

2022-45

12

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК КЫРГЫЗСКОЙ РЕСПУБЛИКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ И ФИТОТЕХНОЛОГИЙ**

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ КЫРГЫЗСКОЙ
РЕСПУБЛИКИ
ОШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Диссертационный совет Д 02.21.629

На правах рукописи
УДК 541.9(575.2)(043.3)

АЛАМАНОВА ЭЛМИРА АЗИСБЕКОВНА

**КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ АЗОЛОВ С
НЕОРГАНИЧЕСКИМИ СОЛЯМИ: СИНТЕЗ,
СВОЙСТВА И СТРОЕНИЕ**

02.00.01 – неорганическая химия

**Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук**

Бишкек – 2022

Работа выполнена в лаборатории неорганической химии Института химии и фитотехнологий Национальной академии наук Кыргызской Республики

Научный руководитель: Кыдырмаева Назира Шыйтыевна
доктор химических наук,
заведующая лабораторией неорганической химии Института химии и фитотехнологий Национальной академии наук Кыргызской Республики

Официальные оппоненты: Касенов Булат Кунурович
доктор химических наук,
профессор Карагандинского химико-металлургического института им. Ж. Абишева

Маматураимова Назгуль Абдулмиталиповна
кандидат химических наук,
доцент кафедры фармацевтической технологии и химии Жалал-Абадского государственного университета им. Б. Осмонова

Ведущая организация: Казахский национальный университет им. Аль-Фараби, (050040, Республика Казахстан, г. Алматы, проспект Аль-Фараби, 71).

Защита диссертации состоится 28 июня 2022 года в 15⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 02.21.629 по защите диссертаций на соискание ученой степени доктора (кандидата) химических наук при Институте химии и фитотехнологий Национальной академии наук Кыргызской Республики и Ошском государственном университете, по адресу: 720071, г. Бишкек, пр. Чуй, 265-а, конференц зал. Ссылка на онлайн трансляцию защиты диссертации: https://vc.vak.kg/b/d_0-quu-d2e-lwm

С диссертацией можно ознакомиться в Центральной научной библиотеке Национальной академии наук Кыргызской Республики (720071, г. Бишкек, проспект Чуй, 265-а), библиотеке Института химии и фитотехнологий Национальной академии наук Кыргызской Республики (720071, г. Бишкек, проспект Чуй, 267) и на сайте <http://www.ihftnaskr.kg/>

Автореферат разослан 27 мая 2022 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат химических наук,
старший научный сотрудник

Э. А. Шабданова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы диссертации. Анализ тематики научных докладов и работ, посвященных проблемам современной координационной химии, свидетельствует о том, что внимание исследований переместилось от классических мономерных комплексов к полимерным соединениям, которые являются новым, перспективным классом соединений. Большой интерес к координационным полимерам связан с уникальными возможностями их структурного дизайна, позволяющими создавать новые поколения функциональных материалов с заданными свойствами. К последним следует относить магнитоактивные, сорбционные, люминесцентные и биологические активные свойства [Е. З. Вацадзе, 2018; М. Е. Бушуев, 2015; М. О. Барсукова, 2019].

Получение координационных полимеров различного типа зависит от многих факторов таких, как координационные предпочтения металлов, геометрические характеристики органического лиганда, природа ацидолигандов. Среди лигандов, подходящих для синтеза полимерных соединений, особый интерес представляет гетероциклический лиганд - имидазол.

Благодаря, наличию пиридинового и пиррольного атомов азота, имидазол может выступать как хелатирующий, так и мостиковый лиганд. Вследствие этой особенности, гетероцикл может образовывать металл - органические координационные полимеры с необычным типом полимерных структур (цепочечные, слоистые, зигзагообразные) в формировании которых, преобладающую роль играют имидазол и нековалентные взаимодействия (водородные, межмолекулярные, нитратные и галогенидные связи) между протоном пиррольной группы и противоионами [И. В. Морозов, 2010; Е. Е. Деева, 2017; Е. Е. Нетреба, 2015].

Имидазол и его производные находят применение в биомедицине, как антигрибковые (клотримазол, миконазол), антимикробные (метронидазол), антигельминтные (альбендазол, мебендазол) и другие виды активности [В. А. Катаев, 2006; М. Negwer, 2007; I. Douyon, 2008; Е. В. Александрова и др., 2011]. До недавнего времени эти области применения были ассоциированы с чисто органическими производными азолов, что стимулировало развитие методов синтеза и изучение их свойств. Значительно меньшее внимание уделялось их координационной химии, т.е. химии в которой имидазол выступает лигандом. Вместе с тем, интерес к химии координационных соединений имидазола с ионами «биометаллов» растет, что связано с их свойствами такими, как высокая эффективность, биодоступность и малотоксичность.

Таким образом, на сегодняшний день актуальными задачами являются синтез координационных полимеров с лигандом на основе имидазола, исследования типов их структур, физико-химических свойств и перспектив практического применения в медицине и ветеринарии.

Связь темы диссертации с приоритетными научными направлениями, крупными научными программами (проектами), основными научно-исследовательскими работами, проводимыми образовательными и научными учреждениями. Работа выполнена в соответствии с планами научно-исследовательской работы Национальной академии наук Кыргызской Республики в лаборатории неорганической химии по проекту: «Разработка химико-технологических и биологических способов переработки природного, минерального и органического сырья Кыргызской Республики». Раздел 2. «Разработка новых биологически активных соединений с целью использования их для нужд медицины и сельского хозяйства» и подпроект: «Синтез новых комплексных соединений на основе солей переходных d-металлов и лантаноидов с N,S-содержащими гетероциклическими органическими соединениями (№ гос. регистрации 0007487).

Цель исследования. Синтез, исследование строения и физико-химических свойств комплексных соединений нитратов меди (II), кобальта (II), никеля (II), кадмия (II), цинка (II), магния (II) и кальция (II), а также хлоридов магния (II) и кальция (II) с имидазолом для изысканий областей их практического применения.

Задачи исследования:

1. Синтезировать комплексные соединения меди (II), кобальта (II), никеля (II), кадмия (II), цинка (II), магния (II) и кальция (II) с имидазолом.
2. Определить состав, свойства и строение полученных соединений методами элементного, термического, рентгенофазового, а также ИК спектроскопией.
3. Определить кристаллические структуры трех комплексных соединений методом рентгеноструктурного анализа.
4. Исследовать биологическую активность синтезированных комплексов, выявить среди них наиболее эффективные комплексы для получения на их основе новых препаратов биомедицинского назначения.

Научная новизна полученных результатов. Синтезированы 11 новых комплексных соединений имидазола с нитратами меди (II), кобальта (II), никеля (II), кадмия (II), цинка (II), магния (II), кальция (II) и хлоридами магния (II), кальция (II). Методами элементного, термического, рентгенофазового, рентгеноструктурного анализа и ИК спектроскопии установлены состав, свойства и строение синтезированных комплексов. Для соединений выбраны условия кристаллизации и выращены монокристаллы, пригодные для РСА.

Выявлены различные типы кристаллических структур. Получены комплексы Co(II), Cd(II) (состава 1:6) – слоистого и Zn(II) (состава 1:2:2) – зигзагообразного строения. Проведены биологические испытания комплексов нитратов Zn(II) и Co(II) и установлено, что данные соединения обладают бактерицидными и фунгицидными свойствами, соответственно.

