

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

O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI

KAMOLOV SANJAR NAYIMOVICH

**Cu(II), Mn(II), Co(II), VA Ni(II) TUZLARINING TARKIBIDA AZOT,
KISLOROD BO‘LGAN LIGANDLAR ASOSIDA YANGI
KOMPLEKSLARI SINTEZI, KRISTALL TUZILISHI VA BIOLOGIK
FAOLLIGI**

02.00.01-Noorganik kimyo
02.00.04-Fizik kimyo

KIMYO FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI

Termiz – 2025

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

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

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

Kamolov Sanjar Nayimovich

Cu (II), Mn(II), Co(II), va Ni(II) tuzlarining tarkibida
azot, kislorod bo'lgan ligandlar asosida yangi komplekslari
sintezi, kristall tuzilishi va biologik faolligi..... 3

Камолов Санжар Найимович

Синтез, кристаллическое строение и биологическая
активность новых комплексов солей Cu (II), Mn (II), Co (II) и Ni
(II) на основе азот- и кислородсодержащих лигандов..... 21

Kamolov Sanjar Nayimovich

Synthesis, crystal structure and biological activity of new
complexes based on nitrogen-and oxygen-containing
ligands of Cu (II), Mn (II), Co (II), and Ni (II) salts..... 41

E'lon qilingan ishlar ro'uxati

Список опубликованных работ

List of published works 45

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

O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI

KAMOLOV SANJAR NAYIMOVICH

**Cu(II), Mn(II), Co(II), VA Ni(II) TUZLARINING TARKIBIDA AZOT,
KISLOROD BO‘LGAN LIGANDLAR ASOSIDA YANGI
KOMPLEKSLARI SINTEZI, KRISTALL TUZILISHI VA BIOLOGIK
FAOLLIGI**

02.00.01-Noorganik kimyo
02.00.04-Fizik kimyo

KIMYO FANLARI BO‘YICHA FALSAFA DOKTORI (PhD)
DISSERTATSIYASI AVTOREFERATI

Termiz – 2025

Falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2024.4.PhD/K865 raqam bilan ro'yxatga olingan.

Dissertatsiya O'zbekiston Milliy universitetida bajarilgan.

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

Ilmiy rahbarlar:

Babayev Baxrom Nurillayevich
kimyo fanlari doktori, professor

Ibragimov Aziz Baxtiyarovich
kimyo fanlari doktori, professor

Rasmiy opponentlar:

Trobov Xamza Tursunovich
kimyo fanlari doktori, professor

Nazarov Yusufjon Eshqobilovich
kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori

Yetakchi tashkilot:

Qarshi davlat universiteti

Dissertatsiya himoyasi Termiz davlat universiteti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 raqamli Ilmiy kengashning 2025-yil «26» 04 soat 11³⁰ dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 190111, Termiz shahri, Barkamol avlod ko'chasi, 43-uy. Tel.: (+99876) 221-74-55, faks: (+99876) 221-71 -17, e-mail: termizdu@umail.uz).

Dissertatsiya bilan Termiz davlat universitetining Axborot resurs markazida tanishish mumkin (№ 286 -raqami bilan ro'yxatga olingan). Manzil: 190111, Termiz shahri, Barkamol avlod ko' chasi, 43- uy. Tel.: (+99876) 221-74-55, faks: (+99876) 221-71 -17, e-mail: termizdu@umail.uz).

Dissertatsiya avtoreferati 2025-yil «10» 04 kuni tarqatildi.

(2025-yil «10» 04 dagi 6 - raqamli reyestr bayonnomasi).



I.A. Umbarov

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash raisi, k.f.d., prof.

Sh.A. Kasimov

Ilmiy darajalar beruvchi Ilmiy kengash kotibi, k.f.d., prof.

G.J. Muqumova

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

KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)

Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati. Bugungi kunda benzamid va uning hosilalari zamonaviy kimyo hamda farmatsevtika sohalarida muhim o‘rin egallaydi. Xususan, benzamid asosidagi kompleks birikmalar dorivor moddalar, biokimyoviy reagentlar va katalizatorlar sifatida keng qo‘llaniladi. Bunday birikmalarning antipsixotik, antiemetik, antibakterial va hatto o‘sma kasalliklariga qarshi xususiyatlari ularni tibbiyotda zarur vositaga aylantirgan bo‘lsada, ba’zi benzamidlar va ularning hosilalari tabiatda sekin parchalanadi hamda toksik ta’sir ko‘rsatishi mumkin. Shunga ko‘ra, benzamid hosilalarining d-metallar ionlari bilan yangi kompleks birikmalari simtezi, ulardagi tarkib-tuzilish-xossa qonuniyatlarini tadqiq etish orqali barqaror, biologik faol, toksikligi kam va tanlovchan katalitik birikmalar olish muhim ahamiyat kasb etadi.

Jahonda oraliq metallarning biologik faol ligandlar bilan kompleks birikmalarini sintez qilish, ularning kristall tuzilishini va biologik faolligini aniqlashga yo‘naltirilgan ilmiy-tadqiqot ishlari olib borilmoqda. Bu borada d-metallarning tarkibida azot va kislorod atomlari bo‘lgan ligandlar bilan kompleks birikmalarini sintez qilish, ularning tarkibi, kristall tuzilishi, kvant-kimyoviy parametrlari hamda boshqa fizik-kimyoviy xossalarini aniqlash, benzamid va uning hosilalarining d-metall ionlari bilan sintez qilingan kompleks birikmalari asosida tibbiyot, farmatsevtika, qishloq xo‘jaligi hamda kimyo sanoatida ishlatiladigan yangi, kam konsentratsiyalarda ham yuqori samarali, ekologik toza, toksikligi kam bo‘lgan preparatlar tayyorlashga alohida e’tibor berilmoqda.

Respublikamizda biogen metall ionlarining biofaol ligandlar bilan hosil qilgan kompleks birikmalari asosida yuqori samarali, import o‘rnini bosadigan, arzon, ekologik xavfsiz va kam toksikli yangi turdagi dorivor preparatlarni yaratish va ularni amaliyotga joriy etish borasida qator natijalarga erishilmoqda. Shu jumladan mahalliy bozorni import o‘rnini bosuvchi reagentlar bilan ta’minlashda keng ko‘lamli ishlar amalga oshirilmoqda. Mamlakatimizda innovatsion texnologiyalarni tadbiq etish orqali sanoat obyektlarini yuritishning ilmiy asoslangan tizimi hamda atrof-muhitni muhofaza qilishning chora-tadbirlarini amalga oshirishga katta e’tibor berilmoqda. “Yangi O‘zbekistonning 2022-2026-yillardagi taraqqiyot strategiyasida”¹ iqtisodiyotni rivojlantirishning ustuvor yo‘nalishlari belgilangan va mahalliy xomashyo resurslarini chuqur qayta ishlash asosida yuqori qo‘shimcha qiymatli tayyor mahsulot ishlab chiqarishni yanada jadallashtirish, sifat jihatdan yangi mahsulot va texnologiyalar turlarini o‘zgartirish kabi masalalar belgilangan. Bu borada biofaol xususiyatga ega bo‘lgan kompleks birikmalar sintez qilish va tadqiq etish dolzarb vazifalardan bo‘lib, muhim ahamiyatga ega.

O‘zbekiston Respublikasi Prezidentining 2022-yil 28-yanvardagi PF-60-son “2022-2026-yillarga mo‘ljallangan Yangi O‘zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to‘g‘risida”gi Farmoni va 2020-yil 12-avgustdagi PQ-4805-son “Kimyo va biologiya yo‘nalishlarida uzluksiz ta’lim sifatini va ilm-fan natijadorligini oshirish

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

chora-tadbirlari to'g'risida"gi, 2021-yil 13-fevraldagi PQ-4992-son "Kimyo sanoati korxonalarini yanada isloh qilish va moliyaviy sog'lomlashtirish, yuqori qo'shilgan qiymatli kimyoviy mahsulotlar ishlab chiqarishni rivojlantirish chora tadbirlari to'g'risida"gi Qarorlari hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa me'yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni amalga oshirishda ushbu dissertatsiya tadqiqoti natijalari muayyan darajada xizmat qiladi.

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

Muammoning o'rganilganlik darajasi. Dunyoning yetakchi ilmiy markazlarida tarkibida azot va kislorod tutgan ligandlar bilan oraliq metallar komplekslarini sintez qilish, ularning fazoviy tuzilishi va biologik faolligini aniqlash borasida ko'plab tadqiqotlar olib borilgan. Xususan, S.Jaumeer-Laulloo, V.Veena, S.Kezo, K.R.Reddy, H.Saxena, W.Kaminsky, M.R.Kollipara, E.Xatiwora, G.Puranik, D.Darmadhikar, A.Adebomi, O.Gabriel kabi dunyo olimlari, shuningdek MDH mamlakatlari miqyosida Ye.V.Antipov, A.P. Gulya, N.T. L.M.Sharkova, N.F.Kucherova, G.N.Artemenko Kuznesov V.I. Pexnko boshchiligidagi olimlarning ilmiy guruhlar va maktablari shug'ullanishgan.

Mamlakatimizda kompleks birikmalarning sintezi, tuzilishi va xossalarini o'rganish bo'yicha tadqiqotlar akademiklar N.A.Parpiyev, B.T.Ibragimov, professorlar X.X.Xakimov, X.T.Sharipov, O.F.Xodjayev, T.A.Azizov, X.X.Turayev, Sh.A.Kadirova, Z.Ch.Kadirova, A.B.Ibragimov, J.M.Ashurov, Sh.A.Kasimov va boshqa olimlar tomonidan olib borilgan.

Xalqaro Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasi (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2024) tahliliga ko'ra, bugungi kunga qadar p-nitroanilinning 19 ta, benzamidning 24 ta, p- va m-sulfanil kislotalarining esa 100 dan ziyod oraliq metallokomplekslari kiritilgan.

Biroq, adabiyot manbalarini tahlil qilish natijasida shuni takidlash mumkinki, tarkibida azot va kislorod donor atomlari bo'lgan ligandlarning d-metallar bilan kompleks birikmalari bo'yicha keng ko'lamda tajriba natijalari mavjud bo'lsa-da, bu sohada hali ko'plab muhim jihatlar yetarlicha o'rganilmagan. Shuning uchun, tarkibida azot va kislorod donor atomlari bo'lgan ligandlar asosida yangi kompleks birikmalarni sintez qilish, ularning fizik-kimyoviy xossalarini aniqlash va biologik faolligini o'rganish ilmiy va amaliy jihatdan katta ahamiyatga ega.

Dissertatsiya mavzusining dissertatsiya bajarilgan oliy ta'lim muassasasining ilmiy-tadqiqot ishlari bilan bog'liqligi. Dissertatsiya ishi Mirzo Ulug'bek nomidagi O'zbekiston Milliy universiteti ilmiy-tadqiqot ishlari rejasining OT-F7-61 "Geterotsiklik birikmalarning yangi hosilalari: sintezi, tuzilishi va biologik faolligi" (2017-2020 yy) mavzusidagi fundamental loyiha doirasida bajarilgan.

Tadqiqotning maqsadi Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) tuzlarining tarkibida azot va kislorod bo'lgan ligandlar (benzamid, p-nitroanilin, p- va m-sulfanilkislota, malein kislotalari) bilan yangi komplekslarini sintez qilish, ularning kristall tuzilishini va biologik faolligini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning vazifalari:

Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) ning tarkibida azot va kislorod atomlari bo'lgan ligandlar bilan kompleks birikmalarini sintez qilish hamda ularning monokristallarini olish;

kompleks birikmalarning tuzilishi, tarkibi va fizik-kimyoviy xossalarini zamonaviy tadqiqot usullari yordamida tahlil qilish;

yangi sintez qilingan kompleks birikmalarning termik barqarorligini aniqlash;

Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) ning tarkibida azot va kislorod atomlari bo'lgan ligandlar bilan kompleks birikmalarining reaksiya qobiliyati, ta'sirlashish energiyalari va elektron tuzilishini kvant-kimyoviy usullar yordamida hisoblash;

sintez qilingan kompleks birikmalarning biologik faolligini aniqlash.

Tadqiqotning ob'yekti sifatida tarkibida Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) ionlarini tutgan anorganik tuzlar, tarkibida azot va kislorod donor atomlari bo'lgan biofaol ligandlar va ular asosida sintez qilingan kompleks birikmalar tanlangan.

Tadqiqotning predmeti Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) ionlarining tarkibida azot va kislorod atomlari bo'lgan biofaol ligandlar bilan kompleks birikmalari sintezi, ularning kristall tuzilishi, biologik va fizik-kimyoviy xossalarini, zaharlilik darajasini aniqlashdan iborat.

Tadqiqotning usullari. Dissertatsiya ishida kompleks birikmalarning tarkibi va tuzilishini aniqlashda rentgen tuzilish tahlili (RTT), element tahlili, UB- va IQ-spektroskopiya, termik (TG va DTA) tahlil, kvant-kimyoviy hisoblash va biologik faollikni aniqlash usullaridan foydalanilgan.

Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:

Cu(II), Mn(II), Co(II), Ni(II) ionlarining tarkibida azot, kislorod bo'lgan ligandlar (benzamid, *p*-nitroanilin, *m*-sulfanil, *p*-sulfanil, malein kislotalari, etilendiamin va dimetilformamid) bilan aralash ligandli 7 ta yangi kompleks birikmalarini sintez qilingan va monokristallari olingan;

sintez qilingan aralash ligandli kompleks birikmalarning tarkibi IQ, UB spektroskopiya, kristall tuzilishi RTT va termik xossalari TG/DTA tahlil usullari yordamida aniqlangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarni kristallografik ma'lumotlaridan foydalanib, Hirshfeld sirt tahlili yordamida sirtning shakllanishiga getero va gomoatomlararo ta'sirlarning ulushi hamda ta'sirlashish masofalari d_{norm} , d_i , d_e qiymatlari aniqlangan;

Cu(II), Mn(II) ionlarining bezamid bilan hosil qilgan aralash ligandli kompleks birikmalarining o'simliklarga nisbatan biostimulyator sifatida ta'sir ko'rsatishi, o'simliklarning abiotik va biotik omillarga chidamliligini oshirishi, shuningdek, metallar korroziyasini keltirib chiqaruvchi mikroorganizmlarga qarshi ingibitor xossalari isbotlangan.

Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:

Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) ionlarining tarkibida azot va kislorod bo'lgan ligandlar bilan tarkibi Me:L = 1:1, 1:2, 1:4 nisbatda bo'lgan yangi aralash ligandli kompleks birikmalari sintez qilingan;

Cu(II), Mn(II), Co(II), Ni(II) ionlarining tarkibida donor atomlari azot va kislorod bo'lgan ligandlar bilan aralash ligandli kompleks birikmalarini sintez qilishning maqbul sharoitlari aniqlangan;

$Cu(NO_3)_2(H_2O)_2(PNA)_2$] kompleksida markaziy mis (II) ioni elektronlari sp^3d^2 gibridlanishi natijasida koordinatsion soni 6 bo'lgan oktaedrik tuzilishdagi komplekslar hosil bo'lishi hamda Yan-Teller effekti hisobiga Cu1—O3 masofasi uzayishi isbotlangan;

sintez qilingan kompleks birikmalarning mikroblarga va bakteriyalarga qarshi faolligi yuqorili, benzamidga nisbatan zaharliligi kamayganligi (4-sinf) aniqlangan;

Tadqiqot natijalarining ishonchliligi. Ba'zi 3d-metallarning benzamid bilan sintez qilingan aralash ligandli kompleks birikmalarning tarkibi, tuzilishi va xossalari element tahlili, RTT, UB, IQ spektroskopiya, termik, konduktometrik hamda biologik tahlil, kvant-kimyoviy hisoblash kabi zamonaviy tadqiqot usullari yordamida aniqlangan, xulosalar tajriba natijalarining tahlili bilan asoslangan.

Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati.

Tadqiqot natijalarining ilmiy ahamiyati Cu(II), Mn(II), Co(II), Ni(II) ionlarining tarkibida azot va kislorod bo'lgan ligandlar bilan yangi kompleks birikmalari sintez qilinganligi, ularning monokristallari ajratib olinganligi, kristall tuzilishlari hamda zamonaviy tahlil usullari yordamida aniqlangan fizik-kimyoviy xossalari kompleks birikmalarning kristallar kimyosiga yangi natijalar sifatida qo'shilishi, natijada tegishli stereokimyoviy, biologik xususiyatli birikmalarning yo'naltirilgan sinteziga ilmiy asos bo'lishi bilan izohlanadi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati $[Mn(BZA)_4Cl_2]$, $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$, $[Cu(H_2O)_4](MAK)_2$, $[Cu(NO_3)_2(PNA)_2(H_2O)_2]$, $\{[(Cu(CH_3COO)_2)_4(EDA)_2(H_2O)_2](PNA)_2\}$, $[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$ va $[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$ kompleks birikmalarining kristallografik ma'lumotlari Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga (CCDC) kiritilganligi, ushbu ma'lumotlardan foydalanish o'xshash kompleks birikmalarni sintez qilish, ularning tuzilishini tavsiflash, biostimulyatorlar va metallar korroziyasiga qarshi vositalar sifatida samaradorligini oshirishga xizmat qiladi.

Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi. Dissertatsiya doirasida sintez qilingan yangi komplekslar tuzilishi va biologik xossalarni aniqlash bo'yicha olingan ilmiy natijalar asosida:

$[Mn(BZA)_4Cl_2]$, $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$, $[Cu(H_2O)_4](MAK)_2$, $[Cu(NO_3)_2(PNA)_2(H_2O)_2]$, $\{[(Cu(CH_3COO)_2)_4(EDA)_2(H_2O)_2](PNA)_2\}$, $[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$ va $[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$ tarkibli yangi sintez qilingan komplekslarning molekulyar va kristall tuzilishi haqidagi ma'lumotlar Kembrij kristallografik ma'lumotlar markazida ro'yxatdan o'tkazilgan (CCDC depozit raqami 2269288, 2292586, 2443835, 2131922, 2443834, 2443837, 2443836). Natijada, bazaga kiritilgan kimyoviy birikmalar haqidagi taqdim etilgan ma'lumotlar o'xshash birikmalarni sintez qilishda va ularning tuzilishini tavsiflashda foydalanish imkonini yaratgan;

$[Mn(BZA)_4Cl_2]$ va $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ kompleks birikmalarining o'simliklarga nisbatan biostimulyatorlik xususiyatini aniqlash natijalaridan №F3-

20200929348 “Fenol kislotalari asosidagi supramolekulyar komplekslarining tuzilishi bilan ularning o‘simliklarni abiotik va biotik salbiy ta’sirlardan himoya qilish xususiyatlari o‘rtasidagi bog‘liqlikni tadqiq qilish” mavzusidagi fundamental loyihasida foydalanilgan (O‘zbekiston Respublikasi Fanlar akademiyasining 2024-yil 31-oktabrdagi 4/1255-2428-son ma’lumotnomasi). Natijada, samarali biostimulyatorlik xususiyatiga ega bo‘lgan yangi, kam zaharli kompleks birikmalarining sintez qilish usuli ishlab chiqilgan;

Sintez qilingan $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ va $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ tarkibli kompleks birikmalar Muborak gazni qayta ishlash zavodi MCHJ “Texnik nazorat bo‘limi” qoshidagi kimyoviy tahlil qilish laboratoriyasida metall konstruksiya va qurilmalarda korroziyaga qarshi ingibitor sifatida qo‘llanilgan (Muborak gazni qayta ishlash zavodi MCHJ ning 2024-yil 30-sentyabrdagi 914/G’K-09-son ma’lumotnomasi). Natijada, sintez qilingan kompleks birikmalar asosida metallar korroziyasini keltirib chiqaruvchi mikroorganizmlarga qarshi yuqori samaradorlikka ega korroziya ingibitorlari olish imkonini bergan;

Dissertatsiyada keltirilgan ma’lumotlardan Hanty-Mansiysk avtonom okrugidagi “Surgut Davlat Universiteti”ning (Rossiya) “Shimoliy rezavor ekinlar va dorivor o‘tlarni yetishtirish va biologik faol birikmalarini ajratib olish texnologiyalari (YugraBioFarm)” mavzusidagi amaliy tadqiqot loyihasida ajratib olingan moddalarning biologik faolligini baholashda foydalanilgan (Surgut Davlat Universitetining 2024-yil 3-oktyabrdagi 03-01/285-son ma’lumotnomasi). Natijada, tibbiyot, farmatsevtika va oziq-ovqat sanoatida qo‘llaniladigan biologik faol birikmalar olish imkonini yaratilgan.

Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi. Tadqiqot natijalari 14 ta, shu jumladan, 7 ta xalqaro va 7 ta respublika ilmiy-amaliy anjumanlarida ma’ruza qilingan va muhokamadan o‘tkazilgan.

Tadqiqot natijalarining e’lon qilinganligi. Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha jami 19 ta ilmiy ish, shundan 5 tasi O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasi tomonidan falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 3 tasi respublika va 2 tasi xorijiy ilmiy jurnallarda chop etilgan.

Dissertatsiyaning hajmi va tuzilishi. Dissertatsiya kirish, to‘rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati va ilovalardan iborat. Dissertatsiyaning umumiy hajmi 115 betni tashkil etadi.

DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

Kirish qismida o‘tkazilgan tadqiqotlarning dolzarbligi va zarurati asoslangan, tadqiqotning maqsadi va vazifalari, ob’jekt va predmetlari tavsiflangan, respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi ko‘rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi, amaliy natijalari bayon qilingan, olingan natijalarning ilmiy va amaliy ahamiyati ochib berilgan, tadqiqot natijalarini amaliyotga joriy qilish va dissertatsiya tuzilishi bo‘yicha ma’lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning “Tarkibida donor atomlari azot va kislorod bo‘lgan ligandlarning o‘tish metallari bilan kompleks birikmalari” deb nomlangan **birinchi bobida** metallarning tarkibida azot va kislorod tutgan ligandlar bilan komplekslari

sintezi, molekulyar va kristall tuzilishlari, fizik-kimyoviy xossalari va biologik faolligiga oid adabiyotlar tahlili keltirilgan. Tahlil natijalari azot va gidroksil guruhidagi kislorod atomlari, metallar bilan bidentant komplekslar hosil bo'lishiga sabab bo'lishini ko'rsatdi.

Dissertatsiyaning **ikkinchi bob** "Ob'yektlar, sintez jarayonlari va tadqiqot usullari" bo'lib, tadqiqot doirasida foydalanilgan asboblardan, kompleks birikmalar sintezi, qo'llanilgan fizik usullar (spektraskopik usullar, element tahlili, termik tahlil, RTT, Hirshfeld sirt yuzasi tahlili va boshq.) va molekulyar doking usuli tavsiflangan, olingan amaliy natijalar keltirilgan.

[Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksini sintez qilish uchun 0,107 g (1,0 mmol) Mn(II) ning suvdagi eritmasiga tinimsiz aralastirib turgan holda 0,206 g (2,0 mmol) benzamidning spirtidagi eritmasi tomchilatib qo'shildi. Aralashmani 50 min xona haroratida aralastirib, keyin ultratovushli suv hammomida 10 daqiqa ishlov berildi. Xona haroratida erituchi bug'lanishi va monokristallar o'sishi uchun qoldirildi. Ma'lum vaqtdan so'ng ajratib olingan rangsiz kristallar tarkibi ([Mn(BZA)₄Cl₂]) rentgen tuzilish tahlili (RTT) usulida aniqlandi.

1-jadval.

Olingan kompleks birikmalar tarkibining element tahlili

№	Birikma	Tarkib	Massa (g/mol)	C % Hisob: (Topilgan):	H% Hisob: (Topilgan)	N% Hisob: (Topilgan)
1	Mn(BZA) ₄ Cl ₂	C ₂₈ H ₂₈ Cl ₂ MnN ₄ O ₄	610.48	55.00 (49.78)	4.62 (4.13)	9.18 (8.99)
2	[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	C ₂₂ H ₂₆ Cu ₂ N ₂ O ₁₀	605.55	43.63 (43.22)	4.33 (4.11)	4.63 (4.12)
3	[Cu(NO ₃) ₂ (PNA) ₂ (H ₂ O) ₂]	C ₁₂ H ₁₈ Cu N ₆ O ₁₂	401.87	35.88 (35.23)	4.52 (4.18)	20.92 (20.33)
4	{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂](PNA) ₂ }	C ₂₆ H ₄₆ Cu ₄ N ₆ O ₂₀	1016.89	30.73 (30.02)	4.56 (4.40)	8.26 (8.01)
5	[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ NiO ₁₀ S ₂	375.10	38.40 (37.95)	5.37 (5.02)	7.47 (7.06)
6	[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (m-SA) ₂]	C ₁₈ H ₃₀ Co N ₄ O ₁₀ S ₂	525.49	41.15 (40.55)	5.75 (5.24)	10.66 (9.98)
7	[Cu(H ₂ O) ₄](MAK) ₂	C ₄ H ₁₀ CuO ₈	249.67	19.24 (19.00)	4.04 (3.91)	0%

Dissertatsiyaning "Olingan kompleks birikmalarning kristall tuzilishlari va fizik-kimyoviy xossalari" deb nomlangan **uchinchi bobida** yangi sintez qilingan metall kompleks birikmalari RTT, UB-, IQ-spektroskopiya, termik va konduktometrik usullar bilan tahlil qilindi. Komplekslarning kristall tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari aniqlanib, ma'lumotlar keltirildi.

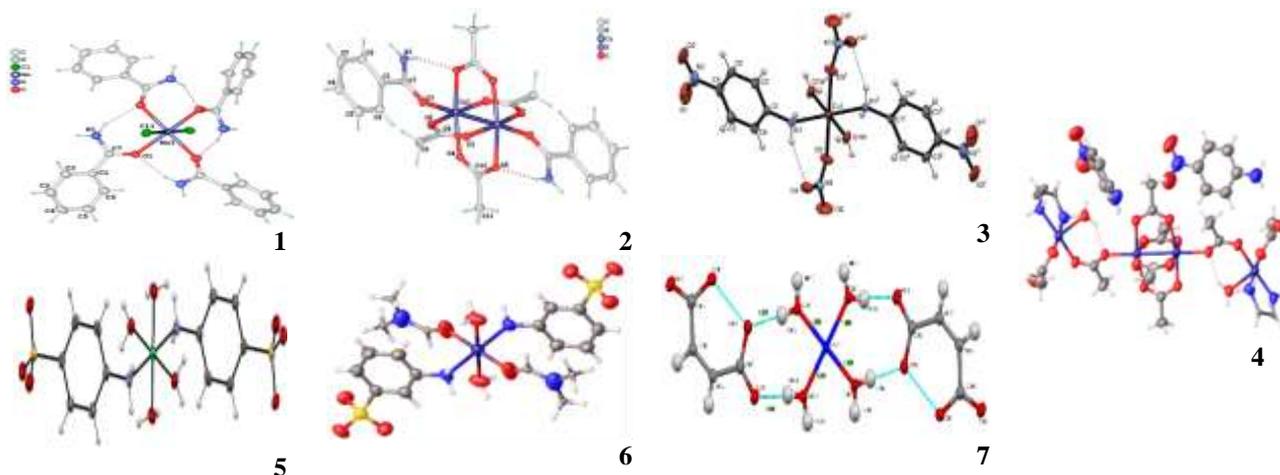
[Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksining kristall tuzilishida markaziy Mn atomi tetragonal geometriyada joylashgan bo'lib, I41/a fazoviy guruhiga mansub. BZA molekulasida Mn ioniga kislorod atomi orqali monodentat bog'lanadi, xlor ioni esa koordinatsiyani ta'minlab, zaryad kompensatsiyasini amalga oshiradi. Kompleksda oktaedr koordinatsion ko'pburchak bo'lib, bog'lanish burchaklari 90° atrofida (89,07°–90,94°) o'zgaradi. Mn-O1 va Mn-Cl1 bog'larining uzunliklari mos ravishda 2,229(2) Å va 2,504(2) Å. Molekulada N1-H va O1 o'rtasida vodород

bog‘lanishi (2,883(5) Å) mavjud bo‘lib, BZA ning amid guruhi aromatik halqaga nisbatan 24,56° burchak hosil qiladi.

2- jadval.

Sintez qilingan kompleks birikmalarning kristallografik ma’lumotlari

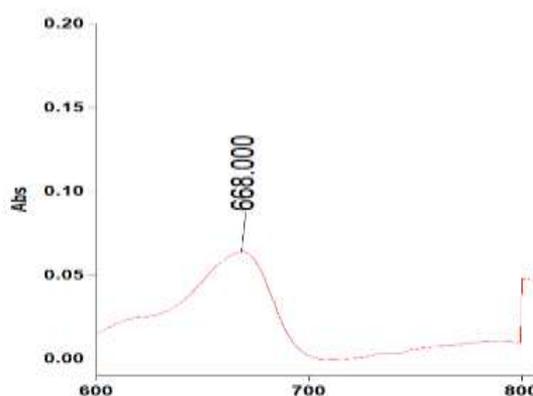
Kompleks Birikmalar	Mr (g/mol)	Singoniya	Faz. gur	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α°	β°	γ°	V(Å ³)
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	610.48	Tetragonal	I41/a	12.36	12.36	19.35	90	90	90	2955
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	605.55	Ortorombik	Pbca	13,20	8,75	22,91	90	90	90	2650
[Cu(NO ₃) ₂ (PNA) ₂ (H ₂ O) ₂]	536.87	Monoklinik	P21/c	5,47	22,56	7,64	90	92	90	944,0
{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂](PNA) ₂ }	1188.8	Monoklinik	P21/n	17.42	8.9	19.2	90	96	90	2983
[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	469.32	Monoklinik	C2/c	20.7	6.44	13.5	90	106	90	1736
[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (m-SA) ₂]	587.49	Monoklinik	P21/n	11.36	8.68	13.01	90	109	90	1208
[Cu(H ₂ O) ₄](MAK) ₂	368.67	Triklinik	P-1	7.19	10.33	10.63	112	96	110	654.3



1-rasm. Sintez qilingan kompleks birikmalarning molekulyar tuzilishi.

1-[Mn(BZA)₄Cl₂], 2-[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄], 3-[Cu(NO₃)₂(PNA)₂(H₂O)₂],
4-[(Cu(CH₃COO)₂)₄(EDA)₂(H₂O)₂](PNA)₂}, 5-[Ni(H₂O)₄(SA)₂],
6-[Co(H₂O)₂(DMFA)₂(m-SA)₂], 7-[Cu(H₂O)₄](MAK)₂

Benamid asosida olingan [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] va [Mn(BZA)₄Cl₂] tarkibli kompleksining **UB spektri** ko‘rinadigan to‘lqin uzunligi Mn(II) ioni uchun 668 nm, Cu(II) ioni uchun esa 774 nm sohada d-d o‘tishlari kuzatildi. Bunda yutilish nuqtalarining joylashuvi va intensivligi kompleksning geometrik tuzilishi va ligandlar maydoniga bog‘liq. Benamid va [Mn(BZA)₄Cl₂] komplekslarining **IQ-spektrlari** o‘xshash



2-rasm. [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksining UB-spektri

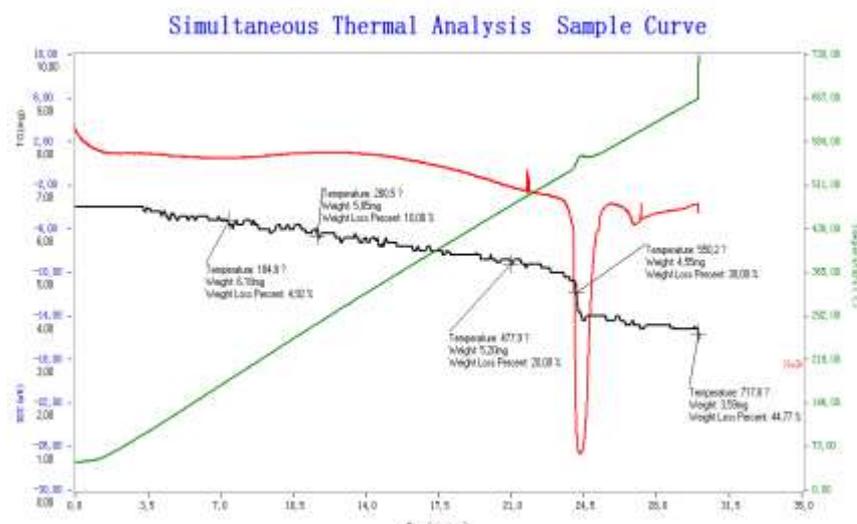
bo‘lib, $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ kompleksida metal-kislorod bog‘lanishlari 525 cm^{-1} , C-H cho‘zilishi 2766 cm^{-1} da, bukilishi esa $766\text{-}695\text{ cm}^{-1}$ da, C=C tebranishlari esa 1547 cm^{-1} - 1449 cm^{-1} sohada farq qilishi kuzatildi.

3-jadval.

Sintez qilingan komplekslar IQ-Spektri (cm^{-1})

Kompleks birikmalar	N-H yoki O-H	C-O yoki S=O	C-N yoki C=S	M-O yoki M-N
$[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$	3359, 3170	1024	1298, 1181	525
$[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$	3449, 3294	1411	1269	516
$[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{PNA})_2]$	3308.62	1650, 1471	1269.94	687.18, 443.49
$\{[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2]_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}(\text{PNA})_2\}$	3480.30	1471.76	1161.07	637, 487, 427.
$[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$	3336.76	1548, 1392, 1329.	884.79, 791.04	679.32, 512.64
$[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$	3389.41, 3180.35	1421, 1246.	791.04	559.70, 685.58
$[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$	2874.30	1404.44	—	644.85

Tadqiqot davomida benzamid va $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ komplekslarining TG va DTA tahlillari olindi. Odatda benzamid $128\text{-}130^\circ\text{C}$ da suyuqlanadi. TG tahlili natijasida, benzamid $200\text{-}300^\circ\text{C}$ oralig‘ida massa yo‘qotilishi 100% ni tashkil etdi.



3-rasm. $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ kompleksini (TG, DTA) termik grafigi

4-jadval.

