

ISSN:2181-0427 ISSN:2181-1458

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС
ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ**

**НАМАНГАН ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
ИЛМИЙ АХБОРОТНОМАСИ**

**НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК НАМАНГАНСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**



2022 йил 2 сон



02.00.00

**КИМЁ ФАНЛАРИ
ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ
CHEMICAL SCIENCES**

**SIANUR KISLOTA SEMIKARBAZONINING Cu(II) KOMPLEKSI DFT HISOBLASHLARI VA
IQ-SPEKTROSKOPIYASI**

B.Sh. Ganiyev, O`M. Mardonov, J.M. Ashurov*

Buxoro davlat universiteti, O`zbekiston, Buxoro

* O`zRFA Bioorganik kimyo instituti, O`zbekiston, Toshkent E-mail: b.ganiyev1990@gmail.com

Annotatsiya: Ushbu maqolada sianur kislota semikarbazonining spirtli eritmasi bilan mis(II) atsetati ammiakli eritmasi 1:1 nisbatda o`zaro ta`sir ettirib olingan CuL_2NH_3 kompleks birikmasining tuzilishi va xossalari haqidagi natijalar muhokama qilingan. Kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida olingan ligand va kompleks birikmalarning tarkibi, tuzilishi va xossalari o`rganilgan, hamda element analiz va IQ-spektroskopiyasi orqali tuzilishi isbotlangan.

Kalit so`zlar: Cu(II) kompleksi, semikarbazon, triazin, ligand, kvant-kimyoviy hisoblash, Malliken zaryadi, entropiya, sianur kislota, elektron energiyasi, dipol momenti.

**РАСЧЕТЫ DFT И ИК- СПЕКТРОСКОПИЯ КОМПЛЕКСА Cu(II) СЕМИКАРБАЗОНА
ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ**

Б.Ш. Ганиев, У.М. Мардонов, Ж.М. Ашуров*

Бухарский государственный университет, Узбекистан, г. Бухара

* Институт биоорганической химии Академии наук Узбекистана, Узбекистан, г. Ташкент

Аннотация: В данной статье обсуждаются результаты исследования структуры и свойств комплексное соединение CuL_2NH_3 , проведенных взаимодействием аммиачного раствора ацетата меди(II) со спиртовым раствором семикарбазона циануровой кислоты в соотношении 1:1. Были изучены состав, структура и свойства полученного лиганда и комплексных соединений с помощью квантово-химических расчетов и структура была доказана с помощью элементного анализа и ИК-спектроскопии.

Ключевые слова: Комплекс Cu(II), семикарбазон, триазин, лиганд, квантово-химический расчет, заряд Малликена, энтропия, циануровая кислота, энергия электронов, дипольный момент.

**DFT CALCULATIONS AND IR- SPECTROSCOPY OF THE Cu(II) COMPLEX OF CYANURIC
ACID SEMICARBAZONE**

B.Sh. Ganiev, U.M. Mardonov, J.M. Ashurov*

Bukhara state university, Uzbekistan, Bukhara

* Institute of Bioorganic Chemistry, Uzbekistan Academy of Sciences, Uzbekistan,
Tashkent

E-mail: b.ganiyev1990@gmail.com

Abstract: This article discusses the results of a study of the structure and properties of complex CuL_2NH_3 , carried out by the interaction of an ammonia solution of copper(II) acetate with an alcoholic solution of cyanuric acid semicarbazone in the ratio of 1:1. The composition, structure and properties of the obtained ligand and complex compounds were studied using quantum chemical calculations and the structure was proved using elemental analysis and IR-spectroscopy.

Keywords: Cu(II) complex, semicarbazone, triazine, ligand, quantum chemical calculation, Mulliken charge, entropy, cyanuric acid, electron energy, dipole moment.

1. Kirish

Triazin birikmalari geterosiklik kimyoning muhim sinfidir va u bugungi kunda intensiv ravishda o'rganilmoqda [1,2].

Sianur kislota - bu turli xil s-triazin hosilalarini tayyorlash uchun ishlatiladigan arzon, sotuvga qo'yiladigan reaktiv hisoblanadi. Turli xil nukleofil reagentlar tomonidan sianur kislotasida kislorod atomlari siljishining osonligi ushbu reagentning harorat sharoitlari nazorati ostida 1,3,5- triazinning mono, di- va tri almashingan hosilalarini olish uchun foydaliligini kuzatish mumkin [3].

Triazin hosilalari tibbiy va qishloq xo'jaligida foydali bo'lgan juda ko'p xususiyatlarga ega birikmalarni yaratish uchun asos bo'lib xizmat qildi [4,5].

1,3,5-triazin halqa tizimiga birlashtirilgan o'rinbosarlarning funktsional guruhlarining reaksiya qobiliyati ham olimlarda katta qiziqish uyg'otmoqda. So'nggi paytlarda giper tarmoqlangan polimerlarni sintez qilishda s-triazin AB₂ tipidagi monomerning strukturaviy birliklariga qo'shilgan aril o'rinbosarlari bo'yicha periferik funktsional guruhlarining reaktivligi qo'llanilmoqda [6, 7].

