ДОНИШГОҲИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

Бо ҳуқуқи дастнавис

ВБД: 544.2.3
ТКБ: 24.51.53(2Т)
Б-77



БОЙНАЗАРЗОДА КИБРИЁ УСМОН

КОМПЛЕКСҲОСИЛКУНИИ НУҚРА (I) БО АЛБЕНДАЗОЛ

АВТОРЕФЕРАТИ

диссертатсия барои дарёфти дараҷаи илмии номзади илмҳои химия аз рӯйи ихтисоси 1.4.5. Химияи физикӣ

ДУШАНБЕ – 2026

Диссертатсия дар кафедраи химияи татбиқии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон ва кафедраи кимиёи фарматсевтӣ ва заҳршиносии МДТ «Донишгоҳи давлатии тибби Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино» иҷро шудааст.

Роҳбари илмӣ: **Ёрмамадова Саврибегим Гулмамадовна** – номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи татбиқии Донишгоҳи Миллии Тоҷикистон

Мушовири илмӣ: **Раҷабов Умарали** – доктори илмҳои химия, профессори кафедраи кимиёи фарматсевтӣ ва заҳршиносии МДТ «Донишгоҳи давлатии тибби Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино»

Муқарризони расмӣ: **Джураев Тухтасун Джураевич** – доктори илмҳои химия, профессори кафедраи металлургияи Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академик М.С.Осимӣ.

Қурбонов Амиршо Соҳибназарович – Директори филиали Агентии амнияти химиявӣ, биологӣ ва ядроии АМИТ дар вилояти Хатлон.

Муассисаи пешбар: Муассисаи давлатии “Институти химияи ба номи В.И. Никитин”-и Академияи миллии илмҳои Тоҷикистон

Ҳимояи диссертатсия “03” декабри соли 2026 соати 10:00 дар маҷлиси шурои диссертатсионии 6D.KOA-136-и назди Донишгоҳи милли Тоҷикистон баргузор мегардад. Суроға: 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ, 17, Донишгоҳи милли Тоҷикистон, бинои асосӣ, толори шурои диссертатсионӣ, ошёнаи 2. E-mail: tojiddin_8989@mail.ru, телефон: (+992) 936002805.

Бо диссертатсия дар китобхонаи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон ва сомонаи www.tnu.tj шинос шудан мумкин аст.

Автореферат «___»_____ соли 2026 фиристода шуд.

Котиби илмии шурои диссертатсионӣ, номзади илмҳои химия Бобокалонов Т.Б.

Муқаддима

Мубрамии мавзуи таҳқиқот. Дар солҳои охир пайвастагиҳои биометаллӣ, алалхусус нуқра бо азолҳо дар соҳаи ветеринария ва тиб нақши муҳим доранд. Нуқра микроэлементест, ки барои фаъолияти узвҳо ва системаҳои дохилӣ муҳим аст, инчунин маводест, ки ба бактерияҳо ва вирусҳои патогенӣ таъсир мерасонад. Азолҳо дар навбати худ фаъолияти зиддимикробӣ нисбат ба маводҳои патогении бемориҳои меъдаю рӯда доранд. Тавре ки Суфиев Т.Д. қайд кардааст: «Таъсири зиддимикробии пайвастагиҳои ҳамоҳангсози нуқра ва тирптофан ба E. coli аз консентратсияи нуқра вобаста аст ва механизми таъсири он аз бозлоштани фаъолияти ферментҳое иборат аст, ки дар равандҳои нафаскашии ҳуҷайра ва фосфорилизатсияи оксидшавӣ ва барқароршавӣ иштирок мекунанд»[1].

Таҳқиқоти А.С. Содатдинова ва ҳаммуаллифон нишон медиҳанд, ки «Хусусияти термодинамикаи комплексшавии Ag(I) бо 1MI дар ҳалкунандаҳои обӣ-диметилсулфоксид афзоиши устувории комплекс бо афзоиши миқдори ДМСО дар ҳалкунанда аз ҳисоби устувории назарраси қабати ҳалшавандагии зарраи комплекс бо афзоиши ҳалшавандагии иони металл ва лиганд мебошад» [2].

Илова бар ин 5-нитроимидазолҳо инчунин бар зидди микроаэрофилҳои алоҳида фаъол мебошанд ва барои табобати бемориҳое, ки ин микроорганизмҳо ба вуҷуд меоянд, самаранок истифода бурда мешаванд.

Дар ҷаҳони муосир соҳаи тандурустӣ доираи васеи доруҳоро дар бар мегирад, ки фаъолияти зиддипаразитӣ зоҳир мекунанд. Бо вуҷуди ин, ҳамаи онҳо меъёри заҳролудшавии муайян доранд ва метавонанд ба узвият таъсири манфӣ расонанд. Тибқи маълумоти Е.Н. Падейскийая: «Албендазол доруи зидди протозитӣ ва зиддигиҷҷавӣ гурӯҳи бензимидазолкарбомат мебошад. Механизми таъсири он ба боздоштани полимеризатсияи тубулин асос ёфта, боиси вайроншавии мубодилаи моддаҳо ва марги паразитҳо мегардад» [3].

Бо моддаҳои органикӣ ҳосил шудани комплексҳои нуқра имкон медиҳад, ки устувории моддаҳои ҳосилшуда зиёд карда шавад. Ба ҳамаи ин нигоҳ накарда комплекси нуқра(I) бо албендазол то ҳол омӯхта нашудааст, ягон маводи доруворӣ дар асоси пайвастагиҳои биокоординатсионии нуқра(I) бо азолҳо мушаххасан албендазол таҳия нашудааст. Аз ин рӯ ҷустуҷӯи усулҳои коркард намудан ва баланд бардоштани устувории онҳо хеле муҳим аст. Чи хеле ки дар кори тадқиқотии Леглер Е.В. қайд карда шудааст вазифаи асосии тадқиқот:«индентификасияи шаклҳои ҷуфтшудаи кислотагӣ асосӣ ва хелатии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо аминокислотаҳои

сефунксионалӣ дар маҳлулҳои обии аз ҷиҳати биологӣ муҳими нейтралӣ ва бузургии термодинамикии константҳои ҳосилшавии онҳо мебошад» [4]. Ғайр аз ин, муаллиф қайд мекунад: «сохти лиганд ба устуворӣ ва таркиби комплекс чӣ тавр таъсир мерасонад». Вай қайд мекунад, ки: «Омӯзиши равандҳои комплексҳосилкунии нуқра(I) бо лигандҳои бисёрфункционалӣ аҳамияти назарраси илмӣ ва амалӣ дорад». Муаллиф баррасӣ мекунад, ки чӣ гуна сохти лиганд ба устуворӣ ва таркиби комплексҳо таъсир мерасонад. Е.В.Леглер нишон додааст, ки: «Нуқраи(I) майл дорад, ки бо чунин аминокислотаҳо тавассути бандҳои донорию аксепторӣ бо атомҳои нитроген ва оксиген пайвастаҳои координатии устуворро ташкил диҳад. Таваҷҷуҳи махсус ба таъсири муҳити pH, қувваи ионии маҳлул ва хусусияти гурӯҳҳои функционалӣ ба раванди комплексҳосилкунӣ дода мешавад» [4]. Дар асоси омӯзиши роҳҳои комплексҳосилкунии азолҳо бо ионҳои металлҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол, аз қабили нуқра(I) ва дар асоси онҳо омода кардани доруҳое, ки бар зидди микроорганизмҳои патогенӣ фаъолияти зиддимикробӣ зоҳир мекунанд, зарур аст.

Дараҷаи коркарди илмии проблемаи мавриди омӯзиш. Дар адабиёти илмӣ оид ба синтез ва сохти пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол ва азолҳо дар муҳитҳои гуногуни обию кислотагӣ ва инчунин дар маҳлули обӣ-спиртӣ дар корҳои илмии як қатор олимони хориҷиву ватанӣ маълумот оварда шудааст. Махсусан дар корҳои илмии Белевансев В.И. [5], Снесарев С.В. [6], Буду Г.В. [7], Юсупов З.Н. [8], Раҳимова М.М. [9], Аминҷонов А.О. [10], Сафармамадзода С.М. [11], Бекназарова Н.С. [12], Мудинов Х.Ғ. [13] ва ғайра комплексҳосилшавии металҳои интиқолӣ бо лигандҳои органикӣ омӯхта шудааст.

Омӯзиши комплексҳои нуқра(I) бо албендазолҳо аз нуқтаи назари маҳлули электролитҳо ва химияи биокоординатсионӣ муҳим аст, зеро он ба мо имкон медиҳад, ки электролитҳои нави нуқра ва пайвастагиҳои биологии фаъоли нуқра ҷустуҷӯ карда шаванд.

Комплексҳосилкунии нуқра бо лигандҳои органикӣ дар маҳлул бо усули потенсиометрия омӯхта шуда, пасон дар ҳолати сахт ҷудо карда шудааст. Тариқи усулҳо таҳлили элементӣ, термикӣ, СИ - спектроскопияи, кондуктометрия ва спектрҳои резонансии парамагнитии электронӣ ва ренгеноструктурӣ сохт ва таркиби пайвастагиҳои комплексии нуқра муайян шудаанд.

Бо вуҷуди тадқиқотҳои мавҷуда аз таҳлили адабиётҳо маълум гардид, ки оиди комплексҳосилкунии нуқра бо албендазол дар муҳити обӣ-уксусӣ ва ДМСО вобаста аз ҳарорат, қувваи ионӣ, константаи

устуворӣ ва бузургиҳои термодинамикӣ ягон маълумот вуҷуд надорад.

Робитаи таҳқиқот бо барномаҳо (лоиҳаҳо) ва мавзуъҳои илмӣ.

Корҳои илмӣ-таҳқиқотии Бойназарзода Кибриё Усмон дар кафедраи химияи татбиқии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон мувофиқ ба самти мавзуи илмии "Коркарди маъданҳои маҳалӣ, партовҳои саноатӣ, инчунин омӯзиши комплексҳосилкунии нуқра бо мис ва оҳан бо лигандҳои органикӣ" ва дар кафедраи кимиёи фарматсевтӣ ва заҳршиносии МДТ «Донишгоҳи давлатии тибби Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино» иҷро шудааст, дар доираи супориши давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон, лоиҳаи № ГР0122ТЈ1433 ва ГР0121ТЈ208 иҷро гардидааст.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқот. Таҳқиқи комплексҳосилкунии нуқра бо албендазол, омӯхтани хосиятҳои физикӣ-химияви моддаҳои ҳосилшуда муайян кардани бузургиҳои константаи устувории пайвастагиҳои координатсионӣ, функсияҳои термодинамикӣ, таъсири омилҳо ба устувории комплексҳои ҳосилшуда дар муҳити 6 мол/л кислотаи сирко ва ДМСО, омӯхтани хосиятҳои зиддимикробӣ, зидди паразитӣ, зидди занбӯруғии онҳо мебошад.

