



DFT РАСЧЕТЫ СЕМИКАРБАЗОНА ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ

Аннотация:

В данной работе приведены результаты DFT анализа с применением квантово-химического расчета электронно-структурных и координационных свойств семикарбазона циануровой кислоты. С помощью квантово-химического расчета определены распределение атомных зарядов по Малликену для молекулы семикарбазона циануровой кислоты. Для квантово-химического расчета и визуализации параметров были использованы программы Gaussian и MaSK (Molecular Modeling and Simulation Kit).

Ключевые слова:

теория функционала плотности, заряд, квантово-химический расчеты, Малликен, базисный набор, эндоцикл, экзоцикл, межмолекулярных взаимодействие (ММВ), донорно-акцепторное взаимодействие (ДАВ).

Information about the authors

Ганиев Бахтиёр Шукуруллаевич

Бухарский государственный университет, Преподаватель,
Республика Узбекистан, г. Бухара

Аслонова Ферангиз Садилаевна

Бухарский государственный университет, Магистрант. Республика
Узбекистан, г. Бухара

Определение распределения атомного заряда по Малликену играет важную роль в исследовании квантово-химических расчетов молекул веществ. Знак и величина атомных зарядов по Малликену дают наиболее точное представление об электронной природе атомов в молекуле и способствует решению задач, связанных с особенностями межмолекулярных взаимодействий (ММВ) и реакционной способности молекулы изучаемого вещества.

С учетом того, что донорно-акцепторное взаимодействие (ДАВ) является одним из видов ММВ и применение теории Малликена позволяет описывать энергию основного состояния образующихся соединений (сопряженная кислота, координационное соединение, молекулярный комплекс), в котором компоненты связаны донорно-акцепторной (ДА) связью, образующейся при переносе электрона от D к A [1-3].

С целью установления влияния изменения значения естественного (эффективного) заряда атомов на дипольный момент, поляризуемость, электронную структуру и донорно-акцепторные свойства молекул нами проведено квантово-химическое исследование молекулы семикарбазона циануровой кислоты - 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбок-сиамида с использованием композитных методов семейства Gaussian (G4), методов теории функционала

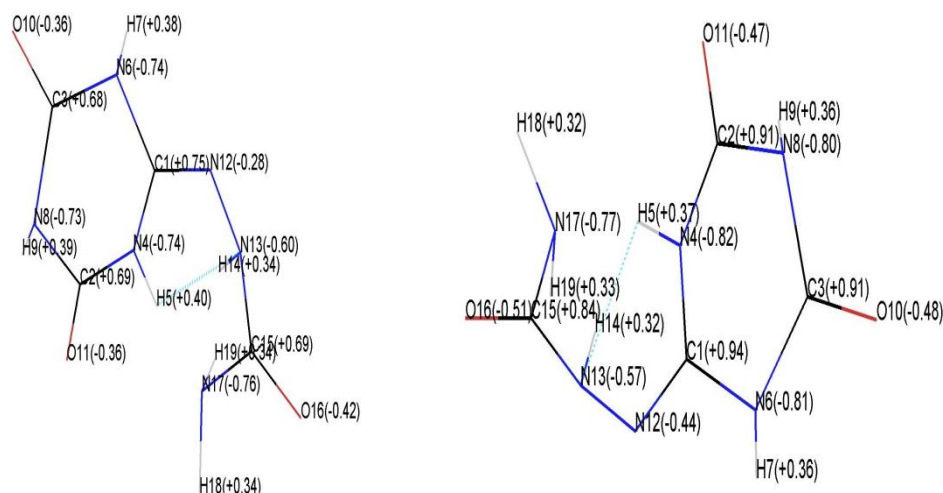


плотности DFT(B3LYP)6-311G и DFT(B3LYP)3-21G. Рассчитанные значения атомных зарядов в соответствии с атомными номерами приведены в таблице 1 и на рис 1.

