Journal of Chemistry of Goods and Traditional Medicine

J Chem Good Trad Med, Volume 3, Issue 1, 2024 Chemistry of Goods

ENZOKSAZOLIN-2-TION PROPION KISLOTA VA CO (II) IONI ASOSIDA YANGI KOMPLEKS SINTEZI HAMDA UNING IQ-SPEKTRAL VA NAZARIY TAHLILLARI

Baxodir Sharifovich Amanov
Termiz muhandislik-texnologiya instituti, Ilmiy-tadqiqotlar, innovatsiyalar va ilmiy-pedagogik kadrlar tayyorlash bo‘limi boshlig‘i
E-mail: baho78.78@mail.ru
https://orcid.org/0009-0001-3333-3800

Jamshid Mengnorovich Ashurov
O‘zR FA Bioorganik kimyo instituti, Kompleks birikmalar laboratoriyasi mudiri, kimyo fanlari doktori, professor
https://orcid.org/0000-0002-4441-2803

Abdusamat Abdujabborovich Rasulov
O‘zR FA O.S.Sodiqov nomidagi Bioorganik kimyo intituti, Kompleks birikmalar laboratoriyasi kichik ilmiy xodimi
https://orcid.org/0009-0005-3905-5556

Bekmurod Xurramovich Alimnazarov
Termiz davlat universiteti, Noorganik kimyo kafedrasi dotsenti, PhD
https://orcid.org/0000-0001-6226-4069

Lola Baxodirovna Sharifova
Termiz davlat universiteti, Kimyo ta’limi yo’nalishi 1-kurs talabasi
https://orcid.org/0009-0007-7736-0636

DOI: https://doi.org/10.55475/jcgtm/vol3.iss1.2024.252

Kalit so‘zlar:
benzoksazolin-2-tion propion kislota, kobalt (II) xlorid, spirt, suv, monodentat, energiya, Hirshfeld

Annotatsiya.
Ushbu maqolada benzoksazolin-2-tion propion kislota (BPK) va kobalt (II) ioni bilan yangi $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli kompleksining sintezi hamda tadqiqot natijalari keltirilgan. Sintez qilingan metallokompleksning tarkibi, molekulyar va kristall tuzilishlari rentgen tuzilish tahlili (RTT) usulida aniqlangan. RTT natijalariga ko‘ra kompleksda kobalt (II) kationiga ikkita BPK ligandlari monodentat holatda va to‘rtta suv molekulalari ham monodentat holatda bog’lanib oktaedr tuzilishli akvokompleks hosil qiladi. Bundan tashqari, assimetrik birlikdagi tashqi koordinatsion soha bitta suv molekulasini o‘z ichiga oladi. Sintez qilingan metallokompleksning IQ-spektri hamda RTT ma’lumotlari asosida molekulalararo ta’sirlashish energiyalari va Hirshfeld sirt tahlili ham o‘rganilgan.

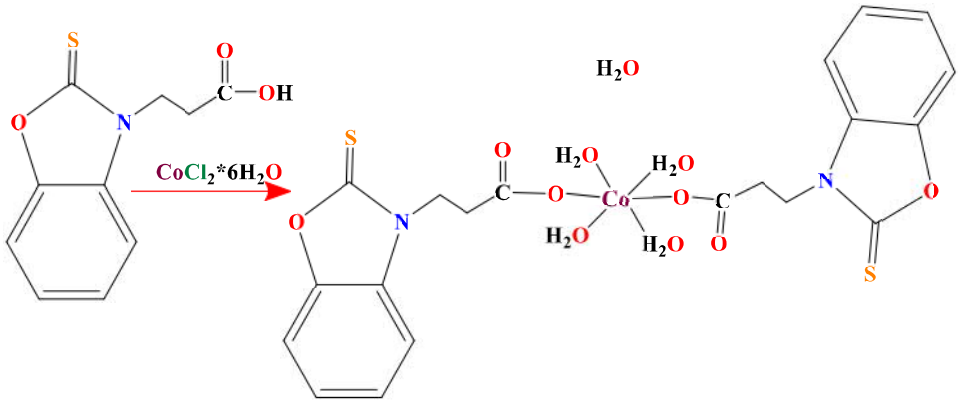
Havola uchun:
Amanov, B. S., Ashurov, J. M., Rasulov, A. A., Alimnazarov, B. X., & Sharifova, L. B. (2024). BENZOKSAZOLIN-2-TION PROPION KISLOTA VA Co (II) IONI ASOSIDA YANGI KOMPLEKS SINTEZI HAMDA UNING IQ-SPEKTRAL VA NAZARIY TAHLILLARI. Tovarlar Kimyosi Va Xalq Tabobati Jurnali, 3(1), 39–57. https://doi.org/10.55475/jcgtm/vol3.iss1.2024.252

