

ЎЗБЕКИСТОН RESPUBLIKASI
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ



ТЕРМИЗ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ
ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

АКАДЕМИК А.Ф.ҒАНИЕВ ВА АКАДЕМИК Н.А.ПАРПИЕВ
ХОТИРАСИГА БАҒИШЛАНГАН

“КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАР КИМЁСИ ВА АНАЛИТИК КИМЁ ФАНЛАРИНИНГ ДОЛЗАРЪ МУАММОЛАРИ”

РЕСПУБЛИКА ИЛМИЙ-АМАЛИЙ
КОНФЕРЕНЦИЯСИ

МАТЕРИАЛЛАРИ ТЎПЛАМИ

1-ҚИСМ



2022 йил 19-21 май
Термиз

КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ СЕРЕБРА С ПРОИЗВОДНЫМИ БЕНЗИМИДАЗОЛА

¹Пардаев О.Т., ¹Бабаева Г.О., ^{1,2}Даминова Ш.Ш., ³Олмасов О.Н., ^{1,2,3}З.Ч. Кадилова

¹Национальный университет Узбекистана им. М.Улугбека, Ташкент, Узбекистан

²ГУ “Узбекско-японский молодёжный центр инноваций”, Ташкент, Узбекистан

³Ташкентский химико-технологический институт, Ташкент, Узбекистан

b.ruziyeva@nuu.uz

Целью работы является изучение электронной и геометрической структуры и исследование характера распределения электронной плотности комплексов серебра с 2-аминобензимидазолом (АВІ), 2-амино-1-метилбензимидазолом (МАВ) и 2-[фенилметил]-1Н-бензимидазолом (FAB). Квантовохимические расчеты молекул проведены по полуэмпирическому методу в приближении PM3 и PM6 с использованием пакетов программ BIOVIA Materials Accelrys Studio 2017 с полной оптимизацией геометрических параметров. Выбранные в качестве объектов исследования основные лиганды АВІ, МАВ и FAB характеризуются наличием в молекуле нескольких потенциальных донорных атомов азота для координации к иону серебра. При введении в гетероцикл заместителей в зависимости от их природы должно происходить перераспределение электронной плотности и изменение предпочтительного центра координации. Поэтому необходимо было изучить квантово-химическим методом характер распределения эффективных зарядов на донорных атомах в молекуле лигандов и дать сравнительную характеристику анализа реакционной способности АВІ, МАВ и FAB. Как показано на рис. 1., эффект конъюгации имидазольного и бензильного колец приводит к плоской структуре бензимидазольного фрагмента с локализацией локализовано по всему бензимидазольному кольцу и аминогруппе для АВІ и МАВ. Для FAB из-за свободного вращения С-С образуется неплоская геометрическая структура с ВЗМО и НВМО, локализованными, в основном, на ароматическом кольце. Известно, что более высокое значение энергии ВЗМО связано со способностью молекулы отдавать электрон на незанятую орбиталь металла, тогда как более низкое значение НВМО указывает на ее способность принимать электроны от металла, а ширина запрещенной зоны ($\Delta E = E_{\text{НВМО}} - E_{\text{ВЗМО}}$) отражает реакционную способность молекулы лиганда по отношению к комплексообразованию с ионами металла. Геометрическое строение молекул лигандов АВІ, МАВ и FAB является сходным, бензольное и имидазольное кольца находятся в одной плоскости. Предполагалось, что в реакциях комплексообразования лиганды будут координироваться преимущественно через атомы азота с наибольшей локализацией отрицательного заряда.

