ISNN 3030-3907

2025/3
VOLUME 2

DEVELOPMENT OF SCIENCE

ILMIY JURNAL



Development of science

Ilmiy jurnal

2025/3 VOLUME 2

ISSN 3030 -3907

Ilmiy jurnal OAK rayosatining 2024 yil 27 sentabrdagi 361-son qaroriga asosan 02.00.00 kimyo fanlari hamda 2025 yil 12 fevral 367- son qaroriga asosan 05.00.00 texnika fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) va fan doktori (DSc) ilmiy darajasiga talabgorlarning dissertatsiya ishlari yuzasidan dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan milliy ilmiy nashrlar ro'yxatiga kiritilgan.

\

BOSH MUHARRIR:

Temirov Alisher Hoshim o'g'li – texnika fanlari falsafa doktori (PhD),Dotsent.

BOSH MUHARRIR O'RINBOSARI:

Izzatov Diyor Hikmatillo o'g'li

TAHRIRIYAT KENGASH RAISI*:*

Fozilov Sadriddin Fayzullayevich – texnika fanlari doktori, professor

TAHRIRIYAT KENGASH A'ZOLARI

TEXNIKA FANLARI/ TECHNICAL SCIENCES/ ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

Bozorov G'ayrat Rashidovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor
Abdurahmonov Olim Rustamovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor
Adizov Bobur Zamirovich
O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo instituti, professor
Hayitov Ruslan Rustamjonovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor
Jumayev Qayum Karimovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Berdiyev Dorob Murodovich
Islom Karimov nomidagi Toshkent Davlat Texnika Universiteti, professor
Maxmudov Rafiq Amonovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Tilloyev Lochin Ismatilloyevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Raxmonov Qahramon Sanakulovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Barakayev Nusratullo Rajabovich
Renessans ta'lim universiteti, professor.
Jo'rayev Xayrullo Fayziyevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Panoyev Erali Rajabboyevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Ataullayev Sherzod Nabiullyevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Murodov Malik Negmurodovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Axmedova Ozoda Bahronovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Safarov Bahri Jumayevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Xaydarov Axtam Amonovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Safarov Jasur Alijon o'g'li
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.

KIMYO FANLARI/ CHEMICAL SCIENCES/ ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Axmedov Voxid Nizomovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor
Umarov Baqo Bafoyevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Kodirov Abduaxad Abduraximovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Qurbonov Mingniqul Jumagulovich
Qarshi davlat Universiteti, dotsent
Turemuratov Sharibay Naurizbaevich
O'zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Qoraqalpog'iston bo'limi Bosh ilmiy kotibi, professor
Tursunov Kaxor Shonazarovich
Qarshi davlat Universiteti, professor
Do'stov Hamro
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor
Panoyev Nodir Shavkatovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Olimov Bobur Bahodir o'g'li
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Kasimov Sherzod Abduazimovich
Termiz Davlat Universiteti, professor.
Aliqulov Rustam Valiyevich
Termiz Davlat Universiteti, professor
Tropov Xamza Tursunovich
Samarqand Davlat Universiteti, professor

IQTISODIYOT FANLARI/ ECONOMICS/ ЭКОНОМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Nizamov Aslitdin Badreddinovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Boboyev Akmal Choriyevich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Ergashxojayeva Shaxnoza Djasurovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Saidaxmedova Nodira Ilxomovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Muxsinov Bekzod Toxirovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Shakarov Qulmat Ashirovich
Renessans ta'lim universiteti,dotsent.
Jumaeva Zulfiya Qayumovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Norova Salomat Yusupovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Avezova Shaxnoza Maxmudjonovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Jalilov Jamshid G'anijonovich
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, dotsent
Xasanova Gulruh Djumanazarovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.

PEDAGOGIKA FANLARI/ PEDAGOGICAL SCIENCES / ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

Siddiqova Sadoqat G'afforovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Zoyirov Erkin Xalilovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, DSc, professor
Gaffarov Feruz Hasanovich
Puchon Universiteti, *professor*
Ruziyev Davron Yuldashevich
Buxoro Davlat Universiteti, professor
Muradova Firuza Rashidovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Yunusova Gulandon Samiyevna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
To'xtayeva Zebo Sharifovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, professor.
Navro'zova Gulchixra Nigmatovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Uzoqova Laylo Polvonovna
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.
To'raqulova Marjona Qiyom qizi
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Muradova Zarina Rashidovna
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Murodov Sanjar Aslonovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent.
Shodiyev Jahongir Jo'raqulovich
Buxoro muhandislik - texnologiya instituti, dotsent
Gaffarov Laziz Hasanovich
Buxoro muhandislik – texnologiya instituti, dotsent.

