O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIY VA O'RTA MAXSUS
TA'LIM VAZIRLIGI

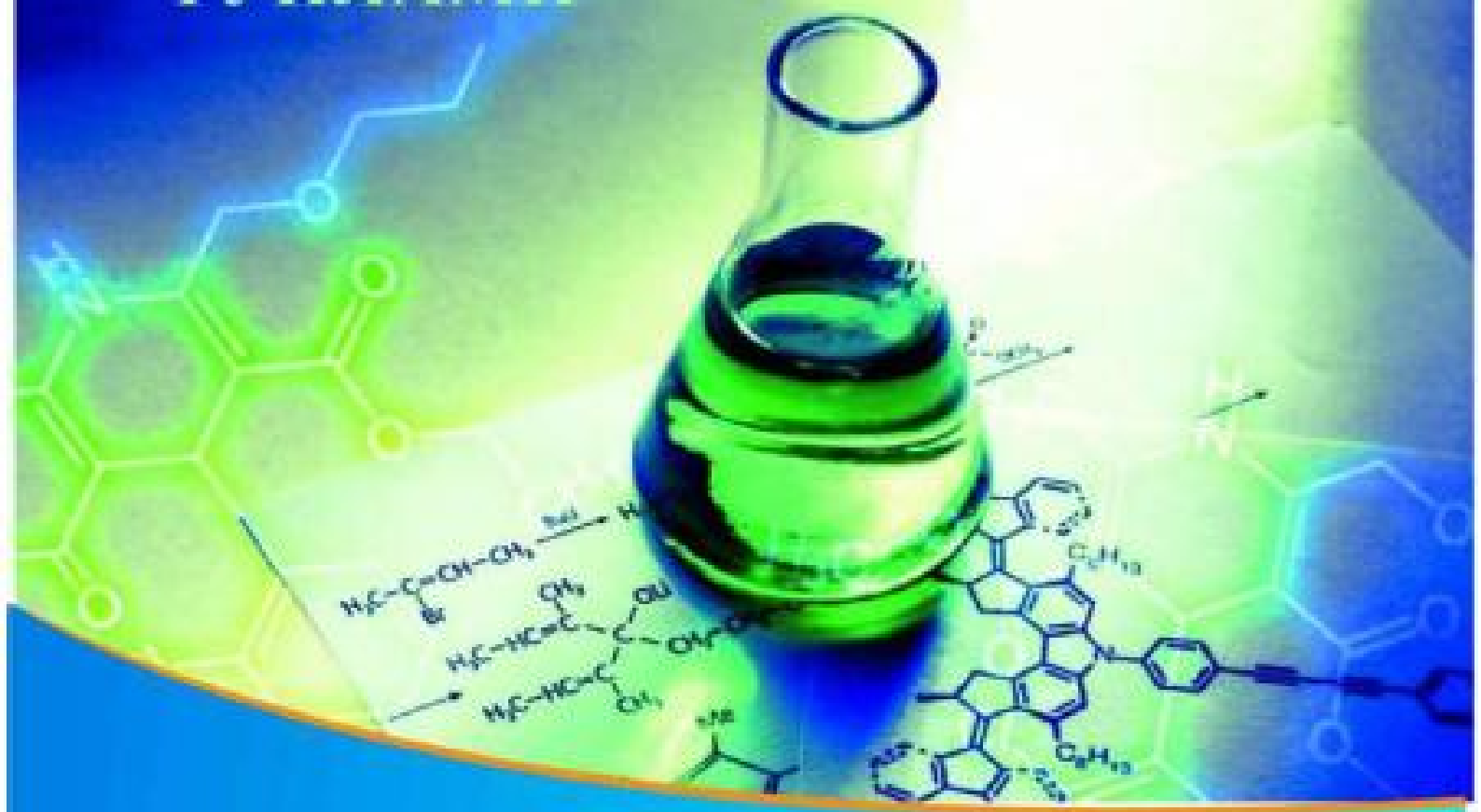
BUXORO
DAVLAT
UNIVERSITETI

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
INNOVATSION
RIVOJLANISH VAZIRLIGI

ЗАМОНАВИЙ КИМЁНИНГ ДОЛЗАРБ МУАММОЛАРИ

мавзусидаги Республика миқёсидаги хорижий олимлар иштирокидаги онлайн илмий-амалий анжумани

МАТЕРИАЛЛАР ТЎПЛАМИ



2020 йил 4-5 декабрь

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

БУХОРО ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ

ТАБИИЙ ФАНЛАР ФАКУЛЬТЕТИ

“ЗАМОНАВИЙ КИМЁНИНГ ДОЛЗАРБ МУАММОЛАРИ”

