

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR
VAZIRLIGI



ILMIY
AXBOROTNOMA

2025

NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI

- НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК НАМАНГАНСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
- SCIENTIFIC BULLETIN OF NAMANGAN STATE UNIVERSITY





NAMANGAN DAVLAT UNIVERSITETI

ILMIY AXBOROTNOMASI

Bosh muharrir

Kirgizbayev Abdugaffor
Karimjonovich
tarix fanlari doktori, professor

Mas'ul muharrir

Nazarov Abdug'ffor
Abdujabborovich, geografiya
fanlari doktori, professor

Mas'ul muharrir o'rinbosari

Imomov Otabek
Normirzayevich
biologiya fanlari bo'yicha falsafa
doktori, dotsent

Texnik muharrir

Xoshimov Sardorbek
Nozimjon o'g'li

"NamDU ilmiy axborotnomasi – Научный вестник НамГУ"

2019-yildan boshlab O'zbekiston
Respublikasi Oliy attestatsiya
komissiyasi Rayosati qarori
bilan quyidagi fan sohalari
bo'yicha OAKning
dissertatsiyalar asosiy ilmiy
natijalarini chop etish tavsiya
etilgan ilmiy nashrlar ro'yxatiga
kiritilgan.

01.00.00-Fizika-matematika
fanlari (14)

02.00.00-Kimyo fanlari (18)

03.00.00-Biologiya fanlari (17)

09.00.00-Falsafa fanlari (24)

10.00.00-Filologiya fanlari (26)

13.00.00-Pedagogika
fanlari (30)

Tahrir hay'ati a'zolari

Fizika-matematika fanlari

Xatamov Nosirjon Muydinovich, fizika-matematika fanlari doktori, dotsent
Abdulazizov Baxromjon Toshmirza o'g'li, fizika-matematika fanlari doktori, dotsent
Sattarov Iskandar Abu-aliyevich, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent
Dexqonov Farrux Nuriddin o'g'li, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent
Boytilayev Dilmurod Axmataliyevich, fizika-matematika fanlari nomzodi, katta ilmiy
xodim
Baymatov Paziljon Jamoldinovich, fizika-matematika fanlari nomzodi, dotsent
Davlatov Abror Borijon o'g'li, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori dotsent
Inoyatov Shukurillo Turg'unboyevich, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori,
dotsent
Jalolov Ravshan Maxmudjonovich, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori,
dotsent
Xolboyev Azamat G'anisherjon o'g'li, fizika-matematika fanlari bo'yicha falsafa doktori
Maxammadaliyev Muxtor Tursunmuxammad o'g'li, fizika-matematika fanlari bo'yicha
falsafa doktori

Kimyo fanlari

Abdullayev Shavkat Vaxidovich, kimyo fanlari doktori, professor
Sultonov Boxodir Elbekovich, kimyo fanlari doktori, professor
Karimov Abdurashid Musaxonovich, kimyo fanlari doktori, professor
Xolmatov Dilshod Sottorjonovich, texnika fanlari doktori, dotsent
Sattarov Tulqinjon Abdusattor o'g'li, texnika fanlari nomzodi, dotsent
Muradov Murod Toxirjonovich, kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori
Rasulov A'zamjon Avazjonovich, texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent

Biologiya fanlari

Tojibayev Komiljon Sharobiddinovich, biologiya fanlari doktori, professor, akademik
Dexqonov Davron Burxanovich, biologiya fanlari doktori, dotsent
Batoshov Avazbek Risqulovich, biologiya fanlari doktori, professor
Turginov Orzimat Turdimatovich, biologiya fanlari doktori, katta ilmiy xodim
Komilov Doniyor Jo'rayevich, biologiya fanlari bo'yicha falsafa doktori
Egamberdiyev Mehmonjon Xudoyberdiyevich, biologiya fanlari bo'yicha falsafa doktori,
dotsent
Xoshimov Xushbaxt Rustamjon o'g'li, biologiya fanlari bo'yicha falsafa doktori

Texnika fanlari

Ataxanov Shuhrat Nuriddinovich, texnika fanlari doktori, professor
Abdullayev Olim Gulamjanovich, texnika fanlari doktori, dotsent
Dadaxanov Musoxon Xoshimxonovich, texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent
Jo'rayev Sherali Umarjonovich, texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori

Qishloq xo'jaligi fanlari

Sulaymonov Inomjon Jamoldinovich, qishloq xo'jaligi fanlari nomzodi, dotsent
Turg'unov Muzaffar Mirzaraxmatovich, qishloq xo'jaligi fanlari bo'yicha falsafa doktori

Tarix fanlari

Rasulov Abdullajon Nuritdinovich, tarix fanlari doktori, professor
Dexkanov Narimon Burxonjonovich, siyosiy fanlari doktori, professor
Haydaraliyev Shuhrat Abdulazizovich, tarix fanlari nomzodi, dotsent
Madraximov Zoxid Sharofovich, tarix fanlari nomzodi, dotsent
Xalmuratov Baxtiyor Rejvaliyevich, tarix fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent
Erqo'ziyev Anvarjon Ashurovich, tarix fanlari nomzodi, dotsent
To'xtabayev A'zamjon Sharipxo'jayevich, tarix fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent

“NamDU ilmiy axborotnomasi –
Научный вестник НамГУ”
jurnali O‘zbekiston Matbuot va
axborot agentligining
17.05.2016-yildagi
08-0075 -raqamli guvohnomasi
hamda O‘zbekiston
Respublikasi Prezidenti
Administratsiyasi huzuridagi
Axborot va ommaviy
kommunikatsiyalar agentligi
(AOKA) tomonidan 2020-yil
29-avgust kuni
1106-sonli guvohnomaga binoan
chop etiladi. “NamDU Ilmiy
Axborotnomasi” elektron nashr
sifatida xalqaro standart turkum
raqami
(ISSN-2181-1458) ga ega.

Ilmiy axborotnomaning
2025-7-soni NamDU
Muvofiqlashtiruvchi
Kengashining 2025-yil
31-iyuldagi 8-sonli yig‘ilishida
muhokama qilinib, ilmiy
to‘plam sifatida chop etishga
tavsiya etilgan
(Bayonnoma № 8).
Maqolalarning ilmiy saviyasi va
keltirilgan ma’lumotlar uchun
mualliflar javobgar hisoblanadi.
Jurnal har oyda o‘zbek, rus va
ingliz tillarida elektron shaklda
chop etiladi.

**Maqolalar quyidagi rasmiy
web sahifa orqali qabul
qilinadi:**

journal.namdu.uz

Tahririyat manzili:
Namangan shahar, Boburshox
ko‘chasi, 161-uy
e-mail: science@namdu.uz

Iqtisodiyot fanlari

Mahmudov Bahriddin Jo‘rayevich, iqtisodiyot fanlari doktori, professor
Sirojiddinov Kamoliddin Ikromiddinovich, iqtisodiyot fanlari nomzodi, dotsent
Baymirzayev Dilmurod Nematovich, iqtisodiyot fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Yoqubjonova Xulkaroy Yoqubovna, iqtisodiyot fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Abdullayev Zafarbek Safibullayevich, iqtisodiyot fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent

Falsafa fanlari

Talapov Baxriddin Alijanovich, falsafa fanlari doktori, professor
Jo‘rayev Ro‘zimat To‘xtasinovich, siyosiy fanlari doktori, professor
Gaffarova Gulchehra Gulamjanovna, falsafa fanlari doktori, professor
Zamilova Rimma Ramiliyevna, pedagogika fanlari doktori, professor
G‘apparov Elyorjon Otabekovich, falsafa fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Sodirjonov Muxriddin Maxamadaminovich, sotsiologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori
(PhD), dotsent
Muydinova Moxira Mukumjanovna, sotsiologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent

Filologiya fanlari

Uluqov Nosirjon Muxammadaliyevich, filologiya fanlari doktori, professor
Jafarov Botir Sattarovich, filologiya fanlari doktori, professor
Sadikov Zoxid Yaqubjanovich, filologiya fanlari doktori, professor
Dosbayeva Nargiza Turg‘unpo‘latovna, filologiya fanlari doktori, professor
Tojiboyev Ilxomjon Usmonovich, filologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori
Karimova Farida Isakovna, filologiya fanlari doktori, dotsent
Siddiqov Qosimjon Abilovich, filologiya fanlari nomzodi, professor
Darvishov Ibroxim O‘rmanovich, filologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Qo‘ziyev Umidjon Yandashaliyevich, filologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Yuldashev Otabek Toshpulat o‘g‘li, filologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent

Geografiya fanlari

Jumaxanov Shavkatjon Zairjanovich, geografiya fanlari doktori, dotsent
Mirzaaxmedov Xamidullo Saydamatovich, geografiya fanlari nomzodi, dotsent
Soliyev Iqboljon Raxmonberdiyevich, geologiya-minerologiya fanlari bo‘yicha falsafa
doktori, PhD

Pedagogika fanlari

Asqarova O‘g‘iloy Mamashakirovna, pedagogika fanlari doktori, professor
Xujamberdiyeva Shaxnoza Kupaysinovana, pedagogika fanlari doktori, professor
Muminova Dilafruz Akbaraliyevna, pedagogika fanlari doktori, dotsent
Ismoilov Turobjon Umirzaqovich, pedagogika fanlari nomzodi, dotsent
Hamidova Muxayyoxon Obidovna, filologiya fanlari nomzodi, professor
Shodmanov Qodirjon Odilxanovich, pedagogika fanlari nomzodi, dotsent
Toshibekova Munajat Xoshimovna, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori
Inamov Dilmirza Dedamirzayevich, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori, dotsent
Madaminov Baxodir Sharifjonovich, pedagogika fanlari nomzodi, dotsent
Urinov Bahrom Jamoliddinovich, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori
Sarimsakova Dilafruz Muhammadjonovna, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori,
dotsent
Axmedov Bexzod Madaminjonovich, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori
Rashidova Nodira Habibullayevna, pedagogika fanlari bo‘yicha falsafa doktori

Tibbiyot fanlari

Abdullayev G‘ofurjon Rahimjanovich, biologiya fanlari doktori, professor
Nurmatov Yodgormirza Xatammirzayevich, tibbiyot fanlari doktori
Abdullayev Ulug‘bek Ubaydullayevich, tibbiyot fanlari nomzodi
Mirzaolimov Mirzohid Mirzavaliyevich, biologiya fanlari bo‘yicha falsafa doktori

NAMANGAN DAVLAT
UNIVERSITETI
ILMIY AXBOROTNOMASI, [2025-7]
ISSN:2181-1458
ISSN:2181-0427



02.00.00-KIMYO FANLARI
journal.namdu.uz
CHEMICAL SCIENCES

Xoliqova Gulyayra Qo'ldoshevna,
Buxoro davlat universiteti tayanch doktoranti,
E-mail: xoliqovagulyayra@gmail.com

Mardonov O'ktam Mardonovich
Buxoro davlat universiteti dotsenti, k.f.n., dotsent
E-mail: o.m.mardonov@buxdu.uz

UDK 544.4:547.26:541.64

MOCHEVINA VA MOCHEVINA NITRAT MOLEKULALARIDA BAJARILGAN ZICHLIK FUNKTSIONAL NAZARIYASI (DFT) HISOBLASHLARI

Annotatsiya: Ushbu maqolada mochevina hamda uning mono-, di- va tri-nitrat tuzlari uchun DFT (zichlik funksional nazariyasi) usuli yordamida olib borilgan tadqiqot natijalari bayon etilgan. Asosiy e'tibor ularning elektron tuzilishi, energetik va termodinamik xususiyatlari, reaksiya faolligi, shuningdek, donor-akseptor o'zaro ta'sirlari natijasida shakllanish holatlarini aniqlashga qaratilgan. Mazkur parametrlar asosida olingan natijalar tahlil qilinadi va izohlanadi.

Kalit so'zlar: mochevina, mono-, di-, trinitratlar, kvant-kimyoviy hisoblash, DFT, Malliken zaryadi, YuBMO, QBMO, dipol momenti.

Холикова Гуляйра Кулдошевна
Докторант Бухарского государственного университета
Мардонов Уктам Мардонович
Доцент, кандидат химических наук, Бухарский государственный университет

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ РАСЧЕТОВ ПО ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ (DFT), ВЫПОЛНЕННЫХ ДЛЯ МОЛЕКУЛ МОЧЕВИНЫ И НИТРАТА МОЧЕВИНЫ

Аннотация: Это исследование представляет собой комплексное исследование мочевины и ее моно-, ди- и тринитратных солей с использованием теории функционала плотности (DFT). Анализ в основном сосредоточен на выяснении их электронной структуры, энергетических профилей, термодинамических характеристик, моделей реакционной способности и донорно-акцепторных взаимодействий. Кроме того, в обсуждении особое внимание уделяется интерпретации этих свойств на основе полученных результатов вычислений.

Ключевые слова: мочевины, моно-, ди-, тринитраты, квантово-химические расчеты, DFT, заряд Малликена, HOMO, LUMO, дипольный момент.

Gulyayra K. Kholiqova
PhD student at Bukhara State University
Uktam M. Mardonov
Associate Professor, PhD in Chemistry, Bukhara State University

Abstract: This study presents a comprehensive density functional theory (DFT) investigation of urea and its mono-, di-, and tri-nitrate salts. The analysis primarily concentrates on elucidating their electronic structures, energetic profiles, thermodynamic characteristics, reactivity patterns, and donor-acceptor interactions. Furthermore, the discussion emphasizes the interpretation of these properties based on the computational results obtained.

Keywords: urea, mono-, di-, tri-nitrates, quantum chemical calculations, DFT, Mulliken charge, HOMO, LUMO, dipole moment.

Kirish

O'zbekiston Respublikasi Prezidentining PQ-4265-son qaroriga muvofiq 2020-yilda umumiy qiymati 1272,3

mln dollarga teng "Navoiyazot" AJ negizida azot kislotasi ishlab chiqarishni tashkil etish", "Navoiyazot" AJ negizida ammiak va karbamid ishlab chiqarishini qurish", "Qo'qon

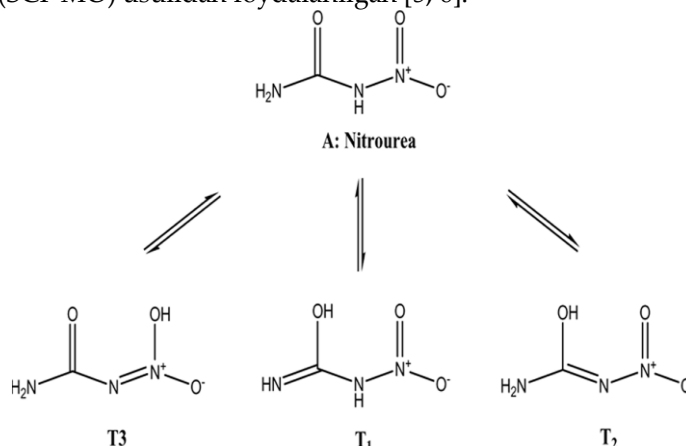
superfosfat zavodi” AJda ishlab chiqarish quvvatlarini modernizatsiya qilish va kengaytirish hamda mahsulotlarning yangi turlarini ishlab chiqarishni tashkil qilish” investitsiya loyihalari yakuniga yetkazilgan [1].

