



ЎЗБЕКISTON RESPUBLIKASI
OLIV VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI



ЎЗБЕКISTON RESPUBLIKASI
INNOVATION
RIVOJLANISH VAZIRLIGI

ЗАМОНАВИЙ КИМЌЕНИНГ ДОЛЗАРБ МУАММОЛАРИ

мавзусидаги Республика миқёсидаги
хорижий олимлар иштирокидаги онлайн
илмий-амалий анжумани

МАТЕРИАЛЛАР ТЎПЛАМИ

2020 йил 4-5 декабрь

Олинган тузларнинг стимуляторлик хоссалари буғдой ҳамда пахта ўсимликларида лаборатория ва дала амалиёти синовларидан ўтказилганда айрим биостимуляторларга қараганда 3-4% самарали натижа берди. Бугунги кунда илмий тадқиқот ишлари давом эттирилмоқда.

HYPERCHEM ДАСТУРИДА ЦИАНУР КИСЛОТА СЕМИКАРБАЗОНИНИ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИ ТАҲЛИЛИ

Қ.Ғ. Авезов, Г.Қ. Холиқова, Б.Ш. Ганиев, Ф.Г. Салимов

Бухоро давлат университети

Координацион бирикмалар кимёсининг кенг ривожланаётган соҳаларидан бири бу таркибида азот, кислород, олтингугурт тутган гетероҳалқали лигандлар билан биометалларнинг комплекс бирикмаларини синтези ва хоссаларининг тадқиқотидир. Координацион бирикмалар кимёсида “таркиб-тузилиш-хосса” орасидаги қонуниятларни ўрганиш натижасида комплекс бирикмаларнинг таркиби, хоссалари ва молекула тузилишини олдиндан башорат қилиш мумкин.

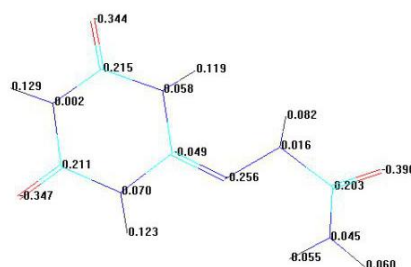
Цианур кислота асосидаги физиологик фаол бирикмалар молекуласида электрофил ва электрофоб реакцион марказлар билан кучли қутбланган гуруҳлар ҳосил қилади ва бу билан улар биологик фаолликни намоён этиб, ферментлар ёки бошқа рецептик хужайраларни ўраб олиш учун дастлабки реагент вазифасини ўтайди [1 -3]. Келтирилган маълумотлар аниқ назарий аҳамиятга эга бўлиб, синтез қилинган координацион бирикмаларнинг электрон, стереокимёвий, кинетик ва термодинамик хусусиятлари ҳамда хоссаларини ўрганиш соҳасини аниқлаб беради.

Ҳозирги кунда квант-кимёвий ҳисоблаш усуллари моддаларнинг электрон тузилишини ўрганиш учун энг муҳим ва қулай усул ҳисобланади. Квант-кимёвий ҳисоблашлар асосида мураккаб тузилишга эга бўлган бирикмаларнинг электрон тузилишини ўрганиш мумкин. Шунингдек, полифункционал лигандларнинг координацияга учрайдиган рақобатдош донор марказларни олдиндан айтиб бериш имконини беради [5,6].

Ишдан мақсад, лиганд 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразин-карбоксиамидни (H_2L^1) квант-кимёвий ҳисоблашлар орқали электрон тузилишини ўрганишдан иборат.

