

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI HUZURIDAGI
FAN DOKTORI ILMIY DARAJASINI BERUVCHI
DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M RAQAMLI ILMIY KENGASH**

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI

XOLIQOVA GULYAYRA QO‘LDOSHEVNA

**MOCHEVINA VA HOSILALARINING NITRAT, FOSFAT TUZLARI
SINTEZI, XOSSALARI**

02.00.01 – Noorganik kimyo

**Kimyo fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi
AVTOREFERATI**

Toshkent – 2026

УДК 541.49+538.113+544.18+546.56.71.74.76.88+547.447.461.484.574

**Kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi avtoreferati
mundarijasi**

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

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

Xoliqova Gulyayra Qo'ldoshevna

Mochevina va hosilalarining nitrat, fosfat tuzlari sintezi, xossalari 3

Холикова Гуляйра Кулдошевна

Синтез, свойства нитратных, фосфатных солей мочевины и её производных
.....21

Kholikova Gulyayra

Synthesis and properties of nitrate and phosphate salts of urea and its
derivatives..... 39

E'lon qilingan ishlar ro'yxati

Список опубликованных работ

List of published works..... 43

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI HUZURIDAGI
FAN DOKTORI ILMIY DARAJASINI BERUVCHI
DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M RAQAMLI ILMIY KENGASH**

BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI

XOLIQOVA GULYAYRA QO‘LDOSHEVNA

**MOCHEVINA VA HOSILALARINING NITRAT, FOSFAT TUZLARI
SINTEZI, XOSSALARI**

02.00.01 – Noorganik kimyo

**Kimyo fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi
AVTOREFERATI**

Toshkent – 2026

Kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2023.4PhD/K683 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya Buxoro davlat universitetida bajarilgan.

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

Ilmiy rahbar:

Mardonov O'ktam Mardonovich
kimyo fanlari nomzodi, dotsent

Rasmiy opponentlar:

Kadirova Zuxra Chingizovna
kimyo fanlari doktori, professor

Abdullayeva Zubayda Shavkatovna
kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent

Yetakchi tashkilot:

Umumiy va noorganik kimyo instituti

Dissertatsiya himoyasi O'zbekiston milliy universiteti huzuridagi DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M raqamli Ilmiy kengashning 2026 yil «31» mart soat 15⁰⁰ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Toshkent shahri, Universitet ko'chasi, 4-uy)

Dissertatsiya bilan O'zbekiston milliy universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (№__raqami bilan ro'yxatga olingan). (Toshkent shahri, Universitet ko'chasi, 4-uy)

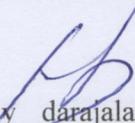
Dissertatsiya avtoreferati 2026 yil «19» mart kuni tarqatildi.

(2026 yil «18» mart dagi 4 raqamli reestr bayonnomasi)



 **T.S. Xoliqov**
Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy kengash raisi, k.f.d., professor

 **U.O. Ro'zmetov**
Ilmiy darajalar beruvchi ilmiy kengash ilmiy kotibi, k.f.d., dotsent

 **Sh.A. Kadirova**
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash qoshidagi ilmiy seminar raisi, k.f.d., professor

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda dunyoning kimyoviy, biologik, tibbiyot va texnologik amaliyotlarida organik va noorganik moddalar asosidagi molekulyar kompleks birikmalar keng qo'llanilayapti. Sintez qilingan ko'p funksiyali, tarkibida amin va karbonil guruhlari tutgan amidlar qatoriga kiruvchi mochevina va hosilalarining noorganik kislotalar bilan molekulalar komplekslari hamda ularning eritmalari agrokimyoviy, biologik faollik va o'ziga xos xususiyatli maxsus moddalar xossalarini namoyon qiladilar. Shu sababli bunday moddalarni sintez qilish, tarkiblarini aniqlash, xossalarini tadqiq etish va ulardan foydalanish imkoniyatlarini izlab topish muhim amaliy ahamiyat kasb etadi.

Jahonda bugungi kunda amidlar, shu jumladan mochevina va uning hosilalarini har tomonlama qo'llash bo'yicha aniq maqsadga yo'naltirilgan ilmiy tadqiqotlar olib borilayapti. Ular asosida turli moddalarni sintez qilish, ularni ajratib olishning yangi usullarini ishlab chiqish va amalga oshirish sharoitlarini optimallashtirish bu tadqiqotning maqsad va vazifalarini tashkil etadi. Mochevina va hosilalarining faol funksional guruhli, molekulyar komplekslarini olish usullari, tarkibi, tuzilishi, xossalari va qo'llanilish sohalari o'zaro bog'liqligini hozirgi zamon tadqiqot usullaridan foydalanib nazariy asoslash muhim ilmiy ahamiyat kasb etadi.

Respublikamizda kimyo sanoatini rivojlantirish maqsadida zamonaviy talablarga javob bera oladigan chiqindisiz, ko'p funksiyali noorganik moddalar ishlab chiqarishga alohida e'tibor qaratilmoqda. Bu borada ichki bozorni import o'rini bosadigan samarali mahalliy sanoat mahsulotlari bilan ta'minlash uchun erituvchilar, antipirenlar, korroziya ingibitorlari va sanoat chiqindilaridan noorganik pigmentlar sintez qilishning ilmiy asoslarini yaratish bo'yicha aniq maqsadli, keng ko'lamlil ilmiy tadqiqotlar amalga oshirilmoqda. 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 Farmonida mavjud imkoniyatlarni to'liq ishga solgan holda mahalliy sanoat tarmoqlari eksport salohiyatini yanada rivojlantirishga yo'naltirilgan muhim vazifalar belgilab berilgan. Bu borada, mahalliy xom ashyolar asosida sanoat mahsulotlarini ishlab chiqarishning ekologik toza va iqtisodiy samarador texnologiyalarni yaratish, yangi qo'shimcha qiymatli kimyoviy mahsulotlar sintez qilish va ulardan turli maqsadlarda foydalanishning qo'shimcha imkoniyatlarini yaratilishi muhim ahamiyat kasb etadi.

O'zbekiston Respublikasi Prezidentining 2019 yil 23 maydagi PQ-4335-son "Qurilish materiallari sanoatini jadal rivojlantirishga oid qo'shimcha chora-tadbirlari to'g'risida" hamda 2019 yilning 12 fevraldagi PQ-4186-son "To'qimachilik va tikuv-trikotaj sanoatini isloh qilishni yanada chuqurlashtirish va uning eksport salohiyatini kengaytirish 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 qo'shilgan hissa bo'lib, ushbu dissertatsiya tadqiqoti natijalari muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning Respublika ilm-fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo'nalishlariga muvofiqligi. Tadqiqot ishi Respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining VII «Kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar» ustivor yo'nalishiga muvofiq bajarilgan.

Muammoning o'rganilganlik darajasi. Noorganik moddalar kimyosi bo'yicha dunyoning yetakchi ilmiy tadqiqot muassasalarida molekulyar kompleks birikmalari sintezi, tarkibi, tuzilishi, xossalari o'rganish usullari bo'yicha keng ko'lamdagi tadqiqotlar olib borilgan. Ushbu yo'nalishda Klemperer W., Lipkowski J., Morokuma K., Bishop R., Bauder A., Herman M., Buchachenko A.L., Person W.B., Zhao X., Coe B.J., Lavachchi A. kabi olimlar tadqiqotlari salmoqli ahamiyatga ega.

Kompleks birikmalar kimyosining nazariy va amaliy muammolari tadqiqotlari bo'yicha Babkina T.S., Kuznetsov A.V., Zuban A.B., Kosova D.A, Shenkin Y.S., Davidov Y.I., Khusanov E.A, Shukhurov Z.A, Petrenko Yu.M, Turker L., Gumush S., Mirsaidov U.I. boshchiligidagi olimlar va maktablari vakillari tadqiqotlarining ilmiy-amaliy natijalari munosib o'rin tutadi.

Respublikamizda kompleks birikmalar kimyosi sohasiga Parpiyev N.A., Sharipov X.T., hozirda davom ettirayotgan Ibragimov B.T., Xo'jayev O.F., Shobilolov O.A., Umarov B.B., Kadirova Sh.A., Kadirova Z.Ch., Daminova Sh.Sh., Sobirov V.A., To'rayev X.X., Ibragimov A.B. kabi olimlar samarali tadqiqotlar olib borishyapti. Amid moddalarning turli kislota va formaldegidli hosilalari addukt va yuqori molekulyar birikmalari sintezi, korroziya ingibitorligi va antipiren xossalari tadqiqotlari Djalilov A.T., Akbarov H.I., Guro V.P., Abdullayev Sh.A., Eshmamatova N.B., Nurqulov F.N., fizik-kimyoviy tahlili va agrokimyoviy xossalari akademiklar Beglov B.M., Namozov Sh.S. shogirdlari Kucharov B.Kh., Tadjiev S.T. va boshqalar tomonidan olib borilayapti, bu tadqiqotlar natijalari karbamid va fosforli birikmalar noorganik kimyosi hamda kimyoviy texnologiyasi rivojlanishiga qo'shilgan salmoqli hissadir. Shu bilan birga ilmiy ma'lumotlar tahlilining ko'rsatishicha, mochevina va hosilalarining nitrat, fosfatli molekulyar kompleks birikmalari sintezi, fizik-kimyoviy va polifunksional xossalari aniqlash alohida ilmiy-amaliy ahamiyat kasb etadi.

Ilmiy nashrlar ma'lumotlari tahlilining ko'rsatishicha, mochevina va hosilalarining noorganik va organik kislotalar bilan molekulyar birikmalarining sintez usullarini ishlab chiqish, zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari (ZFKTU) bilan ularning tarkibi va tuzilishini o'rganish bo'yicha tadqiqotlar olib borilgan bo'lsada, mochevina va hosilalarining nitrat, metafosfatli molekulyar kompleks birikmalarining fizik-kimyoviy, spektral, antipirenlik va korroziya ingibitorlik xossalari hamda ulardan amalda foydalanish sohasini aniqlash yetarlicha tadqiq etilmaganligi hozirda ushbu muammolar dolzarbligini belgilaydi.

Dissertatsiya mavzusining dissertatsiya bajarilgan oliy ta'lim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi. Dissertatsiya

ishi Buxoro davlat universitetining ilmiy-tadqiqot ishlari rejasiga muvofiq “Tabiiy va sintetik, organik, noorganik va koordinatsion birikmalar sintezi, tuzilishi, xossalari va tadqiqoti” mavzusidagi ilmiy-tadqiqot yo‘nalishi doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi. Mochevina va hosilalarining nitrat, fosfat tuzlari sintezi, xossalari aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

- mochevina va biuretning nitrat, metafosfat kislotalar bilan turli molekulyar nisbatlardagi birikmalari hosil bo‘lishi ehtimolliklari, molekulari atomlaridagi elektron va zaryadlar taqsimoti, kimyoviy bog‘lanish tabiati, molekular parametrlarini kvant-kimyoviy usullar (KKU) bilan tadqiq etish va asoslash;

- mochevina va biuretning nitrat hamda metafosfat kislotalari bilan turli molekulyar nisbatlardagi qattiq holdagi birikmalarini olish, ular eritmalarining xossalari aniqlash;

- mochevina va biuretning nitrat, metafosfatlari qattiq holdagi birikmalari hamda eritmaları fizik-kimyoviy, spektral va rentgenografik xossalari zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari (ZFKTU) bilan tadqiq qilish;

- mochevina va biuret nitratlari eritmalarining “tarkib-xossa” bog‘liqligida tuproqdagi gumus komponentlari faolligini, texnologik jihozlar quyqalari eruvchanligini oshirish xossalari tadqiq etish, ular asosida noorganik pigmentlar olish.

- mochevina va biuret metafosfat birikmalari eritmalarining sellyuloza materiallari yong‘inbardoshligini oshiruvchanlik xossalari tadqiq etish, ular asosida antipiren tarkiblar olish.

- mochevina va biuret nitrat, metafosfatlarining turli texnik suvlar muhitlarida metall qotishmalarini korroziyadan himoyalash xossalari tadqiq etish, ular asosida korroziya ingibitorlari eritmalarini olish.

Tadqiqot obyekti Mochevina, biuret va ularning nitrat, metafosfatli birikmalari, kam eruvchan metall birikmalari, karton, mato, qog‘oz, yog‘och, St-3 va St-20 po‘lat, tuproq namunalari olingan.

Tadqiqotning predmetini mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari kvant-kimyoviy parametrlari tahlili, kam eruvchan birikmalar eruvchanligi, tuproq namunalari, sellyuloza materiallari yonuvchanligi, St-3, St-20 po‘lat namunalari korroziyadan himoyalash jarayonlari tahlili tashkil etadi.

Tadqiqotning usullari. Dissertatsiya tadqiqotlarida KKHU ORCA, Gaussian dasturlari, IQ, EPR spektroskopiya, SEM-EDS, RFA, RTT, termik, gravimetriya, konduktometriya va pH-metriya usullaridan foydalanildi.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

- kvant-kimyoviy hisoblashlar (KKU) asosida mochevina va biuretning nitrat, metafosfat kislotalari bilan 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi birikmalari hosil bo‘lishi imkoniyatlari aniqlanib, molekulari atomlaridagi elektron va zaryadlar taqsimoti, kimyoviy bog‘lanish tabiati, molekular energetik parametrlari aniqlanib, tarkib va tuzilishlari isbotlangan;

- mochevina va biuretning nitrat hamda metafosfat ionlari bilan 12 ta molekulyar birikmalari qattiq holda olinib, ularning tarkibi, tuzilishi va ular eritmaları xossalari ZFKTU bilan tadqiq etilib, qoʻllanish sohalari aniqlangan;

- birinchi marta EPR spektrometriya usuli bilan tuproqdagi gumus komponentlari faolligining karbamid nitratlari eritmaları muhiti pH-iga va nitrat-ionlari miqdoriga bogʻliqligi aniqlangan;

- mochevina nitratlari eritmalarining texnologik jihozlardagi quyqalar eruvchanligini 26.0-67.6 % gacha oshirishi, hosil boʻlgan eritmalarda $Fe^{2+/3}$ ionlari miqdorining yuqoriligi (18-23 g/l) aniqlanib, ular asosida texnologik chiqindilardan turli maqsadlarda ishlatiladigan noorganik pigmentlar olingan;

- karbamid va biuret metafosfat birikmalari eritmalarining sellyuloza materiallari yongʻinbardoshligini oshirish xossalari tadqiq etilib, ularning boʻz matosi, karton va yogʻoch namunalari yonuvchanligini (72.99-98.89% ga) kamaytirish xossasi aniqlanib, olingan natijalarga koʻra bu moddalar asosida samarador II guruh (G2) antipiren vositalari olish mumkinligi isbotlangan;

- mochevina va biuretning HNO_3 , HPO_3 bilan 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi 0.5-2.0% li kislotali, neytral eritmalarining texnik suvlar muhitida (St-3, St-20 poʻlat) qotishmalarni korroziyadan himoyalash xossalari gravimetriya, EPR spektrometriya (birinchi marta) usullari bilan $pH = 1.66 - 9.0$ oraligʻida tadqiq etilib, ularning 82.0 – 94.75 % korroziya ingibitorligi, optimal tarkiblari va metafosfatlarning yuqori konsentratsiyali (2.0%li) eritmalarida “korroziya inversiyasi” sodir boʻlishi aniqlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

- karbamid va biuret nitrat, metafosfatlari eritmalarining fizik-kimyoviy xossalarini oʻrganish natijalariga koʻra amalda keng qoʻllaniladigan polifunksional: kam eruvchan birikmalar eruvchanligini, tuproqdagi gumus moddalar, mikroelementlar faolligini oshiruvchi eritmalar olish usullari ishlab chiqilgan;

- mochevina nitratlari eritmalarining texnologik jihozlardagi quyqalarni eritish xossasi tadqiqotlari asosida takibida $Fe^{2+/3+}$ ionlari saqlagan eritmalar olingan, ularni turli usullar bilan qayta ishlab, qurilish, lok-boʻyoq ishlab chiqarishda qoʻllaniladigan noorganik pigmentlar olingan;

- mochevina va biuret nitrat, metafosfatlari eritmalarining neft-gaz sanoati suvli eritmaları $pH = 1.66-9.0$ muhitlarida antikorroziya xossalari tadqiqotlari natijalariga koʻra takibida 0.5-1.0% MNM, MDN, MMMF, BMMF saqlagan yuqori samarador korroziya ingibitorlari eritmaları olish usullari yaratilgan;

- karbamid va biuret metafosfatlari eritmalarining sellyuloza materiallari: boʻz matosi, karton va yogʻoch namunalari yonuvchanligini (72.99-98.89% ga) kamaytirish xossasi aniqlanib, natijalarga koʻra bu moddalar asosida GOST 16363-98, GOST R 5081-0-95 boʻyicha II (G2) guruh yongʻindan himoyalash toifasiga mansub, amidfosfatli samarador antipen vositalari olish usullari ishlab chiqilgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi mochevina va biuret nitrat, metafosfat birikmalari hosil boʻlishi, molekulyar parametrlarini KKH larida ORCA va Gaussian dasturlari, ular eritmalarining spektral, fizik-kimyoviy xossalari

tadqiqotlarida IQ-, EPR spektroskopiya, RTT, RFA, termik va gravimetrik tahlil, pH-metriya, konduktometriya usullaridan foydalanilganligi bilan ifodalanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati KKV bilan mochevina va biuretning HNO_3 , HPO_3 bilan 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi birikmalari hosil bo'lishi imkoniyatlari, 12 ta molekulyar birikmalari olishning optimal sharoitlari aniqlanib, ularning tarkibi, tuzilishi, eritmalarini xossalari tadqiq etilib, tuproqdagi gumus komponentlari faolligi eritma pH-iga va NO_3^- miqdoriga bog'liqligi, texnologik jihozlardagi quyqalar eruvchanligini, sellyuloza materiallari yong'inbardoshligini oshirishi, texnik suvlar muhitida metall qotishmalarini korroziyadan himoyalash xossalari bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati tadqiqotlar natijalari asosida mochevina nitratlarining tuproqdagi gumus komponentlari faolligini oshirishi, texnologik jihozlardagi quyqalarni eritishi bilan chiqindilardan turli pigmentlar, mochevina va biuret metafosfatlari eritmalarining sellyuloza materiallari yong'inbardoshligini oshiruvchi antipiren vositalar, St-3, St-20 po'latlarning korroziya ingibitorlarini olish usullari yaratilganligi bilan belgilanadi.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi. Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari eritmalarining polifunksional xossalari namoyon etishi bo'yicha olingan ilmiy va amaliy tadqiqotlar natijalari asosida:

Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari polifunksional eritmalarini korroziya ingibitorlari sifatida "Sho'rtan NGQCh" boshqarmasiga qarashli "gradirnaya" suv ta'minoti (подпитка) uskunasi metall konstruksiyalarini korroziyadan himoyalashda amaliyotga joriy qilingan ("Sho'rtan neft va gaz qazib chiqarish" boshqarmasining 2024-yil 03-maydagi № ОП02/Б0-1777- son ma'lumotnomasi). Natijada mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari asosida agressiv muhitda samarali korroziya ingibitorlari yaratish imkoniyatini bergan;

Mochevina mononitrati, biuret monogidratining molekulyar tuzulishi krisstallografik ma'lumotlari Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga kiritilgan (CCDC 2511988, 2512468). Natijada, o'xshash birikmalarni tuzulishini tavsiflashda taqdim etilgan ma'lumotlardan foydalanish imkoniyatini bergan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Tadqiqot natijalari 18 ta, jumladan, 5 ta respublika va 13 ta xalqaro anjumanlarida ma'ruza qilingan va muhokamadan o'tgan.

Tadqiqot natijalarining e'lon qilinishi. Dissertatsiya mavzusi bo'yicha jami 28 ta ilmiy ish, shu jumladan, O'zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan doktorlik dissertatsiyalari (PhD) asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 1 ta monografiya, 6 ta maqola (Respublika nashrlarida 2 ta va xorijiy jurnallarda 4 ta maqola) chop etilgan.

