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

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI
MAGISTRATURA BO'LIMI
IQTIDORLI TALABALAR, MAGISTRANTLAR,
TAYANCH DOKTORANT VA DOKTORANTLARNING

"TAFAKKUR VA TALQIN"

MAVZUSIDAGI RESPUBLIKA ILMIY-AMALIY ANJUMANIDA
FAOL ISHTIROKI UCHUN

Boboqulova Ozoda Vohidjon qizi

SERTIFIKAT

BILAN TAQDIRLANADI

REKTOR **O.X. XAMIDOV**

Buxoro 2025-yil 15-may

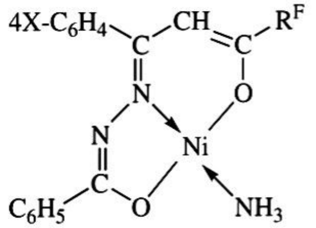
FTORLI DIKETON ASILGIDRAZONLAR NIKELLI KOMPLEKS BIRIKMALARI TARKIBIDAGI ATOMLARNING BOG' UZUNLIGI, BOG'NING EFFEKTIV ZARYADLARI HOMO VA LUMO SATHLARINI HISOBLASH

Boboqulova Ozoda Vohidjon qizi
BuxDU, kimyo ta'lim yo'nalishi 1-bosqich magistranti
o.v.boboqulova@buxdu.uz

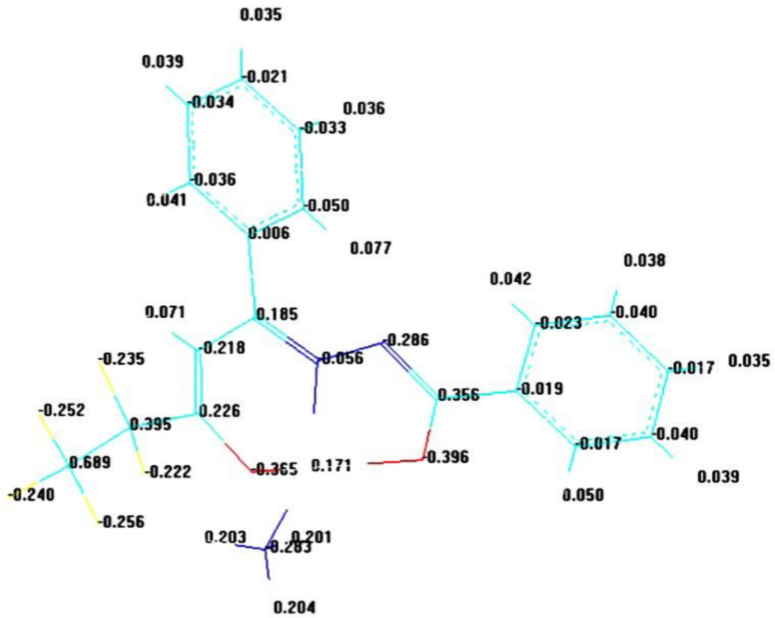
Annotatsiya: Ushbu ilmiy ishda aroiltriftorasetilmetanlar asosida olingan asilgidrazonlarning nikelli kompleks birikmasi tarkibi va xossalari kvant-kimyoviy usullar yordamida o'rganildi. Kompleks birikma uchun optimal geometriya aniqlanib, asosiy bog' uzunliklari va atomlar orasidagi effektiv zaryadlar hisoblab chiqildi. Ushbu tadqiqot natijalari nikelli komplekslarning strukturaviy va elektronik xossalarini chuqur o'rganishga imkon beradi hamda ularning kelgusida sanoat, farmatsevtika va kataliz sohalarida qo'llanish imkoniyatlarini baholash uchun ilmiy asos yaratadi.

Kalit so'zlar: Nikelli komplekslar, aroiltriftorasetilmetan, asilgidrazonlar, kvant-kimyoviy hisoblash, bog' uzunligi, HOMO, LUMO, barqarorlik.

Nikel(II) asetatining ammiakli eritmasi va H_2L^1–H_2L^9 ligandlar spirtli eritmalarining ekvimolyar nisbatdagi ta'sirlashuvidan $NiL^1 \cdot NH_3$–$NiL^9 \cdot NH_3$ tarkibli kompleks birikmalar olingan. Bu birikmalarning element analiz IQ-, PMR spektroskopiyasi natijalari kompleks birikmalarning tuzilishi quyidagicha bo'lishi isbotlangan:



$R^F = CF_3$: X = H ($NiL^1 \cdot NH_3$); CH_3 ($NiL^2 \cdot NH_3$); OCH_3($NiL^3 \cdot NH_3$); Cl ($NiL^4 \cdot NH_3$); Br ($NiL^5 \cdot NH_3$) ; NO_2 ($NiL^6 \cdot NH_3$). $R^F = C_2F_5$: X = H ($NiL^7 \cdot NH_3$); CH_3 ($NiL^8 \cdot NH_3$). $R^F = C_3F_7$: X = Cl ($NiL^9 \cdot NH_3$).



