

**TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJA BERUVCHI PhD.03/30.04.2022.K.78.05 RAQAMLI
ILMIY KENGASH ASOSIDAGI BIR MARTALIK ILMIY KENGASH**

TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI

AHATOV ALISHER ASHUR O'G'LI

**BA'ZI d-METALLARNING 1,2-DIAMINOBENZOL VA 2,4-
DIGIDROKSIBENZOY KISLOTA BILAN ARALASH LIGANDLI
KOMPLEKS BIRIKMALARI SINTEZI, KRISTALL TUZILISHLARI VA
FIZIK-KIMYOVIY XOSSALARI**

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

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

Termiz – 2025

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

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

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

Ahatov Alisher Ashur o'g'li

Ва'зи d-metallarning 1,2-diaminobenzol va
2,4-digidroksibenzoic kislota bilan aralash
ligandli kompleks birikmalari sintezi, kristall
tuzilishlari va fizik-kimyoviy xossalari3

Ахатов Алишер Ашур угли

Синтез, кристаллическая структура и физико-химические
свойства комплексных соединений некоторых d-металлов
с 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксибензойной
кислотой со смешанными лигандами.....21

Ahatov Alisher Ashur ugli

Synthesis, crystal structures and physicochemical
properties of complex compounds of some
d-metals with 1,2-diaminobenzene and
2,4-dihydroxybenzoic acid with mixed ligands.....41

E'lon qilingan ishlar ro'uxati

Список опубликованных работ
List of published works.....44

**TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJA BERUVCHI PhD.03/30.04.2022.K.78.05 RAQAMLI
ILMIY KENGASH ASOSIDAGI BIR MARTALIK ILMIY KENGASH**

TERMIZ DAVLAT UNIVERSITETI

AHATOV ALISHER ASHUR O'G'LI

**BA'ZI d-METALLARNING 1,2-DIAMINOBENZOL VA 2,4-
DIGIDROKSIBENZOY KISLOTA BILAN ARALASH LIGANDLI
KOMPLEKS BIRIKMALARI SINTEZI, KRISTALL TUZILISHLARI VA
FIZIK-KIMYOVIY XOSSALARI**

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

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

Termiz – 2025

Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2024.3.PhD/K818 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya Termiz davlat universitetida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) ilmiy kengash veb-sahifasida (www.tersu.uz) va «ZiyoNet» axborot ta'lim portalida (www.ziynet.uz) joylashtirilgan.

Ilmiy rahbarlar:

Turayev Xaylt Xudaynazarovich
kimyo fanlari doktori, professor

Ashurov Jamshid Mengnorovich
kimyo fanlari doktori, professor

Rasmiy opponentlar:

Ro'zimuradov Olim Narbekovich
Kimyo fanlari doktori, professor

Razzoqova Surayyo Razzoqovna
Kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori, dotsent

Yetakchi tashkilot:

Samarqand davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Termiz davlat universiteti huzuridagi ilmiy daraja beruvchi PhD) 03/30.04.2022.K.78.05 raqamli Ilmiy kengash asosidagi bir martalik ilmiy kengashning 2025-yil «11» 02 soat 14⁰⁰ dagi majlisida bo'lib o'tadi (Manzil: 190111, Termiz shahri, Barkamol avlod ko'chasi, 43-uy. Tel.: (+99876) 221-74-55, faks: (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz).

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

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil « 1 » 02 kuni tarqatildi.

(2025-yil « 1 » 02 dagi 1 raqamli reyestr bayonnomasi).



Z.Z. Yaxshiyeva
Ilmiy daraja beruvchi
bir martalik Ilmiy
kengash raisi, k.f.d., prof.

Y.A. Geldiyev
daraja beruvchi bir martalik
ilmiy kengash kotibi, k.f.d.

O.N. Ro'zimuradov
Ilmiy daraja beruvchi
bir martalik Ilmiy
kengash qoshidagi ilmiy
seminar raisi, k.f.d., prof.

KIRISH

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda dunyoda biofaol ligandlarning d-metallar bilan hosil qilgan kompleks birikmalari asosida olingan preparatlar tibbiyotda turli kasalliklarni davolashda va qishloq xo‘jaligida biostimulyator, fungidsid hamda gerbitsidlar sifatida qo‘llanilmoqda. Shuningdek, so‘ngi yillarda sintez qilinayotgan ayrim kompleks birikmalar saraton hujayralari bilan bog‘lana olishi va ular faoliyatini cheklashi tufayli bunday kompleks birikmalarga bo‘lgan qiziqish yanada ortmoqda. Shu boisdan yuqori biologik faollikka ega bo‘lgan kompleks birikmalar sintez qilish, ularning tarkibi, tuzilishi va xossalarini aniqlash hamda ular asosida tibbiyot va qishloq xo‘jaligi uchun zarur preparatlar olish muhim ahamiyat kasb etadi.

Ayni vaqtda, jahonning yetakchi ilmiy laboratoriyalarida kompleks birikmalarning tarkibi, kristall tuzilishi, fizik-kimyoviy va biologik xossalarini aniqlash bo‘yicha turli tadqiqotlar olib borilmoqda. Bu borada, ba‘zi d-metallarning 1,2-diaminobenzol (OPD) va 2,4-digidroksibenzoy kislota (2,4-DBA) bilan hosil qilgan kompleks birikmalarini sintez qilishning yangi usullarini, tarkibini, tuzilishini, metall va ligand tabiatini, koordinatsiyalanish mexanizmlarini, kvant-kimyoviy va fizik-kimyoviy xossalarini hamda biologik faolliklarini aniqlashga alohida e‘tibor qaratilmoqda.

Respublikamizda kimyo sanoatining yangi turdagi materiallarini ishlab chiqarish yo‘nalishida qator natijalarga erishilmoqda. Shu jumladan mahalliy bozorni import o‘rnini bosuvchi reagentlar bilan ta‘minlashda keng ko‘lamli ishlar amalga oshirilmoqda. Mamlakatimizda innovatsion texnologiyalarni tadbiq etish orqali sanoat obyektlarini yuritishning ilmiy asoslangan tizimi hamda atrof-muhitni muhofaza qilishning chora-tadbirlarini amalga oshirishga katta e‘tibor berilmoqda. Yangi O‘zbekistonning 2022-2026-yillardagi taraqqiyot strategiyasida¹ iqtisodiyotni rivojlantirishning ustuvor yo‘nalishlari belgilangan va “mahalliy xomashyo resurslarini chuqur qayta ishlash asosida yuqori qo‘shimcha qiymatli tayyor mahsulot ishlab chiqarishni yanada jadallashtirish, sifat jihatdan yangi mahsulot va texnologiya turlarini o‘zlashtirish...” bo‘yicha muhim vazifalar belgilab berilgan. Bu borada, iqtisodiyotimizning yetakchi tarmoqlaridan biri bo‘lgan kimyo sanoatini rivojlantirishda biologik faolligi yuqori bo‘lgan kompleks birikmalar sintez qilish va tadqiq etishga keng e‘tibor qaratilmoqda.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son “2022-2026-yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi Farmoni va 2020-yil 12-avgustdagi PQ-4805-son “Kimyo va biologiya yo‘nalishlarida uzluksiz ta‘lim sifatini va ilm-fan natijadorligini oshirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi, 2021-yil 13-fevraldagi PQ-4992-son “Kimyo sanoati korxonalarini yanada isloh qilish va moliyaviy sog‘lomlashtirish, yuqori qo‘shilgan qiymatli kimyoviy mahsulotlar ishlab chiqarishni rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi Qarorlari hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa

¹ O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-sonli “2022-2026 yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi Farmoni

me'yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti natijalari muayyan darajada xizmat qiladi.

Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo'nalishlariga mosligi. Ushbu tadqiqot ishi Respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining VII. "Kimyo, kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar" ustuvor yo'nalishlariga muvofiq bajarilgan.

Muommoning o'rganilganlik darajasi. Tarkibida bir yoki bir nechta aminoguruh hamda karboksil guruh saqlagan halqali tuzilishga ega bo'lgan ligandlarning kompleks birikmalari sintezi, tuzilishi, biologik faolligi va fizik-kimyoviy xossalarni o'rganish dunyoning turli ilmiy laboratoriyalarida amalga oshirilgan. Jumladan, xorijda S. Supriya, K. Samar, S. Wang, R. Kockerbauer, P. Bednarski, G.A. Renovitch, W.A.Baker, I.M.Khan kabi olimlar 1,2-diaminobenzol (OPD) va 2,4-digidroksibenzoy (2,4-DBA) kislota hamda ular hosilalarining metallar bilan kompleks birikmalarini sintez qilish yuzasidan bir qator tadqiqot ishlarini amalga oshirishgan.

1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislolaning monodentatli, bidentatli, bir va ko'p yadroli komplekslari sintez qilingan va ularning kristall tuzilishlarini rentgen tuzilish tahlil (RTT) usulida aniqlangan. Kembridj kristallografik ma'lumotlar bazasi (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2024) ma'lumotlariga ko'ra 1,2-diaminobenzol va uning hosilalariga oid 90 dan ortiq hamda 2,4-digidroksibenzoy kislolaning 40 dan ortiq monokristallari sintez qilingan va ularning tuzilishlari aniqlangan.

Mamlakatimizda ham kompleks birikmalarni sintez qilish, ularning tuzilishlari, xossalari hamda amaliyotga tadbiqu bo'yicha akademiklar N.A.Parpiyev, B.T.Ibragimov, professorlardan X.T.Sharipov, X.X.Xakimov, O.F.Xodjayeov, A.A.Shabilolov, T.A.Azizov, X.X.Turayev, B.B.Umarov, Sh.A.Kadirova, Sh.Sh.Daminova, Z.Ch.Kadirova, J.M.Ashurov, A.B.Ibragimov va Sh.A.Kasimovlar tomonidan bir qator tadqiqot ishlari amalga oshirilmogda.

Shuningdek adabiyot tahlili ma'lumotlariga ko'ra 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota asosida kompleks birikmalarning sintezi bo'yicha bir qator tadqiqotlar olib borilganligiga qaramasdan, ularning tuzilishlari va xossalari yetarlicha o'rganilmagan.

Dissertatsiya tadqiqotining dissertatsiya bajarilgan oliy ta'lim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlarini rejalari bilan bog'liqligi. Mazkur tadqiqoti ishi Termiz davlat universiteti ilmiy-tadqiqot ishlari rejasiga asosan OT-F7-34-sonli "Kompleks hosil qiluvchi polifunksional ionitlar sintezi va ular yordamida ba'zi d-metallarni ajratishning nazariy asoslari" (2017-2020 yy) mavzusidagi fundamental loyihasi asosida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi ba'zi d-metallarning 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan aralash ligandli kompleks birikmalari sintezi, ularning molekulyar, kristall tuzilishlari va fizik-kimyoviy xossalarni aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) kationlarining 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan aralash ligandli kompleks birikmalarini sintez qilish;

sintez qilingan kompleks birikmalarning kristall tuzilishlari, tarkibi va xossalarini zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari yordamida tahlil qilish;

sintez qilingan kompleks birikmalarning termik turg'unligi va turli erituvchilar ta'siriga barqarorliklarini aniqlash;

sintez qilingan kompleks birikmalarning gidratlanish va solvatlanish jarayonidagi termodinamik parametrlarining o'zgarishini (ΔH , ΔG va ΔS) hisoblash;

sintez qilingan kompleks birikmalarining elektron tuzilishi, reaksiyon qobiliyati, geometrik va energetik parametrlarini, molekulalararo ta'sirlashish energiyalarini kvant-kimyoviy usullar yordamida aniqlash;

sintez qilingan kompleks birikmalarning bakteriya shtammlariga qarshi biofaolligini aniqlash.

Tadqiqotning obyekti sifatida Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) tuzlari, 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota, ular asosida sintez qilingan aralash ligandli kompleks birikmalar, shuningdek sintez qilingan kompleks birikmalarning biofaolligini aniqlash maqsadida *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* va *Candida albicans* kabi bakteriya shtammlari tanlangan.

Tadqiqotning predmeti tarkibida azot, kislorod kabi donor atomlari tutgan 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotalarining ba'zi d-metallari bilan aralash ligandli kompleks birikmalari sintezi, kristall va molekulyar tuzilishi, individualligi, kvant-kimyoviy parametrlari, fizik-kimyoviy hamda biologik xossalarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning usullari. Sintez qilingan kompleks birikmalarning tarkibi, tuzilishi va xossalarini aniqlashda rentgen tuzilish tahlili, UB-spektrofotometrik, IQ- va Raman-spektroskopiya, termik analiz (TG, DTA) usullaridan hamda ORCA 6,00 CrystalExplorer 17.5, Mercury 3.8, Olex 2 va Avagadro kabi hisoblash dasturlaridan foydalanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

ilk marotaba Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) kationlarining 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan aralash ligandli 9 ta yangi kompleks birikmalari sintez qilingan hamda monokristallari olingan;

RTT usuli yordamida sintez qilingan aralash ligandli kompleks birikmalarning tarkibi, tuzilishi, M-L koordinatsiyalanish qonuniyatlari va fazoviy holatlari aniqlangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarning elektron tuzilishi, reaksiyon qobiliyati, energetik va geometrik parametrlari kvant-kimyoviy usullar yordamida aniqlangan. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning turli erituvchilar ta'sirida CPCM (o'tkazuvchilarga o'xshash qutblanuvchan muhit modeli) usuli yordamida termodinamik parametrlarining o'zgarishlari hisoblangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarning molekulararo ta'sirlashish energiyalari va Hirshfeld sirt yuza tahlillari aniqlangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarning termik turg'unligi va Babko usuli yordamida eritmalardagi barqarorlik doimiyliklari hisoblangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarning bakteriya shtammlariga qarshi biologik faollik namoyon qilishi tajriba sinov natijalari asosida aniqlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotalarning Co(II), Ni(II), Zn(II) va Cd(II) kationlari bilan aralash ligandli kompleks birikmalarini sintez qilishning maqbul sharoitlari aniqlangan;

olingan izostrukturali kompleks birikmalar tarkibidagi markaziy atomga bog'langan M1–O2, M1–N1 va M1–N2 bog'lar uzunligi Ni(II)<Zn(II)<Cd(II) qatorida ortishi RTT usuli yordamida aniqlangan;

sintez qilingan aralash ligandli $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalar asosida Escherichia coli, Pseudomonas aeruginosa kabi bakteriya shtammlariga qarshi vosita ishlab chiqilgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi. Ba'zi d-metallar ionlarining 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan sintez qilingan kompleks birikmalarining tarkibi, molekulyar hamda kristall tuzilishlari RTT, IQ-, Raman-spektroskopiya, termik turg'unligi termik tahlil, eritmadagi barqarorliklari UB-spektrofotometriya va boshqa fizik-kimyoviy tahlil usullari yordamida aniqlanganligi, kvant-kimyoviy hisoblash asosida olingan natijalar tajriba natijalariga mos kelishi, shuningdek, olingan kompleks birikmalar dizinfeksiyalovchi vositalar olish uchun amaliyotga joriy etilganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot ishining ilmiy ahamiyati Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II) kationlarining 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotalari bilan aralash ligandli yangi kompleks birikmalarini sintez qilish hamda ularning monokristallarini o'stirishning maqbul sharoitlari topilganligi, sintez qilingan aralash ligandli kompleks birikmalarning tarkibi, kristall tuzilishlari, xossalari RTT, IQ, Raman spektroskopiya, termik analiz usullari yordamida aniqlanganligi va molekulararo tasirlashish energiyalari, energetik va geometrik parametrlari zamonaviy kvant-kimyoviy usullar yordamida hisoblanganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqotning amaliy ahamiyati shundan iboratki, $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1.5\text{-NDK})_2$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$, $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ tarkibli aralash ligandli kompleks birikmalarning kristallografik ma'lumotlari Kembridj kristallografik ma'lumotlar bazasiga kiritilganligi, o'xshash komplekslarni sintez qilishda, ularning tuzilishlarini xarakterlashda, taqdim etilgan ma'lumotlardan foydalanish imkonini, shuningdek 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotalarining ba'zi d-metallari bilan sintez qilingan kompleks birikmalarining bakteriya shtammlariga qarshi bakteriosid xususiyatlarini namoyon qilganligi, dezinfeksiyalovchi vositalarga eritma ko'rinishida qo'shilganda ularning ta'sir samaradorligini oshirishga xizmat qiladi.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi. Ba'zi d-metallarning 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan aralash ligandli kompleks birikmalari sintezi, fizik-kimyoviy xossalari hamda biologik faolligini aniqlash bo'yicha olingan ilmiy natijalar asosida:

[Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂], [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂], [Cd(OPD)₃](1.5-NDK)₂·3H₂O, [Cd(OPD)₂(2,4-DBA)₂], [Cd(OPD)₃]SO₄·H₂O, [C₆H₉N₂]₂⁺(C₁₀H₆S₂)₂²⁻, [Zn(OPD)₂(pNBA)₂] va [Ni(OPD)₂(3-NFA)₂]·H₂O tarkibli aralash ligandli kompleks birikmalarning rentgen tuzilish tahlili ma'lumotlari Kembridj kristallografik ma'lumotlar bazasiga (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrievihg.html> Cambridge Crystallographic Data Center) kiritilgan va 2268254, 2268255, 2346685, 2402204, 2346687, 2268256, 2404717, 2404716 depozit raqamlari olingan. Natijada bazaga kiritilgan ma'lumotlar o'xshash birikmalarni sintez qilishda va tuzilishlarini tavsiflashda taqdim etilgan ma'lumotlardan foydalanish imkonini bergan.

