

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI  
OLIIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI  
FARG'ONA DAVLAT UNIVERSITETI

**FarDU.  
ILMIY  
XABARLAR**

1995-yildan nashr etiladi  
Yilda 6 marta chiqadi

4-2024

**НАУЧНЫЙ  
ВЕСТНИК.  
ФерГУ**

Издаётся с 1995 года  
Выходит 6 раз в год

|  |   |
|--|---|
| <b>O.U.Nasriddinov, I.M.Madibragimova, O.S.Isomiddinova</b><br>Differensial tenglamaga keluvchi statika masalasini Maple dasturida yechish ..... | 7 |
|--|---|

|   |    |
|---|----|
| <b>I.R.Asqarov, I.M.To'liqinov</b><br>Study of the quantity of phenol compounds in the content of retail and gazanda plants .....   | 12 |
| <b>I.R.Asqarov, B.A.Jalilov</b><br>Kanakunjut va zig'ir o'simligi tarkibidagi fenol birikmalar miqdorini o'rganish .....  | 16 |
| <b>G.J.Muqumova, X.X.Turayev, Sh.A.Kasimov, N.J.Karimova</b><br>KFQ (karbamid, formalin va qahrabo kislota asosida olingan) sorbentining reaksion qobiliyatini kvant kimyoviy tahlillari.....                                   | 20 |
| <b>G.I.Zakirova, D.B.Karimova, V.U.Xo'jayev</b><br><i>Eriobotrya japonica</i> urug'i tarkibidagi aminokislotalarni yussx usulida aniqlash .....   | 26 |
| <b>Z.Q.Axmedova, I.R.Asqarov, Sh.M.Kirgizov</b><br><i>Taraxacum officinale</i> o'simligining yer ustki qismini uchuvchan komponentlari va ularning mikroblarga qarshi faolligi .....  | 32 |
| <b>M.Z.Alieva, G.A.Nuraliyeva</b><br>Cd(II) tuzini 2-amino 1,3,4-tiadiazol bilan kompleks birikmasining tuzilishini fizik-kimyoviy usullar yordamida o'rganish .....  | 37 |
| <b>X.Sh.Bobojonov, X.U.Usmanova, Z.A.Smanova</b><br>Galliy va alyuminiy ionlarini lyuminessent usulda aniqlashda qo'llaniladigan organik reagentlarni immobillash.....  | 44 |
| <b>Sh.B.Mamatova, M.J.Qurbanov</b><br>Ikkilamchi polietilen chiqindisi asosidagi polimer kompozitsion materiallarning zichligini gidrostatik tortish usulida o'rganish .....  | 49 |
| <b>I.R.Mamajanova, A.A.Ibragimov</b><br>Farg'ona viloyatining uchta tumanidan olingan <i>Prunus cerasus l.</i> o'simligi namunalarinig element tarkibini icp-ms usuli bilan tadqiq qilish .....                                 | 54 |
| <b>J.E.Shamshiyev, A.A.Ibragimov, O.M.Nazarov</b><br>Mahalliy vino mahsulotlarining makro va mikroelement tarkibini o'rganish .....   | 60 |
| <b>I.R.Asqarov, M.D.Xamdamova</b><br>Methods of using wheat bran in the treatment of certain diseases .....   | 67 |
| <b>D.T.Toshpulatov, X.Sh.Tashpulatov, A.M.Nasimov, G.B.Eshmuradova, Sh.E.Mirzayev, H.Q.Toshpulatov</b><br>6,6-disiyano-2,2-bipiridin bilan Kobalt(II) ning gomoleptik kompleks birikmasi sintezi va fotokimyoviy tadqiqoti..... | 71 |
| <b>A.A.Kucharov, S.U.Xalilov, F.M.Yusupov</b><br>Ko'mirni qayta ishlash va ko'mirdan metallarni ajratishning energiya tejamkor texnologiyasini ilmiy tadqiqi .....  | 76 |
| <b>K.K.Пирниязов, Р.Ю.Милушева, С.Ш.Рашидова</b><br>Получение нановолокон на основе хитозана и аскорбиновой кислоты и их перспективы в применении .....   | 82 |
| <b>B.N.Hamidov, A.Sh.Shukurov, M.Y.Ismoilov</b><br>Surkov moyi kompozitsiyasining fizik-kimyoviy xususiyatlarini aniqlash usullari .....  | 91 |
| <b>B.H.Хамидов, С.А.Кодиров, М.Ю.Исмоилов</b><br>Водопоглощения и водонепроницаемость гидроизоляционного материала гидроизол-к.....   | 96 |



