ISNN 3030-3907

2026
MAY
ISSUE - 5
VOLUME - 1

DEVELOPMENT OF SCIENCE

ILMIY JURNAL



Development of science

Ilmiy jurnal

MAY 2026
Issue - 5, VOLUME - 1

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

KIMYO FANLARI/ CHEMICAL SCIENCES/ ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

Axmedov Voxid Nizomovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, 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 Davlat Texnika Universiteti, professor
Panoyev Nodir Shavkatovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Olimov Bobur Bahodir o‘g‘li
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, 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 Davlat Texnika Universiteti, professor.
Boboyev Akmal Choriyevich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, professor.
Ergashxojayeva Shaxnoza Djasurovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Saidaxmedova Nodira Ilxomovna
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, professor
Muxsinov Bekzod Toxirovich
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Shakarov Qulmat Ashirovich
Renessans ta'lim universiteti,dotsent.
Jumaeva Zulfiya Qayumovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Norova Salomat Yusupovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Avezova Shaxnoza Maxmudjonovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.
Jalilov Jamshid G‘anijonovich
Toshkent davlat iqtisodiyot universiteti, dotsent
Xasanova Gulruh Djumanazarovna
Buxoro Davlat Texnika Universiteti, dotsent.

PEDAGOGIKA FANLARI/ PEDAGOGICAL SCIENCES / ПЕДАГОГИЧЕСКИЕ НАУКИ

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

Tahririyat a’zolarning to‘liq ro‘yxati jurnalning www.devos.uz saytida keltirilgan.

Tahririyat hay’ati a’zolarining tarkibini o‘zgartirish hamda qo‘shimcha kiritish yoki tahririyat a’zoligidan chiqarish bosh muharrir tomonidan amalga oshiriladi.

ISSN 3030-3907

Development of science ilmiy jurnali 2024 yil 15 aprel kuni №256445 sonli guvohnoma bilan Davlat ro‘yxatidan o‘tgan.

To‘plam elektron ko‘rinishda (pdf formatida) mualliflarga taqdim etiladi. To‘plamga kiritiladigan maqolalarning mazmuni, ulardagi statistik ma’lumotlar va me’yoriy hujjatlarning to‘g‘riligiga hamda har qanday fikr - mulohazalarga mualliflarning o‘zlari mas’ul hisoblanadilar. Talablarga javob bermaydigan maqolalar to‘plamga kiritilmaydi. Tashkiliy qo‘mita maqola matnini qisqartirish, qisman tuzatish kiritish, seksiyalarga joylashtirish huquqiga ega.

ISSN 3030-3907

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИЙ ПИРИДИНА С ЭФИРАМИ МОНОХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Ражабова Гулноза Рустам кизи
Магистрантка Каршинского государственного университета
Бурихонов Бахтиёр Холмирзаевич
Доктор философии (PhD) по специальности «Химия» Каршинский государственный университет
Республика Узбекистан, г. Кар ши
Бердимуродов Элёр Тухлиевич
Профессор Национального университета Узбекистана, доктор химических наук
E-mail: borixonov90@mail.ru

Аннотация. В работе проведено экспериментальное и квантово-химическое исследование реакций пиридина с эфирами монохлоруксусной кислоты. Изучены условия синтеза четвертичных пиридиниевых солей и влияние строения эфиров на их реакционную способность. Квантово-химические расчёты (DFT) позволили определить электронную структуру и энергетические характеристики соединений. Полученные результаты раскрывают механизмы реакций и могут быть использованы для направленного синтеза новых функциональных соединений.

Ключевые слова: Пиридин; эфиры монохлоруксусной кислоты; четвертичные пиридиниевые соли; нуклеофильное замещение (SN2); алкильные радикалы; бензильный радикал; реакционная способность; DFT расчёты; HOMO–LUMO; механизм реакции.