Zn(II) kationining 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota bilan hosil qilgan kompleks birikmasining ([Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂]) 0.03% li eritmasi "NOVA FARM" MCHJ O'zbekiston-Hindiston qo'shma korxonasida dezinfeksiyalovchi vositalar tayyorlashda amaliyotga joriy etilgan ("NOVA FARM" MCHJ ning 2024-yil 25-noyabrdagi 44-son ma'lumotnoma). Natijada bakteriyalardan himoyalovchi yuqori samarali dizenfeksiyalovchi vositalar olish imkonini bergan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Ushbu tadqiqot ishi natijalari 12 ta, jumladan, 7 ta xalqaro va 5 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma'ruza qilingan hamda muhokamadan o'tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e'lon qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo'yicha jami 19 ta ilmiy ish chop etilgan, shulardan O'zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 7 ta ilmiy maqola, jumladan, 4 ta respublika va 3ta xorijiy jurnallarda chop etilgan.

Dissertatsiyaning hajmi va tuzilishi. Dissertatsiya tarkibi kirish, to'rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati va ilovalardan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 118 betni tashkil etadi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

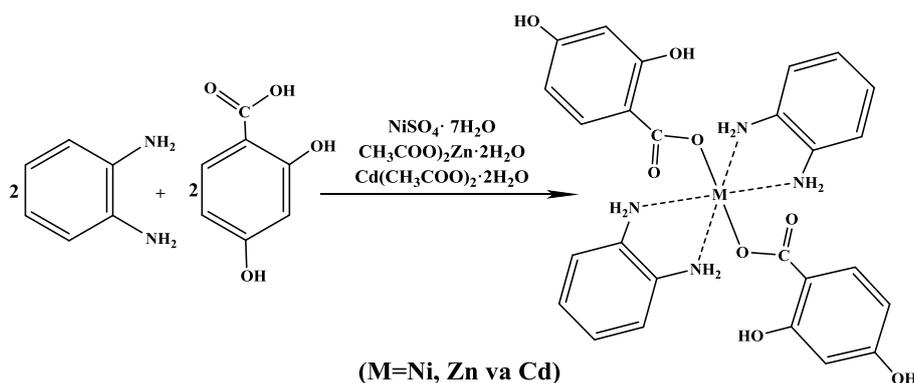
Kirish qismida dissertatsiya ishining dolzarbligi va zaruriyligi asoslab berilgan, tadqiqotning maqsad va vazifalari belgilangan, uning O'zbekiston Respublikasida fan va texnologiyalarni rivojlantirishning ustuvor yo'nalishlariga muvofiqligi ko'rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari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

Dissertatsiyaning "**1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotaning kompleks birikmalari, tuzilishi va xossalari**" deb nomlangan birinchi bobida ligandlarning molekulyar va elektron tuzilishi, xossalari va ishlatilishi bayon qilingan. Shuningdek 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotasi asosida

sintez qilingan kompleks birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari hamda fizik-kimyoviy va biologik xossalari bo'yicha adabiyotlar batafsil tahlil qilingan. Adabiyot tahlillari natijasida tanlab olingan ligandlarning tabiati hamda metall atomlari bilan koordinatsiyalanish qonuniyatlari aniqlangan.

Dissertatsiyaning “**1,2-diaminobenzol va 2,4-digidrosibenzoy kislotaning ba'zi d-metallar bilan aralash ligandli kompleks birikmalari sintezi va tadqiqot usullari**” deb nomlangan ikkinchi bobida olib borilgan tadqiqot doirasida foydalanilgan asboblar, tadqiqot usullari va olingan kompleks birikmalarning sintez jarayoni keltirilgan. Shuningdek olingan kompleks birikmalarning element tahlili, suyuqlanish harorati va ayrim erituvchilarda eruvchanligi keltirilgan.

[Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂, [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] va [Cd(OPD)₂(2,4-DBA)₂] izostrukturali kompleks birikma sintezi. Ushbu izostrukturali kompleks birikmalarni sintez qilishda boshlang'ich tuzlar: nikel (II) sulfat kristallogidratini ($\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$) 0.281gr (1mmol), rux atsetat kristallogidratining ($(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Zn} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) 0.219 g miqdori (1mmol) va kadmiy atsetat kristallogidratidan ($(\text{CH}_3\text{COO})_2\text{Cd} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) 0.266gr (1mmol) dan olindi va suvli eritmaları tayyorlandi. So'ngra esa 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotaning 0.1M eritmaları tayyorlandi hamda aralashtirildi. Hosil qilingan ligandlar aralashmasi Ni(II), Zn(II) va Cd(II) tuzi eritmalariga alohida-alohida qo'shildi. Boshlang'ich tuz va ligandlar 1:2:2 mol nisbatda olindi. Olingan reaksiyon aralashmalar 55-60°C haroratda magnitli aralashtirgichda 2 soat davomida aralashtirildi. So'ngra esa xona haroratigacha sovitildi va o'zgarmas haroratli termostatda (28±1°C) 12 kun saqlandi va sekin bug'latish usulida monokristallar olindi. Reaksiya unumlari $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalari uchun 80%, hamda $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasi uchun esa 75% ni tashkil etdi. Sintez qilingan izostrukturali komplekslarning reaksiya tenglamasi 1-sxemada keltirilgan:

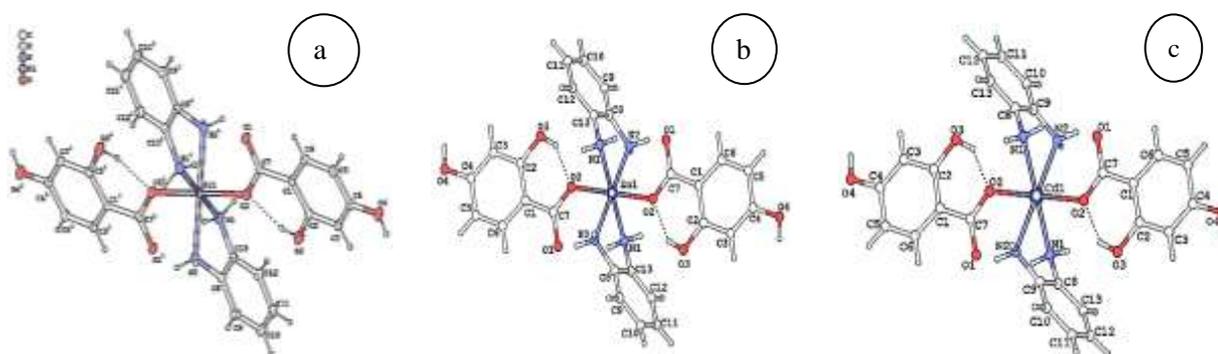


1-sxema. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning hosil bo'lish reaksiya tenglamalari.

Dissertatsiyaning “**1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota asosida olingan kompleks birikmalarning kristall tuzilishlari va fizik-kimyoviy xossalari**” deb nomlangan uchinchi bobida 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotaning Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) kationlari bilan hosil qilgan kompleks birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari, IQ- va Raman-spektroskopiyasi, termik tahlili (TG va DTA), UB-spektrofotometrik analizi hamda

turli erituvchilarda barqarorlik doimiyliklari aniqlangan va tahlil qilingan. Shuningdek sintez qilingan kompleks birikmalarning ayrim bakteriya shtammlariga qarshi biologik faolligi va amaliyotda qo'llash imkoniyatlari keltirilgan.

$[Ni(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$, $[Zn(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ va $[Cd(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari. $[Ni(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$, $[Zn(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ va $[Cd(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari RTT usuli yordamida aniqlandi, tahlil qilindi hamda taqqoslandi. Kompleks birikmalar neytral va simmetrik tuzilishga ega. Inersiya markazida metall atomi (Ni, Zn va Cd) joylashgan va unga 2 molekulasi OPD bidentat holatda hamda 2 molekula 2,4-DBA monodentat holatda birikadi. Sintez qilingan izostrukturali kompleks birikmalarning singoniyasi monoklinik va fazoviy guruhi P21/n. (1-rasm).



1-rasm. Izostrukturali kompleks birikmalarning molekulyar tuzilishi
 $[Ni(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ (a), $[Zn(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ (b) va $[Cd(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ (c).

Molekularlarda MN4 donor-akseptor bog'lari va MO2 ion bog'lari mavjud. Ularning fazoviy tuzilishi oktaedr shaklni hosil qiladi. OPD molekulasi markaziy atomga nisbatan buralishi va sirpanishi natijasida M1-N1 va M1-N2 bog' uzunliklari biroz farq qiladi. Ushbu kompleks birikmalarda metall atomlari koordinatsion soni barqaror holatda 6 ga teng. Olingan izostrukturali kompleks birikmalar tarkibida markaziy atomga bog'langan M1-O2, M1-N1 va M1-N2 bog'larining bog' uzunliklarining Ni(II)<Zn(II)<Cd(II) tartibida uzayganligini kuzatishimiz mumkin. Bu jarayonni markaziy atomning radiusi va elektron tuzilishi orqali tushuntirish mumkin (1-jadval).

1-jadval

Sintez qilingan izostrukturali kompleks birikmalarning ayrim bog' uzunliklari va bog' burchaklari

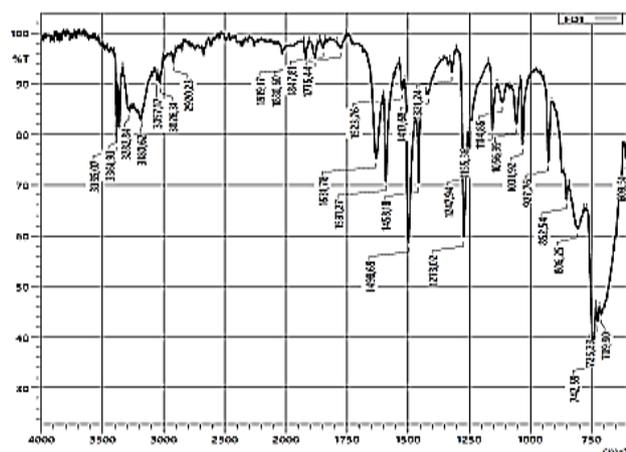
Kimyoviy formulasi	$[Ni(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$	$[Zn(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$	$[Cd(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$
Mr	581.22	587.87	634.91
M1-O2	2.136(2)Å	2.213(2)Å	2.342(3)Å
M1-N1	2.110(3)Å	2.177(2)Å	2.360(4)Å
M1-N2	2.129(2)Å	2.158(3)Å	2.365(4)Å
O2-M1-N1	85.75(10)°	90.78(9)°	88.45(13)°
O2-M1-N2	90.21(9)°	86.78(9)°	91.31(13)°
O2-M1-O2	180.00°	180.00°	180.00°
CCDC-raqami	2346687	2346686	2402204

Sintez qilingan kompleks birikmalarning monokristallari RTT usulida tekshirilganda ularning aksariyat qismi singoniyasi monoklinik tuzilishga ega ekanligi aniqlandi. Ya'ni kristall yacheykadagi kompleks birikmalarning a,b va c o'qi bo'yicha hech qanday cheklanishlar yo'q, ammo a va b hamda b va c burchaklari 90° ekanligi aniqlandi.

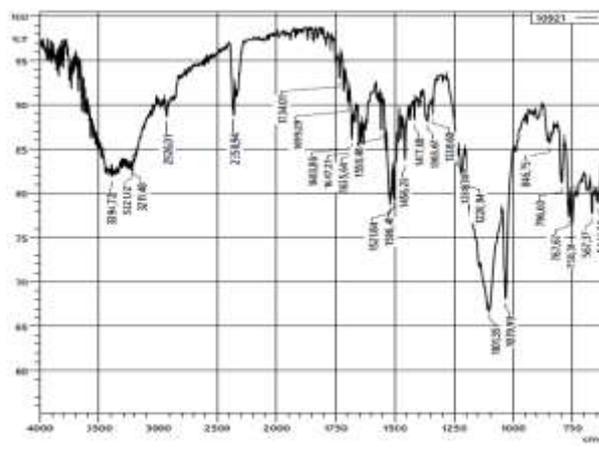
2-jadval

Sintez qilingan kompleks birikmalarning kristallografik ma'lumotlari

Parametr	Kompleks birikmalar					
Formula	[Ni(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Zn(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Cd(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Zn(OPD) ₂ (pNBA) ₂]	[Ni(OPD) ₂ (3-NFA) ₂ ·H ₂ O]	[Co(OPD) ₂ SO ₄] _n
Mr	581.22	587.87	634.92	614.50	713.56	371.12
R-fac.%	3.81	4.21	4.62	3.26	4.18	4.86
Sin-ya	Mon-k	Mon-k	Mon-k	Tri-k	Tri-k	Orto-k
Fazo.gur.	P21/n	P21/n	P21/n	P-1	P-1	<i>Pbcn</i>
a, Å	5.5142(2)	5.5064(6)	5.498(1)	6.455(1)	6.7973(11)	23.39(11)
b, Å	18.875(7)	19.085(19)	19.367(5)	8.038(2)	9.753(15)	9.468(5)
c, Å	11.58(4)	11.54(10)	11.56(2)	12.58(2)	12.40(19)	6.84(3)
α°	90	90	90	95.14(2)	75.24(14)	90
β°	91.29(4)	91.72(9)	92.15(2)	94.38(2)	75.07(14)	90
γ°	90	90	90	98.00(2)	84.12(13)	90
V,	1205.34(8)	1212.8(2)	1230.59(4)	641.4(2)	767.7(2)	1516.2(1)
Z	2	5	5	3	3	7
Dx, g/sm ³	1.601	1.610	1.714	1.589	1.582	1.463
μ(CuKα) mm ¹	1.699	1.941	7.634	1.888	1.640	1.969



2-rasm. OPD ligandining IQ-spektri



3-rasm. [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmasining IQ-spektri

OPD ligandining va [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmaning IQ-spektri 2 va 3-raslarda keltirilgan. [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmasining IQ-spektrida 3221 sm⁻¹ va 3211sm⁻¹ dublet sohasida NH₂-guruhlarining valent tebranishini ko'ramiz. C=O bog'ining valent tebranishini esa spektrning quyi chastotali 1635,64 sm⁻¹ sohasida kuzatildi. Aromatik halqaning halqa tekisligi bo'yicha tebranishini OPD molekulasida 1776 sm⁻¹, 2,4-DBA molekulasida 1653

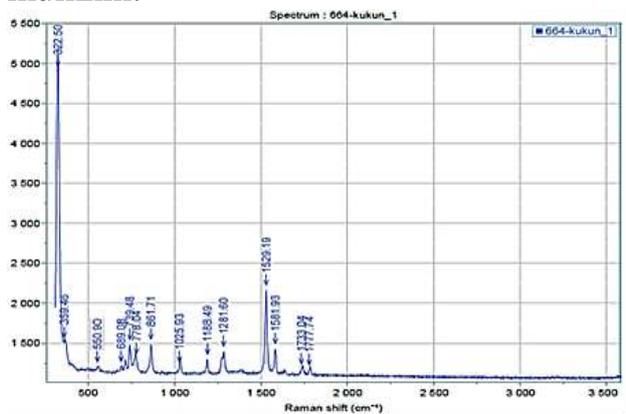
sm^{-1} va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmada esa 1647 sm^{-1} yutilish sohalarida ko‘rish mumkin. Shuningdek spektrda M–N va M–O bog‘larining tebranish chastotalari esa mos ravishda 567 sm^{-1} va 542 sm^{-1} yutilish sohalarida kuzatildi.