Практическая значимость полученных результатов. Полученные теоретические, экспериментальные данные и выводы об особенностях физико-химических свойств и строения синтезированных комплексов представляет вклад в развитие современной координационной химии и могут быть рекомендованы для использования в научных исследованиях ВУЗов химико-биологического направления.

Проведенные исследования позволяют конструировать новые структуры молекул, содержащие различные жизненно важные донорные атомы металлов и органические гетероциклические биоактивные лиганды. Полученные комплексные соединения Co(II) и Zn(II) с имидазолом проявляют биологическую активность которые найдут применение в медицине и сельском хозяйстве как более безвредные и эффективные антимикробные и антигрибковые средства, рекомендованы их для дальнейшего изучения в качестве предшественников лекарственных препаратов для лечения инфицированных ран и воспалительных, грибковых заболеваний кожи. Разработаны новые антимикробный и антигрибковый комплексы Zn(II) и Co(II) с имидазолом, защищенными патентами КР №2237 от 30.06.2020г., №2211 от 31.12.2020 г.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

1. Новые координационные соединения имидазола с нитратами, хлоридами бивалентных металлов и строения их координационных узлов, структур координационных полимеров.
2. Координационные полимеры имидазола с нитратами Co(II), Cd(II) (состава 1:6) - слоистые и Zn(II) (состава 1:2:2) - зигзагообразные, установленные на основании рентгеноструктурного анализа.
3. Результаты биологических испытаний комплексов Co(II) и Zn(II) с имидазолом.

Личный вклад соискателя. Синтезы всех указанных в экспериментальной части комплексов, интерпретация их ИК спектров, термограмм, дифрактограмм, проба подготовка для элементного анализа выполнены соискателем. Проведен анализ полученных данных, которые были сформулированы в виде основных положений диссертации, составляющие ее новизну и практическую значимость, а также обобщены и опубликованы полученные результаты.

Апробация результатов диссертации. Основные результаты работы докладывались и обсуждались на международной практической конференции, посвященной 70-летию доктора химических наук, профессора, лауреата Государственной премии в области науки и техники Кыргызской Республики Алтыбаевой Д.Т. (Ош, 2019); международной научной конференции «Инновационная наука на пороге XXI века», посвященной 75-летию основания Химического Института (Бишкек, 2019); международной практической конференции «Современные тенденции развития системы образования и науки в цифровую эпоху», посвященной 80-летию Государственного и общественного деятеля Кыргызской Республики, академика Мурзубранмова Б.М. (Ош, 2020); международной научной конференции «Наука и инновации - 2021» (Ташкент, 2021); международном научно-практическом форуме по передовым достижениям в науке и технике (Барнаул, 2022).

Полнота отражения результатов диссертации в публикациях. По теме диссертации опубликовано 8 статей: из них 1 – в журнале индексируемых международных системы «Web of Science», 1 - в зарубежном журнале, индексируемого системой РИНЦ, 6 - в рекомендованных изданиях Высшей аттестационной комиссии Кыргызской Республики и получены 2 патента Кыргызской Республики на изобретение.

Структура и объем диссертации. Диссертация изложена на 136 страницах, содержит 55 рисунков, 23 таблиц. Работа состоит из введения, обзора литературы, методов и методики проведения исследований, обсуждения полученных результатов, выводов, 115 источников литературы.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснованы актуальность и выбор объектов исследований, определены цель и задачи работы, научная новизна, практическая значимость и сформулированы положения, выносимые на защиту.

Глава 1. Обзор литературы

1.1. Физико-химические характеристики комплексов имидазола с солями металлов. В литературном обзоре проанализированы результаты, опубликованных к настоящему времени работ, в которых приведены имеющиеся данные по синтезу, строению и способам координации имидазола.

В последующих работах рассматривается строение известных комплексных соединений имидазола с металлами d,s-элементов с полимерной структурой, среди которых встречаются различные типы строений (цепи, ленты, слоистые и каркасные) соединения. Эти полимерные комплексы благодаря своему необычному строению представляют собой особый интерес с точки зрения неорганической кристаллохимии. Кроме того, они являются

перспективными магнетиками, обладают каталитическим, люминесцентными, адсорбционными и биологически активными свойствами.

Несмотря на достижения, имеются ряд проблем, связанных с недостаточной разработанностью синтетических методов и исследованностью этого класса координационных соединений. В связи с этим синтез, характеристика и исследования функциональных свойств новых моно- и полимерных комплексов представляют большой интерес для координационной химии.

Глава 2. Методы и методика проведения исследований.

2.1. Оборудование, реактивы и основные методы исследования. Исходные вещества: имидазол, нитраты и хлориды Cu(II), Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II), Mg(II) и Ca(II) марки «x» и «xч». В работе использовались дифрактометр «ДРОН-3» с CuK α – излучением, спектрофотометр «Nicolette Avatar» в интервале частот 400–4000 см⁻¹, дериватограф системы Паулик-Паулик-Эрдей Q – 1500Д, анализатор АЕ-3000 (Euro – Vector) для проведения C,H,N анализа.

2.2 Объект, предмет и методика исследования. Объектами исследования являются соединения нитратов Cu(II), Co(II), Ni(II), Cd(II), Zn(II), Mg(II), Ca(II) и хлоридов Mg(II), Ca(II) с имидазолом.

Предметом исследования являются изучение строения и свойства синтезированных комплексов, а также поиск перспективных областей их применения.

Методы исследования: метод растворимости, элементный, рентгенофазовый, термический анализы, ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ.

Метод растворимости. Изучение фазовых равновесий в системах неорганическая соль – имидазол – вода проводилось методом растворимости при 25°C. Равновесие устанавливалось в течение 8-9 ч. Все анализы проб твердого «остатка» и жидкой фазы проводили параллельно. Состав твердых фаз в системах определяли по методу Скрейнемакенса и контролировали химическом анализом. Азот имидазола определяли по методу Кьельдаля. Концентрация ионов металлов определялась методом комплексометрического титрования. Ионы Cd²⁺, Zn²⁺, Mg²⁺ и Ca²⁺ определяли в среде аммиачного буфера при pH=10 с применением индикатора эриохрома черного, а Cu²⁺, Ni²⁺, Co²⁺ – в присутствии NH₄Cl и разбавленного раствора NH₄OH при pH=10, в качестве индикатора использовался мурексид. Относительная ошибка определения составила $\pm 0,5\%$.

Рентгеноструктурный анализ. Экспериментальный рентгеноструктурный материал для кристалла получен на автоматическом дифрактометре X-Calibur S (Mo K α – излучение, графитовый монохроматор, ω – сканирование, θ_{\max} – 48,18°). Структура расшифрована и уточнена МНК (по F₂) по программе

SHELIX 97. Атомы водорода заданы в рассчитанных позициях изотропно с параметрами U_n в 1,2 раза превышающими температурный параметр соответствующего неводородного атома.

2.3. Определение физико-химических свойств соединений. Элементный анализ – для подтверждения чистоты образцов и установления эмпирической формулы полученных соединений определяли на CHN – на анализаторе АЕ-3000 фирмы «Euro-Vector».

Рентгенофазовый анализ – для установления фазовой чистоты синтезированных соединений снимались на дифрактометре «ДРОН-3» с Si_{1k} – излучением, β -фильтр. Условия съемки дифрактограмм: $U=35$ кВ; $I=20$ мА; съемка θ -2 θ ; детектор 2 град/мин. Интерпретация дифрактограмм проводилась с использованием данных картотеки ICDD (Powder Diffraction File, 2012).

