

**TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI
HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

XORAZM MA'MUN AKADEMIYASI

SAMANDAROV ELYORBЕК SHONAZAR O'G'LI

**QALAY GALOGENIDLARI VA KRAUN EFIRLARI ASOSIDAGI
NOCHIZIQLI OPTIK MATERIALLAR SINTEZI, TUZILISHI VA
XOSSALARI**

**02.00.01-Noorganik kimyo
02.00.04-Fizik kimyo**

**KIMYO FANLARI BO'YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Termiz – 2025

**Kimyo fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiya avtoreferati
mundarijasi**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по
химическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on chemical
sciences**

Samandarov Elyorbek Shonazar o‘g‘li

Qalay galogenidlari va kraun efirlari asosidagi nochiziqli optik materiallar
sintezi, tuzilishi va xossalari. 3

Самандаров Элёрбек Шоназар ўғли

Синтез, строение и свойства нелинейных оптических материалов на основе
галогенидов олова и краун-эфиров. 21

Samandarov Elyorbek Shonazar ugly

Synthesis, structure, and properties of nonlinear optical materials based on tin
halides and crown ethers. 41

E‘lon qilingan ishlar ro‘uxati

Список опубликованных работ

List of published works 45

**TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI
HUZURIDAGI ILMIY DARAJALAR BERUVCHI
DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

XORAZM MA'MUN AKADEMIYASI

SAMANDAROV ELYORBЕК SHONAZAR O'G'LI

**QALAY GALOGENIDLARI VA KRAUN EFIRLARI ASOSIDAGI
NOCHIZIQLI OPTIK MATERIALLAR SINTEZI, TUZILISHI VA
XOSSALARI**

**02.00.01-Noorganik kimyo
02.00.04-Fizik kimyo**

**KIMYO FANLARI BO'YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI**

Termiz – 2025

Kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2025.1.PhD/K919 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiyasi ishi Xorazm Ma'mun akademiyasida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, ingliz, rus (rezyume)) Ilmiy kengashning veb-sahifasida (www.ik-kimyo.nuu.uz) va "Ziyonet" Axborot-ta'lim portalida (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbarlar:

Yakubov Yo'ldosh Yusupboyevich
kimyo fanlari doktori, professor

Chellakarungu Balakrishnan
kimyo fanlari doktori, professor

Rasmiy opponentlar:

Raxmonova Dilnoza Salamovna
kimyo fanlari doktori, dotsent

Bekchanov Davron Jumanazarovich kimyo
fanlari doktori, professor

Yetakchi tashkilot:

Samarqand davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Termiz davlat universiteti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 raqamli Ilmiy kengashning 2025-yil «__» _____ soat ____ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 190111, Termiz shahri, Barkamol avlod ko'chasi, 43-uy. Tel.: (+99876) 221-74-55, faks: (+99876) 221-71 -17, e-mail:termizdu@umail.uz).

Dissertatsiya bilan Termiz davlat universitetining Axborot resurs markazida tanishish mumkin (№__raqami bilan ro'yxatga olingan). Manzil: 190111, Termiz shahri, Barkamol avlod ko' chasi, 43- uy. Tel.: (+99876) 221-74-55, faks: (+99876) 221-71 -17, e-mail: termizdu@umail.uz).

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil «__» _____ kuni tarqatildi.
(2025-yil «__» _____ dagi _____ raqamli reyestr bayonnomasi).

I.A. Umbarov
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy
kengash raisi, t.f.d., prof.

Sh.A. Kasimov
Ilmiy darajalar beruvchi
Ilmiy kengash kotibi, k.f.d., prof.

G.J. Muqumova
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy
kengash qoshidagi ilmiy
seminar raisi, k.f.d., dots.

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda dunyo miqyosida nochiziqli optik materiallarga bo'lgan talab jadal sur'atlar bilan o'sib bormoqda. Ushbu materiallar zamonaviy optoelektronika, fotonika, quyosh batareyalari, lazer texnologiyalari, optik ma'lumotlarni qayta ishlash, sensorlar, telekommunikatsiya va kvant hisoblash kabi sohalarda muhim ahamiyat kasb etmoqda. Ayniqsa, qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan kompleks birikmalar yuqori optik shaffoflik, nochiziqli optik effektlar va elektrokimyoviy xususiyatlarga ega bo'lib, ushbu sohalarda innovatsion yechimlar taqdim etadi. Shu munosabat bilan, qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida yangi nochiziqli optik materiallar sintezi hamda ularning xossalari tadqiq etish zamonaviy ilm-fan va sanoat uchun muhim ahamiyat kasb etadi.

Jahon miqyosida qalay galogenidlari va kraun efirlari kabi reaksiyon faol komponentlar bilan nochiziqli optik materiallar sintezi, ularning tarkibi, tuzilishi, optik va elektrokimyoviy xossalari hamda qo'llanilish sohasini aniqlashga yo'naltirilgan ilmiy-tadqiqot ishlari faol olib borilmoqda. Bu borada qalay galogenidlari va kraun efirlarining noyob kimyoviy va fizik xususiyatlaridan foydalangan holda maqsadli sintez jarayonlarini amalga oshirish, sintezning maqbul sharoitlarini aniqlash, olingan materiallarning kristall tuzilishini difraksion usullar yordamida isbotlash, ularning optik xossalari va nochiziqli effektlarini chuqur tahlil qilish, tadqiqotlar fotoluminessensiya spektral tadqiqotlar Z-scanerlash texnikasi kabi zamonaviy usullardan foydalangan holda materiallarning energiya zonasi tuzilishi hamda optik xususiyatlarini aniqlash qaratilgan.

Respublikamizda kimyo sanoatining yangi turdagi materiallar ishlab chiqarish yo'nalishida muhim natijalarga erishilmoqda. Shu jumladan, mahalliy bozorni import o'rnini bosuvchi reagentlar bilan ta'minlash bo'yicha keng ko'lamli ishlar amalga oshirilmoqda. O'zbekiston Respublikasini rivojlantirishning 2022-2026 yillarga mo'ljallangan "Yangi O'zbekistonning taraqqiyot strategiyasi" da "mahalliy xomashyo va ikkilamchi resurslardan import o'rnini bosuvchi mahsulotlar olish texnologiyalarini yaratish" ga yo'naltirilgan muhim vazifalar belgilangan. Bu borada yuqori optik shaffoflik, nochiziqli optik effektlar va elektrokimyoviy xususiyatlarga ega bo'lgan kompleks birikmalarni sintez qilish, ular asosida quyosh batareyalari va lazer texnologiyalarida ishlatiladigan yangi turdagi materiallar olish muhim ahamiyat kasb etadi.

O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son "2022-2026-yillarga mo'ljallangan Yangi O'zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to'g'risida"gi Farmoni va 2020-yil 12-avgustdagi PQ-4805-son "Kimyo va biologiya yo'nalishlarida uzluksiz ta'lim sifatini va ilm-fan natijadorligini oshirish chora-tadbirlari to'g'risida"gi, 2021-yil 13-fevraldagi PQ-4992-son "Kimyo sanoati korxonalarini yanada isloh qilish va moliyaviy sog'lomlashtirish, yuqori qo'shilgan qiymatli kimyoviy mahsulotlar ishlab chiqarishni rivojlantirish chora tadbirlari to'g'risida"gi Qarorlari hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa me'yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti natijalari muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi. Ushbu tadqiqot O‘zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalari rivojlanishining VII “Kimyo texnologiyalari va nanotexnologiyalar” ustuvor yo‘nalishi doirasida amalga oshirilgan.

Muammoning o‘rganilganlik darajasi Dunyoning yetakchi ilmiy markazlarida tarkibida azot atomi tutgan ligandlar bilan qalay tuzlari va kraun efirlari asosida nochiziqli optik materiallar sintez qilish, ularning fazoviy tuzilishi va optik xossalarini aniqlash borasida ko‘plab tadqiqotlar olib borilgan.

Xususan, Sofiane Bouacida, Rafika Bouchene, Fadila Berrah, C. Balakrishnan, G. Vinitha, SP. Meenakshisundaram, S. Belhaj Salah, Mohammed S.M. Abdelbaky, Elena A. Chulanova, Ekaterina A. Radiush, Mohamed M. Elsenety, Akram Mhiri, Firas Krichen, Abderrazek Oueslati kabi dunyo olimlarning ilmiy guruhlar va maktablari shug‘ullanishgan.

Mamlakatimizda nochiziqli optik materiallar birikmalarning sintezi, tuzilishi va xossalarini o‘rganish bo‘yicha tadqiqotlar akademiklar N.A.Parpiyev, B.T.Ibragimov, professorlar X.X.Xakimov, X.T.Sharipov, O.F.Xodjayev, T.A.Azizov, X.X.Turayev, Sh.A.Kadirova, Z.Ch.Kadirova, A.B.Ibragimov, J.M.Ashurov, Sh.A.Kasimov, Y.Y.Yakubov va boshqa olimlar tomonidan olib borilgan.

Xalqaro Kembrij kristallografik ma’lumotlar bazasi (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2025) tahliliga ko‘ra, bugungi kunga qadar nochiziqli optik materiallarni qalay xloridi asosida 363ta qalay bromidi asosida 108 ta kraun efirlari asosida 45 dan ortiq brikmalari sintez qilingan va o‘rganilgan.

Biroq, adabiyot manbalarini tahlil qilish natijasida shuni takidlash mumkinki, tarkibida azot donor atomlari bo‘lgan ligandlarning qalay galogenidlari va kraun efirlari bilan optik materiall birikmalari bo‘yicha keng ko‘lamda tajriba natijalari mavjud bo‘lsada, bu sohada hali ko‘plab muhim jihatlar yetarlicha o‘rganilmagan. Shuning uchun, tarkibida azot donor atomlari bo‘lgan ligandlar asosida yangi optik materiall birikmalarni sintez qilish, ularning fizik-kimyoviy xossalarini aniqlash va optik xossalarini o‘rganish ilmiy va amaliy jihatdan katta ahamiyatga ega.

Dissertatsiya mavzusining dissertatsiya bajarilgan oliy ta’lim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari bilan bog‘liqligi. O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasi Umumiy va noorganik kimyo instituti ilmiy tadqiqot ishlari rejasining AL-7623031231 raqamli, ”siklopentadienil temir dikarbonil dimer asosida uglerodli nanonaylar sintez qilish va ularni fizik-kimyoviy xususiyatlarini o‘rganish“ mavzusidagi fundamental loyiha (2024-2025-yil) doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida ligandlar 3-Asetilpiridin; 3-piridilmetanamin; metil izonikotinat; nikotinitril pikolinik kislota (2-piridinkarboksilik kislota); piridin-2-ilmetanamin bilan yangi nochiziqli optik materiallar sintez qilish, ularning kristall tuzilishi va optik xususiyatlarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

Qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida nochiziqli optik materiallarni sintez qilish;

Sintez qilingan nochiziqli optik materiallarning molekulyar va kristallografik tuzilishini zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari yordamida aniqlash;

Sintez qilingan nohiziqli optik materiallarning xususiyatlarini (ikkinchi va uchinchi tartibli nohiziqlilik, optik nur yutulishi va optik nur sinishi) Z-scanerlash xarakteristikasi orqali eksperimental ravishda aniqlash. Diffuz aks ettirish UB-spektroskopiya orqali Tauc diagrammasi hosil qilish va ularning nohiziqli optik xossalari o'zaro taqqoslash;

Sintez qilingan nohiziqli optik materiallarning dielektrik xususiyatlari aniqlash; RTT usuli bilan olingan nohiziqli optik materiallarning CIF faylidan foydalanib CrystalExplorer dasturi yordamida yangi sintez qilingan moddalarni Hirshfeld sirt tahlilini o'tkazish;

CIF faylidan foydalanib Vesta software Crystal structure dasturi yordamida markaziy kristallning bog' valentliklar yig'indisi, poligidral hajmlari, koordinatsion soni aniqlandi.

Tadqiqot ob'ekti sifatida qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida olingan ligandlar-3-asetilpiridin, 3-piridilmetanamin, metil izonikotinat, nikotinitril, pikolinik kislota, piridin-2-ilmetanamin hamda ular asosida sintez qilingan nohiziqli optik materiallar tanlab olingan.

Tadqiqotning predmeti Qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan nohiziqli optik materiallarni sintezi, kristall tuzilishi, kvant-kimyoviy parametrlari, fizik-kimyoviy va optik xossalari aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning usullari. Dissertatsiya ishida optik materiallarni tarkibi va tuzilishini aniqlashda rentgen tuzilish tahlili (RTT), element tahlili, IQ-spektroskopiya, termik (TG va DTA) tahlili, kvant-kimyoviy hisoblashlar va optik xususiyatlarini aniqlashda kukun xolatda diffuz aks ettirish UB-spektroskopiya, Z-scan texnikasi hamda dielektrik xossalarni aniqlash uchun LCR metr (IM3536) qurilmasi qo'llanilgan hamda CrystalExplorer 21.5, Mercury 4.1, Olex 2, Vesta, Ortep-3, Originpro-2024, Diamond, Gaussian-16 kabi hisoblash dasturlaridan foydalanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida 9 ta yangi kompleks birikmalar sintez qilingan, ulardan 6 tasi Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga kiritilib, 2464388, 2464389, 2465923, 2465924, 2344788, 2448617 depozit raqamlar olingan;

sintez qilingan $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$ tarkibli nohiziqli optik xususiyatli kompleks birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari rentgen tuzulish tahlil usuli yordamida aniqlangan;

Kraun efirlari asosida sintez qilingan optik xususiyatli kompleks birikmalardan $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$ sentrosimmetrik trigonal, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ sentrosimmetrik triklinik sistemada kristallanishi rentgen tuzulish tahlil usuli yordamida isbotlangan;

olingan kompleks birikmalar asosidagi optik materiallarning valentlik va o'tkazuvchanlik zonasi orasidagi energiya farqi Tauc diagrammasi yordamida aniqlangan hamda optoelektronik xususiyatlarining $\text{NLO-6} > \text{NLO-7} > \text{NLO-8} > \text{NLO-1} > \text{NLO-3} > \text{NLO-4} > \text{NLO-2} > \text{NLO-5}$ qatorida kamayib borishi isbotlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat;

qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan kompleks birikmalardan nochiziqli optik materiallar olishning maqbul sharoitlari aniqlangan;

olingan $[(C_{12}H_{24}O_6)(C_6H_9N_2)(I)]$ birikma nochiziqli optik material sifatida Z-scan usuli yordamida uchinchi darajali nochizililik parametrining qiymati $\chi^{(3)} = 2.4523 \times 10^{-7}$ ekanligi aniqlangan;

Sintez qilingan nochiziqli optik xossali kompleks birikmalarning kristallari termogravimetrik (TG) va differensial termik tahlil (DTA) natijasiga ko'ra 200 °C gacha termik barqarorligi aniqlangan;

olingan $[C_{12}H_{24}O_6(C_8H_{10}NO)_2(I)_2]$ va $[(C_{12}H_{24}O_6)(C_6H_9N_2)(I)]$ molekulyar kristall birikmalar asosidagi NLO-6 va NLO-7 nochiziqli optik materiallardan yuqori fotoeffekt xossali qiyosh sezgir elementlar olingan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi sintez qilingan nochiziqli optik materiallarning tarkibi, tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari zamonaviy tadqiqot usullari orqali tasdiqlangan. Jumladan, rentgen tuzilish tahlili (RTT), infraqizil spektroskopiya (IQ), termogravimetrik analiz (TGA), differensial termik analiz (DTA) yordamida materiallarning fizik-kimyoviy xossalari aniqlangan. Optik xususiyatlar kukun shaklida diffuz aks ettirish UB-spektroskopiya, Z-scan usuli yordamida, dielektrik xossalar esa LCR METER IM3536 qurilmasi yordamida zamonaviy tadqiqot texnikalari orqali isbotlangan.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan nochiziqli optik materiallarni sintez qilinganligi, ularning monokristallari ajratib olinganligi, kristall tuzilishlari, molekulararo ta'sirlashish energiyalari hamda kvant-kimyoviy parametrlarining aniqlanishi, shuningdek, fizik-kimyoviy xossalarining zamonaviy tahlil usullari yordamida aniqlanganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati sintez qilingan nochiziqli optik materiallarning kristallografik ma'lumotlari Kembrij kristallografik ma'lumotlar markaziga kiritilganligi taqdim etilgan ma'lumotlardan foydalanib o'xshash birikmalarni sintez qilishga va tuzilishini tavsiflashga, shuningdek, ahamiyati qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan nochiziqli optik materiallarni quyosh batareyalarida samarali ishlatishga xizmat qiladi.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi: Qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida sintez qilingan nochiziqli optik materiallarni tuzilishi va optik xossalari bo'yicha olingan natijalar asosida:

$[SnCl_6(H_2O)_2(C_6H_5N_2)_2]$, $[SnBr_6(C_6H_5N_2)_2(H_2O)_2]$, $[SnCl_6(C_6H_6NO_2)_2(H_2O)_2]$, $[SnBr_6(C_6H_6NO_2)_2(H_2O)_2]$, $[SnBr_6(C_7H_8NO_2)_2]$, $[C_{12}H_{24}O_6(C_8H_{10}NO)_2(I)_2]$, $[(C_{12}H_{24}O_6)(C_6H_9N_2)(I)]$, $[(C_{12}H_{24}O_6)_2(H_2O)_2(C_6H_9N_2)_2(I)_2]$, $[(C_{10}H_{20}O_5)(C_6H_9N_2)(I)]$ tarkibli yangi sintez qilingan nochiziqli optik materiallarni molekulyar va kristall tuzilishi haqidagi ma'lumotlari Kembrij kristallografik ma'lumotlar markazi (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrievihg.html>)da №2464388, №2464389, №2465923, №2465924, №2344788, №2448617 raqamlar bilan ro'yxatdan o'tkazilgan. Natijada, bazaga kiritilgan kimyoviy birikmalar haqidagi taqdim etilgan ma'lumotlar o'xshash birikmalarni sintez qilishda va ularning tuzilishini tavsiflashda foydalanish imkonini yaratgan;

olingan NLO-6 va NLO-7 optik materiallari Muborak gazni qayta ishlash zavodi MCHJ da quyosh batareyasi elementlari sifatida qo‘lanilgan (Muborak gazni qayta ishlash zavodi MCHJning 2025-yil 9-iyuldagi 964/G‘K-07-sonli ma’lumotnomasi). Natijada, sanoat quyosh batareyalarida qo‘llanilayotgan perovskit minerali asosidagi quyosh elementlarining o‘rmini bosuvchi, arzon va 22% gacha samaradorlikka ega organik bo‘lgan quyosh elementlarini olish imkonini bergan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Tadqiqot natijalari 14 ta, shu jumladan, 2 ta xalqaro va 10 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma’ruza qilingan va muhokamadan o‘tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e’lon qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha jami 22 ta ilmiy ish, shundan 8 tasi O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda (6 tasi respublika va 2 tasi xorijiy ilmiy jurnallarda) chop etilgan.

