



ЎЗБЕКИСТОН RESPUBLIKASI
OLIY VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI



BUXORO
DAVLAT
UNIVERSITETI



ЎЗБЕКИСТОН RESPUBLIKASI
INNOVATSION
RIVOJLANISH VAZIRLIGI

ЗАМОНАВИЙ КИМЌОНИНГ ДОЛЗАРФ МУАММОЛАРИ

мавзусидаги Республика миқёсидаги
хорижий олимлар иштирокидаги онлайн
илмий-амалий анжумани

МАТЕРИАЛЛАР ТЎПЛАМИ

2020 йил 4-5 декабрь

Cu(II) $g_z = 2.130$, $g_x = 2.099$, $g_y = 2.109$, $a = 7.628 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $b = 6.971 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $c = 6.962 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $\alpha = 3.52^\circ$ $\beta = -22.43^\circ$ $\gamma = 2.98^\circ$

VO(II) $g_z = 1.999$, $g_x = 1.936$, $g_y = 1.971$, $a = 7.050 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $b = 8.747 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $c = 9.514 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^{-1}$ $\alpha = 7.90^\circ$ $\beta = -9.79^\circ$ $\gamma = 23.82^\circ$

Литература

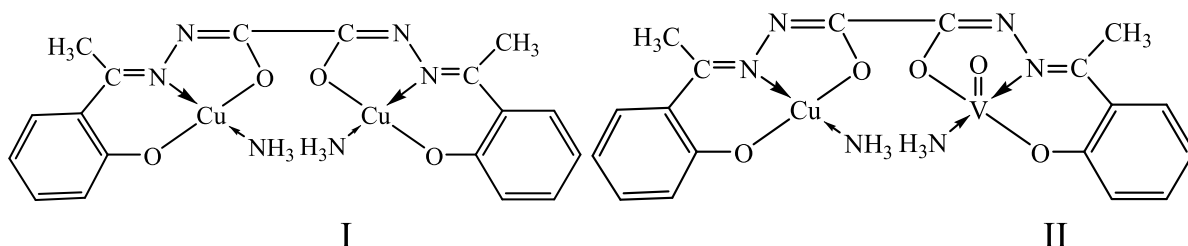
1. Лебедев Я. С., Муромцев В.И. ЭПР и релаксация стабилизированных радикалов. М.: Химия, 1972. 256 с.
2. Ракитин Ю. В., Ларин Г. М., Минин В. В. Интерпретация спектров ЭПР координационных соединений. М.: Наука. – 1993. – 400 с.
3. Wilson R., Kivelson D. ESR linewidths in solution. I. Experiments on anisotropic and spin-rotational effects // The Journal of Chemical Physics.- 1966.- Т. 44. -№. 1. – С. 154-168.

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ

С.Ф. Абдурахмонов, Э.А. Худоярова, Б.Б. Умаров

Бухарский государственный университет, город Бухара

В результате расчета была установлена наиболее стабильная конформация полученного гомобиядерного комплекса меди(II), гетеробиядерного комплекса меди(II) и ванадила(II) с лигандами на основе дигидразона ароматического *орто*-оксикарбонильных соединений:



На основе проведенных квантово-химических расчетов нами были получены геометрические, энергетические и электронные параметры комплексы $\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ (I) и $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ (II). После оптимизации структуры тем же методом HF в базисе 6-31+G(d) в том же пакете программ Gaussian-09 нами рассчитан теоретический колебательный спектр поглощения комплекса $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$, получены частоты и интенсивности колебательных полос и построен теоретический спектр поглощения этого комплекса.

Структуры гомобиядерного комплекса меди(II), гетеробиядерного комплекса меди(II) и ванадила(II) с координированной молекулой NH_3 на

основе дигидразона ароматического оксикарбонильного соединения – 2-гидроксиацетофенона были оптимизированы теорией функционала плотности (DFT). Расчеты методом DFT для комплексов $\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ и $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ были выполнены с использованием пакета GAUSSIAN 09 [1]. К молекулам и их комплексам были применены три различных метода (B3LYP, B3PW91 и PBE1PBE), и поскольку результаты, полученные этими тремя методами, приводят к одним и тем же выводам для запрещенной зоны, ниже будут обсуждаться только результаты B3LYP. Для визуализации молекулярной структуры и формы орбиталей использовалась программа GaussView 05 [1].

