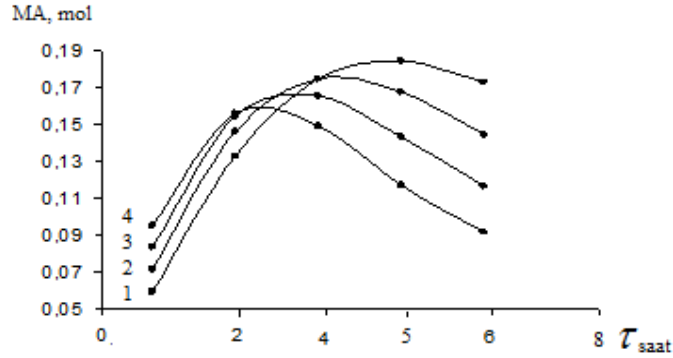
1 - $u=0.1$, 2 - $u=0.15$, 3 - $u=0.2$, 4 - $u=0.25$, 5 - $u=0.3$

Şəkil 8-dən aydın görünür ki, müxtəlif *mol* nisbətləri üçün reaksiya müddətinin optimal qiymətinə müxtəlif temperaturlar uyğun gəlir. Reaksiya müddətinin optimal qiymətinin ilkin maddələrin *mol* nisbətindən və temperaturdan asılılığını müxtəlif empirik modellərlə ifadə edilir və nəticədə aşağıdakı asılılıq alınır:

$$\ln \tau^{\text{opt}} = 1,780 - 0,418 \theta - 0,01369t \quad (\text{I})$$

Burada u – uyğun olaraq, TK, BA və A-ın ilkin *mol* nisbətləri; t - reaksiyanın aparıldığı temperatur; τ^{opt} - reaksiyanın optimal müddətidir.

Eyni qayda ilə ilkin komponentləri ekvimolyar *mol* nisbətlərində AM-nin çıxımının temperatur və müddətdən asılılığı şəkil 9-da öz əksini tapmışdır.



Şək. 9. $u=0.1:0.2:0.1$ *mol* nisbətində müxtəlif temperaturlarda AM-nin çıxımının müddətdən asılılığı: 1 - $t = 0^\circ\text{C}$; 2 - $t = 25^\circ\text{C}$; 3 - $t = 50^\circ\text{C}$; 4 - $t = 60^\circ\text{C}$

Aparılan müqayisəli təhlildən görünür ki, şəkil 8-də əks olunan ilkin maddələrin $0.1:0.2:0.1$ *mol* nisbəti və sabit temperaturda AM-nin çıxımının reaksiya müddətindən asılılığı əyrilərinin hamısının maksimum nöqtələri vardır. Yəni reaksiya müddəti artdıqca AM-nin çıxımı sıfırdan artaraq maksimum qiymətinə çatır və reaksiya müddətinin sonrakı artımı çıxımın azalmasına səbəb olur. Bunun əsas səbəbi AM-nin polimerləşərək qətran əmələ gətirməsidir. Ona görə də prosesin optimal kontakt müddətindən artıq vaxtda aparılması çıxımın azalmasına səbəb olur. Optimallaşma məsələsinin həllərinə əsasən AM-nin çıxımının maksimum nöqtələrini qeyd edib və alınan nöqtələrə görə reaksiya müddətinin temperatur və ilkin maddələrin *mol* nisbətində, optimal qiyməti aşağıdakı xətti tənliklə ifadə edilir:

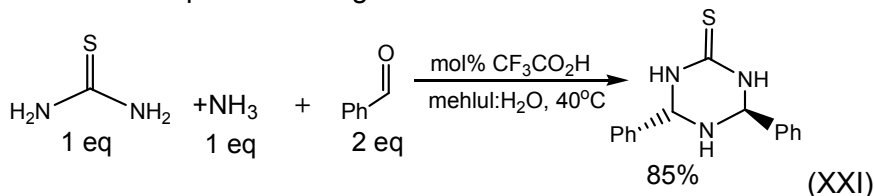
$$\tau_{AM}^{\text{opt}} = 4 + \theta - 0,05t \quad (\text{II})$$

Beləliklə də optimallaşdırma məsələsinin həllindən əslilə olaraq BHTT-nin çıxımını maksimum almaq üçün optimal reaksiya müddətinin qiymətini (II) formulu ilə tapmaq olar. Əksinə, əgər AM-nin çıxımını artırmaq lazımdırsa, onda optimal kontakt müddətini (II) formuluna əsasən hesablamaq lazımdır.

Yuxarıda qeyd olunanları ümumiləşdirsək bu nəticəyə gəlmək olar ki, $u=0.1:0.2:0.1$ *mol* nisbəti, 25°C və 4 saat müddətində götürülən 11.4 *qr* tiokarbamidin 7.41 *qr*-nin çevrilməsindən əsas maddə olan BHTT 85% çıxımla alınır. Arzu olunmayan qarışıq - (AM, İM) 10-15%-dən çox olmur. Bu göstəricilər BHTT-nin sintezi üçün optimal şərait hesab olunur.

IV. Üçkomponentli kondensləşmə reaksiyası əsasında triazintionların sintezinin kompüter tədqiqi

Üçkomponentli kondensləşmə reaksiyası ilə 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun sintezi zamanı məqsədyönlü maddə ilə yanaşı, əlavə maddələr – azometinlər (AM) də əmələ gəlir ki, bu da əsas maddənin çıxımını azaldır. Lakin bu reaksiya üçün tapılan optimal şərait 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun çıxımını 75-80%-ə qədər artırmağa imkan verir.



Bu kondensləşmə reaksiyasının mexanizminə görə, əvvəlcə benzaldehyd ilə ammonyak birləşir, bis-aminal aralıq birləşməsi alınır. Bu birləşmə tiokarbamid fraqmentli birləşmənin nukleofil həmləsinə məruz qalır və iki molekul su çıxır. Nəticə etibarilə triazin tərkibli tiokarbamidin tsiklik törəməsinə çevrilir.

