

**МИНИСТЕРСТВО ВЫСШЕГО И СРЕДНЕГО СПЕЦИАЛЬНОГО
ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ УЗБЕКИСТАН**

=====

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА
имени МИРЗО УЛУГБЕКА**

На правах рукописи
УДК 541.49+547.785.5+543.422.25

РАХМОНОВА ДИЛНОЗА САЛОМОВНА

**КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С
ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫМИ 2-ЗАМЕЩЕННЫМИ
БЕНЗИМИДАЗОЛАМИ**

02.00.01 - Неорганическая химия

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук

Ташкент - 2011

Работа выполнена на кафедре неорганической и аналитической химии Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека

- Научный руководитель:** кандидат химических наук
Кадирова Зухра Чингизовна
- Научный консультант:** доктор химических наук, академик
Парпиев Нусрат Агзамович
- Официальные оппоненты:** доктор химических наук, профессор
Умаров Бақо Бафаевич
- кандидат химических наук, доцент
Насирдинов Саъдулла Джалалович
- Ведущая организация:** **Институт общей и неорганической химии АН РУз**

Защита состоится «__» _____ 2011 года в ____ часов на заседании Объединенного специализированного совета Д 067.02.09 при Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека по адресу: 100174, г. Ташкент, Вузгородок, химический факультет, аудитория 225.

Тел. (998-71) 227-12-24, факс: (998-71) 246-53-21, 246-02-24.

E-mail: dilnoza.rahmonova@gmail.com

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Национального университета Узбекистана имени Мирзо Улугбека.

Автореферат разослан «___» _____ 2011 г.

**Ученый секретарь Объединенного
специализированного совета
кандидат химических наук**

А.Х. Хаитбоев

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность работы. Комплексные соединения переходных металлов с полифункциональными производными бензимидазолов широко используются в науке, технике, медицине, сельском хозяйстве, металлургии, химической промышленности и других отраслях.

Помимо широкого практического применения комплексов актуальность выбранной темы обусловлена фундаментальными исследованиями, связанными с возможностью моделирования биологически важных процессов с участием ионов металлов и азотсодержащих гетероциклических лигандов в бионеорганической химии. При этом особенное внимание привлекают не только координационные соединения с одним лигандом, но и разнолигандные, внутрисферные комплексы, координирующие вокруг себя лиганды внешней сферы за счет электростатического притяжения и других специфических взаимодействий.

В качестве исходных лигандов в работе были выбраны 2-замещенные производные бензимидазола, содержащие несколько гетероатомов и функциональных групп: 2-амино-1-метилбензимидазол (МАБ), 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанол-1 (ПБИ), а также двух бензимидазольных фрагментов в структуре N, N¹-бис-(1-метил-бензимидазол-2-ил) диаминометилена (бисМАБ).

Степень изученности проблемы. В научно-технической и патентной литературе приведено достаточное количество общих сведений о координационных соединениях биометаллов с бензимидазолами, обладающими антигельминтными, антибактериальными и противовоспалительными, противоопухолевыми свойствами, а также указывается на возможность их применения в качестве катализаторов, в металлургии, аналитической химии. Однако, анализ мировой литературы показал, что имеется лишь ограниченное число сведений о синтезе комплексов 2-амино-1-метилбензимидазола, и практически не изучены координационные соединения с переходными металлами таких лигандов, как 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанол-1 и вновь синтезированный лиганд N,N¹-бис-(1-метил-бензимидазол-2-ил) диаминометилена.

Настоящая диссертационная работа является законченным научным исследованием по систематическому созданию и исследованию строения и свойств ранее неизвестных координационных соединений Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cd(II) и V(IV,V) с полифункциональными 2-замещенными производными бензимидазола.

Связь диссертационной работы с тематическими планами НИР. Диссертационная работа выполнена в соответствии с планом НИР Национального университета Узбекистана на 2003-2007 гг. по направлению 2.17.2.9. «Теоретические и экспериментальные проблемы стереохимии координационных соединений» (№ Госрегистрации: 01.97.000.6218) фундаментального гранта Ф-3-142 «Целенаправленный синтез новых биологически активных веществ на основе ароматических и гетероциклических соединений, изучение их комплексообразующей способности, антимикробной и ростстимулирующей активности» ККРНТ РУз.

Цель исследования. Синтез, исследование, установление закономерностей комплексообразования одно- и смешаннолигандных координационных соединений ряда переходных металлов с полифункциональными 2-замещенными производными бензимидазола и выявление биологической активности ряда синтезированных комплексных соединений.

Задачи исследования. Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие задачи:

1. Получение биологически активных 2-замещенных производных бензимидазолов и их комплексов с переходными металлами.
2. Установление состава и способов координации комплексов, квантово-химический анализ полуэмпирическими квантово-химическими методами и определение центров локализации координационной связи в процессе конкурентной координации донорных атомов лиганда.
3. Изучение физических и химических свойств, спектральных характеристик и структурных особенностей синтезированных комплексов.
4. Определение возможных областей применения синтезированных соединений и выявление биологической активности и токсичности некоторых комплексов производных бензимидазолов.

Объект и предмет исследования. Объектами исследования являются производные бензимидазола - 2-амино-1-метилбензимидазол, N,N¹-бис-(1-метилбензимидазол-2-ил) диаминометилен и 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанол-1, переходные металлы - Zn(II), Co(II), Cu(II), Ni(II), Cd(II), V(IV,V). Предметом исследования было изучение строения и свойств синтезированных соединений.

Методы исследования. Рентгеноструктурный, элементный, термический анализы, ИК-, ПМР-спектроскопия, масс-спектрометрия, квантово-химический расчет.

Гипотеза исследования заключается в том, что многочисленность и многообразие полифункциональных комплексов металлов с биологически активными бензимидазолами обуславливает возможность использования их в качестве модели для установления фундаментальной зависимости «структура-свойство», при этом свойства координационных соединений не аддитивны свойствам составляющих компонентов и в ряде случаев наблюдается явление синергизма, а также возможно проявление принципиально новых свойств металлокомплексов.

Основные положения выносимые на защиту:

- разработка условий синтеза комплексных соединений Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Cd(II) и V(IV,V) на основе - 2-замещенных полифункциональных производных бензимидазола;
- квантово-химическая оценка конкурентной координации донорных центров 2-замещенных полифункциональных производных бензимидазола на основании орбитального и зарядового контролей;
- результаты рентгеноструктурного анализа новых синтезированных соединений на основе 2-амино-1-метилбензимидазола;
- синтез и результаты рентгеноструктурного анализа структуры 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1 и его комплексов;

- результаты спектроскопических исследований строения комплексных соединений N,N¹-бис-(1-метил-бензимидазол-2-ил) диаминометилена и установление закономерностей комплексообразования 2-замещенных полифункциональных производных бензимидазолов с металлами;

- результаты исследования антигликемической активности синтезированных комплексных соединений.

Научная новизна. Впервые синтезированы ряд одно- и смешаннолигандных комплексов переходных металлов на основе полифункциональных 2-замещенных производных бензимидазолов, которые охарактеризованы физико-химическими методами анализа (ИК-, ПМР-спектроскопия, масс-спектрометрия, элементный и термический анализы, РСА). Полуэмпирическими методами РМЗ рассчитаны электронные структуры молекул лигандов, определены их геометрические параметры, энергетические характеристики, на основании зарядового и орбитального контроля выявлены наиболее вероятные центры локализации координационной связи. Впервые расшифрована кристаллическая структура 1 лиганда и 9 новых комплексов 2-амино-1-метилбензимидазола и 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1. Установлена гипогликемическая активность низкотоксичного нового ацетилацетонатного комплекса 2-амино-1-метилбензимидазола с ванадием.

Научная и практическая значимость результатов исследования.

