ISNN 3030-3907

2026
JUNE
ISSUE - 6
VOLUME -5

# DEVELOPMENT OF SCIENCE

## scientific journal



# Development of science

## Ilmiy jurnal

IYUN 2026
Issue - 6, VOLUME – 5

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

# MIS OKSALATATSETATLI KOMPLEKS BIRIKMASINING HIRSHFELD YUZALARI TAHLILI

**Zaripova Dinora Ibragimovna,**
*Xorazm Ma'mun akademyasi tayanch doktoranti*
*E-mail: dinora.zaripova.98@mail.ru*
**Abdullayeva Zubayda Shavkatovna**
*Urganch Ranch texnologiya universiteti Texnika kafedrasi dotsenti, PhD*
*E-mail: zubayda.abdullayeva.91@mail.ru*
**Kadirova Shaxnoza Abduxalilovna**
*O'zbekiston Milliy universiteti Kimyo fakulteti dekani, k.f.d., professor*
**Masharipov Azamat Tursinboyevich**
*Urganch davlat universiteti akademik litseyi Kimyo-biologiya kafedrasi mudiri, k.f.f.d. (PhD)*

**Annotatsiya.** Yangi sintez qilingan mis oksalatatsetatli kompleks birikmasining kristall tuzilishi va molekulalararo o'zaro ta'sirlari Hirshfeld yuzalari tahlili yordamida o'rganildi. Kompleks birikmaning kristallografik ma'lumotlari asosida Hirshfeld yuzalari va ikki o'lchamli fingerprint diagrammalari qurildi hamda kristall panjaraning barqarorligini ta'minlovchi asosiy intermolekulyar kontaktlar aniqlandi. Tahlil natijalariga ko'ra, H···H, O···H/H···O va boshqa turdagi kontaktlarning kristall qadoqlanishdagi ulushi baholandi. Olingan natijalar kompleks birikmaning supramolekulyar tuzilishini chuqurroq tushunish va uning fizik-kimyoviy xossalarini izohlashda muhim ahamiyatga ega ekanligi ko'rsatildi.

**Kalit so'zlar:** mis kompleksi, oksalatatsetatli kompleks, Hirshfeld yuzasi, fingerprint diagrammasi, kristall tuzilish,

**Аннотация.** В данной работе кристаллическая структура и межмолекулярные взаимодействия оксалатацетатного комплекса меди исследованы с использованием анализа поверхностей Хиршфельда. На основе кристаллографических данных комплексного соединения были построены поверхности Хиршфельда и двумерные fingerprint-диаграммы, а также определены основные межмолекулярные контакты, обеспечивающие стабильность кристаллической решётки. Результаты анализа показали вклад контактов типов H···H, O···H/H···O и других взаимодействий в упаковку кристалла. Полученные результаты свидетельствуют о важности более глубокого понимания супрамолекулярной структуры комплексного соединения и интерпретации его физико-химических свойств.

**Ключевые слова:** комплекс меди, оксалатацетатный комплекс, поверхность Хиршфельда, fingerprint-диаграмма, кристаллическая структура

**Abstract.** In this study, the crystal structure and intermolecular interactions of a copper oxalatoacetate complex were investigated using Hirshfeld surface analysis.

Based on the crystallographic data of the complex compound, Hirshfeld surfaces and two-dimensional fingerprint plots were generated, and the main intermolecular contacts responsible for the stability of the crystal lattice were identified. The analysis revealed the contributions of H···H, O···H/H···O, and other types of contacts to the crystal packing. The obtained results demonstrated the importance of a deeper understanding of the supramolecular structure of the complex compound and the interpretation of its physicochemical properties.