№ Лиганд

Распределение зарядов

Локализация ВЗМО

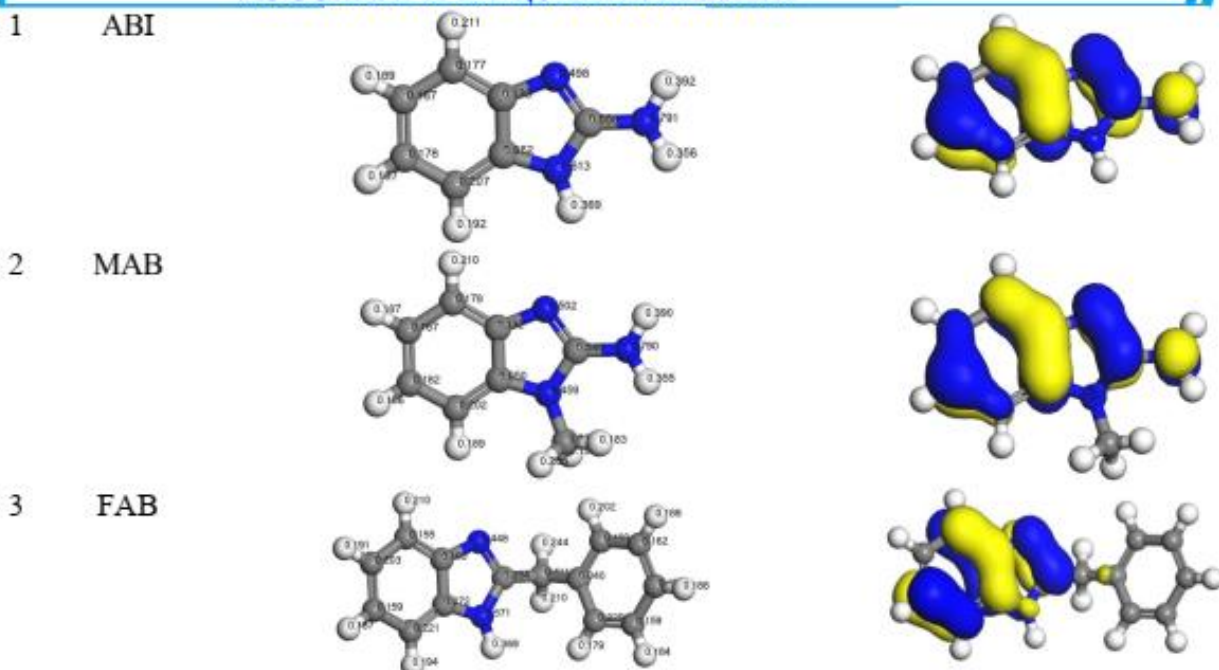


Рис.1. Геометрическое строение и распределение зарядов лигандов и локализация ВЗМО, рассчитанные по методу РМ-6

Анализируя значения зарядов и локализацию ВЗМО, можно судить о том, что вероятными центрами координации с ионом металла в молекуле лиганда являются донорные атомы эндоциклического азота (N) имидазольного кольца. Несмотря на высокую концентрацию эффективного отрицательного заряда на атоме азота в -NH группе гетероцикла, наблюдается практически полное отсутствие локализации ВЗМО на атоме азота NH группы, что не способствует координации через эту группу (-0.613, -0.459, -0.571, соответственно).

БАЪЗИ 3d-МЕТАЛЛАРИНИ 2-КАРБОКСИМЕТИЛТИО-5-ФЕНИЛ-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛ АСОСИДАГИ КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРИНИНГ ИҚ СПЕКТР ТАҲЛИЛИ

Пиримова М.А.¹, Кадирова Ш.А.¹, Зияев А. А.²

¹Ўзбекистон Миллий университети, Тошкент, Ўзбекистон

²ЎзР ФА Ўсимлик моддалар кимёси институти, Тошкент, Ўзбекистон

Координацион бирикмалар кимёсининг кенг ривожланаётган соҳаларидан бири бу таркибида азот, кислород, олтингугурт тутган гетероҳалқали лигандлар билан биометалларнинг комплекс бирикмаларини синтези ва хоссаларининг тадқиқотидир. Координацион бирикмалар кимёсида “таркиб-тузилиш-хосса” орасидаги қонуниятларни ўрганиш натижасида комплекс бирикмаларнинг таркиби, хоссалари ва молекула тузилишини олдиндан назарий жиҳатдан аниқлаш мумкин.

Оксадиазол асосидаги физиологик фаол бирикмалар молекуласида электрофил ва электрофоб реакция марказлар билан кучли қутбланган гуруҳлар ҳосил қилади ва бу билан улар биологик фаолликни намоён этиб,