Термогравиметрический анализ. Дериватограммы соединений снимались на дериватографе системы Паулик-Паулик-Эрдей в атмосфере воздуха при нагревании от 20 до 1000 °С со скоростью нагрева 10 град/мин. Эталоном служил оксид алюминия (Al_2O_3).

Инфракрасная спектроскопия – ИК спектры поглощения ($400-4000$ см⁻¹, образцов, таблетированных с KBr, записывали на спектрофотометре «Nicolette Avatar».

Глава 3. Результаты собственных исследований и их обсуждение

3.1. Растворимость в тройных водных системах из двухвалентных металлов с имидазолом. С целью получения новых координационных соединений нами были изучены фазовые равновесия в водно-солевых системах $Me(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$, где Me – Cu(II), Co(II), Ni(II), Cd(II), Zn(II), Mg(II) и $MeCl_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$, где Me – Mg(II), Ca(II) при 25 °С.

Изотерма растворимости систем $Me(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$, Me – Cu(II), Ni(II), Cd(II), Co(II), характеризуется тремя ветвями кристаллизации, крайние из которых соответствуют кристаллизации исходных компонентов. Средняя ветвь отвечает кристаллизации новых гидратированных соединений состава $[MeL_6](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$, Me – Cu(II), Ni(II) и двух безводных комплексов состава $[MeL_6](NO_3)_2$, Me – Co(II), Cd(II) (рисунок 3.1б).

Изотермы растворимости систем $Me(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$, Me – Zn(II), Mg(II), Ca(II), состоят из трех ветвей, отвечающих кристаллизации $C_3H_4N_2$, гексагидратов цинка и магния и дигидрата кальция и новых конгруэнтно растворимых соединений с мольным соотношением $Me(NO_3)_2 \cdot 4C_3H_4N_2 \cdot 2H_2O$, равным 1:4:2, а в случае нитрата цинка образуются два комплекса состава 1:4:2 и 1:2:2.

Изотерма растворимости системы $Zn(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$ сложна и состоит из четырех ветвей кристаллизации, соответствующих выделению в твердую фазу имидазола, двух новых соединений состава $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$, $[ZnL_2](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ и чистого гексагидрата нитрата цинка (рисунок 3.1а).

Химический анализ комплекса $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ показал следующие содержание составных частей 38,05 масс.% нитрата цинка и 54,71 масс.% имидазола и 7,2 масс.% воды, что хорошо согласуется с теоретическом составом комплекса. Концентрационные выделения второго комплекса $[ZnL_2](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ сравнительно меньше, чем первое соединение. Прямолинейные лучи, идущие от фигуративных точек этой ветви, сходятся в одной точке, имеющий состав 52,45 масс.% нитрат цинка, 37,6 масс.% имидазола и 5,2 масс.% воды. Оба соединения в воде растворяются конгруэнтно.

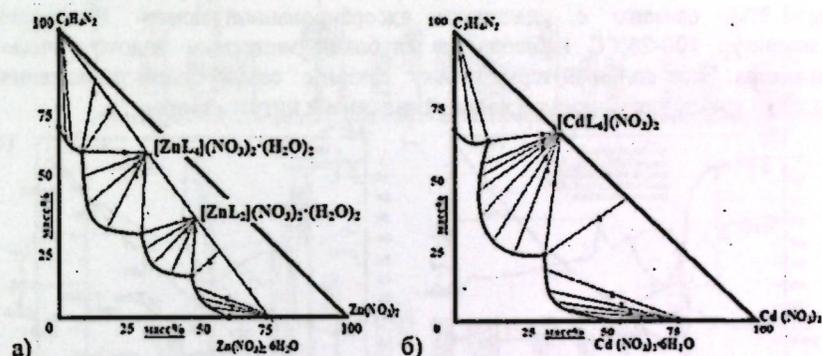


Рисунок 3.1 – Диаграммы растворимости систем: $Zn(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$ (а) и $Cd(NO_3)_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$ (б).

Диаграмма растворимости системы $MeCl_2 \cdot C_3H_4N_2 \cdot H_2O$, Me – Ca(II), Mg(II) состоит из трех ветвей кристаллизации. Первая ветвь соответствует выделению в твердую фазу исходного имидазола. Вторая ветвь изотермы растворимости отвечает кристаллизации новых комплексов состава $[CaL_4(H_2O)_2]Cl_2$ и $[MgL_4(H_2O)_2]Cl_2$ с мольным соотношением, равным 1:4:2. Область кристаллизации комплекса $[MgL_4(H_2O)_2]Cl_2$, по имидазолу – 45,1–30,4 масс.% и по нитрату кальция – 23,60–43,28 масс. %.

3.2. Термический анализ. Данные термогравиметрического анализа нитратных комплексов имидазола подтверждают установленный состав солей другими методами и позволяют предположить механизм их термического распада.

На кривой ДТГ соединения $[CdL_6](NO_3)_2$ в интервале 20-145 °С наблюдается заметная потеря веса, которая вызвана удалением адсорбированной воды и частичным выветриванием из поверхностей частиц слабосвязанных звеньев -3,3% (H_2O +примеси).

Дальнейшее повышение температур (145-290°C) вызывает взрывообразный глубокий экзотермический эффект с резкой потерей веса - 57,3%, которая связана с удалением координированных шести молекул имидазола (теоретически рассчитанные данные 58,4%). В интервале температур 290-525°C происходит разложение нитрата кадмия. Эффекты, наблюдаемые при 420, 525°C с потерей массы 8,5 и 13,0 % соответственно, отвечают образованию конечного продукта оксида кадмия (рисунок 3.2. а, б).

Термограмма комплекса $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ характеризуется наличием термоэффектов в пределах температур 20-100, 100-260, 260-360, 360-410, 410-510, 510-1000°C. Небольшие потери, зафиксированные на кривой убыли массы ($m, =1,3\%$), связаны с удалением адсорбированной влаги. В пределах температур 100-260°C наблюдается глубокий экстремум эндотермического характера. Этот сильный термоэффект связан с совместными разложениями молекул кристаллизационной воды, имидазола и нитрата цинка.

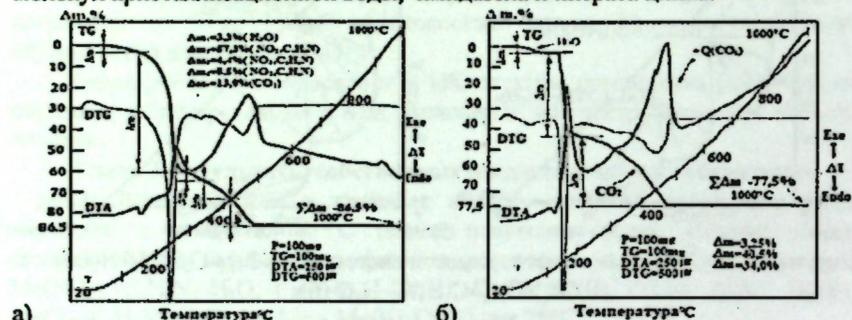


Рисунок 3.2 – Термограммы комплексов: $[CdL_6](NO_3)_2$ (а); $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ (б).

Убыль массы при этом составляет 71,5% от общей массы. Следующие стадии термоэффектов, проявляющихся с поглощением тепла ($\Delta m_3, \Delta m_4, \Delta m_5$), соответствуют дальнейшему распаду промежуточных продуктов разложения, потери массы, которые составляют 5,0; 3,5 и 10,0%, связанными с процессами сублимации и окисления соли. Конечным продуктом термоллиза является оксид цинка.