Dissertatsiyaning hajmi va tuzilishi. Dissertatsiya kirish, to‘rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati va ilovalardan iborat. Dissertatsiyaning umumiy hajmi 120 betni tashkil etadi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

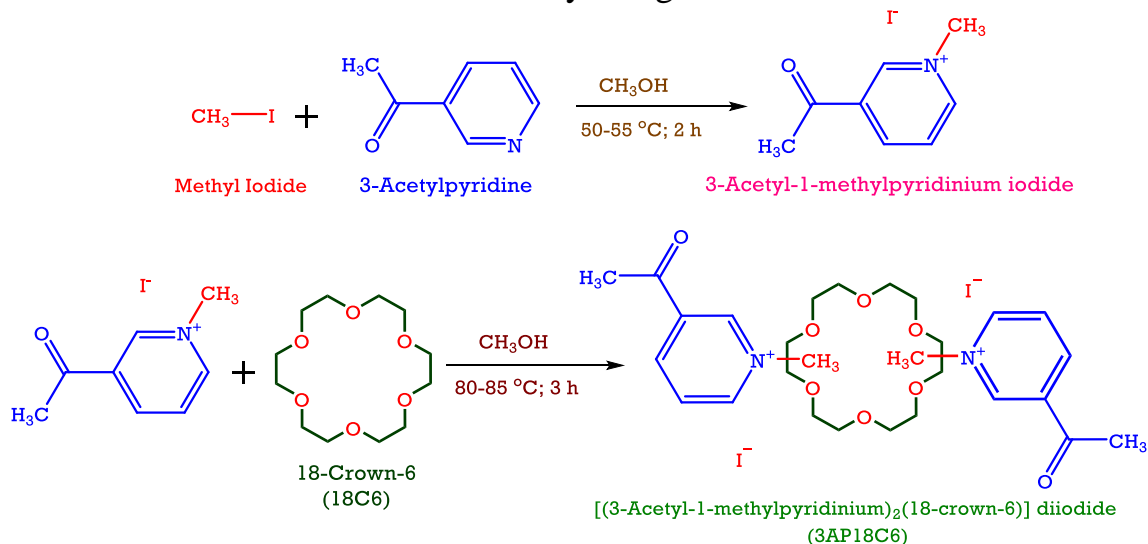
Kirish qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va muhimligi asoslab berilgan, tadqiqotning maqsad va vazifalari belgilangan, uning O‘zbekiston Respublikasida fan va texnologiyalarni rivojlantirishning ustuvor yo‘nalishlariga muvofiqligi ko‘rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari bayon qilingan, ularning ishonchliligi asoslangan, tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati ochib berilgan. Amaliyotga joriy qilish istiqboli borasida xulosalar chiqarilgan hamda chop ettirilgan ishlar va dissertatsiyaning tarkibi to‘g‘risida ma’lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“Tarkibida donor atomlari azot bo‘lgan ligandlarning qalay galogenidlari va kraun efirlari bilan optik materiallari ”** deb nomlangan birinchi bobida, qalay galogenidlari va kraun efirlari bilan optik materiallari birikmalarining sintezi, molekulyar va kristall tuzilishlari, shuningdek, ushbu komplekslarning fizik-kimyoviy xossalari va dielektrikligi va optik xossalari ilmiy adabiyotlar asosida tahlil qilingan. Shuningdek, kraun efirlarilarning optik materiallar hosil qiluvchi xossalarni namoyon qilishi hamda optoelektronika, fotonika, quyosh batareyalari, lazer texnologiyalari, optik ma’lumotlarni qayta ishlash, sensorlar, telekommunikatsiya va kvant hisoblash kabi sohalarda istiqbolli ekanligi ko‘rsatib berilgan

Dissertatsiyadaning **“Qalay galogenidlari va kraun efirlari asosidagi nohiziqli optik materiallar obyektlari, sintez jarayonlari va tadqiqot uslublari”** deb nomlangan ikkinchi bobida, tadqiqot doirasida foydalanilgan asboblar, optik materiallar sintezi, qo‘llanilgan fizik usullar (spektraskopik usullar, element tahlili, termik tahlil, RTT, Hirshfeld sirt yuzasi tahlili va boshq.) va Z-skanerlash usuli tavsiflangan, olingan amaliy natijalar keltirilgan.

(C₁₂H₂₄O₆(C₈H₁₀NO)₂(I)₂) birikmasining sintezi. [(3-atsetil-1-metilpiridin)₂·(18-kraun-6)] diyodid birikmasi erituvchi bug‘latish yordamida sintez qilindi. Dastlab, 3-atsetil-1-metilpiridiniy yodidni 3-atsetilpiridin va metil yodidning teng molli

aralashmasini metanol (30 ml) da etirib reaksiyaga kiritish orqali tayyorlandi. Reaksiya aralashmasi 50-55°C haroratda ikki soat davomida qaynatilib, oldindan tayyorlangan eritma hosil qilindi. Keyinchalik, 18-kraun-6 (1,0 mmol) va yangi sintez qilingan 3-atsetil-1-metilpiridiniy yodid (2,0 mmol) 1:2 mol nisbati bilan 20 ml metanolda eritildi. Olingan eritma 80-85°C haroratda 3 soat davomida qaynatilib, supramolekulyar optik materialning hosil bo'lishiga yordam berdi (pH=4,5). (sxemada keltirilgan). 20-22 kun davomida erituvchining sekin bug'lanishi natijasida kristallar olindi. Unum 75%. Sintez reaksiya tenglamasi:



Olingan optik materiallarni tarkibining element tahlili

№	Tarkib	Malek. massa (g/mo)	C % Hisoblangan (Topilgan):	H % Hisoblangan (Topilgan):	N % Hisoblangan (Topilgan)	O% Hisoblangan (Topilgan)
1	$\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2$	577.68	24.95 (24.86)	2.44 (2.36)	9.7 (9.66)	5.54 (5.44)
2	$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	844.38	17.07 (16.79)	1.67 (1.58)	6.64 (6.49)	3.79 (3.75)
3	$\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	615.68	23.41 (23.38)	2.62 (2.57)	4.55 (4.46)	15.59 (15.47)
4	$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	882.38	16.33 (16.21)	1.83 (1.80)	3.17 (3.08)	10.88 (10.74)
5	$\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2$	874.40	19.23 (19.17)	1.84 (1.81)	3.2 (3.11)	7.32 (7.23)
6	$\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2$	790.45	42.55 (42.24)	5.61 (5.57)	3.54 (3.43)	16.19 (16.08)
7	$(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})$	500.36	43.21 (43.03)	6.65 (6.54)	5.6 (5.55)	19.18 (19.04)
8	$(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2$	1034.74	41.71 (41.53)	6.81 (6.77)	5.4 (5.36)	21.6 (21.29)
9	$(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})$	456.31	42.11 (41.75)	6.41 (6.32)	6.14 (5.79)	17.53 (17.48)

1-jadval

Dissertatsiyaning “Olingan nochiziqli optik materiallarning kristall tuzilishlari va fizik-kimyoviy xossalari” deb nomlangan uchinchi bobida yangi sintez qilingan nochiziqli optik materiallar RTT, UB, IQ-spektroskopiya, termik usullar bilan tahlil qilindi. Optik materiallar kristall tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari aniqlanib, ma’lumotlar keltirildi.

NLO-3; NLO-4 optik materiallarning monokristall rentgen tuzilishi tahlili.

[SnCl₆(C₆H₆NO₂)₂(H₂O)₂]- (NLO-3) va [SnBr₆(C₆H₆NO₂)₂(H₂O)₂]- (NLO-4) molekulyar va kristall tuzilishini aniqlash imkonini berdi. Asosiy kristallografik malumotlar 2-jadvalda keltirilgan. Fazoviy tuzilishi oktaedr shaklda koordinatsion soni 6 ga teng. Ikkala birikma ham izostruktura xususiyatiga ega bo’lib, elementar yacheyka o’lchamlari bilan bir-biridan biroz farq qiladi va monoklinik sistemada kristallanadi. (NLO-3) optik materiall simmetrik $P2_1/c$, (NLO-4) birikma esa $P2_1/n$ fazoviy guruhda kristallanadi.

2-Jadval.

(NLO-3) va (NLO-4) uchun kristallografik ma’lumotlar

	(3)	(4)
Formula	C ₆ H ₈ Cl ₃ NO ₃ Sn _{0.50}	C ₆ H ₈ Br ₃ NO ₃ Sn _{0.5}
Mr (g/mol)	307.83	441.21
Temperatura (K)	273(2)	273(2)
To’lqin uzunligi (Å)	0.71073	0.71073
Kristal o’lchami (mm³)	0.11 x 0.12 x 0.15	0.10 x 0.10 x 0.14
Rangi	metallsimon oqish rangsiz	to’q sariq
Shakli	Blok	ignasimon
kristal panjarasi	Monoklinik	monoklinik
fazoviy guruh	$P2_1/c$	$P2_1/n$
a, b, c (Å)	9.0332(9), 9.2738(9), 13.4947(13)	7.7400(7), 8.8465(8), 17.2637(15)
α, β, γ (°)	90, 106.869(3), 90	90, 92.832(4), 90
Hajm (Å³)	1081.84(18)	1180.64(18)
CCDC	2465923	2465924

(NLO-3) da [SnCl₆]²⁻ va (NLO-4) da [SnBr₆]²⁻ anionlaridan tashkil topgan. Vodorod bog’lanishning batafsil parametrlari 3-jadvalda keltirilgan va 1-rasmda tasvirlangan. Birikma (NLO-3) da kationning karboksil kislotasi qismi kuchli O(1)-H(1)⋯Cl(2) vodorod bog’ini hosil qiladi, bunda H⋯A masofasi qisqa (2,34 Å) va deyarli chiziqli burchak 171°ni hosil qiladi. Protonlangan piridin halqasidagi azot (N1) qo’shni kislorod atomlari bilan vodorod bog’lanishida ishtirok etadi [N(1)-H(1A)⋯O(2) va N(1)-H(1A) ⋯O(3)], ikkinchisi deyarli chiziqli 162° burchakka ega. Suv molekulasida O(3) bir nechta xlorid akseptorlariga vodorod bog’ donori sifatida bog’langan. [O(3)-H(3A)⋯Cl(3), O(3)-H(3B)⋯Cl(1) va O(3)-H(3B)⋯Cl(3)].

NLO-4 brikmada O(1)-H(1)⋯O(3) o’zaro ta’siri juda qisqa H⋯A masofasiga (1,65 Å) va 174° burchakka ega bo’lib, bu ayniqsa kuchli vodorod bog’ini ko’rsatadi. N-H⋯O va N-H⋯Br o’zaro ta’sirlari [N(1)-H(1A)⋯O(2) va N(1)-H(1A) ⋯Br(3)] organik kation va noorganik anionni bog’laydi. Sn-Cl bog’ uzunliklari 2.4161(9) Å dan 2.4419(10) Å gacha o’zgaradi va Sn(1) uchta simmetriyaga ekvivalent Cl(1), Cl(2) va Cl(3) juftlari bilan koordinatsiyalanadi, (NLO-4) birikmasida esa mos Sn-Br bog’lari 2.5860(6) Å dan 2.6189(6) Å gacha o’zgaradi va Sn(1) analog Br(1), Br(2) va Br(3) ligandlari bilan o’ralgan. Turli galogen bo’lishiga qaramay, hisoblangan

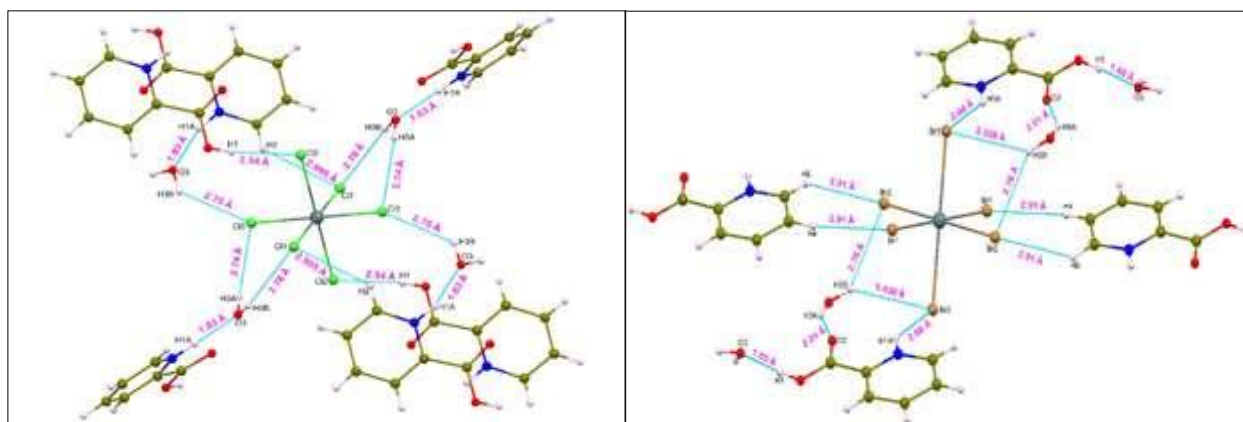
o'rtacha Sn–X bog' uzunligi ikkala tuzilmada ham 2.4290 Å da bir xil bo'lib, ikkala tuzilishda ham yaxshi muvozanatlangan koordinatsiya ko'rsatadi. Bundan tashqari, [SnCl₆]²⁻ va [SnBr₆]²⁻ birikmalari uchun poliedral hajmlar bir xil (19.1061 Å³). E'tiborlisi, bog' burchagi o'zgarishida farq kuzatiladi, bu (NLO-4) birikmasida 1.0641 Å² bo'lib, (NLO-3) birikmasidagi 0.1073 Å² ga nisbatan sezilarli darajada yuqori. Koordinatsiya sonlari deyarli bir xil bo'lib, (NLO-3) uchun 5.996 va (NLO-4) uchun 5.9945 qiymatlarga ega, bu ikkala holatda ham to'liq oktaedral koordinatsiyani tasdiqlaydi 4-jadvalda keltirilgan.

3-Jadval.

NLO-3 va NLO-4 optik materiallning vodorod bog'lanish uzunligi (Å) va burchaklari (°).

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	<(DHA)
(3)				
O(1)-H(1)...Cl(2)	0.82	2.34	3.157(3)	171
C(2)-H(2)...Cl(1)	0.93	2.995	3.675(4)	131
C(4)-H(4)...O(2)	0.93	2.637	3.307(5)	129
N(1)-H(1A)...O(2)	0.92(5)	2.31(4)	2.686(4)	104(3)
N(1)-H(1A)...O(3)	0.92(5)	1.83(5)	2.724(4)	162(4)
O(3)-H(3A)...Cl(3)	0.85	2.74	3.513(3)	152
O(3)-H(3B)...Cl(1)	0.85	2.78	3.511(3)	145
O(3)-H(3B)...Cl(3)	0.85	2.75	3.376(4)	132
(4)				
O(1)-H(1)...O(3)	0.90(5)	1.65(5)	2.546(4)	174(4)
N(1)-H(1A)...O(2)	0.86	2.30	2.654(4)	105
N(1)-H(1A)...Br(3)	0.86	2.66	3.397(4)	144
O(3)-H(3A)...O(2)	0.85	2.01	2.775(5)	149
O(3)-H(3B)...Br(2)	0.85	2.76	3.439(4)	138
O(3)-H(3B)...Br(2)	0.85	3.038	3.748(3)	142.5
C(4)-H(4)...Br(1)	0.93	2.91	3.828(5)	171
C(5)-H(5)...Br(2)	0.93	2.91	3.692(5)	143

Umumiy kristall qadoqlanishi organik va noorganik qismlarning parallel va tartibli joylashgan holda almashinadigan qatlamlarini ochib beradi, bu tasvirlangan.



1-rasm. Vodorod bog'lanish o'zaro ta'sirlari: (a) (NLO-3) birikmasi va (b) (NLO-4) birikmasi uchun.

Bog' valentlik yig'indisi tahlili. BVY qiymatlari 3.97 va 3.92 bo'lib, qalay markazlarining +4 oksidlanish holatini tasdiqlaydi, bu 5-jadvalda umumlashtirilgan tuzilish ma'lumotlarini keltirilgan. Molekulararo vodorod bog'lari molekularni tekisligiga parallel ravishda qatlamlarga birlashtiradi (2-rasm). NLO-5 molekularining qo'shni aromatik halqalari orasidagi $\pi \cdots \pi$ o'zaro ta'sirlarini ko'rsatadi.

4-Jadval

(NLO-3) va (NLO-4) birikmalar uchun polihedral parametrlari.

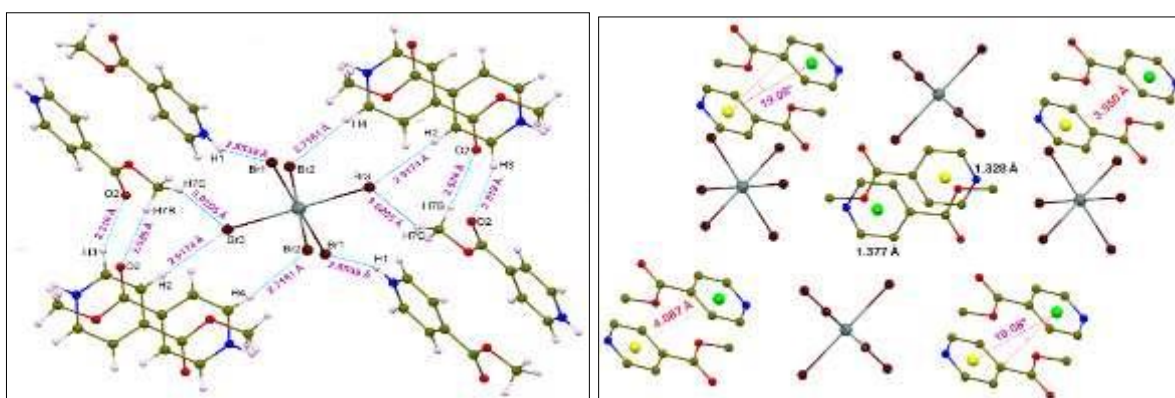
(3)	(4)	(4)
O'rtacha bog' uzunligi (Å).	2.4290	2.4290
Poligidral hajmi (Å ³)	19.1061	19.1061
Bog' uzunligi	0.00356	0.00356
Kvadratik cho'zilish	1.0001	1.0004
Bog' burchagi dispersiyasi (Å ²)	0.1073	1.0641
Kardinatsion soni	5.996	5.9945

5-Jadval

(NLO-3) va (NLO-4) birikmalarning valentlik yig'indisi.