**Keywords:** copper complex, oxalatoacetate complex, Hirshfeld surface, fingerprint plot, crystal structure.

**KIRISH.**

Koordinatsion birikmalar zamonaviy noorganik va materialshunoslik kimyosining muhim yo‘nalishlaridan biri hisoblanadi. Oksalat-anioni ($C_2O_4^{2-}$) va atsetat-anioni ($CH_3COO^-$) metall ionlari bilan mustahkam koordinatsion bog‘lar hosil qiluvchi eng ko‘p uchraydigan ligandlar qatoriga kiradi. Hozirgi paytda koordinatsion birikmalarning kristall tuzilishini o‘rganishda Hirshfeld yuzalari tahlili keng qo‘llanilmoqda. Ushbu usul molekulalararo o‘zaro ta’sirlarni vizuallashtirish va miqdoriy baholash imkonini beradi. Hirshfeld yuzasi molekula atrofidagi elektron zichlik taqsimotiga asoslanib quriladi hamda kristall panjaradagi H···H, O···H/H···O, C···H va boshqa turdagi kontaktlarning umumiy hissasini aniqlashga xizmat qiladi. CrystalExplorer dasturi yordamida hosil qilinadigan ikki o‘lchamli fingerprint diagrammalari esa kristall qadoqlanish mexanizmini chuqur tahlil qilish imkonini beradi. Mis oksalat-atsetatli komplekslarning kristall strukturasida vodorod bog‘lari va elektrostatik o‘zaro ta’sirlar muhim rol o‘ynaydi.

**ADABIYOTLAR TAHLILI.**

Hirshfeld yuzalari tahlili kristall tuzilmalardagi intermolekulyar o‘zaro ta’sirlarni miqdoriy va vizual baholash imkonini beruvchi zamonaviy kristallokimyoviy usullardan biri hisoblanadi. Ushbu metod molekulalararo kontaktlarning tabiatini aniqlash, kristall qadoqlanish mexanizmlarini tushuntirish hamda supramolekulyar tuzilishni tavsiflashda keng qo‘llaniladi [1]. Ohirgi yillarda mis(II) komplekslarining kristall tuzilishini o‘rganishda Hirshfeld yuzalari va fingerprint diagrammalaridan keng foydalanilmoqda. Sintez qilingan yangi mis(II)-atsetat kompleksi uchun olib borilgan tadqiqotda kristall panjaradagi asosiy intermolekulyar ta’sirlar Hirshfeld yuzalari yordamida aniqlangan. Mualliflar H···H hamda O···H/H···O kontaktlari kristall qadoqlanishining asosiy qismini tashkil etishini ko‘rsatganlar [2]. Mis(II) kompleksida Hirshfeld tahlili natijalari H···O/O···H kontaktlari umumiy sirtning 53,5 %, H···H kontaktlari esa 28,1 % ni tashkil etishini ko‘rsatgan. Ushbu kontaktlar kristall strukturaning barqarorlashuvida asosiy omil ekanligini qayd etganlar [3]. Aralash ligandli mis(II)


ISSN 3030-3907

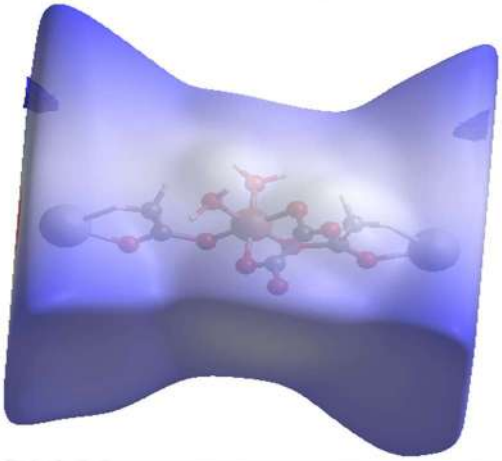
kompleksida kvadrat piramidal koordinatsion muhit kuzatilgan bo‘lib, kristall panjaraning barqarorligi N–H···O, O–H···O va C–H···O vodorod bog‘lari bilan ta’minlanishi aniqlangan. Hirshfeld tahlili ushbu nokovalent o‘zaro ta’sirlarning kristall qadoqlanishdagi ahamiyatini tasdiqlagan [4]. Ushbu tadqiqotda karboksilat ligandli mis(II) kompleksining Hirshfeld yuzalari tahlili bajarilgan. Natijalarga ko‘ra, H···O/O···H (33,1 %), H···H (29,5 %) va H···N/N···H (19,3 %) kontaktlari kristall strukturaning asosiy hissasini tashkil etishi aniqlangan [5]. Shuningdek, arginin asosidagi mis(II) komplekslari uchun bajarilgan tadqiqotlarda ham Hirshfeld yuzalarida vodorod bog‘lari ustunligi aniqlangan. Mualliflar H···O/O···H kontaktlari kristallarning supramolekulyar arxitekturasini shakllantirishda muhim rol o‘ynashini ta’kidlaganlar [6].