1-rasm. $NiL^7 \cdot NH_3$ kompleks birikmasi tarkibidagi atomlar o'rtasidagi bog'larning effektiv zaryadlari

Hyperchem dasturi hisoblashlariga ko'ra, kompleks tarkibidagi asosiy atomlar quyidagi zaryadlarga ega bo'ldi:

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

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI
MAGISTRATURA BO'LIMI
IQTIDORLI TALABALAR, MAGISTRANTLAR, TAYANCH DOKTORANT VA DOKTORANTLARNING

"TAFAKKUR VA TALQIN"

MAVZUSIDAGI RESPUBLIKA ILMIY-AMALIY ANJUMANIDA FAOL ISHTIROKI UCHUN

Boboqulova Ozoda Vohidjon qizi

SERTIFIKAT

BILAN TAQDIRLANADI

REKTOR **O.X. XAMIDOV**

Buxoro 2025-yil 15-may

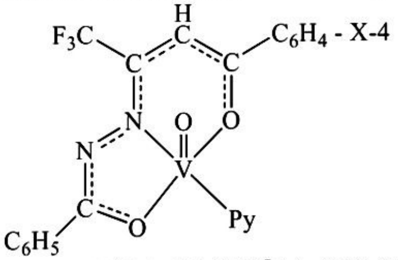
AROILTRIFTORASETILMETANLAR ASILGIDRAZONLARINING VO(II) KOMPLEKS BIRIKMASI TARKIBIDAGI ATOMLARNING BOG' UZUNLIGI VA BOG'NING EFFEKTIV ZARYADLARINI HISOBLASH

Boboqulova Ozoda Vohidjon qizi
BuxDU,1-bosqich talabasi

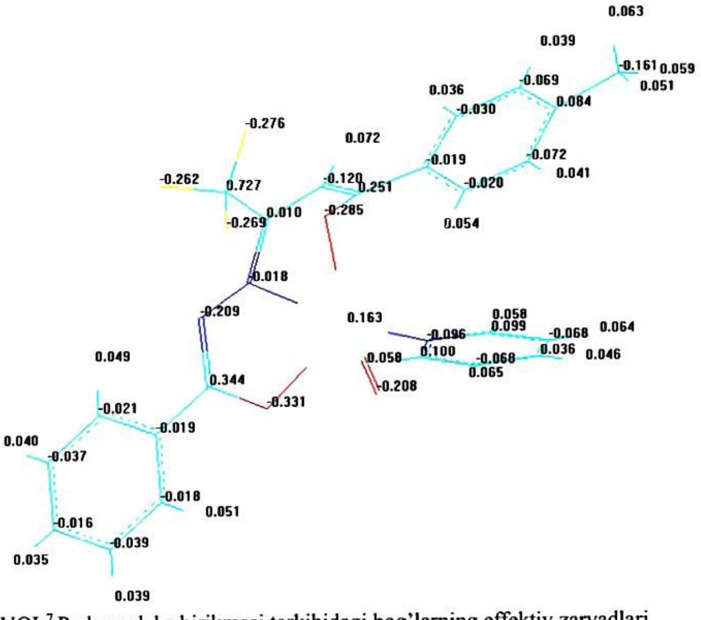
Annotatsiya: Aroiltriftorasetilmetanlar asilgidrazonlarining vanadiyli kompleks birikmasi tarkibidagi atomlarning bog' uzunligi va bog'ning effektiv zaryadlari komplekslar kelgusida katalizator sifatida yoki biologik faol moddalar sifatida foydalanish sohalaridagi kimyoviy jarayonlarni o'rganish.

Kalit so'zlar: Vanadiyli kompleks birikmalar, bog' uzunligi, bog'ning effektiv zaryadi

Vanadilli kompleks birikmalar sintez qilish uchun erkin aroilperftorasilmetanlar hosilalari va piridinning spirtdagi eritmasi bilan vanadil(II) sulfat ($VOSO_4 \cdot 3H_2O$) va natriy atsetati tuzining ($CH_3COONa \cdot 3H_2O$) suvli eritmalari 1:1:1:2 nisbatsda o'zaro aralashtirildi. $VOL^1 \cdot Py - VOL^5 \cdot Py$ tarkibli kompleks birikmalar bir sutkadan keyin ajratib olingan. Vanadil(II) kompleks birikmalarining IQ spektrlarida erkin ligandlar – aroilperftorasilmetanlar benzoilgidrazonlari uchun xos bo'lgan tebranish chastotalarining yo'qligi kompleks birikmalar hosil bo'lganligidan dalolat bergan. Vanadil(II) koordinasion birikmalari namunalaridan olingan IQ spektrlarining tahlili va ulardagi xarakteristik tebranish chastotalarining nikel (II), rux (II), va mis (II) kompleks birikmalari uchun qayd qilingan ma'lumotlarga mos kelishi ularning quyidagi kvadrat – piramidali koordinatsion qurshovli tuzilishi isbotlangan.



X = H($VOL^6 \cdot Py$); CH_3($VOL^7 \cdot Py$); OCH_3($VOL^8 \cdot Py$); Cl($VOL^9 \cdot Py$); Br(VOL^{10} Py); NO_2($VOL^{11} \cdot Py$).



$VOL^7 \cdot Py$ kompleks birikmasi tarkibidagi bog'larning effektiv zaryadlari

Hyperchem dasturi hisoblashlariga ko'ra, kompleks tarkibidagi asosiy atomlar quyidagi zaryadlarga ega bo'ldi:

Atom turi	Effektiv zaryad (e)
V	+0.163
O (karbonil)	-0.331
N (gidrazon)	-0.209
F	-0.27

Vanadil atomi yuqori musbat zaryadga ega bo'lib, bu uning koordinatsion markazdagi dominant rolini ko'rsatadi. Elektron zichligi fenol kislorod atomlari va gidrazon azot atomi tomon ko'chganligi kuzatiladi, bu esa ligandlar va metal orasidagi elektron almashinuvni tasdiqlaydi.