UO‘K: 547-32.54-057:543.33

**KFQ (KARBAMID, FORMALIN VA QAHRABO KISLOTA ASOSIDA OLINGAN)  
SORBENTNING REAKSION QOBILIYATINI KVANT KIMYOVIY TAHLILLARI****КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ СОРБЕНТА  
МФЯ (НА ОСНОВЕ МОЧЕВИНЫ, ФОРМАЛИНА И ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ)****QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF THE REACTIVITY OF KFQ (UREA, FORMALINE,  
AND Succinic ACID BASED) SORBENT****Muqumova Gulvar Jumayevna<sup>1</sup>** <sup>1</sup>Termiz davlat universiteti doktoranti**Turayev Xayit Xudoynazarovich<sup>2</sup>** <sup>2</sup>Termiz davlat universiteti, kimyo fanlari doktori, professor**Kasimov Sherzod Abduzoirovich<sup>3</sup>** <sup>3</sup>Termiz davlat universiteti, kimyo fanlari doktori, professor  
ORCID ID 0000-0002-1450-8687**Karimova Naima Javliboy qizi<sup>4</sup>** <sup>4</sup>Termiz davlat universiteti tayanch doktoranti  
ORCID ID 0009-0007-1502-4346**Annotatsiya**

Maqolada tarkibida azot va kislorod bo'lgan kompleks hosil qiluvchi sorbentlar sintezi, olingan sorbentlar asosida ayrim 3d-metallarning kompleks birikmalarini xossalari o'rganilgan. Kompleks hosil qiluvchi polidentatli ligandlarning koordinatsiyalanishini raqobatdosh donor markazlarini o'rganishda yarim empirik kvant-kimyoviy usullar qo'llanildi. Sintez qilingan polimer ligandlarning elektron tuzilishi, geometrik va energetik tavsiflarini kvant-kimyoviy usullari (Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16 dasturiy ta'minoti) yordamida olingan natijalar asosida tahlil qilindi. Bog'lanish uzunliklari erkin molekuladan koordinatsiyalangan molekulaga o'tishda bog'lanishlarda masofalarning sezilarli o'zgarishi kuzatiladi. KFQ sorbent molekularidagi donor atomlarning effektiv zaryadi qiymatlari jadval asosida keltirilgan. Ushbu usullar yordamida hisoblangan elektron zaryadlar qiymatlarini taqqoslash barcha hisoblangan molekularidagi manfiy zaryadning eng yuqori qiymatiga ega bo'lgan donor atomlar koordinatsiyaga uchrashi mumkin deb xulosa qilindi.

**Аннотация**

В статье исследован синтез комплексобразующих сорбентов, содержащих азот и кислород, изучены свойства комплексных соединений некоторых 3d-металлов на основе полученных сорбентов. Координацию комплексобразующих полиидентатных лигандов изучали на основе применения полумперических методов при изучении конкурирующих донорных центров. Электронную структуру, геометрические и энергетические характеристики синтезированных полимерных лигандов изучали квантово-химическими методами (программы Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16). Когда длины связей изменяются от свободной молекулы к координированной молекуле, наблюдаются значительные изменения расстояний связей. Значения эффективного заряда донорных атомов в молекулах сорбента МФЯ приведены в таблице. Сравнивая значения электронных зарядов, рассчитанных с помощью этих методов, был сделан вывод, что донорные атомы с максимальным значением отрицательного заряда во всех рассчитанных молекулах могут быть с координированы.