Mis(II) komplekslarida ligand tabiatining o‘zgarishi intermolekulyar kontaktlar ulushiga sezilarli ta’sir ko‘rsatishi aniqlangan. 2-amino-1-metilbenzimidazol hamda atsetilatseton ligandlari asosida olingan kompleksda kvadrat-piramidal geometriya kuzatilgan. Hirshfeld tahlili H···H kontaktlari 61,1 %, H···C/C···H kontaktlari 21,3 % va O···H/H···O kontaktlari 11,3 % ni tashkil etishini ko‘rsatgan. Bu esa kristall tuzilishining shakllanishida vodorod atomlari ishtirokidagi kontaktlar ustun ekanligini yana bir bor tasdiqlaydi[7]. Bu tadqiqotda salitsilat hamda 2-amino-1-metilbenzimidazol ligandlari asosidagi mis(II) kompleksi sintez qilinib, uning supramolekulyar tuzilishi batafsil o‘rganilgan. Kompleksda buzilgan oktaedrik koordinatsion muhit mavjud bo‘lib, kristall panjara O–H···O, N–H···O va C–H···O vodorod bog‘lari hamda π–π stacking o‘zaro ta’sirlari orqali barqarorlashgani aniqlangan. Hirshfeld yuzasi tahlili H···H (43,7 %), C···H/H···C (35,8 %) va O···H/H···O (14,1 %) kontaktlari asosiy ulushga ega ekanligini ko‘rsatilgan [8]. Bundan tashqari, quinazolinon hosilali O,N,O-donor ligand asosidagi yangi mis(II) kompleksi uchun kristallografik, spektroskopik va DFT tadqiqotlari olib borilgan. Mualliflar Hirshfeld yuzasi tahlilini kvant-kimyoviy hisoblashlar bilan uyg‘unlashtirib, intermolekulyar ta’sirlarning kristall tuzilishiga ta’sirini kompleks ravishda izohlab berganlar. Ushbu yondashuv Hirshfeld tahlilining nafaqat strukturaviy, balki elektron tuzilishni baholashdagi imkoniyatlarini ham namoyon etadi [9]. Shunday qilib, tahlil qilingan adabiyotlar mis(II) komplekslarida kristall qadoqlanish va supramolekulyar tuzilishning shakllanishida asosan H···H, O···H/H···O hamda C···H/H···C kontaktlari ustunlik qilishini ko‘rsatadi. Hirshfeld yuzasi tahlili esa ushbu o‘zaro ta’sirlarni miqdoriy baholashda samarali usul bo‘lib, yangi mis(II) komplekslarining strukturaviy xususiyatlarini aniqlashda muhim ahamiyat kasb etadi [10].

