SIPROFLOKSATSINNING KOBALT BILAN KOMPLEKS BIRIKMASINING HIRSHFELD SIRT YUZASI TAHLILI

Kudiyarova Aygul Dauletiyarovna
Berdaq nomidagi Qoraqalpoq davlat universiteti
E-mail: kudiyarovaaygul @gmail.com

Annotatsiya. Maqolada biofaol birikmalar sinfiga kiruvchi siprofloksatsin molekulasining kobalt bilan kompleks birikmasining molekulalararo ta'sirlashishlarni Hirshfeld (Hirshfeld) sirti tahlili yordamida tavsiflash amalga oshirildi. Siprofloksatsin va kobalt kompleks birikmasining Hirshfeld umumiy sirt yuzasi va hajmining miqdorlari bo'yicha ma'lumotlar keltirildi.

Kalit so'zlar: siprofloksatsin, kobalt, Xirshfeld, molekulalararo ta'sirlashish, sirt yuzasi.

Annotation. The article describes the intermolecular interactions of the complex compound ciprofloxacin molecule with cobalt, which belongs to the class of bioactive compounds, using Hirschfeld surface analysis. Data on the total surface area and Hirschfeld volume of ciprofloxacin and cobalt complex compounds are presented.

Keywords: ciprofloxacin, cobalt, Hirschfeld, intermolecular interaction, surface.

Аннотация. В статье проведено описание межмолекулярных взаимодействий комплексного соединения молекулы ципрофлоксацина с кобальтом, относящегося к классу биоактивных соединений, с помощью анализа поверхности Хиршфельда (Хиршфельда). Приведены данные по количеству общей площади поверхности и объема Хиршфельда ципрофлоксацина и комплексного соединения кобальта.

Ключевые слова: ципрофлоксацин, кобальт, Хиршфельд, межмолекулярное взаимодействие, поверхность.

Kirish.

Dunyoda sotuvda mavjud bo'lgan biologik faol birikmalarning biometallar bilan metallokomplekslarini sintez qilish usullarini ishlab chiqish va ularning fizik-kimyoviy xossalarini aniqlashga bo'lgan qiziqish ortib bormoqda. Ushbu birikmalar farmatsevtikada antibiotiklar va silga qarshi vositalar, tibbiyotda biologik faol moddalar hamda mikroorganizm hujayralari uchun bakteriyalarni o'sishini ingibirlovchi antibakterial faol moddalar sifatida foydalanish muhim ahamiyat kasb etadi.

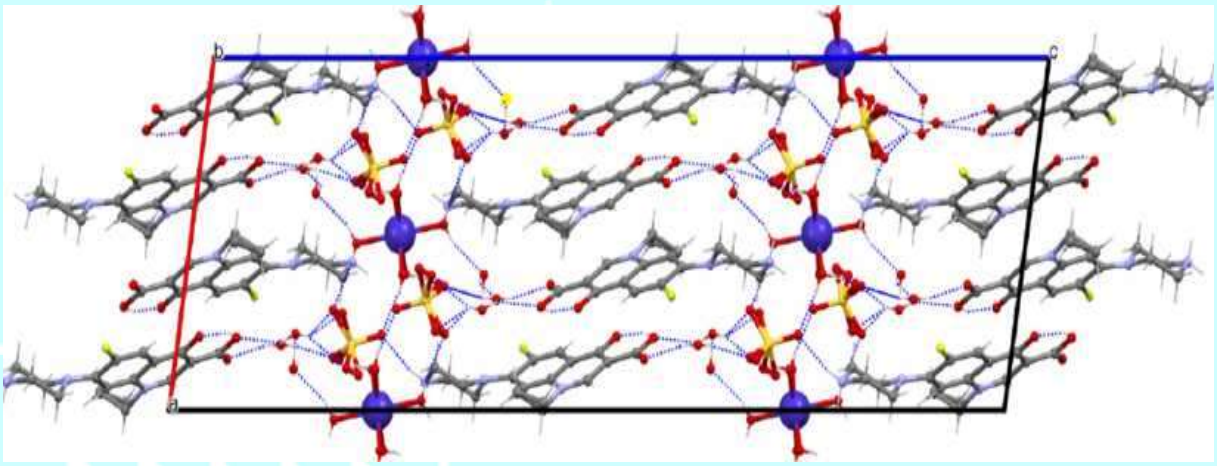
TADQIQOT METODOLOGIYASI. Rentgen strukturaviy analiz sintez qilingan birikmalarni nafaqat individualligini, balki kompleks birikmalarning tuzilishini ham aniqlash imkonini beradi. Co metall bilan siprofloksatsinning bir turli kompleks birikmasining sintezini amalga oshirish, uning tarkibi va tuzilishini tahlil qilish, olingan natijalar tahlilidan tegishli qonuniyatlarni aniqlash va