Annotatsiya. Ushbu ishda piridinning monoxlorsirka kislotasi efirlari bilan reaksiyalari eksperimental va kvant-kimyoviy jihatdan o‘rganildi. To‘rtlamchi piridiniy tuzlar sintezi sharoitlari va efirlar tuzilishining reaksiya faolligiga ta’siri tahlil qilindi. DFT usulida elektron tuzilma va energetik xossalar aniqlanib, reaksiyalar mexanizmi izohlandi. Natijalar yangi funksional birikmalar sintezida qo‘llanishi mumkin.

Kalit so‘zlar: Piridin; monoxlorsirka kislotasi efirlari; to‘rtlamchi piridiniy tuzlari; nukleofil almashinish (SN2); alkil guruhlari; benzil guruhi; reaksion qobiliyat; DFT hisoblashlari; HOMO–LUMO; reaksiyalar mexanizmi.

Abstract. This study presents an experimental and quantum-chemical investigation of the reactions of pyridine with esters of monochloroacetic acid. The synthesis conditions of quaternary pyridinium salts and the effect of ester structure on reactivity were analyzed. DFT calculations were used to determine electronic structure and energy characteristics. The results provide insight into

reaction mechanisms and can be applied in the design of new functional compounds.

Keywords: Pyridine; monochloroacetic acid esters; quaternary pyridinium salts; nucleophilic substitution (SN2); alkyl substituents; benzyl group; reactivity; DFT calculations; HOMO–LUMO; reaction mechanism.

ВВЕДЕНИЕ.

Четвертичные аммониевые соединения (quaternary ammonium compounds — QACs) относятся к классу катионных поверхностно-активных веществ и характеризуются выраженной бактерицидной и противовирусной активностью. В связи с этим они широко применяются в качестве основных действующих компонентов дезинфицирующих средств в медицинских учреждениях, на предприятиях пищевой промышленности, а также в бытовых условиях.

Структура QACs включает центральный положительно заряженный атом азота, связанный с одним или несколькими гидрофобными углеводородными цепями, длина и строение которых определяют физико-химические и биологические свойства соединений. На практике в дезинфицирующих средствах чаще всего используются соединения с алкильными цепями длиной C_8–C_{16}, что обеспечивает оптимальные поверхностно-активные и антибактериальные свойства [8–9].

Большинство QACs содержат галогенидные анионы (например, Cl^- или Br^-), что придаёт им амфифильный характер. В результате они сохраняют положительный заряд даже в нейтральной среде и легко адсорбируются на отрицательно заряженных поверхностях (таких как почва, осадки и коллоидные системы). Это определяет их значимую роль не только в процессах дезинфекции, но и в экологических системах.

В последние годы QACs находят применение не только как дезинфицирующие средства, но и как важные компоненты при создании новых функциональных материалов. В частности, они используются при синтезе нанокомпозитов, в фотокаталитических процессах в качестве источников бромид-ионов, а также при разработке мембранных систем для удаления загрязняющих веществ.

QACs подразделяются на различные структурные классы, включая бензилалкилдиметиламмониевые соединения (BAC), алкилтриметиламмониевые соединения (ATMAB) и диалкилдиметиламмониевые соединения (DADMAB). Эти классы широко изучаются в экологических и прикладных исследованиях, при этом устанавливаются взаимосвязи между их структурой и функциональными свойствами [10].

ISSN 3030-3907

Таким образом, структура четвертичных аммониевых соединений, в частности длина алкильной цепи и природа функциональных групп, является ключевым фактором, определяющим их физико-химические и биологические свойства. Это открывает возможности для целенаправленного синтеза новых эффективных QACs и регулирования их свойств.

В исследованиях также важным критерием является оценка экономической эффективности различных технологий усовершенствованного окисления (AOP). В частности, на основе показателя энергозатрат (Electrical Energy per Order — EEO) проводится сравнительный анализ методов окисления. Данный показатель позволяет оценить количество энергии, необходимое для достижения заданной степени разложения соединений [11].

Кроме того, при деградации QACs образуются промежуточные продукты (трансформационные продукты — TPs), потенциальная опасность которых требует отдельного внимания. Современные квантово-химические и вычислительные методы позволяют определить пути их образования, энергетически предпочтительные направления реакций и механизмы процессов [12].