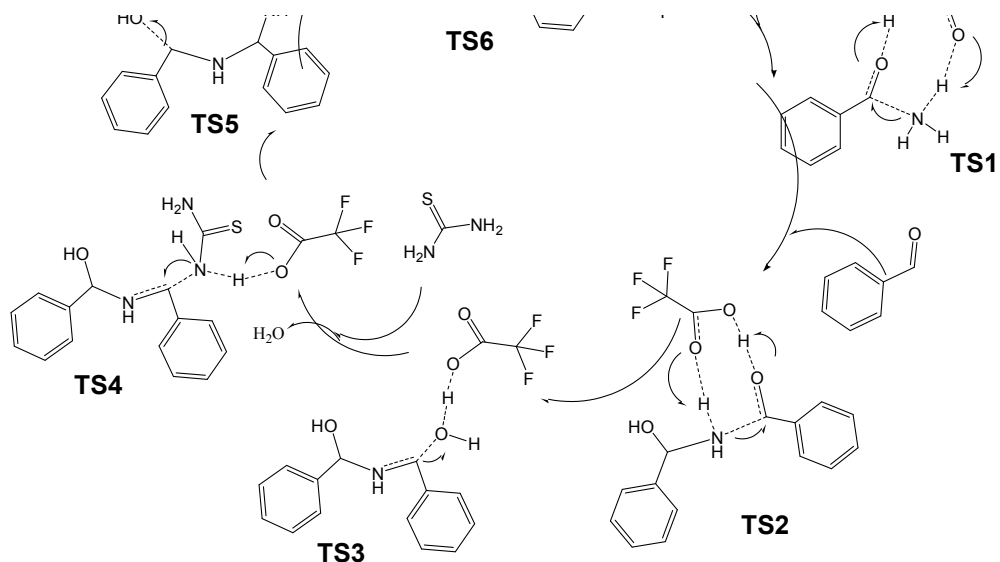
Reaksiya zamanı arzu olunmayan əlavə məhsulun analizi göstərir ki, tiokarbamidin və ya aminlərin aldehidlərlə birləşməsindən uyğun azometinlər də alınır, onlar da əsas məhsulun təkrar kristallaşması yolu ilə reaksiya qarışığından kənarlaşdırılır.

Yuxarıdakı sxem üzrə prosesin getmə istiqamətlərini öyrənmək, eyni zamanda, alınan reaksiya qarışığı içərisində məqsədyönlü maddənin çıxımını artırmaq məqsədilə tiokarbamid (TK), benzaldehyd və ammonyakın 33,5%-li suda məhlulu ilə birgə kondensləşmə reaksiyası ətraflı tədqiq edilmişdir. Əsas maddə kimi 2,6-bis(fenil)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tionun (BHHT) yüksək çıxımla alınması üçün müxtəlif amillərin (temperaturun, reaksiya müddətinin, reaksiya üçün götürülən ilkin maddələrin (İM) mol nisbətləri və qatılıqlarının, katalizatorun miqdarının) sintez prosesinə təsiri ayrı-ayrılıqda tədqiq edilmiş və hər bir şəraitə uyğun göstəricilər hesablanmış və bu nəticəyə gəlinmişdir ki, u=0.1:0.2:0.1 mol nisbəti, 40°C və 4 saat müddətində görülən 11.4 qr TK-nin 7.41 qr-nın çevrilməsindən əsas maddə olan BHHT 85% çıxımla alınır. Arzu olunmayan qarışıq – AM və İM 10-15%-dən çox olmur. Bu göstəricilər BHHT-nin sintezi üçün optimal şərait hesab olunur.

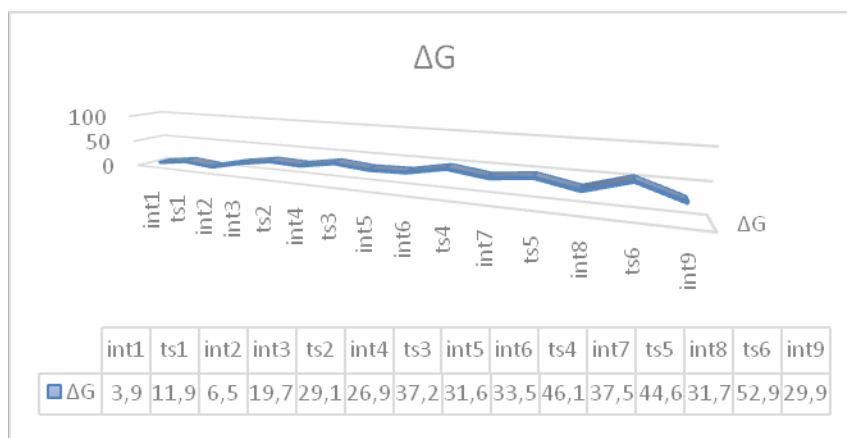
Aparılan araşdırmalardan məlum olur ki, kinetik təcrübələrdən alınan nəticələrlə kinetik model ilə hesablanmış göstəricilər bir-birinə çox yaxındır. Tiokarbamidin konversiyasına görə orta nisbi xəta 4.1%, BHHT-yə görə 2.6%, AM-nə görə 2.9%, İM-lərə görə isə 4.4% təşkil edir. Qəbul edilmiş prinsipə görə müqayisə nəticəsində təcrübi qiymətlərlə, riyazi yolla hesablanmış göstəricilər arasında fərq 10%-dən azdırsa, onda bu sintez reaksiyası üçün tapılmış şərait prosesi olduğu kimi əks etdirir.

Müasir kompüter proqram təminatlarının imkanlarından istifadə edərək kvant kimyəvi hesablamaları ilə bu birmərhələli üçkomponentli kondensləşmə reaksiyanın nəzəri və təcrübi mexanizmi ətraflı tədqiq olunmuşdur. Bu əsasən kompüter klasterlərinə bir çox proqramların yüklənməsi və prosessorları paralel işlətməklə normal kompüterlərdə uzun zaman, illərlə, ala biləcək əməliyyatları qəbul olunan dərəcədə qısa zaman kəsiyində həyata keçirməyin mümkünlüyünə əsaslanır. Bu əməliyyatlarda istifadə edilən proqram "Gaussian" adlanır. İnternet vasitəsilə mərkəzin klasterində istifadəçi adları verilir və dünyanın hər hansı bir yerindən tədqiqatçılar öz sahələri ilə bağlı sistemə əmrilər göndərə bilər və əməliyyatların nəticəsini əldə edə bilərlər. Ölkəmizdə və qonşu dövlətlərdə belə bir sistemin olmadığını nəzərə alsaq klasterlərə tələbatın çox olduğunu təxmin etmək mümkündür. Bu klasterlər bir çox əməliyyatlar etmə imkanına malikdir. Məsələn, kimyəvi reaksiyalarda komponentlərin minimum enerjisini hesablamaqla gedişatın mümkünlüyü ilə bağlı fikir yürütmək imkanı yaradır. Bu da proseslərin təcrübi olaraq yoxlanması zərurətini ortadan qaldıraraq, tədqiqatın iqtisadi baxımdan səmərəliliyini artırır. Belə proqramlar vasitəsilə kimya, fizika, biofizika, farmakologiya və digər sahələrdə kompleks biomolekulların quruluş – funksiya əlaqələrini tədqiq etmək mümkün olur ki, biz apardığımız geniş spektri əhatə edən tədqiqatlar işərisində nəzərdən keçirdiyimiz məsələlərdən biri də məhz, kvant kimyəvi hesablamalarla üçkomponentli kondensləşmə reaksiyalarının nəzəri-təcrübi mexanizminin ətraflı tədqiqi olmuşdur.

