Ni (II) NING β-(N-BENZOKSAZOLIN-2-TION)PROPION KISLOTASI BILAN KOMPLEKS BIRIKMASINING SINTEZI, TUZILISHI VA HIRSHFELD SIRT TAHLILI.

Amanov B.Sh.

Termiz davlat muhandislik va agrotexnologiyalar universiteti

Annotatsiya: Maqolada nikel (II) ionining benzoksazolin-2-tion propion kislota (BPK) bilan yangi [Ni(DEA)$_2$(BPK)$_2$] tarkibli kompleksining sintezi hamda hirshfeld sirt tahlili keltirilgan. Sintez qilingan metallokompleksning tarkibi, molekulyar va kristall tuzilishlari rentgen tuzilish tahlili (RTT) usulida aniqlangan. RTT natijalariga ko‘ra kompleksda nikel (II) kationiga ikkita BPK ligandlari monodentat holatda va dietanolamin (DEA) bidentat holatda bog’lanib oktaedr tuzilishli kompleks hosil qiladi..

Kalit so‘zlar: benzoksazolin-2-tion propion kislota, nikel (II) asitat, spirt, suv, monodentat, bidentat, Hirshfeld.

Abstract: The article presents the synthesis and Hirschfeld surface analysis of a new complex of nickel (II) ion with benzoxazoline-2-thione propionic acid (BPK) consisting of [Ni(DEA)2(BPK)2]. The composition, molecular and crystal structures of the synthesized metallocomplex were determined by X-ray diffraction (XRD). According to the results of XRD, two BPK ligands bind to the nickel (II) cation in the complex in a monodentate state and diethanolamine (DEA) in a bidentate state, forming an octahedral complex.

Keywords: benzoxazoline-2-thione propionic acid, nickel (II) acetate, alcohol, water, monodentate, bidentate, Hirschfeld.

Аннотация: В статье представлены синтез и анализ поверхности по Хиршфельду нового комплекса иона никеля (II) с бензоксазолин-2-тионпропионовой кислотой (БПК), состоящего из [Ni(DEA)2(BPK)2]. Состав, молекулярная и кристаллическая структуры синтезированного металлокомплекса определены методом рентгеновской дифракции (РФА). Согласно результатам РФА, два лиганда БПК связываются с катионом никеля (II) в комплексе монодентатно, а с диэтаноламином (ДЭА) – бидентатно, образуя октаэдрический комплекс.

Ключевые слова: бензоксазолин-2-тионпропионовая кислота, ацетат никеля (II), спирт, вода, монодентатность, бидентатность, Хиршфельд.

Kirish

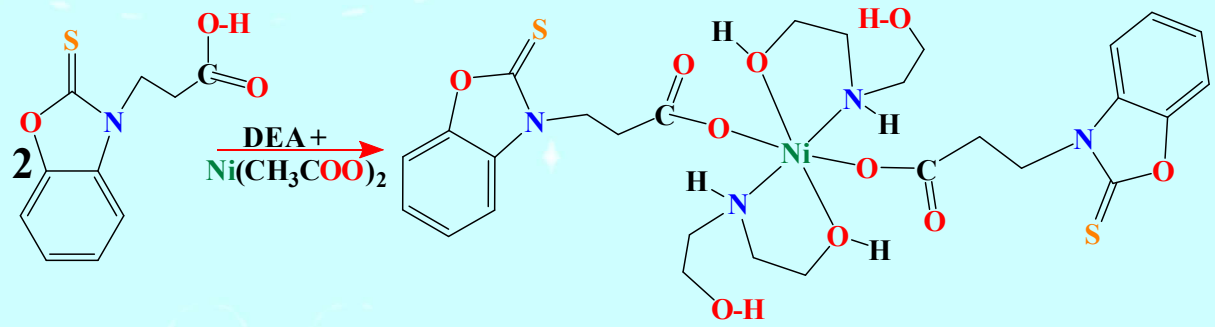
Ma’lumki atrof muhitning ifloslanishi va zararli mikroorganizmlarning ko‘payib borishi hamda ularlarga qarshi kurashadigan vositalarga chidamliligining ortishi oqibatida yangi keng spektrli ta’sir doirasiga ega bo‘lgan insektitsid, gerbitsid, fungitsid va bakteritsidlarga ehtiyoj ortmoqda.