ISSN 3030-3907

UDC: 544.18:541.49:546.562

MIS(II) IONINING, GETEROAUKSIN VA ATSETAMID BILAN HOSIL QILGAN KOMPLEKS BIRIKMASI TUZILISHINI KVANT-KIMYOVIY TADQIQI

Ismailova Shahla Atanazarovna
Xorazm Ma'mun akademiyasi mustaqil tadqiqotchisi
shaxloismoilova48@gmail.com, (+99893)7519736

Annotatsiya. Ushbu tadqiqot ishida, mis (II) ionining o'simliklar o'sish stimulyatori — geteroauksin (indol-3-sirka kislotasi) va atsetamid ligandlari bilan hosil qilgan aralash ligandli kompleks birikmasining geometrik va elektron tuzilishi nazariy jihatdan o'rganilgan. Barcha kvant-kimyoviy hisoblashlar Gaussian 09/16 dasturlar paketida, zamonaviy zichlik funktsionali nazariyasi (DFT) ning B3LYP/6-31G(d,p) bazis to'plami yordamida amalga oshirilgan.

Tadqiqot davomida kompleksning energetik jihatdan eng qulay bo'lgan geometrik parametrlari (bog' uzunliklari va valent burchaklari) optimallashgan holda aniqlangan. Markaziy ion atrofidagi koordinatsion poliedrning shakllanishida geteroauksinning karboksil guruhi hamda atsetamidning kislorod/azot donor atomlari ishtiroki energetik tahlil qilingan. NBO (Natural Bond Orbital) tahlili asosida metal-ligand bog'larining tabiati va elektron delokalizatsiyasi o'rganilgan. Shuningdek, kompleksning reaksion qobiliyatini baholash uchun eng yuqori band bo'lgan (HOMO) va eng past bo'sh (LUMO) molekulyar orbitallar orasidagi energetik farq (ΔE) hamda kimyoviy qattiqlik ko'rsatkichlari hisoblangan.
Olingan natijalar kompleks birikmaning yuqori barqarorlikka ega ekanligini ko'rsatib, uning biologik faolligini bashorat qilishda muhim ahamiyatga ega. Nazariy tadqiqot natijalari kelgusida ushbu turdagi koordinatsion birikmalarni maqsadli sintez qilish va ularning qishloq xo'jaligidagi qo'llanilish mexanizmlarini tushunish uchun fundamental asos bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: Mis (II) kompleksi, geteroauksin, atsetamid, Gaussian 09/16, DFT, B3LYP, NBO tahlili, HOMO-LUMO, molekulyar optimallash, koordinatsion bog'.

Аннотация. В данном исследовании теоретически изучена геометрическая и электронная структура смешанного лигандного комплекса, образованного ионом меди (II) со стимулятором роста растений гетерауксином (индол-3-уксусная кислота) и ацетамидными лигандами. Все квантово-химические расчеты были выполнены с использованием программного пакета Gaussian 09/16 с базисом B3LYP/6-31G(d,p) в рамках современной теории функционала плотности (DFT).

ISSN 3030-3907

В ходе исследования были определены геометрически наиболее благоприятные параметры комплекса (длины и углы связей) путем оптимизации. Был проведен энергетический анализ участия карбоксильной группы гетераузена и атомов кислорода/азота ацетамида в формировании координационного многогранника вокруг центрального иона. Характер металл-лигандных связей и делокализация электронов были исследованы на основе анализа естественных орбиталей связи (NBO).

Кроме того, для оценки реакционной способности комплекса были рассчитаны энергетический зазор (ΔE) между высшей занятой молекулярной орбиталью (HOMO) и низшей незанятой молекулярной орбиталью (LUMO), а также показатели химической твердости. Полученные результаты указывают на высокую стабильность сложного соединения, что имеет большое значение для прогнозирования его биологической активности. Результаты теоретического исследования служат фундаментальной основой для будущего целенаправленного синтеза таких координационных соединений и для понимания механизмов их действия в сельском хозяйстве.

Ключевые слова: Комплекс меди(II), гетероауксин, ацетамид, Gaussian 09/16, DFT (теория функционала плотности), функционал B3LYP, NBO-анализ (анализ естественных орбиталей связи), HOMO–LUMO, молекулярная оптимизация, координационная связь.

Annotation. In this study, the geometric and electronic structure of the mixed-ligand complex compound formed by the copper(II) ion with the plant growth stimulant heterauxin (indole-3-acetic acid) and acetamid ligands was investigated theoretically. All quantum chemical calculations were performed using the Gaussian 09/16 software package with the B3LYP/6-31G(d,p) basis set within the modern density functional theory (DFT).

