

**САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМий ДАРАЖА БЕРУВЧИ
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 РАҚАМЛИ ИЛМий КЕНГАШ**

БУХОРО МУҲАНДИСЛИК-ТЕХНОЛОГИЯ ИНСТИТУТИ

КАСИМОВА ГУЗАЛ КАРИМОВНА

**РИБОФЛАВИН ВА ТАРТРАЗИН МОЛЕКУЛАЛАРИНИНГ ЎЗ-ЎЗИ
БИЛАН ЙИҒИЛИШ СПЕКТРОСКОПИЯСИ**

01.04.05 – Оптика

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Бухоро - 2021

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD)
диссертацияси автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации
доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам**

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

Касимова Гузал Каримовна

Рибофлавин ва тартазин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилиш
спектроскопияси..... 3

Касимова Гузал Каримовна

Спектроскопия самосборки молекул рибофлавина и тартазина 23

Kasimova Guzal Karimovna

Self-Assembly spectroscopy of Riboflavin and tartrazine molecules 41

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ

List of published works 45

**САМАРҚАНД ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ
ИЛМий ДАРАЖА БЕРУВЧИ
PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 РАҚАМЛИ ИЛМий КЕНГАШ**

БУХОРО МУҲАНДИСЛИК-ТЕХНОЛОГИЯ ИНСТИТУТИ

КАСИМОВА ГУЗАЛ КАРИМОВНА

**РИБОФЛАВИН ВА ТАРТРАЗИН МОЛЕКУЛАЛАРИНИНГ ЎЗ-ЎЗИ
БИЛАН ЙИҒИЛИШ СПЕКТРОСКОПИЯСИ**

01.04.05 – Оптика

**Физика-математика фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси
АВТОРЕФЕРАТИ**

Бухоро - 2021

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида B2019.2.PhD/FM358 B2021.1.PhD /FM358 B2021.3.PhD /FM358 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Бухоро муҳандислик-технология институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус, инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифасида (www.samdu.uz) ва «ZiyoNet» ахборот таълим порталида (www.ziynet.uz) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар: **Астанов Солих Хусенович**
физика-математика фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар: **Муродов Гуломхон**
физика-математика фанлари номзоди, доцент

Раҳматуллаев Илёс Арзимуродович
физика-математика фанлари доктори, доцент

Етакчи ташкилот: **Қарши давлат университети**

Диссертация химояси Самарқанд давлат университети ҳузуридаги PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 рақамли Илмий кенгашнинг «__» ____ 2021 йил соат __ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 140104, Самарқанд шаҳри, Университет хиёбони кўчаси, 15 уй.Тел.:(+99866) 239-17-14, 239-11-40; факс: (+99866) 239-11-40, e-mail: devonxona@samdu.uz Самарқанд давлат университети, Физика факультети, 1-қават, 63-хона).

Диссертация билан Самарқанд давлат университетининг Ахборот ресурс марказида танишиш мумкин (№__ рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 140104, Самарқанд шаҳри, Университет хиёбони кўчаси, 15 уй.Тел.:(+99866) 239-17-14, 239-11-40; факс: (+99866) 239-11-40.

Диссертация автореферати 2021 йил «__» _____ куни тарқатилди.
(2021 йил «__» _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси).

М.Х.Ашуров

Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш раиси,
ф.-м.ф.д., академик

Р.М.Ражабов

Илмий даражалар берувчи
илмий кенгаш илмий котиби,
ф.-м.ф.н., доцент

Д.И.Семенов

Илмий даражалар берувчи илмий кенгаш
ҳузуридаги Илмий семинар раиси,
ф.-м.ф.д., доцент

КИРИШ (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Сўнгги йилларда жаҳонда олиб борилаётган тадқиқотлар келгусида микрозарра-чаларнинг олиниши кўзда тутилган ўз-ўзи билан йиғиладиган молекулаларнинг шаклланиш шароитларини аниқлашга қаратилгандир. Ўтказилган экспериментал ва назарий ҳисоблашлар асосида молекулалараро ўзаро таъсирнинг ўрганилиши ярим ўтказгичнинг органик бўёқ билан гибрид микроструктураларини олишга ёрдам берди. Молекуляр спектроскопия усули билан ўтказиладиган тадқиқотлар танқис бўлган янги фотосинтетик пигментларни олиш имконини беради. В₂ витамини асосида янги доривор шаклларнинг яратилиши ўз-ўзи билан йиғилган рибофлавин ва тартразин молекулаларнинг спектроскопик тадқиқоти бўйича кейинги изланишларнинг ўтказилишини талаб қилади.

Дунёда ўтказилаётган кўп сонли тадқиқотларнинг натижалари шундан далолат берадики, Ван-дер-Ваальс кучлари ва водород боғланиш кўринишида намоён бўлувчи бирлашган молекулалар орасида вужудга келадиган молекулалараро ўзаро таъсирлар табиатда ва кўпчилик биокимёвий жараёнларда кенг тарқалгандир. Бундай тадқиқотларнинг ўтказилиши ўз-ўзидан йиғилган заррачалар структураси спектрларининг спектрал-оптик хоссалари орасидаги боғлиқликни аниқлашга имкон беради. Мазкур тадқиқот усуллари оптик электрон ўтишларнинг нозик тафсилотларини аниқлаш бўйича юқори сезгирликка эга бўлади. Эритмаларда, ассоцияланиш даражасига боғлиқ ҳолда, турли структураларни шакллантиришда ва ўз-ўзи билан йиғилган заррачаларнинг микроскопик тасвирларини олишда уларнинг қўлланилиши долзарб бўлиб қолмоқда.

Мамлакатимизда бинар эритмаларда молекулаларнинг ўз-ўзидан йиғилиши натижасида ҳалқасимон кўринишда бирлашадиган микрозарра-чалар олинадиган тадқиқотларга катта эътибор қаратилмоқда. Шунингдек, скварин ва бошқа бўёвчи моддалар молекулаларининг ўз-ўзидан йиғилиши бўйича илмий изланишлар ҳам долзарбдир. Ўзбекистон Республикасида илм-фанни 2030 йилгача ривожлантириш концепциясида¹ кўзда тутилган фундаментал вазифаларни ечишга бағишланган тадқиқотлар муҳим бўлиб, улар мамлакатимизда фан ва техникани муваффақиятли ривожлантириш учун катта аҳамиятга эга. Илмий тадқиқотлар асосида олинган натижалар кимёвий-физика, биологик тиббиёт учун янги материалларни ишлаб чиқишга ёрдам беради.

Ушбу диссертация иши муайян даражада Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 17 февралдаги ПҚ-2789-сон “Фанлар академияси фаолияти, илмий-тадқиқот ишларини ташкил этиш, бошқариш ва молиялаштиришни янада такомиллаштириш чора-тадбирлари тўғрисида”ги фармони, 2019 йил 8 октябрдаги ПФ-5847-сон “Ўзбекистон Республикаси

¹ Илм-фанни 2030 йилгача ривожлантириш концепцияси // Ўзбекистон Республикаси Президентининг 29.10.2020 й. ПФ-6097-сон Фармони, №1 Илова, 3.2 б.

олий таълим тизимини 2030 йилгача ривожлантириш концепциясини тасдиқлаш тўғрисида”ги фармони ва 2021 йил 19 мартдаги ПҚ-5032-сон “Физика соҳасидаги таълим сифатини ошириш ва илмий тадқиқотларни ривожлантириш чора-тадбирлари тўғрисида”ги қарорлари, шунингдек мазкур соҳада қабул қилинган бошқа норматив-ҳуқуқий ҳужжатларда назарда тутилган вазифаларни бажаришга хизмат қилади.

Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига боғлиқлиги. Диссертация Республика фан ва технологиялар ривожланишининг II. «Физика, астрономия, энергетика ва машинасозлик» устувор йўналишига мувофиқ бажарилган.

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Охирги йилларда чет эллик тадқиқотчилар: К.С.Когелов, В.И.Родулгин, М.В.Алфимов, П.В.Лебедев-Степанов (РФА), В.А.Блатов, Г.Д.Илюшин (Самара институти) лар томонидан молекулаларнинг ўз-ўзи билан йиғилишининг назарий жиҳатлари ишлаб чиқилган ва экспериментал натижалар олинган. Россия Фанлар Академиясининг физика ва кимё институти олимлари Л.М.Николенко, С.В.Бричкин ва бошқалар томонидан цианин бўёғининг J-агрегатлари билан яримўтказгичнинг ўз-ўзидан йиғилган гибрид наноструктуралари ўрганилди ва натижада яримўтказгич электр ўтказувчанлигининг ортиши кузатилган. Хитой олимлари томонидан J.X.Chen, L.Liu, R.Liu, C.Zhang, Z.Hu олинган ўз-ўзи билан йиғилган пептидлар иммун тизимини яхшилаш ва нанотрубкалар кўринишидаги дориларни етказиб бериш учун фойдаланилган.

Белоруссия ва Украина фанлар академияси физика институти олимлари Г.П.Гуринович, А.А.Ищенко томонидан хлорофиллар ва парфиринли, шунингдек, полиметин бўёқлари молекулаларининг ўз-ўзи билан агрегатланиши ва уларни барқарорлаш услублари аниқланган. Эрен Айтекин раҳбарлигида Анқаралик бир гуруҳ олимлар томонидан кўзнинг мугуз пардасини транспортда ташиш учун фойдаланиладиган туз комплекси олинган.

Покистон олимлари Муҳаммад Шероз, Иқбол Аҳмад ва бошқалар томонидан рибофлавин молекулаларининг ҳосил бўлиши ва барқарорлашуви жараёни комплекси ўрганилмоқда, унинг асосида эса ҳар хил медицина препаратлари олинмоқда.

Шуни таъкидлаш лозимки, бу соҳанинг ривожланишига ўзбек олимларидан А.А.Қаххоров, С.А.Бахрамовлар (C₆₀) флуорен молекулаларининг этанол+бензол бинар эритувчисида ўз-ўзи билан бирикишини спектроскопик тадқиқотлари ўтказилган. Самарқандлик ва Бухоролик олимлар Н.Н.Низомов, Э.Н.Курталиев, Л.М.Собиров, Д.И.Семенов, А.Жумабаев ва С.Х.Астановлар томонидан органик, озик-овқат бўёқлари, ароматик бирикмалар ва баъзи бир эритувчиларнинг уюшмаси ҳосил бўлиш жараёни ўрганилган.

Ўтказилган адабиётлар шарҳидан келиб чиқадики, бирлашган заррачаларнинг ўз-ўзи билан йиғилиши ва фотобарқарорлик жараёни молекулаларнинг уюшганлик (ассоциация) даражасига боғлиқлиги етарли даражада ўрганилмаган.

Тадқиқотнинг диссертация бажарилган олий таълим муассасасининг илмий–тадқиқот ишлари режалари билан боғлиқлиги.

Диссертация Бухоро муҳандислик - технология институти илмий-тадқиқот ишлари режасига мувофиқ: ЁФ-2-1-рақамли “Ориентациявий ўзаро таъсирни инобатга олган ҳолда феррит-гранатлардаги фазавий ўтишлар ва магнитооптик хусусиятларини тадқиқ этиш” (2016-2017 йй.), ОТ-А4-07-рақамли “Янги экспортбоп маҳсулотлар олиш билан полиз экинларини қайта ишлаш ресурстежамкор технологияларини ишлаб чиқиш” (2017-2018 йй.) ва ОТ-Ф2-64-рақамли “Конденциялашган ва нано ўлчаш тизимларида флукутацион ва параметрик пайдо бўлишлар (ҳодисалар)” (2017-2020 йй.) мавзуларидаги амалий ва фундаментал лойиҳалар доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади. Спектрал-оптик, микроскопик тадқиқотлар асосида ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларнинг вужудга келишида фойдаланиладиган эритувчиларнинг табиатига, концентрациясига ва ҳароратига боғлиқ ҳолда ҳосил бўлиш шароитини аниқлаш, ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларнинг шаклланиши ва тузилишини ўрганиш, ҳосил бўлган заррачаларнинг структураси ва геометрик параметрларини аниқлаш билан бирга рибофлавин молекуласининг фотобарқарорлигини ошириш услубини ишлаб чиқишдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари қуйидагилардан иборат:

рибофлавин ва тартразин молекулаларининг концентрациясига ва фойдаланилаётган эритувчиларнинг табиатига боғлиқ ҳолда ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнининг шаклланиш шартларини аниқлаш;

витамин препаратлари ва озик-овқат бўёқ молекулаларининг эритувчиларда ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнида намоён бўладиган молекулалараро ўзаро таъсир табиатини спектрал - оптик ва квант-кимёвий ҳисоблашлар ёрдамида ўрганиш;

сувли эритмадаги рибофлавин молекуласининг фотобарқарорлигини молекулалар ассоциация даражасига боғлиқлигини ўрганиш ва гипохром эффект табиатини аниқлаш;

ўз-ўзи билан йиғилган заррачалар тузилишини микроскопик тасвирларини олиш ва эритмалардаги ассоциатлар даражасига қараб уларнинг геометрик параметрларини аниқлаш;

Тадқиқотнинг объекти сифатида тартразин, рибофлавин ва унинг фотолиз маҳсулотлари танланган. Эритувчилар сифатида дистилланган сув, хлороформ, диоксан, диметильсульфоксид, ацетон, этанол ва изобутанолдан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг предмети сифатида тадқиқ қилинаётган бирикмаларнинг концентрациясига, ёруғлик ва ҳарорат таъсирларига,

эритувчиларнинг табиатига боғлиқ ҳолда спектрал-люминесцент тавсифларининг ўзгаришини ўрганиш ва молекулаларнинг ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнидаги молекулалараро таъсирнинг табиатини аниқлашдир.

Тадқиқотнинг усуллари. Диссертацияда молекуляр спектроскопия усули, ўз-ўзи билан йиғиладиган молекулалар тузилишини микроскопик тасвирлари ва яримэмпирик методи кванто-кимёвий ҳисоблаш усулларидан фойдаланилган.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

рибофлавин учун молекуланинг ўз-ўзи билан йиғилиши В₂ витаминнинг биринчи молекуласидаги флавон қисми витаминнинг иккинчи молекуласидаги рибитол қисмига ориентацияси орқали амалга ошиши, водород боғлар воситасида бирлашганда, игнасимон заррачалар шаклланганлиги аниқланган;

рибофлавин ва тартразиннинг ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларига тегишли бўлган мос равишда олтига ва иккита яширин ютилиш полосалари мавжудлиги, шунингдек рибофлавин молекулаларининг фотобарқарорлиги эритманинг ассоциация даражасига чизиқли боғланишга эга эканлиги исботланган;

рибофлавин ва тартразиннинг ўз-ўзи билан йиғилган молекулалар структурасидаги игнасимон заррачалар геометрик параметрларини эритмадаги ассоциация даражасига боғлиқлиги ва бу заррачаларнинг умумий кўриниши концентрик ҳалқа ёки эллипсоид шаклда намоён бўлиши аниқланган;

яримэмпирик ҳисоблашлар натижаларига асосан рибофлавин ва тартразин атомларида заряднинг қайта тақсимланишида уларнинг дипол моменти қийматининг ортиши молекулалараро дипол-дипол таъсирнинг вужудга келиши аниқланган.

Тадқиқотнинг амалий натижаси қуйидагилардан иборат:

Рибофлавин ва озиқ-овқат бўёқларининг паспорт хусусиятлари бўлган коллоид эритмасидан димерлар, мураккаб агрегатлар ва ўз-ўзидан танланган молекулаларнинг спектрал-оптик хусусиятларини ўрганиш фармацевтикада витамин препаратига асосланган дори-дармонларни яратиш, шунингдек, ушбу йўналишда олиб борилган клиник тадқиқотлар олиб бориш имконини беради.

Витамин препаратининг концентрацияланган сувли ва спирт эритмаларида фотобарқарорлигининг ошиши В₂ витамини асосида янги дори препаратларини яратиш учун фойдаланилиши мумкинлиги кўрсатилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги. Тадқиқотларнинг ҳозирги замон стандарт қурилмаларда ўтказилиши, экспериментал натижаларнинг назарий яримэмперик квант-кимёвий ҳисоблашлар билан мутаносиблиги, ҳар хил услублар билан олинган натижаларнинг ўзаро мослиги ва электрон спектрларда кузатилган деформацияларнинг назарий талқинларига бошқа муаллифларнинг бошқа бирикмалар учун олган натижалари билан

мувофиқлиги ва илмий адабиётларда келтирилган маълумотларга зид келмаслиги билан тасдиқланган.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти рибофлавин ва тартразин эритмаларида юзага келадиган молекулалараро ўзаро таъсирлар ҳақидаги билимларни чуқурлаштиришдан иборат ва уларни конденсирланган муҳитда молекуляр спектроскопия назариясини ишлаб чиқишда фойдаланиш мумкин.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти шундаки, рибофлавиннинг концентрациялашган сувли эритмалари пастил кўринишидаги озиқ-овқат маҳсулотларини барқарорлаштирувчи модда сифатида фойдаланилган.

Илмий изланишлар натижасида янги метод ишлаб чиқилди, бунга кўра рибофлавин кукуни ва дистилланган сувни алоҳида-алоҳида стерилизация қилинса, ҳамда улар асептик қўшилиши натижасида кўз томчиси ҳосил қилинди. Стерилизациянинг янги методикаси ёрдамида 10 кишидан иборат кўз касалликларига эга бўлган кишиларга синаб кўрилди ва бу методикани синаш натижасида даволаниш вақти 20-25% га камайганлиги кузатилган.