3.3. Рентгенофазовый анализ. Сравнительный анализ рентгенограмм полученных соединений с исходными компонентами позволяет считать, что интенсивность линий и углы отражений характеризуют индивидуальность, кристалличность каждого соединения. Вычислены параметры элементарной ячейки, молярный объем, число формульных единиц и пространственная группа соединений.

Сходство дифракционных картин, а также близость параметров элементарных ячеек комплексов: $[MeL_6](NO_3)_2$ Me – Co(II), Cd(II); $[MeL_4](H_2O)_2(NO_3)_2$, Me – Ca(II), Mg(II) и $[MeL_4(H_2O)_2]Cl_2$ Me – Ca(II), Mg(II) свидетельствует об их изоструктурности (рисунок 3.3а, б).

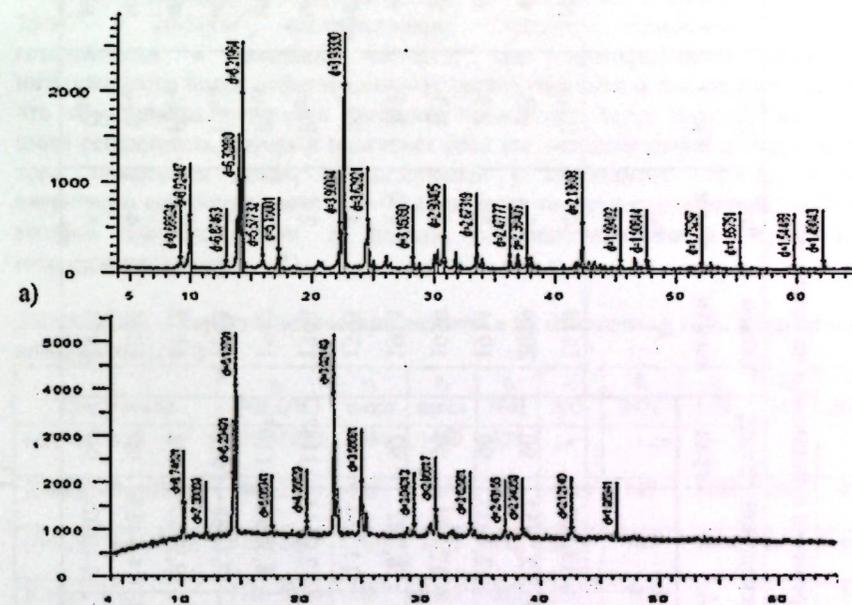


Рисунок 3.3 – Дифрактограммы соединений: $[CdL_6](NO_3)_2$ (а); $[CoL_6](NO_3)_2$ (б).

В результате установлено, что соединения кристаллизуются в триклинной и моноклинной сингонии за исключением орторомбического комплекса нитрата цинка состава 1:2:2 (таблица 3.1).

Таблица 3.1 – Параметры кристаллической решетки имидазола и их комплексов

Соединения	Параметры элементарной ячейки, Å			Углы, град	Объем ячейки А	Чис форм ед.	Прост. Групп.	Сингония
	a	b	c					
	β							
C ₃ H ₄ N ₂	14,685	13,815	13,586	-	1114	4	P2 _{1/c}	ромбическая
[CdL ₆](NO ₃) ₂	12,6098	12,6099	12,7352	90°	2029	3	R3	триклинная
[CoL ₆](NO ₃) ₂	12,350	12,350	12,4033	90°	1914	3	R3	триклинная
[CuL ₆](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	12,30	12,361	12,882	90°	1959	3	R3	триклинная
[NiL ₆](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	8,7724	8,7249	8,782	92°	1914	3	R3	триклинная
[ZnL ₂](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	10,184	10,340	11,354	-	1393	4	P2 _{1/c}	орторомбическая
[ZnL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	8,8655	12,304	12,9154	114°	1393	2	Pn2z	моноклинная
[CoL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	8,9825	8,5761	8,3068	119°	1812	2	P2 _{1/c}	моноклинная
[MgL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	6,7135	6,9344	7,1388	90,9°	1245	2	P2 _{1/c}	моноклинная
[CaL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	9,6001	9,7399	9,9153	92°	1132	2	P2 _{1/c}	моноклинная
[MgL ₄ (H ₂ O) ₂]Cl ₂	11,3826	11,6018	14,4483	90°	1882	4	C _{2/c}	моноклинная
[CaL ₄ (H ₂ O) ₂]Cl ₂	12,290	12,405	14,202	90°	1873	4	C _{2/c}	моноклинная

12

3.4. ИК спектроскопия. Сопоставление ИК спектров имидазола и их комплексов с нитратами металлов [MeL₄](NO₃)₂(H₂O)₂, где Me – Co(II), Zn(II), Mg(II), Ca(II), показало, что значительным изменениям подвергаются положения полос валентных колебаний гетероцикла ν(C=N) при 1490-1587см⁻¹ и деформационных ν(C=N) при 750см⁻¹ в высокочастотную область на 15-25см⁻¹ и 20-30см⁻¹, соответственно. Смещение валентных колебаний гетероцикла к высоким частотам при одновременном изменении интенсивности полос деформационных колебаний дает основание утверждать, что координация металла с лигандом происходит через пиридиновый атом азота гетероцикла, который проявляет себя как монодентатный лиганд. Кроме того, появляется новая, отсутствующая у свободного лиганда, полоса валентного колебания связи Me-N в пределах полос поглощений 425-447см⁻¹, которая свидетельствует в пользу комплексообразования через атом гетероцикла (таблица 3. 2).

Таблица 3. 2 – Характеристические частоты и их отнесение в ИКС лиганда и их комплексов (см⁻¹)

Соединение	ν ₁ (NH ₂ OH)	ν ₁ цикл	ν ₂ цикл	τ, N-H	ν ₁ NO ₃	δ ₁ NO ₃	ν ₁ OH	δ ₁ OH	ν ₁ Me-N
L(имидазол)	3200-2600	1580	1400	625	-	-	-	-	-
[CuL ₆](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3448-2500	1597	1478	615	1383	747	3448	1597	470
[NiL ₆](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3136-2857	1537	1488	618	1384	765	3136	1581	445
[CoL ₆](NO ₃) ₂	3188-2854	1537	1488	615	1384	747	-	-	440
[CdL ₆](NO ₃) ₂	3214-2601	1680	1587	636	1372	749	-	-	450
[CoL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3131-2383	1681	1541	620	1325	749	3131	1604	435
[ZnL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3298-2608	1534	1490	608	1382	725	3200	1620	425
[ZnL ₂](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3354-2396	1703	1504	644	1375	758	3354	1504	425
[MgL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3203-2606	1538	1437	615	1323	748	3203	1608	455
[CaL ₄](NO ₃) ₂ (H ₂ O) ₂	3497-2578	1587	1433	656	1358	751	3450	1640	447
[MgL ₄ (H ₂ O) ₂]Cl ₂	3118	1574	1419	669	-	-	3118	1633	-
[CaL ₄ (H ₂ O) ₂]Cl ₂	3253-2614	1575	1433	659	-	-	3253	1641	-

13

В результате установлено, что координационный полиэдр металлов – слегка искаженный тетраэдр, в котором металлы окружены четырьмя монодентатно-координированными атомами азота гетероцикла, а нитрат-ион и молекулы воды находятся во внешней координационной сфере (рисунок 3.4).

