

**O'ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI HUZURIDAGI  
FAN DOKTORI ILMIY DARAJASINI BERUVCHI  
DSc.03/30.12.2019.K.01.03 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**O'ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI**

**NORMAMATOV ADHAMJON SA'DULLA O'G'LI**

**5-SULFOSALITSIL KISLOTA ASOSIDAGI YANGI KOORDINATSION  
BIRIKMALARNING SINTEZI, TUZILISHI, BIOLOGIK FAOLLIGI VA  
3D MODELLASH**

**02.00.01 – Noorganik kimyo**

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

**Toshkent – 2025**

**Kimyo fanlari bo‘yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi avtoreferati  
mundarijasi**

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

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

**Normamatov Adhamjon Sa’dulla o‘g‘li**

5-sulfosalitsil kislota asosidagi yangi koordinatsion birikmalarning  
sintezi, tuzilishi, biologik faolligi va 3D modellash----- **3**

**Нормаматов Адхамжон Саъдулла угли**

Синтез, строение, биологическая активность и 3D-моделирование  
новых координационных соединений на основе 5-  
сульфосалициловой кислоты----- **21**

**Normamatov Adhamjon Sadulla ugli**

Synthesis, structure, biological activity and 3D modeling of new  
coordination compounds based on 5-sulfosalicylic acid----- **41**

**E‘lon qilingan ishlar ro‘yxati**

Список опубликованных работ  
List of published works ..... **45**

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI HUZURIDAGI  
FAN DOKTORI ILMIY DARAJASINI BERUVCHI  
DSc.03/30.12.2019.K.01.03 RAQAMLI ILMIY KENGASH**

---

**O‘ZBEKISTON MILLIY UNIVERSITETI**

**NORMAMATOV ADHAMJON SA‘DULLA O‘G‘LI**

**5-SULFOSALITSIL KISLOTA ASOSIDAGI YANGI KOORDINATSION  
BIRIKMALARNING SINTEZI, TUZILISHI, BIOLOGIK FAOLLIGI VA  
3D MODELLASH**

**02.00.01 – Noorganik kimyo**

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

**Toshkent – 2025**

**Kimyo fanlari bo'yicha falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi mavzusi O'zbekiston Respublikasi Oliy ta'lim, fan va innovatsiyalar vazirligi huzuridagi Oliy attestatsiya komissiyasida B2024.2.PhD/K753 raqam bilan ro'yxatga olingan.**

Dissertatsiya O'zR FA Umumiy va noorganik kimyo institutida bajarilgan.

Dissertatsiya avtoreferati uch tilda (o'zbek, rus, ingliz (rezyume)) Ilmiy kengash veb-sahifasida (ik-kimyo.nuu.uz) va «Ziyonet» Axborot-ta'lim portalinφ (www.ziyonet.uz) joylashtirilgan.

**Ilmiy rahbar:**

**Ibragimov Aziz Baxtiyarovich**  
Kimyo fanlari doktori, professor

**Rasmiy opponentlar:**

**Umarov Baqo Bafayevich**  
Kimyo fanlari doktori, professor  
**Raxmonova Dilnoza Salamovna**  
kimyo fanlari nomzodi, dotsent

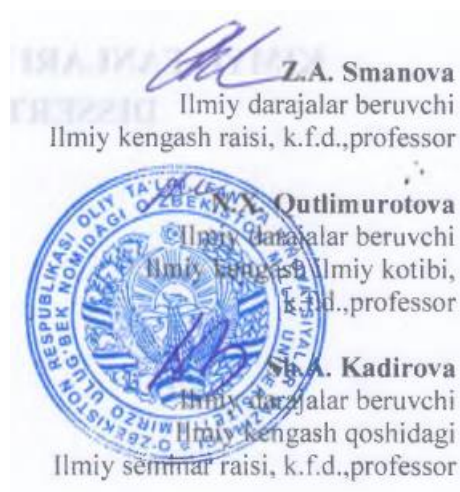
**Yetakchi tashkilot:**

Toshkent davlat farmatsevtika instituti

Dissertatsiya himoyasi O'zbekiston milliy universiteti huzuridagi ilmiy darajalar beruvchi DSc.03/30.12.2019.K.01.03 raqamli Ilmiy kengashning 2025 yil 22.02. soat 14<sup>00</sup> dagi majlisida bo'lib o'tadi. (Manzil: 100174, Toshkent shahri Universitet ko'chasi 4-uy. Tel.: (+99871) 246-07-88; (+99871) 227-12-24, faks: (+99871) 246-53-21; e-mail: [ilmiy\\_kengash@nuu.uz](mailto:ilmiy_kengash@nuu.uz))

Dissertatsiya bilan O'zbekiston Milliy universitetining Axborot-resurs markazida tanishish mumkin (№ 8 raqami bilan ro'yxatga olingan). Manzil: 100174, Toshkent shahri Universitet ko'chasi 4-uy. Tel.: (+99871) 246-07-88; (+99871) 227-12-24, faks: (+99871) 246-53-21.

Dissertatsiya avtoreferati 2025 yil "4" fevral kuni tarqatildi.  
(2025 yil " 3 " fevraldagi 5 raqamli reestr bayonnomasi).



## **KIRISH (falsafa doktori (PhD) dissertatsiyasi annotatsiyasi)**

**Dissertatsiya mavzusining dolzarbligi va zarurati.** Hozirgi kunda dunyoda kam zaharli, biologik faol ligandlarning o'tish metallari bilan hosil qilgan koordinatsion birikmalari tibbiyotda turli kasalliklarni davolashda, qishloq xo'jaligida o'stiruvchi moddalar, zamburug'larga qarshi vositalar, begona o'tlarga qarshi kurashish vositalari va hasharotlarga qarshi kurashish vositalari sifatida, sanoatda esa sorbsion xususiyatlarga ega bo'lgan metall-organik karkaslar sifatida keng qo'llanilmoqda. Ayniqsa, ilm-fanda ko'p funksiyali koordinatsion birikmalarga bo'lgan talab va qiziqish tobora ortib bormoqda. Shularni inobatga olgan holda, ayrim 3d metallarning tarkibida kislorod va azot tutgan 5-sulfosalitsil kislota va monoetanolamin bilan biologik faol, kam zaharli koordinatsion birikmalarini sintez qilish hamda qishloq xo'jaligi va tibbiyotda qo'llash uchun mo'ljallangan preparatlarni ishlab chiqish muhim amaliy ahamiyatga ega hisoblanadi.

Jahon ilmiy manbalarida benzoy kislotalari va ularning hosilalari asosida metallokomplekslar sintezi va tuzilishini o'rganish bo'yicha ko'plab ma'lumotlar mavjud. Xususan, oraliq metallarning ushbu ligandlar bilan hosil qilgan kompleks birikmalarining tuzilishi va xossalari metall va ligandlarning tabiatiga, sintez haroratiga, erituvchilarning ta'siriga va boshqa bir qator omillarga bog'liqligi qayd etilgan. Shuni inobatga olgan holda, zaruriy omillarni tanlash, zarur kompleks birikmalarni sintez qilish, ularning tuzilishini aniqlash, strukturaviy xossalari va biologik faolligi o'rtasidagi bog'liqlikni nazariy va amaliy jihatdan o'rganish muhim ilmiy ahamiyat kasb etadi.

O'zbekiston Respublikasida tibbiyot, farmasevtika, qishloq xo'jaligi, sanoat tarmoqlarini rivojlantirishi va global iqlim o'zgarishlari turli xildagi antibakterial vositalarga chidamli zararli patogen bakteriyalarni paydo bo'lishiga olib kelmoqda, ushbu patogen bakteriyalarga qarshi kurashish uchun kam zaharli, ko'p funksiyali koordinatsion birikmalarni sintezlash va ular ustida tadqiqotlar olib borilmoqda. Shuningdek O'zbekiston Respublikasini rivojlantirishga mo'ljallangan yangi O'zbekistonning taraqqiyot strategiyasida «tibbiyot va farmasevtika tarmoqlarini rivojlantirish» PF<sup>1</sup> ga qaratilgan ustuvor vazifalar belgilab berilgan. Shunga asoslanib so'nggi yillarda O'zbekiston hukumati farmatsevtika sanoatini rivojlantirish va dori vositalari sifatini ta'minlash bo'yicha xalqaro standartlarga erishishga jiddiy e'tibor qaratmoqda, jumladan, 2019-yilda "O'zbekiston Respublikasida farmatsevtika tarmog'ini yanada jadal rivojlantirish chora-tadbirlari to'g'risida"gi Prezident farmoni (PF-5707) va "Prezidentning farmatsevtika tarmog'ini yanada jadal rivojlantirish chora-tadbirlari to'g'risida"gi PQ-4554 sonli qarorida o'z ifodasini topgan.

Ushbu dissertatsiya ishining tadqiqot natijalari 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, 2018 yil 25 oktyabrdagi «O'zbekiston Respublikasida kimyo sanoatini jadal rivojlantirish chora-tadbirlari to'g'risida»gi PQ-3983-son, 2019 yil 3 apreldagi

---

<sup>1</sup> O'zbekiston Respublikasi Prezidentining Farmoni, 28.01.2022 yildagi PF-60-sonli "2022 — 2026-yillarga mo'ljallangan yangi O'zbekistonning taraqqiyot strategiyasi to'g'risida"gi farmoni

«Kimyo sanoatini yana-da isloh qilish va investitsion jozibadorligini oshirish» to'g'risidagi PQ-4265-son hamda 2020 yil 12 avgustdagi «Kimyo va biologiya yo'nalishlarida uzluksiz ta'lim sifatini va ilm-fan natijadorligini oshirish chora-tadbirlari to'g'risida»gi PQ-4805-sonli qarorlari, hamda mazkur faoliyatga tegishli boshqa me'yoriy-huquqiy hujjatlarda belgilangan vazifalarni bajarishga muayyan darajada xizmat qiladi.

**Tadqiqotning respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo'nalishlariga mosligi.** Mazkur tadqiqot respublika fan va texnologiyalar rivojlanishining VII. «Kimyo, kimyoviy texnologiyalar va nanotexnologiyalar» ustuvor yo'nalishiga muvofiq bajarilgan.

**Muammoning o'rganilganlik darajasi.** Dunyodagi yetakchi ilmiy jamoalardan 5-SSK va MEAlar ishtirokida olingan koordinatsion birikmalar, ularning tuzilishi, fizik-kimyoviy xossalarni o'rganish bo'yicha ishlarni Khan M., Kalshetty B.M., Lewandowski W., Furia E., Juillard J., Kiss T., Kukovinets O.S., Köse D.A., Mangrich A.S., Prakash D. va ularning jamoalari olib borishgan. Kembrij kristallografik ma'lumotlar (CCDC-2024) bazasi tahliliga binoan, 2024 yilgacha 5-SSKning 417 ta, metall komplekslari olingan va tuzilishi aniqlangan.

O'zbekistonda koordinatsion birikmalarning sintezi, tuzilishi, xossalari bo'yicha tadqiqotlar akademiklar N.A.Parpiyev va B.T.Ibragimov, professorlar X.T.Sharipov, B.B.Umarov, A.A.Shabilolov, T.A.Azizov, Sh.A.Kadirova, Z.Ch. Kadirova, X.X.To'rayev, Sh.Sh. Daminova, J.M.Ashurov va Sh.A. Kasimov rahbarligidagi olimlar jamoasi tomonidan amalga oshirilgan, fundamental va amaliy tomonlari bo'yicha izlanishlar davom ettirilmogda.

Adabiyot manbaalarining tahlili shuni ko'rsatadiki, 3d-metallarning 5-SSK bilan hosil qilgan birikmalarini o'rganish bo'yicha keng miqyosda tajriba natijalari bo'lishiga qaramasdan, Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) va Ag(I) ionlarining 5-SSK va MEA bilan metall komplekslari tarkib-tuzilish-xossa nuqtai-nazaridan biologik hususiyatlarini yetarli darajada o'rganilmagan. Shu sababli 5-SSK hamda MEA asosidagi yangi koordinatsion birikmalarni sintez qilish, ularning fizik-kimyoviy, biologik xossalarni va 3D modellash orqali tadqiq qilish alohida ilmiy qiziqish kasb etadi.

**Dissertatsiya tadqiqotining bajarilgan ilmiy-tadqiqot muassasasining ilmiy-tadqiqot rejalari bilan bog'liqligi.** Dissertatsiya tadqiqoti O'zR FA Umumiy va noorganik kimyo institutining CAM202201 raqamli "5-SSK supramolekulyar komplekslarining sintezi, tuzilishi, "in-vivo" va "in-silico" mikroblarga qarshi va o'simlik o'sishiga ta'sir faolligi" (2023-2024-yy) mavzusidagi amaliy layiha doirasida bajarilgan.

**Tadqiqotning maqsadi:** 5-sulfosalitsil kislota asosidagi yangi koordinatsion birikmalarning sintezi, tuzilishi, biologik faolligi va 3D modellashdan iborat.

**Tadqiqotning vazifalari:** 5-SSK va MEA ning Co(II), Ni(II), Cu(II), Mn(II), Zn(II) va Ag(I) ionlari bilan koordinatsion birikmalarini sintez qilish usullari va sharoitlarini aniqlash hamda ularning monokristallarini olish;

sintez qilingan koordinatsion birikmalarning tarkibi, tuzilish xususiyatlarini zamonaviy fizik-kimyoviy usullar yordamida tahlil qilish;

sintez qilingan koordinatsion birikmalarni kvant-kimyoviy usullar orqali energetik va geometrik ko'rsatgichlari, elektron tuzilishi, hamda reaksiya qobiliyatlarini aniqlash;

sintez qilingan koordinatsion birikmalarning biologik faolliklari, zaxarilik darajasi, hamda qo'llash sohaslarini amaliy va nazariy jihatdan aniqlash.

**Tadqiqot obyekti** 5-SSK, MEA, Co(II), Ni(II), Cu(II), Mn(II), Zn(II) va Ag(I) tuzlari, sintez natijasida olingan koordinatsion birikmalar, gram(+) va gram(-) bakteriyalar, koordinatsion birikmalarning tuzilishi va xossalari haqida dasturlar yordamida yaratilgan 3D modellari hisoblanadi.

**Tadqiqot predmeti** 3d metallar bilan 5-SSK, va MEA hosil qilgan komplekslar, ularning kristall tuzilishi, biologik va fizik-kimyoviy xossalari, yangi olingan birikmalarning zaxarilik darajasi, substrat-ligand supramolekulyar kompleksi, *in-silico* dasturlari yordamida yaratilgan 3D modellar.

**Tadqiqot usullari.** Dissertatsiya ishida rentgen tuzilish tahlili (RTT), termik tahlil (DTA), IQ-spektroskopiya, UB-spektroskopiya, biologik faolliklarni aniqlash usullari, yangi kvant-kimyoviy hisoblash usullaridan foydalanilgan.

**Tadqiqotning ilmiy yangiligi quyidagilardan iborat:**

Ilk bor 5-SSK va MEAning Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) va Ag (I) ionlari bilan diskret<sup>2</sup> va polimer tuzilishli 12 ta koordinatsion birikma sintez qilingan.

RTT, IQ-spektroskopiya, UB-spektroskopiya, DTA tekshirish usullari orqali olingan koordinatsion birikmalarning tarkibi, tuzilishi va xossalari aniqlanib, ulardan geksogonal oktaedrir geometriyada  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  diskret koordinatsion birikmalar,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$  va  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-SSK})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$  polimer koordinatsion birikmalar,  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ , va  $\{[\text{Cu}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$  aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalar ekanligi aniqlangan;

ilk bor sintez qilingan koordinatsion birikmalarning patogen bakteriyalarga qarshi yuqori selektiv ta'sirga ega ekanligi aniqlangan. "*In silico*" yondashuvi yordamida  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  va  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  tarkibli komplekslarning patogen bakteriyalar oqsiliga bog'lanish natijalari an'anaviy "*in vivo*" usul bilan tasdiqlangan;

ilk bor sintez qilingan monoligandli  $[[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$ ,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$  koordinatsion birikmalarning barqarorlik konstantalari spektroskopik usullar bilan o'rganildi va eritmalaridagi eng barqaror birikma  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  ekanligi aniqlangan;

sintez qilingan  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  va  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$

<sup>2</sup> Diskretlik (lotincha: discretus — ajratilgan, uzlukli) koordinatsion birikmalarda 1D, 2D yoki 3D ko'rinishda polimerlanish kuzatilmaganligini anglatuvchi tushuncha.

koordinatsion birikmalarning kristallografik ma'lumotlaridan foydalanib Hirshfeld sirt xususiyatlari aniqlangan;

sintez qilingan barcha koordinatsion birikmalar bakteriyalarga qarshi biologik faol hamda 4-sinf "kam zaharli" kimyoviy birikmalar toyifasiga kirishi aniqlangan.

#### **Tadqiqotning amaliy natijalari quyidagilardan iborat:**

5-SSKning Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II), Ag(I) ionlari bilan diskret, polimer, 5-SSK va MEA bilan Cu(II), Mn(II) ionlari ishtirokida aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalarini sintez qilishning qulay sharoitlari aniqlangan;

$\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  va  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$  larning tuzilish ma'lumotlari va barcha kristallografik kattalıkları Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga shunga o'xshash birikmalarni sintez qilish hamda ilmiy izlanuvchilar foydalanishi uchun joylashtirilgan;

5-SSK asosida olingan monoligandli koordinatsion birikmalarning antibakterial faolligi yuqori, dizenfiksiyalovchi xususiyatga ega va kam zaharli (4-sinf), aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalarining antibakterial faolligi esa past, ular ham kam zaharli (4-sinf) birikmalar toifasiga kirishi aniqlangan.