3-jadval

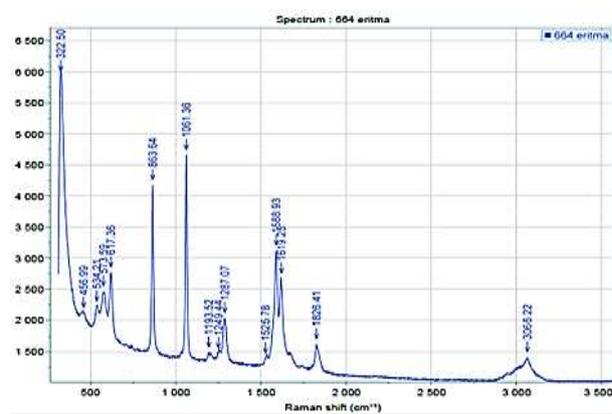
OPD, 2,4-DBA ligandlari va sintez qilingan $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining IQ-spektr tahlili

Modda	$\nu(\text{OH})$	$\nu(\text{NH}_2)$	$\delta(\text{NH}_2)$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{C=O})$	Ar (C_6H_6)	M-N	M-O
OPD	-	3180	1631	1273	-	1776	-	-
2,4-DBA	3379	-	-	-	1623	1653	-	-
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	3394	3211	1558	1101	1635	1647	567	542

Tanlangan ligandlar va olingan kompleks birikmalarning kukun holatidagi Raman-spektrlari va turli xil erituvchilar tasiridagi Raman-spektrlari bilan taqqoslandi. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining kukun holatidagi bog‘lar va funksional guruhlarning Raman-spektri tebranish chastotalari etanol eritmasidagi tebranish chastotalariga yaqin ekanligi kuzatildi. Bu esa ushbu kompleks birikmaning etanoldagi eritmasida barqaror ekanligi haqida xulosa qilish mumkin.



4-rasm. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining kukun holatidagi Raman-spektri



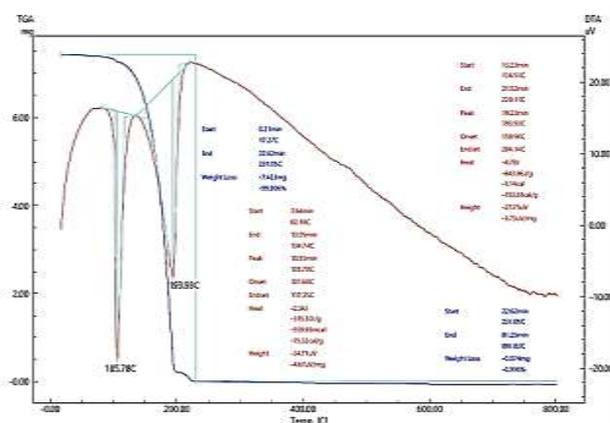
5-rasm. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining etanol eritmasida olingan Raman-spektri

4-jadval

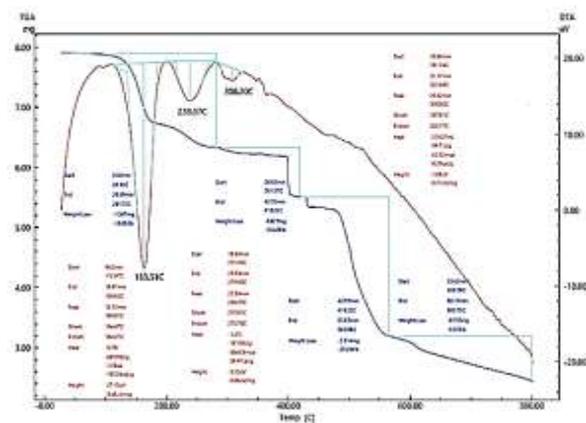
Kukun holatdagi va etanol eritmasidagi OPD hamda $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining Raman-spektri tahlili

Modda	$\delta(\text{OH})$	$\nu(\text{CH})$	$\delta(\text{NH}_2)$	$\delta(\text{C=O})$	Ar (C_6H_6)	M-N	M-O
OPD (kukun)	-	3062	1237	-	1630	-	-
OPD (eritma)	-	3057	1237	-	1630	-	-
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (kukun)	1529	-	1281	1581	1773	459	322
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (eritma)	1588	-	1287	1619	1826	456	322

OPD va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining termik (DTA, TGA) tahlili. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining termik analizi uchun 7.902 mg olinib 800°C haroratgacha olib borildi. Termogravimetrik analizi 4 bosqichda amalga oshdi va 3 ta endotermik effekt kuzatildi. Birinchi endotermik effekt 163.31°C haroratda kompleks birikma tarkibidagi OPD molekulalarining ajralishi hisobiga amalga oshdi. Shuningdek, 238.07°C 2,4-DBA molekulalarining ajralishi hisobiga ikkinchi endotermik effekt sodir bo‘ldi. 308.30°C haroratda esa kompleks birikma tarkibidagi halqa molekulalarining destruksiya uchraishi hisobiga uchinchi endotermik effekt kuzatildi. Jarayon oxirida esa metall oksidlari va organik qoldiqlar qoldi (7-rasm).



6-rasm. OPD ligandining derivatogrammasi



7-rasm. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining derivatogrammasi

5-jadval

$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasining termik tahlili

No	Harorat integrali ($^\circ\text{C}$)	Yo‘qotilgan massa, mg.	Yo‘qotilgan massa, %	Sarflangan energiya ($\mu\text{V} \cdot \text{s}/\text{mg}$)	Sarflangan vaqt (min)
1	26-281 $^\circ\text{C}$	1.567	19.83	19.616	26.69
2	281-419 $^\circ\text{C}$	0.827	10.46	12.493	14.05
3	419-565 $^\circ\text{C}$	2.314	29.284	3.90	14.95
4	565-800 $^\circ\text{C}$	0.755	9.55	19.54	24.54

Dissertatsiya ishining “**1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislota asosida olingan kompleks birikmalarning kvant-kimyoviy hisoblashlari, molekulalararo ta’sirlashish energiyalari va Hirshfeld sirt yuza tahlillari**” deb nomlangan to‘rtinchi bobida olingan kompleks birikmalarning Hirshfeld sirt yuza tahlillari, kvant-kimyoviy xossalari hamda molekulalararo ta’sirlashish energiyalari hisoblandi va tahlil qilindi. Kompleks birikmalarning elektron tuzilishi ORCA 6.00 dasturiy paketi yordamida DFT (Density Functional Theory) usulida aniqlandi va molekula hosil bo‘lish jarayonida elektronlar singlet, triplet va quartet spin holatlarida hisoblandi. Olingan kompleks birikmalar elektron zichliklarining ESP (elektrostatik sirt potensial) sath yuzalari aniqlanib, molekulalarning elektrodonor

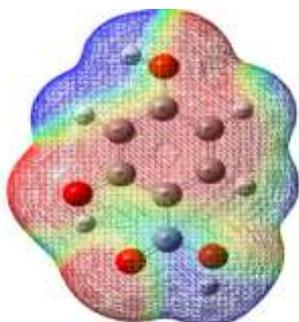
va elektroakseptor qismlari aniqlandi. Kompleks birikmalarning qutbsiz erituvchilardan qutbli erituvchilarga o'tish jarayonida termodinamik parametrlarning o'zgarishi tahlil qilindi.

6-jadval

[Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] va [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] izostrukturali kompleks birikmalarining DFT usulida hisoblangan umumiy energiyalari, kkal/mol

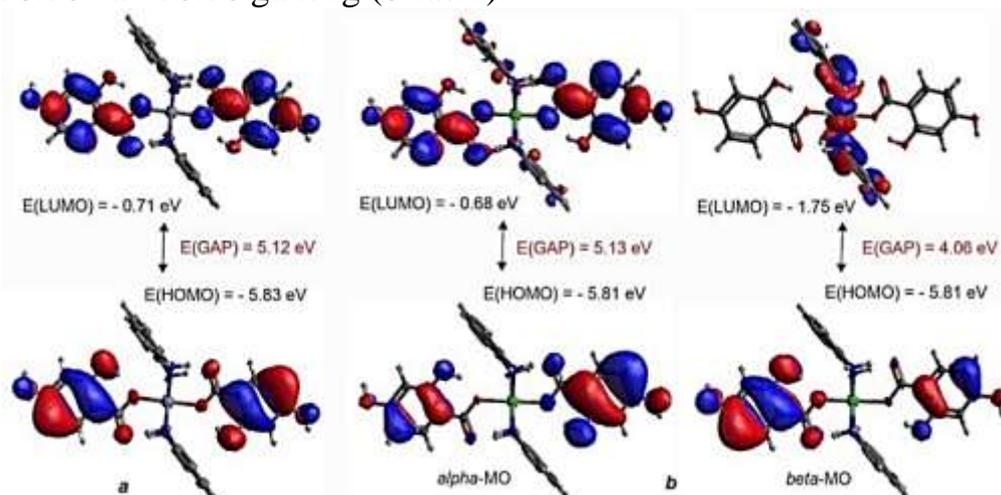
Kompleks	Singlet	Triplet	Quartet
[Zn(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	-2261352.52	-2261316.87	-2261301.09
[Ni(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	-2091389.65	-2091409.72	-2091401.42

Tahlil natijalariga asosan [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleksida Zn(II) kationining tashqi orbitalida juft elektronlar (3d¹⁰) mavjudligi tufayli singlet holatida va [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleksida esa Ni(II) kationida 2 ta toq elektroni mavjudligi tufayli (3d⁸) triplet holatida optimal holatni egallashi aniqlandi.



8-rasm. 2,4-DBA molekulasining molekulyar orbitalarining chegaraviy elektron zichliklari

Tadqiqot ishimizda dastlab boshlang'ich ligand sifatida foydalanilgan 2,4-digidroksibenzoy kislota molekulasining kvant-kimyoviy xossalari aniqlandi. 2,4-DBA molekulasining barqarorligi o'rtacha va reaksiya qobiliyati yuqori ligandlar qatoriga kiradi. Molekulasining YuBMO va QBMO energiyalari mos ravishda 9.26 eV va 5.37 eV ga teng (E(GAP)=3.89 eV). Molekulasining ESP sath yuzalarida nukleofil markazlar karboksil guruhidagi kislorod atomlariga tegishli va elektrofil markazlar esa ikkinchi gidroksil guruhidagi vodorod atomiga tegishli ekanligi aniqlangan. ESP sath minimum va maksimumi mos ravishda -78.76 va +78.76 ga teng (8-rasm).



9-rasm. [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] (a) va [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] (b) kompleks birikmalarining MO 3D modeli hamda YuBMO va QBMO energetik qiymatlari

Shuningdek, [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] va [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] izostrukturali kompleks birikmalarning B3LYP/def2-TZVP usulida ORCA 6.00 dasturiy paketi

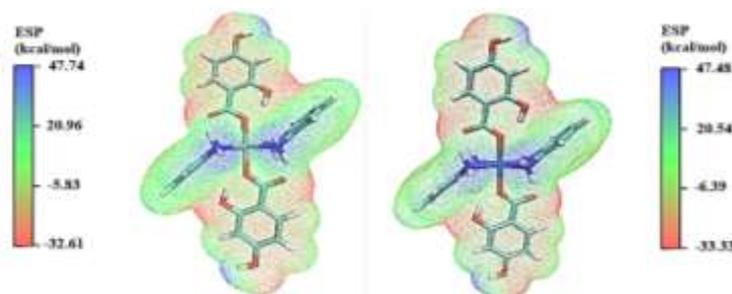
yordamida YuBMO va QBMO energiya qiymatlari aniqlandi. $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmaning tirqish energiyasi $E(\text{GAP})=5.12\text{eV}$ ga teng. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmasi esa 2 xil konformatsion holat uchun tirqish energiyalari 5.13 eV va 4.06 eV ga teng (9-rasm). Izostrukturali $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalarning DFT hisoblashlari asosida ularning η , σ , ΔE , χ va ω qiymatlari hisoblab chiqarildi (7-jadval).

7-jadval

$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalarining kvant-kimyoviy parametrlari

Kvant-kimyoviy parametrlar	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] (\alpha)$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] (\beta)$
E_{YuBMO} , eV	-5.83	-5.81	-5.81
E_{QBMO} , eV	-0.71	-0.68	-1.75
$ \Delta E =E_{\text{YuBMO}}-E_{\text{QBMO}}$, (eV)	5.12	5.13	4.06
Ionlanish potentsiali, $I=-E_{\text{YuBMO}}$, eV	5.83	5.81	5.81
Elektronga moyillik, $A=-E_{\text{QBMO}}$, eV	0.71	0.68	1.75
Elektromanfiylik, $\chi = (I + A)/2$ (eV)	3.27	3.24	3.78
Kim. qattiqlik, $\eta = (I - A)/2$ (eV)	2.56	2.56	2.03
Kim. potentsial, $\mu_p = -(I + A)/2$ (eV)	-3.27	-3.24	-3.78
Kim. yumshoqlik, $\sigma = 1/(2\eta)(\text{eV})^{-1}$	0.19	0.19	0.24
Elektrofillik indeksi, $\omega = \mu_p^2/2\eta$ (eV)	2.09	2.05	3.52

Shuningdek izostrukturali komplekslarning elektronga boy (nukleofil) va elektron taqchil (elektrofil) qismlarini aniqlash maqsadida MultiWFN dasturi yordamida ESP (elektrostatik sirt potentsiali) tahlili amalga oshirildi. Unga ko'ra ESP sathining minimumi ya'ni ortiqcha elektronli soha 2,4-DBA molekulasidagi metall atomiga birikkan kislorod atomiga tegishli. Bu qiymat $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalari uchun mos ravishda -32.61 va -33.33 kcal/mol ga teng. ESP sathining maksimumi ya'ni elektron taqchil soha esa 2,4-DBA molekulasining ikkinchi OH guruhidagi vodorod atomlariga tegishli hamda $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ komplekslari uchun tegishli 47.74 va 47.48 kcal/molga teng.



10-rasm. $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalarining chegaraviy elektron zichliklari

Kvant-kimyoviy parametrlarning erituvchilar ta'sirida gaz fazaga nisbatan o'zgarishini aniqlash maqsadida ORCA 6.00 dasturida CPCM usulida suv, atseton, metanol va etanol muhitida hisoblash jarayonlari olib borildi. Ushbu jarayonda entalpiya (ΔH), gibbs energiyasi (ΔG) va entropiyaning (ΔS) o'zgarishlari aniqlandi. $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmada erituvchilar dielektrik

singdiruvchanligining (ϵ) ortishi bilan entalpiya (ΔH) va Gibbs energiyalarining (ΔG) qiymatlari kamayishi hamda entropiya qiymatining ortishi kuzatildi. Ushbu holatlar xuddi real eritmalaridagi (qattiq moddalarning erituvchilar ta'sirida erib, entropiyaning ortishi) kabi spontan ravishdagi jarayonlarga mos keladi (8-jadval).

