# 2-(4,6-DIOKSO-1,3,5-TRIAZINAN-2-ILIDEN)GIDRAZINKARBOTIOAMIDNING ELEKTRON TUZILIŞI VA VANADIL IONI BILAN KOORDINATSIYALANIŞ MARKAZLARINI KVANT-KIMYOVIY BAHOLAŞ

**F.S.Aslonova**[1]

*1. Osiyo xalqaro universiteti öqituvçisi*

**Mas'ul muallif:** Aslonova Ferangiz Sadilloyevna, Osiyo xalqaro universiteti öqituvçisi.

Received: 10 Noyabr 2026
Accepted: 15 Noyabr 2026
Published: 20 Noyabr 2026

**Copyright:** © 2026 by the author(s). Licensee Buxoro xalqaro universiteti ilmiy axborotnomasi.

**Iqtibos uchun:** Aslonova, F. S. 2-(4,6-DIOKSO-1,3,5-TRIAZINAN-2-ILIDEN)GIDRAZINKARBOTIOAMIDNING ELEKTRON TUZILIŞI VA VANADIL IONI BILAN KOORDINATSIYALANIŞ MARKAZLARINI KVANT-KIMYOVIY BAHOLAŞ / F. S. Aslonova // Buxoro xalqaro universiteti ilmiy axborotnomasi. — 2026. — T. 11, № 2. — B. 45–49.

**Annotatsiya.** Maqolada sianur kislotasi hosilasi bölgan 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden)gidrazinkarbotioamid molekulasining tuzilişi va reaksion qobiliyati kvant-kimyoviy usullar yordamida baholangan. Molekula geometriyasi ChemOffice 2016 paketiga kiruvçi Chem3D 16.0 dasturida MM2 molekulyar mexanika usulida optimallaştirilib, sterik energiyaning taşkil etuvçilari aniqlandi. Atomlardagi effektiv zaryadlar kengaytirilgan Xyukkel usulida hisoblandi. Elektron ziçligi eng yuqori bölgan markazlar karbonil guruhlarining kislorod atomlari O(7) (−0.857) va O(9) (−0.859), tion guruhidagi oltingugurt atomi S(12) (−0.738) hamda azometin azot atomi N(8) (−0.503) ekanligi körsatildi. Olingan natijalar Pirsonning qattiq va yumşoq kislota-asoslar konsepsiyasi hamda tiosemikarbazon komplekslari böyiça adabiyot ma'lumotlari bilan soliştirildi. Tahlil asosida ligand vanadil ($VO^{2+}$) ioni bilan asosan N(8) atomi orqali boğlanişi va S(12) atomi bilan birga beş a'zoli xelat halqa hosil qilişi ehtimoli yuqori ekanligi asoslandi. Kalit sözlar: sianur kislotasi, tiosemikarbazon, kvant-kimyoviy hisoblaş, MM2, kengaytirilgan Xyukkel usuli, effektiv zaryad, donor markaz, vanadil ioni, kompleks hosil böliş.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ЭЛЕКТРОННОГО СТРОЕНИЯ И ЦЕНТРОВ КООРДИНАЦИИ С ИОНОМ ВАНАДИЛА 2-(4,6-ДИОКСО-1,3,5-ТРИАЗИНАН-2-ИЛИДЕН)ГИДРАЗИНКАРБОТИОАМИДА

**Аннотация.** В статье проведена квантово-химическая оценка строения и реакционной способности 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразинкарботиоамида - производного циануровой кислоты. Геометрия молекулы оптимизирована методом молекулярной механики ММ2 в программе Chem3D 16.0 (пакет ChemOffice 2016), определены составляющие стерической энергии. Эффективные заряды на атомах рассчитаны расширенным методом Хюккеля. Показано, что наибольшей электронной плотностью обладают атомы кислорода карбонильных групп O(7) (−0,857) и O(9) (−0,859), атом серы тионной группы S(12) (−0,738) и азометиновый атом азота N(8) (−0,503). Полученные результаты сопоставлены с концепцией жёстких и мягких кислот и оснований Пирсона и литературными данными о комплексах тиосемикарбазонов. На этой основе обоснована высокая вероятность координации лиганда с ионом ванадила ($VO^{2+}$) преимущественно через атом N(8) с образованием пятичленного хелатного цикла с участием атома S(12).