ISSN 3030-3907

aniqlangan xossalarga ko‘ra kompleks birikmalarning ko‘llanilish sohalarini belgilash kabi vazifalarni amalga oshirish zaruriyatini ko‘rsatib berdi. Bunday kompleksning olinishiga bo‘lgan qiziqish, ularni biologik sistemalarda sodir bo‘ladigan jarayonlarni modellashtirishda ishlatish mumkinligi bilan izohlanadi.

Siprofloksatsin molekulasidan farqli ravishda suv molekulasida qo‘shimcha koordinatsion bog‘ hosil qilish imkoniyatlari paydo bo‘ladi, ya’ni kompleks hosil bo‘lishida kislorod atomlari ham qatnashadi.

MUHOKAMA VA NATIJALAR. Siprofloksatsinni $CoSO_4$ bilan olib borilgan reaksiyasi natijasida $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2\cdot 6H_2O$ kompleks birikmasini RSA yordamida tuzilishi amalga oshirildi. $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2\cdot 6H_2O$ kompleksining kristall tuzilishi 1-rasmda keltirilgan. Kristall tuzilishi $[Co(H_2O)_6](SO_4)_2\cdot 2HL\cdot 6H_2O$(1) bo‘lgan modda molekulasi tarkibida tetraedr shaklda $[Co(H_2O)_6]^{2+}$, ikkita bir xil zaryadlangan $(HL)^+$ kationlar, ikkita sulfat anioni va oltita suvdan iborat bo‘lgan (1-rasm). Co^{2+} ioni oktaedrik koordinatsiyaga ega: Co-O_w orasidagi masofasining o‘rtacha qiymati 2,073Å va O_w-Co-O_w ning burchaklari 91^0. Co^{2+} ionining simmetriya o‘qi 2 da 4e holatida yotadi. Co^{2+} ionining atrofida ikkita suv molekulasi va sulfat ionidagi har bir O atomlarining birinchi holatda ishg‘ol etish koeffitsentlari 0,60(1) va 0,40(1), ikkinchi holatda 0,46(1) va 0,54(1) bo‘lgan ikkita holatga bo‘lingan. Ikkinchi holatda, Co(II) ioni atrofidagi ikkita suv molekulasi ishg‘ol koeffitsentlari 0,6 va 0,4 bo‘lgan ikkita pozitsiyaga bo‘lingan. Sulfat guruhidagi O atomlarining har biri taribsiz holatda bo‘ladi. HL molekulasi tarkibida protonlangan karboksil guruhi va piperazin halqasining protonlangan N(3) atomiga ega ikki zaryadli kation bo‘ladi. HL^+ kationlarining bog‘lanish uzunligi va burchaklarining ko‘pchiligi L HC1 ning burchaklariga juda o‘xshashdir [1]. Piperazin halqasida kreslo konformatsiyasi mavjud: N(3)C(15)C(16)N(2) va N(3)C(14)C(13)N(2) diedral burchaklari mos ravishda -56,15 va 56,530 ga teng bo‘ldi. Xinolon halqasi to‘liq tekkislashgan holatda bo‘ladi.