**Abstract**

In the article, the synthesis of complex-forming sorbents containing nitrogen and oxygen, the properties of complex compounds of some 3d metals based on the obtained sorbents were studied. Semi-empirical quantum-chemical methods were used to study the coordination of complex-forming polydentate ligands with competing donor centers. The electronic structure, geometrical and energetic characteristics of the synthesized polymer ligands were analyzed based on the results obtained using quantum-chemical methods (Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16 software). When bond lengths change from a free molecule to a coordinated molecule, a significant change in bond distances is observed. The values of the effective charge of donor atoms in KFQ sorbent molecules are presented on the basis of the

## KIMYO

table. Comparing the values of electronic charges calculated using these methods, it was concluded that donor atoms with the highest value of negative charge in all calculated molecules can be coordinated.

**Kalit soʻzlar:** sorbent, karbamid, formalin, qahrabo kislotasi, kvant-kimyoviy usullar, Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16 dasturiy taʼminoti, Bogʻlanish uzunliklari.

**Ключевые слова:** сорбент, мочеви́на, формалин, янтарная кислота, квантово-химические методы, Авогадро, Hyper Chem 8.01, программа GaussView 6.0.16, длины связей.

**Key words:** sorbent, urea, formalin, succinic acid, quantum chemical methods, Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16 software, Bond lengths.

## KIRISH

Mamlakatimizda keyingi yillarda mahalliy xomashyo asosida import analoglari oʻrniga sanoatning barcha tarmoqlarining zamonaviy talablariga javob beradigan yangi mahsulotlar ishlab chiqarish texnologiyalari ishlab chiqilmoqda. Bu borada hozirgi vaqtda jahon miqyosida kompleks hosil qiluvchi sorbentlar ishlab chiqarish jadal surʼatlarda rivojlanmoqda. Kompleks hosil qiluvchi sorbentlar gidrometallurgiyada turli metall ionlarini konsentrlashda, tarkibida ogʻir metall ionlari boʻlgan sanoat chiqindi suvlarini tozalashda keng qoʻllaniladi [1]. Shu boisdan ushbu mavzu muhim dolzarblik kasb etadi.

## ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODOLOGIYA

Tarkibida iminodiatsetil guruh boʻlgan tolali xelat hosil qiluvchi ion alamshinuvchi sorbent FIBAN X-1 da  $\text{Ca}^{2+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Pb}^{2+}$ ,  $\text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$  va  $\text{Mn}^{2+}$  ionlarining sorbsiya muvozanati, kinetikasi hamda sorbentning kislotasi asosli xossalari oʻrganilgan [2]. Olingan ionomer komplekslarning tuzilishi va elektrontavsifi noemperik kvant-kimyoviy usulda hisoblangan. Oʻrganilgan ionlarning sorbsiya izotermasi Lengmiyur tenglamasi boʻyicha ifodalangan. Ogʻir metallar ionlarining sorbsiyasida tanlovchanlik tadqiq etilgan ishlar nisbatan kamchilikni tashkil etadi. Buning uchun mualliflar turli sorbentlardan foydalangan.  $\text{Co}^{2+}$  ionlarini selektiv konsentrlash uchun tarkibida kimyoviy immobillangan azogidrazon guruh boʻlgan sellulozali sorbentdan foydalanib, Cu, Fe va Al ning ortiqcha miqdori ishtirokida  $\text{Co}^{2+}$  ionlari ajratilgan [3]. Xelat hosil qiluvchi, tarkibida azot va fosfor boʻlgan tolali ionitlar ogʻir metall ionlarini koʻp ionli suvli eritmalaridan sorbsiyalashda samarali sorbentlar boʻlishiga qaramasdan, ular  $\text{Cu}^{2+}$  va  $\text{Co}^{2+}$  ionlariga nisbatan tanlovchanlikni namoyon qilmaydi [4]. Tarkibida  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{2+}$ ,  $\text{Co}^{2+}$  va  $\text{Zn}^{2+}$  ionlari boʻlgan koʻp komponentli eritmalaridan  $\text{Cu}^{2+}$  ionlarini tanlovchan ajratib olish uchun xelat hosil qiluvchi sorbent N-(2-karboksietil)-aminometil-polistiroldan foydalanish mumkinligi keltirilgan [5].