Natijada yiliga 500,0 ming tonna nitrat kislotasi, 660,0 ming tonna ammiak, 577,0 ming tonna mochevina (karbamid), 100 ming tonna superfosfat ishlab chiqarish bo'yicha yangi quvvatlar yaratilgan. Demak, mochevina va nitrat kislotasi asosida faqat o'g'it sifatida foydalaniladigan moddalar emas, balki noan'anaviy kimyoviy-texnologik muammolarni yechishda foydalaniladigan yangi turdagi mahsulotlar sintezi dolzarb vazifalar qatoriga kiradi. Mochevina nitrat tuzlarini ishlab chiqarishning sanoat muammolarini hal etishda, jumladan, turli kam eruvchan moddalar va sanoat jihozlari cho'kindi (quyqa) larini erituvchilar sifatida xossalarini o'rganish, texnologik jarayonlar agressiv muhitlarda metall konstruksiyalari korroziyasini himoyalovchi ingibitorlar sifatida tadqiq etish hamda ular natijalariga ko'ra qo'llanilish sohasini aniqlash mualliflar oldidagi asosiy maqsad etib belgilangan. Ushbu maqsadni amalga oshirishda mochevina, nitrat kislotasi va nitrat tuzlarining hosil bo'lishish jihatlari kvant-kimyoviy hisoblashlar (KKH) asosida o'rganildi.

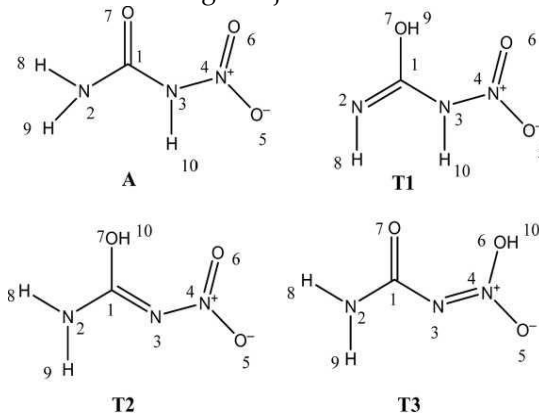
Adabiyotlar tahlili

Bugungi kunga qadar mochevinaning N-almashingan hosilasi - nitromochevina sintez qilinib, tarkibi, tautomer holatlari, ularning tuzilishi (1, 2-rasmlar) o'rganilgan. Shu bilan birga mochevinaning nitrat (MN) tuzlari ham mavjud bo'lib, lekin ularning hosil bolishi, takiblari, xossalari yetarli darajada tadqiq etilmagan. Masalan, nitromochevina (NM) bundan deyarli 100 yil avval 1925-yilda sintez qilinib, turli fizik-kimyoviy xossalari organik birima sifatida o'rganilgan va bu haqida ma'lumotlar "Organik synthesis" jurnalida keltirilgan [2]. Shuningdek, 1943-yilda esa NM sintezi bo'yicha AQSH patenti rasmiylashtirilgan [3]. 1-jadvalda NM va MN ning fizik xossalari tavsiflari keltirilgan hamda o'zaro

taqqoslangan. NMning turli tautomer holatlari [4] da o'rganilgan va kvant-kimyoviy hisoblashlari amalga oshirilgan (1-rasm). Tautomerlarning eng barqaror konfiguratsiya holatini aniqlash va energiya minimallariga olib keladigan barcha tuzilmalarning dastlabki geometriyasini optimallashtirish uchun molekulyar mexanika (MM2) usulidan foydalanilgan (2-rasm). So'ngra yarim empirik PM3 izchil maydonlar molekulyar orbital (SCF MO) usulidan foydalanilgan [5, 6].



1-rasm. NMning mavjud tautomer holatlari



2-rasm. NM tautomerlari tarkibidagi atomlar tartib raqami

1-jadval

NM tautomer holatlarlarining kvant-kimyoviy hisoblangan parametrlari (bog'lanish uzunliklari va valent burchaklar) qiymatlari

RHF/6-311G(d,p)						RHF/6-311++G(d,p)				
	C1-N2	C1-O7	C1-N3	N3-N4	O6-N4-N3-C1	C1-N2	C1-O7	C1-N3	N3-N4	O6-N4-N3-C1
A	1.3345	1.1875	1.4165	1.3465	179.9	1.3345	1.1885	1.4155	1.3475	180.0
T1	1.2395	1.3135	1.4195	1.3485	21.6	1.2415	1.3135	1.4205	1.3505	23.7
T2	1.3615	1.3195	1.2615	1.3915	109.2	1.3605	1.3185	1.2635	1.3905	112.0
T3	1.3265	1.2935	1.3868	1.2729	180.0	1.3335	1.2155	1.3875	1.2735	180.0
B3LYP/6-311G (d,p)						B3LYP/6-311++G(d,p)				

	C1-N2	Cl-07	C1-N3	N3-N4	O6-N4-N3-C1	C1-N2	Cl-07	C1-N3	N3-N4	O6-N4-N3-C1
A	1.3465	1.2095	1.4365	1.3875	12.9	1.3465	1.2115	1.4365	1.3875	-165.5
T ₁	1.2605	1.3315	1.4305	1.3755	-17.1	1.2615	1.3325	1.4305	1.3765	19.5
T ₂	1.3475	1.3445	1.3075	1.3965	170.7	1.3465	1.3445	1.3075	1.3935	167.3
T ₃	1.3465	1.2435	1.3965	1.3025	180.0	1.3465	1.2435	1.3985	1.2995	180.0

Shunday qilib, NM ning 1-jadvalda keltirilgan kvant-kimyoviy hisoblangan tautomer holatlari parametrlarini o'zaro taqqoslashlarga ko'ra, T₁ tautomeri dastlabki bosqichida hisoblangan bog'lanish uzunliklariga ko'ra boshqa tautomerlardan farqli qiymatlarga ega. DFT hisoblash usullaridan N-NO₂ bog'lanish uzunliklari tautomerlardagi T₂ > A > T₁ > T₃ qatorida o'zgarishi, Xartri-Fok usulida esa T₂ > T₁ > A > T₃ tartibida o'zgarishi aniqlangan.

Bu molekullarning kimyoviy reaktivligini, ya'ni elektrofili xossalarini E_{YUBMO} (E_{HOMO}) nukleofil va E_{QBM} (E_{LUMO}) belgilaydi va ularning qiymatlarini taqqoslash yoki farqlari ($\Delta E = E_{YUBMO} - E_{QBM}$) ga asoslanib ular ishtirokida boradigan reaksiyalarning amalda borishi yoki bormasligi

to'g'risida xulosa qilinadi. Nitromochevinaning turli tautomer holatlari uchun hisoblangan chegaraviy molekulyar orbital energiyalari farqi qiymatlari 2-jadvalda keltirilgan. Natijalarga ko'ra, eng katta energiya farqi nitromochevina (A) ga, eng kichik energiya farqi B3LYP/6-311++G(d,p) bo'yicha T₁ va MP2/6-311++G(d,p) usuli bo'yicha T₂ tautomeriga to'g'ri keladi. Odatda, yuqori QBMO energiyasi va past YUBMO energiyasidan kelib chiqadigan farq qiymati shuni ko'rsatadiki, birikma tomonidan elektronning ko'chishi yoki birikishi osonlikcha sodir bo'lmaydi, shuning uchun nitromochevina (A) holati barqaror va asosiy mavjud bo'lish holati hisoblanadi [4].

