



O'zbekiston Respublikasi
Maktabgacha va maktab
ta'limi vazirligi

ISSN: 2992-9008
UDK: 37

TA'LIM VA TARAQQIYOT

Ilmiy-uslubiy jurnali



2026-YIL 5-SON

www.journal.namspi.uz

Bosh muharrir: Namangan davlat pedagogika instituti rektori B.E.Xusanov
Mas'ul muharrir: Ilmiy ishlar va innovatsiyalar bo'yicha prorektor M.R.Qodirxonov
Mas'ul muharrir o'rinbosari: Ilmiy tadqiqotlar, innovatsiyalar va ilmiy-pedagogik kadrlar tayyorlash bo'limi boshlig'i J.A.Yuldashev

TAHRIR HAY'ATI

Aniq va tabiiy fanlar: k.f.d., prof. Sh.Abdullayev, f-m.f.d., dots. R.Xakimov, k.f.d., prof. N.Vohidova, k.f.d., dots. M.Qodirxonov, b.f.d., dots. A.Batashov, f-m.f.n., dots., T.Abdullayev, p.f.n., dots. M.Eshnazarova, p.f.n., dots. G'.Nafasov, p.f.n., dots. M.Boltayeva.

Texnika fanlari: t.f.d., prof. A.Umarov, t.f.d., prof. A.Qayumov, PhD, dots. Sh.Xudoyqulov, PhD, dots. Abdunazarov.

Ijtimoiy-gumanitar fanlar: s.f.d., prof. T.Fayzullayev, tar.f.d., prof. A.Rasulov. f.f.d., prof. M.Ismoilov, i.f.d., dots. N.Sotivoldiyev, t.f.n., dots. A.Isoqboyev, f.f.n., dots. O.Mamatov, t.f.n., dots. Z.Haydarov, PhD. J.Yuldashev, PhD. A.Abdullayev.

Pedagogika fanlari: p.f.d., prof. B.Xodjayev, p.f.d., prof. X.Najmiddinova, p.f.d., prof. T.Ismoilov, p.f.d., prof. S.Abdullayev. p.f.d., prof., M.Y.Sobirova, p.f.d., prof., R.Zamilova, p.f.d., prof. Sh.Xujamberdiyeva, p.f.d., dost. M.Asqarova, PhD, dots. M.Asranboyeva.

Filologiya fanlari: fil.f.d., prof. N.Uluqov, fil.f.d., prof. H.Usmanova, f.f.d., dots. X.Shokirova, p.f.n., dots. S.Misirov, p.f.n., dots. Sh.Ubaydullayev, PhD, dots. P.Lutfullayev, PhD, dots. M.Yakubbayev.

Texnik muharrir: R.Tursunov

Tahririyat manzili: Namangan shahri, Uychi ko'chasi, 316-uy.

Pochta indeksi: 160136, **Faks:** (0369) 227-27-21,

Email: Info@namspi.uz

"Ta'lim va taraqqiyot" ilmiy-uslubiy jurnali elektron to'plam sifatida O'zbekiston Respublikasi Prezidenti Administratsiyasi huzuridagi **Axborot va ommaviy kommunikatsiyalar agentligi (AOKA)ning 2022-yil 25-oktabrdagi № 045044 raqamli guvohnomasi** asosida chop etiladi. Jurnal **Oliy Attestatsiya komissiyasining 2024-yil 30-noyabrdagi (№ 364/5) yig'ilishi qaroriga asosan pedagogika fanlari bo'yicha falsafa fanlari doktori (PhD) va fan doktori (DSc) ilmiy darajasiga talabgorlarning dissertatsiya ishlari yuzasidan asosiy ilmiy natijalarini chop etish uchun tavsiya etilgan.** UDK: 37, Xalqaro standartlashtirish raqami (ISSN): 2992-9008.

Maqolalarning ilmiy saviyasi va keltirilgan ma'lumotlar uchun mualliflar javobgar hisoblanadi.