**Tadqiqot natijalarining ishonchliligi:** Sintez qilingan koordinatsion birikmalarning tarkibi va tuzilishi element analizi, RTT, DTA, IQ-spektroskopiya, UB-spektroskopiya usullari bilan, kvant-kimyoviy hisoblashlardan kristall tuzilishi Crystall Explorer 21.5 dasturida, elektron zichliklari (DFT) GAMESS 2023 dasturida, biologik faollıkları gram musbat bakteriyalar: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*; gram manfiy bakteriyalar: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytocalarda* sinovdan o'tkazilganligi bilan izohlanadi.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati:** 5-SSKning Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) ionlari bilan diskret koordinatsion birikmalari oktaedr ekanligi, misli koordinatsion birikmalarda esa Yan Teller effektini kuzatilganligi,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$  va  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-SSK})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$  polimer birikmalarida 5-SSKni markaziy atomlarni ko'prik bo'lib bog'lash xususiyati,  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ , va  $\{[\text{Cu}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$  birikmalarda ligandlarni markaziy atomga monodinant va bidentant birikishi, ular da 5-SSKni ko'prik vazifasini bajarish xususiyati tadqiqot natijalarining ilmiyligini izohlaydi.

Tadqiqot natijalarining amaliy ahamiyati diskret va polimer koordinatsion birikmalarning tuzilish ma'lumotlari va barcha kristallografik kattalıkları asosida Kembrij kristallografik tuzilish ma'lumotlar bazasiga 5 ta birikmaning joylashtirilganligi hamda 5-SSKni Cu(II) metali bilan sintez qilingan  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  va  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  tarkibli kompleks birikmalari asosida dizenfiksiyalovchi birikma sintez qilinganligi, ular orqali patogen bakteriyalarning ko'payishini oldini olish mavjudlarini nobud qilishi aniqlangan.

**Tadqiqot natijalarining joriy qilinishi.** 5-SSKni Cu(II) bilan sintez qilib olingan  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  tarkibli koordinatsion birikmaning tuzilishi, biologik faolligi va boshqa xususiyatlarga asoslanib O'zR Adliya vazirligi "Intelektual



mulk markazi” davlat muassasidan IAP 7856 raqami bilan qayd qilingan mualliflik guvohnomasi olingan.

5-SSKni Cu(II) bilan sintez qilib olingan  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$  va  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$  tarkibli KBlarining patogen bakteriyalarga qarshi dizenfiksiyalovchi xususiyatiga asoslanib “Muborak gazni qayta ishlash zavodi”ning konstruksiya va qurilmalarida korroziyani keltirib chiqaruvchi mikroorganizmlarga qarshi sinovdan o‘tkazildi va korroziya jarayoniga qarshi ingibitor sifatida amaliyotga joriy qilingan («Muborak gazni qayta ishlash zavodi» ning 22.11.2024 yildagi 985/GK-11 sonli ma’lumotnomasi). Natijada zavodning konstruksiya va qurilmalarida korroziya jarayonining sekinlashishi va uzoq vaqt ishchi holatda saqlab turishiga erishilgan.

5-SSK asosida sintezlangan  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  va  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$  tarkibli koordinatsion birikmalarni fazoviy tuzilishi, barcha kristallografik kattaliklari, hamda individualligiga asoslanib, mos ravishda Kembrij kristallografik ma’lumotlar bazasida №2384143, №2384144, №2384145, №2407466 va №2407467 dipozit raqamlari bilan ro‘yxatdan o‘tkazildi. Natijada ushbu birikmalarni sintez qilish va tuzilish ma’lumotlaridan butun dunyo olimlari foydalanish imkoniyatiga erishildi.

**Tadqiqot natijalarining aprobatsiyasi.** Mazkur tadqiqot ishi natijalari 12 ta jumladan, 7 ta xalqaro va 5 ta respublika ilmiy-amaliy konferensiyalarida ma’ruza qilingan va muhokamadan o‘tkazilgan.

**Tadqiqot natijalarining e’lon qilinganligi.** Dissertatsiya mavzusi bo‘yicha 14 ta ilmiy ish va bitta patent e’lon qilingan, shulardan O‘zbekiston Respublikasi Oliy attestatsiya komissiyasining falsafa doktori (PhD) dissertatsiyalari asosiy ilmiy natijalarini chop etish tavsiya etilgan ilmiy nashrlarda 4 ta ilmiy maqola, jumladan, 2 ta respublika va 2 ta xorijiy jurnallarda nashr etilgan.

**Dissertatsiyaning hajmi va tuzilishi.** Dissertatsiya tarkibi kirish, to‘rtta bob, xulosa, foydalanilgan adabiyotlar ro‘yxati va ilovalardan iborat. Dissertatsiyaning hajmi 101 betni tashkil etadi.

## DISSERTATSIYANING ASOSIY MAZMUNI

**Kirish** qismida dissertatsiya ishining dolzarbligi va zarurati asoslangan, tadqiqotning maqsad va vazifalari, ob’ekti va predmeti tavsiflangan, Respublika fan va texnologiyalari rivojlanishining ustuvor yo‘nalishlariga mosligi ko‘rsatilgan, tadqiqotning ilmiy yangiligi va amaliy natijalari bayon qilingan, olingan natijalarning ilmiy va amaliy ahamiyati yoritilgan, natijalarni amaliyotga joriy qilish, nashr etilgan ilmiy ishlar va dissertatsiya tuzilishi bo‘yicha ma’lumotlar keltirilgan.

Dissertatsiyaning **“5-SSK va MEAning ayrim 3d metallari bilan koordinatsion birikmalari”** deb nomlangan birinchi bobida 5-sulfosalitsil kislota va monoetanolaminning tabiatda tarqalishi, fizik-kimyoviy xususiyatlari, biologik faolliklari, eng muhim ishlatilish sohalari haqida ma’lumotlar keltirilgan. Tahlil natijalariga ko‘ra, biologik faolliklari yuqori va unga bog‘liq ravishda foydalanish sohalari keng bo‘lgan koordinatsion birikmalarga bo‘lgan talab hamda qiziqishlar kundan-kunga ortib bormoqda. Shuningdek, Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II),

Ag (I) metallarining koordinatsion birikmalar hosil qilish qobiliyati, biologik faolliklari va fizik-kimyoviy xossalari sintez sharoiti aniqlangan. 5-SSKda oltita donor xususiyatli markazning mavjudligi uni o'ndan ortiq tuzilishga ega bo'lgan koordinatsion birikmalarning sintezlanishi mumkinligi bayon qilingan.

Dissertatsiyaning **“Tadqiqot obyektlar, sintez jarayonlari va uslublari”** deb nomlangan ikkinchi bobida koordinatsion birikmalarning sintezi, element tahlili, reaksiya unumi, suyuqlanish haroratlari, birikmalarning tuzilishini tahlil qilishning zamonaviy fizik-kimyoviy usullari, 3D modellashtirish usullari, biologik faolliklar va zaxarlilik darajasini aniqlash jarayonlari yoritilgan.

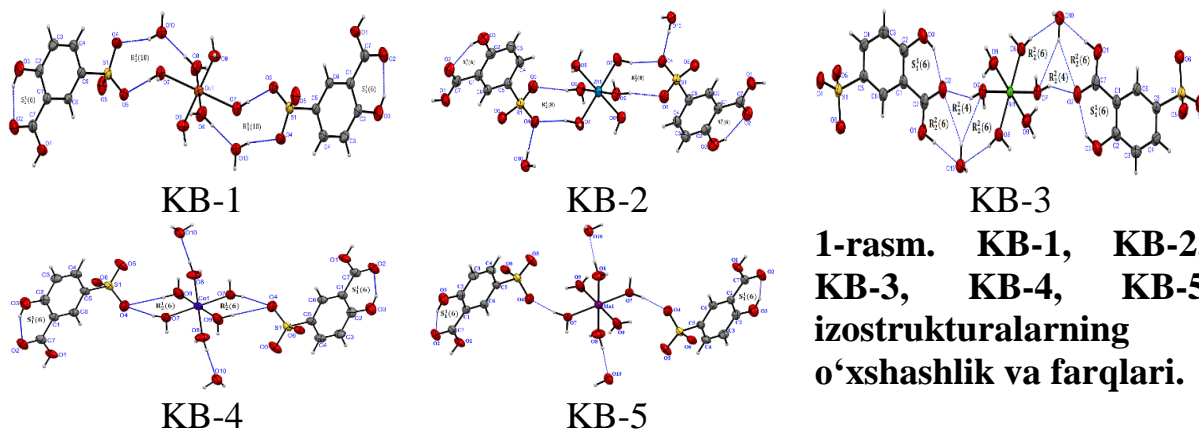
Koordinatsion birikmalarni tarkibi va tuzilishini sodda va qulay ifodalash uchun KB-1, 2, 3...12 tartibda idenfikatsiyalandi. KB-1:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-2:  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-3:  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-4:  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-5:  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-6:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ , KB-7:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$ , KB-8:  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]\}_n$ , KB-9:  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-SSK})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$ , KB-10:  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ , KB-11:  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ , KB-12:  $\{[\text{Cu}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ .

Dissertatsiya ishning **“Olingan koordinatsion birikmalarning molekulyar va kristall tuzilishlari, fizik-kimyoviy xossalari”** deb nomlangan uchinchi bobida sintez qilingan koordinatsion birikmalarning tuzilishi va xossalarini o'rganish natijasida olingan amaliy va nazariy ma'lumotlar keltirilgan.

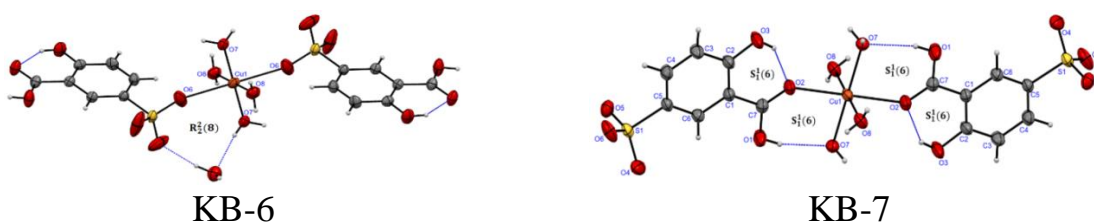
Tadqiqot davomida koordinatsion birikmalarning tuzilishi RTT yordamida o'rganilgan va 12 ta birikmaning tuzilishi va tarkibining individualligi isbotlangan:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSK})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})_2]$ , koordinatsion birikmalari geksogonal oktayedirik geometriyada diskret ekanligi aniqlangan,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSK})]\}_n$ ,  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-SSK})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$ ,  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSK})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$  va  $\{[\text{Cu}(5\text{-SSK})_2](\text{MEA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$  koordinatsion birikmalar esa polimer tuzilishli ekanligi aniqlangan.

KB-1dan KB-5 gacha bo'lgan birikmalar ichki sferasidagi metall ionlariga oltita suv molekulari koordinatsialangan bo'lib, tashqi sferasidagi ikki molekula suv hamda ikki molekula 5-SSK anioni vodorod bog'lari orqali ichki sferaga bog'lanib, izostrukturalarni hosil qilganliklari isbotlangan (1-rasm).

Tadqiqot davomida MEAning kimyoviy reaksiya muhitiga ta'siri etishi reaksiya maxsulotining turlicha bo'lishiga olib kelganligi aniqlangan. KB-7ning sintezida (5-SSK va MEA 1:1 mol nisbatda) 5-SSKni sulfo guruhini MEA bilan vaqtincha biloklanishi natijasida, markaziy atom Cu(II) ioniga ikkita 5-SSKni karbonil guruhi orqali monodentant koordinatsialangan, lekin sulfo guruhlari proton yo'qotishi hisobiga Cu(II) ionini neytrallaydi, qolgan koordinatsion sonini to'rtta suv molekulari to'ldirgan va misning umumiy koordinatsion soni oltiga teng bo'lgan. KB-6 sintezida esa reaksiya jarayonida MEA ishlatilmagan, bunda ham misning koordinatsion soni oltiga teng bo'lib ikkita 5-SSK sulfo guruhlari orqali misga ion bog'i orqali birikkanligi aniqlangan, qolgan koordinatsion sonni to'rt molekula suv to'ldirgan, bir molekula suv tashqi sferada bo'lib, ichki sferaga H-bog'lari orqali birikkan (2-rasm).

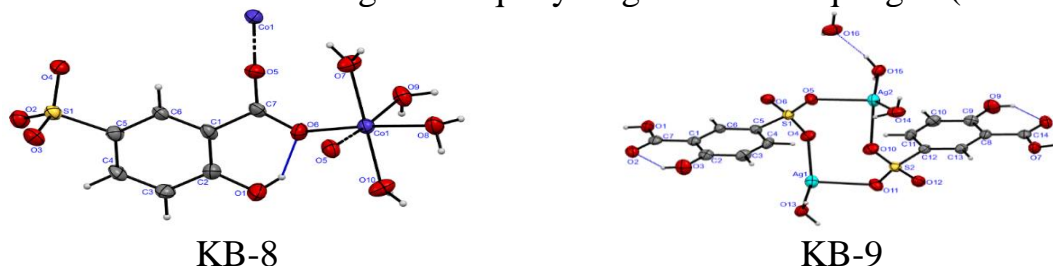


**1-rasm. KB-1, KB-2, KB-3, KB-4, KB-5 izostrukturalarning o‘xshashlik va farqlari.**



**2-rasm. Sintez jarayonidagi MEA ishtirokisiz KB-6, ishtiroki bilan KB-7larning tuzilishidagi farqlar**

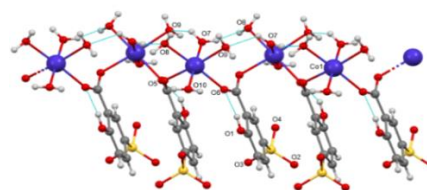
Tadqiqotlar davomida 5-SSK asosida monoligandli polimer koordinatsion birikmalar sintezlandi, KB-8ning sintezida MEA qo‘llanilishi natijasida koordinatsionalanish korboksil guruh orqali yuzaga kelishi aniqlangan (3-rasm).



**3-rasm. 5-SSK Co(II) va Ag(I) ishtirokida olingan polimer koordinatsion birikmlari assimetrik birlikda ifodalandi.**

KB-8 polimerning RTTga ko‘ra har bir Co(II) ioni ikki qo‘shni 5-SSKning karboksilat guruhlardan bittadan kislorodlari va to‘rtta suv molekulasini tomonidan koordinatsiyalangan, bunday koordinatsiya natijasida kristalda [001] yo‘nalishda polimer zanjir hosil bo‘ladi (4-rasm). Zanjirlarni qadoqlash natijasida koordinatsion polimer  $\{[Co(5-SSK)(H_2O)_4]\}_n$  yoki katena-(tetra-aqua-(m2-5-sulfosalitsilato-O,O’)-kobalt(II) birikmasi hosil bo‘ldi.

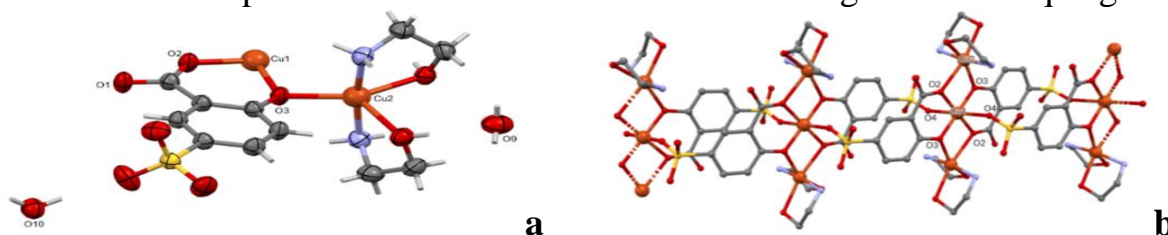
$\{[Cu_3(5-SSK)_2(MEA)_4](H_2O)_2\}_n$  tarkibli aralash-ligandli koordinatsion polimerning RTT tahliliga ko‘ra polimer birikma P-1 triklirik tizimida kristallandi. Birikmaning assimetrik birligi karboksilat guruhining kislorod atomi O2 va gidroksil guruhi kislorod atomi O3 bilan ikki tomondan koordinatsiyalangan Cu1, ikkita MEA molekulasining kislorod va azot atomlari orqali besh a‘zoli xalqa hosil qilib xelatlangan Cu2 ionidan iborat (6-rasm, a).



**4-rasm. KB-9ning [001] yo‘nalishi bo‘yicha harakatlanuvchi polimer zanjiri**

CuI inversiya markazida joylashgan, bo‘lib, ushbu markaz orqali simmetrik transformatsiya natijasida 6,b-rasmda ko‘rsatilgan bimolekulyar polimer birlik hosil bo‘ladi. Unda ligand molekulasini ikki qo‘shni CuI ionini bir uchida O2, O3 atomlari va ikkinchi uchida sulfoguruhning O4 atomlarining koordinatsion bog‘lari orqali birikishi natijasida cheksiz takrorlanadigan polimer zanjirni hosil qildi (1-jadval). Ikkita suv molekulasini tashqi sferada joylashib, H-bog‘lanish orqali polimer zanjirga bog‘langan.

Har ikkala Cu(II) ionining koordinatsion soni oltiga teng bo‘lib, Janh-Teller effekti tufayli har bir Cu(II) ioni buzilgan oktaedr shaklga ega (1-jadval). Polimer koordinatsion birikmaning 1D tarmoqli zanjirlari orasidagi H-bog‘larning murakkab tizimi sababli, ushbu polimer koordinatsion birikma fazoda yo‘naluvchan 3D polimer koordinatsion birikmalar toifasiga kirishi aniqlangan.