2-jadval

NM tautomerlarining B3LYP/6-311++G(d,p) va MP2/6-311++G(d,p) usullarida bilan kvant-kimyoviy hisoblangan energetik parametrlari (eV)

B3LYP/6-311++G(d,p)				
Parametr	A	T ₁	T ₂	T ₃
E _{YUBMO} E _{QBM}	-8.559	-8.221	-7.932	-8.479
ΔE	-2.739	-2.984	-2.413	-2.817
	5.821	5.237	5.520	5.663
MP2/6-311++G(d,p)				
Parametr	A	T ₁	T ₂	T ₃
E _{YUBMO} E _{QBM}	-12.329	-11.647	-11.615	-11.732
ΔE	1.027	1.201	0.475	0.917
	13.356	12.848	12.09	12.649

Yuqorida keltirilgan hisoblashlar shuni ko'rsatdiki, nitromochevinaning barqarorligi T₃ (aci shakli) tautomer shaklida yaqqol kuzatiladi. Boshqa tomondan, gomolitik BDE hisoblashlariga asoslanib, N-N bog'lanish yoki T₂ ↔ T₁ nitromochevina tautomerlariga nisbatan parchalanishga ko'proq moyil, ammo shuni ta'kidlash kerakki, tadqiqot asosida hisoblashlar vakuum sharoitida izolyatsiyalangan molekullar uchun amalga oshirilgan. Eksperimental va kristall holda yuqorida ko'rib chiqilgan barcha tautomerlarning KKH natijalaridan farq qilishi mumkin [4].

Ko'rib chiqilgan tadqiqotlar natijalari muhokamalariga asoslangan holda ushbu maqolada mualliflar tomonidan mochevina mono-, di-, tri- nitrat tuzlarining kvant-kimyoviy hisoblashlari natijalarining

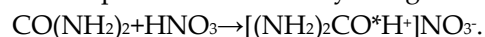
strukturaviy, energetik va nazariy jihatdan tahlili bayon etilgan.

Eksperimental qism

2.1. Mochevinaning nitrat tuzlari sintezi

Mononitrat mochevina tuzi sintezi

Mochevinadan 6 g (0,1 mol) o'lchab olinib, 28 ml 20% li ($\rho = 1,12125$ g/ml) HNO₃ eritmasida M: HNO₃ = 1:1 (Q:S: 1:5) eritildi. Hosil bo'lgan eritma 40°C da, 30 daqiqa davomida magnitli aralashtirgichda qizdirilib, rangsiz qattiq modda hosil qilindi. Sintez reaksiya tenglamasi:



Hosil bo'lgan qattiq modda 1 soatdan so'ng vakuumli filtrlandi va ajratib olingan oq rangli, gigroskopik kristall modda massasi 10,332 g, unumi 84%,

$t_{suyuq}=137^{\circ}\text{C}$, suvda yaxshi eriydi, eritmasi $\chi=160,1\text{ mCm/sm}$ (25°C) elektrolitik xossaga ega.

Dinitrat va trinitrat mochevina tuzlari sintezi yuqoridagi usul hamda tegishli (M:HNO_3) 1:2 va 1:3 nisbatlarda olib borildi. Ajratib olingan qattiq moddalarning $t_{suyuq}=139,5^{\circ}\text{C}$ va $t_{suyuq}=142^{\circ}\text{C}$, suvli eritmadagi $\chi=106,2$ va $\chi=101,3\text{ mCm/sm}$ ga teng ekanligi aniqlandi.

2.2. Mochevinaning mono-, di-, tri- nitrat tuzlarining DFT usuli tadqiqotlari.

Mochevina mono-, di-, trinitrat (MNM, DNM, TNM) tuzlari molekularining kvant-kimyoviy hisoblashlari ORCA 5.0.2. dasturida DFT/B3LYP metodi va 6-311G(d,p) bazis to'plamini qo'llab amalga oshirildi [7-11]. Bunda YUBMO (HOMO) va QBMO (LUMO) molekulyar orbitallarning energetik parametrlari hisoblandi. Hisoblash natijalari Avogadro va ChemCraft dasturlaridan foydalanilgan holda tahlil etildi hamda vizuallashtirildi [9, 12].

3. Natijalar va ularning muhokamasi

3.1. Mono-, di- va trinitrat mochevina molekularining DFT hisoblash natijalari va tahlili.

Azot va kislorod atomlari bo'yicha Malliken zaryad taqsimoti

MNM			DNM			TNM		
1	C	0.473	1	C	0.510	1	C	0.466
2	N	-0.479	2	N	-0.518	3	N	-0.468
3	N	-0.494	3	N	-0.450	4	N	-0.450
8	O	-0.408	6	O	-0.439	2	O	-0.465
9	N	0.442	7	N	0.429	9	N	0.430
10	O	-0.274	8	O	-0.329	14	O	-0.285
11	O	-0.228	9	O	-0.225	15	O	-0.210
12	O	-0.233	10	O	-0.244	22	O	-0.182
HNO_3			12	N	0.415	10	N	0.437
1	N	0.425	13	O	-0.284	11	O	-0.175
2	O	-0.250	14	O	-0.218	17	O	-0.250
3	O	-0.210	15	O	-0.253	19	O	-0.250
4	O	-0.238				12	N	0.417
$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$						13	O	-0.311
1	C	0.467				16	O	-0.246
2	N	-0.486				20	O	-0.225
3	N	-0.486						
4	O	-0.395						

$\text{CO}(\text{NH}_2)$ va HNO_3 larning qutbli molekulalardan iboratligi ular ishtirokida elektrostatik ta'sirlashuvning orientatsion (U_{or}) va induksion (U_{ind}) turlari amal qilishini ko'rsatadi. Ikkala ta'sir turlarining tashkil etuvchilari va tabiatiga ko'ra ular quyidagicha matematik ifodalanadi [13, 14]:

$$U_{or} = -1,5(\mu^4/r^6 kT) \quad \text{va} \quad U_{ind} = -(2\alpha \mu^6)/r^6.$$

Mochevina va nitrat kislota molekularining tarkibi, tuzilishi, elektron tabiati ular tarkibidagi elektron donorlik va akseptorlik xossalariga ega bo'lgan kislorod, azot atomlari va ular asosidagi funksional guruhlar C=O , $-\text{NH}_2$, HO- , va ionlar $-\text{H}^+$, NO_2^- , NO_3^- mavjudligi hamda ular ishtirokida sodir bo'ladigan barcha kimyoviy o'zgarishlar tahlil qilindi.

Yuqorida qayd etib o'tilgan holatlarni o'rganish uchun mochevina va uning nitrat kislotasi bilan turli (1:1, 1:2, 1:3) molyar nisbatlarda hosil qiladigan birikmalari elektron tuzilishi va parametrlarining DFT hisoblashlari Avogadro, Orca va Chemcraft dasturiy paketlarni qo'llab amalga oshirildi. Hisoblashlar natijalari 3,4- jadvallarda keltirilgan bo'lib, ularning muhokamasi quyidagilarni qayd etish imkoniyatlarini berdi.

Kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida olingan natijalarga asoslanib mochevina mono-, di-, trinitrat tuzlari molekulari atomlarida Malliken zaryad taqsimoti 3-rasmda keltirilgan.