2. Adabiyotlar tahlili

Rossiya Fanlar Akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo institutidan G.B. Seifer, Hindiston Kerala universitetining Mahatma Gandhi kollejidan R. Divya, Lekshmi P. Nair. B.R.Bijini, C.M.K. Nair, K. Rajendra Babu kabi olimlar, Tyubingen universitetining Noorganik kimyo institutidan Qutaiba Abu-Salem, Cäcilia Maichle-Mößmer, Elke Niquet, and Norbert Kuhn kabilar, Saudi Arabistonning Qirol Abdulaziz Universitetidan Dina Abed Bakhotmah kabi olimlar triazin hosilalar, shuningdek, sianur kislota hosilalarining xossalari haqida bir qator ilmiy maqolalar nashr ettirganlar. Ushbu olimlarning ilmiy tadqiqotlarini o'rganish natijasida sianur kislotaning korroziya ingibitorlar sifatida, molekulyar o'tkazgichlar sifatida ishlatilishi va boshqa bir qator fizik-kimyoviy xossalari o'rganilib, ularning xalq xo'jaligida gerbitsidlar sifatida ishlatilishi mumkinligiga to'xtalib o'tilganligi adabiyotlar tahlili natijasida o'rganildi [3, 8-13].

O'zbekistonda sianur kislota hosilalarining korroziya ingibitorlar sifatida qo'llanilishi bo'yicha Toshkent Kimyo texnologiyalari ilmiy tadqiqot institutidan Jalilov Abdulhat Turobovich va shogirdlari bir qator ilmiy tadqiqotlar olib borilmoqda. Shuningdek, O'zbekiston Milliy universitetining professori S.E. Nurmonov o'z ilmiy tadqiqotlarida sianur kislota ishtirokida turli xil monomerlar olish, sianur kislotadagi vodorod atomlari almashinishi hisobiga boshqa moddalar hosil qilish, kislorod atomlari o'rniga oltingugurt atomlari tutgan analoglari bilan ham bir qator tajribalar olib borib, ularning natijasini respublika va boshqa ilmiy jurnallarda nashr etilganligi o'rganildi [14-17].

Semikarbazid va sianur kislotaning semikarbazoni ba'zi kvant-kimyoviy parametrlari o'rganilgan va hisoblangan [18-22], ammo uning periferik funktsional guruhlarining reaktivligi, kompleks birikmalari o'rganilmagan.

3. Tajriba qismi

Sintez qilingan semikarbazon va kompleks birikmaning infraqizil spektroskopik tadqiqotlari O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasining Bioorganik kimyo institutida amalga oshirildi. Quritilgan moddalar uchun Furiye (FTIR) infraqizil spektrlari KBr tabletkalari shaklida Furiye-spektrometr «IRTracer-100» (SHIMADZU CORP., Yaponiya, 2017) umumiy komplektida (HPIBO) MIRacle-10 ichki nur sindiruvchi diamond/ZnSe prizmalı (4000÷400 sm^{-1} – spektral diapason tebranish chastotaga ega; chastota oralig'i - 4 sm^{-1} , sezgirlilik nisbati signal/shovqin - 60,000:1; skanerlash tezligi – sekundiga 20 spektr) yordamida qayd etilgan [23,24].

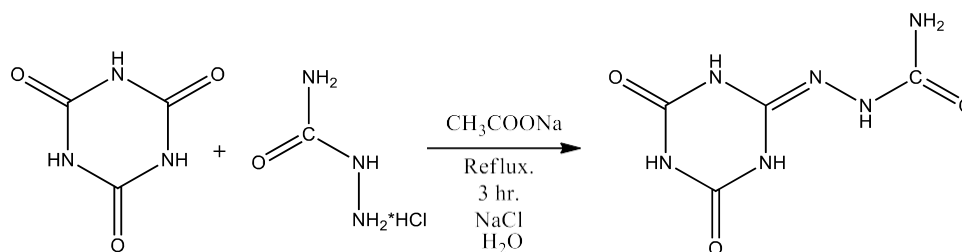
Kvant-kimyoviy hisoblashlar ChemCraft 1.8 dasturi va Gaussian 09 dasturining DFT usulining B3LYP bazislar to'plami bo'yicha optimizatsiyalandi va hisoblandi [19-22].

3.1. Sianur kislota semikarbazoni – ligand sintez

0,446 g (0,004 mol) semikarbazid gidroxloridning 50 ml suvdagi eritmasiga 0,516 g (0,004 mol) sianur kislotaning 100 ml suvdagi suspenziyasi va 0,41 g natriy atsetat qo'shiladi. Reaksiyon kolba teskari sovutgich bilan ulanib suv hammomida 1,5-2 soat davomida qaynatiladi. Reaksiyon aralashma uch sutka davomida xona haroratida saqlanadi. Olingan polikristall holdagi cho'kma filtrlandi, kam miqdordagi benzol va geksanda yuvildi. 1,02 g massadagi polikristall modda benzol va etanolning 1:1,5 hajmiy nisbatdagi aralashmasida qayta kristallanishi natijasida qo'ng'ir rangli monokristall olindi [9,15].

