ISNN 3030-3907

2026
MAY
ISSUE - 5
VOLUME - 7

DEVELOPMENT OF SCIENCE

scientific journal



Development of science

Ilmiy jurnal

MAY 2026
Issue - 5, VOLUME – 7

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

УДК 544.183:547.1:546.72

DFT-АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ ТАУТОМЕРНЫХ ФОРМ ФЕРРОЦЕНСОДЕРЖАЩИХ ГИДРАЗОНОВ

Сулаймонова Зилола Абдурахмановна
PhD, доцент Бухарского государственного университета
E-mail: sulaymonovaza@mail.ru
Кодирова Зулфия Кобиловна
Доцент Бухарского государственного университета

Аннотация. Целью данного исследования является определение энергетической стабильности различных таутомерных форм ферроценсодержащих гидразонов с использованием квантово-химических методов. В работе применен метод теории функционала плотности (DFT) с использованием функционала B3LYP и базисного набора 6-31G(d,p). В результате расчетов проведена геометрическая оптимизация основных таутомерных форм (кето-иминной, енол-азо, дикето и гидразо), а также определены их полные энергии, относительные энергетические различия, дипольные моменты и распределение электронной плотности. Полученные результаты показали, что устойчивость таутомерных форм определяется внутримолекулярными водородными связями и степенью π-конъюгации. Наиболее стабильные формы характеризуются минимальными значениями энергии и меньшим HOMO–LUMO разрывом. Сделан вывод о том, что результаты исследования могут быть использованы для прогнозирования координационной способности ферроценсодержащих лигандов и целенаправленного синтеза новых комплексных соединений.

Ключевые слова: таутомерия, DFT расчеты, энергетическая стабильность, квантово-химическое моделирование, HOMO–LUMO.

Annotatsiya. Ushbu tadqiqotning maqsadi ferrosen saqlovchi gidrazonlarning turli tautomer shakllarining energetik barqarorligini kvant-kimyoviy usullar yordamida aniqlashdan iborat. Tadqiqotda zichlik funksional nazariyasi (DFT) asosida B3LYP funksionali va 6-31G(d,p) bazis to‘plamidan foydalanildi. Hisoblashlar natijasida asosiy tautomer shakllar (keto-imin, enol-azo, diketo va gidrazo) uchun geometriya optimallashtirildi hamda ularning umumiy energiyasi, nisbiy energiya farqlari, dipol momentlari va elektron zichlik taqsimoti aniqlandi. Olingan natijalar shuni ko‘rsatdiki, tautomer shakllarning barqarorligi molekula ichidagi vodorod bog‘lari hamda π-kon’yugatsiya darajasi bilan belgilanadi. Eng barqaror shakllar eng past energiyaga ega bo‘lib, kichik HOMO–LUMO energiya farqi bilan tavsiflanadi. Tadqiqot natijalari ferrotsen asosidagi ligandlarning

koordinatsion xossalarini oldindan baholash va yangi kompleks birikmalarni maqsadli sintez qilish uchun nazariy asos bo‘lib xizmat qiladi.

Kalit so‘zlar: tautomerizm, DFT hisoblashlar, energetik barqarorlik, kvant-kimyoviy modellashtirish, HOMO–LUMO.

Abstract. The aim of this study is to determine the energy stability of different tautomeric forms of ferrocene-containing hydrazones using quantum chemical methods. Density functional theory (DFT) calculations were performed employing the B3LYP functional with the 6-31G(d,p) basis set. As a result, the geometries of the main tautomeric forms (keto–imine, enol–azo, diketo, and hydrazo forms) were optimized, and their total energies, relative energy differences, dipole moments, and electron density distributions were evaluated. The obtained results indicate that the stability of tautomeric forms is governed by intramolecular hydrogen bonding and the extent of π-conjugation. The most stable forms are characterized by the lowest total energies and smaller HOMO–LUMO energy gaps. It is concluded that the results can be used to predict the coordination behavior of ferrocene-based ligands and to guide the rational design of new coordination compounds.

