

**BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/30.12.2019.K.72.01
RAQAMLI ILMIY KENGASH**

XORAZM MA'MUN AKADEMIYASI

MASHARIPOV AZAMAT TURSINBOYEVICH

**BA'ZI BIOGEN METALLAR TUZLARINING SEFOTAKSIM VA
SEFOTAKSIM-AMID KOMPLEKSLARI: SINTEZ, TUZILISHI VA
XOSSALARI**

02.00.01 – Noorganik kimyo

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

Buxoro – 2025

**Kimyo fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi
avtoreferati mundarijasi**
**Оглавление автореферата диссертации доктора философии
(PhD) по химическим наукам**
**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy
(PhD) on chemical sciences**

Masharipov Azamat Tursinboyevich

Ba‘zi biogen metallar tuzlarining sefotaksim va sefotaksim-amid komplekslari:
sintez, tuzilishi va xossalari3

Машарипов Азамат Турсинбаевич

Цефотаксим и цефотаксим-амидные комплексы солей некоторых биогенных
металлов: синтез, строение и свойства.....21

Masharipov Azamat

Cefotaxim and cefotaxim-amide complexes of salts of some biogenic metals:
synthesis, structure and properties41

E‘lon qilingan nashrlar ro‘uxati

Список опубликованных работ

List of published works.....45

**BUXORO DAVLAT UNIVERSITETI HUZURIDAGI
ILMIY DARAJALAR BERUVCHI PhD.03/30.12.2019.K.72.01
RAQAMLI ILMIY KENGASH**

XORAZM MA'MUN AKADEMIYASI

MASHARIPOV AZAMAT TURSINBOYEVICH

**BA'ZI BIOGEN METALLAR TUZLARINING SEFOTAKSIM VA
SEFOTAKSIM-AMID KOMPLEKSLARI: SINTEZ, TUZILISHI VA
XOSSALARI**

02.00.01 – Noorganik kimyo

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

Buxoro – 2025

Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2023.3.PhD/K660 raqam bilan ro'yxatga olingan

Dissertatsiya Xorazm Ma'mun akademiyasida bajarilgan.

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

Ilmiy rahbar:

Hasanov Shodlik Bekpo'latovich

kimyo fanlari nomzodi, katta ilmiy xodim

Rasmiy opponentlar:

Kasimov Sherzod Abduzairovich

kimyo fanlari doktori, professor

Mardonov O'ktam Mardonovich

kimyo fanlari nomzodi, dotsent

Yetakchi tashkilot:

Samarqand davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Buxoro davlat universiteti huzuridagi PhD.03/30.12.2019.K.01.03 raqamli Ilmiy kengashning 2025 yil «29» 03 soat 15⁰⁰ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 705018, Buxoro viloyati Muhammad Iqbol ko'chasi 11-uy. Tel.: +998 (65) 221 29 14, faks: +998 (65) 221 27 64, e-mail: buxdu_rektor@buxdu.uz).

Dissertatsiya bilan Buxoro davlat universitetining Axborot resurs markazida tanishish mumkin (№ _____ raqami bilan ro'yxatga olingan). Manzil: (Manzil: 705018, Buxoro viloyati Muhammad Iqbol ko'chasi 11-uy. Tel.: +998 (65) 221 29 14, faks: +998 (65) 221 27 64, e-mail: buxdu_rektor@buxdu.uz).

Dissertatsiya avtoreferati 2025 yil «11» 03 kuni tarqatildi.

(2025 yil «11» 03 dagi 3 -raqamli reyestr bayonnomasi).


B.B. Umarov
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash raisi, t.f.d., professor
Q.S. Avezov
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash koubi, PhD, dots.
M.R. Amonov
Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash qoshidagi ilmiy seminar raisi, t.f.d., professor

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. So‘nggi yillarda ko‘plab bakteriya shtammlari antibiotiklarga qarshi chidamli bo‘lib qolmoqda. Antibiotiklar uzoq yillardan buyon keng qo‘llanilishi sababli ko‘plab bakteriyalar ularga qarshilik ko‘rsatish mexanizmlarini rivojlantirdi. Bu esa kasalliklarning davosiz bo‘lish xavfini oshiradi va jiddiy global sog‘liq muammosiga aylanmoqda. Biogen metall-komplekslar antibiotiklarni o‘z ichiga olgan holda, bakteriyalarning himoya mexanizmlarini buzishi va ularni zaiflashtirishi mumkin. Buning natijasi antibiotiklar samaradorligini tiklashda muhim qadam hisoblanadi.

Jahonda geteroatomli siklik ligandlar metallurgiyada nodir metallarni ajratishda, lyuminessent xususiyatga ega materiallar olishda, biologik faollik namoyon qiluvchi moddalar sintezida keng qo‘llanilmoqda. Bunday turdagi amidlarning biogen metallar bilan aralash ligandli kompleks birikmalari esa tirik organizmlarda boruvchi hayotiy jarayonlarni modellashtirishda, atrof-muhitni og‘ir metallardan tozalashda, metallurgiya sohasida hamda qishloq xo‘jaligida o‘simliklar uchun stimulyatorlar ishlab chiqishda qo‘llanilib kelinmoqda. Tarkibida azot, kislorod, oltingugurt tutgan geteroatomli siklik ligandlar va amidlar asosida biogen metallar bilan koordinatsion birikmalarni o‘rganish va xalq xo‘jaligida qo‘llash bo‘yicha ilmiy tadqiqotlar olib borish kabi ustuvor yo‘nalishlarga alohida e‘tibor berilmoqda.

Respublikamizda biologik faol moddalar asosida biogen metallar bilan koordinatsion birikmalar sintez qilish, ularni kimyo sanoatida qo‘llash bo‘yicha anaerob sharoitdagi korroziya jarayonini keltirib chiqaruvchi bakteriyalarga qarshi biokorroziya ingibitorlari ishlab chiqarishga alohida e‘tibor qaratilmoqda. Bu borada zamonaviy talablarga javob bera oladigan korroziya ingibitorlarini sintez qilishning ilmiy asoslarini yaratish va import o‘rnini bosuvchi mahalliy biokorroziya ingibitorlar bilan ta‘minlash sohasida keng miqyosli ishlar amalga oshirilmoqda. O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son “2022–2026 yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi Farmoni¹ mavjud imkoniyatlarni to‘liq ishga solgan holda mahalliy sanoat tarmoqlari eksport salohiyatini yanada rivojlantirish”ga yo‘naltirilgan muhim vazifalar belgilab berilgan. Shu jumladan, iqtisodiy samarador biokorroziya ingibitorlarni ishlab chiqarish uchun ekologik toza birikmalarni amaliyotga joriy qilish muhim ahamiyat kasb etadi.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi “2022–2026 yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi PF-60-son Farmonida, 2018-yil 25-oktyabrdagi “O‘zbekiston Respublikasida kimyo sanoatini jadal rivojlantirish chora-tadbirlari to‘g‘risida”gi PQ-3983-son, 2019-yil 3-apreldagi “Kimyo sanoatini yanada isloh qilish va uning investitsiyaviy jozibadorligini oshirish chora-tadbirlar to‘g‘risida”gi PQ-4265-son, 2021-yil 13-fevraldagi “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 PQ-4992-son Qarori hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa

¹ 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

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. Mazkur tadqiqot Respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining VII. Kimyo, kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar ustuvor yo'nalishiga muvofiq bajarilgan.

Muammoning o'rganilganlik darajasi. Dunyo ilm-fanida 1,3-N,S-ligandli biologik faol birikmalarning biogen metallar bilan koordinatsion birikmalari Li B., Zhang T., Sim W. J., Leung H. W., Rossmann J., Yu X., Tamura I. Guo R., Chen J., Samarghandi M. R., Ahmed M. J., Theydan S. K., Nazari G., Jiang Mu, Xian J. M., Wang Lian, Hong W. L., Ji Rong J. R., Perez A. G., David A. R., Zimmerman M. R., Jemal A., Ahmad S. kabi olimlar ishlarida ko'rib chiqilgan. Tadqiqotlar natijasida gomo- va geteroligandli koordinatsion birikmalar sintezi amalga oshirilgan, ularning tuzilishi, kimyoviy va ayrim fizik xossalari tahlil qilingan.

MDH mamlakatlarida koordinatsion birikmalar va ularning amaliyotga tatbiqi bo'yicha Petrichko M.I., Zhuravlev V.D., Savinkina E.V., Karavaev I.A., Grigoriev M.S., Podbolotov K.B., Volochko A.T., Khort A.A., Likoshin D.D., Karavaev I.A. kabi olimlar ilmiy tadqiqotlar olib borishgan. Olimlar tomonidan kompleks birikmalarning tuzilishi, tarkibi, xossasi va biologik faolligi bo'yicha bir qancha ishlar tahlili amalga oshirilgan.

Respublikamizda koordinatsion birikmalar kimyosi sohasida akademiklar N.A.Parpiyev va B.T.Ibragimov, professorlar X.T.Sharipov, B.B.Umarov, A.A.Shabilolov, T.A.Azizov, Sh.A.Kadirova, Z.Ch. Kadirova, X.X.To'rayev, Sh.Sh. Daminova, J.M.Ashurov va Sh.A. Kasimov kabi olimlarning ilmiy ishlarida tiazolin hosilalari, Shiff asoslari, olti a'zoli geterosiklik birikmalar, metall karboksilatlar bilan amidlar asosida koordinatsion birikmalar sintez qilingan, tarkibi, tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari aniqlangan. Keltirilgan ma'lumotlarga asoslangan holda oraliq metallar karboksilatlar asosida poliyadroli koordinatsion birikmalar sintezini amalga oshirish, olingan birikmalarning tarkibi, tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalarini tahlil qilish kam o'rganilgan soha ekanligi ma'lum bo'lmoqda. Shuning uchun turli metallar tutgan koordinatsion birikmalar sintezini amalga oshirish va tahlillar o'tkazish, ham nazariy, ham amaliy ahamiyatga ega.

Dissertatsiya tadqiqotining dissertatsiya bajarilgan ilmiy tadqiqot muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari rejalari bilan bog'liqligi. Dissertatsiya tadqiqoti Xorazm Ma'mun akademiyasi ilmiy-tadqiqot ishlari rejasining PZ-2017092435 «Xorazm viloyati sharoitida dorivor o'simliklarni o'stirish va ular asosida biologik faol qo'shimchalar ishlab chiqish» (2017-2020 yy.) mavzusidagi fundamental loyihasi doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi: Biogen metall ionlarining sefotaksim hamda amidlar bilan gomo- va aralashligandli kompleks birikmalari sintezi, ularning tarkibi, tuzilishi, xossalarini o'rganish, qo'llanilish sohasini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

kvant-kimyoviy hisoblashlar (KKH) usuli bilan ko'p funksional, polidentat sefotaksim va amid ligandlarning koordinatsion faol markazlarini aniqlash va ularning turli metall ionlari bilan kompleks hosil qilishga ta'sir etuvchi omillarini

aniqlash;

biogen metall ionlarining, sefotaksim va amidlar bilan gomo- hamda aralash ligandli kompleks birikmalarini sintez qilish, ularning tarkibi, tuzilishini aniqlash va fizik-kimyoviy, biologik xossalarini tadqiq etish;

IQ-spektroskopiya usuli bilan turli d-elektron konfiguratsiyali metall ionlarining sintez qilingan kompleks birikmalarida ko'p funksional guruhli sefotaksim va amid ligandlarning koordinatsiyalanish usuli va kompleks birikmalarning tuzilishini aniqlash;

Rengen tuzilish tahlil (RTT) usuli bilan ayrim sintez qilingan birikmalarning kristallografik, geometrik parametrlarini va tuzilishini aniqlash;

differensial termogravimetrik (DTG) tahlil usuli bilan turli metall ionlarining gomo- va aralash ligandli koordinatsion birikmalarining termik xossalarini tadqiq qilish va ularga ta'sir etuvchi omillarni aniqlash;

EPR-spektroskopiya usuli bilan sintez qilingan paramagnit metall ionlari kompleks birikmalarining tarkibi, tuzilishi, spektral va magnit xossalarini tadqiq etish;

sintez qilingan kompleks birikmalarning fizik-kimyoviy, biologik xossalarini tadqiq etish va ularning amalda qo'llanilish sohalarini aniqlash.

Tadqiqotning ob'ekti sefotaksim, amidlar va ularning biogen metallar tuzlari bilan sintez qilingan koordinatsion birikmalar tadqiqotning ob'ekti hisoblanadi.

Tadqiqotning predmeti biogen metallar tuzlarining sefotaksim va amidlar bilan gomo- hamda aralash ligandli koordinatsion birikmalarining sintez qilish usullari, individualligi, tarkibi, tuzilishi, fizik-kimyoviy va biologik xossalarini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning usullari: Dissertatsiya ishida kimyoviy element, rentgenfazaviy tahlil (RFA), IQ-, EPR spektroskopiya, differensial termogravimetrik (DTG) tahlil, rentgen tuzilish tahlili (RTT), kvant-kimyoviy hisoblash usullaridan foydalanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat: kvant-kimyoviy usullar yordamida polifunksional polidentat sefotaksim va amid molekulari atomlaridagi zaryadlarning taqsimoti, energetik parametrlari, reaksiya va koordinatsion xossalari hamda ular hosil qiladigan komplekslarning koordinatsion qurshovi aniqlangan;

ilk bor Ag(I), Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cr(III), Fe(III) tuzlari, sefotaksimning natriyli tuzi, asetamid (CH_3CONH_2) (AA), karbamid ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) (KA), tiokarbamid ($\text{CS}(\text{NH}_2)_2$) (TK) asosida 20 ta yangi anion, kation, neytral koordinatsion birikmalari sintez qilingan;

element, rentgenfazaviy, termik tahlil, IQ-, EPR spektroskopiya, RTT usullari yordamida sintez qilingan yangi birikmalarning individualligi va metall ionlari bilan koordinatsiyalanishi aniqlangan;

EPR spektroskopiya usuli bilan turli elektron tuzilishli $\text{Mn}^{2+}(3d^5)$, $\text{Co}^{2+}(3d^7)$, $\text{Cu}^{2+}(3d^9)$ paramagnit metall ionlarining gomo- va aralash ligandli komplekslari tuzilishi, magnetokimyoviy xossalari markaziy ionlar d-elektron konfiguratsiyasi, ligandlarning elektronodonor atomlari turi (N,O,S) va tabiatiga bog'liqligi aniqlangan;

Ilk bor sefotaksim molekulari va uning asosida sintez qilingan

$[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$, $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl} \cdot (\text{TK})_2]$ kompleks birikmalarning rentgenfazaviy tahlil difraktogrammalaridan olingan natijalarni FullProf dasturida qayta ishlash ma'lumotlari asosida kristall tuzilishlari aniqlangan;

kristallografik va strukturaviy tadqiqotlar natijalari asosida sefotaksim molekulasi polifunksional pentadentat ligandlar sifatida Cu^{2+} ionlari bilan uch yadroli kompleks $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ hosil qilganligi, unda markaziy ionning ikkitasi tetraedrik va bittasi oktaedrik qurshovga egaligi isbotlangan;

sintez qilingan yangi kompleks birikmalardan "SefoCu" kompleks birikma metall konstruksiyasi va qurilmalarida korroziya jarayoniga qarshi ingibitor ta'siri va "SefaCo" kompleks birikmasining *Fusarium oxysporum* zamburug'iga qarshi antifungal ta'siri aniqlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

ilk bor Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlari va sefotaksimning natriyli tuzi, asetamid, karbamid, tiokarbamid ligandlari bilan ishlab chiqilgan 9 ta sintez usullari asosida 20 ta yangi gomo- va aralash koordinatsion birikmalar sintez qilingan;

sintez qilingan yangi koordinatsion birikmalarning koordinatsion tugunining tarkibi, tuzilishi, ligandlarning koordinasiyalash markazlari, biologik faollik namoyon qilish qobiliyatlari aniqlangan;

KKH larga asoslangan holda sintez qilingan birikmalarning energetik parametrlari, elektron zichlikning taqsimlanishi, reaksiyon markazlari aniqlangan;

Sefotaksimning biologik xossalariga asoslanib, sintez qilingan kompleks birikmalarning biologik faolligi molekulyar doking (MD) usuli bilan o'rganilgan, natijalarga ko'ra $[\text{Co}(\text{Cxm})_2]$ ichki kompleks birikmasi pomidor o'simligining zamburug'li va bakteriyali kasalliklariga qarshi xossasi aniqlanib, pestitsid sifatida qo'llanilishiga tavsiya etilgan;

sintez qilingan kompleks birikmalar asosida neft-gaz va kimyo sanoati korxonalari metall konstruksiyasi va qurilmalari korroziyasiga qarshi ingibitorlar yaratilgan.