Dissertatsiyaning tuzilishi va hajmi: Dissertatsiyaning tarkibi kirish, uchta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati va ilovalardan iborat bo'lib, hajmi 120 betni tashkil etadi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Kirish qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati asoslangan, tadqiqotning maqsad va vazifalari, ob'ektlari va predmeti tavsiflangan, O'zbekiston Respublikasi fan va texnologiyalarni rivojlantirishning ustuvor yo'nalishlariga mosligi bayon etilgan. Tadqiqot natijalarining ilmiy yangiligi va amaliy ahamiyati, ishonchliligi asoslangan, nazariy va amaliy ahamiyatlari ochib berilgan, amaliyotga joriy etilishi, chop etilgan ishlar va dissertatsiyaning tarkibi bo'yicha ma'lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“Mochevina va uning asosidagi molekulyar komplekslar, ularning tadqiqotlari va qo'llanilish sohalari”** nomli I bobida ushbu mavzudagi mamlakatimiz va xorijiy nashrlaridagi tadqiqotlarning ilmiy ma'lumotlari umumlashtirilgan va ularning tahlili natijasida tadqiqotning maqsadi, vazifalari va dolzarbligi asoslangan.

Dissertatsiyaning **“Mochevina va biuret nitratlari hamda metafosfatlari sintezi va ular eritmalarining tadqiqotlari”** nomli II bobda molekulyar kompleks birikmalarining sintezi va kimyoviy element tahlili, IQ, EPR spektrometriya, SEM-EDT, RFA, RTT, TGA/DSC, gravimetrik tahlillar, fotokolorimetriya, pH-metriya, konduktometriya usullari, molekulyar parametrlarni KKH ORCA va Gaussian dasturlari paketlari hamda ularni solishtirish bilan sintez qilingan molekulyar birikmalar tarkibi va tuzilishini aniqlash ma'lumotlari taqdim etilgan.

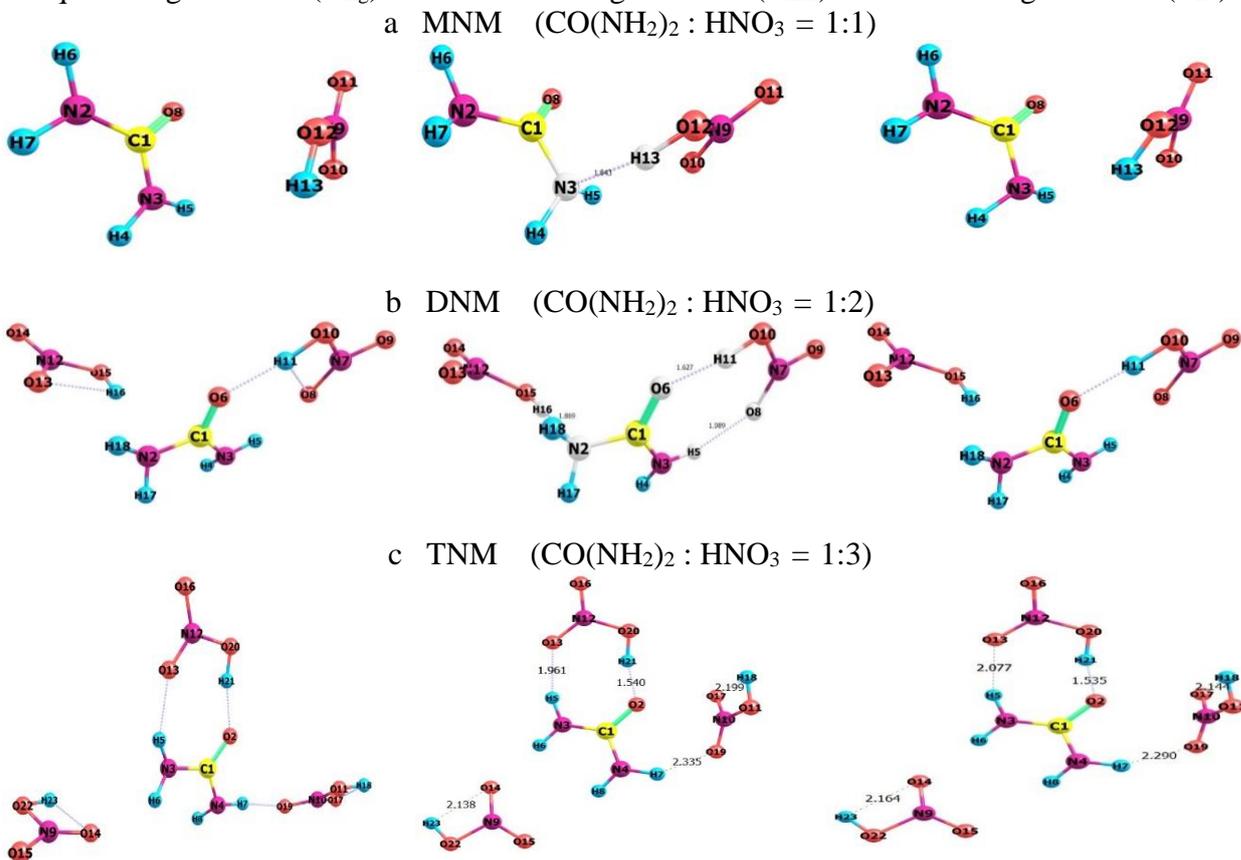
Dissertatsiyaning **“Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari tadqiqotlari va ularning amalda qo'llanilish natijalari tahlili”** nomli III bobida olingan natijalar muhokamasiga bag'ishlangan. Mochevina va biuret nitrat va metafosfat birikmalarining sintezi, tarkibi, tuzilishi, xossalari kvant-kimyoviy hisoblash va zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqotlari natijalari tahlillari, ular asosidagi xulosalar keltirilgan. Sintez qilingan birikmalarining amalda qo'llanilish tadqiqotlari: tuproq tarkibidagi faol gumin kislotasi miqdorining oshirishi, antipireniklik va korroziya ingibitorligi xossalari o'rganilishi natijalari keltirilib, ularning amalda qo'llanilishi bo'yicha xulosalar qilingan.

Mochevina va biuret nitrat, metafosfat birikmalarining kvant-kimyoviy tadqiqotlari

Mochevina va nitrat kislota molekularining tarkibi, tuzilishi, elektron tabiati ular tarkibidagi elektron donorlik va akseptorlik xossalari ega bo'lgan O, N atomlari va ular asosidagi funksional guruhlar C=O, -NH₂, HO⁻ va NO₃⁻, H⁺ ionlar mavjudligi hamda ular ishtirokidagi kimyoviy o'zgarishlar DFT hisoblash usuli bilan o'rganilib, ularning natijalari tahlil qilindi. Tadqiqotlar natijalariga ko'ra turli energetik holatlarda kuchli qutblangan ($\mu_{\text{CO(NH}_2)_2} = 4.30 \text{ D}$, $\mu_{\text{HNO}_3} = 2.30 \text{ D}$) moddalarning CO(NH₂)₂:HNO₃ = 1:1÷1:3 molyar nisbatlarida amid >C=O, -NH₂ guruhlari va kislotaning H, O atomlari tufayli [(H₂N)₂C=O]·n(H-ONO₂) (n=1,2,3) tarkibli molekulyar birikmalar (ion juftliklari) hosil bo'lishi isbotlandi (1-rasm). Natijalar CO(NH₂)₂:HNO₃ nisbatda HNO₃ miqdorining ortishi nazariy jihatdan 1:1÷1:3 molyar tarkiblarga mos keluvchi MNM, DNM, TNM birikmalar hosil bo'lishini tasdiqlaydi. Ular hosil bo'lishini isbotlochi umumiy energiya ($\Delta E_{\text{total}} =$

$E_{\text{total(additiv)}} - E_{\text{total(hisob)}}$ farqi ($\Delta E_{\text{total}} = -0.03, -55.67, -111.3$ eV) hosil bo‘ladigan birikmalar barqarorligining MNM < DNM < TNM qatorda ortib borishini ko‘rsatdi. Shunday energetik farq (ΔE_{total}) mochevina metafosfatlari (MMF) tadqiqotlarida aniqlanmadi. Ular $E_{\text{total(additiv)}}$ manfiy qiymati yig‘indisi ortib borishi bu moddalarning hosil bo‘lishini tasdiqlasada, ΔE_{total} qiymatlari o‘zaro yaqin bo‘lib, nisbiy barqarorliklari ulardan MN lari barqaror bo‘lishini ko‘rsatadi.

Yuqori energetik holat (E_{high}) Minimal energetik holat (E_{min}) Past energetik holat (E_{low})



1-rasm. Turli energetik holatlarda MN larda $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ va HNO_3 larning o‘zaro orientatsiyalari.

Biuret nitratlari-BN, metafosfatlari-BMF KKH larida $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ dan farqli holda, biuret $(\text{H}_2\text{N-CO})_2\text{NH}$ molekulasidagi atomlar soni, funksional guruhlar, ularning fazoviy (*sis-trans*) joylashuvi va molekuladagi aminoatsil ($\text{H}_2\text{N-C(O)-}$) guruhlarning -NH- fragmenti atrofida aylanishi e‘tiborga olindi. Bulardan BMF tarkibida HPO_3 miqdori ortishi bilan molekullarning EM, elektrofilligi, ΔN_{max} , μ , va umumiy energiyasi (E_{total}) ortib borishi, lekin biuret molekulasining fazoviy izomeriyasi (*sis-trans*) bunga ta’sir etmasligi aniqlandi (1-jadval).

1-jadval.

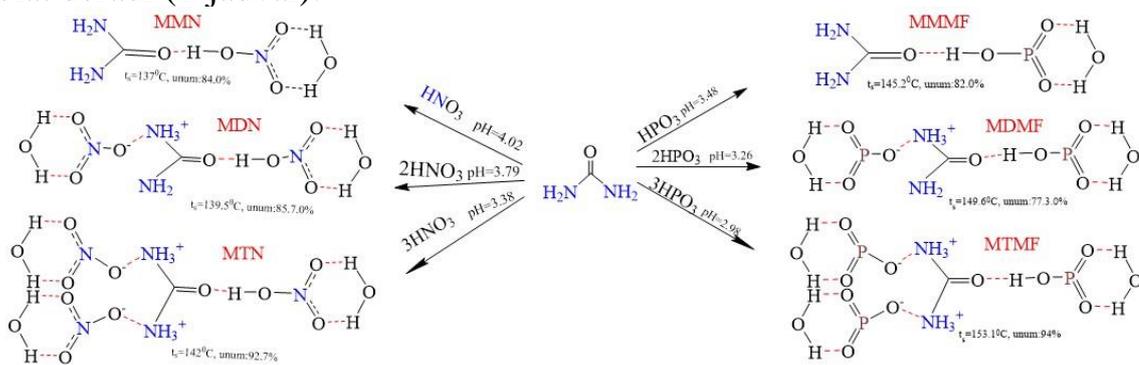
Biuret, HPO_3 , BMF larning optimallashtirilgan KKH hisoblashlari bo‘yicha molekulyar parametrlari va deskriptorlari

Kvant-kimyoviy parameter	Biuret		HPO_3	BMMF		BDMF		BTMF	
	<i>sis</i>	<i>trans</i>		<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>
E_{HOMO} , eV	-6.916	-7.316	-9.28	-7.692	-8.015	-8.534	-8.607	-8.262	-7.916
E_{LUMO} , eV	-0.084	0.305	-1.79	-1.036	-0.789	-1.348	-1.607	-3.014	-4.367
$ \Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$, eV	6.832	7.621	7.49	6.656	7.226	7.186	7	5.248	3.549
Elektromanfiylik, (EM)									
$\chi = (I + A)/2$, eV	3.5	3.5055	5.535	4.364	4.402	4.941	5.107	5.638	6.1415
Elektrofillik ko‘rsat-kichi, $\omega = \mu_p^2/2\eta$, eV	1.793	1.6125	4.0903	2.8613	2.6817	3.3974	3.7259	6.057	10.6278

Maksimal zaryad uzatish indeksi, $\Delta N_{max} = -\mu_p/\eta$	1.0246	0.92	1.478	1.3113	1.2184	1.3752	1.4591	2.1486	3.461
Dipol momenti, μ , Debay)	7.5646	3.4607	3.2221	10.1254	9.094	9.4068	5.4583	10.4029	13.4065
Umumiy energiya, keV	-10.723	-10.724	-15.452	-26.173	-26.168	-41.623	-41.624	-57.074	-57.048

Biuretning *sis/trans* tuzilishlari $\mu_{Biur} = 7.5646$ D/ $\mu_{Biur} = 3.4607$ D qiymatlari nisbati 2.0 martadan yuqoriligi, *sis* – tuzilishda simmetriyaning pastligini isbotlaydi. Umuman, KKH larga ko‘ra, dastlabki moddalarga nisbatan BMF birikmalari dipol momentlari yuqori (9.0940-13.4065 D) bo‘lishi va bunga asoslanib, dastlabki moddalarga nisbatan BMF larning reaksiya qobiliyati, kimyoviy xossalari amalda farqli bo‘lishi to‘g‘risida xulosa qilindi. Bulardan faqat *trans*-BDMF eng kam ($\mu_{BDMF} = 5.4583$ D) qutblangan molekula bolib, bu har bir HPO_3 molekulasi *trans*-biuretning aminoatsil guruhlari O, H atomlari bilan H-bog‘lari va donor-aktseptor bog‘lanishi hosil qilishidan dalolat beradi.

KKH natijalari bo‘yicha BN va BMF larning E_{total} (*additiv*), E_{total} (*hisob*) qiymatlari farqlari ($\Delta E_{total} \approx 0,0$, KeV) kuzatilmaganligi bu moddalarning nazariy jihatdan hosil bo‘lishlari, lekin ular amalda qattiq holda beqaror bo‘lishlari mumkinligi yoki mahsulotning tarkibi dastlabki moddalar molyar nisbatlaridan farqli bo‘lishi, ya’ni ular hosil bo‘lishida inkogurientlik va invariantlik hodisalari namoyon bo‘lishidan dalolat beradi (1-jadval).



Mochevina nitrat va metafosfatlarining sintezi sxemasi

2-jadval

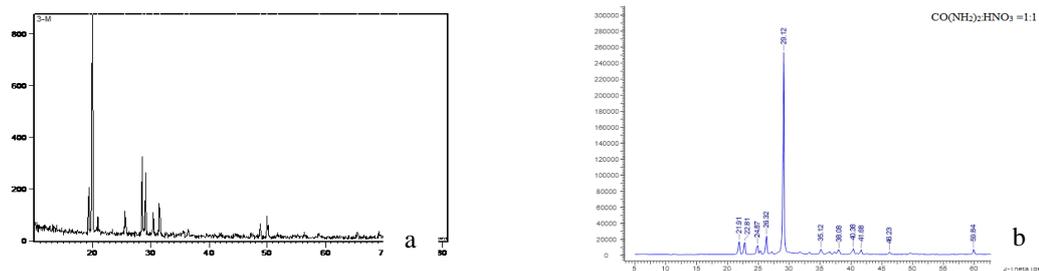
Mochevina va biuret nitrat va metafosfatlari kimyoviy tarkibi va ayrim fizik-kimyoviy xossalari qiymatlari

T/r	Birikmalar	χ , 25 °C, mS/sm	Rangi	Unum, %	t^o_{suyuq} , °C	Topilgan (%)			Hisoblangan (%)		
						C	H	N	C	H	N
1	MMN	160.1	Oq rangli groskopik moddalar	84	137.0	9.76	4.10	34.14	9.82	4.22	34.01
2	MDN	106.2		85.7	139.5	6.45	3.25	30.11	6.34	3.34	30.14
3	MTN	101.3		92.7	142.0	4.82	2.83	28.12	4.73	2.92	28.06
4	MMMF	42.3		82	145.2	8.58	3.60	20.01	8.61	3.23	19.8
5	MDMF	61.8		77.3	149.6	5.46	2.75	12.73	5.47	2.71	12.52
6	MTMF	75.4		94	153.1	4.00	2.35	9.34	4.01	2.24	4.00
7	BMN	38.9		81.9	152.1	14.46	3.64	33.73	13.10	2.96	32.50
8	BDN	56.5		87.2	157.2	10.49	3.08	30.57	10.10	3.25	31.20
9	BTN	69.2		79.6	159.8	8.22	2.76	28.77	8.10	2.64	28.23
10	BMMF	46.9		79.2	183.2	13.12	3.30	22.95	13.02	3.35	22.86
11	BDMF	49.8		80.5	163.8	9.13	2.68	15.98	9.03	2.78	15.64
12	BTMF	56.2		76.4	167.3	7.00	2.35	12.25	7.14	2.02	12.38

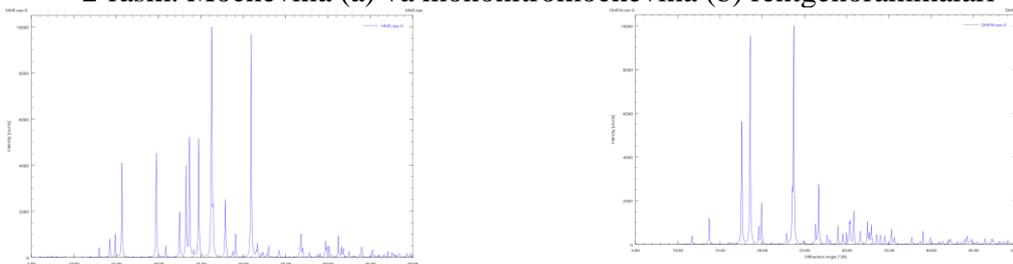
Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat birikmalari tarkibi va tuzilishini FKTU bilan tadqiq etish natijalari

1-sxema bo‘yicha sintez qilingan birikmalarning tarkibi, tuzilishi va xossalari ZFKTU bilan aniqlandi va o‘rganildi (2-jadval). Mochevina va MN hamda MMMF, MDMF (2,3-rasm) rentgenogrammalari farqi sintez qilingan namunalarning yangi modda ekanligini isbotlandi. Mochevina:HNO₃=1:1 va 1:2

nisbatda sintez qilingan birikmalar IQ spektrlaridagi keng yutilish sohasi 3680-3120 cm^{-1} ular tarkibida bog‘langan HNO_3 va mochevina molekulari birgalikda - $\text{O}\cdots\text{H}$ - bog‘lari hosil qilganini ko‘rsatdi.

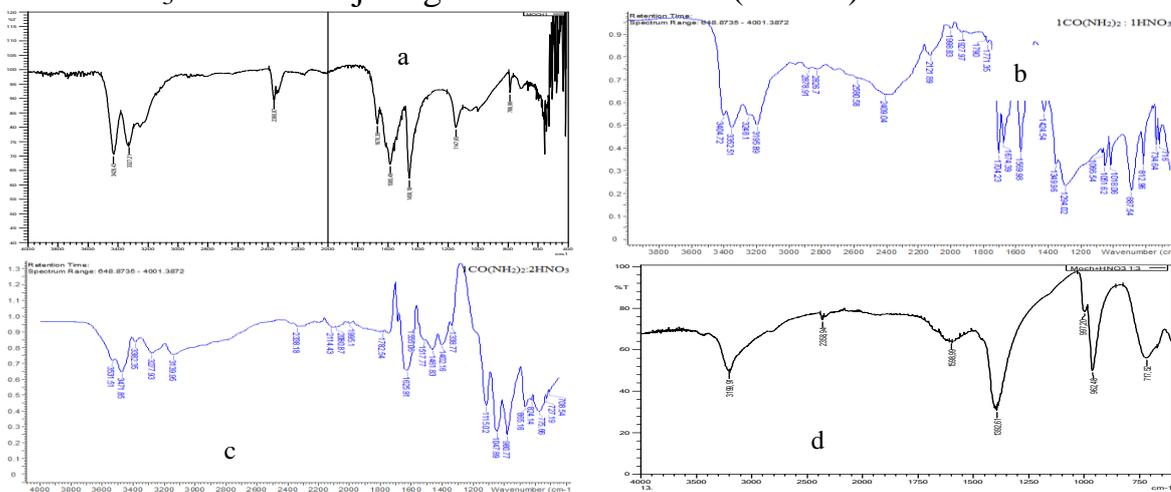


2-rasm. Mochevina (a) va mononitromochevina (b) rentgenorammalari



3- rasm. a) MMMF b) MDMF larning rentgenorammalari

Mochevina $\nu(\text{C}=\text{O})$ 1695.43 cm^{-1} dagi tebranishi nitrat kislota bilan birikma hosil qilganda $>\text{C}=\text{O}\cdots\text{H}^+$ protonlanishi sababli 1633.75 cm^{-1} ($\sim 62 \text{ cm}^{-1}$) gacha past chastotali siljishiga olib kelgan. Mochevina spektridan farqli holda tarkiblari 1:1 ÷ 1:3 nitratlari spektrlarida $1327 \pm 10 \text{ cm}^{-1}$ dagi $\nu(\text{NO}_3^-)$ yutilish chiziqlari modda tarkibida NO_3^- ionlari mavjudligidan dalolat beradi (4-rasm).