Вазифаҳои таҳқиқот. Барои амалӣ намудани ҳадафи гузошташуда, иҷрои вазифаҳои зерин пешбинӣ гардид:

-бо истифода аз усули титронии потенсиометрӣ муайян кардани раванди комплексҳосилкунӣ дар системаҳои $AgNO_3/Ag^0$-Алб-CH_3COOH ва $AgNO_3/Ag^0$- Алб-ДМСО;

- муайян намудани константаи устуворӣ, миқдори пайвастагиҳои комплексӣ дар системаҳои $AgNO_3/Ag^0$- Алб-CH_3COOH ва $AgNO_3/Ag^0$-Алб-ДМСО бо истифода аз усули Фридман, инчунин квадратҳои хурдтарини ғайрихаттӣ;

- таъсири ҳарорат, қувваи ионӣ, табиати лиганд ба константаи устувории ва раванди комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол, инчунин муайян кардани собитаҳои термодинамикӣ дар асоси усули пешниҳодкардаи Василев барои системаи $AgNO_3/Ag^0$- Алб-ДМСО;

- дар асоси собитаҳои умумии термодинамики муайян намудани энталпия, энтропия ва энергияи Гиббс (ΔH^0, ΔS^0,ΔG^0,) барои раванди комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол;

-бо истифода аз натиҷаҳои диаграммаҳои тақсимот дар маҳлулҳои 6 мол/л кислотаи сирко ва ДМСО муайян намудани микдори зарраҳои комплексии ҳосилшуда дар ҳудудҳои гуногуни консентрасияи лиганд, инчунин истифодабарии натиҷаҳо дар синтези пайвастагиҳои нави

комплексии нуқра(I) бо албендазол;

-бо усулҳои физикӣ - химиявӣ бо истифодабарии усулҳои спектри инфрасурх(СИ), масс-спектроскопӣ, ренгеноструктурӣ, РМЯ, дериватография муайян намудани таркиб ва сохти пайвастагиҳои нуқра(I) бо албендазол;

- таҳқиқи биологии хосиятҳои пайвастагиҳои нави синтезкардашудаи нуқра(I) бо албендазол.

Объекти таҳқиқот. Омӯзиши комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол дар асоси таҳлилҳои потенсиометрӣ ва синтези онҳо. Таҳлили хосиятҳои физикӣ-химиявӣ ва биологии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол мебошад.

Мавзӯи (предмед) таҳқиқот. Комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол дар муҳити 6 мол/л кислотаи сирко ва ДМСО мебошад.

Навгониҳои илмии таҳқиқот:

- бори аввал раванди комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол бо истифода аз усули потенсиометрӣ таҳлил карда шудааст;

- таркиб, ҳудуди мавҷудият, инчунин баромади максималии комплексҳои нуқра(I) бо албендазол муқаррар карда шуд;

- методикаи синтези мақсадноки пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол гузаронида шуд;

- таркиб ва сохти пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) ва албендазол бо истифода аз усулҳои спектри инфрасурх (СИ), масс-спектроскопӣ, ренгеноструктурӣ, РМЯ, дериватография таҳқиқ карда шуд;

- бори нахуст хосияти биологии (безарар будан, заҳролудшавии шадид ва музмин, хосиятҳои аллергенӣ) ва зиддимикробии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо лиганд омӯхта шудаанд;

Аҳамияти назариявӣ ва амалии таҳқиқот:

-натиҷаҳои бадастомадаи комплексҳои нуқра(I) бо албендазол барои шарҳ додан ва пешгӯии равандҳои комплексҳосилшавии нуқра(I) истифода мешаванд;

-қиматҳои бадастомади константаҳои устувории нуқра(I) бо албендазол маводи истинодӣ буда, холигиҳҳои мавҷудаи адабиётро пур мекунанд, барои олимоне, ки дар соҳаи комплексҳосилкунии ионҳои металл бо лигандҳои сулфурдор ва нитрогендор таҳқиқот мегузаронанд, инчунин барои синтези пайвастагиҳои нав дар соҳаи химияи координатсионӣ истифода мешаванд;

-натиҷаҳои кори диссертатсионӣ метавонад барои донишҷӯён, магистрони ва унвонҷӯёни кафедраи физики-химиявӣ, дорусозӣ ва заҳршиносӣ барои гузаронидани лексияҳо дар курсҳои махсус, инчунин барои иҷрои корҳои имлӣ-тадқиқотӣ истифода мешаванд.

-усулҳои синтези пайвастагиҳои координатсионие, ки дар кори

мазкур коркард шудаанд, барои синтези мақсадноки пайвастагиҳои нави комплексии дигар металлҳои гузаранда бо лигандҳои сулфур ва нитрогендор истифода бурда мешаванд.

- моддаҳои синтезкардашудаи аз ҷиҳати биологи фаъол, ки дар асоси пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол синтез карда мешаванд, метавонанд ҳамчун маводи зиддибактериявӣ, зидди занбӯруғӣ, зидди гелментӣ ва зидди паразитӣ барои табобати бемориҳои ҳайвонот, ки аз микроорганизмҳои эршихия коли, салмонелла, пастерелла, бруселла ба вуҷуд меоянд, васеъ истифода мешаванд.

Нуктаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда:

-муқаррар кардани қонуниятҳои ионизатсияи албендазол дар муҳитҳои таҳқиқшаванда, аз ҷумла дар кистолаи сирко бо консентратсияи 6мол/л ва диметилсулфоксид (ДМСО), дар асоси натиҷаҳои таҳқиқоти потенсиометрӣ. Муайян намудани бузургиҳои ададии константаҳои ионизатсия, вобастагии шаклҳои протоннокшуда, нейтралӣ ва дипротоннокшудаи албендазол аз қиматҳои pH-и муҳитҳои гуногун. Бо истифода аз усули потенсиометрӣ муайян намудани константаҳои устувории комплексҳои нуқра(I) бо албендазол дар шароити муайяншудаи таҷрибавӣ ва коркарди математикӣ бо усули квадратҳои хурдтарини ғайрихаттӣ. Ҳисоб намудани бузургиҳои тағйирёбии энталпия (ΔH), энтропия(ΔS) ва энергияи озоди Гиббс (ΔG)-и ҳосилшавии комплексҳо дар асоси натиҷаҳои таҷрибавӣ;

-пешниҳод намудани усулҳои ҳосил кардани пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол ва шароити оптималии синтези онҳо.Таҳлил намудани таркиби элементӣ, гурӯҳҳои функсионалӣ, хусусиятҳои сохтории пайвастагиҳои синтезшуда дар асоси маҷмуи натиҷаҳои таҳлили элементӣ, спектроскопияи инфрасурх (СИ), таҳлили ренгеноструктурӣ, резонанси магнитии ядроӣ (РМЯ), таҳлили термогравиметрӣ ва масс-спектрометия. Муайян намудани робитаи байни таркиб, устуворӣ сохти комплексҳо ва муҳити маҳлул. Асоснок намудани модели мувофиқи сохти комплексҳо дар асоси далелҳои таҷрибавӣ;

-муайян намудани хосиятҳои биологӣ ва нишондиҳандаҳои бехатарии пайвастагиҳои комплексии синтезшуда дар асоси натиҷаҳои озмоишҳои токсикологӣ ва микробиологӣ. Таҳлил намудани сатҳи заҳрнокии шадид ва музмин, таъсири хашмгинкунанда, инчунин фаъолияти зиддимикробӣ ва зиддизанбуруғии пайвастагиҳо синтезкардашуда.

Дараҷаи эътимотнокии натиҷаҳо. Эътимоднокии маълумоти гирифташуда бо истифода аз тариқаҳои муосири таҳқиқоти физикӣ ва

химиявӣ, инчунин коркарди омории натиҷаҳо асоснок карда шуд. Натиҷаи синтез таркиб ва сохти пайвастагиҳои комплексии нуқра бо албендазол дар асоси таҳлили спектри инфрасурх(СИ), дервотография, ренгеноструктурӣ, масс-спектрометрӣ ва РМЯ муайян карда шуд; хосиятҳои биологии пайвастагиҳои комплексии нуқра бо албендазол захрнокии шадид, хосияти зиддимикробӣ,аллергеннокии комплексҳо муайян карда шуд.

Мутобиқи диссертатсия бо шиносномаи ихтисоси илмӣ. Кори диссетратсия ба бандҳои бо шиносномаи ихтисоси 1.4.5. Химияи физикӣ мутобиқат мекунад:

- термодинамикаи химиявӣ; таълимот дар бораи мувозинати химиявӣ; термодинамикаи оморӣ-боби 3; 3.1-3.4

- механизмҳои мураккаби равандҳои химиявӣ, равандҳои гудозиш ва кристалшавӣ-боби 3;3.1-3.2

-назарияи маҳлулҳо, таъсири мутақобили байнимолекулӣ ва байнизарравӣ-3;3.1

-таҳқиқи қонуниятҳои равандҳои тағйирёбии таркиби системаҳои химиявӣ вобаста ба ҳарорат.-3; 3.2, 3.3

Саҳми шахсии довталаби дараҷаи илмӣ дар таҳқиқот. Саҳми муалифи рисола, ки бо ҳаммуаллифӣ анҷом дода шудааст, дар ҳамаи зинаҳои иҷрои таҷриба, муқаррар кардани роҳу усулҳои таҳқиқот, кофтукови таҳлили адабиёти илмии мавҷуда оиди мавзуи мазкур, муҳокимаи натиҷаҳо, хулоса ва навиштани мақолаҳои илмӣ бевосита иштирок кардааст. Кори таҳқиқоти ва базаи таҷрибавӣ дар кафедраи химияи татбиқии Донишгоҳи маллии Тоҷикистон, кафедраи кимиёи фармасевтӣ ва захршиносӣ, озмоишгоҳи марказии тадқиқотии Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи А.Сино дар шаҳри Душанбе.

Тасвиб ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия. Натиҷаҳои асосии кори диссертатсионӣ дар конференсияҳо гузориш ва муҳокима карда шудаанд:

Коференсияи байналмиллалии илмию амалии «Рӯшоноии адабӣ дар илм» Қазоқистон (Алмата, 2022); конференсияи байналмиллалии илмию амалии «Конфронси илмӣ- амалии байналмиллалӣ ба муносибати 70-солагӣ «Тибби муосир: анъанаҳо ва навовариҳо»(Душанбе,2022); Маводҳои Конфронси XVIII илмӣ-амалии олимони ҷавон ва донишҷӯёни ДДТТ ба номи Абӯалӣ ибни Сино «Илм ва инноватсия дар тиб-2023» бо иштироки байналмиллалӣ, Том-2 (Душанбе,2023); Мактаби конфронси умумироссиягии олимони ҷавон «Рузҳои илм дар ИТХР» (Иваново,2023); консеренсияи байналмиллалии илмӣ-амалӣ дар мавзуи «Рушди самтҳои нав дар химия ва технологияи химиявӣ» бахшида гиромидошти хотираи академики АМИТ, доктори илмҳои химия, профессор Сафиев Ҳайдар (2023); конференсияи илмӣ-назариявии байналмиллалӣ дар мавзӯи

«Рушди илмҳои химия, технология ва экология» бахшида ба 20-солагии таъсисёбии кафедраи «Технология ва экологияи химиявӣ» ва «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф»(Душанбе,2023) «Самтҳои афзалиятноки тадқиқот дар соҳаи тиб: кимиёи тиббӣ, биокимиё ва биофизика. Маҷмӯаи тезисҳои Анҷумани байналмиллалии илмӣ- амалӣ»(Бухоро,2024); «Масъалаҳои актуалӣ дар химияи имрӯза, усулҳои ҳалли онҳо ва дурнамои пешрафт» Узбекистон (Денав,2025); конференсияи байналмиллалии илмию амалӣ дар мавзуи «Пайвастҳои комплексӣ ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо» (Душанбе,2025).