ISSN 3030-3907

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 [1]. Biz ilgari BPKning [2] 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 [3]. Xususan, BPKda karboksil guruhining harakatchan protoni osonlik bilan deprotonlanadi va turli organik tuzlar hosil bo‘lishida ishtirok etadi. ma’lum bioaktiv xususiyatlarga ega bo‘lgan BPKning metallokomplekslari sintez qilingan va o‘rganilgan [4]. Shundan kelib chiqqan holda, uning metallokomplekslarini sintez qilish hamda fizik-kimyoviy xossalarini o‘rganish dolzarb masalalardan biri hisoblanadi. Yuqoridagi holatlar inobatga olinib, nikel (II) asitat tuzining BPK bilan ta’sirlashishi suv+spirt aralashmasi ishtirokida olib borildi. Natijada hosil bo‘lgan monokristallar RTT usulida tekshirilganda $[Ni(DEA)_2(BPK)_2]$ tarkibli yangi kompleks ekanligi aniqlandi.

Kompleks birikma sintezi

β-(N-benzoksazolin-2-tion)propion kislotasi hamda DEA larning spirtdagi eritmalari bilan nikel (II) asetatning distillangan suvdagi eritmalaridan mos ravishda 2:2:1 molyar nisbatda olinib foydalanildi. Hosil bo‘lgan eritmalarni magnitli aralashtirgich yordamida 25-30°C haroratda 30-35 daqiqa davomida qizdirilib aralashtirildi, xona xaroratida qoldirilib kuzatishga qo‘yildi. Kuzatishlar natijasida 8-10 kundan so‘ng idish tubida kristallar hosil bo‘lgani kuzatildi. Mikroskop orqali RTT uchun 0.09-0.22 mm o‘lchamdagi yaroqli monokristallar tanlab olinib, tahlil qilindi va kompleksning tuzilishi aniqlandi. Reaksiya tenglamasi quyidagicha taklif qilindi (1-rasm).



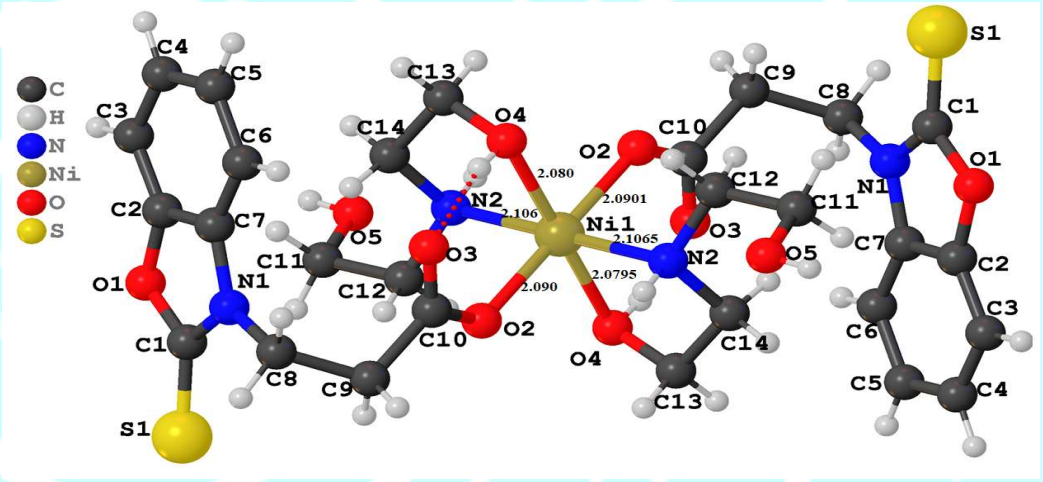
1-расм. $[Ni(DEA)_2](BPK)_2]$ tarkibli metallokompleksning sintez sxemasi

Olingan natijalar va ularning tahlili

Nikel atomi atrofidagi koordinatsion ko‘pburchak NiO_4N_2 tipidagi oktaedrga to‘g‘ri keladi. Ni^{2+} ioni oktaedrik koordinatsiyaga ega bo‘lishida, ikki dona DEA molekulasi bidentat holatda bittadan gidroksil guruhining kislorod atomi hamda to‘rtlamchi azot atomi markaziy atom bilan donor-akseptor bo‘ hisobiga va ikkita