В частности, фотодеградация широко распространённых классов QACs—бензилалкилдиметиламмониевых (BAB)и алкилтриметиламмониевых (ATMAB) соединений — изучается с использованием компьютерного моделирования, что позволяет поэтапно анализировать их реакционные пути и устойчивость.

Таким образом, комплексное изучение процессов деградации QACs на основе экспериментальных и квантово-химических подходов является важной научной задачей, позволяющей не только понять их поведение в окружающей среде, но и создать новые эффективные и экологически безопасные соединения [13].

ISSN 3030-3907

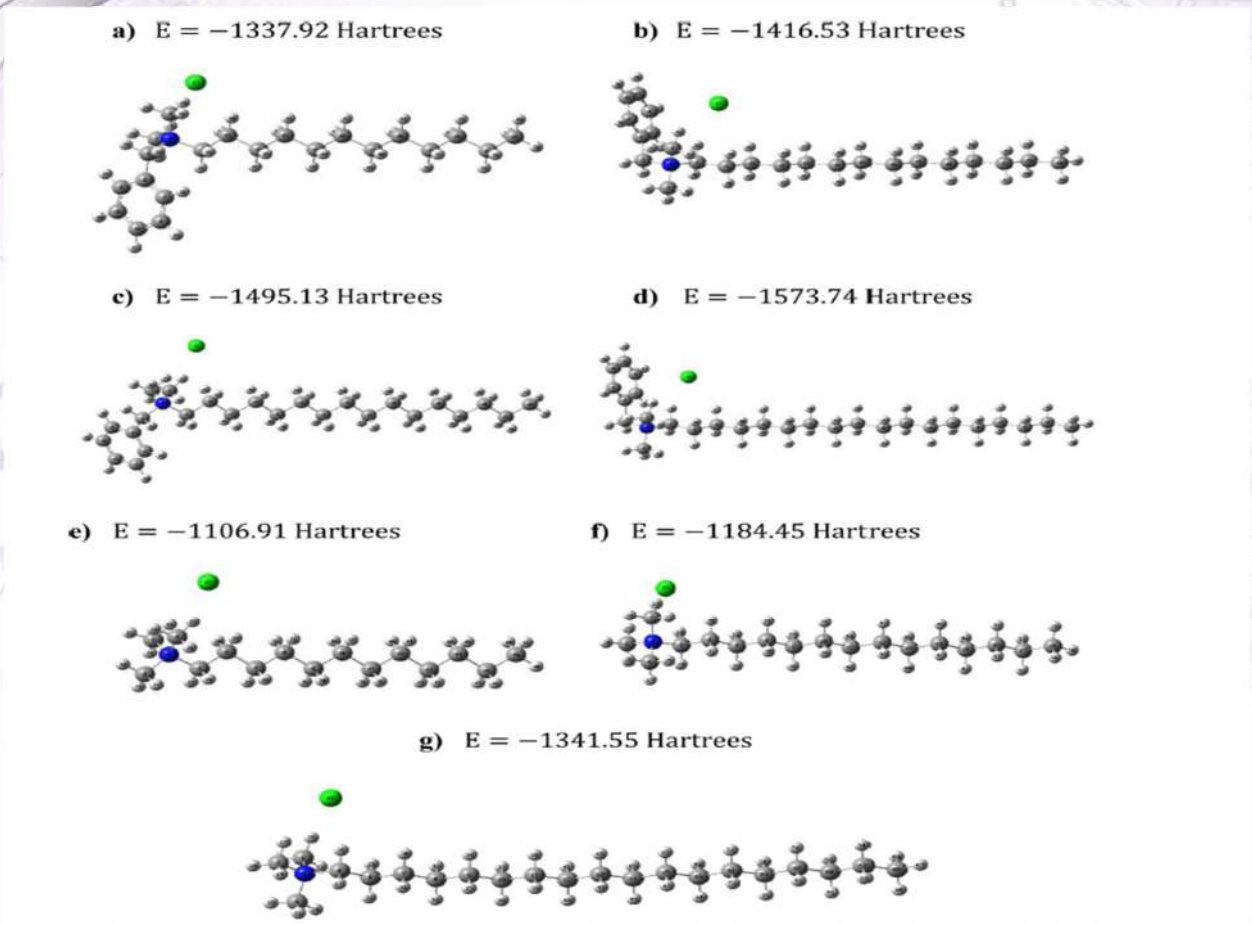


Рисунок 1. Структуры и электронные энергии выбранных четвертичных аммониевых соединений (ЧАС), рассчитанные на уровне теории M06–2X/6–311G(d,p): a) ЧАС C_{12}, b) ЧАС C_{14}, c) ЧАС C_{16}, d) ЧАС C_{18}, e) ATMAB C_{12}, f) ATMAB C_{14} и g) ATMAB C_{18}.

Экспериментальная часть и методика

Синтез четвертичных аммониевых солей представляет собой сложный процесс, требующий строгого подбора условий реакции. Ключевыми факторами являются природа растворителя, мольное соотношение реагентов и температура процесса. Как правило, реакции проводят в органических растворителях (этилацетат, ацетон, этанол) при умеренных температурах.

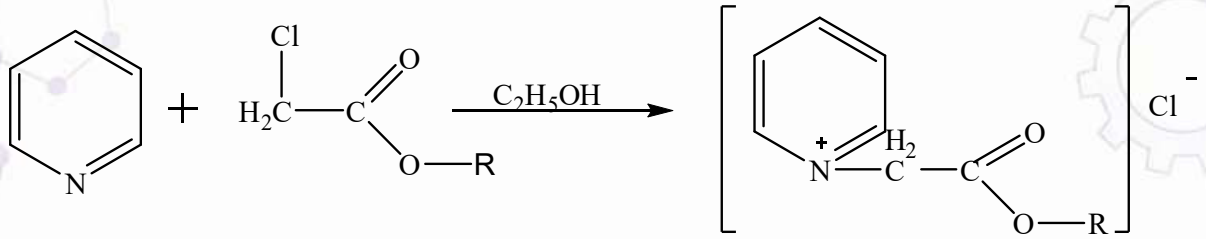
Оптимальное соотношение реагентов существенно влияет на выход и чистоту продукта. Избыток алкилгалогенидов или анионных реагентов может затруднять кристаллизацию и выделение целевых соединений. Кроме того, наличие влаги в растворителях требует дополнительной сушки продуктов, что связано с высокой растворимостью четвертичных аммониевых солей в воде.