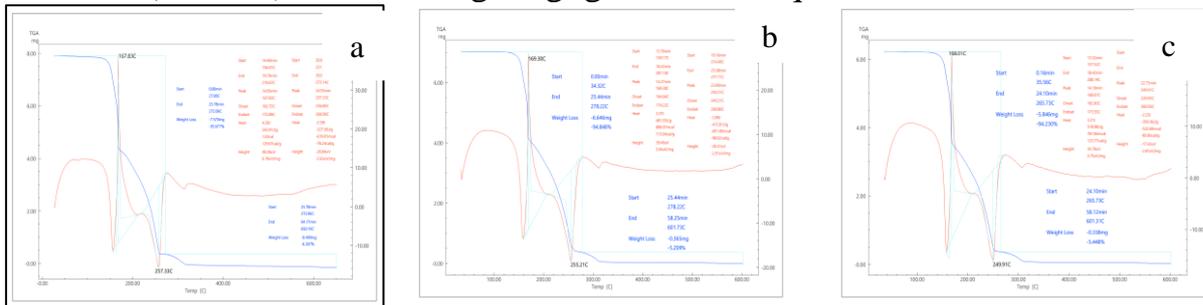


4-rasm. a) Mochevina b) MMN, c) MDN, d) MTN IQ spektrlari

Sintez qilingan NM larining **termik xossalari** TGA, DTA va DSC usullari bilan o‘rganildi va ularning termogrammalari (5-rasm.a-c)ga ko‘ra ($20\text{-}600^\circ\text{C}$) ularda bir xil mexanizmdagi termik parchalanish jarayonlari borganligi aniqlandi (5-rasm). MMN ning suyuqlanishi 140°C da boshlanib, 167.83°C gacha davom etishi va $167.83\text{-}257.33^\circ\text{C}$ oralig‘ida ketma-ket boruvchi parchalanish tufayli 7.51 mg yoki 95.67% massa yo‘qotib, MNM avval $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ va HNO_3 ga, keyin HCNO - sianat kislota va N_xO_y gazlarigacha parchalangan.

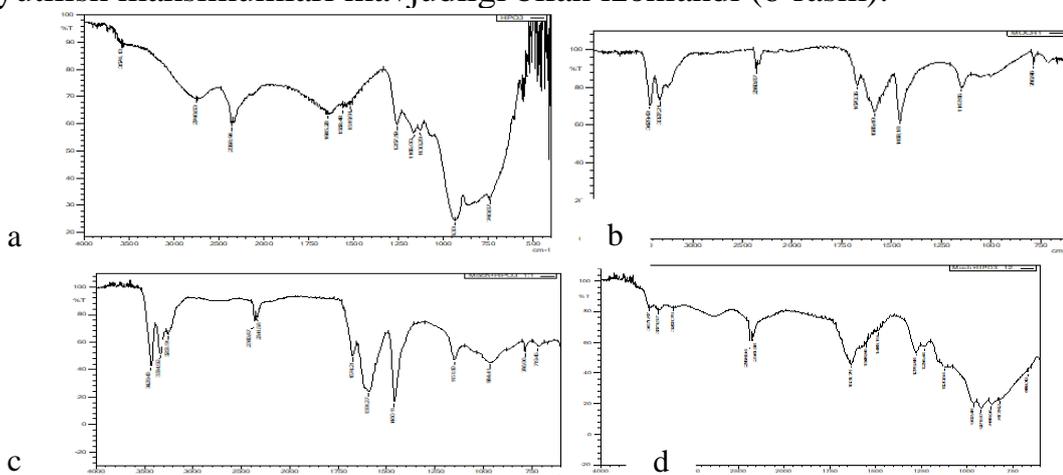
Keyingi bosqichlarda sianat kislota va qoldiq mochevina: biuret (dimer) \rightarrow triuret (trimer) \rightarrow sianur kislota (halqasimon tuzulishli - triazin hosilasi) ga

aylangan. Termik parchalanish mahsulotlari 320°C va undan yuqori temperaturada barqaror bo‘lib, tarkibiy o‘zgarishlarga uchramaganligi, songgi massa kamayishi 0.499 mg (6.307%) ni tashkil etganligi grafikdan aniqlandi.



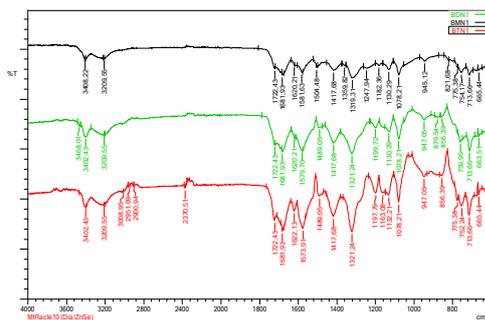
5-rasm. a) MMN, b) MDN, c) MTN larning TGA va DTA lari

CO(NH₂)₂ va HPO₃ lar ishtirokida MMMF molekulasida (NH₂)₂CO···HPO₃ tipidagi H-bog‘lari hosil bo‘lganligi IQ spektrda keng 2600-2800 cm⁻¹ oraliqdagi zaif yutilish maksimumlari mavjudligi bilan izohlandi (6-rasm).



6-rasm. HPO₃ (a), CO(NH₂)₂ (b), [CO(NH₂)₂·HPO₃] (c), [CO(NH₂)₂·2HPO₃] (d) larning IQ spektrlari

CO(NH₂)₂·2HPO₃ ning IQ spektri [CO(NH₂)₂·HPO₃] spektridan farqlanib, yuqori chastotali sohasida mochevinaga xos yutilish chiziqlari (6b,d-rasm) 3471.87 cm⁻¹ da qayd etilgan yutilish HPO₃ ning ν_(O-H) tebranishlariga xos bo‘lib, u >C=O guruhi kislorod atomlari ishtirokidagi MAV bog‘lari tufayli yuzaga kelgan. 3371.57 va 3203.76 cm⁻¹ dagi yutilishlar mochevina ν_{as} va ν_{s(N-H)} lariga to‘g‘ri kelib, NH₂ guruhlarining HPO₃ bilan o‘zaro

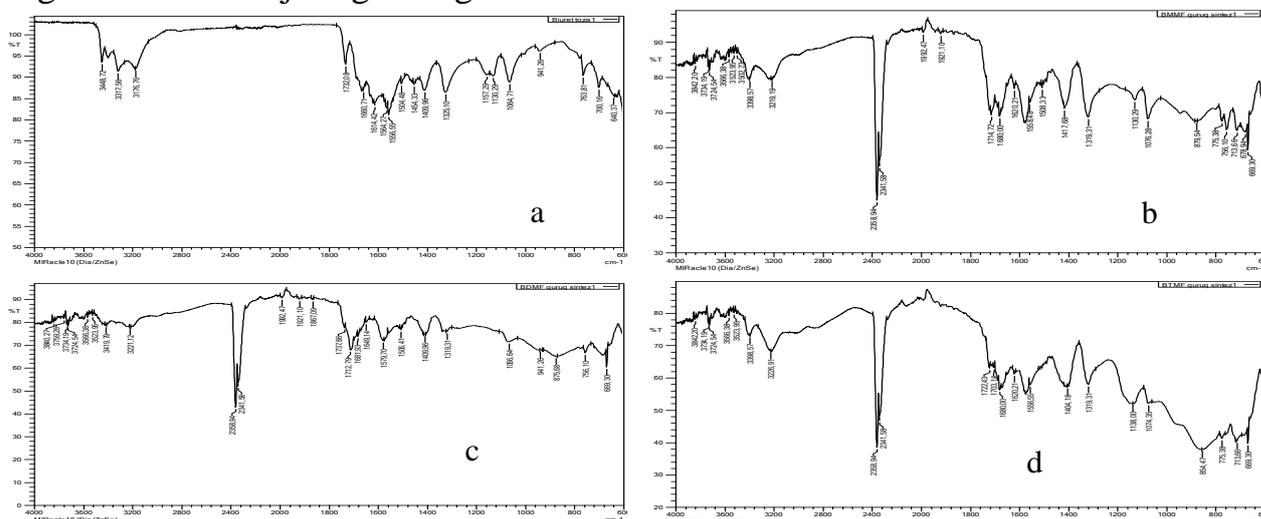


ta’sirda ishtirok etganligini ko‘rsatadi. 7-rasm. Biuret nitratlar IQ spektri Shunday o‘zgarish 1700–1500 cm⁻¹ da ham kuzatilib, mochevinaga xos ν_(C=O), ν_(C-N) va δ_(NH₂) tebranishlar birikma spektrida bitta keng, intensiv chiziqqa birlashib, 1631.76 cm⁻¹ da maksimum 1548.54 va 1485.19 cm⁻¹ da yelkasimon ko‘rinishlarda qayd etildi.

Biuret nitratlari hosil bo‘lishida NH₂ lar ishtirokini spektrning ν_{as}, ν_{s(NH)} va δ_(NH₂) tebranishlar sohalaridagi o‘zgarishlar tasdiqlaydi. Alohida biuret IQ spektridan farqli holda BMN spektrida dublet yutilish 3402, 3209 cm⁻¹ da

namoyon bo‘lib, ularning yuqori chastotali siljishi ($\sim 30-85 \text{ cm}^{-1}$) kuzatildi. Dublet chiziqlar chastotalari orasidagi farq 140 cm^{-1} dan 193.78 cm^{-1} ($\sim 53 \text{ cm}^{-1}$) ga kengaygani aniqlandi. Bunday anomal yuqori chastotali o‘zgarishlar biuret molekulasida o‘ziga xos konformatsiya o‘zgarishlari, ya’ni aminoatsil guruhlardan biri $-\text{HN}-\text{C}(\text{O})\text{NH}_2$ *sis*- holatdan *trans*-izomerga o‘tganligidan dalolat beradi. Shu bilan birga, biuretning $\delta_{(\text{H}-\text{N}-\text{H})}$ tebranishlari 1722.43 cm^{-1} da kuchsiz yutilish ko‘rinishida $\sim 10 \text{ cm}^{-1}$ ga past chastotali siljishi kuzatilib, $-\text{H}_2\text{N}\cdots\text{H}^+-\text{ONO}_2$ va $-\text{NH}_2\cdots\text{O}=\text{NO}_2-\text{H}$ turidagi MAV bog‘lari hosil bo‘lganini tasdiqlaydi. Bu moddalar spektrida biuret spektrida namoyon bo‘lmagan lekin, $1247.94, 1182.36$ (BMN), $1199.72, 879.54, 856.4$ (BDN) va $1197.79, 1163.08, 856.40, 775.4 \text{ cm}^{-1}$ (BTN) (7-rasm) dagi yutilish chiziqlari NO_3^- ga xos bo‘lib, tadqiq etilgan moddalar nitratli birikmalar ekanligini isbotlaydi. IQ-spektrlari asosida biuret nitratlari $[\text{>C}=\text{O}\cdots\text{H}^+-\text{ONO}_2^-]$ oksoniy va $-\text{NH}_2\cdots\text{H}^+-\text{O}-\text{NO}_2$ ammoniy nitrat ion juftlari vositasida hosil bo‘lganligi to‘g‘risida xulosa qilindi (7-rasm).

BMF larning IQS laridagi yutilishlar ayni birikmalarda kuchli H-bog‘lanishlari mavjudligini anglatadi.



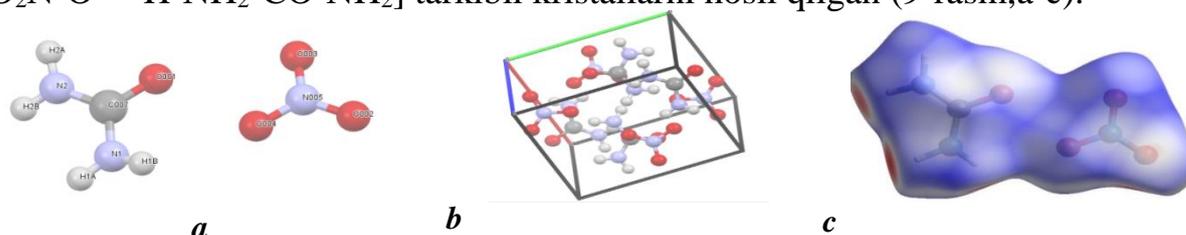
8-rasm. Biuret (a), BMMF (b), BDMF(c) va BTMF(d) IQ spektrlari

Jumladan, ushbu tebranishlar BMMF spektrida 3398.57 va 3291.90 cm^{-1} da, BDMF 3419.79 va 3221.12 cm^{-1} hamda BTMF 3388.57 va 3226.91 cm^{-1} sohada kuzatilib (8-rasm), $1504, 1454 \text{ cm}^{-1}$ dagi yutilish chiziqlari (8-rasm) $\nu_{\text{as}(\text{C}-\text{N})} + \delta_{(\text{H}-\text{N}-\text{H})}$ va $1440, 1325 \text{ cm}^{-1}$ dagi yutilishlar $\nu_{\text{as}(\text{C}-\text{N})} + \delta_{(\text{H}-\text{N}-\text{H})}$ tebranishlar tegishli. Spektrning past chastotalari sohasi ($1200-600 \text{ cm}^{-1}$) da ham biuret molekulasining xarakterli tebranish chiziqlari mavjud (8-rasm). Ular $1157, 1130 \text{ cm}^{-1}$ dagi dublet va 1064.7 cm^{-1} dagi yakka o‘rta intensivlikdagi chiziqlar mos ravishda $\delta_{(\text{C}-\text{N}-\text{C})}$, $\delta_{(\text{C}-\text{N}-\text{H})}$, $\delta_{(\text{N}-\text{C}=\text{O})}$ tebranishlariga to‘g‘ri keladi. Bu siljishlar Biuret:HPO₃ molyar nisbatida kislota miqdorining ortib borishi bilan $(-\text{O}-\text{H}\cdots\text{NH})$ bog‘lanish soni va kuchi oshib borishini ko‘rsatadi. Ayniqsa BTMF namunasi spektrida past chastotalardagi siljish kuchliroq bo‘lib, bu H-bog‘lari asosida yuzaga kelgan molekulyar tuzilish mavjudligini bildiradi.

BMF namunalari rentgenogrammalarida yassi va diffuz chiziqlar mavjud bo‘lib, bu moddalar amorf holatga yaqin yoki kam kristallangan fazali ekanligidan dalolat beradi. Polikristallarning rentgen reflekslari $13.1; 19.7; 23.8; 29.4 \text{ kam}$

intensiv va notekis bo‘lib, bu kristall panjara tuzilmasining tartibsizlashganini va dastlabki moddalarning tanlangan molyar nisbatdagi reaksiyalarida ortiqcha HPO_3 ta’sirida polimer zanjirli yoki amorf tuzulishli birikmaligidan dalolat beradi.

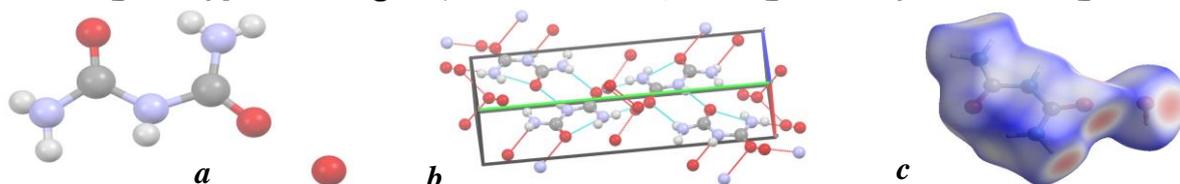
Mochevina mononitrat kristalining tuzilishi RTT usuli bilan aniqlanib, ma’lumotlar 273 K da yig‘ildi. Kristall $P2_1/c$ fazoviy guruhiga mansub bo‘lib, elementar yacheyka parametrlari: $a = 8.149\text{Å}$, $b = 8.195\text{Å}$, $c = 7.477\text{Å}$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 104.80(7)^\circ$, $V \approx 482\text{Å}^3$. $Z = 4$, $R = 0.0406$ (9-rasm). Kristall ikkita tarkibiy qismlar: mochevina molekulasini - $\text{CO}(\text{H}_2\text{N})_2$ va nitrat anioni - NO_3^- dan iborat, ular o‘zaro kuchli ($\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$) H-bog‘lari hosil qilib, uch o‘lchovli barqaror supramolekulyar panjarani shakllantirgan. Planar geometriyali NO_3^- anionlari protonlangan mochevina bilan aniq yo‘nalgan H-bog‘lari orqali bog‘lanib, $[\text{O}_2\text{N}-\text{O}^-\cdots^+\text{H}-\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}_2]$ tarkibli kristallarni hosil qilgan (9-rasm,a-c).



9-rasm. Mochevina mononitrat a- kristall tuzilishi, b- kristall taxlami, c-Hirshfeld yuzasi tahlili

Molekuladagi H va O atomlarining o‘zaro ta’siri Hirshfeld yuzasiga nisbiy hissalari $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ 66.2 % va $\text{O}\cdots\text{O}$ atomlarining o‘zaro ta’siri 9.9 % ga tengligi $[\text{O}_2\text{N}-\text{O}^-\cdots^+\text{H}-\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}_2]$ molekulada kuchli vodorod bog‘lanishlark mavjudligini tasdiqlaydi (9-rasm, a-c).

Biuret monogidrat kristall tuzilishi monokristal RTT usulida aniqlanib, ma’lumotlar 273 K da olindi. Kristall $P2_1/n$ fazoviy guruhiga mansub, parametrlari: $a = 3.651\text{Å}$, $b = 17.768\text{Å}$, $c = 7.962\text{Å}$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 95.080(5)^\circ$, $V=514.451\text{Å}^3$, $Z = 4$. $R=0.0474$. Kristall panjara biuret kationlari va suvning molekulari o‘rtasidagi aniq yo‘naltirilgan ($>\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}-\text{HO}$) H-bog‘lari orqali shakllangan.



10-rasm. Biureta mononitratning: a- kristall tuzilishi, b- kristall taxlami, c-Hirshfeld yuzasi tahlili

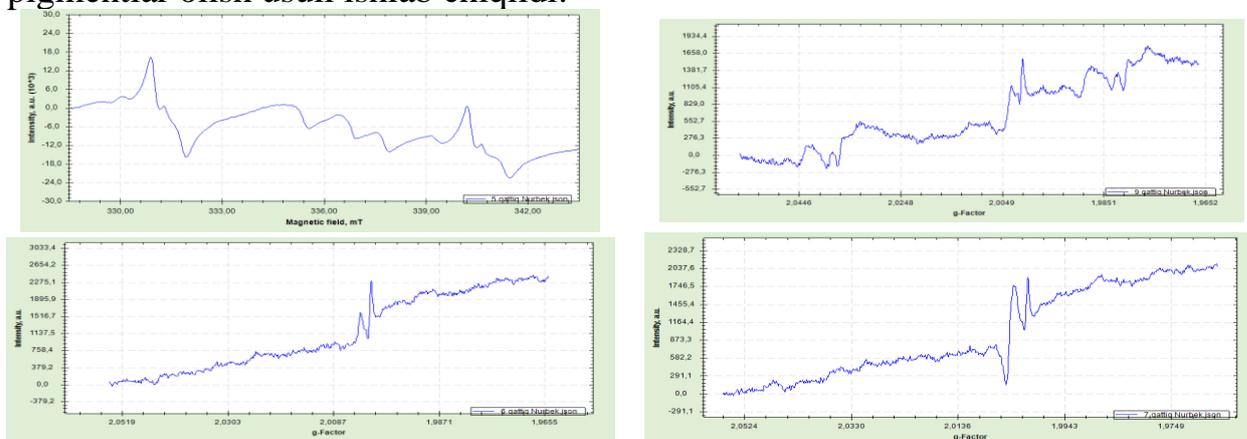
Molekuladagi $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ ta’sirlari Hirshfeld yuzasining eng katta qismini tashkil etadi (50.3%) va bu dominant ta’sir hisoblanadi. Kislorod atomlari bilan vodorod atomlari o‘rtasidagi bu ta’sirlar, asosan, H-bog‘lanishlarini ifodalaydi. Van-der-Vaals ta’sirlarini ifodalovchi $\text{H}\cdots\text{H}$ atomlari ham Hirshfeld yuzasining sezilarli qismini egallaydi (27.9%) (10-rasm, a-c).

