

Masharipov Azamat Tursinboyevich
Xorazm Ma'mun akademiyasi erkin tadqiqotchisi
Hasanov Shodlik Bekpo'latovich
Xorazm Ma'mun akademiyasi
ilmiy ishlar bo'yicha rais o'rinbosari, k.f.n.
Abdullayeva Zubayda Shavkatovna
Xorazm Ma'mun akademiyasi katta ilmiy xodimi, PhD
Xudoyberganov Oybek Ikromovich
Xorazm Ma'mun akademiyasi katta ilmiy xodimi, PhD
E-mail: shadlik@mail.ru

**QUANTUM CHEMICAL ANALYSIS OF MIXED LIGAND COORDINATION
COMPOUND SYNTHESIS BASED ON CoCl_2 , CEFOTAXIME AND UREA**

Annotation: In order to determine the optimal conditions for the method of synthesis of a complex compound with a mixed ligand based on cobalt (II) chloride, cefotaxime and urea, the energetic and geometric parameters of the initial substances were quantum chemical taxilized. The cross-link mole ratios of metals and ligands have been determined in the complex compound, the synthesis of which is envisaged. On the basis of the theoretical data obtained, a coordination compound was synthesized and an element analysis was carried out in order to determine its composition.

Keywords: coordination compound, cefotaxime, urea, scanning electron microscope and energy dispersion analysis (SEM-EDT), quantum-chemical computing

Машарипов Азамат Турсинбаевич
Исследователь-фрилансер Хорезмская академия Мамуна
Хасанов Шодлик Бекпулатович
Хорезмская академия Мамуна
заместитель председателя по научной работе, К.х.н.
E-mail: shadlik@mail.ru
Абдуллаева Зубайда Шавкатовна
Старший научный сотрудник Хорезмская академия Мамуна, PhD
E-mail: zubayda.abdullayeva.91@mail.ru
Худойберганов Ойбек Икромович
Старший научный сотрудник Хорезмская академия Мамуна, PhD

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СИНТЕЗА СМЕШАННОГО ЛИГАНДНО-КООРДИНАЦИОННОГО СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ CoCl₂, ЦЕФОТАКСИМА И МОЧЕВИНЫ

Аннотация: С целью определения оптимальных условий метода синтеза смешанного лигандного комплексного соединения на основе хлорида кобальта (II), цефотаксима и мочевины был проведен квантово-химический анализ энергетических и геометрических параметров исходных веществ. В комплексном соединении, которое предполагается синтезировать, определены мольные соотношения сшивки металлов и лигандов. На основе полученных теоретических данных было синтезировано координационное соединение и проведен элементный анализ с целью определения его состава.

Ключевые слова: координационное соединение, Цефотаксим, мочевины, сканирующий электронный микроскоп и энергетический дисперсионный анализ (SEM-EDT), квантово-химические вычисления.

Masharipov Azamat Tursunbaevich
Freelance researcher Khorezm Mamun Academy
Hasanov Shodlik Bekpulatovich
Deputy Chairman for Scientific Work, c.ch.s. Khorezm Mamun Academy
Abdullayeva Zubayda Shavkatovna
Senior Researcher Khorezm Mamun Academy, PhD
E-mail: zubayda.abdullayeva.91@mail.ru
Khudoyberganov Oybek Ikromovich
Senior Researcher Khorezm Mamun Academy, PhD
E-mail: shadlik@mail.ru
CoCl₂, SEFOTAKSIM VA KARBAMID ASOSIDA ARALASH LIGANDLI
KOORDINASIION BIRIKMA SINTEZ QILISHNING KVANT KIMYOVIY
TAHLILI

Аннотация: Кобальт (II) хлорид, сефотаксим ва карбамид асосида аралаш лигандли комплекс бирикмасининг синтез қилиш усулининг оптимал шароитини аниқлаш мақсадига дастлабки моддаларнинг энергетик ва геометрик параметрлари квант кимйовий тахлил қилинди. Синтези қилиниши ко'зда тўтилайотган комплекс бирикма таркибига металл ва лигандларнинг о'заро бог'ланish мол нисбатлари аниқланди. Олинган назарий

ma'lumotlar asosida koordinatsion birikma sintez qilindi va uning tarkibini aniqlash maqsadida element tahlili amalga oshirildi.