Сравнение и детальный анализ значения и заряда атомов изученной молекулы показывают, что рассчитанные величины с теми знаками зарядов атомов с базисным набором 6-311G приблизительно на 20-25 % ниже, чем в случае с базисным набором 3-21G, видимо это обусловлено различиями в совершенстве методов расчёта, вложенных в использованных базисных наборах. По разновидности атомов обнаружено, что все атомы водорода и углерода имеют положительные, а все атомы азота и кислорода-отрицательные заряды. Положительные заряды атомов углерода на уровне DFT, где атом C1 имеет самое высокое значение заряда по Малликену (+0,94) по сравнению с другими атомами. Наименьшее положительное значение заряда по Малликену (+0,84) было получено для атома C15 (базисный набор 3-21G). В случае расчета базисным набором 6-311G положительность заряда углеродов имеет пониженное значение, но наименьшее значение (+0,68) наблюдается у атома C3. Это связано с тем, что каждый атом углерода с ближайшей стороны окружены электроотрицательными гетероатомами азота, что вносят в значительной вклад в формировании стабильно оптимальном распределении π -электронной плотности гетероцикла. В случае C1, этот атом окружен с тремя (2 эндоциклическими, 1 экзоциклическим) атомами азота, который испытывает наибольший «оттек» электронной плотности в сторону атомов азота. Поэтому, не зависимо от типа базисного набора расчета, атомы C1, C2 и C3 проявляют высокий положительный заряд в обеспечении наиболее энергетически устойчивого состояния гетероцикла и в целом молекулы семикарбазона по теории Малликена.

В изучаемой молекуле имеются 6 атомов азота, различающиеся по электронной природе и пространственному расположению. Из них 3 атома азота (эндоциклические N4, N6, N8) гетероцикла и 3 атома (экзоциклические N12, N13, N17) бокового заместителя. Хотя по величине отрицательного заряда эндоциклические атомы азота имеют преимущества, но месторасположение в цикле и в соседстве карбонильными атомами кислорода (O11, O12) цианурового фрагмента заметно уменьшают возможности участия N6, N8 атомов в ММВ. Атом N4 также обладает аналогичной электронной природой, однако, из-за наличие бокового заместителя при атоме C1 с наличием набора из четырех (3N;O) электронодонорных атомов, способных участвовать в образовании металлоцикла с участием акцептора M^{n+} , он может быть вовлечен в донорно-акцепторном взаимодействии. В целом, суммарная величина отрицательных зарядов (-1,45 по 3-21G и -1,37 по 6-311G) во фрагменте набором N12, N13, C15, O16, N17 атомов, указывает на наибольшей возможности участия молекулы семикарбазона в ДАВ посредством этого фрагмента. Изучаемая молекула семикарбазона, в зависимости от природы растворителя, акцептора M^{n+} и условия взаимодействия, может быть лигандом $[N_2, O]$, $[N, O_2]$, $[N_2]$ и $[O_1]$ типа с различной дентатностью.

Именно на влияние природы растворителя и условия взаимодействия в процессе ДАВ указывает рассчитанное значение дипольного момента молекулы (2,93). Такая значительная величина дипольного момента свидетельствует о том, особенностях таких, как молекула имеет не симметричное строение, следующих в зависимости от состава и пространственного строения молекулы, центр тяжести зарядов достаточной степени смещены от центра молекулы и поэтому она сильно поляризована. Благодаря этому данное вещество обладает хорошей растворимостью и достаточно высокой реакционной способностью в полярных растворителях.



Метод: DFT(B3LYP).

Базисный набор: 6-311G

Метод: DFT(B3LYP).