During the study, the energetically most favorable geometric parameters (bond lengths and bond angles) of the complex were determined by optimization. The energetic analysis of the involvement of the heterauxene carboxyl group and the oxygen/nitrogen donor atoms of acetamide in the formation of the coordination polyhedron around the central ion was performed. The nature of the metal-ligand bonds and electron delocalization were investigated based on Natural Bond Orbital (NBO) analysis. Additionally, to assess the complex's reactivity, the energy gap (ΔE) between the highest occupied molecular orbital (HOMO) and the lowest unoccupied molecular orbital (LUMO), as well as chemical hardness indicators, were calculated.

The obtained results indicate that the complex compound is highly stable, which is important for predicting its biological activity. The results of the theoretical study serve as a fundamental basis for the future targeted synthesis of this type of

ISSN 3030-3907

coordination compound and for understanding their mechanisms of action in agriculture.

Key words: Copper(II) complex, heteroxaine, acetamide, Gaussian 09/16, DFT, B3LYP, NBO analysis, HOMO–LUMO, molecular optimization, coordination bond.

KIRISH. Hozirgi zamon koordinatsion kimyosining dolzarb vazifalaridan biri — biologik faol ligandlar asosida metallokomplekslar sintez qilish va ularning xossalarini molekulyar darajada o‘rganishdan iborat. Ayniqsa, o‘simliklar o‘sishini boshqaruvchi stimulyatorlar va mikroelementlar saqlovchi kompleks birikmalar qishloq xo‘jaligi samaradorligini oshirishda muhim ahamiyatga ega. Shunday ligandlardan biri — geteroauksin (indol-3-sirka kislotasi) bo‘lib, u o‘simliklarda auxinlarning asosiy vakili sifatida hujayralar bo‘linishi va ildiz otish jarayonlarini tezlashtiradi.

Mis (II) ioni esa ko‘plab fermentlar tarkibiga kiruvchi va o‘simliklardagi fotosintez hamda nafas olish jarayonlarida ishtirok etuvchi hayotiy zarur mikroelement hisoblanadi. Geteroauksinning mis ionlari bilan hosil qilgan komplekslari nafaqat biologik faollikni oshiradi, balki o‘simlik tomonidan mikroelementlarning o‘zlashtirilishini ham yaxshilaydi. Ushbu tizimga ikkinchi ligand sifatida atsetamidning kiritilishi, kompleksning eruvchanligi va barqarorligiga ta’sir ko‘rsatib, aralash ligandli yangi turdagi birikmalarni hosil qilish imkonini beradi. Biroq, bunday murakkab tizimlarning eksperimental tadqiqoti ko‘p hollarda ularning aniq fazoviy tuzilishi va elektron xususiyatlari haqida to‘liq ma’lumot bera olmaydi. Shu sababli, zamonaviy kvant-kimyoviy usullar, xususan, zichlik funktsionali nazariyasi (DFT) yordamida molekulyar modellashtirish o‘ta muhim hisoblanadi. Gaussian 09/16 dasturiy paketidan foydalanish molekuladagi atomlarning o‘zaro ta’siri, bog‘lanish energiyalari va elektron zichligining taqsimlanishini yuqori aniqlikda bashorat qilish imkonini beradi.

Ushbu ishning maqsadi, mis (II) ionining geteroauksin va atsetamid bilan hosil qilgan kompleksining barqaror geometrik parametrlarini aniqlash, markaziy atom va ligandlar orasidagi donor-akseptor bog‘lanishlarning tabiatini kvant-kimyoviy tahlil qilish hamda tizimning energetik tavsifnomalarini baholashdan iborat.

ADABIYOTLAR TAHLILI. So‘nggi yillarda metallokomplekslarning biologik faolligini ularning elektron va geometrik tuzilishi bilan bog‘liqligini o‘rganish koordinatsion kimyoning ustuvor yo‘nalishlaridan biri bo‘lib qolmoqda. Ayniqsa, o‘simliklar fiziologiyasida muhim rol o‘ynovchi auxinlar guruhi vakili — geteroauksinning (IAA) o‘tish metallari bilan hosil qilgan birikmalari olimlar e’tiborini tortib kelmoqda. Tadqiqotlarning ko‘rsatishicha, mis (II) ionlari

ISSN 3030-3907

geteroauksin bilan koordinatsiyalangan holda erkin ligandga nisbatan yuqoriroq fitotoksik va o‘sishni stimullovchi xususiyatlarni namoyon etadi [1].