Разработанные условия и методики получения комплексов могут быть основой для практических рекомендаций по целенаправленному синтезу родственных координационных соединений, а также для прогнозирования свойств и строения комплексных соединений переходных металлов с производными 2-замещенных бензимидазолов. Результаты квантово-химического анализа реакционной способности лигандов, а также впервые полученные данные по кристаллическим структурам новых соединений могут быть использованы как справочный материал. Спектральные и структурные данные, результаты квантово-химического расчета, физико-химического анализа могут быть использованы при чтении лекций, проведении семинарских и лабораторных занятий по общим и специализированным курсам для бакалавров и магистрантов. Установленная гипогликемическая активность синтезированных комплексных соединений указывает на возможность их использования при разработке препаратов для лечения сахарного диабета.

Реализация результатов. Полученные экспериментальные данные внедрены в учебный процесс при чтении лекций, проведении семинарских и лабораторных занятий для бакалавров и магистрантов на кафедрах НУУз, ТХТИ. Результаты исследований электронной и кристаллической структуры лигандов позволяют проводить достоверную интерпретацию спектральных характеристик лигандов и их комплексов с переходными металлами и для объяснения биологической активности этого класса соединений и направленного синтеза биологически активных препаратов.

Апробация работы. Материалы диссертационной работы были доложены на Международных и республиканских научных и научно-практических конференциях: XXIV Международной Чугаевской конференции по

координационной химии (Санкт-Петербург, 2009), Международной конференции «Актуальные проблемы химии природных соединений» (Ташкент, 2009), Умумий ва ноорганик кимё институтининг 75 йиллигига бағишланган конференцияда (Ташкент, 2008), «Актуальные вопросы образования, науки и производства в фармации» (Ташкент, 2008), Научно-технической конференции молодых ученых «Умидли кимёгарлар» (Ташкент, 2010), Международной конференции «Актуальные проблемы развития биоорганической химии» (Ташкент, 2010), XXV Международной Чугаевской конференции по координационной химии (Суздаль, 2011).

Опубликованность результатов. Материалы диссертационной работы отражены в 14 публикациях, из них 5 статьи в научных журналах АН РУз и иностранных научных журналах и 9 тезисов докладов на республиканских и международных научных конференциях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав, заключения, выводов, списка цитированной литературы (из 139 наименований) и приложения. Работа изложена на 120 страницах компьютерного текста, содержит 12 таблиц и 25 рисунков. Акты испытаний, таблицы и рисунки, не вошедшие в основной текст, приведены в приложении.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

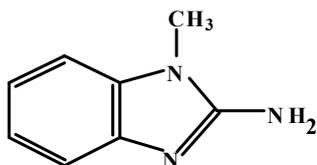
Во введении обосновывается актуальность темы, научно-практическое значение, определены цели и задачи исследования, приведены сведения об апробации и положениях, выносимых на защиту.

Первая глава содержит литературный обзор, посвященный анализу работ, опубликованных по синтезу и исследованию строения и свойств комплексных соединений переходных металлов с 2-замещенными производными бензимидазола.

Вторая глава посвящена описанию методик синтеза лигандов и комплексов металлов, применяемых методов и аппаратуры. Также приводятся результаты элементного анализа и физико-химических исследований синтезированных соединений.

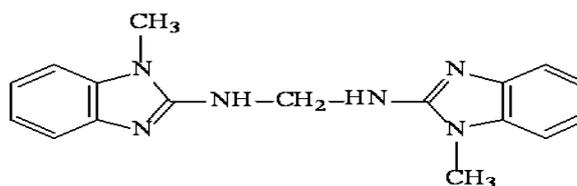
В третьей главе подробно обсуждаются результаты экспериментальных исследований.

При изучении комплексообразования полифункциональных БИ использовали лиганды, содержащие во 2 положении имидазольного цикла замещенную и незамещенную амино-группу (МAB и бисМAB), либо углеводородный заместитель с концевой гидроксильной группой.



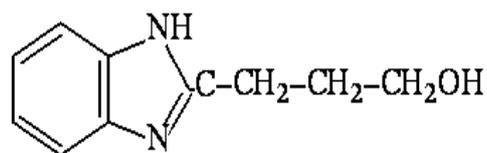
МAB (L^1)

2-амино-1-метилбензимидазол



бисМAB (L^2)

N, N¹ – бис –(1-метил-бензимидазол-2-ил)
диаминметилен



ПБИ (L³)

3-(бензимидазол-2-ил) – пропанол-1

Синтезированный впервые бис-бензимидазольный лиганд бисМАБ, содержит два аминокбензимидазольных фрагмента (МАБ), что подтверждается спектральными методами. В ИК-спектре L² исчезают характеристические полосы исходного МАБ $\nu_{as,s}(\text{NH}_2)$ в области 3400-3100 см⁻¹, $\delta(\text{NH}_2)$ при 1640 см⁻¹ и появляется ряд новых полос в областях 1220-1380, 750-890 см⁻¹, что свидетельствует об образовании бис-продукта. В ПМР-спектре соединения бисМАБ наблюдается триплет в области $\delta = 5,14$ мд ($J=5.50$ Гц), соответствующий CH₂-группе. В масс-спектре L² пик молекулярного иона ($m/z=306$) имеет малую интенсивность (0,4 %), вследствие интенсивного распада биспродукта под электронным ударом, с образованием двух устойчивых осколочных ионов ($m/z=160$ и $m/z=146$).

Молекула ПБИ имеет плоское строение со значительной делокализацией электронной плотности, длины связей в бензимидазольном фрагменте выравниваются, вследствие делокализации электронной плотности по циклу. Однако анализ данных, указывает на некоторое различие длин связей C-N (1.322(3)-1.393(3) Å), что обусловлено участием атомов азота в межмолекулярных взаимодействиях (рис. 1). В кристаллической структуре молекулы образуют трехмерную сетчатую структуру с помощью водородных связей между атомами азота бензимидазольного цикла и OH-группой (рис.1).

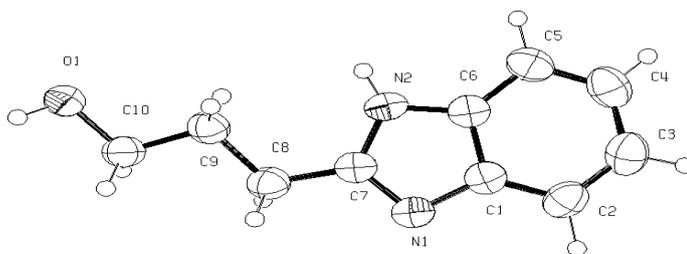


Рис.1. Строение молекулы 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1.

Оценка реакционной способности лигандов (бисМАБ и ПБИ)

Проведенные квантово-химические расчеты молекул лигандов выполнены полуэмпирическим методом PM3 с использованием программы Nupur Chem 7.0. Исходя из рассчитанных теплот образования выявлены наиболее устойчивые формы лигандов для которых было получено зарядовое распределение и проведен анализ орбитальных вкладов верхней занятой молекулярной орбитали (ВЗМО) и нижней вакантной (свободной) молекулярной орбитали (НСМО или НВМО).

Полученные на основании одного зарядового контроля данные указывают, что комплексообразование бисМАБ может идти по эндоциклическим атомам азота, имеющим максимальный отрицательный заряд, и по атому кислорода для

ПБИ. Однако на основании анализа орбитальных вкладов в ВЗМО (орбитальный контроль) атом азота одного бензимидазольного фрагмента бисМАБ является более реакционноспособным в реакциях комплексообразования, а для ПБИ - ВЗМО в основном локализована на эндоциклическом азоте гетероцикла. Установлено, что комплексообразование ПБИ следует рассматривать, как орбитально-контролируемую реакцию, а при исследовании конкурентной координации бисМАБ необходимо обоснованно применять как данные зарядового, так и орбитального контролей. Полученные данные подтверждены экспериментальными данными по изучению комплексообразования с выбранными лигандами.