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi sintez qilingan moddalar IQ-, EPR spektroskopiya, element, rentgenfazaviy – RFA, strukturaviy - RTT, derivatografik - DTG va biologik tahlil hamda kvant-kimyoviy hisoblashlar (KKH) kabi zamonaviy tadqiqot usullari bilan komplekslarning tarkibi va tuzilishi isbotlangan.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati:

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati ilk bor sefotaksim va amidlarning Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlari bilan yangi koordinatsion birikmalarini sintez qilishning optimal parametrlari aniqlangani, yangi kompleks birikmalarining tarkibi, tuzilishi, termik barqarorligi va xossalarini aniqlash natijalari hamda xulosalarni zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari natijalariga tayangan holda amalga oshirilganligi va ko'p funksional polidentat ligandlar koordinatsion birikmalari kimyosining ilmiy ma'lumotlar asosida boyitganligi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati sefotaksim asosida 9 xil usulda 3d-metallarning gomo- va geteroligandli yangi kompleks birikmalarini sintez qilish usullari qo'llanilib, ular asosida o'ziga xos magnetokimyoviy xossali, biologik

faol va metall konstruksiyalarni korroziyadan himoyalovchi komplekslar olinganligi, amaliy natijalardan koordinatsion birikmalar kimyosida foylanishdan iborat.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi. Ba'zi biogen metallar tuzlarining sefotaksim va sefotaksim-amid komplekslari sintezi, fizik-kimyoviy va biologik xossalarni aniqlash bo'yicha olingan ilmiy natijalar asosida:

metallarni korroziyadan himoya qilish samaradorligini baholash tahlillari amalga oshirilib, sefotaksim bilan Cu(II) ning kompleks birikmasi "Muborak gazni qayta ishlash zavodi" MCHJda anaerob korroziyaning samarali ingibitori sifatida жорий etilgan ("Muborak gazni qayta ishlash zavodi" MCHJ ning 2024 yil 18 martdagi 48/G'K-03-son ma'lumotnomasi). Natijada, mahalliy va xorijiy ishlab chiqaruvchilarning ingibitor tarkiblari va xossalari bilan taqqoslanganda $[Cu_3(Cx_m)_2](SO_4)_2$ kompleks birikmasining ingibirlovchilik himoya ta'sirini 77-79 % oshirish imkonini bergan.

"SefaCo" bakterisid ta'sirli stimulyator kompleksi Xorazm viloyati Yangibozor tumanida joylashgan "Mard Jaloliddin" fermer xo'jaligining 4 gektar issiqxona dalasida "Chinto" pomidor navi, "Green house sabzavotlari" fermer xo'jaligining 2 gektar issiqxona dalasida "Alamina" pomidor navi, "Xurshid Rashid bog'i" fermer xo'jaligi 2 gektar ochiq yer dalasiga "Linda" pomidor navlari zamburug'li kasalliklariga qarshi preparat sifatida qo'llanilib, amaliyotga joriy qilingan (O'zbekiston Respublikasi Qishloq xo'jaligi vazirligi Qishloq xo'jaligida bilim va innovatsiyalar milliy markazining 2024-yil 29-martdagi 05/01-05/02-05/04-04-117-son ma'lumotnomasi). Natijada, preparat bilan ishlangan issiqxona va ochiq dalalarida pomidorning rivojlanishi, shonalashi, ko'saklar soni va bo'yi nazoratga nisbatan yuqoriligi, bakteriyali va zamburug'li kasalliklarga chalinish holati kuzatilmaganligi, hosildorligini 57-100 sentnerga oshirish imkonini bergan.

Tadqiqot natijalarining aprotasiyasi. Mazkur tadqiqot natijalari 7 ta, jumladan, 3 ta xalqaro va 4 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma'ruza qilingan va muhokamadan o'tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e'lon qilinganligi. Dissertasiya mavzusi bo'yicha jami 12 ta ilmiy ish chop etilgan, shulardan, O'zbekiston Respublikasi Oliy attestasiya komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 5 ta ilmiy maqola, jumladan, 3 ta respublika va 2 ta xorijiy jurnallarda chop etilgan.

Dissertasiyaning tuzilishi va hajmi. Dissertasiyaning tarkibi kirish, uchta bob, xulosa, 185 nomdagi foydalanilgan adabiyotlar ro'yxati va ilovadan iborat. Dissertasiyaning hajmi 112 betni tashkil etadi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Kirish qismida dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va muhimligi asoslab berilgan, tadqiqotning maqsad va vazifalari belgilangan, uning O'zbekiston Respublikasida fan va texnologiyalarni rivojlantirishning ustuvor yo'nalishlariga muvofiqligi ko'rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari bayon qilingan, ularning ishonchligi asoslangan, tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati ochib berilgan, amaliyotga joriy qilish istiqboli borasida xulosalar chiqarilgan hamda chop ettirilgan ishlar va

dissertatsiyaning tarkibi to'g'risidama'lumotlar keltirilgan.

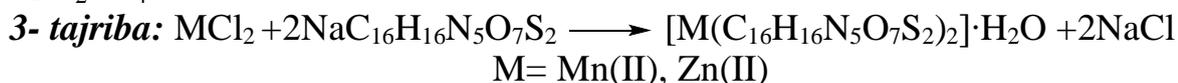
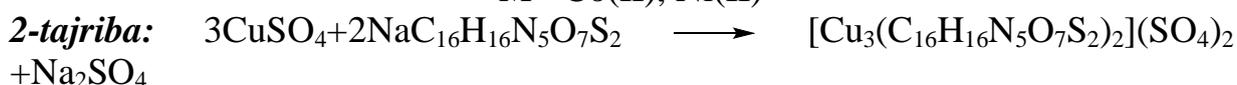
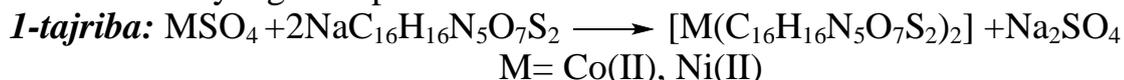
Dissertatsiyaning **“Tiazolkarbon kislotalar va ularning hosilalarini biogen metallar bilan komplekslari (adabiyotlar sharhi)”** deb nomlangan birinchi bobida sefalosporinlarning monodentant, bidentant yoki polidentant holatda koordinatsion bog'lar hosil qilish orqali olingan birikmalari ko'rib chiqilgan. Amidlarning markaziy metall atomiga yoki ikkinchi organik molekula bilan bog'lanish sharoitlari tahlil qilingan. Ligandlarning alohida va gomoligandli metall komplekslari holidagi biologik faolliklari bo'yicha olib borilgan tadqiqotlar o'rganilib, ularda biologik xossalari ta'siri o'rganilmaganligi va ushbu mavzudagi xorijiy va mahalliy adabiyotlar umumlashtirilgan hamda ularning tahlili natijasida ishning maqsadi, vazifalari va dolzarbligiga asoslangan.

Dissertatsiyaning **“Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlarining sefotaksim va amidlar bilan gomo hamda aralash ligandli kompleks birikmalarining sintezi (Tajriba qismi)”** deb nomlangan ikkinchi bobida dissertatsiya tadqiqoti ishi doirasida foydalanilgan asbob-uskunalar va reaktivlar tavsifi, birikmalarni sintez qilish usullari, sefotaksim va amidlar ishtirokidagi kompleks birikmalarni olish hamda ularning fizik-kimyoviy xossalari aniqlash natijalari keltirilgan.

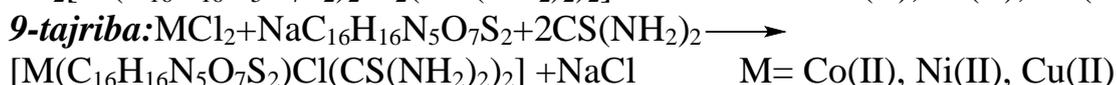
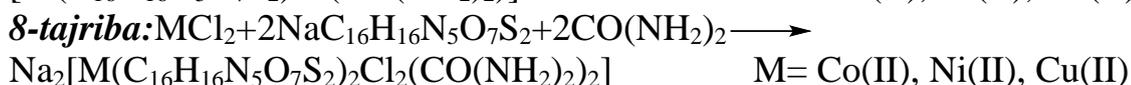
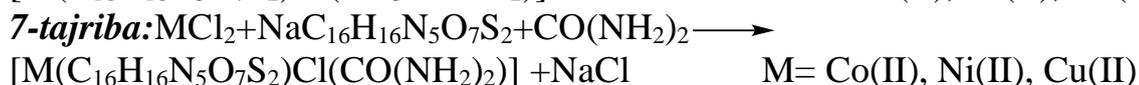
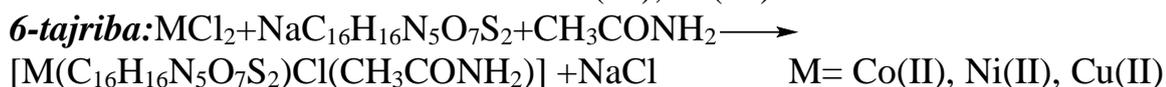
Dissertatsiyaning **“Kompleks birikmalarning fizik-kimyoviy tadqiqoti hamda ularning biologik faolligi”** deb nomlangan 3-bobi Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlarining sefotaksim va amidlar bilan gomo hamda aralash ligandli kompleks birikmalarining kvant-kimyoviy hisoblash natijalari, zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqoti va biologik faolliklarining tahlil natijalariga bag'ishlangan. Olingan kvant-kimyoviy hisoblash natijalari asosida sintez qilingan birikmalarning strukturalari taklif qilindi. Sintez qilingan kompleks birikmalar rentgenfazaviy, strukturaviy, IQ-spektroskopik, termik tahlil usullari yordamida tahlil qilingan. Sintez qilingan yangi kompleks birikmalarning biologik faolligi nazariy o'rganilgan va ularning amaliyotda qo'llash imkoniyatlari keltirilgan.

1. Ba'zi biogen metall ionlarining sefotaksim va amidlar bilan gomo hamda aralash ligandli kompleks birikmalarning sintezi, tarkibi, tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari

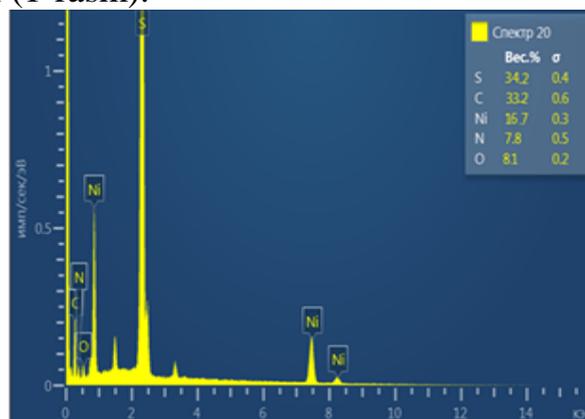
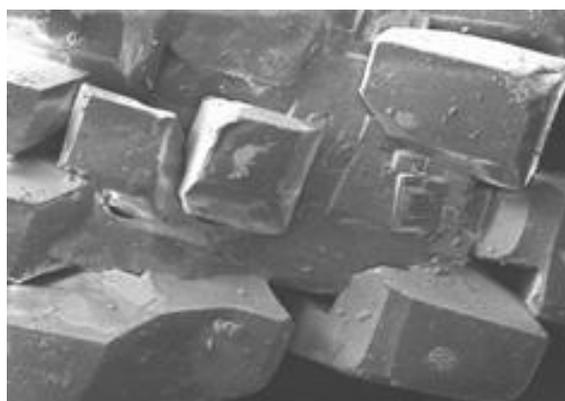
Kompleks birikmalarni sintez qilishda sefotaksim ligandi uchun atsetonitril, amidlar uchun esa suvli eritmalarda olib boriladigan tejamkor usul tanlandi. Buning uchun metallarning xloridli, sulfatli va atsetatli tuzlarining suvdagi eritmalariga aralashtirilgan holda sefotaksim va amidlarning mos ravishda atsetonitrilli va suvli eritmalaridan tegishli nisbatda qo'shildi. Natijada 9 ta tajriba asosida 20 ta yangi kompleks modda olindi.



M=Fe(III), Cr(III)



Sintez qilingan kompleks birikmalar tarkibidagi metall miqdori «Perkin-Elmer» (AQSh) firmasining «3030V» atom-absorbsion spektroskopi yordamida, uglerod, vodorod, azot va oltingugurt miqdori «Carlo-Erba» (Italiya) firmasining «EA 1108» element analizatori yordamida aniqlandi. Ushbu usullarda olingan natijalarni taqqoslash maqsadida kompleks birikmalarning elementlar tahlili va mikrostrukturasi Aztec Energy Advanced X-Act (Oxford) instruments markali elektron skanerlovchi mikroskopi SEM EVO MA 10 (Zeiss) energodispersion rentgen spektrometr yordamida aniqlandi (1-rasm).



1-rasm. $[Ni(C_{16}H_{16}N_5O_7S_2)_2Cl]$ mikrostrukturasi va energiya dispersion tahlili

Alangali fotometrik usulda olingan natijalar asosida Na metalining miqdori kompleks birikmalar tashqi sferasida joylashgan nazariy hisoblangan massasiga mos kelishi aniqlandi, bunda 2-rasmda vertikal qator nur chiqarish intensivlik, gorizontaal qatorda konsentratsiya (mg/l) tasvirlangan.

Bugungi kunda atom absorbsion spektral tahlili moddalarning kimyoviy tarkibini atom bo'yicha aniqlash usuli analitik amaliyotda keng qo'llaniladi. Tadqiqot ishida ushbu tahlil usulidan kompleks birikmalar tarkibidagi metallar miqdorini aniqlashda foydalanildi. Olingan natijalar asosida hosil bo'lgan kompleks birikmalar tarkibida metall va ligandlarning o'zaro nisbatlari aniqlandi va nazariy hisoblangan qiymatlari bilan taqqoslandi, natijalar 1-jadvalda keltirilgan.

1-jadval

Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlarining sefotaksim bilan mono ligandli kompleks birikmalarining element tahlili

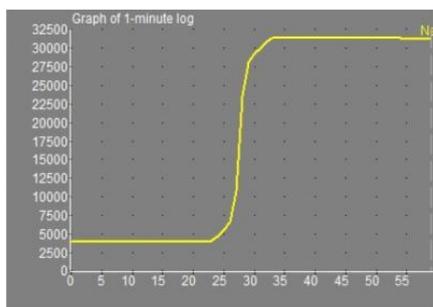
Birikma	M, %		S, %		N, %		C, %		H, %		Na, %		Cl, %	
	Topildi	hisoblandi												
Na[Ag(Cxm)NO ₃]	16.69	16.63	9.89	9.81	12.98	13.03	29.67	29.72	2.47	2.51	3.55	3.52	-	-
[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	6.68	6.65	13.15	13.18	14.38	14.36	39.46	39.44	3.28	3.24	-	-	-	-
[Co(Cxm) ₂]	6.1	6.16	13.23	13.25	14.47	14.43	39.71	39.68	3.3	3.39	-	-	-	-
[Ni(Cxm) ₂]	6.1	6.13	13.23	13.26	14.47	14.48	39.71	39.73	3.3	3.36	-	-	-	-
[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	5.71	5.76	13.29	13.27	14.53	14.56	39.87	39.84	3.32	3.39	-	-	-	-
[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	14.86	14.89	14.86	14.82	10.83	10.81	29.72	29.75	2.47	2.49	-	-	-	-
Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	7.95	7.91	9.79	9.76	10.71	10.75	29.38	29.42	2.75	2.78	3.51	3.56	16.29	16.31
Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	8.51	8.53	9.73	9.74	10.64	10.67	29.2	29.26	2.73	2.77	3.49	3.55	16.19	16.17

2-jadval

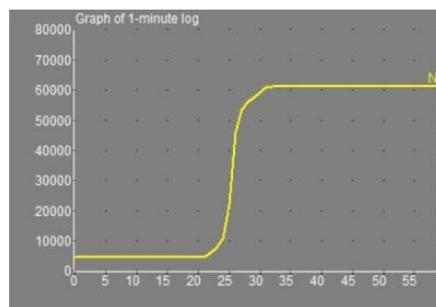
Monoligandli kompleks birikmalarning ayrim fizik xossalari

№	Birikma	T _{suyuq} °C	erituvchilarda eruvchanligi						Chiqish unumi, %
			Suv	Etanol	aseton	Asetonitril	Suv:asetonitril (1:1)	Benzol, Toluol	
1	Na[Ag(Cxm)NO ₃]	210-212	E	O	Q	Q	O	Q	76
2	[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	186-188	O	O	Q	O	E	Q	73
3	[Co(Cxm) ₂]	226-228	O	E	O	Q	E	Q	75
4	[Ni(Cxm) ₂]	140-142	O	O	O	Q	E	Q	86
5	[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	130-133	O	O	Q	Q	E	Q	81
6	[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	240-241	E	O	Q	Q	O	Q	81
7	Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	203-205	O	Q	O	O	E	Q	76
8	Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	165-166	O	O	Q	O	E	Q	79

Izoh: E-eriydi, O- oz eriydi, Q- qiyin eriydi



a)



b)

2-rasm. Na[Fe(Cxm)Cl₃H₂O] (a) va Na[Ag(Cxm)NO₃] (b) kompleks birikmalarining alangali fotometrik tahlil usulida olingan grafiklari

Sintez qilingan monoligandli va aralash ligandli kompleks birikmalarning ayrim fizik xossalari, jumladan, suyuqlanish haroratlari, erituvchilarda erishi va reaksiya unumlari aniqlandi (2-jadval). Hosil bo'lgan kompleks birikmalarda sodir bo'ladigan reaksiyalarni aniqlash maqsadida ularning ba'zi kimyoviy xossalari o'rganildi (3-jadval).