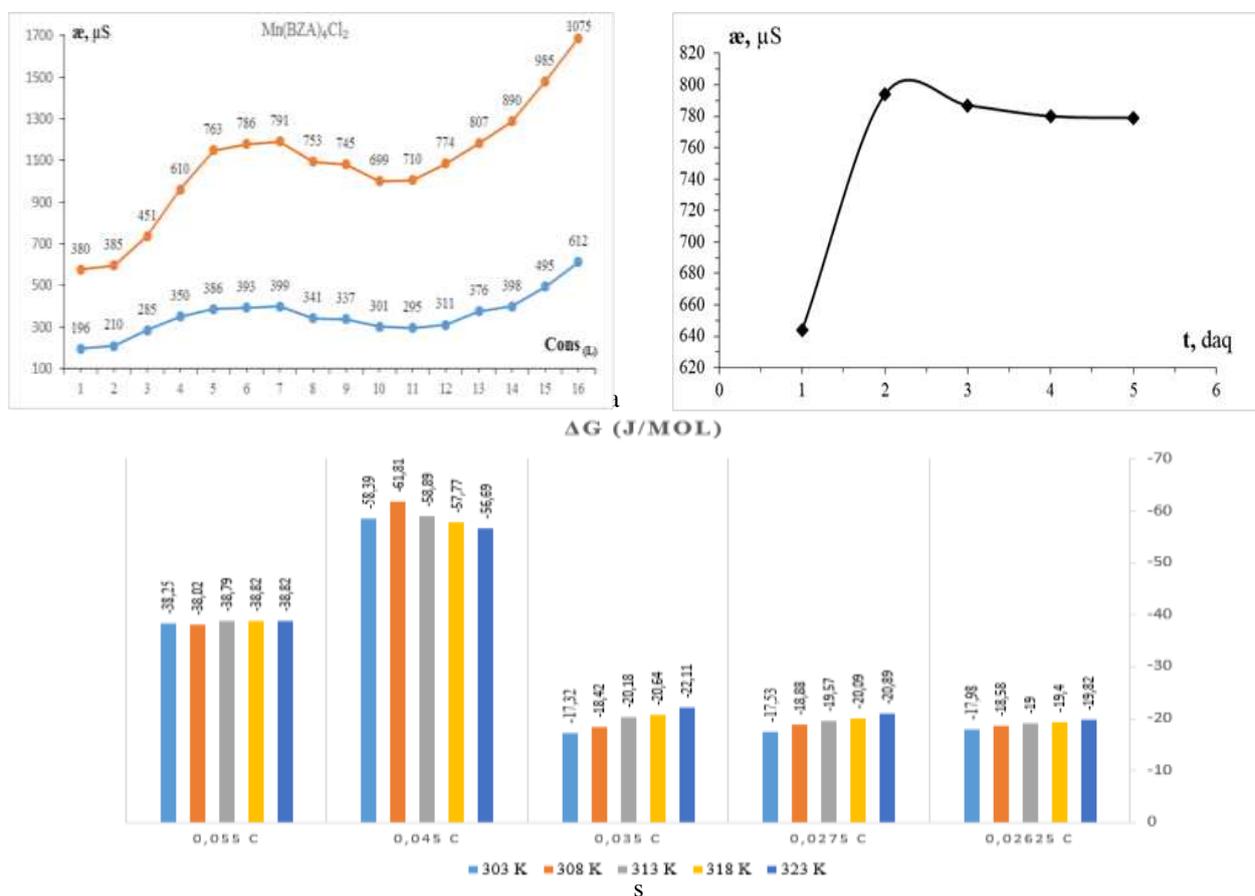
$[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ kompleksini TG) va DTA tahlil ma‘lumotlari

Harorat intervali, $^\circ\text{C}$	Effekt chuqurligi, $^\circ\text{C}$	Massa o‘zgarishi, %	Effekt tabiati
0-184.8	184.8	4.92	Endotermik
184.8 - 280.5	280.5	10.00	Endotermik
280.5 - 477.9	477.9	20.00	Endotermik
477.9 - 550.2	550.2	30.00	Ekzotermik
550.2 - 717.8	717.8	44.77	Ekzotermik

Komplekslarning hosil bo‘lishi va eritmadagi barqarorligini **konduktometrik usulda** tahlil qilindi. Dastlab, ma‘lum konsentratsiyali metall tuzi eritmasiga ligant eritmasidan qo‘shib borildi. Har bir bosqichda, aralashmaning elektr o‘tkazuvchanligi o‘lchandi. Jarayon, magnetli aralashirgichda, o‘zgarmas 20°C haroratda olib borildi.

[Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksining hosil bo'lishi jarayonida, dastlabki porsiyalarda elektr o'tkazuvchanlikning oshishi (380 μS dan 791 μS gacha) va so'ngra kamayishi (699 μS ga tushishi) kuzatildi. Bu holat, kompleksning hosil bo'lishi davomida erkin ionlar konsentratsiyasining kamayishi bilan bog'liq. Ushbu o'zgarish, ligand va metall tuzi aralashmasining taxminan 1:2 va 1:4 nisbatiga mos keldi. Ligand miqdori orttirib borilishi natijasida erkin ligand ionlari soni ko'payib, elektr o'tkazuvchanlik yaxshilandi (4a-rasm). MnCl₂ va BZA eritmaları 1:4 hajm nisbatida aralashtirib, har bir daqiqada (20°C da) elektr o'tkazuvchanlik o'rganildi (4b-rasm). Komplekslarning barqarorligi 20°C dan 85°C gacha bo'lgan harorat oralig'ida o'rganilib, [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining haroratga bog'liq holda barqarorligi ortishi aniqlandi.

[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining shakillanishi jarayonida ΔG qiymatlari manfiy bo'lib, yuqori konsentratsiyalarda komplekslar barqaror, past konsentratsiyalarda esa hosil bo'lishi qiyinlashdi (4s-rasm).



4-rasm. Komplekslarni shakillanishida ionlarga ajralishi va elektr o'tkazuvchanlik xususiyatlarini (a) konsentratsiya, (b) vaqt va (s) ΔG ga bog'liqligi.

Komplekslarning barqarorligi **Babko usuli** yordamida aniqlandi. Analiz uchun belgilangan birikmalardan teng konsentratsiyali eritmalar tayyorlandi va ularning natijalari quyidagi formulalar orqali hisoblab chiqildi.

$$K_{beqaror.(KB)} = \frac{[H^+] \cdot (A_1 \cdot C_2 - A_2 \cdot C_1)^{q+1}}{(C_1 \cdot \sqrt[3]{A_2} - C_2 \cdot \sqrt[3]{A_1}) \cdot (A_1 \cdot \sqrt[3]{A_2} - A_2 \cdot \sqrt[3]{A_1})^q}; (1) \quad K_{barqaror.(KB)} = \frac{1}{K_{beqaror.(KB)}}; (2)$$

Natijalarga ko‘ra, komplekslarni barqarorlik konstantasining o‘rtacha qiymati $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ uchun 14.51, $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ uchun esa 12.59 ga tengligi aniqlandi. Ushbu qiymatlar Irving-Vilyams qatoriga muvofiq ravishda o‘zgarib borishini ko‘rsatdi.

$[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ kompleksi **termik parchalanish** jarayonining **kinetik parametrlari** Frimen-Kerrall, Sharp-Uentvort, Ahara va noparametrik kinetika (NPK) usullari yordamida o‘rganildi. Faollanish energiyasi 20-700°C harorat oralig‘ida hisoblab chiqildi. Termik parchalanish jarayoniga oid hisoblangan termodinamik parametrlar quyidagicha: Frimen-Kerrall usuliga ko‘ra 81,90 kJ/mol, Sharp- Uentvort usuliga ko‘ra 98,85 kJ/mol, Ahara usuliga ko‘ra esa 98,68 kJ/mol. Barchasi haroratning 10°C/daqiqada doimiy oshish tezligida hisoblandi va parametrlar grafik tarzda tasvirlandi.

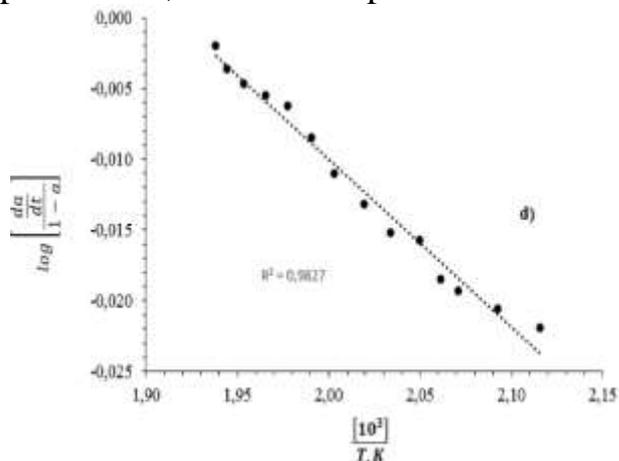
NPK usuli asosida $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ kompleksining termik parchalanish jarayoni uchun faollanish energiyasi ($E_a=103,22$ kJ/mol)

va pre-eksponensial omil koeffitsiyent ($A=2,73 \text{ min}^{-1}$) qiymatlari aniqlandi.

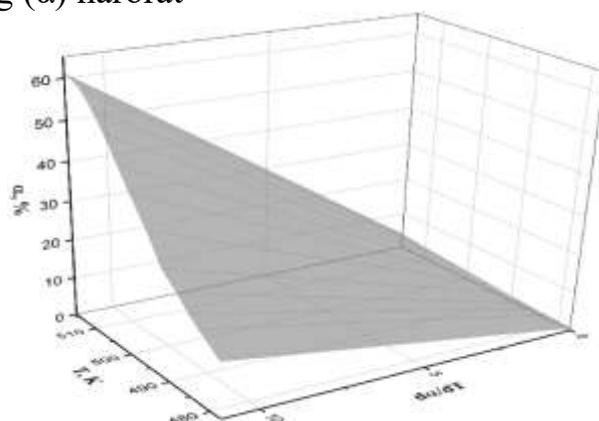
Reaksiya tezligi va konversiya darajasining (α) harorat

bilan bog‘liqligi 3D fazoda interpolyatsiya qilindi (6-rasm).

Aktivlanish energiyasidan foydalangan holda termodinamik funksiyalar – ΔG , ΔH va ΔS hisoblandi. Natijalar, ΔH ning musbat qiymati kompleksning barqarorligini, ΔG ning musbat qiymati jarayonning o‘z-o‘zidan sodir bo‘lmasligini, ΔS ning manfiy qiymati esa mahsulotlarning tartibli tuzilishini, ya’ni bog‘larning uzilishi va qayta tartiblanish jarayonini ko‘rsatdi.



5-rasm. $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ ning termik parchlanish kinetikasi uchun Ahara usuli



6-rasm. Eksperimental ma'notlarning 3D diagrammasi (α , T va $d\alpha/dT$)

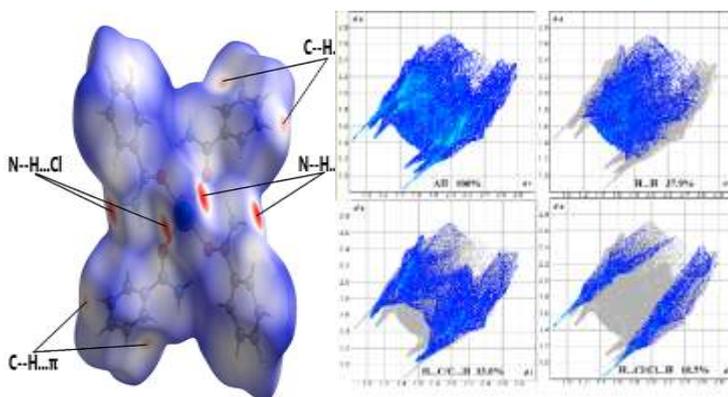
5-jadval.

Termik parchalanish jarayoni uchun turli usullarda hisoblangan termodinamik funksiyalarning o‘zgarishlari

Termodinamik funksiyalar	Kompleks	Usullar			
		Frimen-Kerroll	Sharp-Uentvort	Ahara	NPK
ΔG , kJ/mol	$[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$	78,45	95,16	95,87	99,41
ΔH , kJ/mol		77,25	94,20	94,03	98,57
ΔS , kJ/mol*K		-15,80	-20,67	-22,92	-23,01

Dissertatsiyaning “Olingan kompleks birikmalarning kvant-kimyoviy hisoblashlari va biologik faolligi” deb nomlangan **to‘rtinchi bobida** sintez qilingan kompleks birikmalarining kvant-kimyoviy hisoblash natijalari, molekulararo ta’sirlashish energiyalari, valent bog‘lar yeg‘indisi, Hirshfeld sirti tahlili, shuningdek molekulyar doking va bir qator amaliy usullar yordamida olingan kompleks birikmalarning biologik faolligi o‘rganilgan.

[Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksining Hirshfeld sirt yuzasi tahlili Crystal Explorer 17.5 dasturi bergan ma’notlarga ko‘ra [Mn(BZA)₄Cl₂] uchun d_{norm} maydoni -0,3589 (qizil) dan 1,5139 (ko‘k) atom birligigacha bo‘lgan diapazonda aniqlangan. Barmoq izi grafiklari H...H (37,9%) ta’sirlarining ko‘pligini ko‘rsatdi, bu kompleksning gidrofobik xususiyatga ega ekanligini tasdiqlaydi.



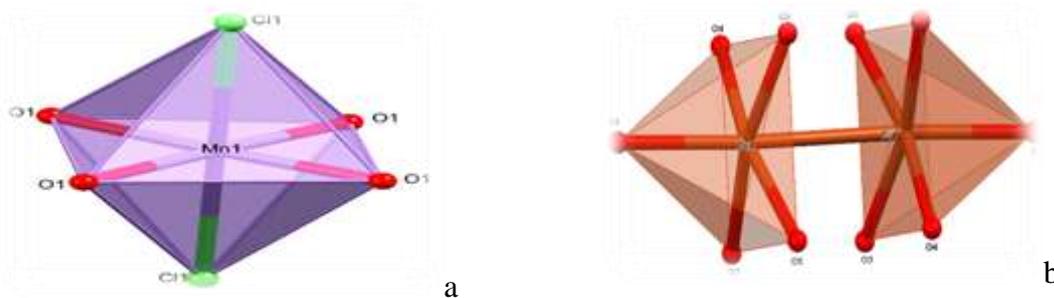
7-rasm. [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksining Hirshfeld sirtlaridagi vodorod bog‘lanishlari va 2D barmoq izi grafigi.

6-jadval.

Komplekslarning Hirshfeld yuzasi xususiyatlari

Kompleks	d _{norm} (Å)	H...H (%)	C...H/ H...C (%)	O...H/ H...O (%)	Boshqa (%)	Hajmi (Å ³)	Yuzasi (Å ²)	Globul yarlik
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	-0.3589 -1.5139	37.9	33.0	5.0	7.5	300.0	350.00	0.650
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	-0.2409 -1.4818	51.8	19.9	25.3	3.0	450.0	400.00	0.720
[Cu(NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂ (PNA) ₂]	0.5385 - 1.2851	13.3	7.7	55.8	23.2	280.0	290.00	0.620
{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂] (PNA) ₂ }	-	47.3	8.4	36.4	7.9	370.0	350.00	0.700
[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (m-SA) ₂]	-	38.8	13.5	36.5	11.2	304.0	310.98	0.703
[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	0.6094 - 1.1281	24.7	11.5	23.9	39.9	425.8	386.98	0.707
[Cu(H ₂ O) ₄] (MAK) ₂	-	12.0	9.0	57.1	21.9	319.2	326.32	0.692

Sintez qilingan kompleks birikmalarining **valent bog‘lar yigindisi** va **doimiy simmetriya o‘lchami** tahlili qilindi. [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksida marganes ionining atrofida to‘rtta kislorod va ikkita xlor atomi joylashgan, valent bog‘lar yigindisi (VBY) qiymati 1.93 bo‘lib, marganesning +2 oksidlanish holatini ko‘rsatadi.



8-rasm. [Mn(BZA)₄Cl₂] ni oktaedrik (a) va [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] ni kvadrat piramidal (b) koordinatsiya grafigi.

Doimiy simmetriya oʻlchami (DSO) tahliliga koʻra, koordinatsiya soni 5.3587 va shaklning buzilish indeksi 0.05246. [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksida esa mis ionining atrofida beshta kislorod atomi mavjud, VBY qiymati 2.06 boʻlib, misning +2 oksidlanishini tasdiqlaydi. DSO tahlilida koordinatsiya soni 4.7792 va shaklning buzilish indeksi 0.02931.

7-jadval

[Mn(BZA)₄Cl₂] va [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] ning VBY

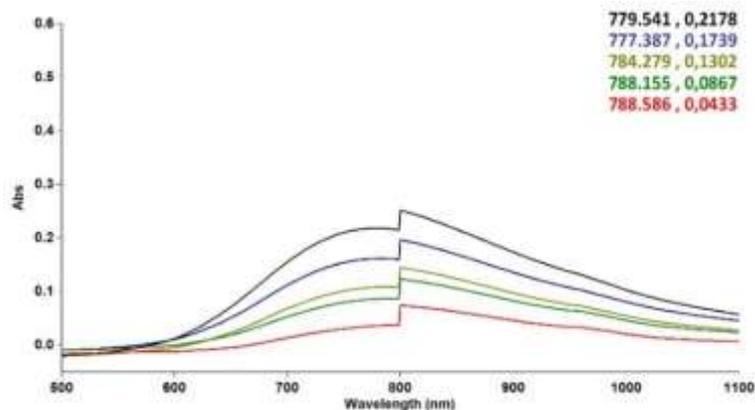
No.	Bogʻlanish masofalari (Å)						V=Σvij
Mn ²⁺ 6	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-Cl(1)	Mn(1)-Cl(1)	Mn(1)-O(1)	1.93*
	2.230(3)	2.230(3)	2.230(3)	2.5038(18)	2.5038(18)	2.230(3)	
Cu ²⁺ 5	Cu(1)-O(3)	Cu(1)-O(5)	Cu(1)-O(1)	Cu(1)-O(2)	Cu(1)-O(4)		2.06*
	1.9704(19)	1.9862(17)	2.1528(18)	1.961(2)	1.9592(18)		

Kompleks birikmalarning **foton energiyasi** Plank qonuni yordamida hisoblandi.

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

Toʻlqin uzunligi va foton energiyasi oʻrtasida teskari bogʻlanish mavjud boʻlib, toʻlqin uzunligi qisqargan sari foton energiyasi oshadi. Yuqori energiya talab qiluvchi elektron koʻchishlar qisqa (225 nm), past energiya talab qiluvchi elektron koʻchishlar esa uzunroq toʻlqin uzunliklariga (774nm) mos keladi.

[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining turli konsentratsiyalardagi (0.05, 0.04, 0.03, 0.02 va 0.01 mol/L) eritmaları UB-spektroskopiya yordamida tahlil qilindi.



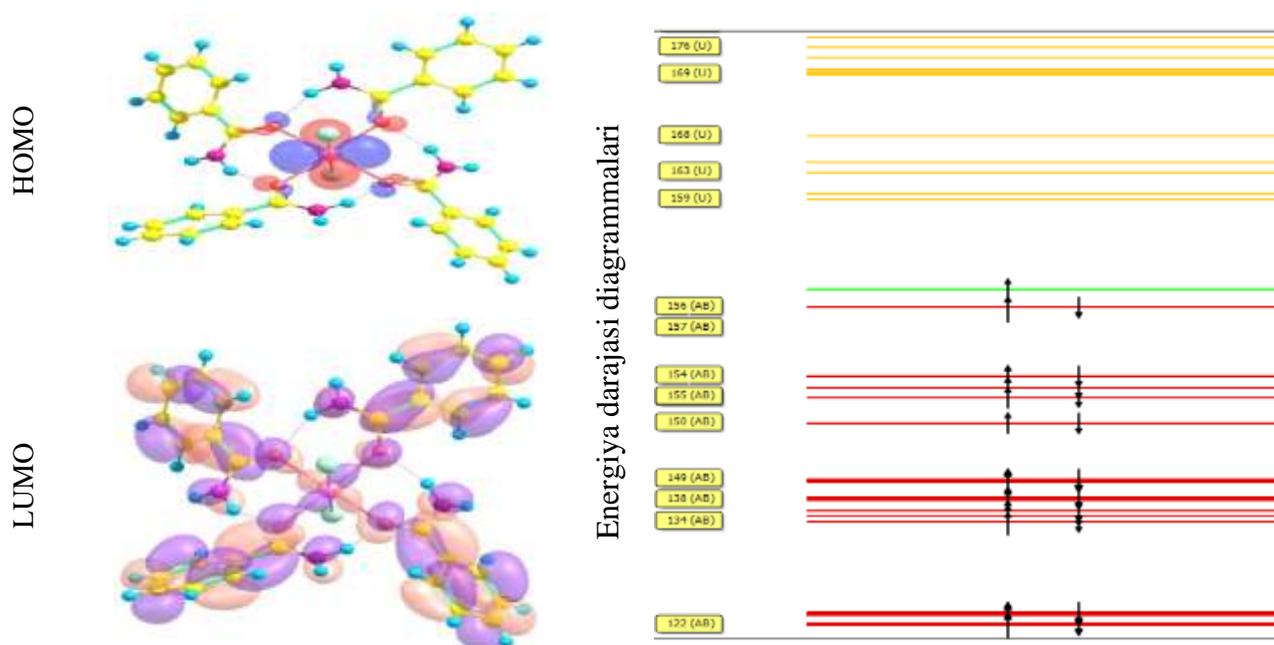
9-rasm. Turli konsentratsiyalardagi [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining UB nurning yutilish absorpsiyasi va Cu²⁺ kationidagi d-d koʻchishlari.