Kirish. Benzoksazolin hosilalari geterosiklik birikmalarning muhim sinfi bo‘lib, biologik faolligi keng spektrli bo’lganligi tufayli katta qiziqish uyg‘otadi. Ular orasida insektitsidlar, gerbitsidlar, fungitsidlar va bakteritsidlar ma‘lum. Atrof muhitning ifloslanishi va zararli mikroorganizmlarning ko‘payib borishi hamda ularlarga qarshi kurashadigan vositalarga chidamliligining ortishi oqibatida yangi keng spektrli ta’sir doirasiga ega bo‘lgan insektitsid, gerbitsid, fungitsid va bakteritsidlarga ehtiyoj ortmoqda.

Mavzuga oid adabiyotlar tahlili. Ma’lumki, benzoksazolin hosilalari keng spektrdagi biologik faolliklarga ega. Shu jumladan, uning N-almashgan hosilalari ham farmakologik izlanishlarda bir nechta faolliklarga ega ekanligi aniqlangan [1]. Tarkibida benzoksazolin-2-tion va β-alanin kabi biologik faol fragmentlarni tutgan benzoksazolin-2-tion propion kislota (BPK) ham istiqbolli biologik faol birikmalardan biri hisoblanadi [2]. Biz ilgari BPKning [3] gidrati, solvati va tuzlarining kristall tuzilmalarini o‘rganib chiqdik va benzoksazolin hosilalarining ekzotsiklik faol qismlari turli kristall shakllarda molekulalar ichidagi va molekulalararo vodorod bog‘lanishlarni hosil qilishga moyil ekanligini ko‘rsatdi [4]. Xususan, BPKda karboksil guruhining harakatchan protoni osonlik bilan deprotonlanadi va turli organik tuzlar hosil bo‘lishida ishtirok etadi. Adabiyotlardan ma’lumki, benzoksazolin hosilasi bo‘lgan BPKning monokristallari olingan, uning rentgen difrasion tahlili, IQ va Raman spektrlari o‘rganilgan, Xirshfeld sirt tahlili o‘tkazilgan [5,6]. Shu bilan birga, ma’lum bioaktiv xususiyatlarga ega bo‘lgan BPKning metallokomplekslari sintez qilingan va o‘rganilgan [7,8]. Shundan kelib chiqqan holda, uning metallokomplekslarini sintez qilish hamda fizik-kimyoviy xossalarini o‘rganish dolzarb masalalardan biri hisoblanadi. Yuqoridagi holatlar inobatga olinib, kobalt (II) xlorid tuzining BPK bilan ta’sirlashishi suv+spirt aralashmasi ishtirokida olib borildi. Natijada hosil bo‘lgan monokristallar RTT usulida tekshirilganda $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli yangi kompleks ekanligi aniqlandi. Shuningdek, sintez qilingan kompleksning molekulalararo ta’sirlashish energiyalari, IQ-spektri hamda Hirshfeld sirt tahlili o‘rganildi.

Material va usullar: Kimyoviy moddalar, asboblar va hisoblash. Barcha reagentlar tijorat manbalaridan olingan va tozalashlarsiz qo‘llanilgan. Kristallning strukturasini aniqlash Oksford difraksion Xcalibur-R CCD (CuKa,- nurlanish, l=1,54184 Å, ω - skanerlash rejimi, grafit monoxromatorida (293K da)) amalga oshirilgan [9]. Struktura SHYeLX-97 dasturiy paketi yordamida olindi [10]. Mercury 2021.3.0 [11] dasturiga kiritilgan UNI kuch maydonlari [12] usulida aniqlandi. Shuningdek Crystal Explorer17.5 [13] dasturi yordamida Hirshfeld sirt tahlillari o‘tkazildi.