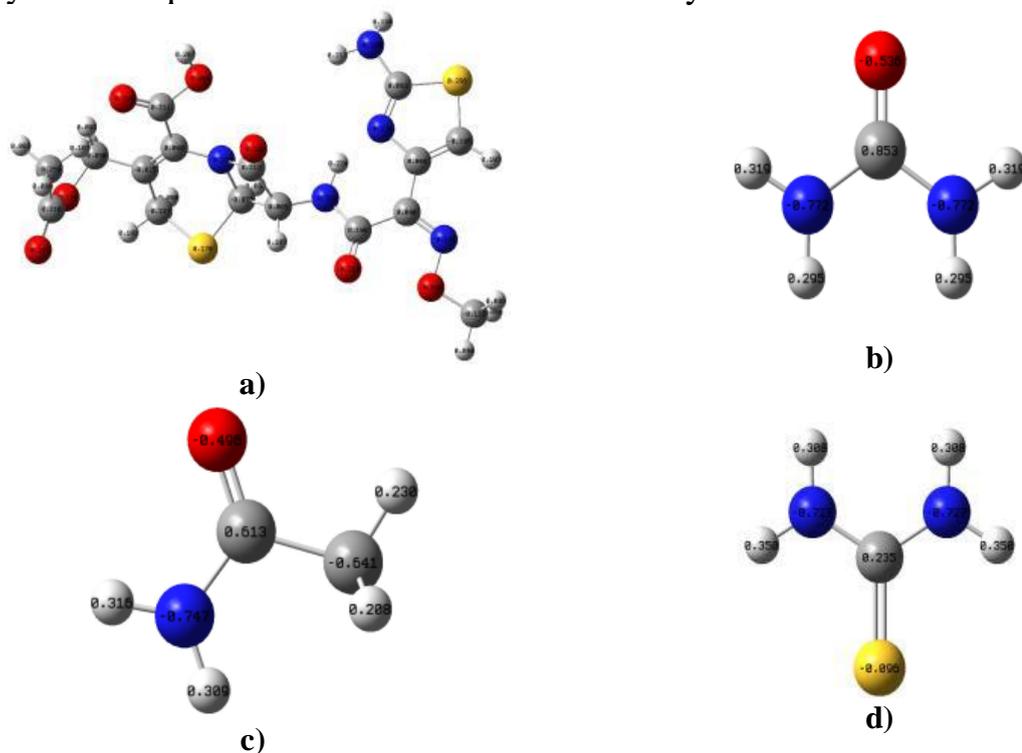
3-jadval

Reaksiya natijalari

№	Kompleks birikmalar	Reagentlar			
		BaCl ₂	NaOH	KH ₂ SbO ₄	AgNO ₃
1	Na[Ag(Cxm)NO ₃]	-	-	Oq ↓	-
2	[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	-	-	-	-
3	[Co(Cxm) ₂]	-	-	-	-
4	[Ni(Cxm) ₂]	-	-	-	-
5	[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	-	-	-	-
6	[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	Oq ↓	-	-	-
7	Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	-	-	Oq ↓	-
8	Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	-	-	Oq ↓	-
9	[Co(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
10	[Co(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
11	[Co(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
12	[Ni(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
13	[Ni(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
14	[Ni(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
15	[Cu(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
16	[Cu(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
17	[Cu(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
18	Na ₂ [Ni(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Oq cho'kma	-
19	Na ₂ [Co(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Oq cho'kma	-
20	Na ₂ [Cu(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Oq cho'kma	-

2. Sefotaksim va amidlarning kvant-kimyoviy hisoblash natijalari

Sefotaksim va amidlarning turli fizik-kimyoviy xususiyatlari Gaussian 09 dasturiy paketi yordamida kvant-kimyoviy tahlil qilindi. Hisoblashlar DFT nazariyasi doirasida B3LYP usulida amalga oshirildi. Model tizimlarni yaratish va vizualizatsiyalash maqsadida GausView dasturlaridan foydanildi.



3-rasm. Optimizatsiyalashtirilgan elektron tuzilishi va Mulliken zaryadlari taqsimoti: sefotaksim (a), karbamid (b), asetamid (c) va tiokarbamid (d)

4-jadval

Ligandlarning kvant-kimyoviy hisoblash parametrlari

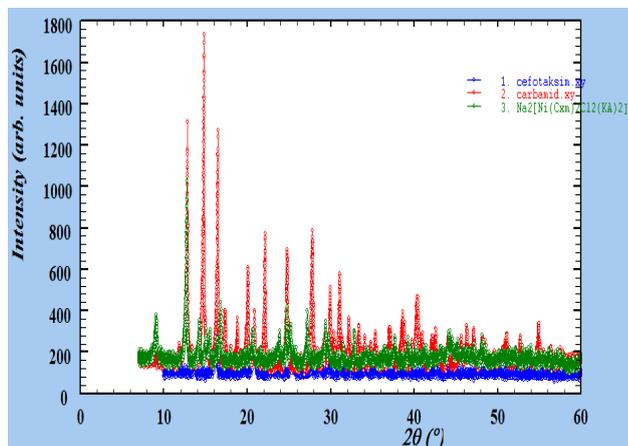
Kvant-kimyoviy parametrlar	C ₁₆ H ₁₆ N ₅ O ₇ S ₂	CO(NH ₂) ₂	CH ₃ CONH ₂	CS(NH ₂) ₂
E _{HOMO} , eV	-0.20635	-0.19505	-0.19774	-0.25969
E _{LUMO} , eV	0.09145	0.08789	0.08189	0.00259
ΔE = E _{HOMO} - E _{LUMO} , (eV)	0.2978	0.28294	0.27963	0.26228
Ionlanish potentsiali, I = -E _{HOMO} , (eV)	0.20635	0.19505	0.19774	0.25969
Elektronga moyillik, A = - E _{LUMO} , (eV)	-0.09145	-0.08789	-0.08189	-0.00259
Elektromanfiylik, χ = (I + A)/2 (eV)	0.05745	0.05358	0.057925	0.12855
Dipol momenti, μ (Debay)	1.1056	2.3064	3.276	0.000004
Elektron energiyasi, (Xartree)	-209.2099	-362.1949	-515.1714	-454.4285

Ligandlarning kvant-kimyoviy tahlillaridan olingan natijalar asosida hosil bo'lishi mumkin bo'lgan komplekslarning barqarorligini aniqlash maqsadida ularning tuzilishi, atomlardagi manfiy effektiv zaryadlari, atomlararo masofalari va hosil bo'lish energiyalari DFT/B3LYP/3-21G metodi yordamida optimizatsiya qilindi (3-rasm, 4-jadval).

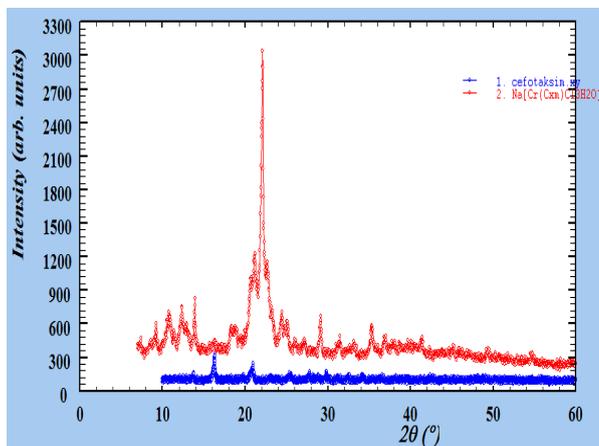
3. Ba'zi biogen metall ionlarining sefotaksim va amidlar bilan gomo- hamda aralash ligandli kompleks birikmalarining RFA va RTT tadqiqotlari natijalari tahlili

Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) tuzlarining

sefotaksim va amidlar bilan gomo- hamda aralash ligandli kompleks birikmalarining yangi moddalar va individualligini isbotlash maqsadida dastlabki moddalar va sintez qilingan koordinatsion birikmalarining rentgenfazaviy tahlili olib borildi va difraktogrammalar solishtirildi. Bunda sintez qilingan birikmalarining tekisliklararo masofalari va intensivligi solishtirilganda ular o‘zaro mos kelmasligi aniqlandi va ularning har biri individual, toza, yangi moddalar ekanligi isbotlandi (4,5-rasm, 5-jadval).



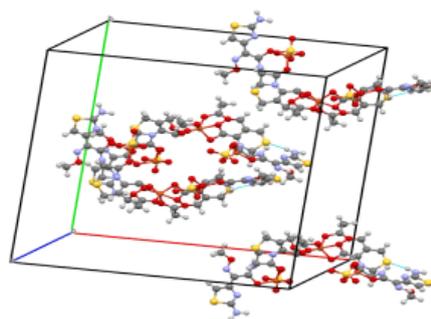
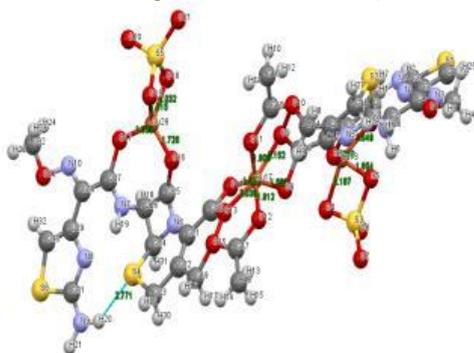
4-rasm. Sefotaksim, karbamid va $\text{Na}_2[\text{Ni}(\text{Cxm})_2\text{Cl}_2(\text{KA})_2]$ birikmalarining taqqoslov rentgenogrammasi



5-rasm. Sefotaksim va $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}]$ birikmalarining taqqoslov rentgenogrammasi

Sintez qilingan geterometalli kompleks birikmalarining tuzilishini isbotlash uchun O‘zR FA Yadro fizikasi ilmiy tadqiqot institutida rentgen nurlari sochilishiga asoslanib ishlaydigan Malvern Pananalytical kompaniyasining Empyrean rusumli zamonaviy difraktometrida strukturaviy tahlil olib borildi.

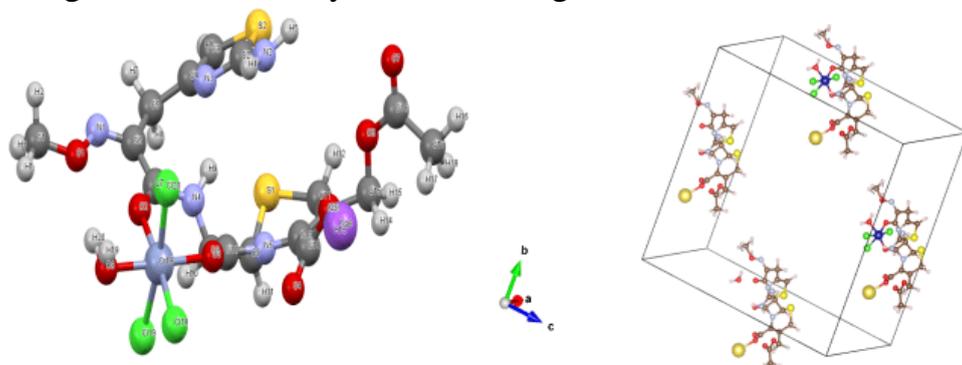
Difraktogramma natijalarini Fullprof dasturi orqali qayta ishlash natijasida kompleks birikmalarining kristallografik xarakteristikalar va struktur tahlil natijalarini aniqlash mumkin (6-10-rasmlar, 5-jadval).



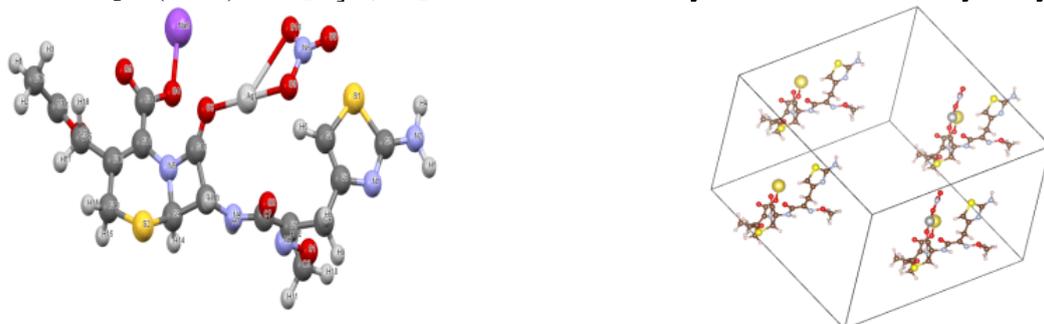
6-rasm. $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ molekulasining kristall tuzilishi va kristall yacheykasi

$[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ tarkibli kompleks birikma kristalining elementar yacheykasi parametrlari quyidagicha: fazoviy guruhi C1, $a=29.061 \text{ \AA}$, $b=29.077 \text{ \AA}$, $c=29.713 \text{ \AA}$, $\alpha=90^\circ$, $\beta=104.43^\circ$, $\gamma=90^\circ$, $V=23786,5 \text{ \AA}^3$, $Z=4$. $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ kompleksi triyadroli bo‘lib, Cu^{2+} ionining sefotaksim molekullari va sulfat qoldig‘idan hosil bo‘lgan, neytral molekula. Bunda 1- va 3- mis atomining koordinatsion soni 4 ga, 2-mis atomining koordinatsion soni 6 ga tengligini ko‘rish mumkin. Kompleks tarkibidagi $\text{Cu}(17)\text{-O}(11)$, $\text{Cu}(17)\text{-O}(12)$, $\text{Cu}(17)\text{-O}(13)$,

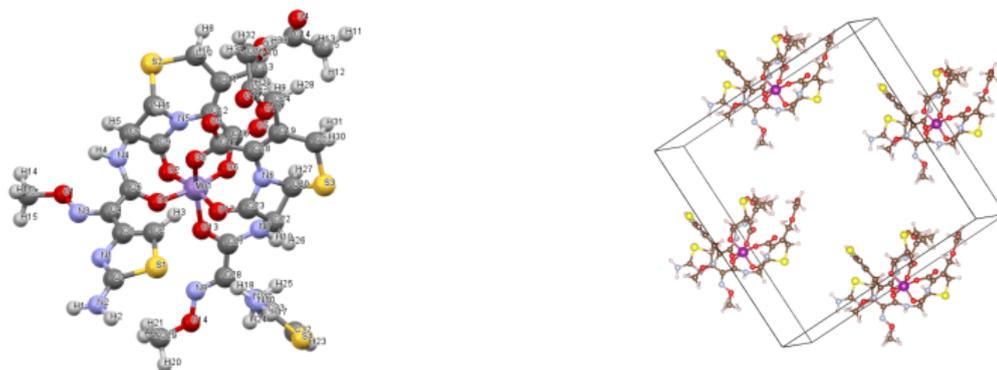
Cu(17)–O(14) bog‘lari orasidagi masofasi qiymati mos ravishda 1.9054Å, 1.9123Å, 2.0383Å, 1.9214Å ga teng. O(8)–Cu(17)–O(9), O(8)–Cu(17)–O(11), O(8)–Cu(17)–O(12), O(8)–Cu(17)–O(13), O(8)–Cu(17)–O(14) ning bog‘lararo burchak kattaliklari mos ravishda 66.29°, 124.17°, 91.47°, 128.14°, 99.9° ga teng ekanligini ko‘rish mumkin (6-rasm). Na[Cr(Cxm)Cl₃H₂O]·0,5H₂O, Na[Ag(Cxm)NO₃], [Mn(Cxm)₂]·H₂O va [Co(Cxm)Cl(TK)₂] tarkibli kompleks birikmalarning ham strukturaviy tahlillari olingan.