Конференсияи ҷумҳуриявии илмию назариявии ҳайати устодону кормандони ИИТ ДМТ бахшида ба «Солҳои рушди саноат (2022-2026)» ва «Бузургдошти Мавлоно Ҷалолиддини Балхи»(Душанбе,2022); конференсияи умумидонишгоҳи илмию назариявии донишҷӯён, магистрон ва унвонҷӯёни ДМТ бахшида ба соҳаи рушди иқтисоли рақамӣ ва инноватсия (2025-2030), «700 солагии шоири ғазалсарои тоҷику форс Ҳофизи Шерозӣ» ва «115-солагии шоири халқии Тоҷикистон Боқӣ Раҳимзода» (Душанбе,2025).

Интишорот аз рӯйи мавзуи диссертатсия. Аз рӯи натиҷаҳои таҳқиқоти илмӣ дар маҷмӯъ 15 мақола ва фишурдаи мақолаҳо, ки 4-тои он дар маҷаллаҳои тавсиявии комиссияи олии аттестатсионии Ҷумҳурии Тоҷикистон ва 11-то фишурдаи мақолаҳо дар конференсияҳои байналмиллалӣ ва дохилӣ ба чоп расидаанд.

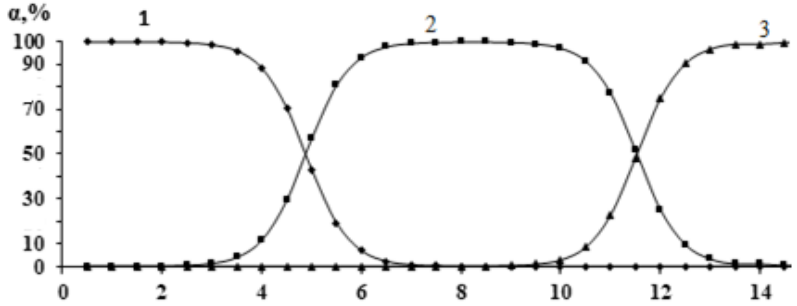
Сохтор ва ҳаҷми диссертатсия. Рисолаи номзадӣ дар ҳаҷми 157 саҳифаи чопи компютерӣ таҳия шуда, аз муқаддима, чор боб, хулоса ва 142 номгуйи адабиётҳо бо забонҳои давлатӣ ва хориҷӣ иборат аст. Рисола аз 30-то расм ва 32- то ҷадвал иборат мебошад.

МУНДАРИҶАИ АСОСИИ ДИССЕРТАТСИЯ

ТАҲҚИҚИ РАВАНДҲОИ КОМПЛЕКСҲОСИЛКУНИИ НУҚРА(I) БО АЛБЕНДАЗОЛ ДАР ҲАЛКУНАНДАИ ОРГАНИКӢ

Таҳлили раванди комплексҳосилкунӣ дар системаи нуқра(I)-албендазол –кислотаи сирко

Дар ин таҳқиқот таҳлил карда шуд, ки чӣ гуна нуқра(I) бо албендазол дар маҳлули кислотаи сиркои 6 мол/л ба реаксия меравад. Константаи ионизатсияи албендазол бо истифода аз усули титркунии pH-метрӣ муайян карда шуд (нигаред ба расми 1). Ин таҳлил нишон дод, ки албендазол дар ин шароит ҳамчун молекулаи нейтралӣ рафтор мекунад.

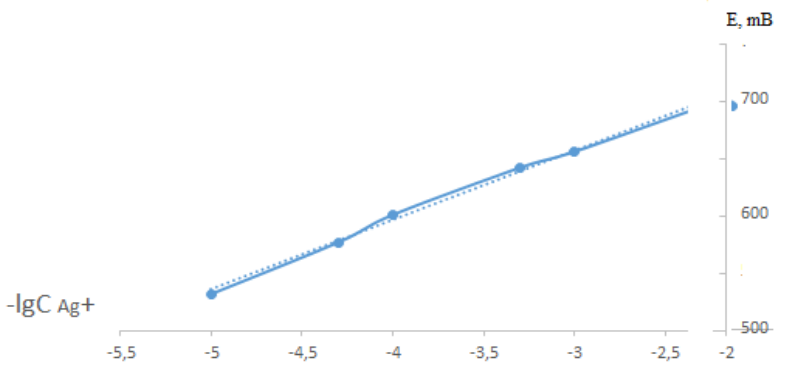


Расми 1.- Диаграммаи тақсимоти албендазол ва маҳсули ионизасияи он дар маҳлули сирко дар доираи васеъи pH-маҳлул. Қаҷхаттаҳо: 1-L^+, 2- L, 3- L^-

Ҳамин тариқ диаграммаи тақсимшавии албендазол нишон медиҳад, ки дар муҳити pH аз 4,0 то 10,5 лиганд дар намуди молекулавӣ мебошад. Яъне ин далели он аст, ки дар муҳити нейтралӣ устувории баланд дошта, дар ин муҳит метавонад дар комплексҳосилкунӣ иштирок кунад.

Ҳангоми омӯзиши хосияти комплексҳосилкунии ионҳои нуқра(I) бо лигандҳои органикӣ, махсусан бо албендазол баргардандагии электроди нуқра (Ag/Ag^+) дар системаи оксиду барқароршавӣ нақши муҳим мебозад.

Аз ин сабаб барои муайян кардани потенсиали стандартии системаи Ag^+-CH_3COOH-H_2O вобастагии потенсиали оксидонӣ аз консентрасияи гуногуни нуқра дар муҳити нейтралӣ омухта шуд.

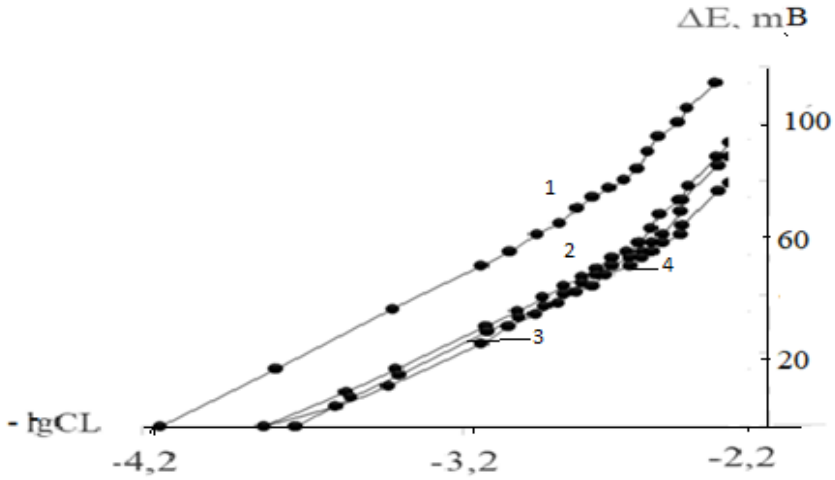


Расми 2.-Баргардандагии электроди нуқра дар системаи Ag+-CH_3COOH маҳлулҳои консентратсияҳашон (мол/л): 1) $1\cdot10^{-5}$;2) $5\cdot10^{-5}$; 3) $1\cdot10^{-4}$; 4) $5\cdot10^{-4}$; 5) $5\cdot10^{-3}$

Чи хеле, ки аз расм аён аст, вобастагии потенсиали оксидонӣ (E) аз консентрасияи ионҳои нуқра (Ag^+) хаттӣ буда тангенси кунҷи он ба 60,36 баробар мебошад ҳангоми экстрополясияи хатти рост ба тири абсиса потенсиали стандартии система муайян гардид, ки ба 837,52 мВ баробар аст.

Шумораи максималии молекулаи албендазол ки бо ионҳои нуқра(I) пайвасти комплексиро ҳосил мекунанд, яъне координатсия шудаанд тавассути вобастагии ΔE аз -lgC_L (ниг. расми 3) ҳангоми афзудани пай дар пайи лиганди органикӣ муайян карда шуд.

Нишебии ин вобастагӣ дар ҳароратҳои гуногун ва қувваи ионии 0,1 мол/л оварда шудааст.



Расми 3.-Вобастагии ΔE аз -lgC_L барои пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) дар ҳарорати 288,16-318,16 К, I=0,1 мол/л ($NaNO_3$) T(1)=288,16 К,T(2)=298,16 К, T(3)=308,16 К, T(4)=318,16 К

Дар расми 3 ҳачнун намуна вобастагии ΔE аз логарифмаи консентрасияи ионҳои нуқра дар ҳароратҳои гуногун ва қувваи ионии 0,1 мол/л оварда шудааст. Натиҷаҳои дар график овардашуда нишон медиҳанд, ки ҳангоми экстрополясияи ин хатҳо дуто қитъаи росхатта ҳосил шуданд.

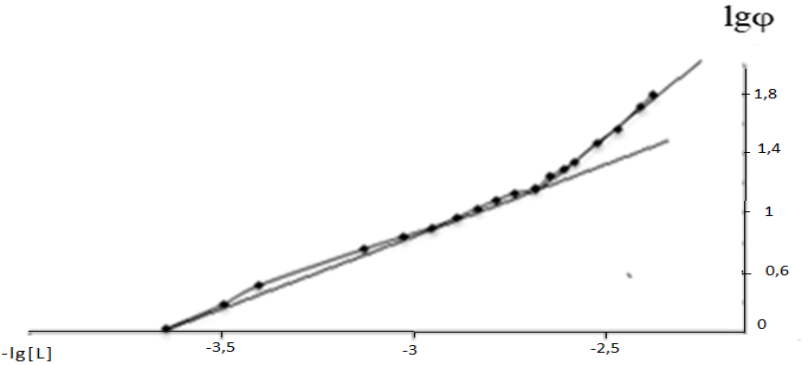
Аз ин натиҷаҳо бармеояд, ки дар системаи $AgNO_3$-L-CH_3COOH ду молекулаи албендазол дар комплексҳосилкунӣ бо нуқра иштирок мекунанд. Дар ҷадвали 1 ҳамчун намуна натиҷаи титркунии потенсиометрӣ ва натиҷааҳои ҳисобшудаи lg[Ag(I)], lg[L], lgφ ва F_0 барои системаи Ag(I)–L-CH3COOH дар ҳарорати 298,16 К оварда шудаанд.