Тадқиқот натижаларининг амалиётга жорий қилиниши. Рибофлавин ва тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилиш спектроскопияси буйича олинган натижалар асосида:

ҳароратнинг ва эритилган модданинг концентрацияси ва эритувчининг табиати ўзгарганда рибофлавин ва тартразин эритмаларининг спектрал-люминисцент тавсифларининг ўзгариш қонуниятлари, рибофлавин ва тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилиш усулларини идентификация қилиш натижалари ОТ-Ф2-30-«Фотоника комплексов органических красителей с биологическими объектами и наночастицами металлов» (Самарқанд давлат университетининг 2020 йил 04 октябрдаги 10-3951-сон маълумотномаси) мавзусидаги фундаментал тадқиқот лойиҳасида фойдаланилган. Илмий натижаларнинг қўлланилиши родамин ва стирилцианин бўёқларининг сув эритмасидан сув-этанол, сув-диметилформамид ва сув-диоксан эритмаларига ўтишда ютилиш спектрлари ва флуоресценциясининг физикавий хусусиятларини таҳлил қилиш, шунингдек, бўёқлар–протеин комплексларини аниқлаш имконини берган.

молекулаларнинг ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнида вужудга келадиган структуранинг ўзгариши, ассоциация даражасига боғлиқ бўлган натижалар, иккиламчи хом ашё сув-сутли фаза билан ёғ фазасининг ўзаро бирлашишида вужудга келадиган бир жинсли масса ҳосил қилиш ва бу массанинг стабиллик вақтини ошириш мақсадида боғловчи модда сифатида ўз-ўзи билан йиғилган рибофлавиннинг сувли эритмасида олинган натижалар ОТ-А9-5 рақамли “Донни қайта ишлашнинг иккиламчи хом ашёсидан фойдаланиб функционал озиқ-овқат маҳсулотлари ишлаб чиқаришнинг ресурстежамкор технологияси асосида янги ишланмалар яратиш” мавзусидаги амалий тадқиқот лойиҳасида фойдаланилган (Бухоро

мухандислик технология институтининг 2021 йил 25 августдаги 87-10/1770-сон маълумотномаси). Тадқиқотлар натижасида технологик режимда донни қайта ишлашнинг иккиламчи хом ашёсидан фойдаланиб, эмульсион ёғ маҳсулотларининг биологик фаоллигини оширишда, дон муртаги қўшилган ёғ-унли композитларнинг сақлаш муддатини узайтириш ҳамда тайёр маҳсулотнинг табиий рангдорлигини сақлаш мақсадида рибофлавин ва тартразиннинг сувли эритмасидан фойдаланиш имконини берган.

рибофлавин ва тартразиннинг сувли эритмасида ассоциатларнинг яширинган ютилиш полосалари аниқланган ва улар флавор, антациан таркибида картоноид бўлган мева пастиллатлари кўринишидаги озиқ-овқат маҳсулотлари учун барқарор шароит яратиш учун фойдаланилган (ТИ-201122919-09-2020 26.09.2020 дан Техникавий инструкция). Илмий натижаларнинг қўлланилиши рибофлавин ассоциатининг паспорт тавсифлари фармацевтикада В₂ витамини асосида дори препаратлари яратиш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг асосий татбиқи олинган натижаларга, Web of Science ва Scopus илмий маълумотлар базасига кўра, юқори импакт факторли журналларда чоп этилган 50 дан ортиқ экспериментал ва моделлаштириш тадқиқотларида, шунингдек мақолаларда шарҳ иқтибос келтириш орқали жорий қилинган:

1. G.K.Kasimova, S.Kh.Astanov, E.N.Kurtaliev, N.N.Nizomov. Structure of self-assembled riboflavin molecules in solutions. Journal of molecular structure. 1185.2019. p.107-111 мақолага 2 та чет эл илмий журналларига ҳаволалар: 1) C.Char, C.Padilla, V.Campos, M.Peczynska, P.D.Calderón, J.Enrione. Characterization and Testing of a Novel Sprayable Crosslinked Edible Coating Based on Salmon Gelatin, Coatings 2019, 9(10), 595 P.1-17; 2) V.Vendramin, S.Primerano, G.Leserri, G.Paniccia, S.Vincenzi. Riboflavin removal by commercial bentonites and charcoals in white and red wines, talian Journal of Food Science, 2021; 33 (2): 13–23.

2. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Sharipov M.Z. Optical systems for removal of polarization spectra.Eurasian Physical Technical Journal, 2019, Vol.16, No.2 (32), P.83-88; мақолага чет эл илмий журналлар ва китобларига ҳаволалар: Khamitov, M Kolchurina, I Kolchurina... Designing of a Laboratory Complex for Spectral Analysis of Measurement Data of Different Materials. Progress in Material Science and Engineering ISBN 978-3-030-68-103-6.AG 2021.

3. S.Kh.Astanov, G.K..Kasimova, E.N.Kurtaliev, N.N.Nizomov, A.Jumabaev. Electronic nature and structure of aggregates of riboflavin molecules. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy Available online 13 November 2020, 119177 мақолага 1 та чет эл илмий журналларига ҳавола: 1)Natalie G. K. Wong , Chris Rhodes, Caroline E. H. Dessent. Photodegradation of Riboflavin under Alkaline Conditions: What Can Gas-Phase Photolysis Tell Us about What Happens in Solution? Molecules 2021,26,6009.doi:10.20944/preprints202108.0307.v1

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Диссертация ишининг натижалари 4 та халқаро конференция ва 4 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилинганлиги. Тадқиқот мавзуси бўйича жами 25 та илмий иш, шу жумладан Ўзбекистон Республикаси Олий Аттестация комиссиясининг диссертациялар асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрлар рўйхатида 15 та илмий мақола (9 та республика ва 6 та хорижий журналларда) ва 2 та монография чоп этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхатидан иборат. Диссертациянинг ҳажми 35 та расм ва 4 та жадвални ўз ичига олган ҳолда 134 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

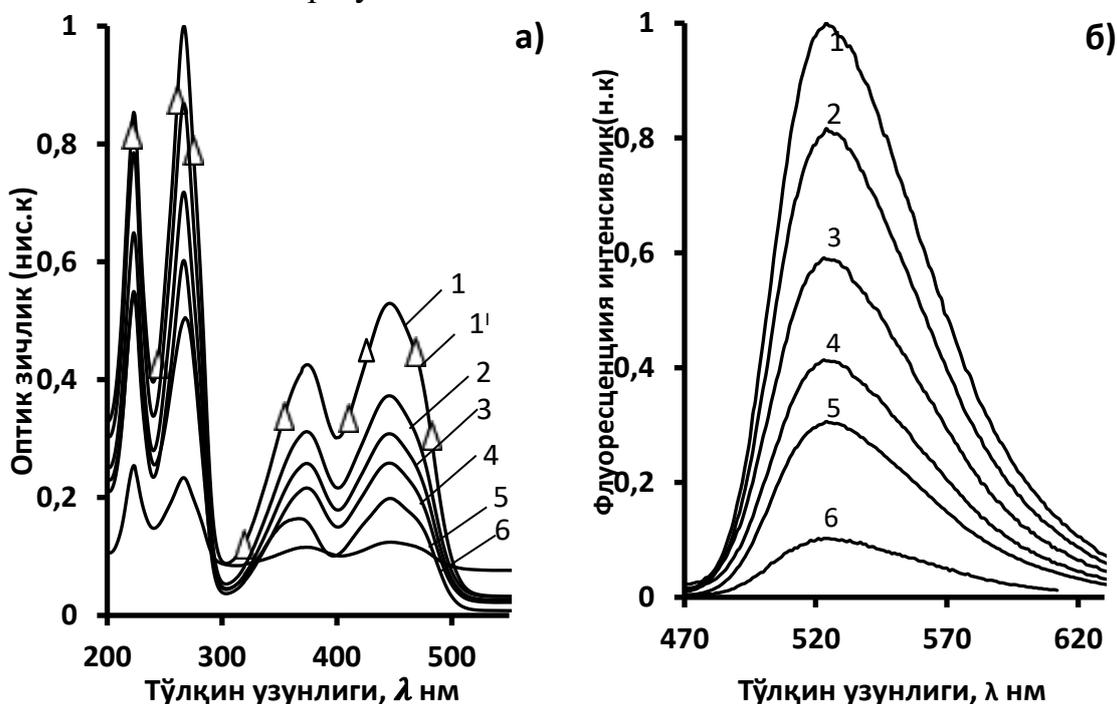
Диссертациянинг **“Кириш”** қисмида диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотларнинг республика фан ва техника тараққиётининг асосий устувор йўналишлари билан боғлиқлиги аниқланган, диссертация мавзуси бўйича халқаро илмий тадқиқотлар шарҳи келтирилган, муаммонинг ўрганилганлик даражаси, вазифа ва мақсаднинг шакллантирилганлиги, аниқланган объектлар, тадқиқот усули ва предмети, тадқиқотнинг илмий янгилиги тушунтирилган, олинган натижалар ишончилигининг асосланганлиги, уларнинг назарий ва амалий аҳамияти очилганлиги, ишнинг апробацияси ва натижаларнинг жорий қилиниши ҳақида қисқача маълумотлар ҳамда диссертациянинг тузилиши ва ҳажми келтирилган.

Диссертациянинг **“Витаминлар ва бўёқларнинг фотофизик ва фотохимёвий хоссаларига молекулалараро таъсири”** номли биринчи бобида электрон спектрларнинг, витамин препаратлари ва озик-овқат бўёқлари концентрациясига, ёруғлик ва ҳароратий таъсирларга боғлиқ ҳолда спектроскопик тадқиқотларига бағишланган адабиётлар таҳлили, молекулаларнинг эритмаларда уюшиш ва ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнида рўй берадиган молекулалараро таъсир тадқиқотлари келтирилган. Келтирилган адабиётлар таҳлили асосида диссертация ишининг мақсади ва вазифалари белгиланган.

Диссертациянинг **“Экспериментал тадқиқот услубиятлари ва методикаси”** деб номланган иккинчи бобида ҳар хил табиатга эга бўлган эритувчилардан фойдаланган ҳолда, электрон ютилиш спектрларининг ва люминесценциясининг тадқиқотлари бўйича ёруғлик ва ҳароратий таъсирга боғлиқ ҳолда экспериментал қурилмаларнинг тавсифи ва улардан олинган натижаларнинг таҳлили келтирилган. Ютилиш спектрларини тадқиқ қилиш, компьютер техникасидан фойдаланган ҳолда автоматик режимда ўтказилган. Адсорбция спектри Spectrophotometer EMC-30PC-UV ва Specord 50 (Analytikjena, Германия) спектрофотометрида олинган, люминесценция спектри ва нурланишнинг нисбий квант чиқиши, тадқиқ қилинаётган

бирикмага уйғотувчи нур 45° бурчак остида тушадиган, иккита МДР-2 монохроматори базаси асосида яратилган қурилмада ўлчанган. Спектроскопик тадқиқотлар ҳароратга боғлиқ ҳолда Thermo Scientific SC-SW5P (Newington USA) термостат билан амалга оширилган. Тадқиқ қилинаётган эритмаларнинг фотолизи ПРК-2 лампанинг филтрланмаган нури билан, ЛП-1 қурилмада амалга оширилган. Ўз-ўзидан йиғилган заррачалар тасвирининг микроскопик сурати Motic B1-253 (Moticam 1080BMH) микроскопидан фойдаланган ҳолда ўтказилган.

Диссертациянинг учинчи боби **“Рибофлавин ва тартразин молекулалари ассоциацияларининг спектроскопияси”** га бағишланган бўлиб, эритувчиларнинг сувли ва бинар аралашмаларида номоён бўладиган ўз-ўзи билан уюшиш жараёнининг спектроскопик тадқиқотлари натижалари келтирилган. Тадқиқ қилинаётган сувли эритмада модда концентрациясини ошиши электрон ютилиш спектрларининг (1а-расм) ва люменесценциясининг жиддий деформациясига олиб келиши (1б-расм) экспериментал аниқланган. Бунда, спектр шаклининг ўзгаришсиз қолиши билан (гипохром эффект), ютилиш ва люменесцент қобилиятининг камайиши кузатиладиган. Кузатиладиган эффект рибофлавин ва тартразиннинг нурланмайдиган ассоциатларнинг ҳосил бўлиши билан тушунтирилган. Кузатиладиган гипохром эффекти модда концентрацияси ўзгармас сақланганда бинар эритувчиларини модда эрмайдиган қисмининг миқдори кўпайган ҳолатда содир бўлади.

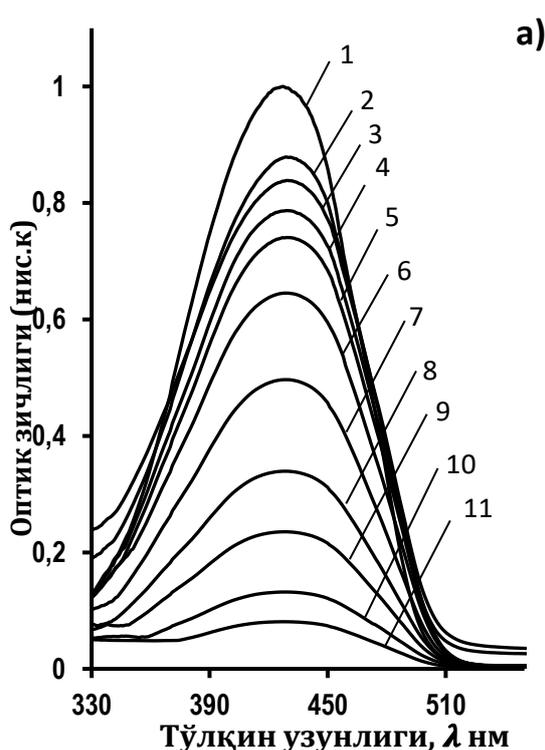


1-расм. Рибофлавиннинг сувдаги ютилиш (а) ва флуоресценция (б) спектрларининг концентрацион боғлиқлиги: 10^{-6} (1), 10^{-5} (1¹), 5×10^{-5} (2), 10^{-4} (3), 5×10^{-4} (4), 10^{-3} (5), 5×10^{-3} М(6).

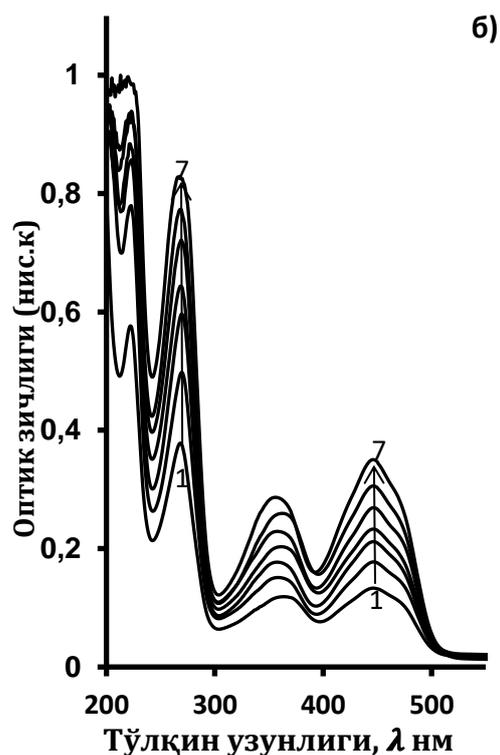
2а расмда тартразин моддасининг сув+ДМСО бинар эритувчилардаги спектрал ўзгариши келтирилган. Бундай спектрал ўзгариш сув+ДМСО,

этанол+изобутанол, этанол+хлороформ, этанол+ацетон каби бошқа эритувчиларида ҳам кузатилади.

Бу ҳодисаларни ўз-ўзи билан уюшган ассоциатлар ҳосил бўлиши билан тушунтириш мумкин ва бу хулоса рибофлавин ва тартразин молекулаларининг тегишли эритмаларида ўтказилган ҳароратий тадқиқотлари билан тасдиқланади (2б-расм). Ўтказилган тажрибалар бинар эритманинг ҳарорат даражаси 78°C ва ундан ортиқ бўлганда мономер молекулаларнинг ютилиш ва нурланиш спектри тикланади.



2-расм (а). Бинар эритувчи сув+ДМСО даги тартразиннинг концентрацияси $C=5 \cdot 10^{-6}\text{M}$ ютилиш спектрларининг сувнинг миқдорига боғлиқлиги 100% (1), 80% (2), 60% (3), 40% (4), 30% (5), 20% (6), 10% (7), 5% (8), 3% (9), 2% (10), 1% (11).



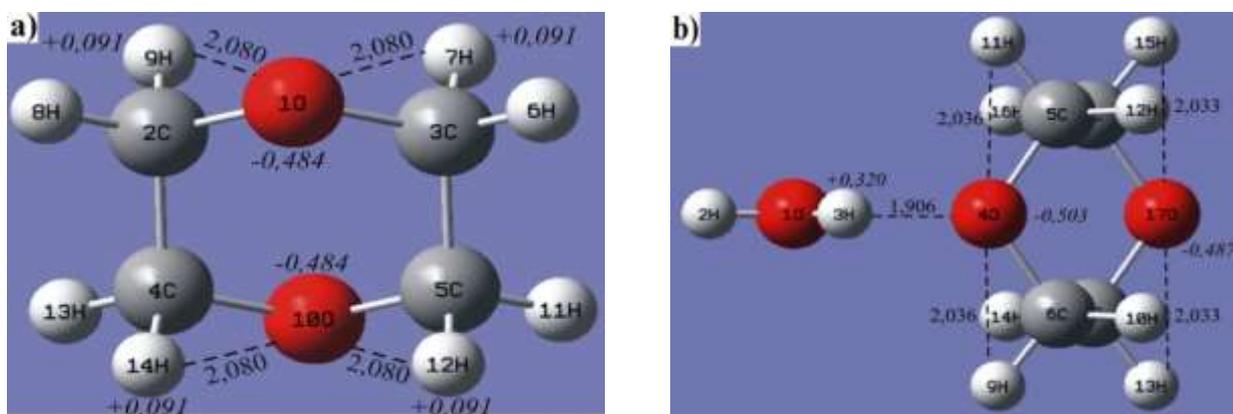
2-расм (б). Рибофлавиннинг ($2 \cdot 10^{-5}\text{M}$) 20% этанол+80% изобутанол бинар эритмасидаги ютилиш спектрининг ҳароратга боғлиқлиги (K): 293 (1); 313 (2); 323 (3); 333 (4); 338 (5); 343 (6); 348 (7).