Sintez qilingan kompleks birikmalarning amalda qo‘llanilishi

Mochevina, biuret nitratlari va metafosfatlarining amalda foydalanish sohasini aniqlash maqsadida “tarkib-xossa” bog‘liqligi asosida, ularning 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi turli konsentratsiyali eritmalarining kam eriydigan moddalar eruvchanligiga ta’siri, antipirenlik va antikorroziyon xossalari tadqiq qilindi va ularning natijalari quyida keltirilgan.

Tajribalarda turli metall ionlarining sanoat jihozlari chiqindi (quyqa)lari va dehqonchilik ekin yerlari tuproqlari tarkibida bo‘lishi mumkin bo‘lgan yoki akkumulyatsiyalanadigan kam eruvchan (oksid, fosfat, sulfat, gidroksi karbonat) birikmalari eruvchanliklari tadqiq etildi. Buning uchun CaHPO_4 , Fe_2O_3 , $\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ va $(\text{CuOH})_2\text{CO}_3$ larning $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HNO}_3]$ ($n=1\div 3$) eritmalari ta’sirida eruvchanliklari o‘rganildi. Umumiy holda MN tarkibida HNO_3 ulushining ($n=1 < 2 < 3$) ortib borishi bilan bu birikmalarning eruvchanligi ortishi kuzatildi.

Gazli gazni qayta ishlash zavodining (GGQIZ) texnologik (issiqlik almashinuv) jihozlarida hosil bo‘lgan quyqalar va korroziya mahsulotlarini mochevina nitratlari ta’sirida laboratoriya sharoitida eruvchanligi o‘rganildi. Tahlillar natijasida $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ionlari miqdori MMN eritmasida - 22.95, MDN - 40.38 va MTN - 73.8 mg/ml ekanligi aniqlandi. Umuman, NM eritmalari quyqaning 26-67 % miqdorini eritishi, bu erimalardan foydalanib, turli noorganik pigmentlar olish usuli ishlab chiqildi.



11-rasm. “Jondor” tuprog‘i (a) va Jondor tuprog‘i+MMN (b), Jondor tuprog‘i+MDN (c) va Jondor tuprog‘i+MTN (d) EPR spektri

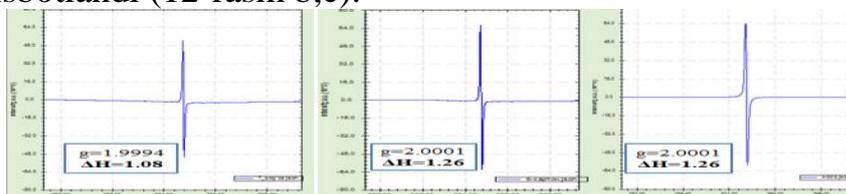
Ilk bor EPR spektrometriya usuli bilan “Jondor” tuproq namunasini turli tarkibli $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HNO}_3]$ $n=1,2,3$ molekulyar komplekslar eritmalari bilan ishlov berilganda NM tarkibida HNO_3 ulushining ortishi tuproq tarkibidagi minerallashgan gumin komponentlarini (GK) faollshtirishi, GK_{faol} miqdorini oshirib, nofaol $\text{GK}_{\text{nofaol}}$ komponentlar miqdorini kamaytirishi aniqlandi (11-rasm).

Mochevina va biuret metafosfat birikmalari eritmalarining antipiren xossalari tadqiqotlari

Bu qismida umumiy: $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HPO}_3]$, $[\text{Biuret} \cdot n\text{HPO}_3]$ $n=1$ (MMMF, BMMF), 2 (MDMF, BDMF), 3 (MTMF, BTMF) tarkibli mochevina va biuret metafosfatlarining selluloza asosidagi qog‘oz (A4), karton, bo‘z matosi va yog‘och namunalarini yong‘indan himoyalash xossalari tadqiqotlar natijalari keltirilgan. Namunalarning yonuvchanlik sinovlari GOST 16363-98, GOST R 5081 0-95 standart talablariga muvofiq amalga oshirildi. Natijalarga ko‘ra MMF asosida olingan namunalar qog‘ozni past (4.5-60.0%), boshqa namunalarni yuqori 72.99 – 98.89 % gacha yong‘indan himoyalash samarador-ligini namoyon qilishi, ular standart talablariga ko‘ra II (G2) toifali antipiren vositalaruf mos kelishi aniqlandi. Biuret MF lari asosidagi namunalar past (38.8-67.3%) antipiren xossaga

ega ekanligi qayd etildi. Mochevina va biuret metafosfatlari bilan modifikatsiyalangan yog'och, paxta tolali mato namunalarining yong'inbardoshlik xossalari LOI - kislorod indeksi (nazorat 21%) bo'yicha aniqlandi: yog'ochda 25.8-28.8% va paxta tolali matoda 24.8-26.8% ni tashkil etishi mochevina va biuret metafosfatlarining yuqori samarador antipiren xossalari namoyon qilishi tasdiqladi.

Antipiren vositalarning sellyuloza materillari yong'in bardoshligini oshirish mexanizmi birinchi marta EPR-spektrometrik usul bilan o'rganildi. Yonish mahsulotlari parametrlari solishtirilganda qog'oz (CO_3^-) karbonat radikallari ($g=1.9986-1.9997$, $\Delta H=1.08-1.26$ mT) (12-rasm a) hosil qilib to'liq yonishi, boshqa namunalar $\text{C}_{(\text{koks})}$ radikallari hosil qilib ($g=2.0001-2.0020$, $\Delta H=1.08-1.26$ mT) (12-rasm b,c), minimal yonishi qayd etildi. Bu bilan mochevina va metafosfat ionlari birgalikda antipiren sinergizmi namoyon qilib, sellyuloza materillari teksturasiga bog'liq holda, ularning sirtida yong'indan himoyalovchi koks qatlami hosil qilishi isbotlandi (12-rasm b,c).



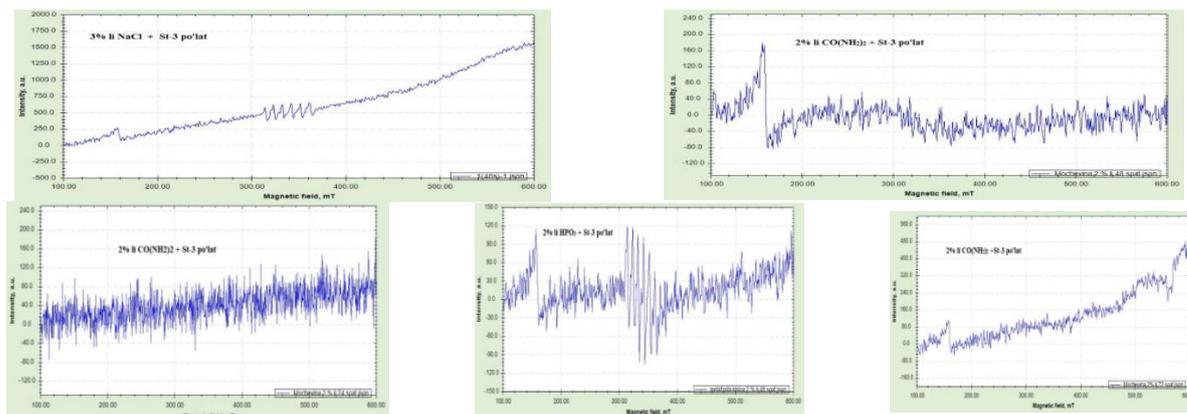
12-rasm. Bo'z mato namunalarini mochevina metafosfatlari bilan ishlov berib, yonuvchanligi o'rganilgandan keyingi EPR spektrlari.

Mochevina va biuret nitrat, metafosfatlari eritmalarining korroziya ingibitorligi xossalari tadqiqotlari

Ishlab chiqarish sharoitida korroziyon muhit sifatida 0,5 molyarli HCl va H_2SO_4 eritmalaridan foydalanib, korroziya tezliklari gravimetriya usuli bilan GOST 9.506-87 ga muvofiq MMMF, MDMF, MTMF va BMMF, BMMF va BTMF larning ingibitorlik xossalari o'rganildi. Bunda korroziya tezligi va ingibitorlik darajasi ingibitorlar konsentratsiyasi va muhit harorati ortishi bilan ortib borishi aniqlandi. Sinov tajribalari "Sho'rtan NGQCh" boshqarmasi Markaziy ilmiy-tadqiqot laboratoriyasida amalga oshirilib, natijalar tegishli dalolatnoma va ma'lumotnoma bilan tasdiqlangan ("Sho'rtan neft va gaz qazib chiqarish" boshqarmasining 03.05.2024 dagi №OII 02/BO-1777-son ma'lumotnomasi).

Ingibitor namunalari: MMMF, MDMF va MTMF ning antikorroziyon samaradorliklarini aniqlash uchun birinchi marta EPR spektrometriya usulidan foydalanildi. Antikorroziyon ko'rsatgichlar ingibitorlarning 0.5-2.0% li eritmaları ishtirokida 3% li NaCl eritmasi va GGQIZ texnik suvi korroziyon muhitida ST-3 po'latdan eritmaga o'tgan $\text{Fe}^{2+/3+}$ va Mn^{2+} paramagnit ionlar miqdori (N_{PMM} , spin/mg; C , spin/mm³, C_M) o'zgarishi hamda hosil bo'lgan cho'kma massasi bilan aniqlandi

Sinovlar turli vaqt oralig'ida (24, 48 va 72 soat) St-3 po'lat namunalari va GGQIZ issiqlik almashinish texnologik jihozlarning metall quvurlari namunalaridan foydalanilib olib borildi, tadqiqot natijalari, 13-rasm va 3-jadvalda keltirilgan.



13-rasm. St-3 po'lat namunasining MMF eritmalarida korroziyalanishi EPR spektrlari.

Tadqiqotlar natijalariga ko'ra, eng yuqori korroziya faolligiga ega bo'lgan nazorat 3% li NaCl eritmasida St-3 po'lat tarkibidagi asosiy metall Fe ($5.923 \cdot 10^{14}$ spin/mm³) ga nisbatan legirlovchi Mn komponenti ($8.174 \cdot 10^{14}$ spin/mm³) 1.38 marta yuqori korroziyalanishi aniqlandi. Bunda ikkala metall ham dastlabki bosqichda (24 soatda) nisbatan yuqori tezlikda korroziyalanadi: $N_{PMM(Fe^{+2/+3})} = 3.399 \cdot 10^{14}$ spin/mm³; $N_{PMM(Mn^{+2})} = 6.525 \cdot 10^{14}$ spin/mm³.

BMF ingibitorlari eritmalarining pH=6.14-7.01 dagi tadqiqotlarida BMMF 0.5% li eritmasida 24 soatda St-3 po'lat massasi o'zgarmagani ($\Delta m=0$ g, $V_1=0$ g/soat·m²), 48-72 soatli sinovda $2.143 \cdot 10^{-3}$ va $1.786 \cdot 10^{-2}$ g/soat·m² tezlikda massa ortishi kuzatildi. Shunday massa ortishi BMMF 1.0% li eritmasida 24, 48,72 soat davomida $2.381 \cdot 10^{-2}$, $2.44 \cdot 10^{-2}$ va $0.992 \cdot 10^{-2}$ g/soat·m² tezlikda St-3 po'lat namunasi sirtida ingibitor qavati hosil bo'lishini ko'rsatdi. Natijalarga ko'ra, BMMF ning KOH bilan neytrallangan 0.5-2.0 % li eritmaları 3.0% li NaCl korroziyon muhitda eng samarali korroziya ingibitorligi namoyon qilishi aniqlandi.

3-jadval

Biuret monometafosfatlarning 3.0% li NaCl eritmasi neytral muhitida St-3 po'lat korroziyasi ingibitori xossasini o'rganish natijalari

T/r	Ingibitor tarkibi	Metall yuzasi, S, cm ² /m ² ·10 ⁻⁴	Eritma pHi	St-3 po'lat namunasi massasi ozgarishi, g / %				^a Korroziya tezligi, g/soat·m ² ^b Massa ortishi tezligi, g/soat·m ²		
				Dast. mas; m ₀ / Δm / %	24 soat, m ₁ /Δm/ %	48 soat, m ₂ /Δm/ %	72 soat, m ₃ /Δm/%	V ₁ (24 soat)	V ₂ (48 soat)	V ₃ (72 soat)
1	3.0% li NaCl +KOH (nazor.)	35	7.01	32.3900 / 0.0 / 0.0	32.3771 / -0.0129 / $3.98 \cdot 10^{-2}$	32.3706 / -0.0194 / $6.0 \cdot 10^{-2}$	32.3643 / -0.0257 / $7.81 \cdot 10^{-2}$	^a 1.536·10 ⁻¹	^a 1.155·10 ⁻¹	^a 1.02·10 ⁻¹
2	3.0% li NaCl + KOH + 0.5% li BMMF	35	6.14	28.9999 / 0.0 / 0.0	28.9999 / 0.0/0.0	29.0035 / +0.0036 / $1.24 \cdot 10^{-2}$	29.0044 / +0.0045 / $5.5 \cdot 10^{-2}$	0	^b 2.143·10 ⁻²	^b 1.786·10 ⁻²
3	3.0% li NaCl + KOH + 1.0% li BMMF	35	6.76	29.9578 / 0.0 / 0.0	29.9598 / +0.0020 / $6.676 \cdot 10^{-3}$	29.9619 / +0.0041 / $1.368 \cdot 10^{-2}$	29.9603 / +0.0025 / $8.3 \cdot 10^{-3}$	^b 2.381·10 ⁻²	^b 2.44·10 ⁻²	^b 0.992·10 ⁻²
4	3.0% li NaCl + KOH + 2.0 % li BMMF	35	6.60	29.9111 / 0.0 / 0.0	29.9108 / -0.0003 / $1.00 \cdot 10^{-3}$	29.9143 / +0.0042 / $1.404 \cdot 10^{-2}$	29.913 / +0.0017 / $5.68 \cdot 10^{-2}$	^a 3.57·10 ⁻³ (nazoratdan 43 marta sekin)	^b 2.50·10 ⁻²	^b 6.75·10 ⁻³

Tadqiqotda dastlabki moddalar: CO(NH₂)₂, (CO(NH₂)₂)₂NH, HNO₃, HPO₃ asosida antipiren tarkiblari (552ming so'm/tonna) va korroziya ingibitorlari (MMF 238ming so'm/tonna, BMF 300ming so'm/tonna) olishning moddiy xarajatlari iqtisodiy hisoblash natijalari bilan asoslangan.

XULOSALAR

1. Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat kislotalari bilan 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi birikmalari hosil bo'lishi kvant-kimyoviy hisoblashlar bilan, ular atomlaridagi elektron va zaryadlar taqsimoti, kimyoviy bog'lanish tabiati, energetik hamda molekulyar parametrlari hosil bo'ladigan moddalarning "tarkib-tuzilish-xossalari" o'zaro bog'liqligi asosida aniqlandi.
2. Mochevinaning nitrat, metafosfat kislotalari bilan 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi suvli eritmalaridan molekulararo vodorod bog'lari tufayli $>C=O\cdots H-ONO_2$, $>C=O\cdots H-OPO_2$ va $-NH_2\cdots O=NO_2H$, $-NH_2\cdots O=PO_2H$ turidagi ion juftlari vositasida hosil bo'lgan, tarkibida o'zgaruvchan suv molekulari tutgan $[CO(NH_2)_2\cdot nHNO_3]\cdot xH_2O$ va $[CO(NH_2)_2\cdot nHPO_3]\cdot xH_2O$, bunda $n=1,2,3$; $x=1,2,3$ qattiq moddalar ajratib olish mumkinligi isbotlandi.
3. Dastlabki 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi biuret nitrat, metafosfat kislotalarining suvli eritmalaridan molekulararo vodorod bog'lari tufayli $>C=O\cdots H-ONO_2$, $>C=O\cdots H-OPO_2$ va $-NH_2\cdots O=NO_2H$, $-NH_2\cdots O=PO_2H$ turidagi ion juftlari bilan hosil bo'lgan $HN[CO(NH_2)]_2\cdot nHNO_3\cdot xH_2O$ va $HN[CO(NH_2)]_2\cdot nHPO_3\cdot xH_2O$ $n=1,2,3$; $x=1,2,3$ qattiq holdagi gigroskopik, inkogurient, invariant molekulyar komplekslar ekanligi aniqlandi.
4. Mochevina va biuretning nitrat, metafosfat kislotalari bilan 12 ta molekulyar birikmalari qattiq holda olinib, ularning tarkibi, tuzilishi (2 tasi RTT) va eritmalarining fizik-kimyoviy xossalari ZFKTU bilan tadqiq etilib, polifunksional moddalar eritmaları sifatida turli maqsadlarda foydalanish imkoniyatlari aniqlandi.
5. MMF va BMF eritmalarining antipirenik xossalari tadqiq etilib, MMF ning sellyuloza materiallari: paxta matosi, karton va yog'ochning yonuvchanligini 72.99-98.89% ga kamaytirish effekti aniqlanib, GOST 16363-98 va GOST R 5081-0-95 bo'yicha sellyuloza materiallarini II guruh (G2) himoyalash toifali amid-fosfat antipen tarkiblar olish usullari ishlab chiqilgan. EPR spektrometriya usuli bilan MMF va BMF larning sellyuloza materiallari teksturasiga bog'liq holda antipiren ta'siri mexanizmi aniqlandi.
6. Mochevina va biuretning 1:1÷1:3 molyar nisbatlardagi nitrat, metafosfat birikmalari 0.5-2.0% li eritmalarining 3% li NaCl, 0.5 M li HCl va H_2SO_4 li texnik suvlar muhitlarida St-3, St-20 po'lat namunalari korroziya ingibitorligi gravimetriya, EPR spektrometriya (birinchi marta) usullari bilan $pH = 1.66-9.0$ oralig'ida tadqiq etilib, ular asosida optimal tarkibli korroziya ingibitorlari yaratilib, ular ishlab charishga tavsiya etildi.
7. Birinchi marta EPR usulida tuproqdagi noorganik moddalarga birikkan gumus komponentlari faol va nofaol shakllarini spektral identifikatsiyalab, haydaladigan yerlarga ishlov berishda foydalaniladigan mochevina nitrat eritmasining miqdori va muhitning pH iga bog'liq holda faol gumus miqdorining ortishi aniqlangan. Mochevina nitrat eritmalarining texnologik jihozlardagi quyqalar eruvchanligiga ta'sirini tadqiq etish bilan ulardagi quyqadan tozalanish darajasi 26.0-67.6% gacha yetkazilib, olingan chiqindi eritmalaridan turli maqsadlarda qo'llaniladigan noorganik pigmentlar olish usullari ishlab chiqilgan.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M ПО
ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЁНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

БУХАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

ХОЛИКОВА ГУЛЯЙРА КУЛДОШЕВНА

**СИНТЕЗ, СВОЙСТВА НИТРАТНЫХ, ФОСФАТНЫХ СОЛЕЙ
МОЧЕВИНЫ И ЕЁ ПРОИЗВОДНЫХ**

02.00.01 – Неорганическая химия

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации доктора философии (PhD) по химическим наукам

ТАШКЕНТ – 2026

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В настоящее время в мировой химической, биологической, медицинской и технолической практике широко применяются молекулярные комплексные соединения на основе органического и неорганического вещества. Синтезированные многофункциональные соединения различного состава на основе амидов, содержащих amino- и карбонильные группы, в число которых входят молекулярные комплексы мочевины и ее производных с неорганическими кислотами и их растворы проявляют агрохимическую, биологическую активности и своеобразные свойства веществ специального назначения. По этому синтез, установление состава, исследование свойства и изыскание возможности применения этих веществ представляют важное практическое значение.

Во всем мире в сегодняшний день проводятся целенаправленные научные исследования по разностороннему применению амидов, в том числе мочевины и её производных. Синтезировать на их основе различные соединения, разработать новых методов их выделения и оптимизировать условий их осуществления составляют цели и задачи этих исследований. В теоретическом обосновании способов получения и установления взаимосвязи между составом, строения и свойства соединений с активными функциональными группами, молекулярных комплексов мочевины и ее производных, определение областей их применения с использованием современных методов исследования имеют важные научные значения.