На рис. 2 а, б показана геометрия основного состояния обоих комплексов гомобиядерных комплекс меди(II) ($\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$), гетеробиядерных комплекс меди(II) и ванадила(II) $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$) оптимизированная с использованием приближения гибридного B3LYP с базисным набором 3-21G. В обоих комплексах четырежды депротонированные остатки лигандов выполняют одинаковую бис-тридентатно-хелатно-мостиковую функцию - с каждым атомом металла связаны феноксидный атом кислорода, азометиновый атом азота и атом кислорода α -оксиазинной таутомерной формы лиганда, возникающей в результате переноса протона от атома азота к амидному атому кислорода. Четвертое координационное место атомов металла в структуре комплекса занято молекулой аммиака.

Расчеты молекулярных орбиталей (МО) были выполнены для определения полос испускания, поскольку расчетный энергетический зазор между самой высокой занятой молекулярной орбиталью (ВЗМО) и самой низкой незанятой молекулярной орбиталью (НСМО) может дать важный ключ к разгадке люминесценции молекул. Расчеты показывают, что и аммиак имеет 5 занятых МО, молекула свободного оксоилгидразона 2-гидроксиацетофенона – 93 МО, $\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ – 130, а $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ – 132 МО. НОМО- и LUMO-орбитали в этих разновидностях соответствуют одному энергетическому состоянию, то есть вырожденных орбиталей нет. Рис. 1 и 2 а,б показаны формы орбиталей НОМО и LUMO для лиганда вместе с их гомобиядерным комплексом меди(II), гетеробиядерным комплексом меди(II) и ванадила(II). Путем анализа и сравнения плотности состояния электронные облака ВЗМО локализованы на кольце лиганда, и электронное распределение их НСМО схоже (см. рис. 2 а,б). Кроме того, НОМО аммиак находится на несколько низком уровне энергии, в то время как их энергии LUMO остаются одинаковыми.