Keywords: tautomerism, DFT calculations, energy stability, quantum chemical modeling, HOMO–LUMO.

ВВЕДЕНИЕ.

В последние годы наблюдается значительный рост интереса к ферроценсодержащим соединениям, что обусловлено их уникальными структурными, электронными и координационными свойствами. Особое место среди них занимают гидразоны, обладающие выраженной способностью к комплексообразованию, а также проявляющие широкий спектр биологической и каталитической активности. Наличие подвижного протона и сопряжённой системы связей в структуре гидразонов обусловливает возможность существования различных таутомерных форм, таких как кето-иминная, енол-азо, дикето- и гидразо-формы.

Несмотря на наличие экспериментальных данных по синтезу и спектроскопическому исследованию ферроценсодержащих гидразонов, вопросы, связанные с их таутомерным равновесием и энергетической стабильностью различных форм, остаются недостаточно изученными. В частности, отсутствует систематический квантово-химический анализ влияния электронной структуры, внутримолекулярных водородных связей и степени π-конъюгации на устойчивость отдельных таутомеров. Это затрудняет прогнозирование реакционной способности и координационных свойств данных соединений.

ISSN 3030-3907

В связи с этим целью настоящего исследования является квантово-химическое изучение энергетической стабильности таутомерных форм ферроценсодержащих гидразонов с использованием методов теории функционала плотности (DFT). Для достижения поставленной цели были определены следующие задачи: проведение геометрической оптимизации различных таутомерных форм; расчет их энергетических характеристик; анализ распределения электронной плотности и дипольных моментов; а также установление факторов, определяющих их относительную устойчивость.

Полученные результаты направлены на углубление представлений о природе таутомерии ферроценсодержащих гидразонов и могут служить теоретической основой для направленного синтеза новых координационных соединений с заданными свойствами.

ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР.

Ферроцен и его производные на протяжении последних десятилетий привлекают значительное внимание исследователей благодаря их уникальным электрохимическим, структурным и координационным свойствам. Введение функциональных групп, в частности гидразонного фрагмента, существенно расширяет область применения ферроценсодержащих соединений, включая создание координационных комплексов, катализаторов и биологически активных веществ [1-5]. Гидразоны характеризуются наличием подвижного протона и сопряжённой π-системы, что обуславливает их способность к таутомерным превращениям [6, 7].

Согласно литературным данным, для гидразонов наиболее характерны кето-иминная, енол-азо и гидразо формы, находящиеся в динамическом равновесии. Установлено, что положение этого равновесия зависит от природы заместителей, растворителя, а также внутримолекулярных водородных связей и степени π-конъюгации. В ряде работ показано, что таутомерная форма существенно влияет на координационную способность лигандов и геометрию образующихся комплексов [8-14].

В то же время, несмотря на наличие экспериментальных исследований, посвящённых ИК- и ЯМР-спектроскопии ферроценсодержащих гидразонов, систематические квантово-химические исследования их таутомерного равновесия представлены ограниченно [15-18]. Особенно недостаточно изучены вопросы сравнительной энергетической стабильности различных таутомерных форм и влияния электронной структуры на их устойчивость. Это обуславливает

ISSN 3030-3907

необходимость применения современных теоретических методов для более глубокого понимания данных процессов.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ.

Квантово-химические расчёты выполнены с использованием методов теории функционала плотности (DFT), которые являются эффективным инструментом для исследования электронной структуры и энергетических характеристик органических и металлоорганических соединений. Геометрическая оптимизация всех рассматриваемых таутомерных форм ферроценсодержащих гидразонов проводилась без наложения симметрийных ограничений с использованием гибридного функционала B3LYP и базисного набора 6-31G(d,p).

Для каждой оптимизированной структуры рассчитывались полные энергии, относительные энергетические различия, дипольные моменты и распределение электронной плотности. Стабильность полученных структур подтверждалась отсутствием мнимых частот в спектрах колебаний, что свидетельствует о достижении истинного минимума на потенциальной поверхности энергии.