В данной работе синтезированы четвертичные аммониевые соли на основе реакций третичных аминов с эфирами монохлоруксусной кислоты, изучены их структура и физико-химические свойства. Особое внимание

ISSN 3030-3907

уделено определению оптимальных условий взаимодействия пиридина с эфирами (бутил, пентил, изопентил, гексил, гептил, нонил, децил и бензил).

Согласно литературным данным, пиридиниевые соли данного типа обладают высокой биологической активностью (например, препараты «Алкацетам» и «Катамин АБ»). В связи с этим систематическое исследование реакций пиридина с эфирами монохлоруксусной кислоты представляет научный и практический интерес для создания новых эффективных соединений.



R –, C_5H_{11}, , C_9H_{19}, $C_{10}H_{21}$, $C_6H_5CH_2$-.

Пиридин и эфиры монохлоруксусной кислоты предварительно растворяли в этаноле и смешивали в мольном соотношении 1:2. В ходе реакции наблюдались различия в физико-химическом поведении системы, зависящие от природы эфиров. Так, при использовании бензильных, нонильных и пентильных эфиров отмечался выраженный экзотермический эффект (нагрев реакционной смеси и образование белого дыма), что свидетельствует об их высокой реакционной способности в реакциях нуклеофильного замещения. В случае бутильных и пентильных эфиров подобные эффекты были менее выражены, что указывает на их сравнительно более низкую реакционную активность.