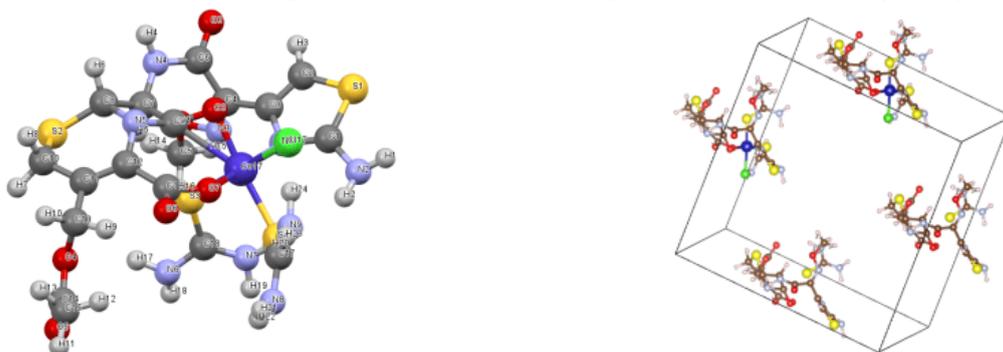
7-rasm. Na[Cr(Cxm)Cl₃H₂O]·0,5H₂O molekulasini fazoviy tuzilishi va kristall yacheykasi



8-rasm. Na[Ag(Cxm)NO₃] molekulasini fazoviy tuzilishi va kristall yacheykasi



9-rasm. [Mn(Cxm)₂]·H₂O molekulasini fazoviy tuzilishi va kristall yacheykasi



10-rasm. [Co(Cxm)Cl(TK)₂] molekulasini fazoviy tuzilishi va kristall yacheykasi

5-jadval

Strukturaviy tahlili olingan molekullarning kristallografik ma'lumotlari

Birikmasi	$[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$	$\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}]$	$\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$	$[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	$[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})_2]$
Mr	1292	667.84	647.03	963.48	624.57
Singoniya	monoklinik	Tetragonal	Tetragonal	Tetragonal	Tetragonal
Fazoviy guruh	C1	C4	C4	C4	C4
a, Å	29.061	17.4143	25.37187	17.1053	13.6488
b, Å	29.077	24.6276	17.94062	24.1906	19.3022
c, Å	29.713	24.6276	25.37187	24.1906	19.3022
α°	90	90	90	90	90
β°	104.43	90	90	90	90
γ°	90	90	90	90	90
V, Å ³	23786,5	14943.286	11548.953	10009.9	5085.11
Kristall o'lchami, mm	0.26×0.23×0.14	0.23×0.17×0.08	0.14×0.12×0.08	0.16×0.14×0.06	0.27×0.23×0.18
Interval h,k,l	-22/18,-6/14,-18/16	-24/22; -18/16; -16/12	-20/22, -6/9, -18/19	-20/26, -12/24, -16/22	-20/24, -6/14, -22/26
Jami reflekslar	7494	5414	2345	2194	2251
Mustaqil reflekslar	1564	2892	1792	1782	1271
R_{int}	0.056	0.058	0.0848	0.0743	0.0674
$F^2 \geq 2\sigma(F^2)$	2612	678	2361	2116	2158
Aniqlagan parametrlar	252	192	233	205	216
Strukturani aniqlash sifati	1.16	1.26	1.26	1.15	1.22
$R_1, wR_2 (I > 2\sigma(I))$	0.0245, 0.1352	0.824, 0.934	0.287, 1.118, 1.31	0.287, 1.118, 1.31	0.287, 1.118,
Dx, g/cm ³	1.349	1.214	1.414	1.331	1.345
$\Delta\rho_{\text{min}} / \Delta\rho_{\text{max}}, e\text{Å}^{-3}$	-0.36 / 0.48	-0.524, 0.688	-0.39 / 0.52	-0.41 / 0.56	-0.32 / 0.43

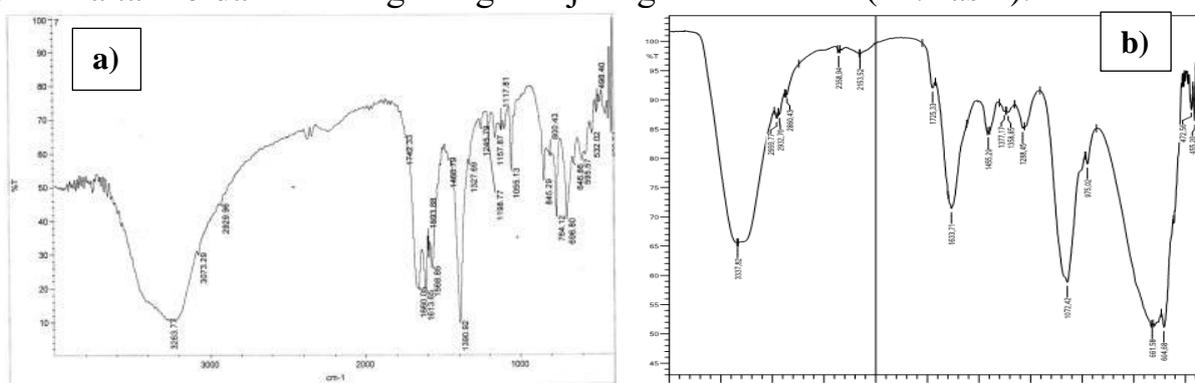
Sefotaksimning Ag(I), Mn(II), Co(II) ionlari bilan neytral, anionli va aralash ligandli $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ va $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})_2]$ komplekslarning strukturaviy jihatlari o'rganildi. Ularning kristallografik ma'lumotlari, strukturasi aniqlik kirituvchi parametrlari 5-jadvalda hamda kompleks birikma tuzilishi va kristal yacheykada joylashuvi 7-10-rasmlarda keltirilgan.

4. Sintez qilingan komplekslarning spektral va termik tahlili natijalari

Natriy sefotaksimi va amidlarning erkin holatda olingan IQ spektrlarini hosil bo'lgan gomo hamda aralash ligandli kompleks birikmalarining IQ spektrlari bilan

taqqoslash natijasida olingan o'zgarishlarni tahlil qilish orqali koordinatsion bog' hosil bo'lganligini aniqlash mumkin.

$\text{Na}_2[\text{M}(\text{C}_{16}\text{H}_{16}\text{N}_5\text{O}_7\text{S}_2)_2\text{Cl}_2(\text{CO}(\text{NH}_2)_2)_2]$ ($\text{M}=\text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Cu}(\text{II})$) kompleks birikmalarining IQ spektrilar, sefotaksim tarkibidagi Na – O bog'iga xos bo'lgan 764 cm^{-1} valent yutilish chiziqlari saqlanib qolgan. Sefotaksim karboksilat assimetrik va simmetrik tebranishlari $\nu_s(\text{COO}^-)$ $1380\text{-}1447 \text{ cm}^{-1}$ va $\nu_{as}(\text{COO}^-)$ $1531\text{-}1551 \text{ cm}^{-1}$ larda namoyon bo'lgan. Koordinatsiyalangan holatga o'tganda tebranish sohaslarida o'zgarishlar kuzatilib, $\nu_s(\text{COO}^-)$ $1371\text{-}1443 \text{ cm}^{-1}$, $\nu_{as}(\text{COO}^-)$ $1514\text{-}1609 \text{ cm}^{-1}$ ga o'zgargan. Bu esa bidentat-ko'priqli koordinatsiyalanishga mos keladi va sefotaksim anioni markaziy atom bilan karboksilat guruhi kislorod atomlari orqali ko'priqli bog' hosil qilganini bildiradi. $\nu(\text{Co-O})$ 546 cm^{-1} , $\nu(\text{Ni-O})$ 558 cm^{-1} , $\nu(\text{Cu-O})$ 563 cm^{-1} da valent tebranishlarga xos yutilish chiziqlari paydo bo'lgan. $\nu(\text{Co-Cl})$ 582 cm^{-1} , $\nu(\text{Ni-Cl})$ 586 cm^{-1} , $\nu(\text{Cu-Cl})$ 592 cm^{-1} sohadagi valent tebranish chastotasi kompleks birikma tarkibida M-Cl bog'ining mavjudligini ko'rsatadi (11.-rasm).



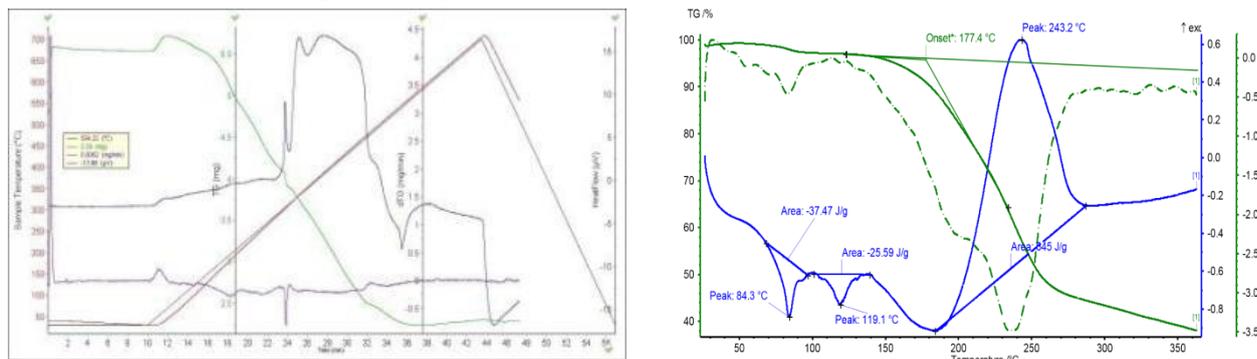
11-rasm. Natriy sefotaksim (a), $[\text{Ni}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{AA})]$ (b) birikmalarining IQ-spektrlari

Termik tahlil (kalorimetriya) bu haroratni o'zgarishiga qarab moddalarning massalarini o'zgarishi bilan birga keladigan issiqlik effektlarini o'rganishga asoslangan fizik-kimyoviy tahlil usuli hisoblanadi. Shuniinobatga olgan holda sintez qilingan metallokompleks birikmalarining differensial termik tahlili amalga oshirildi va ularning termik xossalari aniqlandi.

$[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})]$ tarkibli kompleks birikmaning termik tahlil natijasida olingan egri chizig'ida $166, 256^\circ\text{C}$ da ikkita endotermik effekt va $230^\circ\text{C}, 350^\circ\text{C}, 450^\circ\text{C}, 551^\circ\text{C}$ da to'rtta ekzotermik effektlar aniqlandi. Endotermik effektlarning mavjudligi kompleksining suyuqlanishi va keyingi endoeffekt esa TK molekulasini parchalanishining boshlanishi bilan bog'liq. Keyingi ekzotermik effektlarning tabiati sefotaksim ligandi tarkibidagi komponentlarning termik parchalanishi, gazsimon mahsulotlarning hosil bo'lishi bilan bog'liq. $130\text{-}600^\circ\text{C}$ harorat oralig'ida TG egri chizig'iga ko'ra umumiy massa yo'qolishi $83,60\%$ ni tashkil qiladi. CoCl_2 , CoO oxirgi mahsulot sifatida qoladi (12-rasm).

Barcha kompleks birikmalar uchun termik tahlil natijalarini umumlashtirish shuni ko'rsatadiki, bu komplekslarning termik parchalanishi molekulaning bir vaqtning o'zida yonish, parchalanish mahsulotlarini oksidlash va metall oksidlarini hosil qilish bilan tuzni parchalash jarayoni bir necha bosqichda bir xil va bosqichma-bosqich davom etadi. $\text{Cr}(\text{III}), \text{Mn}(\text{II}), \text{Fe}(\text{III}), \text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Cu}(\text{II}), \text{Zn}(\text{II}), \text{Ag}(\text{I})$

tuzlarining sefotaksim asosida olingan bir ligandli metall komplekslarining termik parchalanish haroratlari quyidagi ketma-ketlikda ortib boradi: Fe(III)<Mn(II)<Co(II)<Ni(II)<Cr(III)<Zn<Ag<Cu(II). 1:1 va 1:2 nisbatlarda olingan Co(II), Ni(II), Cu(II) tuzlarining sefotaksim va amidalar asosidagi aralash ligandli kompleks birikmalarining termik barqarorligi metallar bo'yicha tahlil qilinsa, Co(II)<Ni(II)<Cu(II) qatorida; nisbatlar bo'yicha tahlil qilinsa, 1:1<1:2 nisbatlarda; amidlarning turiga ko'ra tahlil qilinsa, karbamid<tiokarbamid<asetamid qatorida ortib boradi. Olingan natijalar adabiyot manbalarida keltirilgan ma'lumotlar bilan ham mos ekanligini aniqlandi.

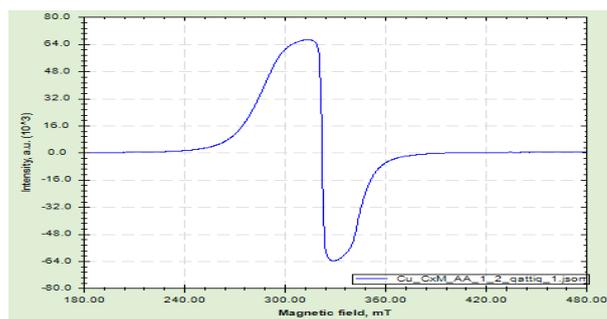
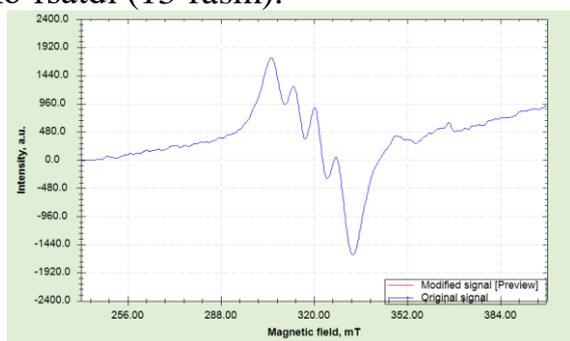


12-rasm. $[Co(Cxm)_2]$ va $[Mn(Cxm)_2] \cdot H_2O$ komplekslari termik tahlili

EPR spektrlari parametrlariga asosan modda tuzilishi haqida xulosa chiqarish mumkin. EPR spektridagi singlet liniya uning intensivligi, kengligi, shakli va magnit maydonidagi holatini bildiradi.

Sefotaksim molekulasida tarkibi jihatdan ko'p funktsionallik polidentat ligand bo'lib, uning koordinatsion xossalari kompleks hosil qiluvchi metal-ionlarining elektron tuzilishi, oksidlanish darajasi miqdori, erituvchi tabiatiga bog'liqligini yuqorida tahlil etildi. O'rganilgan d-metall-ionlaridan ayrimlari ($Cr^{+3}(3d^3)$, $Mn^{+2}(3d^5)$, $Fe^{+3}(3d^6)$, $Co^{+2}(3d^7)$, $Cu^{+2}(3d^9)$) paramagnit xossali bo'lgani va ularning sefotaksim hamda amidli ligandlar bilan gomo- va aralash ligandli komplekslarni qattiq va suv:asetonitrilli eritmalarida EPR spektroskopiyasi usuli bilan tadqiq etildi.

Tadqiqot natijalariga ko'ra Cu^{+2} ionining $[Cu_3(Cxm)_2](SO_4)_2$ tarkibi gomo-ligandli komplekslarining EPR spektr parametrlari (13-rasm) keltirilgan. Qattiq holdagi Cl^- va SO_4^{2-} ionlari saqlagan komplekslarning EPR spektrlari singlet fonida turli intensivliklarda o'ta nozik ta'sirlashuv qayd etildi. Ularning parametrlari $[Cu_3(Cxm)_2](SO_4)_2$ $\Delta H=6.89-7.0mT$ va $g=2.1150 \pm 0.005$ tashkil etib, Cu^{+2} ionlari alohida izomerlangan monoyadroli $[Cu(O_6)]$ koordinatsion qurshovdan iboratligini ko'rsatdi (13-rasm).



5. Sintez qilingan kompleks birikmalarning amalda qo'llanilishi tadqiqotlari

Ba'zi biogen metallar tuzlarining sefotaksim va sefotaksim-amid komplekslari sintezi va fizik-kimyoviy hamda biologik xossalarini aniqlash bo'yicha olingan ilmiy natijalar asosida:

- $[\text{SefoCu}]$ kompleks birikmasi esa "Muborak gazni qayta ishlash zavodi" MCHJ ning elektrokimyoviy laboratoriyasida metall konstruksiyasi va qurilmalarida korroziya jarayoniga qarshi ingibitor sifatida amaliy tahlil qilindi va korroziya ingibitori sifatida qo'llash uchun tavsiya etildi. ("Muborak gazni qayta ishlash zavodi" MCHJ ning 2024 yil 18 martdagi №48/G'K-03 - son ma'lumotnomasi).

- $[\text{SefaCo}]$ kompleks birikmasi pomidor o'simligining zamburug'li va bakteriyali kasalliklariga qarshi preparat sifatida amaliyotga joriy qilindi. (O'zbekiston Respublikasi Qishloq xo'jaligi vazirligi Qishloq xo'jaligida bilim va innovatsiyalar milliy markazining 2024-yil 29-martdagi 05/01-05/02-05/04-04-117-son ma'lumotnomasi).