Республике в целях развития химической промышленности особое внимание уделяется производству безотходных, многофункциональных неорганических веществ, отвечающих современным требованиям. В этой связи проводятся целевые масштабные научные исследования в области создания научных основ синтеза эффективных растворителей, антипиренов, ингибиторов коррозии и неорганических пигментов из промышленных шламов, а также обеспечения внутреннего рынка импортозамещающей местной промышленной продукцией. В Указе Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № УФ-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022–2026 годы» обозначены важные задачи, направленные на «дальнейшее развитие экспортного потенциала местных отраслей промышленности, полное использование имеющихся возможностей». В этой связи создание экологически чистых и экономически эффективных технологий с использованием местного сырья, синтез химических продуктов с добавленной стоимостью, открывающие дополнительные возможности использования в различных целях приобретает важное значение.

Результаты данного диссертационного исследования в определенной мере являются внесенным вкладом в реализации задач, обозначенных в постановлениях Президента Республики Узбекистан от 23 мая 2019 года №ПП-4335 «О дополнительных мерах по ускоренному развитию промышленности строительных материалов» и от 12 февраля 2019 года

№ПП-4186 «О мерах по дальнейшему углублению реформирования текстильной и швейно-трикотажной промышленности и расширению ее экспортного потенциала», от 13 февраля 2021 года №ПП-4992 «О мерах по дальнейшему реформированию и финансовой устойчивости предприятий химической промышленности, развитию производства химической продукции с высокой добавленной стоимостью», от 28 января 2022 года №УП-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022–2026 годы» и других нормативно-правовых актах, регулирующих данную деятельность.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики. Научно-исследовательская работа проводилась в соответствии с VII «Химические технологии и нанотехнологии» приоритетным направлением развития науки и технологий республики.

Уровень изученности проблемы. В ведущих мировых научно-исследовательских учреждениях в области химии неорганических веществ проводятся обширные исследования методов синтеза, состава, структуры и свойств молекулярных комплексных соединений. В этом направлении значительную роль играют исследования учёных таких, как Клемперер В., Липковски Дж., Морокума К., Бишоп Р., Баудер А., Герман М., Бучаченко А.Л., Персон В.Б., Чжао Х., Коэ Б.Дж., Лавакки А.

В области исследований теоретических и практических проблем химии комплексных соединений достойное место занимают научные и практические результаты исследований ученых Бабкиной Т.С., Кузнецова А.В., Дзюбана А.В., Косовой Д.А., Щенкина Ю.С., Давыдова Ю.И., Хусанова Э., Шухурова З., Петренко Ю.М., Туркера Л., Гюмюша С., Мирсаидова У.И.

В республике плодотворные исследования в области химии комплексных соединений вели такие ученые, как Парпиев Н.А., Шарипов Х.Т. и в настоящее время продолжают Ибрагимов Б.Т., Ходжаев О.Ф., Шобилолов О.А., Умаров Б.Б., Собиров В.А., Кадирова Ш.А., Кадирова З.Ч., Даминова Ш.Ш., Ибрагимов А.Б., Тураев Х.Х. и др. Синтез аддуктов и высокомолекулярных соединений различных кислотных и формальдегидных производных амидных веществ, изучение их коррозионных и антипиреновых свойств проводятся Джалиловым А.Т., Акбаровым Х.И., Гуро В.П., Абдуллаевым Ш.А., Эшмаматовой Н.Б., Нуркуловым Ф.Н., физико-химический анализ систем и агрохимические свойства исследуются академиками Беглова Б.М., Намазова Ш.С. и учениками Б.Х. Кучарова, С.Тажиева и др. Результаты этих исследований представляют собой существенным вкладом в развитии неорганической химии и химической технологии карбамида и фосфатных соединений. Вместе с тем, анализ научных данных показывает, что синтез мочевины и ее производных, определение их физико-химических и полифункциональных свойств, а также сложных молекулярных соединений с нитратами и фосфатами представляют особый научно-практический интерес.

Анализ данных научных публикаций по данному направлению свидетельствует о том, что несмотря на проведенные исследования по разработке методов синтеза молекулярных соединений мочевины и ее производных с неорганическими и органическими кислотами, изучению их состава и структуры с использованием современных физико-химических методов исследования (СФХМИ), определение физико-химических, спектральных, антипиреновых и коррозионно-ингибирующих свойств молекулярных комплексных соединений мочевины и ее производных с нитратом и метафосфатом, а также областей их практического использования достаточно не изучены и в настоящее время определяет актуальности исследований данной проблемы.

Связь темы диссертационного исследования с планом научно-исследовательских работ высшего учебного заведения. Диссертационная работа выполнена в соответствии с планом НИР Бухарского государственного университета научного направления «Синтез, строение, свойства и исследование аспектов и синтетических методов, неорганических и координационных соединений».

Цель исследования – синтез соединений мочевины и её производных с азотной, фосфорными кислотами и определение их свойства.

Задачи исследования:

- изучение вероятностей и обоснование образования соединений мочевины и биурета с нитратом и метафосфорными кислотами в различных молекулярных соотношениях, распределения электронов и зарядов в атомах молекул, характера химической связи и параметров молекул с использованием квантово-химических методов (КХМ);

- получение твердых соединений мочевины и биурета с нитратом и метафосфорными кислотами в различных молекулярных соотношениях и определение их свойства в растворах;

- изучение физико-химических, спектральных и рентгенографических свойств твердых соединений и растворов мочевины и биурета с нитратом и метафосфорными кислотами с использованием современных физико-химических методов исследования (СФХМИ);

- изучить свойства растворов нитратов мочевины и биурета в зависимости «состав-свойства» на активности гумусовых компонентов почвы, растворимости шламов технологического оборудования и получить на их основе неорганические пигменты;

- исследование свойств метафосфатных соединений мочевины и биурета в повышении огнестойкости целлюлозных материалов и получения антипиреновых составов на их основе;

- исследование свойств нитратов и метафосфатов мочевины и биурета для защиты металлических сплавов от коррозии в различных средах технических вод и получения растворов ингибиторов коррозии на их основе.

Объекты исследования: мочевины, биурет и их нитратные и метафосфатные соединения, малорастворимые соединения металлов, картон, ткань, бумага, древесина, сталь Ст-3 и Ст-20, образцы почвы.

Предметом исследования являются анализ квантово-химических параметров нитратных и метафосфатных соединений мочевины и биурета, растворимость малорастворимых соединений, образцы почвы, горючести целлюлозных материалов, а также процессы антикоррозионной защиты образцов стали Ст-3 и Ст-20.

Методы исследования. Методы, использованные в диссертационном исследовании: программы ORCA, Gaussian, ИК, ЭПР-спектроскопия, СЭМ-ЭДС, РФА, РСА, термический, гравиметрический, кондуктометрический и рН-метрический методы.

Научная новизна исследования:

- на основе квантово-химических расчетов (КХР) обоснованы возможности образования соединений мочевины и биурета с нитрат- и метафосфорными кислотами в мольных соотношениях 1:1÷1:3, определены распределения электронов и зарядов в атомах молекул, характер химических связей, энергетические параметры молекул, доказаны их состав и строения;

- получены 12 молекулярных соединений мочевины и биурета с нитрат- и метафосфат-ионами в твердом виде, с использованием современных ФХМИ установлены их состав, строения и изучены физико-химические свойства растворов, определены области их применения;

- впервые методом ЭПР спектрально идентифицированы активные и неактивные формы гумусовых компонентов почвы в зависимости от рН среды и количества нитрат-ионов в растворах нитрата карбамида;

- установлено повышение растворимости шламов технологических оборудований в растворах нитрата мочевины на 26.0–67.6 % и высокое содержание ионов $Fe^{+2/+3}$ (18–23 г/л) в растворе, разработаны способы получения неорганических пигментов различного назначения из технологических отходов;

- исследованием свойства повышения огнестойкости целлюлозных материалов растворов нитратных соединений карбамида и биурета установлены снижения горючести суровой ткани, картона и древесины (на 72.99 - 98.89%) на основе полученных результатов доказана о возможности получения эффективных антипиренов II (G2) группы огнезащиты.

- исследованием методами гравиметрии и впервые ЭПР-спектрометрии в интервале рН=1.66-9.0 коррозионно-защитные свойства 0.5-2.0%-ных кислых и нейтральных растворов мочевины и биурета с HNO_3 , HPO_3 в мольных соотношениях 1:1, 1:2, 1:3 металлических сплавов (стали Ст-3, Ст-20) в среде технических вод, установлено ингибирование коррозии на 82.0 – 94.75%, оптимальные составы ингибиторов и выявлено проявления “инверсия коррозии” в высококонцентрированных (2.0%) растворах метафосфатов.

Практические результаты исследований:

- на основании результатов изучения физико-химических свойств растворов нитратов, метафосфатов карбамида и биурета разработаны методы получения многофункциональных, широко применяемых в практике растворов, повышающих растворимость труднорастворимых соединений, активность микроэлементов в почве, гумусовых веществ;

- на основе исследования свойства растворов нитрата мочевины растворить накопленных шламов технологических оборудований получены растворы, содержащие ионы $Fe^{2+/3+}$, химической и термической обработкой этих растворов и твердых образцов получены разнообразные неорганические пигменты, применяющиеся в строительстве и лакокрасочном производстве;

- по результатам исследований антикоррозионных свойств растворов нитратов и метафосфатов мочевины и биурета в водных средах нефтегазовой отрасли с $pH=1.66-9.0$ разработаны способы получения растворов, содержащих 0.5–1.0% MNM, MDN, MMMF, БММФ с высокой ингибирующей эффективностью;

- по результатам определения свойства снизить горючести образцов целлюлозных материалов: суровой ткани картона, древесины (на 72.99-98,89 %), разработаны способы получения эффективных амидофосфатных нтипиренов оптимального состава, согласно ГОСТ 16363-98 и ГОСТ Р 5081-0-95 относящихся к II (G2) группе огнезащиты.

Достоверность результатов исследования подтверждается использованием пакет программ ORCA и Gaussian для КХР состава и молекулярных параметров, применением методов ИК-, ЭПР-спектроскопии, РСА, рентгенофазового, термического и гравиметрического анализов, фотоколориметрии, pH-метрии и кондуктометрии при изучении спектральных и физико-химических свойств их растворов нитрат, метафосфатных соединений мочевины и биурета.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования определяет установления возможности образования соединений мочевины и биурета с HNO_3 и HPO_3 в 1:1÷1:3 молярных соотношениях, оптимальные условия получение 12 молекулярных соединений, результаты исследования состава, строения и свойства их растворов, установленная зависимость активности гумусовых компонентов почвы от pH и содержания ионов NO_3^- , увеличение растворимости отложений в технологических оборудованиях, огнестойкости целлюлозных материалов, ингибирующих коррозии металлических сплавов в среде технических вод.

Практическая значимость результатов исследования определяется разработанными способами получения веществ на основе растворов нитратов и метафосфатов мочевины и биурета, повышающие активности гумусовых компонентов почвы, растворимости отложений в технологическом оборудовании с получением из отходов различных пигментов, антипиренов, повышающих огнестойкость целлюлозных материалов и ингибиторов коррозии сталей марок Ст-3 и Ст-20.

Внедрение результатов исследований. На основании результатов научных и практических исследований полифункциональных свойств растворов нитратных и метафосфатных соединений мочевины и биурета:

- внедрены в практику полифункциональные растворы нитрата и метафосфатных соединений мочевины и биурета в качестве ингибиторов коррозии при защите металлических конструкций “градырная” водоподпиточного устройства «Шуртанское УНГД» от коррозии (Справка управления «Шуртанское УНГД» от 03.05.2024 № ОП02/Б0-1777). В результате созданы ингибиторы коррозии на основе нитратных и метафосфатных соединений мочевины и биурета, обладающие антикоррозионной эффективностью в агрессивных средах;

- кристаллографические данные молекулярных структур мононитрата мочевины и моногидрата биурета были внесены в Кембриджскую кристаллографическую базу данных (CCDC 2511988 и 2512468). Полученные данные позволяют использовать их для описания и сравнительного анализа структурно схожих химических соединений.

Апробация результатов исследования. Результаты исследования были представлены и обсуждены на 18 конференциях, в том числе на 5 республиканских и 13 международных.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 28 научных работы, в том числе 1 монография, 6 статей (2 в Республиканских изданиях и 4 в зарубежных журналах) в научных изданиях, рекомендованных ВАК Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций (PhD).

Структура и объем диссертации: Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, списка использованной литературы и приложений. Объем диссертации составляет 120 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении изложены актуальность и необходимость темы диссертации, описаны цели и задачи, объекты и предмет исследования, указаны его соответствие приоритетным направлениям развития науки и техники Республики Узбекистан. Раскрыты научная новизна и практическая значимость полученных результатов исследования, их достоверность, теоретическая и практическая значимость, приведены сведения об их внедрении в практику, опубликованных работах и составе диссертации.

В главе I диссертации под названием «**Мочевина и молекулярные комплексы на ее основе, их исследование и области применения**» обобщены научные данные опубликованные в отечественных и зарубежных публикациях, по результатам их анализа сформулированы цель, задачи и актуальность исследования.

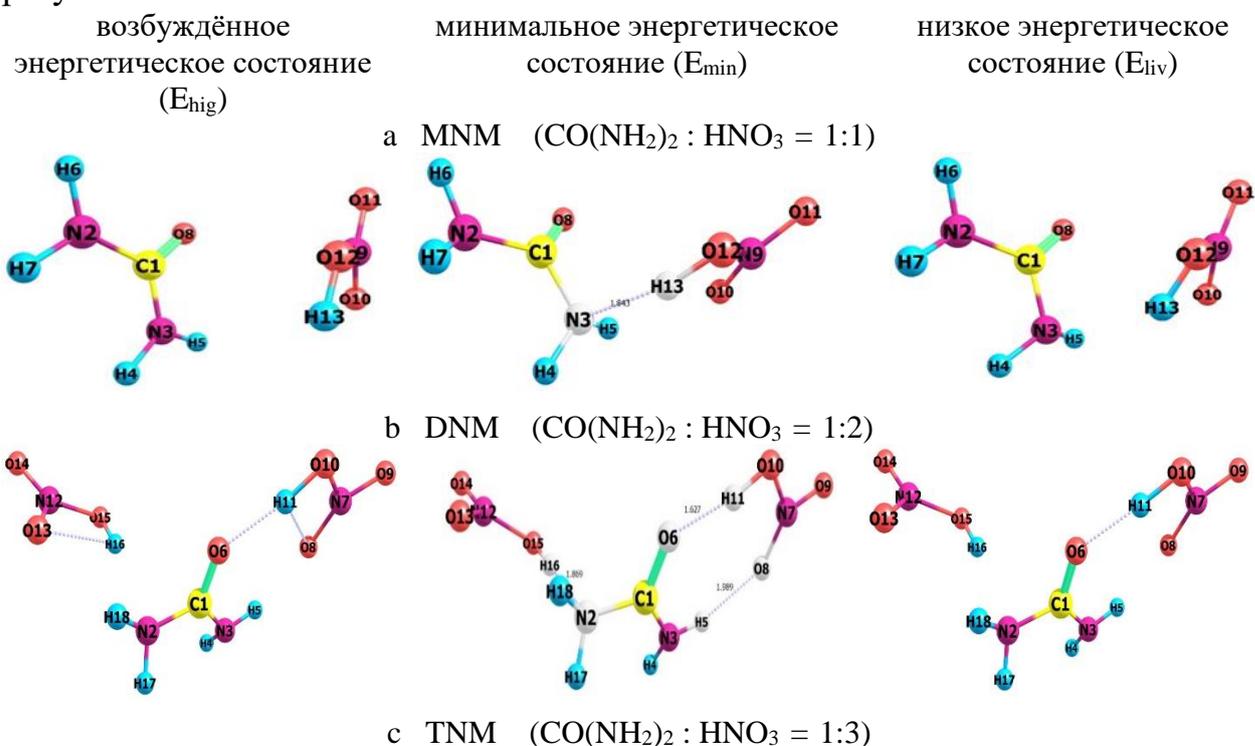
Во второй главе диссертации под названием «**Синтез нитратных и метафосфатных соединений мочевины, биурета и исследование их растворов**» приведены данные синтеза молекулярных соединений и определения их состава и строения методами элементного химического,

СЭМ-ЭДС, РФА, РСА, ТГА/ДСК, гравиметрического анализ, изучения методами ИК-, ЭПР-спектрометрии, фотоколориметрии, рН-метрии, кондуктометрии, описание методов КХР с программными обеспечениями ORCA и Gaussian, сравнение данных для определения состава и строения синтезированных молекулярных соединений.

Глава III диссертации «Исследование нитратных, метафосфатных соединений мочевины, биурет и анализ результатов исследования их практического применения» посвящена обсуждению полученных результатов диссертационной работы. Приведены результаты квантово-химических расчетов и синтеза, установления состава, структуры, свойств нитратных, метафосфатных соединений мочевины и биурета современными физико-химическими методами исследований. Представлены результаты исследований практического применения синтезированных соединений: повышение содержания активных гуминовых кислот в почве, изучение огнезащитных и антикоррозионных свойств, выводы по их практическому применению.

Квантово-химические исследования нитратных, метафосфатных соединений мочевины и биурета

С использованием метода DFT изучены состав, строения, электронная природа молекул мочевины и азотной кислоты, с учетом наличия атомов О, N электронно-донорными и акцепторными свойствами функциональных групп на их основе C=O, -NH₂, HO-, и ионов NO₂⁻, NO₃⁻, H⁺, а также химические изменения с их участием, анализированы полученные результаты.



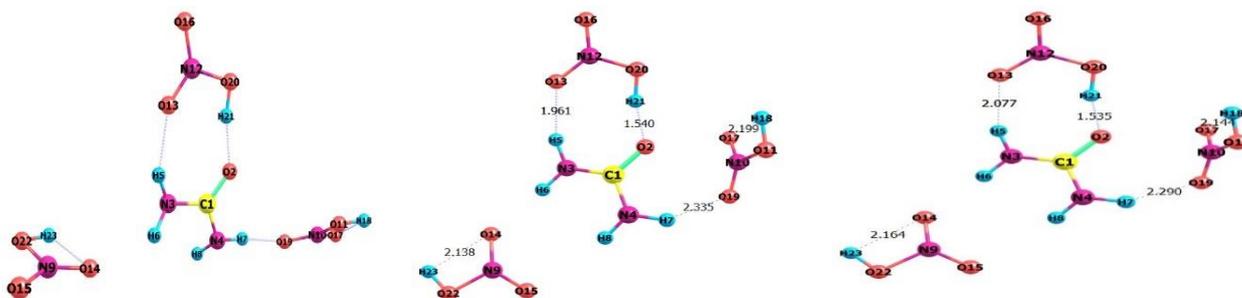


Рис. 1. Взаимная ориентация $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ и HNO_3 в твердом состоянии при различных энергетических состояниях.

По результатам исследований доказано, что благодаря амидных $>\text{C}=\text{O}$, $-\text{NH}_2$ групп и атомов Н, О кислоты в сильно полярных веществах ($\mu_{\text{CO}(\text{NH}_2)_2}=4.30 \text{ D}$, $\mu_{\text{HNO}_3}=2.30 \text{ D}$) в различных энергетических состояниях образуются молекулярные соединения (ионные пары) состава $[(\text{H}_2\text{N})_2\text{C}=\text{O}] \cdot n(\text{H}-\text{ONO}_2)$ ($n=1,2,3$) в мольных соотношениях $\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3 = 1:1 \div 1:3$ (рис. 1). Результаты подтверждают, что увеличение количества HNO_3 в соотношении $\text{CO}(\text{NH}_2)_2:\text{HNO}_3$ приводит к образованию соединений MNM, DNM, TNM, теоретически соответствующих мольным составам $1:1 \div 1:3$. Разница значений полной энергии ($\Delta E_{\text{total}} = E_{\text{total(аддитивная)}} - E_{\text{total(расчетная)}}$) ($\Delta E_{\text{total}} = -0.03, -55.67, -111.3 \text{ эВ}$), свидетельствующая об их образовании, показала повышения устойчивость образующихся соединений ряду $\text{MNM} < \text{DNM} < \text{TNM}$. Аналогичная энергетическая разница (ΔE_{total}) не была выявлена в исследованиях метафосфатов мочевины (MMF). Увеличение суммы аддитивных отрицательных значений энергий подтверждает их образование этих соединений, а сравнение свидетельствует об относительной устойчивости MN.