Ютилиш спектрларининг ҳароратий ўзгаришидан молекулалар уюшмаларининг боғланиш энергиялари аниқланди. Ўтказилган ҳисоблашлар шуни кўрсатдики, ўз-ўзи билан ҳосил бўлган уюшмалар водород энергияси 5-8 ккал/моль интервалида эканлиги аниқланди, бу энергия миқдори боғланишлар энергиясига мос келади.

Витамин препарати ва бўёқнинг сувдаги нурланмайдиган уюшмаси ҳосил бўлишида сув молекуласи иккита бирлашаётган молекула учун кўприк вазифасини ўтайди, бу вақтда сувнинг ҳар иккала водород атоми ўрганилаётган моддаларнинг кислород атоми билан водород боғ ҳосил қилади.

Тажрибада ўрганилаётган моддаларнинг ўз-ўзи билан ассоциат йиғилиш жараёнининг бинар эритмаларда ҳосил бўлиш жараёнини қуйидаги мулоҳазалар билан тушунтирилади. Модда бирор эритувчида эрийдиган бўлса, ўрганилаётган модда молекулалари яхши эрийдиган эритувчининг сольват қобиғида бўлади. Аммо бинар эритувчининг эрмайдиган эритувчиси миқдори кўпайиб бориши билан бинар эритувчилар орасида водород боғланиш ҳосил бўлиб, сольват қобиғининг мустаҳкамлик даражаси камайиб бориб, изланувчи модда молекулалари сольват қобиғидан чиқиб молекулалараро таъсир кучига асосан улар бирлашади.

Иккита бинар эритувчи орасида ҳосил бўлган водород боғланиш қуйидаги схема асосида вужудга келади $R_1O...HR_2$, бу ерда R_1 ва R_2 мос равишда бинар аралашмаларининг ташкил қилувчилари. Бинар эритувчиларнинг компонентлари орасидаги водород боғланишнинг ҳосил бўлиши ярим эмперик ҳисоблашлар асосида исботланган (3-расм).



3-расм. Диоксаннинг мономер (а) ва унинг сув билан комплексларининг (б) назарий структуралари.

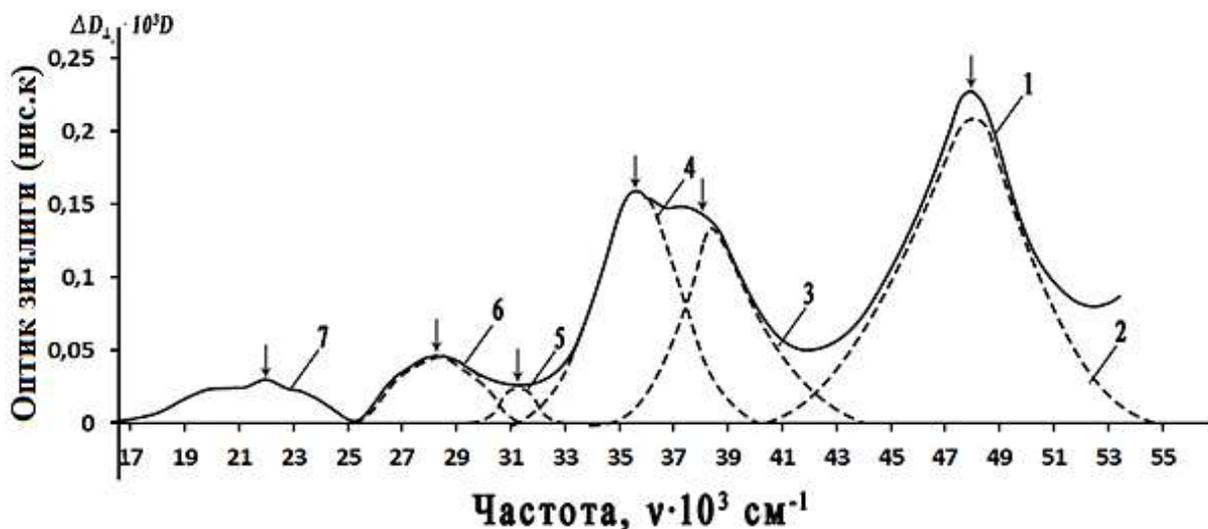
Ушбу тажрибалар асосида топилган водород боғланиш энергиясининг катталиги назарий ҳисоблашлар асосида топилган қийматлар билан мос келган.

Сув-диоксан молекулаларининг боғланиш энергиясини аниқлаш бўйича кванто-кимёвий ҳисоблашларнинг натижалари экспериментал ҳароратий тадқиқотлар билан қониқарли равишда бир-бирига тўғри келади.

Молекулаларнинг ўз-ўзидан йиғилиш жараёнида спектрал ўзгаришлар таҳлилидан кўринадики, барча ҳолатларда ўз-ўзи билан бирлашиб ассоциация ҳосил қилган молекулаларнинг ютилиш спектри яширинган бўлади.

Яширинган ютилиш полосаларини аниқлаш мақсадида эритмада максимал ассоциатлар ҳосил бўлган ютилиш спектрини (2б-расм, 1-эгри чизик) мономер молекулалар учун мос келувчи (1а-расм, 1-эгри чизик) ютилиш полосаси билан нормаллаштирилди. Умумий ютилиш полосасидан мономер молекулалар ҳиссасини айириб ташлаш натижасида рибофлавин молекулалари ассоциатлари полосаси, 4-расмда, 1-эгри чизикда келтирилган шкалалар частотасида олинган эди. Бу расмда ассоциатларга тегишли бўлган

қуйидаги частоталарга мос келадиган ютилиш полосаларнинг максимумлари намоён бўлади. Рибофлавин уюшмаси ютилиш спектрига қуйидаги шкалалар частотасида: $\gamma_{\max} = 22000, 28000, 35000, 38500, 48000 \text{ см}^{-1}$ полосаларнинг очикдан-очик бешта максимуми ажратилади.



4-расм. Рибофлавин ($C=2 \cdot 10^{-5} \text{ M}$) 0,2 % + 0,8% этанол+изобутонал бинар эритувчисидаги ассоциатлар ютилиш спектрларидаги (1) ҳисобланган назарий таркибий (2-7) полосалари.

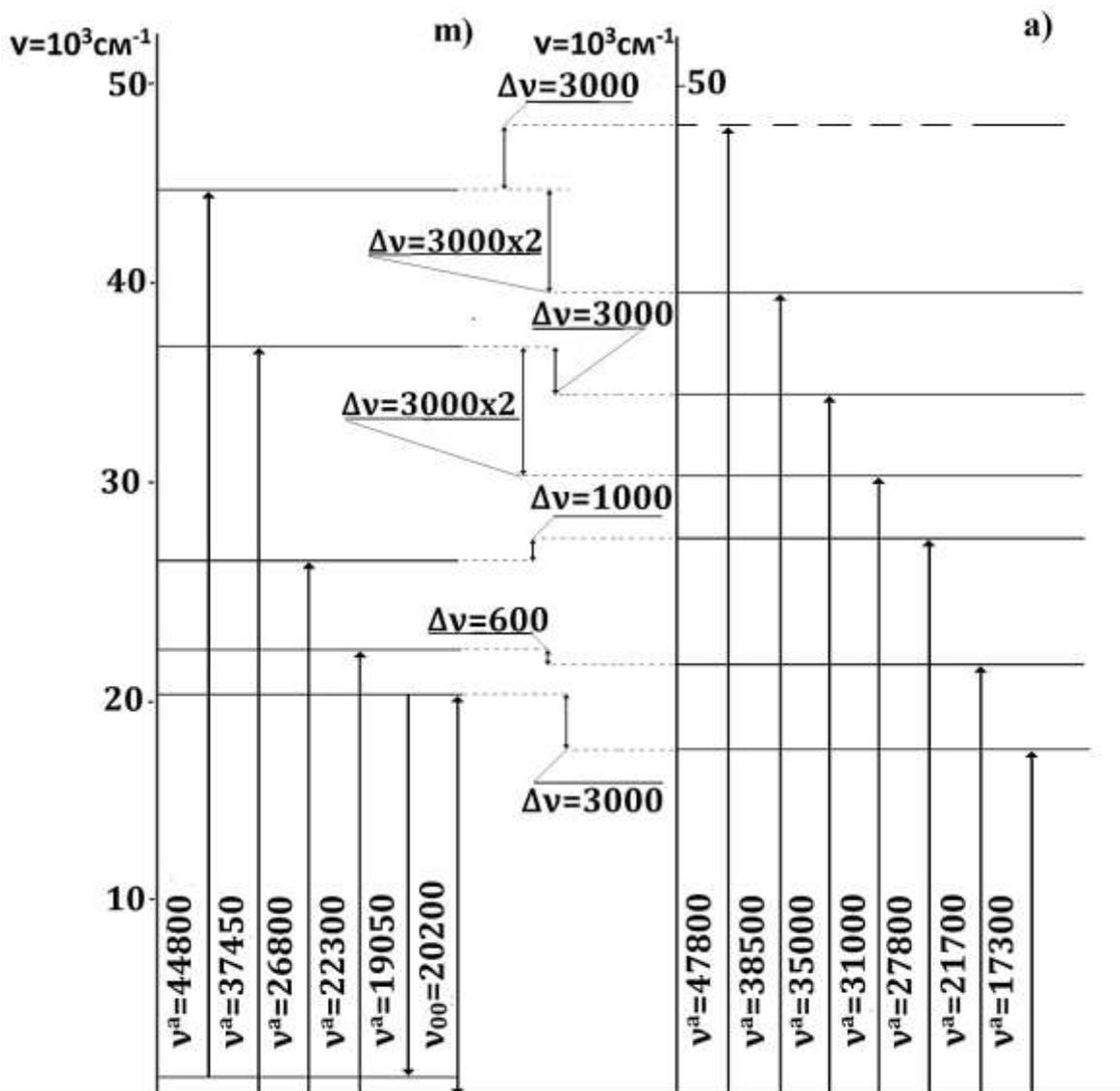
Топилган максимумларга мос келувчи индивидуал полосаларнинг умумий кўриниши Аленцева-Фок усули асосида ва Гаусснинг тақсимот функциясига асосланган ҳолда назарий ҳисоблашлар орқали аниқланди.

Рибофлавин ассоциатлари полосаларининг индивидуал таркибий қисмларга бўлиниши Аленцева-Фок усули ёрдамида ҳисобланди. Бу усулнинг моҳияти шундан иборатки, ташкил қилувчиларнинг индивидуал полосаларининг шакли молекуляр спектрларнинг таркибий қисмлари Гаусс тақсимот функциясидаги кўнғироқсимонликка мос келади. Бу усулнинг бошқа ўзига хослиги шундан иборатки, уюшмалар спектрларида синиш нуқталари бўйича индивидуал полосаларнинг максимум ҳолатларига мос келади. Аленцева-Фок усули асосида аниқланган уюшмаларнинг индивидуал полосалари 4-расмда, 2-7 эгри чизиқларда келтирилган. Назарий ҳисоблашлар асосида топилган ассоциатлар ютилиш полосасининг максимуми ва спектрнинг кўриниши тажрибада олинган ассоциатларнинг чизиқли дихроизм² спектридаги катталиклари билан мос тушган.

Ўз-ўзи билан уюшган молекулаларнинг вужудга келиши учун молекулалараро таъсир кучларининг табиатини аниқлаш мақсадида яримэмперик ҳисоблашлар ёрдамида рибофлавин ва тартразин атомларида заряднинг қайта тақсимланиши натижасида, уларнинг дипол моменти қиймати ошиши моле-

² Белоруссия Фанлар Академиясининг Физика институти катта илмий ходими А. С. Прищеповга чизиқли дихроизм спектрларини олишга ёрдам бергани учун диссертант ўз миннатдочилигини изҳор этади.

кулалараро дипол-дипол таъсирдаги Ван-дер-Вальс кучлари ҳосил бўлиши аниқланди. Бинар эритувчилардан фойдаланганда вужудга келадиган диполь-диполь молекулалараро таъсири натижасида бирлашаётган молекулаларнинг электрон сатҳларининг бир вақтнинг ўзида силжиш ва резонанс бўлиниши вужудга келиб электрон соф ўтиш частотасининг ўзгаришига олиб келади (5-расм).

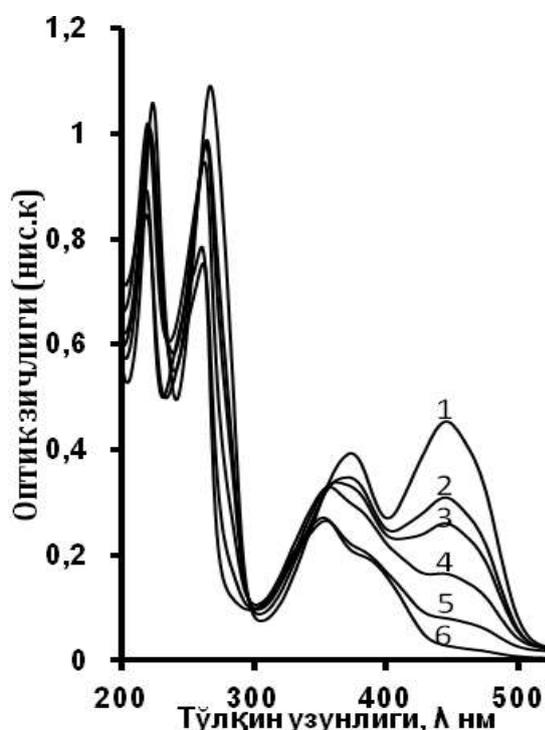


5-расм. Рибофлавин молекуласининг мономери (м) ва ўз-ўзи билан ассоциатга бирлашган (а) электрон ўтишлар частотасининг схематик кўриниши.

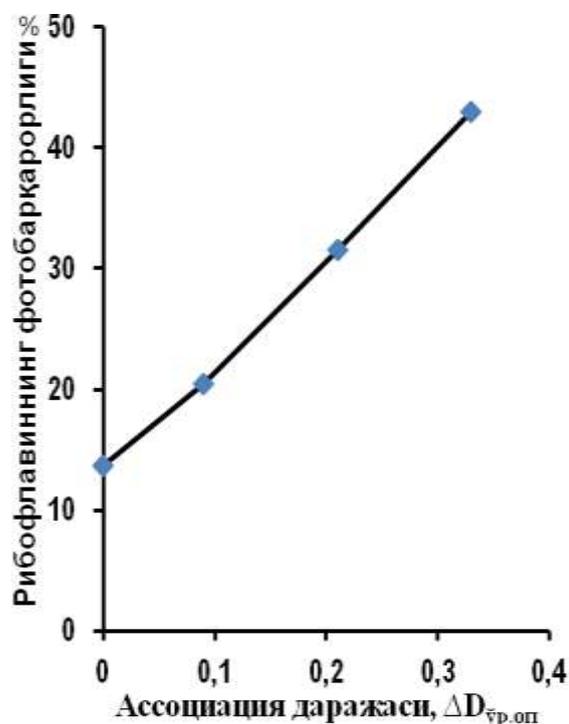
Витамин препаратининг фотолиз жараёнини сувли эритма концентрациясига ва ассоциация даражасига боғлиқлигини ўрганиш мақсадида спектроскопик тадқиқотлар ўтказилди. Рибофлавин молекуласининг концентрацияси $C=10^{-5}M$ бўлганда, улар мономер ҳолатда эканлиги аниқланган. Бундай эритмага 150 мин вақт оралиғида ёруғлик таъсири асосида ютилиш спектрининг 445 нм га мос келувчи тўлқин узунлигида интенсивликнинг камайиши билан бирга иккита изобестик нуқта

(445 ва 293 нм) пайдо бўлиши ва 350 нмда янги ютилиш полосасининг пайдо бўлишига олиб келади. Бу полоса рибофлавин молекуласининг фотолиз маҳсулоти люмихромнинг (ЛС) ютилиш полосасига мос келади.

Таркибида мономер ва ўз-ўзи билан ассоциатлашган рибофлавин молекулалари мавжуд бўлган концентрация $C=5 \cdot 10^{-5} \text{M}$ сув эритмасини фотолизи амалга оширилганда, ютилиш электрон спектрида сезиларли деформация вужудга келади. Эритмада ассоциатлашган молекулаларнинг мавжудлиги, танланган концентрация эритмасида оптик зичликнинг қиймати 10^{-5}M концентрацияга нисбатан 13% камайиши билан боғлиқ. Бундай ҳолда эритманинг 0-150 мин вақт оралиғида ёруғлик таъсир этганда 375 нм ва 445 нм тўлқин узунликларида ютилиш қобилятининг камайиши билан бирга 350 нм тўлқин узунликда янги ютилиш полосаси ҳосил бўлади. Бу ҳолда 295 нм даги изобестик нуқта сақланиб қолади.



6-расм. Рибофлавин сувли эритмасининг $C=10^{-5} \text{M}$ (а) ва $C=5 \cdot 10^{-5} \text{M}$ (б) ютилиш спектрларининг ёруғлик таъсир вақтига боғлиқлиги: 1-0, 2-30, 3-60, 4-90, 5-120, 6- 150 минут.