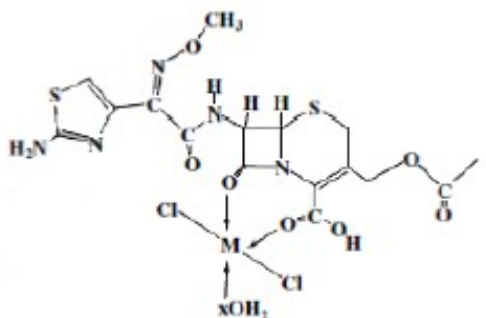
Kalit so'zlar: koordinatsion birikma, sefotaksim, karbamid, skanerlovchi elektron mikroskop va energiya dispersion tahlil (SEM-EDT), kvant-kimyoviy hisoblash

Kirish (Introduction). Tirik organizmlarning hayotida kompleks birikmalarning roli juda katta. Organizm ko'plab koordinatsion birikma hosil qiluvchi moddalar va biologik faol ligandlardan tashkil topgan tizimni ifodalaydi va ular orasida ma'lum bir nisbat mavjud. Ligand komponentining metall bilan muvozanatining buzilishi patologik holatlarning rivojlanishiga olib keladi. Shuning uchun ba'zi biometallarning organik ligandlar bilan o'zaro ta'siri jarayonlarini o'rganish yangi dori-darmonlarni izlashning kalitidir. Metabolik jarayonlarda biokataliz asosiy rol o'ynaydi. Unda tarkibida Co biokomplekslari bo'lgan organik fermentlar ishtirok etadi. Bunday fermentlar tengsiz ta'sir samaradorligi va yuqori selektivlikka ega noyob katalizatorlardir.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili (Literature review). Sefotaksim uchinchi avlod sefalosporinlar guruhining antibiotiki bo'lib, keng ta'sir doirasiga ega. U amfoter antibiotiklar turiga kiradi [1] va tarkibida aminotiazol va karboksil guruhlari mavjud. Kislotali muhitda u kation yoki tsvitter ion, neytral va ishqoriy muhitda anion sifatida mavjud. Tibbiyotda natriy tuzi NaCxm shaklida qo'llaniladi [2].