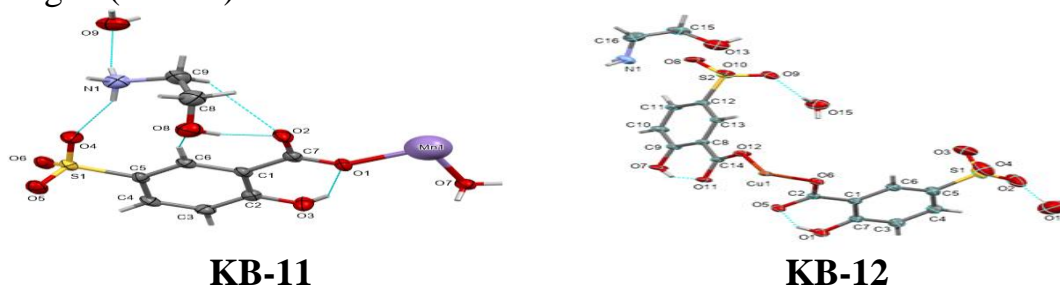
6-rasm. KB-10ning ORTEP tuzilishi: assimetrik qism (a) va 1-D bimolekulyar polimer zanjiri (b).

1-jadval.

Polimer birikmada tanlangan bog‘lanish masofalari va burchaklari

Bog‘	masofa/Å	Bog‘	masofa/Å	Burchak	Gradus
Cu1-O2	1.9004(19)	Cu2'-O7	2.304(2)	O2-Cu1-O3	85.67(8)
Cu1-O3	1.9376(18)	Cu2'-O8	2.124(2)	O3-Cu2-O2	71.23(7)
Cu2-O2	2.386(19)	Cu2-N1	1.972(3)	O3-Cu2-O7	118.48(8)
Cu2-O3	2.0769(19)	Cu2-N2	1.968(2)	N2-Cu2-N1	172.005(11)
Cu2'-O2	2.386(19)	Cu2'-N1	1.972(3)	N2-Cu2-O3	90.25(9)
Cu2'-O3	2.0769(19)	Cu2'-N2	1.968(2)	N2-Cu2-O8	83.475(9)

Tadqiqotlar davomida 5-SSKga nisbatan MEA turli konsentratsiyalarda olinishi natijasida aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalar ham sintezlangan (4-rasm).

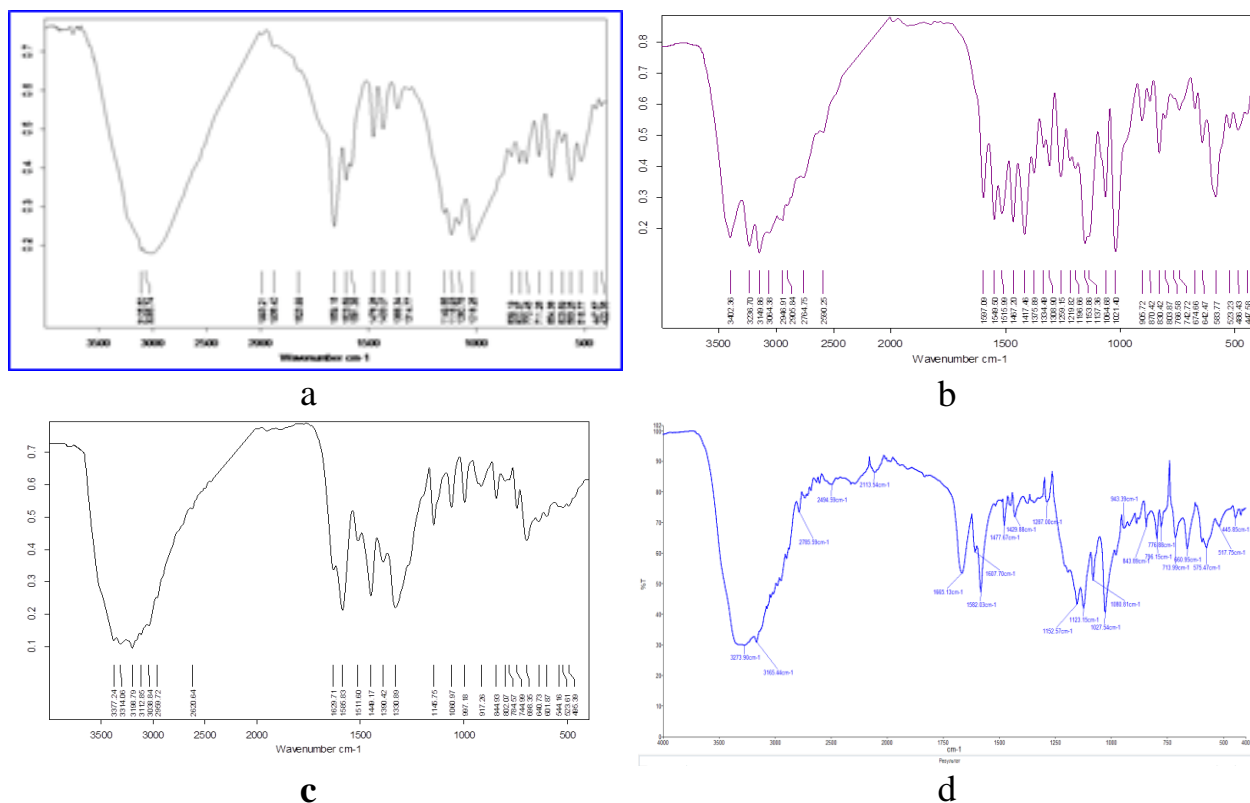


4-rasm. 5-SSK va MEA ishtirokida olingan aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalar (asimmetrik birlikda ifodalangan)

Birikmalarning tuzilishi IQ-spektroskopik usullar bilan ham o‘rganilgan va 5-SSKning IQ spektri bilan solishtirilgan. Sintez qilingan KB-1, KB-2, KB-3, KB-4, KB-5, KB-7, KB-8 va KB-9 birikmalarning asosiy tarkibi 5-SSK bo‘lganligi uchun, ularning IQ spektrlarida diyarli katta farqlar kuzatilmaydi (2-jadval).

<b>2-jadval. Sintezlangand koordinatsion birikmalarning IQ spektrlari, <math>\nu</math>-valent tevranişlar, <math>\delta</math>-difformatsion tebranişlar</b>										
Birikma	$\nu$ (-OH)	$\nu$ (-NH)	$\nu$ (C-H)	$\nu$ (C=O)	$\nu$ (xalqa)	$\nu$ (S=O)	$\delta$ (S=O)	$\delta_{as}$ (C-H)	$\delta_s$ (C-H)	$\nu$ (O-M)
5-SSK	3106		3066	1659	1603 1581	1478 1433	1366	1150 1117	1081 1018	
KB-1	3162			1677	1610 1585	1482 1429	1380	1189 1153	1082 1027	575 518
KB-2	3370			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1203 1154	1080 1032	586 534
KB-3	3371			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1204 1155	1080 1032	586 534
KB-4	3350			1699 1663	1610 1586	1474 1437	1320 1304	1151 1125	1078 1028	571
KB-5	3369			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1203 1128	1080 1032	586 570
KB-6	3111		3071	1660	1607 1581	1478 1431	1364 1348	1152 1122	1081 1023	572 514
KB-7			3096	1659	1609 1584	1475 1421	1373 1315	1182 1142	1078 1022	568 517
KB-8	3383			1663	1609 1585	1475 1431	1338 1296	1180 1120	1077 1022	566 508
KB-9	3388			1658	1614 1585	1477 1425	1349 1288	1184 1122	1078 1031	580 540
KB-10	3402	3237 3150	3064	1597	1550	1467 1417	1335 1308	1197 1154	1065 1021	584 523
KB-11	3377 3314	3197 3113	3039	1630 1586	1512	1449 1390	1331	1146	1061	698 602
KB-12	3274	3165		1665	1582	1478 1430	1287	1153 1123	1081 1028	575 518

Spektroskopik tahlilga ko'ra 5-SSK va koordinatsion birikmalarning tarkibidagi –OH guruhlarini 3106  $\text{cm}^{-1}$  dan 3402  $\text{cm}^{-1}$  sohalar oralig'ida o'tkir yutilishlar bilan valent tebranishlari, aromatik xalqalardagi C-H bog'lari 3039  $\text{cm}^{-1}$  dan 3096  $\text{cm}^{-1}$  sohalar oralig'ida valent tebranishlarni qayd etgan. Uning asimmetrik difformatsion tebranishlari 1204  $\text{cm}^{-1}$  dan 1117  $\text{cm}^{-1}$  sohalarda, simmetrik difformatsion tebranishlari 1081  $\text{cm}^{-1}$  dan 1018  $\text{cm}^{-1}$  sohalarda yuzaga keldi. Birikmalar tarkibidagi karbonil (C=O) guruhning valent tebranishlari 1699  $\text{cm}^{-1}$  dan 1586  $\text{cm}^{-1}$  sohalar orasida kuzatilgan, shuningdek S=O bog'ining valent tebranishlari 1482  $\text{cm}^{-1}$  dan 1390  $\text{cm}^{-1}$  sohalarda, difformatsion tebranishlari esa 1380  $\text{cm}^{-1}$  dan 1287  $\text{cm}^{-1}$  gacha oralig'ida kuzatilgan. KB-10, KB-11 va KB-12 birikmalar tarkibidagi MEAgga tegishli bo'lgan amin guruhining valent tebranishlari 3217  $\text{cm}^{-1}$  dan 3113  $\text{cm}^{-1}$  sohalar oralig'ida kuzatilgan (7-rasm). Koordinatsion birikmlarda markaziy atom bilan birikkan M-O bog'lari 698  $\text{cm}^{-1}$  dan 508  $\text{cm}^{-1}$  sohalar oralig'ida tebranishlari kuzatilgan.



**7-rasm. 5-SSKning (a), KB-10ning (b), KB-11ning (c), KB-12ning (d) IQ spektrlari**

Tadqiqotlarimiz davomida sintezlangan koordinatsion birikmalarning tarkibdagi elektron ko'chish hodisalari ultrabinafsha spektroskopik usul bilan o'rganildi. Aksariyat koordinatsion birikmalarning markaziy atomi 3d metallari bo'lib, ulardagi d-d o'tishlar ultrabinafsha nurning  $\lambda_{\text{max}}$  qiymatlari 401 nm dan 800 nm gacha oraliqda yuzaga keldi (3-jadvalga qarang). 800 nm to'lqin uzunliklari sohasida ligand maydonning ta'siri zaif bo'lsa, aksincha 401 nm to'lqin uzunliklari sohasida d-d ko'chishlari bo'layotgan metalda ligand maydonning ta'siri kuchli bo'ladi va 3d orbitalning ikkita energetik qavatga ajralishi qiyinlashadi (3-jadval). Sintezlangan koordinatsion birikmalarning barqarorliklari Babko usuli bilan

aniqlandi, buning uchun belgilangan birikmalardan teng konsentratsiyali eritmalar qoʻllaniladi. Analiz natijalari quyidagi formulalar orqali hisoblandi.

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

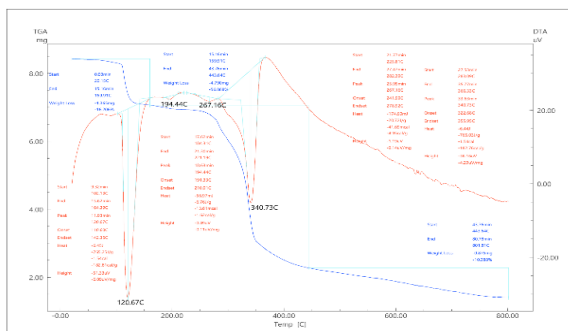
Olingan natijalarga koʻra koordinatsion birikmalarning barqarorlik konstantasining oʻrtacha qiymati Irving-Vilyams qatoriga boʻysingan holda: KB-5 < KB-4 < KB-3 < KB-1 < KB-6 > KB-7 > KB-8 tartibda oʻzgarib bordi.

<b>3-jadval. Koordinatsion birikmalarda UB nur taʼsirida elektron koʻchish hodisalari</b>				
Birikma	Elektron koʻchish turlari			
	d→d	n→π*	LMCT	π→π*
5-SSK		300		216
KB-1	800	298	234	214
KB-2		298	235	215
KB-3	726	298	234	212
KB-4	511	298	235	215
KB-5	401	298	234	213
KB-6	728	298	234	212
KB-7	800	298	234	214
KB-8	512	298	234	215
KB-9		298	233	214
KB-10	695	298	234	210
KB-11	485	297	241	
KB-12	760	297	236	211

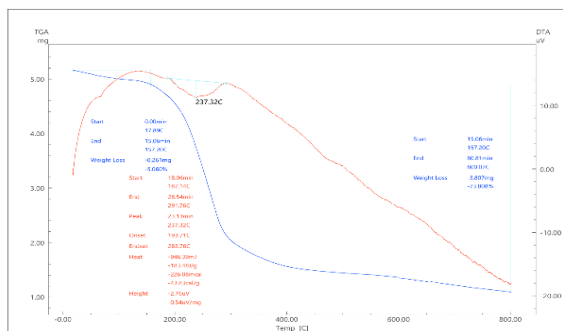
KB-6, KB-7 birikmalarning termik barqarorligi DTA yordamida aniqlandi (7-rasm). KB-6ning termogravimetrik egri chizigʻida asosan 3 ta intensiv massa yoʻqotiladigan harorat oraligʻida amalga oshdi. 1-massa yoʻqotiladigan oraligʻ 20.15–159.91 °Cda 1.365 mg (16.206%) suv bugʻlarining, 2–oraligʻ 159.91–443.64 °C 4.790 mg (56.868%) 5-SSKning chiqib ketishi, 3–oraligʻ 443.64–801.81 °C haroratgacha 0.875 mg (10.388%) kompleks birikmaning toʻliq destruksiya uchirishi hisobiga, jarayon soʻngida CuO ning qolgan. Shular bilan birgalikda DTA grafigida 120.67 °C, 194.44 °C, 267.16 °C va 340.73 °C larda endotermik effekt kuzatildi.

KB-7ning termogravimetrik egri chizigʻida asosan 2 ta intensiv massa yoʻqotilishi: 1-massa 17.89–157.20 °C harorat oraligʻida 0.261 mg (5.060%) kristalizatsion suvning bugʻlanishi, 2-massa esa 157.20–800.07 °C harorat oraligʻida 3.807 mg (73.808%) kompleks birikmaning toʻliq destruksiya uchirishi hisobiga mos keladi, jarayon soʻngida CuO ning qolishi bilan tushuntiriladi deb taxmin qilindi. Shular bilan birgalikda DTA grafigida 237.32 °C larda endotermik effekt kuzatildi.





KB-6



KB-7

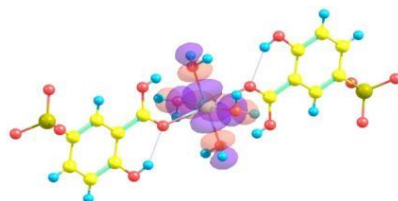
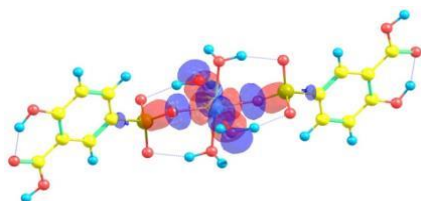
**8-rasm. KB-6 va KB-7larning termogravimetrik tahlili.**

KB-6 va KB-7ning elektron xususiyatlari DFT tahlili orqali tekshirildi (9-rasm). Kimyoviy qattqlik ( $\eta$ ) va yumshoqlik ( $S$ ) molekula faolligi va barqarorligining foydali ko'rsatkichlari hisoblanadi. KB-7 0,7428765 eV qattqlik qiymatiga ega edi, KB-6 esa 1,9415475 eV qattqlikni sezilarli darajada yuqori ko'rsatdi. Ushbu qiymatlar KB-7ning yumshoqroq va shuning uchun ko'proq faol ekanligini ko'rsatadi, KB-6 esa qattiqroq va barqarorroq. Qattqlikka teskari proporsional bo'lgan yumshoqlik bu kuzatuvni yanada qo'llab-quvvatlaydi, KB-7ni KB-6ning 0,515 bilan solishtirganda 1,346 yumshoqlikka ega (4-jadval).

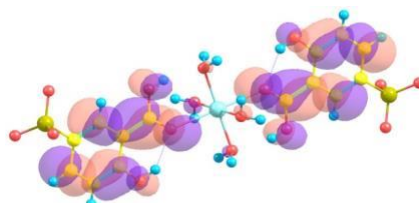
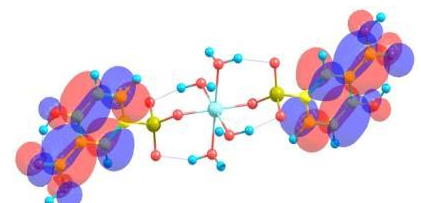
KB-6

KB-7

HOMO



LUMO



**9-rasm. KB-6 va KB-7 komplekslarning eng yuqori band bo'lgan molekulyar orbitallari (HOMO) va eng past band bo'lmagan molekulyar orbitallari (LUMO).**

4-jadval.