7-расм. Рибофлавин молекулаларининг, уларнинг ассоциатлари (а) даражасига боғлиқ ҳолда фотобарқарорлиги

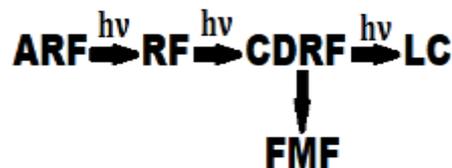
Тажриба натижалари таҳлили кўрсатадики, кузатилаётган 350 нм тўлқин узунликдаги янги ютилиш полосаси люмихром молекуласининг мономериға тегишлидир. Рибофлавин мономер ва ўз-ўзи билан ассоциатлашган молекулалар мавжуд бўлган эритмаларда фотолиз жараёнининг бир хил кечишига асосан, нурланиш энергиясининг маълум қисми, рибофлавин ассоциатларининг ажралишига сарф бўлади. Кейинчалик фотолиз вақтида

мономер кўринишидаги люмихром молекулалари ҳосил бўлади ва у куйидаги схема кўринишида бўлади: $ARF \xrightarrow{h\nu} RF \xrightarrow{h\nu} LC$, бу ерда ARF-рибофлавин молекулаларининг ассоциацияси, RF-рибофлавиннинг мономер молекуласи, LC-люмихром мономер. Ўтказилган тажриба натижаларига кўра рибофлавиннинг сувдаги эритмасида $5 \cdot 10^{-5} M$ концентрацияли эритмасида молекуланинг фотобарқарорлиги $10^{-5} M$ эритмага нисбатан 13% ошганлиги аниқланди.

Витамин препаратининг фотобарқарорлик жараёни эритмада вужудга келадиган ассоциация даражасига боғлиқлигини батафсил ўрганиш мақсадида рибофлавиннинг $C=10^{-4} M$, $C=4 \cdot 10^{-4} M$ ва $C=2 \cdot 10^{-3} M$ концентрацияли сувли эритмаси батафсил ўрганилди.

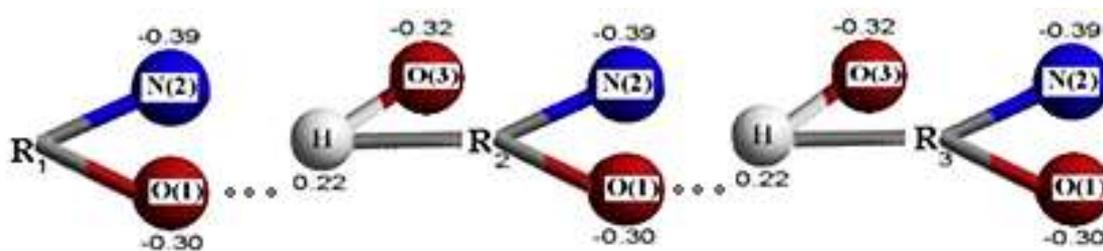
7-расмдан кўринадик, фотобарқарорлик жараёни рибофлавиннинг сувли эритмаларида ҳосил бўлган ассоциация даражасига чизиқли боғланганлиги аниқланди.

Концентрация $C=4 \cdot 10^{-4} M$ ва $C=2 \cdot 10^{-3} M$ бўлган эритмаларни нурлантиришда электрон спектрларнинг деформацияси вужудга келади, унга кўра фотолиз уюшмаларининг мономер молекулаларига ва циклогидрорибофлавиннинг (СРДФ) ёки формилметильфлавиннинг (ФМФ) оралиқ ва люмихром (ЛС) охири маҳсулотига ажралиши кўрсатилган схема бўйича аниқланган.



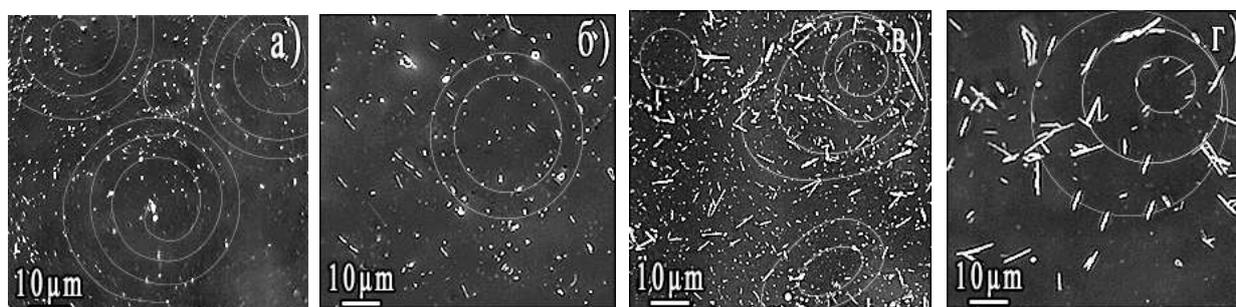
Диссертациянинг тўртинчи боби рибофлавин ва тартазиннинг ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларини тадқиқ қилишга бағишланган. Бу тадқиқотлар нафақат ассоциатларнинг тузилишини аниқлашнинг имконини берди, балки уларнинг шишада, микроразрачаларини олишнинг шароитини ҳам белгилади. Концентрацияси $6 \cdot 10^{-5} M$ бўлган эритманинг ютилиш спектри моноўлчамли молекулаларнинг ютиш қобилиятига тегишлилиги аниқланган. Эритма концентрациясининг $5 \cdot 10^{-5} - 10^{-3} M$ оралиқда ошиши, ютилиш спектри билан оптик зичлик қийматининг $1-x=0,1-0,41$ мос равишда камайиши гипохром эффектга олиб келади. Спектрларнинг бундай ютиш деформацияси RF молекулаларининг этанолдаги уюшиш жараёнининг пайдо бўлиши ва ривожланиши билан тушунтирилади.

Ўтказилган ҳароратий тадқиқотлар билан ассоциалашган молекулаларининг, этанол эритмасидаги боғланишлар энергияси аниқланган, у 4-5 ккаль/моль оралиқда бўлиб, бу эса водород боғланиш энергиясига мос келади. Рибофлавин молекулалари фловон (бош) ва рибитоль (думли) қисмлардан ташкил топишини ҳисобга олиб ва унинг ўз-ўзи билан уюшиши бош-дум тизимида игнасимон тузилиши водород боғланиш билан амалга ошади. Уюшмаларнинг кузатилаётган игнасимон тузилиши жараённинг бошланиш босқичида қандай бўлса, худди шундай рибофлавиннинг мураккаброқ уюшмаларида ҳам рўй беради, бу ҳол ўз-ўзи билан спиртда йиғилган молекулаларнинг микроскопик тасвири туширилиши билан тасдиқланади (8-расм).



8-расм. Рибофлавин молекулаларининг флавин ва рибитоль қисмлари орасидаги водород боғланишнинг структураси.

Рибофлавин ассоциатларининг игнасимон тузилиши ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларнинг микроскопик тасвири билан тасдиқланади (9-расм).



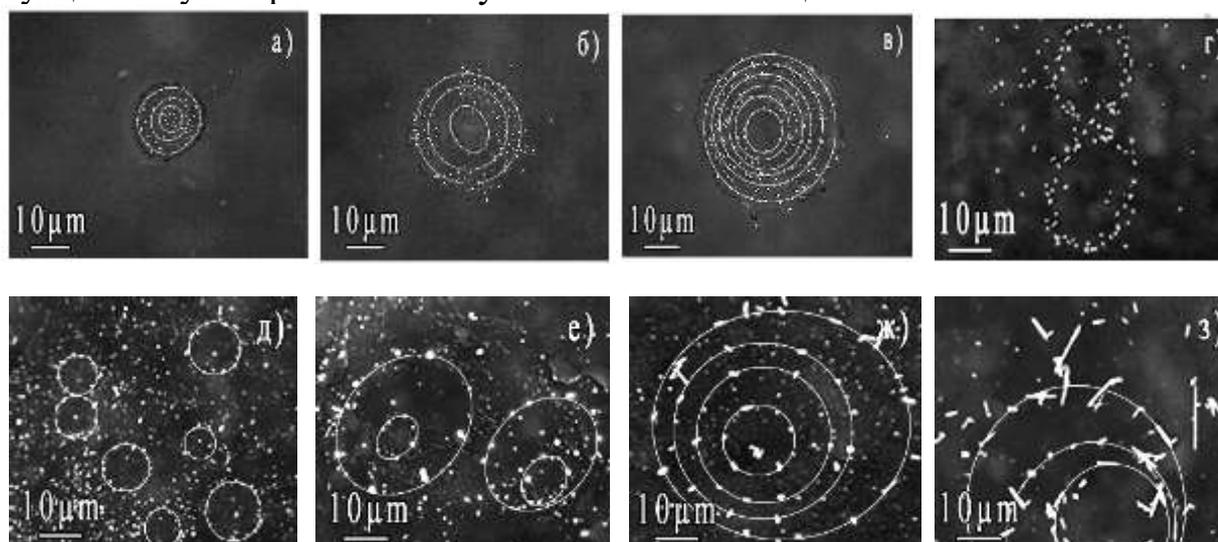
9-расм. Ўз-ўзи билан йиғилган рибофлавин заррачаларининг эритма ассоциат даражасига боғлиқ ҳолдаги микроскопик тасвир кўринишлари: 1- $x=0,27$ ($5 \cdot 10^{-5}M$) (а); 1- $x=0,43$ ($10^{-4}M$) (б); 1- $x=0,57$ ($5 \cdot 10^{-4}M$) (в); 1- $x=0,73$ ($10^{-3}M$) (г) ($\Delta D \sim 1-x$)

Микроскопик тасвирлар таҳлилининг натижалари кўрсатадики, уюшиш даражасининг ошиши билан микротасвирлардаги заррачалар сони ўз-ўзи билан йиғилган игнасимон тузилишга эга бўлган молекулалар 5-7% дан 80-90% гача ўсаяпти. Бу заррачаларнинг геометрик параметрлари 8 μm дан 12 μm гача бўлган оралиқда бўлади. Ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларнинг умумий тузилиши ҳалқасимон шаклга эга. Рибофлавин молекулаларининг игнасимон тузилиши ўз-ўзи билан йиғилишнинг уюшиш даражасига боғлиқлиги аниқланган. Коллоид эритмадан олинган ўз-ўзи билан йиғилган молекулалар, йирик игнасимон заррачаларни ўз ичига олади (9г-расм).

Тартразинни ўзи йиғилган молекулаларининг тузилиши сув+ДМСО нинг доимий концентрациясида $10^{-5}M$, бинар аралашмасининг ҳар хил нисбатларида олинган. Молекулаларни ўз-ўзидан йиғилиши учун танланган шартлар эритмадаги ассоциатлар даражасига қараб заррачаларнинг геометрик параметрларини аниқлаш имконини берди (10-расм). 10а-расмдан кўришиб турибдики, битта марказий структурадан ташкил топган, ўз-ўзидан йиғилган молекулаларнинг микроскопик тасвири ассоциатларнинг даражаси 1- $x=0,16$ бўлган эритмаларга тегишлидир. Бунда шарсимон заррачаларнинг геометрик параметрлари 0,7-1,2 μm оралиғида бўлади. Ассоциатларнинг даражаси 1- $x=0,21-0,26$ оралиғида бўлган эритмаларнинг тадқиқотлари (10б

ва 10в расм) келтирилган. Структуравий тасвирлар шарсимон шаклдаги бир хил геометрик параметрларга эга бўлган заррачаларнинг тасвиридан ташкил топади. Лекин, уюшмалар даражасининг ортиши билан, пайдо бўлган, тузилмавий майдонлар кўпаяди.

Кўриниб турибдики, тасвир майдонининг ошиши микротасвирнинг марказий қисмида ҳосил бўлган ўз-ўзи билан йиғилган молекулалар кўринишидаги бириккан молекулалар сонининг ортиши билан боғлиқ. Ассоциатларнинг ($1-x=0,35$) юқорироқ даражасидаги эритмалардан фойдаланиш шунга олиб келдики, ўз-ўзи билан йиғилган заррачаларнинг тузилиши саккиз (8) рақами кўринишидаги мураккаб тасвирга эга бўлади (10г-расм). Ўз-ўзи билан йиғилган молекулаларнинг мураккаб тузилишидан кўриниб турибдики, ўз-ўзидан йиғилган заррачалар кўринишидаги бириккан бўёқ молекулалари сонининг ўсиши билан боғлиқ.



10-расм. Ассоциация даражасига қараб, тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилган заррачаларининг микроскопик тасвирлари: $1-x = 0,1$ (а), $1-x = 0,21$ (б), $1-x = 0,26$ (в), $1-x = 0,35$ (г), $1-x = 0,55$ (д), $1-x = 0,60$ (е), $1-x = 0,79$ (ж), $1-x = 0,91$ (з)

10 а) ва б) расмларда тасвирларнинг микроскопик суратга олиш ассоциат даражасидаги ($1-x=0,51-0,67$) бўёқнинг эритмасидан олинган. 10 д) ва е) расмлардан кўриниб турибдики, геометрик параметрлари $0,8-2,0 \mu\text{m}$ оралиғида жойлашган ўз-ўзи билан йиғилган заррачалар шарсимон шаклга эга. Бунда бириккан заррачалар микроскопик тасвирларнинг тўлиқ майдонини эгаллаб олади. Бу тасвирнинг иккинчи ўзига хос характери шундан иборатки, ҳосил бўлган заррачалар сонининг игнасимон шаклда ориентацияланиши ортиб боради. Микроскопик тасвирларнинг умумий кўриниши халқасимон (10д-расм) ва баъзи ҳолларда эллипссимон (10е-расм) бўлиб қолади.

Ассоциация даражаси $1-x = 0,76-0,91$ (10ж ва з расмлар) эга бўлган эритмаларнинг олинган тасвирларидан келиб чиқадики, игнасимон тузилишга эга бўлган заррачалар 10е расмда келтирилган заррачалар сонига

нисбатан икки марта ортиқ. Бу ҳолда игнасимон шакл яратиш учун мўлжалланган заррачалар 60% гача кўпаймоқда. Кузатилаётган заррачаларнинг диаметрлари ва узунлиги мос ҳолда қуйидаги ораликда бўлади: $d=0,2-1,0$ $\mu\text{м}$ ва узунлиги $l=1,0-5,0$ $\mu\text{м}$. Бунда ўз-ўзи билан йиғилган молекулалар умумий тузилиши халқасимон шаклга эга бўлади.

Ассоциация даражаси $1-x=0,9$ тенг бўлган коллоид эритма заррачаларнинг микроскопик расмга туширилишининг тасвири 10 \times - расмда келтирилган. 10 \times -расмдан кўриниб турибдики, игнасимон шаклдаги заррачаларнинг геометрик параметрлари мос ҳолда қуйидаги ораликда бўлади: $d=1,0-3,0$ $\mu\text{м}$ ва $l=7,0-12,0$ $\mu\text{м}$. Яъни, 10 \times расмда кўрсатилган заррачалар параметрларига нисбатан геометрик параметрлар тахминан 2-3 марта ортади. Ўз-ўзидан йиғилган игнасимон заррачалар тасвирларининг умумий кўриниши спиралсимон шаклга тўғри келади.

ХУЛОСА

Рибофлавин ва тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилиш спектроскопиясини тадқиқ қилиш натижалари асосида қуйидаги хулосалар қилинди:

1. Рибофлавин ва тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилиш жараёни этанол ва бинар эритувчилар аралашмаларида юқори концентратсияли муайян ҳажмнинг ҳосил бўлиши билан биргаликда боради: сув+ДМСО, сув+диоксан, этанол+изобутанол, этанол+хлороформ, этанол+ацетон ва бошқа игнасимон микрзаррачалар шаклланади. Аленцева-Фок усули ва Гаусс тақсимот функцияси билан ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнида ҳосил бўлган рибофлавин ва тартразиннинг 6 та ва 2 та индивидуал яширин ютилиш полосалари аниқланди.

2. Люминесценция ва ютилишда электрон ўтишлар эҳтимолиятининг ўзгариши, мономер молекулалар электрон сатҳларининг резонанс парчаланиши ва молекулаларнинг ўз-ўзи билан йиғилиш жараёнида силжиши сабабли полоса деформациясининг электрон табиати ўрнатилди.

3. Квант-кимёвий ҳисоблашлар шуни кўрсатдики, ўз-ўзи билан йиғилган димерлар ва рибофлавин молекуласининг мураккаброқ агрегатлари “бош-дум” йўналишига эга, яъни битта молекуланинг флавор қисми ва иккинчи молекуланинг риботор қисми кислород ва водород атомлари ўртасидаги водород боғланишнинг ҳосил бўлишида энг кичик стерик тўсиқ шаклланади. Тартразин молекулалари учун Ван-дер-Ваальс кучларининг дипол-дипол ўзаро таъсири туфайли ўз-ўзи билан йиғилиш ҳосил бўлади.

4. Рибофлавин ва тартразин молекулаларининг ўз-ўзи билан йиғилишининг микроскопик тасвирлари олинган. Ўз-ўзидан йиғилган заррачалар сони ва уларнинг геометрик параметрларининг агрегация даражасига чизиқли боғлиқлиги ўрнатилди.

5. Ўз-ўзи билан йиғилган рибофлавин молекулаларининг фотобарқарорликка эгаллиги аниқланди, бу молекулаларнинг агрегация даражасига чизиқли боғлиқлиги ва рибофлавин мономер молекулаларининг

шаклланиши учун бир қисм нурланиш энергиясининг сарфланиши билан боғлиқлиги исботланди.