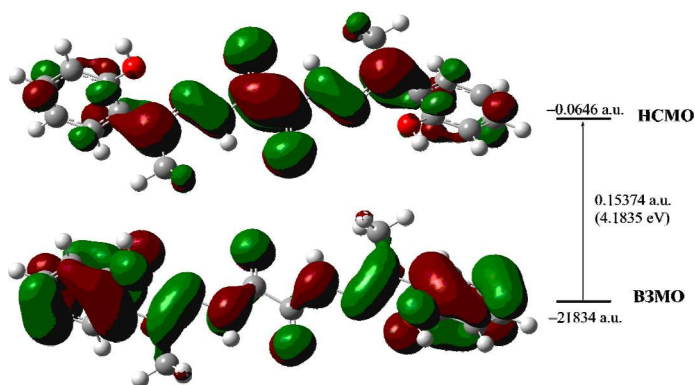


Рис 1. Графики граничных орбиталей в 2-гидроксиацетофенон с их энергией

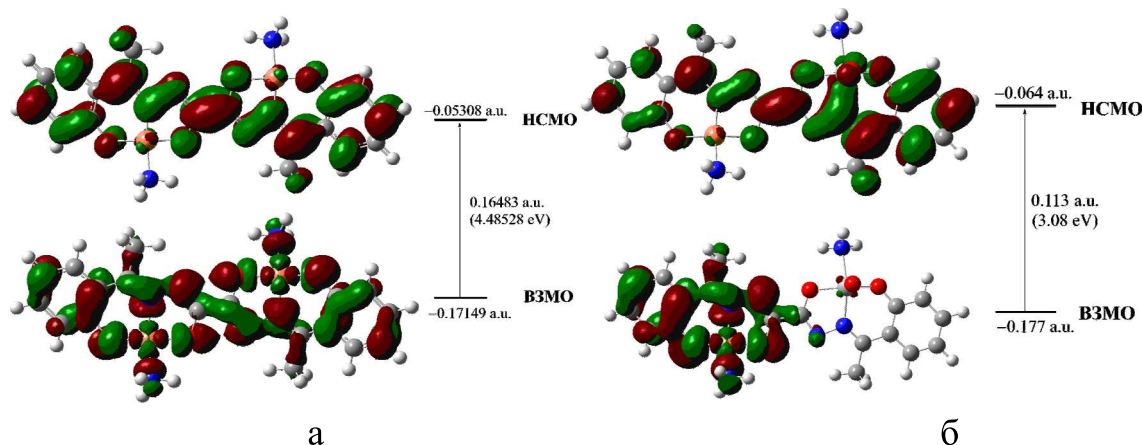


Рис 2. Графики граничных орбиталей в комплексы $\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ (а), $\text{CuVOL}^7 \cdot 2\text{NH}_3$ (б) и с их энергией

Результатами квантово-химических расчетов нам удалось показать, что неспаренный электрон иона меди(II) находится только в ВЗМО одного азота, двух атомов кислорода хелатирующего гексадентатного лиганда и атома азота аммиака, как в случае гомобиядерного $\text{Cu}_2\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ (рис. 2 а), так и в случае гетеробиядерных комплексов меди(II) и ванадила(II) $\text{Cu}(\text{VO})\text{L}^1 \cdot 2\text{NH}_3$ (рис. 2 б). Анализируя параметров квантово-химических расчетов молекул двух комплексов, мы пришли к заключению, что это явление ещё раз доказывает о нахождении неспаренного электрона иона меди(II) находится на орбитали $d_{x^2-y^2}$, а электрон иона $\text{VO}(\text{II})$ – на d_{xy} .

Во всех случаях НСМО имеют одинаковые формы и, по-видимому, они представляют собой антисвязывающие p -орбитали.

Ранее сотрудниками школы акад. Н.А. Парпиева было обнаружено антиферромагнитное обменное взаимодействие между неспаренными электронами в гомобиядерных комплексах иона меди(II), но в случае других гомобиядерных комплексов парамагнитных ионов это явление не было зафиксировано. Такие же результаты были зафиксированы в случае

гомобиядерных комплексов ванадила(II), что было объяснено различной природой орбиталей неспаренных электронов [2].

Достижения современной науки и наши точные квантово химические расчеты позволило нам спустя много лет внести ясность в решении данного вопроса что и требовалось доказать.

Литература

1. Кларк Т. Компьютерная химия. М.: Мир, 1990.
2. Парпиев Н.А., Умаров Б.Б., Авезов К.Г. Перфторалкилли β -дикетон ҳосилалари ва комплекс бирикмалари.- Тошкент.- “DIZAYN-PRESS” МЧЖ нашриёти.- 2013.- 340 б.

КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ ФОРМИАТА КОБАЛЬТА С ФОРМАМИДОМ

¹Жуманиязова М.Э., ²Азизов Т.А., ¹Юлдашева Н.Н., ¹Ражабов Х.М.,

¹Ургенчский государственный университет

²Институт общей и неорганической химии АНРУз, профессор

В водных растворах, подкисленных муравьиной кислотой получено комплексное соединение формиата кобальта с формамидом.

Синтез нового соединения проводили через получение формиата кобальта из гидроксидов. Вначале получали раствор формиата металла растворением свежееосажденного и промытого осадка гидроксида. Затем в полученный раствор добавляли формамид при перемешивании. Компоненты были взяты в мольных отношениях – формиат : амид = 1:3. Через несколько часов из раствора начинает выпадать кристаллический осадок.

Продукт– кристаллический осадок розового цвета, растворимый в воде. Кристаллы несколько раз промывали небольшим количеством дистиллированной воды и сушили в сушильном шкафу при температуре 90 °С. При нагревании выше 170 °С разлагается. Выход 78%.

Для установления индивидуальности соединения получили ИК спектр поглощения. ИК спектры записывали в области 400-4000 см⁻¹ на спектрометре IRTraser – 100 фирмы «Shimadzu».