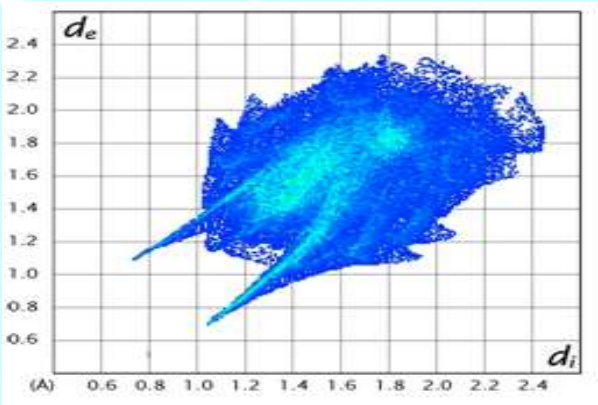


1-rasm. $[Co(H_2O)_6]^{2+}$ va ikkita zaryadlangan $(HL)^+$ kationi va ikkita SO_4^{2-} anionidan va oltita suv molekulasining tuzilishi

ISSN 3030-3907

Asosiy o‘rganilayotgan biofaol birikma siprofloksatsinning kadmiy metall kationi ishtirokidagi kompleks birikmaning, tarkibi va tuzilishi turlicha bo‘lishligi uning molekulalararo ta’sirlashida qanday namoyon bo‘lishligini o‘rganish har tomonlama qiziq hisoblanadi. Shuning uchun RSA yordamida tajriba yo‘li bilan olingan $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ kompleks birikmaning kristallografik ma’lumotlari asosida, ulardagi molekulalararo ta’sirlashuvlar o‘rganildi [2]. Buning uchun qattiq kristall holatda molekulalararo ta’sirlashishlarni Xirshfeld (Hirshfeld) sirti tahlilili yordamida tavsiflash amalga oshirildi. Siprofloksatsin molekulasining molekulalararo o‘zaro ta’sirlashuvlarda ishtirok etuvchi atomlar ulushlarini ko‘rsatadigan ikki o‘lchamli barmoq iz chizmalari hamda tegishli juft atomlarning hissalari (%), Xirshfeld umumiy sirt yuzasi va hajmining miqdorlari bo‘yicha ma’lumotlar keltirildi. Tahliliga ko‘ra molekulalararo o‘zaro ta’sirlarda asosiy ulushlar H···H (31.0-40.5%) va O···H/O···H (22.2-34.7%) atomlari orasidagi ta’sirlarga mos keladi. Kompleks birikmalarda molekulalararo o‘zaro ta’sirlashuvlarda ishtirok etuvchi atomlar ulushlarini tavsiflaydigan ikki o‘lchamli barmoq izlari chizmasi va juft atomlarning hissalari (%), umumiy sirt yuzasi xamda ularning hajmi keltirildi.

Siprofloksatsin strukturasining to‘liq Xirshfeld sirt tahlilining umumiy maydoniga kuchsiz H H bog‘lari 36,9 (A) va 38,3% (B) to‘g‘ri keladi, O H/O H o‘zaro ta’siriga esa 30,3 (A) va 33,3(B)% to‘g‘ri keladi. Bundan tashqari, boshqa kuchsiz o‘zaro ta’sirlarning foiz ulushi quyidagicha: C H/ H C 16,7 (A) va 17,7% (B), boshqa o‘zaro ta’sirlar uchun bog‘lanish ulushlari deyarli bir-biriga yaqin: ya’ni H…F/F…H (8.4%), C…C (3.7 %), H…N/N…H (2.4%), C…N/N…C (0.9%), C…O/O…C (0.3%), S= 334.60 Å², V=355.90 Å³ (2-rasm).