3-jadval

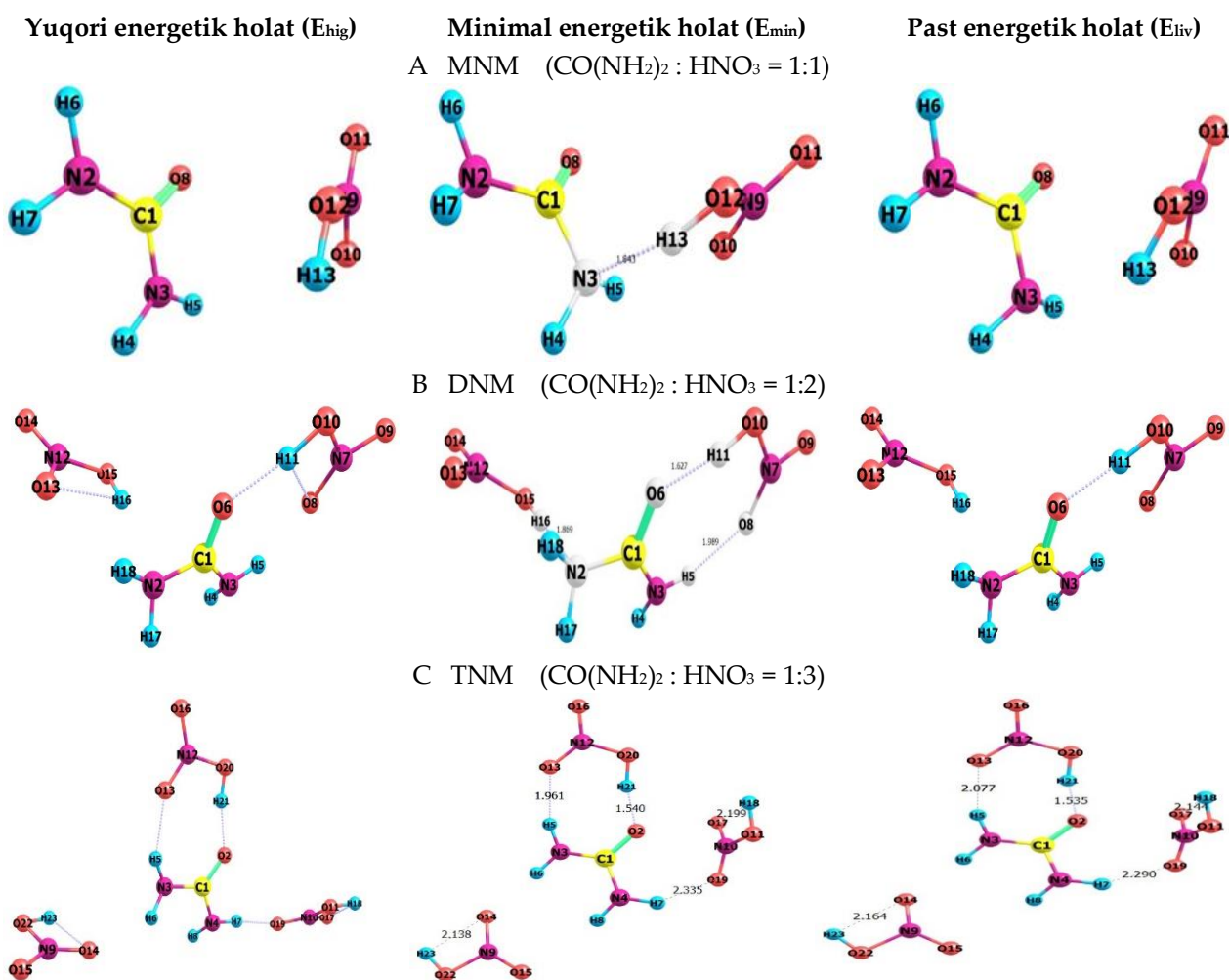
Bunda μ – dipol momenti (D), α -qutublanganlik, k-Boltsman doimiysi, $1,380649 \cdot 10^{-23}\text{ J/K}$, T – temperatura (K). kT – birgalikda zarrachalarning issiqlik harakatini belgilaydi va yuzaga keladigan ta'sir kuchiga nisbatan teskari proportsionallikni ifodalaydi. Shuningdek ikkala ta'sirlashuv kuchi qarama-qarshi qutbli markazlar orasidagi masofaning (r^6) oltinchi darajasiga teskari bog'liq. Hosil bo'ladigan MNM, DNM va TNM larning

barqarorligi $\text{CO}(\text{NH}_2)$ va HNO_3 molekularining dipol momentlari yuqori (μ^4 va μ^6) darajalari va qutublanganliklari (α) qiymati bilan belgilanadi. Bu moddalar tuzilishining kvant va matematik bashoratlarning KKH natijalari bilan qanchalik mos kelishini ORCA dasturini qo'llash bilan o'rganildi. Natijalar komponentlarning molyar nisbatlari va ularning o'zaro ta'sirlashuv jarayoni turli (yuqori, minimal, past) energetik holatlari bog'liqligida tahlil qilindi (3-rasm).

Mavjud tadqiqotlar natijalariga ko'ra $\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3 = 1:1$ tarkibli adduktda mochevinaning $>\text{C}=\text{O}$ guruhi va nitrat kislotaning H^+ ion ishtirokida $[(\text{H}_2\text{N})_2\text{CO}\cdots\text{H}^+](\text{NO}_3^-)$ ionlar juftligi hosil bo'ladi. Bunday

bog'anish IQ-spektros-kopiya va boshqa usullar bilan isbotlangan [15, 16].

Lekin bizning KKH tadqiqotlarimiz natijalariga ko'ra bunday tarkibli adduktning hosil bo'lishida $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ning NH_2 -guruhi azot atomi ishtirok etib, yakunida $[(\text{H}_2\text{N}(\text{O})\text{C}-\text{NH}_3^+)(\text{NO}_3^-)]$ hosil bo'ladi (3-rasm, AE_{min}). Bu orientatsion ta'sirlashuv mahsuloti minimal energetik holatda molekulararo ta'sir kuchlari ortishiga olib keladi va ularning elektromanfiyligi yuqori atomlari ishtirokida donor-aktseptor bog'i $(\text{H}_2\text{N}-\text{CO})-\text{NH}_2\cdots\text{H}-\text{ONO}_2$ yuzaga keladi.



3-rasm. Turli energetik holatlarda MN adduktlari tarkibida mochevina va nitrat kislotasi molekularining o'zaro orientatsiyalari.

$\text{N}(3)$ atomida zaryad qisman ortishi HNO_3 molekulasidan qisman yuqori manfiy zaryadli $\text{O}(12)$ atomi bilan bog'langan $\text{O}_2\text{NOH}(13)$ atomi bilan ta'sirlashib, $r_{\text{N-H}} = 1.843^\circ\text{A}$ uzunligidagi ($r_{\text{NH}} = 2\sqrt{r_{\text{N}}\cdot r_{\text{H}}}$ ga ko'ra $r_{\text{N-H}} = 2.638^\circ\text{A}$ dan ancha qisqa) bog'lanish hosil bo'lishi va uning energiyasi $E_{\text{N-H}} \geq 8,0$ kJ/mol donor-aktseptor ta'sirlashuvga to'g'ri keladi. (Kovalent radiuslar: $r_{\text{N}}=1,5$, $r_{\text{H}}=1,2$, $r_{\text{O}}=1,4$ $^\circ\text{A}$ va $E_{\text{N-H}} = 8,0$ kJ/mol, $E_{\text{O-H}} = 21,0$ kJ/mol qiymatlari [14, 18] lardan olingan.

Shu bilan birga ayni HNO_3 molekasining manfiy zaryadi ($-0,2739$ z.b.) nisbatan yuqori $\text{O}(10)$ atomi mochevina aminoguruhining $(\text{H}_2\text{N})\text{H}(5)$ atomi bilan ham ta'sirlashib, ikkinchi bog'lanishni hosil qilgan (3-rasm, AE_{min}). Ular orasidagi masofa $r_{\text{O-H}} = 2.517^\circ\text{A}$ ancha uzun bolsada, atomlarning kovalent radiuslari ($r_{\text{O-H}} = 2\sqrt{r_{\text{O}}\cdot r_{\text{H}}}$) bo'yicha hisoblangan $r_{\text{O-H}} = 2.592^\circ\text{A}$ qiymatdan kichikligi shunday xulosaga asos bo'ldi [13]. Ikkala molekulaning minimal energiyali holatdagi elektrostatik ta'sirlashuvi

N3H5O10N9O12H13 atomlaridan iborat 6 a'zoli geterohalqa shakllanishiga olib kelishi, bizning fikrimizcha, MNM molekulasi barqarorligini ta'minlovchi asosiy energiyaviy hamda struktura faktoridir. Yuqori va past energetik holatlarda $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ va HNO_3 molekullari o'zaro uzoq masofada ($r \gg 2,683 \text{ \AA}$) joylashuvi va noqulay orientatsiyalanganligi sababli 1:1 molyar nisbatda ular deyarli molekulyar assotsiatlar hosil qilmaydi (3-rasm, A_{Ehig} , A_{Eliv}).