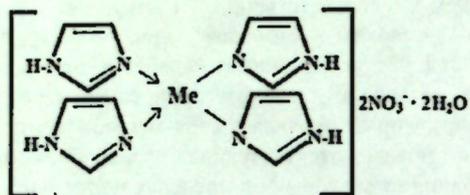


Рисунок 3.4 – Координационный полиэдр комплексов $[MeL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$, Me – Zn(II), Mg(II), Ca(II).

В спектрах нитратных безводных $[CoL_6](NO_3)_2$, $[CdL_6](NO_3)_2$ (рисунок 3.5а,б) и гидратированных комплексов $[CuL_6](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ и $[NiL_6](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ имидазола наблюдается сдвиг в коротковолновую область колебаний циклических $\nu(C=N)$ и $\delta(C-N)$ – связей на $15-20\text{см}^{-1}$, а также внеплоскостных колебаний имидазольного цикла $\tau_{\text{цикл}}(C-N)$ на $20-25\text{см}^{-1}$.

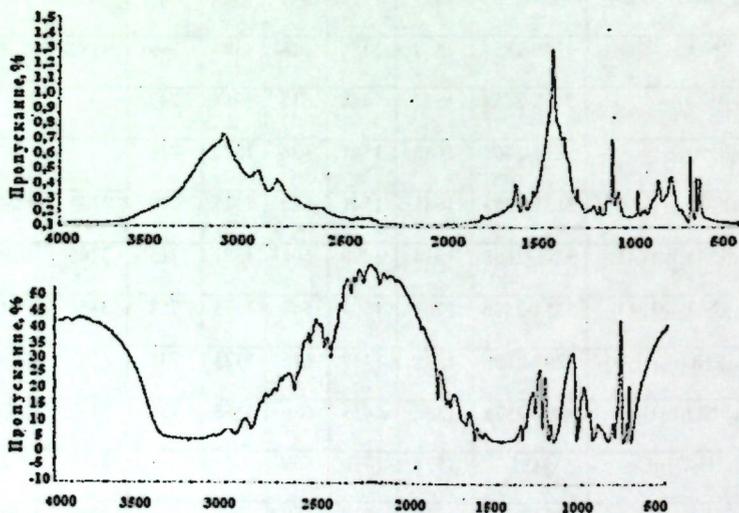


Рисунок 3.5 – ИК спектры поглощения комплекса $[CuL_6](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ (а); $[CdL_6](NO_3)_2$ (б).

Появляются новые полосы поглощения валентного колебания $Me \leftarrow N$ при $470-450\text{см}^{-1}$, что подтверждает координацию гетероцикла с металлами посредством атома азота (N3).

В комплексных соединениях Cu(II) и Ni(II) состава 1:6:2 присутствуют некоординированные полосы поглощения кристаллизационной воды: $\nu_{(OH)}$ около 3450см^{-1} , $\delta_{(OH)}$ при $1597-1625\text{см}^{-1}$, ρH_2O при $510-540\text{см}^{-1}$. В приведённых комплексах NO_3^- -анион не координируется с центральными атомами, располагаясь во внешней сфере. Об этом можно судить по отсутствию полос поглощения $Me \leftarrow O$ для комплексов нитратов меди и никеля ожидаемых в области $750-650\text{см}^{-1}$ (рисунок 3.6).

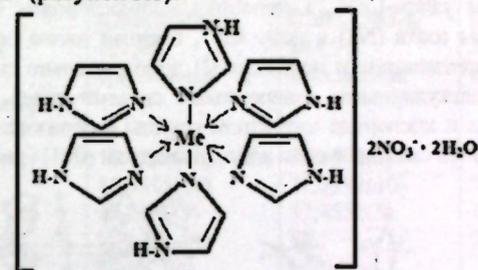


Рисунок 3.6 – Координационные полиэдры комплексов: $[MeL_6](NO_3)_2 \cdot 2H_2O$, где Me – Cu(II), Ni(II).

Таким образом, на основании результатов ИКС и ДТА можно предполагать, что комплексы окружены шестью монодентатно-координированными атомами азота (N3) имидазола так, что весь полиэдр представляет собой октаэдр, образуя шестичленные металлоциклы.

При анализе ИК спектров хлоридных комплексов Mg(II), Ca(II) происходит монодентатная координация четырех молекул имидазола. Координационные полиэдры имеют октаэдрическую конфигурацию, за счет координации атомов кислорода двух молекул воды. Хлорид-ион располагается во внешней сфере комплексов и не координируется с металлами. Об этом можно судить по отсутствию в ИКС комплексов полос поглощения $Me - Cl$ (рисунок 3.7).

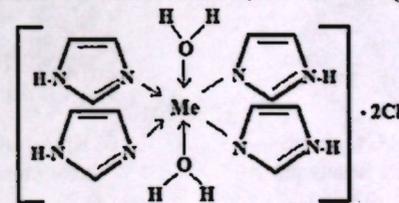
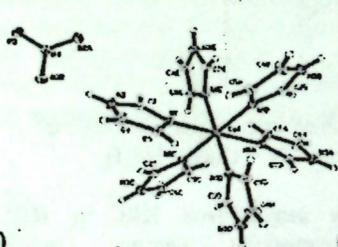
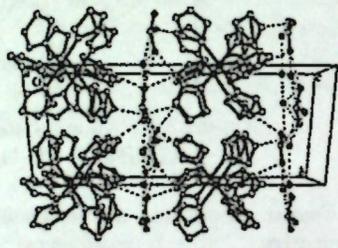


Рисунок 3.7 – Координационный полиэдр комплексов: $[MeL_4(H_2O)_2]Cl_2$, где Me – Mg(II), Ca(II).

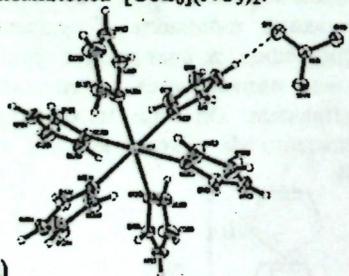
3.5 Кристаллические и молекулярные структуры комплексов $[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$ (I), $[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$ (II), $[\text{ZnL}_2](\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$ (III). Результаты рентгеноструктурного анализа показывают, что координационные соединения $[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$ и $[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$ кристаллизуются в триклинной сингонии с пр.гр.-R3 с параметрами элементарной ячейки (таблица 3.3). Установлено, что координационные соединения (I) и (II), являются изоструктурными и имеют схожее строение, поэтому рассмотрим их более подробно на примере комплекса Co(II). Структура комплекса (I) состоит из дискретных катионов $[\text{Co}(\text{L}_6)]^{2+}$ и анионов NO_3^- . Ион Co^{2+} имеет centrosymmetric конфигурацию октаэдра с координационным узлом-CoN₆. Гетероцикл координирован монодентатно через пиридиновый атом азота (N3) к иону Co^{2+} , средняя длина связи Co-N=2,1590Å. Молекулы в координационном полимере (I) дополнительно связаны между собой сильными межмолекулярными водородными связями через протон пиррольной группы имидзола и кислорода нитратной группы с образованием цепи N-H...O. Полимерные цепочки связаны в слои вдоль плоскости (001) (рисунок 3.8, 3.9).