Базисный набор: 3-21G

Рисунок 1. Молекула распределение заряда по Малликену

Таблица 1. Распределение заряда по Малликену

| Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 6-311G | | | Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 3-21G | | |
|--|---|-------|---|---|-------|
| 1 | C | +0.75 | 1 | C | +0.94 |
| 2 | C | +0.69 | 2 | C | +0.91 |
| 3 | C | +0.68 | 3 | C | +0.91 |
| 4 | N | -0.74 | 4 | N | -0.82 |
| 5 | H | +0.40 | 5 | H | +0.37 |
| 6 | N | -0.74 | 6 | N | -0.81 |
| 7 | H | +0.38 | 7 | H | +0.36 |
| 8 | N | -0.73 | 8 | N | -0.80 |
| 9 | H | +0.39 | 9 | H | +0.36 |
| 10 | O | -0.36 | 10 | O | -0.48 |
| 11 | O | -0.36 | 11 | O | -0.47 |
| 12 | N | -0.28 | 12 | N | -0.44 |
| 13 | N | -0.60 | 13 | N | -0.57 |
| 14 | H | +0.34 | 14 | H | +0.32 |
| 15 | C | +0.69 | 15 | C | +0.84 |
| 16 | O | -0.42 | 16 | O | -0.51 |
| 17 | N | -0.76 | 17 | N | -0.77 |
| 18 | H | +0.34 | 18 | H | +0.32 |
| 19 | H | +0.34 | 19 | H | +0.33 |

Квантово-химическое изучение показывает, что у семикарбазона циануровой кислоты рассчитанные значения разным базисным набором энтропии молекулы (таблица 2) между собой сильно не отличаются ($\Delta = 1,131 \text{ cal/mol}\cdot\text{K}$). Однако, в обоих случаях, результаты расчетов указывают на высокую энтропию, соответственно, изученное вещество характеризуется высокой термодинамической и физико-химической активностью в процессах ММВ.



Таблица 2

| | |
|--|---|
| Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 6-311G | Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 3-21G |
| 106.853 cal/mol-K | 105.722 cal/mol-K |

Список литературы

1. Вольпин М.Е. Современные проблемы физической органической химии. М.: Мир, 1967. – 560 с
2. R.S. Mulliken, J. Chem. Phys., 1995, 23, 1833–1840.
3. Rajesh S., Gunasekaran S., Rajesh P. HOMO-LUMO, NBO and Vibrational analysis of Sitagliptin by using DFT calculations and Experimental Study (FT-IR, FT-Raman and UV-Visible Spectroscopies) //Int. J. Chem. Tech. Res. – 2018. – Т. 11. – С. 107-122
4. Ganiyev, B., et al. "Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide." International independent scientific journal 2.16 (2020): 3-9.
5. Ганиев, Б. Ш., Умаров, Б. Б., Холикова, Г. К., Салимов, Ф. Г. У., & Аслонова, Ф. С. (2020). Синтез, строения, таутомрия и исследование некоторых квантово-химических параметров соединения 2-(4, 6-диоксо-1, 3, 5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбоксамид. Евразийский Союз Ученых, (7-5 (76)), 65-68.
6. Ганиев, Б. Ш., Холикова, Г. К., & Салимов, Ф. Г. (2019). Использование циануровой кислоты в качестве дезинфицирующих средств для окружающей среды. In Материалы международной научной конференции «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства (Vol. 2, pp. 14-16).
7. Ганиев, Б. Ш., Холикова, Г. К., & Салимов, Ф. Г. У. (2020). Синтез и исследование методами ИК-спектроскопии и квантовой химии-6-((2, 4-динитрофенил) гидразон-1, 3, 5-триазинан-2, 4-диона. Universum: химия и биология, (6 (72)), 68-73.
8. Ganiyev, B. S. (2022). Sianur kislota semikarbazonining YaMR–1H va YaMR–13C spektroskopiyasi. Ta'lim va rivojlanish tahlili onlayn ilmiy jurnali, 2(4), 80-83.
9. Ганиев, Б. Ш., Остонов, Ф. И., Холикова, Г. К., & Салимов, Ф. Г. (2020). Расчеты квантово-химических параметров соединения изоциануровой кислоты с семикарбазидом. International Independent Scientific Journal, (16-2), 3-7.
10. Xoliqova, G. Q. L., qizi Farmonova, E. O., & qizi Begmurodova, P. V. (2022). Kimyo darslarida CHEMDRAW dasturidan foydalanishning ahamiyati. Ta'lim va rivojlanish tahlili onlayn ilmiy jurnali, 2(5), 50-54.
11. Aslonova, F. S., and Ganiyev B. Sh. "Synthesis, structure, tautomerism and investigation of some quantum chemical parameters of compound 2-(4, 6-dioxo-1, 3, 5-triazinan-2-ylidene) hydrazine-carboxamide." International Journal of Academic Pedagogical Research (IJAPR)//ISSN: 2643-9123.
12. Ganiyev, Вахтигор. "Использование программы CHEMSKETCH в процессе изучения органической химии для повышения успеваемости учащихся." Центр научных публикаций (buxdu. uz) 8.8 (2021).
13. Ganiyev, Вахтигор. "Граничные молекулярные орбитали и дескрипторы глобальной реактивности триазиновых соединений." ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz) 6.6 (2021).



