

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI
OLIIY TA'LIM, FAN VA INNOVATSIYALAR VAZIRLIGI
FARG'ONA DAVLAT UNIVERSITETI

**FarDU.
ILMIY
XABARLAR**

1995-yildan nashr etiladi
Yilda 6 marta chiqadi

5-2024

**НАУЧНЫЙ
ВЕСТНИК.
ФерГУ**

Издаётся с 1995 года
Выходит 6 раз в год

FIZIKA– TEXNIKA

G'.R.Rahmatov Sabzavotlarni quritishda birlamchi ishlov berishdagi qurish kattaliklari tahlili.....	5
M.B.Nabiyev, O.V.Tillaboyeva, D.D.G'ulomjonova Yarimo'tkazgichli termoelektrik sovutgich (muzlat gich)lar asosidagi qurilmalarning qo'llanilishini o'rganish va uning tadbiqu.....	10
M.Kholdorov Study of infrared light drying processes of fruits and vegetables	16

KIMYO

Q.M.Norboyev, X.Sh.Tashpulatov, A.M.Nasimov, D.T.Toshpulatov, Sh.N.Magdiyev, J.M.Xursandov, D.O.Sadikov Xona haroratida ligandlar yordamida qayta cho'ktirish usulida CsPbBr ₃ tarkibli perovskit kvant nuqtalar sintezi va spektral tahlili	20
M.O.Rasulova, A.A.Ibragimov, T.Sh.Amirova Oshlangan hayvon terilari tarkibidagi makro va mikroelementlar tahlili	26
I.R.Asqarov, Sh.Sh.Abdullayev, S.A.Mamatqulova, O.Sh.Abdulloyev, Sh.X.Abdulloyev Development of a methodology for determining the amount of water-soluble vitamins using the YSSX method (case study of Jujube).....	32
A.A.Toshov, S.R.Razzoqova, I.Karimov, J.Jo'rayev, Sh.A.Kadirova, Sh.Sh.Turg'unboyev, Y.Ro'zimov Синтез, строение и физико-химические свойства комплекса 2-метилтиобензоксазола с кобальтом	39
S.X.Botirov, D.A.Eshkursunov, A.Inxonova D.J.Bekchanov M.G.Muxamediyev AN-31 Anionitiga bixramat ionlarining sorbsiyasini eritma <i>ph</i> muhitiga bog'liqligini tadqiq qilish.....	48
M.A.Yusupov, Sh.E.Satimova, I.R.Asqarov, M.M.Mo'minov Determination of polyphenols and vitamins in artichoke (<i>Cynara scolymus</i> L.) leaves	52
S.X.Botirov, D.A.Eshkursunov, Y.S.Fayzullayev, D.J.Bekchanov, M.G.Muxamediyev Sanoat anionitiga suniy eritmalardan Cr(VI) ionlarining sorbsiya kinetikasini tadqiq qilish.....	60
M.M.Yadgarova, Sh.B.Hasanov, O.I.Xudoyberganov, Z.Sh.Abdullayeva Ni(II) ionining salitsilamid bilan kompleks birikmasi sintezi va kristall tuzilishi	65
O.K.Askarova, G.M.Ikromova, M.Y.Juraev, Э.Х.Ботиров Химический состав эфирного масла из надземной части <i>Haplophyllum acutifolium</i>	73
X.V.Isroilova, B.Y.Abdug'aniyev Jundan tayyorlangan matolarning sifat va miqdoriy tarkibini fizik-kimyoviy uslublarda tadqiq qilish	78
M.M.Yadgarova, Sh.B.Hasanov, O.I.Xudoyberganov, M.A.Ashirov Cu(II) ionining, salitsilamid hamda trietanolamin bilan kompleks birikmasi sintezi va kristall tuzilishi.....	85
N.T.Xo'jayeva, B.Y.Abdug'aniyev, V.U.Xo'jayev <i>Fritillaria severzovii</i> o'simligi piyozi va uning suvli ekstraktini makro va mikroelementlar tahlili.....	93
X.R.Kosimova, O.A.Bozorboyeva, N.K.Malikova, S.B.Raximov, A.E.Yangibayev, Sh.Sh.Turg'unboyev Cu (II) ionini sorbsion-spektrofotometrik aniqlash	97
O.P.Mansurov, B.З.Адизов, X.P.Латипов, Б.Б.Рахимов, М.Ю.Исмоилов Метод производства добавок к бензину	103

BIOLOGIYA

Sh.X.Yusupov, I.I.Zokirov, K.H.G'aniyev, M.A.Masodiqova Zararkunanda hasharotlar populyatsiyasining mavsumiy rivojlanish sur'atlari (no'xat agrotsenozi misolida).....	112
A.K.Xusanov, A.A.Yaxyoyev, J.B.Nizomov, I.I.Zokirov, M.A.Abduvaliyeva Mikroplastiklarni gidrobiontlar organizmiga ta'sirini o'rganilishini adabiyotlarda yoritilishi	118
Z.A.Jabbarov, D.K.Begimova Tuproqda B guruh vitaminlarining mikroorganizmlar tomonidan sintez qilinishi.....	123
S.O.Khuzhzhiev Biological wastewater treatment using higher aquatic plants.....	130