6. Иккиламчи буғдой хом ашёсини қайта ишлаш технологик жараёнида рибофлавин молекуласини маълум концентрацияли сув эритмасини киритиш натижасида стабиллашган ва биологик фаол моддаларга бой бўлган тайёр маҳсулотлар олишга эришилган.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ
САМАРКАНДСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

БУХАРСКИЙ ИНЖЕНЕРНО-ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

КАСИМОВА ГУЗАЛ КАРИМОВНА

**СПЕКТРОСКОПИЯ САМОСБОРКИ МОЛЕКУЛ РИБОФЛАВИНА И
ТАРТРАЗИНА**

01.04.05 – Оптика

**АВТОРЕФЕРАТ
диссертации доктора философии (PhD) по физико-математическим наукам**

Бухара - 2021

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за № В2019.2.PhD/FM358 В2021.1.PhD/FM358 В2021.3.PhD /FM358.

Диссертация выполнена в Бухарском инженерно-технологическом институте.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета (www.samdu.uz) и на информационно-образовательном портале «Ziyonet» (www.ziyonet.uz).

Научный руководитель: **Астанов Солих Хусенович**
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Муродов Гуломхон**
доцент, кандидат физико-математических наук,
Рахматуллаев Иляс Арзимуродович
доцент, доктор физико-математических наук

Ведущая организация: **Каршинский государственный университет**

Защита диссертации состоится «__» _____ 2021 г. в ____ часов на заседании ученого совета PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 при Самаркандском государственном университете. (Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz Самаркандский государственный университет, Физический факультет, 1-этаж, 63-аудитория).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Самаркандского государственного университета (зарегистрирована под №__). Адрес: 140104, г. Самарканд, Университетский проспект, 15. Тел.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; факс: (99866) 239-11-40.

Автореферат диссертации разослан «__» _____ 2021 г.
(Протокол рассылки №__ от «__» _____ 2021 г.)

М.Х.Ашуров

Председатель научного совета
по присуждению ученых степеней,
д.ф.-м.н., академик

Р.М.Ражабов

Ученый секретарь научного совета
по присуждению ученых степеней,
к.ф.-м.н., доцент

Д.И.Семенов

Председатель научного семинара
при научном совете по присуждению
ученых степеней, д.ф.-м.н., доцент

ВВЕДЕНИЕ (аннотация к диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. Исследования, проводимые в мире в последние годы, связаны с выявлением условий формирования самособранных молекул с последующим получением микрочастиц. Изучение межмолекулярных взаимодействий (ММВ) на основе проведённых экспериментальных и теоретических расчётов способствовало получению гибридных микроструктур полупроводников с органическими красителями. Использование методов молекулярной спектроскопии способствует получению дефицитных новых фотосинтетических пигментов. Создание новых лекарственных форм на основе витамина В₂ и тартразина требует проведения дальнейших исследований по спектроскопическому исследованию самособранных молекул рибофлавина и тартразина.

Результаты многочисленных исследований, проводимых в мире, свидетельствуют, что проявляющиеся ММВ в виде Ван-дер-ваальсовых сил и водородных связей, образующихся между объединившимися молекулами, широко распространены как в природе, так и во многих биохимических процессах. Проведение этих исследований позволяет выявить связь спектрально-оптических свойств спектров со структурой самособранных частиц. Данные методы исследования обладают высокой чувствительностью по обнаружению тонких деталей оптических электронных переходов. В результате этих исследований могут быть сформированы самособранные частицы, микроскопические изображения структуры, которых зависят от степени ассоциации в растворах.

В нашей стране, также уделяется большое внимание исследованиям самосборки молекул в бинарных растворителях с получением микрочастиц, объединяющихся в виде концентрических колец, либо имеющих эллипсообразную форму. Актуальными являются научные исследования, посвящённые самоагрегации молекул сквариновых и натуральных красителей. Важными являются исследования, посвящённые решению фундаментальных задач имеющих практическое применение, в соответствии с требованиями, предусмотренными в концепции развития науки Республики Узбекистан¹ до 2030 года, представляющих большое значение для успешного развития науки и техники в нашей стране. Полученные результаты научных исследований способствуют разработке новых материалов для биомедицины и фармацевтики, имеющих геометрические параметры микрочастиц.

Представленная диссертационная работа, в определенной степени служит выполнением задач, предусмотренных Указом Президента № ПП-2789 «О мерах по дальнейшему совершенствованию деятельности Академии наук, организации, управления и финансирования научно-исследовательской деятельности» от 17 февраля 2017 года, № УП-5847 «Об утверждении концепции развития системы высшего образования Республики Узбекистан

¹ Концепции развития науки до 2030 года // Приложение № 1 к Указу Президента Республики Узбекистан от 29 октября 2021 года № УП-6097, п. 3.2.

до 2030 года» от 8 октября 2019 года и Постановлениями Президента № ПП-5032 «О мерах по повышению качества образования и совершенствованию научных исследований в области физики» от 19 марта 2021 года, а также другими нормативно-правовыми документами, принятыми в данной сфере.

Соответствие исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологий в республике. Диссертация выполнена в рамках приоритетных направлений развития науки и технологий Республики Узбекистан – II. «Физика, астрономия, энергетика и машиностроение».

Степень изученности проблемы. В последние годы зарубежными исследователями К.С.Когеловым, В.И.Родульгиным, М.В.Алфимовым, П.В.Лебедев-Степановым (ИФХРАН), В.А. Блатовым, Г. Д. Илюшиным (Самарский институт) разработаны теоретические аспекты и получены экспериментальные результаты по созданию метода самосборки молекул. Учёными Института физики-химии РАН Л.М. Николенко, С.Б.Бричкиным, и др. исследованы самособранные гибридные наноструктуры полупроводника с J-агрегатами цианинового красителя, в результате чего было получено усиление электропроводности полупроводника. Китайскими учёными J.X.Chen, L.Liu, R.Liu, C.Zhang, Z.Hu исследованы самособранные пептиды, которые используются для улучшения иммунной системы и для доставки лекарства в виде нанотрубки.

Учёными института физики Академии наук Белоруссии и Украины Г.П.Гуриновичем и А.А.Ищенко получены самоагрегации молекул хлорофилов, порфиринов, а также полиметиловых красителей и определены методы их стабилизации. Группой ученых из Анкары под руководством Э. Айтекин получен солевой комплекс, который используется для транспортировки в роговицу глаз.

Пакистанскими учеными М.Шероз, И.Ахмад и другими изучаются процессы образования и стабилизации молекул рибофлавина, на основе которых получены различные медпрепараты.

Дальнейшее развитие экспериментальных работ в сфере получения самособранных частиц было положено узбекскими учёными А.М.Каххаровым, С.А.Бахрамовым (ИИПиЛТ) и др., исследована самоорганизация молекул фуллерена (C_{60}) в бинарной смеси этанол+бензол. Учёными Самаркандского государственного университета Н.Н.Низомовым, Э.Н.Курталиевым, Л.М.Собировым, Д.И.Семеновым, А.Жумабаевым, С.Х.Астановым и др. в изучены процессы ассоциации органических, пищевых красителей и ароматических соединений в растворах.

Из проведённого литературного обзора следует, что процесс самосборки и фотостабильность витаминных препаратов и пищевых красителей частиц в зависимости от степени ассоциированности молекул недостаточно изучен.

Связь темы диссертации с научно-исследовательскими работами высшего учебного заведения, где выполнена диссертация. Диссертация выполнена в соответствии с планом научно-исследовательской работы Бухарского инженерно-технологического института по темам: ЁА-2-1

“Исследование фазовых переходов и магнито-оптических свойств феррит-гранатов с учетом ориентационного взаимодействия” (2017-2018 гг.), ОТ-А4-07 “Разработка ресурсосберегающей технологий переработки бахчевых культур с получением новых экспортоспособных продуктов” (2017-2018 гг.) и ОТ-Ф2-64 “Флуктуационные и параметрические явления в конденсированных и наноразмерных системах” (2017-2020 гг.) реализованных в рамках практических и фундаментальных проектов.

Цель исследования: Микроскопическими и спектрально-оптическими методами исследования выявило условия образования самособранных молекул рибофлавина и тартразина в зависимости от природы используемых растворителей, концентрации и температуры, осуществить формирование процесса самосборки молекул и определить их структуру, геометрические параметры и фотостабильность в зависимости от степени ассоциации самособранных молекул .

Задачи исследования являются следующие:

выявить условия формирования процесса самосборки молекул рибофлавина и тартразина в зависимости от их концентраций и природы используемых растворителей;

изучить природу ММВ, проявляющегося в растворах самособранных молекул витаминного препарата и пищевого красителя с привлечением спектрально-оптических и квантово-химических расчётов;

изучить фотостабильность молекул рибофлавина в водном растворе в зависимости от степени ассоциации молекул и определить природу гипохромного эффекта;

получить микроскопические изображения структуры самособранных частиц и определить их геометрические параметры в зависимости от степени ассоциатов в растворах.

Объектом исследования выбраны тартразин, рибофлавин и продукты его фотолиза. В качестве растворителей использовались дистиллированная вода, хлороформ, диоксан, диметилсульфоксид, ацетон, этанол и изобутанол.

Предметом исследования является изучение закономерности, связанной с изменениями спектрально-люминесцентных характеристик в зависимости от концентрации исследуемых соединений, светового и температурного воздействия, природы растворителей и определение природы ММВ в процессе самосборки молекул.

Методы исследования. В диссертации исследованы методы молекулярной спектроскопии, микросъёмка изображения структуры самособранных молекул и полуэмпирических квантово-химических расчётов.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

для рибофлавина самосборка молекулы осуществляется ориентацией флавоновой части одной молекулы с рибитольной частью второй молекулы витамина В₂ с дальнейшим их объединением Н-связью с формированием игольчатообразных микрочастиц;

самособранные молекулы рибофлавина и тартразина обладают шестью и двумя скрытыми полосами поглощения, соответственно, а также

обнаружено, что фотостабильность молекул рибофлавина имеет линейный характер, зависящий от степени ассоциации раствора;

определено, что геометрические параметры игольчатообразных частиц в структуре самособранных молекул рибофлавина и тартразина зависят от степени ассоциации в растворах, общий вид этих объединённых частиц представляет концентрическими кольцами либо в форме эллипсоида;

полуэмпирическими расчетами показано, что перераспределение заряда на атомах рибофлавина и тартразина приводит к повышению значения их дипольного момента, который способствует возникновению межмолекулярного диполь-дипольного взаимодействия сил Ван-дер-Ваальса.

Практические результаты исследования спектрально-оптические характеристики димеров, сложных агрегатов и самособранных молекул из коллоидного раствора, являющиеся паспортными характеристиками рибофлавина и таартазина могут быть использованы в фармацевтике для создания лекарств на базе витаминного препарата, а также в реализации клинических исследований, проводимых в этом направлении.

Установленный рост фотостабильности витаминного препарата в концентрированных водных и спиртовых растворах может быть использован для создания новых лекарственных препаратов на основе витамина В₂.

Достоверность полученных результатов подтверждается проведением экспериментов на современных стандартных приборах, согласованностью экспериментальных результатов с данными полуэмпирических квантово-химических расчётов, совпадением результатов, полученных различными методами, наблюдаемые деформации в электронных спектрах объясняются имеющимися теоретическими интерпретациями, а также совпадением отдельных результатов полученных другими авторами для других соединений.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования заключается в углублении знаний о межмолекулярных взаимодействиях, происходящих в растворах рибофлавина и тартразина, и они могут быть использованы для развития теории молекулярной спектроскопии в конденсированных средах.

Практическая ценность работы заключается в том, что концентрированные водные растворы рибофлавина использованы в качестве стабилизатора пищевых продуктов в виде пастилы.

В результате научных исследований был разработан новый метод, согласно которому порошок рибофлавина и дистиллированная вода стерилизовались отдельно, а также глазные капли образовывались в результате асептического добавления. Новая методика стерилизации была опробована на людях с глазными заболеваниями в количестве 10 человек, и было замечено, что в результате апробации этой методики время заживления сократилось на 20-25%.

Внедрение результатов исследования. Исследованные закономерности изменения спектрально-люминесцентных характеристик растворов рибофлавина и тартразина при изменении температуры и концентрации

растворённого вещества, природы растворителя, методы идентификации самосборки молекул рибофлавина и тартразина были использованы при выполнении научного проекта ОТ-Ф2-30-«Фотоника комплексов органических красителей с биологическими объектами и наночастицами металлов» (акт внедрения из Самаркандского государственного университета от 2 декабря 2020 г.). Применение научных результатов позволяет определить при анализе физических особенностей спектров поглощения и флуоресценции при переходе от водного к водно-этанольному, водно-диметилформамидному и водно-диоксановому растворам родаминовых и стирильцианиновых красителей, а также при исследовании комплексов краситель-протеин.

-изменение структуры молекул в процессе самосборки, зависящие от степени ассоциации обусловлены тем, что в качестве связующего вещества использовалась самосборка молекулы рибофлавина с целью образования однородной массы, возникающей при взаимодействии вторичного сырья с водно-молочной фазой, и увеличением времени стабильности полученных масс которые были использованы при выполнении научного проекта ОТ-А9-5 “Создание новых разработок на основе ресурсосберегающей технологии производства функциональных пищевых продуктов с использованием вторичного сырья переработки зерна” (акт внедрения Бухарского инженерно-технологического Института от 25 август 2021 г № 87-10/1770). Применение этих научных результатов введением водных растворов рибофлавина и тартразина в процессе технологического режима переработки вторичного сырья-зерно преследует собою цель увеличения биологической активности масло-эмульсионных продуктов, продления срока хранения маслично-мучных композитов и сохранения естественной цветности готовых масляных продуктов.

Основное применение результатов исследования было представлено результатами, полученными путем объединения более 50 экспериментальных и модельных исследований, опубликованных в журналах с высоким уровнем воздействия, а также в обзорных статьях, согласно научной базе данных Web of Science:

1. G.K.Kasimova, S.Kh.Astanov, E.N.Kurtaliev, N.N.Nizomov. Structure of self-assembled riboflavin molecules in solutions. Journal of molecular structure. V.1185.2019. p.107-111 ссылки на 2 зарубежных научных журнала: 1)C.Char, C.Padilla, V.Campos, M.Pepczynska, P.D.Calderón, J.Enrione. Characterization and Testing of a Novel Sprayable Crosslinked Edible Coating Based on Salmon Gelatin, Coatings 2019, 9(10), 595 P.1-17; 2) V.Vendramin, S.Primerano, G.Leserri, G.Paniccia, S.Vincenzi. Riboflavin removal by commercial bentonites and charcoals in white and red wines, talian Journal of Food Science, 2021; 33 (2): 13–23.

2. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Sharipov M.Z. Optical systems for removal of polarization spectra. Eurasian Physical Technical Journal, 2019, V.16, #.2 (32), P.83-88, ссылки на статью в зарубежных научных журналах и книгах: R. Khamitov, M.Kolchurina, I.Kolchurina. Designing of a Laboratory

Complex for Spectral Analysis of Measurement Data of Different Materials. Book "Progress in Material Science and Engineering" (2021). P.

3. S.Kh.Astanov, G.K.Kasimova, E.N.Kurtaliev, N.N.Nizomov, A.Jumabaev. Electronic nature and structure of aggregates of riboflavin molecules. Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2020. 119177 ссылки на статью в зарубежных научных журналах и книгах: 1) N. G. K. Wong, Ch. Rhodes, C. E. H. Dessent. Photodegradation of Riboflavin under Alkaline Conditions: What Can Gas-Phase Photolysis Tell Us about What Happens in Solution? Molecules 2021, 26,6009. doi:10.20944/preprints202108.0307.v1

Обнаружены скрытые полосы поглощения ассоциатов в водном растворе рибофлавина и тартразина, которые были использованы для создания условий стабильности флавона, антациана и каротиноида, содержащихся в пищевых продуктах в виде фруктовых пастил (техническая инструкция ТИ-201122919-09-2020 от 26.09.2020). Паспортные характеристики ассоциатов рибофлавина могут быть использованы в фармацевтике для создания лекарственных препаратов на основе витамина В₂.

Апробация результатов исследования. Результаты диссертации были представлены и обсуждены на 4 международных и 4 республиканских научных конференциях.

Публикации результатов исследования. Всего по теме исследования опубликовано 25 научных работ, в том числе 2 монографии, 15 научных статей (6 в республиканских и 9 в зарубежных журналах) из списка научных журналов, рекомендованных к публикации основных научных результатов по диссертации Высшей аттестационной комиссии Республики Узбекистан.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованной литературы. Объем диссертации составляет 134 страниц, в том числе 35 рисунков и 4 таблицы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении приведены актуальность и востребованность темы диссертации, обоснована связь исследований с основными приоритетными направлениями развития науки и технологий в Республике, приведен обзор международных научных исследований по теме диссертации, сформулированы актуальность и изученность проблемы, обоснованы цели и задачи, объекты, предметы и методы исследования, раскрыта научная новизна исследования и достоверность полученных результатов, приведена теоретическая, практическая значимость, краткие сведения о внедрении результатов, апробации работы, объем и структура диссертации.

В первой главе диссертации «**Влияние межмолекулярного взаимодействия на фотофизические и фотохимические свойства витаминов и красителей**» приводится обзор литературы, посвященный спектроскопическим исследованиям деформации электронных спектров в зависимости от концентрации, светового и температурного воздействия витаминных препаратов и пищевых красителей, исследование межмолекулярного

взаимодействия, происходящего в растворах связанное с процессом ассоциации и самосборки молекул. На основе приведённого литературного обзора сформулированы цели и задачи диссертационной работы.