Reaksiya unumi 78 %. $T_{\text{suyuq}} = 177-183^{\circ}\text{C}$.

Sianur kislota ishtirokida olingan semikarbazonining (H_2L) unumi, suyuqlanish harorati va element



tahlili natijalari 1-jadvalda keltirilgan.

H L
2

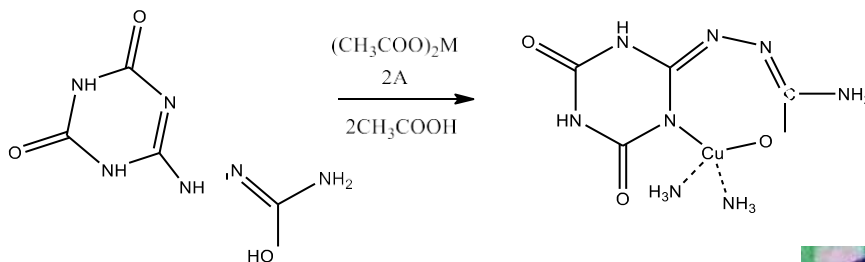
1.-jadval

Sianur kislota ishtirokida olingan semikarbazonining (H_2L) unumi, suyuqlanish harorati va element tahlili natijalari

Birikma	Unum %	T, suyuq. 0 C	Aniqlandi, %			Brutto-formulasi	Hisoblandi, %		
			C	H	N		C	H	N
H L 2	78	177-183	25,81	3,25	45,15	C ₄ H ₆ N ₆ O ₃	25,77	3,22	45,17

3.2. Sianur kislota semikarbazoni asosida mis(II) va bariy kompleks birikmalari sintezi

Biz H₂L sianur kislota semikarbazonining spirtidagi eritmasi bilan donor asos ishtirokida mis(II) va bariy atsetatining spirtli-ammiakli eritmasini 1:1 molyar nisbatdagi o'zaro reaksiyasidan CuL·2NH₃



tarkibli kompleks birikmalar sintez qildik.

M=Cu, Ba

A=NH₃

ML



A. CuL·2NH₃. 200 ml hajmli stakandagi 0,001 mol (0,186 g) sianur kislota semikarbazonining (H₂L) 50 ml etanoldagi qaynoq eritmasiga 0,001 mol (0,2 g) mis(II) atsetat monogidratining 50 ml ammiakdagi eritmasini aralashdirib qo'shdik.

Stakandagi aralashma 5 minut davomida qizdirib aralashdirilganda to'q binafsha rangli kristall cho'kma ajralib tushdi. Bir sutkadan keyin cho'kmani filtrlab oldik, suv, etanol va dietilefiri bilan yuvib, havoda quritdik.

Olindi – 0,2 g. CuL·2NH₃ kompleks birikmasi (ML). Reaksiya unumi 71 %.

Sianur kislota semikarbazoni Cu²⁺ ioni saqlagan (ML) komplekslarining unumi va element tahlili natijalari 2-jadvalda keltirilgan.

2-jadval

Sianur kislota semikarbazoni ishtirokida olingan (ML) komplekslarining unumi va element tahlili natijalari

Birikma	Unum, %	Topilgan, %				Brutto formulasi	Hisoblangan, %			
		M	C	H	N		M	C	H	N
CuL	71	22,92	16,83	3,46	40,04	C ₄ H ₁₀ CuN ₈ O ₃	22,56	17,05	3,58	39,78

4. OLINGAN NATIJALAR VA ULARNING TAHLILI

4.1. Ligandning tuzilishini kvant-kimyoviy hisoblash usullari yordamida o'rganish

Hozirgi paytda kimyogarlar ham murakkab hisoblash texnikalarini kimyoviy jarayonlarni o'rganishga qo'llash imkoniyatiga ega. Organik kimyoda kvant-kimyoviy va molekulyar-dinamik hisoblashlar olib borish nisbatan kam qo'llanilmoqda. Lekin bunday hisoblash texnikalari va turli dasturlarni rivojlanishi ilmiy yangiliklar yaratishga, kimyoviy jarayonlarni kompyuterda modellashtirish kabilarni olib borishga imkon yaratadi [25].

Dastlabki moddalar va hosil bo'lgan semikarbazon kvant-kimyoviy ko'rsatgichlari: molekulaning umumiy energiyasi, boshlang'ich energiyasi, issiqlik energiyasi, elektron energiyasi, yadro energiyasi, dipol momenti va kislorod atomi zaryadi Gaussian (G4) dasturining DFT(B3LYP)3-21G funksional zichlik nazariyasi usuli bo'yicha aniqlandi (3-jadval).