мавзусидаги

Республика миқёсидаги хорижий олимлар иштирокидаги онлайн илмий-амалий анжумани

ТЎПЛАМИ

Бухоро, 2020 йил 4-5 декабрь

Бухоро- 2020

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ КРОТОНИЛИДЕНИМИН-О-БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

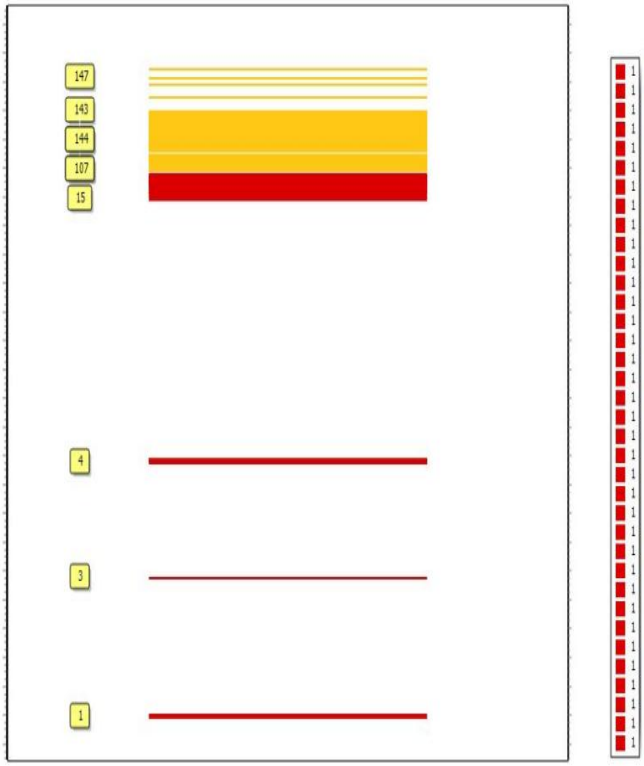
Н.И. Назаров, О.Н. Ўроқов

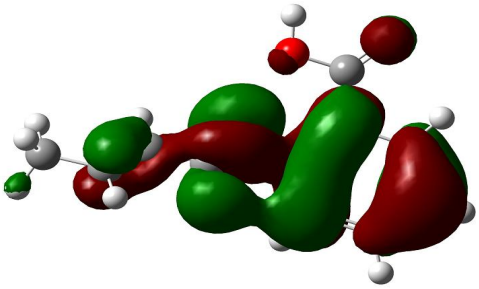
Бухарский государственный университет

Квантово-химические методы расчета являются наиболее важным и удобным способом изучения электронной структуры вещества. На основании квантово-химических расчетов возможно изучение электронной структуры сложных соединений. Это также позволяет прогнозировать конкурирующие донорные центры.

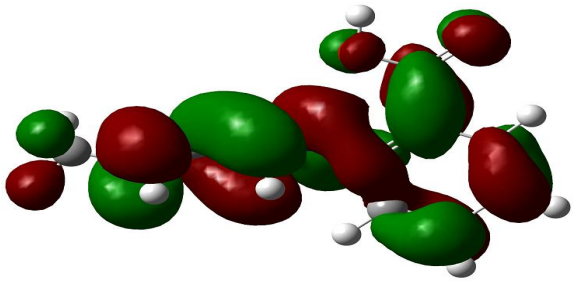
С помощью квантово-химических расчетов исследована электронная структура кротонилиденимин-о-бензойной кислоты(КБК). В частности, проведены расчеты зарядов Малликена, разницы энергий между высокой занятой орбиталью (HOMO) и низкой незанятой (свободной) молекулярной орбиталью (LUMO). Результаты расчета HOMO-LUMO использовались для интерпретации информации о переносе заряда внутри молекулы.

Диаграмма энергетических уровней МО (ВЗМО-НСМО) КБК





HOMO E=-0,22132



LUMO E=-0,05659

ΔE=0,16473

Квантово-химический расчет электронной структуры лиганда было выполнено с применением программы Gaussian 09 методом теории

функционала плотности с использованием гибридного функционала B3LYP, который проводился в несколько этапов: разработка теоретической модели исследуемого вещества, оптимизация и расчет физико-химических параметров, обработка и визуализация полученных результатов.

Результаты квантово-химических расчетов стерамида представлены ниже.

Вещество	$E_{сис}$, a.u.	μ, дебай	Entropy (S)
КБК	-627,300062	3,98	114,500

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

Атом азота имидной группы молекулы имеет самый высокий отрицательный заряд (–0,055 эВ). Кроме того, у атома азота электронная плотность (N = –0,055 эВ) тоже высока.

ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОКСИДОВ АЗОТА С ЦИАНИДНЫМИ РАСТВОРАМИ ГИДРОМЕЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ

И.Н. Турсунова[1], У.М. Мардонов[2], Х.Ш.Урунова.

[1]Навоийский государственнқй горный институт

[2]Бухарское ОУМГ СП ООО "AsiaTransGas",

В данной работе приводятся результаты теоретического изучения, термодинамического обоснования и практической перспективы использования оксидов азота (NO_2, NO) в место SO_2 в регенерации цианистых растворов производства благородных металлов.

Известно, что в процессе выщелачивания драгоценных металлов из обогащенной руды применяется метод цианирования, в конечной стадии после извлечения основного металла цементацией цинковой пылью, в образовавшемся отвальном растворе, остаются в значительном количестве свободного цианида и цианистые комплексы цинка и других сопутствующих металлов в переработанной руде. Данный этап производства характеризуется большим удельным расходом цианистого реагента и для предотвращения этого отвальный цианистый раствор подвергается регенерацию под действием двуокиси серы. Сущностью

G’.O.Mamajanov	
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ АМИДА СТЕАРИНОВОЙ КИСЛОТЫ. Ширинов Г.К.	89
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ КРОТОНИЛИДЕНИМИН-О-БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ С ПОМОЩЬЮ КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ. Н.И. Назаров, О.Н. Ўроқов	91
ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ОКСИДОВ АЗОТА С ЦИАНИДНЫМИ РАСТВОРАМИ ГИДРОМЕЛЛУРГИЧЕСКИХ ПРОИЗВОДСТВ. И.Н. Турсунова, У.М. Мардонов, Х.Ш.Урунова.	92
RIFORMATDAGI BENZOL MIQDORINI KAMAYTIRISH. S.A. G’aybullayev, S.F.Fozilov.	95
RIFORMING JARAYONI PARAMETRLARINI RIFORMATNING TARKIBIGA TA’SIRI. S.A. G’aybullayev	97
AZOT FOSFOR VA AZOT, FOSFOR, KALIYLI O‘G‘ITLARNING TARKIBINI TAHLILI QILISH.B.Sh. Sharipov., A.T. Jalilov., H.S. Beknazarov	99
ВОЗМОЖНОСТИ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА ИЗ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ РАСТВОРОВ ГИДРОМЕТАЛЛУРГИЧЕСКИХ ЗАВОДОВ. К.С.Санакулов, Б.Ф. Мухиддинов, С.Ш. Шарипов	100
ИНДИГО МОЛЕКУЛАСИНИ ЭЛЕКТРОН ТУЗИЛИШИНИ DFT УСУЛИДА ЎРГАНИШ. Эшчанова А.К., Eshimbetov A.G	102
О ХИМИЗМЕ ОБРАЗОВАНИЯ ОРГАНОФОСФОНАТОВ. З.М.Давлятова, Х.И.Кадиров	105
TEMIR (III) IONLARINI AMINOKISLOTALAR BILAN ERITMADA KOMPLEKS HOSIL QILISHINI pH-POTENSIOMETRIYA USULIDA O’RGANISH. T.B. Aliyev., Q.Sh. Xusenov., I.I. Jo’rayev	107
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЕ ГАЛОИДЫ МЕТАЛЛОВ НА СКОРОСТЬ КОРРОЗИИ МЕТАЛЛОВ АХТАМОВ Д.Т., МУХИДДИНОВ Б.Ф., ВАПОЕВ Х.М., КОДИРОВ С.М.	109
СРАВНЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОСТЕЙ РАБОТЫ ТРАДИЦИОННОЙ НАСАДОЧНОЙ КОЛОННЫ И ПОЛОГО ВИХРЕВОГО АППАРАТА Х.Ш. Бахронов[1]., А.А. Ахматов[1]., Д.Д. Жураев[1]., Х.Х. Суярова[2]	111
NEPETA L BA LOPHANTHUS L ЎСИМЛИГИ ТУРЛАРИНИНГ КУЛ ТАРКИБИ. М.Ю. Мамаджонова., Н.Қ. Усманова., Ш.В. Абдуллаев.	113
СОСТАВ ДЛЯ ОГНЕЗАЩИТНОЙ ОБРАБОТКИ ДРЕВЕСНЫХ И ЦЕЛЛЮЛОЗНО – БУМАЖНЫХ МАТЕРИАЛОВ М.Н. Муратова., У.М. Мардонов., И.Н. Турсунова., Н.У. Саидова	114
ДЕРИВАТОГРАФИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА	116