



ИССЛЕДОВАНИЯ ГЛОБАЛЬНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И РЕАКТИВНОСТИ СЕМИКАРБАЗОНА ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ DFT

Аннотация:

Квантово-химический метод DFT / B3LYP был использован для моделирования структуры 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден) гидразин-карбоксамид. Определено пространственное и электронное строение молекулы в различных методах и базисного наборах. Было показано, что стабильность этих соединений в первую очередь обусловлена наличием сильных внутримолекулярные водородные связи (ВВС), образующие шестичленные циклы, и изомерия молекулы, предполагающая образование ВВС.

Ключевые слова:

циануровая кислота, семикарбазид, молекула, заряд, теория Малликена, ВЗМО, НСМО, межмолекулярных взаимодействие (ММВ), квантово-химические расчеты.

Information about the authors

Ганиев Бахтиёр Шукуруллаевич

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

Аслонова Ферангиз Садиллоевна

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

Триазиновые соединения представляют собой важный класс гетероциклической химии и интенсивно изучаются [1, 2].

Циануровая кислота является недорогим, коммерчески доступным реагентом, используемым для приготовления разнообразных s-триазинов производные. Легкость смещения атомов кислорода в изоциануровой кислоте различными нуклеофилами усиливает полезность этого реагента для получения моно-, ди- и три замещенных производных 1,3,5-триазина под контролем температурные условия [3, 4].

Триазиновые каркасы послужили основой для разработки соединений с широким спектром свойств, полезных в лекарственные и сельскохозяйственные применения [5-7].

Реакционная способность функциональных групп заместителей прикрепленные к 1,3,5-триазиновой кольцевой системе также имеют нарисованные значительный интерес. В последнее время реактивность периферических функциональные группы на арильных заместителях, добавленных на структурные единицы мономера типа s-триазина АВ₂ используются в синтез гиперразветвленных полимеров [10, 11]. Хотя было изучено и рассчитано [8,9] работе некоторые квантово-химические параметры гидразона и семикарбазона изоциануровую кислоту, но реакционной



способности его периферические функциональные группы не изучены.

Целью настоящего исследования является изучение электронной структуры 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден) гидразинкарбоксамид с помощью квантово-химических расчетов. В частности, проведены расчеты зарядов Малликена, распределение потенциальной энергии (PED) в соответствии с теорией функционала плотности (DFT), разницы энергий между высокой занятой орбиталью (HOMO) и низкой незанятой (свободной или вакантной) молекулярной орбиталью (LUMO). Результаты расчета HOMO-LUMO использовались для интерпретации информации о переносе заряда внутри молекулы.

Результаты исследования

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

Таблица 2

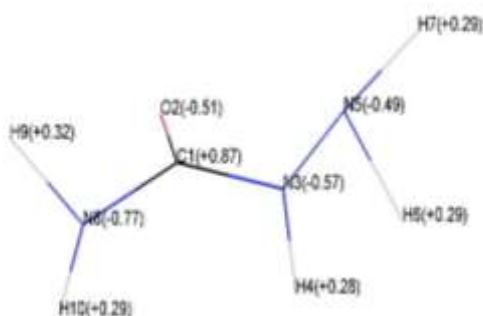
Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 6-311G	Метод: DFT(B3LYP). Базисный набор: 3-21G
106.853 cal/mol-K	105.722 cal/mol-K

Из результатов двух различных расчетов можно сделать следующий вывод:

а) предпочтительны расчеты по методу DFT(B3LYP) и базовому набору 3-21G. Потому что полученные квантово-химические расчеты практически не отличаются от результатов экспериментов.

б) наблюдаются некоторые ошибки в квантово-химических результатах, рассчитанных на методе DFT и базовом наборе 6-311G. Например, дипольный момент молекулы равен 2,93, что, конечно, теоретически не соответствует практическим результатам, даже если вычисленное вторым способом значение (2,76) больше.

Реакционные реагенты и образовавшийся продукт малликеновых зарядов были рассчитаны и оценены квантово-химическим методом 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден), наблюдалось значительное изменение образования молекулы гидразинкарбоксамид, а также силификация симметричной оси в кольце циануровой кислоты (Рис.1) [15-18].