KB-6 va KB-7 ning DFT qiymatlari

Birikma	HOMO	LUMO	Energiya bo'shlig'	Elektronmanfiylik (eV)	Qattqlik (eV)	Yumshoqlik (eV)
a	(eV)	(eV)	(eV)			
KB-6	-5.63	-1.75	3.883	3.126	1.941	0.515
KB-7	-3.86	-2.38	1.485	3.693	0.742	1.346

Tadqiqotlarimiz davomida KB-1, KB-2, KB-3, KB-4, KB-5, KB-6, KB-7 va KB-8larning kristall tuzilmalarning Hirshfeld yuzalarini tekshirish va tegishli ikki o'lchovli (2D) barmoq izlari chizmalari yaratildi.

KB-8ning Hirshfeld sirtining miqdoriy tahlili ( $d_{norm}$ ) umumiy hajmi 292,86 Å<sup>3</sup> va sirt maydoni 294,76 Å<sup>2</sup> ekanligini aniqladi (10-rasm a tasvir). Hirshfeld

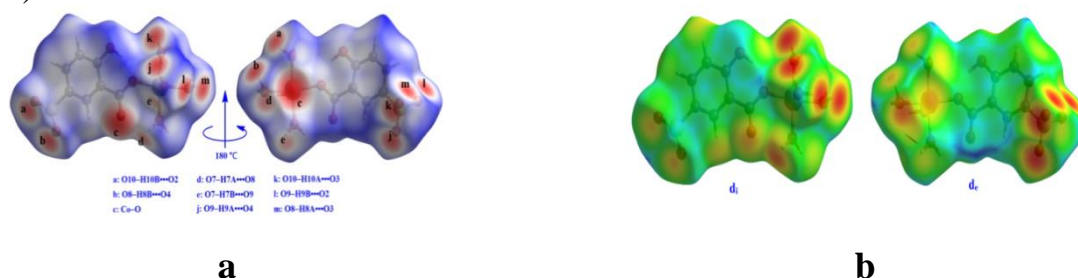


yuzasidan sirt ichidagi va tashqarisidagi atomlarning yadro holatigacha bo'lgan masofani ifodalovchi  $d_i$  parametri 0,7169 dan 2,5554 a.u gacha,  $d_e$  0,7171 dan 2,5307 au gacha bo'lgan diapazonga tushdi. (10-rasm b rasm).

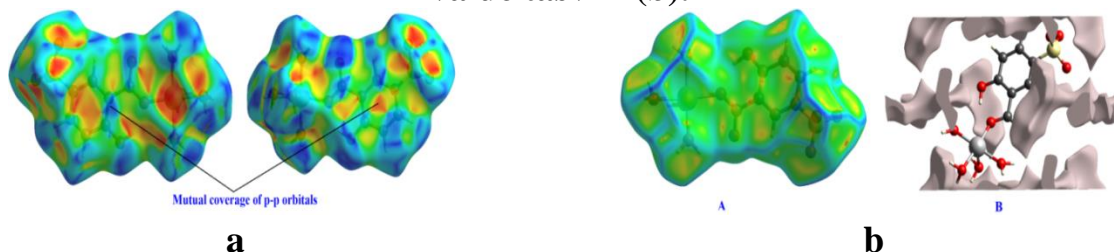
Bundan tashqari, sirt egriligini tavsiflovchi shakl indeksi -0,9983 dan 0,9962 gacha (11-rasm a rasm) va egrilik -3,0384 dan 0,5650 a.u.gacha bo'lgan diapazonda sodir bo'lgan. (11-rasm b/A rasm).

Bundan tashqari, kristall fragmentlari orasida kristall bo'shliqlar mavjud va bu bo'shliqlar bitta assimetrik birlik uchun 114,93 Å<sup>3</sup> hajm va 351,83 Å<sup>2</sup> sirt maydonini egallaydi (11-rasm b/B rasm). Boshqacha qilib aytganda, bitta assimetrik birlik uchun Xirshfeld yuzasi va kristall bo'shliqlarining umumiy hajmi 413,79 Å<sup>3</sup> va sirt maydoni 646,59 Å<sup>2</sup> ga teng.

KB-1 dan KB-8 gacha bo'lgan birikmalarning Hirshfeld yuzalari 2D barmoq izlari tahliliga ko'ra Hirshfeld sirt yuzalarining shakllanishiga gomo va gitro atomlarning ta'sirlari turlicha ekanligi namoyon bo'ldi, eng yuqori ta'sirlarga O-H va H-H ta'sirlar bo'lib, yuzalar shakllanishiga asosiy hissalarini qo'shadi (5-jadval).



10-rasm. KB-8ning Hirshfeld yuzasi, sirt ichida va tashqarisida o'zaro ta'sirlar (a), Koordinatsion polimer  $d_i^{\max} > d_e^{\max}$  ning Xirshfeld yuzasining  $d_i$  va  $d_e$  tasviri (b).



11-rasm. KB-8ning Hirshfeld sirt shakli indeksi (a), koordinatsion polimerning Hirshfeld sirt egriliklari (b/A) va assimetrik qism uchun kristall bo'shlig'i (b/B).

5-jadval.

Hirshfeld yuzaning shakllanishiga atomlararo ta'sirlarning hissi.

	O---H/ H---O	H---H	H---C/ C---H	O---C/ C---O	O---O	C---C
KB-1	52	31	2.5	3.9	2.4	8.1
KB-2	53.3	26.2	5.2	4.8	4	6.6
KB-3	53.8	20.5	4.9	4.8	9.2	6.7
KB-4	50.7	28.4	5.2	6.4	4.4	5
KB-5	51.9	29.6	5.1	6.4	2.2	4.8
KB-6	56.2	24.9	3.1	4.1	2.4	9.3
KB-7	61.5	14.2	7.9	7.1	3.7	5.6

<b>KB-8</b>	55.1	24	3.3	3.4	3.6	7.5
-------------	------	----	-----	-----	-----	-----

Hirshfeld yuzalarning shakillanishiga sirt ichkarisidagi va sirt tashqarisidagi atomlarning hissalarini turlicha bo'lib ularning qiymatlarini 6-jadvaldan ko'rish mumkin.

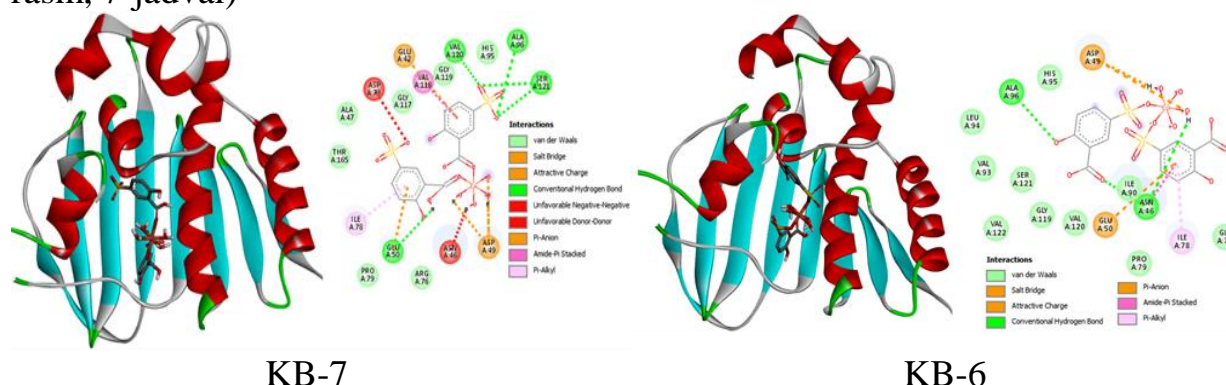
**6-jadval.**

**Hirshfeld yuzaning shakillanishiga tashqi va ichki atomlarning ta'sir hissasi**

	Sirdan ichkarida			Sirdan tashqarida		
	H	O	C	H	O	C
KB-1	56.3	32.3	11.4	60.2	28.5	11.3
KB-2	53.7	34.7	11.6	57.2	31.3	11.5
KB-3	48.9	39.9	11.5	51.3	37.1	11.5
KB-4	54.5	34.2	11.4	58.2	31.6	10.2
KB-5	56.2	32.7	11.1	59.9	30.1	10
KB-6	52.9	34.2	12.9	56.2	30.9	12.9
KB-7	46.4	39.8	13.8	51.4	36.2	12.4
KB-8	51.3	36.3	10.8	55.2	32.5	10.8

Dissertatsiyaning «Koordinatsion birikmalar biologik faolliklarining nazariy va amaliy tahlillari» deb nomlangan **to'rtinchi bobida** KB-6 va KB-7 molekularining E.coli bakteriyasining DNK giraza (1KZN) bilan o'zaro ta'sirining tabiatini o'rganish uchun biz CB-Dock2 serveridan foydalanib, olingan komplekslarni maqsadli protein 1KZN bilan molekulyar docking tadqiqotlari o'tkazilgan, nazariy tadqiqotlar bilan amaliy tadqiqotlarni solishtirish uchun tadqiqotda olingan birikmalarning barchasi gram musbat: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*; gram manfiy: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytoca* bakteriyalarga qarshi faolliklari sinovdan o'tkazilgan. Barcha birikmalarning zaharlilik darajasi o'rganilib tadqiqot natijalari keltirilgan.

KB-6 va KB-7larni E.coli bakteriyasining DNK girazasi antibakterial vositalar uchun vakillik nishoni bo'lgan 1KZN oqsiliga ta'sir qilishi o'rganildi (12-rasm, 7-jadval)



KB-7

KB-6

**9-rasm. KB-6 va KB-7 molekulasining faol joydagi joylashuvi va oqsil-ligand o'zaro ta'sirining 2D diagrammasi.**

**7-jadval.**

**KB-6 va KB-7ning 1KZN oqsiliga bog'lanish energiyalari, hamda vodorod bog'i ta'sirida qoladigan aminokislotalari.**

Birikmalar	Bog'lanish energiyasi kkal/mol	Vodorod bog'lanish ta'siridagi aminokislotalar
5-SSK	-6.4	VAL167
KB-7	-8.0	ASN46, ALA96
KB-6	-7.6	GLU50, ALA96, VAL120, SER121

Kimyoviy moddalarning mikroorganizmlar (bakteriyalar)ga qarshi antagonistik faolligini baholash uchun tomchilar usuli qo'llanilgan. Tadqiqotlarimizda sintezlab olingan KB-1 dan KB-12 gacha bo'lgan kimyoviy birikmalarning biologik faolliklari ma'lum mikroorganizmlarga qarshi faolliklari sinovdan o'tkazildi. Birikmalarning bir bakteriyaga nisbatan biologik faolliklari keskin farq qilmaydi. Monoetanolamin ishtirokida olingan KB-10, KB-11 va KB-12 birikmalarning mikroorganizmlarga nisbatan faolligi kuzatilmadi.

Shuningdek boshqa barcha birikmalarning mikroorganizmlarga qarshi faolliklari 13 mmdan 45> mmgacha borishi aniqlandi (8-jadval).

### 8-jadval. Koordinatsion birikmalarning mikroorganizmlarga ta'siri, o'lchovlar mmda

	Gram musbat			Gram manfiy			
	<i>B.sub</i>	<i>Pro.mir</i>	<i>St.aur</i>	<i>E.coli</i>	<i>P.aeru</i>	<i>Ser mar</i>	<i>K.oxyto</i>
<b>5-SSK</b>	20	x	22	6	x	x	x
<b>KB-1</b>	22	23	45>	40	45>	40	17
<b>KB-2</b>	21	20	45>	36	45>	38	18
<b>KB-3</b>	20	26	45>	33	45>	20	17
<b>KB-4</b>	21	30	45>	30	45>	30	13
<b>KB-5</b>	35	45>	45>	x	41	25	30
<b>KB-6</b>	<b>41</b>	45>	<b>37</b>	<b>30</b>	43	30	30
<b>KB-7</b>	<b>32</b>	45>	<b>28</b>	<b>25</b>	43	30	45>
<b>KB-8</b>	45>	45>	45>	x	43	37	45>
<b>KB-9</b>	45>	45>	45>	x	43	40	45>
<b>KB-10</b>	-	-	-	-	x	x	x
<b>KB-11</b>	-	-	-	-	x	x	x
<b>KB-12</b>	-	-	-	-	x	x	x

Izoh: faollik kuzatilmadi (-); sinov o'tkazilmadi (x)

O'rganilayotgan birikmalarning o'tkir toksikligini baholash OECD № 420 testidan so'ng intragastral yuborish usuli yordamida o'tkazildi. Tadqiqotlarimizda olingan birikmalarning zaharlilik darajasi 530 mg/kgdan 825 mg/kg atrofida ekanligi aniqlandi, bu esa barcha koordinatsion birikmalarning IV sinf zaharlilik darajasida ekanligini ko'rsatadi (9-jadval).

### 9-jadval. Koordinatsion birikmalarning zaharlilik darajasi (LD<sub>50</sub>)

Guru hlar	KB -1	KB -2	KB -3	KB -4	KB -5	KB -6	KB -7	KB -8	KB -9	KB -10	KB -11	KB -12	Nazorat
tur, jinsi	Laboratoriya oq sichqoni, erkak												
LD50 qiymati	589 mg/kg	807 mg/kg	780 mg/kg	830 mg/kg	783 mg/kg	564 mg/kg	708 mg/kg	825 mg/kg	530 mg/kg	550 mg/kg	600 mg/kg	720 mg/kg	Toza suv

## XULOSALAR

1. Ilk marta 5-SSK mono va aralash ligandli, diskret va polimer tuzilishli koordinatsion birikmalar sintez qilindi, sintez sharoitiga MEAning ta'siri aniqlandi. Sintez qilingan koordinatsion birikmalarning KB-1dan KB-7gacha bo'lganlari 5-SSK ishtirokidagi monoligandli diskret, KB-8 va KB-9lar esa polimer, KB-10, KB-11 va KB-12lar 5-SSK MEA bilan aralash ligandli polimer koordinatsion birikmalar ekanligi aniqlandi.

2. RTTdan olingan kristallografik ma'lumotlar asosida beshta birikmaning tuzilishi haqidagi ma'lumotlar Kembrij kristallografik ma'lumotlar bazasiga №2384143, №2384144, №2384145, №2407466 va №2407467 dipozit raqamlari bilan ro'yxatdan o'tkazildi.

3. KB-1dan KB-8gacha birikmalarning barqarorlik konstantasi Babko usulida aniqlandi, unga ko'ra koordinatsion birikmalarning barqarorligi quyidagicha tartibda  $KB-5 < KB-4 < KB-3 < KB-1 < KB-6 > KB-7 > KB-8$  o'zgardi hamda ularni eritmada barqarorligi Irving-Vilyams qatoriga  $Mn(II) < Co(II) < Ni(II) < Cu(II) > Zn(II)$  bo'ysinishi isbotlandi.

4. KB-10 tarkibida MEAning Cu(II) bilan 5 azoli halqa hosil qilganligi, KB-12 tarkibida esa to'rtta 5-SSK molekulasining korboksil guruhi orqali ikkita Cu(II) atomiga simmetrik tarzda to'rt tomondan 5 azoli "Xitoy fonarlari" ko'rinishdagi halqani hosil qilib birikkanligi Chugayevning sikl qoidasiga va xelat effekti hisobiga mutanosib ekanligi aniqlandi.

5. Sintez qilingan diskret koordinatsion birikmalarning biologik faolliklari gram musbat: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*; gram manfiy: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytoca*) kabi bakteriyalarga qarshi yuqori faollik ko'rsatishi aniqlandi, KB-6 va KB-7ning biologik faolliklari molekulyar doking usuli bilan o'rganilib amaliy natijalar bilan o'zaro mutanosib ekanligi, shuningdek barcha koordinatsion birikmalar kam zaharli (4-sinf) birikmalar toifasiga kirishi aniqlandi.

6. KB-6 va KB-7larning bakteriyalarga qarshi biologik faolliklariga asoslanib "Muborak gazni qayta ishlash zavodi"ning konstruksiya va qurilmalarida karroziyani keltirib chiqaruvchi mikroorganizmlarga qarshi sinovdan o'tkazildi va korroziya jarayoniga qarshi ingibitor sifatida taklif etildi.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc.03/30.12.2019.К.01.03 ПО ПРИСУЖДЕНИЮ  
УЧЁНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ  
УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

---

**НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ УЗБЕКИСТАНА**

**НОРМАМАТОВ АДХАМЖОН САЪДУЛЛА УГЛИ**

**СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ, БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ И 3D-  
МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ  
НА ОСНОВЕ 5-СУЛЬФОСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ**

**02.00.01– Неорганическая химия (химические науки)**

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

**Ташкент–2025**

Тема докторской диссертации (PhD) зарегистрирована под номером В2024.2.PhD/К753 на Высшей аттестационной комиссии при Министерстве высшего образования, науки и инноваций Республики Узбекистан.

Диссертация была выполнена в Институте общей и неорганической химии АН РУз.

Автореферат диссертации доступен на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) на сайте Ученого совета (ik-kimyo.nuu.uz) и на информационно-образовательном портале «ZiyoNET» ([www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz)).

**Научный руководитель:**

**Ибрагимов Азиз Бахтиярович**  
доктор химических наук, профессор

**Официальные оппоненты**

**Умаров Бако Бафаевич**  
доктор химических наук, профессор  
**Рахмонова Дилноза Саламовна**  
кандидат химических наук, доцент


**Ведущая организация:**


Ташкентский государственный фармацевтический институт

Защита диссертации состоится на заседании Ученого совета под номером DSc.03/30.12.2019.K.01.03 в Национальном университете Узбекистана 22.02. 2025 года в 14<sup>00</sup> часов. Адрес 100174, г.Ташкент, ул. Университетская, 4 Тел. (99871) 246-07-88; (99871) 227-12-24, Факс: (+99871) 246-53-21.). e.mail: [ilmiy\\_kengash@nuu.uz](mailto:ilmiy_kengash@nuu.uz) .