**MUHOKAMA VA NATIJALAR.**


ISSN 3030-3907

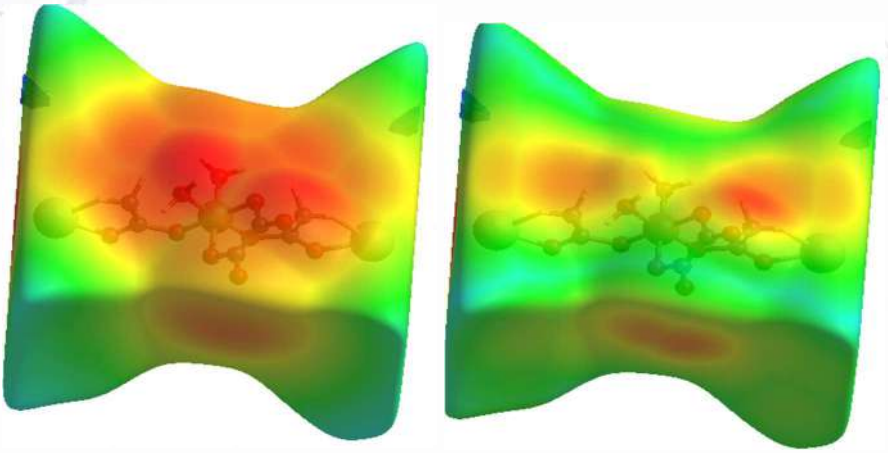
Mis birikmaning Hirshfeld yuzalari tahlili molekulyar kristall tuzilmalarni Hirshfeld yuzasi texnikasi yordamida miqdoriy tahlil qilish mumkin. Ushbu metodologiya Hirshfeld yuzasining har bir nuqtasida, tashqi va ichki yuzalarda joylashgan qo‘shni atomlar bilan bog‘liq o‘zgarishlarni yoritib beradi. Bu o‘ziga xos xususiyatlar molekulyar tartibdagi intermolekulyar kuchlarning tanlab olish va o‘ziga xosligini o‘rganishda muhim rol o‘ynagan.Ushbu yuzalarni yaratish kristall ichidagi fazo Hirshfeld nisbati yordamida bo‘linishi asosida amalga oshiriladi. Normallashtirilgan kontakt masofasi ($d_{norm}$) yuzaning tashqi va ichki tomonlaridan hisoblanadi va quyidagicha ifodalanadi: Hirshfeld yuzasi tahlili kristall tuzilmaning tashqi va ichki qismlari o‘rtasidagi murakkab munosabatlarni ochib beradi. $d_{norm}$ parametri normallashtirilgan kontakt masofasini bildiradi. $d_{norm}$ parametri Hirshfeld yuzasida qizildan oqqa, oqdan ko‘k ranggacha bo‘lgan rang gradienti orqali vizual ko‘rsatiladi. Yorqin qizil hududlar Van-der-Vaals radiuslaridan qisqaroq masofada sodir bo‘ladigan intermolekulyar kontaktlarni bildiradi, ko‘k hududlar esa Van-der-Vaals radiuslaridan kattaroq masofalardagi kontaktlarni ko‘rsatadi. Oq hududlar mos atomlarning Van-der-Vaals radiuslari yig‘indisiga mos keladi. Kristall panjaradagi qo‘shni molekulalar o‘rtasidagi qisqa masofali kontaktlarni tahlil qilish uchun tadqiqotchilar CrystalExplorer 17 versiyasidan foydalanganlar. Ushbu dastur yordamida kristall tuzilmalarining Hirshfeld yuzalari o‘rganilgan va ularga mos ikki o‘lchovli (2D) barmoq izlari (fingerprint plots) yaratilgan. Tahlil jarayonida Hirshfeld yuzasi normallashtirilgan kontakt masofasi ($d_{norm}$) hamda uning di va de ko‘rsatkichlari asosida olingan. Hirshfeld yuzasi maydonining ($d_{norm}$) miqdoriy tahlili shuni ko‘rsatdiki, umumiy hajm 1289,20 $Å^3$, yuza maydoni esa 799,72 $Å^2$ ni tashkil etadi. Umuman olganda, katta hajm va yuza maydoni kristall tuzilmasidagi kengroq intermolekulyar bog‘lanish va o‘zaro ta’sirlarni bildiradi (1-rasm). Normallashtirilgan bog‘lanish masofasi (atom o‘lchamini o‘lchovchi parametr) −0.6319 dan 1.1578 a.u. gacha o‘zgarib, o‘rtacha qiymati 0.3853 a.u. ni tashkil etadi. (1-rasm).



**1-rasm. $[Cu(CO_2)_2 \cdot 2CH_3COONa \cdot 2H_2O]$ kompleks birikmaning $d_{norm}$ yuzasi**

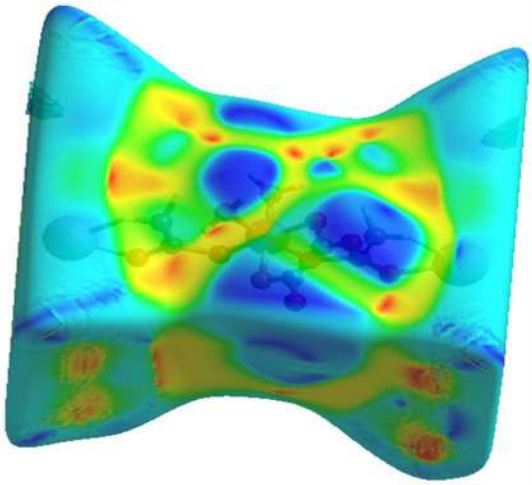

ISSN 3030-3907

di parametri (yuzadan ichki va tashqi atomlarning yadro holatiga masofa) 1,4853dan 10,4032a.u. gacha, de parametri esa 1,4857dan 7,4092 a.u. gacha oralig‘da bo‘lgan (2-rasm).