XULOSA

1. Sefataksim va amid ligandlarning elektron tuzilishi, ulardagi elektronodonor atomlarning koordinatsion xossalari KKH usullar bilan tadqiq etilib, ularning mono va tridentatli ligandlar sifatida azot va kislород atomlari orqali koordinatsiyalanish imkoniyatlari yuqoriligi, ular hosil qiladigan komplekslar tarkibi, tuzilishi markaziy ionning elektron tuzilishi, eritma muhiti va ligandlarning tabiatiga bog'liqligi aniqlangan.

2. Ilk bor $\text{Cr}(\text{III})$, $\text{Mn}(\text{II})$, $\text{Fe}(\text{III})$, $\text{Co}(\text{II})$, $\text{Ni}(\text{II})$, $\text{Cu}(\text{II})$, $\text{Zn}(\text{II})$, $\text{Ag}(\text{I})$ tuzlarining sefotaksim va amidlar bilan 8 ta yangi gomo- ($\text{M}:\text{L}=1:2$ nisbatda) va 12 ta aralashligandli ($\text{M}:\text{L}^n:\text{L}^m=1:1:1$, $1:1:2$, $1:2:2$ nisbatda) kompleks birikmalari sintez qilinib, ularda ligandlar mono- va bidentat koordinatsiyalanib, neytral, anion va kation komplekslar hosil qilganligi isbotlandi.

3. Sintez qilingan komplekslarni zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullari: rentgenfazaviy, strukturaviy, IQ-, EPR spektroskopiya, termik xossalari TGA, DTA, DSC usullari yordamida isbotlandi.

4. Ilk bor roentgen tuzilish usuli bilan $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$, $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}]\cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2]\cdot \text{H}_2\text{O}$ va $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})_2]$ tarkibli gomo- va aralash ligandli koordinatsion birikmalarning kristallografik strukturaviy tadqiqotlari asosida kristall tuzilishlari isbotlangan.

5. Ilk bor $[\text{Co}(\text{Cxm})_2]$ sintez qilingan kompleksning biofaollik xossalari molekulyar doking usuli bilan tadqiq qilindi. Ulardan sefotaksim asosidagi $[\text{Co}(\text{Cxm})_2]$ ichki kompleks birikmasi pomidor o'simligining zamburug'li va bakteriyali kasalliklariga qarshi xossasi aniqlanib, pestitsid sifatida qo'llanilishiga tavsiya etilgan. Shuningdek kompleksning antikorrozion xossalari tadqiqotlari asosida $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ kompleks birikmasi korroziya ingibitori ekanligi aniqlandi va amaliyotga joriy qilindi.

**УЧЕНЫЙ СОВЕТ PhD.03/30.12.2019.К.72.01
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ
БУХАРСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ УНИВЕРСИТЕТЕ**

ХОРЕЗМСКАЯ АКАДЕМИЯ МАМУНА

МАШАРИПОВ АЗАМАТ ТУРСИНБОВЕВИЧ

**ЦЕФОТАКСИМ И ЦЕФОТАКСИМ-АМИДНЫЕ КОМПЛЕКСЫ
СОЛЕЙ НЕКОТОРЫХ БИОГЕННЫХ МЕТАЛЛОВ: СИНТЕЗ,
СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА**

02.00.01 – Неорганическая химия

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

БУХАРА – 2025

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером B2023.3.PhD/K660

Диссертация выполнена в Хорезмской Академии Мамуна.

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

Научный руководитель: Хасанов Шодлик Бекпулатович
кандидат химических наук, старший научный сотрудник

Официальные оппоненты: Касимов Шерзод Абдуазирович
доктор химических наук, профессор
Марланов Уктам Марланович
кандидат химических наук, доцент

Ведущая организация: Самаркандский государственный университет

Защита диссертации состоится «24» 03 2025 года в 15⁰⁰ часов на заседании Научного совета PhD.03/30.12.2019.K.72.01 при Бухарском государственном университете. (Адрес: 705018, Бухара, ул. Мухаммад Икбол, 11. Тел.: +998 (65) 221 29 14; факс: +998 (65) 221 27 64, e-mail: buxdu_rektor@buxdu.uz).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Бухарского государственного университета (зарегистрирована за №___). Адрес: 705018, Бухара, ул. Мухаммад Икбол, 11. Тел.: +998 (65) 221 29 14; факс: +998 (65) 221 27 64, e-mail: buxdu_rektor@buxdu.uz.

Автореферат диссертации разослан «11» 03 2025 года.

(реестр протокола рассылки № 3 от 11 03 2025 года).


Б.Д. Умаров
член Научного совета
по присуждению ученой степени,
д.т.н., профессор

К.В. Авезов
член Научного совета по присуждению ученой степени,
PhD, доцент

М.Р. Амонов
Председатель Научного семинара
при Научном совете по
присуждению ученой степени,
д.т.н., профессор

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и востребованность темы диссертации. В последние годы многие штаммы бактерий становятся стойкими против антибиотиков. Вследствие широкого применения антибиотиков в течение долгих лет у многих бактерий развились механизмы защиты от них. Это повышает опасность становления болезней неизлечимыми и становится серьёзной глобальной проблемой. Биогенные металлокомплексы включая в себя антибиотики могут разрушить защитные механизмы бактерий и ослабить их. Результат является важным шагом при повышении эффективности антибиотиков.

Во всем мире циклические лиганды с гетероатомами применяются при выделении благородных металлов, получении материалов с люминесцентными свойствами, в синтезе веществ, проявляющих биологическую активность. Конкурентная координация амидов с биогенными металлами используется при моделировании жизненных процессов, протекающих в живых организмах, очистке окружающей среды от тяжелых металлов, в области металлургии, а также при производстве стимуляторов для сельскохозяйственных растений. Особое внимание уделяется таким приоритетным направлениям, как проведение научных исследований по изучению и применению в народном хозяйстве координационных соединений биогенных металлов на основе азот, кислород, серусодержащих циклических лигандов и амидами.

В нашей республике особое внимание уделяется синтезу координационных соединений на основе биологически активных веществ с биогенными металлами, их применению в химической промышленности, производству ингибиторов биокоррозии против бактерий, вызывающих процесс коррозии в анаэробных условиях. В этом отношении выполняются широкомасштабные работы по созданию научных основ синтеза ингибиторов коррозии, отвечающих современным требованиям, и обеспечению местными импортозамещающими ингибиторами биокоррозии. В Указе Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы»¹ от 28 января 2022 года поставлены важные задачи, направленные на дальнейшее развитие экспортного потенциала отраслей местной экономики, используя все возможности. В частности, важное значение имеет создание новых экологически чистых технологий по производству экономически эффективных ингибиторов биокоррозии.

Диссертация в определенной мере послужит выполнению задач, поставленных в Указе Президента Республики Узбекистан № УП-60 «О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы» от 28 января 2022 года и постановлениях ПП-№3983 “О мерах по ускоренному развитию химической промышленности Республики Узбекистан” 25 октября 2018 года,

¹ 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

ПП-№4265 “О мерах по дальнейшему реформированию и повышению инвестиционной привлекательности химической промышленности” 3 апреля 2019 года, ПП-4992 “О мерах по дальнейшему реформированию и финансовому оздоровлению предприятий химической промышленности, развитию производства химической продукции с высокой добавленной стоимостью” 13 февраля 2021 года, а также других нормативно-правовых документах, относящихся к данной деятельности.

Соответствие исследования с приоритетными направлениями развития науки и технологии Республики. Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетным направлением развития науки и технологий Республики VII. «Химические технологии и нанотехнологии».

Степень изученности проблемы. В мировой науке биологически активных 1,3-N,S-лигандов с биогенными металлами рассмотрены в работах таких ученых, как Li B., Zhang T., Sim W. J., Leung H. W., Rossmann J., Yu X., Tamura I. Guo R., Chen J., Samarghandi M. R., Ahmed M. J., Theydan S. K., Nazari G., Jiang Mu, Xian J. M., Wang Lian, Hong W. L., Ji Rong J. R., Perez A. G., David A. R., Zimmerman M. R., Jemal A., Ahmad S. В результате исследований осуществлены синтезы гомо- и гетеролигандных координационных соединений, проанализированы их строение, химические и некоторые физические свойства.

В странах СНГ научные исследования по координационным соединениям и их внедрению проводили Петричко М.И., Журавлев В.Д., Савинкина Е.В., Караваев И.А., Григорьев М.С., Подболотов К.Б., Волочко А.Т., Хорт А.А., Ликошин Д.Д., Караваев И.А. Учеными проведен анализ ряда работ по исследованию строения, состава, свойств и биологической активности комплексных соединений.

В нашей республике в научных работах таких ученых, проводивших исследования в области химии координационных соединений, как Н.А.Парпиев и Б.Т.Ибрагимов, профессора Х.Т.Шарипов, Б.Б.Умаров, А.А.Шабиболов, Т.А.Азизов, З.Ч.Кадырова, Х.Х.Тураев, Ш.Ш.Даминова, Ж.М.Ашуров и Ш.А.Касымов синтезированы координационные соединения на основе производных тиазолина, оснований Шиффа, шестичленных гетероциклических соединений, карбоксилатов металлов с амидами, определены их составы, строение, и физико-химические свойства. На основании приведенных данных становится ясно, что осуществление синтеза полиядерных координационных соединений на основе карбоксилатов и амидов исследование состава, строения и физико-химических свойств полученных соединений, является малоизученной областью. Поэтому осуществление синтеза координационных соединений, содержащих различные металлы и проведение анализов имеет и научное, и практическое значение.

Связь диссертационного исследования с планами научно-исследовательских работ научно-исследовательского учреждения. Диссертационное исследование выполнено в рамках фундаментального

проекта PZ-2017092435 «Выращивание лекарственных растений в Хорезмской области и разработка биологически активных добавок на их основе» (2017-2020 гг.) по плану научно-исследовательских работ Хорезмской академии Мамуна.

Целью исследования является в синтез гомо- и смешаннолигандных комплексных соединений ионов биогенных металлов с цефотаксимом и амидами, изучение их состава, строения, свойства, определение области их применение.

Задачи исследования:

определение координационно-активных центров лигандов методом квантово-химических расчетов (КХР) и установлении факторов, влияющие на их комплексообразование с различными ионами металлов;

синтез гомо- и смешаннолигандных комплексных соединений ионов биогенных металлов с цефотаксимом и амидами, установление их состава, строения исследования и некоторых физико-химических, биологических свойств;

определение способов координации многофункционального лиганда цефотаксима и амидов синтезированных комплексных соединениях с различными d-электронными конфигурациями металл – ионов методом ИК-спектроскопии;

установление и определении кристаллографических и геометрических параметров и установления строения некоторых синтезированных соединений методом рентгеноструктурного анализом (РСА);

изучение термических свойств установления факторов влияющие на термической устойчивости гомо- и смешаннолигандных координационных соединений методом дифференциально-термического анализа (ДТА);

исследование состава, строения, спектральных и магнитных свойств синтезированных комплексных соединений парамагнитных оинов методом ЭПР-спектроскопии;

исследование физико-химических и биологических свойств синтезированных комплексных соединений и определение областей их практического применения.

Объектами исследования являются цефотаксим, амиды, соли биогенных металлов и координационные соединения, синтезированные на их основе.

Предмет исследования состоит в разработке способов синтеза гомо- и смешаннолигандных координационных соединений солей биогенных металлов с цефотаксимом и амидами и изучении их индивидуальности, состава, строения, физико-химических и биологических свойств.

Методы исследования: использованы методы химического элементного анализа, рентгенофазового анализа (РФА), ИК-, ЭПР-спектроскопии, дифференциального термогравиметрического анализа (ДТА), рентгеноструктурного анализа (РСА), квантово-химического расчета.

Научная новизна исследования:

методами квантово-химического расчета определены энергетические параметры, распределение зарядов на атомах, реакционные и координационные свойства полифункционального полидентатного цефотаксима и амидных молекул и их координационных соединений;

впервые синтезированы 20 новых анионные, катионные, нейтральные координационные соединения на основе солей Ag(I), Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cr(III), Fe(III) натриевой соли цефотаксима, ацетамида (CH₃CONH₂) (АА), карбамида (CO(NH₂)₂) (К), тиокарбамида (CS(NH₂)₂) (ТК);

методами элементного, рентгенофазового, термического анализов, ИК-, ЭПР-спектроскопии, РСА определены индивидуальность синтезированных комплексах и способы координации лигандов к ионам металлов;

В гомо- и смешаннолигандных комплексах парамагнитных ионов Mn²⁺(3d⁵), Co²⁺(3d⁷), Cu²⁺(3d⁹) с различными электронными строениями методом ЭПР спектроскопии установлено зависимость структуры и магнетохимических свойств от d-электронной конфигурации центрального иона природы и разновидности (N,O,S) электронодонорных атомов лигандов;

впервые по результатам обработки данных дифрактограмм РФА программой FullProf установлены кристаллические структуры молекулы цефотаксима и комплексных соединений [Cu₃(Cxm)₂](SO₄)₂, Na[Cr(Cxm)Cl₃·H₂O]·0,5H₂O, Na[Ag(Cxm)NO₃] [Mn(Cxm)₂]·H₂O, [Co(Cxm)Cl·(ТК)₂] синтезированных на его основе;

на основе кристаллографических и структурных данных установлено, что молекулы цефотаксима как полифункциональные пентадентатные лиганды, образуют с ионами Cu²⁺ трех ядерный комплекс [Cu₃(Cxm)₂](SO₄)₂, в котором два центрального иона находятся в тетраэдрических и один в октаэдрическом окружениях.

из синтезированных соединений выявлено ингибиторное действие комплексного соединения "SefoCu" против процесса коррозии на металлические конструкции и оборудования, и антифунгальное действие комплексного соединения "SefaCo" против грибка *Fusarium oxysporum*.

Практические результаты исследования:

На основе разработанных 9 методов впервые синтезированы 20 новых гомо- и смешаннолигандных координационных соединений Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) ионов с цефотаксимом и ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом;

определены состав, строение, центры координации лигандов, способности проявления биологической активности;

основываясь на КХР, определены энергетические параметры, распределение электронной плотности, реакционные центры синтезированных соединений;

основываясь на биологические свойства цефотаксима методом молекулярного докинга исследованы биологическая активность синтезированных комплексных соединений, выявлено примере соединения [Co(Cxm)₂] на основе цефотаксима проявляющее противогрибковое и

антибактериальное свойство и внедрено как пестицид против болезни растения помидора;

из синтезированных комплексных соединений созданы препарат против бактериальных и грибковых заболеваний томата, а также ингибитор коррозии металлических конструкций и оборудования.

Достоверность результатов исследования. Состав и строение комплексов доказаны такими современными методами исследования, как ИК-, ЭПР-спектроскопия, элементный, рентгенофазовый (РФА), структурный (РСА), дериватографический (ДТГ) и биологический анализы, а также квантово-химические расчеты (КХР).

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Научная значимость результатов исследования заключается в том, что впервые определены оптимальные параметры синтеза новых координационных соединений цефотаксима и амидов с солями Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I). Установлены состав, структура, термическая устойчивость и свойства синтезированных комплексных соединений. Полученные результаты и выводы основаны на данных современных физико-химических методов исследования, что способствует расширению научных знаний в области химии координационных соединений многофункциональных полидентатных лигандов.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что с использованием девяти различных методов синтеза были получены новые гомо- и гетеролигандные комплексные соединения 3d-металлов на основе цефотаксима. Эти соединения обладают особыми магнетохимическими свойствами, биологической активностью и способностью защищать металлические конструкции от коррозии. Теоретические результаты исследования могут быть использованы в химии координационных соединений.

Внедрение результатов исследования. На основе научных результатов по синтезу цефотоксимных и цефотоксим-амидных комплексов некоторых биогенных металлов и определению их физико-химических и биологических свойств:

Разработана методология оценки эффективности защиты металлов от коррозии, комплексное соединение Cu(II) с цефотаксимом внедрено в качестве эффективного ингибитора коррозии на предприятии ООО «Муборакский газоперерабатывающий завод» (справка №48/G'K-03 от 18 марта 2024 года ООО «Муборекский газоперерабатывающий завод»). В результате было установлено, что ингибирующее защитное действие комплексного соединения $[Cu_3(C_{12}H_{17}NO_2)_2](SO_4)_2$ составило 77–79 % эффективности по сравнению с ингибиторными составами и свойствами местных и зарубежных производителей.

