

СИНТЕЗ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО КОМПЛЕКСА БИС-(8-ГИДРОКСИХИНОЛИН) ДИГИДРАТ ЦИНКА (II), ПОВЕРХНОСТЬ ХИРШФЕЛЬДА И ИК СПЕКТРАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ

Назаров Ю. Э.

докторант, Термезский государственный университет, Республика Узбекистан, г. Термез

Тураев Х.Х.

д-р хим. наук, проф., Термезский государственный университет Республика Узбекистан, г. Термез

Ашуров Ж.М.

д-р хим. наук, проф. Института биоорганической химии АН Узбекистана, Узбекистан, г. Ташкент

Аннотация: В работе проведен синтез комплекса 8-оксихинолина с Zn(II), анализ поверхности Хиршфельда и ИК-спектра.

Abstract: In this work, the synthesis of a complex of 8-hydroxyquinoline with Zn(II) was carried out, the Hirshfeld surface and the IR spectrum were analyzed.

Ключевые слова. 8-оксихинолин, фунгициды, поверхность Хиршфельда ИК-спектроскопия.

Keywords. 8-hydroxyquinoline, fungicides, Hirshfeld surface IR spectroscopy.

Фунгициды — это химические вещества, которые защищают сельскохозяйственные культуры и нетоксичные материалы от грибков. Большинство фунгицидов обладают бактерицидными свойствами. 8-оксихинолиновые комплексы металлов используются в качестве фунгицидов, бактерицидов и стимуляторов роста растений [1-3]. Металлокомплексы более активны, чем свободные лиганды. Синтезированы биологически активные комплексы металлов с ионами цинка (II), содержащие 8-HQ, и изучены их свойства. [4].

В настоящей работе были проведены синтез, ИК-спектральный анализ и поверхность Хиршфельда комплекса $[Zn(8-HQ)_2(H_2O)_2]$, полученного в результате реакции иона цинка (II) с 8-оксихинолином (8-HQ). По результатам рентгеноструктурного анализа установлено, что кристалл имеет моноклинную пространственную структуру.

Экспериментальная часть: Синтез комплекса Zn(II) с 8-оксихинолином. 0,1095 г (0,5 ммоль) $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$, 0,145 г (1 ммоль) (8-HQ) растворяли в воде и спирте соответственно и готовили раствор с мольным соотношением 1:2. В качестве дополнительного лиганда из раствора отбрасывали En. Затем раствор лиганда вливали в солевой раствор. Его нагревали и перемешивали на магнитной мешалке при 60°C в течение 30 минут. Затем оставляли охлаждаться при комнатной температуре на 10 дней. Наблюдения показали, что образовались желтые кристаллы. Монокристалл отделяли от раствора фильтрованием и сушили на открытом воздухе. Выход 65%. $[Zn(8-HQ)_2(H_2O)_2] \cdot C_{18}H_{16}O_4N_2Zn$ (Mr=389,128 г/моль) CH N анализ теоретически показал: C 55,51, H 4,14, N 7,19 %: было установлено, что C 55,48, H 4,10, N 7,15 %. Уравнение реакции синтеза;