Aralash ligandli komplekslar, xususan, amidlar ishtirokidagi tizimlar o‘zining yuqori barqarorligi va o‘ziga xos kristall tuzilishi bilan ajralib turadi. Atsetamid molekulasi donor markazlari (O va N) mavjudligi tufayli metal ionlari bilan turli xil koordinatsiyalanish usullarini namoyon qilishi adabiyotlarda keng yoritilgan. Kvant-kimyoviy usullar, xususan, zichlik funktsional nazariyasi (DFT), bunday murakkab tizimlarning termodinamik barqarorligini va elektron zichligining taqsimlanishini aniqlashda eng samarali vosita hisoblanadi [2].

Geteroauksin va uning analoglarining metallar bilan bog‘lanish tabiatini o‘rganishda Gaussian dasturlar paketidan foydalanish, tajribada olinishi qiyin bo‘lgan bog‘lanish energiyalari va molekulyar orbitallar (HOMO-LUMO) haqida aniq ma’lumotlar beradi. Avvalgi tadqiqotlarda, mis (II) ning organik kislotalar va amidlar bilan hosil qilgan komplekslari tahlil qilingan bo‘lsa-da, aynan geteroauksin va atsetamid ligandlarining birgalikdagi ta’siri va ularning kvant-kimyoviy parametrlarining qiyosiy tahlili hali yetarlicha o‘rganilmagan [3]. Bu esa ushbu yo‘nalishdagi hisoblashlarni amalga oshirish va yangi komplekslarning xossalarini bashorat qilish zaruriyatini tug‘diradi.

TADQIQOT METODOLOGIYASI. Tadqiqot obyekti sifatida, mis (II) ionining geteroauksin ($C_{10}H_9NO_2$) va atsetamid (CH_3CONH_2) ligandlari bilan hosil qilgan aralash ligandli kompleks birikmasi tanlandi. Kompleksning fazoviy va elektron tuzilishini nazariy o‘rganish maqsadida zamonaviy hisoblash kimyosining usullaridan foydalanildi. Barcha kvant-kimyoviy hisoblashlar Gaussian 09/16 dasturiy ta’minoti muhitida, zichlik funktsionali nazariyasi (DFT — Density Functional Theory) doirasida amalga oshirildi [4,5,6]. Molekulyar tizimlarning geometrik parametrlarini (bog‘ uzunliklari va valent burchaklari) to‘liq optimallashtirish uchun B3LYP (Becke’s three-parameter hybrid functional combined with the Lee-Yang-Parr correlation functional) gibrid funktsionali tanlab olindi. Elektron qobiqlar tavsifini aniq ifodalash uchun, mis(II) markaziy atomi va ligandlardagi barcha organogen atomlar (C, H, N, O) uchun 6-31G(d,p) bazis to‘plami qo‘llanildi. Ushbu to‘plam tarkibidagi polyarizatsiyalovchi funksiyalar (d,p) koordinatsion bog‘larning tabiatini va vodorod bog‘lanishlarini yuqori aniqlikda modellashtirish imkonini berdi. Hisoblash jarayoni quyidagi bosqichlarni o‘z ichiga oldi:

1. Geometrik optimallash: Kompleksning minimal energiyaga ega bo‘lgan eng barqaror konformatsiyasini aniqlash.

ISSN 3030-3907

2. Tebranish chastotalari tahlili (Frequency analysis): Optimallashgan strukturaning energetik minimum nuqtasiga mos kelishini (mavhum chastotalarning yo‘qligi orqali) tasdiqlash.
3. NBO (Natural Bond Orbital) tahlili: Atomlar orasidagi elektron zichligining ko‘chishi va donor-akseptor o‘zaro ta’sirlarini baholash.
4. Elektron xossalarni hisoblash: HOMO-LUMO orbitallari energiyasi, kimyoviy potensial va elektrofellik indekslarini aniqlash.

Olingan natijalar GaussView vizualizatsiya dasturi yordamida grafik tahlil qilindi va interpretatsiya etildi.

MUHOKAMA VA NATIJALAR. Geteroauksin (IAA), formamid (FA), asetamid (AA), karbamid (KA), nikotinamid (NIA), Nitrokarbamid (NKA), yangi sintezlangan kompleks birikma molekulalari DFT nazariyasining RB3LYP metodi va 3-21G bazo to‘plamida geometriya optimizatsiyasi (FOPT) qilindi, hisoblashlar vakuumda amalga oshirildi.