В отличие от $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, в КХР нитратов - VN и метафосфатов биурета - VMF дополнительно, в молекуле биурета $(\text{H}_2\text{N}-\text{CO})_2\text{NH}$, учитывались число атомов, функциональные группы, их пространственное расположение (*цис-транс*) и вращение аминокислотных $(\text{H}_2\text{N}-\text{C}(\text{O})-)$ групп вокруг фрагмента -NH-. По данным расчета установлено, что с увеличением содержания HNO_3 в составе VMF наблюдается увеличение ЭО, электрофильности, ΔN_{max} , μ и E_{total} молекул, но в этом не отражается влияние пространственной изомерии (*цис-транс*) молекулы биурета (табл. 1).

Таблица 1

Молекулярные параметры и дескрипторы биурета, HNO_3 , VMF рассчитанные на основе оптимизированных расчетов КХР

Кванто-химические параметры	Biuret		HNO_3	BMMF		BDMF		BTMF	
	<i>sis</i>	<i>trans</i>		<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>
Изомерия	<i>sis</i>	<i>trans</i>		<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>	<i>sis</i>	<i>trans</i>
E_{HOMO} , eV	-6.916	-7.316	-9.28	-7.692	-8.015	-8.534	-8.607	-8.262	-7.916
E_{LUMO} , eV	-0.084	0.305	-1.79	-1.036	-0.789	-1.348	-1.607	-3.014	-4.367
$ \Delta E = E_{\text{LUMO}} - E_{\text{HOMO}}$, eV	6.832	7.621	7.49	6.656	7.226	7.186	7	5.248	3.549
Электроотрицательность, (ЭО) $\chi = (I + A)/2$, eV	3.5	3.5055	5.535	4.364	4.402	4.941	5.107	5.638	6.1415
Электрофильность, $\omega = \mu_p^2/2\eta$, eV	1.793	1.6125	4.0903	2.8613	2.6817	3.3974	3.7259	6.057	10.6278
Индекс максимального переноса заряда, $\Delta N_{\text{max}} = -\mu_p/\eta$	1.0246	0.92	1.478	1.3113	1.2184	1.3752	1.4591	2.1486	3.461
Дипольный момент, μ , Debye	7.5646	3.4607	3.2221	10.1254	9.094	9.4068	5.4583	10.4029	13.4065
Общая энергия, $E(\text{total})$, keV	-10.723	-10.724	-15.452	-26.173	-26.168	-41.623	-41.624	-57.074	-57.048

Соотношение $\mu_{\text{Biur}} = 7.5646 \text{ D} / \mu_{\text{Biur}} = 3.4607 \text{ D}$ значений *цис/транс* структур биурета более чем в 2.0 раза выше, что доказывает низкую симметрию в *цис*-структуре. В целом, согласно КХР, дипольные моменты соединений ВМФ по сравнению с исходными компонентами выше (9.0940–13.4065 D) и на основании этого сделан вывод о том, что реакционная способность и химические свойства ВМФ по сравнению с исходными соединениями практически отличаются. Из них только *транс*-ВДМФ является наименее поляризованной молекулой ($\mu_{\text{ВДМФ}} = 5.4583 \text{ D}$), это свидетельствует о том, что каждая молекула HPO_3 образует водородные связи и донорно-акцепторные связи с атомами О, Н аминоацильных групп *транс*-биурета. Тот факт, что по результатам КХР не наблюдается различие в значениях $E_{\text{total(аддитивной)}}$ и $E_{\text{total(расчетной)}}$ ВМФ и ВМФ ($\Delta E_{\text{total}} \approx 0,0, \text{ KeV}$), свидетельствует о том, что эти вещества теоретически образуются, но на практике могут быть нестабильными в твердом состоянии, либо состав продукта могут отличаться от мольного соотношения исходных веществ, то есть в процессах их образования, возможно, проявления явления инкоугурентности и инвариантности (табл.1).

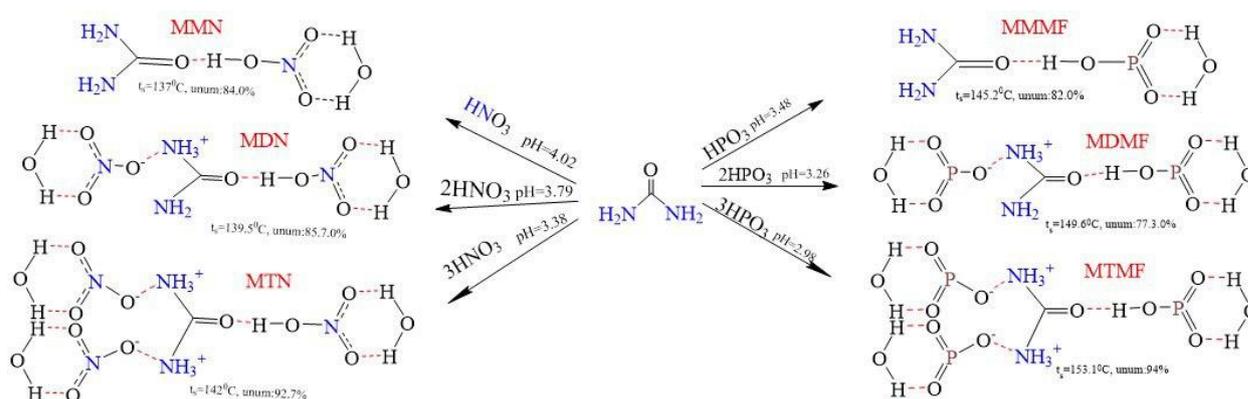


Схема 1. Синтез нитратов и метафосфатов мочевины

Таблица 2

Химический состав и значения некоторых физико-химических свойств нитратов и метафосфатов мочевины и биурета

Т/г	Соединение	$\chi, 25^\circ\text{C}, \text{mS/sm}$	Цвет образца	Выход, %	$t_{\text{плав}}^\circ\text{C}$	Найдено (%)			Расчитано (%)		
						С	Н	N	С	Н	N
1	MMN	160.1	белые гигроскопичные веществ	84	137.0	9.76	4.10	34.14	9.82	4.22	34.01
2	MDN	106.2		85.7	139.5	6.45	3.25	30.11	6.34	3.34	30.14
3	MTN	101.3		92.7	142.0	4.82	2.83	28.12	4.73	2.92	28.06
4	MMMF	42.3		82	145.2	8.58	3.60	20.01	8.61	3.23	19.8
5	MDMF	61.8		77.3	149.6	5.46	2.75	12.73	5.47	2.71	12.52
6	MTMF	75.4		94	153.1	4.00	2.35	9.34	4.01	2.24	4.00
7	BMN	38.9		81.9	152.1	14.46	3.64	33.73	13.10	2.96	32.50
8	BDN	56.5		87.2	157.2	10.49	3.08	30.57	10.10	3.25	31.20
9	BTN	69.2		79.6	159.8	8.22	2.76	28.77	8.10	2.64	28.23
10	BMMF	46.9		79.2	183.2	13.12	3.30	22.95	13.02	3.35	22.86
11	BDMF	49.8		80.5	163.8	9.13	2.68	15.98	9.03	2.78	15.64
12	BTMF	56.2		76.4	167.3	7.00	2.35	12.25	7.14	2.02	12.38

Результаты исследований состава и строения нитратов, метафосфатов мочевины и биурета с ФХМИ

Состав, строение и свойства синтезированных соединений по схемы 1 установлены и исследованы методами ФХМИ (табл.2). При изучении рентгенограмм мочевины и МН, МММФ и МДМФ (рис.2,3) выявленное

различие в рентгенограммах свидетельствует, что синтезированные образцы являются новыми веществами.

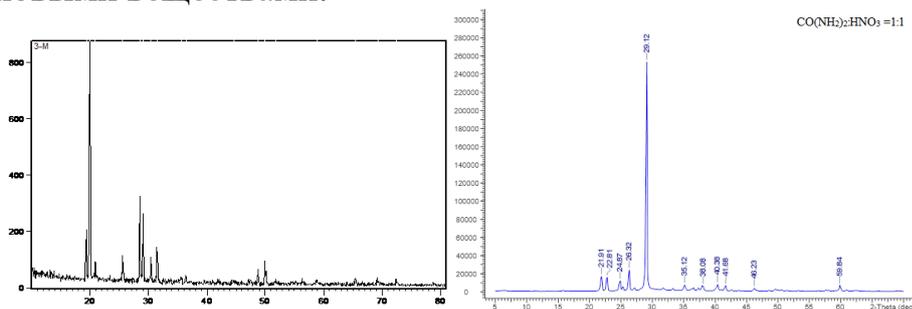


Рис. 2. Рентгенограммы мочевины (а) и мононитромочевины (б)

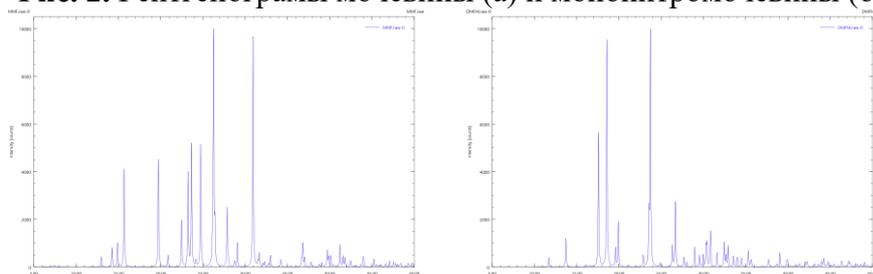


Рис. 3. Рентгенограммы MMMF (а) и MDMF (б)

Широкая полоса поглощения в ИК-спектрах соединений, синтезированных в соотношении Мочевина:ННО₃=1:1 и 1:2, свидетельствует о том, что молекулы ННО₃ и мочевины образуют между собой связи О··Н. Колебание $\nu(\text{C}=\text{O})$ мочевины при 1695.43 см^{-1} притерпевает низкочастотный сдвиг до 1633.75 см^{-1} ($\sim 62 \text{ см}^{-1}$), обусловленный протонированием $>\text{C}=\text{O}\cdots\text{H}^+$ при взаимодействии с азотной кислотой.

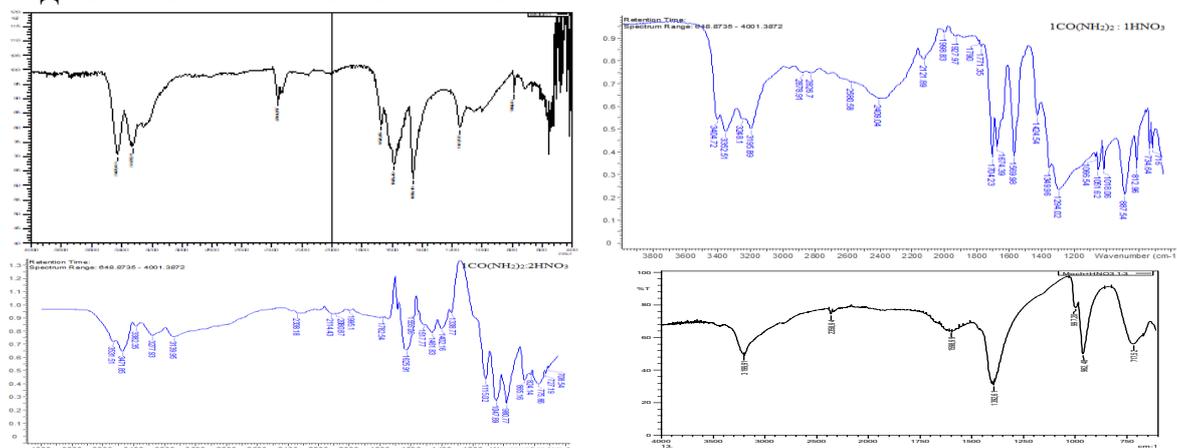


Рис. 4. ИК-спектры мочевины (а), MMN (б), MDN (в), MTN (г)

В отличие от спектра мочевины, появление полосы поглощения $\nu(\text{NO}_3^-)$ при $1327 \pm 10 \text{ см}^{-1}$ в спектрах нитратов составами 1:1÷1:3 указывают на наличие NO_3^- -ионов в их составе (рис.4).

Термические свойства синтезированных NM исследованы методами ТГА, ДТА и ДСК, по термограммам (5-рис,а-с) которых (20-600°C) установлено, что в процессы их термического разложения имеют одинаковые механизмы. Разложение MMN начинается при 140°C и продолжается до 167.83°C, причём в результате последовательного разложения в интервале 167.83–257.33°C MMN распадается сначала на $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ и HNO_3 , потом на HCNO - циановую кислоту и газы N_xO_y , теряя 7.51 мг (95.67% массы). Далее

циановая кислота и остаточная мочевина последовательно превращаются в следующие продукты: биурет (димер)→триурет (тример)→циануровая

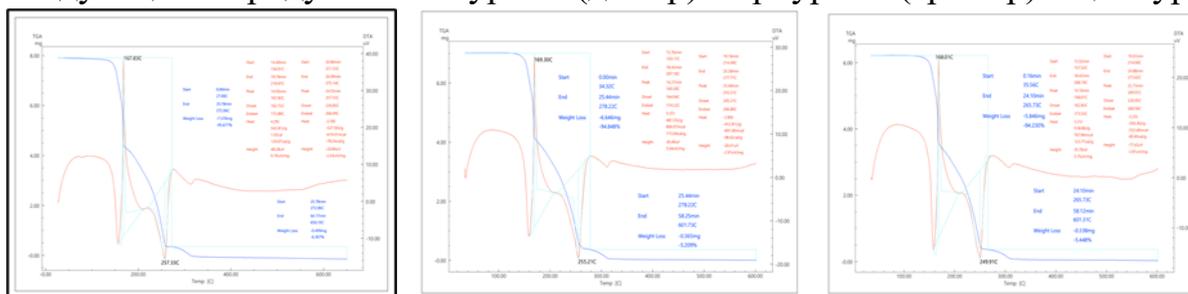


Рис. 5. Кривые TGA и DTA: а) MMN, б) MDN, в) MTN

кислота (циклической структурой – триазина). Выявлено, что продукты термически устойчивы при температурах выше 320°C и не претерпевает составных изменений, с конечной потерей массы 0.499 мг (6.307%).

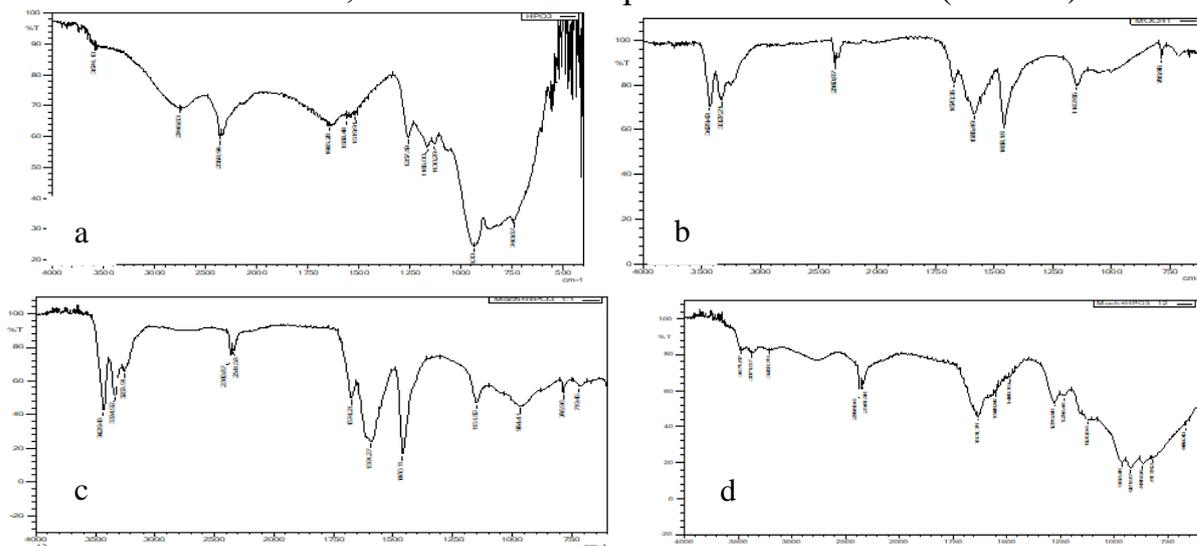


Рис.6. ИК-спектры: HPO₃ (а), CO(NH₂)₂ (б), [CO(NH₂)₂·HPO₃] (в), [CO(NH₂)₂·2HPO₃] (д)

Образование Н-связей в типе (NH₂)₂CO···HPO₃ с участием молекул CO(NH₂)₂ и HPO₃, объясняется проявлением слабых максимумов поглощения в широком диапазоне 2600–2800 см⁻¹ в ИК-спектре ММФ (рис.6). ИК-спектр CO(NH₂)₂·2HPO₃ отличается от спектра [CO(NH₂)₂·HPO₃], и в высоко частотной области наблюдаются линии поглощения, характерные для мочевины (рис. 6-б,д). Поглощение при 3471.87 см⁻¹ характерно для колебаний ν_(O-H) HPO₃, обусловленных ММВ связью с участием атома кислорода группы >C=O. Поглощения при 3371.57 и 3203.76 см⁻¹ соответствуют ν_{as} и ν_s(N-H) мочевины, что указывает на участие групп NH₂ во взаимодействии молекулами HPO₃. Такой сдвиг наблюдался в области 1700-1500 см⁻¹, где колебания ν_(C=O), ν_(C-N) и δ_(NH₂) мочевины сливались в одну широкую интенсивную полосу в спектре с максимумом при 1631.76 см⁻¹ и в виде плеча при 1548.54 и 1485.19 см⁻¹. Участие NH₂-групп в образовании нитратов биурета подтверждается изменениями в области колебаний ν_{as}, ν_s(NH) и δ_(NH₂) спектра. В отличие от ИК-спектра биурета, в спектре VMN появились дублетные полосы поглощения при 3402, 3209 см⁻¹, а также наблюдались их высокочастотные сдвиги (~30-85 см⁻¹). Обнаружено, что разность частот дублетных линий увеличилась от 140 до 193.78 см⁻¹ (~53 см⁻¹).

Такие аномальные высоко частотные изменения свидетельствуют о происходящих специфических конформационных изменениях в молекуле биурета, возможно, вращением одной аминокислотной группы по связи $-NH-C(O)NH_2$ с *цис*- в *транс*-изомер. Наряду с этим, колебания $\delta_{(H-N-H)}$ биурета проявляют слабое поглощение при 1722.43 см^{-1} со сдвигом в области низких частот на $\sim 10 \text{ см}^{-1}$, подтверждает образования MMBC типа $-H_2N \cdots H^+ - ONO_2^-$ и $-NH_2 \cdots O = NO_2 - H$. Полосы поглощения при $1247.94, 1182.36 \text{ (BMN)}, 1199.72, 879.54, 856.4 \text{ (BDN)}$ и $1197.79, 1163.08, 856.40, 775.4 \text{ см}^{-1} \text{ (VTN)}$ (рис. 7), отсутствующие в спектре биурета, но характерны для NO_3^- доказывает, что исследуемые вещества являются нитратными соединениями. На основании ИКС данных сделан вывод, что нитраты биурета образованы ионными парами $[>C=O \cdots H^+ - ONO_2^-]$ оксония и $[-NH_2 \cdots H^+ - O - NO_2^-]$ аммония нитратов.