Стимулятор бактерицидного действия “SefaCo” в практику в качестве препарата против грибковых и бактериальных заболеваний растений томата сорта “Chinto” на 4 гектарах тепличных полей фермерского хозяйства “Mard

Jaloliddin”, сорта “*Alamina*” на 2 гектарах тепличных полей фермерского хозяйства “Green house sabzavotlari”, сорта “*Linda*” на 2 гектарах открытых полей фермерского хозяйства “Xurshid Rashid bog‘i” (Справка № 05/01-05/02-05/04-04-117 Национального центра знаний и инноваций в сельском хозяйстве Министерства Сельского хозяйства Республики Узбекистан от 29 марта 2024 года). В результате наблюдалось усиление развития, повышение ветвистости, числа плодов, устойчивость к бактериальным и грибковым заболеваниям растений томата на тепличных и открытых полях, повышение урожайности на 57–100 центнеров.

Апробация результатов исследования. Результаты данного исследования обсуждены на 7, в том числе 3 международных и 4 республиканских научно-практических конференциях.

Опубликованность результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 12 научных работ, из них 5 работ, в том числе 3 в республиканских и 2 в международных научных изданиях, рекомендованных для публикации основных научных достижений диссертации доктора философии (PhD) Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан.

Структура и объём диссертации. Диссертация включает в себя введение, три главы, выводы, 185 наименования использованной литературы и приложений, состоит из списка используемой литературы. Диссертация состоит из 112 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В введении в диссертацию обосновываются актуальность и востребованность темы диссертации, цель и задачи исследования, показано его соответствие с приоритетными направлениями развития науки и технологии Республики, излагаются научная новизна и практические результаты исследования, обоснована их достоверность, раскрываются научная и практическая значимость полученных результатов, приводятся заключения о перспективе внедрения в практику результатов исследования, а также сведения по опубликованным работам и структуре диссертации.

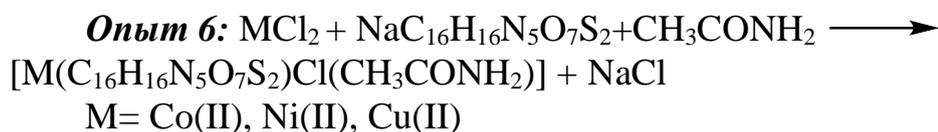
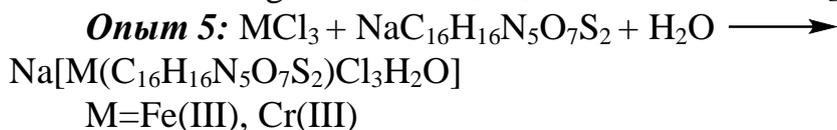
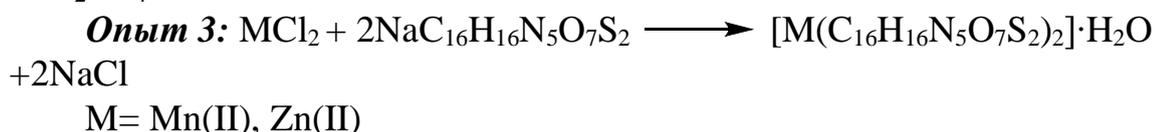
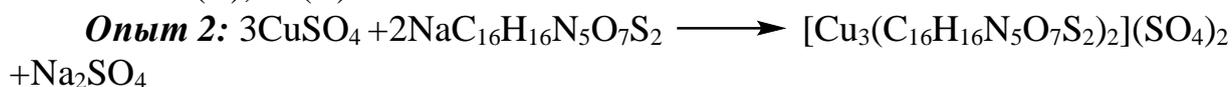
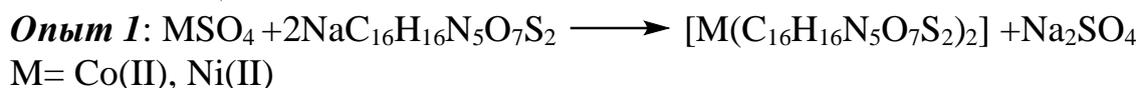
В первой главе диссертации озаглавленной как “**Комплексы тиазолкарбоновых кислот и производных с биогенными металлами (обзор литературы)**” рассмотрены соединения, полученные образованием координационных связей монолигандной, бидентатной или полидентатной координацией цефалоспоринов. Проанализированы условия связывания амидов с центральным атомом металла или со второй органической молекулой. Изучены исследования по биологической активности самих лигандов и монолигандных комплексов металлов и показано, что не изучено их влияние на биологические свойства обобщена зарубежная и местная литература по этой теме, и на основе их анализа обоснованы цели, задачи и актуальность работы.

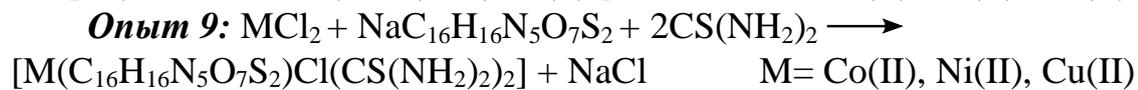
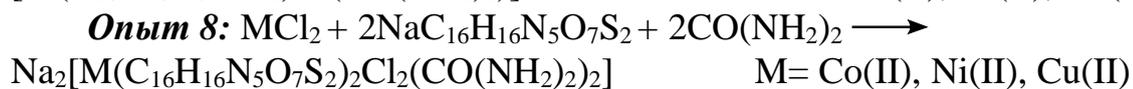
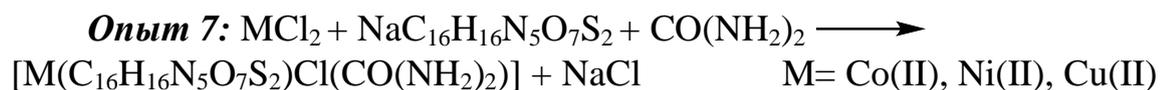
Во второй главе под названием “Синтез гомо- и смешаннолигандных комплексных соединений солей Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) с цефотаксимом и амидами (Экспериментальная часть)” приведены характеристики оборудования и реактивов, использованных в ходе диссертационного исследования, способы синтеза соединений, получения комплексных соединений с участием цефотаксима и амидов, а также результаты определения их физико-химических свойств.

В третьей главе, названной «Физико-химическое исследование комплексных соединений и их биологическая активность» приведены результаты квантово-химического расчета, современного физико-химического исследования и биологической активности гомо и смешаннолигандных комплексных соединений солей Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) с цефотаксимом и амидами. На основе результатов квантово-химических расчетов предложена структура синтезированных соединений. Синтезированные соединения проанализированы с помощью рентгенофазового, структурного, ИК-спектроскопического, термического анализа. Теоретически изучена биологическая ативность синтезированных комплексных соединений и приведены возможности их практического применения.

1. Синтез, состав, строение и физико-химические свойства гомо- и смешаннолигандных комплексных соединений ионов некоторых биогенных металлов с цефотаксимом и амидами

При синтезе комплексных соединений для цефотаксим-лигандных выбран способ проведения реакций в ацетонитриле, а для амидов – экономичный способ проведения в водных растворах. Для этого в водные растворы хлоридов, сульфатов и ацетатов металлов при перемешивании вводили ацетонитрильный и водные растворы цефотаксима и амидов соответственно. В результате на основе 9 синтезов получено 20 новых комплексных веществ.





Количество металлов в составе синтезированных комплексных соединений определяли с помощью атомно-абсорбционного спектроскопа «3030V» фирмы «Perkin-Elmer» (США), количество углерода, водорода, азота и серы – с помощью элементного анализатора «EA 1108» фирмы «Carlo-Erba» (Италия). Для сравнения полученных этими методами результатов были проведены элементный анализ и определение микроструктуры с помощью энергодисперсионного рентгеновского спектрометра электронного сканирующего микроскопа SEM EVO MA 10 (Zeiss) марки Aztec Energy Advanced X-Act (Oxford) instruments (рис.1).

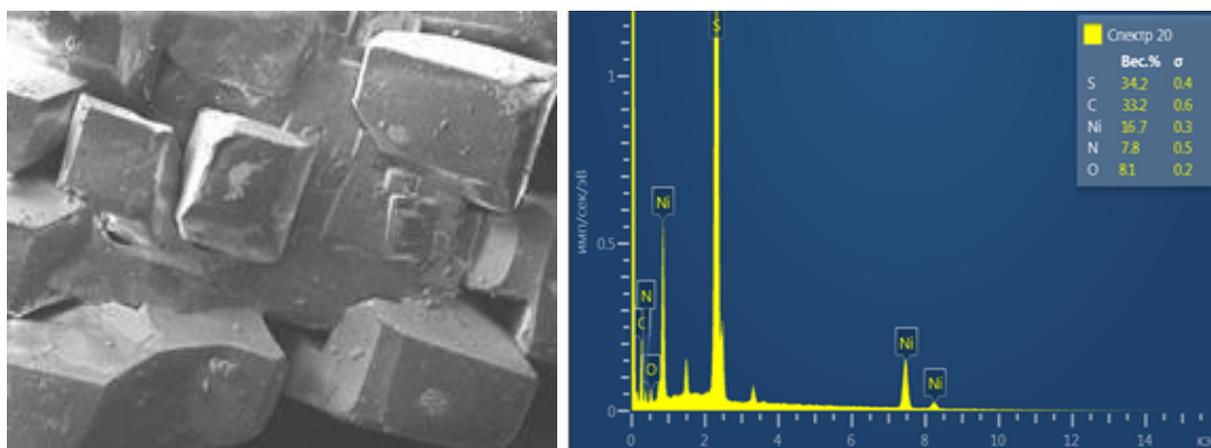


Рис. 1. Микроструктура и энерго-дисперсионного анализ $[Ni(C_{16}H_{16}N_5O_7S_2)_2Cl]$

В целях определения реакций, происходящих с полученными комплексными соединениями были изучены их химические свойства.

Методом пламенной спектрофотометрии выявлено, что количество металла Na соответствует теоретически вычисленной массе расположенной во внешней сфере комплексных соединений, это проиллюстрировано на рис. 2 в горизонтальном ряду концентрация (мг/л), вертикальный ряд интенсивность испускания лучей.

Таблица 1

Элементный анализ монолигандных комплексных соединений солей Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) с
цефотаксимом

Соединение	M, %		S, %		N, %		C, %		H, %		Na, %		Cl, %	
	Найдено	Вычислено												
Na[Ag(Cxm)NO ₃]	16.69	16.63	9.89	9.81	12.98	13.03	29.67	29.72	2.47	2.51	3.55	3.52	-	-
[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	6.68	6.65	13.15	13.18	14.38	14.36	39.46	39.44	3.28	3.24	-	-	-	-
[Co(Cxm) ₂]	6.1	6.16	13.23	13.25	14.47	14.43	39.71	39.68	3.3	3.39	-	-	-	-
[Ni(Cxm) ₂]	6.1	6.13	13.23	13.26	14.47	14.48	39.71	39.73	3.3	3.36	-	-	-	-
[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	5.71	5.76	13.29	13.27	14.53	14.56	39.87	39.84	3.32	3.39	-	-	-	-
[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	14.86	14.89	14.86	14.82	10.83	10.81	29.72	29.75	2.47	2.49	-	-	-	-
Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	7.95	7.91	9.79	9.76	10.71	10.75	29.38	29.42	2.75	2.78	3.51	3.56	16.29	16.31
Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	8.51	8.53	9.73	9.74	10.64	10.67	29.2	29.26	2.73	2.77	3.49	3.55	16.19	16.17

Таблица 2

Некоторые физические свойства монолигандных комплексных соединений

№	Соединение	T _{пл} °C	Растворимость в растворителях					Выход, %	
			Вода	Этанол	Ацетон	Ацетонитрил	Вода:ацетонитрил (1:1)		Бензол, толуол
1	Na[Ag(Cxm)NO ₃]	210-212	P	M	H	H	M	H	76
2	[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	186-188	M	M	H	M	P	H	73
3	[Co(Cxm) ₂]	226-228	M	P	M	H	P	H	75
4	[Ni(Cxm) ₂]	140-142	M	M	M	H	P	H	86
5	[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	130-133	M	M	H	H	P	H	81
6	[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	240-241	P	M	H	H	M	H	81
7	Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	203-205	M	H	M	M	P	H	76
8	Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	165-166	M	M	H	M	P	H	79

Примечание: P - растворимый, M - малорастворимый, H – нерастворимый

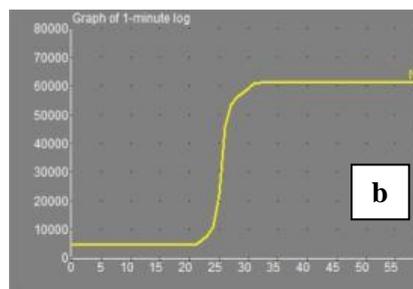
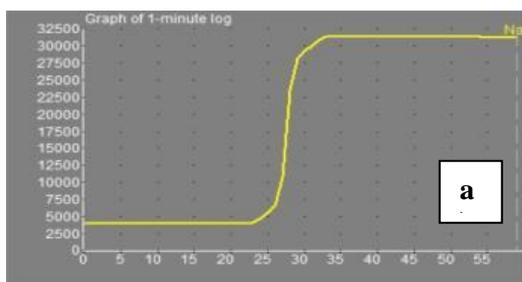


Рис. 2. Графики комплексных соединений $\text{Na}[\text{Fe}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}]$ (а) и $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$ (b), полученные методом пламенной фотометрии

Сегодня атомно-абсорбционный спектральный анализ как метод определения химического состава веществ по атомам широко используется в аналитической практике. В исследовательской работе этот метод анализа использовался для определения количества металлов в сложных соединениях. На основании полученных результатов были определены соотношения металлов и лигандов в составе образующихся комплексных соединений и сопоставлены с их теоретически рассчитанными значениями, результаты приведены в таблице 1.

Определены некоторые физические свойства синтезированных монолигандных и смешанных лигандных комплексных соединений, включая температуры плавления, растворимость в растворителях и продукты реакции (табл.2).

С целью выявления реакций, протекающих в образующихся комплексных соединениях, были изучены некоторые их химические свойства (табл.3).

Таблица 3

Результаты реакций

№	Комплексные соединения	Реагенты			
		BaCl ₂	NaOH	KH ₂ SbO ₄	AgNO ₃
1	Na[Ag(Cxm)NO ₃]	-	-	Белый осадок	-
2	[Zn(Cxm) ₂]·H ₂ O	-	-	-	-
3	[Co(Cxm) ₂]	-	-	-	-
4	[Ni(Cxm) ₂]	-	-	-	-
5	[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	-	-	-	-
6	[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	Белый осадок	-	-	-
7	Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	-	-	Белый осадок	-
8	Na[Fe(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]	-	-	Белый осадок	-
9	[Co(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
10	[Co(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
11	[Co(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
12	[Ni(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
13	[Ni(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
14	[Ni(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
15	[Cu(Cxm)Cl(AA)]	-	-	-	-
16	[Cu(Cxm)Cl(KA)]	-	-	-	-
17	[Cu(Cxm)Cl(TK)]	-	-	-	-
18	Na ₂ [Ni(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Белый осадок	-
19	Na ₂ [Co(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Белый осадок	-
20	Na ₂ [Cu(Cxm) ₂ Cl ₂ (KA) ₂]	-	-	Белый осадок	-

2. Результаты квантово-химических расчетов цефотаксима и амидов

Физико-химические особенности цефотаксима и амидов пранализированы с помощью программного пакета Gaussian 09. Расчеты выполнены методом B3LYP в рамках теории DFT. Для создания модельных систем и визуализации использовались программы GausView (Таблица 4).

На основе результатов квантово-химического исследования лигандов в целях определения устойчивости возможных комплексов с помощью метода DFT/B3LYP/3-21G были оптимизированы их строения, эффективные отрицательные заряды на атомах, межатомные расстояния и энергии образования.