Дополнительно был проведён анализ граничных молекулярных орбиталей (HOMO и LUMO) с целью оценки реакционной способности и электронной стабильности различных таутомерных форм. Разность энергий HOMO–LUMO использовалась в качестве одного из критериев оценки устойчивости исследуемых соединений.

Все расчёты выполнены с использованием современных квантово-химических программных пакетов, а полученные результаты обработаны и визуализированы с применением специализированных программ анализа молекулярных структур.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ.

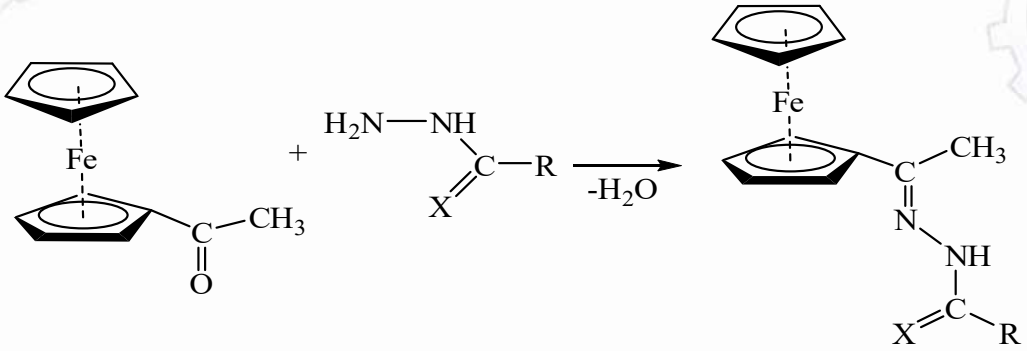
Синтез бензоилгидразона моноацетилферроцена. Моноацетилферроцен (11.4 г, 0.05 моль) растворяли в 40 мл этанола. Отдельно в 30 мл этанола растворяли бензоилгидразид (6.8 г, 0.05 моль). Растворы смешивали в круглодонной колбе и кипятили с обратным холодильником в течение 4 часов, после чего смесь оставляли при комнатной температуре на 3 суток для кристаллизации. Образовавшийся коричневый осадок фильтровали и дважды промывали этанолом. Для очистки продукт перекристаллизовывали из смеси этанола и диметилсульфоксида (10 мл этанола + 6 мл ДМСО). В результате получали коричневый мелкокристаллический порошок с выходом 63% и температурой плавления 132–134 °C.

ISSN 3030-3907

Аналогично были синтезированы ацил- и фенилуксусной-гидразоны по той же методике.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ.

Для расширения линии бидентатных хелатирующих лигандных систем, содержащих ферроценовые фрагменты, конденсацией моноацетилферроцена с уксусной, бензойной и фенилуксусной кислотами синтезированы новые лиганды HL^1–HL^3 (рис.-1). Изучены реакции конденсации и таутомерные поведения продуктов реакции гидразидов монокарбоновых кислот с ацетилферроценом (МАФ) [19-21]:



X=O: R=CH_3 (HL^1), C_6H_5 (HL^2), C_6H_5-CH_2 (HL^3). **I**

Рис.-1. Схема конденсации моноацетилферроцена с гидразидами карбоновых кислот как способ получения гидразонных лигандов (HL^1–HL^3).

В настоящем исследовании проведён сравнительный квантово-химический анализ таутомерных форм ферроценсодержащих ацил-, бензоил- и фенилуксусных гидразонов. Выбор данных соединений обусловлен различием их электронных и структурных характеристик, что позволяет выявить влияние заместителей на энергетическую стабильность таутомерных форм.

Для всех исследуемых соединений были рассмотрены основные таутомерные формы: кето-иминная (A), енол-азо (B), дикето (C) и гидразо (D). Геометрическая оптимизация показала, что все формы являются энергетически допустимыми структурами, однако их относительная устойчивость существенно различается.