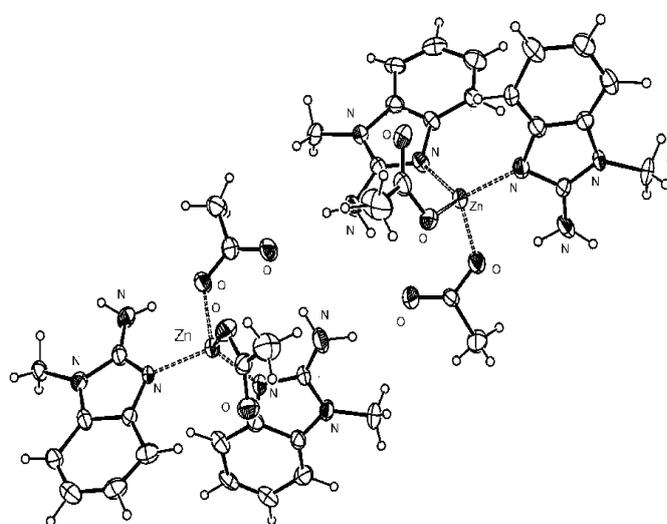
Комплексные соединения ацетатов и нитратов металлов с 2-амино-1-метилбензимидазолом (МАБ)

Наличие нескольких донорных атомов, возможность таутомерии, многообразие межмолекулярных взаимодействий обуславливают необходимость применения рентгеноструктурного анализа при рассмотрении координационных соединений МАБ. Получены новые комплексные соединения с МАБ и ацетатами цинка, кобальта, кадмия с неизоморфными кристаллическими решетками, разные по составу и строению (табл.1, рис.2).

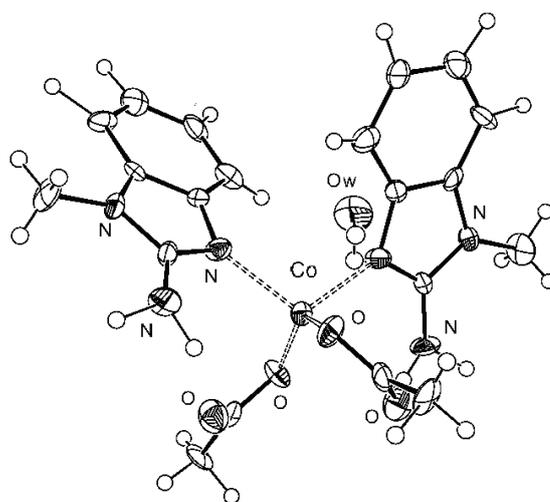
Таблица 1

Основные кристаллоструктурные параметры синтезированных комплексов

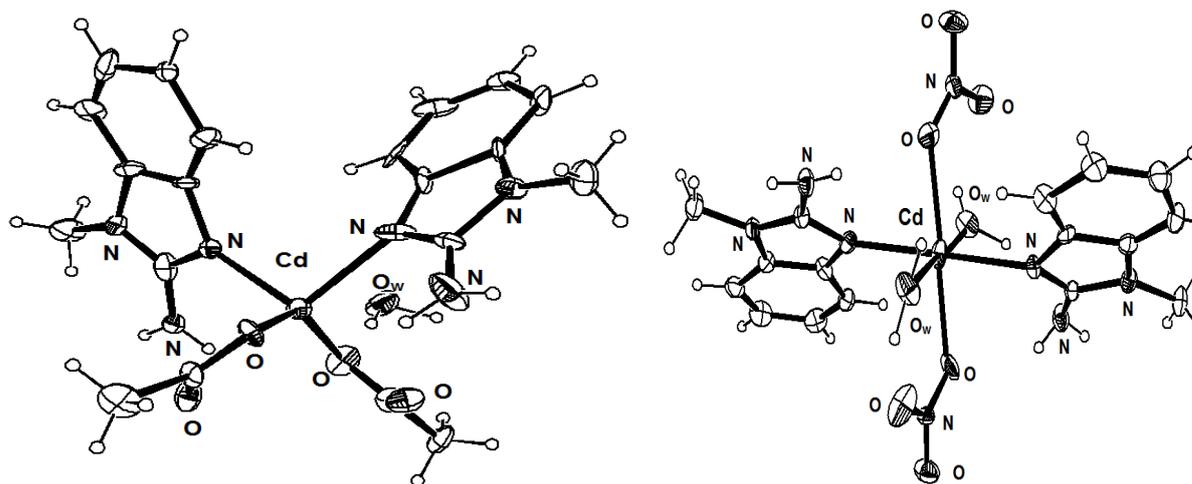
Соединения	<i>a</i> , Å	<i>b</i> , Å	<i>c</i> , Å	α°	β°	γ°	<i>Z</i>	Пр.гр
[ZnL ¹ ₂ (Ac) ₂]	15.530(2)	16.317(2)	17.534(2)	90	91.05(2)	90	2	2/m
[CoL ¹ ₂ (Ac) ₂] \cdot H ₂ O	8.655(2)	17.238(3)	14.524(2)	90	95.63(3)	90	4	P2 ₁ /n
[CdL ¹ ₂ (Ac) ₂] \cdot H ₂ O	8.995(18)	17.094(3)	14.475(3)	90	96.35(3)	90	4	Cc
[CdL ¹ ₂ (NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂]	7.428(15)	8.862(18)	9.027(18)	67.39(3)	75.07(3)	83.99(3)	2	P ₁
[V ₄ O ₁₂](L ¹ +H) ₂ 2H ₂ O	8.995(18)	11.367(2)	12.788(3)	101.98(3)	105.27(3)	108.08(3)	2	P-1
[VO(AcAc) ₂ L ¹]	8.271(10)	15.047(2)	16.108(2)	90	104.264(14)	90	4	P2 ₁ /n
[CoL ³ ₂ Cl ₂]	9.526(5)	14.339(5)	16.487(5)	90	102.26	90	4	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁
[CuCl ₄](L ³ +H) ₂	15.388(14)	10.493(8)	16.349(17)	90	110.806(3)	90	4	P2 ₁ /c
(L ³ +H)NO ₃	8.510(3)	8.8252(4)	16.513(7)	90	93.76(4)	90	4	P2 ₁ /n



[ZnL¹₂(Ac)₂]



[CoL¹₂(Ac)₂] \cdot H₂O



[CdL¹₂(Ac)₂]·H₂O

[CdL¹₂(NO₃)₂(H₂O)₂]

Рис. 2 Структура ацетатных и нитратных комплексов МАБ

Анализ длин связей и валентных углов молекул в комплексах с ацетатами металлов однозначно свидетельствует, что молекула МАБ находится в аминной таутомерной форме (рис. 2, табл. 2). Анализ геометрических параметров полиэдра металла для комплексов показывает, что в комплексе кобальта [CoL¹₂(Ac)₂]·H₂O наблюдается тетраэдрическая конфигурация центрального атома (угол L-Co-L равен 101,8°), а для комплекса цинка [ZnL¹₂(Ac)₂] – искаженно-тетраэдрическая (углы L-Zn-L варьируются от 99 до 113°). Для комплекса кадмия [CdL¹₂(Ac)₂]·H₂O увеличение радиуса иона ($r_{Co^{2+}} < r_{Zn^{2+}} < r_{Cd^{2+}}$), а также более сильное отталкивание электронов 4-d подуровня и лигандов приводит к большему расщеплению кристаллическим полем, что обуславливает искаженно-октаэдрическую конфигурацию (углы L-Cd-L находятся в пределах от 89 до 97 и от 108 до 150°) и реализацию псевдо-бидентатной координации ацетат-иона (табл. 2). Замена объемного ацетат-иона на нитрат-ион меньшего размера в структуре [CdL¹₂(NO₃)₂(H₂O)₂] способствует уменьшению искажений координационного полиэдра (углы L-Cd-L имеют значения от 86 до 93°), а причиной имеющих искажений полиэдра является отталкивание неподеленных электронных пар атомов кислорода.