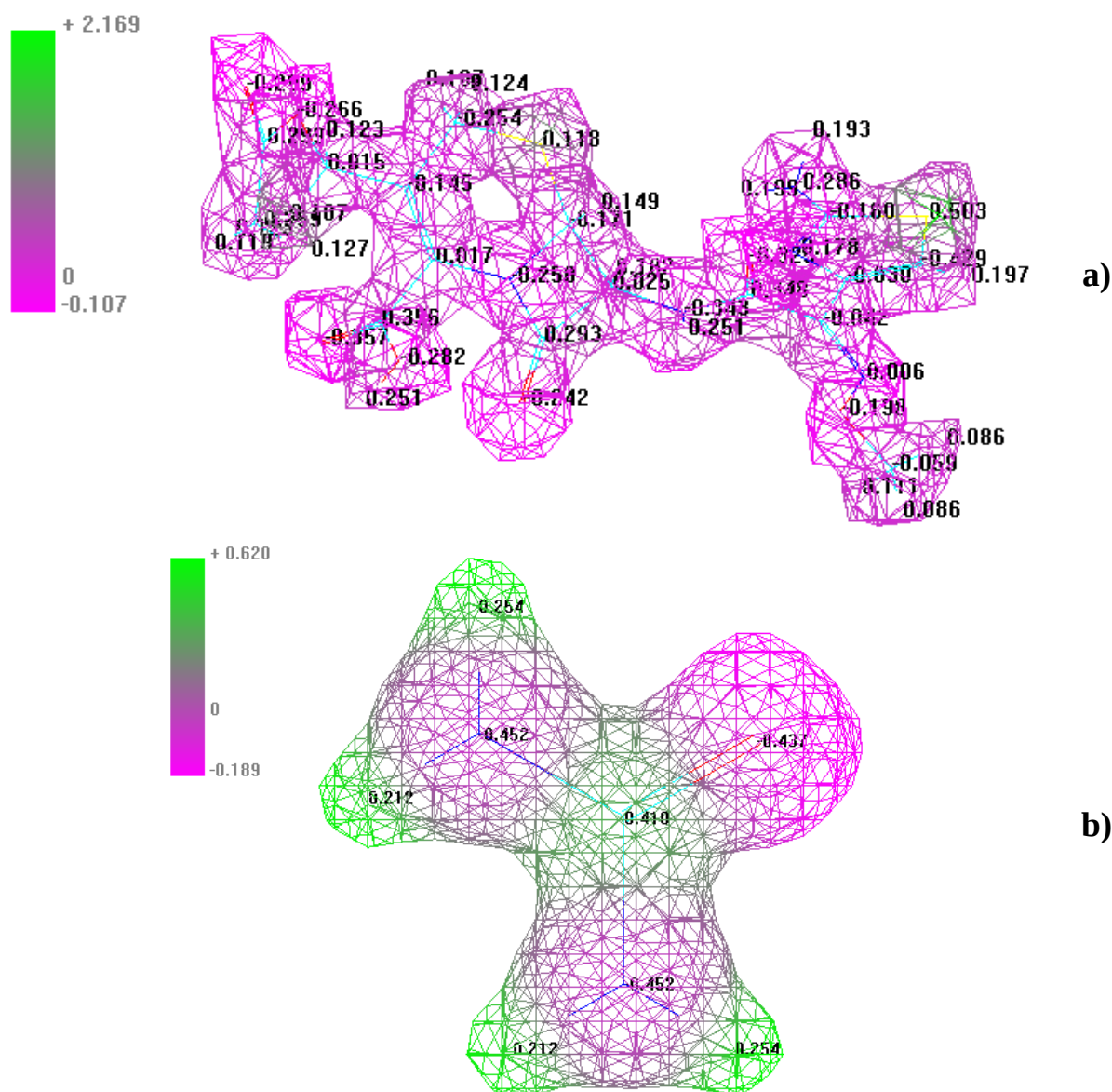
Tsefalosporin molekulalari metall kationlari bilan o'zaro ta'sir qilishda murakkab birikmalar hosil qilish imkonini beruvchi elektron beruvchi funktsional guruhlarni o'z ichiga oladi [3]. Ko'pgina dorilar metall komplekslar shaklida bo'lganida o'zgartirilgan toksikologik va farmakologik xususiyatlarga ega bo'ladi [4]. Bu borada eng ko'p o'rganilgan metall mis(II) bo'lib, u sil [5], oshqozon yarasi [6], revmatoid artritis [7] va saraton [8] kabi kasalliklarda foydali ekanligini isbotladi. [9] da $[\text{Zn}(\text{Cxm})_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ tarkibiga ega sefotaksimning rux kompleksi olingan va o'rganilgan. Ammo ushbu ishda mualliflar kompleksning koordinatsion sohasi tuzilishi haqida hech qanday xulosaga kelishmagan. [10] da $[\text{Zn}(\text{Cxm})\text{Cl}_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ tarkibiga ega kompleks birikmasini sintez qilish bo'yicha ma'lumot berilgan. Olingan

birikmaning tuzilishi fizik va kimyoviy usullar yordamida taxlil qilinib, quyidagicha struktura taklif qilingan:



Ushbu natijalar qattiq holatda bog‘lanish usullari va olingan kompleks birikmalarning biologik faolligini o‘rganish uchun muhim ahamiyatga ega.

Tadqiqot metodologiyasi (Research Methodology). Ma’lumki, hozirgi vaqtda kvant kimyosi ko‘plab hisoblashlar natijalari bilan biokimyoviy, materialshunoslik va boshqa fundamental va amaliy masalalarni yechishda yaxshi eksperimental ma’lumotlari va chuqur yondoshuvlari bilan yuqori darajali metod hisoblanib kelinmoqda. Kvant kimyoviy metodlar nafaqat alohida molekula tizimining xususiyatlarini hisoblash, balki tanlangan molekulalar sinflariga xos bo‘lgan umumiy qonuniyatlarni aniqlash, kimyoda mavjud bo‘lgan qonuniyatlarni asoslash imkonini beradi, balki umumiy qonuniyatlarga ta’siri, bog‘likligini o‘rganish bilan ushbu munosabatlarni o‘rnatish uchun asoslarni aniqlash imkonini beradi. Kvant-kimyoviy hisoblash usullari asosida ko‘pfunksional ligandlarning koordinatsiyaga uchraydigan raqobatdosh donor markazlarini oldindan aytib berish imkonini beradi. Ushbu ishda HyperChem 8.07 dasturi yarim empirik usuli yordamida sefotaksim va karbamid molekulalarining reaksiya qobiliyati kvant-kimyoviy tahlil qilindi.