KFQ sorbentining sintezi. Tarkibida azot va kislorod saqlagan kompleks hosil qiluvchi ionit sintezi uchun qaytar sovutgich va avtomatik aralashtirgich oʻrnatilgan uch ogʻizli kolbaga 1,2 g(0,02 mol) karbamid 4 ml(0,05 mol) formalinda eritildi va pH=8-9 boʻlgunga qadar ammoniy gidroksid eritmasi qoʻshildi. Harorat 70-80 °C da qovushqoq massa hosil boʻlgungacha qizdirildi. Hosil boʻlgan qovushqoq aralashmaga 1,18 g(0,01mol) qahrabo kislotani 5 ml ammoniy gidroksidagi eritmasidan tomchilatib qoʻshildi va aralashtirildi. Harorat 110-130 °C ga koʻtarilganda qattiq yoki saqichsimon massa hosil boʻldi. Hosil boʻlgan smolasimon massa chinni kosachaga solindi va 100 °C haroratda quritish shkafida 20 soat davomida quritildi. Quritilgan polimer maydalangach, past molekulyar ogʻirlikdagi moddalardan dastlab 5 % li natriy ishqor eritmasi bilan, soʻngra bir necha marotaba distillangan suv bilan neytral holga kelguncha yuvildi. Natijada kichik gʻovaklardan iborat oq rangli donador massa hosil boʻldi. Mahsulot unumi 90 % ni tashkil etdi. [6].

KFQ sorbenti molekulasining reaksiya qobiliyatini kvant-kimyoviy hisoblash dasturlari Avogadro, Hyper Chem 8.01, Asselrys MS Modeling 3.0.1 cheklangan Semi-empirical (UHF) usuli orqali, SCF-MO qoʻllagan holda yarim empirik AM1, MNDO, PM3, RM1 va MINDO3 metodi bilan Intel Pro Pentium 1.40 GGs kompyuterida hisoblashlar olib borildi. Molekula geometriyasini optimallashtirish Polak-Ribiere (Conjugate gradient) algoritmini qoʻllagan holda amalga oshirildi. Ushbu metodlar molekulaning umumiy energiyasini va molekulyar orbitallarning elektron zichliklarini, hamda oʻrganilayotgan molekulaning geometrik optimizatsiyasini amalga oshirish imkonini yaratdi.

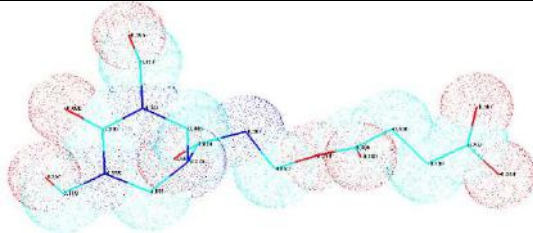
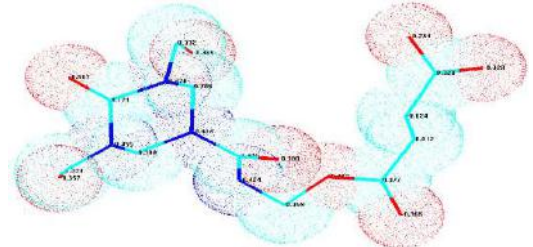
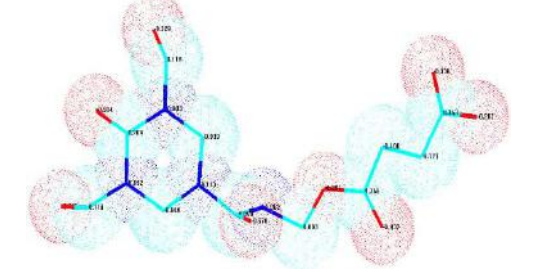
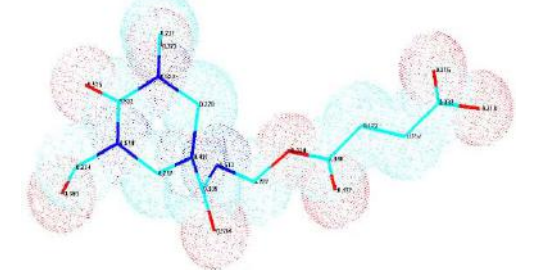
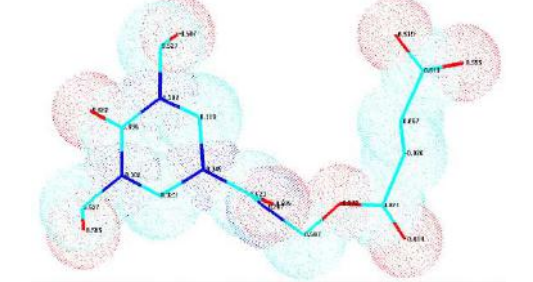
## NATIJA VA MUHOKAMA