а)

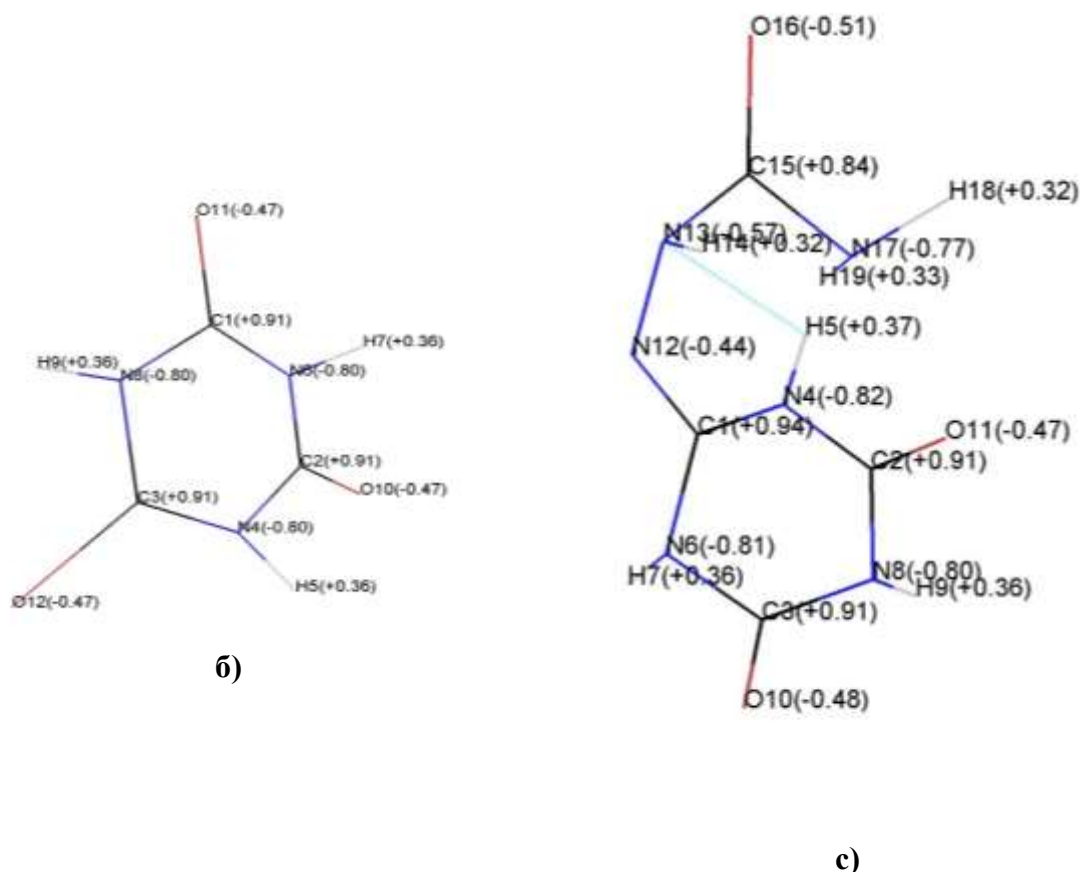


Рисунок 2. Молекулы распределение заряда по Малликену

а) семикарбазид б) циануровая кислота с) семикарбазон циануровой кислоты

Квантово-химические расчеты показывают, что дипольный момент (0,00 D) циануровой кислоты, обладающей симметрией, изменяется условно при взаимодействии с полярной молекулой семикарбазида (4,96 D), дипольный момент (2,76 D) образующегося семикарбазона циануровой кислоты. Также наблюдается, что величина энтропии образующегося вещества также увеличивается по отношению к ингредиентам реакции (табл.3).

Таблица 3

Результирующих величин квантово-химических расчетов

Вещества	Самосогласованное Поле ((SCF) E) (kcal/mol)	Дипольный момент (D)	Энтропия, (S) (cal/mol-K)	Энергия электрона, (kcal/mol)
Семикарбазид	-175080.12	4.96	75.759	-175030.804
Циануровая кислота	-315842.04	0.00	82.579	-315791.129
Семикарбазон циануровой кислоты	-443232.67	2.76	105.722	-443146.988

Изучение электронной и пространственной строение семикарбазона циануровой кислоты было выполнено квантово-химическим расчетом с применением программы Gaussian 09 методом теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP и применением псевдопотенциального базиса LanL2DZ [19].

