

## СИНТЕЗ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ С 3d-МЕТАЛЛАМИ СО СМЕШАННЫМИ ЛИГАНДНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ

<https://doi.org/10.5281/zenodo.7649010>



ELSEVIER



Ситора Амруллаевна Рамазонова

Ассистент кафедры биохимии

Бухарского Государственного медицинского института



**Abstract:** В данной статье современными физико-химическими методами исследования изучено строение и свойства комплексных соединений со смешанными лигандами ионов Ni(II), Cu(II), Zn(II) из различных 3d-металлов на основе производных бензойной кислоты. Исследованы комплексообразующие свойства, геометрия и физико-химические свойства полученных различных моно- и бидентатных лигандов.

**Keywords:** бензойная кислота, производные бензойной кислоты, смешанный лиганд, монодентатный лиганд, бидентатный лиганд, комплексное соединение, инфракрасная спектроскопия, частота симметричных и асимметричных колебаний, валентное колебание, квантово-химический расчет, молекулярная орбиталь, релаксационная энергия молекулярной орбитали.

**About:** FARS Publishers has been established with the aim of spreading quality scientific information to the research community throughout the universe. Open Access process eliminates the barriers associated with the older publication models, thus matching up with the rapidity of the twenty-first century.

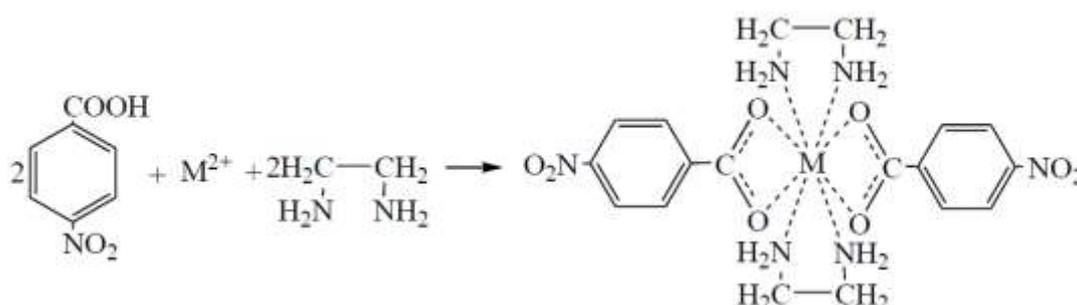
Received: 16-02-2023

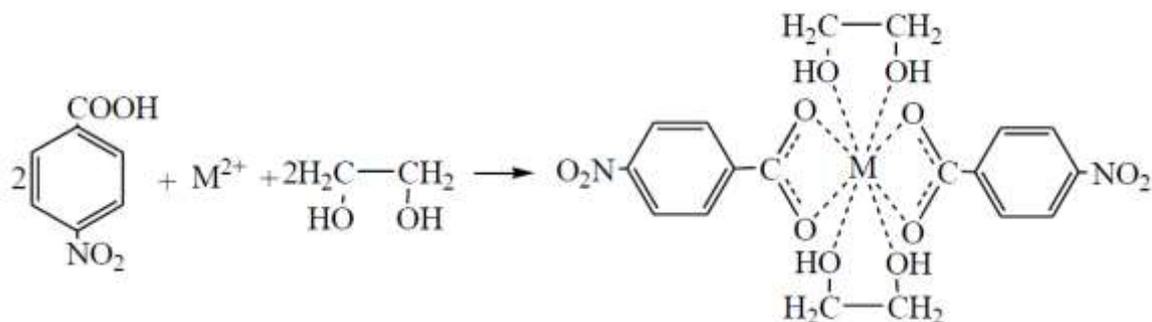
Accepted: 17-02-2023

Published: 22-02-2023

Сегодня ученых-химиков интересует синтез и исследование комплексных соединений промежуточных 3d-металлов, таких как Ni(II), Cu(II), Zn(II), с паранитробензойной кислотой со смешанными лигандами, такими как диэтиламин или этандиол. Потому что такие вещества широко используются в качестве фунгицидов, биокатализаторов, лекарственных веществ в медицине, антимикробных средств и стимуляторов роста растений, биологически активных веществ в сельском хозяйстве. Исследователи уделяют внимание изучению зависимости различных факторов от центров образования комплексов промежуточных ионов металлов с лигандами, энергетических параметров, электронной плотности и координации с 3d-центральным ионом.

Схему реакции образования комплексного соединения можно представить следующим образом:





M=Ni(II), Cu(II), Zn(II).