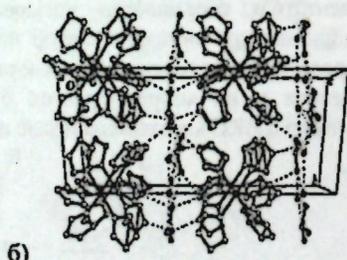
а) Структура координационного полимера комплекса $[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$.



б) Кристаллическая упаковка комплекса $[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$.



а) Структура координационного полимера комплекса $[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$.

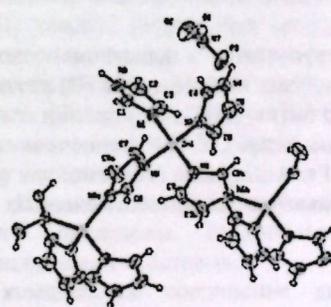


б) Кристаллическая упаковка комплекса $[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$.

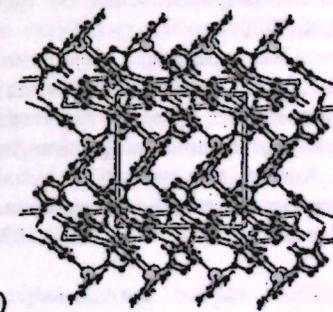
Результаты рентгеноструктурного исследования комплекса Zn(II) показали следующее: комплекс кристаллизуется в орторомбической сингонии с параметрами элементарной ячейки: $a=12,1812(10)$ $b=10,0713(7)$, $c=11,3628(10)$ Å; $\alpha=\beta=90$; $\gamma=1200$; $V=1914,78(5)$ Å³; пр.гр.-R3 (рисунок 3.10).

Таблица 3.3 – Кристаллографические характеристики детали эксперимента и уточнения структуры координационных полимеров $[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$ (I), $[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$ (II), $[\text{ZnL}_2](\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$ (III)

Номер соединения	(I)	(II)	(III)
Молекулярная формула	$\text{C}_{18}\text{H}_{24}\text{CoN}_{14}\text{O}_6$	$\text{C}_{18}\text{H}_{24}\text{CdN}_{12}\text{O}_6$	$\text{C}_{12}\text{H}_{20}\text{N}_{10}\text{ZnO}_8$
Брутто формула	$[\text{CoL}_6](\text{NO}_3)_2$	$[\text{CdL}_6](\text{NO}_3)_2$	$[\text{ZnL}_2](\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$
Мол. масса, г/моль	591,44	644,91	330,62
Гр. симметрии	триклинная	триклинная	орторомбическая
Параметры элементарной ячейки:			
$a/\text{Å}^\circ$	12,3555(10)	12,6098(2)	12,1812(10)
$b/\text{Å}^\circ$	12,3545(10)	12,5191(10)	11,0713(7)
$c/\text{Å}^\circ$	12,2833(5)	12,4352(5)	10,3628(10)
$\alpha/\text{Å}^\circ$	90	90	90
$\beta/\text{Å}^\circ$	90	90	90
$\gamma/\text{Å}^\circ$	120	121	91,011(8)
Объем ячейки, Å ³	1914,76(5)	2029,10(9)	1393,78(19)
Температура, К	100	150(2)	293
Простр. группа	R-3	R-3	$P_{21/c}$
Число формульных единиц в элементарной ячейке, Z	3	3	4
ρ (выч), г/см ³	1,539	1,583	1,680



а) Структура координационного полимера комплекса $[\text{ZnL}_4](\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$.



б) Кристаллическая упаковка комплекса $[\text{ZnL}_4](\text{NO}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2$.

1 В комплексе Zn(II) установлен новый тип координации имидазола, когда
2 он одновременно является монодентатным и мостиковым лигандом.
3 Состав координационного узла комплекса – ZnN_4 , который формируется
4 четырьмя атомами азота-двух монодентатно координированных атомов
5 азота (хелатная функция) и – двух атомов азота координированных
6 мостиковым способом. Структура состоит из цепочек бис (имидазольных
7 цинковых звеньев), соединенных имидазольными анионами, представляя
8 собой зигзагообразный полимер – $[\mu-Zn(C_3H_4N_2)(C_3H_4N_2)_2](NO_3)_2(H_2O)_2$.
9 Атом цинка имеет правильную тетраэдрическую конфигурацию. Средняя
10 длина связи Zn-N=2,251(2)Å. Две единицы мостикового имидазола связаны
11 винтовой осью и соединяют атомы цинка образуя зигзагообразный
12 полимер.

3.6. Антибактериальная и антигрибковая активность комплексов
имидазола с солями нитратами меди, кобальта, никеля, цинка, кадмия,
магния и кальция и хлоридов магния и кальция. Для изучения
биологической активности были синтезированы ряд комплексов на основе
солей бивалентных металлов с имидазолом. Из приведенных первичных
скринингов по изучению биоактивности восьми новых соединений
имидазола с солями бивалентных металлов $MeX_2 \cdot nC_3H_4N_2 \cdot 2H_2O$, где Me –
Cu(II), Co(II), Zn(II), Ca(II), Mg(II); X_2 – NO_3^- , Cl^- , n-количество
координированных молекул имидазола, выявлено два соединения –
дигидраттетраимидазол нитрат цинка – $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ и
дигидраттетраимидазол нитрат кобальта – $[CoL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$, обладающие
бактерицидной и фунгицидной активностью, соответственно.

Установлено, что комплекс $[CoL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ –
дигидраттетраимидазол нитрат кобальта, обладает фунгицидной
активностью на культуру «Candida». На основании экспериментальных
данных разработан способ применения комплекса (Патент КР № 2211 от
30.06.2020г).

На основе полученных результатов испытания комплекса
 $[ZnL_4](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ – дигидраттетраимидазол нитрат цинка (II) установлено,
что комплекс проявляет бактерицидную активность в отношении следующих
культур: Salmonella Typhimurium (сальмонелла), E-coli (кишечная палочка),
St. Aureus (золотистый стафилококк) и Ps. Aureginosa (синегнойная палочка).
Разработан способ применения комплекса против вышеотмеченных культур
(Патент КР № 2237 от 31.12.2020).

ВЫВОДЫ

1. Впервые методом растворимости синтезированы 11 комплексных
соединений имидазола с нитратами Cu(II), Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II), Mg(II),
Ca и хлоридами Mg(II), Ca(II) типа: $Me(NO_3)_2 \cdot 6L \cdot 2H_2O$, где Me – Cu(II), Ni(II),
в случае Co, Cd – безводные комплексы состава 1:6. Комплексы
 $Me(NO_3)_2 \cdot 4L \cdot 2H_2O$, Me – Co(II), Zn(II), Mg(II), Ca(II); $MeL_4Cl_2 \cdot 2H_2O$ Me –
Mg(II), Ca(II) и $Zn(NO_3)_2 \cdot 2L \cdot 2H_2O$.

2. Методами элементного (СНН), РФА, РСА, термогравиметрии и ИК
спектроскопии определены особенности строения и структуры
координационного полиэдра полученных соединений.

3. Установлено, что имидазол координируется к металлу монодентатно и
образуют с нитратами Co(II), Cd(II) (состава 1:6) – слоистые, а комплекс
Zn(II), (состава 1:2:2) – зигзагообразные координационные полимеры.
Критерием формирования полимерных комплексов являются хелатно-
мостиковая функция гетероцикла и нековалентные межмолекулярные
взаимодействия.