1-rasm. Semi-emperical/Am1/UHF metodi bo'yicha sefotaksim (a) va karbamid (b) ligandlarning effektiv zaryadlarning taqsimlanishi

Ligandlar molekulasining energetik, geometrik va elektron xususiyatlari hisoblandi. Ligandlarning burchak va bog' uzunlik qiymatlari aniqlandi. Kvant-kimyoviy tadqiqotlar model tuzish, uni optimizasiyalash, spektroskopik va termodifferensial hisoblashlar olib borish, natijalarni qayta ishlash va vizualizatsiyalash kabi ketma-ket bir nechta bosqichni o'z ichiga oladi.

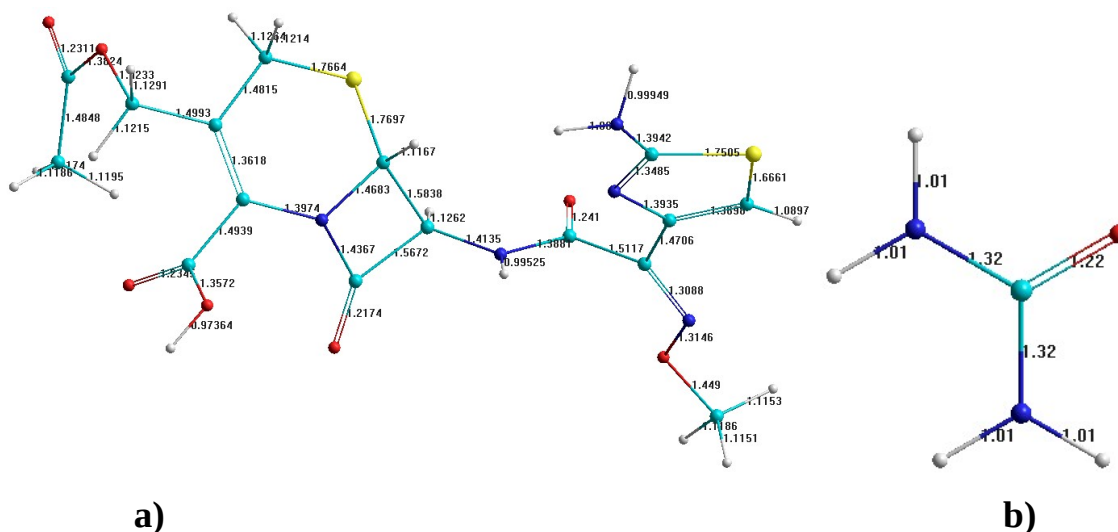
Kvant kimyoviy hisoblashlar ligand molekulasining mumkin bo'lgan koordinatsiya markazlari, koordinatsiyalanish imkoniyatlari, energetik, geometrik va elektron parametrlarini hisoblash maqsadida o'tkazildi. Ushbu hisoblashlar Semi-emperical/Am1/UHF foydalanilgan holda bajarildi (1-rasm).

Ko'rsatilgan hisoblash natijalari bo'yicha ligandlarning minimal hosil bo'lish energiyasi bo'yicha aniqlandi. Ligand molekulalarining hosil bo'lish energiyasi (1-jadval) past ekanligi, ligandlarning barqarorligidan dalolat beradi.