В результате определения системы «состав-строение-свойство» в комплексных соединениях можно прогнозировать состав и свойства комплексных соединений, а также строение и электронное распределение молекулы. На основании этой информации можно делать предварительные выводы и планировать синтез комплексных соединений. Проведены квантово-химические расчеты синтезированных комплексов. Координацию монодентата и диэтиламина или этандиолов через атомы азота и кислорода определяли через кислород карбоксильной группы пара-нитробензойной кислоты. По результатам химического анализа комплексного соединения установлено, что ион металла представляет собой вещество уникального сложного состава, состоящее из молекул двойного ядра, смешанного лиганда (анионов паранитробензойной кислоты и диметиламина или этандиола). Также для изучения способа координации лигандов в каждой внутренней и внешней сфере и окружении центрального иона сравнивались и изучались ИК-спектры лигандов в комплексном и свободном состоянии. В ИК спектре имеются следующие линии поглощения (см<sup>-1</sup>): 3090 (C-H, Ar), 2510-2995 (OH), 1660-1690 (C=O), 1600, 1575 (Ar), 1515, 1340 (пара- NO<sub>2</sub>), 1290 (C-O, COOH). Линии поглощения (1525, 1350 см<sup>-1</sup>), характерные для валентных колебаний нитрогруппы в лиганде, смещены в область более низких частот (1515, 1340 см<sup>-1</sup>) в полученном комплексе, а линии поглощения в области 1660-1690 см<sup>-1</sup>, принадлежащих к группе C-O, в спектре комплексного соединения не наблюдалось. В молекулярных орбиталях комплексного соединения (пара-нитробензойной кислоты) (8) доля r-орбиталей атомов кислорода составляет 36,12% и 37,03% соответственно. Установлено, что во второй полосе МО (EUuBMO-1= -6,6 эВ) велика доля d-электронов атомов Ni(II) (54,92%). Однако вторая пустая МО (EQBMO+1=-3,12 эВ) состоит в основном из релаксационных орбиталей молекулы пара-нитробензойной кислоты. Анализ энергии граничных молекулярных орбиталей и диаграммы электронной плотности состояний показал, что энергия нижних релаксирующих молекулярных орбиталей и энергетическая щель очень малы. Энергия нижней релаксационной молекулярной орбиты имеет

небольшое значение (-3,98 эВ), что свидетельствует о высоком сродстве комплекса к электрону и склонности молекулы к нуклеофильным реакциям.

В распределении зарядов атомов в комплексе пара-нитробензойной кислоты, диметиламина и меди(II) видно, что наименьшие отрицательные заряды локализованы в карбоксилатной группе атомов кислорода, а наибольшие положительные заряды локализованы в атомах углерода. При этом отрицательный заряд на атомах кислорода карбоксилатной группы составляет 0,38-0,42 ед., а группа азота, присоединенная к углероду ароматического кольца в пароположении, имеет отрицательный заряд 0,34 ед. Рассматривая в качестве лиганда молекулу пара-нитробензойной кислоты, координационные возможности кислорода карбоксильной группы выше по сравнению с конкурирующими атомами кислорода группы NO<sub>2</sub>, а координация осуществляется за счет -COO-.

### ИСПОЛЬЗОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА:

1. Турсунов М.А., Умаров Б.Б. Таутомерия в ряду ацилгидразонов этилового эфира 5,5-диметил-2,4-диоксогексановых кислот // *Universum: химия и биология: электрон. научн. журн.*- 2018.- №3(45).- С. 45-48.
2. Umarov V.B., Tursunov M.A., Minin V.V. Kompleksy with derivatives of ketoaldehydes and ketoesters.-Tashkent. Nishon-noshir.-2016. P -350.
3. Умаров Б.Б., Эргашов М.Я., Турсунов М.А., Кароматов С.А. Строение и таутомерия ацилгидразонов формилпинаколина // *Научный вестник Бухарского государственного университета.* -2019.- №1(73).- С. 59-66.
4. Tursunov M.A., Umarov V.B., Avezov K.G. Synthesis and Crystal Structure of Nickel(II) and Zinc(II) Complexes with Benzoylacetic Aldehyde Derivatives // *Moscow University Chemistry Bulletin*, 2019, Vol. 74, No. 3, pp. 138-142.
5. Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Аvezov К.Г., Севинчов Н.Г., Абдурахмонов С.Ф., Парпиев Н.А. Синтез и таутомерия в ряду ацилгидразонов жирноароматических альдегидов // *Фундаментальные и прикладные исследования: проблемы и результаты. Сборник материалов. XVIII Международной научно-практической конференции.* г.Новосибирск, 27 февраля 2015.- С. 151-172.
6. Mardonov S.Y., Tursunov M.A., regional focus and tautomerism in the series of acylhydrazones of  $\beta$ -dicarbonyl compounds. *Journal of Pharmaceutical Negative Results.* Volume 13 | Special Issue 6 | 2022 P. 279-287
7. Mardonov S.Y., Synthesis and structure of the ni (ii) complex on the basis of the 4, 4-dimethyl-3-oxypentanal para-methoxybenzoylhydrazone. *European*

Journal of Interdisciplinary Research and Development. Volume-03 May-2022.P. 5-8.

8. С.Ё Мардонов. Синтез и структура комплекса Ni (II) на основе 4, 4-диметил-3-оксипентаналь пара-метокситиобензоилгидразона. Universum: химия и биология.-2022. Выпуск: 2(92) P. 61-65.