Natijalar kompleksning d-d siljishlari 779.541 nm dan 788.586 nm gacha bo'lgan to'liq uzunliklarida aniqlandi. Absorbsiya 0,2178 dan 0,0433 gacha o'zgardi. Bu natijalar kompleksning optik xususiyatlarining konsentratsiya va to'liq uzunligiga bog'liqligini tasdiqlaydi.

[Mn(BZA)₄Cl₂] va [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] komplekslarini **DFT tahlili** qilindi, elektron xususiyatlari **HOMO-LUMO** tahlili orqali o'rganildi. DFT hisob-kitoblari GAMESS 2023 R1 dasturi va 6-31G baza to'plami yordamida DFT/B3LYP usuli bilan amalga oshirilib, molekulyar geometriyalar optimallashtirildi. HOMO va LUMO energiyalari hisoblandi, komplekslarning elektrofil va nukleofil xususiyatlari aniqlanib, reaktivlik va barqarorlik tavsiflovchilari ishlab chiqildi.

[Mn(BZA)₄Cl₂]: HOMO = -3.13205 eV, LUMO = -1.21091 eV

[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄]: HOMO = -4.67223 eV, LUMO = -3.25450 eV



10-rasm. [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksi HOMO-LUMO orbitalari va bo'shlig'ining energiya diagrammalari.

To'ldirilgan orbitalar qizil, bo'sh orbitalar esa to'q sariq rangda ko'rsatilgan. HOMO orbitalarida bitta elektron bo'lib, ular yashil rangda tasvirlangan. Kichik HOMO-LUMO bo'shlig'i yuqori reaktivlikni ko'rsatdi, shuning uchun [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining kichik bo'shligi uni [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksiga nisbatan kimyoviy jihatdan faolroq qiladi. Elektromanfiylik, kimyoviy qattqlik va yumshoqlik xususiyatlari hisoblandi.

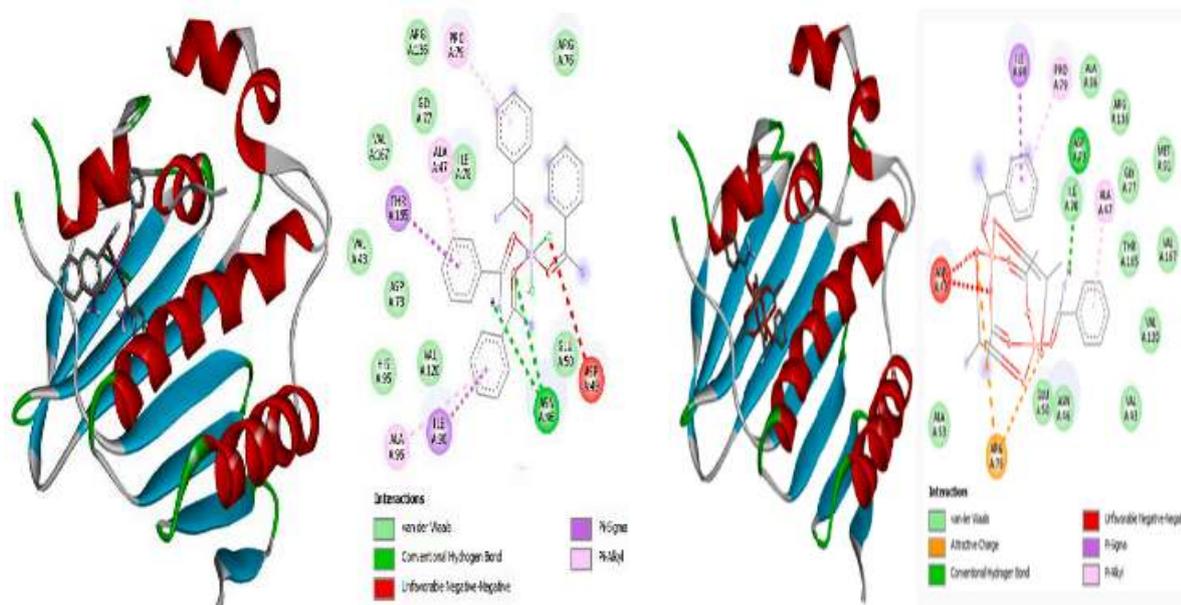
Jadvaldagi ma'lumotlarga asoslanib (8-jadval), [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksining elektromanfiylik qiymatlari [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksiga nisbatan yuqori bo'lib, bu uning barqaror va kam reaktiv xususiyatlarga ega ekanligini ko'rsatadi. Shuningdek, HOMO-LUMO oraliqi [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] kompleksida kichik bo'lib, uning kamroq reaktivligini tasdiqlaydi.

8-jadval.

Metallorganik komplekslarni elektron xususiyatlari taqqoslanishi

Kompond	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Energiya oralig i (eV)	Elektroman fiylik (eV)	Qattiqlik (eV)	Yumshoqlik (eV)
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	-3.13205	-1.21091	1.92091	2.17148	0.960657	1.04104
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	-4.67223	-3.25450	1.41173	3.96336	0.70886	1.41070

Molekulyar doking usulida komplekslarni **biologik faolligini** o‘rganildi. *In silico* tahlili orqali BZA va metall komplekslarining *E. coli* va *Candida albicans* oqsillari bilan o‘zaro ta’siri o‘rganildi. CB-Dock2 serveri yordamida komplekslarning bog‘lanish energiyalari (BE) hisoblandi.



11-rasm. 1KZN va 2QZX oqsillari bilan [Mn(BZA)₄Cl₂] kompleksi.

9-jadval.

Maqsadli oqsillarda BZA va metall komplekslarining bog‘lanish energiyalari, kkal/mol

Protein	BZA	Mn-kompleks	Cu-kompleks	Standart birikmalar
1KZN of <i>E. coli</i>	-5.4	-8.2	-8.3	-8.0(levofloxacin)
2QZX of <i>Candida albicans</i>	-5.8	-8.9	-8.2	-6.8 (fluconazole)

Natijalar [Mn(BZA)₄Cl₂] va [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄]komplekslarining bog‘lanish energiyasi BZA ning BE ga nisbatan ikki baravar yuqori ekanligini ko‘rsatdi. Standart antibakterial va antifungal molekular, levoflaksatsin va flukonazol bilan taqqoslaganda, Mn- va Cu-komplekslarining yuqori reaktivlik va o‘zaro ta’sirga ega ekanligi aniqlandi. Shuningdek, har ikkala kompleksda π - π stacking va “jozibali zaryad” (ya’ni, bir-birini tortish) o‘zaro ta’sirlari mavjudligi tasdiqlandi, bu esa ferment-substrat o‘zaro ta’sirlarini kuchaytirishga yordam beradi.

Komplekslarni mikroblarga qarshi faolligi “quduq (chuqurcha) diffuziya” usuli yordamida baholandi.

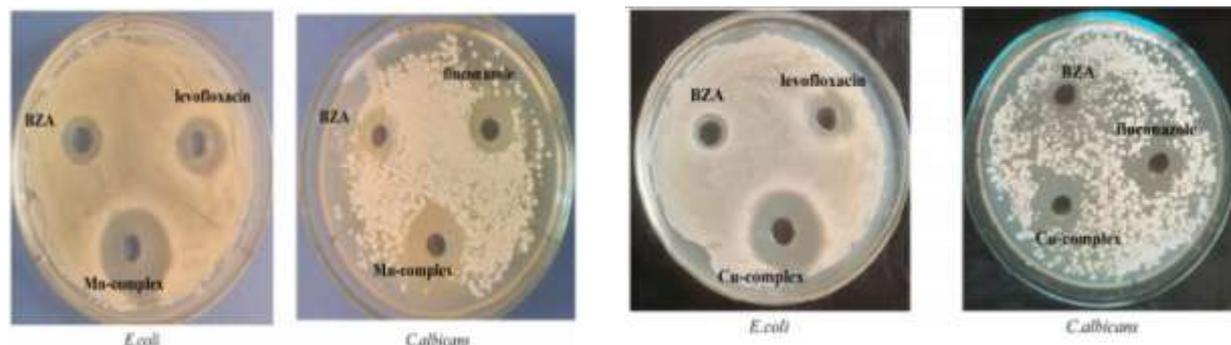
10-jadval.

Ligant, komplekslar va standart antibiotiklarning ingibitsiya zonalari hajmi.

	BZA (nazorat), mm	Mn-kompleks, mm	Antibiotik, mm
E.coli	11 ± 0,26	27 ± 0,62	20 ± 0,43 (levofloxacin)
C.albicans	10 ± 0,25	22 ± 0,52	17 ± 0,41 (flconazole)
		Cu-kompleks, mm	
E.coli	10 ± 0,25	25 ± 0,56	18 ± 0,43 (levofloxacin)
C.albicans	10 ± 0,25	23 ± 0,54	17 ± 0,42 (flconazole)

Sintezlangan Mn-kompleksining antibakterial faolligi testlari shuni ko‘rsatadiki, metall kompleksidagi boshlang‘ich birikma (ligand) BZA ning biologik ta‘siri ikki baravar kuchayadi va bu standart antibiotik levoflaksatsin faolligiga nisbatan taxminan 25% ga yaxshiroqdir.

Antifungal faollikda yaxshilanish kamroq bo‘ldi, biroq metall komplekslari flukonazolga nisbatan yaxshiroq faollik ko‘rsatdi. Cu-kompleksining antimikrobik faolligi ham o‘xshash natijalarga ega bo‘ldi. In vitro tajribalar Mn- va Cu-komplekslarining antibakterial faolligining levoflaksatsindan yuqori ekanligini tasdiqladi.



12-rasm. $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ va $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ kompleksning mikroblarga qarshi faolligi.

Sintezlangan birikmalarning o‘tkir zaharliligini baholash uchun intragastral yuborish usuli qo‘llanildi. Ushbu usulda, birikmaning bir dozasi sinov hayvonlarining oshqozoniga kiritish orqali o‘tkir toksiklik tekshirildi. Sichqonlarga 500, 1200, 1600 va 2000 mg/kg dozasi bir marta inektsiya yoli bilan kiritildi.

11-jadval.

Sichqonlarda o‘tkir zaharlash ko‘rsatkichlari

Guruh	$[Mn(BZA)_4Cl_2]$	$[Cu_2(BZA)_2(CH_3COOH)_4]$	$[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$	$[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$	$[Cu(H_2O)_4(MAK)_2]$
Hayvon	Oq laboratoriya sichqonchasi, erkak				
LD ₅₀	2720 mg/kg	1630 mg/kg	2730 mg/kg	3000 mg/kg	2800 mg/kg

Natijalar shuni ko‘rsatdiki, birinchi o‘lim dozalari (LD₅₀) BZA (1290 mg/kg), $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COOH)_4]$ (1630 mg/kg) va $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ (2720 mg/kg) uchun aniqlandi. O‘tkir toksikologik sinovlar natijasida, Hodge va Sterner tasnifiga ko‘ra,

bu birikmalar IV-sinf (LD_{50} 500-5000 mg/kg) kam zaharli birikmalar deb topildi. Shuningdek, $[Cu(H_2O)_4](MAK)_2$, $[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(M-SA)_2]$ va $[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$ namunalarining LD_{50} qiymatlari 2700-3000 mg/kg oralig'ida bo'lib, ularning zaharli emasligini tasdiqlaydi.

XULOSALAR

1. Cu(II), Mn(II), Co(II) va Ni(II) kationlarining tarkibida azot va kislorod bo'lgan ligandlar bilan tarkibi Me:L = 1:1, 1:2, 1:4 nisbatda bo'lgan 7 ta yangi aralash ligandli kompleks birikmalari sintez qilindi. $[Mn(BZA)_4Cl_2]$, $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$, $[Cu(H_2O)_4](MAK)_2$, $[Cu(NO_3)_2(PNA)_2(H_2O)_2]$, $\{[(Cu(CH_3COO)_2)_4(EDA)_2(H_2O)_2](PNA)_2\}$, $[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$ va $[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$ komplekslarning RTT ma'lumotlari xalqaro Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga kiritilib, depozit raqamlari (2269288, 2292586, 2443835, 2131922, 2443834, 2443837, 2443836) olindi.

2. Ilk bor rentgen tuzilish tahlili, element analiz, UB- va IQ-spektroskopiya, konduktometrik, termik analiz usullari yordamida, $[Mn(BZA)_4Cl_2]$, $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$, $[Cu(H_2O)_4](MAK)_2$, $[Cu(NO_3)_2(PNA)_2(H_2O)_2]$, $\{[(Cu(CH_3COO)_2)_4(EDA)_2(H_2O)_2](PNA)_2\}$, $[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$ va $[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$ komplekslarining tarkibi, tuzilishi, barqarorligi aniqlandi.

3. $[Cu(NO_3)_2(H_2O)_2(PNA)_2]$ kompleksida markaziy mis (II) ionni elektronlari sp^3d^2 gibridlanishi natijasida koordinatsion soni 6 bo'lgan oktaedrik tuzilishdagi komplekslar hosil bo'lishi hamda Yan-Teller effekti hisobiga Cu1—O3 masofasi uzayishi aniqlandi.

4. $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ kompleksini hosil bo'lishida 1:1 nisbatdagi konsentratsiyasi boshqa konsentratsiyalarga nisbatan termodinamik muvozanat barqarorlik konstantasi yuqori ekanligi, harorat va konsentratsiya o'zgarishlari tufayli ΔG qiymatlari manfiy bo'lib, kompleksning o'z-o'zidan hosil bo'lishi va barqarorligini tasdiqladi.

5. Termik tahlilga ko'ra kompleks birikmalarning termik barqarorligi ularning kristall tuzilishi bilan bog'liq ekanligini ko'rsatdi. $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ parchalanish jarayoni termodinamik parametrlarini Frimen-Kerrall, Sharp-Uentvort, Ahara va NPK usullar yordamida o'rganish kompleksning yuqori barqarorligini tasdiqladi.

6. Sintez qilingan komplekslarning xossalarini kvant-kimyoviy, shuningdek, Hirshfeld sirt tahlili H...H, H...O/O...H va C...H/H...C bog'lar olingan komplekslar tuzilishiga ta'sir etishi aniqlandi.

7. In silico hisob-kitoblari orqali $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ va $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COOH)_4]$ komplekslari zaharlilik darajasi hamda antibakterial faolligi bo'yicha standart antibiotik levofloksatsindan, zamburug'larga nisbatan flukonazoldan ustunligi bashorati amalda tasdiqlandi: komplekslarning zaharliligi ligandlarnikidan 1,5-2 barobar pastligi, bakteriyalarga nisbatan faolligi levofloksatsindan 35-38%, zamburug'larga nisbatan esa, flukonazoldan 29-35% yuqoriligi tajribada isbotlandi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSC.03/31.01.2023.К/Т.78.01 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ
УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ ТЕРМЕЗСКОМ ГОСУДАРСТВЕННОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ**

НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА

КАМОЛОВ САНЖАР НАЙИМОВИЧ

**Синтез, кристаллическая структура и биологическая активность
новых комплексов солей Cu (II), Mn (II), Co (II) и Ni (II) на основе
азотсодержащих и кислородсодержащих лигандов**

02.00.01-Неорганическая химия

02.00.04-Физическая химия

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

Термез-2025

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Узбекистана за номером. В2024-4.PhD/K865

Диссертация выполнена в Национальном университете Узбекистана.

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

Научные руководители:

Бабаев Бахром Нурилшевич
доктор химических наук, профессор

Ибрагимов Аши Бахтирович
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Тробиов Хамза Турсунович
доктор химических наук, профессор

Назаров Юсуф Эшкobilлович
доктор философии по химии

Ведущая организация:

Каршинский государственный университет

Защита диссертации состоится «26» 04 2025 г. в «11³⁰» часов на заседании Научного совета DSc 03/31.01.2023.K/T.78.01 при Термезском государственном университете по адресу: 190111, Сурхандарьинская область, г. Термез, ул. Баркамол авлод 43. Тел.: (+99876) 221-74-55, факс: (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@gmail.uz.

Диссертация зарегистрирована в Информационно-ресурсном центре в Термезском государственном университете под № 286 с которой можно ознакомиться в ИРЦ (190111, Сурхандарьинская область, г. Термез, ул. Баркамол авлод 43. Тел.: (+99876) 221-74-55), факс: (+99876) 221-71-17), e-mail: termizdu@gmail.uz.

Автореферат диссертации разослан «10» 04 2025 г.

(протокол рассылки № 10 от «05» 04 2025 г.)



И.А. Улбаров

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

Ш.А. Касимов

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

Г.Ж. Мукумова

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

ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и необходимость темы диссертации. На сегодняшний день бензамид и его производные играют важную роль в современной химии и фармацевтике. В частности, комплексные соединения на основе бензамида широко используются в качестве лекарственных веществ, биохимических реагентов и катализаторов. Хотя антипсихотические, антибактериальные и даже противоопухолевые свойства таких соединений сделали их востребованным инструментом в медицине, некоторые бензамиды и их производные медленно разлагаются в природе и могут оказывать токсическое действие. В связи с этим синтез новых комплексных соединений производных бензамида с ионами d-металлов и изучение закономерностей их состава, структуры и свойств имеют большое значение для получения более стабильных, биологически активных, менее токсичных и селективных каталитических соединений.