14. Sh, Ganiev Bakhtiyor. "Online molecular docking and analysis of biological activity of cyanuric acid derivatives." *Universum: химия и биология* 6-4 (96) (2022): 12-16.
15. Холикова, Гуляйра. "Изучение координационных свойств мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 6.6 (2021).
16. Ганиев, Б. Ш., Холикова, Г. К., Садуллаева, Г. Г., Салимов, Ф. Г. У., & Аслонова, Ф. С. (2021). Использование программы CHEMSKETCH в процессе изучения органической химии для повышения успеваемости учащихся. *Universum: психология и образование*, (12 (90)), 14-17.
17. Абдурахмонов, С. Ф., Холикова, Г. К., Аvezов, Қ. Ғ., & Умаров, Б. Б. (2020). Салицил альдегид дикарбон кислота дигидразонларининг молекуляр механик хоссаларини кванткимёвий ҳисоблаш. *БухДУ магистрантлари ва иктидорли талабалари "Тафаккур ва талкин" мав-зусидаги илмий анжумани*, 15, 157-162.
18. Ганиев, Б. Ш., Мардонов, У. М., Ашуров, Ж. М., Холикова, Г. К., & Музафаров, Ф. И. Гранулярные молекулярные орбитали и дескрипторы глобальной реакционной способности триазиновых соединений. Материалы Республиканской научно-практической конференции «Актуальные проблемы химии комплексных соединений», посвященной 90-летию Парпиева Нусрата Агзамовича. Ташкент. *НУУ.-2021 з*, 14-15.
19. Ганиев, Б. Ш., Холикова, Г. К., & Аслонова, Ф. С. (2022). Изучение энергии различных конформации мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты. *Ta'lim va rivojlanish tahlili onlayn ilmiy jurnali*, 2(4), 161-164.
20. Аvezов, Х. Т., Ганиев, Б. Ш., Холикова, Г. К., угли Салимов, Ф. Г., & Аслонова, Ф. С. (2022). SIANUR KISLOTANING MOCHEVINA ALMASHINGAN HOSILALARINING ONLINE MOLEKULAR DOKINGI VA PASS ANALIZI. *Журнал химии товаров и народной медицины*, 1(3), 82-94.
21. Ганиев, Б. Ш., et al. "Изучение координационных свойств мочевины замещенных продуктов циануровой кислоты. Материалы Республиканской научно-практической конференции «Актуальные проблемы химии комплексных соединений», посвященной 90-летию Парпиева Нусрата Агзамовича. Ташкент." *НУУ.-2021 з*: 14-15.
22. Aslonova, Ferangiz. "Conformational analysis of urea-substituted cyanuric acid products." *Eurasian Journal of Medical and Natural Sciences* 3.1 (2023): 53-56.
23. Ganiyev, Vaxtiyor. "HYPERCHEM дастурида цианур кислота семикарбазонини электрон тузилиши таҳлили." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 2.2 (2020).
24. Ganiyev, Vaxtiyor. "Электронное строение молекулы n'-(4, 6-диоксо-1, 3, 5-триазинан-2-илиден)-3-нитробензогидразона." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 2.2 (2020).
25. Ganiyev, Vaxtiyor. "Исследование некоторых квантово-химических параметров семикарбазона изоциануровой кислоты." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 1.1 (2020).
26. Ganiyev, Vaxtiyor. "Кимё фанидан лаборатория ишларини виртуаллаштириш." *Центр научных публикаций (buxdu. uz)* 6.6 (2021).
27. Qo'ldoshevna, X. G. (2022). Kompyuter dasturlari orqali YAMR-spektroskopiyasini tahlili. *Ta'lim va rivojlanish tahlili onlayn ilmiy jurnali*, 2(3), 224-227.
28. Qo'ldoshevna, X. G. (2022). Kompyuter dasturlari orqali ub-spektroskopiyasi tahlili. *Ta'lim va rivojlanish tahlili onlayn ilmiy jurnali*, 2(3), 92-95.