NLO	K	Bog' masofalari (Å)						V = $\sum v_{ij}$
(NLO-3)	6	Sn(1)-Cl(1)	Sn(1)-Cl(1) ⁱ	Sn(1)-Cl(2)	Sn(1)-Cl(2) ⁱ	Sn(1)-Cl(3)	Sn(1)-Cl(3) ⁱ	3.97 *
		2.4161(10)	2.4161(10)	2.4419(9)	2.4419(9)	2.4288(9)	2.4288(9)	
(NLO-4)	6	Sn(1)-Br(1)	Sn(1)-Br(1) ⁱ	Sn(1)-Br(2)	Sn(1)-Br(2) ⁱ	Sn(1)-Br(3)	Sn(1)-Br(3) ⁱ	3.92 *
		2.6017(5)	2.6017(5)	2.5860(6)	2.5860(6)	2.6189(6)	2.6189(6)	

Ushbu o'zaro ta'sir uchun halqalar markazi-markazi masofasi 3.550 Å dan 4.087 Ågacha, burchak 19.08° ga teng va tekislik-tekislik masofasi 3.550 Å, gorizonta siljish $\pi \cdots \pi$ o'zaro ta'sir va xalqa orasidagi masofa 1.328 Å qatlamlarni uch o'lchamli tarmoq tuzilmasiga birlashtiradi.



2-rasm.NLO-5 ning vodorod bog'lari tarmog'i va $\pi \cdots \pi$ o'zaro ta'sirlari bilan molekulyar joylashuv.

SEM/EDS.-bu materiallarning sirt tuzilishi va elementar tarkibini tahlil qilish uchun qo'llaniladigan kuchli analitik usullar(NLO-1) va (NLO-2) birikmalarning sirt morfologiyasi va element tarkibi EDS o'rqli tekshirildi.3-rasm. Xlorid analogi bo'lgan (NLO-1) birikmaning 2700 va 5500 marta kattalashtirilgan tegishli EDS spektri asosiy tarkibiy elementlari-uglerod (C), azot (N), kislorod (O), xlor (Cl) va

Miller indeksleri(h,k,l) bo‘lib, bu cho‘qqi qaysi kristallografik g‘ovakka mos ekanini bildiradi.Grafikda turli cho‘qqilar modellashgan va tajriba natijalarida solishtiriladi.O‘rtacha kristallanish o‘lchami kukun rentgen difraksion taxlili natijasi asosida Schtirrer formulasiga asosan $D \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta}$ kristall o‘lchami 35.4 nmni kristall tozaligi 69%ni tashkil qiladi.

Z-scan xarakteristikasi.NLO-6 optik material uchinchi tartibli NLO Z-skanerlash orqali o‘rganildi.5-rasm. Bu usul materiallardagi nochiziqli sinish va nochiziqli yutilish ko‘rsatkichi,materialning intensivlikka bog‘liq sindirish xususiyatini aks ettiruvchi nochiziqli sindirish ko‘rsatkichi-(n₂) nochiziqli yutilish koeffitsiyenti-(β)aniqlash uchun Z-skanerlash ma‘lumotlaridan foydalanildi.Uchinchi tartibli nochiziqli qabul qiluvchanlikning haqiqiy va mavhum tarkibiy qismlarini, ya’ni Re(χ⁽³⁾) va Im(χ⁽³⁾)ni hisoblash uchun mavjud nazariy formulalarda qo‘llanildi.

$$\text{Re } \chi^3(esu) = 10^{-4} \frac{\epsilon_0 c^2 n_o^2}{\pi} n_2 \left(\frac{cm^2}{W} \right) \quad (1) \quad I_m \chi^3(esu) = 10^{-2} \frac{\epsilon_0 c^2 n_o^2 \lambda}{4\pi^2} \beta \left(\frac{cm}{W} \right) \quad (2)$$

ε₀ -vakuumdagi dielektrik singdiruvchanlik, c-yorug‘likning vakuumdagi tezligi va n₀ -esa moddaning chiziqli sindirish ko‘rsatkichi hisoblanadi

$$|\chi^3| = [(R_e(\chi^3))^2 + (I_m(\chi^3))^2]^{1/2} \quad (3)$$

Ushbu nochiziqli optik javoblar birgalikda birikmaning sezilarli uchinchi tartibli nochiziqli optik material ekanligini ko‘rsatadi.

6-jadval

Yangi kristallarining Z-skan xarakteristikasi natijalari.

	Reχ ⁽³⁾ (cm ² /W)	Imχ ⁽³⁾ (cm/W)	X ⁽³⁾ (esu)
NLO-8	6.6580x10 ⁻⁹	2.4514x10 ⁻⁷	2.4523x10 ⁻⁷
NLO-9	5.4449x10 ⁻⁹	3.0644x10 ⁻⁷	3.0649x10 ⁻⁷
NLO-6	5.9400x10 ⁻¹⁰	3.7800x10 ⁻⁹	3.8300 x10 ⁻⁹
NLO-1	4.6721x10 ⁻¹⁰	1.0603x10 ⁻⁹	1.1586 x10 ⁻⁹
NLO-2	9.0915x10 ⁻¹⁰	6.2131x10 ⁻⁹	6.2793 x10 ⁻⁹
NLO-3	7.2234x10 ⁻¹⁰	4.7828x10 ⁻⁹	4.8370 x10 ⁻⁹
NLO-4	7.7608x10 ⁻¹⁰	3.0855x10 ⁻⁸	3.0865 x10 ⁻⁸
NLO-5	4.9840x10 ⁻¹⁴	2.0036x10 ⁻⁹	2.0036x10 ⁻⁹

7-jadval

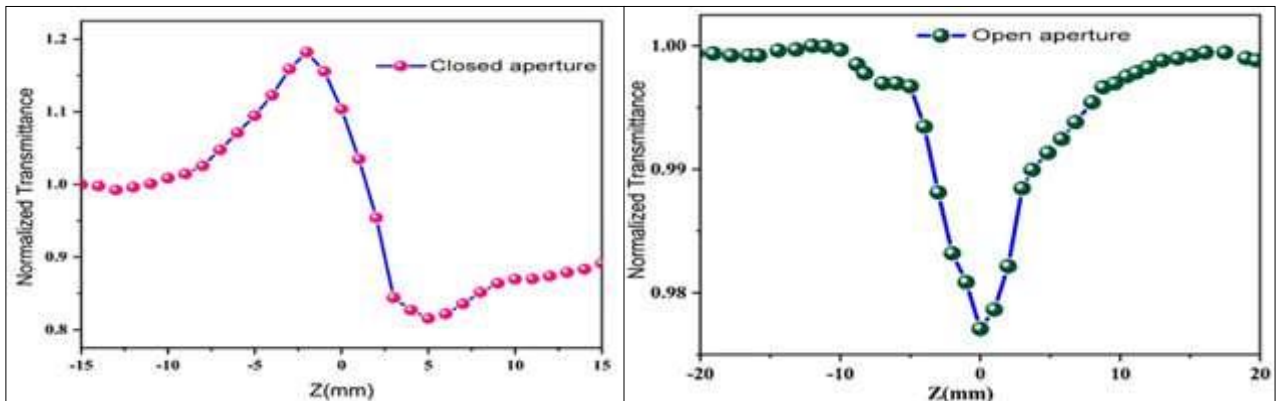
Kraun efiri asosida sintez qilingan nochiziqli optik materiallarni yangi NLO-6ning χ⁽³⁾ (esu)qiymatlari bo‘yicha taqqoslash.

Kraun efiri asosida sintez qilingan optik materiallar	χ ⁽³⁾ (esu)	Adabiyotlar
18C6·2(5-Nitroizoftal kislota monometil efiri) ·2(H ₂ O)	4.19x10 ⁻⁶	[45]
2(5-Aminoizoftal kislota)·18C6	5.98x10 ⁻⁶	[46]
2(5-amino-2,4,6-triyodoizoftal kislota) ·18C6·2(H ₂ O)	3.03x10 ⁻⁶	[47]
Bis (1-metilpiridin yodid) ·18C6	5.57x10 ⁻⁶	[21]
Bis (4-amino-1-metilpiridin-1-ium iodid) ·18C6	5.30x10 ⁻⁶	[21]
Bis (1,2-dimetilpiridin-1-ium yodid)·18C6	3.54x10 ⁻⁶	[22]
18C6·2(Trimezin kislotasi) ·2(H ₂ O)	3.34x10 ⁻⁷	[48]
18C6·6(5-Gidroksiizoftal kislota) ·10(H ₂ O)	1.81x10 ⁻⁷	[48]
[(3-atsetil-1-metilpiridinium) ₂ (18-kraun-6)] diyodid	3.83x10 ⁻⁹	NLO-6
[(15C5) ₄ Pc]In(OH)	1.34x10 ⁻⁹	[49]

Bu uni optik cheklash va fotonik kalitlash ilovalarida istiqbolli nomzod qiladi. Barcha sintez qilingan optik materiallarning Z-skan natijalari 6-jadvalda keltirilgan.

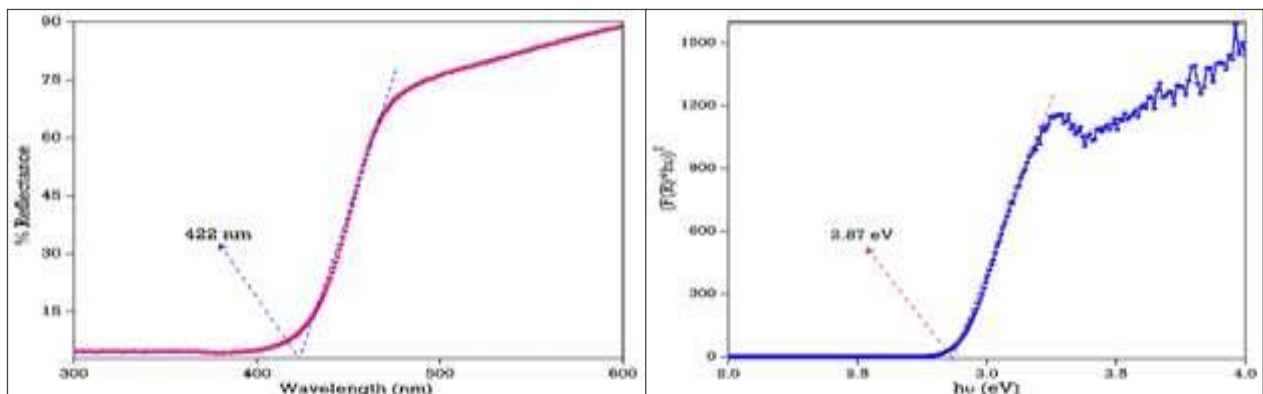
Uchinchi tartibli sezuvchanlikning haqiqiy va xayoliy qismlari, ya'ni, $\text{Re}(\chi^{(3)})$ va $\text{Im}(\chi^{(3)})$ mos ravishda $5,94 \cdot 10^{-10}$ esu va $3,78 \cdot 10^{-9}$ esu ni tashkil qiladi. Mutlaq $\chi^{(3)}$ qiymati $3,83 \cdot 10^{-9}$ esu deb hisoblanadi.

Bu qiymatlar odatda 10^{-15} dan 10^{-5} esu gacha bo'lgan ko'pgina an'anaviy materiallardan sezilarli darajada yuqori bo'lib, o'rganilgan birikmaning kuchli chiziqsiz optik javobini ta'kidlaydi. 7-jadvalda boshqa yuqori samarali kraun efriga asoslangan materiallar bilan taqqoslash keltirilgan, bu o'rganilgan kuchli NLO javobini ta'kidlaydi. Quyida berilgan ma'lumotlarga asoslanib, 18-kraun-6 (18C6) va boshqa kraun efrilariga asoslangan materiallarning uchinchi tartibli chiziqsiz optik sezuvchanlik $[\chi^{(3)}]$ qiymatlari qiyosiy tahlil qilinadi..



6-Rasm.NLO-6ning yopiq va ochiq aperturali Z-Skan egri chiziqlari.

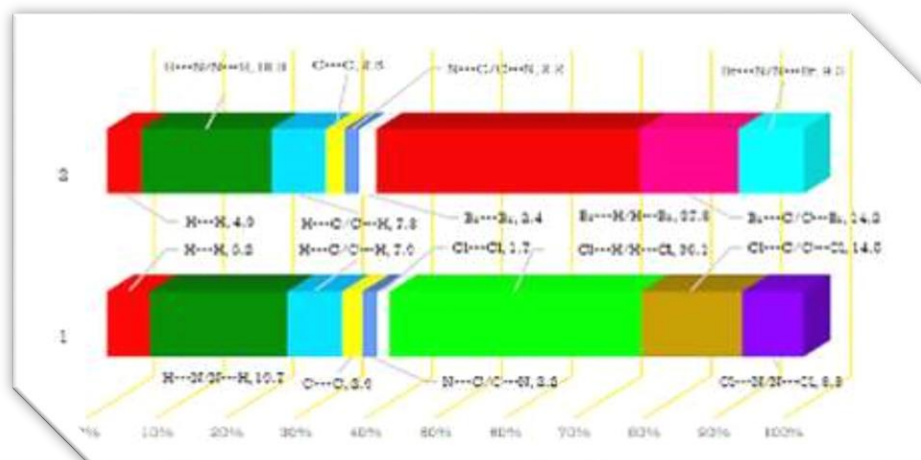
Tauc diagrammasi va UB-spektr - bu materialning optik energiya bo'shlig'ini (E_g) aniqlash uchun ishlatiladigan grafik usul bo'lib, odatda diffuz aks ettirish spektroskopiyasi (UB) ma'lumotlari asosida tuziladi. Tauc diagrammasi materialning Kubelka-Munk funksiyasi $F(R)$ va foton energiyasi ($h\nu$) o'rtasidagi bog'liqlikni ko'rsatadi. Energiya bo'shlig'ini aniqlash uchun Tauc tenglamasi qo'llaniladi. $ah\nu = A(h\nu - E_g)^2$ 422 nm atrofida reflektans keskin pasayadi-bu materialning UBda kuchli yutish boshlanishi hisoblanadi.300 nmdan 600 nmgacha oshadi, demak material ko'rish spektrida nisbatan shaffof, lekin UBda (422 nm) yutish boshlanadi.7-rasm. Tauc-plotda 2.87 eV (-322 nm) band gap qiymatiga ega.NLO-6 ning yarimo'tkazgich xususiyatiga ega ekanligini ko'rsatadi.



7-rasm.NLO-6 ning UB-spektr va optik zona kengligi spektri (Tauc).

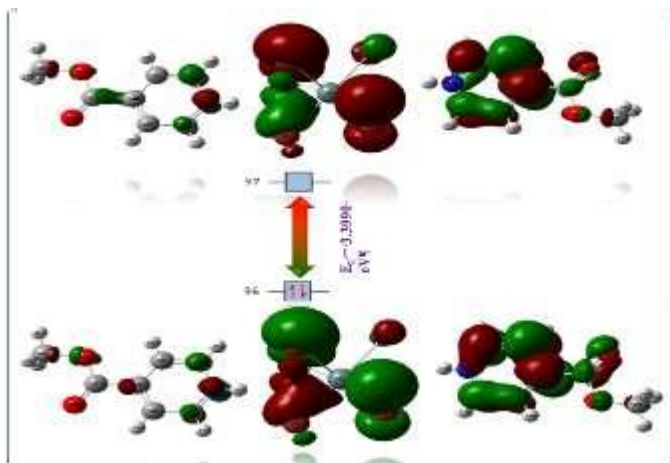
Olingan optik materiallarni Hirshfeld sirt yuzasi tahlili.

Barcha sintez qilingan optik materiallarni Hirshfeld sirt yuzalari va xaritalari o'rganildi. To'liq disertatsiyada keltirilgan. 8-rasmda NLO-1 va NLO-2ning barmoq izi sohasi. 8-rasmda keltirilgan.



8-rasm.
(NLO-1, NLO-2)
Hirshfeld yuzaning
shakillanishiga
atomlararo
ta'sirlarning hissasi.

NLO-5 nohiziqli optik materiallarning DFT tahlili. Molekulyar orbital diagrammi molekuladagi elektronlarning energiya darajalarini ko'rsatadi. Yuqoridagi vertikal o'q elektronlar egallagan eng yuqori to'ldirilgan orbital (HOMO) va eng past to'ldirilmagan orbital (LUMO) orasidagi farqni - ya'ni "frontier" orbitallarni (HOMO va LUMO) belgilaydi. Kimyoviy qattqlik, yumshoqlik, molekula faolligi va barqarorligini foydali ko'rsatkichlari hisoblanadi. Diagrammada ko'rsatilgan 96-97 raqamli energiya darajalari, rangli gradient bilan ifodalangan, ularning orasidagi energiya farqi $E_g = 3.3990$ eV bo'lib, bu HOMO-LUMO energiya bo'linmasini bildiradi. Bunday farq molekulaning optik va elektr xususiyatlarini, yorug'likni yutish yoki elektr o'tkazuvchanligini belgilaydi.