Во всем мире ведутся исследования по синтезу комплексных соединений промежуточных металлов с биологически активными лигандами, определению их кристаллической структуры и биологической активности. При этом особое внимание уделяется синтезу комплексных соединений d-металлов с лигандами, содержащими атомы азота и кислорода, определению их состава, кристаллической структуры, квантово-химических параметров и других физико-химических свойств, а также созданию на основе синтезированных комплексных соединений бензамида и его производных с ионами d-металлов новых высокоэффективных, экологически безопасных и малотоксичных препаратов для использования в медицине, фармацевтике, сельском хозяйстве и химической промышленности.

В нашей республике достигается ряд результатов по созданию и внедрению новых видов высокоэффективных, импортозамещающих, недорогих, экологически безопасных и малотоксичных лекарственных препаратов на основе комплексных соединений, образованных ионами биогенных металлов с биоактивными лигандами. В том числе проводится масштабная работа по обеспечению местного рынка импортозамещающими реагентами. В нашей стране уделяется большое внимание внедрению научно обоснованных систем эксплуатации промышленных объектов и мероприятий по охране окружающей среды за счет внедрения инновационных технологий. В «Стратегии развития нового Узбекистана на 2022–2026 годы»² определены приоритетные направления развития экономики и обозначены такие вопросы, как дальнейшее ускорение производства готовой продукции с высокой добавленной стоимостью на основе глубокой переработки местного сырья, внедрение качественно новых видов продукции и технологий. В связи с этим синтез и исследование комплексных соединений с биологически активными свойствами является актуальной задачей и имеет большое значение.

¹Указ Президента Республики Узбекистан "О стратегии развития Нового Узбекистана на 2022-2026 годы" от 28 января 2022 года

Результаты диссертационного исследования в определенной мере послужат реализации задач, обозначенных в Указе Президента Республики Узбекистан № ПФ-60 «О Стратегии развития нового Узбекистана на 2022-2026 годы» от 28 января 2022 года, Постановлениях № ПП-4805 «О мерах по повышению качества непрерывного образования и эффективности науки в области химии и биологии» от 12 августа 2020 года и № ПП-4992 «О мерах по дальнейшему реформированию и финансовой устойчивости предприятий химической промышленности, развитию производства химической продукции с высокой добавленной стоимостью» от 13 февраля 2021 года, а также в других нормативно-правовых документах, касающихся данной деятельности.

Соответствие исследований приоритетам развития науки и техники республики. Данное исследование выполнено в рамках приоритетного направления развития науки и технологий Республики Узбекистан VII «Химические технологии и нанотехнологии».

Степень изученности проблемы. В ведущих мировых научных центрах проведены многочисленные исследования по синтезу комплексов промежуточных металлов с азот- и кислородсодержащими лигандами, определению их пространственной структуры и биологической активности. В частности, заслуживает внимания результаты исследования научных школ под руководством S.Jaumeer-Laulloo, V.Veena, S.Kezo, K.R.Reddy, H.Saxena, W.Kaminsky, M.R.Kollipara, E.Xatiwora, G.Puranik, D.Darmadhikar, A.Adebomi, O.Gabriel, а также на уровне стран СНГ Е.В.Антипов, А.П.Гуля, Н.Т. Л.М.Шаркова, Н.Ф.Кучерова, Г.Н.Артеменко, Кузнецовым В.И., Пекко.

В нашей стране по синтезу, строению и свойствам комплексных соединений проводили академики Н.А.Парпиев, Б.Т.Ибрагимов, профессора Х.Х.Хакимов, Х.Т.Шарипов, О.Ф.Ходжаев, Т.А.Азизов, Х.Х.Тураев, Ш.А.Кадилова, З.Ч.Кадилова, А.Б.Ибрагимов, Ж.М.Ашуров, Ш.А.Касимов и другие ученые.

Согласно анализу Международной Кембриджской кристаллографической базы данных (Cambridge Crystallographic Data Center, CCDC-2024), на сегодняшний день изучено 19 промежуточных металлокомплексов п-нитроанилина, 24 металлокомплекса бензамида и более 100 промежуточных металлокомплексов п- и м-сульфаниловых кислот.

Однако, в результате анализа литературных источников можно отметить, что, несмотря на то, что имеются обширные экспериментальные результаты по комплексным соединениям лигандов, содержащих донорные атомы азота и кислорода с d-металлами, многие важные аспекты в этой области еще недостаточно изучены. Поэтому синтез новых комплексных соединений на основе лигандов, содержащих донорные атомы азота и кислорода, определение их физико-химических свойств и изучение их биологической активности имеет большое научное и практическое значение.

Связь диссертационного исследования с научными планами высшего учебного заведения, в котором выполнена диссертация. Диссертационная работа выполнена в рамках фундаментального проекта ОТ-

Ф7-61 «Новые производные гетероциклических соединений: синтез, строение и биологическая активность» (2017-2020 гг) плана НИР Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека

Целью исследования является синтез новых комплексов солей Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с азот- и кислородсодержащими лигандами (бензамидом, п-нитроанилином, п- и м-сульфаниловыми кислотами, малеиновыми кислотами), определение их кристаллической структуры и биологической активности.

Задачи исследования:

синтез и получение монокристаллов комплексных соединений Cu(II), Mn(II), Co(II), Ni(II) с азот- и кислородсодержащими лигандами;

анализ структуры, состава и физико-химических свойств комплексных соединений с использованием современных методов исследования;

определение термической устойчивости вновь синтезированных комплексных соединений;

расчет реакционной способности, энергий взаимодействия и электронной структуры комплексных соединений Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с лигандами, содержащими атомы азота и кислорода, с использованием квантово-химических методов;

определение биологической активности синтезированных комплексных соединений.

Объектами исследования выбраны неорганические соли, содержащие ионы Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II), биоактивные лиганды, содержащие донорные атомы азота и кислорода, и синтезированные на их основе комплексные соединения.

Предметом исследования является синтез комплексных соединений ионов Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с биоактивными лигандами, содержащими атомы азота и кислорода, определение их кристаллической структуры, биологических и физико-химических свойств, а также уровня токсичности.

Методы исследования. В диссертационной работе для определения состава и структуры комплексных соединений использовали такие методы, как рентгеноструктурный анализ (РСА), элементный анализ, УФ- и ИК-спектроскопия, термический (ТГ и ДТА) анализ, квантово-химические расчеты, методы определения биологической активности.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

Синтезированы семь новых смешаннолигандных комплексов ионов Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с азот- и кислородсодержащими лигандами (бензамидом, п-нитроанилином, м-сульфанилом, п-сульфанилом, малеиновыми кислотами, этилендиамином и диметилформамидом) и получены монокристаллы;

Состав синтезированных смешаннолигандных комплексов определяли с помощью ИК- и УФ-спектроскопии, кристаллическую структуру РСА и термические свойства — с помощью методов ТГ/ДТА-анализа;

Используя кристаллографические данные синтезированных комплексных соединений, с помощью анализа поверхности по Хиршфельду определены доли гетеро- и гомоатомных взаимодействий в формировании поверхности и расстояния взаимодействия в величинах d_{norm} , d_i и d_e ;

Доказано, что разнолигандные комплексы ионов Cu(II), Mn(II) с бензамидом оказывают биостимулирующее действие на растения, повышают устойчивость растений к абиотическим и биотическим факторам, а также обладают ингибирующими свойствами в отношении микроорганизмов, вызывающих коррозию металлов.

Практические результаты исследования заключаются в следующем:

Синтезированы новые смешаннолигандные комплексы ионов Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с азот- и кислородсодержащими лигандами в соотношениях Me:L = 1:1, 1:2 и 1:4;

определены оптимальные условия синтеза смешаннолигандных комплексных соединений ионов Cu(II), Mn(II), Co(II) и Ni(II) с азот- и кислородсодержащими лигандами;

доказано, что в комплексе $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{PNA})_2$ в результате sp^3d^2 -гибридизации электронов центрального иона меди (II) образуются комплексы с октаэдрической структурой с координационным числом 6, а расстояние Cu1—O3 увеличивается за счет эффекта Яна-Теллера;

установлено, что синтезированные комплексные соединения обладают высокой антимикробной и антибактериальной активностью, а их токсичность снижена по сравнению с бензамидом (4 класс).

Достоверность результатов исследования. Состав, структура и свойства смешаннолигандных комплексов некоторых 3d-металлов, синтезированных с бензамидом определены с использованием современных методов исследования, таких как элементный анализ, РСА, УФ-, ИК-спектроскопия, термический, кондуктометрический и биологический анализы, а также квантово-химические расчеты. Выводы основаны на анализе экспериментальных результатов.

Научная и практическая значимость результатов.

Научная значимость результатов исследований заключается в том, что синтезированы новые комплексные соединения ионов Cu(II), Mn(II), Co(II), Ni(II) с лигандами, содержащими азот и кислород, выделены их монокристаллы, а кристаллические структуры и физико-химические свойства комплексных соединений, определенные с использованием современных аналитических методов, дополнили кристаллохимию в качестве новых результатов, что в конечном итоге стало научной основой для направленного синтеза соединений с соответствующими стереохимическими и биологическими свойствами.

Практическая значимость результатов исследований заключается в том, что кристаллографические данные комплексных соединений $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{PNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $\{[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2]_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}(\text{PNA})_2$, и $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{MSA})_2]$ включены в Кембриджскую базу кристаллографических данных

(CCDC), использование которых позволит синтезировать аналогичные комплексные соединения, охарактеризовать их структуру и повысить их эффективность в качестве биостимуляторов и антикоррозионных средств для металлов.

Внедрение результатов исследований. На основании полученных научных результатов по определению структуры и биологических свойств новых комплексов, синтезированных в рамках диссертации:

Данные о молекулярной и кристаллической структуре вновь синтезированных комплексов $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{PNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $\{[(\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2)_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{PNA})_2\}$, $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$ и $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$ были депонированы в Кембриджском центре кристаллографических данных (номера доступа CCDC 2269288, 2292586, 2443835, 2131922, 2443834, 2443837, 2443836). В результате предоставленная информация о химических соединениях, включенных в базу данных, позволила использовать ее при синтезе аналогичных соединений и характеристике их структуры;

Результаты определения биостимулирующих свойств комплексных соединений $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ и $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ на растениях были использованы в фундаментальном проекте №ФЗ-20200929348 по теме «Изучение взаимосвязи между строением супрамолекулярных комплексов на основе фенолокислот и их свойствами защиты растений от абиотических и биотических негативных воздействий» (Справка Академии Наук Республики Узбекистан №4/1255-2428 от 31 октября 2024 г.). В результате разработан метод синтеза новых, менее токсичных комплексных соединений, обладающие эффективными биостимулирующими свойствами;

Синтезированные комплексные соединения $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ и $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, были использованы в качестве ингибиторов коррозии металлических конструкций и приборов в лаборатории химического анализа при «Отделе технического контроля» ООО «Мубарекский газоперерабатывающий завод» (справка ООО «Мубарекский газоперерабатывающий завод» № 914/Г'К-09 от 30.09.2024 г.). В результате удалось получить ингибиторы коррозии на основе синтезированных комплексных соединений, обладающие высокой эффективностью против микроорганизмов, вызывающих коррозию металлов;

Представленные в диссертации данные были использованы для оценки биологической активности выделенных веществ в научно-практическом проекте «Технологии выращивания и извлечения биологически активных соединений из северных ягодных культур и лекарственных трав (ЮграБиоФерма)» Сургутского государственного университета в Ханты-Мансийском автономном округе (Россия) (Справка Сургутского государственного университета от 03.10.2024 № 03-01/285). В результате стало возможным получение биологически активных соединений, используемых в медицинской, фармацевтической и пищевой промышленности.

Апробация результатов исследования. Результаты исследований докладывались и обсуждались на 14, в том числе на 7 международных и 7 республиканских научно-практических конференциях.

Публикация результатов исследования. Всего по теме диссертации опубликовано 19 научных работ, из которых 5 опубликованы в научных изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертаций на соискание ученой степени доктора философии (PhD), 3 – в республиканских и 2 – в зарубежных научных журналах.

Объем и структура диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. Общий объем диссертации составляет 115 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ.

Во введении обоснованы актуальность и необходимость исследований, описываются цели и задачи, объекты и предметы исследования, показывается их совместимость с приоритетными направлениями развития науки и техники республики, описаны научная новизна и практические результаты исследования, раскрыта научная и практическая значимость полученных результатов, приведены сведения о внедрении и структуре диссертации.

В первой главе диссертации “Комплексные соединения лигандов, содержащих донорные атомы азота и кислорода, с переходными металлами” приведен анализ литературы по синтезу, молекулярной и кристаллической структуре, физико-химическим свойствам и биологической активности комплексов металлов с азот- и кислородсодержащими лигандами. Результаты анализа показали, что атомы кислорода азотной и гидроксильной групп вызывают образование бидентантных комплексов с металлами.

Во второй главе диссертации “Объекты, процессы синтеза и методы исследования” описаны использованные в рамках исследования приборы, синтез комплексных соединений, использованные физические методы (спектроскопические методы, элементный анализ, термический анализ, РСА, анализ поверхности Хиршфельда и др.) и метод молекулярного докинга, приведены полученные практические результаты.

Табл. 1.

Элементный анализ состава полученных комплексных соединений

№	Комплексные соединения	Состав	Масса (г/моль)	С % Рассчитано (Найдено):	Н % Рассчитано (Найдено)	О % Рассчитано (Найдено)
1	Mn(BZA) ₄ Cl ₂	C ₂₈ H ₂₈ Cl ₂ MnN ₄ O ₄	610.48	55.00(49.78)	4.62(4.13)	9.18 (8.99)
2	[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	C ₂₂ H ₂₆ Cu ₂ N ₂ O ₁₀	605.55	43.63 (43.22)	4.33 (4.11)	4.63 (4.12)
3	[Cu(NO ₃) ₂ (C ₆ H ₆ N ₂ O ₂) ₂ (H ₂ O) ₂]	C ₁₂ H ₁₈ CuN ₆ O ₁₂	401.87	35.88 (35.23)	4.52 (4.18)	20.92 (20.33)
4	{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂] (PNA) ₂ }	C ₂₆ H ₄₆ Cu ₄ N ₆ O ₂₀	1016.89	30.73 (30.02)	4.56 (4.40)	8.26 (8.01)

5	[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	C ₁₂ H ₂₀ N ₂ NiO ₁₀ S ₂	375.10	38.40 (37.95)	5.37 (5.02)	7.47 (7.06)
6	[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (m-SA) ₂]	C ₁₈ H ₃₀ CoN ₄ O ₁₀ S ₂	525.49	41.15 (40.55)	5.75 (5.24)	10.66 (9.98)
7	[Cu(H ₂ O) ₄](MAK) ₂	C ₄ H ₁₀ CuO ₈	249.67	19.24 (19.00)	4.04 (3.91)	0%

Для синтеза комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂] к раствору 0,107 г (1,0 ммоль) Mn(II) в воде при постоянном перемешивании по каплям добавляли 0,206 г (2,0 ммоль) бензамид в спирте. Смесь перемешивали при комнатной температуре в течение 50 минут, а затем обрабатывали ультразвуковой водяной баней в течение 10 минут. Растворителю давали испариться при комнатной температуре. Состав ([Mn(BZA)₄Cl₂]) выпавших через некоторое время бесцветных кристаллов установили методом рентгеноструктурного анализа (РСА).

В третьей главе диссертации “Кристаллические структуры и физико-химические свойства полученных комплексных соединений” синтезированные комплексные соединения металлов проанализированы методами РСА, УФ, ИК-спектроскопии, термических и кондуктометрических методов, а также определены кристаллические структуры и физико-химические свойства комплексов и представлены данные.

Табл. 2.

Кристаллографические данные синтезированных комплексных соединений

Комплексные соединения	Mr (g/mol)	Сингония	Фаз. гру	a (Å)	b (Å)	c (Å)	α°	β°	γ°	V(Å ³)
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	610.48	Тетрагональный	I41/a	12.36	12.3	19.35	90	90	90	2955
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	605.55	Орторомбический	Pbca	13,20	8,75	22,91	90	90	90	2650
[Cu(NO ₃) ₂ (PNA) ₂ (H ₂ O) ₂]	536.87	Моноклинная	P21/c	5,47	22,5	7,64	90	92	90	944,0
{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂](PNA) ₂ }	1188.8	Моноклинная	P21/n	17.42	8.9	19.2	90	96	90	2983
[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	469.32	Моноклинная	C2/c	20.7	6.44	13.5	90	106	90	1736
[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (mSA) ₂]	587.49	Моноклинная	P21/n	11.36	8.68	13.01	90	109	90	1208
[Cu(H ₂ O) ₄](MAK) ₂	368.67	Триклинная	P-1	7.19	10.3	10.63	112	96	110	654.3

В кристаллической структуре комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂] центральный атом Mn расположен в тетрагональной геометрии и относится к пространственной группе I41/a. Молекула БЗА монодентатно связывается с ионом Mn через атом кислорода, а ион хлора обеспечивает координацию и

осуществляет компенсацию заряда. В комплексе октаэдр является координационным многоугольником, и углы связи изменяются в пределах 90° ($89,07^\circ$ - $90,94^\circ$). Длины связей Mn-O1 и Mn-Cl1 составляют $2,229$ (2) \AA и $2,504$ (2) \AA соответственно. В молекуле присутствует водородная связь между N1-H и O1 ($2,883$ (5) \AA), а амидная группа BZA образует угол $24,56^\circ$ относительно ароматического кольца.