Muhim hisoblanadigan elektron harakteristikalaridan biri bu Malliken boʻyicha atomlardagi effektiv zaryadlar (CHARGES) va sistemaning toʻliq energiyasidir (TOTAL ENERGY) (1-jadval).

Kvant-kimyoviy beshta yarim empirik metodlar natijalariga ko'ra xulosa qilib shuni aytish mumkinki, KFQ molekulasida manfiy effektiv zaryadining yuqori qiymatlari C=O, C-O-C, triazin halqadagi azot va ikkilamchi amin N-H guruhlaridagi kislorod va azot atomlarida ekanligi ushbu atomlarning metall bilan koordinatsion bog' bilan bog'lanib 2 ta to'rt va 1 ta olti a'zoli xelat turdagi komplekslarni hosil qilishi mumkinligidan dalolat beradi.

1-jadval

KFQ sorbent molekulasi donor atomlaridagi effektiv zaryad taqsimoti

| Hisoblash usuli | KFQ  |
|-----------------|--|
| AM1             |    |
| MNDO            |   |
| PM3             |  |
| RM1             |  |
| MINDO3          |  |

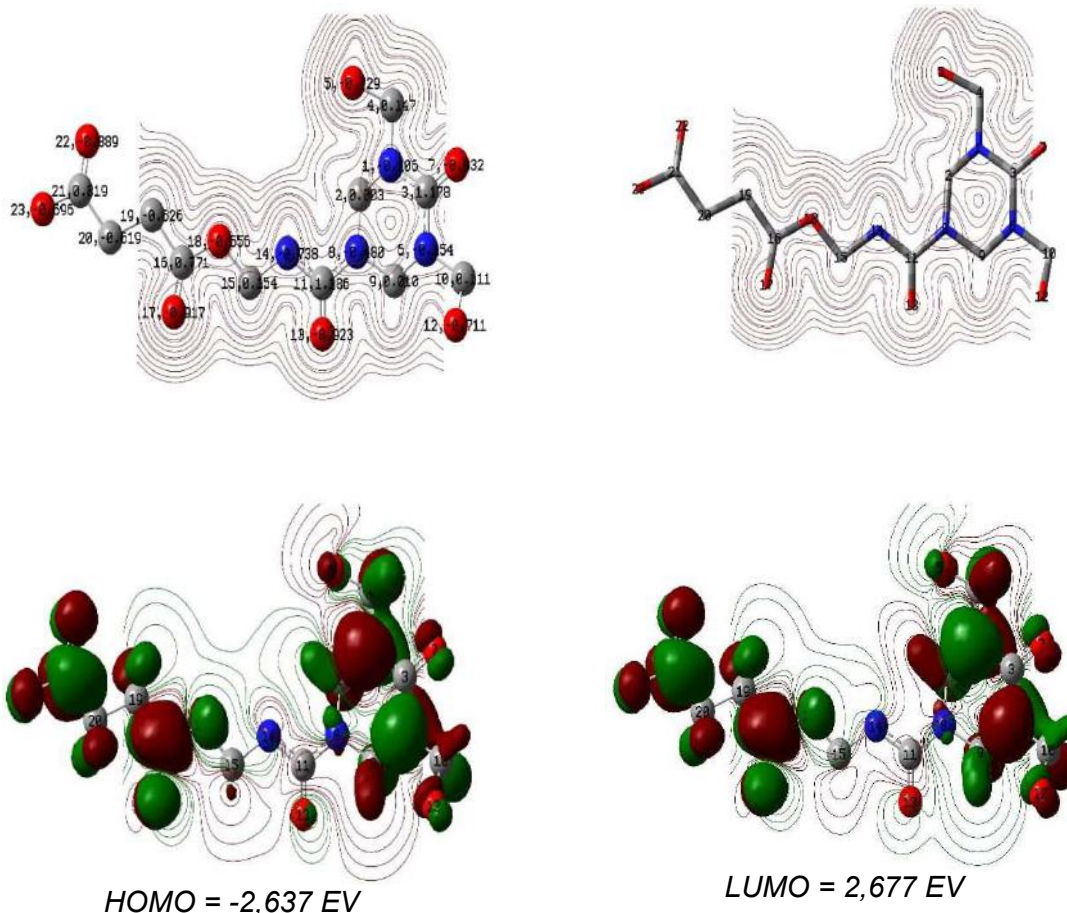
2-jadval.