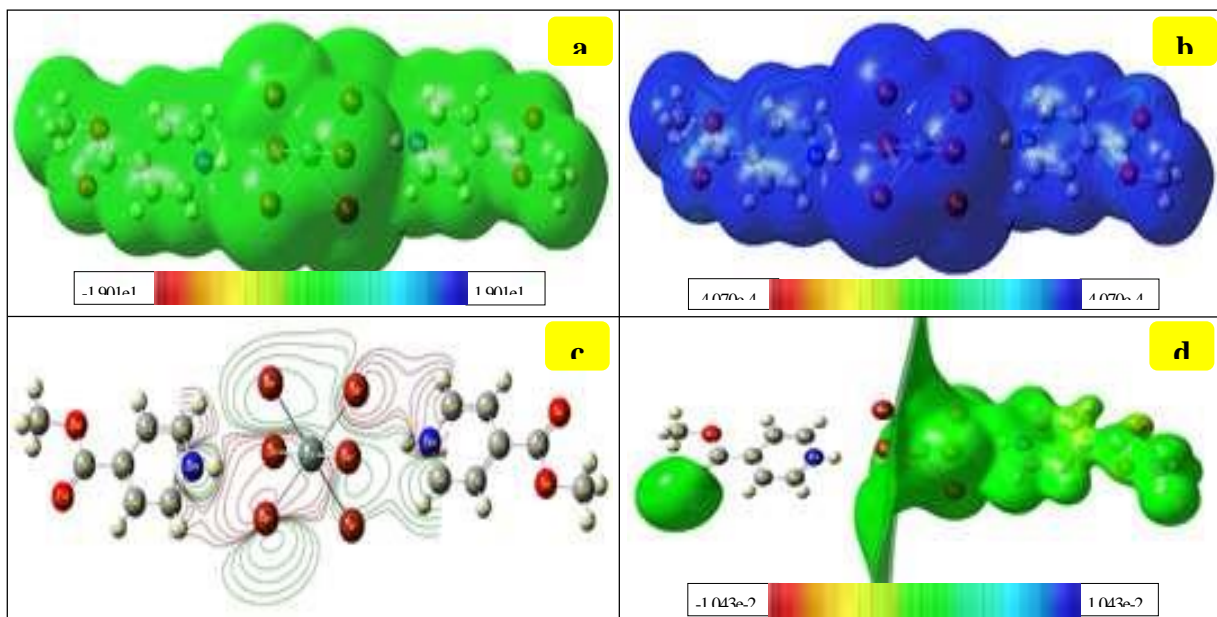
9-rasm. Nohiziqli optik
materiallarning eng yuqori
egallangan molekulyar
orbitallari (HOMO) va eng past
band bo'lmagan molekulyar
orbitallari (LUMO).

NLO-5 ning HUMO-LUMO malumotlari.

8-jadval.

E_{HOMO}	-0.2687	Absolyut elektrmanfiylik (χ)	5.6125
E_{LUMO}	-0.1438	Absolyut yumshoqlik (σ)	0.5884
Energy Gap (eV)	3.3990	Kimyoviy qattqlik (η)	1.6995
Ionlanish potentsiali (IP)	7.3120	Kimyoviy potentsial (μ)	-5.6125
Elektronga moyillik (EA)	3.9130	Elektrofillik (ω)	9.2675

10-rasmda birikmaning elektron tuzilishi va zaryad taqsimoti molekulyar elektrostatik potensial (MEP), elektron zichlik va chegaraviy molekulyar orbital (CHMO) vizualizatsiyalari yordamida o‘rganildi.



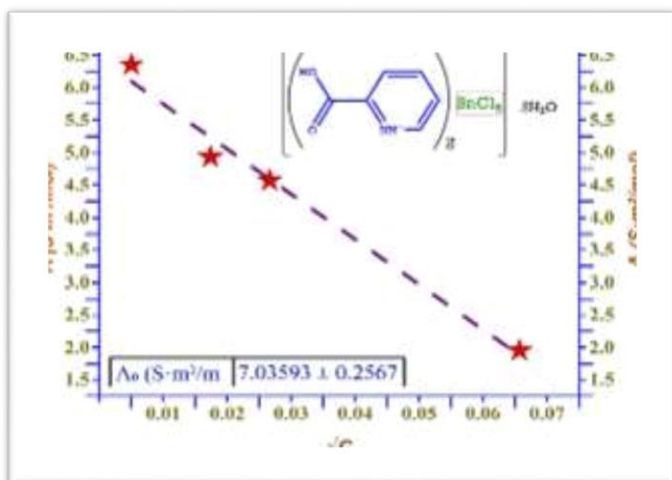
10-rasm. Elektron zichlik yuzasi (a) molekulyar elektrostatik potensial, (b) umumiy elektron zichligi, (c) elektron hisoblagich va (d) elektrostatik potensial xaritalari.

N	Symp	R	Electron Density	E_ele	E_pol	E_dis	E_rep	E_tot
0	-	8.30	HF/3-21G	0.6	-0.3	-3.6	0.3	-2.6
0	-	4.91	HF/3-21G	0.0	nan	0.0	0.0	nan
1	-	5.56	HF/3-21G	-2.6	-0.8	-20.5	13.2	-10.9
1	-	10.72	HF/3-21G	-0.0	-0.0	-0.3	0.0	-0.3
1	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	10.16	HF/3-21G	-0.4	-0.0	-0.2	0.0	-0.6
1	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	5.53	HF/3-21G	-2.5	-0.9	-9.9	2.0	-10.4
1	-x, -y, -z	10.54	HF/3-21G	-0.0	-0.0	-0.2	0.0	-0.2
1	-x, -y, -z	11.12	HF/3-21G	-0.1	-0.0	-0.1	0.0	-0.2
1	x, y, z	7.74	HF/3-21G	1.6	-0.6	-3.9	0.4	-2.0
1	-	7.39	HF/3-21G	0.3	-0.6	-12.4	10.8	-2.5
1	-	11.34	HF/3-21G	0.0	-0.0	-0.2	0.0	-0.2
1	-	6.99	HF/3-21G	-0.4	-0.0	-0.2	0.0	-0.6
1	-	7.36	HF/3-21G	-2.5	-0.9	-9.9	2.0	-10.4
1	-	10.02	HF/3-21G	-0.1	-0.0	-0.1	0.0	-0.2
1	-	4.58	HF/3-21G	1.6	-0.6	-3.9	0.4	-2.0
1	-	6.27	HF/3-21G	0.8	-0.6	-12.6	6.4	-5.7
1	-	14.30	HF/3-21G	0.0	-0.0	0.0	0.0	-0.0
1	-x, -y, -z	6.15	HF/3-21G	1.6	-1.4	-15.1	7.8	-6.5
1	x, y, z	8.85	HF/3-21G	-0.4	-0.0	-0.6	0.0	-1.0
1	-x, -y, -z	7.10	HF/3-21G	1.1	-0.0	-0.9	0.0	0.2
1	x, y, z	11.75	HF/3-21G	0.0	-0.0	-0.1	0.0	-0.1
1	x+1/2, -y+1/2, z+1/2	10.48	HF/3-21G	0.0	-0.0	-0.1	0.0	-0.1
1	-x+1/2, y+1/2, -z+1/2	9.19	HF/3-21G	-0.2	-0.0	-0.5	0.0	-0.7

Energy Model	k_ele	k_pol	k_disp	k_rep
CE-HF ... HF/3-21G electron densities	1.019	0.651	0.901	0.811
CE-B3LYP ... B3LYP/6-31G(d,p) electron densities	1.057	0.740	0.871	0.618

11-rasm. Kvant-kimyoviy xisoblashlar. Atomlarning ta'sir energiyalari (kJ/mol).

Konduktometriya analizi natijalari. Cheksiz suyultirilgan eritmadagi molyar o'tkazuvchanlik aniqlangan va qiymatlari keltirib o'tilgan. Chiziqning $1/C = 0$ ga (konsentratsiyaning cheksiz katta qiymatiga) ekstrapolyatsiyasi $A_0 = 7.0359 \pm 0.2567$ m^2/mm qiymatini beradi. 10-rasmda chizmada keltirilgan.



10-rasm. Molar elektr o'tkazuvchanlikning \sqrt{C} ga bog'liqligi: Kohlrausch ekstrapolyatsiyasi orqali Λ_m^0 qiymatini aniqlash. Elektrolit eritmalarining molyar o'tkazuvchanlik va ionlanish darajasi bo'yicha kondüktometrik tahlil natijalari

XULOSALAR.

1. Tadqiqot doirasida qalay galogenidlari va kraun efirlari asosida jami 9 ta yangi nochiziqli optik material sintez qilindi. NLO-1-[$\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2$]; NLO-2-[$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$]; NLO-3-[$\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$]; NLO-4-[$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$]; NLO-5-[$\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2$]; NLO-6-[$\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2$] 6 tasi Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasi (CCDC)ga mos ravishda 2464388, 2464389, 2465923, 2465924, 2344788, 2448617 depozit raqamlar bilan ro'yxatdan o'tkazildi.
2. Sintez qilingan yangi nochiziqli optik materiallar kristallarining tarkibi va tuzilishini aniqlashda rentgen tuzilish tahlili (RTT), elementar tahlil, UB- va IQ-spektroskopiya, termik tahlil (TG va DTA), kvant-kimyoviy hisoblashlar (Mercury 4.1, Crystal Explorer 17.5, Ortep-3, Olex-2, Oregin Pro-2024 dasturlari) hamda optik xususiyatlarni aniqlash usullari, jumladan, diffuz aks ettirish UB-spektroskopiya, Z-scan usuli va dielektrik xossalarini o'lchash (LCR Meter IM3536) usullaridan foydalanildi.
3. Uchinchi tartibli nochiziqli optik qabul qiluvchanlik ($\chi^{(3)}$) qiymatlari, NLO-1 1.1586×10^{-9} esu, NLO-2 6.2793×10^{-9} esu, NLO-3 4.8370×10^{-9} esu, NLO-4 3.0865×10^{-8} esu, NLO-5 2.0036×10^{-9} esu, NLO-6 3.8300×10^{-9} esu, NLO-7 2.4523×10^{-7} esu, NLO-8 2.4523×10^{-7} esu, NLO-9 3.0649×10^{-7} esu ekanligi aniqlangan. Kraun efirlarining $\chi^{(3)}$ qiymatlari eng kuchli natijalardan biri hisoblanadi. Bu qiymatlar Al_2O_3 (2.2×10^{-14} esu) va TiO_2 (1.5×10^{-12} esu) kabi an'anaviy materialnikidan sezilarli darajada yuqoriligi isbotlandi.
4. Valentlik zonasi va o'tkazuvchanlik zonasi orasidagi energiya farqini UB- diffuz aks ettirish spektroskopiya va Tauc diagrammasi yordamida materiallarning optik energiya bo'shliqlari topildi. NLO-1 4.33 eV, NLO-2 3.07 eV, NLO-3 4.28 eV, NLO-4 2.38 eV, NLO-6 2.87 eV va NLO-7 2.36 eV to'g'ridan-to'g'ri band gap qiymatlari

olingan. Xlorni bromga almashtirish band gapning torayishiga (4.33 eV dan 3.07 eV ga) olib kelgan, bu esa ularning optoelektronik xususiyatlarini (NLO-1) dan (NLO-2) yuqoriligi isbotlandi. NLO-6>NLO-7>NLO-8>NLO-1>NLO-3>NLO-4>NLO-2>NLO-5.

5. Sintez qilingan qalay galogenidli va kraun efirli nochiziqli optik materiallar termogravimetrik (TG) va differensial termik tahlil (DTA) natijasida 200 °C gacha yuqori termik barqarorlik ko'rsatdi. Bu xususiyatlar materiallarning yuqori haroratli sharoitlarda qo'llanilish imkonini beradi.

6. Hirshfeld sirt tahlili NLO materiallaridagi molekulalararo o'zaro ta'sirlarning NLO faolligiga ta'sirini aniq ko'rsatdi. NLO-6 birikmasida O··H/H··O kontaktlari 54.3 % bo'lib, molekulyar tuzilishni barqarorlashtiradi, elektron delokalizatsiyasini kuchaytiradi va NLO faolligini oshiradi. Galogen (Cl, Br) va organik ligandlarning o'zgartirilishi optik band gap, PL va uchinchi tartibli NLO ko'rsatkichlarini sezilarli darajada o'zgartiradi, shuning uchun bu gibridlar fotonik va optoelektronika sohasida istiqbolli materiallar hisoblanadi.

7. NLO-5 birikmasining DFT tahlili uning dipol momenti 29.2960 D, qutblanuvchanligi (α) 87.9361×10^{-24} esu va birinchi tartibli giperqutblanuvchanligi (β) 6.1375×10^{-30} esu ekanligini ko'rsatgan. HOMO-LUMO energiya oralig'i (ΔE) 3.3990 eV ni tashkil etgan. Bu parametrlar materialning ichki molekulyar zaryad uzatish (ICT) qobiliyatini va optik kommutatsiya hamda yorug'lik yig'ish qurilmalarida potentsial foydalanish imkoniyatini beradi.

8. Muborak gazni qayta ishlash zavodi MChJ "Texnik nazorat bo'limi" qoshidagi kimyoviy tahlil laboratoriyasida NLO-6 va NLO-7 materiallari asosida ishlab chiqarilgan quyosh batareyasi hujayralari sinovdan o'tkazildi. Natijada, kraun-efirlaridan tayyorlangan hujayralar perovskit hujayralariga nisbatan uzoqroq xizmat muddatiga ega bo'lib, arzon xomashyodan ishlab chiqarilishi bilan ajralib turdi. Laboratoriya sharoitida perovskit hujayralari 25 % dan yuqori samaradorlikka erishgan bo'lsa, ularning tan-narxi juda qimmat va yaroqlilik muddati juda qisqa. NLO materiallari asosida tayyorlangan quyosh batareyasi hujayralari panellari 20-22 % samaradorlikka ega bo'lishi, tan-narxining arzonligi va yaroqlilik muddatining uzoqligi isbotlandi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.03/31.01.2023.К/Т.78.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ ТЕРМЕЗСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ**

ХОРЕЗМСКАЯ АКАДЕМИЯ МАЪМУНА

САМАНДАРОВ ЭЛЁРБЕК ШОНАЗАР ЎҒЛИ

**СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА НЕЛИНЕЙНЫХ ОПТИЧЕСКИХ
МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ГАЛОГЕНИДОВ ОЛОВА И КРАУН-
ЭФИРОВ**

**02.00.01-Неорганическая химия
02.00.04-Физическая химия**

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD) ПО
ХИМИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Термез-2025

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Узбекистана за номером B2025.1.PhD/K919

Диссертация выполнена в Хорезмской академии Маъмуна

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице научного совета www.tersu.uz и на информационно-образовательном портале «ZiyoNet» по адресу www.ziyo.net.

Научные руководители:

Якубов Юлдаш Юсупбоевич
доктор химических наук, профессор

Челлакарунгу Балакришнан
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Рахманова Дилноза Саламовна
доктор химических наук, профессор

Бекчанов Даврон Жуманазарович
доктор химических наук, профессор

Ведущая организация:

Самаркандский государственный университет

Защита диссертации состоится «_____» _____ 2025 г. в «_____» часов на заседании Научного совета DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 при Термезском государственном университете по адресу: 190111, Сурхандарьинская область, г. Термез, ул. Баркамол авлод 43. Тел.: (+99876) 221-74-55, факс: (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz.

Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре в Термезском государственном университете под №_____, с которой можно ознакомиться в ИРЦ (190111, Сурхандарьинская область, г. Термез, ул. Баркамол авлод 43. Тел.: (+99876) 221-74-55), факс: (+99876) 221-71-17), e-mail: termizdu@umail.uz.

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2025 г.

(протокол рассылки № _____ от «__» _____ 2025 г.

И.А.Умбаров

Председатель научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.х.н., профессор

Ш.А. Касимов

Ученый секретарь научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.х.н., профессор

Г.Ж. Мукумова

Председатель научного семинара
при научном совете по присуждению
ученых степеней, д.х.н., доцент

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время во всем мире стремительно растет спрос на нелинейные оптические материалы. Эти материалы важны в таких областях, как современная оптоэлектроника, фотоника, солнечные батареи, лазерные технологии, обработка оптических данных, сенсоры, телекоммуникации и квантовые вычисления. В частности, комплексные соединения, синтезированные на основе галогенидов олова и краун-эфиров, обладают высокой оптической прозрачностью, нелинейными оптическими эффектами и электрохимическими свойствами, что обеспечивает инновационные решения в этих областях. В связи с этим синтез новых нелинейных оптических материалов на основе галогенидов олова и краун-эфиров, а также исследование их свойств имеет важное значение для современной науки и промышленности.

В мире активно ведутся научно-исследовательские работы, направленные на синтез нелинейных оптических материалов с такими реакционно-активными компонентами, как галогениды олова и краун-эфиры, определение их состава, структуры, оптических и электрохимических свойств, а также областей применения. В связи с этим проводится целенаправленный синтез с использованием уникальных химических и физических свойств галогенидов олова и краун-эфиров, определение оптимальных условий синтеза, доказательство кристаллической структуры полученных материалов дифракционными методами, глубокий анализ их оптических свойств и нелинейных эффектов, исследования направлены на определение структуры энергетической зоны и оптических свойств материалов с использованием современных методов, таких как фотолюминесцентные спектральные исследования, техника Z-сканирования.

В нашей республике достигнуты важные результаты в направлении производства новых видов материалов в химической промышленности. В частности, проводится масштабная работа по обеспечению местного рынка импортозамещающими реагентами. В "Стратегии развития Нового Узбекистана" на 2022-2026 годы определены важные задачи, направленные на "создание технологий получения импортозамещающей продукции из местного сырья и вторичных ресурсов." В связи с этим синтез комплексных соединений с высокой оптической прозрачностью, нелинейными оптическими эффектами и электрохимическими свойствами, получение на их основе новых видов материалов, используемых в солнечных батареях и лазерных технологиях, имеют важное значение.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в Указе Президента Республики Узбекистан No УП-60 от 28 января 2022 года "О Стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы," Постановлениях Президента Республики Узбекистан No ПП-4805 от 12 августа 2020 года "О мерах по повышению качества непрерывного образования и результативности науки в области химии и биологии," No ПП-4992 от 13 февраля 2021 года "О мерах по дальнейшему реформированию и финансовому оздоровлению предприятий химической

промышленности, развитию производства химической продукции с высокой добавленной стоимостью," а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики Узбекистан VII "Химические технологии и нанотехнологии."

Степень изученности проблемы. В ведущих научных центрах мира проведено множество исследований по синтезу нелинейных оптических материалов на основе солей олова и краун-эфиров с лигандами, содержащими атомы азота, определению их пространственной структуры и оптических свойств.

В частности, Софиан Буакида, Рафика Бушен, Фадила Бerra, С. Балакришнан, Г. Винита, С.П. Минакшисундарам, С. Белхадж Салах, Мохаммед С.М. Абдельбаки, Елена А. Чуланова, Екатерина А. Радиуш, Мохамед М. Эльсенети, Акрам Мхири, Фирас Кричен, Абдерразек Уэслати внесли большой вклад в этой области.