3- jadval

Kvant-kimyoviy hisoblashlar natijaviy qiymatlari

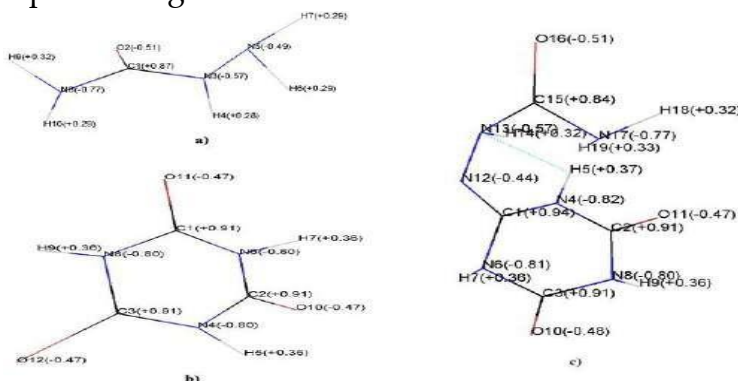
Moddalar	O'z-o'ziga mos keladigan maydon energiyasi ((SCF) E) (kcal/mol)	Dipol momenti (D)	Entropiya, (S) (cal/mol-K)	Elektron energiyasi, (kcal/mol)
Semikarbazid	-175080.12	4.96	75.759	-175030.804
Sianur kislota	-315842.04	0.00	82.579	-315791.129
Sianur kislota semikarbazoni	-443232.67	2.76	105.722	-443146.988

Kvant-kimyoviy hisoblashlar shuni ko'rsatadiki, simmetriyaga ega bo'lgan sianur kislotaning dipol momenti (0.00 D) qutbli semikarbazid molekulasini (4.96 D) bilan reaksiyaga kirishganda hosil bo'ladigan sianur kislota semikarbazonining dipol momenti (2.76 D) shartli ravishda o'zgaradi. Shuningdek, hosil bo'lgan moddaning entropiya qiymati ham reaksiya ingredienlriga nisbatan ortishi kuzatiladi.

Reaksiyaga kirishuvchi reagentlar va hosil bo'lgan mahsulot Malliken zaryadlari kvant-kimyoviy hisoblab, baholanganida 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden) gidrazinkarboksamid molekulasini hosil bo'lishida sezilarli o'zgarish bo'lishini, hamda sianur halqasidagi simmetrik o'qning siljishi kuzatildi (1-rasm).

Shuningdek, organik ligand molekulasining donor atomlarining manfiy effektiv zaryadlari shuni ko'rsatdiki, sianur semikarbazoni molekulasining triazin halqasidagi azotlar (-0,344; -0,347),

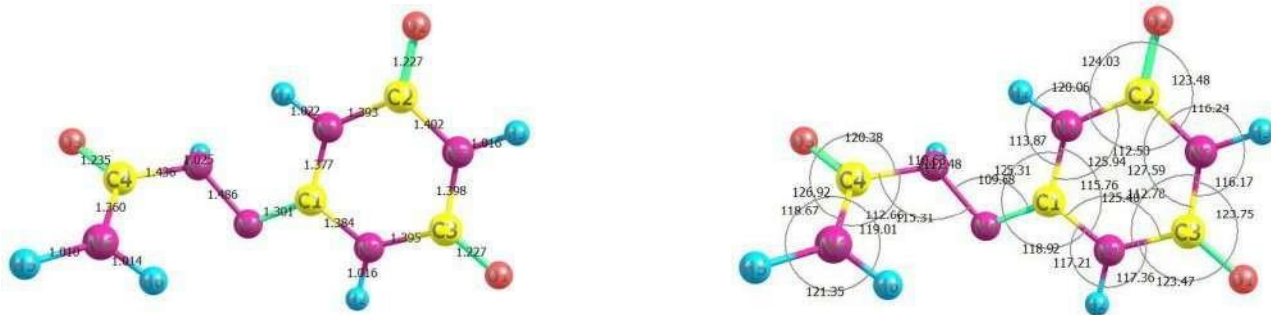
semikarbazon bog`ga ega bo`lgan ulerod (-0,049) va karbonil guruhidagi kislorod (-0,390) atomida manfiy effektiv zaryad yuqori ekanligi ma`lum bo`ldi.



1-rasm. Molekularda Malliken zaryadlari taqsimoti

Molekulardagi atomlar zaryadining Malliken bo`yicha taqsimlanishini aniqlash, molekuladagi atomlarning elektron tabiati va molekulalararo o`zaro ta`sirlar mavjudligi, hamda o`rganilayotgan modda molekulasining reaksiya qobiliyati Mn^{+n} metal kationlari bilan o`zaro donor-aktseptor ta`siri yuzaga kelishini tavsiflashga yordam beradi.