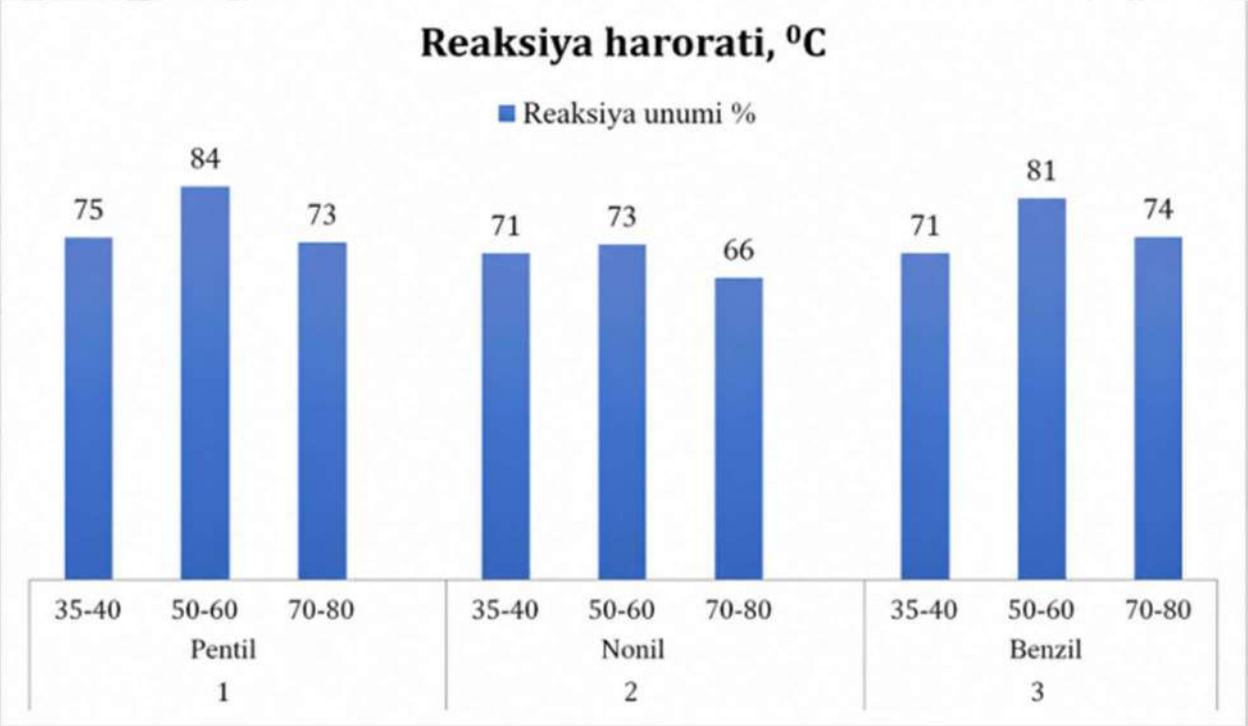
Проведение реакции при пониженной температуре сопровождалось снижением выхода продукта, что связано с замедлением кинетики процесса. Установлено, что оптимальными условиями являются температура 50–60 °C и продолжительность реакции 2–4 часа, при которых достигается максимальный выход четвертичных пиридиниевых солей.

Полученные продукты после завершения реакции сушили в эксикаторе в течение суток для удаления влаги и остаточного растворителя. Анализ результатов показал, что повышение температуры способствует увеличению выхода продукта до определённого предела, после чего наблюдается его стабилизация или незначительное снижение, что обусловлено возможным протеканием побочных реакций.

ISSN 3030-3907

График 1.1.

Влияние температуры на выход продукта в реакции пиридина с эфирами монохлоруксусной кислоты.



Реакцию проводили при различных температурных интервалах: 35–40 °C, 50–60 °C и 70–80 °C. Экспериментальные результаты показали, что максимальный выход продукта достигается при 50–60 °C. Это объясняется повышением кинетической энергии молекул и более эффективным протеканием реакции нуклеофильного замещения.

Необходимость проведения реакции при повышенной температуре обусловлена химической природой пиридина. Азотный атом в его структуре частично делокализован в ароматической системе, что снижает его основность по сравнению с алифатическими аминами. В связи с этим для активации реакции требуется дополнительная энергия в виде нагрева.