29. Хожиев, Ш. Т., Косимов, И. О., Исломов, А. Х., Гаибназаров, Б. Б., Ганиев, Б. Ш., & Холикова, Г. К. (2022). Физико-химические, квантово-химические и биологические анализы госсипол-уксусной кислоты. *Universum: химия и биология*, (6-2 (96)), 23-29.
30. Ganiyev, Vaxtiyor. "Квантово-химическое исследование электронного строения (R, E)-6-(1-бензоил-5-гидрокси-5-(перфторпропил)-2λ2-пиразолидин-3-илиден)-3-хлорциклогекса-2, 4-диен-1-ида." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 8.8 (2021).
31. Абдурахмонов, Сайфиддин Файзуллаевич, et al. "Исследование электронной структуры малоноилгидразон салицилового альдегида с помощью квантово-химических расчетов." *Universum: химия и биология* 12-1 (78) (2020): 99-102.
32. Ganiyev, Vaxtiyor. "Исследование электронной структуры 2-(4, 6-диоксо-1, 3, 5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбоксиамида с помощью квантово-химических расчетов." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 1.1 (2020).
33. Холикова, Г. К., Муродова, С. Б., & Авезов, К. Г. (2021). СИНТЕЗ И ИК-СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ВАНАДИЛА (II) НА ОСНОВЕ БЕНЗОИЛГИДРАЗОНОВ АРОИЛТРИФТОРАЦЕТИЛМЕТАНОВ. *Scientific progress*, 1(4), 243-248.
34. Авезов, К. Г., & Умаров, Б. Б. (2017). Комплексы меди (II) на основе бензоилгидразонов ароилтрифторацетилметанов: синтез, ИК, ЭПР спектроскопия и РСА. *Universum: химия и биология*, (2 (32)), 39-44.
35. Мардонов, У., Умаров, Б., Авезов, К., Минин, В., Якимович, С., Зерова, И., & Парпиев, Н. (2005). Синтез и ЭПР спектроскопия комплексов меди (II) и ванадила (II) с бензоилгидразонами 2-трифторацетилциклоалканонов. In *Чугаевская конференция по координационной химии* (pp. 416-417).
36. Б.Ш. Ганиев, С.Ф. Абдурахмонов, Б.Б. Умаров, Ф.Г. Салимов. Исследование комплексов ванадила(II) на основе бис-5- оксипиразолинов. Материалы международной научной конференции «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства» 1 ТОМ. 14-16 ноябр. Бухара-2019. С. 440-442
37. Б.Ш. Ганиев, Умаров Б.Б., Авезов К.Г., Холикова Г.К. Комплексы ванадила(II) на основе ацилгидразонов ароил-трифторацетилметанов. Материалы XIII Международной научной конференции молодых ученых. «Инновационное развитие и востребованность науки в современном Казахстане» II том. Тараз, 2019. С. 83-85
38. Б.Ш. Ганиев, Б.Б. Умаров, Х.Т. Авезов, С.Ф. Абдурахмонов. Дикарбонил бирикмаларнинг дигидразонлари асосида гомобиядроли ванадил(II) комплекс бирикмалари. “Фармацевтика сохасининг бугунги ҳолати: муаммолар ва истикболлар” (халқдро олимлар иштирокидаги республика илмий-амалий анжумани материаллари). Тошкент – 2019. 173-174 бетлар
39. Абдурахмонов С.Ф., Умаров Б.Б., Авезов К.Г., Б.Ш. Ганиев, Холикова Г.К. Синтез и свойства биядерных комплексов ванадила(II) на основе бис-5-оксипиразолинов. Сборник трудов международной научно-практической конференции на тему «Интернационализация и инновация в области высшего образования», посвященная 20-летию Университета дружбы народов имени академика А. Куатбековаи 75-летию заслуженного работника образования Республики Казахстан, к.х.н., профессора К.П. Куатбековой. 24-25 октябрь. Shymkent. 2019 год. I-том. С. 435-437
40. Б.Ш. Ганиев, С.Ф. Абдурахмонов, М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров. Ароматик оксикарбонил бирикмаларнинг дикарбон кислота дигидразонлари ва уларнинг тузилиши. «Функционал