Ҷадвали 1. - Натиҷаҳои консентратсияи мувозинатии ионҳои нуқра(I) ва албендазол дар 298,16 К; C_L=1,0·10-2 мол/л; $C_{Ag(I)}$=1·10-4 мол/л; J=0,1 мол/л $NaNO_3$

ΔЕ, мВ	C_L мол/л;	C_{Ag} мол/л;	lgф	[L] мол/л;
1,00	$1,5\cdot10^{-4}$	$9,8\cdot10^{-5}$	$1,6\cdot10^{-2}$	$1,4\cdot10^{-4}$
13,00	$3,4\cdot10^{-4}$	$9,6\cdot10^{-5}$	$2,1\cdot10^{-1}$	$2,7\cdot10^{-4}$
21,00	$4,9\cdot10^{-4}$	$9,5\cdot10^{-5}$	$3,5\cdot10^{-1}$	$3,8\cdot10^{-4}$
36,00	$8,7\cdot10^{-4}$	$9,1\cdot10^{-5}$	$6,0\cdot10^{-1}$	$7,3\cdot10^{-4}$
41,00	$1,0\cdot10^{-3}$	$8,9\cdot10^{-5}$	$6,9\cdot10^{-1}$	$9,2\cdot10^{-4}$
46,00	$1,2\cdot10^{-3}$	$8,7\cdot10^{-5}$	$7,7\cdot10^{-1}$	$1,1\cdot10^{-3}$
50,00	$1,4\cdot10^{-3}$	$8,5\cdot10^{-5}$	$8,4\cdot10^{-1}$	$1,2\cdot10^{-3}$
53,00	$1,6\cdot10^{-3}$	$8,3\cdot10^{-5}$	$8,9\cdot10^{-1}$	$1,4\cdot10^{-3}$
56,00	$1,7\cdot10^{-3}$	$8,2\cdot10^{-5}$	$9,4\cdot10^{-1}$	$1,6\cdot10^{-3}$
60,00	$1,9\cdot10^{-3}$	$8,0\cdot10^{-5}$	1,014	$1,8\cdot10^{-3}$
61,00	$2,1\cdot10^{-3}$	$7,8\cdot10^{-5}$	1,031	$2,0\cdot10^{-3}$
63,00	$2,3\cdot10^{-3}$	$7,6\cdot10^{-5}$	1,064	$2,2\cdot10^{-3}$
66,00	$2,5\cdot10^{-3}$	$7,4\cdot10^{-5}$	1,115	$2,3\cdot10^{-3}$
69,00	$2,7\cdot10^{-3}$	$7,2\cdot10^{-5}$	1,166	$2,5\cdot10^{-3}$
77,00	$3,0\cdot10^{-3}$	$6,9\cdot10^{-5}$	1,301	$2,9\cdot10^{-3}$
81,00	$3,2\cdot10^{-3}$	$6,7\cdot10^{-5}$	1,369	$3,1\cdot10^{-3}$
93,00	$3,9\cdot10^{-3}$	$6,0\cdot10^{-5}$	1,572	$3,8\cdot10^{-3}$
97,00	$4,3\cdot10^{-3}$	$5,6\cdot10^{-5}$	1,639	$4,2\cdot10^{-3}$

Чи хеле ки аз ин ҷадвалҳо бармеояд, ҳангоми зиёд шудани консентрасияи лиганд фарқи энергияи потенсиалӣ меафзояд яъне ин нишонаи он аст, ки дар система потенсиали оксидонӣ кам мешавад. Сабаби камшавии потенсиали оксидонӣ дар он аст, ки дар системаи омӯхташаванда зарраҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол ҳосил шудаанд.

Барои муайян намудани константаҳои умумии устувории комплексҳо аз усулҳои пешниҳодшудаи Фридман ва УККҒ-усулҳои камтарини квадрати ғайрихатӣ истифода карда шуд. Мувофоқи усули Фридман вобастагиҳои lgф аз $-lgC_L$ гирифта шуд. Ин вобастагӣ характери ғайрихаттӣ дошта аз ду қитъаи росхатта иборат аст. Ҳангоми экстрополясия кардани ҳар як қитъаи рост ба мевҳари абссис қиматҳои константаи умумии устувории заррачаҳои комплексӣ муайян карда шуданд (ниг.расми 4).



Расми 4.-Вобастагии Δф аз -lg[L] барои системаи Ag-албендазол-ДМСО дар ҳарорати 298,16 К, J=0,1 мол/л.

Барои муайян намудани константаҳои устувории пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол аз «барномаҳои компютерӣ бо истифода аз усули камтарини квадрати ғайрихаттӣ» истифода бурда шуд.

Дар рисолаи А.С. Содатдинова қайд карда мешавад, ки «константаҳои устувории нуқра(I) бо лигандҳои органикӣ бо истифода аз усули камтарини квадрати ғайрихатӣ ҳисоб карда шуданд, ки барои коркарди маълумоти комплекскунонӣ муайян кардани параметрҳои мувозинат васеъ истифода мешавад»[14].

Константаи умумии устуворӣ бо усули камтарини квадрати ғайрихаттӣ муайян карда шуда натиҷаҳои миёнаи онҳо ки бо ду роҳ ҳисоб карда шуда буданд, дар ҷадвали 2 оварда шудаанд.

Ҷадвали 2.- Константаи устувории пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол дар ҳароратҳои 288,16-318,16 К ва қувваии онии 0,1 мол/л($NaNO_3$)

Усулҳо	β / Т, К	288,16К	298,16К	308,16К	318,16К
Фридман	$lg\beta_1$	4,19±0,06	3,75±0,05	3,61±0,04	3,40±0,03
	$lg\beta_2$	7,12±0,09	6,61±0,08	6,47±0,07	6,21±0,08
УККҒ	$lg\ \beta_1$	4,17±0,07	4,01±0,06	3,63±0,05	3,42±0,04
	$lg\beta_2$	7,14±0,08	6,93±0,07	6,51±0,06	6,25±0,09
Қиммати миёна	$lg\beta_1$	4,18±0,065	3,88±0,055	3,62±0,04	3,41±0,03
	$lg\beta_2$	7,13±0,085	6,77±0,075	6,49±0,06	6,23±0,08

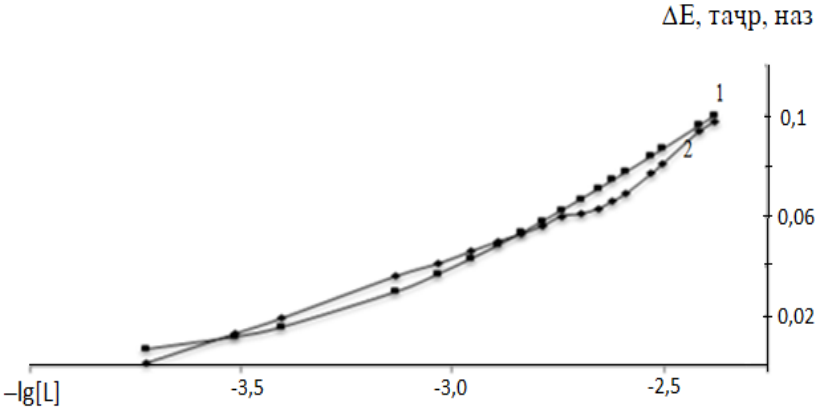
Чи хеле ки аз ҷадвал аён аст барои ҳисоби константаи

устувории комплексҳо аз ду усули муосир истифода карда шуд. Натиҷаҳои ба даст омадаи ҳар ду усул бо ҳам хеле наздиканд, ки ин шабоҳати дурустии механизми реаксияҳоро дорад. Боз агар ба ҷадвал назар андозем дида мешавад, ки бо афзудани ҳарорат қиматҳои $lg\beta_1$ ва $lg\beta_2$ оҳиста оҳиста кам мешаванд, яъне устувории пайвасти комплексии нуқра бо албендазол бо зиёд шудани ҳарорат кам мешавад.

Пас аз гузаронидани тадқиқот ва натиҷагирии бузургиҳои константаи устувории онҳо бо истифода аз муодилаи зерин ҳисоб карда шуданд.

$$\Delta E_{назариявӣ}=\frac{2,3RT}{nFlog(1+\beta 1[Алб]+lg\beta 2)}+++\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots(1)$$

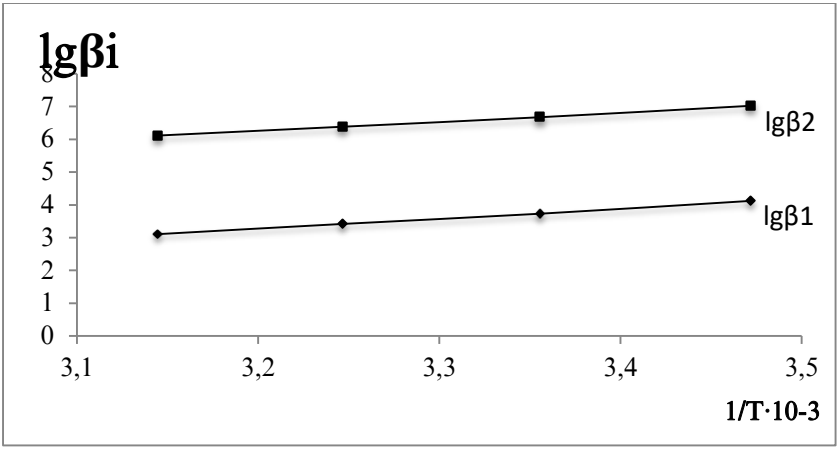
Натиҷаҳои таҷрибавии онро бо натиҷаҳои назариявӣ дар муқоиса гузошта дурустии модели пешниҳодшуда яъне комплексҳосилкунии нуқра (I) бо албендазол тасдиқ карда шуд.



Расми 5.- Вобастагии ΔE аз -lg[L] барои системаи Ag-албендазол-ДМСО дар ҳарорати 298,16 К .Каҷхаттаҳо: 1)-$\Delta E_{назариявӣ}$ 2)- $\Delta E_{таҷрибавӣ}$

Муқоисаи раванди комплексонии нуқра(I) бо албендазол нишон дод, ки дар системаи Ag+-Алб-CH_3COOH ду шакли пайвасти комплексӣ ҳосил мешавад. Константаи умумии устуворӣ $lg\beta_2$ барои комплекси албендазолӣ ба 4,12 воҳиди баробар шуд.

Бо истифода аз усули коэффисенти ҳароратӣ аз муодилаи $\Delta H–T\Delta S=-RT\ lg\beta i$, бузургиҳои ΔH ва ΔS реаксияҳои комплексонии нуқра(I) бо албендазол бо усули графикӣ (расми 6) ёфт шуданд. Бузургии ΔG аз рӯи муодилаи $\Delta G=\Delta H-T\Delta S$ муайян карда шуд.



Расми 6. -Вобастагии lgβi аз 1/T барои зарраҳои комплексии зерин: 1 - $[Ag(L)NO_3]^+$; 2 - $[Ag(L)_2(NO_3)_2]^+$ дар 298,16К

Тавре, ки аз расми 6 бар меояд, дар фосилаи ҳарорати 298,16К, вобастагии lgβi аз 1/T барои ҳамаи комплексҳо хатӣ мебошад. Барои муайян кардани функсияҳои термодинамикӣ (ΔH, ΔG), муодилаи Кларк-Глю истифода шуд.

Дар ин муодила, вобастагии lgβi аз 1/T таҳлил карда шуд. Қимати ΔH аз нишебии хати рост ва қимати ΔG аз қисмати буридаи хат дар меҳвари ординатаҳо муайян карда шуд. Қимати ΔS аз рӯи муодилаи Гиббс ҳисоб карда шуд. Дар ҷадвали 3 функсияҳои термодинамикии реаксияи ҳосилшавии комплексҳои нуқра(I) бо албендазол, ки бо усули коэффисентҳои ҳароратӣ (а) ва бо истифода аз муодилаи Кларк-Глю (б) ҳисоб шудаанд, оварда шудаанд.