İkiəvzli triazin-2-tionun alınması mexanizmi aşağıda verilmiş sxemə uyğun olaraq hesablanmışdır:



Amonyakın benzaldehidə nükleofilik hücumu ilə başlayan reaksiya 6 tranzit mərhələdən sonra arzu olunan məhsula nəticələnir. İkiəvzli triazin-2-tionun alınma reaksiyasının Gibbs sərbəst enerjisi +29.9 kilokaloridir ki, bu da tədqiq olunan reaksiyanın endotermik olduğunu göstərir. Tranzit mərhələlərin aktivləşmə enerjisi və reaksiyanın enerji profili aşağıdakı şəkil 10-da verilmişdir:

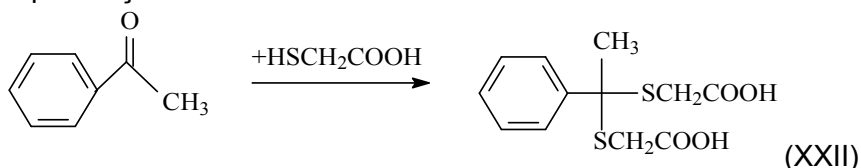


Şək. 10. Tranzit mərhələlərin aktivləşmə enerjisi və reaksiyanın enerji profili.

V. 1.1-bis-(hidroksikarbonilmetiltio)-1-feniletanın sintezi

Aldehid və ketonların merkaptosirkə turşusu ilə reaksiya məhsulları, xüsusilə, karboksil və hidroksil kimi funksional qrupları olan birləşmələr böyük maraq doğurur. Bu birləşmələr müxtəlif efirlər, amidlər, heterosiklik birləşmələr və bir sıra digər törəmələrin sintezi üçün qiymətli sintonlar ola bilər.

Yuxarıdakıları nəzərə alaraq tərəfimizdən asetofenonun merkaptosirkə turşusu ilə tiilləşmə reaksiyası aparılmışdır. Tiilləşmə reaksiyası benzol məhlulunda asetofenon:merkaptosirkə turşusu 1:4 mol nisbətində benzolsulfoturşunun iştirakı ilə 80°C-də aparılmışdır. Reaksiya bitəndən sonra həlledici su nasosu ilə qovulur, əsas maddə isə müvafiq həlledicidən yenidən kristallaşma yolu ilə ayrılır. Reaksiya aşağıdakı sxem üzrə aparılmışdır:



Sintez edilmiş 1,1-bis-(karboksimetil)-1-feniletan asetonda, spirtə və efiyə yaxşı həll olan kristallik maddədir. $T_{\text{erimə}}=136-137^{\circ}\text{C}$, çıxım 81.1%.

VI. Qliserinin monoxlorosirkə turşusu ilə triefirlərinin alınması, ksantogenatlar əsasında yeni üzvi birləşmələrin sintezi

Alkil radikalında 1-4 karbon atomu olan alkilksantogenat duzları ilə hidroksil qrupları qismən yaxud tam əvəz edilmiş, xlor saxlayan qliserin törəmələrinin reaksiyalarını və reaksiya məhsullarını tədqiq etmək işin əsas məqsədi olmuşdur.

İlk öncə qliserinin monoxlorosirkə turşusu ilə 1:1,1:2 və 1:3 nisbətində mürəkkəb efirləri –mono-, di və triqliseridlər alınmışdır. Həlledici kimi toluol, katalizator kimi toluolsulfoturşu götürülmüşdür.

Alınan qliseridlərin fiziki və kimyəvi xassələri cədvəl 8-də verilmişdir.

Cədvəl 8

Sintez olunmuş qliseridlərin fiziki və kimyəvi xassələri

REAKSIYA MƏHSULLARI	n_D^{20}	d_4^{20}	M_{R_D}	
			Tapılmış	Hesablanmış
Monoqliserid	1.4874	1.3936	34.80	34.86
Diqliserid	1.4885	1.4163	49.45	49.09
Triqliserid	1.4900	1.4444	64.34	63.43

Alınan qliseridlərin müxtəlif mol nisbətə götürülmüş ksantogenat turşusunun kalium duzu ilə reaksiyaları aparılmışdır. Reaksiya nəticəsində butilksantogenatosirkə turşusunun 2,3-dihidro-oksipropil-2-hidroksi-1,3-bis(ksantogenatoasetiloksi)propan, 1,2,3-tri(ksantogenatoasetiloksi)propan efirləri sintez edilmişdir. Bundan başqa xlorlu ksantogenatla qismən əvəz olunmuş törəməsi də alınmışdır. Alınan efirlər suda həll olmayan, üzvi həlledicilərdə və yağlarda həll olan sarı rəngli maddələrdir.

Alınan birləşmələrin yağlayıcılıq xassələrini –siyirmə indeksi (I_3), böhran yükü (P_K), qaynaq yükü (P_C) və yeyilmə izinin diametrini (D_M) MC-20 yağında öyrənilmişdir.

VII. Canlı orqanizmlərdə immun müdafiə sistemlərinə təsirinin tədqiqi

Azərbaycan MEA-nın Fiziologiya İnstitutunun “Təbii mənşəli heroprotektorların farmakologiyası” və “Zərif üzvi sintez” laboratoriyalarının əməkdaşları tərəfindən birgə layihə çərçivəsində akad. Ə.Quliyev adına Aşqarlar Kimyası İnstitutu tərəfindən hazırlanmış fizioloji fəal üzvi birləşmə kompozisiyalarının heyvan orqanizmlərində eksperimental fiziki-kimyəvi mənfi təsir (kəskin hipoksiya) zamanı yaranmış zədələnmələrə qarşı immun müdafiə sistemlərinin vəziyyəti və aktivlik dərəcələri araşdırılır.