С методом Ли (Lee)-Янг (Yang)-Парра (Parr) были оптимизированы геометрия и рассчитаны

общие энергии (E_t), энергии граничных молекулярных орбиталей и энергетическая щель между граничными МО (ΔE). А также, были рассчитаны распределение общего заряда на атомах и распределение заряда в верхней занятой МО (ВЗМО) и нижней свободной МО (НСМО) (Рис.1.) [20-25].

Теоретические квантово-химические исследования выявили фронтальные (граничные) молекулярные орбитали в основном и возбужденном состоянии лиганда.

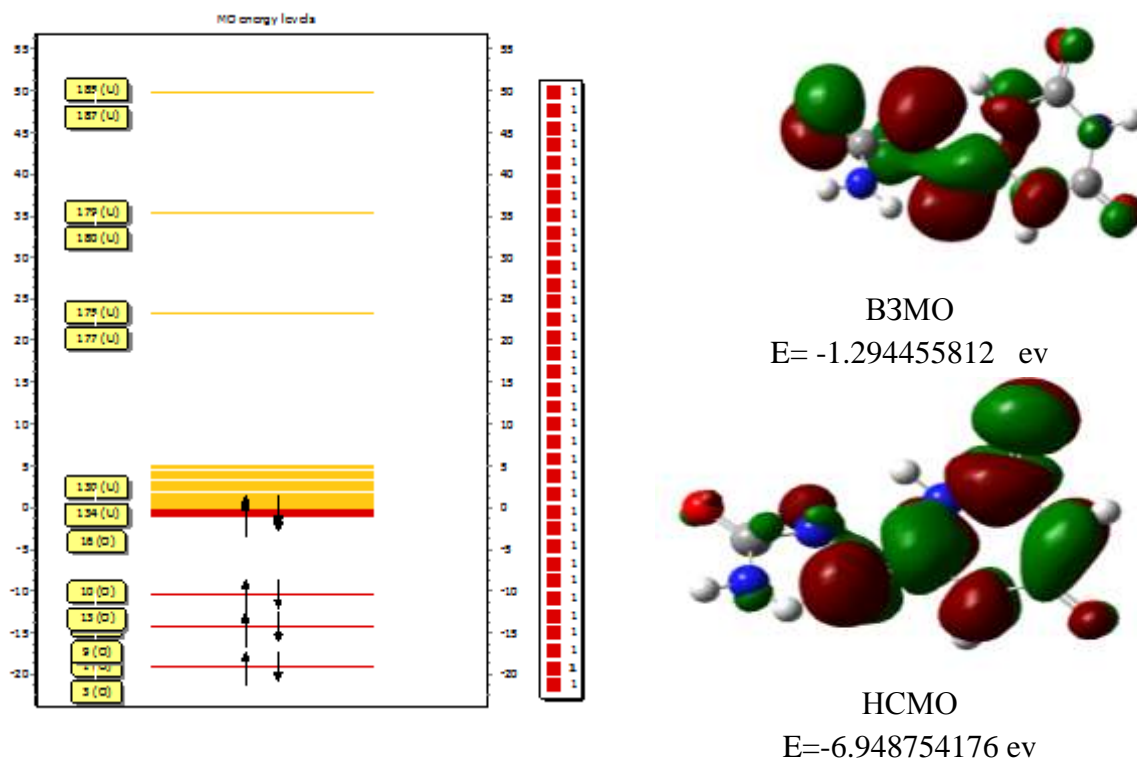


Рисунок 3. Диаграмма энергетических уровней МО (ВЗМО-НСМО) семикарбазона циануровой кислоты

Оптимизированные структурные параметры были использованы для расчета колебательных волновых чисел. Положительное значение всех вычисленных волновых чисел подтверждает стабильность оптимизированной геометрии (Рис.2.Табл.1.).