В нашей стране исследования по синтезу, структуре и свойствам соединений нелинейных оптических материалов проводились академиками Н.А. Парпиевым, Б.Т. Ибрагимовым, профессорами Х.Х. Хакимовым, Х.Т. Шариповым, О.Ф. Ходжаевым, Т.А. Азизовым, Х.Х. Тураевым, Ш.А. Кадировой, З.Ч. Кадировым, А.Б. Ибрагимовым, Ж.М. Ашуровым, Ш.А. Касимовым, Ю.Ю. Якубовым и другими учеными. Согласно анализу Кембриджской международной кристаллографической базы данных (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2025), на сегодняшний день изучено более 45 соединений нелинейных оптических материалов на основе хлорида олова, на основе 108 краун-эфиров, на основе 363 бромидов олова.

Однако, в результате анализа литературных источников можно отметить, что, хотя существуют обширные экспериментальные результаты по соединениям лигандов, содержащих донорные атомы азота, с галогенидами олова и краун-эфирами оптических материалов, многие важные аспекты в этой области еще недостаточно изучены. Поэтому синтез новых оптических материалов на основе лигандов, содержащих донорные атомы азота, определение их физико-химических свойств и изучение оптических свойств имеет большое научное и практическое значение.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ высшего образовательного учреждения, где выполнена диссертация. Диссертационное исследование выполнено согласно с планами научно-исследовательских работ института общей и неорганической химии Академии наук Республики Узбекистан в рамках прикладного гранта №AL-7623031231 "Синтез углеродных нанотрубок на основе циклопентадиенилжелезодикарбонильного димера и изучение их физико-химических свойств" (2024-2025 г.).

Цель исследования: лиганды на основе галогенидов олова и краун-эфиров 3-Ацетилпиридин; 3-пиридилметанамин; метиловый изоникотинат;

никотинитрил пиколиновая кислота (2-пиридинкарбоксиловая кислота); Синтез новых нелинейных оптических материалов определение их кристаллической структуры и изучение оптических свойств.

Задачи исследования:

Синтез нелинейных оптических материалов на основе галогенидов олова и краун-эфиров;

Определение молекулярной и кристаллографической структуры синтезированных нелинейных оптических материалов с использованием современных физико-химических методов исследования;

Экспериментальное определение свойств синтезированных нелинейных оптических материалов (нелинейность второго и третьего порядка, поглощение оптического света и преломление оптического света) с помощью Z-сканирующей характеристики. Получение диаграммы Таус с помощью УФ-спектроскопии диффузного отражения и сравнение их нелинейных оптических свойств;

Определение диэлектрических свойств синтезированных нелинейных оптических материалов;

Проведение анализа поверхности Хиршфельда вновь синтезированных веществ с использованием программы CrystalExplorer с использованием файла CIF нелинейных оптических материалов, полученных методом РСА;

С помощью программы Vesta software Crystal structure с использованием файла CIF были определены сумма валентностей связей, полигидральные объемы и координационное число центрального кристалла.

Объектом исследования являются лиганды на основе галогенидов олова и краун-эфиров 3-Ацетилпиридин;3-пиридилметанамины; метиловый изоникотинат; никотинитрил пиколиновая кислота (2-пиридинкарбоксиловая кислота) ; пиридин-2-илметанамином

Предмет исследования: Синтез, кристаллическая структура, квантово-химические параметры, энергия межмолекулярного взаимодействия, физико-химические и оптические свойства нелинейных оптических материалов, синтезированных на основе галогенидов олова и краун-эфиров.

Методы исследования. В диссертационной работе для определения состава и структуры оптических материалов использовались рентгеноструктурный анализ (РСА), элементный анализ, ИК-спектроскопия, термический анализ (ТГ и ДТА), квантово-химические расчеты и УФ-спектроскопия диффузного отражения в порошкообразном состоянии для определения оптических свойств, техника Z-scan, устройство LCR-метр (IM3536) для определения диэлектрических свойств, а также использовались такие вычислительные программы, как CrystalExplorer 21.5, Mercury 4.1, Olex 2, Vesta, Ortep-3, Originpro-2024, Diamond, Gaussian-16.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

Синтезировано 9 новых комплексных соединений на основе галогенидов олова и краун-эфиров, 6 из которых включены в Кембриджский банк кристаллографических данных и получили депозитные номера 2464388, 2464389, 2465923, 2465924, 2344788, 2448617;

Методом рентгеноструктурного анализа определены молекулярная и кристаллическая структуры синтезированных комплексных соединений с нелинейными оптическими свойствами, состоящих из $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$;

Методом рентгеноструктурного анализа доказана кристаллизация оптически активных комплексных соединений, синтезированных на основе краун-эфиров, в центросимметричных тригональных системах $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$,

С помощью диаграммы Тауца определена разность энергий валентной зоны и зоны проводимости оптических материалов на основе полученных комплексных соединений, а также показано, что оптоэлектронные свойства убывают в ряду $\text{NLO-6} > \text{NLO-7} > \text{NLO-8} > \text{NLO-1} > \text{NLO-3} > \text{NLO-4} > \text{NLO-2} > \text{NLO-5}$.

Практические результаты исследования:

определены оптимальные условия получения нелинейных оптических материалов из комплексных соединений, синтезированных на основе галогенидов олова и краун-эфиров;

полученное соединение $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ (предлагается использовать) в качестве нелинейного оптического материала, методом Z-scan определено значение параметра нелинейности третьей степени $\chi^{(3)} = 2.4523 \times 10^{-7}$;

По результатам термогравиметрического (ТГ) и дифференциально-термического анализа (ДТА) определена термическая стабильность кристаллов синтезированных нелинейных комплексных соединений с оптическими свойствами до 200 °С;

Из синтезированных NLO-6 и NLO-7 на основе молекулярных кристаллических соединений $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$ и $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ получены солнцечувствительные элементы с высокими фотоэффективными свойствами.

Достоверность результатов исследования состав, структура и физико-химические свойства синтезированных нелинейных оптических материалов подтверждены современными методами исследования. В частности, с помощью рентгеноструктурного анализа (РСА), инфракрасной спектроскопии (ИК), термогравиметрического анализа (ТГА), дифференциально-термического анализа (ДТА) были определены физико-химические свойства материалов. Оптические свойства были доказаны с помощью диффузного отражения в порошкообразной форме, УФ-спектроскопии, методом Z-scan, а диэлектрические свойства - с помощью современной исследовательской техники с помощью устройства LCR METER IM3536.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования объясняется синтезом нелинейных оптических материалов на основе галогенидов олова и краун-эфиров, выделением их монокристаллов, определением кристаллических

структур, энергий межмолекулярных взаимодействий и квантово-химических параметров, а также определением физико-химических свойств с помощью современных методов анализа.

Практическая значимость результатов исследования заключается во внесении кристаллографических данных синтезированных нелинейных оптических материалов в Кембриджский центр кристаллографических данных для синтеза и описания структуры подобных соединений с использованием представленных данных, а также в эффективном использовании нелинейных оптических материалов, синтезированных на основе галогенидов олова и краун-эфиров в солнечных батареях.

Внедрение результатов исследования.

На основе полученных результатов по структуре и оптическим свойствам нелинейных оптических материалов, синтезированных на основе галогенидов олова и краун-эфиров:

Данные о молекулярной и кристаллической структуре вновь синтезированных нелинейных оптических материалов состава $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$, $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ зарегистрированы в Кембриджском центре кристаллографических данных (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrievihg.html>). В результате представленная информация о химических соединениях, включенных в базу данных, позволила использовать их при синтезе подобных соединений и описании их структуры.

Полученные оптические материалы NLO-6 и NLO-7 были использованы в качестве элементов солнечной батареи на Мубарекском газоперерабатывающем заводе ООО (справка Мубарекского газоперерабатывающего завода ООО No 964/G'K-07 от 9 июля 2025 г.). В результате стало возможным получить дешевые органические солнечные элементы с эффективностью до 22%, которые заменяют солнечные элементы на основе минерала перовскита, используемые в промышленных солнечных батареях.

Апробация результатов исследования. Результаты исследования были представлены и обсуждены на 14, в том числе 2 международных и 10 республиканских научно-практических конференциях.

Публикация результатов исследования. Всего по теме диссертации опубликовано 22 научные работы, из них 8 в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертаций доктора философии (PhD) (6 в республиканских и 2 в зарубежных научных журналах).

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. Общий объем диссертации составляет 120 страниц.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и востребованность проведенного исследования, охарактеризованы цель и задачи, объект и предмет исследования, показано соответствие исследования приоритетным

направлениям развития науки и технологий республики, изложены научная новизна и практические результаты исследования, раскрыта научная и практическая значимость полученных результатов, приведены сведения о внедрении результатов исследования в практику и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **“Оптические материалы лигандов, содержащих донорные атомы азота, с галогенидами олова и краун-эфирами”** на основе научной литературы проанализированы синтез соединений оптических материалов с галогенидами олова и краун-эфирами, молекулярные и кристаллические структуры, а также физико-химические свойства и диэлектрические и оптические свойства этих комплексов. Также показано, что краун-эфиры проявляют свойства, образующие оптические материалы, и являются перспективными в таких областях, как оптоэлектроника, фотоника, солнечные батареи, лазерные технологии, обработка оптических данных, сенсоры, телекоммуникации и квантовые вычисления.

Во второй главе диссертации **“Объекты, процессы синтеза и методы исследования нелинейных оптических материалов на основе галогенидов олова и краун-эфиров”** описаны использованные в рамках исследования приборы, синтез оптических материалов, примененные физические методы (спектроскопические методы, элементный анализ, термический анализ, РСА, анализ поверхности Хиршфельда и др.) и метод Z-сканирования, приведены полученные практические результаты.

Синтез соединения NLO-6 $[C_{12}H_{24}O_6(C_8H_{10}NO)_2(I)_2]$. Первоначально 3-ацетил-1-метилпиридиний йодид был приготовлен путем введения равномолярной смеси 3-ацетилпиридина и метилйодида в метаноле (30 мл). Реакционную смесь кипятили при температуре 50-55°C в течение двух часов, чтобы получить заранее приготовленный раствор. Далее 18-Краун-6 (1,0 ммоль) и вновь синтезированный 3-ацетил-1-метилпиридиний йодид (2,0 ммоль) растворяли в 20 мл метанола в мольном соотношении 1:2. Полученный раствор кипятили при температуре 80-85°C в течение 3 часов, что способствовало образованию супрамолекулярного комплекса (pH=4,5). (Показано на схеме 1). В результате медленного испарения растворителя в течение 20-22 дней были получены конкретные кристаллы, подходящие для структурного анализа. Полученные кристаллы были охарактеризованы с помощью рентгеновской дифракции для определения молекулярной структуры и порядка расположения. Выход 75%. Уравнение реакции синтеза:

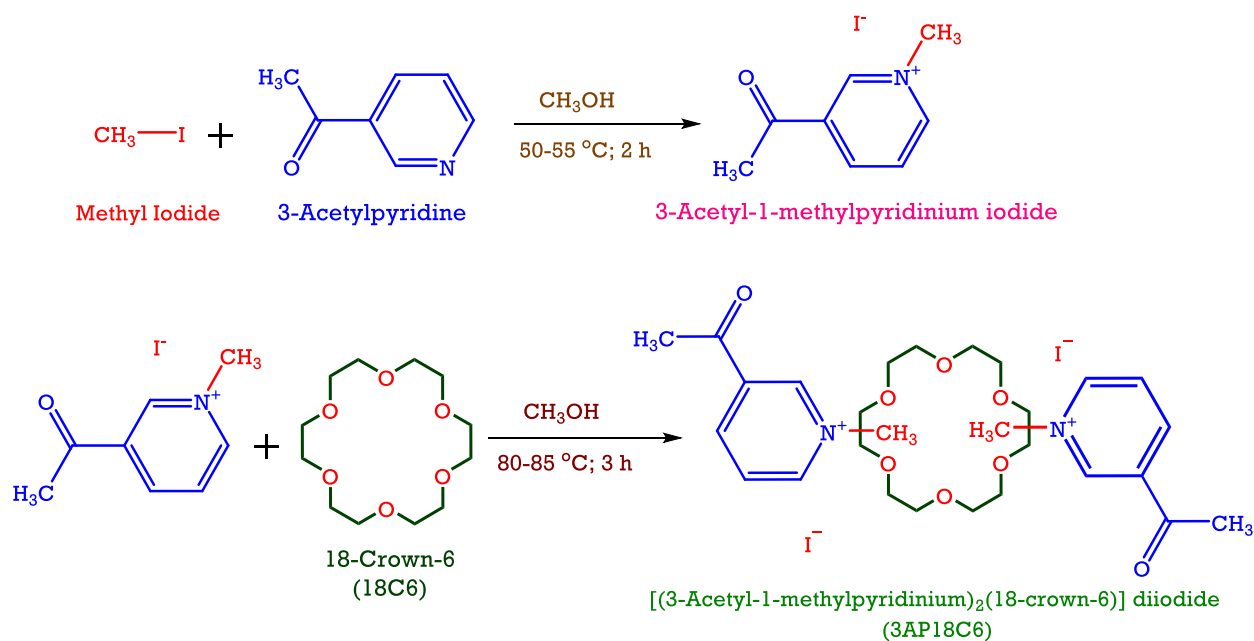


Таблица 1

Элементный анализ состава полученных оптических материалов.

	Состав	Молекулярная масса (г/моль)	С, % Вычислено (Найдено)	Н, % Вычислено (Найдено)	Н, % Вычислено (Найдено)	О, % Вычислено (Найдено)
1	$\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2$	577.68	24.95 (24.86)	2.44 (2.36)	9.7 (9.66)	5.54(5.44)
2	$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	844.38	17.07(16.79)	1.67(1.58)	6.64(6.49)	3.79 (3.75)
3	$\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	615.68	23.41(23.38)	2.62(2.57)	4.55(4.46)	15.59 (15.47)
4	$\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2$	882.38	16.33(16.21)	1.83(1.80)	3.17(3.08)	10.88(10.74)
5	$\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2$	874.40	19.23(19.17)	1.84(1.81)	3.2(3.11)	7.32(7.23)
6	$\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2$	790.45	42.55(42.24)	5.61(5.57)	3.54(3.43)	16.19(16.08)
7	$(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})$	500.36	43.21(43.03)	6.65(6.54)	5.6(5.55)	19.18(19.04)
8	$(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2$ $(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2$	1034.7	41.71(41.53)	6.81(6.77)	5.4(5.36)	21.6(21.29)
9	$(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})$	456.31	42.11(41.75)	6.41(6.32)	6.14(5.79)	17.53(17.48)

В третьей главе диссертации, озаглавленной "Кристаллическая структура и физико-химические свойства полученных нелинейных оптических материалов," были проанализированы новые синтезированные нелинейные оптические материалы методами РСА, УФ, ИК-спектроскопии и термическими методами. Были определены и представлены данные о кристаллической структуре и физико-химических свойствах оптических материалов.

Монокристаллический рентгеноструктурный анализ оптических материалов NLO-3 и NLO-4, полученных из $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ -(NLO-3) и $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ -(NLO-4) позволили определить их молекулярную и кристаллическую структуру. Основные кристаллографические данные приведены в таблице 2. Оба соединения обладают изоструктурными свойствами, незначительно отличаясь друг от друга размерами элементарных ячеек, и кристаллизуются в моноклинной системе. Соединение (NLO-3)

принимает centrosymmetric пространственную группу $P2_1/c$, а соединение (NLO-4) кристаллизуется в пространственной группе $P2_1/n$.

Таблица-2.

Кристаллографические данные для (NLO-3) и (NLO-4).

	(3)	(4)
Формула	$C_6H_8Cl_3NO_3Sn_{0.50}$	$C_6H_8Br_3NO_3Sn_{0.5}$
Mr (г/моль)	307.83	441.21
Температура (К)	273(2)	273(2)
Длина волны (Å)	0.71073	0.71073
Размер кристалла (мм³)	0.11 x 0.12 x 0.15	0.10 x 0.10 x 0.14
Цвет	металлически-белый, бесцветный	Оранжевый
Форма	Блок	Игольчатый
Кристал-кая решётка	Моноклинный	Моноклинный
Космическая группа	$P2_1/c$	$P2_1/n$
a, b, c (Å)	9.0332(9), 9.2738(9), 13.4947(13)	7.7400(7), 8.8465(8), 17.2637(15)
α, β, γ (°)	90, 106.869(3), 90	90, 92.832(4), 90
Объём (Å³)	1081.84(18)	1180.64(18)
CCDC	2465923	2465924

$[SnCl_6]^{2-}$ в (NLO-3) и $[SnBr_6]^{2-}$ в (NLO-4). Подробные параметры водородной связи приведены в таблице-3 и изображены на рисунке-1. В соединении (NLO-3) карбоксильная часть катиона образует сильную водородную связь $O(1)-H(1)\cdots Cl(2)$, при этом расстояние $H\cdots A$ короткое (2,34 Å) и образует почти линейный угол 171° . Азот(N1) в протонированном пиридиновом кольце участвует в водородных связях с соседними атомами кислорода [$N(1)-H(1A)\cdots O(2)$ и $N(1)-H(1A)\cdots O(3)$], причем последняя имеет почти линейный угол 162° . Молекула воды $O(3)$ связана с несколькими акцепторами хлора в качестве донора водородной связи [$O(3)-H(3A)\cdots Cl(3)$, $O(3)-H(3B)\cdots Cl(1)$ и $O(3)-H(3B)\cdots Cl(3)$].

Взаимодействие $O(1)-H(1)\cdots O(3)$ в соединении NLO-4 характеризуется очень коротким расстоянием $H\cdots A$ (1,65 Å) и углом 174° , что указывает на особенно сильную водородную связь. Взаимодействия $N-H\cdots O$ и $N-H\cdots Br$ [$N(1)-H(1A)\cdots O(2)$ и $N(1)-H(1A)\cdots Br(3)$] связывают органический катион и неорганический анион. Молекула воды $O(3)$ также выступает в роли донора водородных связей для акцепторов кислорода и брома [$O(3)-H(3A)\cdots O(2)$ и $O(3)-H(3B)\cdots Br(2)$].