UO'K: 541.49+ 546.47+546.817

2-METILTIOBENZOKSAZOLNING KOBALT BILAN HOSIL QILGAN KOMPLEKSINI SINTEZI, TUZILISHI VA FIZIK-KIMYOVIY XOSSALARI**СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСА 2-МЕТИЛТИОБЕНЗОКСАЗОЛА С КОБАЛЬТОМ****SYNTHESIS, STRUCTURE AND PHYSICO-CHEMICAL PROPERTIES OF THE 2-METHYLTHIOBENZOXAZOLE COMPLEX WITH COBALT****Toshov Akobir Asqarovich¹**¹O'zbekiston Milliy universiteti, mustaqil tadqiqotchi**Razzoqova Surayyo Razzoqovna²** ²O'zbekiston Milliy universiteti, PhD, dotsent**Karimov Islom³**³O'zbekiston Milliy universiteti, magistrant**Jo'rayev Abduqayum⁴**⁴O'zbekiston Milliy universiteti, magistrant**Kadirova Shaxnoza Abduxalilovna⁵** ⁵O'zbekiston Milliy universiteti, k.f.d, professor**Turg'unboyev Shavkatjon Shuhratjon o'g'li⁶** ⁶Farg'ona davlat universiteti, PhD, dotsent**Ro'zimov Yodgor⁷**⁷Xorazm Mamun akademiyasi, doktorant**Annotatsiya**

Ushbu ishda kobaltning 2-metiltiobenzoksazol bilan kompleksini sintez qilish, tuzilishi va xossalari o'rganishga bag'ishlangan natijalar keltirilgan. Hosil bo'lgan kompleksning tuzilishi va xossalari rentgen tuzilish tahlil usuli yordamida o'rganilgan. Kristal monoklinik singoniyaga ega, fazoviy guruhi P21/c (№ 15), $a=16.5799$ (8), $b=9.8956$ (4), $c=19.1097$ (9) Å, $\beta=112.925$ (6), $V=2887.7$ (2) Å³. Kristall tuzilishida kobalt atomiga ikkita ligand molekulasi monodentat holatda, ikkita nitrat ioni bidentat holatda bog'langan oktaedr tuzilishga ega. Molekulararo ta'sirlarni vizuallashtirish maqsadida Hirschfeld sirt tahlili o'tkazilgan.

Аннотация

В настоящей работе приведены результаты посвященные синтезу, изучению строения и свойств комплекса кобальта с 2-метилтиобензоксазолом. Методом рентгеноструктурного анализа изучено строение и свойства полученного комплекса. Кристалл обладает моноклинной сингонией, с P21/c (№15), $a=16,5799$ (8), $b=9,8956$ (4), $c=19,1097$ (9) Å, $\beta=112,925$ (6), $V=2887,7$ (2) Å³. В кристаллической структуре он имеет октаэдрическую структуру, в которой две молекулы лиганда связаны с атомом кобальта в монодентатном состоянии, а два нитрат-иона находятся в бидентатном состоянии. пространственной группой. Для визуализации межмолекулярных взаимодействий был проведен анализ поверхности Хиршфельда.

Abstract

This work presents the results devoted to the synthesis, study of the structure and properties of the complex of cobalt with 2-methylthio benzoxazole. The structure and properties of the resulting complex were studied using X-ray diffraction analysis. The crystal has a monoclinic system, P21/c (No. 15), $a=16.5799$ (8), $b=9.8956$ (4), $c=19.1097$ (9) Å, $\beta=112.925$ (6), $V=2887.7$ (2) Å³. In the crystal structure, it has an octahedron structure in which two ligand molecules are

bound to the cobalt atom in the monodentate state, and two nitrate ions are in the bidentate state. space group. To visualize intermolecular interactions Hirshfeld surface analysis was performed.

Kalit so'zlar: sintez, ligand, kompleks, spektroskopiya, struktura, kristall, monoklinik singoniya.

Ключевые слова: синтез, лиганд, комплекс, спектроскопия, структура, кристалл, моноклиническая сингония.

Key words: synthesis, ligand, complex, spectroscopy, structure, crystal, monoclinic syngony, intermolecular hydrogen bond.

ВВЕДЕНИЕ

К концу двадцатого века химия гетероциклических соединений стала интенсивно развивающейся областью органической химии. Этому способствовало то, что многие азотсодержащие гетероциклы являются высокоэффективными лекарствами. Среди азотсодержащих гетероциклов постепенно занимают достойное место 2-метилтиобензоксазола и их производные.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Производные 2-метилтиобензоксазола обладают биологическим действием [1-3], противогрибковой, фунгицидной активностью [4,5], являются антиоксидантами [6], противогрибковая активность этих 2-замещенных производных бензоксазола была оценена в отношении патогенных грибов *Aspergillus niger* и *Fusarium oxysporium*. Установлено, что все соединения обладают умеренной антибактериальной и противогрибковой активностью [7-9]. Все синтезированные производные 2-меркаптобензоксазола были проверены на антибактериальную активность с использованием ДМФ в качестве растворителя против микроорганизмов *S.aureus* и *E.coli*. Противогрибковая активность при использовании *Candida albicans*. Методом дисковой диффузии на питательной агаровой среде. Стандартным используемым препаратом был амоксициллин (антибактериальное действие) и кетоконазол (стандартное противогрибковое действие) [10-11].

Синтез комплекса: В колбе снабжённой обратным холодильником и магнитной мешалкой при постоянном перемешивании при 80-90°C нагревали реакционную смесь, содержащую этанольный раствор 0,002 моль лиганда и водный раствор 0,002 моль едкого калия. Реакцию проводили в течение 2,5 часа, потом добавляли водный раствор 0,001 моль нитрат Со (II). На следующий день образовался осадок желтый цвета, которого отфильтровывали, промывали несколько раз этанолом и сушили на воздухе. Выход – 75%.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для изучения структуры и свойств комплексного соединения кобальта с 2-метилтиобензоксазолами синтезирован комплекс имеющей по данным элементного анализа состав $[\text{CoL}^1_2(\text{NO}_3)_2]$. Состав и строение синтезированного комплекса обсуждено на основании результатов РСА рис.1.

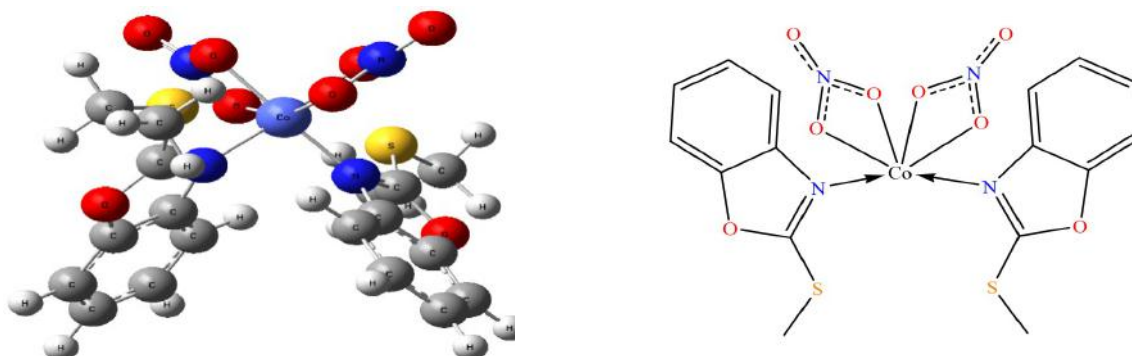
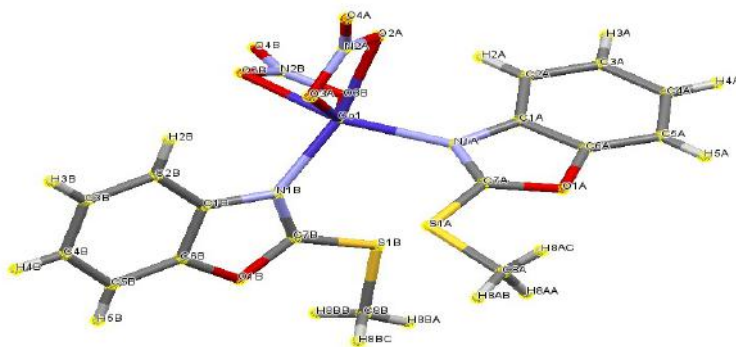


Рис. 1. Комплекс 2-метилтиобензоксазола с кобальтом

Рис. 2. Кристаллическая структура $[\text{CoL}^{12}(\text{NO}_3)_2]$.

Кристаллографические данные: $\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{CoN}_4\text{O}_8\text{S}_2$, $M=208.79$ г·моль⁻¹, прозрачные кристаллы лимонного света с моноклинной сингонией, пространственная группа $P2_1/c$ (№. 15), $a=16.5799$ (8), $b=9.8956$ (4), $c=19.1097$ (9) Å, $\beta=112.925$ (6), $V=2887.7$ (2) Å³, $Z=13$. (табл.1,2,3)

Таблица 1

Основные кристаллографические параметры и характеристики рентгеноструктурного эксперимента для структуры $[\text{Co}(\text{C}_8\text{H}_7\text{NOS})]$

$0.308(\text{C}_{16}\text{H}_{14}\text{CoN}_4\text{O}_8\text{S}_2) \cdot 0.308(\text{C}_8\text{H}_7\text{NOS})$	$Z = 13$
$M_r = 208.79$	$F(000) = 1388$
Monoclinic, $P2_1/c$	$D_x = 1.561 \text{ Mg m}^{-3}$
$a = 16.5799$ (8) Å	Cu Ka radiation, $\lambda = 1.54184$ Å
$b = 9.8956$ (4) Å	Cell parameters from 3626 reflections
$c = 19.1097$ (9) Å	$q = 4.7\text{--}69.7^\circ$
$\beta = 112.925$ (6)°	$m = 7.21 \text{ mm}^{-1}$
$V = 2887.7$ (2) Å ³	$T = 293 \text{ K}$

Таблица 2

Кристаллографические данные комплекса

XtaLAB Synergy, Single source at home/near, HyPix3000 diffractometer	5593 independent reflections
Radiation source: micro-focus sealed X-ray tube, PhotonJet (Cu) X-ray Source	3054 reflections with $I > 2s(I)$
Mirror monochromator	$R_{\text{int}} = 0.099$
Detector resolution: 10.0000 pixels mm^{-1}	$q_{\text{max}} = 71.6^\circ$, $q_{\text{min}} = 2.9^\circ$
w scans	$h = -20@20$
Absorption correction: multi-scan CrysAlis PRO 1.171.40.84a (Rigaku Oxford Diffraction, 2020) Empirical absorption correction using spherical harmonics, implemented in SCALE3 ABSPACK scaling algorithm.	$k = -12@12$
$T_{\text{min}} = 0.127$, $T_{\text{max}} = 1.000$	$l = -23@23$
30151 measured reflections	

Таблица 3

Корректирующие параметры рекристаллизации и позиционирования атомов водорода

Refinement on F^2	Hydrogen site location: inferred from neighbouring sites
Least-squares matrix: full	H-atom parameters constrained
$R[F^2 > 2s(F^2)] = 0.070$	$w = 1/[s^2(F_o^2) + (0.0495P)^2 + 2.2006P]$ where $P = (F_o^2 + 2F_c^2)/3$
$wR(F^2) = 0.167$	$(D/s)_{max} < 0.001$
$S = 1.03$	$D\rho_{max} = 0.33 \text{ e } \text{Å}^{-3}$
5593 reflections	$D\rho_{min} = -0.32 \text{ e } \text{Å}^{-3}$
383 parameters	Extinction correction: SHELXL2016/6 (Sheldrick 2016), $F_c^* = kF_c[1 + 0.001 \times F_c^2 / \sin(2\theta)]^{-1/4}$
0 restraints	Extinction coefficient: 0.00020 (6)
Primary atom site location: dual	

На рис.2 приведена кристаллическая структура комплексного соединения 2-метилтиобензоксазола. Строение 2-метилтиобензоксазола комплекс, с коротким лигандом-металлом контакты (Co-N и Co-O) с различным атомами кобальта. И снова формируется полимерная структура, но в этом случае лиганды принимают спиральную форму рис. 2. Два атома азота координированы цис-по отношению друг к другу. Приблизительно октаэдрический атом кобальта (2,28 и 2.33 Å), экзоциклические атомы серы каждого из лиганды координируются с короткими расстояниями Cd-O (2,55 и 2,60 Å) к соседним атомам кобальта в противоположных направлениях вдоль полимерной цепи. Короткий участок полимерной цепи 2-метилтиобензоксазола, сложный, вид вниз с; выбранная облигация длины (Å) и углы (°) следующие: (таб. 4).

Таблица 4

Длины связей и валентные углы в структуре

Co1—N1B	2.068 (4)	C2A—H2A	0.9300
Co1—O3A	2.081 (4)	C2A—C3A	1.383 (7)
Co1—O3B	2.126 (4)	C6B—C5B	1.365 (7)
Co1—N1A	2.061 (4)	C1C—C6C	1.353 (7)
Co1—O2A	2.242 (4)	C1C—C2C	1.369 (8)
Co1—O2B	2.217 (4)	C6C—C5C	1.372 (8)
S1A—C7A	1.711 (5)	C2B—H2B	0.9300
S1A—C8A	1.785 (6)	C2B—C3B	1.379 (7)
S1B—C7B	1.713 (5)	C3B—H3B	0.9300
S1B—C8B	1.790 (6)	C3B—C4B	1.380 (8)
S1C—C7C	1.761 (7)	C3A—H3A	0.9300
S1C—C8C	1.717 (7)	C3A—C4A	1.393 (9)
O1A—C6A	1.394 (6)	C5A—H5A	0.9300
O1A—C7A	1.352 (6)	C5A—C4A	1.366 (9)
O1B—C7B	1.352 (5)	C5B—H5B	0.9300
O1B—C6B	1.396 (6)	C5B—C4B	1.379 (8)
N1B—C7B	1.304 (6)	C5C—H5C	0.9300
N1B—C1B	1.403 (6)	C5C—C4C	1.359 (8)
O3A—N2A	1.275 (6)	C2C—H2C	0.9300
N2B—O3B	1.221 (5)	C2C—C3C	1.358 (9)
N2B—O4B	1.208 (5)	C4B—H4B	0.9300

KIMYO

N2B—O2B	1.249 (5)	C4A—H4A	0.9300
N1A—C1A	1.408 (6)	C3C—H3C	0.9300
N1A—C7A	1.313 (6)	C3C—C4C	1.377 (9)
N1C—C1C	1.358 (7)	C4C—H4C	0.9300
N1C—C7C	1.287 (8)	C8B—H8BA	0.9600
O2A—N2A	1.249 (6)	C8B—H8BB	0.9600
O1C—C6C	1.411 (6)	C8B—H8BC	0.9600
O1C—C7C	1.332 (7)	C8C—H8CA	0.9600
N2A—O4A	1.219 (6)	C8C—H8CB	0.9600
C1B—C6B	1.382 (7)	C8C—H8CC	0.9600
C1B—C2B	1.387 (7)	C8A—H8AA	0.9600
C1A—C6A	1.364 (7)	C8A—H8AB	0.9600
C1A—C2A	1.398 (7)	C8A—H8AC	0.9600
C6A—C5A	1.375 (7)		
N1B—Co1—O3A	98.46 (16)	C6C—C1C—N1C	111.7 (5)
N1B—Co1—O3B	100.81 (17)	C6C—C1C—C2C	121.1 (7)
N1B—Co1—O2A	157.14 (17)	C1C—C6C—O1C	106.3 (5)
N1B—Co1—O2B	90.67 (17)	C1C—C6C—C5C	122.4 (6)
O3A—Co1—O3B	148.80 (17)	C5C—C6C—O1C	131.3 (6)
O3A—Co1—O2A	59.05 (15)	C1B—C2B—H2B	122.0
O3A—Co1—O2B	98.24 (16)	C3B—C2B—C1B	116.1 (5)
O3B—Co1—O2A	98.14 (17)	C3B—C2B—H2B	122.0
O3B—Co1—O2B	57.42 (15)	N1C—C7C—S1C	118.0 (5)
N1A—Co1—N1B	103.86 (16)	N1C—C7C—O1C	118.5 (6)
N1A—Co1—O3A	102.66 (16)	O1C—C7C—S1C	123.4 (6)
N1A—Co1—O3B	96.26 (16)	C2B—C3B—H3B	118.6
N1A—Co1—O2A	86.57 (17)	C2B—C3B—C4B	122.8 (6)
N1A—Co1—O2B	152.31 (16)	C4B—C3B—H3B	118.6
O2B—Co1—O2A	88.82 (18)	C2A—C3A—H3A	118.9
C7A—S1A—C8A	102.4 (3)	C2A—C3A—C4A	122.2 (6)
C7B—S1B—C8B	102.5 (3)	C4A—C3A—H3A	118.9
C8C—S1C—C7C	96.8 (4)	C6A—C5A—H5A	122.5
C7A—O1A—C6A	105.0 (4)	C4A—C5A—C6A	115.1 (6)
C7B—O1B—C6B	104.8 (4)	C4A—C5A—H5A	122.5
C7B—N1B—Co1	126.8 (3)	C6B—C5B—H5B	122.3
C7B—N1B—C1B	105.7 (4)	C6B—C5B—C4B	115.3 (5)
C1B—N1B—Co1	127.3 (3)	C4B—C5B—H5B	122.3
N2A—O3A—Co1	96.1 (3)	C6C—C5C—H5C	121.6
O3B—N2B—O2B	115.4 (4)	C4C—C5C—C6C	116.8 (6)
O4B—N2B—O3B	123.9 (5)	C4C—C5C—H5C	121.6
O4B—N2B—O2B	120.7 (5)	C1C—C2C—H2C	121.6
N2B—O3B—Co1	96.1 (3)	C3C—C2C—C1C	116.8 (7)
C1A—N1A—Co1	126.7 (3)	C3C—C2C—H2C	121.6
C7A—N1A—Co1	128.4 (3)	C3B—C4B—H4B	119.3
C7A—N1A—C1A	104.8 (4)	C5B—C4B—C3B	121.4 (5)
C7C—N1C—C1C	102.0 (5)	C5B—C4B—H4B	119.3
N2A—O2A—Co1	89.3 (3)	C3A—C4A—H4A	119.0
C7C—O1C—C6C	101.5 (5)	C5A—C4A—C3A	121.9 (6)
O2A—N2A—O3A	115.6 (5)	C5A—C4A—H4A	119.0
O4A—N2A—O3A	121.7 (6)	C2C—C3C—H3C	118.9

O4A—N2A—O2A	122.7 (6)	C2C—C3C—C4C	122.2 (7)
N2B—O2B—Co1	90.9 (3)	C4C—C3C—H3C	118.9
O1B—C7B—S1B	120.4 (4)	C5C—C4C—C3C	120.7 (7)
N1B—C7B—S1B	125.4 (4)	C5C—C4C—H4C	119.6
N1B—C7B—O1B	114.2 (4)	C3C—C4C—H4C	119.6
C6B—C1B—N1B	107.6 (4)	S1B—C8B—H8BA	109.5
C6B—C1B—C2B	119.9 (5)	S1B—C8B—H8BB	109.5
C2B—C1B—N1B	132.4 (5)	S1B—C8B—H8BC	109.5
C6A—C1A—N1A	108.6 (4)	H8BA—C8B—H8BB	109.5
C6A—C1A—C2A	120.1 (5)	H8BA—C8B—H8BC	109.5
C2A—C1A—N1A	131.3 (5)	H8BB—C8B—H8BC	109.5
C1A—C6A—O1A	107.6 (4)	S1C—C8C—H8CA	109.5
C1A—C6A—C5A	124.9 (6)	S1C—C8C—H8CB	109.5
C5A—C6A—O1A	127.5 (6)	S1C—C8C—H8CC	109.5
C1A—C2A—H2A	122.1	H8CA—C8C—H8CB	109.5
C3A—C2A—C1A	115.8 (6)	H8CA—C8C—H8CC	109.5
C3A—C2A—H2A	122.1	H8CB—C8C—H8CC	109.5
O1A—C7A—S1A	121.5 (4)	S1A—C8A—H8AA	109.5
N1A—C7A—S1A	124.6 (4)	S1A—C8A—H8AB	109.5
N1A—C7A—O1A	114.0 (4)	S1A—C8A—H8AC	109.5
C1B—C6B—O1B	107.6 (4)	H8AA—C8A—H8AB	109.5
C5B—C6B—O1B	127.9 (5)	H8AA—C8A—H8AC	109.5
C5B—C6B—C1B	124.4 (5)	H8AB—C8A—H8AC	109.5
N1C—C1C—C2C	127.2 (7)		

Расстояния от первого кобальта (3,06 и 3,12 Å) находятся в пределах сумма радиусов Ван-дер-Ваальса для кобальта и кислорода (3,4 Å). Два дополнительных Cd-O контакты необычайно длинные, атомы кобальта разделены током 3,77 Å, что значительно превышает сумму радиусы Ван-дер-Ваальса(3,2 Å). Способ лигирования сильно отличается от хелатного режима, показанного на анионный трис-комплекс с кобальт (II), ⁴Co-O 2,66 Å и Cd-N 2,47 Å, с углом прикуса 62° и строгаая C, симметрия (искаженная от тригонально-призматической к октаэдрической на 25,8 дюйма) (таб.4).

На рис. 3 показана кристаллическая упаковка комплексного соединения [CoL¹₂(NO₃)₂] по осям «b» и «с». Поверхность Хиршфельда анализировали с помощью программы Crystal Explorer 17.5 с целью визуализации межмолекулярных взаимодействий в комплексе [12-14]. На основе кристаллографических данных комплексного соединения, полученных экспериментально с помощью PCA, были изучены межмолекулярные взаимодействия в них.

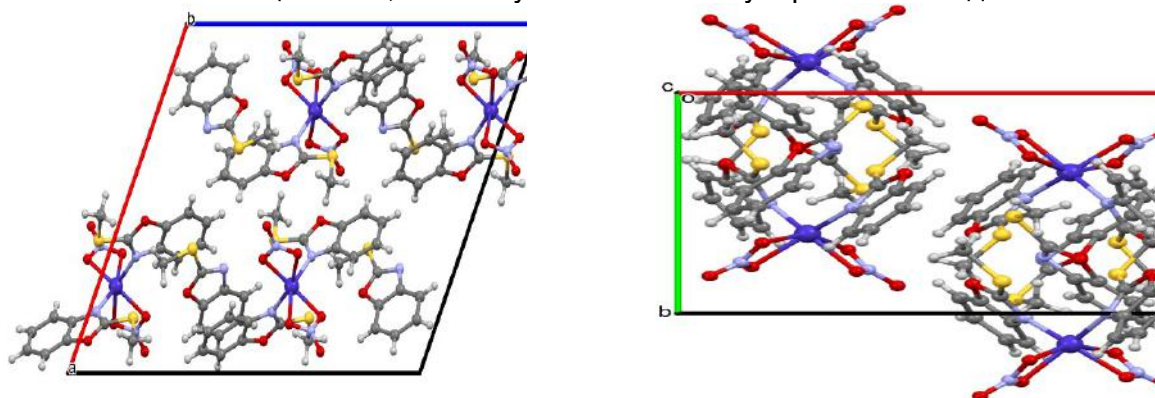


Рис.3. Упаковка структурных элементарных ячеек: снимки из а) “b” и б) “с” оси.

На рис.4 показаны двумерные отпечатки пальцев, показывающие доли атомов, участвующих в межмолекулярных взаимодействиях, и доли соответствующих пар атомов

KIMYO

(%), общую площадь поверхности и объем Хиршфельда. 2D-график отпечатков пальцев строился по осям графика с использованием значений расстояний d_e и d_i со стандартным представлением расстояний 0,6–2,6 Е. Функция d_{norm} — это соотношение, которое фиксирует расстояние от произвольной точки на поверхности до ближайшего внутреннего (d_i) и внешнего (d_e) атома, а также Ван-дер-Ваальсовы радиусы (vdW) атомов. На поверхности Хиршфельда точки с низким вкладом окрашены в синий цвет, а цвета от зеленого до красного обозначают точки с высоким вкладом.

Поверхность Хиршфельда комплекса $[\text{CoL}^{1_2}(\text{NO}_3)_2]$ была картирована путем маркировки трехмерных поверхностей d_{norm} при стандартном разрешении поверхности символами цветовой шкалы от -0,5137 (красный) до 1,3727 (синий) (рис. 4а).

Таблицы индекс формы и кривых составляют от -1,0 до 1,0 а. б. соответственно и от -4,0 до 0,4 а.с. (рис. 4 (б, в)).

Красные треугольники, представленные вогнутыми областями в индексе рисунка, обозначают π -взаимодействия, а синие треугольники, представленные выпуклыми областями, обозначают кольцевые атомы молекулы внутри поверхности (рис. 4б). Искривления на поверхности указывают на электронную плотность вокруг молекулярных взаимодействий (рис. 4в).