Во второй главе «Методика и техника экспериментальных исследований» описаны экспериментальные установки по исследованию электронных спектров поглощения и люминесценции. Спектр поглощения был снят на спектрофотометре Spectrophotometer EMC-30PC-UV и Specord 50 (Analytikjena, Германия). Спектры люминесценции измерялись на установке, собранной на базе двух монохроматоров МДР-23, где возбуждающий свет на исследуемое соединение падает под углом 45° . Спектроскопические исследования в зависимости от температуры осуществлялись термостатом Thermo Scientific SC100-S5P (Newington USA). Фотолиз исследуемых растворов осуществлялся на установке ЛП-1 нефiltroванным светом лампой ПРК-2. Микроскопическая съёмка изображения самособранных частиц проведена с использованием микроскопа Motic B1-253 (Moticam-1080BMH).

В третьей главе диссертации «Спектроскопия ассоциации молекул рибофлавина и тартразина» приведены результаты спектроскопического исследования процесса самоассоциации, проявляющейся в водных, этанольных и бинарных смесях растворителей.

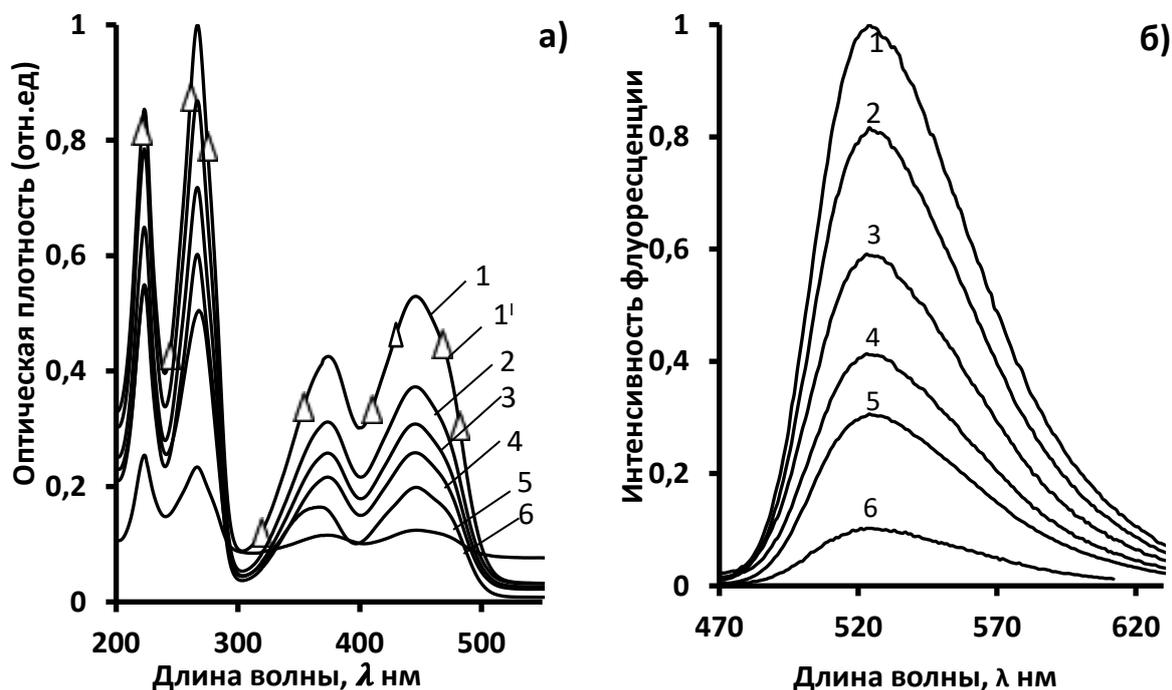


Рис. 1. Концентрационная зависимость спектров поглощения (а) и флуоресценции (б) рибофлавина в воде: 10^{-6} (1), 10^{-5} (1¹), 5×10^{-5} (2), 10^{-4} (3), 5×10^{-4} (4), 10^{-3} (5), 5×10^{-3} М(6).

Экспериментально установлено, что увеличение концентрации рибофлавина в водном и этанольном растворе приводит к существенной деформации электронных спектров поглощения (рис. 1а) и люминесценции

(рис. 1б). При этом наблюдались падение поглотительной и люминесцентной способностей без изменений формы электронных спектров (гипохромный эффект). Аналогичные спектральные деформации наблюдаются также и для тартразина.

Наблюдаемый эффект связан с проявлением не люминесцирующих ассоциатов рибофлавина и тартразина. Подобные спектральные изменения также наблюдаются при постоянной концентрации тартразина с увеличением нерастворимого компонента в бинарной смеси растворителей (рис. 2а). В качестве примера на рис. 2а показано изменение спектра поглощения тартразина в бинарной смеси растворителя вода+ДМСО. Аналогичные спектральные изменения наблюдаются при использовании других компонентов бинарных смесей растворителей: вода+ДМСО, этанол+изобутанол, этанол+хлороформ, этанол+ацетон и др.

Наблюдаемые гипохромные эффекты в электронных спектрах были отнесены к возникновению процесса самоассоциации, которые подтверждаются проведенными температурными исследованиями растворов молекул рибофлавина и тартразина (рис. 2б).

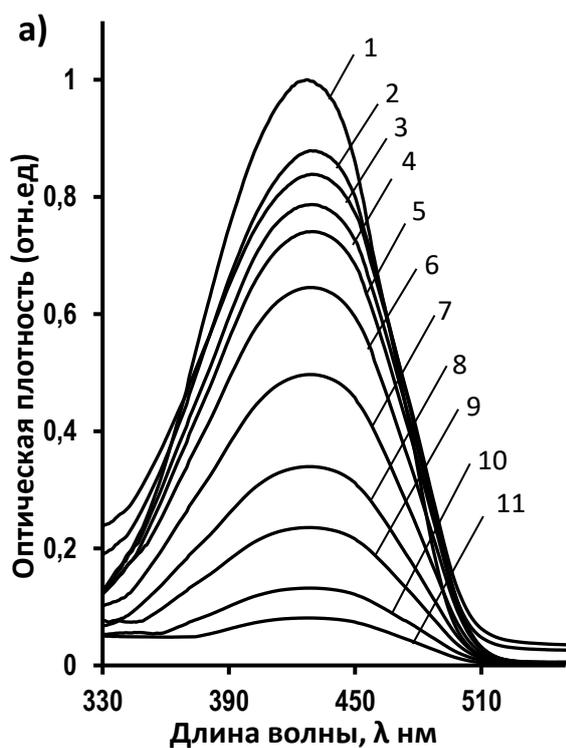


Рис.2а. Спектр поглощения тартразина в бинарной смеси вода-ДМСО с концентрацией $C=5 \times 10^{-6} \text{M}$ от содержание объёма воды-100(1), 80(2), 60(3) 40(4), 30(5), 20(6), 10 (7), 5(8), 3(9), 2(10), 1%(11).

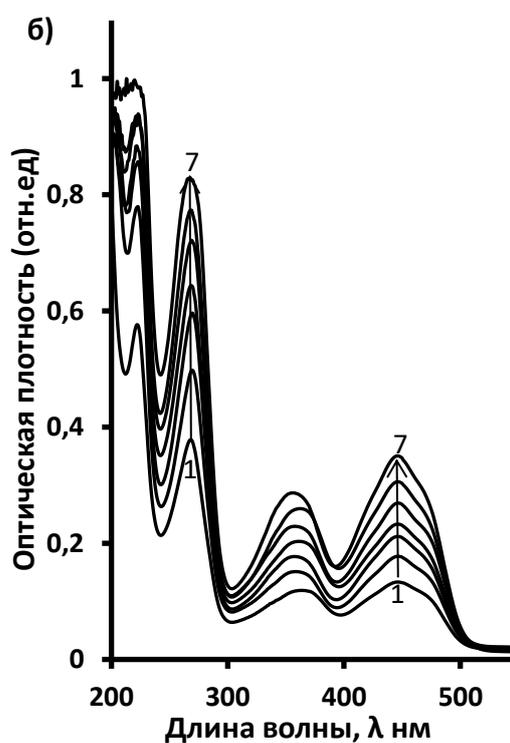


Рис.2б. Температурная зависимость спектра поглощения рибоф-лавина ($C=2 \times 10^{-5} \text{M}$) в смеси 20% этанол+ 80% изобутанол: 293 (1); 313 (2); 323 (3); 333 (4); 338 (5); 343 (6); 348 К (7).

При повышении температуры раствора в интервале 78°C наблюдается восстановление поглотительной и люминесцентной способности, характерной для мономеров. Из температурных зависимостей спектров

поглощения была определена энергия связи образовавшихся самоассоциатов исследуемых соединений в бинарных смесях растворителей.

Проведенные расчёты показывают, что энергии связи самоассоциатов находятся в интервале 5–8 ккал/моль, что соответствует энергии водородной связи. Не люминесцирующие агрегаты молекул витаминного препарата и красителя образуются в водных растворах, где молекула растворителя выступает в качестве связующего мостика водородной связи между двумя молекулами исследуемых соединений. В этих случаях водородные атомы молекул воды образуют водородную связь с кислородом молекул исследуемых соединений.

Процесс самоассоциации исследуемых соединений в бинарных смесях растворителей объясняется следующими соображениями. При растворении исследуемых соединений в первом компоненте бинарной смеси растворителей, где исследуемые соединения хорошо растворимы, они окажутся окружёнными сольватной оболочкой. В этих случаях межмолекулярное взаимодействие (ММВ) между растворёнными молекулами исключено, и они окажутся в мономерной форме.

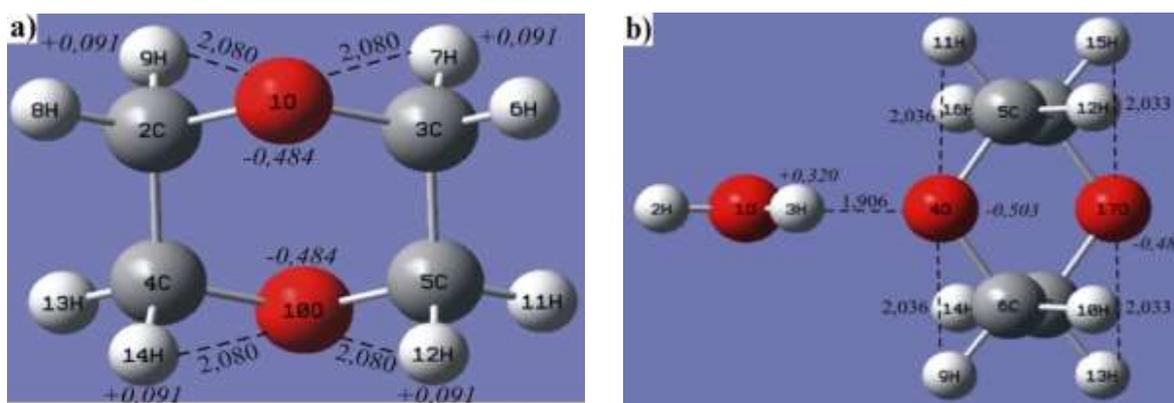


Рис.3. Расчетные структуры мономерных молекул диоксана (а) и комплекса вода+диоксан (б).

Добавление второго компонента бинарной смеси приводит к объединению первого и второго компонента водородной связью по схеме: $R_1O...HR_2$, где R_1 и R_2 оставшая часть молекул компонентов бинарных смесей соответственно. В этих объединениях сольватная оболочка вокруг мономерных молекул ослабевает. В результате возникают условия объединения мономерных молекул в самоассоциат.

Образование водородной связи между компонентами бинарной смеси растворителей подтверждается проведёнными квантово-химическими расчётами (рис 3). Определённая энергия связи ассоциатов, относящаяся к водородной связи, совпадает со значениями экспериментальных результатов.

Анализ спектра поглощения и люминесценции ассоциатов рибофлавина и тартразина показывает, что во всех случаях электронные полосы, относящиеся к ассоциированным молекулам, являются скрытыми. Для выявления скрытых полос поглощения были нормированы спектры

поглощения ассоциированных молекул (рис. 2б, крив.1) с полосами мономерных молекул (рис. 1а, крив. 1) рибофлавина. В результате вычитания из общей полосы поглощения доли мономерных молекул были получены полосы ассоциатов молекул рибофлавина в шкале частот (рис. 4, крив.1). Как видно из рис.4 в спектре поглощения ассоциата рибофлавина явно выделяются пять максимумов полос в шкале следующих частот: $\nu_{\max} = 22000, 28000, 35000, 38500, 48000 \text{ см}^{-1}$.

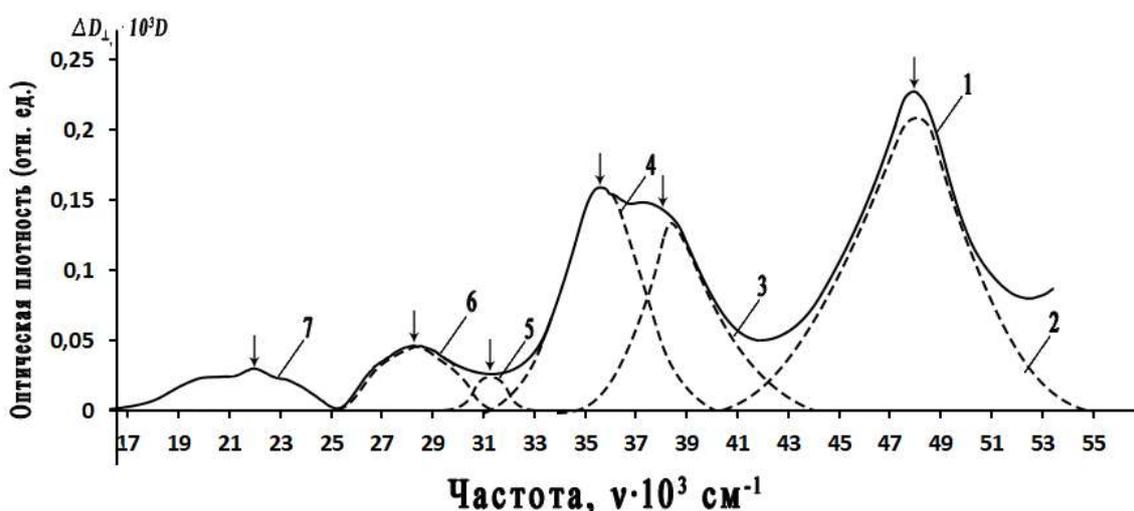


Рис. 4. Разрешение спектров поглощения ассоциатов рибофлавина, полученные в бинарном растворителе 20% этанол+80% изобутанол $C=2 \cdot 10^{-5} \text{ М}$ (1) на индивидуальные компоненты (2-7).

Из анализа литературных данных следует, что многие полосы ассоциатов растительных пигментов (натуральные красители, хлорофиллы, порфирины, фиофетины) и других крупных молекул в статическом пределе соответствуют функции Гаусса. Разделение полос ассоциатов рибофлавина на индивидуальные компоненты осуществлялись методом Аленцева-Фока. Приемлемость этого метода заключается в том, что форма индивидуальных полос компонентов соответствует функции Гаусса. Другая особенность этого метода заключалась в том, что точки излома в спектрах ассоциатов соответствуют положению максимумов индивидуальных полос. Полученные индивидуальные полосы ассоциатов определены на основе метода Аленцева-Фока (рис.4, крив.2-7). Выделенные максимумы индивидуальных полос поглощения были сопоставлены с максимумами полос в спектрах линейного дихроизма ассоциатов³ рибофлавина. Полученные экспериментальные результаты совпадают с теоретическими значениями.

В целях определения природы ММВ для формирования самоагрегации молекул проведены теоретические расчёты по распределению зарядов на атомах выбранных соединений. При этом установлено, что происходит существенное усиление распределения зарядов, которые сопровождаются

³ Диссертант выражает благодарность старшему научному сотруднику Института физики АН Белоруссии А.С.Прищепову за помощь при снятии спектров линейного дихроизма.

ростом значений дипольного момента в возбуждённых состояниях по отношению к основным молекулам исследуемого состояния. На основании этих расчётов определено, что объединение молекул в самоассоциаты в бинарных смесях растворителей осуществляется диполь-дипольным взаимодействием Ван-дер-Ваальсовых сил. В результате проявления ММВ в процессе самосборки молекул происходит одновременное смешение и резонансные расщепления электронных уровней с изменением частот чисто электронного перехода (рис.5).