M: HNO_3 =1:2 nisbatda HNO_3 miqdorining ortishi bilan hajm birligidagi zarracyhalar soni (fazoviy tig'islik, zichlik) ortib, molekullar orasidagi masofa qisqarishi, ular atomlaridagi zaryadlar taqsimoti va uzaro ta'sirlashuvlar turi hamda sonining ortganligi bilan xarakterlanadi. Buning isboti sifatida uchchala energetik (3- rasm, B_{Ehig} – B_{Eliv}) holatlarda $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, HNO_3 molekullariaro masofa (r) ning sezilarli qisqargani va barcha energetik holatlar molekulyar kompleks hosil bo'lishiga olib kelishidir.

Yuqori energetik holatda (3-rasm, B_{Ehig}) $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ va HNO_3 molekullari bir-biriga yetarlicha yaqinlashib, orientatsion markazda joylashgan mochevina molekulasi bilan juda qulay holda joylashuvi tufayli uchta bog'lanish yuzaga keladi. Ulardan birinchisi, $>\text{C}=\text{O}$ guruhi O(6) atomi HNO_3 ning H11 atomi bilan $r_{\text{OH}}=1.681 \text{ \AA}$ uzunlikdagi $[(\text{NH}_2)_2\text{C}=\text{O}\cdots\text{H}^+]\cdots\text{ONO}_2$ bog'ini hosil bo'lishidir. Ikkinchi tomondan amid molekulasi NH₂ guruhi H5 atomi HNO_3 ning O(8) atomi bilan ikkinchi vodorod bog'i ($r_{\text{H}\cdots\text{O}}=1,996 \text{ \AA}$) va $(\text{H}_2\text{NC}(\text{O})\cdots\text{NH}_2)\cdots\text{ONO}_2$ ning hosil bo'lishi tufayli ikkala molekula birlashib, 8 a'zoli halqasimon tuzilma yuzaga keladi. Uchinchisi - ikkinchi (3-rasm, B_{Ehig}) HNO_3 molekulasi H16 atomi $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ning ikkinchi amid N2 atomi bilan ($r = 1.946 \text{ \AA}$) N12 $\cdots$ H16 bog'ini va $[(\text{H}_2\text{N}(\text{O})\text{C}\cdots\text{NH}_3^+)\cdots(\text{ONO}_2)]$ ni hosil qiladi, lekin bu faqat birlamchi tartibga ega. Mochevina NH₂–guruhlarining H4, H17-atamlari fazoviy qulay joylashgan bo'lsada, masofa jihatidan molekullararo ta'sirlashuvda ishtirok etmagan.

Past energiyali holatda (3-rasm, B_{Eliv}) ham mochevina va HNO_3 molekullari o'zaro orientatsiyasi va joylashuvi, ularda ishtirok etuvchi H,N,O atomlari soni, turi bo'yicha 1:2 molyar nisbatning yuqori energetik holatdagiga o'xshash bo'lib, faqat $r(\text{O6}\cdots\text{H11})= 1,627$, $r(\text{H5}\cdots\text{O8})=1,989 \text{ \AA}$ bo'lganishlar uzunliklari nisbatan qisqaligi va $r(\text{N2}\cdots\text{H16}) = 2,151 \text{ \AA}$ bog'ining uzayganligi bilan farqlanadi.

Minimal energiyali holatda (3-rasm, B_{Emin}) ham yuqoridagiga o'xshash o'zgarishlar kuzatilib, mochevina $\text{C}=\text{O}$, NH₂ guruhlari O6, H5 atomlari va HNO_3 ning H11, O8 atomlari ishtirokidagi bog'lanishlar uzunliklari $r(\text{O6}\cdots\text{H11})=1.627$, $r(\text{H5}\cdots\text{O8})=1.989 \text{ \AA}$ ni tashkil etib, qisqargan. Shu bilan birga ikkinchi HNO_3 molekulasiining yanada yaqinlashuvi kuzatilib, uning H16 atomi bilan mochevinaning N2 atomi orasidagi masofa $r(\text{H16}\cdots\text{N2})=1.869 \text{ \AA}$ sezilarli qisqargan va O15 $\cdots$ H18 (NH₂amid) lararo masofa $3.051 \text{ \AA}$ ni tashkil etgan.

Bu natijalar $\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3=1:2$ nisbatning uchchala energetik holatida ham ($B_{\text{Ehig}} - B_{\text{Eliv}}$) DNM molekulasi hosil bo'lishini va ular o'zaro solishtirilganda umumiy energiya va geometrik parametrlar bo'yicha minimal energetik holat eng optimal holat ekanligidan dalolat berdi. Energetik nuqtai-nazardan minimal (-786.9540) < past (-786.9491) < yuqori (-786.9317) j/mol holatlar qatorini tashkil etishi aniqlandi.

Dastlabki komponentlarning $\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3=1:3$ molyar nisbatlarining turli energetik holatlari (3-rasm $C_{\text{Ehig}} - C_{\text{Eliv}}$)dagi o'zaro ta'sirlashuvlari KKH natijalarining 1:1 ($A_{\text{Ehig}}-A_{\text{Eliv}}$) va 1:2 nisbatlaridagi ($B_{\text{Ehig}} - B_{\text{Eliv}}$) dan farq qiladi. Asosiysi, $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ molekulasi uning atrofidagi (1:3 molyar nibatga ko'ra) uchala HNO_3 molekullari bilan ta'sirga egaligidir.

Yuqori energetik (3-rasm, C_{Ehig}) holatda $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ning $>\text{C}=\text{O}(2)$, NH₂ (H5) atomlari bitta HNO_3 molekulasiining OH21 va O13 atomlari ishtirokida 8 a'zoli halqa hosil qilgan, $r(\text{H5}\cdots\text{O13})=1.979 \text{ \AA}$, $r(\text{O2}\cdots\text{H11})=1.666 \text{ \AA}$ ni tashkil etgan. O'ng tomondagi HNO_3 molekulasi barcha atomlari bir tekislikda joylashib, uning O19 atomi –NH₂ amid H2 atomi bilan $r=1.912 \text{ \AA}$ uzunlikdagi bitta bog'lanishda ishtirok etgan. Deyarli shunday orientatsiyalangan uchinchisi (chapdagi) HNO_3 molekulasi O14 atomi orqali ikkinchi NH₂(amid) H6 atomi bilan $r=2.0976 \text{ \AA}$ uzunlikdagi bog'lanishni hosil qilgan. Bu ta'sirlashuvda birinchi NH₂(amid) guruhi H8 atomi qatnashmagan. Umumiy energiya o'zgarishi -1067.774 j/mol ni tashkil etgan.