KFQ sorbent molekularidagi donor atomlarning effektiv zaryadi qiymatlari

## KIMYO

| Atomlar                  | AM1, eV                   | MNDO, Ev                 | PM3, eV                  | RM1, eV                   | MINDO3, eV               |
|--------------------------|---------------------------|--------------------------|--------------------------|---------------------------|--------------------------|
| <b>KFQ</b>               |                           |                          |                          |                           |                          |
| $\delta_q O^1_{(C-O)}$   | -0,355                    | -0,369                   | -0,329                   | -0,373                    | -0,507                   |
| $\delta_q N^1_{(N)}$     | -0,361                    | -0,470                   | -0,083                   | -0,523                    | -0,302                   |
| $\delta_q O^1_{(C=O)}$   | -0,482                    | -0,557                   | -0,504                   | -0,515                    | -0,662                   |
| $\delta_q O^1_{(O-H)}$   | -0,352                    | -0,357                   | -0,330                   | -0,369                    | -0,505                   |
| $\delta_q N^2_{(N)}$     | -0,355                    | -0,455                   | -0,092                   | -0,528                    | -0,302                   |
| $\delta_q N^3_{(N)}$     | -0,278                    | -0,414                   | -0,113                   | -0,491                    | -0,345                   |
| $\delta_q O^2_{(C=O)}$   | -0,551                    | -0,390                   | -0,578                   | -0,534                    | -0,605                   |
| $\delta_q N^1_{(NH)}$    | -0,307                    | -0,424                   | -0,062                   | -0,513                    | -0,267                   |
| $\delta_q O^1_{(C-O-C)}$ | -0,294                    | -0,372                   | -0,251                   | -0,342                    | -0,532                   |
| $\delta_q O^3_{(C=O)}$   | -0,368                    | -0,365                   | -0,437                   | -0,422                    | -0,614                   |
| $\delta_q O^4_{(C=O)}$   | -0,301                    | -0,284                   | -0,338                   | -0,316                    | -0,519                   |
| $\delta_q O^2_{(C-O)}$   | -0,304                    | -0,328                   | -0,287                   | -0,318                    | -0,555                   |
| <b>E</b>                 | - 4071,3502<br>(kkal/mol) | -4081,0322<br>(kkal/mol) | -4101,4677<br>(kkal/mol) | - 3156,4788<br>(kkal/mol) | -4151,4304<br>(kkal/mol) |