Kompleks birikma sintezi. BPK suv+spirt aralashmasidagi eritmasi bilan kobalt (II) xloridning distillangan suvdagi eritmalaridan mos ravishda 2:1 molyar nisbatda olinib foydalanildi. Hosil bo‘lgan eritmalarni mexanik aralashtirgich yordamida 20-25^oC haroratda 15-20 daqiqa davomida qizdirilib aralashtirildi, xona xaroratida qoldirilib kuzatishga qo‘yildi. Kuzatishlar natijasida 10-13 kundan so‘ng idish tubida qizg‘ish rangli ignasimon kristallar hosil bo‘lgani kuzatildi. Mikroskop orqali RTT uchun 0.1-0.5 mm o‘lchamdagi yaroqli monokristallar tanlab olinib, tahlil qilindi va kompleksning tuzilishi aniqlandi. Reaksiya tenglamasi quyidagicha taklif qilindi (1-rasm).



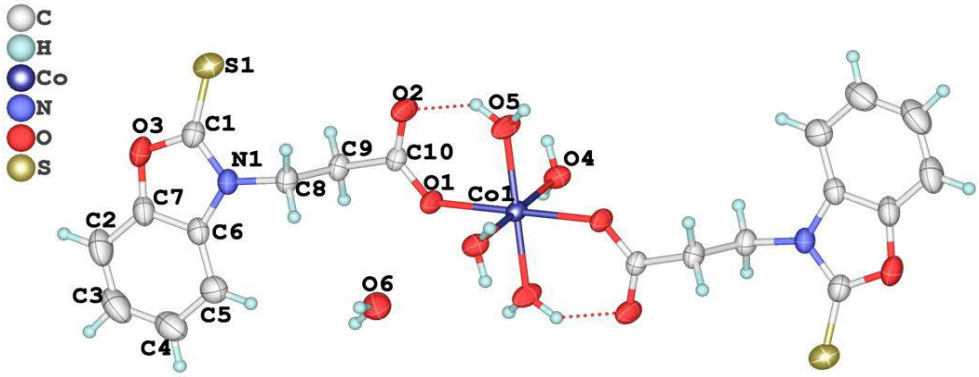
1-rasm. $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli metallokompleksning sintez sxemasi

Olingan kompleksning molekulyar va kristall tuzilishi RTT usulida o‘rganildi. Molekulalararo ta’sirlashish energiyalari va Hirshfeld sirt tahlili o‘rganildi.

Olingan natijalar va ularning tahlili

Mazkur ishda biz yangi monoyadroli kompleks birikmaning, $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ (bu yerda BPK=benzoksazolin-2-tion propionat anion) molekulyar va kristall tuzulishlari, IQ-spektri, molekulalararo ta’sirlashish energiyalari hamda Hirshfeld sirt tahlili haqida xabar beramiz.

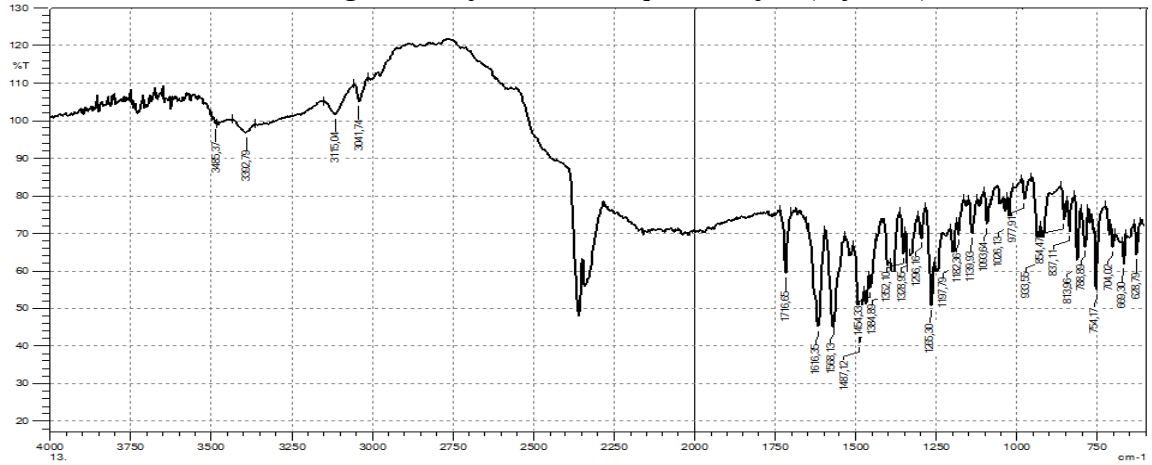
Kobaltli yangi $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ kompleks birikmaning singoniyasi monoklinik, fazo guruhi esa $P2/_1n$ ekanligi aniqlandi. Kobalt atomi atrofidagi koordinatsion ko‘pburchak CoO_6 tipidagi oktaedrga to‘g‘ri keladi.