4. Показано, что в зависимости от природы металла, ацидо- и
гетероциклического лиганда образуются искаженно-октаэдрические
 $-[MeL_6](NO_3)_2$, Me – Co(II), Cd(II), Cu(II), Ni(II), $[MeL_4(H_2O)_2]Cl_2$, Me – Ca(II),
Mg(II); тетраэдрические – $[MeL_4](NO_3)_2(H_2O)_2$, Me – Co(II), Zn(II), Ca(II),
Mg(II); и орторомбический – $[ZnL_2](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ – комплексы.

5. Методом РСА установлены кристаллические структуры трех
полимерных комплексов $[CoL_6](NO_3)_2$ (I), $[CdL_6](NO_3)_2$ (II) и
 $[ZnL_2](NO_3)_2(H_2O)_2$ (III). Изоструктурные комплексы (I) и (II) –
кристаллизуются в триклинной сингонии с пр.гр.– R-3, координационные
полиэдры-слегка искаженные октаэдры. Структурными единицами соединений
являются комплексные катионы $[CoL_6]^{2+}$, $[CdL_6]^{2+}$ и анионы NO_3^- . В комплексах
(I) и (II) каждый нитрат ион соединяет три различных катиона $[(Me(L_6))^{2+}]$,
через водородную связь пиррольного атома азота (N–H...O), тем самым нитрат
– ион оказывает влияние на построение слоистой полимерной сети. А в
комплексе $[ZnL_2](NO_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ (III) имидазол выступает в роли хелатно-
мостикового лиганда, обуславливая формирование зигзагообразных
полимерных цепей.

6. Изучены биологические свойства синтезированных комплексов, среди
которых определены соединения, обладающие фунгицидными и
бактерицидными свойствами:

– комплексное соединение дигидраттетраимидазол нитрат кобальта
 $-[CoL_4](NO_3)_2(H_2O)_2$ обладает фунгицидным действием. Препарат защищен
патентом КР №2211 от 30.06.2020 г;

- комплексное соединение дегидраттетраимидазол нитрат цинка – $[ZnL_4](NO_3)_2(H_2O)_2$ проявляет высокую бактерицидную активность и является перспективным для практического применения, на что получен патент КР №2237 от 11.02.2020 г.

ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ

Полученные теоретические, экспериментальные данные и выводы об особенностях физико-химических свойств и строений синтезированных комплексов представляет вклад в развитие современной координационной химии и могут быть рекомендованы для использования в научных исследованиях ВУЗов химико-биологического направления.

Проведенные исследования позволяют конструировать новые структуры молекул, содержащие различные жизненно важные донорные атомы металлов и органические гетероциклические биоактивные лиганды. Полученные комплексные соединения Co(II) и Zn(II) с имидазолом проявляют биологическую активность которые найдут применение в медицине и сельском хозяйстве как более безвредные и эффективные антимикробные и антигрибковые средства, рекомендованы их для дальнейшего изучения в качестве предшественников лекарственных препаратов для лечения инфицированных ран и воспалительных, грибковых заболеваний кожи. Разработаны новые антимикробный и антигрибковый комплексы Zn(II) и Co(II) с имидазолом, защищенными патентами КР №2237 от 30.06.2020 г., №2211 от 31.12.2020 г.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ:

1. Аламанова, Э. А. Синтез и физико-химические свойства имидазольных комплексов меди и кобальта состава $Me(NO_3)_2 \cdot 6C_3H_4N_2 \cdot 2H_2O$ (Me = Co, Cu) [Текст] / Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, Ж. И. Бердалиева, А. М. Малабаева // Вестник Таджикского Национального Университета. - Душанбе, 2017. - №12. - С.17-23. <https://elibrary.ru/item.asp?id34832833>.
2. Аламанова, Э. А. Изучение взаимодействия имидазола с нитратом никеля [Текст] / Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, Ж. Бердалиева, А. Малабаева // Наука, новые технологии и инновации Кыргызстана. – Бишкек, 2017. - №7. - С. 132-136. <https://elibrary.ru/item.asp?id30484395>.
3. Аламанова, Э. А. Новые металлохелаты на основе нитратов меди (II) и кобальта (II) с имидазолом [Текст] / [Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, Ж. И. Бердалиева, А.М. Малабаева] // Вестник Ошского государственного университета. 2017. - С.9-15.

4. Аламанова, Э. А. Новые металлохелаты имидазола с нитратом цинка (II) [Текст] / [Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, Ж. И. Бердалиева, А. М. Малабаева А. Т. Дуйшонбаева, И. Б. Саматов] // Известия Национальной академии наук Кыргызской Республики. 2018. - № 5. - С. 122-129. <https://elibrary.ru/item.asp?id36964112>.

5. Аламанова, Э.А. Пат. №2211 Кыргызская Республика. Диакватетраимидазол динитрат кобальта (II), $Co(NO_3)_2 \cdot 4C_3H_4N_2 \cdot 2H_2O$, обладающий фунгицидной активностью [Текст] / [Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, С. Б. Ибраева, Ж. И. Бердалиева и др.] // – Бишкек. заявл., 31.05.2019; опубл. 30.06.2020.

6. Аламанова, Э. А. Пат. №2237 Кыргызская Республика. Дигидрат тетраимидазол нитрат цинка $Zn(NO_3)_2(C_3H_4N_2)_4 \cdot (H_2O)_2$, обладающий бактерицидным действием [Текст] / [Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, С. Б. Ибраева, Ж. И. Бердалиева и др.] // – Бишкек. заявл., 11.10.2019; опубл. 31.12.2020.

7. Аламанова, Э. А. Комплексные соединения нитратов магния и кальция с имидазолом: синтез и физико-химические свойства [Электронный ресурс]. / Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, А. М. Малабаева, Ж. И. Бердалиева – Электронный журнал Бишкек.: 2021 «Научные исследования в Кыргызской Республике». - Режим доступа: vak.kg/jurnal/VAK. – Загл. с экрана.

8. Аламанова, Э. А. Квантово-химическое исследование донорно-акцепторных взаимодействий в хелатных комплексах Mg (II), Zn (II) с имидазолом [Текст] / Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, Арыстанбек к. А. // Наука и новые технологии и инновации Кыргызстана. – Бишкек, 2021. - № 3. - С. 29-32. <https://elibrary.ru/item.asp?id46306356>.

9. Alamanova, E. Coordination Polymer of Cobalt (II) Nitrate with Imidazole: Synthesis, Properties and Crystal Structure [Электронный ресурс]. / N. Shyytyeva, Zh. Berdalieva, N. Abdyldaeva, A. Duishonbaeva, Zh. Abdullaeva // Journal of Crystallization Process and Technology. – 2021, – Vol.10, - P. 1-9. – Режим доступа: <https://www.scirp.org/journal/jcpt> – Загл. с экрана.

10. Аламанова, Э. А. Координационные соединения 3d- металлов с N-донорными лигандом: синтез, структура и биологическая активность [Текст] / Э. А. Аламанова, Н. Шыйтыева, А. М. Малабаева // Сборник научных трудов международной научной конференции молодых ученых «Наука и Инновации». – Ташкент, – 2021. – С. 249-252. – Режим доступа: https://www.doi.org/10.36522/Science_and_innovation

Аламанова Элмира Азисбековнанын «Органикалык эмес туздар менен азолдордун координациялык бирикмелеринин: синтези, касиеттери жана түзүлүшү» деген темада 02.00.01 – органикалык эмес химия адистиги боюнча химия илимдеринин кандидаты окумуштуулук даражасына сунуш кылынган диссертациясынын

РЕЗЮМЕСИ

Негизги сөздөр: имидазол, «биваленттүү» элементтер, комплекстик полимерлер, физика-химиялык анализ, биологиялык активдүүлүк.