В соединении (NLO-3) длины связей Sn-Cl варьируют от 2.4161(9) Å до 2.4419(10) Å, и Sn (1) координируется тремя симметрично эквивалентными парами Cl(1), Cl(2) и Cl(3), в то время как в соединении (NLO-4) соответствующие связи Sn-Br варьируют от 2.5860(6) Å до 2.6189 (6) Å, и Sn (1) окружен аналогичными лигандами Br(1), Br(2) и Br(3). Несмотря на различие галогенов, рассчитанная средняя длина связи Sn-X одинакова в обеих структурах и составляет 2.4290 Å, что указывает на хорошо сбалансированную

координацию в обоих случаях. Кроме того, полиэдрические объемы для соединений $[\text{SnCl}_6]^{2-}$ и $[\text{SnBr}_6]^{2-}$ идентичны (19.1061 \AA^3).

Таблица-3.

Длина водородной связи (\AA) и углы ($^\circ$) оптических материалов NLO-3 и NLO-4.

D-H...A	d(D-H)	d(H...A)	d(D...A)	$\angle(\text{DHA})$
(3)				
O(1)-H(1)•••Cl(2)	0.82	2.34	3.157(3)	171
C(2)-H(2)•••Cl(1)	0.93	2.995	3.675(4)	131
C(4)-H(4)•••O(2)	0.93	2.637	3.307(5)	129
N(1)-H(1A)•••O(2)	0.92(5)	2.31(4)	2.686(4)	104(3)
N(1)-H(1A)•••O(3)	0.92(5)	1.83(5)	2.724(4)	162(4)
O(3)-H(3A)•••Cl(3)	0.85	2.74	3.513(3)	152
O(3)-H(3B)•••Cl(1)	0.85	2.78	3.511(3)	145
O(3)-H(3B)•••Cl(3)	0.85	2.75	3.376(4)	132
(4)				
O(1)-H(1)•••O(3)	0.90(5)	1.65(5)	2.546(4)	174(4)
N(1)-H(1A)•••O(2)	0.86	2.30	2.654(4)	105
N(1)-H(1A)•••Br(3)	0.86	2.66	3.397(4)	144
O(3)-H(3A)•••O(2)	0.85	2.01	2.775(5)	149
O(3)-H(3B)•••Br(2)	0.85	2.76	3.439(4)	138
O(3)-H(3B)•••Br(2)	0.85	3.038	3.748(3)	142.5
C(4)-H(4)•••Br(1)	0.93	2.91	3.828(5)	171
C(5)-H(5)••• Br(2)	0.93	2.91	3.692(5)	143

Примечательно, что наблюдается разница в изменении угла связи, который составляет 1.0641 \AA^2 в соединении (4), что значительно выше, чем 0.1073 \AA^2 в соединении (3). Это указывает на большее искажение угла в единице $[\text{SnBr}_6]^{2-}$, что является результатом стерического эффекта более крупных бромидных лигандов. Координационные числа практически одинаковы и имеют значения 5.996 для (3) и 5.9945 для (4), что подтверждает полную октаэдрическую координацию в обоих случаях, как показано в таблице 4. Общая кристаллическая упаковка раскрывает чередующиеся слои органических и неорганических частей, расположенных параллельно и упорядоченно, как показано на рисунке 1.

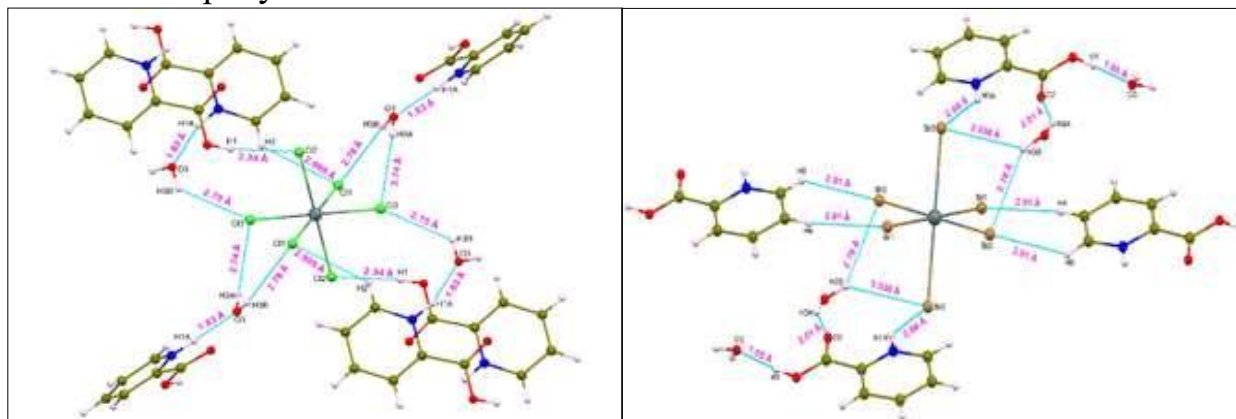


Рисунок -1. Взаимодействия водородных связей: (а) для соединения (NLO-3) и (b) для соединения (NLO-4).

Таблица-4.

Полиэдрические параметры для соединений (NLO-3) и (NLO-4).

(3)	(4)	
средняя длина связи (Å).	2.4290	2.4290
полигидральный объём (Å ³)	19.1061	19.1061
длина связи	0.00356	0.00356
квадратное растяжение	1.0001	1.0004
дисперсия связи угла (Å ²)	0.1073	1.0641
ординационное число	5.996	5.9945

Анализ суммы валентностей связи. Метод BVS предполагает определение степени окисления центрального атома, используя длины кристаллографических связей. Значения BVS, равные 3.97 и 3.92, подтверждают степень окисления +4 для центров олова, что согласуется с обобщенными структурными данными, представленными в таблице-5.

Таблица-5.

Сумма валентностей соединений (NLO-3) и (NLO-4).

NLO	K	Расстояния связи (Å)						V = Σ v _{ij}
(NLO-3)	6	Sn(1)-Cl(1)	Sn(1)-Cl(1) ⁱ	Sn(1)-Cl(2)	Sn(1)-Cl(2) ⁱ	Sn(1)-Cl(3)	Sn(1)-Cl(3) ⁱ	3.97 *
		2.4161(10)	2.4161(10)	2.4419(9)	2.4419(9)	2.4288(9)	2.4288(9)	
(NLO-4)	6	Sn(1)-Br(1)	Sn(1)-Br(1) ⁱ	Sn(1)-Br(2)	Sn(1)-Br(2) ⁱ	Sn(1)-Br(3)	Sn(1)-Br(3) ⁱ	3.92 *
		2.6017(5)	2.6017(5)	2.5860(6)	2.5860(6)	2.6189(6)	2.6189(6)	

Межмолекулярные водородные связи объединяют молекулы в слои, параллельные плоскости (рис.2). Наблюдаются π··π взаимодействия между соседними ароматическими кольцами молекул NLO-5. Для этого взаимодействия расстояния между центрами колец составляет от 3.550 Å до 4.087 Å, угол равен 19.08°, а расстояние между плоскостями 3.550 Å. Горизонтальное смещение π··π взаимодействия и расстояние между кольцами 1.328 Å объединяют слои в трехмерную сетевую структуру.

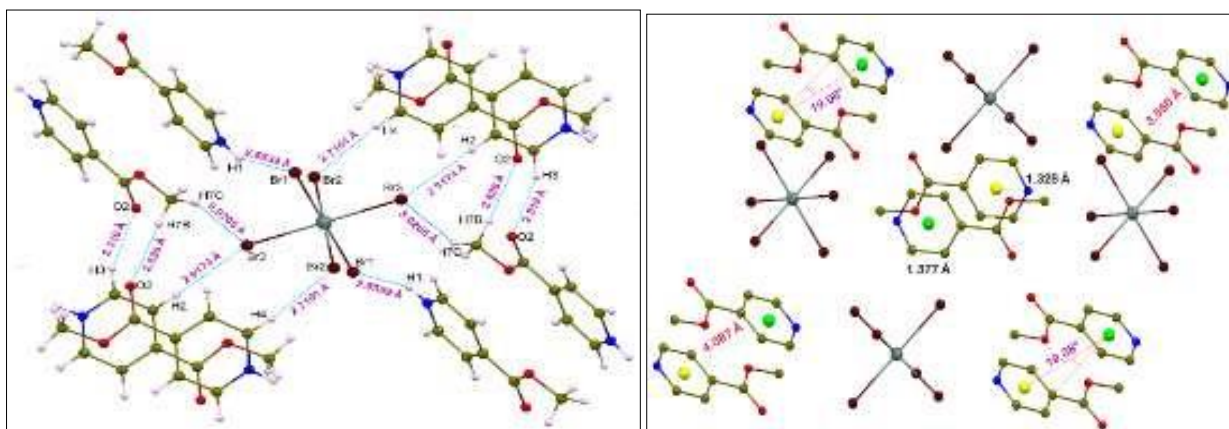


Рис. 2. Молекулярное расположение NLO-5 с сетью водородных связей и π··π взаимодействиями.

СЭМ/ЭДС-это мощные аналитические методы (NLO-1) и (NLO-2), применяемые для анализа поверхностной структуры и элементного состава материалов, которые исследовали морфологию поверхности и элементный состав соединений с помощью ЭДС. Рисунок -3.

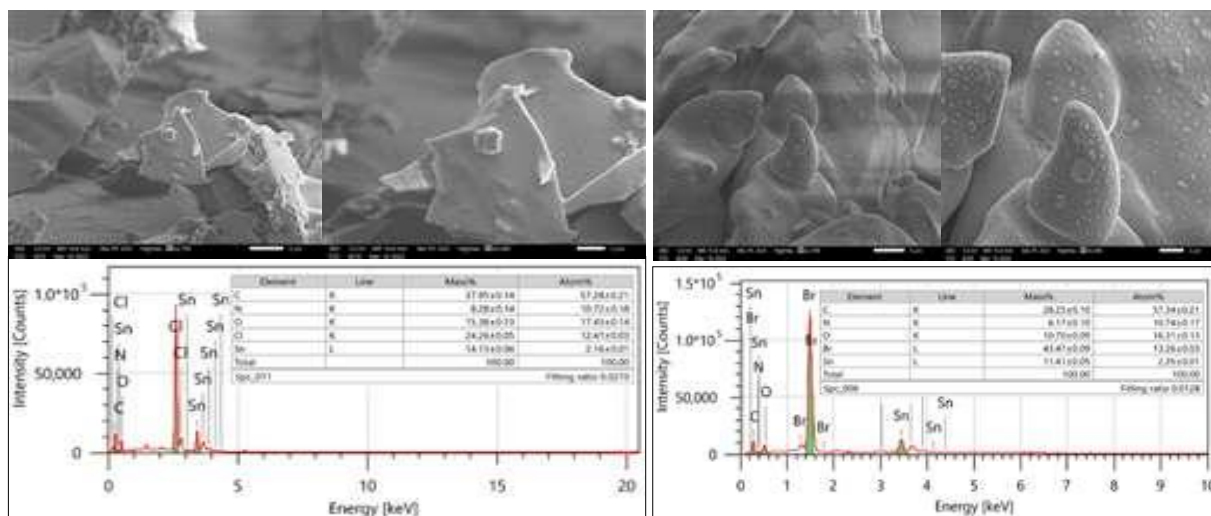


Рис-3. Спектр СЭМ и ЭДС NLO-1 и NLO-2.

Соответствующий спектр ЭДС соединения (NLO-1), являющегося хлоридным аналогом, увеличенным в 2700 и 5500 раз, подтверждает наличие основных составляющих элементов - углерода (C), азота (N), кислорода (O), хлора (Cl) и олова (Sn). Эти элементы полностью соответствуют ожидаемой молекулярной формуле дигидрата бис (3-цианопиридина) гексахлоростанната (IV). Количественный анализ показывает, что присутствуют массовые доли 44,22% C, 19,84% N, 5,18% O, 19,67% Cl и 11,09% Sn, причем атомные проценты подтверждают предложенную стехиометрию, текстура шероховатой поверхности указывает на природу кристалла. В ЭДС спектре соединения (NLO-2) обнаружено присутствие Sn, Br, C, N и O, соответствующих составу соединения. Количественные данные указывают на значительные массовые доли Br (45,71%) и Sn (11,95%), что подтверждает наличие аниона гексобромстанната (IV).

Рентгенофлуоресцентная спектроскопия. Рентгенографические спектры четко указывают на наличие анионных типов $[\text{SnCl}_6]^{2-}$ и $[\text{SnBr}_6]^{2-}$, которые представлены четкими линиями эмиссии, соответствующими олову, хлору и бром. В спектре соединения (NLO-1) наблюдаются пики, связанные с оловом и хлором (рис. 4). Олово имеет сильную характерную эмиссию в диапазоне 20-25 кэВ, а хлор имеет значительную K_α -эмиссию в диапазоне 2,5-3,0 кэВ, соответственно, для своих K_α и K_β переходов.

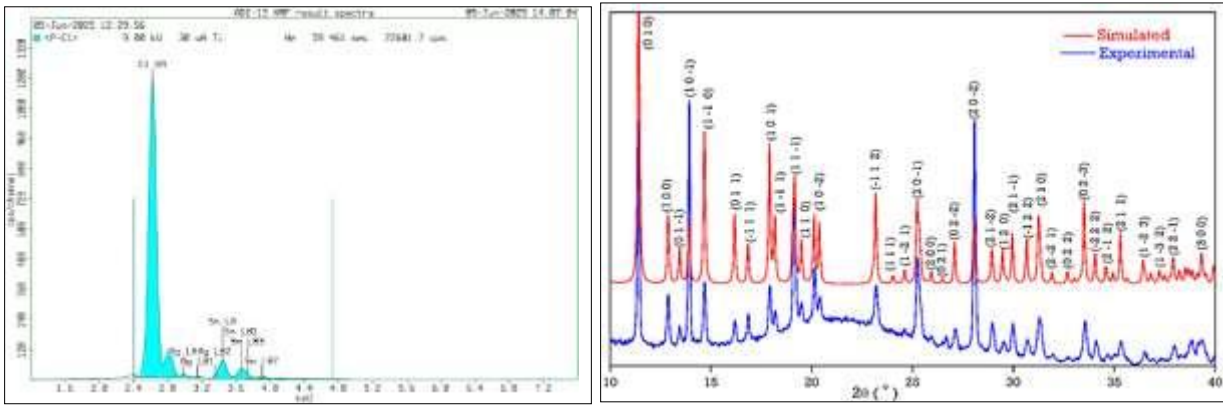


Рис. 4. Рентгеновские спектры основных пиков NLO-1 ниже 30 кэВ моделированных и (Рис. 5) экспериментальных образцов ПХРД. Порошковый рентгеноструктурный анализ.

Сравнение между смоделированными и экспериментально полученными порошковыми рентгенограммами NLO-1 показывает сильную согласованность в расположении дифракционных пиков, представленных на рис. 4. Экспериментальный образец демонстрирует высокую степень кристалличности. На графике ось x представляет -2θ (степень) дифракционный угол, а ось y - интенсивность. Каждый пик имеет индексы Миллера (h, k, l), которые указывают, какой пик соответствует кристаллографической пористости. На графике моделируются различные пики и сравниваются с экспериментальными результатами. Средний размер кристаллизации основан на результатах рентгеноструктурного анализа порошка, согласно формуле Штиррера, размер кристалла asosan $D \frac{K\lambda}{\beta \cos\theta}$ составляет 35.4 нм, чистота кристалла составляет 69%.

Характеристика Z-сканирования.

Оптический материал NLO-6 исследовали методом Z-сканирования NLO третьего порядка. В этом методе использовали данные Z-сканирования для определения нелинейного показателя преломления и нелинейного поглощения в материалах, нелинейного показателя преломления - (n_2) нелинейного коэффициента поглощения - (β) , $\text{Re}(\chi^{(3)})$ и $\text{Im}(\chi^{(3)})$ отражающего интенсивно-зависимые свойства преломления материала.

$$\text{Re } \chi^3(esu) = 10^{-4} \frac{\epsilon_0 c^2 n_0^2}{\pi} n_2 \left(\frac{cm^2}{W}\right) \quad (1) \quad I_m \chi^3(esu) = 10^{-2} \frac{\epsilon_0 c^2 n_0^2 \lambda}{4\pi^2} \beta \left(\frac{cm}{W}\right) \quad (2)$$

где: ϵ_0 - диэлектрическая проницаемость в вакууме, c - скорость света в вакууме, а n_0 - линейный показатель преломления вещества.

$$|\chi^3| = \left[(R_e(\chi^3))^2 + (I_m(\chi^3))^2 \right]^{1/2} \quad (3)$$

Эти нелинейные оптические ответы вместе указывают на то, что соединение является значительным нелинейным оптическим материалом третьего порядка. Это делает его перспективным кандидатом в приложениях оптического ограничения и фотонного ключа. Результаты Z-сканирования всех синтезированных оптических материалов представлены в таблице 6.

Таблица 6.

Результаты Z-сканирования новых кристаллов.

	$\text{Re}\chi^{(3)}$ (cm ² /W)	$\text{Im}\chi^{(3)}$ (cm/W)	$\chi^{(3)}$ (esu)
NLO-8	6.6580×10^{-9}	2.4514×10^{-7}	2.4523×10^{-7}
NLO-9	5.4449×10^{-9}	3.0644×10^{-7}	3.0649×10^{-7}
NLO-6	5.9400×10^{-10}	3.7800×10^{-9}	3.8300×10^{-9}
NLO-1	4.6721×10^{-10}	1.0603×10^{-9}	1.1586×10^{-9}
NLO-2	9.0915×10^{-10}	6.2131×10^{-9}	6.2793×10^{-9}
NLO-3	7.2234×10^{-10}	4.7828×10^{-9}	4.8370×10^{-9}
NLO-4	7.7608×10^{-10}	3.0855×10^{-8}	3.0865×10^{-8}
NLO-5	4.9840×10^{-14}	2.0036×10^{-9}	2.0036×10^{-9}

Действительная и мнимая части чувствительности третьего порядка, а именно, $\text{Re}(\chi^{(3)})$ и $\text{Im}(\chi^{(3)})$, составляют $5,94 \cdot 10^{-10}$ esu и $3,78 \cdot 10^{-9}$ esu соответственно. Абсолютное значение $\chi^{(3)}$ принимается равным $3,83 \cdot 10^{-9}$ esu.

Эти значения значительно выше, чем у большинства традиционных материалов, обычно в диапазоне от 10^{-15} до 10^{-5} эДж, что подчеркивает сильную нелинейную оптическую реакцию исследуемого соединения. В таблице 7 представлены сравнения с другими высокоэффективными материалами на основе краун-эфира, что подчеркивает изученный сильный НЛО-ответ. На основании приведенных ниже данных проводится сравнительный анализ значений нелинейной оптической чувствительности третьего порядка [$\chi^{(3)}$] материалов на основе 18-краун-6 (18С6) и других краун-эфиров.