Laborator heyvanları üzərində aparılan təcrübələrin məqsədi Aşqarlar Kimyası İnstitutundan olan layihə icraçıları tərəfindən hazırlanmış və antioksidant təsir istiqamətli ehtimalı olan, tərkibində azot və kükürd saxlayan yeni sinif kimyəvi maddələrin 2 nümunəsinin tədqiq edilməsidir. Tədqiqat obyektini kimi çəkisi 160-180 qr olan ağ laborator siçovullardan istifadə edilir. Hazırda həmin nümunələrin ilkin aktivlik dozalarını təyin etmək üçün heyvanlar üzərində tədqiqatlar aparılır. İlk olaraq sulfamid tərkibli (emprik olaraq “maddə 5” və “maddə 8”) nümunələrin aktivlik dozaları araşdırılmaqdadır. Eksperimentlər 4 seriya üzrə aparılmışdır: I qrup- kontrol siçovullar, II qrup- stressə məruz edilmiş (kəskin hipoksiya amili) siçovullar, III qrup- “maddə 5” verildikdən sonra hipoksiyaya məruz qalmış siçovullar və IV qrup- “maddə

8" verildikdən 1 saat sonra hipoksiya olunmuş siçovullar. Təcrübələrin gedişatından öncə istifadə ediləcək fizioloji fəal birləşmələrin (hazırda 2 maddə) optimal təsir dozasını təyin etmək üçün iki variantı – 1-2 mq/kq miqdarda kimyəvi maddə (50°C temperaturda suda həll edilərək) qarın boşluğuna inyeksiya yolu ilə yeridilmişdir.

II qrup heyvanlar Xvatova metodu ilə 20 dəqiqə müddətində stress təsiri effekti yaratmaq üçün kəskin hipoksiyaya məruz qalmışlar. Təcrübə qrup heyvanlarda qanda LPO proseslərinin intensivliyini təyin etmək üçün Asakawa T., Matsushita S. (1980) metodundan istifadə edilir. Eksperimental məlumatların hesablanması üçün Studentin t-meyarı, eyni zamanda Vilkokson-Manna-Uitninin qeyri-parametrik U-meyarı tətbiq edilir (Лакин Г.Ф., 1990). Nəticələr Microsoft Excel (Office-2007) proqramı ilə işlənmişdir.

Alınmış nəticələr və onların təhlili: Kəskin hipoksiyadan əvvəl heyvanlara verilmiş tədqiq etdiyimiz antioksidantların təsiri orqanizmdə lipid peroksidləşməsi məhsullarının intensivliyinin zəifləməsi ilə nəticələnir ki, bu da tədqiq etdiyimiz antioksidantların yüksək bioloji aktivliyə və çox effektiv antihipoksant xassəsinə malik olmasını göstərir, onun xəstəliklərin kompleks müalicəsində effektiv vasitə kimi tətbiq olunmasına perspektivlər açır. Bu özünü T8 maddəsində daha qabarıq şəkildə göstərir (Cədvəl 9). Tədqiqat işləri davam etdirilir.

Cədvəl 9

Hipoksiya zamanı baş beyinin müxtəlif şöbələrində LPO məhsullarının – HP (nis.vah.), MDA(nmol/mq_{zülal}) miqdarının dəyişməsi dinamikasına “maddə T5” və “maddə T8”-in təsiri; M±m, n-10.

№	Təsir	Təsir müddəti	Hipotalamus		Beyincik		Striatum		Frontal qabıq	
			HP	MDA	HP	MDA	HP	MDA	HP	MDA
1	Kontrol		1,8±0,4	1,7±0,3	2,4±0,2	2,0±0,2	2,5±0,4	2,2±0,3	2,0±0,4	1,7±0,2
2	Hipoksiya	1saat	3,6±0,6**	3,0±0,7*	3,8±0,4**	3,9±0,4	4,0±0,5	3,6±0,6	3,7±0,4	3,1±0,3*
3		3 gün	3,3±0,6*	3,4±0,3	4,0±0,3	2,9±0,5	4,3±0,3*	3,8±0,4**		3,9±0,4
4		6 gün	2,9±0,4**	2,5±0,4*	3,6±0,2	3,0±0,4**	3,7±0,2	2,9±0,3	4,4±0,2*	3,0±0,2**
									3,5±0,3	
5	Maddə T5+hipoks.	1saat	2,6±0,3**	2,0±0,3	3,0±0,3	2,7±0,3	2,9±0,5**	2,5±0,4	2,8±0,3*	2,6±0,4
6		3 gün	2,3±0,2	2,8±0,3*	3,5±0,3	2,8±0,4*	3,2±0,4	2,9±0,4*	2,8±0,5	2,7±0,3*
7		6 gün	2,0±0,4*	2,0±0,2	2,8±0,2**	2,6±0,3	3,0±0,3	2,9±0,3	2,4±0,4**	2,2±0,3
8	Maddə T8+hipoks.	1saat	2,4±0,3**	1,8±0,5*	2,0±0,3	1,9±0,3*	2,7±0,5	2,4±0,4	2,4±0,3*	2,0±0,4
9		3 gün	2,0±0,2	2,0±0,3	2,9±0,3**	1,9±0,4	2,6±0,4**	2,4±0,4	2,2±0,5	2,0±0,3**
10		6 gün	2,0±0,4*	1,9±0,2	1,9±0,2	1,9±0,3*	2,7±0,3	2,3±0,3**	2,5±0,4	2,3±0,3

Qeyd: Dürüslük əmsali * - P<0,05, ** - P<0,01 olduqda.

Layihənin yerinə yetirilməsi zamanı istifadə olunan üsul və yanaşmalara gəldikdə isə birmərhələli ikikomponentli və üçkomponentli kondensləşmə üsulları əsasında sintez olunmuş müxtəlif birləşmələrin İQ-şüa spektrlərinin çəkilməsində «Spekord-75» spektrofotometr cihazlarından istifadə edilmişdir. Spektrlər maye təbəqədə və ya vazelin yağında həll edilməklə, o cümlədən KBr, NaCl və LiF prizmasından istifadə edilməklə 3600-400 sm^{-1} sahəsində çəkilmişdir.

Alınmış bu sıra yeni maddələrin ¹H, ¹³C NMR spektrləri Bruker-300 və Tesla-80 cihazlarında 300 və 80 MHz işlək tezlikdə DMSO, CDCl₃ və D₂O~10% məhlullarında çəkilmişdir. Qrupların kimyəvi sürüşməsi δ - şkalası ilə TMS-na görə ölçülmüşdür.

Sintez olunmuş maddələrin yeniliyini təsdiq etmək üçün “Scifinder” beynəlxalq axtarış sistemlərindən istifadə olunmuşdur.

Narın təbəqəli xromatoqrafiya Sulufol UV-250 plastinkasında aparılmışdır. Elüent kimi izopropil spirtin heksan ilə (1:5, 3:5 və digər nisbətində) qarışığı götürülüb. Yod buxarları ilə plastinkanı aydınlaşdırdıqda həmişə təmizliyi yoxlanılan birləşmənin bir ləkəsi alınır.

Sintez olunmuş birləşmələrin bioloji aktivlikləri zonal diffuziya metodu müxtəlif bakteriya və göbək ştampları üzərində öyrənilmişdir.