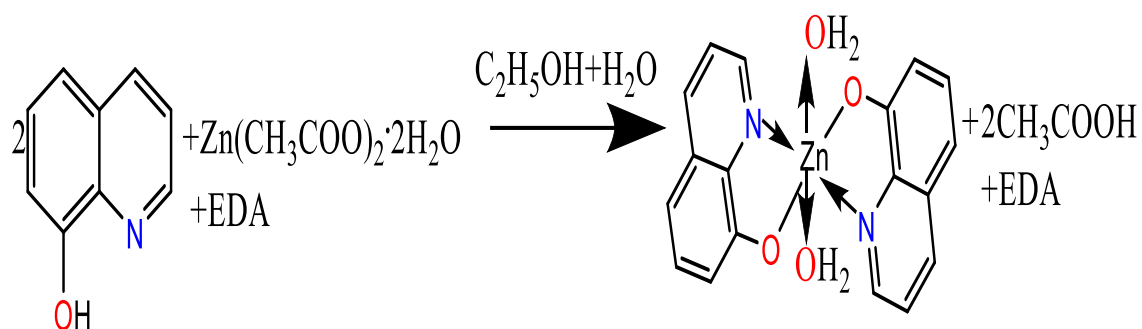
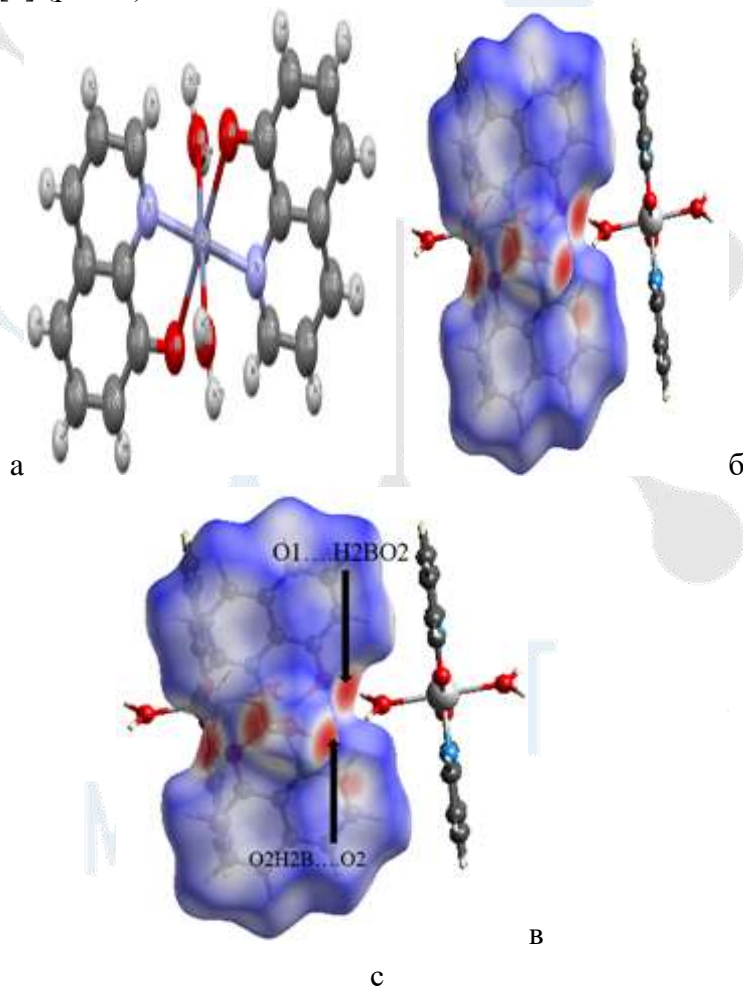


Рис.1. $[Zn(8-HQ)_2(H_2O)_2]$ сложная реакция синтеза

Анализ полученных результатов. Молекулярная структура монокристаллического комплекса $[Zn(8-HQ)_2(H_2O)_2]$, синтезированного в присутствии кристаллогидрата 8-оксихинолина ацетата цинка, определена методом (а) рентгеноструктурного анализа. Для описания характера межмолекулярных взаимодействий (б) поверхность Хиршфельда анализировали с помощью программы Crystal Explorer17.5 [5] (рис. 2).