**2-rasm. [$Cu(CO_2)_2 \cdot 2CH_3COONa \cdot 2H_2O$] kompleks birikmaning di va de yuzalari**

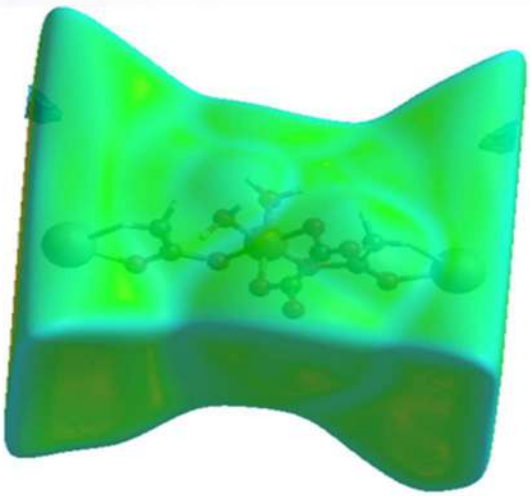
Bundan tashqari, yuza egri chizig‘ini tavsiflovchi shape index parametri -1,0000dan 1,0000gacha (3-rasm), egriklik (curvedness) esa -4,0000dan 0,4000 a.u. gacha oralig‘da bo‘lgan (4-rasm). Bu Hirshfeld yuzasi kristall tuzilmaning umumiy shakli va topografiyasi haqida ma’lumot berishini ko‘rsatadi. Ushbu xususiyatlar kristall tuzilmasidagi qadoqlanish va intermolekulyar o‘zaro ta’sirlarni aniqlashda muhim ahamiyatga ega.



**3-rasm. [$Cu(CO_2)_2 \cdot 2CH_3COONa \cdot 2H_2O$] kompleks birikmaning shape index yuzasi**

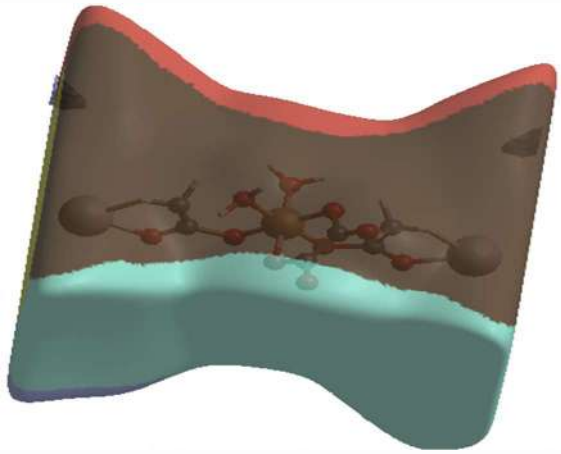
Bu Hirshfeld yuzasi kristall tuzilmaning umumiy shakli va topografiyasi haqida ma’lumot berishini ko‘rsatadi.