2-rasm. $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli metallokompleksning molekulyar tuzilishi

Ikki BPK ligandlari kation bilan monodentat holatda, to’rtta suv molekulasi ham monodentat holatda bog‘lanib akvokompleksni hosil qiladi. Co atomi bilan ta’sirlashgan atomlar o‘rtasidagi bog’lar Co-O1 2.136 Å ni, Co-O4 2.096 Å ni hamda Co-O5 2.059 Å larni tashkil etadi. Bundan tashqari, tashqi koordinatsion sohadagi bitta H_2O molekulasi kuchli vodorod bog‘ orqali bog‘langan. Kompleksning molekulyar tuzilishi 2-rasmda keltirilgan.

Sintez qilingan metallokompleksning IQ-spektral xarakteristikalarini o‘rganish maqsadida ligand va sintez qilingan kompleksning IQ - spektrlari Shimadzu (Yaponiya) IQ-Furye spektrofotometrida 400-4000 sm^{-1} sohada yozib olindi (1-jadval, 3-rasm). BPKning spektri adabiyotlarda keltirilgan spektrlar bilan mos ekanligi aniqlandi, ya’ni unda 3000-3500 sm^{-1} oraliqda kichik intensivlikdagi keng (OH), 1699, 1627 sm^{-1} sohalarda C=O guruhlari yutilish chiziqlari hamda 1180-1250 sm^{-1} sohalarda C=S guruhlari yutilish chiziqlari mavjud (1-jadval).



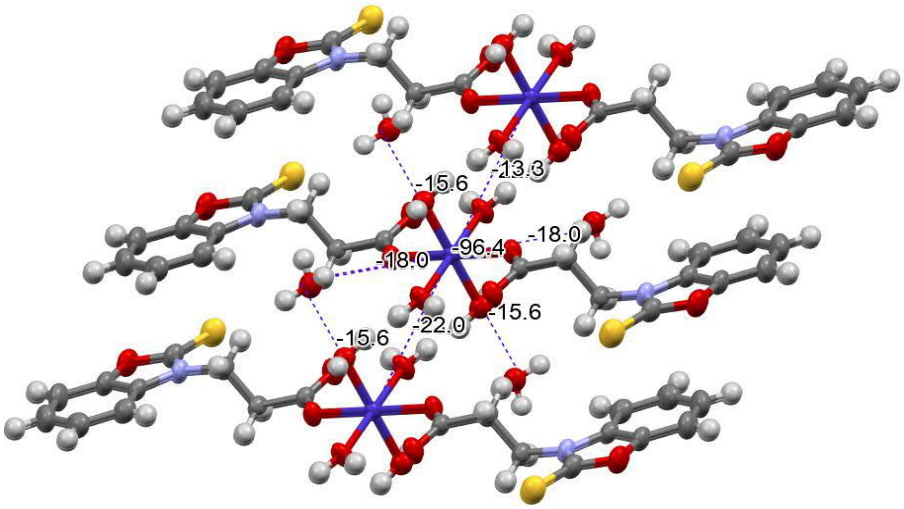
3-rasm. $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli metallokompleksning IQ-spektri

1-jadval

Ligand BPK va $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli kompleksning IQ-spektrlari tahlili, sm^{-1}

Tebranish tavsifi	ν(OH)	ν(C=O)	ν(C=S)	ν(CH_2,CH_3)/ δ(CH_2,CH_3)
BPK	-	1699, 1627	1197	2958, 1475, 1444, 1381, 1361
$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$	3041, 3115, 3392, 3485	1716, 1616	1182, 1197	1487, 1454, 1384, 1352

Kompleks IQ-spektrida 3041, 3115, 3392, 3485 sm^{-1} (OH va H_2O) sohalarda yangi yutilish chiziqlari yuzaga kelishi aniqlandi. Shuningdek, qo‘sh bog‘ sohada qo‘shimcha yutilish chiziqlarining (1716, 1616 sm^{-1}) kuzatilishi aniqlandi (3-rasm).



4-rasm. $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ kompleks tarkibidagi molekulalarning UNI kuch maydonlari usulida aniqlangan molekulalararo ta’sirlashish energiyalari, kJ/mol

Sintez qilingan $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli organik tuzining kristall tahlanishidagi molekulalararo ta’sirlashish energiyalari Mercury 2021.3.0 dasturiga kiritilgan UNI kuch maydonlari usulida aniqlandi (4-rasm; 2-jadval).