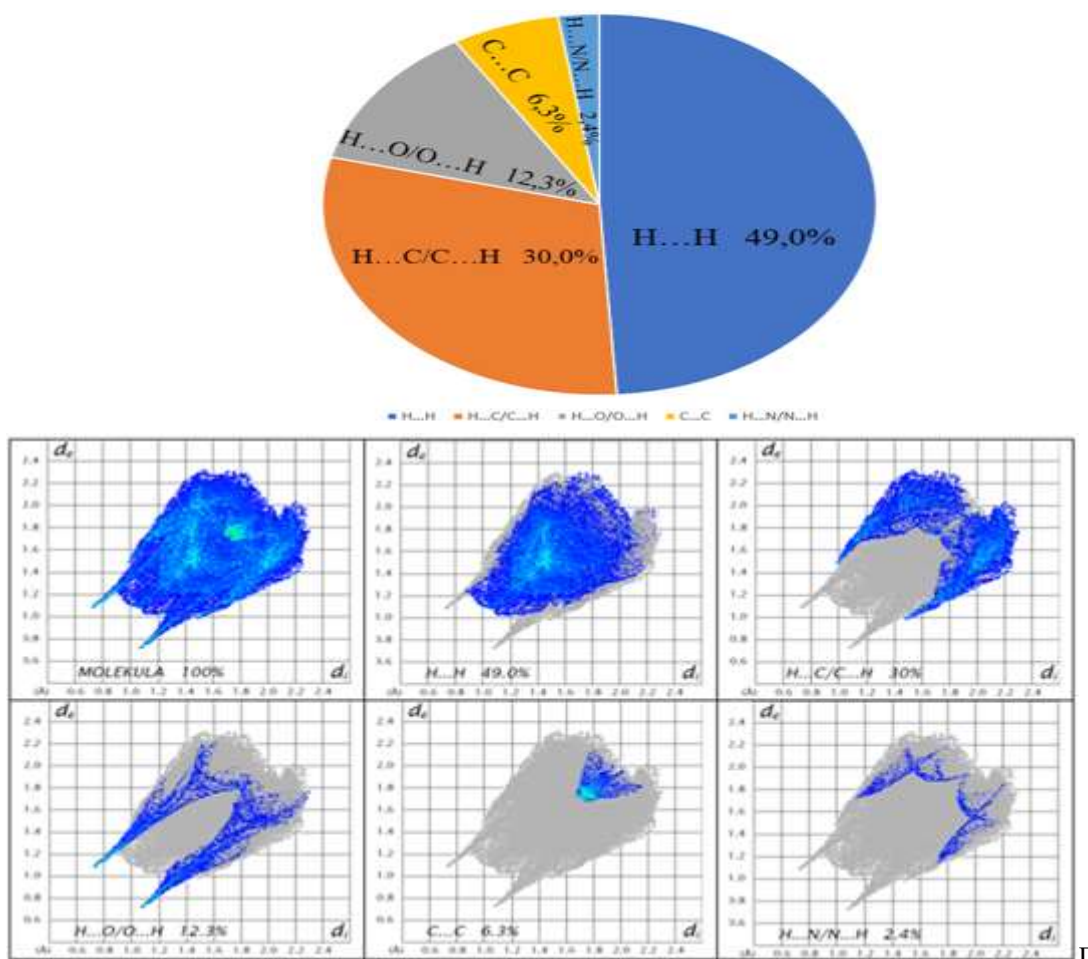


Рис. 2. Молекулярная структура комплексного монокристалла $[\text{Zn}(\text{8-HQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ (а), поверхности Хиршфельда (б), прочная межмолекулярная водородная связь (в) диаграмма отпечатков пальцев Хиршфельда (с), двумерный отпечаток Хиршфельда (г).

На рис. 2- «б» показаны поверхности Хиршфельда монокристалла комплекса $[\text{Zn}(\text{8-HQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2]$, красный цвет представляет самые близкие взаимодействия, а синий цвет представляет самые дальние взаимодействия. На рис. «в» Основную часть межмолекулярной водородной связи составляют связи $\text{O}1\cdots\text{H}2\text{VO}2$ и $\text{O}2\text{H}2\text{B}\cdots\text{O}2$. «с» На рис. с показаны двумерные графики отпечатков пальцев, полученные с использованием функций d_e и d_i , показывающие вклад отдельных взаимодействий в формирование кристаллической упаковки. Таким образом, анализ поверхности Хиршфельда $\text{H}\cdots\text{H}$ (49,0%), $\text{H}\cdots\text{C}/\text{C}\cdots\text{H}$ (30,0%), $\text{H}\cdots\text{O}/\text{O}\cdots\text{H}$ (12,3%), $\text{C}\cdots\text{C}$ (6,3%), $\text{H}\cdots\text{N}/\text{N}\cdots\text{H}$ (2,4%), основной вклад в формирование кристаллической упаковки вносят взаимодействия. Итак, как видно из анализа поверхности Хиршфельда, основную долю взаимодействий составляют $\text{H}\cdots\text{H}$ (49,0%), $\text{H}\cdots\text{C}/\text{C}\cdots\text{H}$ (30,0%).