8-jadval

[Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleksining ayrim erituvchilar ishtirokida solvatlanish jarayonidagi fizik-kimyoviy ko'rsatkichlari

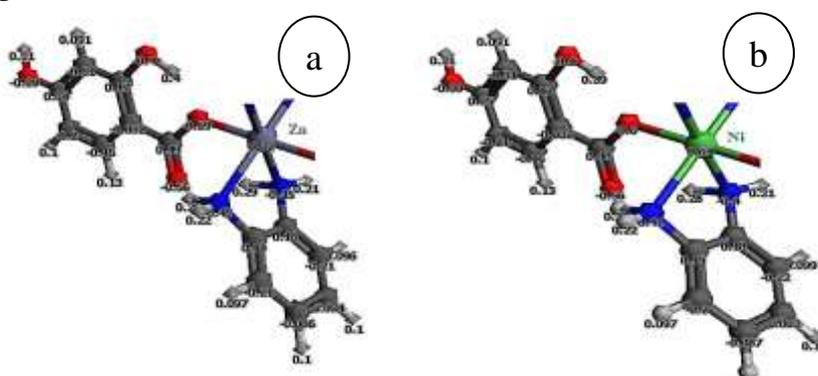
Erituvchi (ϵ)	ΔH , kkal/mol	ΔG , kkal/mol	ΔS , kkal/mol
Gaz(0)	218.86	278.23	-59.37
Atseton (20.7)	218.56	277.73	-59.17
Etanol (24.3)	217.55	276.4	-58.85
Metanol(32.63)	216.99	275.51	-58.52
Suv (80.4)	216.95	275.16	-58.21

9-jadval

Erituvchilar ta'sirini inobatga olgan holda CPCM usulida [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks uchun hisoblangan kvant-kimyoviy parametrlar

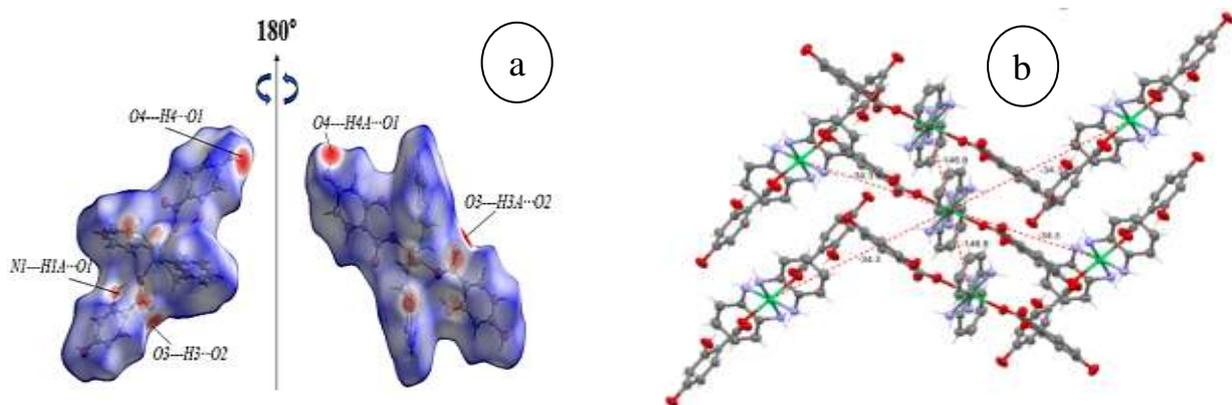
Kvant-kimyoviy parametrlar	Vakuum	Atseton	Etanol	Metanol	Suv
E_{YUBMO} , eV	-5.832	-6.079	-6.081	-6.085	-5.832
E_{QUBMO} , eV	-0.714	-0.856	-0.858	-0.861	-0.865
$ \Delta E =E_{YUBMO}-E_{QUBMO}$, (eV)	-5.118	5.22	-5.223	-5.224	-4.967
Ion. potentsiali, $I=-E_{YUBMO}$, eV	-5.832	-6.079	-6.081	-6.085	-5.832
El.moyillik, $A=-E_{QUBMO}$, eV	-0.714	-0.856	-0.858	-0.861	-0.865
Elektromanfiylik, $\chi = (I + A)/2$ (eV)	3.273	3.467	3.469	3.473	3.348
Kim.qattqlik, $\eta = (I - A)/2$ (eV)	2.559	2.612	2.612	2.612	2.483
Kim.potensial, $\mu_p = -(I+A)/2$ (eV)	-3.273	-3.467	-3.469	-3.473	-3.348
Kim.yumshoqlik, $\sigma = 1/(2\eta)$ (eV) ⁻¹	0.195	0.191	0.191	0.190	0.201
Elekt. indeksi $\omega = \mu_p^2/2\eta$ (eV)	2.093	2.302	3.204	2.308	2.256

Shuningdek olingan izostrukturali komplekslarning Malliken usuli bo'yicha zaryad taqsimoti ham hisoblab topildi. 2,4-DBA molekulasidagi karboksil guruhning ikkinchi kislorod atomi eng kichik manfiy qiymatni qabul qilishi aniqlandi. Gidroksil guruhlar (OH) vodorod atomining musbat zaryadining ortishi molekuladagi umumiy elektron zichlikning gidroksil guruhdan halqa tomon siljishi natijasida yuzaga keladi (11-rasm).

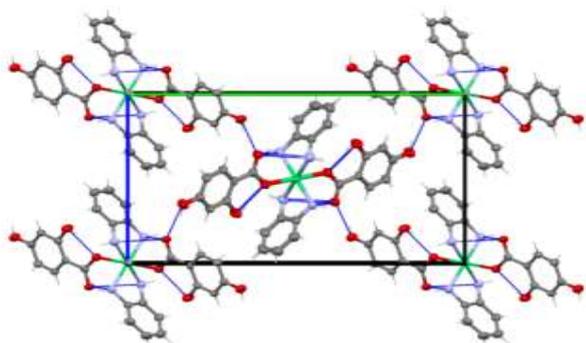


11-rasm. [Zn(OPD)₂(2,4-DBA)₂] (a) va [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] (b) kompleks birikmalarining zaryad taqsimoti

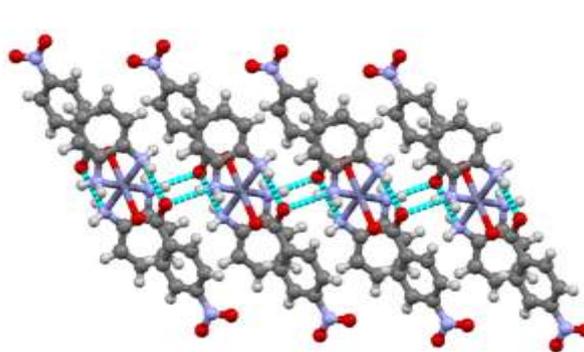
[Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmasining Hirshfeld sirt yuza tahlili va molekulararo ta'sirlashish energiyalari. Ushbu kompleks birikmada N–H···O va O–H···O tipidagi ichki va molekulararo vodorod bog‘lanishlar mavjud. Molekulaning ichki vodorod bog‘lanishida ikkinchi uglerod atomiga birikkan gidroksil (OH) guruhi bilan karboksil guruhidagi ikkinchi kislorod atomi o‘rtasida vujudga keladi (O3–H3···O2). Molekulararo vodorod bog‘lanishlar esa to‘rtinchi uglerod atomiga birikkan OH guruhi bilan qo‘shni molekula karboksil guruhidagi birinchi kislorod atomi o‘rtasida vujudga keladi (O4–H4···O1). Bundan tashqari molekulada OPD aminoguruhilari bilan 2,4-DBA ning birinchi kislorod atomlari o‘rtasida zig-zag shaklidagi N1–H1A···O1, N2–H2A···O1 va N2–H2B···O1 ichki vodorod bog‘lanishlar mavjud. Ushbu vodorod bog‘lanishlar va Van der Waals o‘zaro ta'sirlashuvlar Hirshfeld yuzasida qizil dog‘lar shaklida namoyon bo‘ldi (12a-rasm). Bu o‘zaro ta'sirlar miqdoriy jihatdan aniqlandi va vizualizatsiya qilindi. Hirshfeld yuzasining hajmi V=593,58Å³ va yuzasi S=503,30Å² ga teng. Shuningdek molekulaning umumiy molekulararo ta'sirlashish energiyasi -349.3 kJ/molga teng(12b-rasm).



12-rasm. [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmasining Hirshfeld sirt yuzasi (a) va molekulararo ta'sirlashish energiyalari (b).



13-rasm. [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] kompleks birikmaning a o‘qi bo‘yicha kristall taxlanishi.



14-rasm. [Zn(OPD)₂(pNBA)₂] kompleks birikmaning b o‘qi bo‘yicha kristall taxlanishi.

Sintez qilingan kompleks birikmalarning Mercury 3.8 dasturi yordamida molekulararo ta'sirlashish energiyalari hisoblandi. Kristall yacheykadagi molekulararo ta'sirlashish energiyalari ham kamayib borishi aniqlandi. Bu qonuniyatlarni

molekularning kristall tuzilishi, metall atomi radiusi va ligandlarning tabiati orqali izohlash mumkin (10-jadval).

10-jadval

Olingan kompleks birikmalarning molekulararo o‘zaro ta’sirlashish energiyalari va energetik yacheykadagi zichliklari

Kompleks birikmalar	$[\text{Cd}(\text{OPD})_3 \text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$	$[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1,5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	$[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+ (\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$	$[\text{Co}(\text{OPD})_2 \text{SO}_4]_{\text{in}}$
Dx, g/sm ³	1.742	1.714	1.627	1.610	1.601	1.589	1.582	1.499	1.463
Mol.um.tas. ener. kj/mol	-425.2	-420.1	-395.6	-370.8	-349.3	-340.2	-332.6	-330.1	-320.6

Sintez qilingan kompleks birikmalarning *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* va *Candida albicans* bakteriya shtamlariga qarshi bakterosid xususiyatlari aniqlandi. Natijada $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalarning tanlangan bakteriya shtamlariga qarshi antagonistik faolligi yuqori ekanligi aniqlandi.

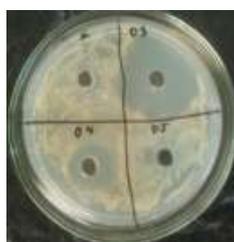
11-jadval

Ligandlar va olingan kompleks birikmalarining mikroblarga qarshi biofaolligi (3-5 kun)

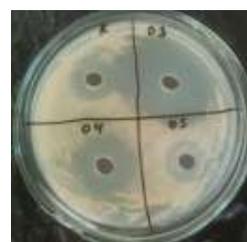
№	Olingan namunalar	Bakteriya shtamlari (Antagonistik faollik, d, mm)				
		<i>Bacillus subtilis</i>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Candida albicans</i>	<i>Staphylococcus aureus</i>
K	OPD	10	12	16	10	11
02	2,4-DBA	14	11	13	14	16
03	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	20	18	34	22	35
04	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	18	21	36	24	30
05	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	28	18	26	19	24
06	$[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	18	16	21	15	20



Bacillus subtilis



Escherichia coli



Staphylococcus aureus

15-rasm. Kompleks birikmalarning test shtamlarga antagonistik faolligi

XULOSALAR

1. Ilk bor 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotalarining ba’zi d-metallar bilan tarkibi M:L¹:L² 1:2:2, 1:3:1, 1:2:1 nisbatda bo‘lgan 9 ta yangi aralash ligandli kompleks birikmasi sintez qilindi va monokristallari olindi. Sintez qilingan $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1,5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+ (\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$ va

$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ tarkibli kompleks birikmalarning kristallografik ma'lumotlari Kembridj kristallografik ma'lumotlar bazasiga (Cambridge Crystallographic Data Center) kiritilib, mos ravishda 2268254, 2268255, 2346685, 2402204, 2346687, 2268256, 2404717, 2404716 depozit raqamlari olindi.

2. Sintez qilingan kompleks birikmalarning tarkibi, kristall tuzilishi, fizik-kimyoviy xossalari RTT, IQ-, Raman-spektroskopiya, UB-spektrofotometriya, termik analiz (TG, DTA) usullari va bir qator kvant-kimyoviy usullar yordamida aniqlandi va tahlil qilindi. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ kompleks birikmalarda metall atomlari bir xil koordinatsiyalanishi va izostrukturali ekanligi tadqiqot usullari yordamida aniqlandi. Ushbu izostrukturali kompleks birikmalarda M–N va M–O bog' uzunliklarining $\text{Ni} < \text{Zn} < \text{Cd}$ qatorida ortib borishi aniqlandi.

3. Sintez qilingan kompleks birikmalarning eritmalaridagi barqarorligi Babko usulida aniqlandi va shunga muvofiq $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] > [\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ qatorida izostrukturali kompleks birikmalarda 3d elektronlarning ortib borishi hisobiga Irving–Vilyams qonuniyatlariga mos kelishi aniqlandi.

4. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning kvant-kimyoviy tadqiqotlari asosida elektrodonor va elektroakseptor qismlari, reaksiya qobiliyati hamda YuBMO va QBMO energiyalari aniqlandi hamda ular asosida η , σ , ΔE , χ va ω qiymatlari hisoblab topildi. Erituvchilar ta'sirini inobatga olgan holda CPCM usulida $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ va $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ izostrukturali kompleks birikmalarning solvatlanish va gidratlanish jarayonlarida termodinamik parametrlarning o'zgarishlarining (ΔH , ΔG va ΔS) qiymatlari aniqlandi.

5. Sintez qilingan kompleks birikmalarning ilk bor kristall yacheykasidagi molekulalararo ta'sirlashish energiyalari va Hirshfeld sirti yuza tahlili amalga oshirildi. Hirshfeld sirt yuza tahliliga asosan kristall yacheyka taxlanishida H...H (31.5-61%), H...C/C...H (15.8-28.7%), O...H/H...O (19.7-38.4%) ta'sirlashuvlar asosiy ulushni egallaydi. $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] < [\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] < [\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ qatorida izostrukturali kompleks birikmalarda Hirshfeld yuzasining va Hirshfeld hajmining ortishi kuzatildi. Shuningdek kompleks birikmalarning molekulalararo ta'sirlashish energiyalari va kristall yacheyka zichliklari orasidagi o'zaro bog'liqlik qonuniyatlari ko'rsatib berildi.

6. 1,2-diaminobenzol va 2,4-digidroksibenzoy kislotaning Zn (II) ion bilan hosil qilgan kompleks birikmasining 0,03% li eritmasi "NOVA FARM" MCHJ O'zbekiston-Hindiston qo'shma korxonasida dezinfeksiyalovchi vositalarga qo'shimcha sifatida qo'llashga tavsiya etildi.

**РАЗОВЫЙ НАУЧНЫЙ СОВЕТ НА БАЗЕ НАУЧНОГО СОВЕТА
PhD.03/30.04.2022.К.78.05 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ
ПРИ ТЕРМЕЗСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

ТЕРМЕЗСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

АХАТОВ АЛИШЕР АШУР УГЛИ

**СИНТЕЗ, КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИКО-
ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
НЕКОТОРЫХ d-МЕТАЛЛОВ С 1,2-ДИАМИНОБЕНЗОЙНОЙ И 2,4-
ДИГИДРОКСИБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТОЙ СО СМЕШАННЫМ
ЛИГАНДОМ**

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

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

Термез-2025

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Узбекистана за номером В2024.3.PhD/K818

Диссертация выполнена в Термезском государственном университете.

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

Научные руководители:	Тураев Хайит Худайназарович доктор химических наук, профессор
	Ашуров Жамшид Менгнорович доктор химических наук, профессор
Официальные оппоненты:	Рузимурадов Олим Нарбекович доктор химических наук, профессор
	Раззокова Сурайё Раззоковна доктор философии по химическим наукам, доцент
Ведущая организация:	Самаркандский государственный университет

Защита диссертации состоится на заседании разового ученого совета на базе ученого совета за номером PhD.03/30.04.2022 К 78.05 по присуждению ученой степени при Термезском государственном университете «11» 02 в 14⁰⁰ г. 2025. (Адрес: 190111, г. Термез, ул. Баркамол Авлод, 43. Тел.: (+99876) 221-74-55, факс: (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@unail.uz).

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

Автореферат диссертации разослан « 1 » 02 2025 г.
(протокол рассылки № 1 2025 г.)



З.З. Яхшиева

Председатель научного совета
присуждению ученой степени,
д.х.н., проф.

Ю.А. Гелдиев

Ученый секретарь научного
совета по присуждению ученой
степени, д.ф.х.н.

О.Н. Рузимурадов

Председатель научного семинара
при научном совете по присуждению
ученой степени, д.х.н., проф.

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD)).

Актуальность и востребованность темы диссертации. На сегодняшний день препараты, полученные на основе комплексных соединений биоактивных лигандов с d-металлами, применяются в медицине для лечения различных заболеваний и в сельском хозяйстве в качестве биостимуляторов, фунгицидов и гербицидов. Кроме того, в последние годы возрос интерес к некоторым синтезируемым комплексам, так как они могут связываться с раковыми клетками и ограничивать их активность. Поэтому синтез комплексных соединений с высокой биологической активностью, определение их состава, структуры и свойств, а также разработка препаратов на их основе для медицины и сельского хозяйства имеет важное значение.

В настоящее время в ведущих научных лабораториях мира проводятся различные исследования с целью изучения состава, кристаллической структуры, физико-химических и биологических свойств комплексных соединений. В частности, уделяется особое внимание изучению новых методов синтеза комплексных соединений некоторых d-металлов с 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксибензойной кислотой, а также их состава, структуры, природы металла и лиганда, механизмов координации, квантовохимических и физико-химических свойств, а также биологической активности.

В нашей республике достигнуты определённые результаты в области производства новых типов материалов для химической промышленности. В частности, проводится масштабная работа по обеспечению местного рынка реактивами, заменяющими импорт. В стране также уделяется большое внимание внедрению инновационных технологий, научно обоснованной системе управления промышленными объектами и реализации мероприятий по охране окружающей среды. ¹В Стратегии развития Узбекистана на 2022-2026 годы определены приоритетные направления развития экономики, в том числе «ускорение производства высококачественной готовой продукции с высокой добавленной стоимостью на основе глубокой переработки местных сырьевых ресурсов, освоение качественно новых типов продукции и технологий...». В этом контексте большое внимание уделяется синтезу и исследованию комплексных соединений с высокой биологической активностью, что является важной задачей в развитии химической промышленности, одного из ведущих секторов нашей экономики.