ISSN 3030-3907

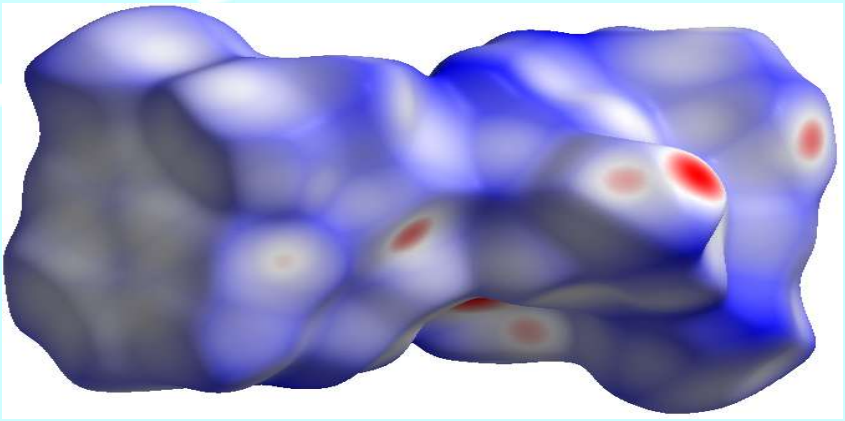
BPK anioni ion bog‘ hisobiga koordinatsiyalanib oktaedr tuzilishli neytral kompleks hosil qiladi (2-rasm).



2-rasm. [Ni(DEA)$_2$(BPK)$_2$] tarkibli metallokompleksning molekulyar tuzilishi

Ni atomi bilan ta’sirlashgan DEA molekulasining atomlari o‘rtasidagi bog‘lar Ni-O2 2.0901 Å, Ni-O5 2.0795 (2.080) Å, Ni-N2 2.1065 (2.106) Å ni tashkil etadi. Kompleksning molekulyar tuzilishi 2-rasmda keltirilgan.

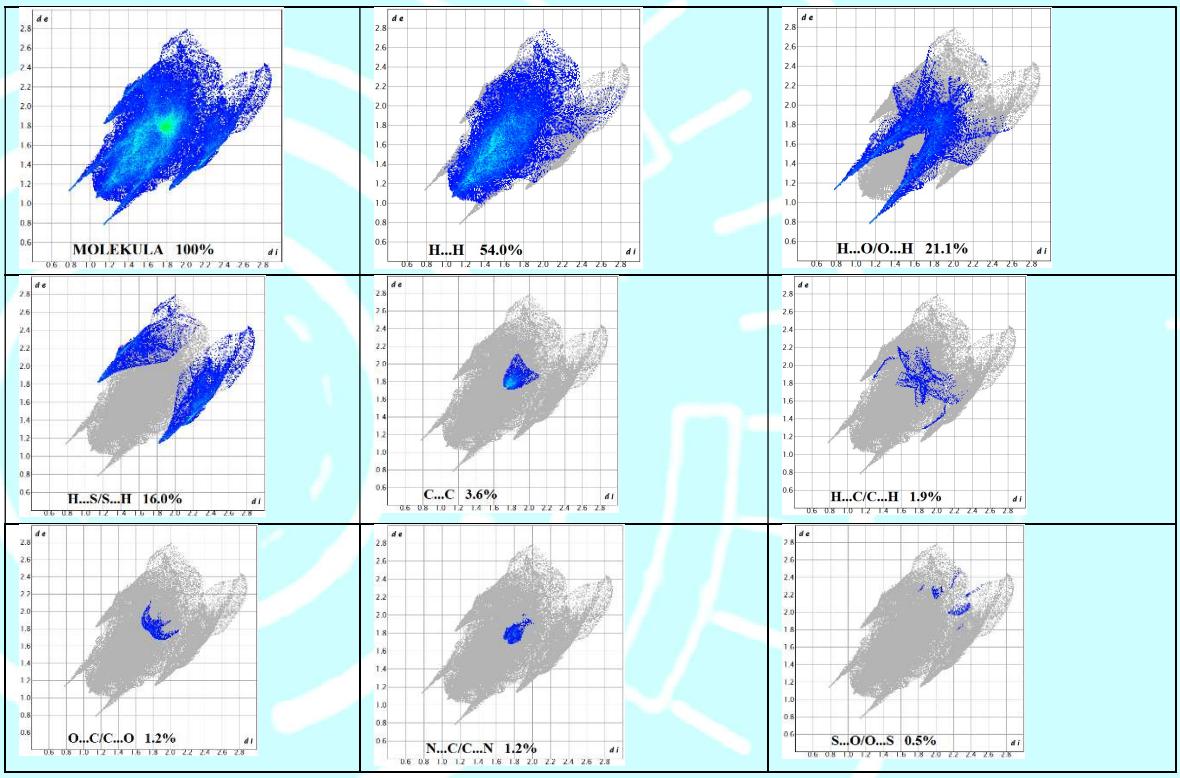
[Ni(DEA)$_2$(BPK)$_2$]tarkibli kompleks birikmadagi molekulalararo o‘zaro ta’sirlarning tabiatini yaxshiroq tushunish uchun, Hirshfeld sirt tahlili normallashtirilgan aloqa masofasini (d_{norm}) xaritalash, shuningdek, Crystal Explorer 21.5 dastur paketi yordamida o‘zaro ta’sir energiyasini hisoblash orqali o‘tkazildi. Kompleksining Hirshfeld sirt tahlilida qizil rang eng yaqin ta’sirlashuvlarni va ko‘k rang eng uzoq ta’sirlashuvlarni ifodalaydi (3-rasm).



3-rasm. [Ni(DEA)$_2$(BPK)$_2$] tarkibli kompleks birikmasining Hirshfeld yuzasi tahlilining sirt xususiyatlari tasviri

Kristall qadoqlashning shakllanishiga individual o‘zaro ta’sirlarning xissasini ko‘rsatuvchi d_e va d_i funksiyalari yordamida olingan ikki o‘lchamli barmoq izining grafiklari (3-rasm) keltirilgan. Shunday qilib Hirshfeld sirtini tahlil qilish natijasida quyidagi ta’sirlashuvlar aniqlandi: H•••H (54.0%), H•••O/O•••H (21.1%), H•••S/S•••H (16.0%), C•••C (3.6%), H•••C/C•••H (1.9%), O•••C/C•••O (1.2%), N•••C/C•••N (1.2%), O•••S/S•••O (0.5%), S•••C/C•••S (0.4%) ta’sirlashuvlar kristall qadoqlashning shakllanishiga asosiy hissa qo‘shadi.(4-rasm)

ISSN 3030-3907



4-rasm. $[Ni(DEA)_2(BPK)_2]$ tarkibli 2kompleksining 2D Hirshfeld barmoq izi grafigi

Hirshfeld sirt tahlilidan ko‘rinib turibdiki o‘zaro ta’sirlarning asosiy qismini H•••H (57.0%), H•••O/O•••H (20.4%), H•••S/S•••H (9.7%)va H•••C/C•••H (7.1%) tashkil qiladi. N•••C/C•••N (0.6%), S•••C/C•••S (0.5%) hamda H•••N/N•••H (0.4%) o’zaro ta’sirlarining hissasi juda kam va mos ravishda 0.6%, 0.5 va 0,4% ga teng.

Xulosa

Olib borilgan tadqiqotlar natijasida BPK asosida $[Ni(DEA)_2(BPK)_2]$ tarkibli yangi metallokompleks sintez qilindi. Sintez qilish uchun optimal sharoitlari o‘rganildi. Sintez qilingan metallokompleksning tarkibi, molekulyar va kristall tuzilishlari rentgen tuzilish tahlili (RTT) yordamida aniqlandi. Sintez qilingan kompleksning ichki sferasida Ni, BPK va DEA o‘zaro bog‘lanib sp^3d^2 holatda gibridlangan hamda oktaedr shaklda koordinatsiyalanganligi aniqlandi. Hirshfeld sirtini tahlil qilish natijasida molekulalararo ta’sirlashuvlar aniqlandi.

ADABIYOTLAR.

1. B. Berk, Y.A. Tahirovic, E.F. Bülbül, S.N. Biltekin. 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

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

3. 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.

ISSN 3030-3907

4. 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.

ISSN 3030-3907