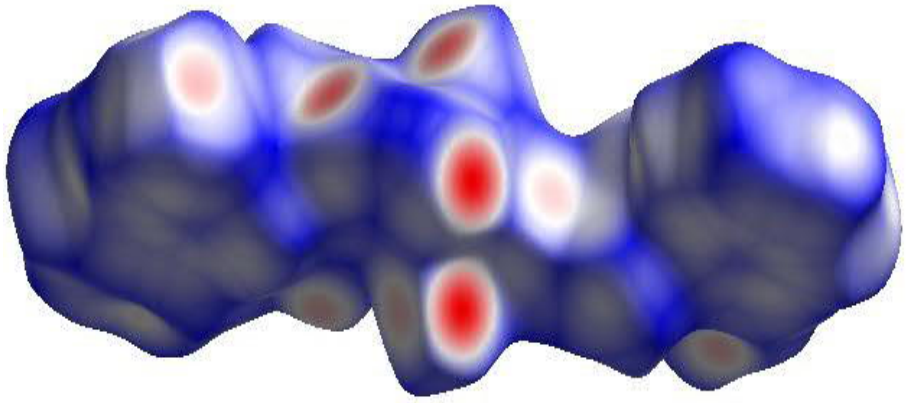
2-jadval

$Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ kompleks tarkibidagi molekulalarning UNI kuch maydonlari usulida aniqlangan molekulalararo masofalari, Å va ta’sirlashish energiyalari, kJ/mol

№	Ta’sirlashgan molekulalar	Masofa; Å	Energiya; J/mol
1	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$	6.81057	-96.36
2	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$	8.57092	-21.9633
3	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…H_2O	8.08184	-17.9965
4	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…H_2O	8.12227	-15.6117
5	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$	8.57092	-13.3192
6	$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$…$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]$	18.7805	-10.1112

2-jadvaldagi ma’lumotlardan ko‘rinib turibdiki, bir xil molekulalar o‘rtasida masofa ortib borgan sari ta’sirlashish energiyalari kamayib boradi. Shu bilan birga molekulalararo ta’sirlashish energiyalariga molekuladagi atomlar soni ham ta’sir ko‘rsatadi. BPK ning $CoCl_2$ bilan hosil qilgan kompleks birikmasining kristalidagi umumiy qadoqlanish energiyasi -84.9 kJ/mol ni tashkil etadi.

$[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli kompleks birikmadagi molekulalararo o‘zaro ta’sirlarning tabiatini yaxshiroq tushunish uchun, Hirshfeld sirt tahlili normallashtirilgan aloqa masofasini (d_{norm}) xaritalash, shuningdek, Crystal Explorer 21.5 dastur paketi yordamida o‘zaro ta’sir energiyasini hisoblash orqali o‘tkazildi. Hirshfeld sirt yuzasi tahlili d_{norm} bo‘yicha maydoni hajmi 610,36 $Å^3$, yuzasi 546,60 $Å^2$ da, o‘lchamlari -1,1616 (qizil) 1,0765 a.m.b. (ko‘k) gacha ko‘rildi va tashqi (d_e) va ichki (d_i) masofalarni eng yaqin yadrogacha hisoblash yo‘li bilan aniqlandi (5-rasm).



5-rasm. $[Co(BPK)_2(H_2O)_4]H_2O$ tarkibli kompleksining Hirshfeld sirtlari

BPKning kobalt (II) xlorid bilan hosil qilgan kompleksining Hirshfeld sirtida qizil rang eng yaqin ta'sirlashuvlarni va ko'k rang eng uzoq ta'sirlashuvlarni ifodalaydi (5-rasm). Shunday qilib Hirshfeld sirtini tahlil qilish natijasida quyidagi ta'sirlashuvlar aniqlandi: H•••H (39.4%), H•••O/O•••H (23.8%), H•••C/C•••H (14.8%), H•••S/S•••H (13.0%), S•••C/C•••S (2.2%), C•••C (2.1%), O•••O (1.6%), N•••C/C•••N (1.3%), O•••S/S•••O (1.1%), O•••C/C•••O (0.5%), H•••N/N•••H (0.2%), N•••S/S•••N (0.1) ta'sirlashuvlar kristall qadoqlashning shakllanishiga asosiy hissa qo'shadi. Hirshfeld sirt tahlilidan ko'rinib turibdiki o'zaro ta'sirlarning asosiy qismini H•••H (39.4%), H•••O/O•••H (23.8%), H•••C/C•••H (14.8%) va H•••S/S•••H (13.0%) tashkil qiladi. O•••C/C•••O (0.5%), H•••N/N•••H (0.2%), N•••S/S•••N (0.1) o'zaro ta'sirlarining hissasi juda kam.