1-jadval

Ligandlarning hosil bo'lish energiyalari

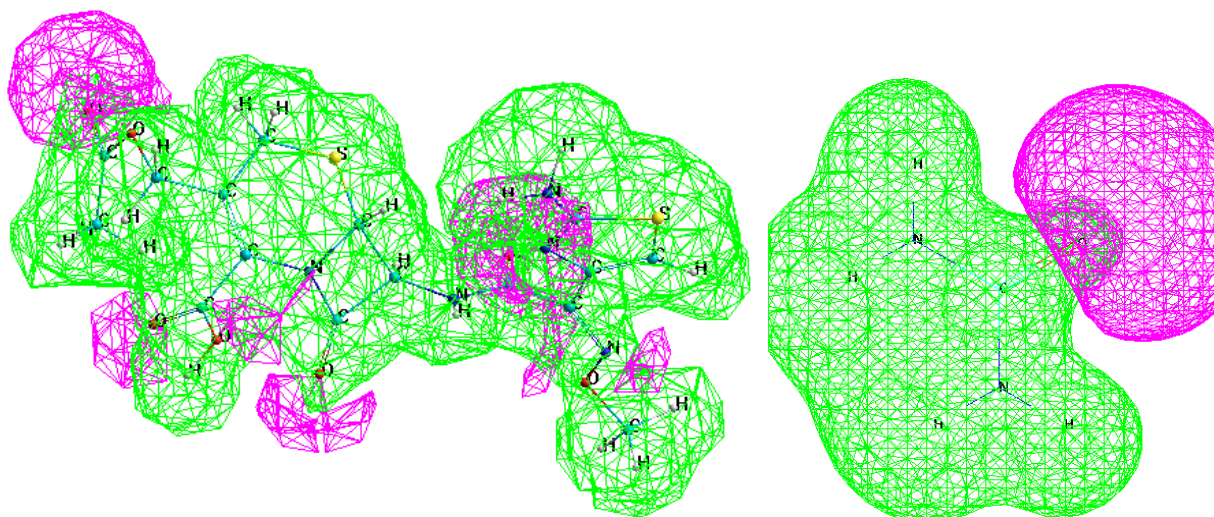
Usullar	$E_{\text{sefotaksim}}$ (Hartrees)	E_{karbamid} (Hartrees)
Semi-emperical/ Am1/UHF	-79,869	-158,325



2-rasm. Semi-emperical/Am1/UHF metodi bo'yicha sefotaksim (a) va karbamid (b) molekulalarining geometrik tuzilishi va atomlararo bog' uzunliklari

Ligandlar donor atomlardagi zaryadlarning miqdori bo'yicha molekuladagi eng yuqori manfiy effektiv zaryad karbonil guruhdagi kislorod atomida (-0.373 va -0.390 eV, Semi-emperical/Am1/UHF bo'yicha), amino guruhning azot (-0.031 va -0.101 eV Semi-emperical/Am1/UHF bo'yicha) atomida aniqlanganligi ko'rinadi (2-rasm).

Ligandlar molekulalarining donor va reaksion faol atomlaridagi elektron zichliklar va effektiv zaryadlarning qiymatlariga asoslanib keltirilgan natijalar adabiyotlardagi ma'lumotlarga to'g'ri kelishi aniqlanildi (3-rasm).

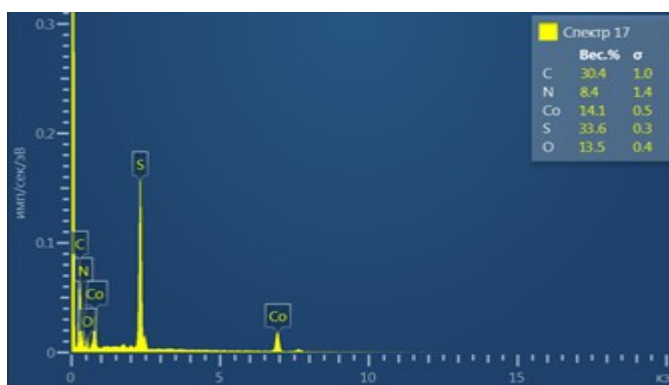
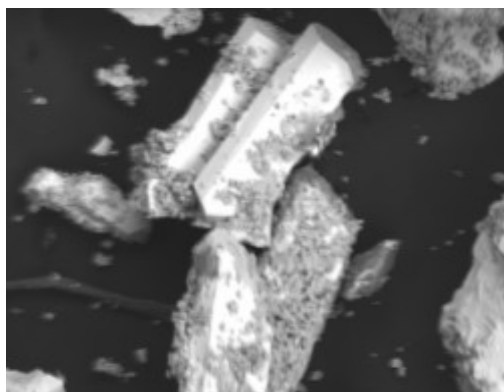