**Ключевые слова:** циануровая кислота, тиосемикарбазон, квантово-химический расчёт, ММ2, расширенный метод Хюккеля, эффективный заряд, донорный центр, ион ванадила, комплексообразование.

## QUANTUM-CHEMICAL EVALUATION OF THE ELECTRONIC STRUCTURE AND COORDINATION SITES OF 2-(4,6-DIOXO-1,3,5-TRIAZINAN-2-YLIDENE)HYDRAZINECARBOTHIOAMIDE WITH THE VANADYL ION

**Abstract.** The structure and reactivity of 2-(4,6-dioxo-1,3,5-triazinan-2-ylidene)hydrazinecarbothioamide, a cyanuric acid derivative, were evaluated by quantum-chemical methods. The molecular geometry was optimized with the MM2 molecular mechanics force field in Chem3D 16.0 (ChemOffice 2016), and the components of the steric energy were determined. Effective atomic charges were calculated by the extended Hückel method. The highest electron density was found on the carbonyl oxygen atoms O(7) (−0.857) and O(9) (−0.859), the thione sulfur atom S(12) (−0.738) and the azomethine nitrogen atom N(8) (−0.503). The results were compared with Pearson's concept of hard and soft acids and bases and with published data on thiosemicarbazone complexes. The analysis suggests that the ligand is most likely to bind the vanadyl ion ($VO^{2+}$) mainly through N(8), forming a five-membered chelate ring together with S(12).

**Keywords:** cyanuric acid, thiosemicarbazone, quantum-chemical calculation, MM2, extended Hückel method, effective charge, donor centre, vanadyl ion, complex formation.

Kiriş. Sönggi yillarda koordinatsion kimyoda köp dentatli organik ligandlar asosida biologik faol kompleks birikmalar olişga qiziqiş sezilarli darajada ortdi. Bunday ligandlar orasida tarkibida bir vaqtning özida azot, kislorod va oltingugurt donor atomlari bölgan tiosemikarbazonlar alohida örin tutadi. Ular d-metallar bilan barqaror xelatlar hosil qiladi, olingan komplekslar esa köpinça erkin ligandga qaraganda yuqoriroq antibakterial, ösmaga qarşi va virusga qarşi faollik namoyon etadi [1, 2].

Sianur kislotasi (1,3,5-triazinan-2,4,6-trion) va uning hosilalari ham ligand sifatida qiziqarli obyektlar hisoblanadi. Triazin halqasidagi uçta karbonil va uçta NH guruhi molekulaga bir neçta koordinatsion markaz hamda vodorod boğlari hosil qiliş imkonini beradi [3]. Halqadagi karbonil guruhlaridan biri tiosemikarbazid qoldiği bilan kondensatlanganda tarkibida ham triazin halqasi, ham tiosemikarbazon fragmenti bölgan 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden)gidrazinkarbotioamid hosil böladi (1-rasm). Bu modda D.I. Mendeleyev davriy sistemasidagi d-metallar bilan kompleks hosil qilişga moyil bölgani uçun uni d-metallarni aniqlaşda reagent sifatida hamda tibbiyot uçun istiqbolli kompleks birikmalar olişda qöllaş mumkin.

Vanadiy birikmalari, xususan vanadil ($VO2+$) ioni, ya'ni oksovanadiy(IV) komplekslari tibbiyot kimyosida faol örganilmoqda. Ularning insulinga öxşaş (qandli diabetga qarşi), ösmaga qarşi va parazitlarga qarşi ta'siri köplab tadqiqotlarda qayd etilgan [4–6]. Tiosemikarbazon ligandli oksovanadiy(IV) komplekslari sintez qilinib, ularning tuzilişi va biologik faolligi örganilgani ham ma'lum [7]. Ana şu ma'lumotlarga asoslangan holda biz ilmiy işimizda 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden)gidrazinkarbotioamidni $VO2+$ ioni bilan kompleks hosil qilişda ligand sifatida qöllaşni maqsad qildik.