Ҷадвали 3.- Бузургиҳои функсияҳои термодинамикии раванди ҳосилшавии комплексҳои албендазолии нуқра(I) бо усули Кларк-Глю

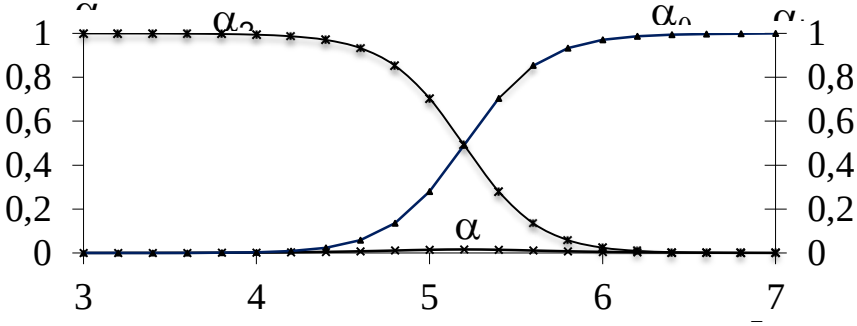
Реаксияҳои ҳосилшавии комплексҳо	ΔH, кҶ/мол	ΔG, кҶ/мол	ΔS, кҶ/мол
$Ag+L\rightarrow[AgL]^+$	-58,62±2,3	-21,40±4,8	-61,13±7,8
$Ag+2L\rightarrow[Ag(L)_2]^+$	-53,0±0,8	-43,16 ±1,6	-49,89±0,7

Аз маълумоти ҷадвал бар меояд, ки функсияҳои термодинамикии бо ду усул ҳисоб шуда бо ҳам хеле наздиканд. Тавре ки маълум аст, дар ҳамаи марҳилаҳои комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол бузургии ΔG манфӣ мебошад, ки ин нишонаи худ ба худ ба амал омадани раванд мебошад. Аз ҷиҳати энергетикӣ ҳосилшавии комплексҳои биядроии албендазолати нуқра нисбат ба моноядрои устувортаранд. Яъне ҳангоми ҳосилшавии пайвасти комплексии

моноядроии нуқа(I) бо албендазол 21,0 кҶ/мол энергия хориҷ мешавад ва барои комплексҳои биядрои бошад 43,16 кҶ/мол энергия хориҷ мешавад.

Агар константаҳои устувории пайвастагии комплекси маълум бошад бо осони ҳиссаи молии онро ҳисоб кардан имконпазир аст.

Бо ҳамин мақсад барои муайян кардани соҳаи ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ дар системаи $AgNO_3$-Алб-CH_3COOH дар ҳарорати 298,16К графики диаграммаи тақсимшави барои заррaҳои комплексии дар система ҳосилшаванда сохта шуд (расми7).



Расми 7.- Каҷхатаҳои тақсимшавии комплексҳои албендазолатии Ag(I) бо албендазол –CH_3COOH дар ҳарорати 298,16 К, ки дар ин ҷо α_0- Ag+ ;α_1-$[AgL]^+$;α_2-$[AgL_2]^+$

Таҳлили диаграммаҳои тақсимот нишон дод, ки ҳангоми реаксияи ионҳои нуқра(I) бо албендазол дар маҳлул асосан комплексҳои моноҳастаи ҳосил мешаванд, ки тақрибан 99 %-ро ташкил медиҳанд. Ин нишон медиҳад, ки пайвасти комплексии моноҳастаи аз ҷиҳати термодинамикӣ хеле устуворанд.

Комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол дар ҳалкунандаи органикӣ –ДМСО низ дарҳамин ҳароратҳои аз 288,16-318,16К ва кувваҳои ионии 0,05, 0,1, 0,5, 1,0 мол/л омӯхта шуда натиҷаҳои назаррас ба даст оварда шуданд.

Дар ин асос пайвастагиҳои комплексии иони нуқра (I) бо албендазол дар шакли сахт ҳам дар муҳити 6 мол/л сирко ва ҳам ДМСО синтез карда шуданд. Аз маҳлул пайвасти комплексӣ бо таносуби 1:1 ва 1:2 дар намуди хокаи сафеди хокистарӣ ва хокаи қаҳваранг ҷудо карда шуданд.

Дар умум натиҷаҳо нишон додаанд, ки албендазол бо ионҳои нуқра(I) дар муҳити 6мол/л кислотаи сирко пайвастагиҳои устуворро ҳосил мекунад, гарчанде, ки устувории онҳо нисбат ба комплексҳои

лигандҳои дар муҳити ДМСО ҳосилшуда камтараст.

Таҳлили элементии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол

Дар асоси таҳқиқотҳои дар боло зикршуда мо методикаи синтези 8-то пайвасти комплексии нуқра бо албендазолро дида баромадем. Дар ҷадвали 4 таҳлили миқдорӣ аз рӯи мавҷудияти элементҳо дар таркиби пайвасти комплексии синтезкардашуда оварда шудааст.

Ҷадвали 4.- Таҳлили элементии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол

Пайвастагиҳо	назариявӣ, % / таҷрибавӣ, %					
	Ag	C	H	N	S	O
[AgLCH3COO]-(1:1)	24,96	38,90	4.20	9,72	7,42	14,81
	24,89	38,2	4.1	9,56	7,4	14,2
[AgL2 CH3COO] - (1:2)	15,40	41,15	4,32	14,0	9,15	15,99
	15,0	41,0	4,7	13,9	9,1	16,2
[AgLДМСО]NO3 - (1:1)	24,79	33,12	3,47	12,8	7,37	18,38
	24,0	32,8	3,8	12,5	7,3	18,5
[AgL2 ДМСОNO3]- (1:2)	15,4	41,15	4,32	14,0	9,15	14,05
	15,3	40,5	4,4	13,7	9,11	13,96
[AgLДМСО]NO3 - 99%	20,09	4,5	4,30	9,72	7,4	14,81
	21,00	4,53	4,5	9,90	7,42	14,00
[AgL2 ДМСОNO3]- 99%	15,0	40,9	4,9	15,0	9,2	13,99
	14,98	41,0	4,87	14,8	9,21	14,0
[AgL(C2H5OH)]NO3	24,78	33,5	3,3	12,5	7,1	18,38
	24,5	33,0	3,4	13,0	7,3	18,3
[AgL2(C2H5OH)]NO3	17,5	33,82	2,5	11,5	5,30	20,8
	17,8	33,7	3,0	12,0	5,7	21,0

Таҳқиқи СИ –спектроскопии комплексҳои албендазолатии нуқра(I)

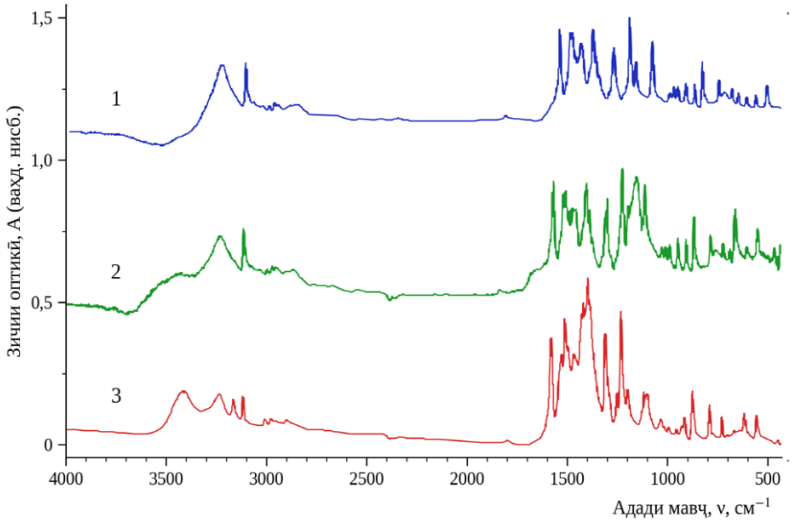
Бо мақсади муайян намудани хусусиятҳои сохт ва гурӯҳҳои функсионалии таркиби пайвастагиҳои нави синтезшуда, ки дар натиҷаи комплексҳосилкунии иони нуқраи(I) бо албендазол ҳосил шудаанд, усули спектроскопияи инфрасурх (СИ) истифода гардид.

Ефимона А.И. ва ҳаммуаллифонашон овардаанд: «спектроскопияи ларзишӣ метавонад хеле иттилоотӣ бошад, зеро робитаи байни сохти электронӣ ва молекулавӣ боиси тағйирот дар бандҳои инфрасурх мегардад, ки аксар вақт ба мо имкон медиҳад, ки сохтори комплексҳои координасиониро тавсир кунем» [15].

Интерпретасия ва таҳлили спектри инфрасурхи (СИ) пайвасти комплексии [AgL2NO3] нишон медиҳанд, ки дар спектри инфрасурхи (СИ) ин модда бояд хатҳои ҷаббиши хос барои ҳалқаи бензолии

моноивазшуда, гурӯҳи метиленӣ ва системаи гетеросиклӣ мушоҳида шаванд.

Дар расми 8 спектри инфрасурхи (СИ) пайвастҳои нуқра бо албендазол дар муҳити 6 мол/л сирко оварда шудааст, ки дар онҳо воқеан хатҳои ҷаббиши хос мушоҳида мешаванд, ки ба тағйирёбии гурӯҳҳои функсионалӣ мувофиқат мекунанд.



Расми 8.–Спектри инфрасурхи (СИ)-и молекулаҳо: 1) албендазол; 2) комплекси таркиби [AgLCH3COO], 3) [AgLДМСО]NO_3

Тавре ки аз ин расм маълум мешавад, ҳосилшавии комплекс боиси тағйироти назарраси спектрҳои инфрасурхи (СИ)- и лиганд дар тамоми диапазони басомад аз 4000 то 400см$^{-1}$ мегардад.

Чихеле ки аз таҳлил бармеояд, дар спектри албендазоли озод қулла дар ҳудуди 1620 см$^{-1}$ -1650 см$^{-1}$ мушоҳида мешавад, дар спектри комплекс бошад, дар ин ҳудуд тағйироти ҷиддӣ ба назар мерасад. Ғайр аз ин, зичии электронии гурӯҳи N-H дар ҳудуди 3300 – 3400 см$^{-1}$ кам шудааст, ки ин аз иштироки атоми нитрогени ҳалқаи бензимидазол дар координатсия шабоҳат медиҳад.

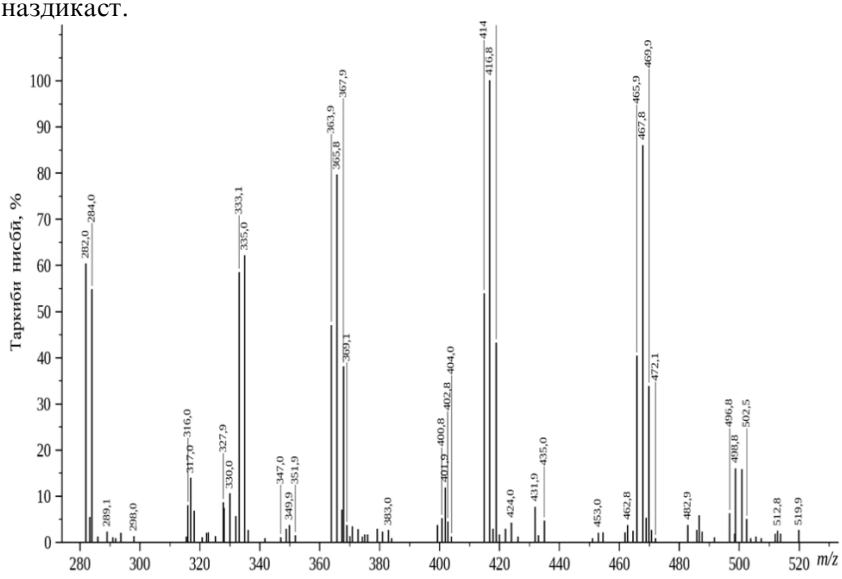
Боз маълум аст ки дар ҳудуди 700 то 750 см$^{-1}$ лағжиши диформатсионии C-S ба вуҷуд омадааст, ки ин низ гувоҳи он аст, ки сулфури гуруҳи тиолии молекулаи албендазол низ дар координатсия иштирок мекунад.

Ҳамин тавр, метавон хулоса кард, ки пайвасти координатсионӣ байни иони нукра- албендазол тавассути ҳам атоми нитрогени ҳалқаи пиридин ва ҳам атоми сулфури гурӯҳи тиолӣ амалӣ мешавад.