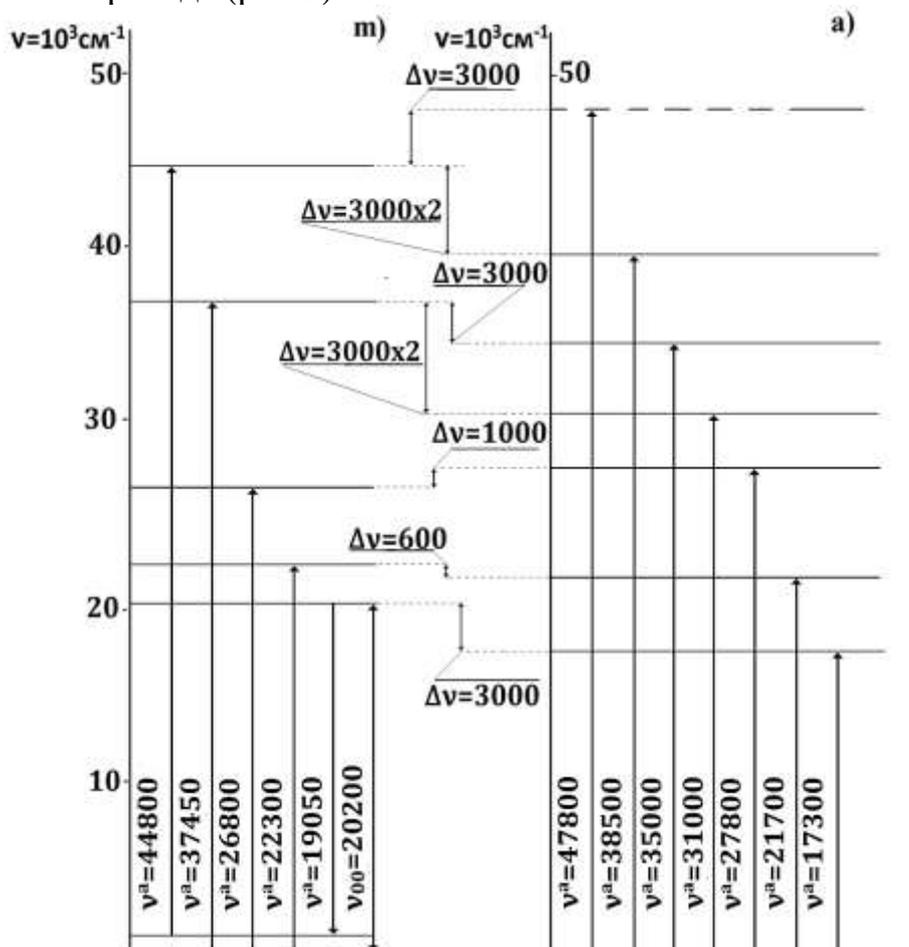


Рис.5. Схема частот электронных переходов мономеров (м) и самоассоциатов (а) молекул рибофлавина

Спектроскопическим методом исследован процесс фотолиза водного раствора в зависимости от степени ассоциации и концентрации витаминного препарата. Показано, что при концентрации $C=10^{-5} \text{ M}$ молекулы рибофлавина находятся в мономерном состоянии (рис.1). Облучение этого раствора в интервале времени 0-150 мин приводит наряду с падением поглощательной способности на длине волны 445 нм с проявлением двух изобестических точек (295 и 350 нм) и возникновению новой полосы поглощения при длине волны $\lambda_{\text{max}}=350 \text{ нм}$, которая относится к полосе поглощения продукта фотолиза люмихрома (LC).

В случае фотолиза водного раствора рибофлавина с концентрацией $C=5 \cdot 10^{-5} \text{ M}$, в растворе которых сосредоточены как мономерные так и ассоциированные молекулы, наблюдается деформация электронных спектров

поглощения. Существование ассоциированных молекул доказано тем, что значение оптической плотности выбранной концентрации оказалось меньше примерно на 13% по отношению к концентрации водного раствора рибофлавина 10^{-5} М. При этом установлено, что при облучении в интервале времени 0-150 мин наблюдается дальнейшее падение поглощательной способности при длине волны 445 нм и 375 нм с появлением новой полосы поглощения при длине волны 350 нм, с сохранением изобестической точки при длине волны 295 нм.

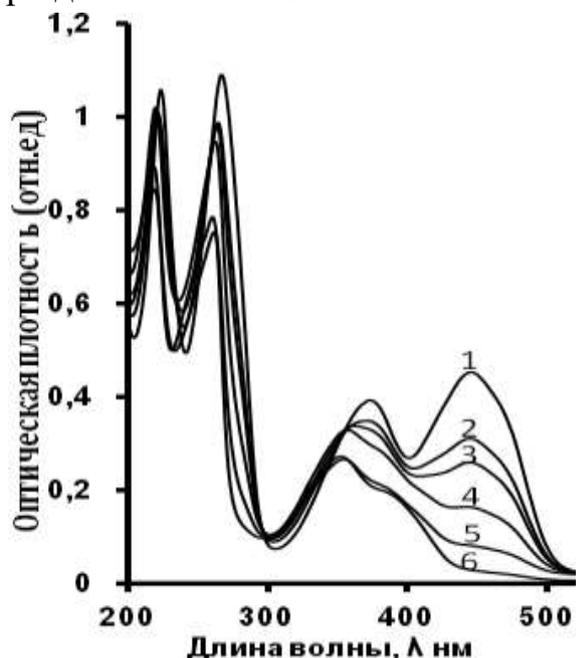


Рис.6. Спектры поглощения водного раствора рибофлавина $C=5 \cdot 10^{-5}$ М в зависимости от времени облучения: 0(1), 30(2), 60(3), 90(4), 120(5), 150(6) мин.

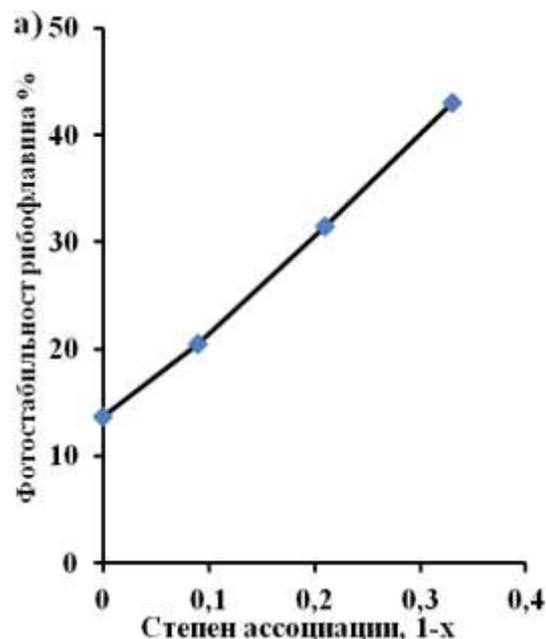


Рис.7. Фотостабильность молекул рибофлавина в зависимости от степени ассоциации в растворах.

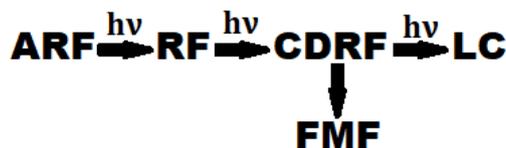
Из анализа экспериментальных результатов установлено что, наблюдаемая новая полоса 350 нм относится к мономерным молекулам люмихрома. Идентичность процесса фотолиза мономерных и ассоциированных растворов рибофлавина свидетельствует о том, что определённая энергия облучения расходуется на разложение ассоциатов рибофлавина с возникновением их мономерных молекул. Дальнейшее облучение приводит к деструкции мономерных молекул витаминного препарата с образованием люмихрома (LC). Данная реакция фотолиза происходит по следующей схеме:

$ARF \xrightarrow{h\nu} RF \xrightarrow{h\nu} LC$, где ARF– ассоциаты рибофлавина, RF–мономерные молекулы витамина B₂, LC–продукт фотолиза-люмихрома.

Проведенными экспериментальными результатами по фотолизу водного раствора рибофлавина с концентрацией $5 \cdot 10^{-5}$ М показали, что наблюдается фотостабильность раствора примерно 12% по отношению к концентрации 10^{-5} М исследуемого соединения. В целях подробного исследования процесса фотостабильности витаминного препарата в зависимости от степени

ассоциации раствора были приведены эксперименты водного раствора рибофлавина с концентрацией $C=10^{-4}$, $4 \cdot 10^{-4}$, $2 \cdot 10^{-3}$ М такая зависимость приведена на рис 7. Как видно из рис.7 зависимость фотостабильности водных растворов рибофлавина от их степени ассоциации имеет линейчатый характер.

Облучение растворов с концентрациями $C=4 \cdot 10^{-4}$ М и $C=2 \cdot 10^{-3}$ М приводит к деформации электронных спектров, согласно которому установлено, что фотолиз сопровождается разложением ассоциатов на мономерные молекулы, с образованием промежуточного продукта циклогидрорибофлавина (CDRF) или формильметильфлавина (FMF) и конечного продукта люмихрома (LC) по следующей схеме:



Четвёртая глава диссертации посвящена исследованию самособранных молекул рибофлавина и тартразина. Эти исследования не только позволили определить структуры ассоциатов, но они также определили условия получения соответствующих частиц на горизонтальной стеклянной подложке. Проведёнными экспериментальными результатами концентрационной зависимости спектра поглощения рибофлавина в этаноле установлено, что при концентрации $5 \cdot 10^{-6}$ М относится к поглощательной способности мономерных молекул. Увеличение концентрации раствора в интервале $5 \cdot 10^{-5} \div 5 \cdot 10^{-3}$ М приводит к гипохромному эффекту с увеличением степени ассоциации в интервале $1-x=0,1 \div 0,41$ меняются в интервале соответственно. Такая деформация спектров поглощения отнесена к проявлению и развитию процесса ассоциации молекул исследуемого соединения в этаноле.

Развитие процесса ассоциации рибофлавина в этанольных растворах подтверждено температурными исследованиями спектра поглощения. На основе этого определена энергия связи ассоциатов в этанольных растворах, что составляет ≈ 5 ккал/мол, которая относится к энергии водородной связи.

С учётом того, что молекула рибофлавина состоит из флавоновой (головная) и рибитольной (хвостовая) частей, его самоассоциация происходит в системе голова-хвост с образованием водородной связи. Квантово-химическими расчётами установлено, что структура димеров и более сложных ассоциатов витамина В₂ обладают игольчатообразной структурой (рис. 8).

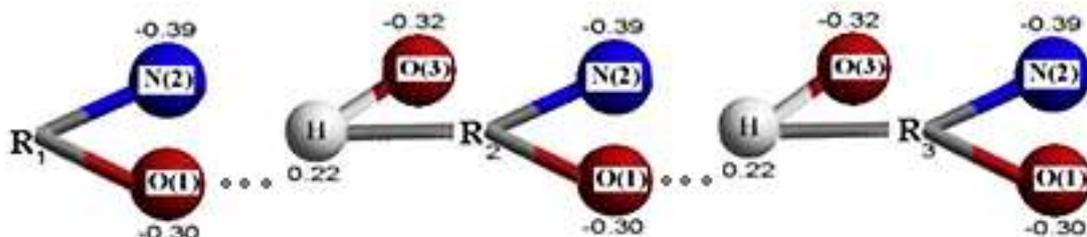


Рис. 8. Схема образование водородной связи между флавоновой и рибитольной частями молекул рибофлавина по структуре голова-хвост.

С учётом изложенного, можно считать, что структура самособранных молекул димеров и более сложных ассоциатов исследуемого соединения имеет игольчатообразную форму.

При этом установлено что, структура самоассоциатов витаминного препарата, как в начальной стадии, так и более сложных ассоциатов соответствует игольчатообразную структуру, что подтверждается микроскопическими съёмками самособранных молекул спиртовых растворов (рис. 9).

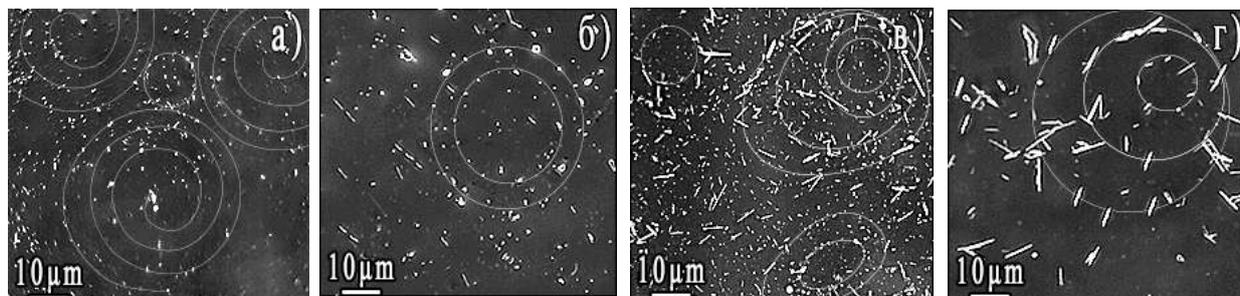


Рис. 9. Микроскопические съёмки самособранных частиц рибофлавина полученных на стеклянный подложке в зависимости от степени ассоциации раствора $1-x=0,16$ ($10^{-4}M$) (а); $1-x=0,22$ ($5 \cdot 10^{-4}M$) (б); $1-x=0,28$ ($10^{-3}M$) (в); $1-x=0,41$ ($5 \cdot 10^{-3}M$) (г)

Результаты микроскопических съёмок показывают, что по мере увеличения степени ассоциации, число частиц в микросъёмках самособранных молекул, имеющих игольчатообразную структуру, растёт от 5-7% до 80-90%. Геометрические параметры этих частиц находятся в интервале от 0,8 μm до 12 μm . Общая структура самособранных молекул имеет кольцообразную форму. Самособранные молекулы, полученные из коллоидного раствора, содержат крупные игольчатообразные частицы (рис. 9.г).

Структуры самособранных молекул тартразина была получена растворами с различным соотношением бинарной смеси вода+ДМСО при постоянной концентрации $5 \cdot 10^{-5}M$. Выбранные условия для самосборки молекул позволили определить геометрические параметры частиц в зависимости от степени ассоциатов в растворе (рис. 10 а). Как видно из рис. 10 а, изображение микроскопической съёмки самособранных молекул, состоящие из одной центральной структуры, относятся к растворам со степенью ассоциата $1-x=0,16$. При этом геометрические параметры шарообразных частиц находятся в интервале $0,70 \div 1,2$ μm . Исследование растворов со степенями ассоциации находящиеся в интервале $1-x=0,21 \div 0,26$ (рис. 10б и 10в). Из рисунка видно (10б и в), что структура самособранных частиц имеет шарообразную форму, причём их геометрические параметры практические имеют одинаковые значения. Однако, по мере роста степени ассоциации в растворе, который использовался для получения микроскопических изображений, площадь структурных образований растёт. По-видимому, увеличение площади изображения связано с ростом числа

объединенных молекул в виде самособранных молекул, образовавшихся в центральной части микросъёмки. Использование растворов с более высокими степенями ассоциатов ($1-x=0,41$) привели к тому, что структура самособранных частиц приобретает сложное изображение в виде цифры восемь (рис. 10г). Сложные структуры самособранных молекул, по-видимому, связаны с ростом числа объединившихся молекул красителя в виде самособранных частиц.

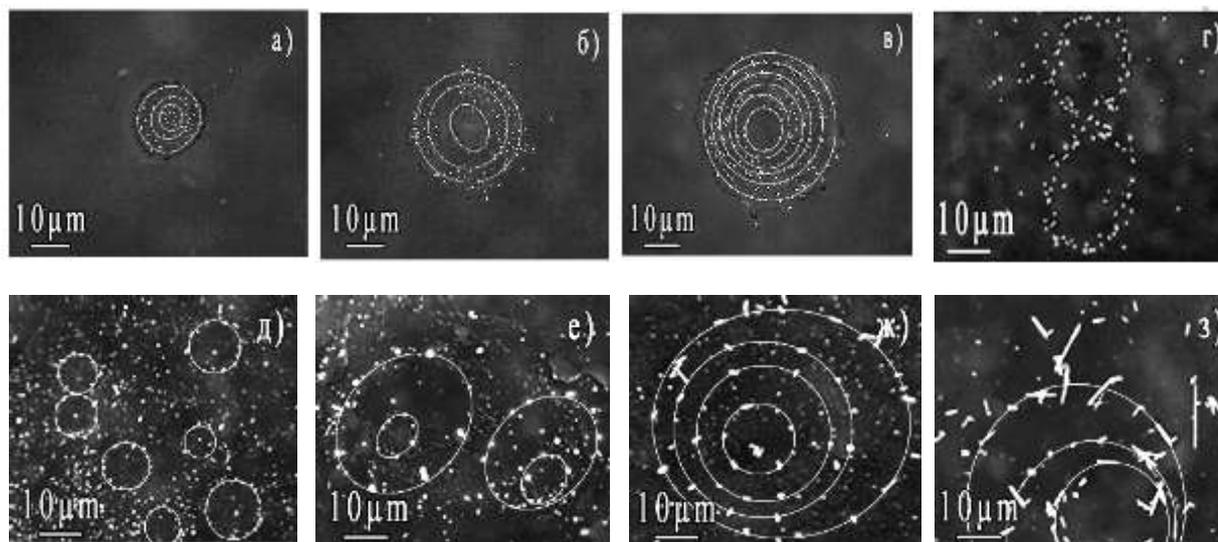


Рис. 10. Микроскопические съёмки самособранных частиц молекул тартразина в зависимости от степени ассоциации, полученные на горизонтальной стеклянной подложке $1-x=0,16$ (а), $1-x=0,21$ (б), $1-x=0,26$ (в), $1-x =0,35$ (г), $1-x =0,55$ (д) , $1-x =0,60$ (е); $1-x =0,76$ (ж), $1-x =0,91$ (з)

Микроскопические съёмки изображения, приведённые на рис. 10а и б, были получены из раствора красителя со степенью ассоциатов ($1-x=0,51-0,67$). Как видно из рис. 10д и 10е, самособранные частицы обладают шарообразной формой с геометрическими параметрами, находящиеся в интервале $0,8-2,0$ μm . При этом, объединённые частицы охватывают всю площадь микроскопического изображения. Второй отличительной чертой этого изображения является то, что число частиц, ориентированных к образованию игольчатообразных форм, растёт. Общий вид микроскопических изображений остаётся кольцеобразным (рис. 10д) и эллипсообразными (рис. 10е).

Из полученного изображения использованного раствора со степенью ассоциации $1-x=0,76$ игольчатообразную структуру превышает число частиц приведённого на рис. 10е, в два раза. В этих случаях число частиц имеющих ориентир к созданию игольчатообразной структуры увеличивается до $\sim 60\%$. Диаметр и длина наблюдаемых частиц окажутся в интервале: $d=0,20-1,0$ μm и $l=1,0-5,0$ μm соответственно. При этом, общая структура самособранных молекул окажется в кольцеобразной форме.