Kompleks sintezini rejalaştirişdan oldin ligand molekulasidagi qaysi atom metall ioniga birinçi bölib «hujum» qilişini, boşqaça aytganda, reaksiya qaysi markazdan boşlanişini biliş muhim. Bu savolga nazariy javob topişning qulay yöli kvant-kimyoviy hisoblaşlardir [8, 9]. Işning maqsadi 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden)gidrazinkarbotioamid molekulasining fazoviy tuzilişini molekulyar mexanika usulida optimallaştiriş, atomlardagi effektiv zaryadlarni kengaytirilgan Xyukkel usulida hisoblaş va şu asosda ligandning ehtimoliy donor markazlarini aniqlaşdan iborat.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Tiosemikarbazonlarning metallar bilan koordinatsiyalanişiga oid ma'lumotlar T.S. Lobana va hammualliflarining şarhida keng umumlaştirilgan [1]. $R2C=N–NH–C(=S)–NH2$ tarkibli ligandlar köp hollarda metallga azometin azot atomi va oltingugurt atomi orqali boğlanib, beş a'zoli xelat halqa hosil qiladi. Bunda ligand neytral (tion) şaklda ham, NH protonini yöqotgan tiolat şaklda ham koordinatsiyalanişi mumkin. H. Beraldo va D. Gambino semikarbazon va tiosemikarbazonlarning farmakologik xossalarini tahlil qilib, metall bilan kompleks hosil bölganda ligandning lipofilligi va biologik faolligi köpinça ortişini qayd etgan [2].

Sianur kislotasi va sianuratlar kimyosi G.B. Seyfer şarhida tizimlaştirilgan bölib, unda sianur kislotasining tautomeriyasi, metallar bilan tuzlar va komplekslar hosil qilişi körib çiqilgan [3]. Buxoro davlat universitetida B.Ş. Ganiyev rahbarligidagi ilmiy guruh sianur kislotasining semikarbazid, moçevina va gidrazin hosilalari bilan hosil qilgan mahsulotlarini sintez qilib, ularni IQ-spektroskopiya va kvant-kimyo usullarida örganib kelmoqda [10, 11]. Masalan, sianur kislotasi semikarbazonining DFT (B3LYP) usulidagi hisoblari molekula barqarorligida olti a'zoli halqa hosil qiluvçi molekula içki vodorod boğlarining hissasi katta ekanini, modda şaroitga qarab turli donor atomlar orqali ligand vazifasini bajara olişini körsatgan [12]. Moçevina bilan almaşingan sianur kislotasi hosilalari uçun B3LYP/6-311G++(d,p) darajasida hisoblangan Malliken zaryadlari asosida halqa azoti va yon zanjir kislorodi iştirokida olti a'zoli xelat hosil bölişi taklif etilgan [13]. Şu birikmalarning biologik faolligi onlayn molekulyar doking va PASS dasturi yordamida başorat qilingan [14].

Hisoblaş usullari nuqtai nazaridan qaraganda, molekulyar mexanika (MM2) nisbatan yirik molekulalarning barqaror konformatsiyasini tez va yetarli aniqlikda topiş imkonini beradi [9, 15]. Atomlardagi zaryad taqsimotini baholaşda esa R. Hoffmann taklif etgan kengaytirilgan Xyukkel usuli keng qöllaniladi [16]. Bu usulda rezonans integrallari Volfsberg–Gelmgols yaqinlaşuvi böyiça topiladi [17], atom zaryadlari esa Malliken populyatsion tahlili asosida aniqlanadi [18].