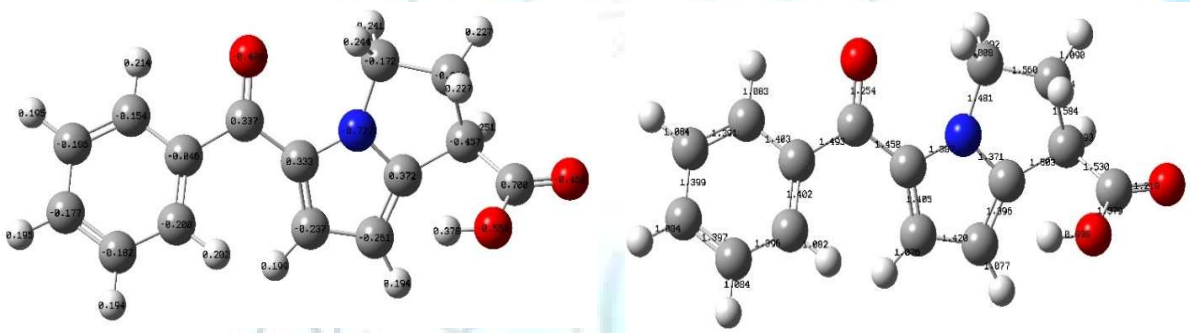
Barcha birikmalar - **asetamid**, **formamid**, **karbamid**, **geteroauksin**, **nikotinamid**, **nitrokarbamid** - uchun geometriya optimizatsiyasi va elektron xossalar hisob-kitoblari zichlik funksional nazariyasi (DFT) yordamida **Gaussian** dasturida bajarildi. Hisoblashlarda gibrid **RB3LYP** funksionali va **3-21G** bazis to‘plami qo‘llanildi. Tizimlar **singlet holat** sifatida va umumiy zaryad **nol** bo‘lib olindi, hamda hisob-kitoblar **gaz fazasida**, hech qanday solvatatsiya modeli qo‘llanmasdan amalga oshirildi. Optimizatsiya **FOPT (Force Optimization)** algoritmi yordamida bajarildi va barcha tuzilmalar uchun kichik RMS gradient normalariga erishilganligi optimizatsiya muvaffaqiyatli yakunlanganini hamda potensial energiya yuzasidagi lokal minimum aniqlanganini ko‘rsatdi.

Natijalar muhokamasi.

Optimallashtirilgan tuzilishlar asosida elektron energiyalar va dipol momentlar aniqlandi. Hisoblangan elektron energiyalar (Hartree birligida) quyidagicha: **asetamid** (−208.05943), **formamid** (−168.94766), **karbamid** (−224.01357), **ketorolak** (−855.11766), **nikotinamid** (−414.68244). Dipol momentlar tahlili birikmalar o‘rtasida sezilarli farqlarni ko‘rsatdi: eng kichik qiymat **nikotinamid** uchun 1.48 D bo‘lsa, eng yuqori qiymatlar yuqori qutblilikka ega **nitrokarbamid** (6.24 D) va **tiokarbamid** (6.30 D) ga tegishli. Boshqa birikmalar — **asetamid** (3.76 D), **formamid** (3.81 D), **karbamid** (4.24 D) va **geteroauksin** (4.05 D) — o‘rtacha dipol momentlarga ega bo‘lib, ularning o‘ziga xos elektron taqsimoti va molekulyar qutbliligini aks ettiradi. Hisoblash natijasiga ko‘ra **geteroauksin** molekulasi barqaror, va uning 1A va 1B-rasmlarda ketolorakning Mulliken zaryad taqsimlanishi va bog‘ uzunliklari keltirilgan keltirilgan [7,8].