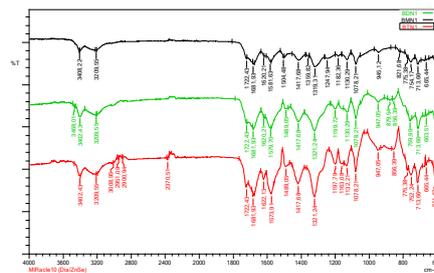


Рис. 7. ИК-спектр нитрата биурета

Поглощения в ИКС ВМФ указывают на наличие в этих соединениях прочных водородных связей. В частности, эти колебания наблюдаются в спектре VMMF при 3398.57 и 3291.90 см^{-1} , VDMF при 3419.79 и 3221.12 см^{-1} и VTMF при 3388.57 и 3226.91 см^{-1} (рис. 8), полосы поглощения при $1504, 1454 \text{ см}^{-1}$ (рис. 8) соответствуют колебаниям $\nu_{as(C-N)+\delta(H-N-H)}$ и поглощения при $1440, 1325 \text{ см}^{-1}$ – колебаниям $\nu_{as(C-N)+\delta(H-N-H)}$. В низкочастотной области спектра ($1200-600$) см^{-1} также присутствуют характерные колебательные линии молекулы биурета (рис. 8). Это дублеты при $1157, 1130 \text{ см}^{-1}$ и синглеты при 1064.7 см^{-1} средней интенсивности, соответствующие колебаниям $\delta_{(C-N-C)}, \delta_{(C-N-H)}, \delta_{(N-C=O)}$ соответственно. Эти сдвиги свидетельствуют об увеличении числа и прочности связей $(-O-H \cdots NH)$ с увеличением содержания кислоты в соотношении $Biuret:HPO_3$. В частности, сильный сдвиг в области низких частот в спектре образца VTMF свидетельствует о наличии молекулярной структуры, обусловленной H-связями.

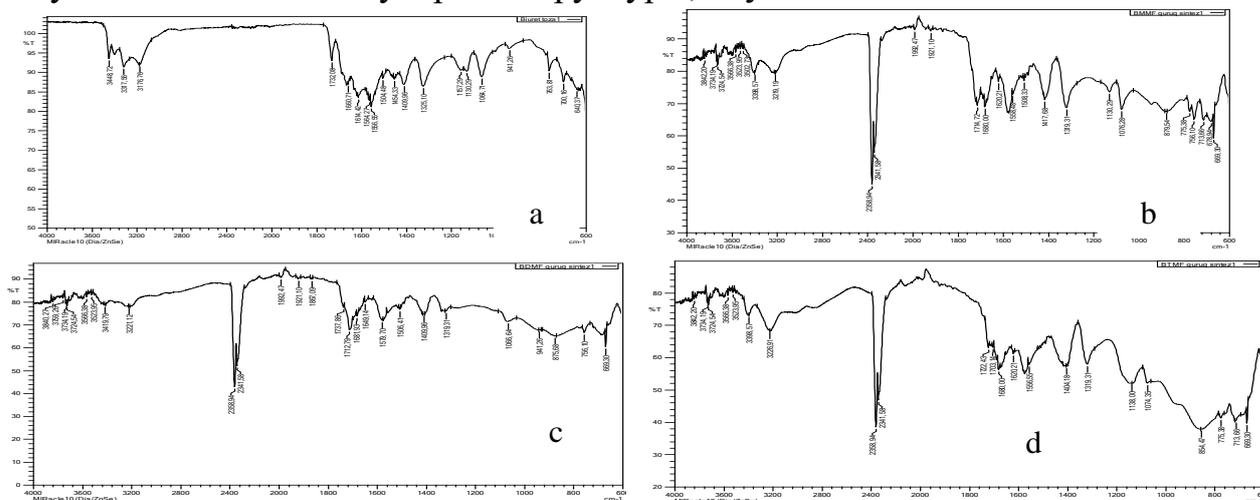


Рис. 8. ИК-спектры: Биурет (а), VMMF (b), VDMF(c) и VTMF(d)

На рентгенограммах образцов ВМФ наблюдаются плоские и размытые линии, что свидетельствует о близком к аморфному состоянию или наличии

слабо окристаллизованной фазы. Рентгеновские характерные рефлекссы поликристаллов при 13.1; 19.7; 23.8; 29.4 менее интенсивны и неравномерны, что свидетельствует о разупорядочении структуры кристаллической решетки и образовании из исходных веществ полимерные цепи или аморфные структуры под воздействием избыточной HPO_3 в изученных молярных соотношениях.

Структура кристалла мононитрата мочевины определено методом РСА сбором данных при 273 К. Кристаллы относятся к пространственной группе $P2_1/c$ с параметрами элементарной ячейки: $a=8.149\text{\AA}$, $b=8.195\text{\AA}$, $c=7.477\text{\AA}$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 104.80(7)^\circ$, $V \approx 482\text{\AA}^3$. $Z = 4$, $R = 0,0406$ (рис. 9). Кристаллы состоят из двух составных частей: молекулы мочевины- $\text{CO}(\text{H}_2\text{N})_2$ и нитрат анионов - NO_3^- , связанных между собой сильными Н-связями ($\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$) формированием устойчивой трехмерной супрамолекулярной решетки. NO_3^- анионы планарной геометрией и связаны точно направленной сильной Н-связью с протонированной молекулой мочевины с образованием кристаллов состава $[\text{O}_2\text{N}-\text{O}^-\cdots^+\text{H}-\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}_2]$.

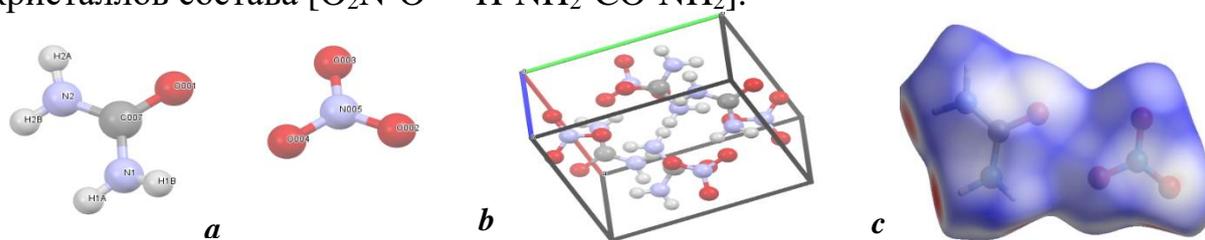


Рис.9. MMN: а-кристаллическая структура и б-ячейка, с-анализ поверхности Хиршфельда.

Относительные доля атомов Н и О в значении поверхности Хиршфельда составляют в виде взаимодействий $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ 66.2 % и $\text{O}\cdots\text{O}$ 9.9 %. Это указывают на существование сильных водородных связей в молекуле $[\text{O}_2\text{N}-\text{O}^-\cdots^+\text{H}-\text{NH}_2-\text{CO}-\text{NH}_2]$ (рис-9,а-с).

Структура кристалла моногидрата биурета определено методом РСА сбором данных при 270 К. Кристаллы относятся к пространственной группе $P2_1/n$ с параметрами элементарной ячейки: $a = 3.651\text{\AA}$, $b = 17.768\text{\AA}$, $c = 7.962\text{\AA}$; $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 95.080(5)^\circ$, $V=514.451\text{\AA}^3$, $Z = 4$. $R = 0.0474$. (рис. 10). Кристаллическая решетка сформирована с точно направленными Н-связями ($>\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}-\text{HO}$) между катионами биурета и молекул воды.

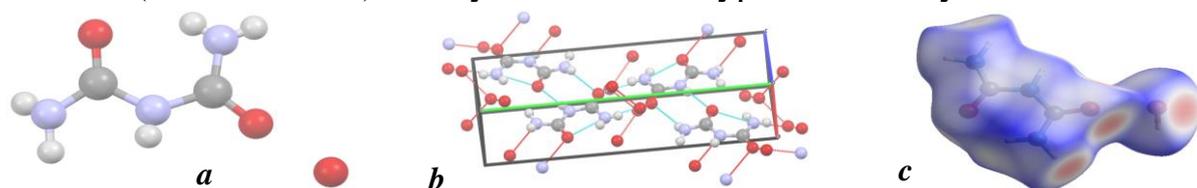


Рис.10. Биурет мононитрат а-кристаллическая структура и б- кристаллическая ячейка, с-анализ поверхности Хиршфельда

Наибольшую долю (50.3%) в значении поверхности Хиршфельда составляет $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ взаимодействие, которое считается доминирующим и выражает, в основном, Н-связи в молекуле. Доля Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий типа $\text{H}\cdots\text{H}$ также составляет значительную часть (27.9%) поверхности Хиршфельда (рис 10, а-с).

Исследования по практическому применению синтезированных комплексных соединений

С целью определения областей практического применения нитратов, метафосфатов мочевины и биурета во взаимосвязи «состав-свойство» было изучено влияние растворов различной концентрации в молярных соотношениях 1:1÷1:3 на растворимость труднорастворимых веществ, антипиреновые и антикоррозионные свойства этих соединений, результаты которых ниже приведены.

В экспериментах изучались растворимости труднорастворимых соединений (оксида, фосфата, сульфата, гидроксикарбоната) металлов, которые аккумулируются или накапливаются в шламах промышленных оборудований и почвах сельскохозяйственных оборотных землях. С этой целью исследованы растворимости CaHPO_4 , Fe_2O_3 , $\text{CaSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $(\text{CuOH})_2\text{CO}_3$ под воздействием растворов $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HNO}_3]$ ($n=1\div 3$). Увеличением доли HNO_3 в составе МН ($n=1 < 2 < 3$) повышаются растворимости этих соединений. В лабораторных условиях исследовали растворимость отложений и продуктов коррозии, образующихся в технологическом (теплообменном) оборудовании Газлинского газоперерабатывающего завода (ГПЗ) под действием нитратов карбамида. В результате анализов установлено, что содержание ионов $\text{Fe}^{2+/3+}$ в растворах составляло по ММН – 22.95, МДН – 40.38 и МТН – 73.8 мг/мл. В целом, в растворах нитратов мочевины растворяются 26.0-67.6 % шламовые отложения, разработан способ получения неорганических пигментов использованием этих растворов.

Впервые применением метода ЭПР-спектрометрии установлено, что при обработке образцов почвы «Jondor» растворами молекулярных комплексов НМ различного состава $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HNO}_3]$ $n=1,2,3$ спектрально идентифицированы активные ($\text{ГК}_{\text{акт}}$) и неактивные ($\text{ГК}_{\text{неакт}}$) формы гумусовых компонентов, связанных с неорганическими веществами в почве, установлено активирующее влияние увеличения доли HNO_3 в составе НМ на повышение количества $\text{ГК}_{\text{акт}}$ и уменьшение количества $\text{ГК}_{\text{неакт}}$ почвы пахотной земли (рис 11, a-d).

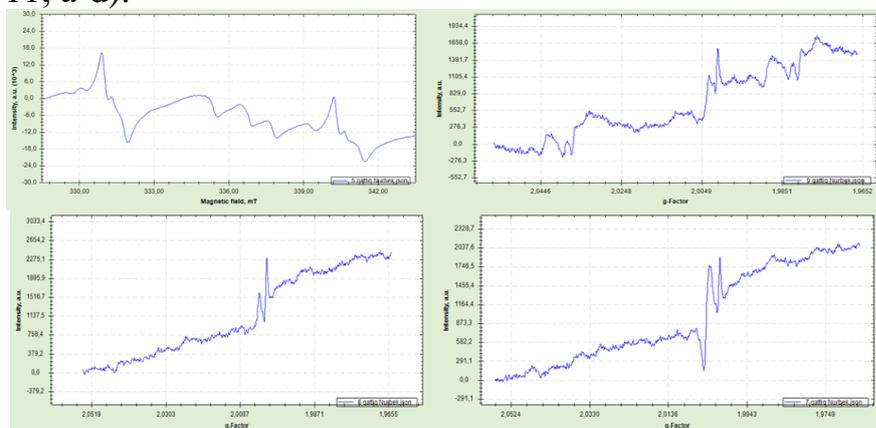


Рис.11. Спектры ЭПР: почвы «Jondor» (а) и почвы «Jondor» + МНМ (б), почвы «Jondor» + МДН (в) и почвы «Jondor» + МТН (г).

Исследования огнезащитных свойств растворов метафосфатных соединений мочевины и биурет

В этом разделе представлены результаты исследования антипиреновых свойств растворов метафосфаты мочевины и биурета общего состава $[\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot n\text{HPO}_3]$, $[\text{Biuret} \cdot n\text{HPO}_3]$ $n = 1$ (МММФ, ВММФ), 2 (МДМФ, ВДМФ), 3 (МТМФ, ВТМФ) по огнезащиты целлюлозных материалов: бумагу(А4), картона, суровой ткани и древесины. Испытания образцов на горючесть проводились в соответствии с требованиями ГОСТ Р 50810-95.

По результатам исследований установлено, что образцы, полученные на основе ММФ, проявили на бумаге (4.5-60.0%) низкую, а в случае остальных образцов высокую – 72.99-98.89% огнезащитную эффективность, что по нормативам стандарта соответствуют II классу (G2) антипиреновых средств. Отмечено, что образцы ВМФ обладают (38.8-67.3%) низкими огнезащитными свойствами. Модифицированные образцы древесины и хлопковой ткани, обработанные растворами ММФ и ВМФ исследованы на огнезащитные свойства по кислородному индексу (LOI), составляющие для древесины 25.8-28.8 %, а для ткани 24.8-26.8% (контроль 21%) также подтверждают проявления антипиреновой эффективности растворами метафосфатов мочевины и биурета.

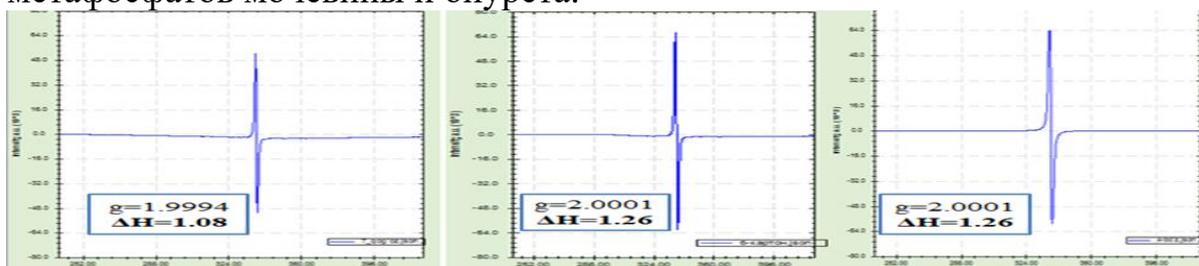


Рис.12. Спектры ЭПР после испытания на воспламеняемость образцов бумаги, суровой ткани, картона обработанных растворами МММФ.

Впервые методом ЭПР-спектроскопии изучен механизм повышения огнестойкости целлюлозных материалов антипиренами. Сравнением параметров продуктов горения установлено, что бумага образует (CO_3^-) карбонатные ($g=1.9986-1.9997$, $\Delta H=1.08-1.26$ мТ) радикалы (рис.12,а) горит до конца. Остальные образцы горят минимально, образуя радикалы $\text{C}^{\cdot}_{(\text{кокс})}$ ($g=2.0001-2.0020$, $\Delta H=1.08-1.26$ мТ) (рис.12,б,с). Доказано, что мочевины и метафосфат ионы совместно проявляют антипиреновый синергизм, способствуя образованию эффективного огнезащитного коксового слоя при горении целлюлозных материалов в зависимости от их текстуры.

Исследования коррозионно-ингибирующих свойств растворов нитратов, метафосфатов мочевины и биурета

В производственных условиях использованием в качестве коррозионных сред 0.5 молярных растворов HCl и H_2SO_4 определялись скорости коррозии образцов стали Ст-20, исследованы ингибирующие свойства МММФ, МДМФ, МТМФ и БММФ, БММФ, БТМФ весовым методом по ГОСТ 9.506-87. Установлено, что скорость коррозии и степень ингибирования возрастают с увеличением концентрации образцов-

ингибиторов в коррозионной среде и температуры окружающей среды. Испытательные эксперименты проводились в ЦНИЛ “Шуртанского УНГД”, а результаты подтверждены соответствующими актом и справкой (Справка № ОП 02/БО-1777 Шуртанского УНГД от 03.05.2024 г.).

Для определения антикоррозионной эффективности образцов ингибиторов МММФ, МДМФ и МТМФ впервые нами использован метод ЭПР спектроскопии. Антикоррозионные показатели определялись по параметрам спектров ЭПР и количества (N_{PMM} , spin/mg; C , spin/mm³, C_M , M) перешедших в раствор парамагнитных ионов Fe²⁺, Fe³⁺ и Mn²⁺ из образца стали Ст-3 в коррозионной среде 3%-ного раствора NaCl и технической воды ГППЗ, в присутствии метафосфатов мочевины и массе осадков. Испытания проводились с различными интервалами времени (24, 48 и 72 часа) с использованием образцов стали Ст-3 и образцов металлических труб теплообменников технологического оборудования ГППЗ. Результаты исследования представлены на рисунке 13 и в таблице 3.

Согласно результатам исследований, в контрольном 3% растворе NaCl высокой коррозионной активностью было установлено, что легирующий компонент Mn ($8.174 \cdot 10^{14}$ спин/мм³) корродируется в 1.38 раза больше, чем основной металл Fe ($5.923 \cdot 10^{14}$ спин/мм³) в стали Ст-3. При этом оба металла корродируются с относительно высокой скоростью в начальном этапе (за 24 часа): $N_{КПЦ}(Fe^{+2/+3}) = 3.399 \cdot 10^{14}$ спин/мм³; $N_{КПЦ}(Mn^{+2}) = 6.525 \cdot 10^{14}$ спин/мм³.

При исследовании растворов ингибиторов в среде pH 6.14–7.01 установлено, что масса металла в 0.5%-ном растворе БММФ ($\Delta m=0$ г, $V_1=0$ г/ч·м²) за 24 часа не изменялась, а при 48-72-часовом испытании обнаружен прирост массы со скоростью $2.143 \cdot 10^{-3}$ и $1.786 \cdot 10^{-2}$ г/ч·м². Такой прирост массы свидетельствует об образовании на поверхности образца стали Ст-3 слоя ингибитора, а в 1.0%-ном растворе БММФ со скоростью $2.381 \cdot 10^{-2}$, $2.44 \cdot 10^{-2}$ и $0.992 \cdot 10^{-2}$ г/ч·м² в течение 24, 48, 72 часов. По результатам исследований установлено, что наиболее эффективное ингибирование коррозии в среде 3.0% ного раствора NaCl проявляют нейтрализованные КОН 0.5-2.0% ные растворы БММФ.

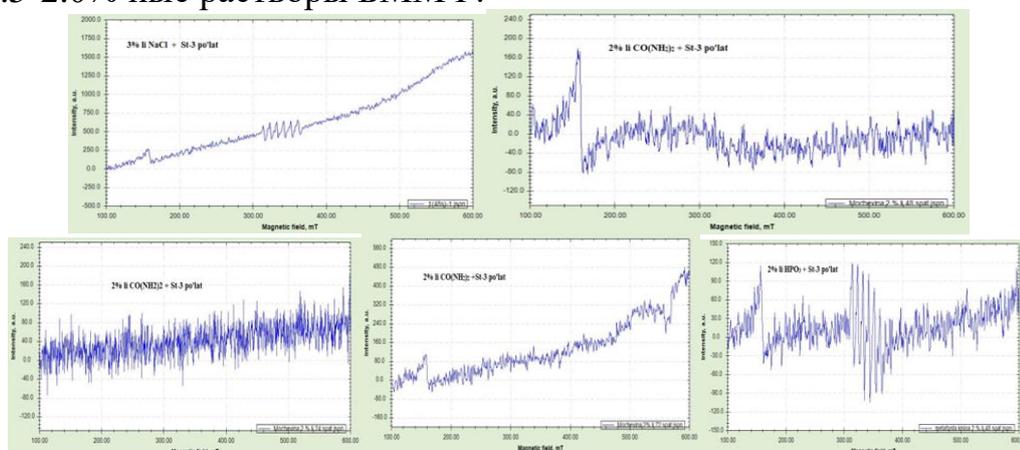


Рис 13. ЭПР-спектры коррозии образца стали Ст-3 в различных средах и растворах ММФ, ВМФ.

Таблица 3.