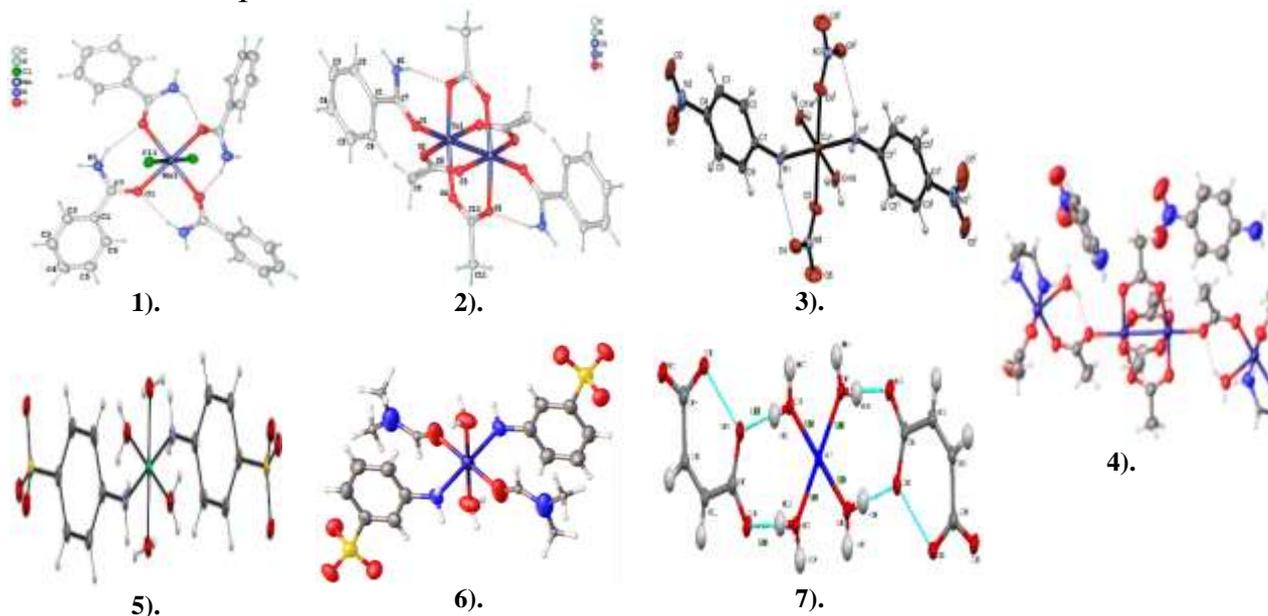
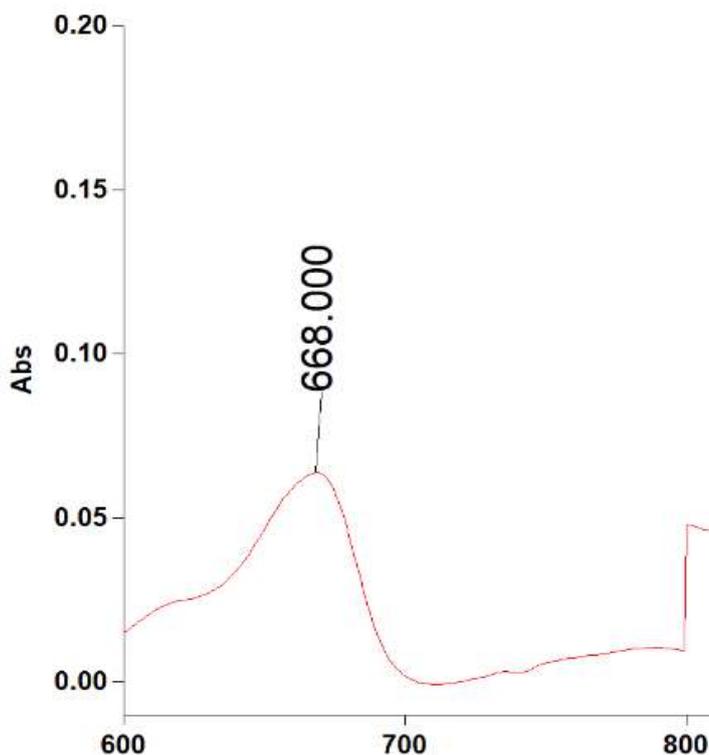


Рис. 1. Молекулярное строение синтезированных комплексных соединений. 1-[Mn(BZA)₄Cl₂], 2-[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄], 3-[Cu(NO₃)₂(PNA)₂(H₂O)₂], 4-[(Cu(CH₃COO)₂)₄(EDA)₂(H₂O)₂](PNA)₂}, 5-[Ni(H₂O)₄(SA)₂], 6-[Co(H₂O)₂(DMFA)₂(m-SA)₂], 7-[Cu(H₂O)₄](MAK)₂.

УФ спектр комплекса состава $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ и $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, полученного на основе бензамида, имеет видимую длину волны для иона Mn (II) в области 668 нм, а для иона Cu (II) в области 774 нм. При этом расположение и интенсивность точек поглощения зависят от геометрического строения комплекса и площади лигандов.

ИК-спектры комплексов бензамида и $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ сходны, в комплексе $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ металл-кислородные связи различаются в области 525 cm^{-1} , C-H удлинение 2766 cm^{-1} , а изгиб



766-695 cm^{-1} , а колебания C=C в области 1547 cm^{-1} -1449 cm^{-1} .

Рис. 2. УФ-спектр комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂]

Табл. 3.

ИК-спектр синтезированных комплексов (cm^{-1})

Комплексные соединения	ОН	C-O или S=O	C-N или C=S	M-O или M-N
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	3359, 3170	1024	1298, 1181	525
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	3449, 3294	1411	1269	516
[Cu(NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂ (PNA) ₂]	3308.62	1650, 1471	1269.94	687.18, 443.49
{[Cu(CH ₃ COO) ₂] ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂ }(PNA) ₂ }	3480.30	1471.76	1161.07	637, 487, 427.
[Co(H ₂ O) ₂ (DMFA) ₂ (m-SA) ₂]	3336.76	1548, 1392, 1329.	884.79, 791.04	679.32, 512.64
[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	3389.41, 3180.35	1421, 1246.	791.04	559.70, 685.58
[Cu(H ₂ O) ₄](MAK) ₂	2874.30	1404.44	—	644.85

В ходе исследования были получены ТГ и ДТА анализы комплексов бензамида и [Mn(BZA)₄Cl₂]. Обычно бензамид плавится при 128-130°C. В результате анализа ТГ потеря массы бензамида наблюдалась в диапазоне 200-300°C и составила 100%.

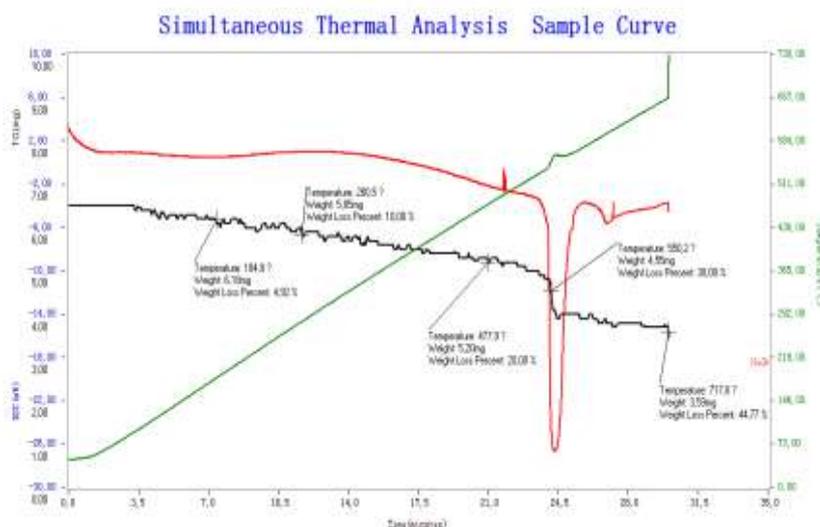


Рис. 3. Термическая диаграмма комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂ (ТГ, ДТА)

Табл. 4.

Данные ТГ и ДТА анализа комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂]

Температурный интервал, °C	Глубина эффекта, °C	Изменение массы, %	Характер эффекта
0-184.8	184.8	4.92	Эндотермический
184.8 - 280.5	280.5	10.00	Эндотермический
280.5 - 477.9	477.9	20.00	Эндотермический
477.9 - 550.2	550.2	30.00	Эндотермический
550.2 - 717.8	717.8	44.77	Эндотермический

Образование и стабильность комплексов в растворе анализировали кондуктометрическим методом. Первоначально к раствору соли металла определенной концентрации добавляли раствор лиганда. На каждом этапе измерялась электропроводность смеси. Процесс проводили при постоянном

перемешивании при помощи магнитной мешалки с поддержанием постоянной температуры 20°C.

В процессе образования комплекса $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ наблюдалось увеличение электропроводности в исходных порциях (с 380 μS до 791 μS) и затем уменьшение (снижение до 699 μS). Это связано с уменьшением концентрации свободных ионов в процессе образования комплекса. Это изменение соответствовало приблизительному соотношению 1:2 и 1:4 смеси лиганда и соли металла. В результате увеличения количества лиганда увеличивается количество свободных ионов лиганда и улучшается электропроводность (рис. 4а). Растворы MnCl_2 и БЗА перемешивали в объемном соотношении 1:4 и изучали электропроводность каждую минуту (при 20°C) (рис. 4б). Исследование устойчивости комплексов в температурном диапазоне от 20°C до 85°C показало, что устойчивость комплекса $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ увеличивается в зависимости от температуры.

В процессе формирования комплекса $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ значения ΔG были отрицательными, при высоких концентрациях комплексы становились стабильными, а при низких концентрациях образование комплексов затруднялось (рис. 4с).

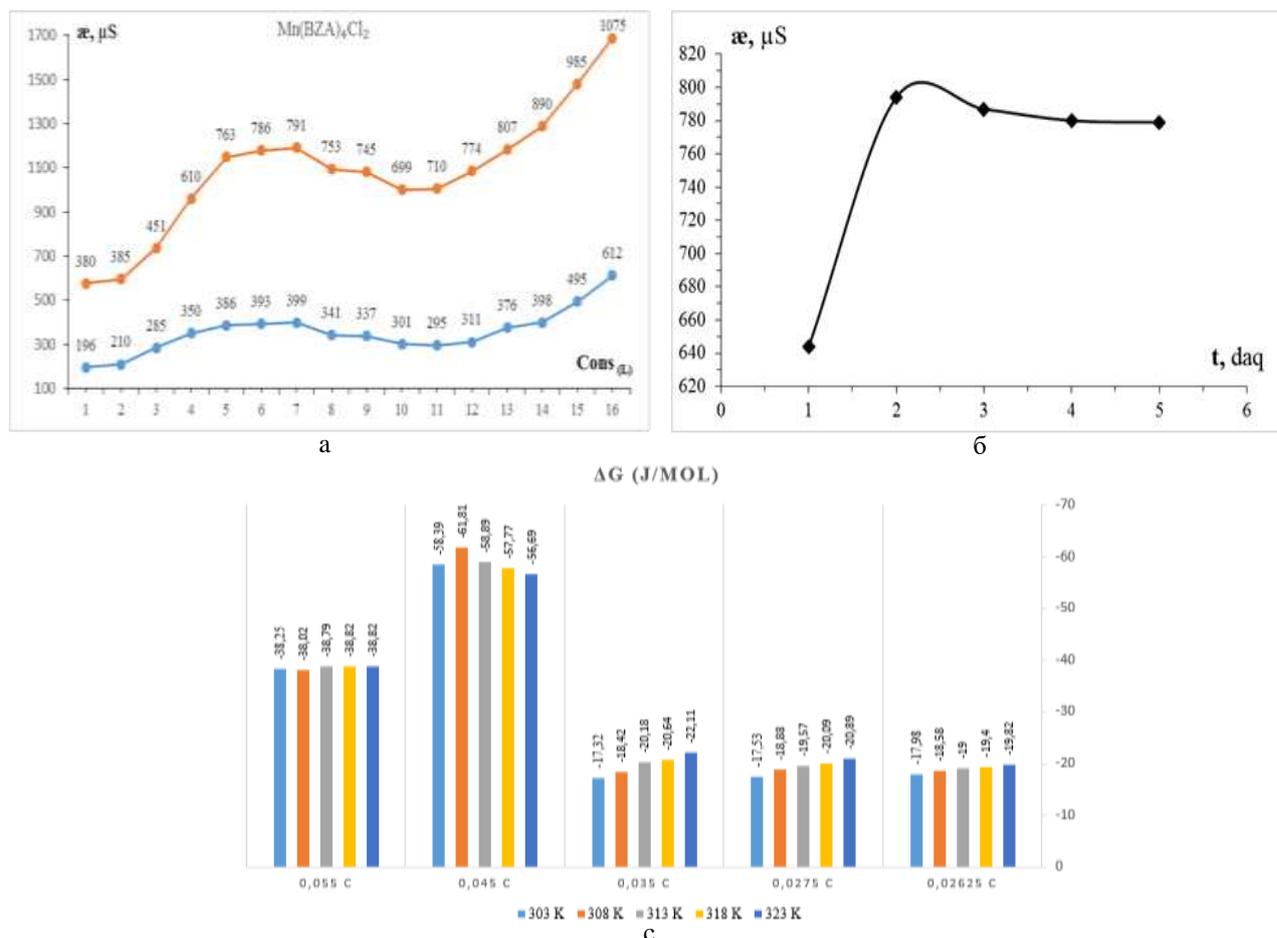


Рис. 4. Диссоциация на ионы при образовании комплексов и зависимость их электропроводящих свойств от (а) концентрации, (б) времени и (с) ΔG .

Кинетические параметры процесса термического разложения комплекса $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ изучали методами Фримена-Кэррола, Шарпа-Уэнтворта, Ахара и непараметрической кинетики (НПК).

Энергия активации рассчитывалась в диапазоне температур 20-700°C. Рассчитанные термодинамические параметры процесса термического разложения следующие: по методу Фримена-Кэррола 81,90 кДж/моль, по методу Шарпа-Уэнтворта 98,85 кДж/моль, а по методу Ахары 98,68 кДж/моль. Все рассчитано при постоянной скорости повышения температуры при 10°C/мин и параметры представлены графически.

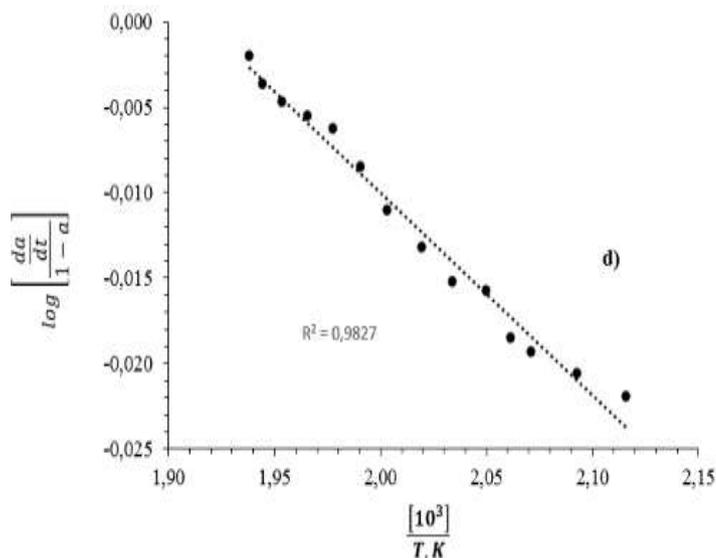


Рис. 5. $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ метод Ахары для кинетики термического разложения

На основе метода НПК определены энергия активации ($E_a=103,22$ кДж/моль) и коэффициент предэкспоненциального множителя ($A=2,73$ мин⁻¹) для термического разложения комплекса $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$.

Зависимость скорости реакции и степени конверсии (α) от температуры интерполировалась в 3D-пространстве (рис. 6). Используя энергию активации, были рассчитаны термодинамические функции – ΔG , ΔH и ΔS . Результаты показали, что положительное значение ΔH указывает на стабильность комплекса, положительное значение ΔG указывает на то, что процесс не является самопроизвольным, а отрицательное значение ΔS указывает на упорядоченную структуру продуктов, т. е. на процесс разрыва связей и перегруппировки.

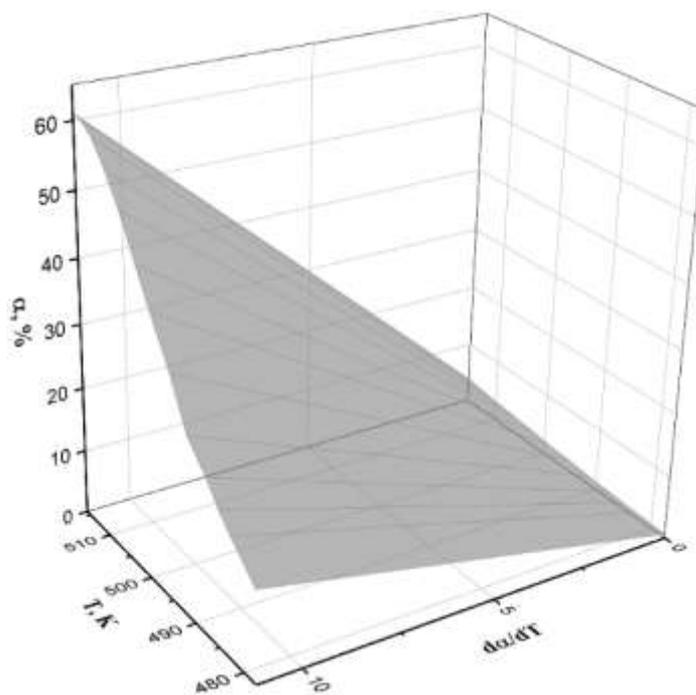


Рис. 6. 3D диаграмма экспериментальных данных (α , T и da/dT)

Табл. 5.

Изменения термодинамических функций, рассчитанных различными методами для процесса термического разложения.

Термодинамические параметры	Комплекс	Методы			
		Фримена-Кэррола	Шарпа - Уэнтворта	Ахара	НРК
ΔG , kJ/mol	[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	78,45	95,16	95,87	99,41
ΔH , kJ/mol		77,25	94,20	94,03	98,57
ΔS , kJ/mol*K		-15,80	-20,67	-22,92	-23,01

Устойчивость комплексов определяли **методом Бабко**. Из указанных для анализа соединений были приготовлены растворы равной концентрации и их результаты рассчитаны по следующим формулам.

$$K_{\text{beqaror.(KB)}} = \frac{[H^+] \cdot (A_1 \cdot C_2 - A_2 \cdot C_1)^{q+1}}{(C_1 \cdot \sqrt[q]{A_2} - C_2 \cdot \sqrt[q]{A_1}) \cdot (A_1 \cdot \sqrt[q]{A_2} - A_2 \cdot \sqrt[q]{A_1})^q}; (1) \quad K_{\text{barqaror.(KB)}} = \frac{1}{K_{\text{beqaror.(KB)}}}; (2)$$

По результатам установлено, что среднее значение константы устойчивости комплексов равно 4,37 для [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] и 2,57 для [Mn(BZA)₄Cl₂]. Эти значения показывают, что они изменяются в соответствии с рядом Ирвинга-Вильямса.