Cu(II) SULFAT VA 4-AMINOSALITSIL KISLOTA ASOSIDA OLINGAN KOMPLEKS BIRIKMANING KVANT-KIMYOVIY TAHLILI

M.R.Narimanova¹, Z.Sh Abdullayeva², Ch.A.Shermetova²

¹UrDTI "Tibbiy va biologik kimyo" kafedrası stajyor assistenti

²PhD, Urganch RANCH texnologiya universiteti, Urganch

Annotatsiya. Ushbu maqolada Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida olingan kompleks birikmaning kvant-kimyoviy xususiyatlari nazariy usullar yordamida o'rganildi. DFT hisoblashlari asosida kompleksning optimal molekulyar geometriyasi aniqlanib, uning elektron tuzilishi, Mulliken zaryad taqsimoti, HOMO–LUMO energiya orbitallari, molekulyar elektrostatik potensial (MEP) xaritasi hamda vibratsion chastotalari tahlil qilindi. Hisoblash natijalari kompleksning energetik jihatdan barqaror molekulyar tuzilishga ega ekanligini ko'rsatdi. 4-aminosalitsil kislota ligandining karboksil va aminoguruhlaridagi donor atomlar orqali Cu(II) ionlari bilan koordinatsion o'zaro ta'sir hosil qilishi aniqlandi. HOMO–LUMO tahlili kompleksning elektron donor-akseptor xususiyatlari va kimyoviy faolligi haqida ma'lumot berdi, MEP xaritasi esa molekuladagi elektrofil va nukleofil markazlarni aniqlash imkonini berdi. Vibratsion chastotalar tahlili ligandning funksional guruhlari koordinatsiyalanishi natijasida kuzatiladigan spektral o'zgarishlarni nazariy jihatdan tasdiqladi. Olingan natijalar Cu(II)–4-aminosalitsilat kompleksining elektron va strukturaviy xususiyatlarini chuqurroq tushunish hamda uning amaliy qo'llanilish imkoniyatlarini baholash uchun muhim nazariy asos bo'lib xizmat qiladi.

Kalit so'zlar: Cu(II) sulfat, 4-aminosalitsil kislota, mis(II) kompleksi, koordinatsion birikma, kvant-kimyoviy hisoblash, DFT, molekulyar geometriya, Mulliken zaryadlari, HOMO–LUMO, MEP, vibratsion tahlil.

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СЛОЖНОГО СОЕДИНЕНИЯ, ПОЛУЧЕННОГО ИЗ СУЛЬФАТА МЕ(II) И 4-АМИНОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Аннотация. В данной статье с использованием квантово-химических методов исследованы структурные и электронные свойства комплексного соединения, полученного на основе сульфата меди(II) и 4-аминосалициловой кислоты. На основе DFT-расчётов проведена оптимизация молекулярной геометрии комплекса, а также выполнен анализ распределения зарядов по Малликену, энергетических уровней HOMO–LUMO, молекулярного электростатического потенциала (MEP) и колебательных частот. Результаты расчётов показали, что исследуемый комплекс характеризуется энергетически стабильной молекулярной структурой. Установлено, что лиганд 4-аминосалициловой кислоты взаимодействует с ионами Cu(II) посредством донорных атомов функциональных групп, образуя координационные связи. Анализ HOMO–LUMO позволил оценить электронно-донорные и акцепторные свойства комплекса и его химическую активность, тогда как карта MEP позволила определить электрофильные и нуклеофильные центры молекулы. Анализ колебательных частот подтвердил

теоретически ожидаемые изменения, связанные с координацией функциональных групп лиганда. Полученные результаты имеют важное теоретическое значение для более глубокого понимания структурных и электронных свойств комплекса Cu(II) с 4-аминосалициловой кислотой и оценки перспектив его практического применения.