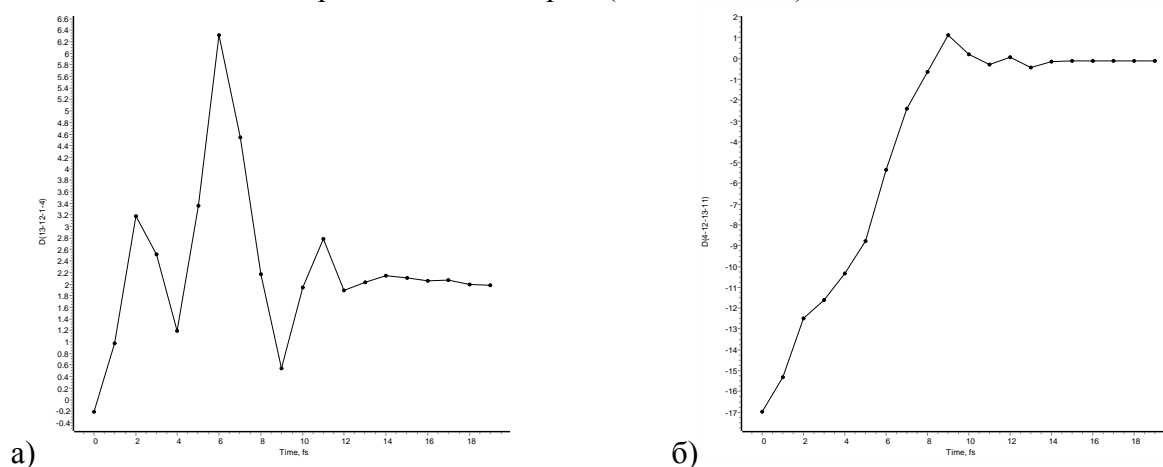


Рисунок 4. Диаграмма координирующие способности семикарбазона циануровой кислоты
а) координирующие атомы N13-N12-N4
б) координирующие атомы N4-N13-N12-O11

Заключение

Из результатов двух различных расчетов можно сделать следующий вывод:



а) предпочтительны расчеты по методу DFT(B3LYP) и базовому набору 3-21G. Потому что полученные квантово-химические расчеты практически не отличаются от результатов экспериментов.

б) наблюдаются некоторые ошибки в квантово-химических результатах, рассчитанных на методе DFT и базовом наборе 6-311G. Например, дипольный момент молекулы равен 2,93, что, конечно, теоретически не соответствует практическим результатам, даже если вычисленное вторым способом значение (2,76) больше.

Из квантово-химических расчетов можно сделать вывод, что изучаемая молекула семикарбазона, в зависимости от природы растворителя, акцептора M^{n+} и условия взаимодействия, может быть лигандом $[N_2O]$, $[N, O_2]$, $[N_2]$ и $[O_1]$ типа с различной дентатностью.

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 1H va ^{13}C 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, Вахтийор. "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. Ф., & Умаров, Б. Б. (2020). Салицил альдегид дикарбон кислота дигидразонларининг молекуляр механик хоссаларини кванткимевий ҳисоблаш. *БухДУ магистрантлари ва иктидорли талабалари "Тафаккур ва талкин" мавзусидаги 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 MOLEKULYAR 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, Вахтигор. "HYPERCHEM дастурида цианур кислота семикарбазонини электрон тузилиши таҳлили." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 2.2 (2020).
24. Ganiyev, Вахтигор. "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, Вахтигор. "Исследование некоторых квантово-химических параметров семикарбазона изоциануровой кислоты." *ЦЕНТР НАУЧНЫХ ПУБЛИКАЦИЙ (buxdu. uz)* 1.1 (2020).
26. Ganiyev, Вахтигор. "Кимè 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., & Аvezов, К. Г. (2021). СИНТЕЗ И ИК- СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ВАНАДИЛА (II) НА ОСНОВЕ БЕНЗОИЛГИДРАЗОНОВ АРОИЛТРИФТОРАЦЕТИЛМЕТАНОВ. *Scientific progress*, 1(4), 243-248.
34. Аvezов, 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., Аvezов, 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., Аvezов 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. Аvezов, С.Ф. Абдурахмонов. Дикарбонил бирикмаларнинг дигидразонлари асосида гомобиядроли ванадил(II) комплекс бирикмалари. “Фармацевтика сохасининг бугунги ҳолати: муаммолар ва истиқболлар” (халқдро олимлар иштирокидаги республика илмий-амалий анжумани материаллари). Тошкент – 2019. 173-174 бетлар
39. Абдурахмонов С.Ф., Умаров Б.Б., Аvezов 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. Куатбекова и 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) -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) гидразинкарбоксамидов 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 qo'llab-quvvatlash markazi. Talabalar konferensiyasi ilmiy-onlayn konferensiya to'plami // 4 qism. Toshkent. 17-noyabr. 2020. В. 110-112
49. Б.Ш. Ганиев, Қ.Ғ. Авезов, Г.Қ. Холиқова, Ф.Г. Салимов. HyperChem 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