В структурах всех синтезированных комплексов имеются внутримолекулярные связи (ВМВС) между аминогруппой МАБ и ацетатом. Независимая структурная единица комплекса состоит из двух комплексных частиц [ZnL¹₂(Ac)₂], которые отличаются по своим геометрическим параметрам и связаны друг с другом посредством водородных связей. В целом, система водородных связей приводит к формированию прочных трехмерных сеток в молекуле кристалла, что обуславливает высокую термическую стабильность соединения. Структура [CoL¹₂(Ac)₂]·H₂O также характеризуется наличием широкой сети межмолекулярных водородных связей (ММВС). В структуре комплекса содержится одна молекула кристаллизационной воды, которая участвует в образовании ММВС и на дериватограммах имеется эндо-эффект, связанный с удалением молекулы воды. Для [CdL¹₂(Ac)₂]·H₂O наблюдается

псевдо-бидентатная координация ацетата и структура включает молекулу гидратной воды, способствующую соединению димеров комплексов в ленты. В отличие от структур ацетатных комплексов МАБ в случае $[\text{CdL}^1_2(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ в структуру входят молекулы внутрисферной воды, нитрат координирован монодентатно, а координационный полиэдр Cd представляет собой октаэдр.

Таблица 2

Геометрические характеристики полиэдра металла в комплексах ацетатов МАБ

Соединение	Связь М- N _(эндо)	d, Å	Связь М-О _{ac}	d, Å	Угол N-M-O	ω, град
$[\text{CoL}^1_2(\text{Ac})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	Co-N	2.041(4)	Co-O	2.007(4)	N-Co-O	101.8(1)
$[\text{ZnL}^1_2(\text{Ac})_2]$	Zn-N	1.999(10) 1.994(9) 2.041(9) 1.989(9)	Zn-O	1.939(9) 1.956(9) 1.947(9) 1.997(9)	N-Zn-O	108.3(3) 113.4(3) 99.3(3) 113.4(3)
$[\text{CdL}^1_2(\text{Ac})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$	Cd-N	2.178(15) 2.261(18)	Cd-O	2.251(18) 2.298(18) 2.524(18) 2.51(2)	N-Cd-O	96.8(7) 107.7(7) 108.4(6) 95.3(6) 150.2(6) 90.1(7) 89.4(6) 149.8(6)
$[\text{CdL}^1_2(\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$	Cd-N	2.229(11) 2.241(10)	Cd-O	2.366(11) 2.388(11) 2.458(12) 2.627(15)	N-Cd-O	88.8(4) 90.9(4) 91.8(4) 88.5(4) 86.5(4) 93.4(4) 93.1(4) 87.0(4)

Комплексы ванадия с 2-амино-1-метилбензимидазолом (МАБ)

Смешаннолигандный комплекс $[\text{VO}(\text{L}^1)(\text{AcAc})_2]$ бидентатного ацетилацетонатного O,O-лиганда (AcAc) и монодентатного бензимидазольного лиганда (МАБ) имеет цис-октаэдрическую конфигурацию (рис.3) и может существовать в виде двух оптических изомеров. Хиральные молекулы цис-комплекса кристаллизуются в виде рацемата в элементарной ячейке кристалла. Металлоцентр находится в искаженной октаэдрической сфере координации N^1O^5 , включающей O-O-донорные атомы AcAc, оксо-группу и эндо-циклический атом азота МАБ. Углы вокруг атома ванадия имеют небольшие отклонения от 90° . Координационная связь локализована на N-атоме. Амино-группа копланарна с метильной группой (торсионный угол $\text{C}(\text{CH}_3)\text{-N-C-N}(\text{NH}_2)$ равен 3.67°) и участвует в водородных связях с кислородом карбонильной группы. Связь V-O, которая находится в транс-положении к оксо-группе и длиннее, чем связь V-O, находящаяся в цис-положении к оксо-группе, что связано с эффектом транс-влияния. ММВС соединяют молекулы в бесконечной цепи вдоль оси y.

Кристаллы $[\text{V}_4\text{O}_{12}](\text{L}^1+\text{H})_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ построены из комплексных анионов тетраоксиванадата и протонированных катионов МАБ. На рис. 3 представлен фрагмент структуры, где ванадий в составе циклического тетраоксиванадатного аниона имеет тетраэдрическую конфигурацию. Комплекс является

внешнесферным оиевым комплексом МАБ, который протонирован через эндоциклический азот. Для структуры характерна широкая сеть ММВС с участием молекул кристаллогидратной воды.

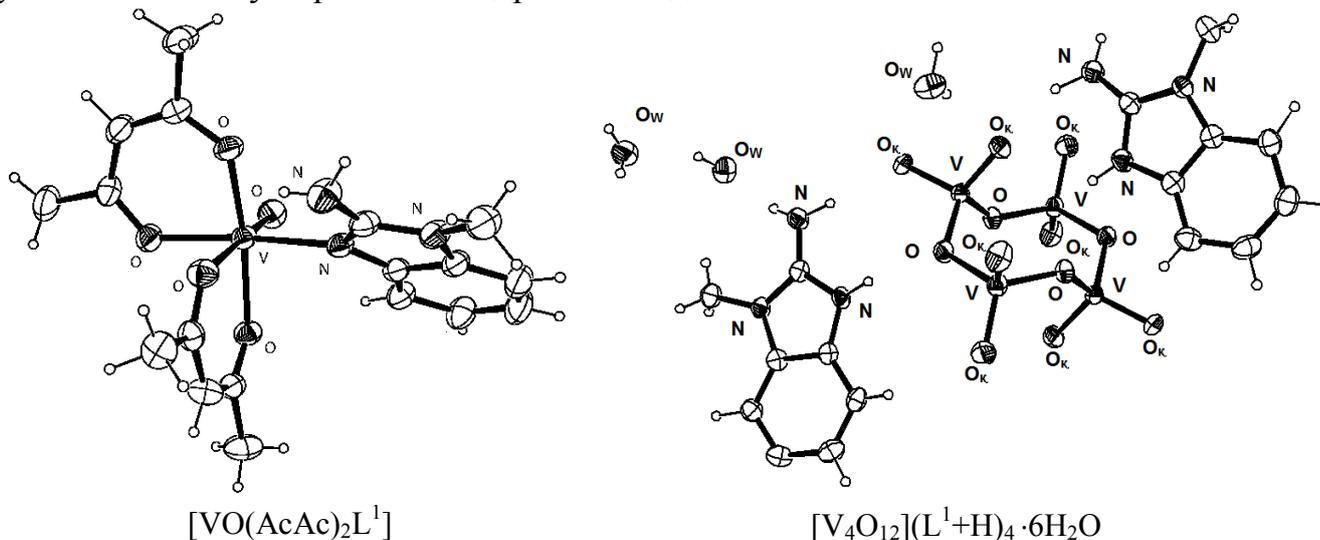


Рис. 3 Структура комплексов ванадия (IV, V) с МАБ

Комплексы 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1 (ПБИ)

Для более адекватного анализа конкурентной реакционной способности методом РСА исследовались аддукт ПБИ с азотной кислотой, внутри- и внешнесферные металлокомплексы ПБИ. Установлено, что в структуре аддукта с азотной кислотой при образовании катиона типа иона-бензимидазолия протон, который относится к «жестким» комплексообразователям (по теории ЖМКО), координируется к эндо-циклическому атому N, являющемуся более «мягким» координационным центром, а не через «жесткий» атом O. Аналогично в кислой среде образуется внешнесферный комплекс $[CuCl_4](L^3+H)_2$, состоящий из бензимидазолиевого катиона и анионного хлоридного комплекса меди с искаженно-тетраэдрической конфигурацией (табл.3). В этом случае центральным ионом можно рассматривать внутрисферный комплекс $[CuCl_4]^{-2}$, координирующий вокруг себя лиганды внешней сферы за счет электростатического притяжения, а также водородных связей (рис.4). В целом внедрение а кристаллическую структуру объемного аниона нитрата или тетрахлокоупрата приводит к нарушению планарного строения ПБИ.