Таҳлили масс- спектроскопияи албендазол ва пайвастагиҳои синтезкардашудаи нуқра(1) бо албендазол

Таҳлили масс-спектрометрии сифатӣ барои муайян кардани таркиби молекулавӣ ва тасдиқи сохтори пайвастагиҳо бо истифода аз усули ионизатсияи электроскопӣ (HR-ESI-MS) дар реҷаи мусбат анҷом дода шуд. Ин таҳлил дар дастгоҳи Agilent 129-6545 UHPLC-QTOF LC/MS ки воқеъ дар давлати Чин мебошад дар ҳамкори бо ҳамкасбон гузаронида шуд.

Дар спектри ба даст омада, қуллаи асоси дар иони $(M+H)^+$ рост меояд, ки ба формулаи молекулавии албендазол $C_{12}H_{16}N_3O_2S$ мувофиқат мекунад. Бузургии таҷрибавии m/z ба 266.0958 баробар аст, ки бо бузургии ҳисобшудаи назариявӣ m/z-266.0958 хеле наздикаст.



Расми 9.-Пайвасти комплексии албендазол - нуқра–ДМСО

Дар муқоиса бо спектри ^1H NMR-и албендазоли холис дар спектри комплекси нуқра албендазол тағйироти назарраси ҷойивазкунии химиявӣ ва шакли сигналҳо мушоҳида мешавад. Пеш аз ҳама сигналҳои вобаста ба гурӯҳои -NH дар минтақаи майдони паст β- 11-12 ppm тағйир ёфтаанд. Ин тағйирот далели иштирок намудани атомҳои нитроген дар координатсия бо иони нуқра мебошад. Каме батарафи майдони паст ҷо ба ҷо шудани ин сигналҳо ба коҳиш ёфтани зичии электронии протонҳои –NH ишора мекунад, ки аз натиҷаи иштироки Ag^+ дар комплексҳосилкунӣ шаҳодат

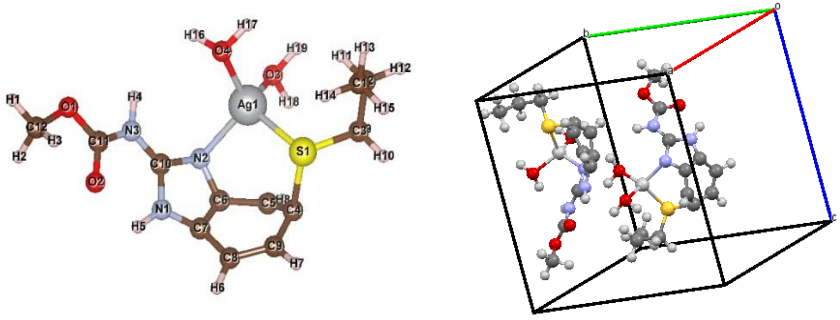
медиҳад.

Таҳқиқоти рентгеноструктурии кристаллҳои пайвастагии комплексии нуқра(I) бо албендазол

Таҳқиқоти ренгеноструктурии кристаллҳои пайвасти комплексии синтезкарадшудаи таркибашон $C_{12}H_{19}N_3AgO_4$ ки дар асоси намаки нитрати нуқра ва албендазоли аз ҷиҳати химиявӣ тоза ҳосил шудааст дар диафрактометри автоматии яккристалии модели «Malvern Panalytical Empyrean» дар давлати Узбекистон бо истифода аз асбоби шуоъафкани СиКα (γ=1,54 A^0) анҷом дода шуд.

Тавре ки дар расм нишон дода шудааст, координасия тавассути атоми нитрогени ҳалқаи бензимидазол ва эҳтимолан тавассути атоми сулфури гурӯҳи тиолӣ гурӯҳи функсионалӣ ба амал меояд, агар лиганд дар маҳлул гидролиз шавад ё табдилоти таутомерӣ ба амал ояд. Ғайр аз ин, пайвандҳои гидрогенӣ байни гурӯҳҳои NH-и албендазол ва лигандҳои дорои оксиген (масалан, ионҳои атсетат ё молекулаҳои ҳалкунанда) мушоҳида мешаванд, ки дар устувории панҷараи кристаллӣ нақши муҳим доранд. Таҳлили дифраксияи рентгенӣ ҳосилшавии комплекси устувори нуқра(I)-ро бо албендазол дар муҳити 6М кислотаи сирко тасдиқ кард. Сохтори комплекси ҳосилшуда нишон медиҳад, ки албендазол ҳамчун лиганди бидентати амал мекунад, ки қодир аст иони Ag^+-ро тавассути таъсири мутақобилаи донор-аксептор устувор кунад. Параметрҳои сохтории комплекси нуқра-албендазол бо маълумоти спектроскопӣ мувофиқанд ва имкон медиҳанд, ки ҳалкунанда ба панҷара ё бастабандии кристаллӣ дохил карда шавад.

Маълум гардид, ки сохти параметрҳо бо натиҷаҳои спектори инфрасурх (СИ) мувофиқат намуда эҳтимолияти иштироки ҳалкунанда ба сфераи координатсиони ё панҷараи кристали нишон медиҳад.



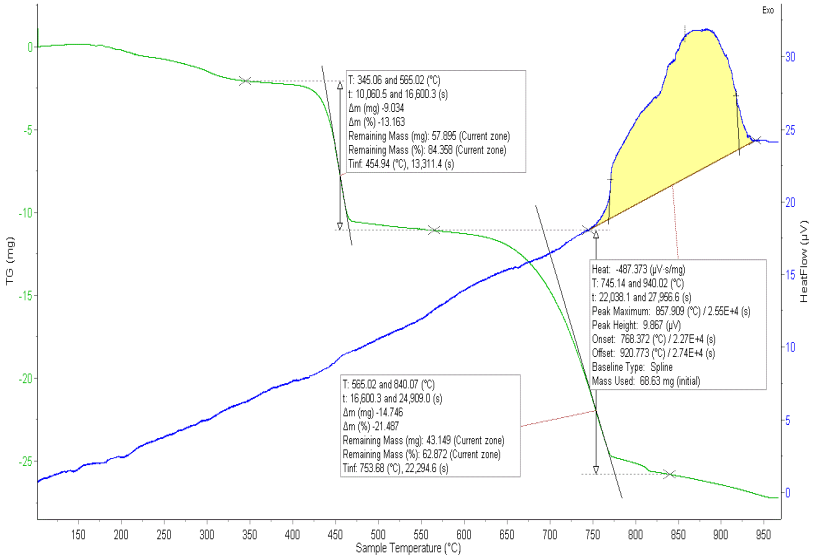
Расми 10.-Сохти молекулавии пайвастагии комплексии нуқра(I) ва албендазол

Атоми нуқра дар муҳити ду атоми донор, ки аз таркиби албендазол ва молекулаҳои анионӣ мавҷуданд геометрияи координатсиониеро ташкил медиҳад, ки ба сохти координатсияшудаи бидентати шабоҳат дорад. Атомҳои нитрогени ҳалқаи бензимидазол ва атомҳои сулфури гурӯҳои тиолӣ дар координатсия иштирок мекунанд, ки ин бо дарозии пайвандҳои Ag-N ва Ag-S дар доираи 2,10-2,30A^0 тасдиқ мешавад.

Дар сохт ҳамчунин пайвандҳои гидрогении байни молекулӣ вуҷуд доранд, ки дар устувории бастабандии кристалӣ нақши калиди мебозанд.Инчунин эҳтимолияти таъсири байни ҳамдигарии сусти π–π байни қисмҳои ароматикии молекулаҳо вуҷуд дорад.

Омӯзиши тавсифи термикии пайвастагиҳои синтезкардашудаи нуқра(I) бо албендазол бо усули дериватография

Таҳқиқоти гузаронидашуда нишон доданд, ки таҷзияи гармии комплексҳои нуқра(I) бо албендазол мураккаб буда, аз якчанд марҳила бо ҷазби гармӣ ва хориҷшавии он мегузарад.



Расми 4.11. - Устувории термикии пайвасти комплексии нуқра бо албендазол дар муҳити 6 мол/л сирко

Тавзеҳот: Т: 345.06 ва 565.02 0С; t: 10,060 ва 16,600 сония; Δm (мг)=-9.034; Δm (%)=-13.163; массаи боқимонда (мг): 57.895 (Минтақаи ҷорӣ); массаи боқимонда (%): 84.358 (минтақаи ҷорӣ); ҳарорати нуқтаи инфлексия :454.940С,13 311.4 сония.

Т: 565.02 ва 840.07 0С; t: 16,600 ва 24,909 сония; Δm (мг)=-14.746; Δm

(%)=-21.487; массаи боқимонда (мг): 43.149 (Минтақаи ҷорӣ); массаи боқимонда (%): 62.872 (минтақаи ҷорӣ); ҳарорати нуқтаи инфлексия: 753.680С, 22294.6 сония.

Гармии раванд, яъне миқдори гармие,ки дар вараёни қулла ҷудо ё ҷабидда шудааст:-487.373 μVs; Т: 745.14 ва 940.02 0С; t: 22 038.1 ва 27909.6 сония; максималии қулла:857.9090С; баландии қулла:9,867 μV; оғоз:768.3720С /2.27Е +4(с); ҷойивазкунӣ: 920.7730С/2.74Е +4(с); навъи ибтидой :Хатти асосӣ; массаи истиводашуда: 68.63мг(ибтидой).

Дар расми 11 дериватограммаи комплекси $[AgLCH_3COO]NO_3$ нишон дода шудааст. Дериватограммаи системаи Ag-Алб-CH_3COOH дар ҳарорати 25-950 °С бо суръати гармкунии 2К/ дақ сабт шудааст. Массаи аввалаи комплекси синтез карда шуда 68,63 мг –ро ташкил дод. Дар расм хати сабз (хати TG) тағйирёбии масса ва хати кабуд (DTA) эффекти гармиро нишон медиҳад. Дар натиҷаи гузаронидани таҳлилҳо дар термогривиметрия яъне дар хати додашуда се то марҳилаи тағйирёбии масса дида мешавад.

Марҳилаи аввал дар диапазони 170-350°С мушоҳида мешавад ва бо хориҷ кардани оби координасионӣ ё қисман кислотаи сирко алоқаманд аст. Дар диапазони 3450-5650°С талафоти масса тақрибан 9.03 мг ё 13.16% -ро ташкил медиҳад. Аммо дар диапазони 170-350°С, массаи намуна қариб бетағйир боқӣ мемонад. Талафоти масса дар диапазони 345-5650°С, ки аз сабаби ҷудошавии масса ба вуҷуд меояд, тақрибан 9.03 мг ё 13.16% -ро ташкил медиҳад. Ин талафоти масса бо хориҷшавии пайвастагиҳои ноустувор, аз ҷумла кислотаи сирко ё оби ҳамоҳангӣ алоқаманд аст.

Марҳилаи дуюм дар диапазони 565-840°С сабт шудааст. Талафоти масса ба 14-87 мг ё 21.4% мерасад. Ин марҳила аз таҷзияи васеъи қисми органикии комплекс ва таҷзияи пурраи кислотаи сирко шаҳодат медиҳад.

Дар марҳилаи сеюм, каҷи DTA таҷзияи пурраи лигандро, яъне албендазолро, дар диапазони 750–840°С нишон медиҳад. Дар ин марҳила, ҷудошавии газҳои NO_2 ва CO_2 мушоҳида мешавад. Пас аз анҷоми раванд, тақрибан 62–63% массаи комплекси нуқра(I) бо албендазол дар маҳлули 6 мол/л кислотаи сирко боқӣ мемонад. Ин эҳтимолан аз сабаби ҳосилшавии нуқраи металлӣ ё оксиди нуқра аст.