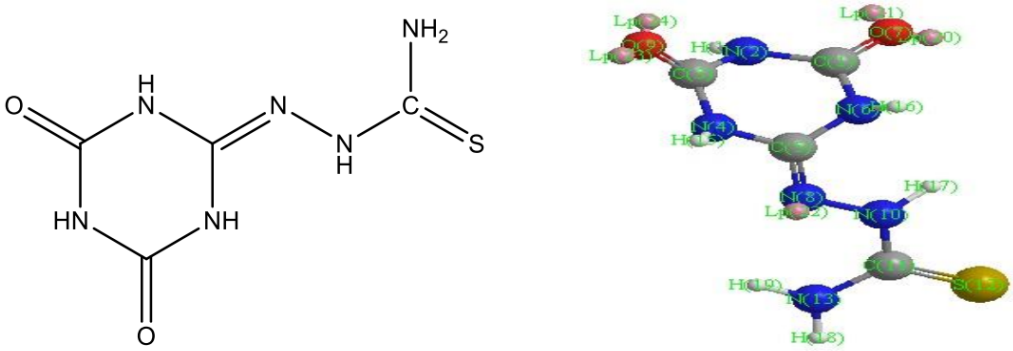
Ligand bilan metall ioni orasidagi özaro ta'sirni talqin qilişda R. Pirsonning qattiq va yumşoq kislota-asoslar konsepsiyasi muhim nazariy asos bölib xizmat qiladi [19]. Bundan taşqari, reaksion qobiliyatni çegara molekulyar orbitallar nazariyasi [20] va ziçlik funksionali nazariyasi doirasida kiritilgan Fukui funksiyalari [21] orqali ham baholaş mumkin. Mazkur işda asosiy mezon sifatida atom zaryadlari olindi.

Tadqiqot metodologiyasi. Tadqiqot obyekti sifatida sianur kislotasining tiosemikarbazid fragmentini tutgan hosilasi - 2-(4,6-diokso-1,3,5-triazinan-2-iliden)gidrazinkarbotioamid ($C4H6N6O2S$, M = 202.19 g/mol) olindi. Molekula tarkibida triazin halqasi, ikkita karbonil guruhi, azometin (C=N) boği, gidrazin NH guruhi hamda tioamid $–C(=S)–NH2$ fragmenti mavjud (1-rasm).

Hisoblaşlar ChemOffice 2016 dasturiy paketining Chem3D 16.0 dasturida bajarildi [8]. Molekulaning struktur formulasi dasturga kiritilgaç, uning geometriyasi MM2 kuç maydonida optimallaştirildi [15]. MM2 usulida sterik energiya boğlarning çözilişi, valent burçaklarning özgarişi, torsion, van-der-Vaals va dipol–dipol ta'sirlaşuvlari hissalarining yiğindisi sifatida topiladi:

Etotal = Estr + Ebend + Estr-bend + Etors + EVDW + Edip, (1)

MM2 hisoblari dasturning ikki rejimida, ya'ni «Minimize Energy» (energiyani minimallaştiriş) va «Compute Properties» (xossalarni hisoblaş) rejimlarida bajarildi. Şuni nazarda tutiş kerakki, MM2 sterik energiyasi termodinamik kattalik emas: u faqat bitta molekulaning turli konformatsiyalarini özaro soliştirişda ma'noga ega [9].



1-rasm. Molekulaning struktur formulasi (çapda) va MM2 usulida optimallaştirilgan fazoviy modeli (öngda)

Molekula tarkibidagi har bir atom atrofidagi elektron ziçlik qiymatlari kengaytirilgan Xyukkel usulida Chem3D 16.0 dasturi yordamida hisoblandi [10, 11]. Buning uçun dasturning holat satridan «Calculations» bandi tanlanib, «Extended Hückel» bölimining «Calculate Charges» bandi orqali buyruq beriladi va dastur atomlardagi effektiv zaryadlarni hisoblab beradi. Hisoblaşlar gaz fazasidagi yakkalangan molekula uçun, erituvçi ta'sirini hisobga olmagan holda bajarildi. Oğir atomlarning raqamlanişi 1-rasmdagi modelga mos keladi.

Tahlil va natijalar. MM2 usulida olingan sterik energiya taşkil etuvçilari 1-jadvalda keltirilgan. Har bir ustundagi taşkil etuvçilarning yiğindisi umumiy energiya qiymatiga töliq mos keladi, bu jadval ma'lumotlarining içki muvofiqligini körsatadi.

1-jadval.