Таблица 3

Геометрические характеристики полиэдра металла в комплексах ПБИ

Соединение	Связь M-N, M-Cl	d, Å	Угол N-M-Cl	ω, град
$CoL^3_2Cl_2$	Co-N	2.016(3)	N-Co-Cl	108.81(11)
		2.029(4)		116.52(12)
	Co-Cl	2.2403(15)		112.14(11)
		2.2640(15)		107.19(11)
$[CuCl_4](L^3+H)_2$	Cu-Cl	2.190(17)	Cl-Cu-Cl	98.10(8)
		2.241(17)		97.28(6)
		2.249(18)		99.43(7)

При комплексообразовании с более «мягкими», чем H^+ кислотами, такими как ионы Co^{2+} , характерна тетраэдрическая внутрисферная координация лиганда к металлу через пиридиновый азот. Хлорид-ионы координированы внутрисферно и связаны ММВС с ОН-группой (табл. 3, рис.4).

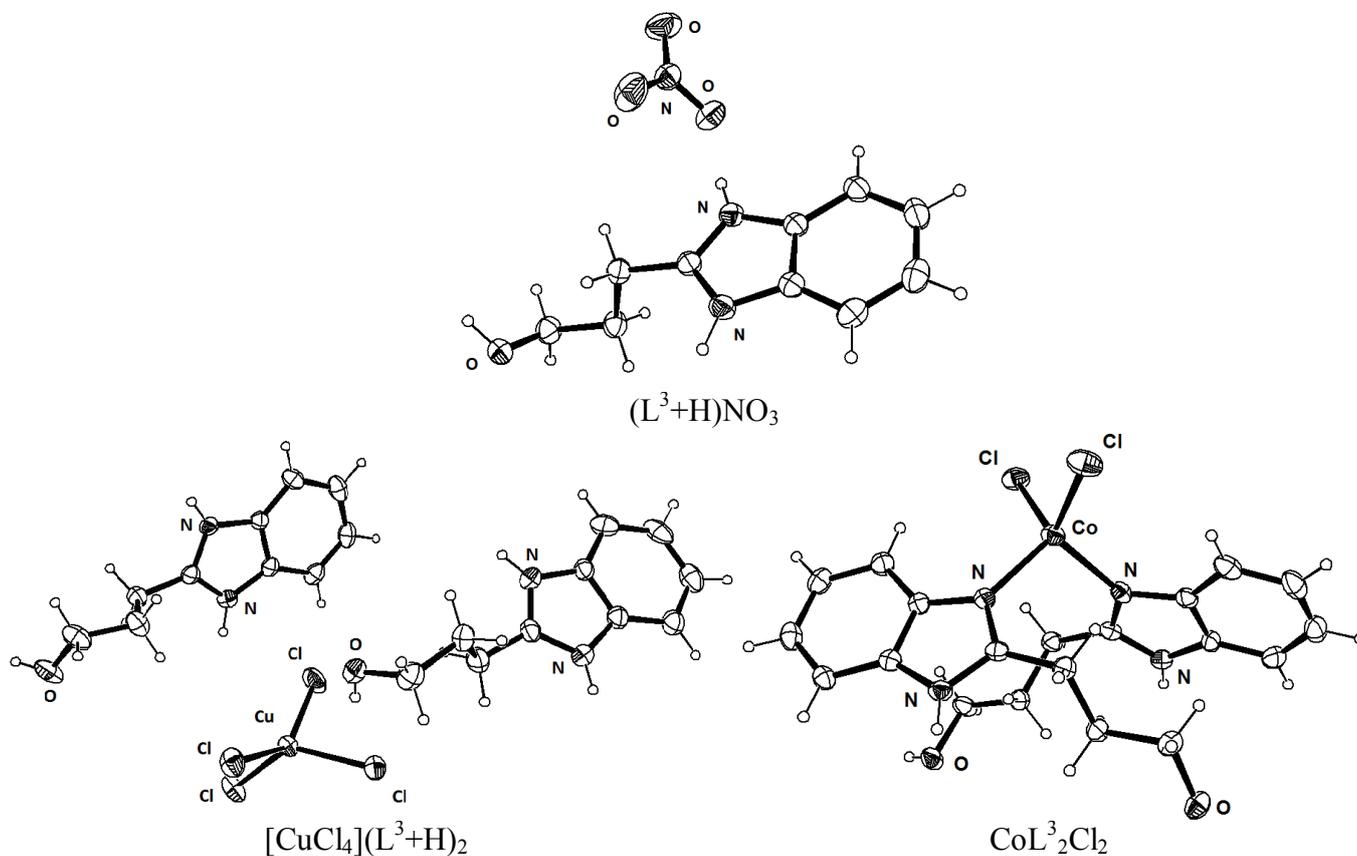


Рис. 4 Структура нитрата ПБИ и комплексов ПБИ с хлоридами кобальта и меди

Комплексные соединения $Co(II)$, $Ni(II)$, $Cu(II)$, $Zn(II)$ и $Cd(II)$ с N, N^1 -бис-(1-метил-бензимидазол-2-ил) диаминометиленом (бисМАБ- L^2)

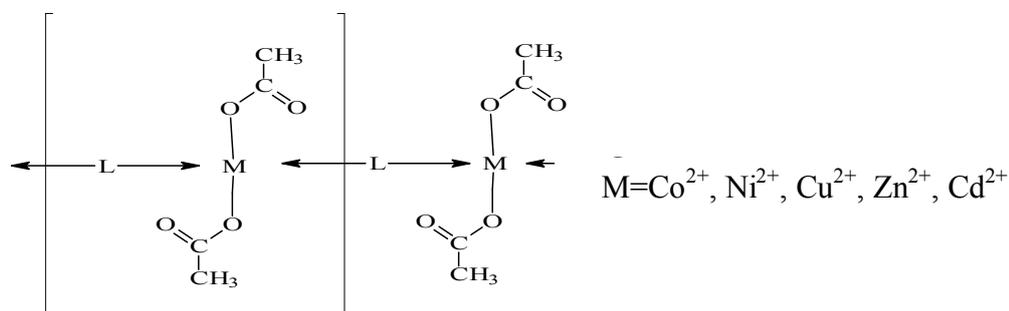
Сопоставление ИК спектров бисМАБ и его комплексов с хлоридами, нитратами и ацетатами $Co(II)$, $Ni(II)$, $Cu(II)$, $Zn(II)$ и $Cd(II)$ показало, что значительным изменениям подвергается положение полос поглощения симметричных валентных колебаний связи $C=N$ и валентных колебаний связи $C=C$ - гетероцикла, которые при переходе от свободного лиганда к комплексам смещаются в первом случае на $5-70\text{ см}^{-1}$ (табл. 4) соответственно. Наблюдается различное смещение полос поглощения группы $N-H$ ($10-80\text{ см}^{-1}$) с уширением сигналов в спектрах. Появление полос поглощения при $422-452$ и $467-578\text{ см}^{-1}$ в ИК-спектрах комплексов, отсутствующих в ИК- спектре лиганда, обусловлено валентными колебаниями связей $N-M$, что свидетельствует о координации гетероциклического лиганда к центральному иону через атомы азота бензимидазольного цикла, предсказанному квантово-химическими методами расчета. По результатам расшифровки ИК-спектров доказана монодентатная координация ацетата, как для комплексов L^1 , так и L^2 , $\Delta=[\nu_{as}(CO_2^-)-\nu_s(CO_2^-)]=220-263\text{ см}^{-1}$.