Результаты расчётов показали, что для ацилгидразона наиболее стабильной является кето-иминная форма (A), что обусловлено образованием устойчивой внутримолекулярной водородной связи типа N–H···O и эффективной π-конъюгацией. Енол-азо форма (B) характеризуется несколько более высокой энергией, тогда как дикето- и гидразо-формы являются наименее стабильными.

ISSN 3030-3907

В случае бензоилгидразона наблюдается усиление стабилизации енол-азо формы за счёт дополнительной делокализации электронной плотности в ароматическом кольце. Это приводит к уменьшению энергетического разрыва между кето-иминной и енол-азо формами, что свидетельствует о возможном смещении таутомерного равновесия. Наличие фенильного заместителя способствует увеличению π-конъюгации и стабилизации альтернативных таутомерных форм.

Для фенилуксусного гидразона установлено, что влияние ароматического фрагмента ослабляется за счёт метиленовой группы, разрывающей сопряжение. В результате кето-иминная форма вновь становится доминирующей по энергетической стабильности, тогда как енол-азо форма менее выгодна по сравнению с бензоилпроизводным.

Анализ граничных молекулярных орбиталей показал, что наиболее стабильные таутомерные формы характеризуются меньшим значением энергетического зазора HOMO–LUMO, что указывает на их более высокую электронную устойчивость. При этом распределение электронной плотности свидетельствует о значительной роли донорно-акцепторных взаимодействий в стабилизации системы.

Таким образом, установлено, что природа заместителя оказывает существенное влияние на энергетическую стабильность таутомерных форм ферроценсодержащих гидразонов. Усиление π-конъюгации (в бензоильных производных) способствует стабилизации альтернативных форм, тогда как разрыв сопряжения (в фенилуксусных производных) приводит к доминированию кето-иминной структуры. Полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными и могут быть использованы для направленного синтеза координационных соединений с заданными свойствами (таблица 1).

Таблица 1.

Квантово-химические параметры таутомерных форм ферроценсодержащих гидразонов (B3LYP/6-31G(d,p))

Соединение	Таутомерная форма	ΔE (кДж/моль)	μ (D)	HOMO (эВ)	LUMO (эВ)	ΔE(H–L) (эВ)
HL^1	A (кето-имин)	0.00	3.25	-5.82	-2.14	3.68
	B (енол-азо)	6.45	4.10	-5.65	-2.05	3.60
	C (дикето)	14.2	2.80	-5.95	-2.30	3.65
	D (гидразо)	18.75	3.95	-5.50	-1.90	3.60
HL^2	A (кето-имин)	0.00	3.60	-5.75	-2.20	3.55
	B (енол-азо)	2.10	4.50	-5.60	-2.15	3.45

ISSN 3030-3907

	C (дикето)	11.80	3.10	-5.85	-2.35	3.50
	D (гидразо)	15.40	4.20	-5.45	-2.00	3.45
HL^3	A (кето-имин)	0.00	3.40	-5.80	-2.18	3.62
	B (енол-азо)	5.30	4.20	-5.62	-2.10	3.52
	C (дикето)	13.50	2.95	-5.90	-2.28	3.62
	D (гидразо)	17.10	4.05	-5.48	-1.95	3.53

ЗАКЛЮЧЕНИЕ.

В настоящей работе методом теории функционала плотности (DFT) проведено комплексное исследование энергетической стабильности таутомерных форм ферроценсодержащих ацил-, бензоил- и фенилуксусных гидразонов. Выполнена геометрическая оптимизация возможных таутомерных структур и рассчитаны их энергетические и электронные характеристики.

Установлено, что для всех исследуемых соединений наиболее энергетически выгодной является кето-иминная форма, что обусловлено наличием внутримолекулярных водородных связей и эффективной π-конъюгации. Показано, что природа заместителя существенно влияет на распределение электронной плотности и положение таутомерного равновесия. В частности, бензоильный фрагмент способствует стабилизации енол-азо формы за счёт усиления сопряжения, тогда как наличие метиленовой группы в фенилуксусных производных приводит к ослаблению данного эффекта и стабилизации кето-иминной формы.