В отличие от пиридина, более сильные основания (например, алифатические третичные амины) способны образовывать четвертичные аммониевые соли уже при комнатной температуре. Однако для пиридина оптимальные условия достигаются только при умеренном нагревании.

Дальнейшее повышение температуры до 70–80 °C приводит к снижению выхода продукта, что, вероятно, связано с протеканием побочных реакций или частичным разложением образующихся пиридиниевых солей. Таким образом, температурный диапазон 50–60 °C является оптимальным для данной системы.

ISSN 3030-3907

На следующем этапе было исследовано влияние мольного соотношения реагентов на выход продукта, результаты которого представлены в соответствующем графике.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

В ходе проведённого исследования были изучены реакции пиридина с эфирами монохлоруксусной кислоты в различных условиях и установлены основные закономерности их протекания. Показано, что природа алкильных и бензильных заместителей существенно влияет на реакционную способность и выход четвертичных пиридиниевых солей.

Экспериментально установлено, что оптимальными условиями синтеза являются температура 50–60 °C и мольное соотношение реагентов 1:2, при которых достигается максимальный выход продукта. При более высоких температурах наблюдается снижение выхода, связанное с протеканием побочных реакций.

Квантово-химические расчёты позволили определить электронную структуру, энергетические характеристики и реакционную способность синтезированных соединений, что обеспечило теоретическое обоснование экспериментальных результатов.

Таким образом, полученные данные расширяют представления о механизмах взаимодействия пиридина с эфирами монохлоруксусной кислоты и могут быть использованы при направленном синтезе новых эффективных четвертичных аммониевых соединений с заданными свойствами.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Gilbert P., Moore L. E.. Cationic antiseptics: diversity of action under a common epithet // *Journal of Applied Microbiology*. – 2005. – Vol. 99(4). – P. 703–715.
2. Gerba C. P.. Quaternary ammonium biocides: efficacy in application // *Applied and Environmental Microbiology*. – 2015. – Vol. 81(2). – P. 464–469.
3. Zhang C. et al. Synthesis and antimicrobial activity of quaternary ammonium salts // *Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters*. – 2018. – Vol. 28(2). – P. 162–166.
4. Ioannou C. J., Hanlon G. W.. Action of disinfectant quaternary ammonium compounds // *Journal of Applied Microbiology*. – 2007. – Vol. 102(3). – P. 939–949.
5. McDonnell G., Russell A. D.. Antiseptics and disinfectants: activity, action, and resistance // *Clinical Microbiology Reviews*. – 1999. – Vol. 12(1). – P. 147–179.

ISSN 3030-3907

6. Zhao T. et al. Structure–activity relationship of quaternary ammonium compounds // *Journal of Molecular Structure*. – 2020. – Vol. 1202. – 127284.
7. Kuca K. et al. Quaternary ammonium salts as antimicrobial agents // *International Journal of Molecular Sciences*. – 2017. – Vol. 18(3). – 529.
8. Wessels S., Ingmer H.. Modes of action of disinfectants // *Applied Microbiology and Biotechnology*. – 2013. – Vol. 97. – P. 889–902.
9. Fardim P. et al. Surfactant properties of quaternary ammonium compounds // *Colloids and Surfaces A*. – 2012. – Vol. 413. – P. 30–36.
10. Klein W. et al. Environmental behavior of quaternary ammonium compounds // *Environmental Science & Technology*. – 2019. – Vol. 53(6). – P. 2927–2935.
11. Oturan M. A., Aaron J. J.. Advanced oxidation processes in water treatment // *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*. – 2014. – Vol. 44(23). – P. 2577–2641.
12. Frisch M. J. et al. Gaussian 09, Revision D.01. – Gaussian Inc., Wallingford CT, 2013.
13. Zhao Y., Truhlar D. G.. The M06 suite of density functionals // *Theoretical Chemistry Accounts*. – 2008. – Vol. 120. – P. 215–241.
14. Parr R. G., Yang W.. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. – Oxford University Press, 1989.
15. Becke A. D.. Density-functional thermochemistry // *Journal of Chemical Physics*. – 1993. – Vol. 98. – P. 5648–5652.

ISSN 3030-3907