- полимерлар фанининг замонавий ҳолати ва истиқболлари» Профессор ўқитувчилар ва ёш олимларнинг илмий- амалий анжумани материаллари. Тошкент –19-20 март. 2020. 333 бет
41. С.Ф. Абдурахмонов, Б.Б. Умаров, Э.А. Худоярова, Б.Ш. Ганиев, Г.К. Холикова. Синтез и свойства биядерных комплексов ванадила(II) на основе бис-5-оксипиразолинов. *Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн.* № 12(66). С. 50-55
 42. Б.Ш. Ганиев, А.Б. Жураева, С.Ё. Мардонов, М.А. Турсунов. Комплексы никеля(II) и цинка(II) с ацилгидразами □-кетоальдегидов. Симпозиум «Химия в народном хозяйстве» / (12 февраля 2020 г.). - Дубровицы: 2020. С.37-38
 43. С.Ф. Абдурахмонов, Б.Б. Умаров, Қ.Ғ. Авезов, Б.Ш. Ганиев, Г.Қ. Холикова. Ванадил ацетат тетрамерининг ЭПР спектроскопияси. “Математика, физика ва ахборот технологияларининг долзарб муаммолари” мавзусидаги Республика миқёсидаги онлайн илмий-амалий анжумани. 15 апрель. Бухоро, 2020 йил. 260-261 бет
 44. Умаров Б.Б., Авезов К.Г., Ганиев Б.Ш. Холикова Г.К. Тухсанов И.П. ИК- спектроскопия комплексы ванадила(II) на основе ацилгидразонов β-дикетонлов. “Математика, физика ва ахборот технологияларининг долзарб муаммолари” мавзусидаги Республика миқёсидаги онлайн илмий-амалий анжумани. 15 апрель. Бухоро, 2020 йил. 261 бет
 45. Абдурахмонов С.Ф., Ганиев Б.Ш., Умаров Б.Б. Комплексы никеля(II) и меди(II) с новыми N, O, S содержащими лигандами. Химическая технология и техника: Материалы докладов 84-й научно-технической конференции, посвященной 90-летию юбилею БГТУ и Дню белорусской науки (с международным участием). 3-14 февраля. Минск 2020. С.222-224
 46. Б.Ш. Ганиев, Б.Б. Умаров, Ф.С. Аслонова. Исследование электронной структуры 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбоксамиды с помощью квантово-химических расчетов // “ Янгиланаётган Ўзбекистон ёшлари ва инновацион фаолият” мавзусидаги Иккинчи Республика тармоқли илмий масофавий онлайн конференцияси. 2020 йил 2 сентябрь. IV қисм. Б. 202-204
 47. Б.Ш. Ганиев, Ф.С. Аслонова. Исследование некоторых квантово-химических параметров семикарбазона изоциануровой кислоты // Иқтидорли талабалар илмий ахборотномаси. Наманган. 2020 йил. 3-сон Б. 30-36
 48. Б.Ш. Ганиев, Б.Б. Умаров, Ф.С. Аслонова. 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразинкарботиоамидни квант – кимёвий баҳолаш // «Innovative academy» ilmiy tadqiqotlarni qoʻllab-quvvatlash markazi. Talabalar konferensiyasi ilmiy-onlayn konferensiya toʻplami // 4 qism. Toshkent. 17-noyabr. 2020. В. 110-112
 49. Б.Ш. Ганиев, Қ.Ғ. Авезов, Г.Қ. Холиқова, Ф.Г. Салимов. SuperChem дастурида цианур кислота семикарбазонини электрон тузилиши таҳлили. “Замонавий кимёнинг долзарб муаммолари” Республика миқёсидаги хорижий олимлар иштирокидаги онлайн илмий-амалий анжуман материаллари . Бухоро.- БухДУ.- 2020 йил 4-5 декабрь.- 292-295 бетлар
 50. Б.Ш. Ганиев. Цианур кислота ва семикарбазид реакция механизмини квант-кимёвий баҳолаш. “Замонавий кимёнинг долзарб муаммолари” Республика миқёсидаги хорижий олимлар иштирокидаги онлайн илмий-амалий анжуман материаллари . Бухоро.- БухДУ.- 2020 йил 4-5 декабрь.- 402-404 бетлар
 51. Б.Ш. Ганиев, У.М. Мардонов. Анализ распределение атомных зарядов по малликену в молекуле семикарбазона циануровой кислоты. “Замонавий кимёнинг долзарб муаммолари” Республика миқёсидаги хорижий олимлар иштирокидаги онлайн илмий-амалий анжуман материаллари . Бухоро.- БухДУ.- 2020 йил 4-5 декабрь.- 420-426 б.