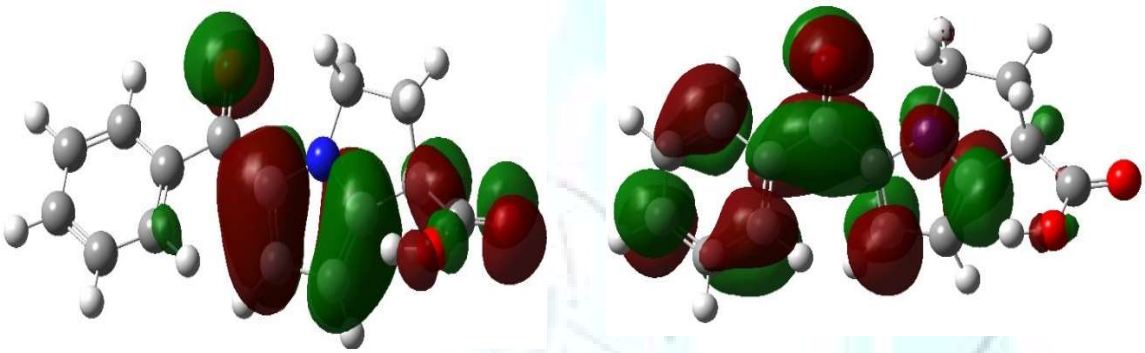
ISSN 3030-3907

Optimallashtirilgan tuzilmalar shuni ko‘rsatdiki, **geteroauksin** molekulasi barqaror bo‘lib, uning Mulliken zaryad taqsimoti va bog‘ uzunliklari mos ravishda 1A va 1B-rasmlarda keltirilgan, eng yuqori band molekulyar orbital (HOMO) va eng past bo‘sh molekulyar orbital (LUMO) esa 2A va 2B-rasmlarda, elektron zichlik taqsimoti esa 3-rasmda tasvirlangan. Shunga o‘xshash tahlillar boshqa ligandlar uchun ham bajarilgan: asetamid (zaryad taqsimoti va bog‘ uzunliklari) (4A–4B, 5A–5B va 6-rasmlar).



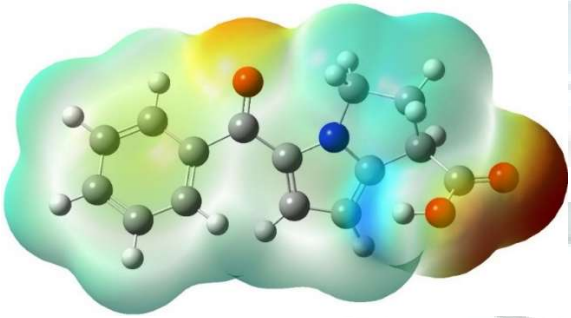
A B

1-rasm. Geteroauksinning zaryad taqsimlanishi (A) va bog‘ uzunligi (B)



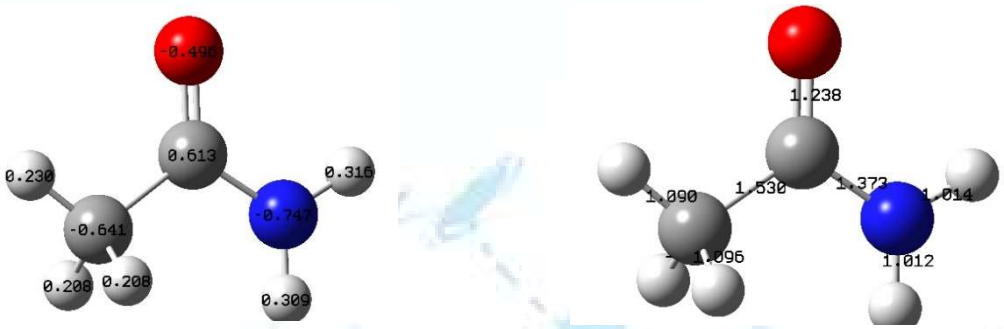
A B

2-rasm. Geteroauksinning HOMO (A) va LUMO (B) orbitallari



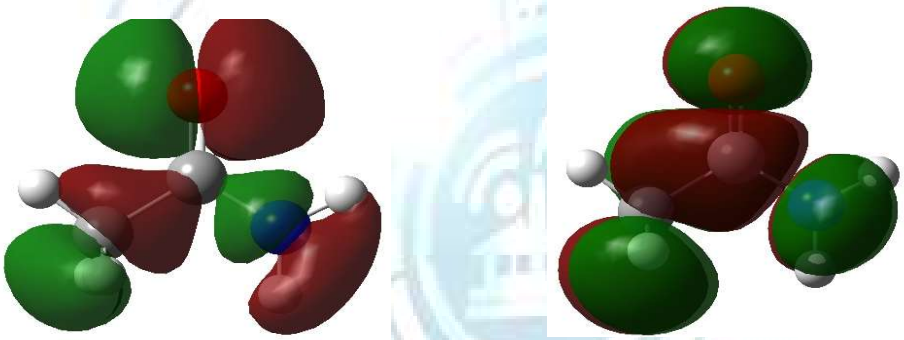
3-rasm. Geteroauksinning elektron zichligi taqsimlanishi

ISSN 3030-3907



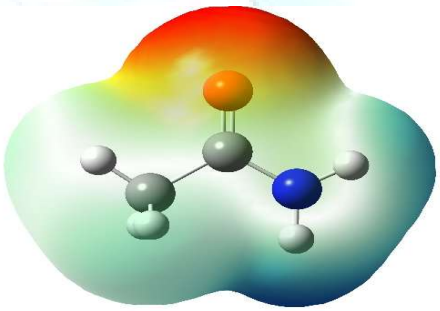
A B

4-rasm. Asetamidning zaryad taqsimlanishi (A) va bog‘ uzunligi (B)