Xulosa: Olib borilgan tadqiqotlar natijasida norfloksatsinning kobalt (II) xlorid bilan kompleks birikmasi sintez qilindi. Sintezning maqbul sharoiti sifatida reagentlarning (BPK va $CoCl_2 \cdot 6H_2O$) 2:1 mol nisbati, 15-20 daqiqa davomida 20-25ºC haroratda intensiv aralashtirish va olingan tiniq eritmani xona haroratida bug'lanishga qoldirish ko'rsatib berildi. Yangi kompleks birikmaning tarkibi, molekulyar va kristall tuzilishlari RTT yordamida aniqlandi. Kristall yacheykadagi tahlangan metallokompleklarning molekulalararo ta'sirlashish energiyalari umumiy qiymati -84.9 kJ/mol ga teng ekanligi aniqlandi. Hirshfeld sirt yuzasi tahlili ta'sirlarning asosiy qismini H•••H (39.4%), H•••O/O•••H (23.8%), H•••C/C•••H (14.8%) hamda H•••S/S•••H (13.0%) tashkil etishi aniqlandi.

ADABIYOTLAR

1. Jayanna N. D., Vagdevi H. M., Dharshan J. C., Prashith Kekuda T. R., Hanumanthappa B.C., and Gowdarshivannanavar B. C. Synthesis and Biological Evaluation of Novel 5,7-Dichloro-1,3-benzoxazole Derivatives. J. Chem. 2013, doi.org/10.1155/2013/864385

2. Berk B., Tahirovic Y.A., Bülbül E.F., Biltekin S.N. The Synthesis, Antimicrobial Activity Studies, and Molecular Property Predictions of Novel Benzothiazole-2-Thione Derivatives. Acta Pharm. Sci. 2017, Vol.55, N3. DOI:10.23893/1307-2080.APS.05516

3. Ashurov J.M., Muhammedov N.S., Tashhodjaev B., Ibragimov B. J. Struct. Chem., - 2015. – 56, N 6. – 1201.

4. Turner, M. A., McKinnon, J. J., Wolff, S. K. D. J., Grimwood, D. J., Spackman, P. R., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A. (2017). Crystal Explorer, Version 17, University of Western Australia, Perth.

5. Ashurov J.M., Ibragimov B.T. and Mukhamedov N.S. Complexes of Acetic Acid α(N-benzoxazolin-2-one) with Zn(II), Cu(II), and Co(II): Syntheses and Crystal Structures // Russian Journal of Coordination Chemistry. -2014. -V40. -№4. -P. 246–250.

6. Ashurov J.M., Izotova L.Yu., Ibragimov B.T. and Mukhamedov N.S. Two crystalline polymorphic forms of α-(N-Benzoxazolin-2-one)acetic acid// Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2017. -V91. -№1. -P. 106–110.

7. Ashurov J.M., Mukhamedov N.S., Tashkhodzhaev B. and Ibragimov A.B. // Crystal structure of α(N-benzoxazolin-2-one)acetic acid hydrate, solvate and salts. Journal of Structural Chemistry. -2015. -V56. -№6. -P.1190-1196.

8. Ashurov J.M., Mukhamedov N.S. and Ibragimov A.B. // Synthesis and Structure of Mono and Polynuclear Cu(II) Complexes with α(N-benzoxazolin-2-one)acetic Acid // Russian Journal of Coordination Chemistry. -2015. -V41. -№3. -P. 207–211.

9. Macrae C.F., Bruno I.J., Chisholm J.A., Edington P.R., McCabe P., Pidcock E., Rodriguez-Monge L., Taylor R., van de Streek J., Wood P.A., Mercury programme// J Appl Crystallogr.-2008. -41.-466-470

10. Sheldrick G. M., "SHELXS-97 and SHELXL-97, Program for Crystal Structure Solution and Refinement,"University of Gottingen, Gottingen, 1997.

11. Macrae C. F., Bruno I. J., et al. Appl.Cryst. 2008.41.466-470

12. Gavezotti A.. Acc. Chem. Res. 1994.Vol. 27. №10. P.309–314

13. Turner, M. J., McKinnon, J. J., Wolff, S. K., Grimwood, D. J., Spackman, P. R., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A. 2017, Turner CrystalExplorer17. University of Western Australia. http://Hirshfeldsurface.net.