Past energiyali holatda (3-rasm, C_{Eliv}) molekullararo bog'lanishlar soni 5 tani tashkil etib, 2 ta HNO_3 molekulasi $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ molekulasi bilan ikkilamchi 4 ta, 1 ta HNO_3 molekulasi 1 ta birlamchi bog'lanishda ishtirok etgan. Bunda $>\text{C}=\text{O}(2)\cdots\text{H21}(\text{HNO}_3)$ bog'i $r=1.535 \text{ \AA}$ gacha qisqarib, $(-\text{NH}_2)\text{H5}\cdots\text{O15}((\text{HNO}_3))$ bog'ida $r=2.154 \text{ \AA}$ kuzatilib, yangi $(-\text{NH}_2)\text{H8}\cdots\text{O15}((\text{HNO}_3))$ $r=2.661 \text{ \AA}$ bog'i hosil bo'lganligi tufayli, TNM molekulasiining umumiy hosil bo'lish energiyasi -1067.7976 j/mol , ya'ni MNM va DNM ga nisbatan yuqori barqarorligidan dalolat beradi.

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3=1:3$ molyar nisbatning minimal energiyali holati (3-rasm, C_{Emin}) da ham mochevinaning amid guruhlari (NH₂) H va karbonil O atomi to'liq molekullararo ta'sirlashuvda ishtirok etgan. Ulardan $(\text{NH}_2)\text{H5}\cdots\text{O13}(\text{HNO}_3)$ $r=1.961$, $>\text{C}=\text{O}(2)\cdots\text{H21}(\text{HNO}_3)$ $r=1.540 \text{ \AA}$ uzunlikdagi o'zaro ikkilamchi bog'lanishlar tufayli 8 atomli geterohalqali tuzilma hosil bo'lgan va bu TNM molekulasiining barqarorligiga sezilarli hissa qo'shgan. Ikkinchi shunday halqasimon tuzilma (3-rasm, C_{Emin} chap tomoni) keyingi HNO_3 molekulasi nitrat kislorod atomlari (O14, O15) va amid molekulasiining H6, H8 atomlari ishtirokida $r(\text{H6}\cdots\text{O14})=2.1502$; $r(\text{H8}\cdots\text{O15})=2.688 > r=2.592 \text{ \AA}$ (chegaraviy qiymatdan yuqori) 7 a'zoli ikkinchi kvazi geterohalqani vujudga keltirgan. Uchinchisi HNO_3 molekulasi O19 atomi mochevinaning (NH₂) H7 atomi bilan $r=2.290 \text{ \AA}$ uzunlikdagi birlamchi bog'lanishni hosil qilgan. Bu HNO_3

molekulasining $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ bilan boshqa bog'lanish hosil qilinishiga ularning o'zaro orientatsiyasidagi fazoviy nomuvofiqliklar va amid molekulasidagi barcha H va O atomlarining atomlararo ta'sirlashuvlarda band ekanligi bilan izohlanadi. Umuman, minimal energiyali holatda TNM molekulasining hosil bo'lishidagi energiya o'zgarishi -1067.8049 j/mol bo'lib, yuqori (CE_{hig}) va past (CE_{liv}) energetik holatlarga nisbatan eng kamligi bilan xarakterlanadi (4-rasm).

Xulosa o'rinda shuni qayd qilish mumkinki, KKH lar natijalariga ko'ra $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ va HNO_3 molekulari o'zaro ta'sirlashganda turli molyar nisbatlar 1:1, 1:2, 1:3 ga mos keluvchi MNM, DNM, TNM adduktalarini hosil qiladi. Bu birikmalar hosil bo'lishida qutbli molekularning (dipol-dipol) o'zaro orientatsion va dispersion elektrostatik ta'sirlari amal qiladi. Mochevinaning dipol molekulasida o'zaro ta'sirlashuv markazida joylashib, uning atrofida HNO_3 molekulari turlicha orientatsiyalanadi va uning

miqdoriga bog'liq holda avval $\text{H}_2\text{N}\cdots\text{HONO}_2$ keyin $>\text{C}=\text{O}\cdots\text{HONO}_2$ va $\text{NH}_2\cdots\text{ONO}_2\text{H}$ ta'sirlashuvlar yuzaga keladi. Bu ta'sirlarning eng optimal natijalari minimal energiyali (AE_{min} , BE_{min} , CE_{min}) holatlarda namoyon bo'ladi.

3.2. Chegaraviy molekulyar orbitalar va global reaktivlik deskriptorlari

Molekulyar komplekslarning reaksiya qobiliyati funksional zichlik nazariyasi usuli bilan elektromanfiylik (χ), kimyoviy potensial (μ), umumiy qattqlik (η), umumiy yumshoqlik (S), σ -absolut yumshoqlik va elektrofillik indeksini (ω) hisobga olgan holda aniqlangan. Boshqacha qilib aytganda, bu parametrlar molekularning reaktivligining global deskriptorlarini aniqlaydi va Koopmans teoremasi asosida global reaktivlik tendensiyalarini muvaffaqiyatli ravishda oldindan ko'rsatib beradi. Ushbu reaktivlik xususiyatlari chegaraviy molekulyar orbitalarining energiyasidan foydalangan holda hisoblab topildi (4-jadval).

4-jadval

Mochevina nitrat (MN) tuzlarining KKH energetik parametrlari

Kvant-kimyoviy parametr	Mochevina	Nitrat kislota	MNM	DNM	TNM
E_{HOMO} , eV	-6.904	-9,042	-6,786	-8,522	-7,349
E_{LUMO} , eV	0.601	-2.144	-1,266	-1,992	-2,942
$ \Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$, eV	7.505	6.898	5,52	6,53	4,407
Ionlanish potentsiali, $I = -E_{\text{HOMO}}$, eV	6.904	9,042	6,786	8,522	7,349
Elektronga moyillik, $A = -E_{\text{LUMO}}$, eV	0.601	2.144	1,266	1,992	2,942
Elektromanfiylik, $\chi = (I + A)/2$, eB	3.7525	5.593	4.026	5,257	5,1455
Kimyoviy qattqlik, $\eta = (I - A)/2$, eV	3.1515	3.449	2,76	3,265	2,2035
Kimyoviy potensial, $\mu_p = -(I + A)/2$, eV	-3.7525	-5.593	-4.026	-5,257	-5,1455
Kimyoviy yumshoqlik, $\sigma = 1/2 \eta$ (eV ⁻¹)	0.1586	0.1449	0,1812	0,1531	0.2269
Elektrofillik ko'rsatkichi, $\omega = \mu_p^2/2\eta$, eV	2.234	4.534	2,9364	4,2322	6.0077
Maksimal zaryad uzatish indeksi, ($\Delta N_{\text{max.}} = -\mu_p/\eta$)	1.191	1.621	1.4587	1.610	2.3351
Dipol momenti, μ , (Deby)	$x=-0.68065$ $y=-1.54775$ $z=-0.0000$ 4.29769	$x=-0.89498$ $y=-0.14745$ $z=0.00474$ 2.30555	$x=-1.25527$ $y=-2.14696$ $z=-1.0243$ 6.83643	$x=0.28289$ $y=2.35174$ $z=-0.03938$ 6.02157	$x=3.94967$ $y=-1.84981$ $z=-2.09473$ 12.29810
Umumiy energiya	-280.8472	-225.2178	-506.08074	-786.9540	-1067.7986