ISSN 3030-3907



**4-rasm. $[Cu(CO_2)_2 \cdot 2CH_3COONa \cdot 2H_2O]$ kompleks birikmaning egriklik (curvedness) yuzasi**

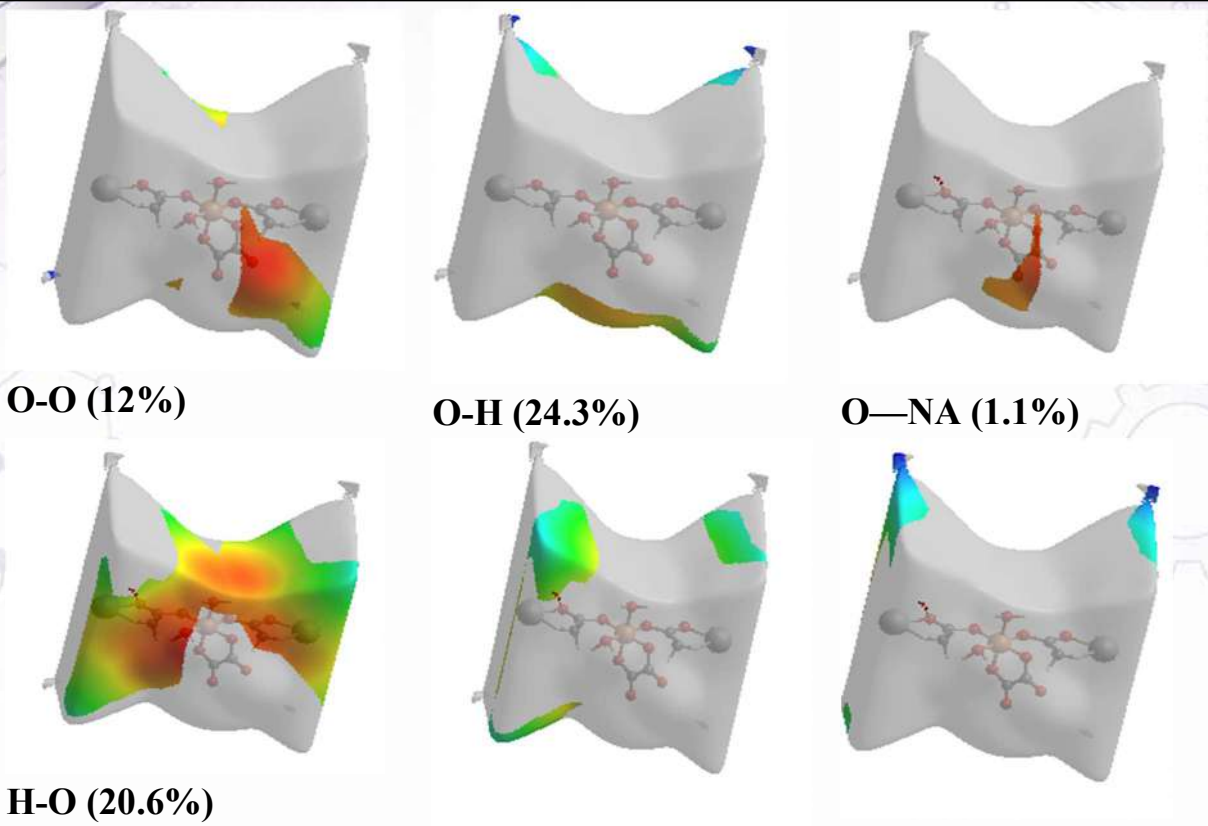
Fragment Patch xaritalari kristall packing tabiatini tushunishda muhim ahamiyatga ega bo‘lib, molekulalar orasidagi eng muhim kontaktlarni vizual ravishda namoyish etadi (5-rasm). Ushbu xususiyatlar kristall tuzilmasidagi qadoqlanish va intermolekulyar o‘zaro ta’sirlarni aniqlashda muhim ahamiyatga ega.



**5-rasm. $[Cu(CO_2)_2 \cdot 2CH_3COONa \cdot 2H_2O]$ kompleks birikmaning Fragment Patch yuzasi**

Kristall tuzilmasidagi bunday bo‘shliqlar yoki kanallar materialning xususiyatlariga, masalan, gaz adsorbtsiyasi, ion tashish yoki mehmon molekulalarni joylashtirish imkoniyatiga ta’sir qilishi mumkin. Koordinatsion birikmasining Hirshfeld yuzasining 2D barmoq izlari keltirilgan (6-rasm).


ISSN 3030-3907




**6-rasm. [Cu(CO₂)₂·2CH₃COONa·2H₂O] kompleks birikmaning barmoq izlari**

Eng muhim intermolekulyar o‘zaro ta’sirlar O–H kontaktlari bo‘lib, ular Hirshfeld yuzasining 24% ini tashkil etadi. Bu kislorod-vodorod bog‘lanishining kristall tuzilmani barqarorlashtirishdagi muhim rolini ko‘rsatadi. Ikkinchi o‘rinda O-H / H-O kontaktlari joylashgan bo‘lib, ular yuzaning 20.6% ini egallaydi. Bu yaqin kislorod-vodorod o‘zaro ta’sirlari ham intermolekulyar qadoqlanishda muhim rol o‘ynaydi. Uchinchi o‘rinda esa Na-H / H-Na kontaktlari joylashgan bo‘lib, ular yuzaning 22.3% ini egallaydi. Boshqa sezilarli hissalar quyidagilar: O–O kontaktlari (12%) — turli Van-der-Vaals va dipol-dipol o‘zaro ta’sirlarni aks ettiradi, bularning barchasi kristall tuzilmani barqarorlashtirishga hissa qo‘shadi. Hirshfeld yuzasi tahliliga ko‘ra, molekulyar yuzaning ichki va tashqi qismlarida bir xil elementlarning umumiy yuza hosil bo‘lishiga qo‘shgan hissasi sezilarli darajada farq qilmagan. Bu molekulyar yuzaning ichki va tashqi qismlarida turli elementlarning Hirshfeld yuzasi hosil bo‘lishiga qo‘shgan hissasi o‘xshash ekanligini ko‘rsatadi.