Хулоса, таҳлили таҷзияи гармӣ нишон дод, ки комплекси албендазол дар маҳлули 6 мол/л кислотаи сирко устувории нисбатан баланди гармиро нишон медиҳад ва таҷзияи он дар ду марҳилаи асосӣ суръат мегирад.

Безарарии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол

Ҳангоми ҳосилшавии пайвасти комплексӣ дар асоси синтези албендазол бо нуқра дар маҳлул миқдори ионҳои нуқра кам шудан

мегиранд, ки яке аз омилҳои пастшавии захрнокии биологии пайваста ба шумор меравад.

Натиҷаи бузургиҳои термодинамикӣ ва константаи устувори нишон медиҳанд, ки иони нуқра(I) бо албендазол комплексҳои устуворро ҳосил мекунанд. Пайвасти комплексии синтезшуда $[Ag(L)_2]^+$ константаи устувории зиёд дорад.

Аз ҷумла, дар патенти Ҷумҳурии Тоҷикистон Раҷабов У бо ҳаммуаллифонаш оварда шудааст, ки: «Сулфати мис –албендазол дорои хосияти зиддигиҷҷавӣ мебошад». [16]

Барои муайян намудани захрнокиишадиди пайвасти нави синтезкардашудаи нуқра(I) бо албендазол таҳқиқотҳои таксикологӣ дар мушҳои сафеди лабораторӣ дар муддати 14 рӯз гузаронида шуд. Дар ҷадвали 5 натиҷаи захрнокии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол оварда шудааст.

Ҷадвали 5.-Захрнокии комплексҳои нуқра(I) бо албендазол

Модда	Мас саи модда г/кг	Мас саи мод да мг/к г	Массаи муш(г)	Миқдо ри мушҳо	Кушан дагӣ	LD (Вояи кушандаг й)
$[Ag(LCH_3COO)_2]$	0.03	30	20	6	0/6	0
$[Ag(LCH_3COO)_2]$	0.3	300	20	6	0/6	0
$[Ag(L)_2CH_3COO]$	1	1000	20	6	0/6	0
[Ag(L)2CH3COO]	3	3000	20	6	1/6	16
$[Ag(L)_2CH_3COO]$	6	5000	20	6	2/6	33
$[Ag(L)_2Cн3COO]$	8	6000	20	6	3/6	50
$[Ag(L)_2]CH_3COO$	10	8000	20	6	6/6	100

Таҳқиқи хосиятҳои зиддимикробӣ ва зиддизамбӯруғии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албенадзол

Фаъолияти зиддимикробӣ ва зиддизамбӯруғии доруҳоро бо усули силсилаи дукаратаи онҳо дар МПБ (маводи ғизоии моеъ) муайян карданд. Суспензияҳои тест-культураҳои як рӯза дар маҳлули хлориди натрий дар миқдори 2×108 м.к. дар 1 мл истифода шуданд. Усули диффузия дар агар-агар ҳамчун муҳити ғизоӣ МПА истифода шуд. Ба зарфҳои Петри диаметраш 100 мм 15 мл маҳлули ғизоии омодашуда, рехта шуд. Пеш аз ҳар як тақриба, зарфҳои Петри дар давоми 45-60 дақиқа дар термостат дар ҳарорати 36-37°С бо сарпӯшҳои кушода хушк карда шуданд. Суспензия дар ҳаҷми 1мл дар иштироки агар-агар ҳангоми ларзонидани зарф дар тамоми сатҳ

баробар тақсим карда шуд. Сипас аз дохили зарф моеъи зиёдатӣ бо ёрии пипетка гирифта шуд. Зарфҳо дар давоми 24 соат дар ҳарорати 36-37°С дар ҳолати чаппа инкубатсия карда шуданд, то ки шусташавии қабати микробӣ аз моеъи конденсатсионӣ пешгирӣ карда шавад. Мавҷудияти минтақаи боздории афзоиши микробҳо дар атрофи диск бо ёрии ченак чен карда шуд.

Дар ҷавдали 6 натиҷаҳои омӯзиши фаъолияти зиддимикробии моддаи нави синтезкарадшудаи нуқра(I) бо албендазол ва маводи маълуми амписиллин нисбат ба бактерияҳои Эшериха кол, салмонелла ва пастурелла оварда шудааст.

Ҷадвали 6. Минтақаи афзоиши хусусияти зиддимикробии пайвасти комплексии нуқра бо албендазол ва амписиллин нисбат ба сето бактерия

Моддаҳо	Миқдор дар лунка, мг	Андозаи минтақаҳо, мм		
		E.Coli	Salmonella	Pasterella
Комплекси нуқра бо албендазол	100	≤ 16-17	≤ 14-15	≤ 14-15
Амписиллин	100	≤ 11-12	≤ 10-11	≤ 6-8

Чи хеле ки аз натиҷаҳои ҷадвал маълум аст, маводи синтезкардашудаи албендазол нисбат ба ҳар се штаммҳои санҷидашуда таъсири хуби зиддимикробӣ дорад. Аз ҳама диаметри калонтарин нисбат ба штамми эршиха кол мушиҳида карда шуд. Амписиллин бошад нисбат ба штаммҳо таъсири пасттарро дорад алалхусус нисбат ба штамми эршеха кол.

Ҳамин тариқ натиҷаҳои ба дастомада нишон медиҳад, ки маводи химиявӣ синтезкардашудаи нуқра бо албендазол нисбат ба амписиллин хосияти зиддимикробкушандагии баландтарро доро мебошад ва метавонад дар оянда ҳамчун маводи фармокологӣ барои табобати касалиҳои бактериалӣ истифода шавад.

ХУЛОСАҲО

1. Бо усули титркунии pH-метрӣ хосиятҳои кислотагӣ-асосии албендазол ва шаклҳои мавҷудияти он дар мухити 6 мол/л сирко ва ДМСО дар доираи васеи муҳити pH омӯхта шуданд. Нишон дода шуд, ки бузургиҳои константаҳои ионизатсия вобаста ба табиати ивазкунанда дар молекулаи албендазол ба таври зерин тағйир меёбанд: pKa(Алб-CH_3COOH)=12,89; pKa(Алб-ДМСО)=12,01.**[2-М; 4-М; 9-М; 11-М; 13-М; 14-М].**

2. Бо усули потенсиометрӣ нишон дода шуд, ки нуқра(I) бо албендазол зина ба зина ду навъи пайвасти комплексиро ҳосил намуд. Константаҳои устувории пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо

албендазол дар муҳити 6 мол/л сирко ва ДМСО муайян карда шуданд. **[3-М; 4-М; 9-М; 13-М; 14-М].**

3. Бо ёрии усули термодинамикӣ, аз ҷумла истифодаи коэффисентҳои ҳарорат, бузургиҳои lgβ, ΔH^0, ΔS^0 ва ΔG^0 барои реаксияи комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол муайян карда шуданд. **[1-М; 11-М; 14-М].**

4. Шароити оптималии синтези 8 намуди пайвасти комплексии нави нуқра(I) бо албендазол таҳия карда шуданд. Таркиб ва сохти пайвастаҳои ҳосилшуда дар асоси маълумоти таҳлили физикӣ-химиявӣ, спектроскопияи инфрасурх, рентгеноструктурӣ, масс–спекторскопия, РМЯ-спектроскопӣ ва термогравиметрӣ муайян карда шуданд. **[5-М; 10-М].**

5. Аз натиҷаҳои таҳқиқоти физикӣ-химиявӣ спектри инфрасурх ва ренгеноструктурӣ маълум гардид, ки молекулаҳои албендазол тавассути атоми нитрогени ҳалқаи пиридин ва сулфури гурӯҳи тиолӣ координатсия мешавад. **[8-М; 14-М].**

6. Хусусиятҳои биологии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол, аз ҷумла сатҳи захрнокии шадид, музминӣ, аллергенӣ ва фаъолияти зиддимикробии онҳо омӯхта шуд. Муайян гардид, ки пайвастагиҳои навсинтезшуда на танҳо хосиятҳои ғайриаллергенӣ ва ғайриангезандагиро доро мебошанд, балки захрнокии паст дошта, хосияти зиддимикробкушандагӣ низ зоҳир мекунанд. **[6-М; 7-М; 8-М; 10-М; 12-М].**

Тавсияҳо оид ба истифодаи амалии натиҷаҳои таҳқиқот

Натиҷаҳои таҳиқоти диссертасионнии анҷомдодашуда ба самти таҳқиқоти фундаменталӣ ва химияи физикӣ, аз ҷумла химияи координатсионнӣ ва равандҳои комплексҳосилкунии биометаллҳо бо биолигандҳо равона шудааст.

Маълумоти илмӣ-таҳқиқотии бадастомада оид ба пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол, таркиби стехиометрии комплексҳои ҳосилшуда, марҳилаи пайиҳам ҳосилшавии онҳо, устувории комплексҳо метавонад барои васеъ намудани корҳои илмӣ-таҳқиқотӣ оиди механизми таъсири байни ионҳои металлҳои интиқолӣ ва биолигандҳо истифода шаванд.

Муайян намудани хусусиятҳои кислотагӣ-асосиӣ ва донорӣ-аксептории албендазол, инчунин таъсири муҳити ҳалкунанда ба ҳолати ионизасия ва қобилияти комплексҳосилкунии лиганд имкон медиҳанд, ки нақши сохти албендазол дар ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионии нуқра(I) илман дақиқтар муайн карда мешавад. Муқоисаи натиҷаҳои илмии бадастомада оид ба таркиб, устуворӣ ва хусусиятҳои физикӣ-химиявии комплексҳои нурқа(I) бо албендазол

дар маҳлул ва ҳолати сахт барои муайян кардани таркиби комплекс, муҳити координатсионӣ ва сохтори кристалии онҳо мусоидат мекунад. Ин раванд барои интихоби шароити оптималии синтези пайвастагиҳои нави координатсионии нуқра(I) аҳамияти амалӣ дорад.

Дар доираи таҳқиқот инчунин хосиятҳои биологии пайвастагиҳои комплексии нурқа(I) бо албендазол омӯхта шудаанд. Натиҷаҳои бадастомада оид ба фаъолияти биологии пайвастагиҳои синтезшуда ва муқоисаи онҳо бо моддаҳои ибтидои аҳамияти муҳим дорад. Дар сурати тасдиқи самаранокии биологии пайвастагиҳои синтезкардашуда, натиҷаҳои мазкур метавонанд барои интихоби пайвастагиҳои дорои фаъолияти биологӣ ва гузаронидани таҳқиқоти минбаъдаи фармакологӣ ва токсикологӣ асос гузорад.

Усулҳои таҳияшудаи синтези комплексҳо барои олимон дар соҳаи синтези пайвастагиҳои координатсионӣ, донишҷӯён, магистрон, унвонҷӯёни кафедраҳои химияи татбиқӣ, физикӣ ва коллоидии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, инчунин кафедраи кимиёи фармасевтӣ ва заҳршиносии Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи А.Сино бо мақсади муайян намудани фаъолияти биологии пайвастагиҳо тавсия дода мешаванд.

Рӯйхати мақолаҳое, ки дар маҷаллаҳои илмӣ ба тавсияи Комиссияи Олии Аттестатсионии назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон нашр шудаанд:

[1-М]. Бойназарова К.У. Физико-химических свойств координационного соединения серебра(I) с альбендазолом/ С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов// Доклады Академии наук Республики Таджикистан. 2023. Т. 66. -№ 8-7. -С. 445-452.