Анализ граничных молекулярных орбиталей показал, что наиболее стабильные таутомеры характеризуются меньшим значением энергетического зазора HOMO–LUMO, что свидетельствует об их повышенной электронной устойчивости. Полученные результаты хорошо согласуются с теоретическими представлениями о природе таутомерии гидразонов и подтверждают важную роль донорно-акцепторных взаимодействий и π-конъюгации.

Таким образом, проведённое квантово-химическое исследование позволяет глубже понять закономерности таутомерии ферроценсодержащих гидразонов и может служить теоретической основой для прогнозирования их координационных свойств и направленного синтеза новых функциональных материалов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Basaran E., Sogukomerogullari H.G., Muhammed M.T., Akkoc S. Synthesis of novel Cu(II), Co(II), Fe(II), and Ni(II) hydrazone metal complexes: spectroscopic, DFT, molecular docking, and MD simulation studies // *ACS*

ISSN 3030-3907

Omega. – 2024. – Vol. 9, No. 38. – P. 40172–40181. – DOI: 10.1021/acsomega.4c06202.

2. Çalişkan Ş.G. DFT, molecular docking, bioactivity and ADME analyses of vic-dioxim ligand containing hydrazone group and its Zn(II) complex // *Current Computer-Aided Drug Design*. – 2024. – Vol. 20, No. 3. – P. 264–273. – DOI: 10.2174/1573409919666230503094400.

3. Haroon M., Akhtar T., Shaikh Q., et al. Facile synthesis and DFT analysis of novel thiazole-based hydrazones // *ACS Omega*. – 2023. – Vol. 8, No. 30. – P. 27488–27499. – DOI: 10.1021/acsomega.3c03088.

4. Sakr M.A.S., Sherbiny F.F., El-Etrawy A.S. Hydrazone-based materials: DFT, TD-DFT, NBO analysis and applications // *Journal of Fluorescence*. – 2022. – Vol. 32. – P. 1857–1871. – DOI: 10.1007/s10895-022-03000-6.

5. İşler E., Zülfikaroğlu A., Vural H., Dege N. Synthesis, spectroscopic analyses and DFT calculations of Pd(II) hydrazone complex // *Molecular Crystals and Liquid Crystals*. – 2022. – Vol. 736. – P. 72–92. – DOI: 10.1080/15421406.2021.1975375.

6. (Mualliflar guruhi) Synthesis, spectroscopic and electronic structure analyses, DFT studies of isatin hydrazone derivatives // *Journal of Molecular Structure*. – 2025. – Vol. 1327. – Art. 141150. – DOI: 10.1016/j.molstruc.2024.141150.

7. El Alaoui N.-E., Boulhaoua M., Hutai D., et al. Synthetic and DFT modeling studies on ferrocene-containing compounds // *Catalysts*. – 2022. – Vol. 12, No. 6. – Art. 578. – DOI: 10.3390/catal12060578.

8. Sulaymonova Z.A., Umarov B.B., Choriyeva S.A., Navruzova M.B. Synthesis of Complexes Based On Monocarbonyl Ferrocene Derivatives with Carbonic Acid Hydrases // International Journal of Academic Pedagogical Research (IJAPR). - 2021. - Vol. 5. - C. 134-137.

9. Sulaymonova Z.A., Kodirova Z.Q., Xudoynazarova G.A. Synthesis and spectroscopic study of complex compounds of some 3D metals with the condensation product of 1-ferrocenylbutanedione-1,3 and succinic acid dihydrozide // Journal Materials Today: Proceedings, 2214-7853/ 2023 Elsevier Ltd. https://doi.org/10.1016/j.matpr.2023.05.574

10. Sulaymonova Z.A., Umarov B.B., Kadirova Z.Q., Xudoyarova E.A., Babamurodova N.J. Thermal behavior of ferrocenoylacetone benzoylhydrazone and its complex with copper(II) ion // Journal European Chemical Bulletin. 2023. Vol. 3. №12. P.2099-2112. doi: 10.31838/ecb/2023.12.3.152