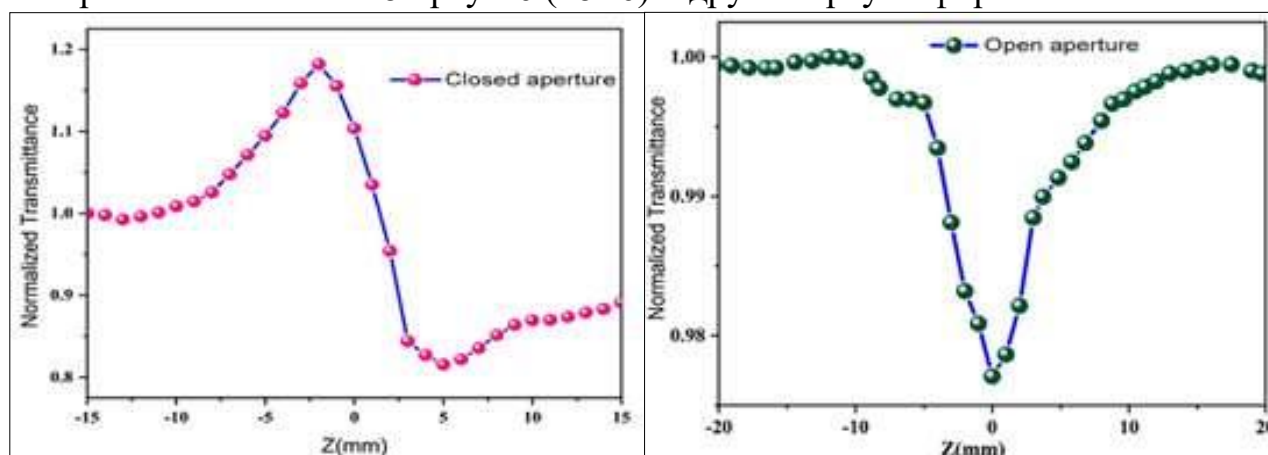


Рисунок 6. Z-Scan кривые NLO-6 с закрытой и открытой апертурой.

Таблица 7.
Оптические материалы, синтезированные на основе эфира крауна.

Оптические материалы	$\chi^{(3)}$ (esu)	Литература
18С6·2(5-Нитроизофталеваая кислота монометиловый эфир) ·2 (H ₂ O)	4.19×10^{-6}	[45]
2(5-Аминозофталеваая кислота) -18С6	5.98×10^{-6}	[46]
2 (5-амино-2,4,6-триидоизофталеваая кислота) -18С6·2(H ₂ O)	3.03×10^{-6}	[47]
Бис (1-метилпиридиний йодид) -18С6	5.57×10^{-6}	[21]
Бис (4-амино-1-метилпиридин-1-йодид йода) -18С6	5.30×10^{-6}	[21]
Бис (1,2-диметилпиридин-1-йодид йода) -18С6	3.54×10^{-6}	[22]
18С6·2 (тримезиновая кислота) ·2(H ₂ O)	3.34×10^{-7}	[48]
18С6·6(5-Гидроксиизофталеваая кислота) ·10(H ₂ O)	1.81×10^{-7}	[48]
[(3-ацетил-1-метилпиридиний) 2 (18-краун-6)] дийодид	3.83×10^{-9}	NLO-6

Таус -диаграмма и УФ-спектр-это графический метод, используемый для определения оптического энергетического зазора (E_g) материала, обычно построенный на основе данных спектроскопии диффузного отражения (УФ). Диаграмма Таус показывает зависимость между функцией Кубелки-Мунка материала $F(R)$ и энергией фотона ($h\nu$). Для определения энергетического зазора применяется уравнение Таус: $ah\nu = A(h\nu - E_g)^2$. В области 422 нм рефлексивность резко снижается — это считается началом сильного поглощения материала в УФ. 2.87 эВ (322 нм) на диаграмме Таус указывает на то, что NLO-6 обладает полупроводниковыми свойствами.

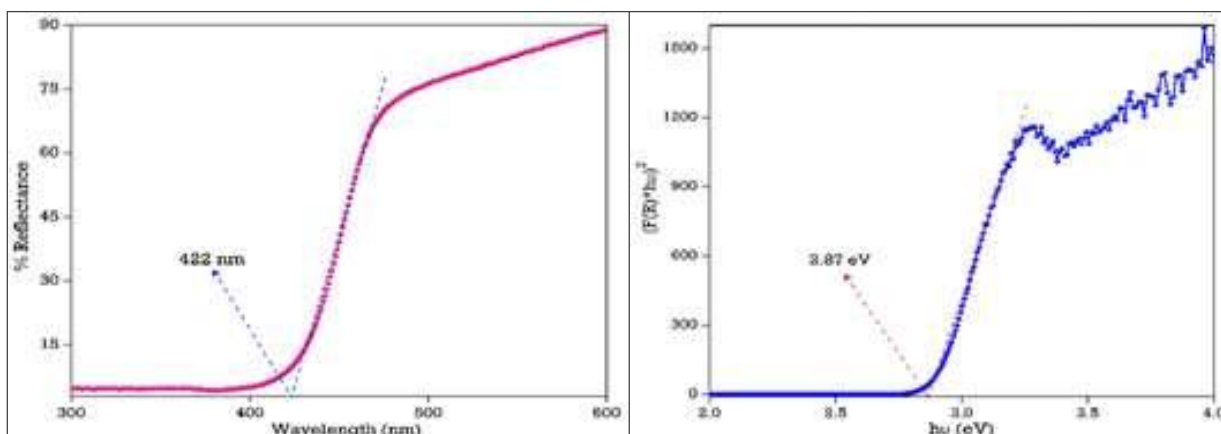


Рисунок 7. УФ-спектр и спектр ширины оптической зоны (по Таус) NLO-6.

Анализ поверхности Хиршфельда полученных оптических материалов.

Поверхности и карты Хиршфельда всех синтезированных оптических материалов были изучены. Полная часть представлена в диссертации. На рисунке 8 показана область отпечатка пальца NLO-1 и NLO-2.

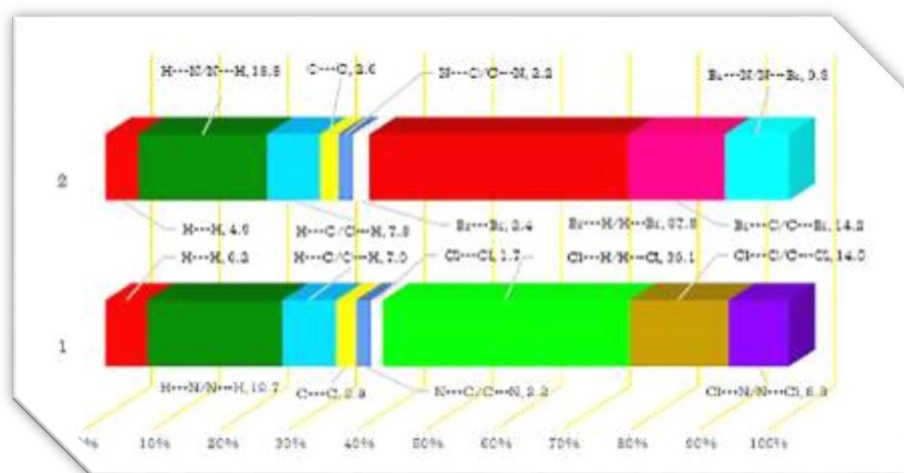


Рисунок 8. (NLO-1, NLO-2). Вклад межмолекулярных взаимодействий в формирование поверхности Хиршфельда.

ДФТ-анализ нелинейных оптических материалов NLO-5.

Молекулярная орбитальная диаграмма показывает энергетические уровни электронов в молекуле. Вертикальная ось вверху определяет разницу между наиболее заполненной орбиталью (НОМО), занимаемой электронами, и наименее заполненной орбиталью (LUMO), т.е. "пограничные" орбитали (НОМО и LUMO). Химическая твёрдость, мягкость, активность молекул и

стабильность являются полезными показателями. Уровни энергии, показанные на диаграмме под номерами 96-97, представлены цветовым градиентом, разность энергий между ними составляет ($E_g=3.3990$) эВ, что указывает на энергетическое деление HOMO - LUMO. Такое различие определяет оптические и электрические свойства молекулы, например, поглощение света или электропроводность.

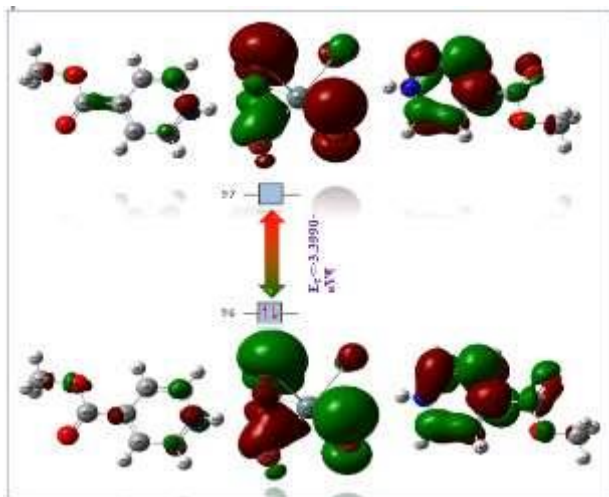


Рисунок-9. Высокозахватные молекулярные орбитали (HOMO) и низкозахватные молекулярные орбитали (LUMO) нелинейных оптических материалов.

В таблице-8 приведены данные HOMO-LUMO нелинейного оптического материала NLO-5.

Таблице 8

Данные HOMO-LUMO NLO-5.

E_{HOMO}	-0.2687	Абсолютная электроотрицательность (χ)	5.6125
E_{LUMO}	-0.1438	Абсолютная мягкость (σ)	0.5884
Energy Gap (eV)	3.3990	Химическая твёрдость (η)	1.6995
Потенциал ионизации (IP)	7.3120	Химический потенциал (μ)	-5.6125
Электронная ависимость (EA)	3.9130	Электрофильность (ω)	9.2675

На рисунке 10 изучена электронная структура и распределение заряда соединения с помощью визуализации молекулярного электростатического потенциала (МЭП), электронной плотности и граничной молекулярной орбитали (ПМО).

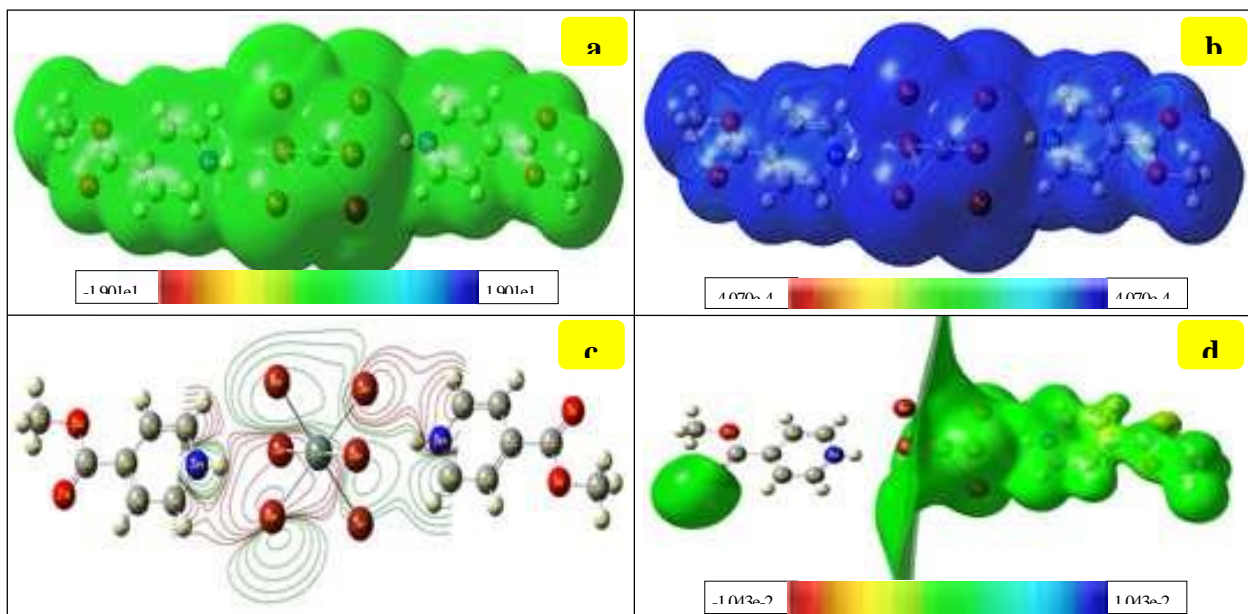


Рисунок 10. Карты (а) молекулярного электростатического потенциала, (б) общей электронной плотности, (в) электронного счетчика и (г) электростатического потенциала поверхности электронной плотности.

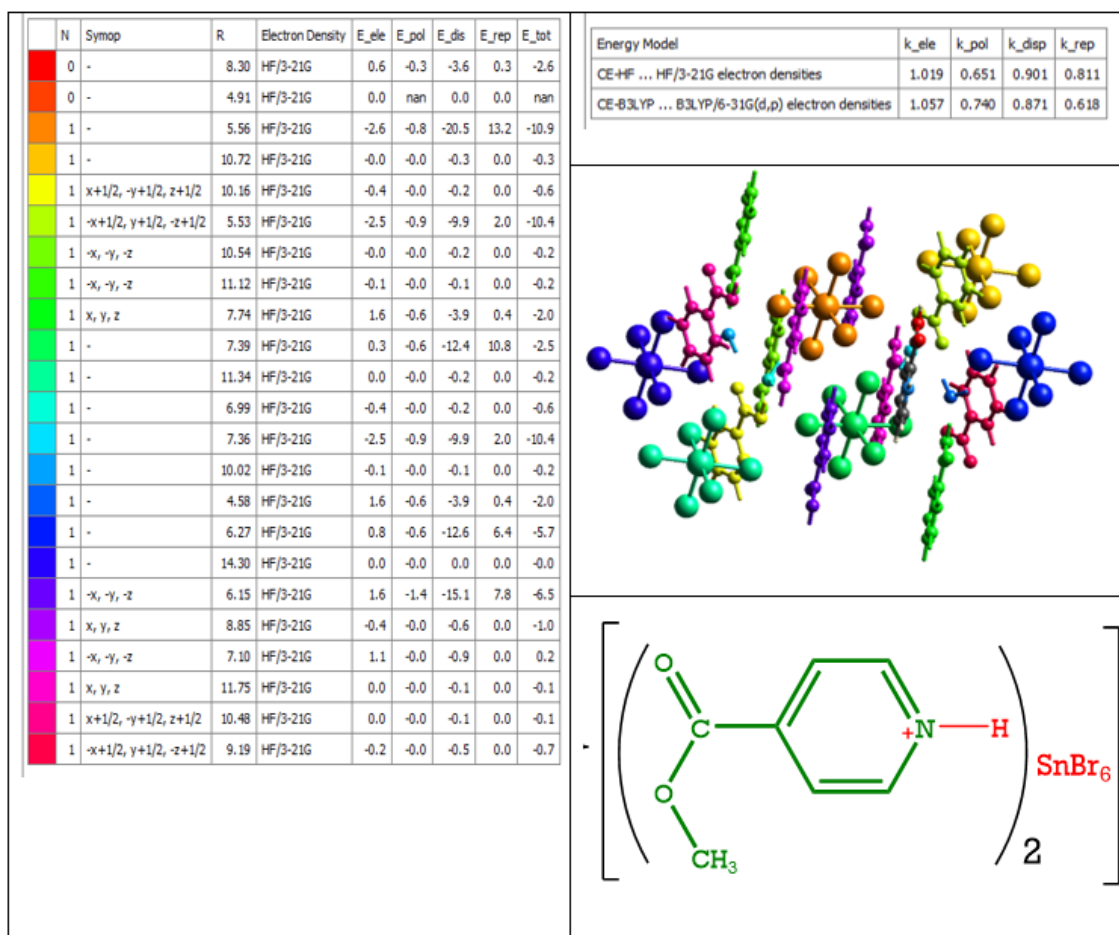


Рисунок 11. Квантово-химические расчеты. Энергии взаимодействия атомов (кДж/моль).

Результаты кондуктометрического анализа. Определена и приведены значения молярной проводимости в бесконечно разбавленном растворе.

Экстраполяция линии на $1/C=0$ (бесконечно большое значение концентрации) дает $\Lambda_0 = 7.0359 \pm 0.2567 \text{ m}^2/\text{mm}$.

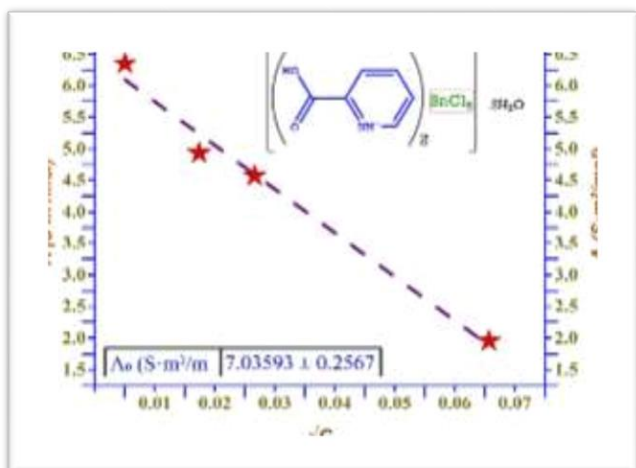


Рисунок-10. Зависимость молярной электропроводности от $1/C$: Определение значения Λ_m^0 с помощью экстраполяции Кольрауша.

Результаты кондуктометрического анализа молярной проводимости и степени ионизации растворов электролитов

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. В рамках исследования было синтезировано в общей сложности 9 новых нелинейных оптических материалов на основе галогенидов олова и краун-эфиров: NLO-1- $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$; NLO-2- $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$; NLO-3- $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$; NLO-4 $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$; NLO-5 $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$; NLO-6 $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$, 6 из них зарегистрированы в Кембриджской кристаллографической базе данных (CCDC) под депозитными номерами 2464388, 2464389, 2465923, 2465924, 2344788, 2448617 соответственно.