3-rasm. Sefotaksim va karbamid molekularidagi elektronodonor markazlar

Bundan kelib chiqadiki, kompleks hosil qilishda potensial tetra, penta va geksadentatlik qiladigan ligandlar molekularida karbonil guruhdagi kislorod atomi va amino guruhdagi azot atomi orqali bog'lanishi mumkin. Bunda yana bu ikkala yuqori manfiylikni ko'rsatadigan markazlar molekulaning ikkala tomonida joylashganligi uchun yoki poliyadroli kompleks hosil qilib ikki metall ioni orasida ko'prik sifatida hosil qilishi yoki faqat bir tomonda turgan atomlar (C=O yoki H₂N-C) bidentant holatda koordinatsiyalanishi mumkin.

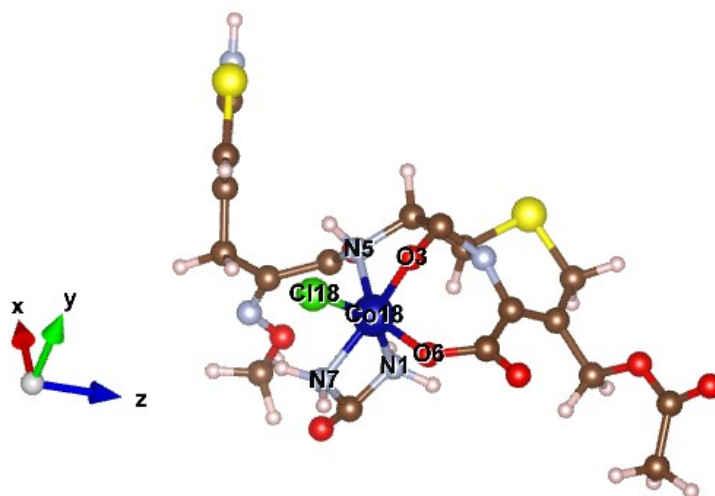
Olingan kvant kimyoviy natijalar asosida 1:1:1 nisbatda aralash ligandli kompleks birikmani sintez qilishning optimal sharoiti ekanligi aniqlandi va quyidagi usuldan foydalanildi: CoCl₂ (0.001 mol), sefotaksim (0.001 mol) va karbamid (0.001 mol) ning mos ravishda suvli, atsetonitrilli va suvli eritmaları magnitli aralashtirgich yordamida daqiqasiga 800 aylanma tezlikda, 40°C haroratda, 1.5 soat davomida o'zaro aralashtirildi. Natijada to'q qizil rangli eritma olindi [11]. Ushbu eritma tarkibida kristallar hosil bo'lgunga qadar 12 kunga xona haroratida qoldirildi.

Tahlil va natijalar (Analysis and results). Olingan aralash ligandli koordinatsion birikmaning tarkibidagi elemenlarning nazariy hisoblangan miqdorlariga solishtirish maqsadida reaksiya natijasida olingan kompleks birikmalarning tarkibini skanirlovchi elektron mikroskop – energiya dispersion tahlil (SEM-EDT) usuli yordamida element analizi amalga oshirildi (4-rasm) va ularning miqdorlari bir-biriga mos ekanligi aniqlandi.



4-rasm. $[\text{CoC}_{17}\text{H}_{20}\text{N}_7\text{O}_8\text{S}_2\text{Cl}]$ mikrostrukturasi (a) va EDT natijasi (b)

SEM-EDT natijalariga ko'ra, metall ioni bilan kompleks hosil bo'lishi va ligandning mikro tuzilishini o'zgarishi bilan birgalikda, metall ioni uchun xarakterli bo'lgan ko'p sonli cho'qqilar qayd etildi. Yangi kompleks birikmaning kristallik darajasi ham aniqlandi. Kvant kimyoviy tahlil natijasida eng minimal energiya mos keluvchi strukturaning SEM-EDT tahlili natijasida olingan ma'lumotlar bilan solishtirilganda kobalt uchun ushbu koordinatsion birikmada 6 koordinatsion soni mos kelishi aniqlandi (5-rasm).