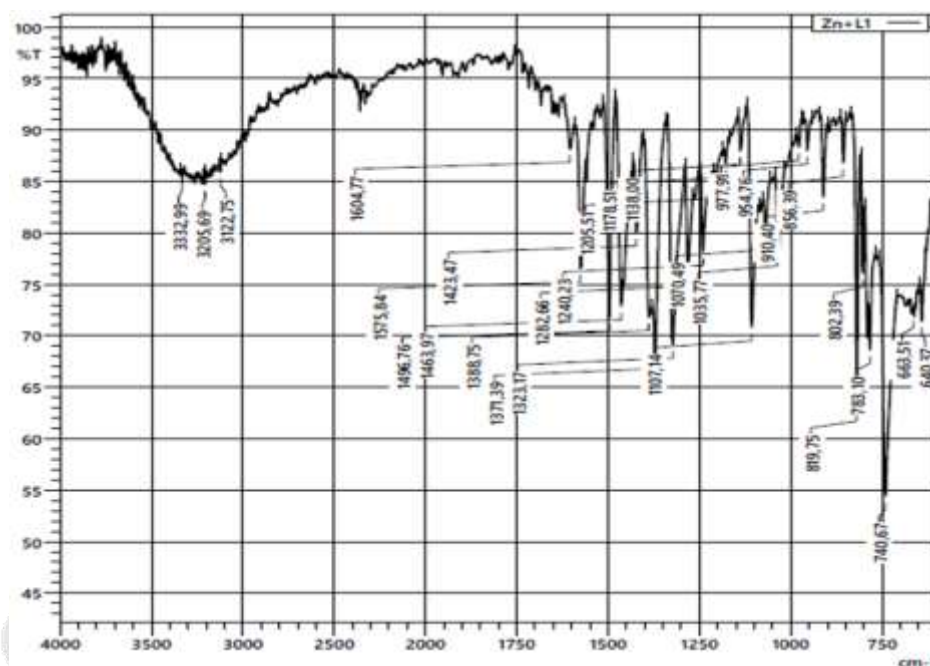


Рис. 3. ИК спектроскопическое исследование комплекса $[(\text{Zn}(\text{8-HQ})_2(\text{H}_2\text{O})_2)]$

Анализ ИК-спектров лиганда и комплекса показал значительные изменения нескольких линий поглощения в ИК-спектре лиганда при комплексообразовании. Например, в области $2800\text{-}3500\text{ см}^{-1}$ сложного ИК-спектра наблюдается широкая линия поглощения средней интенсивности. Это свидетельствует о том, что связи ОН в комплексной молекуле образуют прочные межмолекулярные Н-связи. Линии поглощения ОН-группы молекулы лиганда расположены в значительно более коротком диапазоне ($2800\text{-}3300\text{ см}^{-1}$). Также характерными для колебаний оксихинолинового кольца (на плоскости кольца) линиями поглощения в комплексном ИК-спектре являются колебания в области $1575,84\text{-}1604,77\text{ см}^{-1}$, характерные для связи Ме-О в области $663,51\text{ см}^{-1}$, Ме- N связи в районе $640,37\text{ см}^{-1}$ частоты специфических валентных колебаний.

Заключение: В результате проведенных нами исследований по анализу поверхности синтезированного сложного кристалла по методу Хиршфельда выявлено, что основную часть взаимодействий составляют Н...Н (49,0%), Н...С/С...Н (30,0%). Анализ ИК-спектров лиганда и комплекса показал значительные изменения нескольких линий поглощения в ИК-спектре лиганда при комплексообразовании.

Список литературы:

- 1.Short, Benjamin RD, et al. "In vitro activity of a novel compound, the metal ion chelating agent AQ+, against clinical isolates of Staphylococcus aureus." *Journal of Antimicrobial Chemotherapy* 57.1 (2006): 104-109
- 2.S.Srisung., T.Suksrichavalit,S.Prachayasittikul,S.Ruchirawat,V. Prachayasittikul, Antimicrobial activity of 8-hydroxyquinoline and transition metal complexes,*Int.J.Pharmacol.*9(2)(2013) 170 -175
3. Xu H. et al. 8-Hydroxyquinoline: A privileged structure with a broad-ranging pharmacological potential //*MedChemComm.* – 2015. – Т. 6. – №. 1. – С. 61-74
- 4.Li H. et al. In situ route to novel fluorescent mesoporous silica nanoparticles with 8-hydroxyquinolate zinc complexes and their biomedical applications //*Microporous and Mesoporous Materials.* – 2012. – Т. 151. – С. 293-302.
- 5.S.I. Tirkasheva, O.E.Ziyadullaev. A. G. Eshimbetov,B. T. Ibragimov and J. M. Ashurov "Synthesis, crystal structure, Hirshfeld surface analysis and DFT study of the 1,100-(buta-1,3-diyne-1,4-diyl)bis(cyclohexan-1-ol)" *Acta Cryst.* (2023). E79 <https://doi.org/10.1107/S2056989023004772>