Указ Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № УП-60 "О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы", постановление от 12 августа 2020 года № ПП-4805 "О мерах по повышению качества непрерывного образования и результативности науки в области химии и биологии", постановление от 13 февраля 2021 года № ПП-4992 "О мерах по дальнейшей реформе химической промышленности и финансовому оздоровлению, развитию производства химической продукции с высокой

¹Указ Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № PF-60 "О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы"

добавленной стоимостью" и другие нормативно-правовые акты, касающиеся данной деятельности, определяют задачи, выполнение которых в значительной степени будет способствовать реализации результатов данного диссертационного исследования.

Исследование соответствует приоритетным направлениям развития науки и технологий в Республике. Эта исследовательская работа выполнена в соответствии с VII приоритетным направлением развития науки и технологий Республики – «Химия, химические технологии и нанотехнологии».

Степень изученности проблемы. Синтез, структура, биологическая активность и физико-химические свойства комплексных соединений с лигандами, имеющих кольцевую структуру и содержащих одну или несколько аминогрупп и карбоксильных групп, были изучены в различных научных лабораториях мира. В частности, такие ученые, как S. Supriya, K. Samar, S. Wang, R. Kockerbauer, P. Bednarski, G.A. Renovitch, W.A.Baker, I.M.Khan провели ряд исследований по синтезу комплексных соединений 1,2-диаминобензола (OPD) и 2,4-дигидроксибензойной кислоты (2,4-DBA) с металлами и их производными.

Синтезированы моно- и бидентатные, одно- и многосложные комплексы 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксибензойной кислоты, а их кристаллические структуры были определены методом рентгеновского структурного анализа (РСА). Согласно данным Камбриджской кристаллографической базы данных (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2024), синтезировано более 90 монокристаллов 1,2-диаминобензола и его производных, а также более 40 монокристаллов 2,4-дигидроксибензойной кислоты, и их структуры были исследованы.

В нашей стране также проводится ряд исследований по синтезу комплексных соединений, их структуре, свойствам и применению на практике учеными, такими как академики Н.А. Парпиев, Б.Т. Ибрагимов, профессора Х.Т. Шарипов, Х.Х. Хакимов, О.Ф. Ходжаев, А.А. Шабилолов, Т.А. Азизов, Х.Х. Тураев, Б.Б. Умаров, Ш.А. Кадырова, Ш.Ш. Даминова, З.Ч. Кадырова, Ж.М. Ашуров, А.Б. Ибрагимов и Ш.А. Касимов и другие.

Также, согласно анализу литературы, несмотря на то, что проведен ряд исследований по синтезу комплексных соединений на основе 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксибензойной кислоты, их структура и свойства недостаточно изучены.

Связь диссертационного исследования с научными планами высшего учебного заведения, в котором выполнена диссертация. Данное исследование выполнено в соответствии с планом научно-исследовательских работ Термезского государственного университета по фундаментальному проекту OT-F7-34 “Теоретические основы синтеза комплексообразующих полифункциональных ионитов и разделения с их помощью некоторых d-металлов” (2017-2020 гг.).

Целью исследования является синтез смешанных лигандных комплексных соединений некоторых d-металлов с 1,2-диаминобензолом и

2,4-дигидроксibenзойной кислотой, определение их молекулярных, кристаллических структур и физико-химических свойств.

Задачи исследования:

синтезировать смешанные лигандные комплексные соединения 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты с катионами Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II);

анализировать кристаллическую структуру, состав и свойства синтезированных комплексных соединений с помощью современных физико-химических методов исследования;

определить термическую стабильность синтезированных комплексных соединений и их устойчивость в различных растворителях;

Вычислить изменения термодинамических параметров (ΔH , ΔG и ΔS) в процессе гидратации и сольватации синтезированных комплексных соединений;

определить электронную структуру, реакционную способность, геометрические и энергетические параметры синтезированных комплексных соединений, а также энергии межмолекулярного взаимодействия с помощью квантово-химических методов;

определить биологическую активность синтезированных комплексных соединений против бактериальных штаммов.

Объектом исследования были выбраны соли Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II), 1,2-диаминобензол и 2,4-дигидроксibenзойная кислота, а также смешанные лигандные комплексные соединения, синтезированные на их основе. Также для определения биологической активности синтезированных комплексных соединений были выбраны штаммы бактерий, такие как *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* и *Candida albicans*.

Предметом исследования является синтез смешанных лигандных комплексных соединений 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты с некоторыми d-металлами, содержащими донорные атомы, такие как азот и кислород, а также определение их кристаллической и молекулярной структуры, индивидуальности, квантово-химических параметров, физико-химических и биологических свойств.

Методы исследования. Для определения состава, структуры и свойств синтезированных комплексных соединений использовались методы рентгеновского структурного анализа (РСА), УФ-спектрофотометрии, ИК- и Раман-спектроскопии, термического анализа (ТГ, ДТА), а также вычислительные программы ORCA 6.00, CrystalExplorer 17.5, Mercury 3.8, Olex 2 и Avogadro.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

впервые синтезировано 9 новых смешанных лигандных комплексных соединений катионов Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) с 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксibenзойной кислотой, а также получены их монокристаллы;

с помощью метод РСА были определены состав, структура, закономерности координации М-L и пространственное расположение синтезированных смешанных лигандных комплексных соединений;

электронная структура, реакционная способность, энергетические и геометрические параметры синтезированных комплексных соединений были определены с помощью квантово-химических методов. Изоструктурные комплексные соединения $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ были исследованы на изменение термодинамических параметров в различных растворителях с использованием метода СРСМ (модель полярных сред, аналогичных проводникам);

энергии межмолекулярного взаимодействия синтезированных комплексных соединений и анализ поверхности по методу Хиршфельда были определены;

стабильность синтезированных комплексных соединений в растворах была вычислена с использованием термического анализа и метода Бабко;

биологическая активность синтезированных комплексных соединений против штаммов бактерий была определена на основе результатов экспериментальных испытаний.

Практические результаты исследования заключаются в следующем: Определены оптимальные условия синтеза смешанных лигандных комплексных соединений 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксибензойной кислоты с катионами Co(II), Zn(II), Ni(II) и Cd(II);

В полученных изоструктурных комплексных соединениях, в ряду Ni(II)<Zn(II)<Cd(II) определено увеличение длины связей M1–O2, M1–N1 и M1–N2, присоединенных к центральному атому с использованием метода РТТ;

на основе изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ был разработан препарат против штаммов бактерий *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*.

Достоверность результатов исследования. Состав, молекулярная и кристаллическая структура комплексных соединений некоторых ионов d-металлов, синтезированных с 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксибензойной кислотой, были определены с помощью таких методов, как РТТ, ИК-, Раман-спектроскопия, термическая стабильность — методом термического анализа, стабильность в растворе — УФ-спектрофотометрии и других физико-химических методов анализа. Результаты, полученные на основе квантово-химических расчетов, соответствуют экспериментальным данным, а синтезированные комплексные соединения были внедрены в практику для получения дезинфицирующих средств.

Научная и практическая значимость результатов исследования. Научное значение исследования заключается в том, что были найдены оптимальные условия синтеза новых смешанных лигандных комплексных соединений 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксибензойной кислоты с катионами Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II), а также для выращивания их

монокристаллов. Состав, кристаллическая структура и свойства синтезированных смешанных лигандных комплексных соединений были определены с помощью методов РСА, ИК-, Раман-спектроскопии и термического анализа, а межмолекулярные взаимодействия, энергетические и геометрические параметры были рассчитаны с помощью современных квантово-химических методов.

Практическое значение исследования заключается в следующем: кристаллографические данные смешанных лигандных комплексных соединений, таких как $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1.5\text{-NDK})_2$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$, $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$, были внесены в базу данных Кембриджской кристаллографической базы данных, что позволяет использовать представленные данные для синтеза аналогичных комплексов и их характеристик. Также было продемонстрировано, что комплексные соединения, синтезированные на основе 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты с некоторыми d-металлами, проявляют бактерицидные свойства против штаммов бактерий, что способствует увеличению эффективности их воздействия при добавлении в дезинфицирующие средства в виде раствора.

Внедрение результатов исследований.

На основе полученных научных результатов по синтезу смешанных лигандных комплексных соединений 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты с d-металлами, их физико-химических свойств и биологической активности рентгеновские структурные данные для комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1.5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ были внесены в Кембриджскую кристаллографическую базу данных (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrieving.html> Cambridge Crystallographic Data Center), получены депозитные номера 2268254, 2268255, 2346685, 2402204, 2346687, 2268256, 2404717, 2404716. В результате внесения данных в базу появляется возможность использовать представленные сведения для синтеза аналогичных соединений и описания их структуры.

Комплексное соединение $\text{Zn}(\text{II})$ с 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксibenзойной кислотой ($[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$) в 0,03% растворе было внедрено в практику на производстве дезинфицирующих средств в совместном предприятии “NOVA FARM” Узбекистан-Индия, что позволило получить высокоэффективные дезинфицирующие средства для защиты от бактерий (справка № 44 от 25 ноября 2024 года от “NOVA FARM”).

Апробация результатов исследования. Результаты данной исследовательской работы были представлены и обсуждены на 12 научно-практических конференциях, включая 7 международных и 5 республиканских.

Опубликованность результатов исследования. По теме диссертации опубликовано всего 19 научных работ, из которых 6 научных статей,

основанных на основных научных результатах диссертации кандидата наук (PhD), были рекомендованы для публикации в научных изданиях, утвержденных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан, включая 4 республиканских и 3 международных журнала.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованных источников и приложений. Объем диссертации составляет 118 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении диссертационной работы обоснована актуальность и необходимость исследования, определены цель и задачи исследования, показано его соответствие приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики Узбекистан, изложены научная новизна и практические результаты исследования, обоснована их достоверность, раскрыта научная и практическая значимость результатов исследования, сделаны выводы о перспективах внедрения в практику, а также представлены сведения об опубликованных научных работах и структуре диссертации.

В первой главе диссертации, под названием «**Комплексные соединения 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты, их структура и свойства**», изложены молекулярная и электронная структуры, свойства и применение лигандов. Также подробно проанализированы литературные данные о молекулярной и кристаллической структуре комплексных соединений, синтезированных на основе 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты, а также их физико-химических и биологических свойствах. В результате анализа литературы изучены особенности природы выбранных лигандов и закономерности их координации с металлами.

Во второй главе диссертации, под названием «**Синтез и методы исследования смешанных лигандных комплексов 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты с некоторыми d-металлами**», приведены использованные инструменты, методы исследования и процесс синтеза полученных комплексных соединений. Также приведены результаты элементного анализа полученных комплексных соединений, температура плавления и растворимость в некоторых растворителях.

Синтез изоструктурных комплексных соединений $[Ni(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$, $[Zn(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$ и $[Cd(OPD)_2(2,4-DBA)_2]$. Для синтеза этих изоструктурных комплексных соединений использовались исходные соли: кристаллогидрат сульфата никеля (II) ($NiSO_4 \cdot 7H_2O$) в количестве 0,281 г (1 ммоль), кристаллогидрат ацетата цинка ($(CH_3COO)_2Zn \cdot 2H_2O$) в количестве 0,219 г (1 ммоль) и кристаллогидрат ацетата кадмия ($(CH_3COO)_2Cd \cdot 2H_2O$) в количестве 0,266 г (1 ммоль), из которых были подготовлены водные растворы. Затем были приготовлены 0,1 М растворы 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты, которые были смешаны. Полученная смесь лигандов была поочередно добавлена в растворы солей Ni(II), Zn(II) и Cd(II). Исходные соли и лиганды были взяты в молярном соотношении 1:2:2.

Полученные реакционные смеси были перемешаны на магнитной мешалке при температуре 55-60°C в течение 2 часов. Затем они были охлаждены до комнатной температуры и хранились в термостате при постоянной температуре (28±1°C) в течение 12 дней, после чего методом медленного выпаривания были получены монокристаллы. Выход реакции составил 80% для комплексных соединений $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, и 75% для комплексного соединения $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$. Реакционная схема получения изоструктурных комплексов приведена на схеме 1.

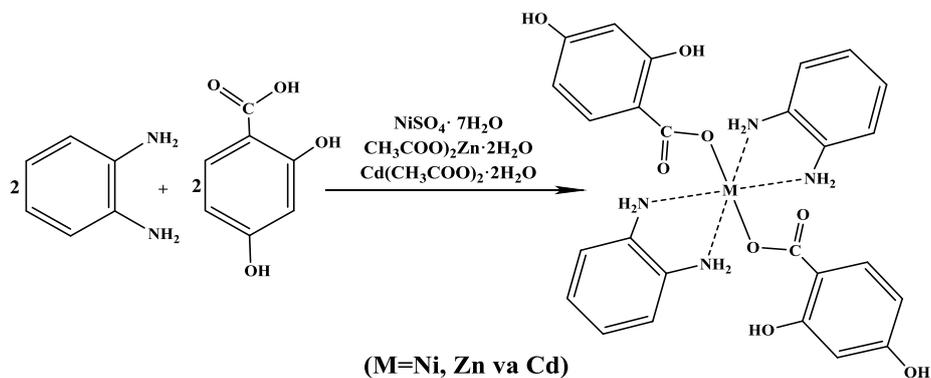


Схема 1. Реакционные уравнения образования изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

В третьей главе диссертации, под названием «**Кристаллические структуры и физико-химические свойства комплексных соединений, полученных на основе 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксibenзойной кислоты**», изложены молекулярные и кристаллические структуры комплексных соединений, образованных 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксibenзойной кислотой с катионами $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Ni}(\text{II})$, $\text{Zn}(\text{II})$, $\text{Cd}(\text{II})$. Также проведены их ИК- и Раман-спектроскопия, термический анализ (ДТА и ТГА), ультрафиолетовая спектрофотометрия, а также определены и проанализированы постоянная устойчивость в различных растворителях. Кроме того, приведены данные о биологической активности полученных комплексных соединений против некоторых штаммов бактерий и возможности их применения на практике.

Молекулярные и кристаллические структуры изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$. Молекулярные и кристаллические структуры изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ были определены с помощью метода РСА, проанализированы и сравнены. Комплексные соединения имеют нейтральную и симметричную структуру. В центре инерции находится металл (Ni, Zn и Cd), к которому прикрепляются 2 молекулы OPD в бидентатной форме и 2 молекулы 2,4-DBA в монодентатной форме. Синтезированные изоструктурные комплексные соединения имеют моноклинную сингонию и пространственную группу $P21/n$. (рис. 1).

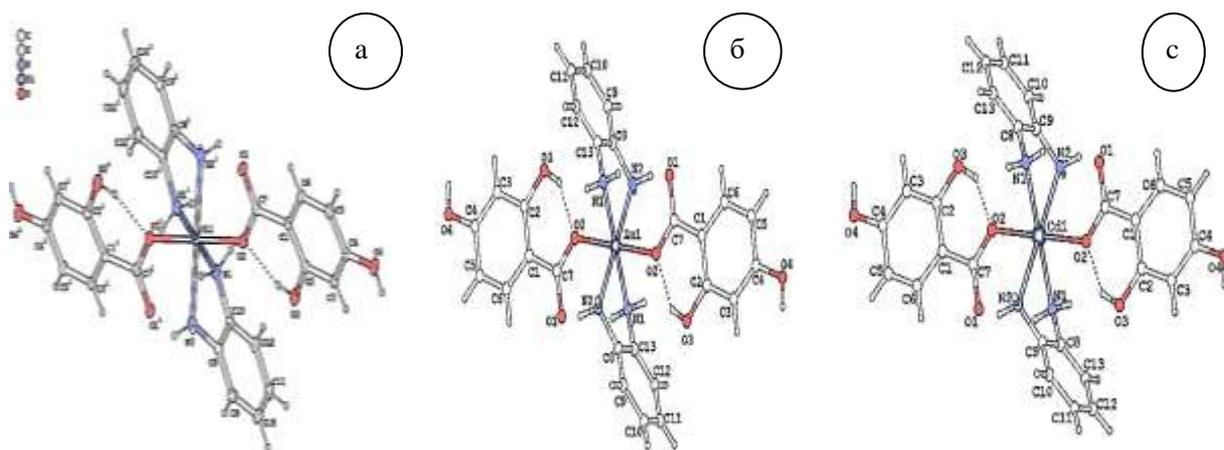


Рис. 1. Молекулярная структура изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (а), $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (б) и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (с).