52. Б.Ш. Ганиев, Б.Б. Умаров, Ф.С. Аслонова. 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразин-карботиоамидни квант – кимёвий баҳолаш. «Илм-фан тараққиётида ёшларнинг ўрни» // Республика миқёсидаги илмий-амалий онлайн-конференция материаллари. Андижон. 2020. Б. 342-345
53. Б.Ш. Ганиев, У.М. Мардонов. Пространственное и электронное строение молекулы семикарбазона циануровой кислоты. III Международное книжное издание стран Содружества Независимых государств «Лучший молодой ученый - 2021»// III международная книжная коллекция научных работ молодых ученых VI том. Нурсултан. 2021 г. С. 19-26
54. Б.Ш. Ганиев, У.М. Мардонов, Ф.Г. Салимов. Электронное строение молекулы N'-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)-3-нитробензогидразона. Республиканская научно-практическая конференция Актуальные проблемы развития химии и химической технологии в Республике Каракалпакстан. 24 март. Нукус. 2021 г.С. 100-102
55. Б.Ш. Ганиев, У.М. Мардонов, Ф.И. Музафаров. Квантохимическое изучение возможности образования мономерного монохлорацетата ванадила(II). СБОРНИК ТРУДОВ международной научно-теоретической конференции на тему: «Куатбековские чтения-1: Уроки Независимости», посвященной 30-летию Независимости Казахстана. 23 апрель 2021 г. III том. С. 4-6
56. Б.Ш. Ганиев, Ф.И. Музафаров, Г.К. Холикова. Оптимизация и расчет квантово-химических параметров соединения мономерного ацетата ванадила(II). СБОРНИК ТРУДОВ международной научно-теоретической конференции на тему: «Куатбековские чтения-1: Уроки Независимости», посвященной 30-летию Независимости Казахстана. 23 апрель 2021 г. III том. С. 12-14