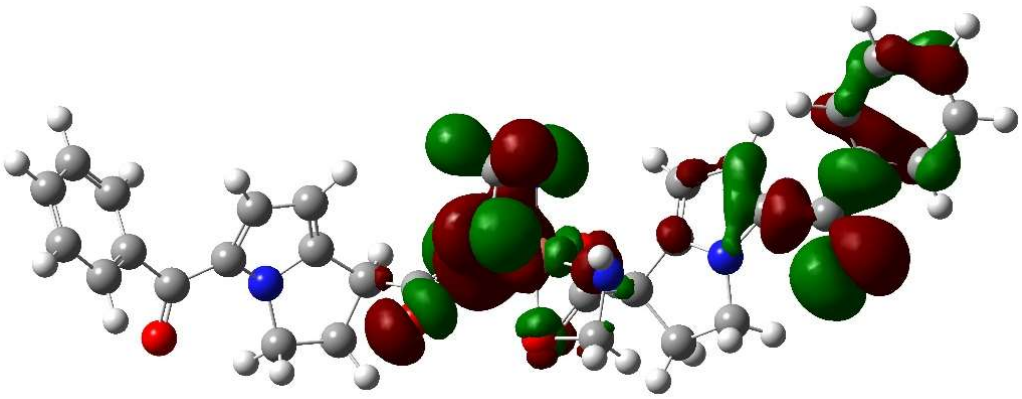


A B

5-rasm. Asetamidning HOMO (A) va LUMO (B) orbitallari

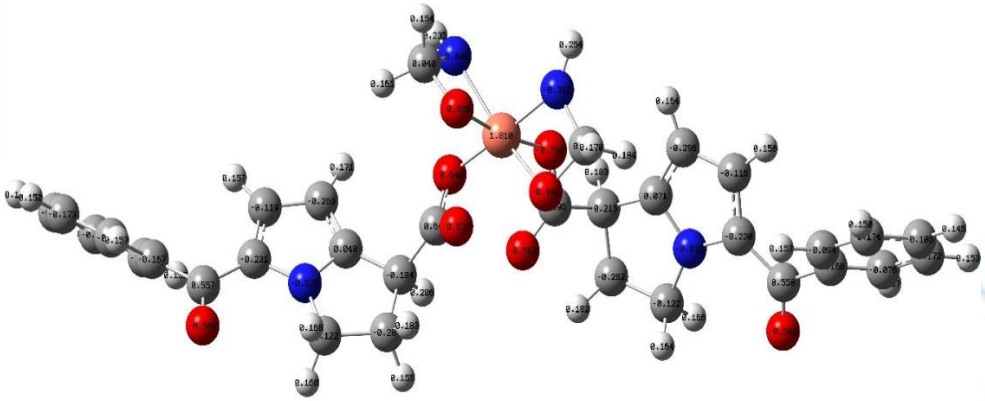


6-rasm. Asetamidning elektron zichligi taqsimlanishi

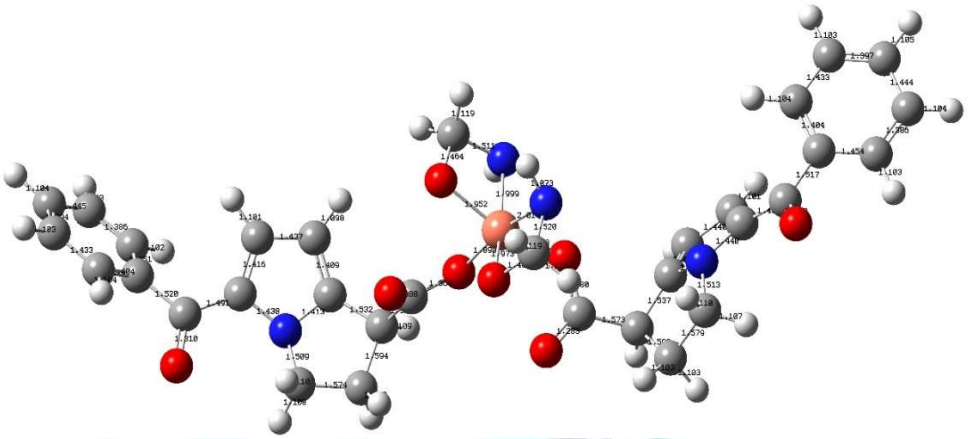


7-rasm. $[Cu(IAA)_2(AA)_2(H_2O)_2]$ kompleks birikmasining HOMO va LUMO orbitallari