Molekula sterik energiyasining taşkil etuvçilari (MM2, kkal/mol)

| Energiya taşkil etuvçisi | MM2 minimize energy usuli böyiça | MM2 compute properties usuli böyiça |
|---|---|---|
| Stretch (boğ çözilişi) | 0.0169 | 0.2103 |
| Bend (valent burçak özgarişi) | 17.0513 | 3.3477 |
| Stretch-Bend (aralaş had) | 0.0156 | −0.0055 |
| Torsion (torsion burçaklar) | 67.2738 | 8.7635 |
| Non-1,4 VDW (1,4 bölmagan VDW ta'siri) | −2.3857 | −2.6968 |
| 1,4 VDW (1,4 VDW ta'siri) | 0.4600 | −2.9663 |
| Dipole/Dipole (dipol–dipol ta'siri) | −9.5404 | −12.1779 |
| Total Energy (umumiy energiya) | 72.8915 | −5.5250 |

Jadvaldan körinib turibdiki, ikki rejimda olingan umumiy sterik energiya qiymatlari bir-biridan keskin farq qiladi: 72.8915 va −5.5250 kkal/mol. Ular orasidagi 78.42 kkal/mol farqning asosiy qismi torsion taşkil etuvçiga töğri keladi: uning qiymati 67.2738 dan 8.7635 kkal/molgaça, ya'ni 58.51 kkal/molga kamaygan, bu umumiy farqning qariyb 74.6 % ini taşkil etadi. Ikkinçi örinda valent burçaklar deformatsiyasi turadi (17.0513 → 3.3477 kkal/mol, farq 13.70 kkal/mol yoki 17.5 %). Demak, farq boğ uzunliklari bilan emas, molekula konformatsiyasining özgarişi bilan boğliq.

Boğ uzunliklari bilan boğliq hissa (Stretch) ikkala holatda ham juda kiçik (0.0169 va 0.2103 kkal/mol). Bu boğ uzunliklari kuç maydonidagi muvozanat qiymatlariga yaqin ekanini bildiradi. Dipol–dipol ta'sirlaşuv energiyasi ikkala holatda ham manfiy bölib, −9.5404 dan −12.1779 kkal/molgaça kamayadi. Bu qutbli C=O, C=S va N–H boğlarining fazoda özaro qulayroq joylaşganini körsatadi. Sianur kislotasi semikarbazoni uçun DFT usulida aniqlangan molekula içki vodorod boğlarini [12] hisobga olsak, bu yerda ham şunga öxşaş ta'sirlaşuvlar molekulani barqarorlaştirişi ehtimoldan xoli emas. Umumiy sterik energiyaning manfiy qiymati (−5.5250 kkal/mol) molekulaning tegişli konformatsiyasida içki kuçlaniş deyarli yöqligini va bu konformatsiya energetik jihatdan qulay ekanini körsatadi.

Kengaytirilgan Xyukkel usulida hisoblangan atom zaryadlari 2-jadvalda keltirilgan. Reaksion markazlar sifatida ajratilgan atomlar qalin harflar bilan berilgan.

2-jadval.

Atomlardagi effektiv zaryadlar (kengaytirilgan Xyukkel usuli)

| Atom | Zaryad, e | Atom | Zaryad, e |
|---|---|---|---|
| C(1) | 0.472 | N(10) | 0.249 |
| N(2) | 0.235 | C(11) | 0.201 |
| C(3) | 0.467 | S(12) | −0.738 |
| N(4) | 0.242 | N(13) | −0.065 |
| C(5) | 0.352 | H(14) | 0.099 |
| N(6) | 0.226 | H(15) | 0.095 |

| Atom | Zaryad, e | Atom | Zaryad, e |
|---|---|---|---|
| O(7) | −0.857 | H(16) | 0.099 |
| N(8) | −0.503 | H(17) | 0.085 |
| O(9) | −0.859 | H(18) | 0.099 |
| H(19) | 0.101 | | |

Jadvaldagi barça zaryadlarning yiğindisi nolga teng (musbat zaryadlar yiğindisi +3.022, manfiy zaryadlar yiğindisi −3.022), bu neytral molekula uçun kutilgan natija bölib, hisoblaşning töğriligini tasdiqlaydi. Manfiy zaryad beşta atomda töplangan: ikkita karbonil kislorod atomi O(7) va O(9) (−0.857 va −0.859), tion guruhidagi oltingugurt S(12) (−0.738), azometin azoti N(8) (−0.503) va tioamid guruhining NH2 azoti N(13) (−0.065). Qolgan barça oğir atomlar musbat zaryadlangan.