Таблица 4

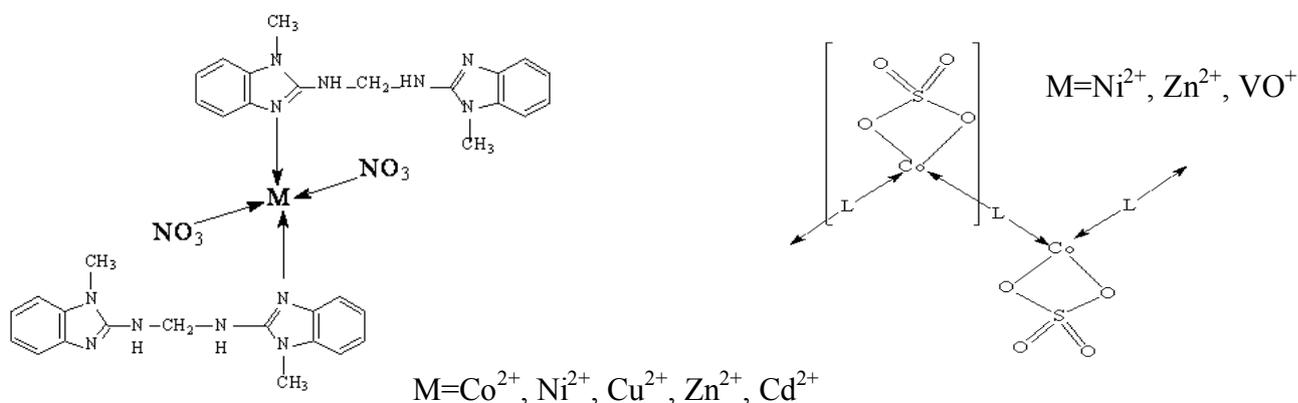
Основные частоты в ИК спектрах лиганда L^2 и его комплексов (см^{-1})

№	Название	ν_{NH} см^{-1}	Δ	$\nu_{\text{C=N}}$ см^{-1}	Δ	δ_{CH_2} см^{-1}	Δ	Другие частоты см^{-1}
1.	L^2	3380 3350 (ш.)	-	1600	-	1350	-	-
2.	$[\text{CoL}^2(\text{CH}_3\text{COO})_2]$	3320	50	1585	15	1340	10	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{COO}) - \nu_{\text{s}}(\text{COO})] = 1640 - 1395 = 245 \text{ см}^{-1}$
3.	$[\text{CuL}^2(\text{CH}_3\text{COO})_2]$	3310	60	1575	5	1335	15	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{COO}) - \nu_{\text{s}}(\text{COO})] = 1630 - 1400 = 230 \text{ см}^{-1}$
4.	$[\text{NiL}^2(\text{CH}_3\text{COO})_2]$	3290	10	1580	10	1340	10	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{COO}) - \nu_{\text{s}}(\text{COO})] = 1650 - 1390 = 260 \text{ см}^{-1}$
5.	$[\text{ZnL}^2(\text{CH}_3\text{COO})_2]$	3300	80	1550 1530	50 70	1400	50	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{COO}) - \nu_{\text{s}}(\text{COO})] = 1650 - 1380 = 270 \text{ см}^{-1}$
6.	$[\text{CdL}^2(\text{CH}_3\text{COO})_2]$	3280	70	1555 1530	45 70	1400	50	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{COO}) - \nu_{\text{s}}(\text{COO})] = 1630 - 1380 = 250 \text{ см}^{-1}$
7.	$[\text{CoL}_2^2](\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3370	10 20	1605	5	1360	10	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2) - \nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)] = 1510 - 1280 = 230 \text{ см}^{-1}$, $\delta_{\text{N-O}} = 995 \text{ см}^{-1}$
8.	$[\text{CuL}_2^2](\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	3300	80	1595	25	1380	30	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2) - \nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)] = 1510 - 1280 = 230 \text{ см}^{-1}$, $\delta_{\text{N-O}} = 995 \text{ см}^{-1}$
9.	$[\text{NiL}_2^2](\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	3220	50	1590	20	1390	40	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2) - \nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)] = 1480 - 1250 = 230 \text{ см}^{-1}$, $\delta_{\text{N-O}} = 995 \text{ см}^{-1}$
10.	$\text{ZnL}_2^2(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3290	20	1610	10	1350 (ш.)	-	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2) - \nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)] = 1470 - 1220 = 250 \text{ см}^{-1}$, $\delta_{\text{N-O}} = 995 \text{ см}^{-1}$
11.	$[\text{CdL}_2^2](\text{NO}_3)_2$	3280	70	1610	10	1360	10	$\Delta = [\nu_{\text{as}}(\text{NO}_2) - \nu_{\text{s}}(\text{NO}_2)] = 1470 - 1230 = 240 \text{ см}^{-1}$, $\delta_{\text{N-O}} = 995 \text{ см}^{-1}$
12.	$[\text{CoCl}_2\text{L}^2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3300	40	1580	10	1380	30	-
13.	$[\text{CuCl}_2\text{L}^2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3250		1620 1595	20 5	1370	20	-
14.	$[\text{NiCl}_2\text{L}^2(\text{H}_2\text{O})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3290	20	1530	10	1340	-	-
15.	$[\text{ZnCl}_2\text{L}^2(\text{H}_2\text{O})_2]$	маскирована		1580	20	1350	-	-
16.	$[\text{CoL}^2\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3280(ш.)	70	1600 1580(ш.)	20	1355	5	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4) = 1100, 1080, 1040$, $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_4) = 995 \text{ см}^{-1}$
17.	$[\text{CuL}^2\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3370(ш.)	10 20	1600 1570	30	1360	10	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4) = 1100, 1075, 1020$, $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_4) = 970 \text{ см}^{-1}$
18.	$[\text{NiL}^2\text{SO}_4]$	3380	- 30	1610	10	1355	5	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4) = 1200, 1070, 995$, $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_4) = 980 \text{ см}^{-1}$
19.	$[\text{ZnL}^2\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3320	60 30	1580	20	1350	-	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4) = 1100, 1080, 1040$, $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_4) = 995 \text{ см}^{-1}$
20.	$[\text{VOL}^2\text{SO}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3300- 3100(ш.)	80	1610	10	1350	-	$\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4) = 1110, 1075, 1020$, $\nu_{\text{s}}(\text{SO}_4) = 980 \text{ см}^{-1}$
21.	$[\text{VOL}^2(\text{AcAc})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	3300 3100	80	1610	10	1360	10	$\nu_{\text{as}}(\text{C=C, C=O}) = 1590, 1525$, $\nu_{\text{s}}(\text{V=O}) = 920$ (расш.) см^{-1}

По совокупности данных элементного анализа, термогравиметрии, ИК-спектроскопии и с учетом плохой растворимости в комплексах L^2 и ацетатов металлов предполагается образование полиядерных комплексов с монодентатной координацией ацетата и мостиковой координацией бисМАБ состава 1:1 (M:L).



Моноядерная структура комплексов состава 1:2 (M:L) характерна для нитратов и хлоридов. При этом в ИК-спектрах отчетливо наблюдаются полосы симметричных и ассиметричных валентных и деформационных колебаний нитратной группы. Также возможно образование комплексов с сульфатами, происходящее в результате замещения 2 хлорид ионов на сульфат-ион. В случае сульфатов образуются полиядерные плохо растворимые комплексы с бидентатной координацией сульфатного аниона и мостиковой координацией бисМАБ. В ИК-спектрах соответственно наблюдаются группа полос, характерных для ассиметричных и симметричных валентных колебаний сульфата.