Xulosa

$\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3$ nisbatda HNO_3 miqdorining ortib borishi MNM, DNM, TNM tarkibli adduktlar hosil bo'lishi va ularning umumiy energiyalari -506.0807 ; -786.9540 ; -1067.8049 j/mol monoton kamayib borishini, ya'ni hosil

bo'ladigan adduktlarning barqarorligini ortib borishini ta'minlaydi. Bu KKH (diagnostik) xulosalarning qanchalik o'rinni ekanligi keyingi tajriba (eksperimental) tadqiqotlar natijalari bilan solishtirilib tahlil etiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Sidiqov S., Saydullayeva Z., Normamatova Sh., Ermatova M. Suyuq suspenzion kompleks o'g'itlar qo'llash-jahon va O'zbekiston tajribasi, afzalliklari va istiqbollari //Modern education and development. – 2024. – T. 1. – №. 1. – С. 326-337.
2. Ingersoll A.W., Armendt B.F. Nitrourea, Journal of Organic Synthesis. 1925.P.85.
3. Spaeth C.P., Woodbury N.J. Preparation of Nitrourea. US Patent 2,279,765, Company, Wilmington DL, USA, 1943.
4. Türker, L., Gümüş, S., Atalar, T., & Atlanel, S. (2008). A theoretical study on nitrourea and its tautomers. Journal of Energetic Materials, 26(3), 181-195.
5. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semi empirical methods I, Method. Journal of Computational Chemistry, 10: 1989. P.209–220.
6. Stewart J.J.P. Optimization of parameters for semi empirical methods II. Applications. Journal of Computational Chemistry, 1989. P.221–264.
7. Турабекова М.А., Левкович М.Г., Математическое моделирование строения химических соединений и их реакционной способности, Ташкент.-Университет. 2008.- 136 с.
8. Snyder H. D., Kucukkal T. G. Computational chemistry activities with Avogadro and ORCA //Journal of Chemical Education. – 2021. – Т. 98. – №. 4. – С. 1335-1341.
9. Andrienko, G. A. "ChemCraft, Version 1.8 (build 489)." URL: <http://www.chemcraftprog.com> (2020).
10. Ganiev B., Mardonov U., Kholikova G. Molecular structure, HOMO-LUMO, MEP—Analysis of triazine compounds using DFT (B3LYP) calculations //Materials Today: Proceedings. – 2023.
11. Avezov K.G., Ganiev B.S., Kholikova G.K., Tukhtaeva M.O. Спектроскопическое (ИК-и ЯМР), DFT, предсказание PASS, ADMET и молекулярное докинг-исследование тиосемикарбазонов монокарбониллов. BULLETIN of the LN Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series, 149(4), 2024. С. 11-25.
12. Hanwell M.D., Curtis D.E., Lonie D.C., Vandermeersch T., Zurek E., Hutchison G.R. Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform //Journal of cheminformatics. – 2012. – Т. 4. – С. 1-17.
13. Зефилов Ю.В., Зоркий П.М. Успехи химии. 58(5). 1989. С.713-746.
14. Зоркий П.М. Физическая химия: Современные проблемы. М.: Химия, 1982. С.134-179
15. Холикова Г.К., Фатуллаев Н.Н., Турдиева Г.А., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш. Синтез и изучение нитратных солей мочевины. Узбекско-японская международная конференция «Energy-Earth-Environment-Engineering», Ташкент. 15-18 ноября 2022 г. С.143.
16. Xoliqova G.Q., Avezov Q.G., Mardonov O.M., Ganiyev B.Sh. Mochevina nitrat tuzi va nitrat kislotalar bilan qayta ishlangan fosforitlarining rentgen fazaviy tahlili. Scientific journal of the Fergana State University 4 (2023): 73-73.
17. Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Жумаева З.Р., Самиев С.Н. Синтез и исследование антикоррозионный свойств нитратных и орто-фосфатных солей мочевины. Актуальные вопросы химии 21 века: сборник тезисов докладов II Международной научной студенческой конференции, посвященной 220-летию КФУ. 25-26 май. 2024 год. Казань.С.55
18. Pauling L., Corey R. B. Atomic coordinates and structure factors for two helical configurations of polypeptide chains //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 1951. – Т. 37. – №. 5. – С. 235-240.

MUNDARIJA *** СОДЕРЖАНИЕ *** CONTENTS

FIZIKA-MATEMATIKA FANLARI

01.00.00 - ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

PHYSICS AND MATHEMATICS

Анализ механической устойчивости кремниевых пластин для фотоэлектрических преобразователей энергии.	
Р.Алиев, О.Бозаров, Д.Хонбутаева, Ж.Алиева, Р.Жалолов, Ж.Зиёитдинов.....	4
О диофантова приближения с простыми переменными.	
Б.Абраев, О.Ботиралиева.....	12
Uchinch tartibli xususiy hosilali differensial tenglama uchun chegaraviy masala.	
D.Usmonov, M.Fozilov.....	18
Yuqori energiyali p+Pb va Pb+Pb to'qnashuvlaridagi zarrachalar ko'ndalang impuls spektrlarini tsallis taqsimoti orqali tahlil qilish.	
X.Olimov, A.Tohirov.....	24
УСВО – 123 namumaning kristall panjarasidagi atomlar bog'lanishini raman spektrometrik tahlili.	
O.To'rayev.....	28
Поиск и исследование образования многопротонных состояний в адрон- и ядро-ядерных соударениях при высоких энергиях. Адронные молекулы.	
К.Олимов, Б.Юлдашев, Х.Олимов, Ш.Баходиров.....	32
On automorphisms of finite-dimensional naturally graded associative algebras.	
F.Arzikulov, A.Qurbonov.....	38
Yarimo'tkazgichlarning ta'qiqlangan zona kengligini haroratga bog'liqligiga effektiv massaning ta'siri.	
U.Erkaboyev, Sh.Qalandarova, A.No'monjonov, S.G'ayratov, R.Boltaboyev.....	43
Fabrication of silicon nanoparticles by pm400 milling and their suitability for lithium-ion battery anode.	
G.Khamdamov, U.Berdiyev, R.Ashurov.....	48
Анализ спектров поперечного импульса pT заряженных пионов, каонов, протонов и антипротонов, образованных в Pb+Pb столкновениях при энергии $\sqrt{s_{nn}}=5.02$ ТэВ, с использованием новой комбинированной функции цаллиса-хагедорна с внедрённым поперечным потоком.	
X.Олимов, А.Кахорова.....	53
Kesik kubda bitta aktiv ikkita sust quvlovchi va bir qochuvchining differensial o'yini.	
X.Qo'shaqov, Sh.Toxirjonova.....	58
Magnetron changlatish usulida CdTe yupqa qatlamini olish: fazaviy xolati va morfologiyasi.	
N.Mirzayarov.....	62
Mathematical modeling of doubly degenerate nonlinear parabolic equation with source and absorption in a medium with variable density.	
O.Atabaev.....	66
Temir yo'l poyezdlari harakatidan hosil bo'lgan tebranishlarni binolarga tarqalish darajasini kamaytirish masalasi.	
A.Abdujabborov.....	70
Yuqori energiya fizikasida yadro materyasini olish.	
A.Abduraximov.....	75

KIMYO FANLARI

02.00.00 - ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

CHEMICAL SCIENCES

<i>Inula rhizocephala</i> flavonoids of the aerial parts and biological activities.	
N.Yuldasheva, B.Komilov, K.Eshbakova, R.Khalilov, Sh.Sulaymonov.....	78
Favipiravir-trimetoprim supramolekulyar kompleksining digidrolatreduktaza fermentiga bog'lanishini autodock yordamida nazariy tadqiq qilish.	
O.Choriyev, J.Ashurov, A.Yeshimbetov, B.Ibragimov.....	83
Ni (II) ionining 2,6-piridindikarbon kislotasi va mea bilan kompleks birikmasi sintezi va tadqiqi.	
Y.Nazarov, X.Turayev, Sh.Kasimov, S.Xolmatov.....	87
Benzotiazol hosilalari: ilmiy va tahliliy yondashuvlar.	
Z.Mamadaliyeva, T.Sattarov, J.Ashurov.....	94
Mochevina va mochevina nitrat molekularida bajarilgan zichlik funktsional nazariyasi (dft) hisoblashlari.	
G.Xoliqova, O'Mardonov.....	98
Uzum shinnisining tarkibidagi aminokislotalar miqdorini aniqlash.	