В молекулах присутствуют донорно-акцепторные связи MN_4 и MO_2 ионные связи. Их пространственная структура образует октаэдрическую форму. Из-за скручивания и скольжения молекулы OPD относительно центрального атома длины связей M1-N1 и M1-N2 немного различаются. В этих комплексных соединениях координационное число металлических атомов стабильно равно 6. В полученных изоструктурных комплексах можно наблюдать, что длины связей M1-O2 , M1-N1 и M1-N2 увеличиваются в порядке $\text{Ni(II)} < \text{Zn(II)} < \text{Cd(II)}$. Этот процесс можно объяснить радиусом центрального атома и его электронной структурой (табл.1).

Табл. 1.

Некоторые длины связей и валентные углы синтезированных изоструктурных комплексных соединений

Химическая формула	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$
Mr	581.22	587.87	634.91
M1-O2	2.136(2)Å	2.213(2)Å	2.342(3)Å
M1-N1	2.110(3)Å	2.177(2)Å	2.360(4)Å
M1-N2	2.129(2)Å	2.158(3)Å	2.365(4)Å
O2-M1-N1	85.75(10)°	90.78(9)°	88.45(13)°
O2-M1-N2	90.21(9)°	86.78(9)°	91.31(13)°
O2-M1-O2	180.00°	180.00°	180.00°
CCDC	2346687	2346686	2402204

При проверке монокристаллов синтезированных комплексных соединений методом РСА было установлено, что большинство из них имеют сингонию моноклинной структуры. То есть в кристаллической ячейке комплексных соединений нет ограничений по осям a , b и c , однако углы между осями a и b , а также b и c равны 90° .

Табл. 2.

Кристаллографические данные синтезированных комплексных соединений

Параметр	Комплексные соединения					
Формула	[Ni(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Zn(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Cd(OPD) ₂ (2,4-DBA) ₂]	[Zn(OPD) ₂ (pNBA) ₂]	[Ni(OPD) ₂ (3-NFA) ₂] _n ·H ₂ O	[Co(OPD) ₂ SO ₄] _n
Mr	581.22	587.87	634.92	614.50	713.56	371.12
R-fac. %	3.81	4.21	4.62	3.26	4.18	4.86
Синг-я	Мон-ник	Мон-ник	Мон-ник	Три-к	Три-к	Орто-ик
Прос. гр.	P21/n	P21/n	P21/n	P-1	P-1	Pbcn
a, Å	5.5142(2)	5.5064(6)	5.498(1)	6.4555(1)	6.7973(11)	23.394(11)
b, Å	18.875(7)	19.0851(19)	19.367(5)	8.0387(2)	9.7530(15)	9.4686(5)
c, Å	11.583(4)	11.5454(10)	11.5687(2)	12.5847(2)	12.4024(19)	6.8462(3)
α°	90	90	90	95.146(2)	75.246(14)	90
β°	91.299(4)	91.725(9)	92.158(2)	94.387(2)	75.078(14)	90
γ°	90	90	90	98.003(2)	84.127(13)	90
V, Å ³	1205.3(8)	1212.8(2)	1230.59(4)	641.48(2)	767.7(2)	1516.2(1)
Z	2	5	5	3	3	7
D _x , г/см ³	1.601	1.610	1.714	1.589	1.582	1.463
μ(CuKα) мм ⁻¹	1.699	1.941	7.634	1.888	1.640	1.969

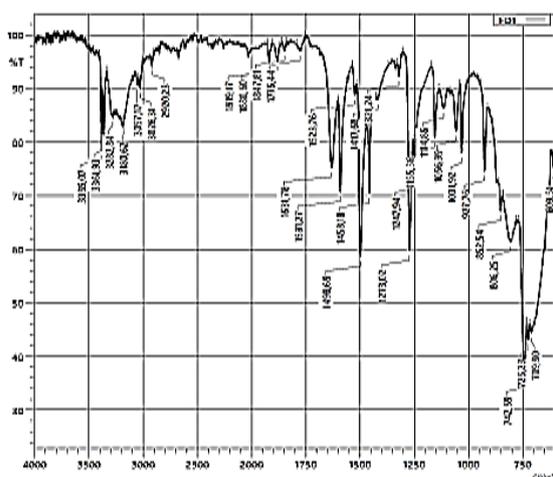
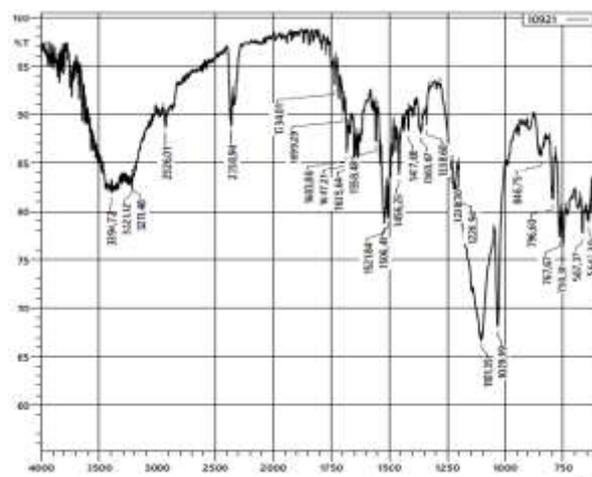


Рис. 2. ИК-спектр лиганда OPD

Рис. 3. ИК-спектр комплекса [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂].

Инфракрасный спектр лиганда OPD и комплекса [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] приведены на рисунках 2 и 3. В инфракрасном спектре комплекса [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] в области дублета 3221 см⁻¹ и 3211 см⁻¹ наблюдаются валентные колебания группы NH₂. Валентные колебания связи C=O зафиксированы в области низких частот спектра на 1635,64 см⁻¹. Колебания по плоскости ароматического кольца в молекуле OPD наблюдаются на 1776 см⁻¹, в молекуле 2,4-DBA — на 1653 см⁻¹, а в комплексе [Ni(OPD)₂(2,4-DBA)₂] — на 1647 см⁻¹. Также в спектре были зафиксированы колебания связей M–N и M–O на частотах 567 см⁻¹ и 542 см⁻¹ соответственно.

Табл. 3.

Анализ ИК-спектра лигандов OPD, 2,4-DBA и синтезированного комплексного соединения $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

Вещество	$\nu(\text{OH})$	$\nu(\text{NH}_2)$	$\delta(\text{NH}_2)$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{C=O})$	Ar (C_6H_6)	M-N	M-O
OPD	-	3180	1631	1273	-	1776	-	-
2,4-DBA	3379	-	-	-	1623	1653	-	-
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	3394	3211	1558	1101	1635	1699	567	542

Сравнены Рамановские спектры выбранных лигандов и полученных комплексных соединений в порошкообразном состоянии, а также Рамановские спектры в растворах, подвергнутых воздействию различных растворителей. Рамановский спектр связей и функциональных групп комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ в порошкообразном состоянии показал, что частоты колебаний близки к частотам колебаний в этаноловом растворе. Это позволяет сделать вывод, что раствор данного комплексного соединения в этаноле стабилен.

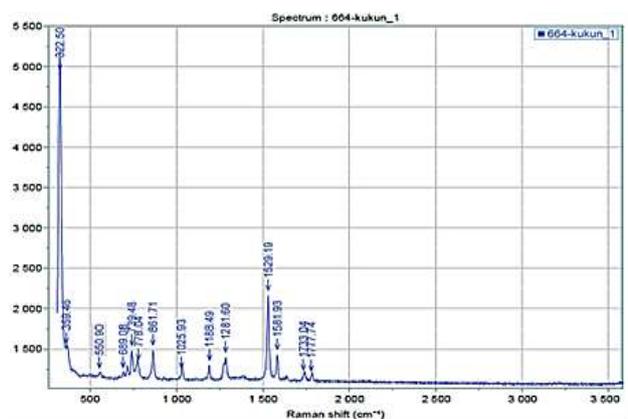


Рис. 4. Рамановский спектр комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ в порошкообразном состоянии

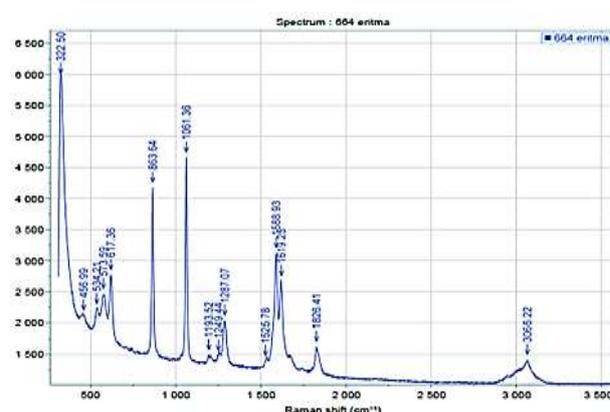


Рис. 5. Рамановский спектр комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ в растворе этанола

Табл. 4.

Анализ Рамановских спектров OPD и комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ в порошкообразном состоянии и в растворе этанола.

Вещество	δ (OH)	ν (CH)	δ (NH ₂)	δ (C=O)	Ar (C_6H_6)	M-N	M-O
OPD (порошок)	-	3062	1237	-	1630	-	-
OPD (раствор)		3057	1237	-	1630	-	-
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (порошок)	1529	-	1281	1581	1773	459	322
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (раствор)	1588		1287	1619	1826	456	322

Термогравиметрический (ДТА, ТГА) анализ OPD и комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

Для термического анализа комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ было взято 7,902 мг вещества, который прогрели до 800°C. Термогравиметрический анализ был проведен в 4 этапа, при этом наблюдалось 3 эндотермических

эффекта. Первый эндотермический эффект произошел при температуре 163,31°C из-за разложения молекул OPD в составе комплексного соединения. Второй эндотермический эффект произошел при 238,07°C из-за разложения молекул 2,4-ДВА. Также при температуре 308,30°C был зафиксирован эндотермический эффект из-за разрушения молекул кольца в составе комплекса. В конце процесса остались металлические оксиды и органические остатки (рис. 7).

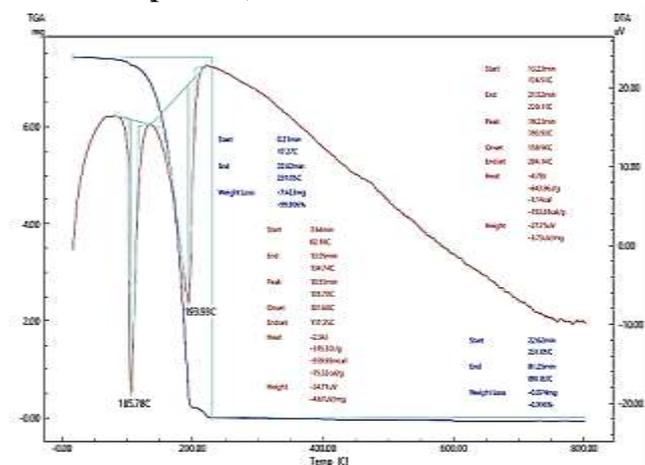


Рис. 6. Дериватограмма лиганда OPD

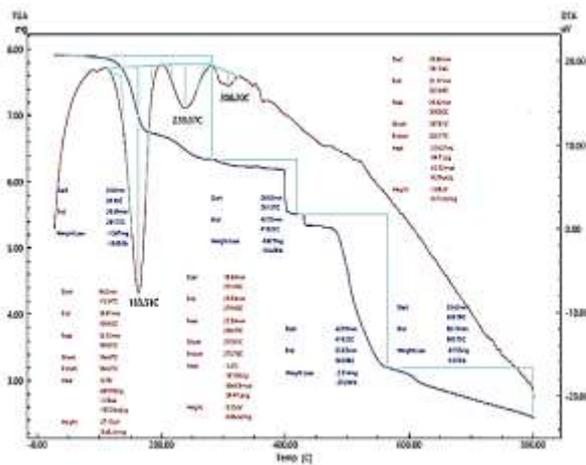


Рис. 7. Дериватограмма комплексного соединения $[Ni(OPD)_2(2,4-DVA)_2]$

Табл. 5.

Термальный анализ комплекса $[Ni(OPD)_2(2,4-DVA)_2]$

№	Температурный интеграл (°C)	Потеря массы, мг.	Потеря массы, %	Потребляемая энергия ($\mu V \cdot c / мг$)	Проведенное время (мин)
1	26-281°C	1.567	19.83	19.616	26.69
2	281-419°C	0.827	10.46	12.493	14.05
3	419-565°C	2.314	29.284	3.90	14.95
4	565-800°C	0.755	9.55	19.54	24.54

В четвертой главе диссертационной работы «Квантово-химические расчеты комплексных соединений, полученных на основе 1,2-диаминобензола и 2,4-дигидроксибензойной кислоты, энергии межмолекулярного взаимодействия и анализ поверхности Хиршфельда» были определены и проанализированы поверхностные анализы Хиршфельда полученных комплексных соединений, их квантово-химические свойства и энергии межмолекулярного взаимодействия. Электронная структура комплексных соединений была определена с использованием программного пакета ORCA 6.00 методом DFT (Density Functional Theory), а в процессе формирования молекул электроны были рассчитаны для состояний синглета, триплета и квартета спинов. Были определены поверхности ЭСП (электростатический поверхностный потенциал) для плотности электронов полученных комплексных соединений, а также выявлены электродонорные и электроакцепторные части молекул. Процесс перехода комплексных соединений от неполярных растворителей к полярным растворителям был проанализирован с точки зрения изменения термодинамических параметров.

Табл. 6.

Общие энергии, рассчитанные методом DFT для изоструктурных комплексных соединений $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, ккал/моль.

Сложное соединение	Синглет	Триплет	Квартет
$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	-2261352.52	-2261316.87	-2261301.09
$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	-2091389.65	-2091409.72	-2091401.42

На основе результатов анализа было установлено, что в комплексе $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ катион $\text{Zn}(\text{II})$ находится в синглетном состоянии из-за наличия парных электронов ($3d^{10}$) на внешней орбитали, а в комплексе $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ катион $\text{Ni}(\text{II})$ находится в триплетном состоянии из-за наличия двух неспаренных электронов ($3d^8$).

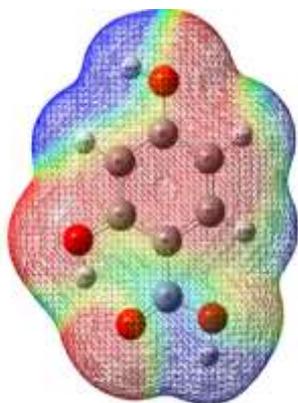


Рис. 8. Граничные электронные плотности молекулярных орбиталей молекулы 2,4-DBA

В нашем исследовании были определены квантово-химические свойства молекулы 2,4-дигидроксibenзойной кислоты, использованной в качестве исходного лиганда. Молекула 2,4-DBA относится к группе лигандов с средней стабильностью и высокой реакционной способностью. Энергии ВЗМО и НСМО молекулы составляют соответственно 9,26 эВ и 5,37 эВ ($E(\text{GAP}) = 3,89$ эВ). На поверхностях ESP-сайтов молекулы было установлено, что нуклеофильные центры относятся к кислородным атомам карбоксильной группы, а электрофильные центры — к водородным атомам второго гидроксильного группа. Минимум и максимум уровня ESP составляют соответственно -78.76 и +78.76.

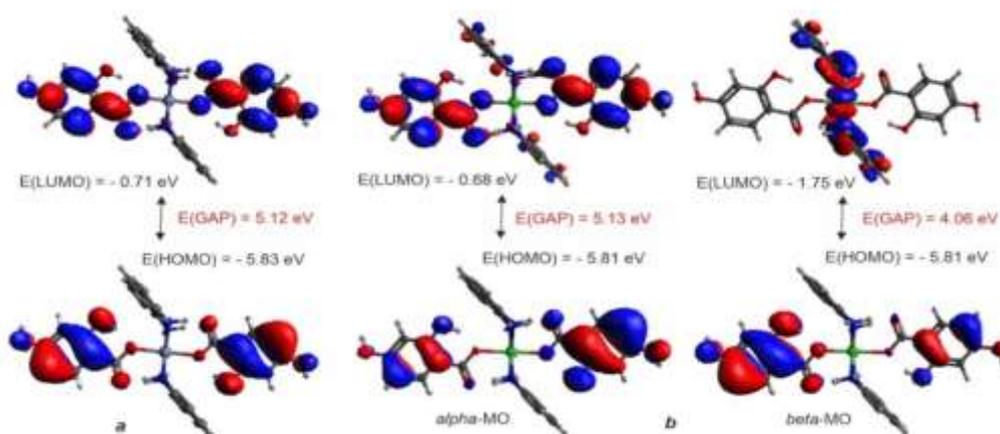


Рис. 9. МО 3D модель комплексов $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (a) и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (b) и их энергетические значения ВЗМО и НСМО.