5-rasm. $[\text{CoC}_{17}\text{H}_{20}\text{N}_7\text{O}_8\text{S}_2\text{Cl}]$ birikmaning fazoviy tuzilishi

Xulosa (Conclusion). Kobalt (II) xloridning sefotaksim va karbamid bilan aralash ligandli kompleks birikmasi sintez qilindi. Yangi sintez qilingan birikmaning koordinasion bog'lanish hosil qilganligini isbotlash maqsadida SEM-EDT va kvant-kimyoviy hisoblashlar amalga oshirildi. Olingan natijalar asosida $[\text{CoC}_{17}\text{H}_{20}\text{N}_7\text{O}_8\text{S}_2\text{Cl}]$ birikmasining tarkibidagi kobalt sefotaksim ligandidagi karboksil guruhi anioni kislorodi va xlorid anioni orqali ion bog'lanish, to'rt a'zoli

geteroxalqa karbonili va amid bog' tarkibidagi azot atomlari hamda karbamid ligandi tarkibidagi amino guruhi azot atomlari bilan koordinasion bog'lanish orqali birikib, 6 koordinatsion sonini hosil qilganligi aniqlandi.

ADABIYOTLAR

1. Jha, R. Structure and derivatographic study of Co(II) complexes of salicylic acid and thiosalicylic acid. // Asian Journal of Chemistry. 2001, vol. 13, nr. 3, pp. 1048-1054. ISSN 0970-7077.

2. Saelim, T., Chainok, K., Kielar, F., Wannarit, N. Crystal structure of a novel one-dimensional zigzag chain-like cobalt(II) coordination polymer constructed from 4,4'-bipyridine and 2-hydroxybenzoate ligands.//Acta Crystallographica Section E. 2020, vol. 76, nr. 8, pp. 1302-1306. ISSN: 2056-9890. DOI: 10.1107/S2056989020009482.

3. Fan, X., Huang, X., Wang, K., Sun, T., Wu, H. (2-Hydroxybenzoato-kO1) [tris(1-methylbenzimidazol-2-ylmethyl-kN3)amine-PIYAkN]cobalt(II) perchlorate dimethylformamide sesquisolvate. // Acta Crystallographica Section E. 2008, vol. 64, nr. 11, pp. M1455. ISSN 2056-9890. DOI: 10.1107/S1600536808033758.

4. J. R. Anacona, J. J. Santaella. In vitro, antibacterial activity of metal complexes containing a cephaclor derivative ligand // Latin American Journal of Pharmacy, - 2013. - №1. - pp. 101–106.

5. J. R. Anacona, M. Lopez. Mixed-ligand nickel(II) complexes containing sulfathiazole and cephalosporin antibiotics synthesis, characterization, and antibacterial activity // International Journal of Inorganic Chemistry, - 2012, - Article ID106187. - pp.8.

6. K. Singh, Y. Kumar, P. Puri, and G. Singh. Spectroscopic, thermal, and antimicrobial studies of Co(II), Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes derived from bidentate ligands containing N and S donor atoms // Bioinorganic Chemistry and Applications. - 2012. - Article ID729708. - 9 p.

7. M. R. Karekal, V. Biradar, M. B. H. Mathada. Synthesis, characterization, antimicrobial, DNA cleavage, and antioxidant studies of some metal complexes derived from Schiff base containing indole and quinoline moieties // Bioinorganic

Chemistry and Applications, - 2013. - Article ID 315972. - 16 p.

8. Зеер Г.М., Фоменко О.Ю., Ледеява О.Н. Применение сканирующей электронной микроскопии в решении актуальных проблем материаловедения // Журнал Сибирского федерального университета. – 2009. – Т.2. – №4. – С.287-293.

9. Калмыков К.Б., Дмитриева Н.Е. Сканирующая электронная микроскопия и рентгено-спектральный анализ неорганических материалов. Методическое пособие. Москва, – 2017. – С.54.

10. Е.В. Иванова, Родионова О.А., Фипагенова Г.О., Никифорова А.А., Балашев К.П. Циклометаллированные комплексы платиновых металлов с пространственным переносом энергии фотовозбуждения. // Материалы XXIV Международной Чугаевской конференции по координационной химии. Санкт-Петербург, 2009 (июнь). С. 74-75.

11. Ш.А.Кадирова, З.Ш.Абдуллаева, Ш.Б.Хасанов. Гетерометаллический комплекс формиата никеля (II) с ацетатом цинка // Universum: Химия и биология: электрон. научн. журн. – 2021. – № 8(86). – С. 46-49.