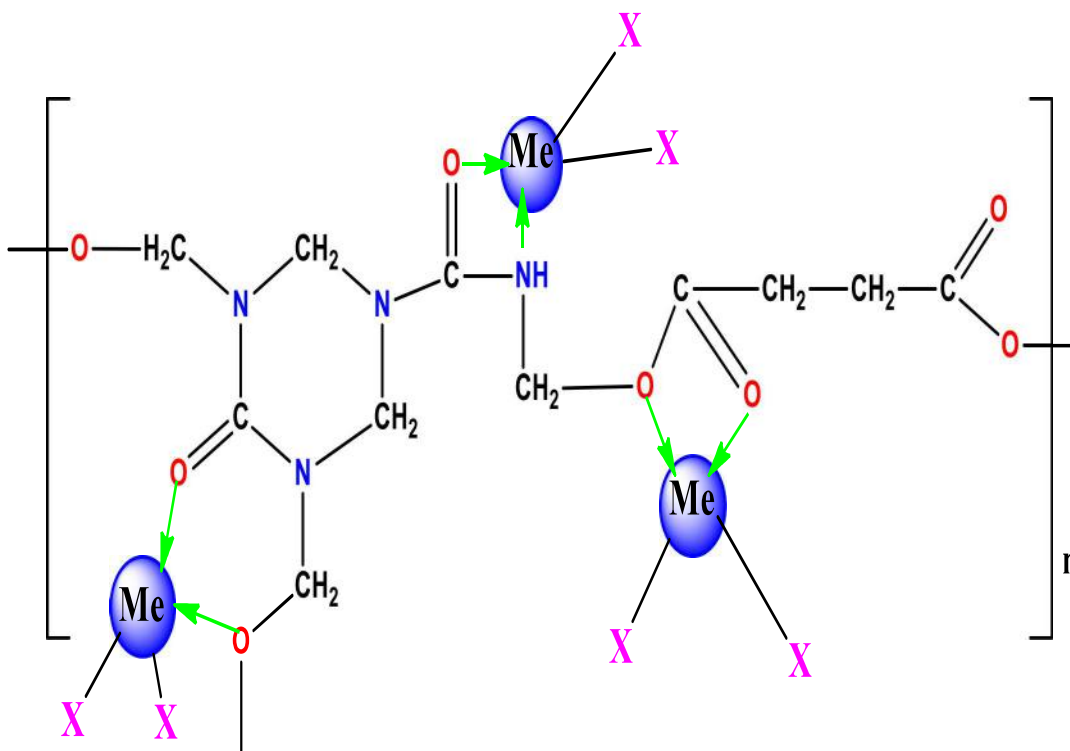
Olib borilgan tadqiqotlar natijasiga ko'ra o'rganilayotgan sorbentlarning geometriyalari Avogadro dastur to'plami yordamida hosil qilingan, so'ngra GaussView 6.0.16 dasturiy ta'minotidan foydalangan holda Molekula tuzilishlari optimizatsiyalari gaz fazasidagi izolyatsiyalangan molekularlar uchun Li - Yanga- Parra korrelyatsiya funksionalli (B3LYP) va 6- 311 G (d, p) bazislari bilan DFT metodida olib borildi. DFT (B3LYP) usulidan foydalanib GaussView 6.0.16 hisob-kitoblarning natijalari Malliken usuli va barcha atomlardagi zaryadlarni hisoblash uchun chegaraviy molekulyar orbital (FMO) yaqinlashuvidan foydalanildi. Avogadro dasturi yordamida vizualizatsiya qilindi. Ushbu usullar yordamida hisoblashdan olingan elektron zaryadlar natijalarini taqqoslash barcha metodlarda hisoblangan molekularlardagi manfiy zaryadning eng yuqori qiymatiga ega bo'lgan donor atomlar koordinatsiyaga uchrashi mumkin deb xulosa qilindi.



**1 -rasm. KFQ da zaryadning atomlarda taqsimlanishi va chegaraviy orbitallarning lokallashuvi.**

KFQ sorbentining LUMO dagi elektron zichligi C=O, C-O-C va triazin halqadagi azot guruhlaridagi kislorod va azot atomlarida joylashgan (1-rasm). Bu ligand uchun ham LUMO va HOMO holatlar energiyasi bir-biridan katta farq qiladi. Shu sababli KFQ ham kuchli maydon hosil qiladi va Pirsonning “qattiq va yumshoq kislotalar va asoslar” prinsipiga ko’ra, -O-, -C=O guruhi va triazin halqasidagi azot atomlari spektator ligand sifatida raqobatlashadi. Natijada oraliq kislotalar Cu(II), Ni(II), Zn(II) bilan triazin halqasidagi azot atomlari hamda -O- va -C=O guruhi 2 ta to’rt va 1 ta olti a’zoli mustahkam xelat halqali komplekslar hosil qiladi. Ushbu kompleks birikmalar metall ioni orbitalida bo’linish energiyasi yuqori bo’lganligi sababli past spinli kompleks birikmalar hisoblanadi.