Sintez prosesin optimallaşması üçün kinetik model qurulmuşdur. Həmin modelin parametrlərini tapmaq üçün qeyri-xətti proqramlaşdırma üsullarından olan Pauellin, Rozenbrokun, Mak-Kormikin alqoritmlərinin kombinasiyasından, diferensial tənliklər sisteminin həlli üçün Kutta-Merson alqoritmindən

	<p>istifadə olunmuşdur.</p> <p>Üçkomponentli kondensləşmə reaksiyasının kompüter tədqiqi zamanı kvant kimyəvi hesablamalardan istifadə olunmuşdur, eyni zamanda enerji span modeli (ƏG, burada Gibbs enerjisi baxımından) tətbiq edilmişdir. Enerji span modelinə görə, hər bir marşrut üçün ən aşağı energetik aralıq və ən yüksək enerjili keçid vəziyyəti müəyyən edilir. TOF dəyərləri hər yol üçün Eyring tənliyi tərtib edilmişdir.</p> <p>Sintez olunan maddələrin canlı orqanizmdə immun müdafiə qabiliyyətini dəyərləndirmək üçün Xvatova metodu tətbiq olunmuşdur. Təcrübə qrup heyvanlarda qanda LPO proseslərinin intensivliyini təyin etmək üçün Asakawa T., Matsushita S. metodundan istifadə edilir. Eksperimental məlumatların hesablanması üçün Studentin t-meyarı, eyni zamanda Vilkokson-Manna-Uitninin qeyri-parametrik U-meyarı tətbiq edilir. Nəticələr Microsoft Excel (Office-2007) proqramı ilə işlənmişdir.</p>
2	<p><u>Layihənin həyata keçirilməsi üzrə planda nəzərdə tutulmuş işlərin yerinə yetirilmə dərəcəsi (faizlə qiymətləndirməli)</u></p> <p>Layihə çərçivəsində nəzərdə tutulan işlər 95 faiz yerinə yetirilmişdir. Xarici məqalələr və konfrans materialları dərc olunduqdan sonra bu göstərici 100 faiz yerinə yetirilmiş olacaq.</p>
3	<p>Hesabat dövründə alınmış elmi nəticələr (onların yenilik dərəcəsi, elmi və təcrübə əhəmiyyəti, nəticələrin istifadəsi və tətbiqi mümkün olan sahələr aydın şəkildə göstərilməlidir)</p> <ol style="list-style-type: none"> I. Tərəfimizdən alınmış AKİ 154d çoxfunksiyalı aşqarı sürtkü yağlarının yuyucu, oksidləşmə və korroziya qarşı xassələrini yaxşılaşdırmışdır. Onun təkmilləşdirilmiş alınma üsulu ekoloji cəhətdən zərərsiz və sadə texnologiya malik olması ilə digərlərindən fərqlənir. II. 1-(2-Aminoetil)tiokarbamid, 1-[1-metil-2-(metilamino)etil]tiokarbamid, tiokarbamid əsasında heksahidro-1,3,5-triazin-2 və triazin-4-tionlar sintez edilmişdir. Reaksiyanın tədqiqindən müəyyən olmuşdur ki, yüksək elektronoakseptor xassəyə malik triflüorsirkə turşusu katalizatorundan istifadə etdikdə əsas məhsulun çıxımı 75-80%-ə qədər artır. III. İlk dəfə tiokarbamid ilə benzaldehyd və ammonyak arasında üçkomponentli, birmərhələli kondensləşmə reaksiyası əsasında 2,6-bis(aril)heksahidro-1,3,5-triazin-4-tion sintez edilmiş və reaksiyanın optimal şəraiti tapılmışdır: $u=0.1:0.2:0.1 \text{ mol}$ nisbəti, 25°C, reaksiya müddəti 4 saat. Təcrübə və riyazi yolla hesablanmış qiymətlərin müqayisəsindən ilkin maddə kimi götürülən tiokarbamidə görə yol verilən nisbi xəta 0.5%, əsas maddəyə görə - 0.8%, əlavə maddəyə görə isə 3.1% olduğundan, yeni təcrübə qiymətlərlə riyazi hesablanmış qiymətlər arasında fərq 10%-dən az olduğundan, bu yuxarıda qeyd edilən reaksiya üçün tapılmış şəraitin optimal olduğunu sübut edir. IV. İlk dəfə kvant kimyəvi hesablamalarla bioaktiv xassələrə malik triazintionların üçkomponentli, birmərhələli kondensləşmə reaksiyasının nəzəri-təcrübə mexanizminin ətraflı tədqiqindən məlum olmuşdur ki, amonyakın benzaldehyd nükleofil hücumu ilə başlayan endotermik reaksiya 6 tranzit mərhələdən sonra arzu olunan məhsulla nəticələnir. V. Müxtəlif efirlər, amidlər, heterosiklik birləşmələr və bir sıra digər törəmələrin sintezi üçün qiymətli sinton ola bilən asetofenonun merkaptosirkə turşusu ilə etilləşmə reaksiyası aparılmış və nəticədə geniş tətbiq sahəsinə malik olan 1.1-bis-(hidroksikarbonilmetiltio)-1-feniletan alınmışdır. VI. Qliserinin monoxlorosirkə turşusu ilə 1:1,1:2 və 1:3 nisbətində mürəkkəb efirləri olan mono-, di və triqliseridlər alınmışdır. Sonra qliseridlərin müxtəlif mol nisbətində götürülmüş ksantogenat turşusunun kalium duzu ilə reaksiyaları aparılmışdır. Reaksiya nəticəsində butilksantogenatosirkə turşusunun 2,3-dihidro-oksipropil-2-hidroksi-1,3-bis(ksantogenatoasetil-oksi)propan, 1,2,3-tri(ksantogenatoasetiloksi)propan efirləri sintez edilmişdir. Bundan başqa xlorlu ksantogenatla qismən əvəz olunmuş törəməsi də alınmışdır. VII. Salisiliden və tiosemikabazon qliksilidenin keçid metal komplekslərinin sintezi İQ, UB, termiki analizlər vasitəsilə təsdiq olunmuşdur. Bu analizlər nəticəsində komplekslərin iki müxtəlif növ formalaşması metal : liqand 1:1 və 1:2 nisbətində olduğu sübuta yetirilmişdir. VIII. Element analizi, fiziki və analitik araşdırmalar salisiliden tiosemikabazon və qliksiliden tiosemikabazonun keçid metal komplekslərinin yetəri qədər davamlı olduqlarını və hiqroskopik olmadıqlarını göstərir. Komplekslər asanlıqla DMF, DMSO və piridində həll olur ki, bu da bioloji aktiv maddələrin sintezində mühüm əhəmiyyətə malikdir. IX. Sintez etdiyimiz salisiliden tiosemikabazon və qliksiliden tiosemikabazonun keçid metal kompleksləri qram-müsbət və qram-mənfi bakteriyalara qarşı çox yüksək antimikrob aktivliyi göstərir. Tiosemikabazonun Cu(II), Ni(II), Co(III) kompleksləri isə daha aktivlik nümayiş etdirir. Əksinə nə liqand, nə də komplekslər göbələklərə qarşı fəallıq göstərmirlər. X. Oksidativ stres vəziyyətinə məruz qalmış (hipoksiya olunmuş) heyvanların qanında LPO məhsullarının miqdarının dəyişməsi orqanizmin stres amilə qarşı cavab reaksiyasıdır. Kimyəvi