Также для изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ были определены значения ЮБМО и КБМО с использованием метода B3LYP/def2-TZVP в программном пакете ORCA 6.0

Энергия щели $E(\text{GAP})$ для комплекса $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ составляет 5.12 eV. Для комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ энергия щели для двух конформационных состояний равна 5.13 eV и 4.06 eV (Рис. 9).

На основе DFT расчетов для изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ были получены значения η , σ , ΔE , χ и ω , которые приведены в таблице 7.

Табл. 7.

Квантово-химические параметры комплексов $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$

Квантово-химические параметры	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] (\alpha)$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] (\beta)$
$E_{\text{ВЗМО}}$, eV	-5.83	-5.81	-5.81
$E_{\text{НСМО}}$, eV	-0.71	-0.68	-1.75
$ \Delta E = E_{\text{ВЗМО}} - E_{\text{НСМО}}$, (eV)	5.12	5.13	4.06
Ион. потенциал, $I = -E_{\text{ВЗМО}}$, eV	5.83	5.81	5.81
Эл.восп., $A = -E_{\text{НСМО}}$, eV	0.71	0.68	1.75
Электроотриц., $\chi = (I + A)/2$ (eV)	3.27	3.24	3.78
Хим. твердость, $\eta = (I - A)/2$ (eV)	2.56	2.56	2.03
Химический пот., $\mu_p = -(I + A)/2$ (eV)	-3.27	-3.24	-3.78
Химическая мяг., $\sigma = 1/(2\eta)(\text{eV})^{-1}$	0.19	0.19	0.24
Элект. индекс, $\omega = \mu_p^2/2\eta$ (eV)	2.09	2.05	3.52

Также с целью определения электронно-обильных (нуклеофильных) и электронно-дефицитных (электрофильных) частей изоструктурных комплексов был проведен анализ ЭСП (электростатического поверхностного потенциала) с использованием программы MultiWFN. Согласно результатам, минимум на уровне ЭСП, то есть область с избытком электронов, относится к атомам кислорода, связанным с металлическим атомом в молекуле 2,4-DBA. Это значение для комплексов $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ составляют соответственно -32.61 и -33.33 ккал/моль. Максимум на уровне ЭСП, то есть область с дефицитом электронов, относится к водородным атомам второй ОН-группы молекулы 2,4-DBA и составляет 47.74 и 47.48 ккал/моль для комплексов $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, соответственно.

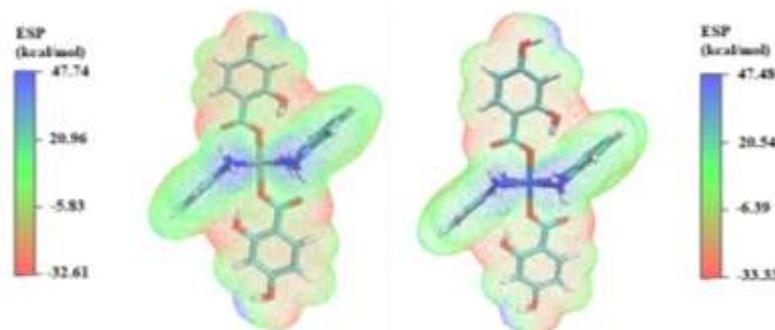


Рис. 10. Предельные электронные плотности комплексов $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

С целью определения изменения квантово-химических параметров в растворах по сравнению с газовой фазой были проведены расчеты методом CPSCM в программе ORCA 6.00 для сред воды, ацетона, метанола и этанола.

В ходе этих расчетов были определены изменения энтальпии (ΔH), энергии Гиббса (ΔG) и энтропии (ΔS). Для комплекса $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ было обнаружено, что с увеличением диэлектрической проницаемости растворителей (ϵ) значения энтальпии (ΔH) и энергии Гиббса (ΔG) уменьшаются, а значение энтропии увеличивается. Эти изменения соответствуют спонтанным процессам, как в реальных растворах, где твердые вещества растворяются в растворителях с увеличением энтропии. С учетом воздействия растворителей, вычислены методом СРСМ квантово-химические параметры для комплекса $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

Табл. 8.

Физико-химические параметры комплекса $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ в процессе сольватации в присутствии некоторых растворителей

Растворитель (ϵ)	ΔH , ккал/моль	ΔG , ккал/моль	ΔS , ккал/моль
Газ (0)	218.86	278.23	-59.37
Ацетон (20.7)	218.56	277.73	-59.17
Этанол (24.3)	217.55	276.4	-58.85
Метанол (32.63)	216.99	275.51	-58.52
Вода (80.4)	216.95	275.16	-58.21

Табл. 9.

Расчетные квантово-химические параметры для комплекса $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ методом СРСМ с учетом влияния растворителей

Квантово-химические параметры	Вакуум	Ацетон	Этанол	Метанол	Вода
$E_{\text{ВЗМО}}$, eV	-5.832	-6.079	-6.081	-6.085	-5.832
$E_{\text{НСМО}}$, eV	-0.714	-0.856	-0.858	-0.861	-0.865
$ \Delta E =E_{\text{ВЗМО}}-E_{\text{НСМО}}$, (eV)	-5.118	5.22	-5.223	-5.224	-4.967
Ион. потенциал, $I=-E_{\text{ВЗМО}}$, eV	-5.832	-6.079	-6.081	-6.085	-5.832
Эл.восп., $A=-E_{\text{НСМО}}$, eV	-0.714	-0.856	-0.858	-0.861	-0.865
Электроотриц., $\chi = (I + A)/2$ (eV)	3.273	3.467	3.469	3.473	3.348
Хим. твердость, $\eta = (I - A)/2$ (eV)	2.559	2.612	2.612	2.612	2.483
Химический пот., $\mu_p = -(I + A)/2$ (eV)	-3.273	-3.467	-3.469	-3.473	-3.348
Химическая мяг., $\sigma = 1/(2\eta)(\text{eV})^{-1}$	0.195	0.191	0.191	0.190	0.201
Элект. индекс, $\omega = \mu_p^2/2\eta$ (eV)	2.093	2.302	3.204	2.308	2.256

Также было вычислено распределение зарядов для полученных изоструктурных комплексов методом Малликена. Увеличение положительного заряда атома водорода в гидроксильных группах (ОН) происходит в результате смещения общей электронной плотности молекулы от гидроксильной группы к кольцу.

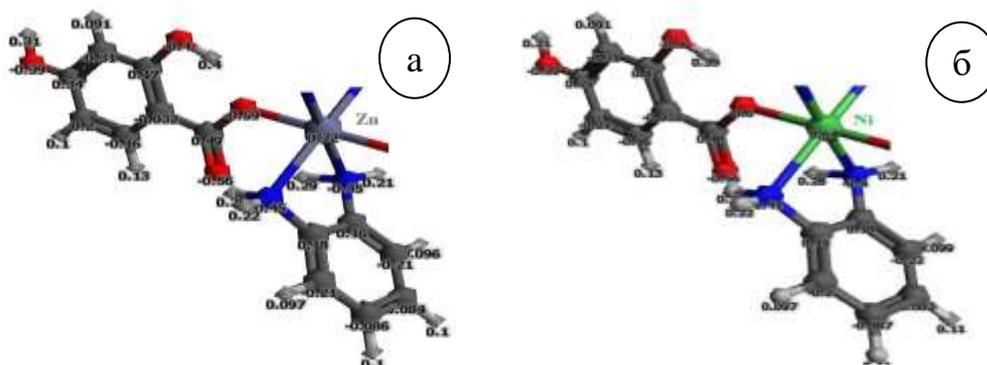


Рис. 11. Распределение зарядов в комплексах $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (а) и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (б).

Анализ поверхности Хиршфельда и энергии межмолекулярного взаимодействия комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ показал, что в этом комплексе присутствуют как внутримолекулярные, так и межмолекулярные водородные связи типов $\text{N}-\text{H}\cdots\text{O}$ и $\text{O}-\text{H}\cdots\text{O}$. Внутримолекулярная водородная связь образуется между гидроксильной (ОН) группой, привязанной ко второму углеродному атому, и вторым кислородным атомом карбоксильной группы ($\text{O}_3-\text{H}_3\cdots\text{O}_2$). Межмолекулярная водородная связь образуется между ОН группой, привязанной к четвертому углеродному атому, и первым кислородным атомом карбоксильной группы соседней молекулы ($\text{O}_4-\text{H}_4\cdots\text{O}_1$). Кроме того, в молекуле существуют внутримолекулярные водородные связи типа $\text{N}_1-\text{H}_1\text{A}\cdots\text{O}_1$, $\text{N}_2-\text{H}_2\text{A}\cdots\text{O}_1$ и $\text{N}_2-\text{H}_2\text{B}\cdots\text{O}_1$ между аминогруппами OPD и первым кислородным атомом 2,4-DBA, которые образуют зигзагообразные водородные связи. Эти водородные связи и взаимодействия ван-дер-Ваальса проявляются на поверхности Хиршфельда в виде красных пятен. Эти взаимодействия были количественно исследованы и визуализированы. Объем поверхности Хиршфельда $V=593,58 \text{ \AA}^3$, а площадь поверхности $S=503,30 \text{ \AA}^2$. Общая энергия межмолекулярного взаимодействия молекулы составляет $-349,3 \text{ кЖ/моль}$.

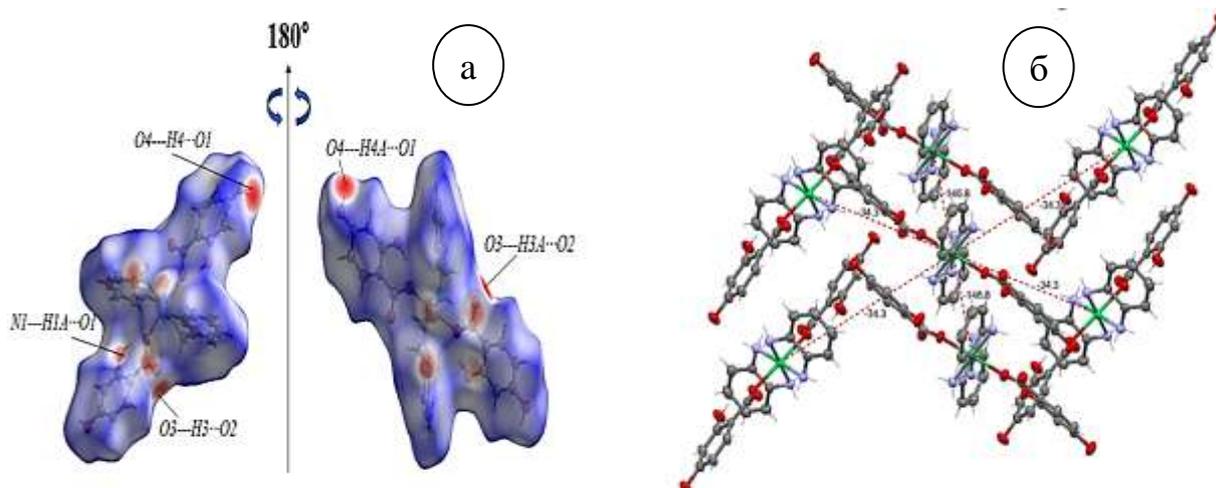


Рис. 12. Поверхность Хиршфельда комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ (а) и энергии межмолекулярного взаимодействия (б).

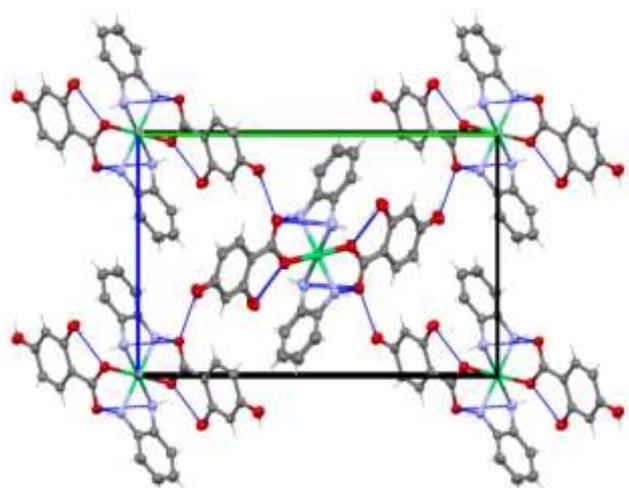


Рис. 13. Кристаллическая структура комплекса $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ вдоль оси *a*.

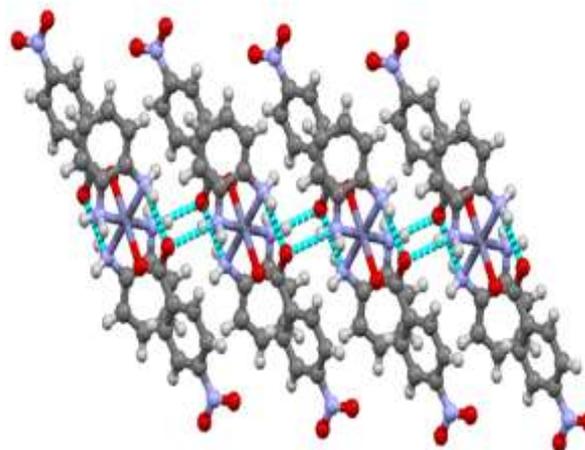


Рис. 14. Выравнивание кристаллов комплексного соединения $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(\text{pNBA})_2]$ вдоль оси *b*.

Синтезированные комплексные соединения были исследованы с использованием программы Mercury 3.8 для расчета энергий межмолекулярного взаимодействия. Было установлено, что с уменьшением плотности молекул в кристаллической ячейке также уменьшаются их энергии межмолекулярного взаимодействия. Эти закономерности можно объяснить через кристаллическую структуру молекул, радиус атома металла и природу лигандов (табл. 10).

Табл. 10.

Энергии межмолекулярного взаимодействия и плотности в энергетических ячейках полученных комплексных соединений.

Комплексные соединения	$[\text{Cd}(\text{OPD})_3 \text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$	$[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1,5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(\text{pNBA})_2]$	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	$[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+ (\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$	$[\text{Co}(\text{OPD})_2 \text{SO}_4]_n$
Дх, г/см ³	1.742	1.714	1.627	1.610	1.601	1.589	1.582	1.499	1.463
Общая энергия. кж/моль	-425.2	-420.1	-395.6	-370.8	-349.3	-340.2	-332.6	-330.1	-320.6

Синтезированные комплексные соединения были исследованы на бактериоцидные свойства против штаммов бактерий *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus* и грибка *Candida albicans*. В результате было установлено, что комплексные соединения $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ обладают высокой антагонистической активностью против выбранных штаммов бактерий.

Биологическая активность лигандов и полученных комплексных соединений против микробов (3-5 дней)

№	Полученные образцы	Бактериальные штаммы (Антагонистическая активность, д, мм)				
		<i>Bacillus subtilis</i>	<i>Pseudomonas aeruginosa</i>	<i>Escherichia coli</i>	<i>Candida albicans</i>	<i>Staphylococcus aureus</i>
К	OPD	10	12	16	10	11
02	2,4-DBA	14	11	13	14	16
03	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	20	18	34	22	35
04	$[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	18	21	36	24	30
05	$[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	28	18	26	19	24
06	$[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$	18	16	21	15	20



Bacillus subtilis



Escherichia coli



Staphylococcus aureus

Рис. 15. Антагонистическая активность комплексных соединений к тест-штаммам

ВЫВОДЫ

1. Впервые было синтезировано 9 новых смешанных лигандных комплексных соединений, состав которых включает 1,2-диаминобензол и 2,4-дигидроксibenзойную кислоту с некоторыми d-металлами в соотношении $M:L^1:L^2$ 1:2:2, 1:3:1, 1:2:1, и получены их монокристаллы. Синтезированные комплексные соединения $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1.5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3] \text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)^{2-}$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ были внесены в Кембриджскую базу данных кристаллографических данных (Cambridge Crystallographic Data Center) и получили депозитные номера 2268254, 2268255, 2346685, 2402204, 2346687, 2268256, 2404717, 2404716 соответственно.