В лаборатории кафедры фармакологии и клинической фармации Ташкентского фармацевтического института проводились испытания синтезированных препаратов на основе ряда комплексных соединений с ванадием. Синтезированный препарат ацетилацетоната ванадия с МАБ в дозе 25 мг/кг снижает уровень сахара в крови через 30, 60 и 120 минут на 18,5 %, 32,7 %, 13,6 % при острой гипергликемии у крыс, а в дозах 25-500 мг/кг не вызывает гибели подопытных животных, являясь малотоксичным. Препарат может быть рекомендован для дальнейших исследований на гипогликемическую и инсулинсберегающую активность при разработке терапевтических средств нового поколения при лечении сахарного диабета.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Синтезированы новый бис-бензимидазольный лиганд - N, N¹-бис-(1-метил-бензимидазол-2-ил) диаминометилен и 32 новых комплексных соединения хлоридов, нитратов, ацетатов, сульфатов и ацетилацетонатов Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II), V (IV, V) с 2-амино-1-метилбензимидазолом, 3-(бензимидазол-2-ил) - пропанолом-1 и вновь синтезированным лигандом. На основании изучения состава и строения соединений, установленных на основе ИК-, ПМР-спектроскопии, элементного и термического анализов, масс-спектрометрии, данных расшифровки 10 кристаллических структур методом РСА установлено, что протонирование и образование координационной связи с металлом в молекулах 2-замещенных полифункциональных бензимидазолов происходят через эндо-циклический азот гетероцикла.

2. Полуэмпирическим методом РМЗ исследовано электронное строение лигандов и установлено, что 2-замещенные полифункциональные бензимидазолы координируются к металлу преимущественно через атомы гетероциклического азота с наибольшей локализацией отрицательного заряда. На основании анализа орбитальных вкладов в бис-бензимидазольном лиганде установлено, что атом азота одного из двух бензимидазольных фрагментов является более реакционноспособным, что указывает на возможность образования как полиядерных, так и моноядерных комплексов.

3. Расшифрованы 6 кристаллических структур комплексов 2-амино-1-метилбензимидазола состава $ML_nA_2 \cdot mH_2O$ ($n=1-2$, $m=0-1$; $M=Co, Zn, Cd(II), V(IV)$; $A=Ac, AcAc$) и $[CdL_2(NO_3)_2(H_2O)_2]$. В зависимости от стереохимических, электронных факторов и при увеличении радиуса иона образуются октаэдрические ($[CdL_2(NO_3)_2(H_2O)_2]$, $VO(AcAc)_2L$), искаженно-октаэдрические ($CdL_2Ac_2 \cdot H_2O$), искаженно-тетраэдрические (ZnL_2Ac_2) и тетраэдрические ($CoL_2Ac_2 \cdot H_2O$) координационные соединения, а также ониевые комплексы $[V_4O_{12}](L+H)_4 \cdot 6H_2O$ полиядерных анионов циклотетраоксиванадата с тетраэдрической конфигурацией V(V).

4. Синтезированы и расшифрованы кристаллические структуры 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1 и его аддукта с азотной кислотой, а также двух металлокомплексов, имеющих тетраэдрическую конфигурацию вокруг центрального атома (CoL_2Cl_2 , $[CuCl_4](L+H)_2$), при этом хлорид-ионы координируются внутрисферно.

5. На основании ИК и ПМР спектроскопических исследований комплексов бис-бензимидазольного лиганда и данных квантово-химических расчетов показано, что состав и строение соединений определяется природой иона металла, ацидолиганда и дентатностью гетероциклического лиганда. Лиганд координируется как монодентатно, так и бидентатно, через атом гетероциклического азота, приводя к образованию как полиядерных комплексов ацетатов, сульфатов, хлоридов металлов, так и мономерных комплексов нитратов и некоторых хлоридов.

6. Испытания препаратов на основе комплексных соединений ванадия с 2-амино-1-метилбензимидазолом свидетельствуют, что препарат на основе

смешаннолигандного комплекса ацетилацетоната ванадия с 2-амино-1-метилбензимидазолом малотоксичен, обладает выраженной способностью к снижению уровня глюкозы в крови подопытных животных и при использовании в вышеуказанных дозах и может быть рекомендован для дальнейших более углубленных исследований на гипогликемическую активность.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Кадырова З.Ч., Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А. Кристаллическая структура 1-метил-2-аминобензимидазола с ацетатом цинка // Достижения и перспективы комплексной химической переработки топливно-минерального сырья Узбекистана: Тр. Респ. науч.-техн. конф. 7-8 октября 2008.-Ташкент, 2008. -С.36-38.

2. Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А., Суюнова Ф.Ш., Кадырова З.Ч. Комплексные соединения бис-производных аминобензимидазола с переходными металлами // Фармацияда таълим, Фан ва ишлаб чиқаришнинг долзарб масалалари: Материалы науч.-прак. конф. - Ташкент, 2008. -С.246.

3. Kadirova Z.Ch., Rahmonova D.S., Talipov S.A., Ashurov J.M., Parpiev N.A. Bis(acetylacetonato-κ²O,O') (2-amino-1-methyl-1H-benzimidazole-κ³N³) oxidovana - dium (IV) // Acta Crystallogr., Sect. E: Struct. Rep. Online. - Copengahen, 2009.- №7(65).-m819.

4. Kadirova Z.Ch., Rahmonova D.S., Talipov S.A., Parpiev N.A., Ashurov J.M. Oxovanadium (II) complexes with acetylacetone and benzimidazoles derivative // Физико-химические методы в химии координационных соединений: Тез. докл. XXIV Межд. Чугаевской конф. по координационной химии. 15-19 июня 2009. - Санкт-Петербург, 2009.-С.406-407.

5. Кадырова З.Ч., Парпиев Н.А., Рахмонова Д.С., Сманов Б. Квантово-химическое исследование некоторых производных бензимидазола как ингибиторов коррозии // Вестник НУУз. – Ташкент, 2009.-№3.-С.8-12.

6. Парпиев Н.А., Рахмонова Д.С., Суюнова Ф.Ш., Чепульский С.А., Кадирова З.Ч. Координационные соединения биометаллов с карболиновыми алкалоидами и производными бензимидазола // Актуальные проблемы химии природных соединений: Тр. конф. 18-19 марта 2009. - Ташкент, 2009.-С.240.

7. Рахмонова Д.С., Кадырова З.Ч., Парпиев Н.А., Талипов С.А., Шарипов Х.Т. Синтез и кристаллическая структура комплекса хлорида кобальта (II) с 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанолом-1 // Химия и химическая технология. – Ташкент, 2010.-№3.-С.26-29.

8. Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А., Кадырова З.Ч. Исследование диабетических свойств комплексов ванадия (IV,V) с 1-метил-2-аминобензимидазолом // Актуальные проблемы развития биоорганической химии: Тез. докл. Межд. науч. конф. 20-21 сентября 2010. - Ташкент, 2010.-С.64-65.

9. Ахмадалиева Н.Р., Рахмонова Д.С. Синтез и исследование разнометальных комплексов на основе тетраоксиванадатов [V₄O₁₂](МАБН)₂ 2H₂O

// Умидли кимёгарлар-2010: Тр. Респ. науч.-техн. конф. 6-9 апреля 2010. - Ташкент, 2010.-С.67-68.

10. Кадырова З.Ч., Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А., Талипов С.А. Синтез и исследование комплекса кобальта (II) с 3-(бензимидазол-2-ил)-пропанолом-1 // Актуальные проблемы инновационных технологий химической, нефтегазовой и пищевой промышленности: Тр. Респ. науч.-техн. конф. 28-29 октября 2010. - Ташкент-Кунград, 2010.-С.62-63.

11. Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А., Кадырова З.Ч., Талипов С.А. Синтез и кристаллическая структура комплекса хлорида Cu (II) с 3-(бензимидазол-2-ил)-пропанолом-1 // Вестник НУУз. – Ташкент, 2010.-№4.-С.45-48.