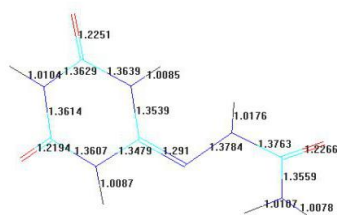
Молекуланинг квант кимёвий ҳисоблашлари **HyperChem** программасида яримэмпирик PM3 ва AM1 усулида тўлиқ геометрик

параметрларни оптималлаштириш билан ўрганилди [4]. Ярим эмпирик квант-кимёвий PM3 ва AM1 усули ёрдамида 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)-гидразин-карбоксиамидни электрон тузилиши ва реакцион қобилияти, рақобатдош донор марказлари ҳамда лиганд молекуласининг энергетик, электрон хусусиятлари, бурчак ва боғ узунлик қийматлари аниқланди. Лиганд молекуласининг донор атомларининг манфий эффектив зарядлари шуни кўрсатдики, цианур семикарбазон молекуласидаги триазин ҳалқасидаги азотлар (-0,344; -0,347), гидразон боғга эга бўлган улерод (-0,049) ва карбонил гуруҳидаги кислород (-0,390) атомида манфий эффектив заряд юқори эканлиги маълум бўлди (1-расм).

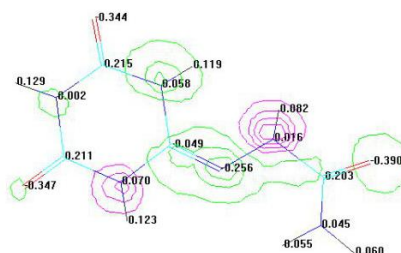


1-расм. Цианур кислота семикарбазони молекуласидаги атомларнинг манфий эффектив заряд қиймати

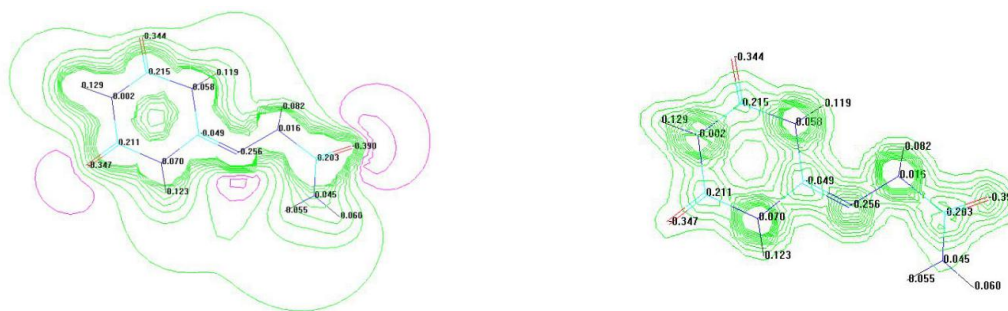
Орбитал контроль бўйича ҳам молекуласида электрон зичликнинг азот ва кислород атомида кўпроқ локаллашганини кўриш мумкин (3-расм). Бундан, H_2L^1 молекуласида триазин ҳалқадаги азот, углерод ва карбонил гуруҳининг кислород атоми координацияда иштирок этади деган назарий ҳулосага келиш мумкин. H_2L^1 молекуласидаги атомларнинг боғ узунлиги ва электрон зичлиги 2-3 расмларда келтирилди.



2-расм. Боғ узунлиги



3-расм. Молекуладаги электрон зичлиги юқори атомлар



4-расм. Орбитал контрол бўйича электрон зичликнинг локаллашиши

Орбитал контрол бўйича ҳам H_2L^1 молекуласида электрон зичликнинг азот атомида кўпроқ локаллашганини кўриш мумкин (4-расм). Квант-кимёвий ҳисоблашлардан олинган натижаларга кўра, H_2L^1 молекуласида азот атоми координацияда иштирок этади деган назарий хулосага келиш мумкин.

Фойдаланилган адабиётлар

1. Seifer G. B. Cyanuric acid and cyanurates //Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2002. – Т. 28. – №. 5. – С. 301-324.
2. Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Использование циануровой кислоты в качестве дезинфицирующих средств для окружающей среды. Мат. Межд. научной конференции «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства». 2 ТОМ. 14-16 ноябр. Бухара, -2019. - С. 21-23.
3. Ахмедов В.Н., Олимов Б.Б., Назаров Ш.К. Электронная структура и квантово-химические расчёты виниловых эфиров фенолов // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 4(70). – С. 53-56.
4. Ganiyev B., Ostonov F., Kholikova G., Salimv F. Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide // International Independent Scientific Journal. 2020. Vol.2. №. 16. P. 3-9.
5. Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Синтез и исследование методами ИК- спектроскопии и квантовой химии -6-((2,4-динитрофенил) гидразон-1,3,5-триазиан-2,4-диона // Universum: Химия и биология : электрон. научн. журн. 2020. № 6(72). – С. 68-73.
6. Абдурахмонов С.Ф., Холикова Г.К., Авезов Қ.Ғ., Умаров Б.Б. Ганиев Б.Ш. Салицил альдегид дикарбон кислота дигидразонларининг молекуляр механик хоссаларини квант-кимёвий ҳисоблаш // БухДУ

магистрантлари ва иктидорли талабалари “Тафаккур ва талкин” мавзусидаги илмий анжумани. 15 май. 2020. 157-162 б.

ЦЕЛЛЮЛОЗА СУЛЬФАТ ҲОСИЛАЛАРИНИ СУЛЬФАТ КИСЛОТА ИШТИРОКИДА ГЕТЕРОГЕН СИНТЕЗИ

Г.А. Дадажонов¹, Б.И. Мухитдинов², А.С. Тураев², Х.И. Акбаров¹

¹Мирзо Улуғбек номидаги Ўзбекистон Миллий университети

²ЎзР ФА Биоорганик кимё институти

Ушбу тадқиқотларда целлюлозани H_2SO_4 билан изопропанол муҳитида гетероген сульфатлаш реакцияси тадқиқ қилинди. Реакция давомида маҳсулотнинг алмашиниш даража (АД) ва полимерланиш даража (ПД) қийматлари, сульфатланиш тезлиги, унумнинг ўзгариши ҳамда моносахарид қолдиғи С-2, С-3, С-6 углерод атомларининг сульфатланиш имкониятлари ўрганилди. Тадқиқотлар ПД қиймати 2500 бўлган целлюлоза намунаси билан олиб борилди. Реакция -5 - $+5^\circ\text{C}$ да, 1-4 соат давомида, H_2SO_4 нинг 2,0-5,0 моль/моль ангидроглюкоза бирлиги (АГБ) миқдори билан олиб борилди.

Олинган натижаларга кўра, реакция ҳароратининг оширилиши олинган маҳсулотларнинг АД қиймати ва сульфатланиш тезлигини ортишига олиб келди. H_2SO_4 билан гетероген сульфатлашда реакция муҳити кучли кислотали бўлганлиги учун реакция давомида сульфатланиш билан бирга десульфатланиш ҳам кузатилади. Ҳарорат ортиши билан маҳсулотнинг ПД қиймати 1158 гача камайди, маҳсулот унуми 46,7% гача ортди. Олинган маҳсулотларнинг барчаси сувда тўлиқ эрувчан бўлишига қарамадан, юқори унум 46,7% ни ташкил қилди. Сульфатловчи реагент миқдори оширилганда, маҳсулотнинг АД қиймати, сульфатланиш тезлиги ва унум ортиши аниқланди. Шунингдек, реакция давомийлиги ортиши билан маҳсулотнинг АД қиймати ортиб борди ва 4 соатда 0,88 га етиши аниқланди. Маҳсулотнинг ПД қиймати эса 4 соат давомида 893 гача кескин камайди. ^{13}C ЯМР спектроскопия натижалари ушбу реакцияда углерод атомларининг реакцион қобилияти $\text{C-6} > \text{C-2} > \text{C-3}$ тартибида камайиб боришини кўрсатди.

Хулоса ўрнида, целлюлозани (ПД=2500) H_2SO_4 билан изопропанол муҳитида гетероген сульфатлаш орқали турли молекуляр катталиқдаги (АД=0,38-0,92, ПД=1891-880) моносульфат ҳосилалар олинди. Тадқиқот натижаларига кўра, маҳсулот АД қийматининг ортишида сульфатловчи реагент миқдори ва ҳарорат асосий омиллар ҳисобланади. Реакцияда

MEVA VA SABZAVOTLARDAGI UGLEVODLARNI SIFAT REAKSIYALARI ORQALI TAJRIBADA ANIQLASH. Z.K. Qodirova, S. Saidova	282
ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ЭНЕРГИИ ДИССОЦИАЦИИ Х-Н СВЯЗИ 4-АМИНО-2-МЕРКАПТОБЕНЗИМИДАЗОЛА. Д.С Раҳмонова, Л.Н . Гапурова, Ш.А. Кадирова, Г.Ю.Тўраева, А.Г. Ешимбетов	284
НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ КОЛХАМИНА С 2-МЕТИЛ-5-ЭТИНИЛПИРИ-ДИНА. Р.В. Аликулов, Х.Х. Тураев, Д.М. Атамуродова, Ж.Р. Суюнов	285
ТУПРОҚДА КОЛЛОИДЛАРНИНГ ҲОСИЛ БЎЛИШИ ВА ХОССАЛАРИНИ ЎРГАНИШ. М.М. Амонов, А.Т. Жўраев, Ф.А. Азимова, З.А. Азимова	287
ГЛИЦИРРИЗИН КИСЛОТАСИ ҲОСИЛАЛАРИНИНГ ФОЙДАЛАНИШ ИСТИҚБОЛЛАРИ. И.Р. Асқаров, Ю.Т. Исаев, С.А. Рустамов	289
o-ФЕРРОЦЕНИЛ БЕНЗОЙ КИСЛОТАСИ АСОСИДА БИОЛОГИК ФАОЛ МОДДАЛАР СИНТЕЗ ҚИЛИШ. И.Р. Асқаров, Ғ.Н. Мадрахимов, М.М. Хожиматов, М.М. Мўйдинов	291
НУПЕРСЧЕМ ДАСТУРИДА ЦИАНУР КИСЛОТА СЕМИКАРБАЗОНИНИ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИ ТАҲЛИЛИ. Қ.Ғ. Авезов, Г.Қ. Холиқова, Б.Ш. Ганиев, Ф.Ғ. Салимов	292
ЦЕЛЛЮЛОЗА СУЛЬФАТ ҲОСИЛАЛАРИНИ СУЛЬФАТ КИСЛОТА ИШТИРОКИДА ГЕТЕРОГЕН СИНТЕЗИ. Г.А. Дадажонов, Б.И. Мухитдинов, А.С. Тураев, Х.И. Акбаров	295
АЛЛЕНЛАШ ЖАРАЁНИГА КАТАЛИЗАТОР ТАБИАТИ ВА МИҚДОРИ ТАЪСИРИ. Ж.Ҳ. Жумаев	296
YER PLANETASI AYLANISHINING INSON FAOLIYATIGA, O'SIMLIK VA KRISTALLARNING O'SISHIGA TA'SIRI. U.N. Yusupov	298
ВАКУУМ-ВЫПАРКА ТИОМОЧЕВИНО-ФОРМАЛЬДЕГИДНОГО РАСТВОРА НА ЛАБОРАТОРНОЙ УСТАНОВКЕ. Х. Исаков, И.Р. Асқаров, Ш.О. Турахонов, С. Усманов, Р.У. Махмудов	300
SORPTION – PHOTOMETRICAL Fe(III) DETERMINATION BY IMMOBILIZED REAGENTS. F.B. Isakulov, A.E. Yangibayev, O.A. Ermatova, D.A. Gafurova, Z.A. Smanova	302
SYNTHESIS AND SUZUKI CROSS-COUPPLING OF ISOMERIC N-BOC-PROTECTED BENZIMIDAZOLES. B.J. Elmuradov, B.B. Jurayev, Kh.S. Tadjimukhamedov, H. Butenschön	304
OBTAINING AN ECOLOGICALLY PURE BIOPOLYMER CARBOXYMETHYL CHITOSAN FROM APIS MELLIFERA G.A. Ikhtiyarova, F.N. Kurbanova	306
АДСОРБЕНТЫ ДЛЯ ОЧИСТКИ ПРИРОДНОГО ГАЗА. Х. Кадиров, Д. Мирзарасулова	308