Изображение микроскопической съёмки частиц из коллоидного раствора со степенью ассоциации $1-x=0,9$ приведено на рис. 10з. Как видно из рис. 10з, геометрические параметры игольчатообразных частиц окажутся в

следующих интервалах: $d=1,0-3,0$ μm и $l=7,0-12,0$ μm соответственно. То есть, геометрические параметры увеличиваются примерно в 2-3 раза. По отношению к параметрам частиц приведенных на рис.10ж. Общий вид изображений иголецатообразных самособранных частиц соответствует спиралеобразной форме.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

По результатам исследования спектроскопии самосборки молекул рибофлавина и тартразина были сделаны следующие выводы:

1. Обнаружено, что процесс самосборки молекул рибофлавина и тартразина сопровождается образованием высококонцентрированного локального объёма в этаноле и в смеси бинарных растворителей: вода+ДМСО, вода+диоксан, этанол+изобутанол, этанол+хлороформ, этанол+ацетон и др. формированием иголецатообразных микрочастиц. Методом Аленцева-Фока и распределением функции Гаусса определены шесть и две индивидуальных скрытых полос поглощения рибофлавина и тартразина соответственно, образующие в процессе самосборки.

2. Установлено, что электронная природа деформации полос в процессе самосборки молекул обусловлена смещением и резонансным расщеплением электронных уровней мономерных молекул и изменением вероятности перехода электронов в поглощении и люминесценции.

3. Квантово-химическими расчётами установлено, что самособранные димеры и более сложные агрегаты молекул рибофлавина имеют ориентацию типа «голова-хвост», т. е. флавоновой части одной молекулы и рибитольной части второй молекулы за счет образования водородной связи между атомами кислорода и водорода имеющие наименьшие стерической препятствие. Для молекул тартразина самосборка формируются за счет диполь-дипольных взаимодействий Ван-дер-Ваальсовых сил.

4. Получены микроскопические изображения самособранных молекул рибофлавина и тартразина. Установлено, что число самособранных частиц и их геометрические параметры имеют линейную зависимость от степени агрегации.

5. Обнаружено, что самособранные молекулы рибофлавина обладают фотостабильностью, которая имеет линейную зависимость от степени агрегации молекул и обусловлена расходом части энергии облучения, для формирования мономерных молекул рибофлавина.

6. Включение в технологический процесс переработки вторичного сырья водного раствора рибофлавина определённой концентрации, способствует получению стабилизированной готовый продукции с высоким содержанием биологических активных веществ.

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD OF THE SCIENTIFIC DEGREE
DOCTOR OF PHILOSOPHY PhD.03/30.12.2019.FM.02.04
SAMARKAND STATE UNIVERSITY**

BUKHARA INSTITUTE OF ENGINEERING AND TECHNOLOGY

KASIMOVA GUZAL KARIMOVNA

**SELF-ASSEMBLY SPECTROSCOPY OF RIBOFLAVIN AND
TARTRAZINE MOLECULES**

01.04.05 – Optics

ABSTRACT

of dissertation of the doctor of philosophy (PhD) on the physical and mathematical sciences

Bukhara – 2021

The theme of dissertation of doctor of philosophy (PhD) on physical and mathematical sciences was registered at the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan under number B2019.2.PhD/FM358 B2021.1.PhD/FM358 B2021.3.PhD/FM358.

The dissertation was completed at the Bukhara Institute of Engineering and Technology.
The abstract of the dissertation is posted in three languages (uzbek, russian, english (resume)) on the website (www.samdu.uz) and the “Ziyonet” information and educational portal (www.ziyonet.uz).

Scientific supervisor: **Astanov Solix Khusenovich**
Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor

Official opponents: **Muradov Gulomkhon**
Candidate of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor

Rakhmatullaev Ilyos Arzimurodovich
Doctor of Physical and Mathematical Sciences,
Associate Professor

Leading organization: **Karshi State University**

Dissertation defense will be held on « ____ » _____ 2021 at ____ at the meeting of Scientific Council number PhD.03/30.12.2019.FM.02.04 at Samarkand State University. (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40; e-mail: rektor@samdu.uz. cabinet 63, ground floor, the department of Physics, Samarkand State University).

Dissertation is possible to review in Information Resource Centre at Samarkand State University (is registered № ____) (Address: University Boulevard 15, Samarkand, 140104, Uzbekistan, Ph.: (99866) 239-13-87, 239-11-40; fax: (99866) 239-11-40.

Abstract of dissertation sent out on « ____ » _____ 2021 year
(Mailing report № _____ on « ____ » _____ 2021 year)

M.Kh.Ashurov
Chairman of scientific council
on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, academician

R.M.Rajabov
Scientific secretary of scientific council
on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics, docent

D.I.Semenov
Chairman of scientific seminar under scientific
council on award of scientific degrees,
DSc in physics and mathematics

INTRODUCTION (annotation of PhD dissertation)

The aim of the research. microscopic and spectral-optical research methods are used to identify the conditions for the formation of self-assembled riboflavin and tartrazine molecules depending on the nature of the solvents used, concentration and temperature, to form the process of self-assembly of molecules and determine their structure, geometric parameters and photostability depending on the degree of association of self-assembled molecules.

The objects of the research riboflavin, its photolysis products and tartrazine. Distilled water, chloroform, dioxane, dimethyl sulfoxide, acetone, ethanol and isobutanol were used as solvents.

The scientific novelty of the research is as follows:

for riboflavin, self-assembly of the molecule is carried out by orientation of the flavone part of one molecule with the ribitol part of the second vitamin B2 molecule with their further combination by the H-bond with the formation of needle-shaped microparticles;

self-assembled molecules of riboflavin and tartrazine have six and two hidden absorption bands, respectively, and it was also found that the photostability of riboflavin molecules is linear, depending on the degree of association of the solution;

it was determined that the geometric parameters of acicular particles in the structure of self-assembled molecules of riboflavin and tartrazine depend on the degree of association in solutions, the general appearance of these combined particles is concentric rings in the form of an ellipsoid;

it was shown by ab initio calculations that the redistribution of the charge on the atoms of riboflavin and tartrazine leads to an increase in the value of their dipole moment, which contributes to the appearance of intermolecular dipole-dipole interaction of van der Waals forces.

Implementation of research results.

The studied patterns of changes in the spectral-luminescent characteristics of riboflavin and tartrazine solutions with changes in the temperature and concentration of the dissolved substance, the nature of the solvent, methods for identifying the self-assembly of riboflavin and tartrazine molecules were used in the implementation of the scientific project OT-F2-30 - "Photonics of organic dye complexes with biological objects and metal nanoparticles" (implementation act from Samarkand State University dated December 2, 2020). The application of scientific results makes it possible to determine the physical characteristics of the absorption and fluorescence spectra during the transition from water to water-ethanol, water-dimethylformamide and water-dioxane solutions of rhodamine and styrylcyanine dyes, as well as in the study of dye-protein complexes.

- changes in the structure of molecules in the process of self-assembly, depending on the degree of association, are due to the fact that the self-assembly of a riboflavin molecule was used as a binder in order to form a homogeneous mass arising from the interaction of secondary raw materials with the water-milk phase, and an increase in the stability time of the obtained masses that were used in the

implementation of the scientific project OT-A9-5 "Creation of new developments based on resource-saving technology for the production of functional food products using secondary raw materials for grain processing" (implementation act of the Bukhara Institute of Engineering and Technology dated August 25, 2021 No. 87-10/1770). The application of these scientific results by the introduction of aqueous solutions of riboflavin and tartrazine in the process of the technological regime of processing secondary raw materials-grain pursues the goal of increasing the biological activity of oil-emulsion products, prolonging the shelf life of oilseed-flour composites and preserving the natural color of finished oilseed products.

The main application of the research results was represented by the results obtained by combining more than 50 experimental and model studies published in high-impact journals, as well as in review articles, according to the Web of Science scientific database:

1. G. K. Kasimov, S. Kh. Astanov, E. N. Kurtaliev, N. N. Nizomov. Structure of self-assembled riboflavin molecules in solutions. *Journal of molecular structure*. 1185.2019. p. 107-111 links to 2 foreign scientific journals: 1) C.Char, C.Padilla, V.Campos, M.Pepczynska, P.D.Calderón, J.Enrione. Characterization and Testing of a Novel Sprayable Crosslinked Edible Coating Based on Salmon Gelatin, *Coatings* 2019, 9(10), 595 P.1-17; 2) V.Vendramin, S.Primerano, G.Leserri, G.Paniccia, S.Vincenzi. Riboflavin removal by commercial bentonites and charcoals in white and red wines, *talian Journal of Food Science*, 2021; 33 (2): 13-23.

2. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Sharipov M.Z. Optical systems for removal of polarization spectra.*Eurasian Physical Technical Journal*, 2019, Vol.16, No. 2 (32), Pp. 83-88, article in foreign scientific journals and books: R.Khamitov, M Kolchurina, I Kolchurina. Designing of a Laboratory Complex for Spectral Analysis of Measurement Data of Different Materials. *Progress in Material Science and Engineering*. 2021. P. 171.

Hidden absorption bands of associates were found in an aqueous solution of riboflavin and tartrazine, which were used to create conditions for the stability of flavone, antacian and carotenoid contained in food products in the form of fruit pastilles (technical instructions of TI-201122919-09-2020 from 26.09.2020). Passport characteristics of riboflavin associates can be used in pharmaceuticals to create medicines based on B2.

Approbation of the research results. The results of the dissertation were presented and discussed at 4 international and 4 republican scientific conferences.

Publication of the research results. In total, 25 scientific papers have been published on the research topic, 2 monographs, including 17 scientific articles (8 republican and 9 foreign journals) from the list of scientific journals recommended for publication of the main scientific results on the dissertation of the higher attestation commission of the Republic of Uzbekistan.

Structure and scope of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, and a list of references. The volume of the dissertation is 134 pages, including 35 figures and 4 tables.

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАР РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; I part)

1. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Шарипов М.З. “Теоретические и экспериментальные аспекты применения поляризационных спектров при изучении фотоники самоагрегированных молекул” // Монография. Тошкент: Мухаррир нашриёти. 2019. 172 бет.

2. Астанов С.Х., Касимова Г.К. Оптические кюветы и системы для изучения фотоники анизотропных молекул // Монография. LAP LAMBERT Academic Publishing. 2020.С. 130.

3. Kasimova G.K., Astanov S.Kh., Kurtaliev E.N., Nizomov N.N. Structure of self-assembled riboflavin molecules in solutions // Journal of Molecular structure. 2019. Volume 1185. P.107-111 (№3 Scopus IF=3,196. doi.org/10.1016/j.molstruc. 2019.02.084).

4. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Kurtaliev E.N., Nizomov N.N., Jumabaev A. Electronic nature and structure of aggregates of riboflavin molecules // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2021. 119177 (№3 Scopus IF=4,098 doi.org/10.1016/j.saa.2020.119177).

5. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Sharipov M.Z. Hypochromic effect in riboflavin solutions // Eurasian Physical Technical Journal. 2019. Volume 16, No.1(31) (№3 Scopus IF=3: doi 10.31489/2019No1/12-17).

6. Astanov S.Kh., Kasimova G.K., Sharipov M.Z. Optical systems for removal of polarization spectra // Eurasian Physical Technical Journal. 2019. Volume.16, No.2(32). (№3 Scopus IF=0.7: doi 10.31489/2019No2/83-88).

7. Astanov S.H., Kasimova G.K., Abrorov A., Fayziyeva B.K. Self-assembly of tartrazine molecules in water-dimethylsulphoxide solution // IOP Conf. Series: Earth and Environmental Science. 2021. Volume 848. 012095 (№3 Scopus Q=3 doi:10.1088/1755-1315/848/1/012095).

8. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Шарипов М.З., Шамсиев Р.Х., Ёкубов М.Э. Природа гипохромного эффекта в растворах рибофлавина и некоторых пищевых красителей // Журнал Доклады Академии Наук. 2018. №6. С.8-13. (01.00.00; №5)

9. Astanov S.H., Kasimova G.K. The nature of electronic spectra of self-combined riboflavin molecules // Eurasian Physical Technical Journal. 2018. Volume 15. No.1(29). P.66-72 (№2 IF=0.7, https://phtj.ksu.kz/files_phtj/2018.07/11.pdf).

10. Касимова Г.К. Оптические системы для снятия поляризационных спектров самособранных молекул // Вухоро Davlat Universiteti Ilmiy Axboroti. 2020. Т. 77. №1. 30-37 бет (01.00.00; №3).

11. Астанов С.Х., Касимова Г.К. Электронные спектры самособранных молекул рибофлавина // Вухоро Davlat Universiteti Ilmiy Axboroti 2020. Т.78. №2. 22-28 бет (01.00.00; №3).

12. Astanov S.H., Kasimova G.K., Tilloyev L.I. Optical system and flow cell for studying the polarization spectra of self-assembled molecules // Buxoro Davlat Universiteti Ilmiy Axboroti. 2021. T.77. №1. 20-28 бет (01.00.00; №3).

13. Астанов С.Х., Турдиев М.Р., Касимова Г.К., Абдукадиров А., Разоков Б.М., Рузиева Н.З. Некоторые условия стабилизации водных растворов и порошков рибофлавина // Развитие науки и технологий. Научно-технический журнал. 2017. №1. С.74-75 (05.00.00; №24).

14. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Турдиев М.Р. Спектроскопические проявления самосборки пищевого красителя тартразина // Развитие науки и технологий. Научно-технический журнал. 2017. №3. С.93-99 (05.00.00; №24).

15. Комилов О.С., Астанов С.Х., Турдиев М.Р., Касимова Г.К., Мўминов А.Р. Структура самособранных молекул рибофлавина // Развитие науки и технологий. Научно-технический журнал. 2018. №1. С.61-67 (05.00.00; №24)

16. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Ахророва М.И., Жураева Л.И. Спектрально-оптические характеристики 3-рамноглюкозил -3, 5, 7, 3', 4' - пентаоксифлавона и рибофлавина // Развитие науки и технологий. Научно – технический журнал. 2019. №5. С.87-90 (05.00.00; №24).

17. Астанов С.Х., Касимова Г.К. Зеркала и призмы применяемых для снятия поляризационных спектров // Развитие науки и технологий. Научно – технический журнал. 2020. №2. С.170-176 (05.00.00; №24).

II бўлим (II часть; II part)

18. Касимова Г.К. Самосборки молекул тартразина // “Фан ва таълим ютуқлари инсон манфаатлари йўлида” мавзусида педагог ходимлар, илмий-тадқиқотчилар ва талабалар илмий-амалий анжумани материаллари. Бухоро. 2017. 398-399 б.

19. Касимова Г.К., М.Ж.Яхёев. Самосборки молекул рибофлавина // “Фан ва таълим ютуқлари инсон манфаатлари йўлида” мавзусида педагог ходимлар, илмий-тадқиқотчилар ва талабалар илмий-амалий анжумани материаллари. Бухоро. 2017. 396-397 б.

20. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Турдиев М.Р., Комилов О.С., Низомов Н. Спектроскопические исследования термодеструкции рибофлавина // Материалы международной конференции “Актуальные проблемы современной физики” Посвященной 80-летию памяти Заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, доктора физ.-матем.н., проф. Нарзиева Бозора Нарзиевича. 18 апреля. 2018 года. С.136-138.

21. Астанов С.Х., Касимова Г.К. Рибофлавин молекулаларининг ўз-ўзидан агрегациясини ҳосил бўлишида ютилиш спектрларидаги деформациясини электрон табиати // «Олий таълим инновацион фаолияти ва фаол тадбиркорлик интеграцияси ривожланишининг муаммолари» мавзусида профессор-ўқитувчилар, илмий изланувчилар, магистрлар ва талабаларнинг илмий-амалий анжумани материаллари I – том, Бухоро. 2019. 489-490 б.

22. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Ёқубов М.. Самоагрегация молекул рибофлавина в спиртовых растворах // “Конденсирланган ҳолатлар

физикасининг замонавий муаммолари” мавзусидаги II - Республика илмий-амалий анжумани тезислар тўплами. Бухоро. 2019. 8-9 б.

23. Астанов С.Х., Касимова Г.К., Ахророва М.И., Ёкубов М.Э. Самосборка молекул рибофлавина в бинарных растворителях // 11th International Conference «Chaos and structures in nonlinear systems. Theory and experiment». November, 22-23, 2019. Kazakhstan, Karaganda. P. 48-54.

24. Касимова Г.К., Ахророва М.И., Вахобова М.А. Электронная природа самоагрегированных молекул тартразина // БухИТИ «Инновационные решения инженерно-технологических проблем современного производства» Халқаро илмий анжуман материаллари, 2 том. Бухара. 14-16 ноября. 2019. 94-97 бет.

25. Астанов С.Х., Касимов Г.К., Курталиев Э.Н., Низомов Н.Н.. Изучение фотостабильности рибофлавина. БухИТИ «Иновационные пути решения актуальных проблем развития пищевой и нефтегазохимической промышленности», Международной научно-практической конференции. Бухара. 12-14 ноябрь 2020. С.161-165.

Авореферат Самарқанд Давлат университетининг “СамДУ илмий тадқиқотлар ахборотномаси”
журнали таҳририятида таҳрирдан ўтказилиб, ўзбек, рус ва инглиз тилларидаги матнлари ўзаро
мувофиқлаштирилди (18.11.2021).

2021 йил 19 ноябрда босишга рухсат этилди:
Офсет босма қоғози. Қоғоз бичими 60×84_{1/16}.
“Times” гарнитураси. Офсет босма усули.
Ҳисоб-нашриёт т.: 3,0. Шартли б.т. 2,3.
Адади 100 нусха. Буюртма №19/11.

СамДЧТИ нашр-матбаа марказида чоп этилди.
Манзил: Самарқанд ш, Бўстонсарой кўчаси, 93