12. Рахмонова Д.С., Кадырова З.Ч., Талипов С.А. Рентгеноструктурное исследование молекулы 3-(бензимидазол-2-ил) - пропанола-1 // Вестник НУУз. – Ташкент, 2010.-№4.-С.49-52.

13. Кадирова З.Ч., Рахмонова Д.С., Парпиев Н.А., Ахмадалиева Н.А., Шарипов Х.Т., Джураев Ш. Комплексные соединения ванадия с 2-амино-1-метилбензимидазолом // Тез. докл. XXV Межд. Чугаевской конф. по координационной химии. 6-11 июня 2011. - Суздаль, 2011.-С.406-407.

14. Рахмонова Д.С., Кадирова З.Ч., Парпиев Н.А., Шарипов Х.Т. Кристаллическая структура комплексов 3-(бензимидазол-2-ил) – пропанола-1 с переходными металлами // Тез. докл. XXV Межд. Чугаевской конф. по координационной химии. 6-11 июня 2011. - Суздаль, 2011.-С.313-314.

Кимё фанлари номзоди илмий даражасига талабгор Рахмонова Дилноза Саломовнанинг 02.00.01 – Ноорганик кимё ихтисослиги бўйича «**Оралик металлларнинг кўпфункционал 2-алмашинган бензимидазоллар асосидаги комплекс бирикмалари**» мавзусидаги диссертациясининг

РЕЗЮМЕСИ

Таянч сўзлар: координацион бирикмалар, оралик металллар, бензимидазол ҳосилалари, квант-кимёвий ҳисоблашлар, гипогликемик активлик.

Тадқиқот объектлари: кўпфункционал 2-алмашинган бензимидазоллар, оралик металллар - Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II) ва V(IV,V).

Ишнинг мақсади: қатор оралик металлларнинг кўпфункционал 2-алмашинган бензимидазоллар асосидаги бир- ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг синтези, тадқиқоти, комплекс ҳосил бўлиш қонуниятларини ўрганиш ҳамда синтез қилинган комплекс бирикмаларнинг биологик фаоллигини аниқлаш.

Тадқиқот методлари: рентгенструктуравий, элемент, термик анализлар, ИҚ- ва ПМР-спектроскопияси, квант-кимёвий ҳисоблашлар.

Олинган натижалар ва уларнинг янгилиги: Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II) ва V(IV,V) хлорид, ацетат, сульфат, нитрат ва ацетилацетонатларининг бензимидазол ҳосилалари асосидаги 32 та янги комплекс бирикмалари синтез қилинди. Илк бор 10 та янги лиганд ва комплексларнинг кристалл тузилиши ўрганилди. Янги комплекс бирикмаларнинг таркиби, тузилиши, физик-кимёвий хоссалари ҳамда антигипогликемик фаоллиги ўрганилди.

Амалий аҳамияти: 2-алмашинган бензимидазол ҳосилалари асосида олинган комплекс бирикмаларни синтези учун яратилган синтез услублари ўхшаш бўлган координацион бирикмаларни мақсадли йўналтирилган синтез олиб бориш учун амалий тавсиялар сифатида ишлатиш мумкин, квант-кимёвий ҳисоблашлар асосида комплекс бирикмалардаги координациялашув марказини олдиндан айтиб бериш ҳамда аниқланган биологик фаоллик асосида уларни келажакда қандли диабет билан касаланган беморларда дори-дармон сифатида ишлатиш мумкин.

Татбиқ этиш даражаси ва иқтисодий самарадорлиги: олинган натижалар ЎзМУ кимё факультети ноорганик ва аналитик кимё кафедраси ва ТКТИ ноёб металллар технологияси ва аналитик кимё кафедрасининг ўқув жараёнига жорий қилинган.

Қўлланиш соҳаси: координацион кимё, аналитик кимё, органик кимё, тиббиёт.

РЕЗЮМЕ

диссертации Рахмоновой Дилноза Саломовны на тему: «**Комплексные соединения переходных металлов с полифункциональными 2-замещенными бензимидазолами**» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01-Неорганическая химия

Ключевые слова: координационные соединения, переходные металлы, производные бензимидазолы, квантово-химический расчет, гипогликемическая активность.

Объекты исследования: полифункциональные 2-замещенные бензимидазолы, переходные металлы - Co, Ni, Cu, Zn, Cd (II), V(IV,V).

Цель работы: Синтез, исследование, установление закономерностей комплексообразования одно - и смешаннолигандных координационных соединений ряда переходных металлов с полифункциональными 2-замещенными производными бензимидазола и выявление биологической активности ряда синтезированных комплексных соединений.

Методы исследования: рентгеноструктурный, элементный, термический анализы, ИК, ПМР-спектроскопия, квантово-химический расчет.

Полученные результаты и их новизна: синтезированы 32 новых комплексных соединений хлоридов, нитратов, ацетатов, сульфатов и ацетилацетонатов Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II), V(IV,V) на основе производных бензимидазола. Впервые расшифрованы кристаллические структуры 10 новых комплексов и лигандов. Определены состав, строение, физико-химические свойства, получены новые комплексы обладающие антигипогликемической активностью.

Практическая значимость: разработанные условия и методики получения производных 2-замещенных бензимидазолов и комплексов металлов на их основе могут быть основой для создания практических рекомендаций по целенаправленному синтезу родственных координационных соединений, а также для прогнозирования свойств и строения комплексных соединений переходных металлов с гетероциклическими лигандами. Установленная антигипогликемическая активность синтезированных новых комплексов ванадия указывает на возможность их использования при создании лекарственных препаратов для лечения сахарного диабета.

Степень внедрения и экономическая эффективность: полученные экспериментальные данные реализованы в учебном процессе на кафедре неорганической и аналитической химии НУУз, кафедре аналитической химии и технологии благородных металлов ТХТИ.

Область применения: координационная химия, аналитическая химия, органическая химия, медицина.

RESUME

thesis of Raxmonova Dilnoza Salomovna on the of scientific degree competition of the doctor of philosophy in inorganic chemistry, specialty 02.00.01-Inorganic chemistry, subject “**Complex compounds of transitional metals with the polyfunctional 2-substituted benzimidazoles**”

Key words: coordinated compounds, transitional metals, benzimidazole derivatives, quantum-chemical calculations, hypoglycemic activity.

Subject of inquiry: polyfunctional 2-substituted benzimidazoles, transition metals - Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II), V(IV,V).

Aim of inquiry: synthesis, study, establishment the complex formation laws of single and mixedligand coordination compounds of transitional metals with the polyfunctional 2-substituted benzimidazoles and determination of biological activity a number of synthesized complex compounds

Method of inquiry: X-ray structural, elemental, thermal analysis, IR-and PMR-spectroscopy, quantum-chemical calculations.

The results achieved and their novelty: 32 new complexes of chlorides, nitrates, acetates and acetylacetonates of Co, Ni, Cu, Zn, Cd(II), V(IV,V) on the base of benzimidazole derivatives were synthesized. For the first time the crystal structures of 10 complex and ligands were calculated. Composition, structure, physical-chemical properties were determined and new complexes possessing antihypoglycemic activity were obtained.

Practical value: developed conditions and methods of the 2-substituted benzimidazoles derivatives and its metal complexes on their base can be base for creation of practical recommendations on aimed synthesis of related coordinated compounds and also for forecast of the heterocyclic ligands and transitional metal complexes properties and structure. The determined antihypoglycemic activity of the synthesized new vanadium complexes has indicated on the possibility of their application at creation of medicinal preparations for diabetes treatments.

Degree of application and economical efficiency: obtained experimental data were realized in education processes on department of inorganic and analytical chemistry of NUU and department of analytical chemistry and technology of noble metals of TCTI.

Sphere of usage: coordination chemistry, analytical chemistry, organic chemistry, medicine.

Соискатель: