

ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ
ОЛИЙ ВА ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ

МИРЗО УЛУҒБЕК НОМИДАГИ
ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ

КИМЁ ФАКУЛЬТЕТИ



**ЎзР ФА академиги, ЎзР хизмат кўрсатган фан арбоби,
Халқаро олий мактаб академияси академиги,
кимё фанлари доктори, профессор**

ПАРПИЕВ НУСРАТ АГЗАМОВИЧ

таваллудининг 90 йиллик хотирасига бағишланган
«КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАР КИМЁСИНИНГ
ДОЛЗАРБ МУАММОЛАРИ»

мавзусидаги Республика илмий-амалий конференция
материаллари тўплами

2021 йил 14-15 сентябрь

ТАШКЕНТ – 2021

расчетным данным (рис.), карта МЭП показывает, что отрицательные потенциалы находятся вокруг азотов цикла, а положительные потенциалы - вокруг водородов, а в комплексах потенциалы уменьшаются, что указывает на то, что электронное поле донорных атомов централизуется в центре комплексных молекул (рис.).

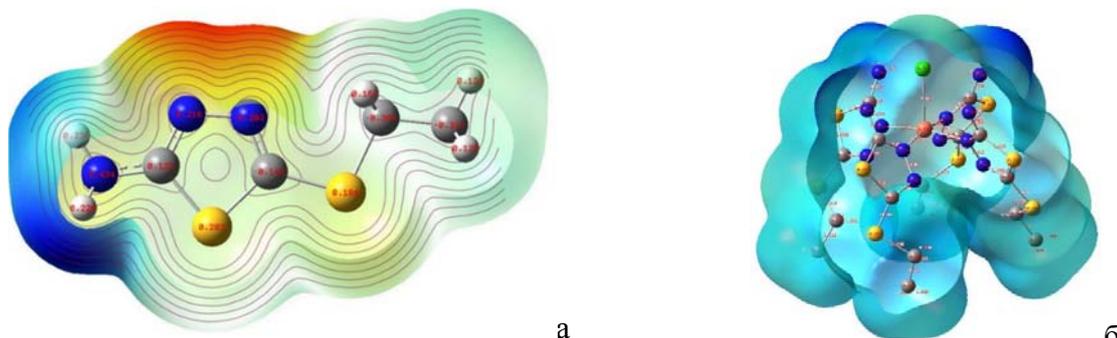


Рис. Геометрическое строение, МЭП и распределение зарядов лиганда (а) и комплекса (б), рассчитанные по методу DFT/ V3LYP с базисам 6-311G(d,p) и LanL2DZ

Таким образом, на основании квантово-химического расчета методом V3LYP / 6–311G (d, p) можно сделать качественный вывод о том, что при реакции комплексообразования лиганд будет координироваться к иону-комплексообразователя за счет атома азота в третьем положении тиadiaзольного кольца, проявляя монодентатность. Данные теоретические предположения будут далее подтверждены данными эксперимента.

При сравнении геометрических характеристик по данным РСА и расчетным квантово-химическим данным установлено, что расчетные и экспериментальные данные согласуются, что свидетельствует о правильности техники выполнения расчетов и применимости их в априорном предсказании вероятных донорных центров в реакциях комплексообразования.

Литература:

1. Luis M.T. Frija, Armando J.L. Pombeiro, Maximilian N. Kopylovich. Coordination chemistry of thiazoles, isothiazoles and thiadiazoles// Coordination Chemistry Reviews 308. 2016. P.32-55
2. Dani R.K., Bharty M.K., Kushawaha S.K., Prakash O., Singh R.K., Singh N.K. Ni(II), Cu(II) and Zn(II) complexes of (Z)-N'(1,3,4-thiadiazol-2-yl) acetimidate: Synthesis, spectral, solid state electrical conductivity, X-ray diffraction and DFT study // Polyhedron. – 2013. – V. 65. – P. 31–41. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2013.08.015>.
3. Becke A.D. Density-functional thermochemistry. III. The role of exact exchange //The Journal of Chemical Physics, – 1993. – V. 98(7), – P. 5648 – 5652. <http://dx.doi.org/10.1063/1.464913>.

ВНАДИЛ(II) ИОНИ КАРБОКСИЛАТЛАРИНИНГ БИОЛОГИК ФАОЛЛИГИНИ НАЗАРИЙ ЎРГАНИШ (PASS АНАЛИЗ)

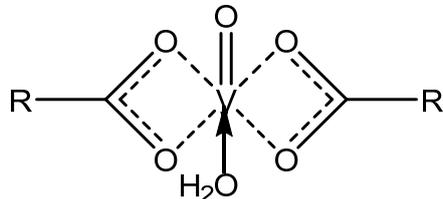
Ф.И. Музафаров, Б.Ш. Ганиев, Ў.М. Мардонов, Г.Қ. Холиқова
Бухоро давлат университети

Биологик ва фармакологик фаол бирикмаларнинг янги синфларини излашда бир нечта фаоллик намоён қилувчи моддаларнинг таҳлили шуни кўрсатадики, таклиф қилинаётган “структура-фаоллик” ўзаро боғлиқликни тадқиқ қилишда анъанавий компьютер дастурларига кўра *online* режимда махсус компьютер дастурлари самаралироқ натижалар беради. Шундай мақсадда янгидан синтез қилинган моддалар биологик фаоллигини уларнинг тузилиш формулалари асосида башорат қилишда PASS компьютер дастуридан кенг фойдаланиш мумкин. PASS дастурига кўра кимёвий бирикманинг таркиби ва тузилишига боғлиқ ҳолда

унинг биологик фаоллик намоён қилиш эҳтимоллиги P_a – фаол бирикма, P_i – нофаол параметрларнинг киймати билан аниқланади.

Мазкур ишда янгидан синтез қилинган ванадил ацетати ва галогенацетатларининг биологик фаоллигини PASS дастури асосида ўрганиш натижалари ва уларнинг тахлиллари келтирилган.

Ушбу дастурга асосан карбоксилатли комплекс бирикмалар ($VOL^1 \cdot H_2O - VOL^7 \cdot H_2O$) нинг турли биологик фаолликка эга эканлиги аниқланди, натижалар 1-жадалда келтирилган.



$R = CH_3$ (VOL^1), $R = CH_2Cl$ (VOL^2), $R = CHCl_2$ (VOL^3), $R = CCl_3$ (VOL^4),
 $R = CH_2F$ (VOL^5), $R = CHF_2$ (VOL^6), $R = CF_3$ (VOL^7).

Бу дастурга кўра моддаларнинг биологик фаолликларини ўрганиш қуйидаги жиҳатларни аниқлаш имкониятини берди:

- VO^{2+} ионининг ацетатли ва галогеноацетатли комплекс бирикмалари миокард инфаркти, қандли диабет, инсулт, юрак ишемияси касалликларига қарши, сахаропепсин ингибитори, аденоматоз полипозни даволаш ва глуксилат редуктазаси ингибиторлиги бўйича 0,578 дан 0,997 гача биологик фаоллик намоён қилиши тўғрисида маълумот олинди;

- $VOL^1 \cdot H_2O - VOL^7 \cdot H_2O$ комплекслар лигандлари таркибидаги ўринбосарлар ($R = CH_3, Cl, F$)нинг миқдори ва турларидан қатъий назар миокард инфаркти ва қандли диабет касалликларига қарши юқори фаоллик (0,958-0,987 ва 0,995-0,997 мос равишда) намоён қилади;

- VOL^1-VOL^7 қаторида комплексларнинг инсултни даволашдаги фаоллиги карбоксилат лиганднинг таркибида ўринбосар (R) ларнинг таркибига кучли боғлиқлиги ва унинг $CCl_3 < CH_2Cl < CH_3 < CHCl_2 < CH_2F < CHF_2 \approx CF_3$ қаторида ортиб бориши, улар ичида фторли ҳосилалар юқори фаолликка эга эканлиги аниқланди:

- юрак ишемиясига нисбатан комплексларнинг биофаоллиги ҳам карбоксилат лиганди таркибига кирувчи ўринбосарлар таркибига боғлиқ бўлиб, органик ўринбосарларни галоген атомларига алмашинуви фаолликни камайтириши CH_3 (0,920), $CHCl_2$ (0,734) ва бу хосса Cl дан F ли бирикмаларга ўтганда ўзига хос қийматларга эга эканлиги аниқланди;

- комплексларнинг аденоматоз полипозни даволаш ва глуксилат редуктаза ингибиторлиги хоссалари ўртача фаоллик кўрсаткичига эга. Бу кўрсаткичларнинг ўзгарувчанлиги ҳам карбоксилат анион таркибидаги ўринбосар табиатига боғлиқ бўлиб, ҳар иккала ҳолда ҳам хлорли ўринбосарларга нисбатан CH_3 -, CH_2F , CHF_2 ва CF_3 радикалли комплекслар нисбатан устунликка эгалигини кўрсатди.

1-жадвал

Ўрганилган комплекс бирикмаларнинг PASS анализи дастури бўйича юқори кўрсаткичли биологик фаоллик натижалари

№	Биологик фаоллик	Фаоллик / нофаоллик	Карбоксилатли комплекс бирикмалар						
			VOL^1	VOL^2	VOL^3	VOL^4	VOL^5	VOL^6	VOL^7
1	Миокард инфарктини даволовчи	P_a	0,978	0,958	0,958	0,98	0,983	0,974	0,974
		P_i	0,001	0,002	0,002	0,001	0,001	0,001	0,001
2	Диабетга қарши	P_a	0,996	0,996	0,995	0,996	0,996	0,997	0,997
		P_i	0,002	0,002	0,003	0,002	0,002	0,002	0,002
3	Инсултни даволовчи	P_a	0,658	0,578	0,672	0,551	0,81	0,895	0,895
		P_i	0,005	0,007	0,005	0,009	0,004	0,002	0,004
4	Юрак ишемиясига қарши	P_a	0,920	0,853	0,734	0,869	0,892	0,848	0,848
		P_i	0,003	0,004	0,005	0,004	0,004	0,004	0,004

5	Сахаропепсин ингибитори	P _a	0,861	0,788	0,788	0,808	0,788	0,812	0,812
		P _i	0,010	0,023	0,023	0,019	0,023	0,018	0,018
6	Аденоматоз полипозни даволаш	P _a	0,652	0,476	0,476	0,511	0,534	0,710	0,710
		P _i	0,013	0,048	0,048	0,039	0,035	0,007	0,007
7	Глоксилат редуктаза ингибитори	P _a	0,661	0,626	0,626	0,646	0,626	0,661	0,661
		P _i	0,008	0,011	0,011	0,009	0,011	0,008	0,008

Юқоридаги 1-3 турдаги касалликларга нисбатан ванадийнинг нафақат органик лигандлар билан комплекслари, балки ванадил сульфати, метаванадат ва ортованадатнинг натрийли тузлари эритмалари ҳам биологик фаолликка эга эканлиги кейинги йилларда дунёнинг турли хуудлари (Миср, Греция, Польша, Ҳиндистон, Япония) олимлари томонидан экспериментал тадқиқотлар асосида тасдиқланган [1-6].

Умуман, жадвалда келтирилган ва 3-7 турдаги касалликларга нисбатан комплексларнинг юқори биологик фаоллик намоён қилишига эришиш учун карбоксилат лигандлар таркибига кирувчи R – ўринбосарлар таркибини турли функционал гуруҳлар билан алмаштириш бўйича тадқиқотларни олиб бориш зарурлигини тақозо этапти.

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

1. Winther J. R., Phylip L. H., Kay J. Saccharopepsin //Handbook of Proteolytic Enzymes. – Academic Press, 2004. – С. 87-90.

2. Cronin, N. B., Badasso, M. O., Tickle, I. J., Dreyer, T., Hoover, D. J., Rosati, R. L., Humblet, C. C., Lunney, E. A., & Cooper, J. B. (2000). X-ray structures of five renin inhibitors bound to saccharopepsin: Exploration of active-site specificity. *Journal of Molecular Biology*, 303(5), 745–760.

3. Kowalski S., Wyrzykowski D., Inkielewicz-Stepniak I. Molecular and cellular mechanisms of cytotoxic activity of vanadium compounds against cancer cells //Molecules. – 2020. – Т. 25. – №. 7. – С. 1757.

4. Kioseoglou, E., Petanidis, S., Gabriel, C., & Salifoglou, A. (2015). The chemistry and biology of vanadium compounds in cancer therapeutics. *Coordination Chemistry Reviews*, 301, 87-105.

5. D.C. Crans, J.J. Smee, E. Gaidamauskas, L. Yang, *Chem. Rev.* 104 (2004) 849–902.

6. Havranek, Brandon, and Shahidul M. Islam. "An in silico approach for identification of novel inhibitors as potential therapeutics targeting COVID-19 main protease." *Journal of Biomolecular Structure and Dynamics* (2020): 1-12.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СМЕШАННОЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ ЛАНТАНА (III)

Рузиева Б.Ю., Даминова Ш.Ш., Тожибоева И.М.

Национальный университет Узбекистана имени М.Улугбека, baxtigul74@mail.ru

Бензимидазол представляет собой циклическое соединение с имидазольным кольцом с двумя атомами азота, присоединенными к бензольному кольцу, производные которого широко используются в медицине благодаря своим антимикробным, антибактериальным и антиоксидантным свойствам. Целью данной работы является синтез смешаннолигандного координационного соединения нитрата лантана (III) с 2-амино-1-метилбензимидазолом (МАВ) и диизопропилдитиофосфатной кислотой (*изо*-Pr₂PS₂) и изучение их термических свойств.

Синтез (нитрато)бис(диизопропилдитиофосфато)(2-амино-1-метил-1Н-бензимидазол) лантана(III) [Ln(МАВ)₂(*изо*-Pr₂PS₂)₂(NO₃)]. К раствору 0,104 г (0,25 ммоль) La(NO₃)₃·5H₂O в 5 мл H₂O при перемешивании прибавляли по каплям раствор 0,26 г (1 ммоль) *изо*-Pr₂PS₂ в 10 мл C₂H₅OH. Раствор приобрел коричневого цвета. Затем к смеси прибавляли раствор

Хусенов К.Ш., Умаров Б.Б., Бахронова О.Ж., Самадов С.С., Мухиддинов Б.Ф. ТИАДИАЗОЛ-1,3,4 ҲОСИЛАЛАРИ АСОСИДА РУХ(II)НИНГ ҲАР ХИЛ АЦИДОЛИГАНДЛИ КОМПЛЕКСЛАРИНИНГ ГЕОМЕТРИК СТРУКТУРАВИЙ ТУЗИЛИШИНИ ЎРГАНИШ	33
Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Ашууров Ж.М., Холикова Г.К., Музафаров Ф.И. ГРАНИЧНЫЕ МОЛЕКУЛЯРНЫЕ ОРБИТАЛИ И ДЕСКРИПТОРЫ ГЛОБАЛЬНОЙ РЕАКТИВНОСТИ ТРИАЗИНОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ	35
Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Ашууров Ж.М., Холикова Г.К., Салимов Ф.Г. ИЗУЧЕНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ СВОЙСТВ МОЧЕВИНО ЗАМЕЩЕННЫХ ПРОДУКТОВ ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ	37
Торамбетов Б.С., Аташов А.К., Кадирова Ш.А. КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛ ЛИГАНДА 2-АМИНО-5-ЭТИЛТИО-1,3,4-ТИАДИАЗОЛА И ЕГО КОМПЛЕКСА С ХЛОРИДОМ МЕДИ(II)	38
Музафаров Ф.И., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Холиқова Г.Қ. ВАНАДИЛ(II) ИОНИ КАРБОКСИЛАТЛАРИНИНГ БИОЛОГИК ФАОЛЛИГИНИ НАЗАРИЙ ЎРГАНИШ (PASS АНАЛИЗ)	40
Рузиева Б.Ю., Даминова Ш.Ш., Тожибоева И.М. СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СМЕШАННОЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ ЛАНТАНА (III)	42
Сайдуллаева Х.Т., Якубова Н.Х., Эсанов Р.С., Юлдашев Х.А., Гафуров М.Б. ГЛИЦИРРИЗИН КИСЛОТАСИ ВА N-(ФЕНИЛМЕТИЛ)-7Н-ПУРИН-6-АМИН СУПРАМОЛЕКУЛЯР КОМПЛЕКСЛАРИНИНГ БАРҚАРОРЛИК КОНСТАНТАСИНИ АНИҚЛАШ	43
Азизов О.Т., Шарипов Х.Т., Дусматов А.Ф. ИЗУЧЕНИЯ ТЕРМИЧЕСКОГО ПОВЕДЕНИЯ КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ СТЕАРАТА КАЛЬЦИЯ С КАРБАМИДОМ	44
Эшкурбонов Ф.Б., Тоирова Г.Х., Бакиров Ж.А. СОРБЦИЯ ИОНОВ ХРОМА (VI) ИОНИТАМИ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИОКАРБАМИДА И ПОЛЭТИЛЕНПОЛИАМИНА	45
Эшкурбонов Ф.Б., Гаффарова Ш.В., Рахмонкулов Ж. ИЗУЧЕНИЕ СЕЛЕКТИВНОСТИ СОРБЦИИ ИОНОВ Cu^{2+} И Co^{2+} ИОНИТАМИ НА ОСНОВЕ ЭПОКСИДНОГО ПРОИЗВОДНОГО КАРБАМИДА И ПОЛИАМИНОВ	46
Култаев Кузибай Казакбаевич d-ОРАЛИҚ МЕТАЛЛАР КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРИ ТУЗИЛИШИ	47
Алиева Г.К., Нуралиева Г.А., Кадирова Ш.А. МАСС-СПЕКТРОМЕТР УСУЛИ ЁРДАМИДА КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРНИ ЎРГАНИШ	49
Нуралиева Г.А., Умирзокова О.Т., Алиева М.З., Парниев Н.А. Zn(II), Ni(II), Co(II), Cr(II) ВА Mn(II) ЛАРНИНГ КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРИНИ ТУЗИЛИШИНИ ФИЗИК-КИМЁВИЙ УСУЛЛАР АСОСИДА ЎРГАНИШ	51
Нуралиева Г.А., Умирзокова О.Т., Алиева М.З., Парниев Н.А. ТЮСЕМИКАРБАЗИД ВА САЛИЦИЛ КИСЛОТА БИЛАН Zn(II), Ni(II), Co(II), Cr(II) ВА Mn(II) ЛАРНИНГ КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРНИ ИҚ-СПЕКТРОСКОПИЯ АСОСИДА ЎРГАНИШ	53
Султонова С., Умирзокова О.Т., Нуралиева Г.А., Парниев Н.А. 3d-ОРАЛИҚ МЕТАЛЛ ТУЗЛАРИНИ АЦЕТИЛАЦЕТОНАТ ВА АЦЕТАМИД БИЛАН АРАЛАШ ЛИГАНДЛИ КОМПЛЕКС БИРИКМАЛАРИНИ ЎРГАНИШ	54
Каримова Гавхар Шовкатжановна СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КОМПЛЕКСА α -(N-БЕНЗОКСАЗОЛИН-2-ОН) УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ С ЦИНКОМ	55