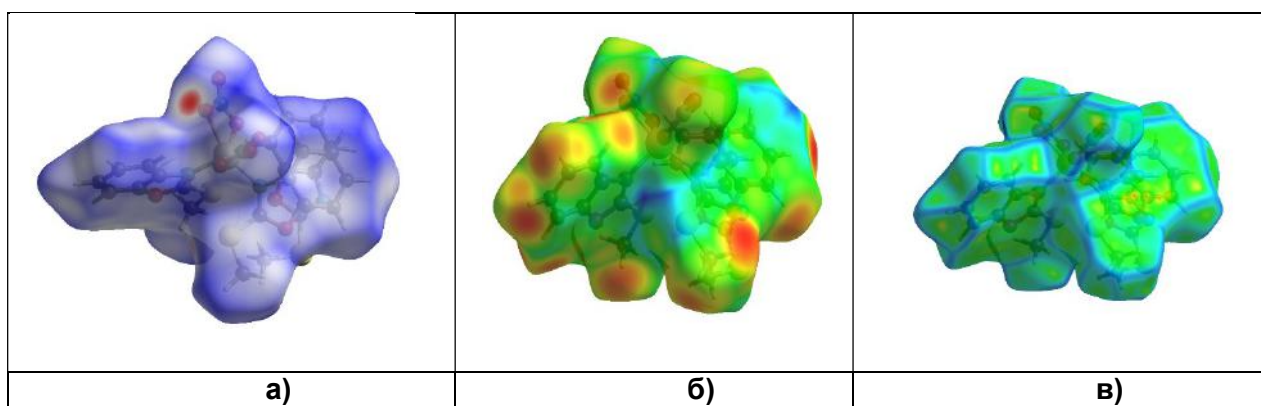
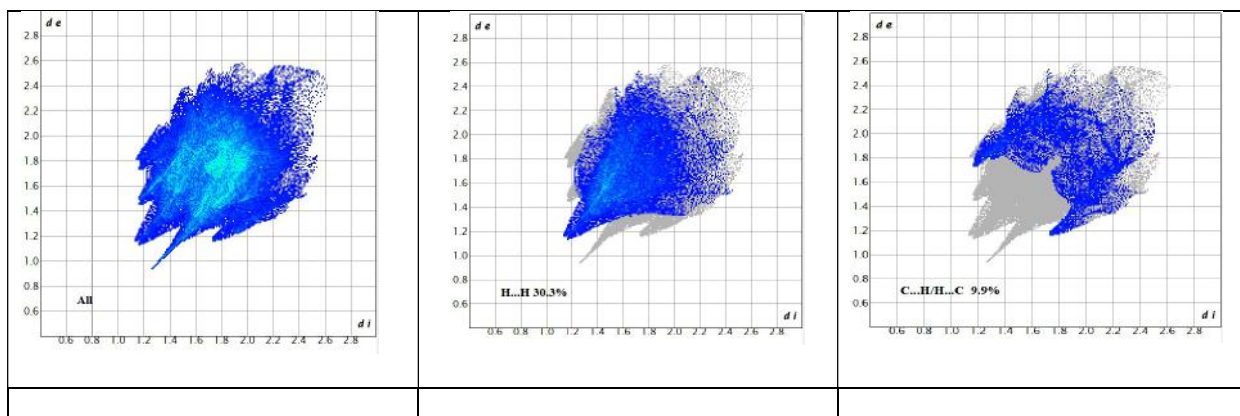


Рис. 4. (а) Поверхности Хиршфельда комплекса $[\text{CoL}^{1_2}(\text{NO}_3)_2]$ в d_{norm} , (б) область показателей формы и (в) область кривой, показывающая области взаимодействия



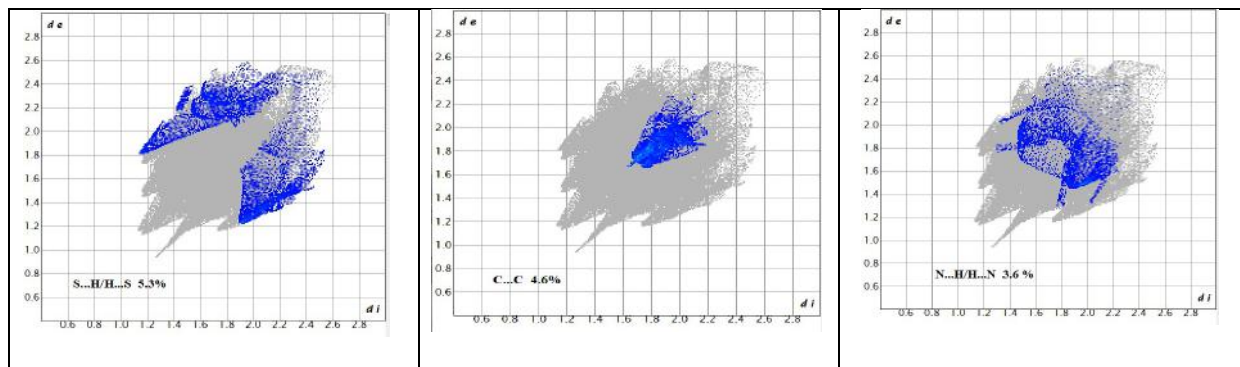


Рис. 5. Полное двумерное поле отпечатка пальца $[\text{CoL}_2(\text{NO}_3)_2]$ комплекса. Значения d_i и d_e на ближайшем внутреннем и внешнем расстоянии (E) от заданной точки поверхности Хиршфельда

Плоские участки поверхности соответствуют малым значениям кривизны, а участки с резкой кривизной соответствуют большим значениям кривизны и обычно имеют тенденцию разделять поверхность на части, что указывает на взаимодействие между соседними молекулами. Большая плоская область, обведенная синим цветом, представляет собой π...π-взаимодействие. Кривизна этого соединения указывает на π...π-взаимодействие. График отпечатков пальцев и связь коротких эффектов приведена на рис. 5.