В четвертой главе диссертации **“Квантово-химические расчеты и биологическая активность полученных комплексных соединений”** изучены результаты квантово-химических расчетов синтезированных комплексных соединений, энергии межмолекулярных взаимодействий, сумма валентных связей, анализ поверхности Хиршфельда, а также биологическая активность комплексных соединений, полученных с помощью молекулярного докинга и ряда практических методов.

Анализ поверхности Хиршфельда комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂] по данным программы Crystal Explorer 17.5 показал, что площадь d_{norm} для [Mn(BZA)₄Cl₂] находится в диапазоне от -0,3589 (красный) до 1,5139 (синий) атомных единиц. Графики отпечатков пальцев показали большое количество воздействий Н...Н (37,9%), что подтверждает гидрофобный характер

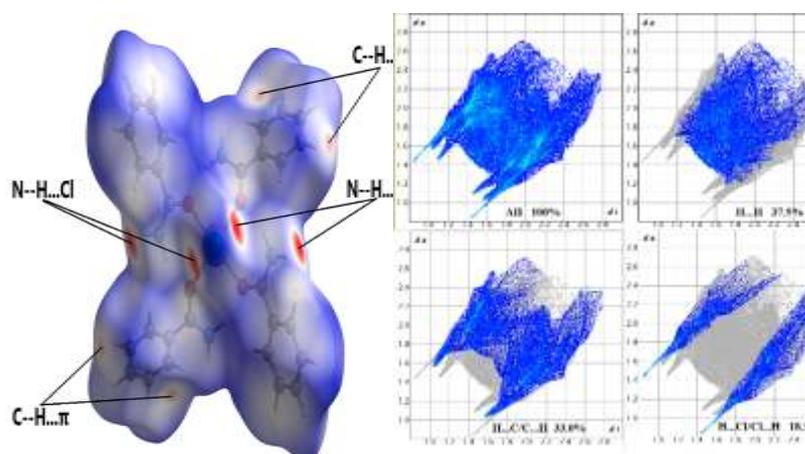


Рис. 7. График водородных связей и 2D отпечатков пальцев на поверхностях Хиршфельда комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂].

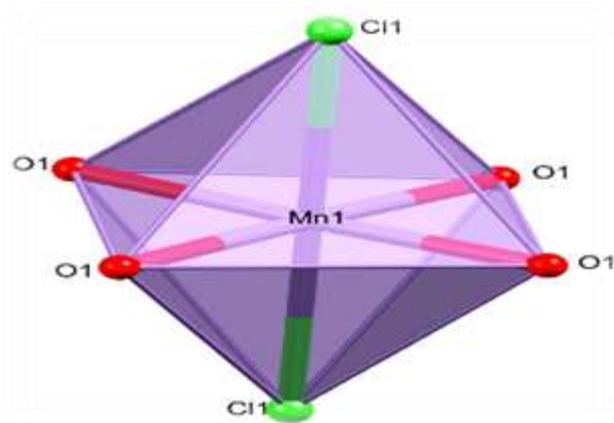
КОМПЛЕКСА.

Табл. 6.

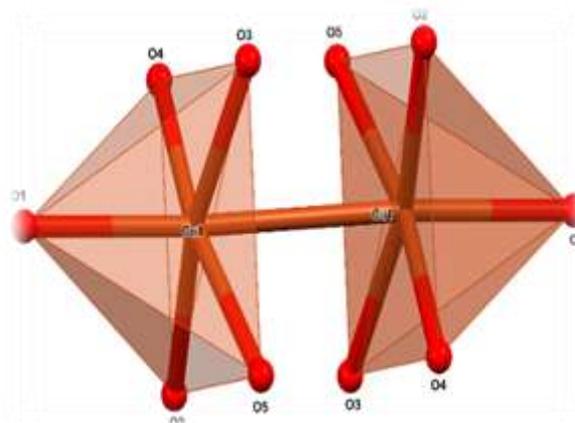
Характеристики поверхности Хиршфельда комплексов

Комплекс	d _{norm} (Å)	H...H (%)	C...H/H.. C(%)	O...H/H.. ..O (%)	Другое (%)	Размер (Å ³)	Поверхн ости (Å ²)	Глобуляр ность
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	-0.3589 -1.5139	37.9	33.0	5.0	7.5	300.00	350.00	0.650
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	-0.2409 -1.4818	51.8	19.9	25.3	3.0	450.00	400.00	0.720
[Cu(NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂ (PNA) ₂]	0.5385 - 1.2851	13.3	7.7	55.8	23.2	280.00	290.00	0.620
{[(Cu(CH ₃ COO) ₂) ₄ (EDA) ₂ (H ₂ O) ₂] (PNA) ₂ }	-	47.3	8.4	36.4	7.9	370.00	350.00	0.700
[Co(H ₂ O) ₂ (DMF A) ₂ (m-SA) ₂]	-	38.8	13.5	36.5	11.2	304.06	310.98	0.703
[Ni(H ₂ O) ₄ (SA) ₂]	0.6094 - 1.1281	24.7	11.5	23.9	39.9	425.88	386.98	0.707
[Cu(H ₂ O) ₄] (MAK) ₂	-	12.0	9.0	57.1	21.9	319.25	326.32	0.692

Проанализированы сумма валентных связей и размер постоянной симметрии синтезированных комплексных соединений. В комплексе [Mn(BZA)₄Cl₂] вокруг иона марганца расположены четыре атома кислорода и два атома хлора, **сумма валентных связей (СВС)** составляет 1.93, что указывает на состояние окисления марганца +2. Согласно анализу **размера постоянной симметрии (DSO)**, координационное число 5.3587 и индекс искажения формы 0.05246. В комплексе [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] вокруг иона меди имеется пять атомов кислорода, значение VBY составляет 2,06 и подтверждает окисление меди +2. При анализе ДСО координационное число 4.7792 и индекс искажения формы 0.02931.



a



b

Рис. 8. Октаэдрический (а) график координации [Mn(BZA)₄Cl₂] и квадратный пирамидальный (б) график координации [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄].

Табл. 7.

СВС из [Mn(BZA)₄Cl₂] и [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄]

No.	Расстояния связи (Å)						V=Σvij
Mn ²⁺ 6	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-O(1)	Mn(1)-Cl(1)	Mn(1)-Cl(1)	Mn(1)-O(1)	1.93*
	2.230(3)	2.230(3)	2.230(3)	2.5038(18)	2.5038(18)	2.230(3)	
Cu ²⁺ 5	Cu(1)-O(3)	Cu(1)-O(5)	Cu(1)-O(1)	Cu(1)-O(2)	Cu(1)-O(4)		2.06*
	1.9704(19)	1.9862(17)	2.1528(18)	1.961(2)	1.9592(18)		

Энергия фотонов комплексных соединений рассчитывалась с помощью закона Планка.

$$E = \frac{hc}{l}$$

Между длиной волны и энергией фотона существует обратная зависимость, и по мере уменьшения длины волны энергия фотона увеличивается. Электронные переносы, требующие высокой энергии, соответствуют более коротким (225 нм), а электронные переносы, требующие низкой энергии, более длинным волнам (774 нм).

Растворы комплекса [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] в различных концентрациях (0.05, 0.04, 0.03, 0.02 и 0.01 моль/л) анализировали с помощью УФ-спектроскопии. Результаты определяли d-d сдвиги комплекса на длинах волн от 779.541 нм до 788.586 нм. Абсорбция варьировала от 0,2178 до 0,0433. Эти результаты подтверждают зависимость оптических свойств комплекса от концентрации и длины волны.

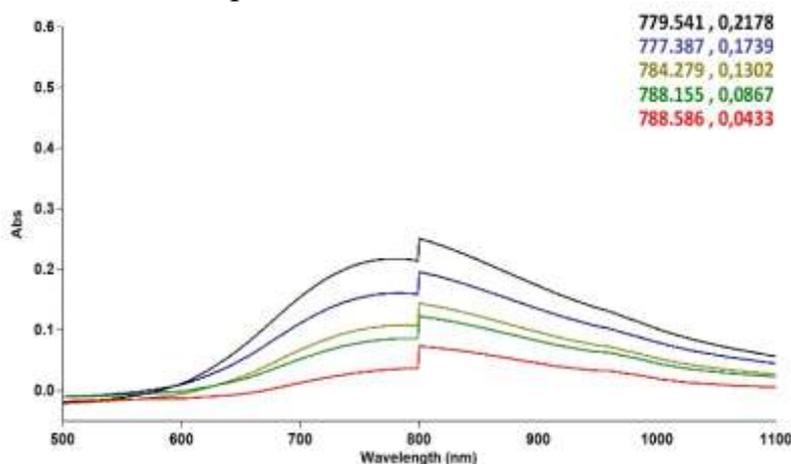


Рис. 9. Абсорбция ультрафиолетового излучения комплексом [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] при различных концентрациях и d-d переходы в катионе Cu²⁺.

Проведен DFT-анализ комплексов [Mn(BZA)₄Cl₂] и [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄], изучены электронные свойства с помощью НОМО-

LUMO-анализа. Расчеты DFT были проведены с использованием программы GAMESS 2023 R1 и базового пакета 6-31G методом DFT/B3LYP и оптимизированы молекулярные геометрии. Рассчитаны энергии HOMO и LUMO, определены электрофильные и нуклеофильные свойства комплексов, разработаны характеристики реактивности и устойчивости.

[Mn(BZA)₄Cl₂]: HOMO = -3.13205 eV, LUMO = -1.21091 eV

[Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄]: HOMO = -4.67223 eV, LUMO = -3.25450 eV

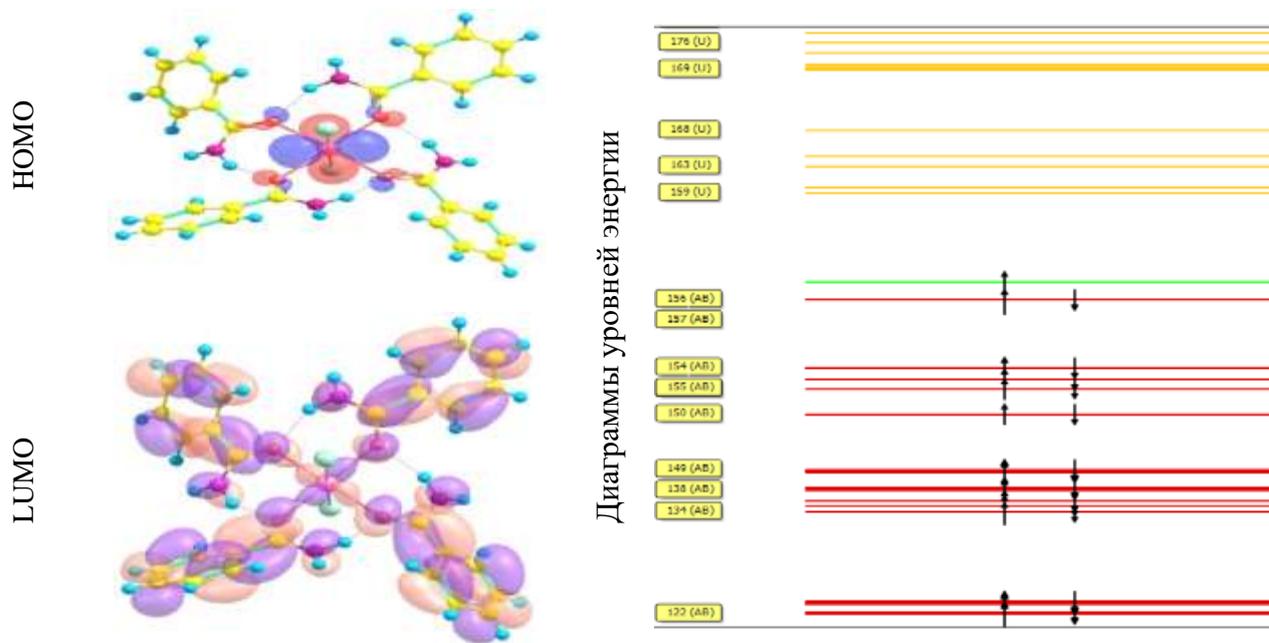


Рис. 10. Энергетические диаграммы орбиталей HOMO-LUMO и щели комплекса [Mn(BZA)₄Cl₂].

Заполненные орбиты показаны красным цветом, а пустые орбиты - оранжевым. На орбитах HOMO имеется один электрон, и они изображены в зеленом цвете. Малая полость HOMO-LUMO показала высокую реактивность, поэтому малая полость комплекса [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] делает его химически более активным, чем комплекс [Mn(BZA)₄Cl₂]. Рассчитаны электроотрицательность, химическая твердость и мягкость.

Табл. 8.

Сравнение электронных свойств металлоорганических комплексов

Комплекс	HOMO (eV)	LUMO (eV)	Диапазон энергии (eV)	Электроотрицательность (eV)	Твердость (eV)	Мягкость (eV)
[Mn(BZA) ₄ Cl ₂]	-3.13205	-1.21091	1.92091	2.17148	0.960657	1.04104
[Cu ₂ (BZA) ₂ (CH ₃ COO) ₄]	-4.67223	-3.25450	1.41173	3.96336	0.70886	1.41070

Комплекс электрохимических клеток [Cu₂(BZA)₂(CH₃COO)₄] Комплекс [Mn(BZA)₄Cl₂] содержит лишь небольшое количество водорода, что позволяет использовать химическую реакционную силу жидкого металла в качестве катализатора. Промежуток HOMO-LUMO представляет собой

совокупность ионных молекул $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, одним из которых является реактивный тип кислорода.

Биологическую активность комплексов изучали с помощью метода молекулярного докинга. Взаимодействие БЗА и комплексов металлов с *E. coli* и *Candida albicans* изучалось с помощью анализа *in silico*. Энергии (ЭС) комплексов рассчитывались с использованием сервера CB-Dock2.

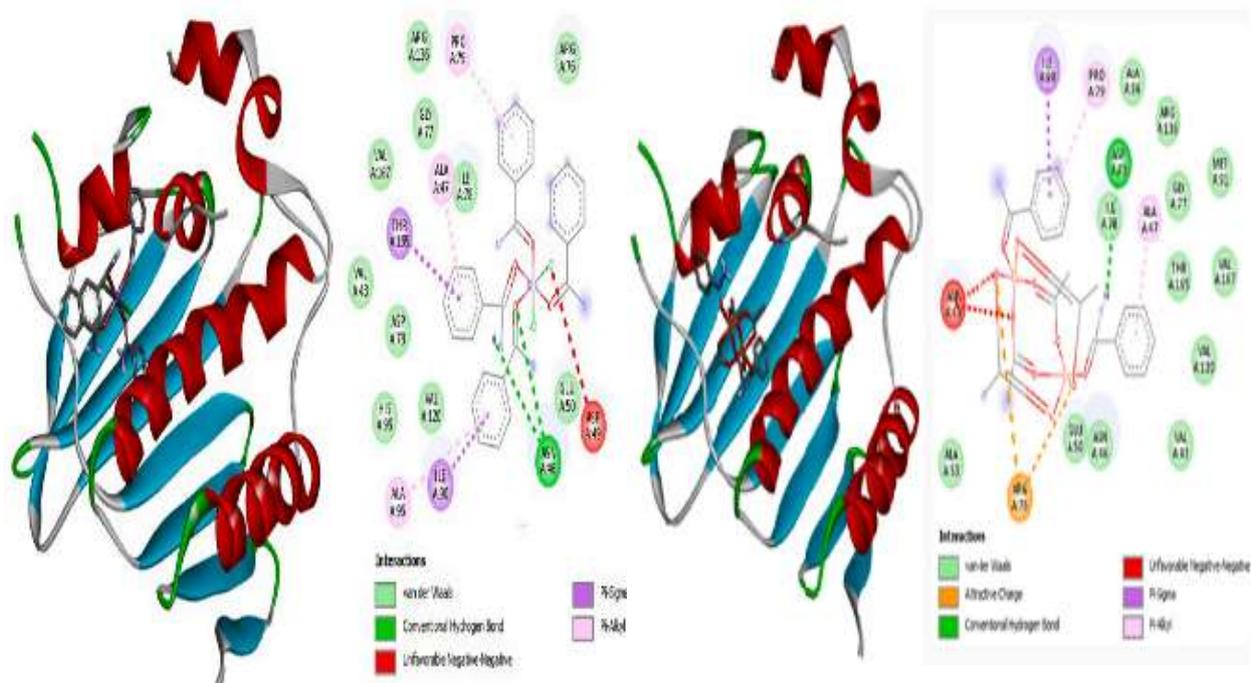


Рис. 11. Комплекс $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ с белками 1KZN и 2QZX.

Табл. 9.

Энергии связи БЗА и металлокомплексов в целевых белках, ккал/моль

Protein	БЗА	Mn- комплекс	Cu-комплекс	Стандартные соединения
1KZN of <i>E. coli</i>	-5.4	-8.2	-8.3	-8.0(levofloxacin)
2QZX of <i>Candida albicans</i>	-5.8	-8.9	-8.2	-6.8 (fluconazole)

Результаты показали, что энергия связи комплексов $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ и $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ в два раза выше, чем у БЕ. Установлено, что Mn-и Cu-комплексы обладают более высокой реактивностью и взаимодействием по сравнению со стандартными антибактериальными и антифунгальными молекулами, левофлаксаценом и флуконазолом. Также было подтверждено, что оба комплекса содержат π - π stacking и "притягивающий заряд" (т.е. взаимное притяжение), что способствует усилению взаимодействия фермент-субстрат.

Противомикробную активность комплексов оценивали методом "колодезной диффузии". Тесты антибактериальной активности синтезированного Mn-комплекса показали, что биологическое действие исходного соединения (лиганда) в металлокомплексе БЗА удваивается, что

примерно на 25% лучше по сравнению со стандартным антибиотиком левофлаксацином.