С диссертацией можно ознакомиться в Центре информационных ресурсов Национального университета Узбекистана (зарегистрирован под номером 8). Адрес 100174, г.Ташкент, ул. Университетская, 4 Тел. (99871) 246-07-88; (99871) 227-12-24, Факс: (+99871) 246-53-21.

Автореферат диссертации разослан « 4 » февраль 2025 года.  
(Реестр за № 5 от « 3 » февраль 2025 года).

  
**З.А. Сманова**  
Председатель научного  
совета по присуждению ученой  
степени, д.х.н., проф.

  
**Н.Х. Кутлимуротова**  
Ученый секретарь научного совета  
по присуждению ученой  
степени, д.х.н., проф.

  
**Ш.А. Кадилова**  
Председателя научного  
семинара при научном совете  
по присуждению ученой  
степени, д.х.н., проф.



## **ВВЕДЕНИЕ (Аннотация диссертации доктора философии PhD)**

**Актуальность и необходимость темы диссертации.** На сегодняшний день во всем мире комплексные соединения малотоксичных, биологически активных лигандов с переходными металлами используются в медицине для лечения различных заболеваний, в сельском хозяйстве в качестве стимуляторов, фунгицидов, гербицидов и пестицидов, а в промышленности в качестве металлоорганических каркасов с сорбционными свойствами. Особенно возрастает спрос и интерес к полифункциональным координационным соединениям в науке. Учитывая это, синтез биологически активных, малотоксичных координационных соединений некоторых 3d-металлов с 5-сульфосалициловой кислотой и моноэтаноламином, содержащими кислород и азот, а также разработка препаратов на их основе, предназначенных для использования в сельском хозяйстве и медицине, имеют важное практическое значение.

В мировых научных источниках имеется много информации по синтезу и изучению структуры металлокомплексов на основе бензойных кислот и их производных. В частности, отмечается, что структура и свойства комплексных соединений, образованных переходными металлами с этими лигандами, зависят от природы металла и лигандов, температуры синтеза, влияния растворителей и ряда других факторов. Учитывая это, выбор необходимых факторов, синтез требуемых комплексных соединений, определение их структуры, теоретическое и практическое исследование взаимосвязи между структурно-композиционными свойствами и биологической активностью имеют научное значение.

В Республике Узбекистан развитие медицины, фармацевтики, сельского хозяйства и промышленности, а также глобальные изменения климата приводят к появлению различных патогенных бактерий, устойчивых к антибактериальным средствам. Ведутся исследования по синтезу малотоксичных, многофункциональных координационных соединений для борьбы с этими патогенными бактериями. Кроме того, в стратегии развития «Нового Узбекистана» определены приоритетные задачи, направленные на развитие медицины и фармацевтической отрасли. Основываясь на этом, в последние годы правительство Узбекистана уделяет серьезное внимание развитию фармацевтической индустрии и обеспечению качества лекарственных средств в соответствии с международными стандартами. В частности, это нашло отражение в указе Президента «О мерах по дальнейшему ускорению развития фармацевтической отрасли в Республике Узбекистан» (УП-5707) и в решении «О мерах по дальнейшему ускорению развития фармацевтической отрасли» (РП-4554) от 2019 года.

Данные результаты исследования диссертационной работы служат для выполнения задач, установленных указом Президента Республики Узбекистан от 28 января 2022 года № РР-60 «О стратегии развития нового Узбекистана на 2022–2026 годы», постановлением от 25 октября 2018 года № РР-3983 «О мерах по ускоренному развитию химической промышленности в Республике Узбекистан», постановлением от 3 апреля 2019 года № РР-4265

«О дальнейшей реформе химической промышленности и повышении инвестиционной привлекательности», а также постановлением от 12 августа 2020 года № PQ-4805 «О мерах по повышению качества непрерывного образования и научной результативности в области химии и биологии» и других нормативно-правовых актов, относящихся к данной деятельности.

**Исследование соответствует приоритетным направлениям развития науки и технологий Республики.** Данное исследование выполнено в соответствии с VII приоритетным направлением развития науки и технологий Республики — «Химия, химические технологии и нанотехнологии».

**Уровень изученности проблемы.** Исследования по изучению координационных соединений, их структуры и физико-химических свойств проводились ведущими научными группами мира, такими как 5-ССК и МЭА, в составе которых работали Хан М., Кальшетти Б.М., Левандовски В., Фурия Е., Жюйяр Ж., Кисс Т., Куковинец О.С., Кёсэ Д.А., Мангрих А.С., Пракеш Д. и их команды. Согласно анализу данных Кембриджской кристаллографической базы (CCDC-2024), до 2024 года было получено и определено 417 металлических комплексов 5-ССК.

В Узбекистане исследования по синтезу, структуре и свойствам координационных соединений проводятся под руководством академиков Н.А. Парпиева и Б.Т. Ибрагимова, а также профессоров Х.Т. Шарипова, Б.Б. Умарова, А.А. Шабилолова, Т.А. Азизова, Ш.А. Кадилова, З.Ч. Кадиловой, Х.Х. Тураева, Ш.Ш. Даминовной, Дж.М. Ашурова и Ш.А. Касимова проводятся под руководством ученых команды.

Анализ литературных источников показывает, что, несмотря на наличие ширококомасштабных экспериментальных данных об изучении соединений 3D-металлов с 5-ССК, биологические свойства комплексных соединений ионов Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) и Ag(I) с 5-ССК и МЭА с точки зрения состава, структуры и свойств недостаточно изучены. Поэтому синтез новых координационных соединений на основе 5-ССК и МЭА, а также исследование их физико-химических и биологических свойств с помощью 3D-моделирования представляет особый научный интерес.

**Связь выполнения диссертационного исследования с научными планами научно-исследовательского учреждения.** Диссертационное исследование выполнено в рамках практического проекта с номером САМ202201 «Синтез, структура, активность против микробов и влияние на рост растений супрамолекулярных комплексов 5-ССК» (2023-2024 гг.) Института общей и неорганической химии Академии наук Узбекистана.

**Цель исследования:** синтез новых координационных соединений на основе 5-сульфосалициловой кислоты, их структура, биологическая активность и 3D-моделирование.

**Задачи исследования:** Определение методов и условий синтеза координационных соединений с ионами Co(II), Ni(II), Cu(II), Mn(II), Zn(II) и Ag(I) на основе 5-ССК и МЭА, а также получение их монокристаллов.



Анализ состава и структурных особенностей синтезированных координационных соединений с использованием современных физико-химических методов.

Определение энергетических и геометрических характеристик, электронной структуры и реакционной способности синтезированных координационных соединений с помощью квантово-химических методов.

Определение биологической активности, уровня токсичности и областей применения синтезированных координационных соединений как с практической, так и с теоретической точки зрения.

**Объектом исследования:** являются 5-ССК, МЭА, соли Co(II), Ni(II), Cu(II), Mn(II), Zn(II) и Ag(I), а также координационные соединения, полученные в результате синтеза, грамположительные и грамотрицательные бактерии, а также 3D-модели, созданные с помощью программ, касающиеся структуры и свойств координационных соединений.

**Предметом исследования:** являются комплексы, образованные 3d металлами с 5-ССК и МЭА, их кристаллическая структура, биологические и физико-химические свойства, уровень токсичности новых соединений, супрамолекулярный комплекс субстрат-лиганд, а также 3D модели, созданные с помощью *in-silico* программ.

**Методы исследования:** В диссертационной работе использованы рентгено-структурный анализ (РСА), дифференциально-термический анализ (ДТА), ИК-спектроскопия, УФ-спектроскопия, методы определения биологической активности и новые квантово-химические вычислительные методы.

**Научная новизна исследования заключается в следующем:**

Впервые синтезировано 12 координационных соединений с дискретной и полимерной структурой, образованных ионами Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) и Ag(I) с 5-ССК и МЭА.

РСА, ИК-спектроскопия, УФ-спектроскопия и методы ДТА использованы для определения состава, структуры и свойств координационных соединений, среди которых выделяются следующие:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$  Эти координационные соединения имеют геометрию гексагонального октаэдра и являются дискретными структурами,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})]\}_n$ ,  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-ССК})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$ , смешаннолигандные  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-ССК})_2(\text{МЭА})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-ССК})_2](\text{МЭА})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ , и  $\{[\text{Cu}(5\text{-ССК})_2](\text{МЭА})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$  комплексы были идентифицированы как полимерные структуры.

Впервые синтезированные координационные соединения обладают высокой селективной активностью против патогенных бактерий. С помощью подхода "in silico" были получены результаты связывания комплексов  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  и  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$  с белками патогенных бактерий, которые были подтверждены традиционным методом «*in vivo*».

Впервые были изучены константа устойчивости с монолигандом координационных соединений  $[[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-$

ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Ni(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Co(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Mn(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>, {[Co(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)}<sub>n</sub> константа устойчивости соединений были изучены с помощью спектроскопических методов, и было установлено, что наиболее стабильным соединением в растворе является [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•H<sub>2</sub>O.

Свойства поверхности Хиршфельда синтезированных координационных соединений ([Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Zn(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Ni(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Co(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Mn(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>] и {[Co(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)}<sub>n</sub>) определяли по кристаллографическим данным;

Синтезированные координационные соединения были определены как обладающие биологической активностью против бактерий и относятся к классу химических соединений с низкой токсичностью (4-й класс— малотоксичные).

**Практические результаты исследования заключаются в следующем:**

Определены оптимальные условия для синтеза дискретных и полимерных координационных соединений 5-ССК с ионами Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), Mn(II) и Ag(I), а также смешанных лигандных полимеров с участием Cu(II) и Mn(II) в присутствии 5-ССК и МЭА.

Структурные данные и все кристаллографические параметры для следующих соединений были депонированы в базе данных Кембриджской кристаллографии для использования исследователями и для синтеза аналогичных соединений: {[Cu<sub>3</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>(МЭА)<sub>4</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>}<sub>n</sub>, {[Mn(5-ССК)<sub>2</sub>](МЭА)(H<sub>2</sub>O)}<sub>n</sub>, [Co(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O и {[Co(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>](5-ССК)}<sub>n</sub>

5-ССК на основе монолигандных координационных соединений обладает высокой антибактериальной активностью, дезинфицирующими свойствами и низкой токсичностью (4-й класс). В то же время, смешанные лигандные полимерные координационные соединения продемонстрировали низкую антибактериальную активность, но также относятся к классу малотоксичных (4-й класс) соединений.

**Надежность: результатов исследования:** Состав и структура синтезированных координационных соединений были проанализированы с использованием элементного анализа, рентгено-структурный анализ (РСА), дифференциально-термический анализ (ДТА), ИК-спектроскопии и УФ-спектроскопии. Кристаллическая структура была изучена с помощью квантово-химических расчетов в программе Crystall Explorer 21.5, а электронная плотность была рассчитана с использованием метода DFT в программе GAMESS 2023. Биологическая активность соединений была протестирована на грамположительных бактериях: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*, а также на грамотрицательных бактериях: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytoca*.

**Научное и практическое значение результатов исследования:**

Дискретные координационные соединения 5-ССК с ионами Co (II), Ni (II), Cu (II), Zn (II), Mn (II) являются октаэдрическими, причем в медных координационных соединениях наблюдается эффект Яна-Теллера. Способность 5-ССК выступать в роли мостика, связывающего центральные атомы в полимерных соединениях  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})]\}_n$  и  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-ССК})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$ , а также монодентатное и бидентатное присоединение лигандов к центральному атому в соединениях  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-ССК})_2(\text{МЭА})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-ССК})_2](\text{МЭА})(\text{H}_2\text{O})\}_n$  и  $\{[\text{Cu}(5\text{-ССК})_2](\text{МЭА})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ , где 5-ССК также выполняет функцию мостика, объясняет научную значимость результатов исследования.

Практическая значимость результатов исследования заключается в том, что на основе структурных данных дискретных и полимерных координационных соединений и всех кристаллографических величин в базу данных кристаллографической структуры Кембриджа внесено 5 соединений, а также синтезировано дезинфицирующее соединение на основе комплексных соединений  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$  и  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$ , синтезированных с металлом Cu (II). Установлено, что эти соединения предотвращают размножение патогенных бактерий и уничтожают существующие.

**Внедрение результатов исследования.** На основании строения, биологической активности и других свойств координационного соединения состава  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$ , синтезированного с Cu (II) и 5-ССК, получено авторское свидетельство No IAP 7856 от государственного учреждения «Центр интеллектуальной собственности» Министерства юстиции Республики Узбекистан.

На основе дезинфицирующих свойств координационных соединений состава  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$  и  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$ , полученных синтезом 5-ССК с Cu (II), проведены испытания на конструкциях и установках «Мубарекского газоперерабатывающего завода» против микроорганизмов, вызывающих коррозию, и внедрены в практику в качестве ингибитора коррозионного процесса (справка «Мубарекского газоперерабатывающего завода» No 985/GK-11 от 22.11.2024 г.). В результате достигнуто замедление коррозионного процесса в конструкциях и устройствах завода и обеспечено их длительное поддержание в рабочем состоянии.

Исходя из пространственной структуры, всех кристаллографических величин и индивидуальности синтезированных на основе 5-ССК координационных соединений  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-ССК})_2(\text{МЭА})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-ССК})_2](\text{МЭА})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  и  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})]\}_n$ , они были зарегистрированы в Кембриджской кристаллографической базе данных под депозитными номерами No2384143, No2384144, No2384145, No2407466 и No2407467 соответственно. В результате данные о синтезе и структуре этих соединений стали доступны ученым всего мира.

**Апробация результатов исследования.** Результаты данного исследовательского труда были представлены в виде докладов и обсуждены

на 12 научно-практических конференциях, из которых 7 международных и 5 республиканских.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано 16 научных работ и один патент, из них 4 научные статьи в изданиях, рекомендованных Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов диссертаций доктора философии (PhD), в том числе 2 статьи в республиканских и 2 в зарубежных журналах.

**Объем и структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы и приложений. Объем диссертации составляет 101 страниц.

### **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ**

Во введении обосновывается актуальность и необходимость диссертационной работы, описываются цели и задачи, объект и предмет исследования, показано соответствие исследования приоритетным направлениям развития науки и технологий республики, излагаются научная новизна и практические результаты исследования, освещается научная и практическая значимость полученных результатов, приводятся сведения о внедрении результатов в практику, опубликованных научных работах и структуре диссертации.

В первой главе диссертации **«Координационные соединения 5-ССК и МЭА с некоторыми 3d металлами»** приведены сведения о распространении 5-сульфосалициловой кислоты и моноэтаноламина в природе, их физико-химических свойствах, биологической активности и важнейших областях применения. Согласно результатам анализа, спрос и интерес к координационным соединениям с высокой биологической активностью и широким спектром применения возрастают с каждым днем. Также определены способность металлов Co (II), Ni (II), Cu (II), Zn (II), Mn (II), Ag (I) образовывать координационные соединения, их биологическая активность и физико-химические свойства, а также условия синтеза. Описано, что наличие шести донорных центров в 5-ССК позволяет синтезировать координационные соединения более чем с десятью различными структурами.

Во второй главе диссертации, озаглавленной **«Объекты исследования, процессы синтеза и методы»** освещены синтез координационных соединений, элементный анализ, выход реакции, температуры плавления, современные физико-химические методы анализа структуры соединений, методы 3D-моделирования, а также процессы определения биологической активности и степени токсичности.

Для простого и удобного представления состава и структуры координационных соединений они были идентифицированы в порядке KB-1, 2, 3...12. KB-1:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-2:  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-3:  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-4:  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-5:  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-ССК})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ , KB-6:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ , KB-7:  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]$ , KB-8:  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-ССК})_2]\}_n$ , KB-9:  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-ССК})_2]\}_n$

ССК)<sub>2</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>n</sub>, KB-10: {[Cu<sub>3</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>(МЭА)<sub>4</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>, KB-11: {[Mn(5-ССК)<sub>2</sub>](МЭА)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>, KB-12: {[Cu(5-ССК)<sub>2</sub>](МЭА)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>.

В третьей главе диссертационной работы, озаглавленной «Молекулярная и кристаллическая структура, физико-химические свойства полученных координационных соединений» представлены практические и теоретические данные, полученные в результате изучения строения и свойств синтезированных координационных соединений.

В ходе исследования структура координационных соединений была изучена с помощью РСА и доказана индивидуальность строения и состава 12 соединений: [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Zn(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Ni(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Co(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Mn(H<sub>2</sub>O)<sub>6</sub>](5-ССК)<sub>2</sub>•2H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>]•H<sub>2</sub>O, [Cu(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>] установлено, что координационные соединения имеют дискретную гексагональную октаэдрическую геометрию, {[Co(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>(5-ССК)]<sub>n</sub>, {[Ag<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>3</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>](H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub>, {[Cu<sub>3</sub>(5-ССК)<sub>2</sub>(МЭА)<sub>4</sub>](H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub>, {[Mn(5-ССК)<sub>2</sub>](МЭА)(H<sub>2</sub>O)]<sub>n</sub> и {[Cu(5-ССК)<sub>2</sub>](МЭА)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>]<sub>n</sub> установлено, что координационные соединения имеют полимерное строение.

Доказано, что в соединениях от KB-1 до KB-5 к ионам металлов во внутренней сфере координированы шесть молекул воды, а две молекулы воды во внешней сфере и два аниона 5-ССК связаны с внутренней сферой посредством водородных связей, образуя изоструктуры (Рисунок 1).