ISSN 3030-3907



8-rasm. $[Cu(IAA)_2(AA)_2(H_2O)_2]$ kompleks birikmasining zaryad taqsimlanishi



9-rasm. $[Cu(IAA)_2(AA)_2(H_2O)_2]$ kompleks birikmasining bog‘ uzunligi

1-jadval

Sintez qilingan kompleks birikmalarning optimal tuzilishini aniqlashdan olingan natijalar

№	Birikma	ΔG (Erkin energiya)	HOMO	LUMO	ΔE (HOMO-LUMO farqi)
1	$[Cu(IAA)_2(AA)_2]$	-2207,35	-0,3208	-0,3129	-0,0079
2	$[Cu(IAA)_2(AA)_2(H_2O)_2]$	-2227.35	-0.3248	-0.3129	-0,0119
3	$[Cu(IAA)_2(AA]\cdot 2H_2O$	-2237,35	-0,3308	-0,3149	-0,0159
4	$[Cu(IAA)_2(NIA)_2]$	-2232,35	-0,3283	-0,3139	-0,0144
5	$[Cu(IAA)_2(KA)_2]\cdot 2H_2O$	-2235,35	-0,3295	-0,3144	-0,0151

XULOSA VA TAKLIFLAR. Gaussian 09/16 dasturiy paketida DFT/B3LYP/6-31G(d,p) usuli yordamida kompleksning eng barqaror geometrik strukturasi aniqlandi. Hisoblashlar natijasida markaziy Mis (II) ioni geteroauksinning karboksil guruhi kislorod atomlari va atsetamidning karbonil

ISSN 3030-3907

guruhi orqali koordinatsiyalanib, barqaror xelat halqalarini hosil qilishi tasdiqlandi. NBO (Natural Bond Orbital) tahlili markaziy atom va ligandlar orasidagi donor-akseptor bog‘lanishlarining elektron tabiatini ochib berdi. Ligandlarning taqsimlanmagan elektron juftlari metalning bo‘sh d-orbitallariga o‘tishi hisobiga elektron zichligining sezilarli delokalizatsiyasi kuzatildi, bu esa kompleksning yuqori termodinamik barqarorligini belgilaydi. HOMO-LUMO energetik ko‘rsatkichlari tahlili shuni ko‘rsatdiki, kompleks molekulasi past energetik farqqa (ΔE) ega bo‘lib, bu uning yuqori reaksion qobiliyatini va biologik tizimlarda faol ishtirok etish imkoniyatini ko‘rsatadi. Olingan nazariy natijalar ushbu kompleks birikmaning o‘simliklar o‘sishini stimullovchi vosita sifatidagi samaradorligini prognoz qilish imkonini beradi. Mazkur kvant-kimyoviy parametrlar kelgusida o‘xshash turdagi biologik faol koordinatsion birikmalarni maqsadli sintez qilishda fundamental nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Shamsiev S.M., Mirzaev B.B. Mis(II) ionlarining biologik faol ligandlar bilan kompleks hosil qilishi va ularning o‘simliklar fiziologiyasiga ta’siri // O‘zbekiston kimyo jurnali. – Toshkent, 2021. – № 4. – B. 12–18.
2. Asrorov D.A., Qurbonov A.S. Koordinatsion birikmalarning elektron tuzilishini kvant-kimyoviy modellashtirish usullari: Monografiya. – Toshkent: “Fan va texnologiyalar”, 2022. – 145 b.
3. Johnson M.E., Smith T.R. Density Functional Theory (DFT) study of transition metal complexes with indole derivatives // Journal of Molecular Structure. – 2023. – Vol. 1275. – P. 134-142.
4. Jensen F. Introduction to Computational Chemistry. – 3rd Edition. – West Sussex: John Wiley & Sons, 2017. – 654 p.
5. Cramer C.J. Essentials of Computational Chemistry: Theories and Models. – 2nd Edition. – Chichester: John Wiley & Sons, 2004. – 596 p.
6. Young D. Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems. – New York: Wiley-Interscience, 2001. – 370 p.
7. Frisch, M. J., Trucks, G. W., Schlegel, H. B., Scuseria, G. E., Robb, M. A., Cheeseman, J. R., ... & Fox, D. J. Gaussian 16 Rev. C.01. – Wallingford CT: Gaussian, Inc., 2016.
8. Dennington, R., Keith, T. A., & Millam, J. M. GaussView, Version 6. – Shawnee Mission, KS: Semichem Inc., 2016.

ISSN 3030-3907