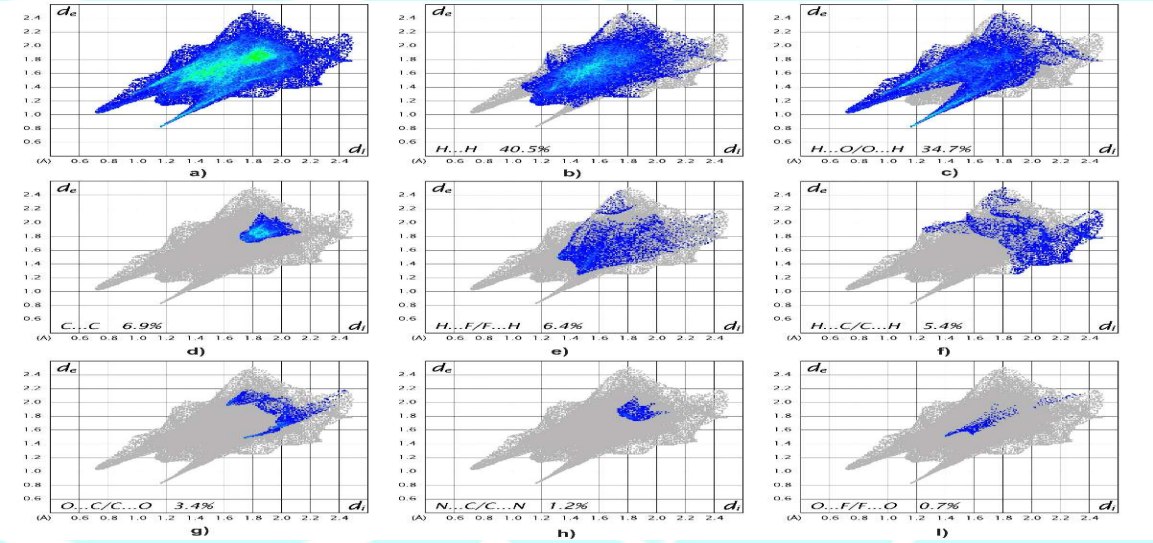


2-rasm. Siprofloksatsinning molekulalararo o‘zaro ta’sirlashuvlarda ishtirok etuvchi atomlar ulushlari.

Kristall strukturasining Xirshfeld to‘liq sirt maydoni tahlili, kuchsiz H···H bog‘lanishlar 40,5%, O···H/O···H bog‘lanish esa, umumiy ichki molekulyar ta’sirlarga 34,7% hissa qo‘shishi aniqlangan. Bundan tashqari, boshqa kuchsiz ta’sirlashuvlarning foiz ulushi quyidagicha: C···C/C···C 6,9 %, H···F/F···H 6,4 %, H···C/C·· ·H 5,4%, C···O/O···C 3,4%, N···C/C···N 1,2%, O···F/F···O 0,7%. 2-rasmda

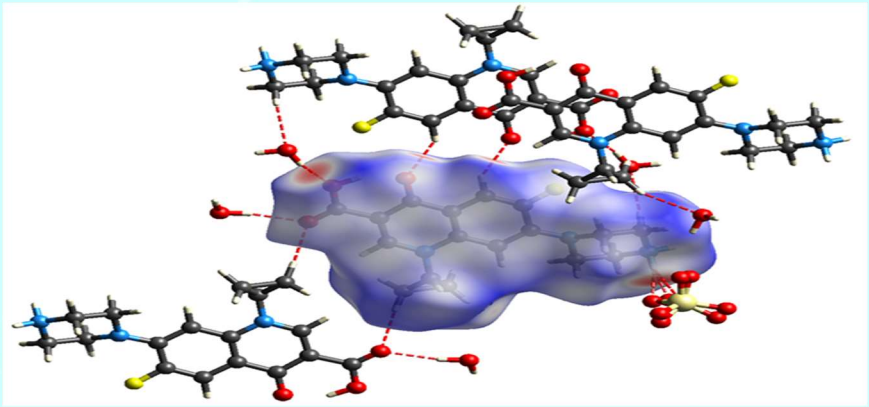
ISSN 3030-3907

tasvirlanganidek, bog‘lanishsiz o‘ziga xos o‘zaro ta’sirlar umumiy parametrga katta hissa qo‘shishi ko‘rsatilgan va u $(HL)^+$-kationlar supramolekulyar birliklar bilan turli xil yo‘llar orqali bog‘lanish mumkinligini ko‘rsatgan (3-rasm).



3-rasm. $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2\cdot 6H_2O$ kompleks uchun Xirshfeld to‘liq sirt yuzasi.