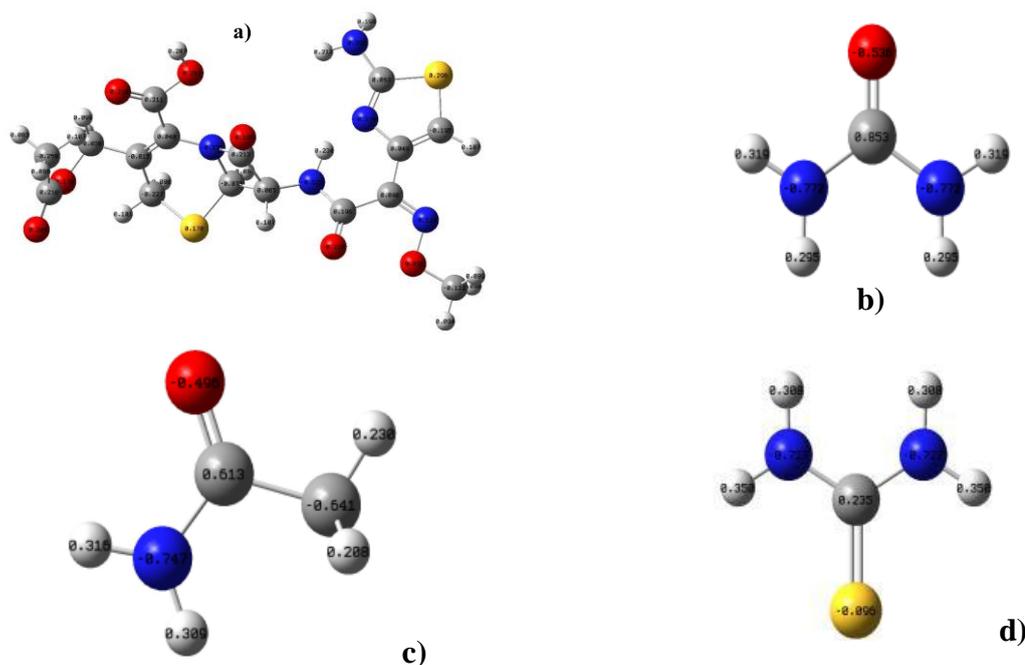


Рис. 3. Оптимизированная электронная структура и распределение зарядов по Малликену: цефотаксим (а), мочевины (б), ацетамида (с) и тиомочевины (д)

Таблица 4

Параметры квантово-химического расчета лигандов

Квантово-химический параметры	$C_{16}H_{16}N_5O_7S_2$	$CO(NH_2)_2$	CH_3CONH_2	$CS(NH_2)_2$
E_{HOMO} , eV	-0.20635	-0.19505	-0.19774	-0.25969
E_{LUMO} , eV	0.09145	0.08789	0.08189	0.00259
$ \Delta E = E_{HOMO} - E_{LUMO}$, (eV)	0.2978	0.28294	0.27963	0.26228
Энергия ионизации, $I = -E_{HOMO}$, (eV)	0.20635	0.19505	0.19774	0.25969
Сродство к электрону, $A = -E_{LUMO}$, (eV)	-0.09145	-0.08789	-0.08189	-0.00259
Электроотрицательность, $\chi = (I + A)/2$ (eV)	0.05745	0.05358	0.057925	0.12855
Дипольный момент, μ (Debye)	1.1056	2.3064	3.276	0.000004
Энергия электрона, (Hartree)	-209.2099	-362.1949	-515.1714	-454.4285

3. Анализ результатов РФА и РСА исследований гомо- и разнолигандных комплексов некоторых биогенных ионов металлов с цефотаксимом и амидами.

В целях доказательства индивидуальности кристаллических решеток однородно- и смешанноамидных комплексных соединений солей Cr(III),

Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) был проведен рентгенофазовый анализ исходных веществ и синтезированных координационных соединений. При этом выяснилось, что межплоскостные расстояния и интенсивности синтезированных соединений и свободных лигандов не совпадают (рис. 4, 5).

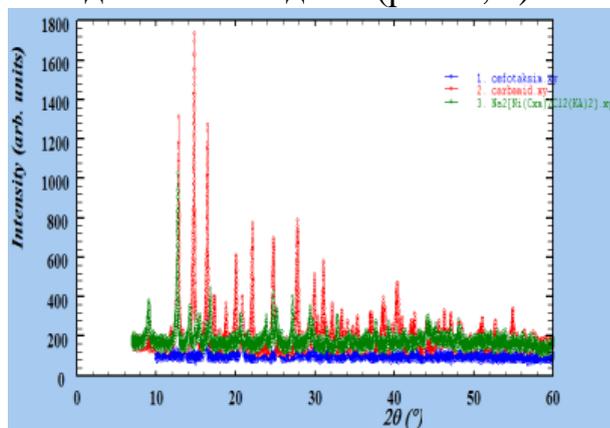


Рис. 4. Рентгенограмма сравнения цефотаксима, карбамида и соединения $\text{Na}_2[\text{Ni}(\text{Cxm})_2\text{Cl}_2(\text{KA})_2]$

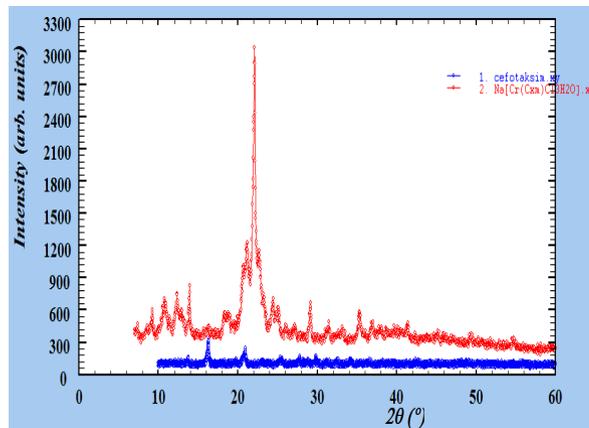


Рис. 5. Рентгенограмма сравнения цефотаксима и соединения $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}]$

Для доказательства строения синтезированных гетерометаллических комплексных соединений был проведен структурный анализ на современном дифрактометре Empyrean компании Malvern Pananalytical, работающем на основе рассеяния рентгеновских лучей в НИИ Ядерной физики АН РУз.

В результате обработки результатов дифрактограммы с помощью программы Fullprof можно определить кристаллографические характеристики и результаты структурного анализа комплексных соединений (рис. 6-10, табл. 5).

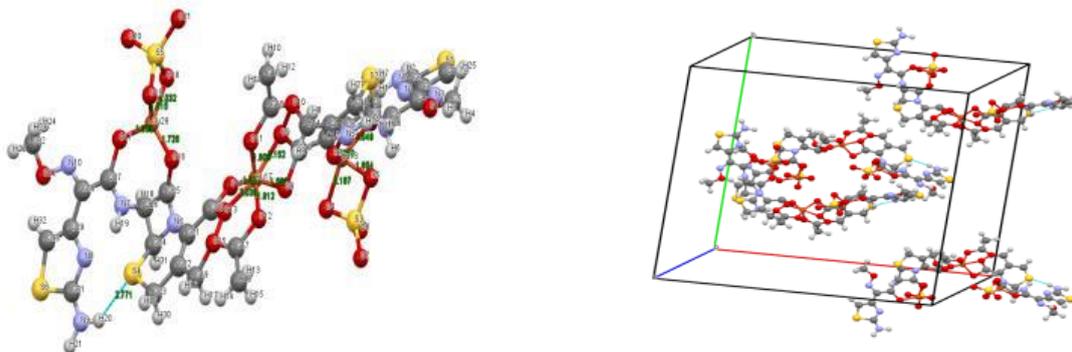


Рис. 6. Строение и расположение молекулы $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ в кристаллической ячейке

Параметры элементарной ячейки кристалла комплексного соединения с $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ следующие: пр. группа C1, $a=29,061 \text{ \AA}$, $b=29,077 \text{ \AA}$, $c=29,713 \text{ \AA}$, $a=90^\circ$, $b=104,43^\circ$, $\gamma=90^\circ$, $V=23786,5 \text{ \AA}^3$, $Z=4$. Комплекс $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ представляет собой трехъядерную нейтральную молекулу, образованную из молекул цефотаксима иона Cu^{2+} и сульфатного остатка. Видно, что координационное число 1-го и 3-го атомов меди равно 4, а координационное число 2-го атома меди равно 6. Величина расстояния между связями Cu(17)-O(11), Cu(17)-O(12), Cu(17)-O(13), Cu(17)-O(14) в комплексе равна 1,9054, соответственно \AA равно 1,9123 \AA , 2,0383 \AA , 1,9214 \AA . O(8)-Cu(17)-O(9), O(8)-Cu(17)-O(11), O(8)-Cu(17)-O(12), O(8)- Межвалентные углы

$\text{Cu}(17)\text{--O}(13)$, $\text{O}(8)\text{--Cu}(17)\text{--O}(14)$ составляют $66,29^\circ$, $124,17^\circ$, $91,47^\circ$ соответственно. Видно, что $128,14^\circ$ равно $99,9^\circ$ (рис. 6).

Получены структурные анализы комплексных соединений, содержащих $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})_2]$.

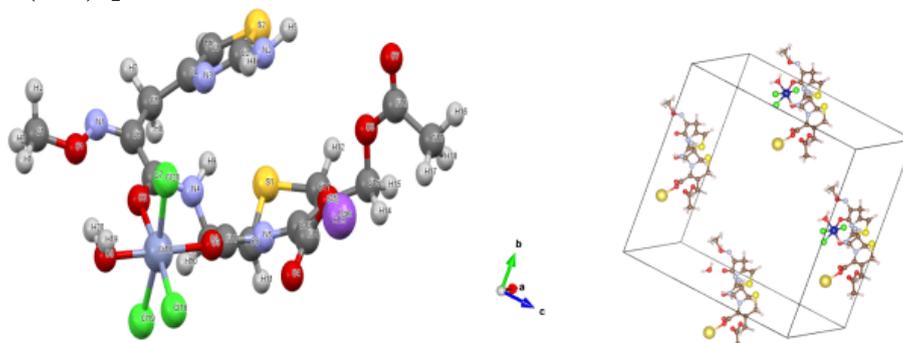


Рис. 7. Строение и расположение молекулы $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ в кристаллической ячейке

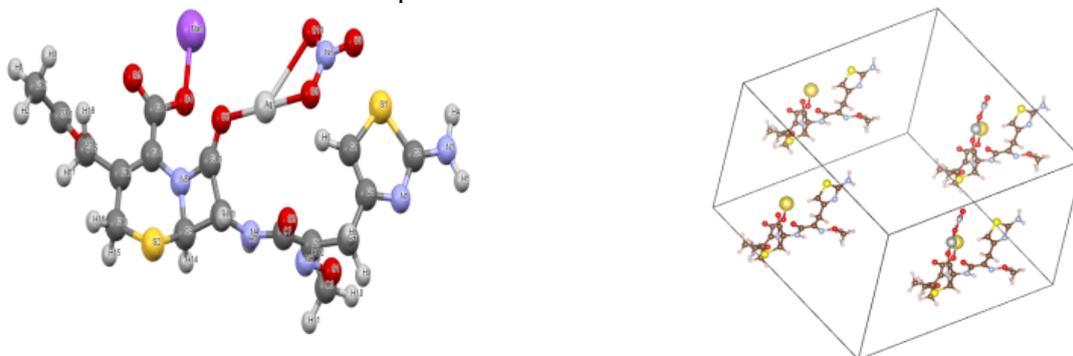


Рис. 8. Строение и расположение молекулы $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$ в кристаллической ячейке



Рис. 9. Строение и расположение молекулы $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ в кристаллической ячейке

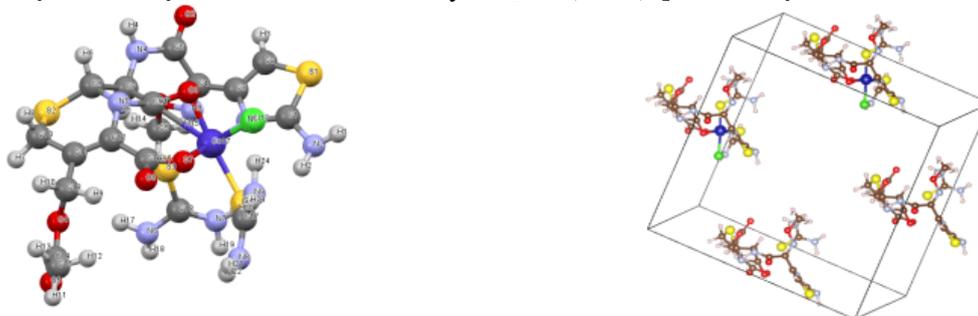


Рис. 10. Строение и расположение молекулы $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{TK})_2]$ в кристаллической ячейке

Нами исследованы структурные аспекты нейтральные, анионные и смешанно лигандные комплексы $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и

[Co(Cxm)Cl(TK)₂] цефотаксима с ионами Ag(I), Mn(II), Co(II). Их кристаллографические данные, параметры, уточняющие их строение, представлены в таблице 5, а строение комплексного соединения и его расположение в кристаллической ячейке - на рисунках 7-10.

Таблица 5

Кристаллографические данные структурного анализа молекул

Соединение	[Cu ₃ (Cxm) ₂](SO ₄) ₂	Na[Cr(Cxm)Cl ₃ H ₂ O]·0,5H ₂ O	Na[Ag(Cxm)NO ₃]	[Mn(Cxm) ₂]·H ₂ O	[Co(Cxm)Cl(TK) ₂]
Молекулярная масса	1292	667.84	647.03	963.48	624.57
Сингония	моноклинная	тетроганала	тетроганала	тетроганала	тетроганала
Пространственная группа	C1	C4	C4	C4	C4
a, Å	29.061	17.4143	25.37187	17.1053	13.6488
b, Å	29.077	24.6276	17.94062	24.1906	19.3022
c, Å	29.713	24.6276	25.37187	24.1906	19.3022
α °	90	90	90	90	90
β °	104.43	90	90	90	90
γ °	90	90	90	90	90
V, Å ³	23786,5	14943.286	11548.953	10009.9	5085.11
Размер кристалла, мм	0.26×0.23×0.14	0.23×0.17×0.08	0.14×0.12×0.08	0.16×0.14×0.06	0.27×0.23×0.18
Интервал h,k,l	-22/18,-6/14,-18/16	-24/22; -18/16; -16/12	-20/22, -6/9, -18/19	-20/26, -12/24, -16/22	-20/24, -6/14, -22/26
Всего рефлексов	7494	5414	2345	2194	2251
Число свободных рефлексов	1564	2892	1792	1782	1271
R _{int}	0.056	0.058	0.0848	0.0743	0.0674
Критерий F ² ≥2σ (F ²)	2612	678	2361	2116	2158
Определенные параметры	252	192	233	205	216
Качество определения структуры	1.16	1.26	1.26	1.15	1.22
R ₁ , wR ₂ (I>2σ (I))	0.0245,0.1352	0.824, 0.934	0.287, 1.118, 1.31	0.287, 1.118, 1.31	0.287, 1.118,
D _x , г/см ⁻³	1.349	1.214	1.414	1.331	1.345
Δρ _{min} Δρ _{max} , eÅ ⁻³	-0.36 / 0.48	-0.524, 0.688	-0.39 / 0.52	-0.41 / 0.56	-0.32 / 0.43

4. Результаты спектрального и термического анализа синтезированных комплексов.

Сравнивая ИК спектры свободных цефотаксима и амидов с ИК спектрами образованных гомо- и смешаннолигандных комплексных соединений можно определить образование координационной связи.

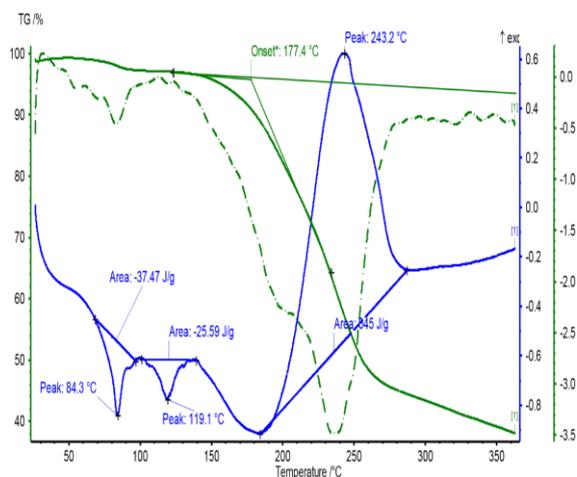
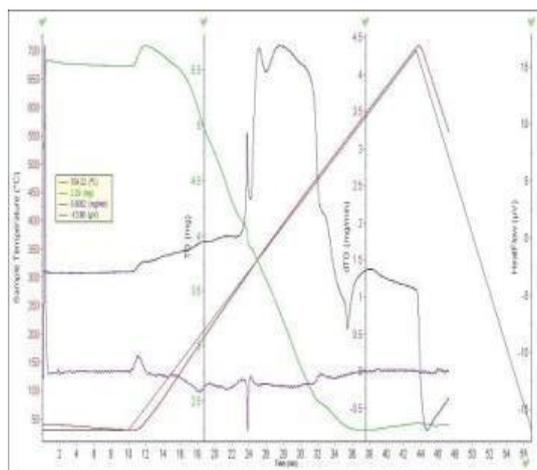


Рис. 12. Термический анализ комплексов $[\text{Co}(\text{Cxm})_2]$ и $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$

Обобщение результатов термического анализа всех синтезированных комплексных соединений показывает их ступенчатое разложение с одновременным горением продуктов распада и их полным окислением, конечным продуктом термического разложения является остаток оксида металла. Температуры термического разложения однородных комплексов солей Cr(III), Mn(II), Fe(III), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Ag(I) с цефотаксимом повышаются в ряду солеобразующих металлов: $\text{Fe(III)} < \text{Mn(II)} < \text{Co(II)} < \text{Ni(II)} < \text{Cr(III)} < \text{Zn(II)} < \text{Ag(I)} < \text{Cu(II)}$. Термическая устойчивость смешанно-амидных комплексных соединений солей Co(II), Ni(II), Cu(II), полученных в соотношении металл:лиганд 1:1 и 1:2, увеличивается, в зависимости от металла, в ряду $\text{Co(II)} < \text{Ni(II)} < \text{Cu(II)}$, в зависимости от соотношении металл:лиганд – в ряду $1:1 < 1:2$ и в зависимости от лиганда – в ряду карбамид < тиокарбамид < ацетамид. Полученные результаты соответствуют данным, приведенным в литературных источниках.