В ходе исследования установлено, что влияние МЭА на химическую реакцию приводит к образованию различных продуктов реакции. При синтезе KB-7 (в мольном соотношении 5-ССК и МЭА 1:1) в результате временной блокировки сульфогруппы 5-ССК с МЭА, центральный атом монодентатно координирован с ионом Cu(II) через две карбонильные группы 5-ССК, но сульфогруппы нейтрализуют ион Cu(II) за счет потери протона. Остальное координационное число заполнено четырьмя молекулами воды, и общее координационное число меди равно шести. При синтезе KB-6 в процессе реакции МЭА не использовался. Также было установлено, что координационное число меди равно шести, и две 5-ССК сульфогруппы связаны с медью через ионную связь. Остальное координационное число заполнено четырьмя молекулами воды, одна молекула воды находится во внешней сфере и связана с внутренней сферой через Н-связи (Рисунок 2).

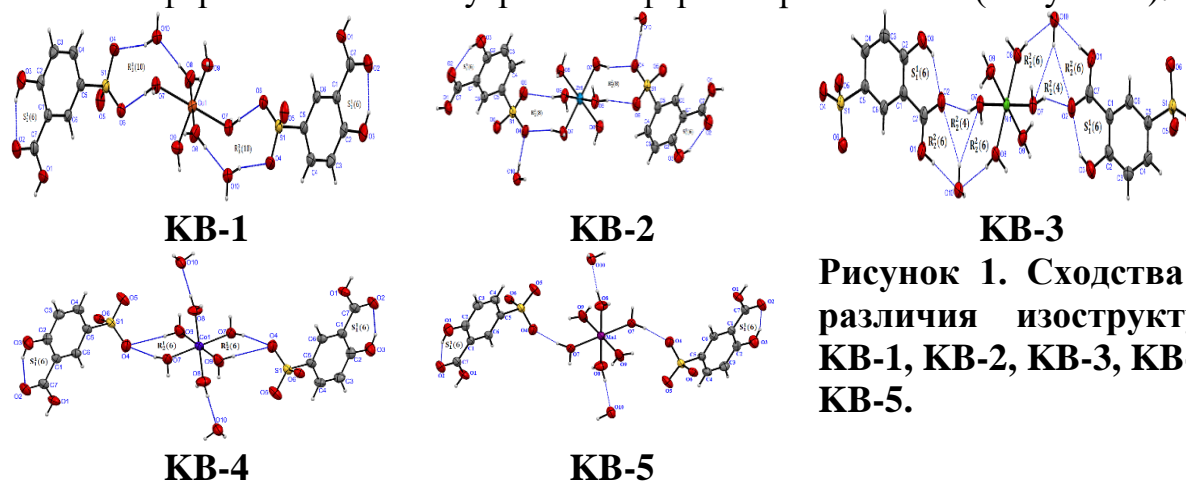
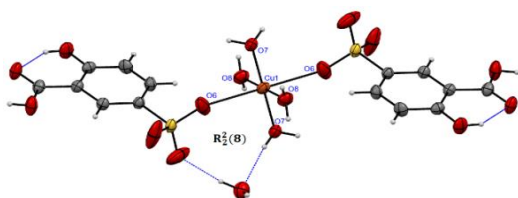
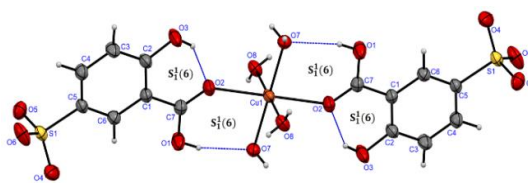


Рисунок 1. Сходства и различия изоструктур KB-1, KB-2, KB-3, KB-4, KB-5.



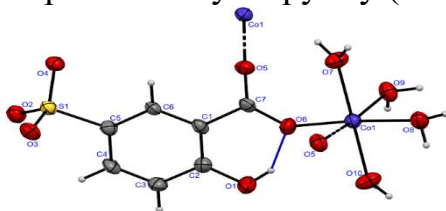
**KB-6**



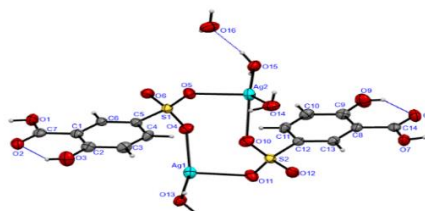
**KB-7**

**Рисунок 2. Различия в строении KB-6 без участия МЭА и KB-7 с участием МЭА в процессе синтеза**

В ходе исследований были синтезированы монолигандные полимерные координационные соединения на основе 5-ССК. Установлено, что в результате применения МЭА при синтезе KB-8 координация происходит через карбоксильную группу (Рисунок 3).



**KB-8**



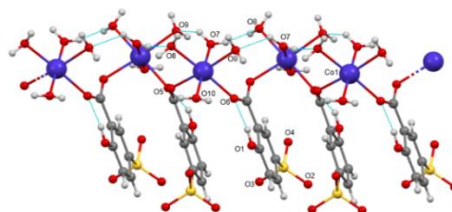
**KB-9**

**Рисунок 3. Полимерные координационные соединения, полученные в присутствии 5-ССК Co (II) и Ag (I), представлены в асимметричных единицах.**

Согласно РСА полимера KB-8, каждый ион Co(II) координирован одним атомом кислорода из карбоксилатных групп двух соседних 5-ССК и четырьмя молекулами воды. В результате такой координации в кристалле образуется полимерная цепь в направлении [001] (Рисунок 4). В результате упаковки цепей образовался координационный полимер  $\{[Co(5-ССК)(H_2O)_4]\}_n$  или катена-(тетра-аква-( $\mu$ -2-5-сульфосалицилато-О,О')) -кобальт (II) соединение.

Согласно РСА анализу смешанно-лигандного координационного полимера состава  $\{[Cu_3(5-ССК)_2(МЭА)_4](H_2O)_2\}_n$ , полимерное соединение кристаллизовалось в триклинной системе P-1. Асимметричная единица соединения состоит из Cu1, который координирован с двух сторон атомом кислорода O2 карбоксилатной группы и атомом кислорода O3 гидроксильной группы, а также иона Cu2, который хелатирован с образованием пятичленного цикла через атомы кислорода и азота двух молекул МЭА (Рисунок 5, а).

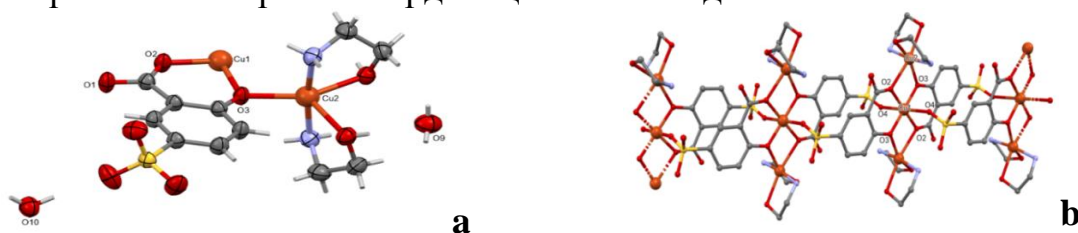
Cu1 расположен в центре инверсии, и в результате симметричной трансформации через этот центр образуется бимолекулярная полимерная единица, показанная на рисунок 6, b. В ней молекула лиганда связывает два соседних иона Cu1 посредством координационных связей атомов O2, O3 на одном конце и атомов O4 сульфогруппы на другом конце, образуя бесконечно повторяющуюся полимерную цепь (таблица 1). Две молекулы



**Рисунок 4. Полимерная цепь, движущаяся вдоль направления [001] KB-9**

воды располагаются во внешней сфере и связаны с полимерной цепью посредством Н-связи.

Координационное число обоих ионов Cu (II) равно шести, и благодаря эффекту Яна-Теллера каждый ион Cu (II) имеет искаженную октаэдрическую форму (таблица 1). Установлено, что из-за сложной системы водородных связей между одномерными сетчатыми цепями полимерного координационного соединения, данное полимерное координационное соединение относится к классу пространственно ориентированных трехмерных полимерных координационных соединений.



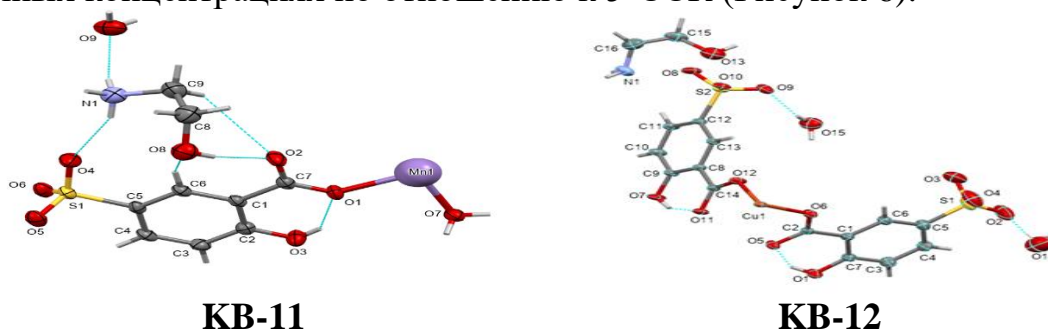
**Рисунок 5. Строение ORTEP KV-10: асимметричная часть (а) и 1-D бимолекулярная полимерная цепь (б).**

**Таблица 1.**

Выбранные расстояния и углы связи в полимерном соединении

Связь	расстояние /Å	Связь	расстояние /Å	Угол	Градус
Cu1-O2	1.9004(19)	Cu2'-O7	2.304(2)	O2-Cu1-O3	85.67(8)
Cu1-O3	1.9376(18)	Cu2'-O8	2.124(2)	O3-Cu2-O2	71.23(7)
Cu2-O2	2.386(19)	Cu2-N1	1.972(3)	O3-Cu2-O7	118.48(8)
Cu2-O3	2.0769(19)	Cu2-N2	1.968(2)	N2-Cu2-N1	172.005(11)
Cu2'-O2	2.386(19)	Cu2'-N1	1.972(3)	N2-Cu2-O3	90.25(9)
Cu2'-O3	2.0769(19)	Cu2'-N2	1.968(2)	N2-Cu2-O8	83.475(9)

В ходе исследований были синтезированы смешаннолигандные полимерные координационные соединения в результате получения МЭА в различных концентрациях по отношению к 5-ССК (Рисунок 6).



**Рисунок 6. Смешаннолигандные полимерные координационные соединения, полученные с участием 5-ССК и МЭА (представленные в асимметричных единицах)**

Строение соединений также изучалось методами ИК-спектроскопии и сравнивалось с ИК-спектром 5-ССК. В связи с тем, что основным компонентом синтезированных соединений KV-1, KV-2, KV-3, KV-4, KV-5, KV-7, KV-8 и KV-9 является 5-ССК, существенных различий в их ИК-спектрах не наблюдается (таблица 2).



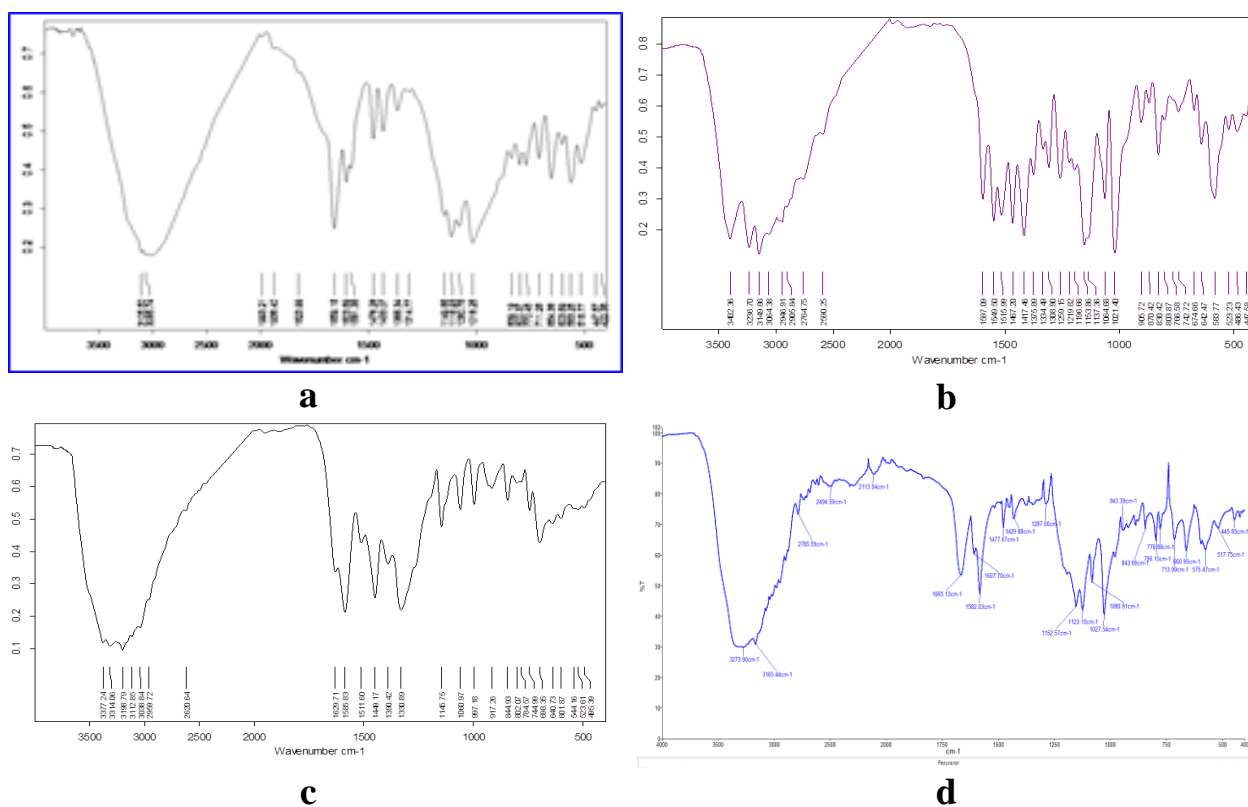
Таблица 2.

ИК-спектры синтезированных координационных соединений,  $\nu$ -валентные колебания,  $\delta$ -деформационные колебания

Соединение	$\nu$ (-OH)	$\nu$ (-NH)	$\nu$ (C-H)	$\nu$ (C=O)	$\nu$ (кольцо)	$\nu$ (S=O)	$\delta$ (S=O)	$\delta_{as}$ (C-H)	$\delta_s$ (C-H)	$\nu$ (O-M)
5-SSK	3106		3066	1659	1603 1581	1478 1433	1366	1150 1117	1081 1018	
KB-1	3162			1677	1610 1585	1482 1429	1380	1189 1153	1082 1027	575 518
KB-2	3370			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1203 1154	1080 1032	586 534
KB-3	3371			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1204 1155	1080 1032	586 534
KB-4	3350			1699 1663	1610 1586	1474 1437	1320 1304	1151 1125	1078 1028	571
KB-5	3369			1664	1608	1477 1436	1339 1305	1203 1128	1080 1032	586 570
KB-6	3111		3071	1660	1607 1581	1478 1431	1364 1348	1152 1122	1081 1023	572 514
KB-7			3096	1659	1609 1584	1475 1421	1373 1315	1182 1142	1078 1022	568 517
KB-8	3383			1663	1609 1585	1475 1431	1338 1296	1180 1120	1077 1022	566 508
KB-9	3388			1658	1614 1585	1477 1425	1349 1288	1184 1122	1078 1031	580 540
KB-10	3402	3237 3150	3064	1597	1550	1467 1417	1335 1308	1197 1154	1065 1021	584 523
KB-11	3377 3314	3197 3113	3039	1630 1586	1512	1449 1390	1331	1146	1061	698 602
KB-12	3274	3165		1665	1582	1478 1430	1287	1153 1123	1081 1028	575 518



Согласно спектроскопическому анализу, группы -ОН в 5-ССК и координационных соединениях проявляют валентные колебания с острыми поглощениями в диапазоне от  $3106\text{ см}^{-1}$  до  $3402\text{ см}^{-1}$ , а связи С-Н в ароматических кольцах зафиксировали валентные колебания в диапазоне от  $3039\text{ см}^{-1}$  до  $3096\text{ см}^{-1}$ . Их асимметричные деформационные колебания наблюдались в областях от  $1204\text{ см}^{-1}$  до  $1117\text{ см}^{-1}$ , а симметричные деформационные колебания - в областях от  $1081\text{ см}^{-1}$  до  $1018\text{ см}^{-1}$ . Валентные колебания карбонильной группы (С=О) в составе соединений наблюдались в диапазоне от  $1699\text{ см}^{-1}$  до  $1586\text{ см}^{-1}$ , а также валентные колебания связи S=O наблюдались в диапазоне от  $1482\text{ см}^{-1}$  до  $1390\text{ см}^{-1}$ , а деформационные колебания - в диапазоне от  $1380\text{ см}^{-1}$  до  $1287\text{ см}^{-1}$ . Валентные колебания аминогруппы, относящейся к МЭА в соединениях KB-10, KB-11 и KB-12, наблюдались в диапазоне от  $3217\text{ см}^{-1}$  до  $3113\text{ см}^{-1}$  (Рисунок 7). В координационных соединениях связи М-О, связанные с центральным атомом, наблюдались в диапазоне от  $698\text{ см}^{-1}$  до  $508\text{ см}^{-1}$ .