$[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2\cdot 6H_2O$ kompleks tuzilishining Xirshfeld sirt yuzasi tahlilida har qanday $(HL)^+$ kabi kationli moda uchun mavjud qisqa bog‘lanishni tasavvur qilish uchun aniqlanayotgan birikmaning kristalidagi Xirshfeld sirtlari o‘rganidi. Bunga ko‘ra, yuzadagi qizil dog‘lar N3A-H3AA Cl4, N3A-H3AB Cl3 va N3B-H3BA Cl1 vodorod bog‘lariga to‘g‘ri keladigan asosiy o‘zaro ta’sirni ko‘rsatgan, ko‘k maydon orqali ese, butunlay erkin va yaqin bog‘lanishlar tasvirlangan. d_{norm} ning sirt usulida birikmaning gidratlangan shaklining barqarorligini ko‘rsatuvchi suv molekulasi bilan vodorod bog‘lanishi ko‘rsatilgan (4-rasm).



4-rasm. $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2\cdot 6H_2O$ kompleksidagi $(HL)^{+}$-kation uchun Xirshfeld sirt yuzasi tahlili

(Bu yerdagi shtrix chiziqlar vodorod bog‘larni va bog‘lanmagan zaif ichki molekulyar ta’sirlarni ko‘rsatadi).

ISSN 3030-3907

4-rasmda bog‘lanmagan o‘ziga xos o‘zaro ta’sirlar umumiy sirt tahlilga katta hissa qo‘shishi va ular $(HL)^+$-kationlar retseptorlari bilan turli yo‘llar bilan bog‘lanish mumkinligini ko‘rsatgan [3].

XULOSA. Tadqiqot natijalariga ko‘ra, siprofloksatsinning $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ kompleksida molekulalararo ta’sirlashuvlar Hirshfeld (Hirshfeld) sirt tahlillariga ko‘ra asosan H···H va O···H/O···H ta’sirlar muhim hissa qo‘shishi aniqlandi. Siprofloksatsin $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ komplekslarida molekulalararo o‘zaro ta’sirlarda asosiy ulushlar H···H (40,5%) va O···H/O···H (34,7%) atomlari orasidagi ta’sirlarga mos keladi.

Olingan ma’lumotlar siprofloksatsinning $[Co(H_2O)_6](HL)_2(SO_4)_2 \cdot 6H_2O$ kompleksida molekulalararo ta’sirlashuvlar Hirshfeld (Hirshfeld) sirt tahlillari va kompleks hosil qilish qobiliyatini baholashda muhim ahamiyat kasb etadi. Shuningdek, ushbu tadqiqot natijalari kelajakda siprofloksatsin asosidagi biologik faol kompleks birikmalar sintezi va ularning fizik-kimyoviy hamda biologik xossalarini o‘rganishda ilmiy asos bo‘lib xizmat qilishi mumkin.

FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR RO‘YXATI

1. Turel I., Leban I., Bukovec P. Synthesis, characterization, and crystal structure of a copper(II) complex with quinolone family member (ciprofloxacin): bis(1) – cyclopropyl – 6 – fluoro – 1,4 – dihydro – 4 – oxo – 7 – piperazin – 1 –ylquinoline – 3 – carboxylate) copper(II) chloride hexahydrate // J. Inorganic Biochemistry – 1994. – V.56. –P. 273-282.

2. Kudiyarova A.D., Ashurov J.M., Ibragimov A.B., Sabirov V.K., Khodjaniyazov K.U. Crystal structure of the ciprofloxacin ionic complex with the cobalt (II) // Узбекский химический журнал. –2021. –№2. –P.64-69 (02.00.00. №6).

3. Dong-Rong Xiao., En-Bo Wang., Hai-Yan An., Zhong-Min Su., Yang-Guang Li., Lei Gao., Chun-Yan Sun., Lin Xu. Catena-(bis(mu-2-Ciprofloxacin)-cobalt(II) hydrate) // Chem. -Eur.J. –2005. –V.11. –P.6673.

4. Temirov A. H., To'raqulova M. Q. & Izzatov D. H. (2024). ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ, ПОЛУЧЕННОГО НА ОСНОВЕ МЕСТНОГО СЫРЬЯ. Development Of Science, 4(1), pp. 19-24.

5. Alisher hoshim o’g’li, T., & Husan o’g’li, S. D. (2024). Dizel Yoqilg ‘Isi Tarkibidan Parafinni Adsorbsion Usulda Ajratib Olish Texnologik Tizimi Tahlili. Miasto Przyszłości, 46, 271-275.

ISSN 3030-3907