

**O‘ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O‘RTA MAXSUS
TA‘LIM VAZIRLIGI**

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI

**“KOORDINATSION BIRIKMALAR KIMYOSINING
HOZIRGI ZAMON MUAMMOLARI”
MAVZUSIDA XALQARO ILMIY-AMALIY
KONFERENSIYA
MATERIALLARI TO‘PLAMI**

**2022-yil 22-23-dekabr
Buxoro**

“Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusida xalqaro ilmiy-amaliy anjumani materiallari. Buxoro – 2022. - 734 bet

Buxoro davlat universitetida O'zbekiston Respublikasi Vazirlar Mahkamasining 2022 yil 7 martdagi 101-f-sonli farmoyishi bilan tasdiqlangan O'zbekiston Respublikasida 2022 yilda xalqaro va respublika miqyosida o'tkaziladigan ilmiy va ilmiy-texnik tadbirlar rejasida belgilangan tadbirlarning bajarilishi maqsadida 2022 yil 22-23 dekabr kunlari **“Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari”** mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy anjumani bo'lib o'tadi.

Mas`ul muharrir:

Umarov Baqo Bafayevich – kimyo fanlari doktori, professor

Tahrir hayati:

O`M. Mardonov, M.Ya. Ergashov, H.T. Avezov, N.G. Sevinchov, E.D. Niyozov, Q.G`Avezov, M.A. Tursunov, S.F. Abduraxmonov, Z.A. Sulaymonova, F.M. Nurutdinova, D.A. Hazratova, Sh.Sh. Xudoyberdiyev, Z.K. Qodirova, E.A. Xudoyorova, D.B. Mutalipova, G.Q. Xoliqova, S.A. Karomatov

Maqolalarni to'plovchi va nashrga tayyorlovchilar Organik va fizkolloid kimyo kafedrasi mudiri, k.f.f.d. S.F. Abduraxmonov, kafedra o`qituvchisi B.Sh. Ganiyev.

Ushbu xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to'plamiga bakalavr va magistrantlar, ilmiy tadqiqot ishlarini olib borayotgan izlanuvchi va tadqiqotchilar, katta ilmiy xodim-izlanuvchilar, ilmiy-tadqiqot institutlari olimlari va oliy o'quv yurtlari professor-o'qituvchilari hamda kimyo sohalari xususan koordinatsion birikmalar kimyosi sohasida tadqiqot olib borayotgan mutaxassislarning ilmiy ishlari kiritilgan.

Mazkur to'plamga kiritilgan materiallarning mazmuni, undagi statistik ma'lumotlar va me'yoriy hujjatlar sanasining to'g'riligiga hamda tanqidiy fikr mulohazalarga mualliflarning o'zlari mas'uldir.

ДИАЛКИЛ АЛМАШИНГАН ИЗОМЕР 5/6-ХЛОРБЕНЗИМИДАЗОЛЛАРНИНГ КРИСТАЛЛ ТУЗИЛИШИ

¹Охунхўжаева З.Н., ²Жураев Б.Б., ³Элмурадов Б.Ж., ^{4,5}Тургунов К.К., ⁶Тожибоев А.Ғ.

¹Ўзбекистон Миллий университети магистранти

²ЎЗР ФА Ўсимлик моддалари кимёси институти стажёр-тадқиқотчиси

³ЎЗР ФА Ўсимлик моддалари кимёси институти етакчи илмий ходими, к.ф.д.

⁴ЎЗР ФА Ўсимлик моддалари кимёси институти катта илмий ходими, к.ф.н.

⁵Тошкент шаҳридаги Турин политехника университети доценти, к.ф.н.

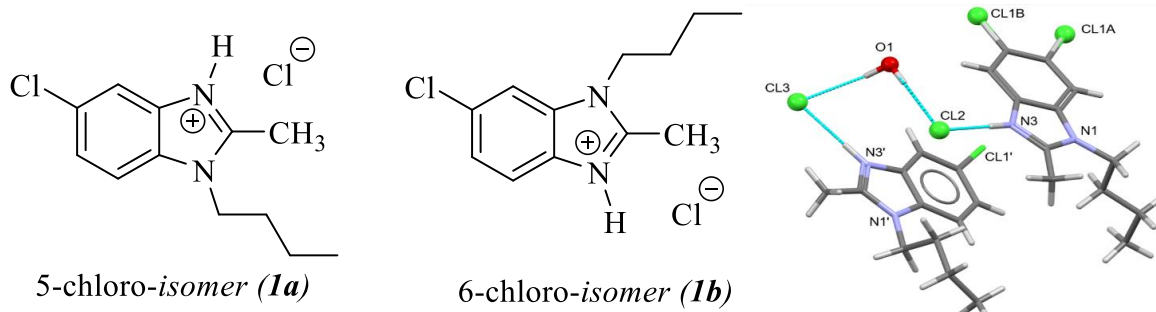
⁶Геология фанлари университети доценти, к.ф.н.

Аннотация: 1-бутил-2-метил-5-хлорбензимидазол гидрохлорид кристалл тузилиши рентгенструктуравий таҳлил (РСТ) қилиниб, бирикма моноклиник $C2/c$ фазовий гуруҳида кристалланиши ва элементар ячейкасининг асимметрик қисми Cl^- , асос катионлари ва H_2O лардан иборат эканлиги аниқланди. РСТ натижаларига асосан, кристаллда $N-H...Cl$, $O-H...Cl$ ва $C-H...Cl$ молекулалараро водород боғлар мавжудлиги аниқланди. Шунингдек, кристаллда катион молекулалари $0.919(4):0.081(4)$ нисбатда бўлиши, кристалл изоморфлар аралашмасидан иборат эканлигини тасдиқламоқда.

Калит сўзлар: 1-бутил-2-метил-5-хлорбензимидазол, кристалл структура, монокристалл, рентгенструктуравий таҳлил, изомер.

Бензимидазоллар муҳим биологик фаол гетероциклик бирикмалар бўлиб, улар асосида яратилган дори воситалари бутун дунёда кенг қўлланилади. Хусусан, уларнинг ҳосилалари микроб ва бактерияларга қарши, юқори антиоксидант хоссаларга эга эканлиги туфайли соҳа мутахассисларида катта қизиқиш ўйғотмоқда. Шунингдек, улар саратонга қарши, антигельминт, цитотоксик, яллиғланишга қарши дори воситалари сифатида амалиётга жорий этилган. Бензимидазол ҳалқаси сақлаган металлокомплекслар ҳам қатор фаолликларга (антифунгал, микробларга қарши, антиоксидант ва каталитик) эга бўлиб, улар ҳам кенг ўрганилмоқда. Бензимидазол металл комплекслари эркин лигандларга нисбатан юқори самарадорликка эга эканлиги аниқланган [1,2]. Юқоридан келиб чиқиб, биз илк бор синтез қилинган 1-бутил-2-метил-5-хлорбензимидазол гидрохлориднинг (**1**) кристалл тузилишини РСТ асосида аниқладик (1-расм).

Ўрганилган бирикма **1** моноклиник, $C2/c$ фазовий гуруҳида кристалланади. Кристалл структура элементар ячейкасининг асимметрик қисми 2 та Cl^- , 2 та асос катионлари ва H_2O лардан иборат. РСТ натижалари асосида $N-H...Cl$, $O-H...Cl$ ва $C-H...Cl$ молекулалараро водород боғлар мавжудлиги аниқланди (1-жадвал). Шунингдек, кристаллда катион молекулалари $0.919(4):0.081(4)$ нисбатда бўлиши, **1** кристаллни изоморфлар аралашмасидан иборат эканлигини тасдиқламоқда.



1 - Расм. 1-бутил-2-метил-5/6-хлорбензимидазол гидрохлорид изомерларнинг структуравий формулалари (**1a,b**) ва кристалл структура асимметрик ячейкаси(пастда).

1-Жадвал

Кристаллдаги водород боғларнинг параметрлари (Å, °)

$D-H\cdots A$	$D-H$	$H\cdots A$	$D\cdots A$	$D-H\cdots A$
---------------	-------	-------------	-------------	---------------

“Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari”

O1—H1W···C12	0.84(6)	2.37(6)	3.207(3)	173(6)
O1—H2W···C13	0.87(5)	2.45(5)	3.316(3)	174(5)
N3—H3···C12	0.88(3)	2.13(3)	3.009(2)	180(4)
N3’—H3’···C13	0.902(19)	2.13(2)	3.030(2)	174(2)
C11—H11D···C11B	0.97	2.24	2.997(15)	134
C11—H12E···C11B	0.96	2.78	3.354(15)	119

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Aragón-Muriel A., Liscano Y., Upegui Y. *Antibiotics*. 2021, 10(6), 728.
2. Geiger D.K., Geiger H.C., Moore S.M. *Acta Crystallographica E Cryst. Comm.* 2019. 29, 75.
3. Ranskiy A., Didenko N., Gordienko O. *Chem.chem.Technol.* 2017. 11(1), 11.

SIANUR KISLOTA ARALASH LIGANDLI MIS(II) KOMPLEKSINING ELEKTRON TUZILISHINI DFT METODI YORDAMIDA O`RGANISH

Ganiyev B.Sh., Avezov H.T., Salimov F.G’.

Buxoro davlat universiteti

Annotatsiya: Ushbu ishda sianur kislotasi va tiosemikarbazid asosidagi mis(II) kompleksining elektron tuzilishi kvant-kimyoviy hisoblashning DFT metodi yordamida o`rganilib, kompleks birikmadagi YuBMO va QBMO larning energetik qiymatlarini tahlili natijalari keltirilgan.

Kalit so‘zlar: DFT, HOMO, LUMO, kvant-kimyoviy hisoblash, sianur kislotasi, kompleks birikma.

Barcha kvant-kimyoviy hisoblash ishlari kompyuterda Frisch va boshqalar tomonidan hammualliflikda yaratilgan Gaussian 09W dasturiy ta’minotida amalga oshirildi. Beckning uch parametrlilik funksional gibridini LYP funksional korrelyatsiyasi bilan birgalikda ishlatish (B3LYP) eng mustahkam gibrid oilalardan biri hisoblanadi. Shu sababli mis(II) kompleksining elektron xossalarni, YuBMO-QBMO/(HOMO-LUMO) energiyalarni hisoblashlar funksional zichlik nazariyasi (DFT) (B3LYP) usuli yordamida 6-311G++ (d, p) asosli to’plam bilan amalga oshirildi. Gaussiandagi hisoblangan out fayllari Gauss View dasturi yordamida vizualizatsiyalashtiriladi [1-3].

Molekulyar orbitalning chegarasi molekulaning boshqa turdagi molekular bilan o’zaro ta’sirini belgilaydi. HOMO (yuqori band molekulyar orbital), elektronlarni o’z ichiga olgan eng uzoq orbital deb hisoblanishi mumkin bo’lgan elektron donor kabi bu elektronlarni berishga harakat qiladi. Boshqa tomondan olib qaraldanda, LUMO (quyi bo’sh molekulyar orbital) ni elektronlarni qabul qilish uchun bo’sh joylarni o’z ichiga olgan eng ichki orbital deb hisoblash mumkin. Demak, HOMO energiyasi ionlanish potentsialiga bevosita bog’liq bo’lsa, LUMO energiyasi elektron yaqinligi bilan bevosita bog’liq bo’ladi. HOMO va LUMO orbitallari o’rtasidagi energiya farqi energiya bo’shlig’i deb ataladi, bu esa hosil bo’lgan molekulaning barqarorligini belgilaydi. LUMO konstruksiyalarining barqarorligi molekulaning kimyoviy reaktivligi va kinetik barqarorligini tavsiflashga yordam beradi. Kichkina bo’shliqqa ega bo’lgan molekula ko’proq qutblangan va yumshoq molekula deb nomlanadi. So’nggi paytlarda HOMO va LUMO o’rtasidagi energiya bo’shlig’i molekula ichidagi zaryad o’tkazuvchanligidan biologik faollikni isbotlash uchun ham foydalaniladi. Chunki u elektron o’tkazuvchanlik o’lchovi hisoblanadi. Sianur kislotasi va tiosemikarbazid asosidagi Cu(II) kompleks birikmasining chegara orbitallari (HOMO, LUMO) B3LYP/6-311G++(d,p) yordamida aniqlandi va 1-2-rasmlarda grafik ko’rsatilgan. HOMO va LUMO orbitallarining energiya parametrlari, shuningdek, o’rganilayotgan birikmaning boshqa xarakteristikalarini B3LYP/6-311G++(d,p) usuli yordamida hisoblab chiqilgan va 1-jadvalda keltirilgan.

Жумаев М.М.	386	Крылова И.В.	580
Жумаева З.Э.	608, 610, 615	Курбанов Ф.П.	577
Жумаева Э.Ш.	241	Кутлимуратов Н.М.	450
Жураев Б.Б.	231	Кучаров Б.Х.	544
Жураев И.И.	22		
Жураев М.А.	145	Қ	
		Қосимова Х.Х.	714
З		Қурвонов Д.Д.	392
Загидуллин А.А.	50	Кутлимуратов Н.М.	331
Зайлобиддинов Ф.К.	375	Л	
Зайниева Р.Б.	169	Лобанов А.В.	630
Закиров Б.С.	544		
Залов А.З.	264, 266	М	
Зарипова Р.Ш.	220	М.И.Олимова	242
Зиятов Д.А.	53, 175	Мадаминова Г.И.	600
		Мамадҷонова М.Ж.	684
И		Мамажанова Р.	411
Ибодуллаев А.Х.	280	Мамажонов А.	371
Ибодуллоева М.И.,	127	Маматкулов М.О.	70
Ибрагимов А.Б.	76, 184	Маматқодиров Б.Д.,	76
Ибрагимов Б.Т.	38, 48	МАМАТОВ Э.Д.	624, 628
Ибрагимов Д.	340	Мамедова М.Ф	259
Изотова Л.Ю.	473	Мамедова Ш.А.	264
Икрамова С.М.	419	Марданова В.И.	152
Инояткулов Ғ.С.	186	Мардонов У.М.	30, 32, 72
Инхонова А	334	Маркова М.О.	580
Исакова Н.И.	700	Матчанов А.Д.	384, 555
Исломов А.Х.	384, 555	Махмудова Ю.А.	597
Исмаилов Д.	688	Махсати Мирзаева	20
Исмоилов Б.	428	Махсумова О.С.	408
Ишанкулов А.Ф.	575	Маҳкамов М.А.	458
Ишмуродова Д.К.	608	Машан Т.Т.	479
		Мая Цинцадзе	152
Й		Медзатый Н.А.	603
Й.Ю.Якубов	76	Мерещенко А.С.	548, 553
Йигиталиев Д.Т.	550	Милюков В.А.	50
Йон Петер	57	Минин В.В.	139, 177
		Миннахметова В.А.	622
К		Мирзаев Д.Б.	562
Кадиров Х.И.	462	Мирзаолимова С.С.	419
Кадирова З.Ч.	175, 240	Мирзаянов И.И.	100
Кадирова Н.Б.	587	Мирзоева Г.А.	43
Кадирова Ш. А.	53	Мирзохидов Х.А.	450
Кадирова Ш.А.	193, 242	Миршарипов Р.Х.	565
Кадирова Ш.А.,	111	Михеева А.И.	695
Карасев М.О.	55	Мохамед А. Ахмед	100
Каримов И.Т.	585	Муродова С.Б.	303, 305
Каримов М.М.	280, 722	Музаффаров Ф.И.	30, 32
Каримова М.М.	261	Мукумова Г.Ж.	220, 613
Каримова Н.Ж.	220, 613	Мукумова Г.Ж.,	127
Каримова Н.Ж.,	127	Муминова Ш.Н.	220
Касимов Ш.А.	67, 103, 136, 212, 615	Муминова Ш.Н.,	127
Касимов Ш.А.,	125	Муминова Э.А.	700
Кемалов Р.А.	70	Муродов С.С.	116
Керим Кулиев	309	Муродова З.Б.	572
Кодиров О.Ш.	408	Мухамадиев Н.К.	575
Кодирова Д.Т.	402	Мухамадсодиқов К.Д.	375
Колесник С.С.	553	Мухамедиев М.Г.	331, 334, 416, 450, 724
Комилов З.А.	303, 305		
Комилов С.М.	594		
Корабоева Н.М.	416		