Uglerod atomlari orasida karbonil uglerodlari C(1) va C(3) eng katta musbat zaryadga ega (+0.472 va +0.467). Iliden uglerodi C(5) zaryadi biroz kiçikroq (+0.352), tiokarbonil uglerodi C(11) esa eng kiçik musbat zaryadga ega (+0.201). Buni oltingugurtning elektromanfiyligi kislorodnikidan ança past bölgani, şu sababli C=S boği C=O boğiga nisbatan kamroq qutblanganligi bilan izohlaş mumkin.

Halqadagi NH guruhlarining azot atomlari N(2), N(4), N(6) hamda gidrazin NH azoti N(10) musbat zaryadga ega (+0.226…+0.249). Bunday holat amid tipidagi azot atomlari uçun xos: ularning umumlaşmagan elektron jufti qöşni karbonil yoki tiokarbonil guruhi bilan tutaşib, azotning donorlik xossasi susayadi. Şu sababli neytral ligand holatida halqa azotlari va N(10) atomining metall bilan bevosita boğlanişi ehtimoli past. Kengaytirilgan Xyukkel usulida zaryadlar öz-özidan moslaştirilmagani uçun ularning mutlaq qiymatlari oşirib baholanişi mumkin [9, 16]. Şu bois biz asosiy e'tiborni zaryadlarning nisbiy taqsimotiga qaratdik.

Kvant-kimyoviy hisoblaşlar natijasida molekulada reaksiyada kimyoviy hujum boşlanişi ehtimoli yuqori bölgan qismlar O(7), N(8), O(9) va S(12) atomlari ekanligi aniqlandi. Ularning ligand sifatidagi rolini baholaşda faqat zaryad qiymatigina emas, balki atomlarning fazoviy joylaşuvi va hosil bölişi mumkin bölgan xelat halqaning ölçami ham hisobga olindi (3-jadval).

3-jadval.

Ligand molekulasidagi ehtimoliy donor markazlar

| Atom | Zaryad, e | Molekuladagi örni | Koordinatsiyadagi ehtimoliy roli |
|---|---|---|---|
| O(7) | −0.857 | C(1)=O karbonil guruhi kislorodi (triazin halqasi) | monodentat yoki köprik donor; N(8) va S(12) bilan xelat hosil qila olmaydi |
| O(9) | −0.859 | C(3)=O karbonil guruhi kislorodi (triazin halqasi) | O(7) ga öxşaş; molekulalararo vodorod boğlarida iştirok etadi |
| S(12) | −0.738 | C(11)=S tion guruhi oltingugurti | N(8) bilan birga beş a'zoli xelat; deprotonlanganda tiolat donor |
| N(8) | −0.503 | C(5)=N(8) azometin guruhi azoti | asosiy donor markaz |
| N(13) | −0.065 | tioamid NH2 guruhi azoti | donorlik xossasi kuçsiz |

Pirson konsepsiyasiga köra, VO2+ ioni qattiq Lyuis kislotasi bölib, kislorod va azot donorli ligandlarga moyil [4, 19]. Şu jihatdan qaraganda, eng katta manfiy zaryadga ega karbonil kislorod atomlari ham VO2+ bilan ta'sirlaşişi mumkin. Biroq O(7) va O(9) atomlari triazin halqasiga boğlangan bölib, ekzotsiklik C=O boğlari bir-biridan taxminan 120° burçak ostida taşqariga yönalgan. Şu sababli ular bitta metall ioni bilan xelat hosil qila olmaydi, yon zanjirdagi N(8) va S(12) atomlaridan ham uzoqda joylaşgan.

Yon zanjirdagi N(8) va S(12) atomlari esa metall ioni bilan M–N(8)–N(10)–C(11)–S(12) beş a'zoli halqani hosil qiladi. Beş a'zoli xelat halqalar burçak kuçlanişi kiçikligi tufayli eng barqaror halqalar qatoriga kiradi va tiosemikarbazonlar komplekslarida aynan şu N,S-koordinatsiya eng köp uçraydi [1, 2]. Oltingugurt Pirson tasnifida yumşoq asos hisoblansa-da, adabiyotlarda VO2+ ning tiosemikarbazonlar bilan oltingugurt atomi iştirokida hosil qilgan komplekslari tavsiflangan [6, 7]. Bunda xelat effekti va ligandning tion–tiol tautomeriyasi muhim rol öynaydi: N(10) atomidagi proton ajralganda manfiy zaryad N(10)–C(11)–S(12) fragmenti böylab taqsimlanadi va tiolat oltingugurti kuçli donorga aylanadi [1].

Şunday qilib, zaryad taqsimoti va geometrik omillar birgalikda körib çiqilganda, imin guruhidagi N(8) atomi metall ioni, xususan vanadil (VO2+) ioni bilan boğlanişda asosiy markaz bölişi, S(12) atomi bilan birgalikda esa ikki dentatli N,S-xelat hosil qilişi eng ehtimoliy hisoblanadi. Bu natija sianur kislotasining moçevina hosilalari uçun taklif etilgan, halqa azoti iştirok etadigan N,O-koordinatsiyadan [13] farq qiladi: tiosemikarbazid fragmentidagi oltingugurt atomi koordinatsiya markazini yon zanjirga köçiradi.

Qöllanilgan usullar elektron korrelyatsiyasi va erituvçi ta'sirini hisobga olmaydi, şu bois natijalar sifat xarakteriga ega. Keyingi bosqiçda DFT (B3LYP) usulida çegara orbitallar va Fukui funksiyalarini hisoblaş [20, 21], kompleksning IQ-spektrlarida ν(C=N) va ν(C=S) çastotalari siljişini tajribada tekşiriş maqsadga muvofiq.

Xulosa.

1. Chem3D 16.0 dasturida MM2 usulida örganilayotgan ligand molekulasining geometriyasi optimallaştirildi. Umumiy sterik energiyaning eng kiçik qiymati −5.5250 kkal/molni taşkil etdi, energiyaning kamayişi asosan torsion va burçak kuçlanişining pasayişi hisobiga yuz berdi.

2. Kengaytirilgan Xyukkel usulida hisoblangan zaryadlar böyiça molekulada kimyoviy hujumga eng moyil markazlar O(7) (−0.857), O(9) (−0.859), S(12) (−0.738) va N(8) (−0.503) atomlari ekanligi aniqlandi.

3. Zaryad taqsimoti, donor atomlarning fazoviy joylaşuvi va qattiq va yumşoq kislota-asoslar konsepsiyasi birgalikda tahlil qilinib, imin guruhidagi N(8) atomining metall, xususan vanadil ($VO2+$) ioni bilan kompleks hosil qilişda asosiy markaz bölişi va S(12) atomi bilan birga beş a'zoli N,S-xelat hosil qilişi ehtimoli yuqori ekanligi nazariy jihatdan asoslandi.

4. Olingan natijalar ligandning $VO2+$ bilan komplekslarini sintez qiliş şaroitlarini tanlaşda nazariy asos bölib xizmat qiladi.

**Foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati**

[1] Lobana T.S., Sharma R., Bawa G., Khanna S. Bonding and structure trends of thiosemicarbazone derivatives of metals – An overview // Coordination Chemistry Reviews. – 2009. – Vol. 253, № 7–8. – P. 977–1055.

[2] Beraldo H., Gambino D. The wide pharmacological versatility of semicarbazones, thiosemicarbazones and their metal complexes // Mini-Reviews in Medicinal Chemistry. – 2004. – Vol. 4, № 1. – P. 31–39.

[3] Seifer G.B. Cyanuric acid and cyanurates // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2002. – Vol. 28, № 5. – P. 301–324.

[4] Crans D.C., Smee J.J., Gaidamauskas E., Yang L. The chemistry and biochemistry of vanadium and the biological activities exerted by vanadium compounds // Chemical Reviews. – 2004. – Vol. 104, № 2. – P. 849–902.

[5] Thompson K.H., Orvig C. Vanadium in diabetes: 100 years from Phase 0 to Phase I // Journal of Inorganic Biochemistry. – 2006. – Vol. 100, № 12. – P. 1925–1935.

[6] Costa Pessoa J., Etcheverry S., Gambino D. Vanadium compounds in medicine // Coordination Chemistry Reviews. – 2015. – Vol. 301–302. – P. 24–48.

[7] Saswati, Adão P., Majumder S., Dash S.P., Roy S., Kuznetsov M.L., Costa Pessoa J., Gomes C.S.B., Hardikar M.R., Tiekink E.R.T., Dinda R. Synthesis, structure, solution behavior, reactivity and biological evaluation of oxidovanadium(IV/V) thiosemicarbazone complexes // Dalton Transactions. – 2018. – Vol. 47. – P. 11358–11374.

[8] ChemOffice // CambridgeSoft [Electronic resource]. – Mode of access: http://www.cambridgesoft.com/software/details/?ds=1. – Date of access: 22.11.2010.

[9] Соловьев М.Е., Соловьев М.М. Компьютерная химия. – М.: Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

[10] Ganiyev B., Ostonov F., Kholikova G., Salimov F. Calculations of quantum chemical parameters of the compound of isocyanuric acid with semicarbazide // International Independent Scientific Journal. – 2020. – Vol. 2, № 16. – P. 3–9.

[11] Ганиев Б.Ш., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Синтез и исследование методами ИК-спектроскопии и квантовой химии 6-((2,4-динитрофенил)гидразон-1,3,5-триазинан-2,4-диона // Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн. – 2020. – № 6(72). – URL: http://7universum.com/ru/nature/archive/item/9514

[12] Ганиев Б.Ш., Аслонова Ф.С. Исследования глобальных дескрипторов и реактивности семикарбазона циануровой кислоты с использованием DFT // Journal of Science, Research and Teaching. – 2023. – Vol. 2, № 5. – P. 124–133.

[13] Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Ашуров Ж.М., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. Изучение координационных свойств мочевино замещенных продуктов циануровой кислоты // Материалы Республиканской научно-практической конференции «Комплекс бирикмалар кимёсининг долзарб муаммолари». – Ташкент: НУУз, 2021. – С. 37–38.

[14] Ganiev B.Sh., Kholikova G.K., Aslonova F.S., Khozhiev S.T. Online molecular docking and analysis of biological activity of cyanuric acid derivatives // Universum: Chemistry and Biology. – 2022. – № 6(96). – DOI: 10.32743/UniChem.2022.96.6.13834.

[15] Allinger N.L. Conformational analysis. 130. MM2. A hydrocarbon force field utilizing V1 and V2 torsional terms // Journal of the American Chemical Society. – 1977. – Vol. 99, № 25. – P. 8127–8134.

[16] Hoffmann R. An extended Hückel theory. I. Hydrocarbons // The Journal of Chemical Physics. – 1963. – Vol. 39, № 6. – P. 1397–1412.

[17] Wolfsberg M., Helmholz L. The spectra and electronic structure of the tetrahedral ions $MnO4^-$, $CrO42^-$ and $ClO4^-$ // The Journal of Chemical Physics. – 1952. – Vol. 20, № 5. – P. 837–843.

[18] Mulliken R.S. Electronic population analysis on LCAO–MO molecular wave functions. I // The Journal of Chemical Physics. – 1955. – Vol. 23, № 10. – P. 1833–1840.

[19] Pearson R.G. Hard and soft acids and bases // Journal of the American Chemical Society. – 1963. – Vol. 85, № 22. – P. 3533–3539.

[20] Fukui K. Role of frontier orbitals in chemical reactions // Science. – 1982. – Vol. 218, № 4574. – P. 747–754.

[21] Parr R.G., Yang W. Density functional approach to the frontier-electron theory of chemical reactivity // Journal of the American Chemical Society. – 1984. – Vol. 106, № 14. – P. 4049–4050.