Ключевые слова: сульфат Cu(II) , 4-аминосалициловая кислота, комплекс меди(II), координационное соединение, квантово-химические расчёты, DFT, молекулярная геометрия, заряды Малликена, HOMO–LUMO, MEP, колебательный анализ.

QUANTUM-CHEMICAL ANALYSIS OF A COMPLEX COMPOUND OBTAINED FROM Cu(II) SULPHATE AND 4-AMINOSALICYLIC ACID

Abstract. In this study, the structural and electronic properties of a coordination compound obtained from copper(II) sulfate and 4-aminosalicylic acid were investigated using quantum-chemical methods. The molecular geometry of the complex was optimized using DFT calculations, followed by an analysis of Mulliken charge distribution, HOMO–LUMO energy levels, molecular electrostatic potential (MEP) mapping, and vibrational frequencies. The calculated results demonstrated that the investigated complex possesses an energetically stable molecular structure. It was established that the 4-aminosalicylic acid ligand interacts with Cu(II) ions through donor atoms of its functional groups, resulting in the formation of coordination bonds. The HOMO–LUMO analysis provided information on the electron-donor and electron-acceptor properties and chemical reactivity of the complex, while the MEP map enabled the identification of electrophilic and nucleophilic regions within the molecule. Vibrational frequency analysis theoretically confirmed the spectral changes associated with the coordination of the ligand functional groups. The obtained results provide an important theoretical basis for a deeper understanding of the structural and electronic properties of the Cu(II) –4-aminosalicylic acid complex and for evaluating its potential practical applications.

Keywords. Cu(II) sulfate, 4-aminosalicylic acid, copper(II) complex, coordination compound, quantum-chemical calculations, DFT, molecular geometry, Mulliken charges, HOMO–LUMO, MEP, vibrational analysis.

KIRISH

So'nggi yillarda metall komplekslarining kvant-kimyoviy tahlili ularning elektron tuzilishi, molekulyar geometriyasi, metall–ligand bog'lanish xususiyatlari va reaktivligini chuqur o'rganishda muhim ahamiyat kasb etmoqda. Ayniqsa, Cu(II) ionlari asosidagi koordinatsion birikmalar o'ziga xos elektron tuzilishi, turli koordinatsion geometriyalarni hosil qilishi hamda biologik va katalitik xususiyatlari bilan ajralib turadi. 4-Aminosalitsil kislota tarkibidagi karboksil, gidroksil va aminoguruhlarning donor

atomlari Cu(II) ionlari bilan koordinatsion bog'lar hosil qilishi mumkin. Shu nuqtayi nazardan, Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida hosil qilingan kompleks birikmaning elektron va strukturaviy xususiyatlarini kvant-kimyoviy usullar yordamida o'rganish muhim ilmiy va amaliy ahamiyatga ega.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODLAR

Kompleks birikmalar kimyosi zamonaviy koordinatsion kimyoning muhim yo'nalishlaridan biri bo'lib, yangi funksional materiallar, katalizatorlar, biologik faol moddalar va farmatsevtik preparatlar yaratishda keng qo'llaniladi [1–3]. So'nggi yillarda Cu(II) asosidagi kompleks birikmalar turli xil organik ligandlar bilan sintez qilinib, ularning strukturaviy, elektron, katalitik va biologik xususiyatlari keng tadqiq etilmoqda [4,5].