2. Состав, кристаллическая структура, физико-химические свойства синтезированных комплексных соединений были определены и проанализированы с помощью методов РТТ, ИК-, Раман-спектроскопии, УФ-спектрофотометрии, термического анализа (ТГ, ДТА) и ряда квантово-химических методов. В комплексных соединениях $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ с помощью методов исследования было установлено, что металлы имеют одинаковую координацию и изоструктурность. В этих изоструктурных комплексах было установлено, что длина связей $M-N$ и $M-O$ увеличивается в ряду $\text{Ni} < \text{Zn} < \text{Cd}$.

3. Стабильность синтезированных комплексных соединений в растворах была определена методом Бабко, и в соответствии с этим было установлено, что в изоструктурных комплексных соединениях $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] > [\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ увеличение 3d-электронов соответствует закономерностям Ирвинга-Вильямса.

4. На основе квантово-химических исследований изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ были определены электродонорные и электроакцепторные части, реакционная способность, а также энергии ЮБМО и КБМО, на основе которых вычислены значения η , σ , ΔE , χ и ω . С учетом влияния растворителей, с использованием метода СРСМ, были определены изменения термодинамических параметров (ΔH , ΔG и ΔS) в процессе сольватации и гидратации изоструктурных комплексных соединений $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ и $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$.

5. Были проведены исследования энергии межмолекулярных взаимодействий в кристаллической ячейке синтезированных комплексных соединений и анализ поверхности Хирсфельда. Согласно анализу поверхности Хирсфельда, в кристаллической ячейке основные вклады вносят взаимодействия Н...Н (31,5-61%), Н...С/С...Н (15,8-28,7%), О...Н/Н...О (19,7-38,4%). В изоструктурных комплексных соединениях $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] < [\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2] < [\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ наблюдается увеличение площади и объема поверхности Хирсфельда. Также были продемонстрированы закономерности взаимосвязи между энергиями межмолекулярных взаимодействий и плотностью кристаллической ячейки комплексных соединений..

6. Раствор 0,03% комплекса, образованного 1,2-диаминобензолом и 2,4-дигидроксibenзойной кислотой с ионом Zn(II), был рекомендован для использования в качестве добавки к дезинфицирующим средствам на совместном предприятии «NOVA FARM» в Узбекистане и Индии.

**ONE-TIME SCIENTIFIC ADVICE BASED ON THE SCIENTIFIC
COUNCIL PhD.03/30.04.2022.K.78.05 FOR THE AWARD OF AN
ACADEMIC DEGREE AT TERMIZ STATE UNIVERSITY**

TERMIZ STATE UNIVERSITY

AHATOV ALISHER

**SYNTHESIS, CRYSTAL STRUCTURES AND PHYSICOCHEMICAL
PROPERTIES OF COMPLEX COMPOUNDS OF SOME d-METALS
WITH 1,2-DIAMINOBENZENE AND 2,4-DIGIDHROXYBENZOIC ACID
WITH MIXED LIGAND**

02.00.01-Inorganic chemistry

02.00.04-Physical chemistry

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

Термиз-2025

The dissertation topic of the Doctor of Philosophy (PhD) in technical sciences is registered in the Higher Attestation Commission under the Ministry of Higher Education, Science and Innovation with registration numbers of B2024.3.PhD/K818.

The dissertation has been prepared at the Termez State University.

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

Supervisors:

Turaev Khayit

Doctor of chemical sciences, professor

Ashurov Jamshid

Doctor of chemical sciences, professor

Official opponents:

Ruzimuradov Olim

Doctor of chemical sciences, professor

Razzakova Surayyo

Doctor of Philosophy of Science in Chemistry,
Associate Professor

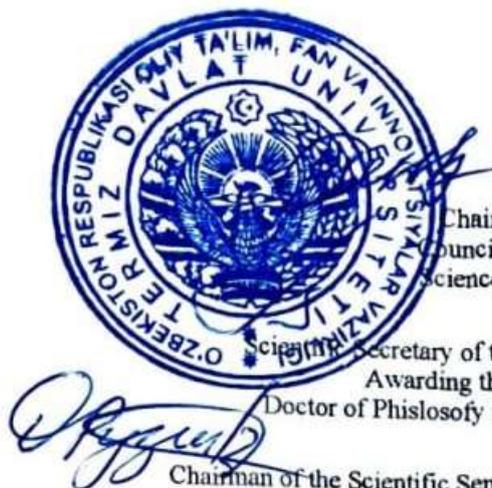
Leading organization:

Samarkand State University

The defense of the thesis will take place " 1 " 02 2025 at " 14⁰⁰ " hours at a meeting of the One-time Scientific Council based on Scientific Council No. DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 at Termez State University at the address: 190111, Surkhandarya region, Termez, st. Barkamol Avlod, 43. Tel.: (+99876) 221-74-55, fax: (+99876) 221-71-17, e-mail: ternizdu@umail.uz.

The thesis is registered at the Information Resource Center of Termez State University under No. _____, which can be found at the IRC (190111, Surkhandarya region, Termez, Barkamol Avlod St., 43. Tel.: (+99876) 221-74-55, fax: (+99876) 221-71-17, e-mail: ternizdu@umail.uz).

The abstract of the dissertation was sent out " 1 " 02 2025.
(Protokol at the register No. 1 dated " 1 " 02 2025).



Z.Yakhshiyeva

Chairman of the Scientific Council for the Awarding of Sciences Degrees, Professor

Y.Geldiyev

Secretary of the Scientific Council Awarding the Scientific Degrees, Doctor of Philosophy in Chemical Sciences

O.Ruzimuradov

Chairman of the Scientific Seminar under Scientific Council for Awarding the Scientific Degrees, Doctor of Chemical Sciences, Professor

INTRODUCTION (abstract of doctor of philosophy PhD dissertation)

The aim of the research is to synthesize mixed ligand complex compounds of some d-metals with 1,2-diaminobenzene and 2,4-dihydroxybenzoic acid, and to determine their molecular and crystal structures, as well as their physicochemical properties.

The objects of the research are Co(II), Ni(II), Zn(II), Cd(II) salts, 1,2-diaminobenzene, 2,4-dihydroxybenzoic acid, and the mixed ligand complex compounds synthesized based on them. Additionally, to determine the bioactivity of the synthesized complex compounds, bacterial strains such as *Bacillus subtilis*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Staphylococcus aureus*, and *Candida albicans* were selected.

The scientific novelty of the research is as follows:

For the first time, 9 new mixed-ligand complex compounds of Ni(II), Co(II), Zn(II), and Cd(II) cations with 1,2-diaminobenzene and 2,4-dihydroxybenzoic acid were synthesized, and their monocrystals were obtained;

Using the RTT method, the composition, structure, M-L coordination rules, and spatial states of the synthesized mixed-ligand complexes were determined;

The electronic structure, reactivity, energetic, and geometric parameters of the synthesized complex compounds were determined using quantum-chemical methods;

The changes in thermodynamic parameters of the isostructural complexes $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ and $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$ under the influence of various solvents were calculated using the SRSM (Solvent-Resembling Polarizable Environment Model) method;

The intermolecular interaction energies and Hirshfeld surface area analyses of the synthesized complexes were determined;

The thermal stability and stability constants of the synthesized complex compounds in solutions were calculated using the Babko method;

The biological activity of the synthesized complex compounds against bacterial strains was determined based on experimental test results.

Implementation of research results. Based on the obtained scientific results on the synthesis of mixed ligand complex compounds of some d-metals with 1,2-diaminobenzene and 2,4-dihydroxybenzoic acid, their physicochemical properties and biological activity were determined:

X-ray structural analysis data of mixed ligand complex compounds containing $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3](1.5\text{-NDK})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$, $[\text{Cd}(\text{OPD})_3]\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{C}_6\text{H}_9\text{N}_2]_2^+(\text{C}_{10}\text{H}_6\text{S}_2)_2^2$, $[\text{Zn}(\text{OPD})_2(p\text{NBA})_2]$ and $[\text{Ni}(\text{OPD})_2(3\text{-NFA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ have been deposited in the Cambridge Crystallographic Data Centre (<https://www.ccdc.cam.ac.uk/conts/retrievhg.html>) with deposit numbers 2268254, 2268255, 2346685, 2402204, 2346687, 2268256, 2404717, and 2404716. As a result, the data entered into the database have allowed the use of this information for the synthesis of similar compounds and the description of their structures.

A 0.03% solution of the Zn(II) complex formed with 1,2-diaminobenzene and 2,4-dihydroxybenzoic acid ($[\text{Zn}(\text{OPD})_2(2,4\text{-DBA})_2]$) has been implemented in the production of disinfectants at the "NOVA FARM" LLC joint venture between Uzbekistan and India (based on the information letter No. 44 from "NOVA FARM" LLC dated November 25, 2024). As a result, it allowed the production of highly effective disinfectants with bacterial protective properties.

The volume and structure of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references, and appendices. The total length of the dissertation is 118 pages.

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

I bo'lim (I часть; part I)

1. Ahatov A.A., Turaev Kh.Kh., Toshkulov A.Kh , Ashurov J. M., Tillaev Kh.R. Nomozov A. K. Synthesis, crystal structure and properties of tris (benzene-1,2-diamine-N,N')-cadmium naphthalene-1,5-disulfonate trihydrate complex compound. //Indian Journal of Chemistry. – 2024. – Т. 63. – С. 1036-1043. . DOI: 10.56042/ijc.v63i10.12760. №3 **SCOPUS**. CitiScore – 1,9. 2023. SJR-0.132.

2. Akhatov A. A., Turaev K. K., Ashurov J. M., Umbarov I. A., Tillaev X. R., Nomozov A. K., Eshdavlatov E. A. Synthesis, structure and hirshfeld surface analysis of the complex compound based on Cd (II) salt and o-phenylenediamine.// Recent Contributions to Physics.–2024. №4 (91) 77-85. DOI:10.26577/RCPH.2024.v91.i4.a8 **WOS** ISSN / eISSN: 1563-0315 / 2663-2276

3. Ахатов А.А., Тураев Х.Х., Ашуров Ж.М., Тиллаев Х.Р. Синтез и исследование бис(2-аминоанилин) нафталин 1,5-дисульфонат комплекса на основе о-фенилендиамин//Universum: “химия и биология” 2024. -№5(119).- С. 5-13. DOI - 10.32743/UniChem.2024.119.5.17440 (02.00.00; №2).

4. Ахатов А.А., Тураев Х.Х., Ашуров Ж. М., Тиллаев Х.Р. Синтез и исследование смешанно-лигандного соединения иона Ni(II) с о-фенилендиамином и 2,4-дигидрооксобензойной кислотой. Химический журнал Узбекистана, 2024, №1-79-85-b. (02.00.00; №6).

5. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillayev Kh.R., Djalilov A.T. O-fenilendiaminning naftalin 1,5-disulfokislotalari bilan hosil qilgan molekulyar kompleksi sintezi va tadqiqoti. NamDU ilmiy axborotnomasi 2023-yil №.12 -71-76-b. (02.00.00.№18).

6. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillaev X.R., Djalilov A.T. Kadmiy (II) ionining o-fenilendiamin va naftalin-1,5-disulfo kislotasi bilan aralash ligandli kompleksi sintezi va tadqiqoti// “O‘zbekiston Milliy universiteti xabarlari”, 2023, №(3/2). 359-361-b (02.00.00; №12).

7. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillayev X.R., Karimov M.U. Tris(1,2-fenilendiamin) kadmiy (II) sulfat monogidрати kompleksining kristall tuzilishi va tadqiqoti // QarDU xabarlari Ilmiy-nazariy, uslubiy jurnal. -2024. №.(1)2 76-80-b.OAK Rayosatining - 2022 yil 31-martdagi 314/9.2 - son qarori. <https://oak.uz/pages/480>.

II bo'lim (II часть; part II)

8. Ahatov A.A., Turaev Kh.Kh., Ashurov J. M., Tillaev Kh.R. O-fenilendiamin asosida olingan aralash ligandli $[(Cd(C_6H_8N_2)_2(C_7H_6O_4)_2)]$ kompleks birikmasining hirshfeld sirt yuza tahlili “Kimyoning dolzarb muommolari” Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to‘plami.-Urganch.2024. -21-22 iyun -6-7-b.

9. Ahatov A.A., Turayev X.X. O-fenilendiamin asosida olingan tris(1,2-fenilendiamin) kadmiy (II) sulfat monogidrat kompleksining hirshfeld sirt yuza

tahlili // Ilm-fan muammolari tadqiqotchilar talqinida” mavzusidagi xalqaro ilmiy konferensiya -Xo‘jand, Farg‘ona.-2024 15-fevral. -151-153-b

10. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillayev X.R. O-fenilendiamin asosida olingan $[(\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_4)_2]$ kompleks birikmasining sintezi va hirshfeld sirt yuza tahlili // Tabiiy fanlar sohasidagi dolzarb muammolar va innovatsion texnologiyalar” Xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya -Toshkent -2024. 4-5 aprel. -31-32-b.

11. Ahatov A.A., Turayev X.X., , Ashurov J. M., Tillayev Kh.R., Karimov M.U. O-fenilendiamin asosida aralash ligandli komplekslar sintezi va spektroskopik tadqiqoti // Nazariy va eksperimental kimyo hamda kimyoviy texnologiyaning zamonaviy muommolari. Xalqaro ilmiy-amaliy anjumani -Qarshi 2023 20-sentyabr.-408-411-b.

12. Ahatov A.A., Turaev Kh.Kh., , Ashurov J. M., Tillaev X.R.O-fenilendiaminning Cd (II) ioni bilan hosil qilgan aralash ligandli kompleksining bog‘lar geometriyasi // Fizikaviy va kolloid kimyoning fundamental va amaliy muommolari hamda ularning innovatsion yechimlari. -Namangan-2024. -9-10-fevral -944-946-b.

13. Ahatov A.A., Turayev X.X.,Ashurov J. M., Tillaev X.R.Naftalin 1,5-disulfokislotasi bilan o-fenilendiaminning hosil qilgan molekulyar kompleksi sintezi va bog‘lar geometriyasi // Fizikaviy va kolloid kimyoning fundamental va amaliy muommolari hamda ularning innovatsion yechimlari -Namangan-2024. -9-10- fevral -942-944-b.

14. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillaev X.R.Naftalin 1,5-disulfokislotasi bilan o-fenilendiaminning hosil qilgan molekulyar kompleksi sintezi va bog‘lar geometriyasi // Актуальные проблемы создания использования высокий технологий переработки минерально-сырьевых ресурсов Узбекистана. -Ташкент-2023 -16-17 ноябрь 409-410-b

15. Ahatov A.A., Turayev X.X., , Ashurov J. M., Tillaev X.R. O-fenilendiamin asosida olingan $[(\text{Cd}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_4)_2]$ kompleks birikmasining sintezi va IQ-spektr tahlili // Материалы республиканской научно-практической конференции достижения и перспективы супрамолекулярной химии “Достижения и перспективы супрамолекулярной химии” года г. -Ташкент -2024 15 мая -127-130с

16. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J.M., Tillayev X.R. O-fenilendiamin asosida olingan $[(\text{Ni}(\text{C}_6\text{H}_8\text{N}_2)_2(\text{C}_7\text{H}_6\text{O}_4)_2]$ kompleks birikmasining sintezi va hirshfeld sirt yuza tahlili // Материалы республиканской научно-практической конференции достижения и перспективы супрамолекулярной химии “Достижения и перспективы супрамолекулярной химии” года г. -Ташкент -2024 15 мая 125-127 с.

17. Ahatov A.A., Turayev X.X., , Ashurov J. M., Tillaev X.R., Alimnazarov B.X. Bis(2-aminoanilin) naftalin-1,5-disulfonat molekulyar kompleksining sintezi va kristall tuzilishi // Материалы республиканской научно-практической конференции достижения и перспективы супрамолекулярной химии “Достижения и перспективы супрамолекулярной химии” года г. -Ташкент -2024 15 мая 123-125с

18. Ahatov A.A., Turayev X.X., Ashurov J. M., Tillayev X.R., Kasimov Sh.A. 2-aminoetil 2-(fenilamino)benzoat sintezi va uning Ni(II) tuzi bilan hosil qilgan kompleksi va tadqiqoti // “Kompleks birikmalar kimyosi va analitik kimyo fanlarining dolzarb muommolari” Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari -Termiz -2022 -19-21-may. 192-193b.

19. Ahatov A.A., Turaev Kh.Kh., Ashurov J.M., Tillaev Kh.R., Nomozov A.K., Uralov N.B. Synthesis of complex formation of Cd(II) ion with 1,2-diaminobenzene and Hirschfeld surface analysis // International Scientific Research Forum in honor of 90th anniversary of Al-Farabi Kazakh National University -Almaty -2024 -26-28-september -264-266 p.