Результаты исследования свойства ингибитора коррозии стали Ст-3 в 3.0% растворе NaCl в нейтральной среде монометафосфата биурета (БММФ)

№ п/п	Среда 3.0% NaCl, КОН + Ингибитор	Площадь образца, см ² /м ² ·10 ⁻⁴	рН р-ра	Изменение массы образца стали Ст-3, g / %				^a Скорость коррозии, г/час м ² ^b Скорость увелич. массы, г/час м ²		
				Исх. масса; m ₀ / Δm / %	24 часа, m ₁ /Δm / %	48 часов, m ₂ /Δm / %	72 часа, m ₃ /Δm / %	V ₁ (24 часа)	V ₂ (48 часов)	V ₃ (72 часа)
1	3.0% ный NaCl+KOH (котроль)	35	7.01	32.3900 / 0.0 / 0.0	32.3771 / -0.0129 / 3.98·10 ⁻²	32.3706 / -0.0194 / 6.0·10 ⁻²	32.3643 / -0.0257 / 7.81·10 ⁻²	^a 1.536·10 ⁻¹	^a 1.155·10 ⁻¹	^a 1.02·10 ⁻¹
2	0.5% ный ВММФ	35	6.14	28.9999 / 0.0 / 0.0	28.9999/0.0/0.0	29.0035 / +0.0036 / 1.24·10 ⁻²	29.0044 / +0.0045 / 1.5·10 ⁻²	0	^b 2.143·10 ⁻²	^b 1.786·10 ⁻²
3	1.0% ный ВММФ	35	6.76	29.9578 / 0.0 / 0.0	29.9598 / +0.0020 / 6,676·10 ⁻³	29.9619 / +0.0041 / 1.368·10 ⁻²	29.9603 / +0.0025 / 8.35·10 ⁻³	^b 2.381·10 ⁻²	^b 2.44·10 ⁻²	^b 0.992·10 ⁻²
4	2.0 % ный ВММФ	35	6.60	29.9111 / 0.0 / 0.0	29.9108 / -0.0003 / 1.00·10 ⁻³	29.9143 / +0.0042 / 1.404·10 ⁻²	29.913 / +0.0017 / 5.68·10 ⁻²	^a 3.57·10 ⁻³ (43 раза медленнее отн. котр)	^b 2.50·10 ⁻²	^b 6.75·10 ⁻³

Материальные балансы получения антипиреновых составов (552 тысяча сум/т) и ингибиторов коррозии ММФ (238 тысяча сум/т), БМФ (300 сум/т) обоснованы экономическими расчетами, по ценам (01.11. 2025 г.) исходных компонентов CO(NH₂)₂, [CO(NH₂)₂]NH, HNO₃, HPO₃

ВЫВОДЫ

1. Образование соединений мочевины и биурета с азотной и метафосфорной кислотами в мольных соотношениях 1:1, 1:2, 1:3 обосновано на основе квантово-химических расчетов распределения электронов и зарядов на атомах их молекул, характера связей и молекулярных параметров во взаимосвязи «состав-структура-свойства» образующихся соединений.

2. Из водных растворов мочевины с азотной и метафосфорной кислотами в мольных соотношениях 1:1÷1:3, выделены твердые гигроскопичные молекулярные комплексы состава [CO(NH₂)₂·nHNO₃]·xH₂O и [CO(NH₂)₂·nHPO₃]·xH₂O, где n=1,2,3; x=1,2,3, образованием межмолекулярной водородной связью ионных пар типов >C=O···H-ONO₂, >C=O···H-ОРО₂ и -NH₂···O=NO₂H, -NH₂···O=РО₂H с изменчивым количеством гидратированных молекул воды.

3. Исходными мольными соотношениями биурета с азотной и метафосфорной кислотами 1:1÷1:3 из водных растворов выделены твердые гигроскопичные, инкогуриэнтно, инвариантные молекулярные комплексы состава HN[CO(NH₂)₂·nHNO₃]·xH₂O и HN[CO(NH₂)₂·nHPO₃]·xH₂O n=1,2,3; x=1,2,3, благодаря образования ионных пар ММВ связями типов >C=O···H-ONO₂, >C=O···H-ОРО₂ и -NH₂···O=NO₂H, -NH₂···O=РО₂H, с различными числами гидратных молекул H₂O.

4. По результатам исследования полученных 12 молекулярных соединений мочевины и биурета с азотной и метафосфорной кислотами в твердом состоянии современными ФХМИ установлены состав, строения (2 методом РСА) и определены многофункциональные свойства их растворов, выявлены возможности практического применения полученных соединений в различных целях.

5. Изучением антипиреновых свойств растворов МФМ и БМФ обнаружен снижающий эффект ММФ горючести целлюлозных материалов: хлопковой ткани, картона и древесины на (72.99-98.89%). Методом ЭПР спектроскопии установлен механизм антипиренового действия ММФ и БМФ в зависимости от текстуры целлюлозных материалов. Разработаны способы получения эффективных амидо-фосфатных антипиреновых составов II (G2) группы огнезащиты целлюлозных материалов по ГОСТ 16363-98 и ГОСТ Р 5081-0-95.

6. Методами гравиметрии, ЭПР-спектрометрии (впервые) в интервале рН = 1.66-9.0 изучено ингибирование коррозии образцов стали Ст-3, Ст-20 в среде технических вод, содержащих 3% NaCl, 0.5 М HCl и H₂SO₄, 0.5-2.0% ными растворами нитратов и метафосфатов мочевины и биурета состава 1:1÷1:3, на их основе разработаны и внедрены в производство эффективные ингибиторы коррозии оптимального состава.

7. Впервые методом ЭПР спектрально идентифицированы активные и неактивные формы гумусовых компонентов, связанных с неорганическими веществами в изученных образцах почвы и увеличение содержания активных форм в зависимости от рН среды и количества нитрат-ионов в растворах нитрата мочевины, использованных при обработке пахотных земель.

Исследованием влияния растворов нитрата мочевины на растворимость шламовых отложений в технологических оборудованьях достигнуто до 26.0-67.6% очистки от шламовых отходов и разработаны способы получения неорганических пигментов различного назначения использованием этих растворов.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M
IN ACCORDANCE OF ACADEMIC DEGREES
AT THE NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

BUKHARA STATE UNIVERSITY

KHOLIKOVA GULYAYRA KULDOSHEVNA

**SYNTHESIS AND PROPERTIES OF NITRATE AND PHOSPHATE SALTS
OF UREA AND ITS DERIVATIVES**

02.00.01 - Inorganic chemistry

**DISSERTATION ABSTRACT
of the doctor of philosophy (PhD) on chemical sciences**

Tashkent - 2026

The title of the doctoral dissertation (PhD) has been registered by the Supreme Attestation Commission under the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of Uzbekistan under the number of B2023.4PhD/K683.

The dissertation has been prepared at the Bukhara State University.

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

Scientific leader:	Mardonov Uktam Mardonovich Candidate of Chemical Sciences, Associate professor
Official opponents:	Kadirova Zuxra Chingizovna Doctor of chemical sciences, professor Abdullayeva Zubayda Shavkatovna Candidate of chemical sciences, Associate professor
Leading organization:	Institute of General and Inorganic Chemistry

The defense of the dissertation will take place at the meeting of the Academic Council of the National University of Uzbekistan No. DSc.03/2025.27.12.K.01.13.M on "31.03" 2026 at 15⁰⁰ hours. (Tashkent, 4 Universitetskaya Street)

The dissertation is available for review at the Information and Resource Center of the National University of Uzbekistan (registration number №___). (Tashkent, 4 Universitetskaya Street)

The abstract of the dissertation was distributed on "19.03, 2026.

(Protocol registration number № 4 dated "19.03" 2026)

T.S. Xolikov

Chairman of Scientific Council for awarding of scientific degrees, Doctor of Chemical Sciences, Professor

U. Ruzmetov

Scientific Secretary of Scientific Council on award of scientific degrees, Doctor of Chemical Sciences, Professor

Sh.A. Kadirova

Chairman of Scientific Seminar under Scientific Council for awarding the scientific degrees, Doctor of Chemical Sciences, Professor



INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

The aim of the research work is to synthesis of urea compounds and its derivatives with nitric and phosphoric acids and determination of their properties.

The objects of the research work are urea, biuret and their nitrate and metaphosphate compounds; sparingly soluble metal compounds; cardboard, fabric, paper, wood, St-3 and St-20 steels, and soil samples.

Scientific novelty of the research work:

-based on quantum-chemical calculations (QChC), the possibilities of formation of urea and biuret compounds with nitrate and metaphosphoric acids in molar ratios of 1:1 to 1:3 were substantiated; the electron density and atomic charge distributions in the molecules, the nature of chemical bonds, and the energetic parameters of the molecules were determined, and their compositions and structures were confirmed.

-twelve molecular compounds of urea and biuret with nitrate and metaphosphate ions were obtained in the solid state; using modern physicochemical research methods, their compositions and structures were established, the physicochemical properties of their solutions were studied, and potential application areas were identified.

-for the first time, active and inactive forms of soil humic components were spectrally identified by the EPR method depending on the pH of the medium and the concentration of nitrate ions in urea nitrate solutions.

-an increase in the solubility of technological equipment sludges in urea nitrate solutions by 26.0–67.6% was established, along with a high content of $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$ ions (18–23 g/L) in solution; methods for producing inorganic pigments of various applications from technological wastes were developed.

-investigation of the fire-retardant properties of nitrate solutions of urea and biuret showed a significant reduction in the flammability of untreated fabric, cardboard, and wood (by 72.99–98.89%); based on these results, the possibility of obtaining effective fire retardants of group II (G2) fire-protection class was demonstrated.

-using gravimetric methods and, for the first time, EPR spectrometry in the pH range of 1.66–9.0, the corrosion-protective properties of 0.5–2.0% acidic and neutral solutions of urea and biuret with HNO_3 and HPO_3 in molar ratios of 1:1, 1:2, and 1:3 toward metal alloys (steels St-3 and St-20) in technical water media were studied; corrosion inhibition of 82.0–94.75% was established, optimal inhibitor compositions were determined, and the phenomenon of “corrosion inversion” in highly concentrated (2.0%) metaphosphate solutions was revealed.

Implementation of research results. Based on the results of scientific and applied studies on the manifestation of the multifunctional properties of solutions of nitrate and metaphosphate compounds of urea and biuret:

- multifunctional solutions of nitrate and metaphosphate compounds of urea and biuret were implemented in practice as corrosion inhibitors for protecting the metal structures of the cooling tower (“gradirnaya”) make-up water supply system from corrosion at the “Shurtan Oil and Gas Production” Directorate under the

“Shurtan Oil and Gas Production” (reference No. ОП02/Б0-1777 dated May 3, 2024). As a result, highly effective corrosion inhibitors for aggressive environments were developed based on nitrate and metaphosphate compounds of urea and biuret.

- the molecular structures of urea mononitrate and biuret monohydrate were deposited in the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC 2511988 and 2512468). These data provide an opportunity to use the presented crystallographic information for the structural characterization of related compounds.

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

E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI

I bo'lim (I часть; I part)

1. Xoliqova G.Q., Avezov Q.G., Ganiyev B.Sh., Mardonov O.M. Mochevina nitrat tuzi va nitrat kislotalar bilan qayta ishlangan fosforitlarining rentgen fazaviy tahlili. ФарДУ хабарлари. - Фарғона. 2023. - №.4. - Б. 56-59 (02.00.00. №17).
2. Xoliqova G.Q., Mardonov O.M., Ganiyev B.Sh. Mochevina nitrat tuzlarining korroziya ingibitorlik xossalari // Journal of Science, Research and Teaching. 2024. - Vol. 3. - №.12. - P. 123-132 (№.23. Scientific Journal Impact Factor. SJIF 6.645).
3. Kholikova G.K., Mardonov U.M., Tursunova I.N., Ganiyev B.Sh., Khozhiev Sh.T. Synthesis and study of the agrochemical properties of urea salts with nitric and orthophosphoric acid // E3S Web of Conferences. 2023. - №.389. - P.03005,1-7. (№.3. Scopus: IF 0.21.).
4. Kholikova G.K., Mardonov U.M., Ganiev B.Sh. Synthesis, spectroscopic characterization and theoretical investigation of biuret-metaphosphate molecular complexes: a combined experimental and DFT study // Oriental journal of medicine and natural sciences. 2025. - Vol. 2. - №. 4. - P. 34-45. (№.23. Scientific Journal Impact Factor. SJIF 2.145).
5. Xoliqova G.Q., Mardonov O.M. Mochevina va mochevina nitrat molekularida bajarilgan zichlik funktsional nazariyasi (DFT) hisoblashlari. NamDU Ilmiy Axborotnomasi. 2025. - №. 7. - B. 98-105 (02.00.00. №18).
6. Kholikova G.K., Mardonov U.M., Ganiyev B.Sh., Khazratova D.A., Sharipov M.S. Flame-retardant behavior of urea–metaphosphoric acid complexes on cellulose-based materials. Journal of Chemistry and Technologies, 2025. - Vol. 33. - №.4. - P. 611-620 (№.3. Scopus IF.0.15, WOS. IF.0.5).

II bo'lim (II часть; II part)

7. Холикова Г.К., Мардонов У.М., Акрамов А.Я., Ганиев Б.Ш. Синтез и изучение состава фосфата мочевины. Узбекско-японская международная конференция «Energy-Earth-Environment-Engineering», - Ташкент, 2022. 15-18 ноября. - С.100.
8. Холикова Г.К., Фатуллаев Н.Н., Турдиева Г.А., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш. Синтез и изучение нитратных солей мочевины. Узбекско-японская международная конференция «Energy-Earth-Environment-Engineering», - Ташкент. 2022. 15-18 ноября. - С.143.
9. Холикова Г.К., Турдиева Г.А., Фатуллаев Н.Н., Акрамов А.Я., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш. Изучение растворимости плохо растворимых солей под действием нитрата мочевины. Узбекско-японская международная конференция «Energy-Earth-Environment-Engineering», - Ташкент. 2022. 15-18 ноября. - С.83.
10. Фатуллаев Н.Н., Турдиева Г.А., Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш. Исследование взаимодействия солей нитрата мочевины в почве. // Международная научно-практическая конференция «Современные проблемы химии координационных соединений». – Бухара, 2022. 22–23 декабря. – С. 333–334.

11. Холикова Г.К., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш. Синтез и свойства молекулярных комплексов мочевины с метафосфорной кислотой. “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusida xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya. - Buxoro. 2022. 22-23 dekabr. - B. 74-77.
12. Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Акрамов А.Я., Фатуллаев Н.Н., Турдиева Г.А., Кахрамонова М.З., Нарзуллаева М.Р. Синтез и исследование свойств солей мочевины с кислотами элементов V группы. Региональная научная студенческая конференция с международным участием, посвященная 195-летию А.М. Бутлерова. - Казань. 2023 г. 24-27 май. - С.23.
13. Xoliqova G.Q., Avezov Q.G., Ganiyev B.Sh., Mardonov O.M., Saitov J.J., Normurodov N.N. Mochevina nitrat tuzlarining “Jondor” tuprog‘iga ta’sirini o‘rganish natijalari // “Tabiiy fanlarda innovatsion yechimlar: zamonaviy tadqiqotlar va ilm-fan integratsiyasi” mavzusidagi Respublika ilmiy – amaliy konferensiyasi. Xiva. 2023. 5-6 oktyabr. - B.76-77.
14. Xoliqova G.Q., Avezov Q.G., Ganiyev B.Sh., Mardonov O.M., Saitov J.J., Normurodov N.N. Mochevina nitrat tuzlari ta’sirida past sifatli Qizilqum fosforitlari eruvchanligini o‘rganish // “Tabiiy fanlarda innovatsion yechimlar: zamonaviy tadqiqotlar va ilm-fan integratsiyasi” mavzusidagi Respublika ilmiy – amaliy konferensiyasi. Xiva. 2023. 5-6 oktyabr. - B.80-82.
15. Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш. Изучение усвояемости P_2O_5 под действием азотнокислых солей мочевины Жондорского района Бухарской области // Всероссийская научная конференция «Агрохимическая наука - синтез академических знаний и практического опыта». - Москва. 2023. 12-13 сентября. - С.114-115.
16. Xoliqova G.Q., Ganiyev B.Sh., Mardonov O.M. Mochevina mono- va difosfat tuzlari eritmalari ta’sirida “Jondor” tuprog‘i namunasi paramagnit markazlar tabiatini EPR spektroskopik tahlili // Uzbekistan-Japan International Conference «Energy- Earth-Environment-Engineering». Tashkent. 2023. 5th december. -С. 71.
17. Xoliqova G.Q., Mardonov O.M., Ganiyev B.Sh. Mochevina va monofosfat mochevina kompleksi kvantkimyoviy hisoblashlari // Tibbiyot sohasida tibbiy kimyo, biokimyo va biofizikada istiqbolli tadqiqotlar. Xalqaro ilmiy-amaliy anjuman tezislari to‘plami. - Buxoro. 2024. 17-18 may. - B. 247-249.
18. Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Жумаева З.Р., Самиев С.Н. Синтез и исследование антикоррозионных свойств нитратных и орто-фосфатных солей мочевины // Актуальные вопросы химии 21 века: сборник тезисов докладов II Международной научной студенческой конференции, посвященной 220-летию КФУ. - Казань. 2024. 25-26 май. - С.55.
19. Xoliqova G.Q., Mardonov O.M., Ganiyev B.Sh., Hazratova D.A., Sharipov M.S. Mochevina nitrat tuzlarining tuproq tarkibidagi fosforli birikmalar eruvchanligiga ta’sirini o‘rganish // “Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo‘llash orqali qishloq xo‘jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari” mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. - Buxoro. 2025. 21-22-aprel. - B.307-308.

20. Xoliqova G.Q., Mardonov O'.M., Ganiyev B.Sh., Hazratova D.A., Tursunov M.A. Tuproq tarkibidagi turli metall ionlari birikmalari eruvchanligiga mochevina nitrat tuzlari ta'siri // "Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo'llash orqali qishloq xo'jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari" mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. - Buxoro. 2025. 21-22-aprel. - B.301-302.
21. Xoliqova G.Q., Mardonov O'.M., Umarov B.B., Ganiyev B.Sh., Xudoyarova E.A. Tuproq tarkibidagi gumus moddalar miqdorini nitrat mochevina tuzlari ta'sirida o'zgarishini EPR spektroskopiya usuli bilan o'rganish // "Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo'llash orqali qishloq xo'jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari" mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. - Buxoro. 2025. 21-22-aprel. - B.334-337.
22. Xoliqova G.Q., Narzullayeva M.R., Mardonov O'.M., Ganiyev B.Sh. Biuret va metafosfat kislotalari molekulyar komplekslari IQ spektroskopik tahlili // "TAFAKKUR VA TALQIN" mavzusida Respublika miqyosidagi ilmiy-amaliy anjuman to'plami. - Buxoro. 2025. 15-may. - B.92-95.
23. Холикова Г.К., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш., Хазратова Д.А. Турсунова И.Н., Муратова М.Н. Синтез и исследование антипиреновых свойств молекулярных комплексов метафосфата мочевины. "Kimyo sanoati va kimyoviy texnologiyaning muammolari va innovatsion yechimlari" mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani. - Navoiy. 2025. 23-24-may. - B. 423-425.
24. Холикова Г.К., Мардонов У.М., Ганиев Б.Ш., Абдурахмонов С.Ф., Хусенов К.Ш., Каримов З.Т. ЭПР спектроскопическое изучение антикоррозионной эффективности метафосфатных молекулярных комплексов мочевины. "Kimyo sanoati va kimyoviy texnologiyaning muammolari va innovatsion yechimlari" mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani. 23-24-may, Navoiy. 2025. B. 472-476.
25. Mardonov O'.M., G.Q.Xoliqova, Ganiyev B.Sh. Mochevina va biuret asosidagi kompleks birikmalar tadqiqotlari". Monografiya. Kamolot. 2025. – B 200.
26. Xoliqova G.Q., Mardonov O'.M., Ganiyev B.Sh., Xudoyarova E.A., Hazratova D.A. Применение метода ЭПР спектрометрии в исследовании плодородия почвы. O'zbekiston Respublikasi adliya vazirligi huzuridagi intellektual mulk agentligi. №DGU.57008. 01.12.2025.
27. Xoliqova G.Q., Mardonov O'.M., Ganiyev B.Sh., Abduraxmonov S.F., Babayeva R.R. Применение метода ЭПР спектрометрии в исследовании коррозии металлов. O'zbekiston Respublikasi adliya vazirligi huzuridagi intellektual mulk agentligi. №DGU.57007. 01.12.2025.
28. Xoliqova G.Q., Mardonov O'.M., Ganiyev B.Sh., Aslonova F.S., Babayeva R.R. Применение метода ЭПР спектрометрии в определения механизмов действия антипиренов. O'zbekiston Respublikasi adliya vazirligi huzuridagi intellektual mulk agentligi. №DGU.57009. 01.12.2025.