maddələrlə inyeksiya edildikdən sonra ağ siçovulların qanında LPO məhsullarının dinamikası göstərir ki, yeridilən maddələrin təsirindən sonra heyvanların stres amilə qarşı həmin maddələrin antioksidant xassəsi özünü göstərir. Başqa sözlə, kəskin hipoksiyadan əvvəl heyvanlara verilmiş tədqiq etdiyimiz antioksidantların təsiri orqanizmdə lipid peroksidləşməsi məhsullarının intensivliyinin zəifləməsi ilə nəticələnir ki, bu da tədqiq etdiyimiz antioksidantların yüksək bioloji aktivliyə və çox effektiv antihipoksant xassəsinə malik olmasını göstərir, onun xəstəliklərin kompleks müalicəsində effektiv vasitə kimi tətbiq olunmasına perspektivlər açıq. Bu özünü T8 maddəsində daha qabarıq şəkildə göstərir.

4 Layihə üzrə **elmi nəşrlər** (elmi jurnallarda məqalələr, monoqrafiyalar, icmallar, konfrans materiallarında məqalələr, tezislər) (dərc olunmuş, çapa qəbul olunmuş və çapa göndərilmişləri ayrılıqda qeyd etməklə, uyğun məlumat - jurnalın adı, nömrəsi, cildi, səhifələri, nəşriyyat, indeksi, İmpact Factor, həmmüəlliflər və s. bunun kimi məlumatlar - ciddi şəkildə dəqiq olaraq göstərilməlidir) *(surətlərini kağız üzərində və CD şəkildə əlavə etməli!)*

Layihə çərçivəsində görülən işlər əsasında 6 məqalə hazırlanmış, onlardan biri "Web of Science" bazasına daxil olan yüksək impakt faktorlu "Arshive der Pharmaze- TR-2.288", digəri Journal of Biochemical and Molecular Toxicology – TR-1.835 jurnalına çapa göndərilmişdir, digər 4 məqalə yerli jurnallarda ("Azərbaycan Neft Təsərrüfatı", Azərbaycan Kimya Jurnalı və "Gənc tədqiqatçı") çapdadır. 1 konfrans materialı Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 96-cı ildönümünə həsr olunan tələbələrin I Respublika Konfransı materiallarında dərc olunmuşdur.

5 İxtira və patentlər, səmərələşdirici təkliflər

Layihə mövzusu üzrə 1 patent almaq üçün səndələr hazırlanır.

6 Layihə üzrə ezamiyyətlər (ezamiyyə baş tutmuş təşkilatın adı, şəhər və ölkə, ezamiyyə tarixləri, həmçinin ezamiyyə vaxtı baş tutmuş müzakirələr, görüşlər, seminarlarda çıxışlar və s. dəqiq göstərilməlidir)

Layihə çərçivəsində layihə rəhbəri Xədicə Məmmədyarova və layihə icraçısı Sevinc Quliyevanın Türkiyənin Atatürk Universitetində bir həftə elmi ezamiyyəti nəzərdə tutulsa da, Azərbaycan Respublikası Prezidentinin sərəncamı ilə Elmin İnkişaf Fondu özünü maliyyələşdirmə sistemində keçirildiyi üçün Fond rəhbərliyi tərəfindən ezamiyyətin təxirə salınmasına qərar verilmişdir.

7 Layihə üzrə elmi ekspedisiyalarda iştirak (əgər varsa)

Nəzərdə tutulmamışdır.

8 Layihə üzrə digər tədbirlərdə iştirak

Nəzərdə tutulmamışdır.

9 Layihə mövzusu üzrə elmi məruzələr (seminar, dəyirmi masa, konfrans, qurultay, simpozium və s. çıxışlar) (məlumat tam şəkildə göstərilməlidir: a) məruzənin növü: plenar, dəvətli, şifahi və ya divar məruzəsi; b) tədbirin kateqoriyası: ölkədaxili, regional, beynəlxalq)

Layihə icraçısı Günay İsmayılova Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 96-cı ildönümünə həsr olunan tələbələrin I Respublika Konfransı iştirak etmiş və layihə çərçivəsində əldə etdiyi nəticəni poster vasitəsi ilə nümayiş etdirmişdir.

10 Layihə üzrə əldə olunmuş cihaz, avadanlıq və qurğular, mal və materiallar, komplektləşdirmə məmullatları

Layihə çərçivəsində mövzuya uyğun olaraq 1 ədəd cihaz (Refraktometr AR-WAY-2S) və 13 adda reaktiv və həlledici alınıb təhvil verilmişdir:

No	Cihaz və avadanlıqların adı	Miqdarı	Ölçü vahidi
1	Triphenyl Phosphate 2x50 qr	1	dəst
2	Triphenylsilyl Chloride 4x25 gr	1	dəst
3	Epichlorohydrin 2 l	1	əd
4	Acetic Acid, Reagentplus(R) 1 l	1	əd
5	Ethyl Acetate, Anhydrous 1 l	1	əd
6	2-Hydroxy-N-(3-Hydroxyphenyl)-5 250mg	1	əd
7	Acetylacetone, Reagentplus 1 l	1	əd
8	3-Mercapto-5-Propyl-4H-1,2,4-Tria 100 mg	1	əd
9	Dicumyl peroxide 500 g	1	əd
10	3-Nitroacetophenone 500 g	1	əd
11	2-Hydroxyacetophenone, reagentplus(R) 500 g	1	əd

12	Salicylaldehyde 1 kg	1	əd
13	Dimethyl Sulfoxide Hybri-Max Sterilefilt 5x10ml	1	dəst
14	Refraktometr AR-WAY-2S	1	əd

11 Yerli həmkarlarla əlaqələr

Layihə planına uyğun olaraq sintez olunmuş maddələrin ayrı-ayrı siniflərə aid 2 nümunə layihədə partnyor təşkilat olan AMEA Fiziologiya İnstitutuna təqdim olunmuş, həmin maddələrin immun müdafiə sistemlərinə təsiri öyrənilmişdir.