По данным анализа поверхности Хиршфельда, существенную роль в кристаллообразовании играют эффекты H...H 30,3 %, C...H/H...C 9,9 %, S...H/H...S 5,3 %, затем имеют места эффекты C...C 4,6 %. Доля других межмолекулярных взаимодействий на поверхности Хиршфельда N...H/H...N составляет 3,6 %. Анализ Хиршфельда показывает, что наибольшую долю в сложной кристаллической ячейке занимают межмолекулярные взаимодействия H...H, которые образуются при взаимодействии водородов метиленового и бензольного кольца. Это объясняется тем, что силы Ван-дер-Ваальса оказывают важное влияние на стабилизацию положения в кристаллической структуре.

ВЫВОДЫ

Таким образом, анализируя значения зарядов и локализацию ВЗМО, донорными центрами, которые могут координироваться с ионом металла в молекуле лиганда, являются атомы азота (N) оксазольного кольца (-0,216, -0,202 эВ) и метода B3LYP/6-311G (d, p), основанного на квантово-химическом расчете, можно заключить, что в ходе реакции комплексообразования оксазольное кольцо лиганда координируется с комплексообразующим ионом, проявляя монодентность через атом азота. Эти теоретические предположения в дальнейшем были подтверждены экспериментальными данными.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kiran K. R. et al. (2019). Acid-Catalyzed Condensation of o-Phenylenediamines and o-Aminophenols with α-Oxodithioesters: A Divergent and Regioselective Synthesis of 2-Methylthio-3-aryl/Heteroarylquinoxalines and 2-Acylbenzoxazoles // *Synthesis*. – Т. 51. – №. 22. – С. 4205-4214.
2. Bhat R., Kumbhar P., Helavi V. (2019). Synthesis, characterization and evaluation of antibacterial and antifungal activity of 2-mercaptobenzothiazole and 2-mercaptobenzoxazole derivatives // *Chemistry & Biology Interface*. V. 9.N.1.P.38-58.
3. Wang L. et al. (2014) Synthesis of 2-substituted pyrimidines and benzoxazoles via a visible-light-driven organocatalytic aerobic oxidation: enhancement of the reaction rate and selectivity by a base // *Green chemistry*. Т. 16. №. 8. С. 3752-3757.
4. Wu F. L. et al. 2-Mercaptobenzothiazole and its derivatives: syntheses, reactions and applications // *Current Organic Chemistry*. – 2012. – Т. 16. – №. 13. – С. 1555-1580.
5. Губанова П. А., Рамш С. М. (2010). Особенности спектров ^1H ЯМР четвертичных солей бензазолов в ДМСО- d_6 // *Известия Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета)*. №. 7. С. 54-57.
6. Mohammed O. A., Dahham O. S. (2018). Synthesis, Characterization, and Study of Antibacterial Activity of Some New Formazan Dyes Derivatives, Derived from 2-Mercapto Benzoxazole // *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*. IOP Publishing, T. 454. – №. 1. – С. 012-015.

KIMYO

7. Balogun M. M. et al. (2021). 2-Mercapto Benzoxazole Derivatives as Novel Leads: Urease Inhibition, In Vitro and In Silico Studies // *Chemistry Select*. T. 6. №. 33. C. 8490-8498.
8. Askar F. W., Hassan H. A., Jinzeel N. A. (2013). Synthesis of Some Heterocyclic Compounds Derived from 2-Mercapto Benzoxazole // *Baghdad Science Journal*. T. 10. №. 3.C. 766-778.
9. Parham H., Khoshnam F. (2013). Solid phase extraction–preconcentration and high performance liquid chromatographic determination of 2-mercapto-(benzothiazole, benzoxazole and benzimidazole) using copper oxide nanoparticles // *Talanta*. T. 114. C. 90-94.
10. Jain C. et al. (2014). Synthesis and Biological activity of organophosphates phenoxy derivatives derived from 2-mercapto benzoxazole // *Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements*. T. 189. №. 11.C. 1699-1705.
11. Jadhava R. R. et al. (2011). Synthesis of some novel benzoxazole derivatives and their antimicrobial activity // *Journal of Pharmacy Research*. T. 4. №. 10. C. 3562-3565.
12. Spackman, M. A. & Jayatilaka, D. (2009). Hirshfeld surface analysis // *Cryst. Eng. Comm*. Vol. 11. P. 19-32.
13. M.Kinnon J.J., Jayatilaka D., Spackman M.A. (2007). Towards quantitative analysis of intermolecular interactions with Hirshfeld surfaces // *Chemical Communications*. №. 37. P. 3814-3816.
14. Spackman, P. R., Turner, M. J., McKinnon, J. J., Wolff, S. K., Grimwood, D. J., Jayatilaka, D. & Spackman, M. A. (2021). Crystal Explorer: a program for Hirshfeld surface analysis, visualization and quantitative analysis of molecular crystals // *J. Appl. Cryst*. Vol. 54. -P. 1006–1011.