

М.Р. Яхшимуратов<sup>1</sup>, М.Д. Сабирова<sup>1</sup>,  
Ш.Б. Хасанов<sup>2</sup>, З.Ш. Абдуллаева<sup>2</sup>, Ф.К. Халлаков<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Ургенчский государственный университет,

<sup>2</sup>Хорезмская академия Маъмуна,

<sup>3</sup>Институт ядерной физики  
(Республика Узбекистан)

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И СИНТЕЗ КООРДИНАЦИОННОГО СОЕДИНЕНИЯ М-КРЕСОКСИАЦЕТАТА С МЕДИ (II) ФОРМИАТА

В настоящее время изучение механизма действия лекарственных средств на организм человека является одной из актуальных проблем медицинской химии и фармакологии. Использование современных инновационных технологий играет важную роль в создании эффективных инструментов. Из литературы известно, что крезоксиацетат и его производные обладают иммуномодуляторами, уменьшают количество микробов в организме, обладают гепатопротекторной и многими другими биологическими свойствами [1].

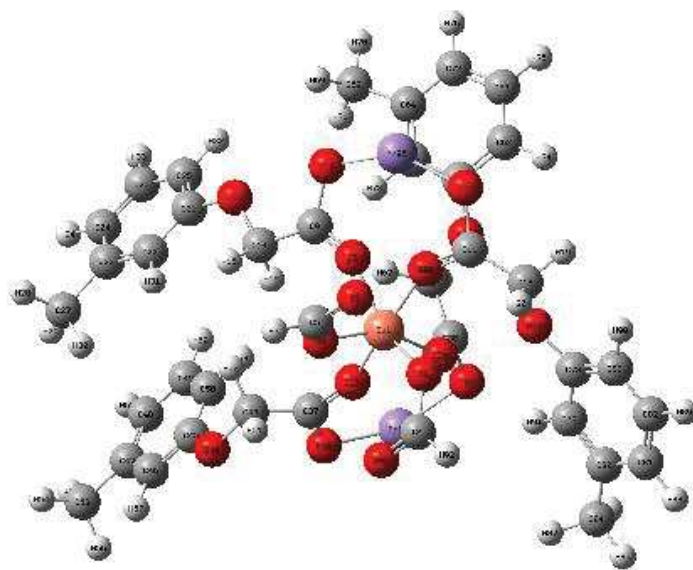


Рисунок 1 – Структура комплексного соединения,  
содержащего  $[\text{Cu}(\text{HCO}_2)_2] \cdot 2\text{Mn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_3)_2$

При определении пространственной структуры и координационного числа центрального атома в координационном соединении  $[\text{Cu}(\text{HCO}_2)_2] \cdot 2\text{Mn}(\text{C}_9\text{H}_9\text{O}_3)_2$  входной файл создавался неэмпирическим методом программы HyperChem 8.07 в приближении MINIMAL STO-3G, а оптимизация проводилась в неэмпирическом приближении 3-21G V3LYP в программе Gaussian 9.0 [2]. Рассмотр-

рены четыре варианта возможной координационной структуры формиата кобальта и ацетата свинца(II) с координационными числами 4 и 6 в соотношении 1:1 и координационными числами 6 и 8 в соотношении 1:2. Стабильность комплексных соединений анализировали по минимальной теплоте образования. Таким образом, установлено, что координационное число кобальта, равное 6, в комплексном соединении, полученном при соотношении солей 1:2, является стабильным.

Синтез комплексного соединения проводили по следующей методике: 0,01 молькобальтформиат растворяли в 15 мл воды. В другом стакане 0,04 мольмарганецметакреоксиацетат растворяли в 20 мл смеси вода:ацетонитрил (1:1) при нагревании на водяной бане (при температуре 50-55°C). Затем Cu(II) по каплям над раствором формиата, марганецдобавляли горячий раствор метакреоксиацетата и смесь упаривали в течение 4 ч до уменьшения объема в 1,5 раза [3]. Полученный раствор оставляли на 2 дня. Полученный порошок растворяли в смеси 2 мл дистиллированной воды и 2 мл спирта и оставляли на 72 часа для перекристаллизации [4]. Выход массы полученного вещества по отношению к массе исходного вещества составил 79,7%.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кузнецов И.А., Воронков М.Г., Расулов М.М., Нурбеков М.К. Иммуномодулирующее действие крезоксиацетата трис-2(оксиэтил)аммония и его механизм // Научный электронный архив. URL: <http://econf.rae.ru/article/6916>
2. Ш.А. Кадырова, З.Ш. Абдуллаева, Ш.Б. Хасанов. Гетерометаллический комплекс формиата никеля (II) с ацетатом цинка // Универсум: Химия и биология: электрон. научн. Журнал. – 2021. – № 8(86). – С. 46–49.
3. Суюнбекова А. Взаимодействие формиатов, ацетатов, сульфатов, бивалентных металлов с амидами и свойствами твердых фаз Автореферат дисс. канд. хим. наук Бишкек, – 1999. – 25 с.
4. З. Ш. Абдуллаева, Ш. А. Кадырова, Ш. Б. Хасанов, Н. К. Рузметова. Синтез и спектроскопическое исследование координационных соединений кобальта (II) с ацетатом натрия и барием // Вестник НУУз. – Ташкент, 2021. – № 3/1. – С. 254–257.