Табл. 10.

Объем зон ингибирования лигандов, комплексов и стандартных антибиотиков.

	БЗА (контроль), мм	Mn- комплекс, мм	Антибиотик, мм
E.coli	11 ± 0,26	27 ± 0,62	20 ± 0,43 (levofloxacin)
C.albicans	10 ± 0,25	22 ± 0,52	17 ± 0,41 (flconazole)
		Cu-комплекс	
E.coli	10 ± 0,25	25 ± 0,56	18 ± 0,43 (levofloxacin)
C.albicans	10 ± 0,25	23 ± 0,54	17 ± 0,42 (flconazole)

Улучшение противогрибковой активности было меньшим, но металлокомплексы показали лучшую активность по сравнению с флуконазолом. Аналогичные результаты были зафиксированы и по антимикробной активности Cu-комплекса. Эксперименты *in vitro* подтвердили, что антибактериальная активность комплексов Mn-и Cu-выше, чем у левофлоксацина.

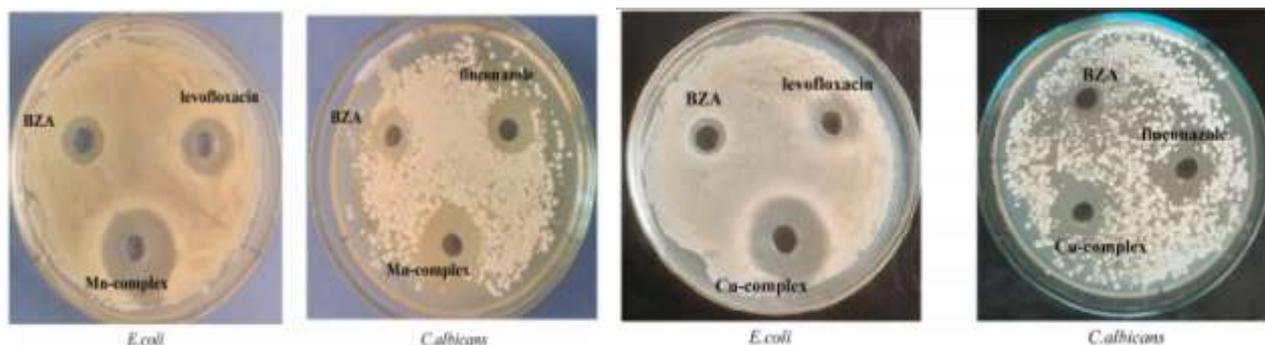


Рис. 12. Антимикробная активность комплексов $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ и $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$.

Для оценки острой токсичности синтезированных соединений использовали метод интрагастрального введения. В данном методе острую токсичность проверяли введением одной дозы соединения в желудок подопытных животных. Мышам однократно вводили дозы 500, 1200, 1600 и 2000 мг/кг путем инъекций.

Табл. 11.

Показатели острого отравления у мышей

Группа	$[Mn(BZA)_4Cl_2]$	$[Cu_2(BZA)_2(CH_3COOH)_4]$	$[Ni(H_2O)_4(SA)_2]$	$[Co(H_2O)_2(DMFA)_2(m-SA)_2]$	$[Cu(H_2O)_4(MAK)_2]$
Животный	Белая лабораторная мышь, мужского пола				
LD ₅₀	2720 мг/кг	1630 мг/кг	2730 мг/кг	3000 мг/кг	2800 мг/кг

Результаты показали, что первые летальные дозы (LD₅₀) определялись для BZA (1290 мг/кг), $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COOH)_4]$ (1630 мг/кг) и $[Mn(BZA)_4Cl_2]$ (2720 мг/кг). В результате острых токсикологических испытаний по классификации Ходжа и Стернера эти соединения были признаны низкотоксичными соединениями IV класса (LD₅₀ 500-5000 мг/кг). Также LD₅₀

образцов $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$ и $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$ находится в пределах 2700-3000 мг/кг, что подтверждает их нетоксичность.

ЗАКЛЮЧЕНИЯ

1. Синтезированы 7 новых смешаннолигандных комплексных соединений катионов Cu (II), Mn (II), Co (II) и Ni (II) с азот-и кислородсодержащими лигандами в соотношении Me:L = 1:1, 1:2, 1:4. Данные РСА комплексов $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{PNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $\{[(\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2)_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{PNA})_2\}$, и $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$ были внесены в Международную Кембриджскую кристаллографическую базу данных и получены депозитные номера (2269288, 2292586, 2443835, 2131922, 2443834, 2443837, 2443836).

2. Впервые с использованием рентгеноструктурного анализа, элементного анализа, УФ- и ИК-спектроскопии, кондуктометрического, термических методов анализа, определены состав, строение и устойчивость комплексов. $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{PNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $\{[(\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2)_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{PNA})_2\}$, $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$

3. Установлено, что в комплексе $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2(\text{PNA})_2]$ в результате sp^3d^2 гибридизации электронов центрального иона меди (II) образуются комплексы октаэдрической структуры с координационным числом 6, а также удлинение расстояния Cu1 - O3 за счет эффекта Яна-Теллера.

4. При образовании комплекса $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ константа устойчивости термодинамического равновесия при концентрации 1:1 выше, чем при других концентрациях, а значения ΔG отрицательны из-за изменений температуры и концентрации, что подтвердило самообразование и стабильность комплекса.

5. Термический анализ показал, что термическая устойчивость комплексных соединений связана с их кристаллической структурой. Изучение термодинамических параметров процесса разложения $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ методами Фримена-Керралла, Шарпа-Уэнтворта, Ахара и НПК подтвердили высокую устойчивость комплекса.

6. С помощью квантово-химического анализа свойств синтезированных комплексов, а также анализа поверхности Хиршфельда установлено, что связи Н...Н, Н...О/О...Н и С...Н/Н...С влияют на структуру полученных комплексов.

7. На практике подтвержден прогноз *in silico* относительно биологических свойств $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ и $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COOH})_4]$: комплексы по степени токсичности и антибактериальной активности превосходят стандартный антибиотик левофлоксацин и флуконазол по сравнению с грибами: токсичность комплексов в 1,5-2 раза ниже, чем у лигандов, активность по сравнению с бактериями на 35-38% выше, чем у левофлоксацина, а по сравнению с грибами на 29-35% выше, чем у флуконазола.

**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 AWARDED
SCIENTIFIC DEGREES AT TERMEZ STATE UNIVERSITY**

NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN

KAMOLOV SANJAR NAYIMOVICH

**Synthesis, crystal structure, and biological activity of new complexes
based on nitrogen-and oxygen-containing ligands of Cu (II), Mn (II), Co (II),
and Ni (II) salts**

02.00.01 - Inorganic Chemistry

02.00.04 - Physical Chemistry

**DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD) IN CHEMISTRY ABSTRACT OF
DISSERTATION**

Termiz – 2025

The topic of the Doctor of Philosophy (PhD) dissertation is registered with the Higher Attestation Commission under the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of Uzbekistan under the number B2024.4.PhD/K865

The dissertation has been prepared at the National University of Uzbekistan.

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

Supervisors:

Babayev Bakhrom Nurillaevich
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Ibragimov Aziz Bakhtiyarovich
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Official opponents:

Trobov Khamza Tursunovich
Doctor of Chemical Sciences, Professor

Nazarov Yusufjon Eshqobilovich
Doctor of Philosophy in Chemistry.

Leading Organization:

Karshi State University

The dissertation defense will be held on "26" "04" 2025 at "11³⁰" at the meeting of the Scientific Council DSc.03/31.01.2023.K/T.78.01 at Termez State University at the address: 190111, Termez, district, pos. Barkamol Avlod, 43 tel: (+99876) 221-74-55; (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz

The dissertation is registered at the Informational Resource Center of Termez State University for № 286, which can be found at the IRC (Address: 190111, Termez, 43 Barkamol Avlod St., tel.: (+99876) 221-74-55; (+99876) 221-71-17, e-mail: termizdu@umail.uz

The abstract of the dissertation was distributed on "10" "04" 2025.

Protocol at the register No. 10 dated "04" "6" 2025.



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

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

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

INTRODUCTION (abstract of doctor of philosophy PhD dissertation)

The aim of the research is to synthesize new complexes of Cu(II), Mn(II), Co(II) and Ni(II) salts with nitrogen and oxygen-containing ligands (benzamide, p-nitroaniline, p- and m-sulfanyl acids, maleic acids), determine their crystal structure and biological activity.

The objects of the study were inorganic salts containing Cu(II), Mn(II), Co(II), and Ni(II) ions, bioactive ligands containing nitrogen and oxygen donor atoms, and complex compounds synthesized on their basis.

The scientific novelty of the research is as follows:

seven new complexes of Cu(II), Mn(II), Co(II), and Ni(II) ions with mixed ligands containing nitrogen and oxygen (benzamide, p-nitroaniline, m-sulfanyl, p-sulfanyl, maleic acids, ethylenediamine, and dimethylformamide) were synthesized and their single crystal structure obtained;

the composition of the synthesized mixed ligand complexes was determined by IR, UV spectroscopy, crystal structure SCXRD and thermal properties using TG/DTA analysis methods;

using crystallographic data of the synthesized complex compounds, the proportion of hetero- and homoatomic interactions in the formation of the surface and the values of the interaction distances d_{norm} , d_i , d_e were determined using Hirshfeld surface analysis;

it has been proven that mixed ligand complexes of Cu(II), Mn(II) ions with benzamide act as biostimulants on plants, increase the resistance of plants to abiotic and biotic factors, and also have inhibitory properties against microorganisms that cause metal corrosion.

Implementation of research results. Based on the scientific results obtained in determining the structure and biological properties of the new complexes synthesized within the framework of the dissertation:

The molecular and crystal structure data of the newly synthesized complexes $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$, $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$, $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4](\text{MAK})_2$, $[\text{Cu}(\text{NO}_3)_2(\text{PNA})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, $\{[(\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2)_4(\text{EDA})_2(\text{H}_2\text{O})_2](\text{PNA})_2\}$, $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{SA})_2]$ and $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{DMFA})_2(\text{m-SA})_2]$ have been deposited with the Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC accession numbers 2269288, 2292586, 2443835, 2131922, 2443834, 2443837, 2443836). As a result, the information provided about the chemical compounds included in the database made it possible to use them in the synthesis of similar compounds and characterize their structure;

The results of determining the biostimulating properties of the complex compounds $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ and $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ in relation to plants were used in the fundamental project No. F3-20200929348 on the topic "Investigation of the relationship between the structure of supramolecular complexes based on phenolic acids and their properties of protecting plants from abiotic and biotic negative effects" (Reference of the Academy of Sciences of the Republic of Uzbekistan dated October 31, 2024 No. 4/1255-2428). As a result, a

method for the synthesis of new, low-toxic complex compounds with effective biostimulating properties was developed;

The synthesized complex compounds containing $[\text{Mn}(\text{BZA})_4\text{Cl}_2]$ and $[\text{Cu}_2(\text{BZA})_2(\text{CH}_3\text{COO})_4]$ were used as corrosion inhibitors in metal structures and devices in the chemical analysis laboratory under the “Technical Control Department” of Mubarak Gas Processing Plant LLC (reference document of Mubarak Gas Processing Plant LLC dated September 30, 2024 No. 914/G’K-09). As a result, it was possible to obtain corrosion inhibitors with high efficiency against microorganisms that cause metal corrosion based on the synthesized complex compounds;

The data presented in the dissertation were used in the practical research project of the Surgut State University in the Khanty-Mansiysk Autonomous Okrug (Russia) on the topic “Technologies for growing and extracting biologically active compounds from northern berries and medicinal herbs (YugraBioFarm)” to assess the biological activity of the extracted substances (reference letter of Surgut State University dated October 3, 2024 No. 03-01/285). As a result, it was possible to obtain biologically active compounds used in the medical, pharmaceutical and food industries.

The volume and structure of the dissertation. The dissertation consists of an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references, and appendices. The total volume of the dissertation is 115 pages.

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

I bo'lim (часть; part I)

1. Kamolov S.N., Babaev B.N., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Yu., Abdullaev A.X., Ibragimov B.T., Ashurov J.M. Synthesis, structure and Hirshfeld surface analysis of diaquadinitratobis(4-nitroaniline)copper(II). Acta Crystallographica Section E Crystallographic Communications. Acta Cryst. E79. - 2022 йил -P. 1165-1168. doi.org/10.1107/S2056989022010404. **SCOPUS**. 2022. SJR-0.246
2. Kamalov S., Babaev B., Ibragimov A., Eshimbetov A., Ashurov J, Normamatov A., Tilyakov Z., Usmanov S, Tashpulatov J., Ibragimov B. Antimicrobial activity enhancement and acute toxicity lowering of benzamide through preparation of metal complexes. Journal of Molecular Structure 1303 (2024) 137620. doi.org/10.1016/j.molstruc.2024.137620. №3 **SCOPUS**. CiteScore- 7.1. 2024. SJR-0.628
3. Kamolov S.N., Babayev B.N., Qayumov A.N., Ibragimov A.B. Study of a new single crystal obtained on the basis of p-nitroaniline and copper nitrate by physical research methods. Uzbek Chemical Journal. 2023. №6. -3-7-b (02.00.00. №4)
4. Kamolov S.N., Babayev B.N., Safarov A.R., Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Synthesis and thermal analysis of metal complex containing benzamide. Uzbek Chemical Journal. 2024. №1. -86-90-b (02.00.00. №4)
5. Kamolov S.N., Safarov A.R., Jo'rayev A.Sh., Fayziyeva A.K., Ibragimov A.B. Synthesis and study of a new complex compound of copper (II) acetate based on p-nitroaniline and ethylenediamine. Uzbek Chemical Journal. - 2024. №1. -14-22-b (02.00.00. №4)

II bo'lim (II часть; part II)

6. Kamolov S.N., Babayev B.N. Safarov A.R. Ibragimov A.B. Qayumov A.N. p- nitroanilin asosida olingan yangi metall kompleksining fizikaviy usullar orqali o'rganilishi. International Scientific Symposium "Democracy and national unity" Turkiya - 2023. –P 309-314.
7. Kamolov S.N., Babayev B.N, Mis asetatning p-nitroanilin va etilendiamin ishtirokidagi yangi kompleks sintezi. "International conference on learning and teaching 2022/3" Tashkent -2022. -161-p.
8. Kamolov S.N., Babaev B.N., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Yu. The synthesis, crystal structure and hirschfeld surface analysis of new complex of mn with benzamide and cl. "Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari". Buxoro – 2022. -76 -b.
9. Kamolov S.N., Babaev B.N., Ibragimov A.B., Yakubov Y.Yu. Synthesis, structure and hirshfeld surface analysis of the cu complex of p-nitroaniline. "Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari". Buxoro – 2022. -148-b.

10. Kamolov S.N., Babayev B.N., Sayfullayev I.B., Ibragimov A.B. Mis asetatning p-nitroanilin va etilendiamin asosidagi yangi kompleksini fizikaviy usullar orqali tadqiq etish. “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari”. Buxoro – 2022. -179-b.

11. Kamolov S.N., Babayev B.N., Ibragimov A.B., Kamolov F.Q. p-nitroanilinning mis(II)nitrat tuzi bilan yangi kompleks sintezi. “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari”. Buxoro – 2022. -97-b.

12. Kamolov S.N., Babayev B.N., Ibragimov A.B. p-nitroanilinning yangi kompleksini termogravimetrik (TG) va differensial termik (DTA) analiz orqali fizik tadqiq etish. “Fizikaviy va kolloid kimyo fanlarining fundamental va amaliy muammolari hamda ularning innovatsion yechimlari” mavzusida xalqaro ilmiy-amaliy anjuman. Namangan – 2024. -1251-1253-b

13. Kamolov S.N., Babayev B.N., Ibragimov A.B. Metall komplekslarni tayyorlash orqali benzamidning mikroblarga qarshi faolligini oshirish va oʻtkir toksikligini pasaytirish. “Fizikaviy va kolloid kimyo fanlarining fundamenta va amaliy muammolari hamda ularning innovatsion yechimlari” mavzusida xalqaro ilmiy-amaliy anjuman. Namangan – 2024. -1352-1354-b

14. Kamolov S.N., Babayev B.N., Normamatov A.S., Ibragimov A.B. p-nitroanilinning kobalt (II) metalli bilan kompleks sintezi. “Инновационные технологии переработки минерального и техногенного сырья химической, металлургической, нефтехимической отраслей и производства строительных материалов” Ташкент 12-14 май -2022 года. -285 с

15. Kamolov S.N., Babayev B.N., Qayumov A.N. Benzamidning $MnCl_2$ bilan yangi kompleksining sintezi va kristall tuzilishi. Oʻzbekiston Milliy Universitetining 105 yilligiga bagʻishlangan “Analitik kimyoning dolzarb muammolari” mavzusidagi xalqaro professoroʻqituvchilar va yosh olimlar ishtirokidagi respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari toʻplami. Toshkent - 2023. -232-233-b

16. Kamolov S.N., Babayev B.N., Toshov H.S., Ibragimov A.B. p-nitroanilinning bir neshta metall tuzlari bilan olingan kompleksining iqspektraskopik tahlili. “Нодир ва ноёб металллар кимёси ва технологияси: бугунги ҳолати, муаммолари ва истиқболлари” Termiz-2023. -104-105-

17. Kamolov S.N., Ibragimov A.B. Cu(II) ioni p-nitroanilin va etilindiamin bilan hosil qilgan kompleks birikmasining ultrabinafsha spektiri. Достижения и перспективы супрамолекулярной химии, 15 мая 2024 года г. Ташкент. -С 107-109

18. Kamolov S.N., Ibragimov A.B., Safarov A.R. Benzamidni $MnCl_2$ bilan hosil qilgan yangi kompleks birikmasini oʻtkir zaharlilik darajasini oʻrganish. Достижения и перспективы супрамолекулярной химии, 15 мая 2024 года г. Ташкент. -С 213-215

19. Kamolov S.N., Ibragimov A.B., Babayev B.N. $[Cu_2(BZA)_2(CH_3COO)_4]$ kompleksining sintezi va termal tahlili. Достижения и перспективы супрамолекулярной химии, 15 мая 2024 года г. Ташкент. -С 211-213

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

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

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