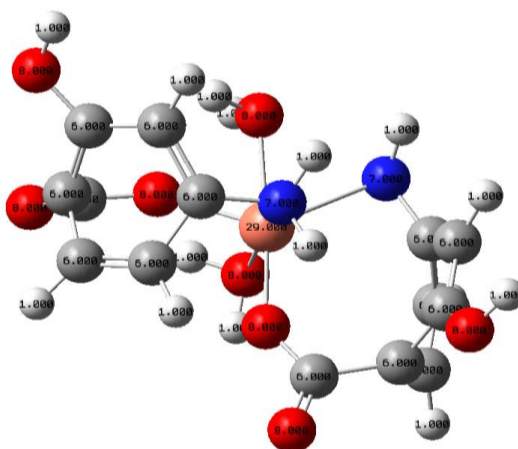
4-Aminosalitsil kislota tarkibida karboksil, gidroksil va aminoguruhlarning mavjudligi sababli metall ionlari bilan turli xil koordinatsion birikmalar hosil qilish imkoniyatiga ega ko'p funksional ligand hisoblanadi [6]. Ligand tarkibidagi kislorod va azot atomlari donor markazlar sifatida ishtirok etib, Cu(II) ionlari bilan koordinatsion bog'lar hosil qilishi mumkin. Shu sababli 4-aminosalitsil kislota asosidagi mis(II) komplekslarining tuzilishi va elektron xususiyatlarini o'rganish koordinatsion kimyo nuqtayi nazaridan muhim ahamiyatga ega [7].

So'nggi tadqiqotlarda kvant-kimyoviy hisoblash usullari, xususan, DFT, Mulliken zaryad taqsimoti, frontier molekulyar orbitallar va molekulyar elektrostatik potensial (MEP) tahlillari kompleks birikmalarning energetik barqarorligi, elektron tuzilishi va reaktivligini baholashda samarali usullar sifatida qo'llanilmoqda [8–10]. Ushbu usullar yordamida metall–ligand o'zaro ta'sirining tabiati, elektron zichlikning molekula bo'ylab taqsimlanishi hamda reaksiya markazlarning xususiyatlarini nazariy jihatdan aniqlash mumkin. Shu nuqtayi nazardan, Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida olingan kompleks birikmaning kvant-kimyoviy tahlili uning molekulyar va elektron tuzilishini chuqurroq tavsiflash imkonini beradi.

Tadqiqot kvant-kimyoviy hisoblash usullari asosida amalga oshirildi. Kompleksning molekulyar geometriyasini optimallashtirish, elektron zichlik taqsimotini aniqlash va frontier molekulyar orbitallarni tahlil qilish DFT (Density Functional Theory) usuli yordamida bajarildi. Hisoblashlarda B3LYP funksionali va mos bazis to'plamidan foydalanildi. Olingan natijalar asosida kompleksning optimallashtirilgan molekulyar tuzilishi, HOMO va LUMO energiya qiymatlari hamda ular orasidagi energetik farq, Mulliken atom zaryadlari, molekulyar elektrostatik potensial (MEP) xaritasi va elektron zichlik kontur diagrammalari aniqlandi [11]. Mazkur parametrlar kompleksning energetik barqarorligi, elektron donor-akseptor xususiyatlari va ehtimoliy reaktiv markazlarini baholashda asosiy mezon sifatida qo'llanildi.

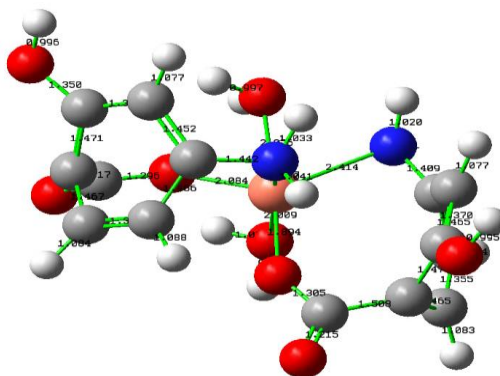
NATIJALAR VA MUHOKAMA

Kvant-kimyoviy hisoblash natijalariga ko'ra, Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida hosil bo'lgan kompleks birikmaning optimallashtirilgan geometrik tuzilishi aniqlandi. Molekuladagi atomlarning qisman zaryadlari tahlil qilinib, markaziy Cu(II) ioni atrofida elektron zichligining qayta taqsimlanishi kuzatildi [12]. Bu holat 4-aminosalitsil kislota tarkibidagi donor atomlar bilan Cu(II) ioni o'rtasida donor-akseptor tipidagi elektron o'zaro ta'sir mavjudligini ko'rsatadi. Kompleksning optimallashtirilgan geometrik tuzilishi va undagi elektron zichlikning taqsimlanishi 1-rasmda keltirilgan.