**Рисунок 7. ИК-спектры 5-ССК (а), KB-10 (b), KB-11 (c), KB-12 (d)**

В ходе наших исследований электронные переходы в составе синтезированных координационных соединений изучались методом ультрафиолетовой спектроскопии. Центральным атомом большинства координационных соединений являются 3d-металлы, в которых d-d-переходы происходят в диапазоне  $\lambda_{\text{max}}$  ультрафиолетового излучения от 401 до 800 нм (см. таблицу 3). Если в области длин волн 800 нм влияние лигандного поля слабое, то, наоборот, в области длин волн 401 нм в металле, где происходят d-d переходы, влияние лигандного поля сильнее, и расщепление 3d-орбитали на два энергетических уровня затрудняется (таблица 3). Устойчивость

синтезированных координационных соединений определяли методом Бабко, для чего использовали растворы указанных соединений равной концентрации. Результаты анализа рассчитывались по следующим формулам.

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

Согласно полученным результатам, среднее значение константы устойчивости координационных соединений варьировало по ряду Ирвинга-Вильямса: KB-5 < KB-4 < KB-3 < KB-1 < KB-6 > KB-7 > KB-8.

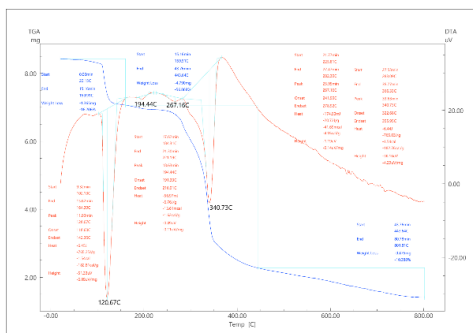
**Таблица 3.**

Явления переноса электронов под действием УФ-лучей в координационных соединениях

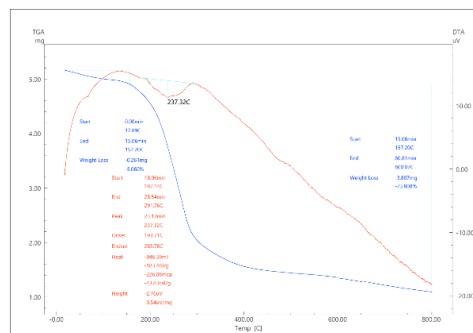
Соединение	Виды электронных переносов			
	d→d	n→π*	LMCT	π→π*
5-ССК		300		216
KB-1	800	298	234	214
KB-2		298	235	215
KB-3	726	298	234	212
KB-4	511	298	235	215
KB-5	401	298	234	213
KB-6	728	298	234	212
KB-7	800	298	234	214
KB-8	512	298	234	215
KB-9		298	233	214
KB-10	695	298	234	210
KB-11	485	297	241	
KB-12	760	297	236	211

Термическую стабильность соединений KB-6, KB-7 определяли с помощью ДТА (Рисунок 8). На термогравиметрической кривой KB-6 наблюдались в основном 3 интенсивных интервала потери массы. 1-й интервал потери массы при 20,15-159,91 °С составил 1,365 мг (16,206%) за счет испарения водяных паров, 2-й интервал при 159,91-443,64 °С - 4,790 мг (56,868%) за счет выделения 5-ССК, 3-й интервал при 443,64-801,81 °С - 0,875 мг (10,388%) за счет полной деструкции комплексного соединения, в конце процесса остался CuO. Кроме того, на графике ДТА наблюдались эндотермические эффекты при 120,67°С, 194,44°С, 267,16°С и 340,73°С.

На термогравиметрической кривой KB-7 в основном наблюдаются 2 интенсивные потери массы: первая - испарение 0,261 мг (5,060%) кристаллизационной воды в интервале температур 17,89-157,20°С, а вторая - полная деструкция комплексного соединения 3,807 мг (73,808%) в интервале температур 157,20-800,07°С, что предположительно объясняется образованием остатка CuO в конце процесса. Наряду с этим, на графике ДТА наблюдается эндотермический эффект при 237,32°С.



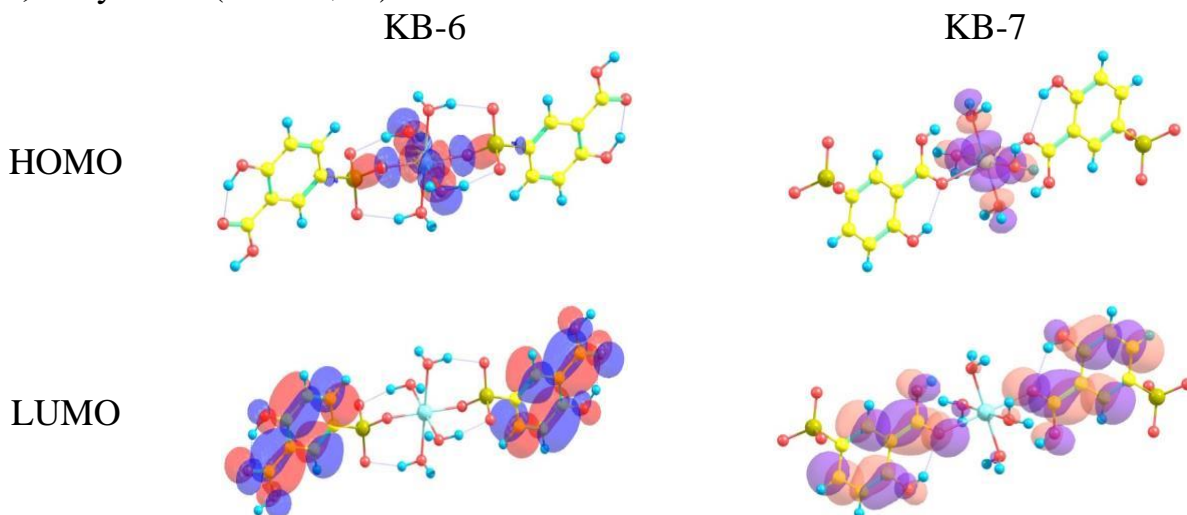
**KB-6**



**KB-7**

**Рисунок 8. Термогравиметрический анализ KB-6 и KB-7.**

Электронные свойства KB-6 и KB-7 были исследованы с помощью DFT-анализа (Рисунок 9). Химическая жесткость ( $\eta$ ) и мягкость ( $S$ ) являются полезными показателями активности и стабильности молекулы. KB-7 имел значение жесткости 0,7428765 эВ, тогда как KB-6 показал значительно более высокую жесткость - 1,9415475 эВ. Эти значения указывают на то, что KB-7 более мягкий и, следовательно, более активный, а KB-6 более жесткий и устойчивый. Мягкость, обратно пропорциональная жесткости, еще больше подтверждает это наблюдение: KB-7 имеет мягкость 1,346 по сравнению с 0,515 у KB-6 (таблица 4).



**Рисунок 9. Высшие занятые молекулярные орбитали (НОМО) и низшие свободные молекулярные орбитали (LUMO) комплексов KB-6 и KB-7.**

**таблица 4**

**Значения DFT KB-6 и KB-7**

соединение	НОМО (eV)	LUMO (eV)	Энергетический разрыв (eV)	Электроотрицательность (eV)	Твёрдость (eV)	Мягкость (eV)
KB-6	-5.63	-1.75	3.883	3.126	1.941	0.515
KB-7	-3.86	-2.38	1.485	3.693	0.742	1.346

В ходе наших исследований были проведены анализ поверхностей Хиршфельда кристаллических структур KB-1, KB-2, KB-3, KB-4, KB-5, KB-6, KB-7 и KB-8, а также созданы соответствующие двухмерные (2D) диаграммы отпечатков пальцев.

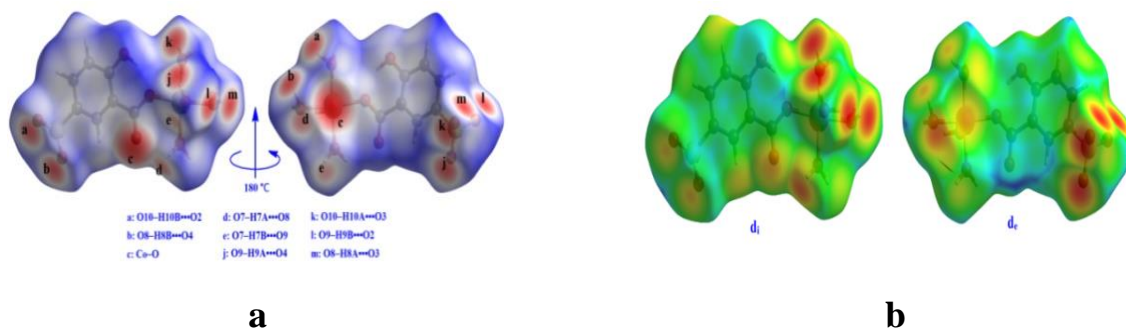
Количественный анализ поверхности Хиршфельда ( $d_{\text{norm}}$ ) КВ-8 показал, что общий объем составляет  $292,86 \text{ \AA}^3$ , а площадь поверхности  $294,76 \text{ \AA}^2$  (Рисунок 10а). Параметр  $d_i$ , выражающий расстояние от атомов внутри и снаружи поверхности Хиршфельда до их ядерного состояния, находился в диапазоне от 0,7169 до 2,5554 а.е., а  $d_e$  от 0,7171 до 2,5307 а.е. (Рисунок 10b).

Кроме того, индекс формы, характеризующий кривизну поверхности, варьировался от -0,9983 до 0,9962 (рис. 11а), а кривизна от -3,0384 до 0,5650 а.е. (Рисунок 11b/А).

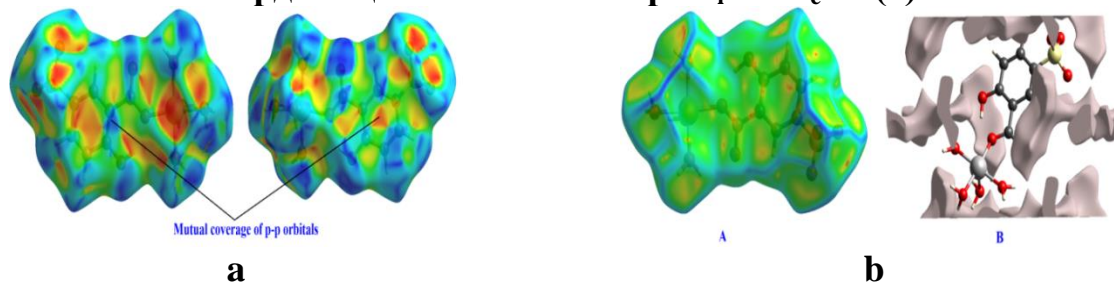
Кроме того, индекс формы, характеризующий кривизну поверхности, варьировался от -0,9983 до 0,9962 (Рисунок 11а), а кривизна от -3,0384 до 0,5650 усл. ед. (Рисунок 11b/А).

Помимо этого, между кристаллическими фрагментами присутствуют кристаллические пустоты, которые занимают объем  $114,93 \text{ \AA}^3$  и площадь поверхности  $351,83 \text{ \AA}^2$  на одну асимметрическую единицу (Рисунок 11b/В). Иными словами, общий объем поверхности Хиршфельда и кристаллических полостей для одной асимметрической единицы составляет  $413,79 \text{ \AA}^3$ , а площадь поверхности  $646,59 \text{ \AA}^2$ .

Анализ 2D отпечатков пальцев на поверхностях Хиршфельда соединений от КВ-1 до КВ-8 показал, что влияние гомо- и гетероатомов на формирование поверхностей Хиршфельда различно. Наиболее сильными являются взаимодействия О-Н и Н-Н, которые вносят основной вклад в формирование поверхностей (таблица 5).



**Рисунок 10. Поверхность Хиршфельда КВ-8, взаимодействия внутри и снаружи поверхности (а), Ди и де изображение поверхности Хиршфельда координационного полимера  $d_i^{\text{max}} > d_e^{\text{max}}$  (б).**



**Рисунок 11. Индекс формы поверхности Хиршфельда КВ-8 (а), кривизна поверхности Хиршфельда координационного полимера (b/А) и кристаллическая полость для асимметричной части (b/В).**

таблица 5.

Вклад межатомных взаимодействий в формирование поверхности Хиршфельда.

	O---H/ H---O	H---H	H---C/ C---H	O---C/ C- --O	O---O	C---C
KB-1	52	31	2.5	3.9	2.4	8.1
KB-2	53.3	26.2	5.2	4.8	4	6.6
KB-3	53.8	20.5	4.9	4.8	9.2	6.7
KB-4	50.7	28.4	5.2	6.4	4.4	5
KB-5	51.9	29.6	5.1	6.4	2.2	4.8
KB-6	56.2	24.9	3.1	4.1	2.4	9.3
KB-7	61.5	14.2	7.9	7.1	3.7	5.6
KB-8	55.1	24	3.3	3.4	3.6	7.5

Вклад атомов внутри и вне поверхности в формирование поверхностей Хиршфельда различен и их значения можно увидеть в таблице 6.

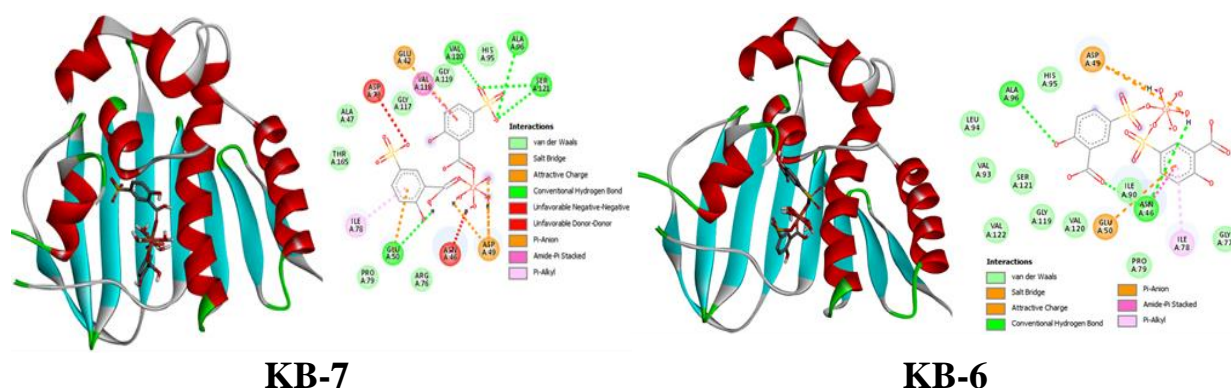
таблица 6.

Вклад внешних и внутренних атомов в формирование поверхности Хиршфельда

	Внутри поверхности			Вне поверхности		
	H	O	C	H	O	C
KB-1	56.3	32.3	11.4	60.2	28.5	11.3
KB-2	53.7	34.7	11.6	57.2	31.3	11.5
KB-3	48.9	39.9	11.5	51.3	37.1	11.5
KB-4	54.5	34.2	11.4	58.2	31.6	10.2
KB-5	56.2	32.7	11.1	59.9	30.1	10
KB-6	52.9	34.2	12.9	56.2	30.9	12.9
KB-7	46.4	39.8	13.8	51.4	36.2	12.4
KB-8	51.3	36.3	10.8	55.2	32.5	10.8

В четвертой главе диссертации «Теоретический и практический анализ биологической активности координационных соединений» для изучения природы взаимодействия молекул KB-6 и KB-7 с ДНК-гиразой (1KZN) бактерии *E.coli* нами были проведены молекулярные докинговые исследования полученных комплексов с целевым белком 1KZN с использованием сервера CB-Dock2. Для сравнения теоретических исследований с практическими все полученные в исследовании соединения были протестированы на активность против грамположительных бактерий: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*; и грамотрицательных бактерий: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytoca*. Была изучена токсичность всех соединений и представлены результаты исследования.

Было изучено влияние KB-6 и KB-7 на белок 1KZN, который является репрезентативной мишенью для антибактериальных средств ДНК-гиразы бактерии *E.coli* (Рисунок 12, таблица 7)



**КВ-7** **КВ-6**  
**Рисунок 12. 2D диаграмма расположения молекул КВ-6 и КВ-7 в активном месте и белково-лигандного взаимодействия.**

**таблица 6.**

Энергии связи КВ-6 и КВ-7 к белку 1KZN, а также аминокислоты, остающиеся под влиянием водородной связи.

Соединение	Энергия связи ккал/моль	Аминокислоты под действием водородных связей
5-ССК	-6.4	VAL167
КВ-7	-8.0	ASN46, ALA96
КВ-6	-7.6	GLU50, ALA96, VAL120, SER121

Для оценки антагонистической активности химических веществ против микроорганизмов (бактерий) использовался метод капель. В наших исследованиях была протестирована биологическая активность синтезированных химических соединений от КВ-1 до КВ-12 против известных микроорганизмов. Биологическая активность соединений по отношению к одной бактерии существенно не отличается. Активность соединений КВ-10, КВ-11 и КВ-12, полученных в присутствии моноэтаноламина, в отношении микроорганизмов не наблюдалась.

Также установлено, что антимикробная активность всех остальных соединений варьируется от 13 мм до более 45 мм (таблица 8).

**Таблица 8.**

Влияние координационных соединений на микроорганизмы, измерения в мм.