Изилдөө объектиси: имидазол менен Cu(II) , Co(II) , Ni(II) , Cd(II) , Zn(II) , Mg(II) , Ca(II) дин нитраттарынын жана Mg(II) , Ca(II) дин хлориддеринин бирикмелери.

Изилдөө предмети: синтезделип алынган комплекстердин түзүлүшүн жана касиеттерин, ж.о.э алардын перспективдүү колдонуу тармактарын окуп уйронуу.

Изилдөө максаты: Cu(II) , Co(II) , Ni(II) , Cd(II) , Zn(II) , Mg(II) жана Ca(II) дин имидазол менен болгон комплекстик бирикмелерин синтездөө, алардын түзүлүшүн, физика-химиялык касиеттерин аныктоо, ж.о.э. колдонуу тармактарын изилдөө.

Изилдөө ыкмалары жана аппаратура: эригичтүүлүк ыкмасы, элементтик, рентгеноструктуралык, рентгенофазалык, термогравиметрикалык анализдөө ыкмалары жана ИК спектроскопия. Аппаратура: дериватограф Паулик-Паулик-Эрдей, дифрактометр «ДРОН-3», спектрофотометрлер «Nicolette Avatar», дифрактометр X-Calibur S.

Алынган жыйынтыктар жана изилдөөнүн жаңылыгы. Имидазол менен жездин(II), кобальттын(II), никелдин(II), цинктин(II), кадмийдин(II), магнийдин(II) жана кальцийдин(II) нитраттарынан жана магнийдин(II), кальцийдин(II) хлориддеринен 11 комплекстик бирикме синтезделип алынды. Алынган комплекстик бирикменин курамы, касиети жана түзүлүшү элементтик, рентгенофазалык, рентгенструктуралык анализдери, ИК спектри жана термогравиметриялык методдору менен аныкталды. Рентгенструктуралык анализге колдонуу учун, бирикменин монокристаллы ыңгайлуу шарт түзүлүп өстүрүлдү. Бирикменин ар түрдүү кристаллдык түзүлүштөрү аныкталды. Курамы 1:6 Co(II) , Cd(II) катмарлуу жана 1:2:2 Zn(II) зигзагтүрүндөгү комплекстери алынды. Co(II) жана Zn(II) нитраттарынын комплексине биологиялык сыноо жүргүзүлдү, жана ал бирикмелер бактерициддик, фунгициддик касиетке ээ экендиги тастыкталды.

Колдонуу тармагы: координациялык бирикмелердин химиясы, биокоординациялык химия, медицина.

РЕЗЮМЕ

диссертации Аламановой Элмиры Азисбековны на тему «Координационные соединения азолов с неорганическими солями: синтез, свойства и строение», на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 - неорганическая химия

Ключевые слова: имидазол, бивалентные металлы, комплексные полимеры, физико-химический анализ, биологическая активность.

Объекты исследования являются соединения нитратов Cu(II) , Co(II) , Ni(II) , Cd(II) , Zn(II) , Mg(II) , Ca(II) и хлоридов Mg(II) , Ca(II) с имидазолом.

Предмет исследования: изучение строения и свойства синтезированных комплексов, а также поиск перспективных областей их применения.

Цель исследования. Синтез, исследование строения и физико-химических свойств комплексных соединений нитратов меди (II), кобальта (II), никеля (II), кадмия (II), цинка (II), магния (II) и кальция (II), а также хлоридов магния (II) и кальция (II) с имидазолом для изысканий областей их практического применения.

Методы исследования и аппаратура: метод растворимости, элементный, рентгенофазовый, термический анализы, ИК спектроскопия, рентгеноструктурный анализ (РСА). Аппаратура: дериватограф Паулик-Паулик-Эрдей, дифрактометр «ДРОН-3», спектрофотометры «Nicolette Avatar», дифрактометр X-Calibur S.

Полученные результаты и их новизна: Синтезированы 11 новых комплексных соединений имидазола с нитратами меди (II), кобальта (II), никеля (II), кадмия (II), цинка (II), магния (II), кальция (II) и хлоридами магния (II), кальция (II). Методами элементного, термического, рентгенофазового, рентгеноструктурного анализов и ИК спектроскопии установлены состав, свойства и строение синтезированных комплексов. Для соединений выбраны условия кристаллизации и выращены монокристаллы, пригодные для РСА. Выявлены различные типы кристаллических структур. Получены комплексы Co(II) , Cd(II) (состава 1:6) – слоистого и Zn(II) (состава 1:2:2) – зигзагообразного строения. Проведены биологические испытания комплексов нитратов Zn(II) и Co(II) и установлено, что данные соединения обладают бактерицидными и фунгицидными свойствами, соответственно.

Область применения: химия координационных соединений, биокоординационная химия, медицина.

SUMMARY

the dissertation of Alamanova Elmira Azisbekovna on the theme: «Coordination compounds of azoles with inorganic salts: synthesis, properties and structure» for the degree of Candidate of Chemical Sciences in specialty 02.00.01 - inorganic chemistry

Key words: imidazole, bivalent elements, complex polymers, physico-chemical analysis, biological activity.

Object of the study: compounds of Cu(II), Co(II), Ni(II), Cd(II), Zn(II), Mg(II) and Ca(II) nitrates, Mg(II) and Ca(II) chlorides with imidazole.

Subject of research: is the study of the structure and properties of the synthesized complexes, as well as the search for promising areas of their application.

Work object. Synthesis, study of the structure and physicochemical properties of complex compounds of copper (II), cobalt (II), nickel (II), cadmium (II), zinc (II), magnesium (II) and calcium (II) nitrates, as well as chlorides magnesium (II) and calcium (II) with imidazole to explore areas of their practical application.

Research methods and equipment: solubility method, elemental, X-ray, X-ray phase and thermogravimetric analyses, as well as IR spectroscopy. Equipment: Paulik-Paulik-Erdi derivatograph; DRON-3 diffractometer, Nicolette Avatar, spectrophotometers, X-Calibur S diffractometer.

Obtained results and their novelty: 11 imidazole complex compounds with copper(II), cobalt(II), nickel(II), zinc(II), cadmium(II), magnesium(II) and calcium(II) nitrates and magnesium(II) and calcium(II) chlorides were synthesized. The composition, properties, and structure of the resulting complexes were studied by elemental, X-ray phase, X-ray diffraction analyses, IR spectroscopy, and thermogravimetry. Crystallization conditions were chosen for the compounds, and single crystals suitable for XRD were grown. Various types of crystal structures have been revealed. Co(II), Cd(II) complexes of composition 1:6 - layered and complex Zn(II) of composition 1:2:2 - zigzag structure were obtained. Biological tests of Zn(II) and Co(II) nitrate complexes have been carried out and it has been established that these compounds have antimicrobial and antifungal properties, respectively.

Scope of application: chemistry of coordination compounds, biocoordination chemistry, medicine.

Подписано к печати _____ 2022 г.
Заказ № 175. Тираж 50 экз. Бумага офсетная.
Формат бумаги 60 × 90/16. Объем 1,5 п. л.
Отпечатано в ОсОО «Соф Басмасы»
720020, г. Бишкек, ул. Ахунбаева, 92