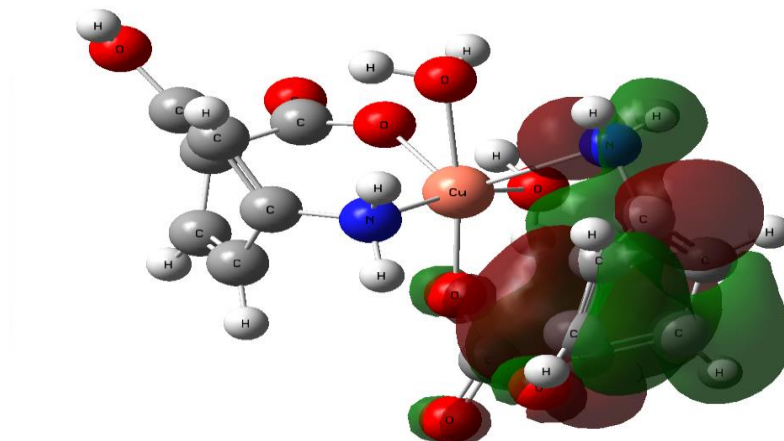


1-rasm. Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida hosil qilingan kompleksning elektron zaryad taqsimoti (Mulliken usuli bo'yicha)

Optimallashtirilgan kompleksning 3D modeli va molekulararo vodorod bog'lanishlari 2-rasmda keltirilgan. 4-Aminosalitsil kislota ligandining karboksil va gidroksil guruhlaridagi kislorod atomlari, shuningdek aminoguruhdagi azot atomi orqali markaziy Cu(II) ion bilan koordinatsion o'zaro ta'sir hosil qilishi aniqlandi. Hisoblash natijalariga ko'ra, Cu–O va Cu–N bog'larining geometrik parametrlari kompleksda metall–ligand o'zaro ta'sirining mavjudligini tasdiqlaydi. Mazkur bog'larning uzunligi va elektron zichlik taqsimoti Cu(II) ion bilan 4-aminosalitsil kislota ligandining donor atomlari o'rtasidagi ion-kovalent xarakterdagi koordinatsion bog'lanishni ko'rsatadi (2-rasm).

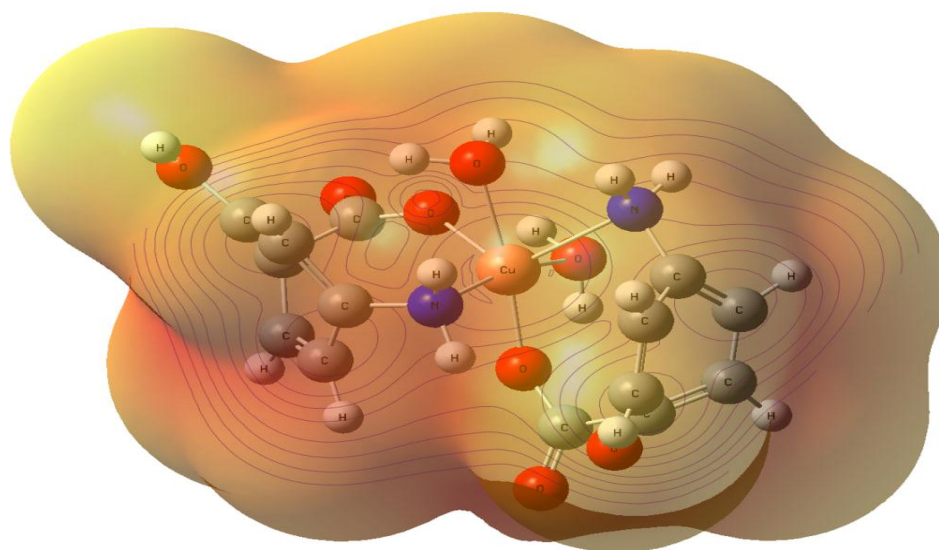


2-rasm. Kompleks birikmaning optimallashtirilgan molekulyar geometriyasi va bog' uzunliklari