Olib borilgan tadqiqotlar natijasiga ko’ra Raman va kvant-kimyoviy tadqiqotlar natijalariga ko’ra, Cu(II), Zn(II) va Ni(II) ning KFQ sorbentining bitta monomeriga nisbatan hosil qilgan kompleks birkmasining tuzilishi quyidagicha ifodalanishi mumkin:



### XULOSA

Sintez qilingan karbamid, formalin va qahrabo kislotasi asosida olingan sorbentning ba'zi oraliq metallar bilan hosil qilgan metallokomplekslarning kvant-kimyoviy usullari (Avogadro, Hyper Chem 8.01, GaussView 6.0.16 dasturiy ta'minoti) yordamida o'rganildi. *Bog'lanish uzunliklari erkin molekuladan koordinatsiyalangan molekulaga o'tishda bog'lanishlarda masofalarning sezilarli o'zgarishi kuzatiladi.* KFQ sorbent molekularidagi donor atomlarning effektiv zaryadi qiymatlari jadval asosida keltirilgan.

Kvant-kimyoviy beshta yarim empirik metodlar natijalariga ko'ra xulosa qilib shuni aytish mumkinki, KFQ molekulasida manfiy effektiv zaryadning yuqori qiymatlari C=O, C-O-C, triazin halqadagi azot va ikkilamchi amin N-H guruhlaridagi kislorod va azot atomlarida ekanligi ushbu atomlarning metall bilan koordinatsiyalanib 2 ta to'rt va 1 ta olti a'zoli xelat turdagi komplekslarni hosil qilishi mumkinligidan dalolat beradi.

Ushbu usullar yordamida hisoblangan elektron zaryadlar qiymatlarini taqqoslash barcha hisoblangan molekularidagi manfiy zaryadning eng yuqori qiymatiga ega bo'lgan donor atomlar koordinatsiyaga uchrashi mumkin deb xulosa qilindi.

### ADABIYOTLAR RO'XATI

1. Kasimov Sh.A. Ba'zi d-metallarning tarkibida N,P,S bo'lgan immobillangan ligandlar bilan metallokomplekslari: sintezi, tuzilishi va xossalari. // Doktorlik dissertatsiyasi – T.: 2021. 28-46 b.
2. Soldatov V.S., Zelenkovskii V.M., Orlovskaya L.A. Sorption of bivalent ions by a fibrous chelating ion exchanger and the structure of sorption complexes // React. and Funct. Polym. -2011, -V. 71, -№ 1, -P. 49-61.
3. Темердашев З.А., Коншина Д.Н., Коншин В.В. Селективное концентрирование  $Co^{2+}$  на целлюлозных сорбентах, содержащих иммобилизованную азогидразонную группу // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2010. – Т. 76. – № 5. – С. 3–6.
4. Грачек В.И., Шункевич А.А., Марцинкевич Р.В. Синтез и сорбционные свойства новых волокнистых азотфосфорсодержащих ионитов // Журн. прикл. химии. – 2011. – Т. 84. – Вып. 8. – С. 1270–1275.
5. Неудачина Л.К., Пестов А.В., Баранова Н.В., Старцев В.А. Новые хелатные сорбенты: свойства и применение для сорбционно-спектроскопического определения ионов переходных металлов // Аналитика и контроль. – 2011. – Т. 15. – № 2. – С. 238–250.
6. Muqumova G.J., Turayev X.X., Kasimov Sh.A., Karimova N.J. "Karbamid, formalin va qahrabo kislota asosida xelat hosil qiluvchi sorbentning sintezi tadqiqoti" Sanoatda raqamli texnologiyalar. (E) ISSN:3030-3214. Volume 2, №1 March 2024