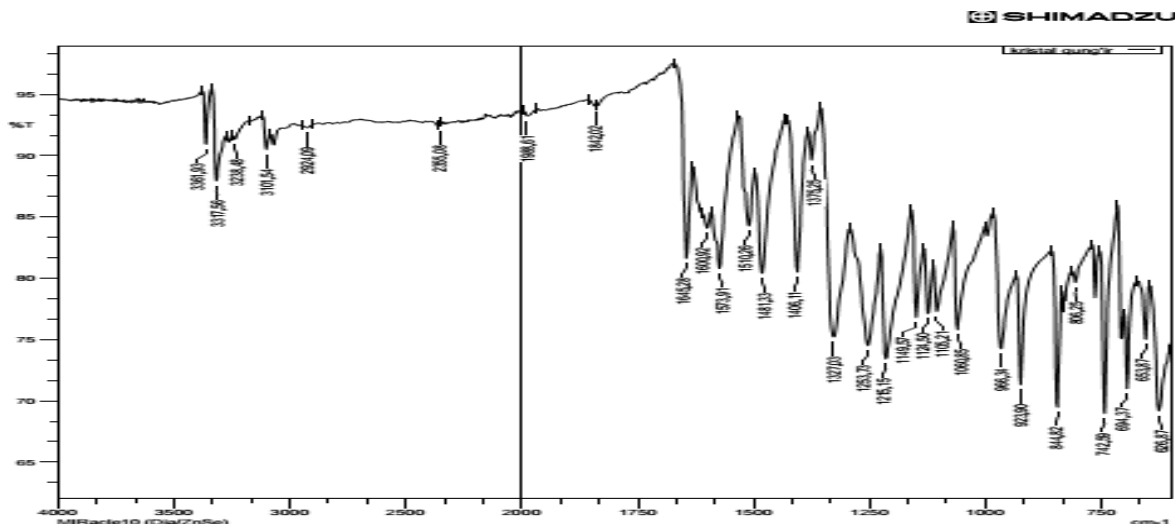
Ligandning bog` uzunligi va bog` burchaklarini aniqlandi va N,O saqlagan organik birikmaning bog` uzunligi va bog` burchagi aks ettirilgan modellariga ko`ra, ayrim nazariy xulosalarga kelindi (2-3 rasm).



2-rasm. Molekulaning modelida bog` uzunligi 3-rasm. Molekulaning modelida bog` burchagi

4.2. Sianur kislota semikarbazonining IQ-spektroskopiyasi

Sianur kislota semikarbazoni H_2L ning IQ spektrilarini Avogadro dasturiy ta'minotida hisoblangan IQ spektriga mosligi o`rganilganda eksperimental olingan tebranish chastotasi $\nu(C=N)$ guruhi uchun $1600,92 \text{ cm}^{-1}$ ga nisbatan $\nu(C=N)$ gacha 1594.53 cm^{-1} past chastotalarga o`zgarganda 6.39 cm^{-1} ga o'tish holati kukaziladi (4-rasm, 4-jadval).



4-rasm. Sianur kislota semikarbazonining (H₂L) SHIMADZU spektrometrida olingan IQ-spektri

C-N spektrlari: C-N tebranish chastotasini aniqlanish juda qiyin vazifadir, chunki bu sohada bir nechta spektr chiziqlarni aralashtirish mumkin. Tittal va boshq. guruhni 1689 cm^{-1} ga mos ravishda C = N va C-N ga benzimidazol birikmasi uchun tebranish kuzatilishini izohlaydi [25].

Prabhaharan va boshq. FT-IR da 1575 cm^{-1} va FT-IR spektroskopiyada ham, Raman spektroskopiyada ham 1540 cm^{-1} sohada, C = N tebranishlari haqida xabar berishdi [26].

C-N cho'zilishi odatda 1400-1200 cm^{-1} oraliq'ida yotadi. Ushbu tadqiqot ishida 1778, 1752 va 1463 cm^{-1} diapazonida orasida sianur kislota semikarbazonining juda kuchli cho'ziluvchan tebranishlari va 1727 cm^{-1} da juda kuchli, 1469 cm^{-1} da juda kuchsiz va FT-IR spektrida 1418 cm^{-1} diapazonida kuzatiladi.

4.3. Sianur kislota semikarbazoni Cu(II) kompleksining IQ-spektroskopiyasi

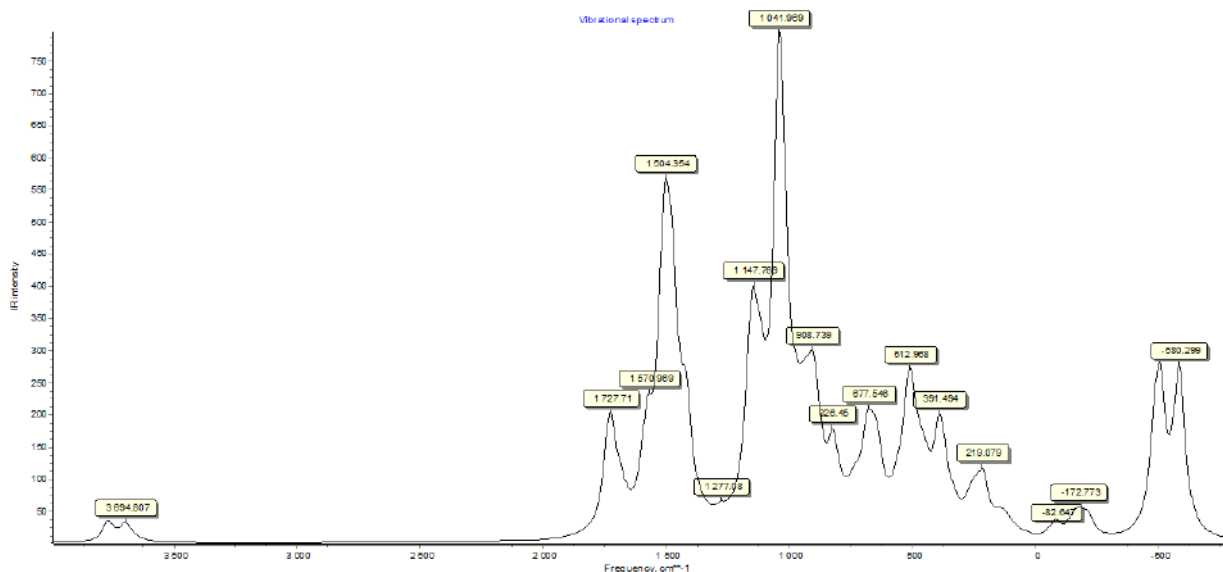
Semikarbazondan mis(II) ioni kompleks birikmasiga o'tilganda IQ-spektrida 3300 cm^{-1} sohada $\nu(\text{N-H})$ va 1640 cm^{-1} sohada $\nu(\text{C=O})$ valent tebranishlari yo'qoladi. Ammo 2500-3400 cm^{-1} sohadagi keng tebranish chiziqlari saqlanib qoladi, bu esa OH^o guruhining ichki molekulyar vodorod bog'lanish hosil bo'lishi bilan bog'liq valent tebranishlariga tegishlidir. Bunga asoslanib kompleks birikma tuzilishini (ML) shaklda yozish mumkin. Qo'shni ligand molekularidagi kislorod atomlari Cu(II) ionining tetragonal bipiramidal holatgacha bo'lishiga olib keladi [8,10].