**XULOSA VA TAKLIFLAR.**

Mis(II) oksalat-atsetatli kompleks birikmasining Hirshfeld yuzalari tahlili natijalari kristall panjarada molekulalararo o‘zaro ta’sirlarning tabiati va ulushini aniqlash imkonini berdi. Tahlil natijasida [Cu(CO₂)₂·2CH₃COONa·2H₂O] kompleks tuzilishining barqarorligi asosan O···H/H···O turidagi vodorod bog‘lari


ISSN 3030-3907

hamda O···O va H···H kontaktlari orqali ta’minlanishi aniqlandi. Shunday qilib, mis oksalat va natriy atsetat asosida sintez qilingan mis(II) oksalat-atsetatli kompleks birikmaning Hirshfeld yuzalari tahlili kristall strukturaning shakllanishida kislorod atomlari ishtirokidagi vodorod bog‘lari ustun ahamiyatga ega ekanligini ko‘rsatdi.

## FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Spackman M.A., Jayatilaka D. *Hirshfeld surface analysis*. CrystEngComm. 2009. Vol. 11. P. 19–32. DOI: 10.1039/B818330A.

2. Al-Farhan K. A., Almutairi A. A., Alotaibi M. R. et al. *Structural characterization, Hirshfeld surface analysis, optical properties, and DFT study of a new copper(II) complex*. Inorganic Chemistry Communications. 2023. Vol. 157. Article 111314. DOI: 10.1016/j.inoche.2023.111314.

3. Vynohradov O.S., Vashchenko O.V., Khomenko D.M. et al. *Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of a new copper(II) complex based on diethyl 2,2'-(4H-1,2,4-triazole-3,5-diyl)diacetate*. Acta Crystallographica Section E. 2024. Vol. 80. No. 9. P. 976–980. DOI: 10.1107/S2056989024008259.

4. Chaisuriya W., Chainok K., Wannarit N. *Crystal structure and Hirshfeld surface analysis of a new mononuclear copper(II) complex*. Acta Crystallographica Section E. 2023. Vol. 79. No. 12. P. 1115–1120. DOI: 10.1107/S2056989023009234.

5. Oleksandr V., Alexandru-C. S. et al. *Crystal structure and Hirshfeld-surface analysis of diaquabis(5-methyl-1H-1,2,4-triazole-3-carboxylato)copper(II)*. Acta Crystallographica Section E. 2024. Vol. 80. No. 1. P. 54–57. DOI: 10.1107/S2056989023010770.

6. Potočňák I., Györyová K. et al. *The supramolecular hybrid inorganic–organic L-argininato-based copper(II) materials – preparation, structural, spectroscopic and thermal properties*. Inorganica Chimica Acta. 2023. Vol. 557. Article 121698. DOI: 10.1016/j.ica.2023.121698

7. Kaneda A., Suzuki S., Nakane D. et al. Crystal structure and Hirshfeld surface analysis of (1H-imidazole-κN3)[4-methyl-2-{[(2-oxido-5-(2-phenyldiazen-1-yl)phenyl)methylidene]amino}pentanoate]copper(II) // *Acta Crystallographica Section E*. – 2024. – Vol. 80. – P. 468–471. DOI: 10.1107/S2056989024002986.

8. Siddikova K., Ziyatov D., Tojiboev A. et al. Synthesis, crystal structure and Hirshfeld surface analysis of bis(acetylacetonato)(2-amino-1-methyl-1H-benzimidazole)copper(II) // *Acta Crystallographica Section E*. – 2025. – Vol. 81. – P. 1–5. DOI: 10.1107/S2056989024011538.

9. Mukhammadiev S., Fayzullayeva F., Kadirova Z. et al. Crystal structure and Hirshfeld surface analysis of bis(2-amino-1-


ISSN 3030-3907

methylbenzimidazole)bis(salicylato)copper(II) // *Acta Crystallographica Section E*. – 2025. – Vol. 81. – P. 968–971. DOI: 10.1107/S2056989025007960.

10. Spectroscopic properties, crystal structure, Hirshfeld surface analysis and DFT study of a new Cu(II) complex based on quinazolinone O,N,O-donor ligand // *Journal of Molecular Structure*. – 2024. – Vol. 1306. – Article 137886.


ISSN 3030-3907