На основе спектров ЭПР можно сделать выводы о строении вещества. Синглетная линия в спектре ЭПР указывает на его интенсивность, широту, форму и состояние в магнитном поле.

Молекула цефотаксима представляет собой многофункциональный полидентатный лиганд, и ее координационные свойства зависят от электронного строения, степени окисления и природы растворителя комплексообразующих ионов металлов. Некоторые из изученных ионов d-металлов ($\text{Cr}^{+3}(3d^3)$, $\text{Mn}^{+2}(3d^5)$, $\text{Fe}^{+3}(3d^6)$, $\text{Co}^{+2}(3d^7)$, $\text{Cu}^{+2}(3d^9)$) обладают парамагнитными свойствами, исследованы методом ЭПР-спектроскопии их гомо- и разнолигандных комплексов с цефотаксимом и амидными лигандами в твердом состоянии и водно-ацетонитрильном растворе.

По результатам исследований представлены параметры спектра ЭПР гомолигандных комплексов иона Cu^{+2} $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ (рис. 13). Спектры ЭПР комплексов, содержащих ионы Cl^- и SO_4^{2-} в твердом состоянии, показали очень тонкое взаимодействие различной интенсивности на синглетном фоне. Их параметры $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ $\Delta H = 6.89-7.0$ мТ и $g = 2.1150 \pm 0.005$ показали, что ионы Cu^{+2} состоят из отдельного изомеризованного моноядерного $[\text{Cu}(\text{O}_6)]$ координационного узла (рис. 13).

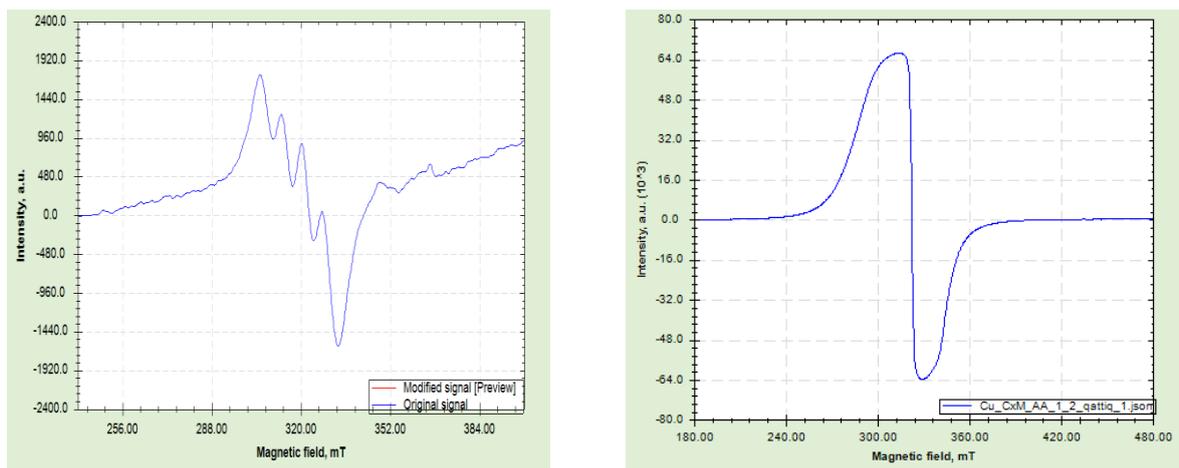


Рис. 13. ЭПР спектры комплексов $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ и $[\text{Cu}(\text{Cxm})\text{Cl}(\text{AA})]$

5. Исследования по практическому использованию синтезированных комплексных соединений.

На основе научных результатов по синтезу цефатоксимных и цефатоксим-амидных комплексов некоторых биогенных металлов и определению их физико-химических и биологических свойств:

-комплексное соединение $[\text{SefoCu}]$ испытано на практике в электрохимической лаборатории ООО “Муборекского газоперерабатывающего завода” и рекомендовано в качестве ингибитора коррозии металлических конструкций и установок (справка №48/G’K-03 от 18 марта 2024 года ООО “Муборекский газоперерабатывающий завод”).

-комплексное соединение $[\text{SefaCo}]$ внедрено в практику в качестве препарата против грибковых и бактериальных заболеваний растений томата. Справка № 05/01-05/02-05/04-04-117 Национального центра знаний и инноваций в сельском хозяйстве Министерства Сельского хозяйства Республики Узбекистан от 29 марта 2024 года).

ВЫВОДЫ

1. Исследованием электронного строения, координационные свойства электронодонорных атомов цефтоксима и амидных лигандов методами КХР установлено высокие преимущественные возможности координации через атомы азота и кислорода монодентатных и тридентатного лиганда, в зависимости состава, среды раствора и природы лигандов.

2. Впервые синтезировано 8 новых гомолигандных ($\text{M}:\text{L} 1:2$) и 12 смешаннолигандных (в соотношениях $\text{M}:\text{L}^n:\text{L}^m 1:1:1, 1:1:2, 1:2:2$) координационных соединений солей $\text{Cr}(\text{III}), \text{Mn}(\text{II}), \text{Fe}(\text{III}), \text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Cu}(\text{II}), \text{Zn}(\text{II}), \text{Ag}(\text{I})$ с цефотаксимом и амидами, при этом доказано образование нейтральных, анионных и катионных комплексов, в которых полидентатные лиганды проявили по природе моно- и бидентатность.

3. Строение синтезированных соединений доказано с помощью современных физико-химических методов исследования – рентгенофазового, структурного анализа, ИК, ЭПР спектроскопии, термические свойства

доказаны с помощью ТГА, ДТА, ДСК.

4. Впервые доказано кристаллическое строение и геометрическая форма координационных узлов комплексных соединений $[\text{Cu}_3(\text{Схм})_2](\text{SO}_4)_2$, $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Схм})\text{Cl}_3\text{H}_2\text{O}] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Схм})\text{NO}_3]$, $[\text{Mn}(\text{Схм})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $[\text{Co}(\text{Схм})\text{Cl}(\text{ТК})_2]$.

5. Впервые с помощью метода молекулярного докинга проанализирована биологическая активность веществ определенного типа на примере соединений $[\text{Co}(\text{Схм})_2]$ и $[\text{Cu}_3(\text{Схм})_2](\text{SO}_4)_2$. Выявлено и внедрено в практику, что комплексное соединение $[\text{Co}(\text{Схм})_2]$ является пестицидом против грибковых и бактериальных болезней растений томата, а комплексное соединение $[\text{Cu}_3(\text{Схм})_2](\text{SO}_4)_2$ является конкурентноспособным ингибитором коррозии, заменяющим экспорт.

**SCIENTIFIC COUNCIL AWARDING SCIENTIFIC DEGREES
PhD.03/30.12.2019.K.72.01 AT THE BUKHARA STATE UNIVERSITY
KHOREZM MAMUN ACADEMY**

MASHARIPOV AZAMAT TURSINBOYEVICH

**CEFOTAXIME AND CEFOTAXIME-AMIDE COMPLEXES OF SALTS
OF SOME BIOGENIC METALS: SYNTHESIS, STRUCTURE AND
PROPERTIES**

02.00.01 – Inorganic chemistry

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

BUKHARA – 2025

INTRODUCTION (abstract of Doctor of Philosophy (PhD) dissertation)

Purpose of the study consists of the synthesis of homogeneously and mixed-ligand complex compounds of biogenic metal salts with cefotaxime and amides, studying their composition, structure and properties, as well as determining the patterns of complex formation.

Objects of research are cefotaxime, amides, salts of biogenic metals and coordination compounds synthesized on their basis.

Scientific novelty of the study:

Using quantum-chemical calculation methods, the energetic parameters, charge distribution on atoms, and the reactive and coordination properties of the multifunctional polydentate ceftotaxime and amide molecules, as well as their coordination compounds, were determined.

For the first time, 20 new anionic, cationic, and neutral coordination compounds based on salts of Ag(I), Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cr(III), and Fe(III) with the sodium salt of ceftotaxime, acetamide (CH_3CONH_2) (AA), urea ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) (K), and thiourea ($\text{CS}(\text{NH}_2)_2$) (TK) were synthesized.

The individuality of the synthesized complexes and the coordination modes of the ligands to the metal ions were determined using elemental analysis, X-ray phase analysis, thermal analysis, IR and EPR spectroscopy, and X-ray crystallography (XRD).

In homo- and mixed-ligand complexes of paramagnetic ions $\text{Mn}^{2+}(3d^5)$, $\text{Co}^{2+}(3d^7)$, $\text{Cu}^{2+}(3d^9)$ with different electronic configurations, the dependence of the structure and magnetochemical properties on the d-electron configuration of the central ion and the nature and type (N, O, S) of electron-donor atoms of the ligands was established using EPR spectroscopy.

For the first time, the crystal structures of the ceftotaxime molecule and the coordination compounds $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$, $\text{Na}[\text{Cr}(\text{Cxm})\text{Cl}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}] \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$, $\text{Na}[\text{Ag}(\text{Cxm})\text{NO}_3]$ $[\text{Mn}(\text{Cxm})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$, $[\text{Co}(\text{Cxm})\text{Cl} \cdot (\text{TK})_2]$ synthesized on its basis were determined by processing X-ray diffraction data using the FullProf program.

Based on crystallographic and structural data, it was established that ceftotaxime molecules, as multifunctional pentadentate ligands, form a trinuclear complex $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ with Cu^{2+} ions, in which two central ions are in tetrahedral and one in octahedral coordination environments.

Among the synthesized compounds, the inhibitory effect of the complex compound "SefoCu" against the corrosion process on metal structures and equipment, as well as the antifungal effect of the complex compound "SefaCo" against the fungus *Fusarium oxysporum*, were identified.

Implementation of the research results. On the basis of scientific results on the synthesis of cefatoxime cefatoxime-amide complexes of some biogenic metals and determination of their physicochemical and biological properties:

Based on the scientific results of the synthesis of ceftotaxime and ceftotaxime-amide complexes of certain biogenic metals and the determination of their physicochemical and biological properties:

A methodology for evaluating the effectiveness of metal corrosion protection

has been developed. The Cu(II) complex with ceftotaxime has been implemented as an effective corrosion inhibitor (reference №48/G'K-03 dated 18 March 2024 of LLC “Muborek Gas Processing Plant”). It was found that the inhibitory protective effect of the complex compound $[\text{Cu}_3(\text{Cxm})_2](\text{SO}_4)_2$ reached 77–79% efficiency compared to inhibitor formulations and properties of local and foreign manufacturers.

The bactericidal action stimulator "SefaCo" has been introduced into practice as a preparation against fungal and bacterial diseases of tomato plants. It was tested on the tomato variety "Chinto" across 4 hectares of greenhouse fields at the farm "Mard Jaloliddin," the variety "Alamina" across 2 hectares of greenhouse fields at the farm "Green House Sabzavotlari," and the variety "Linda" across 2 hectares of open fields at the farm "Xurshid Rashid Bog‘i (Reference №05/01- 05/02-05/04-04-117 of the National Centre of Knowledge and Innovation in Agriculture of the Ministry of Agriculture of the Republic of Uzbekistan dated 29 March 2024). As a result, enhanced development, increased branching, higher fruit yield, resistance to bacterial and fungal diseases, and an increase in tomato productivity by 57–100 centners per hectare were observed in both greenhouse and open fields.

Structure and scope of the dissertation. The dissertation includes an introduction, three chapters, conclusions, a list of references and appendix from 185 titles . The dissertation is 112 pages.

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

I Bo'lim (I часть; part I)

1. Masharipov A., Xasanov Sh., Abdullaeva Z., Xudoyberganov O., Xallokov F., Abdullaeva F. Синтез и строение полиядерного комплексного соединения на основе сульфата меди(II) и цефотаксима // Universum: технические науки. - 2024 - №2(119), С. 50-55. (02.00.00. №1)

2. Masharipov A. Synthesis and structure of a monoligand compound based on Mn^{2+} and cefotaxime // Universum: химия и биология. – 2024. – №4(118) – С. 51-55. (02.00.00. №2)

3. Masharipov A., Hasanov Sh., Abdullayeva Z. Kobalt (II) sulfat bilan sefotaksim asosida bir ligandli kompleks birikma sintez qilish va tuzilishini o'rganish // O'zbekiston milliy universiteti xabarлари, – 2023. - №3/1/1, - 458-461 b. (02.00.00. №12)

4. A.T.Masharipov, Sh.B.Khasanov, Z.Sh.Abdullaeva, O.I.Khudoyberganov. Synthesis and analysis of mixed ligand coordination compound based on $NiCl_2$, cefotaxime and acetamide // Electronic journal of actual problems of modern science education and training (URDU elektron jurnali). – 2024. – №5. – P. 9-14. (02.00.00. №15)

5. A.T.Masharipov, Sh.B.Hasanov, Z.Sh.Abdullayeva, O.I.Xudoyberganov. $CoCl_2$, sefotaksim va karbamid asosida aralash ligandli koordinatsion birikma sintez qilishning kvant kimyoviy tahlili // Namangan davlat universiteti ilmiy axborotnomasi. - 2024. - №6. - 71-75 b. (02.00.00. №18)

II bo'lim (II часть; part II)

6. Masharipov A., Xasanov Sh., Abdullaeva Z. Синтез и элементный анализ координационных соединений на основе сульфата кобальта (II) и цефотаксима // Международной научно-технической конференции молодых ученых, г. Минск, Республика Беларусь, 2023. ст. 110-111

7. A.T.Masharipov, Sh.B.Khasanov, Z.Sh.Abdullaeva. Synthesis of coordination compound based on copper (II) sulfate and cefotaxime // Actual problems of the chemistry of natural compounds konferensiya materiallari to'plami, Toshkent, 2023, 278-bet

8. A.T.Masharipov, Sh.B.Hasanov, Z.Sh.Abdullayeva, O.I.Xudoyberganov. Nikel (II) xlorid, sefotaksim va karbamid asosida aralash ligandli kompleks birikmasining sintezi va tahlili // Tibbiyot sohasida tibbiy kimyo, biokimyo va biofizikada istiqbolli tadqiqotlar xalqaro ilmiy-amaliy anjuman tezislar to'plami, Buxoro, 2024, 166-168 betlar

9. A.T.Masharipov, Sh.B.Hasanov, Z.Sh.Abdullayeva, O.I.Xudoyberganov. Kobalt (II) sulfat, sefotaksim va karbamid asosida aralash ligandli kompleks birikmasining sintezi va kvant-kimyoviy tahlili // Сборник трудов республиканской научно-практической конференции «Достижения и

перспективы супрамолекулярной химии» материалы конференции. Ташкент, 2024, 148-149 ст.

10. A.T.Masharipov, Sh.B.Hasanov, Z.Sh.Abdullayeva. Rux sulfat bilan sefotaksim asosida bir ligandli kompleks birikmasi sintezi va elementlar tahlili // Kimyo va kimyoviy texnologiyaning dolzarb muammolari va yechimlari respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi. Navoiy, 2023. 244-245 betlar

11. A.T.Masharipov, Sh.B.Hasanov, Z.Sh.Abdullayeva, Sh.Matmurotov, J.Matkarimov. Mis(II) sulfat, sefotaksim va karbamid asosida aralash ligandli kompleks birikmasining kvant-kimyoviy tahlili // «Ta'lim, fan va ishlab chiqarishning dolzarb muammolari» mavzusidagi respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. Namangan, 2023. 301-303 betlar

12. Masharipov A., Hasanov Sh., Abdullayeva Z., Xudoyberganov O., Sobirova N. Karbamid va sefotaksimning CoCl_2 tuzi bilan kompleks birikmasi sintezi // "Kimyoning dolzarb muammolari" mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to'plami. Urganch, 2024. 111-112 betlar

Avtoreferat “Durdona” nashriyotida tahrirdan o‘tkazildi hamda o‘zbek, rus va ingliz tillaridagi matnlarning mosligi tekshirildi.



Bosishga ruxsat etildi: 07.03.2025 yil. Bichimi 60x84 1/16 , «Times New Roman» garniturada raqamli bosma usulida bosildi.
Shartli bosma tabog‘i 3,0 Adadi: 100 nusxa. Buyurtma №133.

Guvohnoma AI №178. 08.12.2010.
“Sadridin Salim Buxoriy” MChJ bosmaxonasida chop etildi.
Buxoro shahri, M.Iqbol ko‘chasi, 11-uy. Tel.: 65 221-26-45