Shuningdek, kompleks birikmalarning kvant-kimyoviy hisoblash natijasida olingan nazariy va eksperimental spektrlari o'zaro taqqoslanib o'rganildi, ularning o'zaro mos spektr qiymatlari 4-jadvalda aks ettirildi (5-7-rasm).

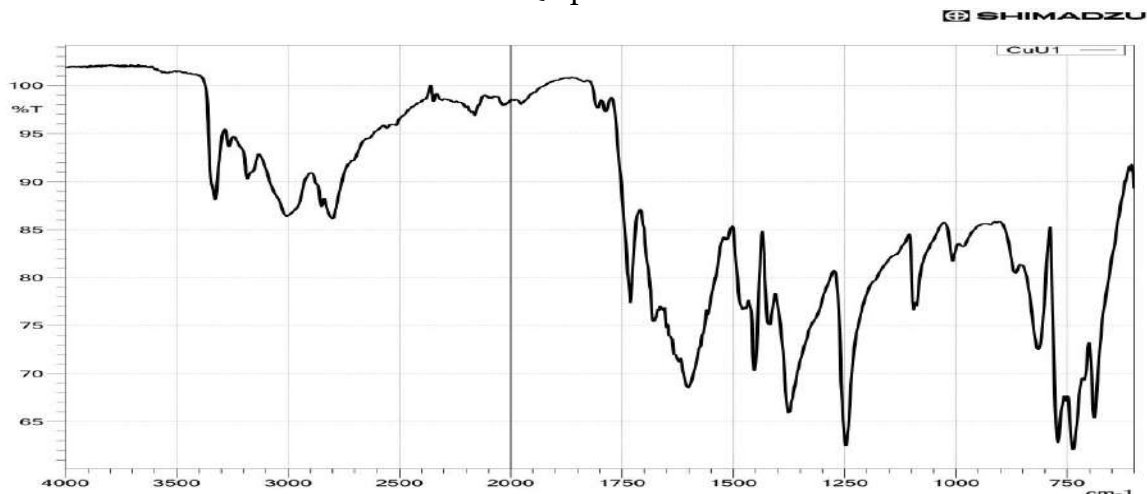
4-jadval

Sianurik kislota semikarbazoni Cu(II) kompleksining kvant-kimyoviy hisoblash natijasida Chem Craft 1.8. dasturida olingan nazariy va tajribada Shimadzu spektrometrida olingan IQ-spektrlarini taqqoslash

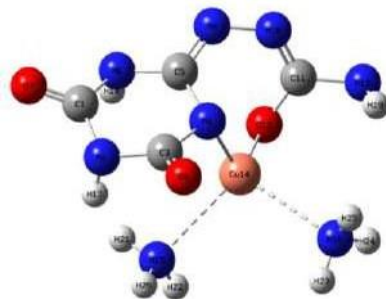
Chastota	Intensivlik	Tajribadagi olingan spektrlar
621.76	43,72	626,87
653.39	50,67	653,87
691.37	180,08	694,37
742.03	51,26	742,59
840.94	10,34	844,82 N - H tebranish
931.44	42,46	923,90
970.69	18,47	966,34
1044.29	192,03	1060,85 Planar halqaning tebranishlari
1093.79	11,83	1105,21
1393.33	348,07	1406,11
1468.00	152,25	1481,33
1528.10	795,62	1510,26
1574.64	40,74	1573,91
1594.53	214,53	1600,92
1636.68	206,41	1645,28
1873.02	1158,58	1842,02
1986.49	372,72	1988,61



5-rasm. Sianurik kislota semikarbazoni Cu(II) kompleksining Chem Craft 1.8. dasturida olingan IQ-spektri