Термический анализ проводили на дериватографе системы F.Paulik-J.Paulik-L.Erdey со скоростью 9 град/мин и навеской 0,2 г при чувствительности гальванометров Т-900, ТГ-200, ДТА, ДТГ-1/10. Запись

РУХ(II) СУКЦИНАТЛАРИНИНГ АРАЛАШ АМИДЛИ КООРДИНАЦИОН БИРИКМАЛАР СИНТЕЗИ. Ш.Х. Чариева, Г.Ж. Муқимова, Ш.А. Касимов	391
КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НИКЕЛЯ(II) НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕРРОЦЕНА С ГИДРАЗИДАМИ МОНОКАРБО- НОВЫХ КИСЛОТ. З.А. Сулаймонова, Ш.О. Атаева	392
КОМПЛЕКСЫ МЕТАЛЛОВ С ГИДРАЗОНАМИ МОНОАЦЕТИЛ- ФЕРРОЦЕНА. З.А. Сулаймонова, Ф.М. Авезова	393
STUDY OF THE STRUCTURE OF DIOXOPENTANIC ACID ETHYL ETERIUM EXCHANGED AROILHYDRAZONE BY PMR AND RSA. M.A. Tursunov, N.Q. Savrieva, F.A. Azimova, A.T. Jo'rayev	395
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРА-ЗАМЕЩЕННЫХ АРОИЛ- ГИДРАЗОНОВ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА 2,4-ДИОКСОПЕНТАНОВОЙ КИСЛОТЫ. Б.Б. Умаров, Д.Н. Севинчова, М.М. Амонов	397
5,5-ДИМЕТИЛ-2,4-ДИОКСОГЕКСАН КИСЛОТА ЭТИЛ ЭФИРИ <i>пара</i> -НИТРОБЕНЗОИЛГИДРАЗОНИ Ni(II) КОМПЛЕКСИ КРИСТАЛЛ ТУЗИЛИШИНИ РСА УСУЛИДА ЎРГАНИШ. Б.Б. Умаров, М.М. Амонов, Г.К. Холиқова, С.Ҳ. Рамазонов	399
АРОИЛСИРКА АЛЬДЕГИДИ БЕНЗОИЛГИДРАЗОНЛАРИ СИНТЕЗИ ВА ТАУТОМЕРИЯСИ. М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров, М.М. Амонов	400
ЦИАНУР КИСЛОТА ВА СЕМИКАРБАЗИД РЕАКЦИЯ МЕХАНИЗМИНИ КВАНТ-КИМЁВИЙ БАҲОЛАШ. Ганиев Б.Ш.	402
ГЕТЕРОБИДЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(II) И НИКЕЛЯ(II) С ДИАЦИЛДИ-ГИДРАЗОНАМИ БЕНЗОИЛАЦЕТОНА. С.Ф. Абдурахмонов, Э.А. Худоярова, Б.Б. Умаров, В.В. Минин	405
ГЕТЕРОБИЯДЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(II) И ВАНАДИЛА(II) С ДИГИДРАЗОНАМИ АРОМАТИЧЕСКИХ ОРТО-ОКСИКАРБО- НИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ С.Ф. Абдурахмонов, Б.Б. Умаров, Е.А. Уголкова, В.В. Минин	407
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КООРДИНАЦИОН- НЫХ СОЕДИНЕНИЙ. С.Ф. Абдурахмонов, Э.А. Худоярова, Б.Б. Умаров	409
КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ ФОРМИАТА КОБАЛЬТА С ФОРМАМИДОМ. Жуманиязова М.Э., Азизов Т.А., Юлдашева Н.Н., Ражабов Х.М.	412
6-Шўба. Физикавий тадқиқот усуллариинг кимёда қўлланиши ва унинг истиқболлари	
PURIFICATION OF RECOMBINANT PROTEINS SYNTHESIZED IN <i>BOMBYX MORI LARVAE</i> AND <i>PICHA PASTORIS</i> YEAST BY DEAE SEPHAROSE FF ION-EXCHANGE CHROMATOGRAPHY. J.M. Abdurhakhmanov, S.A. Sasmakov, Sh.Sh. Khasanov, O.N. Ashirov, F.B.	414