3-rasm. Molekulyar orbitalar (HOMO va LUMO) ko'rinishi

Kompleks birikmaning molekulyar orbitalari HOMO va LUMO taqsimoti rasmda keltirilgan. Hisoblash natijalariga ko'ra, HOMO asosan 4-aminosalitsil kislota ligandining donor atomlari, xususan kislorod va azot atomlari atrofida elektron zichligining yuqori ekanligini ko'rsatadi. LUMO esa markaziy Cu(II) ion va unga yaqin molekulyar sohada joylashgan. HOMO va LUMO orbitalarining fazoviy taqsimoti ligand va metall markazi o'rtasida elektron zichlikning qayta taqsimlanishi mavjudligini ko'rsatadi. Ushbu natijalar kompleksda liganddan metall markaziga elektron o'tish ehtimoli mavjudligini va Cu(II)–4-aminosalitsil kislota tizimida donor–akseptor tipidagi elektron o'zaro ta'sir shakllanganligini ko'rsatadi (3-rasm).



4-rasm. Molekulyar elektrostatik potentsial (MEP) taqsimoti, kompleksning to'liq energiya spektri (orbital energiyalarining taqsimlanishi)

Molekulaning molekulyar elektrostatik potentsial (MEP) taqsimoti 4-rasmda keltirilgan. MEP xaritasida qizil rang elektron zichligi yuqori bo'lgan sohalarni, ko'k rang esa elektron yetishmovchiligi kuzatiladigan hududlarni ifodalaydi. Elektron zichligi yuqori bo'lgan qizil sohalar, asosan, 4-aminosalitsil kislota ligandining kislorod va azot atomlari atrofida kuzatilib, ushbu qismlar nukleofil markazlar sifatida namoyon bo'ladi. Ko'k rang bilan ifodalangan sohalar esa elektron yetishmovchiligi yuqori bo'lgan elektrofil markazlarni bildiradi. Hisoblash natijalariga ko'ra, kompleksdagi eng katta

musbat elektrostatik potensial markaziy Cu(II) ioni yaqinida kuzatilib, uning elektronlarni qabul qilishga moyil elektrofil markaz sifatidagi xususiyatini ko'rsatadi. MEP xaritasi kompleks molekulasidagi elektron zichlikning fazoviy taqsimlanishi va ligand–metall o'rtasidagi elektrostatik o'zaro ta'sirlarni baholash imkonini beradi (4-rasm).

Elektron zichlikning kontur diagrammalari kompleks molekulasidagi elektronlarning fazoviy taqsimlanishini yaqqol ifodalaydi. Ayniqsa, markaziy Cu(II) ioni va u bilan koordinatsiyalangan kislorod hamda azot donor atomlari atrofida elektron zichlik konturlarining zich joylashishi metall–ligand o'zaro ta'sirining mavjudligini ko'rsatadi. Ushbu diagrammalar elektron zichlikning molekula bo'ylab qayta taqsimlanishini, orbitalararo o'zaro ta'sirni va koordinatsion bog'larning elektron tabiatini batafsil tavsiflash imkonini beradi. Natijalarga ko'ra, Cu(II) markazi bilan 4-aminosalitsil kislota ligandining donor atomlari o'rtasida sezilarli elektron o'zaro ta'sir mavjudligi hamda kompleksning barqaror koordinatsion tuzilishi shakllanganligi aniqlandi [15].

XULOSA

O'tkazilgan kvant-kimyoviy tadqiqotlar natijalariga ko'ra, Cu(II) sulfat va 4-aminosalitsil kislota asosida olingan kompleks birikma barqaror elektron va geometrik tuzilishga ega ekanligi aniqlandi. Mulliken zaryad tahlili markaziy Cu(II) ioni va 4-aminosalitsil kislota ligandining donor atomlari o'rtasida elektron zichlikning qayta taqsimlanishini ko'rsatdi. HOMO–LUMO tahlili kompleksning elektron tuzilishi va kimyoviy barqarorligini baholash imkonini berdi, MEP xaritasi esa molekuladagi elektrofil va nukleofil markazlarni aniqlashga xizmat qildi.

Vibratsion chastotalar tahlili kompleksning optimallashtirilgan geometrik tuzilmasi uchun xayoliy chastotalar mavjud emasligini ko'rsatib, uning energetik jihatdan barqaror holatda ekanligini tasdiqladi. Olingan natijalar Cu(II)–4-aminosalitsil kislota kompleksining elektron va strukturaviy xususiyatlarini nazariy jihatdan tavsiflash,

shuningdek, uning potensial biologik va katalitik xossalarini kelgusida chuqurroq o'rganish uchun ilmiy asos bo'lib xizmat qiladi.

ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. Housecroft C.E., Sharpe A.G. Inorganic Chemistry. 5th ed. – Harlow: Pearson, 2018. – 816 p.
2. Miessler G.L., Fischer P.J., Tarr D.A. Inorganic Chemistry. 5th ed. – Boston: Pearson, 2014. – 696 p.
3. Cotton F.A., Wilkinson G., Murillo C.A., Bochmann M. Advanced Inorganic Chemistry. 6th ed. – New York: Wiley-Interscience, 1999. – 1376 p.
4. Kumar S., Dhar D.N., Saxena P.N. Applications of metal complexes of Schiff bases – A review // Journal of Scientific & Industrial Research. – 2009. – Vol. 68. – P. 181–187.
5. Sigel H., Sigel A. Metal Ions in Biological Systems: Copper and Its Role in Biology. – New York: Marcel Dekker, 1983.
6. Várnagy K., Sóvágó I. Biological aspects of copper coordination chemistry // Journal of Coordination Chemistry. – 1998. – Vol. 45. – P. 1–19.
7. Silverstein R.M., Webster F.X., Kiemle D.J., Bryce D.L. Spectrometric Identification of Organic Compounds. 8th ed. – Hoboken: Wiley, 2014. – 464 p.
8. Parr R.G., Yang W. Density-Functional Theory of Atoms and Molecules. – New York: Oxford University Press, 1989. – 333 p.
9. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange // The Journal of Chemical Physics. – 1993. – Vol. 98. – P. 5648–5652.
10. Lee C., Yang W., Parr R.G. Development of the Colle–Salvetti correlation-energy formula into a functional of the electron density // Physical Review B. – 1988. – Vol. 37. – P. 785–789.
11. Stephens P.J., Devlin F.J., Chabalowski C.F., Frisch M.J. Ab initio calculation of vibrational absorption and circular dichroism spectra using density functional force fields // The Journal of Physical Chemistry. – 1994. – Vol. 98. – P. 11623–11627.
12. Mulliken R.S. Electronic population analysis on LCAO–MO molecular wave functions. I // The Journal of Chemical Physics. – 1955. – Vol. 23. – P. 1833–1840.
13. Mulliken R.S. Electronic population analysis on LCAO–MO molecular wave functions. II. Overlap populations, bond orders, and covalent bond energies // The Journal of Chemical Physics. – 1955. – Vol. 23. – P. 1841–1846.
14. Fukui K. Role of frontier orbitals in chemical reactions // Science. – 1982. – Vol. 218. – P. 747–754.
15. Murray J.S., Politzer P. The electrostatic potential: an overview // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2011. – Vol. 1. – P. 153–163.