	Gram musbat			Gram manfiy			
	<i>B.sub</i>	<i>Pro.mir</i>	<i>St.aur</i>	<i>E.coli</i>	<i>P.aeru</i>	<i>Ser mar</i>	<i>K.oxyto</i>
<b>5-SSK</b>	20	x	22	6	x	x	x
<b>КВ-1</b>	22	23	45>	40	45>	40	17
<b>КВ-2</b>	21	20	45>	36	45>	38	18
<b>КВ-3</b>	20	26	45>	33	45>	20	17
<b>КВ-4</b>	21	30	45>	30	45>	30	13
<b>КВ-5</b>	35	45>	45>	x	41	25	30
<b>КВ-6</b>	<b>41</b>	45>	<b>37</b>	<b>30</b>	43	30	30
<b>КВ-7</b>	<b>32</b>	45>	<b>28</b>	<b>25</b>	43	30	45>
<b>КВ-8</b>	45>	45>	45>	x	43	37	45>
<b>КВ-9</b>	45>	45>	45>	x	43	40	45>



<b>КВ-10</b>	-	-	-	-	-	x	x	x
<b>КВ-11</b>	-	-	-	-	-	x	x	x
<b>КВ-12</b>	-	-	-	-	-	x	x	x

**Примечание:** не прослежена активность (-); не проведено тестирование (x).

Оценку острой токсичности исследуемых соединений проводили методом интрагастрального введения после теста OECD № 420. В ходе наших исследований было установлено, что степень токсичности полученных соединений находится в диапазоне от 530 мг/кг до 825 мг/кг, что указывает на то, что все координационные соединения относятся к IV классу токсичности (таблица 9).

**Таблица 9.**

Токсичность координационных соединений (ЛД50)

Группы	КВ -1	КВ -2	КВ -3	КВ -4	КВ -5	КВ -6	КВ -7	КВ -8	КВ -9	КВ -10	КВ -11	КВ -12	Конт роль
Вид животно го, пол	Лабораторная белая мышь мужского пола												
LD50 с доверит ельным интерва лом	58 9 mg /kg	80 7 mg /kg	78 0 mg /kg	83 0 mg /kg	78 3 mg /kg	56 4 mg /kg	70 8 mg /kg	82 5 mg /kg	53 0 mg /kg	55 0 mg /kg	60 0 mg /kg	72 0 mg /kg	Чист ая вода

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Впервые синтезированы моно- и смешаннолигандные, дискретные и полимерные координационные соединения 5-ССК, определено влияние МЭА на условия синтеза. Установлено, что синтезированные координационные соединения от КВ-1 до КВ-7 являются монолигандными дискретными с участием 5-ССК, КВ-8 и КВ-9 - полимерными, а КВ-10, КВ-11 и КВ-12 представляют собой смешаннолигандные полимерные координационные соединения 5-ССК с МЭА.

2. На основе кристаллографических данных, полученных методом РСА, сведения о структуре пяти соединений были зарегистрированы в Кембриджской кристаллографической базе данных под депозитными номерами №2384143, №2384144, №2384145, №2407466 и №2407467.

3. Константа устойчивости соединений от КВ-1 до КВ-8 была определена методом Бабко, согласно которому устойчивость координационных соединений изменялась в следующем порядке: КВ-5 < КВ-4 < КВ-3 < КВ-1 < КВ-6 > КВ-7 > КВ-8, и было доказано, что их устойчивость в растворе подчиняется ряду Ирвинга-Вильямса: Mn (II) < Co (II) < Ni (II) < Cu (II) > Zn (II).

4. Установлено, что в составе КВ-10 МЭА с Cu (II) образует 5-членное кольцо, а в составе КВ-12 четыре молекулы 5-ССК симметрично связаны с двумя атомами Cu (II) через карбоксильную группу, образуя 5-членные кольца в виде «китайских фонариков» с четырёх сторон, что соответствует правилу цикличности Чугаева и обусловлено хелатным эффектом.

5. Установлено, что синтезированные дискретные координационные соединения обладают высокой биологической активностью против таких бактерий, как грамположительные: *Bacillus subtilis*, *Proteus mirabilis*, *Staphylococcus aureus*; грамотрицательные: *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Serratia marcescens*, *Klebsiella oxytoca*. Биологическая активность KB-6 и KB-7 изучена методом молекулярного докинга и сопоставима с практическими результатами. Также установлено, что все координационные соединения относятся к категории малотоксичных (4-й класс) соединений.

6. На основе биологической активности KB-6 и KB-7 против бактерий были проведены испытания на конструкциях и установках "Мубарекского газоперерабатывающего завода" против микроорганизмов, вызывающих коррозию. По результатам испытаний данные соединения были предложены в качестве ингибиторов коррозионного процесса.



**SCIENTIFIC COUNCIL DSc.03/30.12.2019K.01.03  
IN ACCORDANCE OF ACADEMIC DEGREES  
AT THE NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

---

**NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN NAMED AFTER MIRZO  
ULUGBEK**

**NORMAMATOV ADHAMJON SADULLA UGLI**

**SYNTHESIS, STRUCTURE, BIOLOGICAL ACTIVITY AND 3D  
MODELING OF NEW COORDINATION COMPOUNDS BASED ON 5-  
SULFOSALICYLIC ACID**

**02.00.01 – Inorganic chemistry (chemical sciences)**

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

**Tashkent-2025**

**The dissertation subject of Doctor of philosophy (PhD) in Chemical Sciences is registered by the Supreme Attestation Commission at the Ministry of Higher Education, Science and Innovation of the Republic of Uzbekistan with registration numbers B2024.2.PhD/K753**

The dissertation work was carried out at the Institute of General and Inorganic Chemistry.

The dissertation abstract is available in three languages (Uzbek, Russian, and English (summary)) on the Scientific Council's website (ik-kimyo.nuu.uz) and on the "ZiyoNET" information and educational portal (www.ziynet.uz).

**Academic Supervisor:**

**Ibragimov Aziz Bakhtiyarovich**  
Doctor of Chemical Sciences, Professor

**Official opponents:**

**Umarov Bako Bafaevich**  
Doctor of Chemical Sciences, Professor  
**Rakhmonova Dilnoza Salamovna**  
Candidate of Chemical Sciences, Associate Professor

**Leading organization:**

Tashkent State Pharmaceutical Institute

The defense of the dissertation will take place at the meeting of the Academic Council under the number DSc.03/30.12.2019.K.01.03 at the National University of Uzbekistan on 22.02. 2024 at 14<sup>00</sup> o'clock. Address: 100174, Tashkent, University str. 4. Ph.: (99871) 246-07-88; (998 71)227-12-24, fax: (99871) 246-53-21. E-mail: [ilmiy\\_kengash@nuu.uz](mailto:ilmiy_kengash@nuu.uz).

The dissertation can be found at the Information Resources Center of the National University of Uzbekistan (registered under the number 8). Address: 100174, Tashkent, University str. 4. Ph.: (99871) 246-07-88; (998 71)227-12-24, fax: (99871) 246-53-21.

Abstract of dissertation sent out on « 4 » February 2025 y.  
(mailing report № 5 from « 3 » February 2025 y.)



## INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

**The aim of the research:** synthesis, structure, biological activity and 3D modeling of new coordination compounds based on 5-sulfosalicylic acid.

**The aim of the research** work are 5-SSA, MEA, Co (II), Ni (II), Cu (II), Mn (II), Zn (II) and Ag (I) salts, coordination compounds obtained as a result of synthesis, gram (+) and gram (-) bacteria, 3D models created using programs about the structure and properties of coordination compounds.

**The scientific novelty is as follows:**

For the first time, 12 coordination compounds with discrete and polymeric structures were synthesized using Co (II), Ni (II), Cu (II), Zn (II), Mn (II), and Ag (I) ions of 5-SSC and MEA.

The composition, structure, and properties of the coordination compounds obtained through X-ray diffraction, IR spectroscopy, UV spectroscopy, and DTA methods were determined. It was found that in hexagonal octahedral geometry,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$  are discrete coordination compounds;  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})]\}_n$  and  $\{[\text{Ag}_2(\text{H}_2\text{O})_3(5\text{-SSA})_2]\text{H}_2\text{O}\}_n$  are polymer coordination compounds; and  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSA})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSA})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ , and  $\{[\text{Cu}(5\text{-SSA})_2](\text{MEA})_2(\text{H}_2\text{O})_2\}_n$  are mixed-ligand polymer coordination compounds;

For the first time, it has been established that the newly synthesized coordination compounds exhibit a highly selective effect against pathogenic bacteria. The results of binding complexes  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$  to pathogenic bacterial proteins, obtained using the "in silico" approach, have been confirmed by the traditional «in vivo» method.

The stability constants of the newly synthesized monoligand coordination compounds  $[[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$ ,  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})]\}_n$  were studied using spectroscopic methods. It was determined that  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  is the most stable compound in solutions.

The Hirshfeld surface properties have been determined using crystallographic data for the synthesized coordination compounds  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Zn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Ni}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$  and  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})]\}_n$

It has been determined that all synthesized coordination compounds are biologically active against bacteria and belong to the category of 4th class «low-toxicity» chemical compounds.

**The practical results of the research are as follows:**

Favorable conditions have been determined for the synthesis of discrete and polymer coordination compounds of 5-SSA with Co (II), Ni (II), Cu (II), Zn (II), Mn (II), and Ag (I) ions, as well as mixed-ligand polymer coordination compounds of 5-SSA and MEA in the presence of Cu (II) and Mn (II) ions;

The structural data and all crystallographic parameters of  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSA})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSA})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  va  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})]\}_n$  have been deposited in the Cambridge Crystallographic Database for the synthesis of similar compounds and for use by scientific researchers.

It has been determined that monoligand coordination compounds based on 5-SSA have high antibacterial activity, possess disinfecting properties, and are of low toxicity (class 4). In contrast, mixed-ligand polymer coordination compounds have low antibacterial activity but also fall into the category of low-toxicity compounds (class 4).

**Implementation of the research results.** Based on the structure, biological activity, and other properties of the coordination compound  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$ , synthesized by combining 5-SSA with Cu (II), an author's certificate was obtained from the state institution "Intellectual Property Center" of the Ministry of Justice of the Republic of Uzbekistan, registered under No. IAP 7856.

Based on the disinfecting properties of  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2] \cdot \text{H}_2\text{O}$  and  $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})_2]$  complexes, obtained by synthesizing 5-SSA with Cu (II), against pathogenic bacteria, these compounds were tested against microorganisms causing corrosion in the structures and installations of the «Muborak Gas Processing Plant» and implemented in practice as inhibitors of the corrosion process (according to the certificate of the «Muborak Gas Processing Plant» No. 985/GK-11 dated 22.11.2024). As a result, it was possible to slow down the corrosion process in the plant's structures and installations and maintain them in working condition for a long time.

Based on the spatial structure, all crystallographic parameters, and individuality of the coordination compounds  $\{[\text{Cu}_3(5\text{-SSA})_2(\text{MEA})_4](\text{H}_2\text{O})_2\}_n$ ,  $\{[\text{Mn}(5\text{-SSA})_2](\text{MEA})(\text{H}_2\text{O})\}_n$ ,  $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_6](5\text{-SSA})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  and  $\{[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(5\text{-SSA})]\}_n$  synthesized on the basis of 5-SSA, they were registered in the Cambridge Crystallographic Database under the deposit numbers No2384143, No2384144, No2384145, No2407466, and No2407467 respectively. As a result, scientists around the world have gained access to the synthesis and structural data of these compounds.

**Dissertation Volume and Structure.** The dissertation comprises an introduction, four chapters, a conclusion, a list of references, and appendices. The total volume of the dissertation is 101 pages.

**E'LON QILINGAN ISHLAR RO'YXATI**  
**СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ**  
**LIST OF PUBLISHED WORKS**

**I bo'lim (I часть; I part)**

1. Normamatov A., Ibragimov A., Ruzmetov A., Khaitbaev A., Toshov Kh. Spectroscopic analysis of synthesis and structure of coordination compounds of 5-sulfosalicylic acid with certain 3d metals // Uzbek Chemical Journal. –Tashkent, 2022. – №6. –P. 58-63.(02.00.00,№6)

2. Normamatov A.S., Ibragimov B.T., Ibragimov A.B., Kodamboev P.K., Juraev A.Sh. Coordination polymer of Cu(II) with 5-sulfosalicylic acid and monoethanolamine: synthesis, structure and hirshfeld surface analysis // ISJ Theoretical & Applied Science, 2024. –№11 (139), –P. 377-383. (РИИЦ (Russia)=0.191)

3. Normamatov A.S., Ibragimov B. T., Ibragimov A. B. Synthesis, structure, antibacterial activity and toxicity of Co(II) complex with 5-sulfosalicylic acid // International Journal of Current Research in Multidisciplinary, 2024. Vol. 9, No. 11, pp 01-06 (SJIF 3.66).

4. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Toshov X.S., Mamatumarov M., Mirsaidov M., No'monov M.A., Ergashov D.A., Sodiqov U.X. 5-sulfosalitsil kislotasining kumushli koordinatsion polimer birikmasi sintezi, tuzulishi, biologik faolligining in vitro va in silco tahlili // Scientific-technical journal–FerPI, 2024. T.28. спец.выпуск № 26 –С. 132-140 (02.00.00; OAK Rayosatining 2021 yil 4 iyundagi 300/5-son qarori)

5. Ibragimov A.B., Normamatov A.S., Ruzmetov A.X., Yakubov Y.Y., Myachina O.V., Kim R.N., Mamasaliyeva L.E., Zhao Jiangyu, Ajiakebaier Aisa. Mikroblarga qarshi faollikka ega 5-sulfosalitsil kislotasi bilan mis (II)ning kompleks birikmasi // O'zbekiston Respublikasi Ixtirolar davlat reyestri Patent № IAP 7856, 25.10.2024 yilda ro'yxatdan o'tkazildi

**II bo'lim (II часть; II part)**

1. Normamatov. A.S., Ibragimov A.B. 5-nitrosalitsil kislotasining metallar bilan koordinatsion birikmalar hosil qilish qobiliyati / “Kimyo, metallurgiya, neft-kimyo sanoatining mineral va texnogen xom ashyolarini qayta ishlash va qurilish materiallari ishlab chiqarishning innovatsion texnologiyalari” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari. –Toshkent, 2022. 12-14 may. –B. 289-290

2. Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Cu<sup>2+</sup> va Ni<sup>2+</sup> ionlari bilan sulfosalitsil kislotasi hosil qilgan koordinatsion birikmalarning IQ va UB spektroskopik tahlili /, “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusidagi Xalqaro ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to'plami. –Buxoro, 2022. 22-23-dekabr. –B. 198-201.

3. Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Synthesis and structure of a new complex based on 5-sulfosalicylic acid and Cu(II) / “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusidagi Xalqaro ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to‘plami. –Buxoro, 2022. 22-23-dekabr. –B. 97.

4. Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Synthesis and structure of the new metal complex of 5-sulfosalicylic acid / “Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusidagi Xalqaro ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to‘plami. –Buxoro, 2022. 22-23-dekabr. –B. 98.

5. Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Sulfosalitsil kislotasining mis metali bilan hosil qilgan komplekslarini hirshfeld yuzalar tahlili / “Нодир ва ноёб металллар кимёси ва технологияси: бугунги ҳолати, муаммолари ва истиқболлари” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari to‘plami. 1-qism. –Termiz, 2023. 28-29-aprel. –B. 106-107.

6. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Structural analysis of the supramolecular compound formed by 5-Sulfosalicylic acid with monoethanolamine / “Zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining ilmiy va ishlab chiqarish sohasidagi integratsiyasi” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy anjumani materiallari. Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy universiteti. –Toshkent, 2023. 22-23-sentyabr. –B. 78-79.

7. Normamatov A.S., Ibragimov A.B. Hirschfeld surface analysis of the coordination compound of sulfosalicylic acid with Co (II) and Ni (II) Hirschfeld surface analysis of the coordination compound / “Zamonaviy fizik-kimyoviy tadqiqot usullarining ilmiy va ishlab chiqarish sohasidagi integratsiyasi” mavzusidagi ilmiy-amaliy anjumani materiallari. Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston milliy universiteti. –Toshkent, 2023. 22-23-sentyabr. –B. 130-131.

8. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Ruzmetov A.X., Haji Akber Aisa., Zhao Jiangyu. 5-sulfosalitsil kislotasining biologik faolligi: keng qamrovli sharh / “O‘zbekistonning mineral-xom ashyo resurslarini qayta ishlashda yuqori texnologiyalarni yaratish va ulardan foydalanishning dolzarb muammolari” mavzusidagi Xalqaro ilmiy-texnikaviy konferensiyasi materiallari. –Toshkent, 2023. 16-17-noyabr. –B. 493.

9. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Ruzmetov A.X., Haji Akber Aisa., Zhao Jiangyu. Review of hirschfeld surfaces of monoethanolamine salt of sulfosalicylic and nitrosalicylic acids / “O‘zbekistonning mineral-xom ashyo resurslarini qayta ishlashda yuqori texnologiyalarni yaratish va ulardan foydalanishning dolzarb muammolari” mavzusidagi Xalqaro ilmiy-texnikaviy konferensiyasi materiallari. –Toshkent, 2023. 16-17-noyabr. –B. 494.

10. Shaymanova I.I., Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Adipin kislotasining  $\text{Co}^{2+}$  ioni bilan hosil qilgan koordinatsion / “Kimyo, metallurgiya, neft-kimyo sanoatining mineral va texnogen xom ashyolarini qayta ishlash va qurilish materiallari ishlab chiqarishning innovatsion texnologiyalari” mavzusidagi Respublika ilmiy-amaliy konferensiyasi materiallari. –Toshkent, 2022. 12-14 may. –B. 291-292

11. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Haji Akber Aisa., Zhao Jiangyu. Synthesis, structure, antibacterial activity and toxicity of Co(II) complex with 5-sulfosalicylic acid / On the topic of Theory of scientific researches of whole world European science international conference. –Switzerland. 2024. Vol. 1, No. 2, pp 295-299.

12. Normamatov A.S., Ibragimov A.B., Haji Akber Aisa., Zhao Jiangyu. Coordination polymer of Cu (II) with 5- sulfosalysilic acid and monoethanolamine: synthesis, structure and hirshfeld surface analysis / On the topic of modern problems in education and their scientific solutions European science international conference. – England. 2024. Vol. 1, No. 3, pp 379-387.