2. Для определения состава и структуры кристаллов синтезированных новых нелинейных оптических материалов использовались методы рентгеноструктурного анализа (РСА), элементного анализа, УФ- и ИК-спектроскопии, термического анализа (ТГ и ДТА), квантово-химических расчетов (программы Mercury 4.1, Crystal Explorer 17.5, Ortep-3, Olex-2, Oregan Pro-2024), а также методы определения оптических свойств, включая УФ-спектроскопию с диффузным отражением, метод Z-сканирования и измерение диэлектрических свойств (LCR Meter IM3536).

3. Установлено, что значения нелинейной оптической восприимчивости третьего порядка ($\chi^{(3)}$): NLO-1 равны $1.1586 \cdot 10^{-9} \text{ esu}$, NLO-2 - $6.2793 \cdot 10^{-9} \text{ esu}$, NLO-3 - $4.8370 \cdot 10^{-9} \text{ esu}$, NLO-4 - $3.0865 \cdot 10^{-8} \text{ esu}$, NLO-5 - $2.0036 \cdot 10^{-9} \text{ esu}$, NLO-6 - $3.8300 \cdot 10^{-9} \text{ esu}$, NLO-7 - $2.4523 \cdot 10^{-7} \text{ esu}$, NLO-8 - $2.4523 \cdot 10^{-7} \text{ esu}$, NLO-9 - $3.0649 \cdot 10^{-7} \text{ esu}$. Доказано, что эти значения значительно выше, чем у традиционных материалов, таких как Al_2O_3 ($2.2 \cdot 10^{-14} \text{ esu}$) и TiO_2 ($1.5 \cdot 10^{-12} \text{ esu}$).

4. Методом спектроскопии УФ-диффузного отражения и диаграммы Таус были определены оптические энергетические щели материалов, представляющие разницу энергий между валентной зоной и зоной проводимости. Получены следующие значения прямой запрещенной зоны: NLO-1 - 4,33 эВ, NLO-2 - 3,07 эВ, NLO-3 - 4,28 эВ, NLO-4 - 2,38 эВ, NLO-6 -

2,87 эВ и NLO-7 - 2,36 эВ. Замена хлора бромом привела к сужению запрещенной зоны (с 4,33 эВ до 3,07 эВ), что доказывает превосходство их оптоэлектронных свойств (NLO-2) по сравнению с (NLO-1). NLO-6>NLO-7>NLO-8>NLO-1>NLO-3>NLO-4>NLO-2>NLO-5.

5. Синтезированные нелинейные оптические материалы с галогенидом олова и краун-эфиром показали высокую термостабильность до 200°C в результате термогравиметрического (ТГ) и дифференциально-термического анализа (ДТА). Эти свойства позволяют применять материалы в высокотемпературных условиях.

6. Анализ поверхности Хиршфельда ясно показал влияние межмолекулярных взаимодействий в материалах NLO на активность NLO. Контакт O...H/H...O в соединении NLO составляет 54.3%, что стабилизирует молекулярную структуру, усиливает делокализацию электронов и повышает активность NLO. Преобразование галогенов (Cl, Br) и органических лигандов существенно изменяет параметры оптически занятого предложения, ПЛ и NLO третьего порядка, поэтому эти гибриды являются перспективными материалами в области фотоники и оптоэлектроники.

7. DFT-анализ соединения NLO-5 показал, что его дипольный момент составляет 29.2960 D, поляризуемость (α) 87.9361×10^{-24} esu, а гиперполяризуемость первого порядка (β) 6.1375×10^{-30} esu. Энергетический интервал НОМО-LUMO (ΔE) составил 3,3990 эВ. Эти параметры указывают на способность материала к внутримолекулярному переносу заряда (ВПЗ) и его потенциальное применение в устройствах оптической коммутации и сбора света.

8. В лаборатории химического анализа при ООО "Отдел технического контроля" Мубарекского газоперерабатывающего завода были испытаны солнечные батареи, произведенные на основе материалов NLO-6 и NLO-7. В результате клетки, изготовленные из краун-эфиров, имели более длительный срок службы по сравнению с клетками перовскита и отличались тем, что производились из дешевого сырья. В лабораторных условиях перовскитовые клетки достигли эффективности более 25%, их себестоимость очень высока, а срок годности очень короткий. Доказано, что панели солнечных элементов, изготовленные на основе материалов NLO, обладают эффективностью 20-22%, низкой стоимостью и длительным сроком годности.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 FOR THE AWARD OF
AN ACADEMIC DEGREE AT TERMIZ STATE UNIVERSITY**

KHOREZM MA'MUN ACADEMY

SAMANDAROV ELYORBЕК SHONAZAR UGLY

**SYNTHESIS, STRUCTURE, AND PROPERTIES OF NONLINEAR OPTICAL
MATERIALS BASED ON TIN HALIDES AND CROWN ETHERS**

02.00.01-Inorganic chemistry

02.00.04-Physical chemistry

**DISSERTATION ABSTRACT OF THE DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD) ON
CHEMICAL SCIENCES**

Termez-2025

The topic of the Doctor of Philosophy (PhD) dissertation is registered with the Higher Attestation Commission under the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of Uzbekistan under the number B2025.1.PhD/K919.

The dissertation has been prepared at the Khorezm Mamun Academy.

The abstract of dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) is available online www.tersu.uz and on the website of «ZiyoNet» information-educational portal www.ziynet.uz.

Supervisors:

Yakubov Yuldash Yusupboyevich
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Chellakarungu Balakrishnan
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Official opponents:

Raxmonova Dilnoza Salamovna
Doctor of Chemical Sciences, associate professor

Bekchanov Davron Jumanazarovich
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Leading Organization:

Samarkand State University

The dissertation defense will be held on “_____” _____ 2025 at “_____” at the meeting of the Scientific Council DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 at Termez State University at the address: 190111, Termez, district, pos. Barkamol Avlod, 43 tel: (+99876) 221-74-55; (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz

The dissertation is registered at the Informational Resource Center of Termez State University for №_____, which can be found at the IRC (Address: 190111, Termez, 43 Barkamol Avlod St., tel.: (+99876) 221-74-55; (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz

The abstract of the dissertation was distributed on "_____" _____ 2025.

Protocol at the register No. ____ dated "_____" _____ 2025.

I. Umbarov
Chairman of the Scientific
Council for the Awarding of
Doctor of Technical Sciences, Professor

Sh. Kasimov
Scientific Secretary of the Scientific Council
Awarding the Scientific Degrees,
Doctor of Chemical Sciences, Professor

G.Mukumova
Chairman of the Scientific Seminar under Scientific
Council for Awarding the Scientific Degrees,
Doctor of Chemical Sciences, Docent.

INTRODUCTION (abstract of doctor of philosophy PhD dissertation)

The aim of the research The aim is to synthesize new nonlinear optical materials based on tin halogenides and crown ethers with ligands such as 3-acetylpyridine, 3-pyridylmethanamine, methyl isonicotinate, nicotinonitrile, picolinic acid (2-pyridinecarboxylic acid), and pyridine-2-ylmethanamine, to determine their crystal structure, and to study their optical properties.

The objects of the Ligands based on tin halogenides and crown ethers: 3-Acetylpyridine; 3-pyridylmethanamine; methyl isonicotinate; nicotinonitrile; picolinic acid (2-pyridinecarboxylic acid); pyridin-2-ylmethanamine.

The scientific novelty of the research is as follows:

9 new complex compounds based on tin halides and crown ethers were synthesized, 6 of which were included in the Cambridge Crystallographic Database, deposit numbers 2464388, 2464389, 2465923, 2465924, 2344788, 2448617 were obtained;

The molecular and crystal structures of the synthesized complex compounds with nonlinear optical properties $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$ were determined by X-ray structural analysis;

From the complex compounds with optical properties synthesized on the basis of Crown ethers, the crystallization of $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$ in a centrosymmetric trigonal, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ in a centrosymmetric triclinic system was proven by X-ray structural analysis;

The energy difference between the valence and conduction bands of optical materials based on the obtained complex compounds was determined using the Tauc diagram, and it was proven that the optoelectronic properties decrease in the series $\text{NLO-6} > \text{NLO-7} > \text{NLO-8} > \text{NLO-1} > \text{NLO-3} > \text{NLO-4} > \text{NLO-2} > \text{NLO-5}$.

Implementation of research results. Based on the results obtained on the structure and optical properties of nonlinear optical materials synthesized on the basis of tin halides and crown ethers:

Information on the molecular and crystalline structure of newly synthesized nonlinear optical materials containing $[\text{SnCl}_6(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_5\text{N}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnCl}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_6\text{H}_6\text{NO}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $[\text{SnBr}_6(\text{C}_7\text{H}_8\text{NO}_2)_2]$, $[\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6(\text{C}_8\text{H}_{10}\text{NO})_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$, $[(\text{C}_{12}\text{H}_{24}\text{O}_6)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)_2(\text{I})_2]$, $[(\text{C}_{10}\text{H}_{20}\text{O}_5)(\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2)(\text{I})]$ is registered in the Cambridge Crystallographic Data Centre (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrievihg.html>) under the numbers No2464388, No246438 As a result, the presented information about the chemical compounds included in the database made it possible to use it in the synthesis of similar compounds and in describing their structure;

The obtained optical materials NLO 6 and NLO 7 were used as solar panel elements at Mubarek Gas Processing Plant LLC (certificate of Mubarek Gas Processing Plant LLC No. 964/GK-07 dated July 9, 2025). As a result, it was possible

to obtain inexpensive organic solar cells with an efficiency of up to 22%, replacing solar cells based on the mineral perovskite used in industrial solar batteries.

The volume and structure of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references, and appendices. The total volume of the dissertation is 120 pages.

E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLICATIONS.

I bo'lim (часть; part I).

1. Malathi, M., Samandarov, E. S., Senthana, S., Gunganathan, L., Balasubramanian, V., Arivazhagan, V., . Balakrishnan, C. Design, structural elucidation, dielectric characterization, and Hirshfeld surface analysis of pyridin-2-ylmethanaminium iodide-18-crown-6 supramolecular cocrystals //Journal of Materials Science: Materials in Electronics. – 2025. – Т. 36. – №. 14. – С. 843.
<https://doi.org/10.1007/s10854-025-14904-x> №3, Scopus.
2. Senthana S., Nandhini P., Gunganathan L., Dhanasekaran S., Balasubramanian V., Samandarov E.Sh., Ibragimov A.B., Gomathi V., Suppuraj P., Balakrishnan C.Synthesis, structural characterization, dielectric properties and Hirshfeld surface analysis of bis [4-(dimethylamino) pyridinium] hexabromostannate (IV) hybrid // Journal of Molecular Structure. –2025. –С. 143391.
<https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2025.143391> №3, Scopus.
3. Samandarov.E.Sh.,Ibragimov A.B.,Yakubov Y.Y.C. Balakrishnan. 18-crown-6 based supramolecular structure, z-scan, hirshfeld surface analysis nonlinear optical properties // O'zbekiston Kompozitsion Materiallar Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali-2025.-№2. -C.139-142-b. (02.00.00; №4)
4. Samandarov.E.Sh.,Ibragimov A.B.,Yakubov Y.Y.C. Balakrishnan. Ethylenediammonium hexachlorostannate(IV). synthesis, crystal structure, hirshfeld surface analysis. Namangan Davlat universiteti ilmiy axborotnomasi -2025.-№3-C. 156-161-b. (02.00.00; №18)
5. Samandarov E. Sh., Kodamboev P. K., Normamatov A.S., Yakubov.Y.Y., Ibragimov.A.B.Nonlinear optical (NLO) materials: bis(2-methyl-4-nitroanilinium) hexachloro-tin(IV) monohydrate. Quantum chemical calculations, synthesis, crystal structure, hirshfeld surface analysis, crystal voids. Qo'qon Davlat pedagogika instituti ilmiy xabarlari-2025.-№2-C. 234-245-b
6. Samandarov E. Sh., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Y., C.Balakrishnan. 18-crown-6 based supramolecular structure, hydrogen bonding behaviour and its nonlinear optical properties.Qo'qon davlat pedagogika instituti ilmiy xabarlari -2025.-№3-C. 9-16-b.
7. Samandarov.E.Sh., Ibragimov A.B.,Yakubov Y.Y.,C.Balakrishnan. synthesis of nonlinear optical materials; crystal structure, Tauc diagram. Qo'qon Davlat pedagogika instituti ilmiy xabarlari-2025.-№5-C. 285-294-b.
8. Yuldasheva N.N., Samandarov.E.Sh., Qodamboev.P.Q. Nonlinear Optical Materials of Inorganic-Organic Hybrid Semiconductors (R-C₆H₄CHCH₃NH₃)₂PbI₄//Texas Journal of Multidisciplinary Studies. 2024, -№30-C.1-7-b., №14. ResearchBib. 2025 IF-10,25.

II bo'lim (II часть; part II)

9. Samandarov E.Sh., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Y., Balakrishnan C. Advanced nonlinear optical materials and devices. n-(o-methoxyphenyl)aza-15-crown-5-ether. Urganch Davlat universiteti. «Kimyoning dolzarb muammolari» Mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjuman materiallari Urganch-2024-yil., 21-22-iyun., 184-186-b.

10. Samandarov E.Sh., Kodamboev P.K., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Y., Quantum chemical calculations of synthesized nonlinear optical materials based on 1,4-diaminobenzene PbJ_4 mercury. Urganch Davlat universiteti. «Kimyoning dolzarb muammolari» Mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjuman materiallari Urganch-2024-yil., 21-22-iyun., 186-189-b.

11. Samandarov E.Sh., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Y., Balakrishnan C. N-(o-methoxyphenyl)aza-15-crown-5-ether derivatives: highly efficient and wide range nonlinear optical response based cation recognition. Urganch Davlat universiteti. «Kimyoning dolzarb muammolari» Mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjuman materiallari Urganch-2024-yil., 21-22-iyun., 191-194-b.

12. Samandarov E.Sh., Usmanov B.X., Ishankulov A.E., P.Q. Qodamboev. Quantum chemical computing of nonlinear optical materials at mercury. Urganch Davlat universiteti «Kimyoning dolzarb muammolari» Mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjuman materiallari Urganch-2024-yil., 21-22-iyun., 234-236-b.

13. Samandarov E.Sh., P.Q. Qodamboev., A.B. Ibragimov., Y.Y. Yakubov. Synthesis of nonlinear optical materials utilizing tin. Namangan Muhandislik-texnologiya institut «Fizikaviy va kolloid kimyo fanlarining fundamental va amaliy muammolari hamda ularning innovatsion yechimlari» Namangan-2024-yil., 9-10-fevral., 1220-1222-b.

14. Samandarov E.Sh., Y.Y. Yakubov. Synthesis of nonlinear optical materials; crystal structure, tauc diagram. Namangan Muhandislik-texnologiya institut «Fizikaviy va kolloid kimyo fanlarining fundamental va amaliy muammolari hamda ularning innovatsion yechimlari» yechimlari» Namangan-2024-yil., 9-10-fevral., 1228-1229-b.

15. Samandarov E.Sh., Kodamboev P.K., Ibragimov A.B.; Yakubov Y.Y., C. Balakrishnan. Tin metal cluster compounds as new third-order nonlinear optical materials by computational study (NLO). Сборник трудов республиканской научно-практической конференции «Достижения и перспективисты супрамолекулярной химии» материалы конференция. Ташкент-2024г., 15 мая., 234-236-b.

16. Samandarov E.Sh., Yakubov Y.Y., C. Balakrishnan. Non-linear optical materials, hirshfeld surface analysis. Qo‘qon Davlat pedagogika Instituti «Kimyo ta’limi, fan va ishlab chiqarish integratsiyalari» Qo‘qon-2024., 22-may., 30-32-b.

17. Samandarov E.Sh., Yakubov Y.Y., C. Balakrishnan. Non-Linear Optical Materials, Bis (3-cyanopyridin-1-ium) hexabromostannate(IV). Qo‘qon Davlat pedagogika Instituti «Kimyo ta’limi, fan va ishlab chiqarish integratsiyalari» Qo‘qon-2024., 22-may., 81-84-b.

18. Samandarov E.Sh., Yakubov Y.Y., C. Balakrishnan. Crystal parameters of nonlinear optical materials. Qo‘qon Davlat pedagogika Instituti «Kimyo ta’limi, fan va ishlab chiqarish integratsiyalari» Qo‘qon-2024., 22-may., 131-134-b.

19. Samandarov.E.Sh., Yakubov.Y.Y.,C.Balakrishnan. Tauc diagram and z-scan studies for nonlinear optical materials. Qo‘qon Davlat pedagogika Instituti “Kimyo ta’limi, fan va ishlab chiqarish integratsiyalari” Qo‘qon-2024.,22-may.192-195-b.

20. Samandarov.E.Sh., Yakubov.Y.Y.,C.Balakrishnan.18-crown-6 based supramolecular structure, nonlinear optical properties. Qo‘qon Davlat pedagogika Instituti.“Kimyo ta’limi, fan va ishlab chiqarish integratsiyalari” Qo‘qon-2024-yil., 22-may.,51-53-b.

21. Samandarov.E.Sh., Yakubov.Y.Y.,C.Balakrishnan. Nonlinear optical (NLO) materials: Bis(2-Methyl-4-nitroanilinium) hexachloro-Tin(IV) monohydrate.Single crystal X-ray structure analysis. International Conference on Multidisciplinary Sciences and Educational Practices Rome,Italy-24/04/2025., www.econfseries.com.62-66-bet.

22. Samandarov.E.Sh., Yakubov.Y.Y.,C.Balakrishnan. Bis(2-methyl-4-nitroanilinium) hexachloro-tin(iv) monohydrate. hirshfeld surface analysis. International Conference on Multidisciplinary Sciences and Educational Practices Rome,Italy Date-24/04/2025. www.econfseries.com. 67-71-bet.

Avtoreferatning o‘zbek, rus va ingliz (rezyume) tillaridagi nusxalari
«Surxondaryo ilm va fan» jurnali tahririyatida tahrirdan o‘tkazildi.

Bosishga ruxsat etildi 09.04.2025 yil.
Ofset bosma qog‘ozi. Qog‘oz bichimi 60Ч84 1/16.
“Times New Roman” garniturasini. Ofset bosma usuli.
Shartli b.t. 2,8. Adadi 80 nusxa. Buyurtma № 31.

Termiz davlat universiteti nashr-matbaa markazida chop etildi.
Manzil: Termiz shahri, Barkamol avlod ko‘chasi, 43-uy.