12 Xarici həmkarlarla əlaqələr

Türkiyənin Atatürk Universiteti əməkdaşları ilə əlaqələr yaradılmış layihə mövzusunda uyğun olaraq patoloji hallara qarşı izoenzim inhibitorların yaradılması ilə bağlı bezi tədqiqatlar aparılmış, bir sıra mühüm nəticələr alınmışdır və məqalə şəklində dərc olunacaq.

13 Layihə mövzusu üzrə kadr hazırlığı (əgər varsa)

Nəzərdə tutulmamışdır.

14 Sərgilərdə iştirak (əgər baş tutubsa)

Nəzərdə tutulmamışdır.

15 Təcrübəartırmada iştirak və təcrübə mübadiləsi (əgər baş tutubsa)

Nəzərdə tutulmamışdır.

16 Layihə mövzusu ilə bağlı elmi-kütləvi nəşrlər, kütləvi informasiya vasitələrində çıxışlar, yeni yaradılmış internet səhifələri və s. (məlumatı tam şəkildə göstərməlidir)

1. <http://gencalimler.az/az/news/1531/>
2. <https://www.facebook.com/AMEA1945/videos/1643816439042817/UzpfSTM4MDU2NzQ5NTQxMDkyNDoxMTgwODExODk4NzE5ODA5/>
3. <http://ica.az/asqarlar-kimyasi-institutunun-emekdasinin-layihesi-grant-musabiqesinin-qalibi-olub/>

SİFARIŞÇI:

Elmin İnkişafı Fondu

İCRAÇI:

Baş məsləhətçi

Quliyeva Mülayim Sahib qızı

Layihə rəhbəri

Məmmədیارova Xədicə Nizami

(imza)

“ ___ ” _____ 201_ -ci il

(imza)

“ ___ ” _____ 201_ -ci il



AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA

ELMİN İNKİŞAFI FONDU

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondunun Gənc alim və mütəxəssislərin
4-cü birgə “Mənim ilk qrantım” müsabiqəsinin
(EİF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə

ALINMIŞ NƏTİCƏLƏRİN ƏMƏLİ (TƏCRÜBİ) HƏYATA KEÇİRİLMƏSİ VƏ LAYİHƏNİN NƏTİCƏLƏRİNDƏN GƏLƏCƏK TƏDQIQATLARDA İSTİFADƏ PERSPEKTİVLƏRİ HAQQINDA MƏLUMAT VƏRƏQİ (Qaydalar üzrə Əlavə 16)

Layihənin adı: Çoxfunksiyalı aşqarların və patoloji proseslərə qarşı rol oynayan bioaktiv maddələrin kompüter sintezi və canlı orqanizmlərdə immun müdafiə sistemlərinə təsiri

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: Məmmədyarova Xədicə Nizami

Qrantın məbləği: **40 000 manat**

Layihənin nömrəsi: EİF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)-19/05/4-M-07

Müqavilənin imzalanma tarixi: **06 aprel 2018-ci il**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **12 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01 may 2018-ci il – 01 may 2019-ci il**

1. Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi

1 Layihənin əsas əməli (təcrübi) nəticələri, bu nəticələrin məlum analoqlar ilə müqayisəli xarakteristikası

- Tərəfimizdən alınmış AKİ 154d çoxfunksiyalı aşqarı sürtkü yağlarının yuyucu, oksidləşmə və korroziya qarşı xassələrini yaxşılaşdırmışdır. Onun təkmilləşdirilmiş alınma üsulu ekoloji cəhətdən zərərsiz və sadə texnologiya malik olması ilə digərlərindən fərqlənir. Apardığımız müqayisəli araşdırmalardan məlum olmuşdur ki, AKİ-154d aşqarı konkret olaraq AKİ-144d aşqarından üstündür. Həmçinin, AKİ-154d aşqarı ilə müqayisəli xarici sənaye aşqarlarının – ВНИИHP-714 və ОЛОА-218A göstəriciləri təhlil olunmuş, nəticələrdən aydın olur ki, AKİ-154d aşqarının korroziya qarşı xassələri xarici analoqlardan, oksidləşməyə, korroziyaya qarşı və yuyuculuq xassələri isə AKİ-144d aşqarından üstündür.
- Müasir kompüter proqram təminatlarının imkanlarından istifadə edərək kvant kimyəvi hesablamaları ilə bu birmərhələli üçkomponentli kondensləşmə reaksiyanın nəzəri və təcrübi mexanizmi ətraflı tədqiq olunmuşdur. Bu əsasən kompüter klasterlərinə bir çox proqramların yüklənməsi və prosessorları paralel işlətməklə normal kompüterlərdə uzun zaman, illərlə, ala biləcək əməliyyatları qəbul olunan dərəcədə qısa zaman kəsiyində həyata keçirməyin mümkünlüyünə əsaslanır. Bu əməliyyatlarda istifadə edilən proqram "Gaussian" adlanır. İnternet vasitəsilə mərkəzin klasterində istifadəçi adları verilir və dünyanın hər hansı bir yerindən tədqiqatçılar öz sahələri ilə bağlı

sistemə əmlər göndərə bilər və əməliyyatların nəticəsini əldə edə bilərlər. Ölkəmizdə və qonşu dövlətlərdə belə bir sistemin olmadığını nəzərə alsaq klasterlərə tələbatın çox olduğunu təxmin etmək mümkündür. Bu klasterlər bir çox əməliyyatlar etmə imkanına malikdir. Məsələn, kimyəvi reaksiyalarda komponentlərin minimum enerjisini hesablamaqla gedişatın mümkünlüyü ilə bağlı fikir yürütmək imkanı yaradır. Bu da proseslərin təcrübi olaraq yoxlanması zərurətini ortadan qaldıraraq, tədqiqatın iqtisadi baxımdan səmərəliliyini artırır. Belə proqramlar vasitəsilə kimya, fizika, biofizika, farmakologiya və digər sahələrdə kompleks biomolekulların quruluş – funksiya əlaqələrini tədqiq etmək mümkün olur ki, biz apardığımız geniş spektri əhatə edən tədqiqatlar işərisində nəzərdən keçirdiyimiz məsələlərdən biri də məhz, kvant kimyəvi hesablamaqla üçkomponentli kondensləşmə reaksiyalarının nəzəri-təcrübi mexanizminin ətraflı tədqiqi olmuşdur.