6-rasm. Sianurik kislota semikarbazoni Cu(II) kompleksi IQ-spektri



7-rasm

CuL·2NH₃ kompleksining tuzilishi

5. XULOSALAR

Ikki xil hisob-kitoblarning natijalaridan quyidagi xulosa chiqarish mumkin:

- DFT(B3LYP) usuli va 3-21G bazasi bo'yicha hisob-kitoblar afzallik beriladi. chunki olingan kvant-kimyoviy hisob-kitoblar tajriba natijalaridan deyarli farq qilmaydi.
- DFT usuli va 6-311G bazasi to'plamida hisoblangan kvant-kimyoviy natijalarda ba'zi xatolar mavjud. Masalan, molekula dipol momenti 2,93 ga teng, bu, albatta, nazariy jihatdan amaliy natijalarga mos kelmaydi, hatto ikkinchi usul bilan hisoblangan qiymat (2,76) katta bo'lsa ham [20- 22].

Kvant-kimyoviy hisoblashlardan olingan ma'lumotlarga ko'ra, o'rganilayotgan semikarbazon molekulasi hal qiluvchi, Mⁿ⁺ qabul qiluvchi va o'zaro ta'sir qilish sharoitlariga qarab turli xil dentatlikka ega bo'lgan ligand [N₂O], [N, O₂], [N₂] va [O₁] bo'lishi mumkin degan xulosaga kelindi va Cu(II) va Ba metallari bilan komplekslari sintez qilindi.

Sianur kislota molekulari yuqori D_{3h} simmetriyasi tufayli uning semikarbazon hosilasining IQ spektrlari juda sodda va tahlil qilish oson bo'lganligi isbotlandi. Eksperimental spektrlarning talqini DFT (B3LYP)/6-311 ++ G (d, p) darajasida hisoblangan oddiy chastotalar va IQ-intensivligi bilan taqqoslaganda, nazariy bashorat qilingan normal tebranish chastotalarining qiymatlari potentsial energiya taqsimoti nuqtai nazaridan mosligi isbotlandi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. G. Giacomelli, A. Porcheddu, 1,3,5-Triazines, In *Comprehensive Heterocyclic Chemistry III*; K. Turnbull (Eds.), Elsevier Science & Technology, 2008, 197-290.
2. E. M. Smolin, L. Rapoport, s-Triazine and Derivatives in *The Chemistry of Heterocyclic Compounds*; Interscience: New York, 1959.
3. Seifer G. B. Cyanuric acid and cyanurates // *Russian Journal of Coordination Chemistry*. – 2002. – T. 28. – №. 5. – С. 301-324.
4. Giacomelli G., Porcheddu A., Luca L. D. [1, 3, 5]-Triazine: a versatile heterocycle in current applications of organic chemistry // *Current Organic Chemistry*. – 2004. – T. 8. – №. 15. – С. 1497- 1519.
5. H. M. LeBaron, J. E. McFarland, O. C. Burnside, *The Triazine Herbicides*; Elsevier, San Diego, USA, 2008
6. Elango M., Subramanian V., Sathyamurthy N. Nanoclusters of cyanuric acid // *Journal of Chemical Sciences*. – 2017. – T. 129. – №. 7. – С. 873-881
7. Shibayama, A.; Kajiki, R.; Kobayashi, M.; Mitsunari, T.; Nagamatsu, A. 6-Acyl-1,2,4-triazine- 3,5-dione derivative and herbicides. Patent WO 2012002096; *Chem. Abstr.* 2012, 156, 122559.
8. Divya R. et al. Growth and characterization of heterobimetallic copper-sodium complex of cyanuric acid: A novel photoluminescent material // *Journal of Molecular Structure*. – 2020. – T. 1200. – С. 127031.
9. Divya R. et al. A novel structure of gel grown strontium cyanurate crystal and its structural, optical, electrical characterization // *Physica B: Condensed Matter*. – 2017. – T. 526. – С. 37-44.
10. Divya R. et al. Growth and characterization of barium complex of 1, 3, 5-triazinane-2, 4, 6-trione in gel: a corrosion inhibiting material // *Applied Physics A*. – 2018. – T. 124. – №. 5. – С. 1-9.
11. Kalmutzki M. et al. Development of Metal Cyanurates: The Example of Barium Cyanurate (BCY) // *European Journal of Inorganic Chemistry*. – 2014. – T. 2014. – №. 15. – С. 2536-2543.
12. Abu-Salem Q. et al. [Ph₄P][C₅H₆N₃O₃] M (CO)₅ (M= Cr, Mo, W; C₅H₇N₃O₃= 1, 3-Dimethyl-cyanuric Acid). Organometallic Complexes of the 1, 3-Dimethylcyanurate Ligand // *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. – 2008. – T. 634. – №. 14. – С. 2463-2465.
13. Al-Otaibi F. A., Bakhotmah D. A. Synthesis and Biological Evaluation of New Fluorine Compounds Bearing 4-Amino-1, 2, 4-triazino [4, 3-b]-1, 2, 4-triazin-8-one and the Related Derivatives as CDK2 Inhibitors of Tumor Cell // *Polycyclic Aromatic Compounds*. – 2020. – С. 1-
14. Ziyadullaev A. E. et al. Mathematical processing of the results of synthesis of vinyl ethers of cyanuric acid // *Восточно-европейский научный журнал*. – 2020. – №. 3-1 (55). – С. 61-70.
15. Ziyadullaev A., Nurmonov S., Parmonov A. Study of the catalytic reaction of acetylene with cyanuric acid // *Journal of science*. Lyon. – 2020. – №. 8-1. – С. 11-14.
16. Ziyadullaev A. et al. Homogeneous catalytic vinylation of 2, 4, 6-trihydroxy-1, 3, 5-triazine by acetylene at high pressure // *The Scientific Heritage*. – 2020. – №. 44-2 (44).
17. Зиядуллаев А. Э. и др. Теоретические основы реакции гомогенного каталитического винилирования циануровой кислоты // *Евразийский союз ученых*. – 2019. – №. 9-2. – С. 37-41.
18. 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.