3. Sintez etdiyimiz bəzi yeni maddələrin oksidativ stres vəziyyətinə məruz qalmış (hipoksiya olunmuş) heyvanların qanında LPO məhsullarının miqdarının dəyişməsi orqanizmin stres amilə qarşı cavab reaksiyası araşdırılmışdır. Kimyəvi maddələrlə inyeksiya edildikdən sonra ağ siçovulların qanında LPO məhsullarının dinamikası göstərir ki, yeridilən maddələrin təsirindən sonra heyvanların stres amilə qarşı həmin maddələrin antioksidant xassəsi özünü göstərir. Başqa sözlə, kəskin hipoksiyadan əvvəl heyvanlara verilmiş tədqiq etdiyimiz antioksidantların təsiri orqanizmdə lipid peroksidləşməsi məhsullarının intensivliyinin zəifləməsi ilə nəticələnir ki, bu da tədqiq etdiyimiz antioksidantların yüksək bioloji aktivliyə və çox effektiv antihipoksant xassəsinə malik olmasını göstərir, onun xəstəliklərin kompleks müalicəsində effektiv vasitə kimi tətbiq olunmasına perspektivlər açıq. Bu özünü sintez etdiyimiz T8 maddəsində daha qabarıq şəkildə göstərir.

2 Layihənin nəticələrinin əməli (təcrübi) həyata keçirilməsi haqqında məlumat (istehsalatda tətbiq (tətbiqin aktını əlavə etməli); tədris və təhsildə (nəşr olunmuş elmi əsərlər və s. – təhsil sistemində tətbiqin aktını əlavə etməli); bağlanmış xarici müqavilələr və ya beynəlxalq layihələr (kimlə bağlanıb, müqavilənin və ya layihənin nömrəsi, adı, tarixi və dəyəri); dövlət proqramlarında (dövlət orqanının adı, qərarın nömrəsi və tarixi); ixtira üçün alınmış patentlərdə (patentin nömrəsi, verilmə tarixi, ixtiranın adı); və digərlərində)

Layihə çərçivəsində alınan elmi-təcrübi yeniliklərə patent alınması üçün hazırda müvafiq sənədlər hazırlanır.

2. Layihənin nəticələrindən gələcək tədqiqatlarda istifadə perspektivləri

- 1 Nəticələrin istifadəsi perspektivləri (fundamental, tətbiqi və axtarış-innovasiya yönlü elmi- tədqiqat layihə və proqramlarında; dövlət proqramlarında; dövlət qurumlarının sahə tədqiqat proqramlarında; ixtira və patent üçün verilmiş ərizələrdə; beynəlxalq layihələrdə; və digərlərində)

Tərəfimizdən ilk dəfə sintez olunacaq yeni üzvi birləşmələrin sənaye müəssisələrində aşqar, həmçinin patoloji proseslərə qarşı bioloji əlavələr kimi istifadəsi tövsiyə olunacaq. Bu məqsədlə AMEA Polimer Materialları İnstitutu, Bakı Dövlət Universiteti, Botanika İnstitutu, Mikrobiologiya İnstitutu, Fiziologiya İnstitutu, Azərbaycan Tibb Universiteti ilə bu birləşmələr əsasında müştərək elmi tədqiqatların həyata keçirilməsi planlaşdırılır.

SİFARIŞÇI:

İCRACI:

Elmin İnkişafı Fondu

Baş məsləhətçi

Quliyeva Mülayim Sahib qızı

Layihə rəhbəri

Məmmədyarova Xədicə Nizami

(imza)
“ ” _____ 201_-ci il

(imza)
“ ” _____ 201_-ci il



**AZƏRBAYCAN RESPUBLİKASININ PREZİDENTİ YANINDA
ELMİN İNKİŞAFI FONDU**

MÜQAVİLƏYƏ ƏLAVƏ

**Azərbaycan Respublikasının Prezidenti yanında
Elmin İnkişafı Fondunun Gənc alim və mütəxəssislərin
4-cü birgə “Mənim ilk qrantım” müsabiqəsinin
(EIF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)) qalibi olmuş
layihənin yerinə yetirilməsi üzrə**

**ALINMIŞ ELMİ MƏHSUL HAQQINDA MƏLUMAT
(Qaydalar üzrə Əlavə 17)**

Layihənin adı: **Çoxfunksiyalı aşqarların və patoloji proseslərə qarşı rol oynayan bioaktiv maddələrin kompüter sintezi və canlı orqanizmlərdə immun müdafiə sistemlərinə təsiri**

Layihə rəhbərinin soyadı, adı və atasının adı: **Məmmədیارova Xədicə Nizami**

Qrantın məbləği: **40 000 manat**

Layihənin nömrəsi: **EIF/GAM-4-BGM-GİN-2017-3(29)-19/05/4-M-07**

Müqavilənin imzalanma tarixi: **06 aprel 2018-ci il**

Qrant layihəsinin yerinə yetirilmə müddəti: **12 ay**

Layihənin icra müddəti (başlama və bitmə tarixi): **01 may 2018-ci il – 01 may 2019-ci il**

Diqqət! Bütün məlumatlar 12 ölçülü Arial şrifti ilə, 1 intervalla doldurulmalıdır

1. Elmi əsərlər (sayı)

No	Tamliq dərəcəsi	Dərc olunmuş	Çapa qəbul olunmuş və ya çapda olan	Çapa göndərilmiş
1.	Elmi məhsulun növü Monoqrafiyalar			
	həmçinin, xaricdə çap olunmuş			
2.	Məqalələr		3	1
	həmçinin xarici nəşrlərdə		1	1
3.	Konfrans materiallarında məqalələr			
	O cümlədən, beynəlxalq konfrans materiallarında			
4.	Məruzələrin tezisləri	1		1
	həmçinin, beynəlxalq tədbirlərin toplusunda			
5.	Digər (icmal, atlas, kataloq və s.)			

2. İxtira və patentlər (sayı)

№	Elmi məhsulun növü	Alınmış	Verilmiş	Ərizəsi verilmiş
1.	Patent, patent almaq üçün ərizə			1 ədəd hazırlanır.
2.	İxtira			
3.	Səmərələşdirici təklif			

3. Elmi tədbirlərdə məruzələr (sayı)

№	Tədbirin adı (seminar, dəyirmi masa, konfrans, qurultay, simpozium və s.)	Tədbirin kateqoriyası (ölkədaxili, regional, beynəlxalq)	Məruzənin növü (plenar, dəvətli, şifahi, divar)	Sayı
1.	Ümummilli lider Heydər Əliyevin anadan olmasının 96-cı ildönümünə həsr olunan tələbələrin I Respublika Konfransı	respublika	şifahi	1
2.	Neft-Kimya Prosesləri İnstitutunun 90 illik yubileyinə həsr olunmuş Beynəlxalq Elmi Konfransı, 2-4 oktyabr 2019 (çapa göndərilib)	beynəlxalq	divar	1
3.				

SİFARIŞÇI:

Elmin İnkişafı Fondu

Baş məsləhətçi

Quliyeva Mülayim Sahib qızı

(imza)

“ ” 201_-ci il

İCRAÇI:

Layihə rəhbəri

Məmmədyanova Xədicə Nizami

(imza)

“ ” 201_-ci il