19. Ganiyev B.Sh., Aslonova F.S. 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 // Vol. 5 Issue 5, May - 2021, P. 104-106

20. Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М. 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

21. Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М. Анализ распределение атомных зарядов по малликену в молекуле семикарбазона циануровой кислоты // “Замонавий кимёнинг долзарб муаммолари” Республика миқёсидаги хорижий олимлар ишгирокидаги онлайн илмий-амалий анжуман материаллари . Бухоро.- БухДУ.- 2020 йил 4-5 декабрь.- 420-426 бетлар

22. Ганиев Б.Ш. Цианур кислота ва семикарбазид реакция механизмини квант-кимёвий баҳолаш // “Замонавий кимёнинг долзарб муаммолари” Республика миқёсидаги хорижий олимлар ишгирокидаги онлайн илмий-амалий анжуман материаллари . Бухоро.- БухДУ.-2020 йил 4-5 декабрь.- 402-404 бетлар

23. В.В. Umarov, Q.G'. Avezov; M.A. Tursunov. Fizikaviy tadqiqot usullari - Toshkent: “Navro’z” nashriyoti, 2020. 322 b.

24. Prech E., Byulmann F., Affolter K. Determination of the structure of organic compounds. Tables of spectral data. Moscow, Binom.- 2006.- 438 p

25. Tittal R. K. et al. Synthesis, molecular docking and DFT studies on biologically active 1, 4-disubstituted-1, 2, 3-triazole-semicarbazone hybrid molecules //New Journal of Chemistry. – 2019. –Т. 43. – №. 21. – С. 8052-8058.

26. M. Prabhakaran, A.R. Prabakaran, S. Srinivasan, S. Gunasekaran, Densityfunctional theory studies on molecular structure, vibrational spectra and electronic properties of cyanuric acid, Spectrochim. Acta A: Mol. Biomol.Spectrosc. 138 (2015) 711–722.



МУНДАРИЖА

ФИЗИКА-МАТЕМАТИКА ФАНЛАРИ

01.00.00

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

PHYSICAL AND MATHEMATICAL SCIENCES

1	Mathematical logic, logical practices and formula Abdunazarova D.T., Madrahimova M.A., Madrahimov Sh.Sh	3
2	Инъектив ҳақиқий w^*-қисм алгебралар Нуриллаев М.Э	7
3	Viola-Jons algoritmini cheklangan resurslarga ega mikrokontrollerda tadbiqu. Holmirzayev H.E., Botiraliyev X.A., Mamatov A.A	12
4	Ikkinchi tartibli gronuoll chegaralanishli boshqaruvlar uchun tutish masalasi Samatov B.T., Doliyev O.B., Egamov J.A	19
5	Исследование научных аспектов создания оптронов с тонкими пленками Найманбоев Р., Нурдинова Р.А., Искандаров У.У., Эргашев Ш. У., Тошпулатов Ш.М	23
6	Dimensional quantization in a quantum well of hole conduction tellurium Rasulov V.R., Rasulov R.Ya., Eshboltaev I.M., Kuchkarov M.Kh.	29
7	Некоторые свойства функции карлемана Жураева У.Ю.	35
8	О некоторых краевых задачах для одного класса уравнений третьего порядка параболо-гиперболического типа в треугольной области с тремя линиями изменения типа Мамажонов М., Шерматова Х.М.	41
9	Одгга 3 тур чегара масала учун айирмали схема Имомов А., Иномиддинов С., Настинов С., Махмудова Х.	51
10	Оптоэлектрон тунда кўриш мосламаси Онаркулов К.Э., Юлдашев Ш.А., Юлдашев А.А	56

КИМЁ ФАНЛАРИ

02.00.00

ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

CHEMICAL SCIENCES

11	Sianur kislota semikarbazonining cu(ii) kompleksi dft hisoblashlari va iq-spektroskopiyasi Ganiyev B.Sh., Mardonov O`M., Ashurov J.M.	62
12	Yengil neft distillatlarini gidrolizlash uchun samarali katalizatorni ishlab chiqish Saydaliyev O.	73
13	Исследование физико-химических свойств олигомеров на основе полисульфида натрия Нормуродов Б.А., Тураев Х.Х., Джалилов А.Т., Пардаева Н.Ж	76