[2-М]. Бойназарова К.У. Исследование комплексообразования в системе Ag(I)-альбендазол-уксусная кислота / С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Доклади Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон. 2025. Т. 68. -№ 9-10. -С. 879-888.

[3-М]. Бойназарзода К.У. Комплексхосилкунии нуқра (I) бо албендазол /К.У. Бойназарзода // Паёми Донишгоҳи давлатии Бохтар ба номи Носири Хусрав (маҷаллаи илмӣ) силсилаи илмҳои табиӣ. - Бохтар. - 2026. - № 2/3 (150).

[4-М]. **Бойназарзода К.У.** Комплексҳосилкунии нуқра (I) бо албендазол дар ҳалкунандаи органикӣ-ДМСО/ **К.У. Бойназарзода,** С.Г. Ёрмамадова, У. Раҷабов //Паёми Донишгоҳи давлатии Данғара, Бахши илмҳои табиӣ. -Данғара.-2026.-№1(35).-С.149-155.

[5-М]. Бойназарова К.У. Синтез ва омӯзишинуқра(I) боалбендазол/

С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов// Коференсияи байналмиллалии илмию амалии «Рӯшоноии адабӣ дар илм»,- Алмата.- 2022.-С.116-119

[6-М].Бойназарова К.У. Синтез ва хосияти биологии пайвасти комплексии Ag(I) бо албендазол/ С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов // Конференсияи ҷумҳуриявии илмию назариявии ҳайати устодону кормандони ИИТ ДМТ бахшида ба «Солҳои рушди саноат (2022-2026)» ва «Бузургдошти Мавлоно Ҷалолиддини Балхи».Душанбе.-2022.-С.-301-302.

[7-М].Бойназарова К.У. Хусусиятҳои биологии нитрати нуқра бо албендазол /С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов // Конференсияи байналмилалии илмию амалии «Конфронси илмӣ-амалии байналмилалӣ ба муносибати 70-солагӣ «Тибби муосир: анъанаҳо ва навовариҳо».-Душанбе.-2022.-Т.-2.-С.566-567

[8-М].Бойназарова К.У. Хусусиятҳои физикӣ-кимиёвӣ ва биологии сулфати мис бо албендазол // С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов // Маводҳои Конфренсияи XVIII илмӣ-амалии олимони ҷавон ва донишҷӯёни ДДТТ ба номи Абӯалӣ ибни Сино «Илм ва инноватсия дар тиб-2023». –Душанбе.2023.-Т.-2.-С.250.

[9-М]. Бойназарова К.У. Омӯзиши равандҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол дар маҳлулҳои сиркой-обӣ // С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов //Мактаби-конфронси умумироссиягии олимони ҷавон «ДНИ НАУКИ В ИГХТУ».Иваново.-2023.-С.188.

[10-М]. Бойназарова К.У. Хусусятҳои физика-химиявӣ ва биологии нуқра(I) бо албендазол// С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов // Консеренсияи байналмиллалии илмӣ-амалӣ дар мавзуи «Рушди самтҳои нав дар химия ва технологияи химиявӣ» бахшида гиромидошти хотираи академики АМИТ, доктори илмҳои химия, профессор Сафиев Ҳайдар.-2023.-С.149-150.

[11-М]. Бойназарова К.У.Омӯзиши ҳосилшавии комплексии Ag(I) бо (5-(пропилтио)-1н бензимидазол-2-ил)кислотаи карбамини метил// С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов// конференсияи илмӣ-назариявии байналмиллалӣ дар мавзӯи «Рушди илмҳои химия, технология ва экология» бахшида ба 20-солагии таъсисёбии кафедраи «Технология ва экологияи химиявӣ» ва «Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф».- Душанбе.-2023.-С.86.

[12-М]. Бойназарова К.У. Хусусиятҳои пайвастагиҳои комплексии нуқра бо албендазол// С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов //

Самтҳои афзалиятноки тадқиқот дар соҳаи тиб: кимиёи тиббӣ, биокимиё ва биофизика. Маҷмӯаи тезисҳои Анҷумани байналмиллалии илмӣ- амалӣ».-Бухоро.-2024.-С.343-344.

[13-М]. Бойназарова К.У. Омӯзиши комплексҳосилкунии нуқра() бо албендазол дар ҳарорати 298К//С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раҷабов // Конференсияи умумидонишгоҳи илмию назариявии донишҷӯён, магистрон ва унвончӯёни ДМТ бахшида ба соҳаи рушди иқтисоли рақамӣ ва инноватсия (2025-2030), «700 солагии шоири ғазалсарои тоҷику форс Ҳофизи Шерозӣ» ва «115-солагии шоири халқии Тоҷикистон Боқӣ Раҳимзода».-Душанбе.-2025.-С.449-454.

[14-М]. Бойназарова К.У. Комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол дар муҳити ДМСО// Конференсияи байналмилалии илмӣ-амалӣ дар мавзӯи«Проблемаҳои актуалӣ, ҳалли онҳо ва дурнамои рушди химияи муосир» дар Донишкадаи соҳибкорӣ ва педагогии Денов, Ҷумҳурии Ӯзбекистон.-2025.-С.179.

Патент

15-М]. Бойназарова К.У. Сулфати мис албендазол дорои хосияти зиддигиҷҷавӣ/ Раджабов У.Р., Ёрмамадова С.Г., Ибодзода С.Т., Султонов Р.А., Бойназарова К.У.// Патент РТ №TJ.1432. 2023г.

НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ТАДЖИКИСТАНА

На правах рукописи

УДК: 544.2.3.
ББК: 24.51.53(2Т)
Б-77



БОЙНАЗАРЗОДА КИБРИЁ УСМОН

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ СЕРЕБРА(I) С АЛЬБЕНДАЗОЛОМ

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.5. Физическая химия

Душанбе – 2026

Диссертация выполнена на кафедре прикладной химии химического факультета Таджикского национального университета и кафедре фармацевтической химии и токсикологии ГОУ "Таджикский государственный медицинский университет имени Абуали ибни Сино".

Научный руководитель: **Ёрмамадова Саврибегим Гулмамадовна –** кандидат химических наук, доцент кафедры прикладной химии Таджикского национального университета

Научный консультант: **Раджабов Умарали –** доктор химических наук, профессор кафедры фармацевтической и токсиологической химии ГОУ«Таджикский государственный медицинский университет имени Абуали ибни Сино»

Официальные оппоненты: **Джураев Тухтасун Джураевич** – доктор химических наук, профессор кафедры металлургии Таджикского технического университета имени академика М. С. Осими.

Курбонов Амиршо Соҳибназарович – директор филиала Агентства химической, биологической и ядерной безопасности Национальной академии наук Таджикистана в Хатлонской области.

Ведущая организация: **Государственное учреждение «Институт химии имени В.И. Никитина» Национальной академии наук Таджикистана**

Защита состоится «03» декабря 2026 года в 10:00 часов на заседании диссертационного совета 6D. КОА – 136 при Таджикском национальном университете. Адрес: 734025, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17 Таджикский национальный университет, главный корпус, зал диссертационного совета.

E-mail: tojiddin_8989@mail.ru Тел.: (+992) 936002805

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Таджикского национального университета www.tnu.tj

Автореферат разослан «____» _____ 2026 года

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат химических наук Бобокалонов Т.Б.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. В последние годы биометаллические соединения, особенно серебро с азолами, играют важную роль в ветеринарии и медицине. Серебро является микроэлементом, важным для функционирования внутренних органов и систем, а также веществом, воздействующим на патогенные бактерии и вирусы. Азолы, в свою очередь, обладают противомикробной активностью в отношении патогенных возбудителей желудочно-кишечных заболеваний. Как отметил Суфиев Т.Д: «антимикробное действие координационных соединений серебра и тирптофана на кишечную палочку зависит от концентрации серебра,а его механизм действия заключается в ингибировании активности ферментов,участвующих в процессах клеточного дыхания и окислительного и восстоновительного фосфолированния» [1].

Исследования А.С. Содатдиновой и соавторов сказанно что «особеностью в термодинамике комплексообразования Ag(I) с 1МИ растворителях вода-диметилсульфоксид являетс увеличением устойчивости комплекса с ростом содержания ДМСО в растворителе за счет значительной стабилизации сольватной оболочки комплексной частицы при усилении сольватации иона металла и лиганда» [2].

Кроме того, 5-нитроимидазолы также активны против некоторых микроаэрофилов и эффективно используются для лечения заболеваний, вызываемых этими микроорганизмами.

В современном мире сфера здравоохранения охватывает широкий спектр лекарственных средств, проявляющих противопаразитарную активность. Тем не менее, все они имеют определенную степень токсичности и могут оказывать негативное воздействие на организм. По мнению Е.Н. Падейской: «Альбендазол — это антимипрозитарный и антигельминтный препарат гуппы бензимидазола карбомата, механизм действия которого основан на угнетении полимеризации тубулина, что вызывает нарушение метаболизма и гибель паразитов»[3].

Формирование координационных комплексов серебра (I) с органическими лигандами приводит к увеличению устойчивости обарзующихся соединений. Несмотря на это, комплекс серебра(I) с альбендазолом до сих пор не был придметом детального изучения, и лекарственные средства, основанные на биокоординационных соединениях серебра (I) с азолами пока не существуют.Таким образом, разработка методов повышения устойчивости таких систем является актуальным направлением исследований.Как указанно в работе Е.В.Леглер основная задача исследования заключается в «индентификация сопржённых кислотно-основных и хелатных

комплексных форм серебра(I) с трифункциональнимы аминокислотами в биологически важных нетральных водных расторах и термодинамические оценки констант их образования». Кроме того автор отмечает: «как строение лиганд влияет на устойчивостй и состава комплекса». Он отмечает, что: «изучение процессов комплексообразования серебра (I) с многофункциональными лигандами имеет важное научное и практическое значение». Леглер Е.В показал, что: «серебро(I) имеет тенденцию образовывать стабильные координационные соединения с такими аминокислотами посредством донорных и акцепторных связей с атомами азота и кислорода. Особое внимание уделяется влиянию pH среды, ионной силы раствора и природы функциональных групп на процесс комплексообразования» [4]. Исходя из этого, необходимо изучать методы комплексообразования азолов с биологически активными ионами металлов, такими как серебро (I), и производить на их основе лекарственные препараты, обладающие антимикробной активностью и применяемые против патогенных микроорганизмов.

Степень научной разработанности проблемы. В научной литературе имеются сведения о синтезе и строении комплексных соединений серебра(I) с азолами и албендазолами в различных водных и кислотных средах, а также в водно-спиртовых растворах, опубликованные рядом зарубежных и отечественных ученых. В частности, в научных работах Белеванцева В.И. [5], Снесарева С.В. [6], Буду Г.В. [7], Юсупова З.Н. [8], Рахимовой М.М. [9], Аминжонова А.О. [10], Сафармамадзоды С.М. [11], Бекназаровой Н.С. [12], Мудинова Х.Г. [13] и др. изучалось комплексообразование переходных металлов с органическими лигандами.

Изучение комплексов серебра(I) с албендазолам имеет значение с точки зрения электролитов и биокоординационной химии, поскольку позволяет искать новые серебряные электролиты и биологически активные соединения серебра.

Комплексообразование серебра с органическими лигандами в растворе изучалось потенциометрическим методом, после чего они были выделены в твердом виде. С помощью элементного, термического, ИК-спектроскопического, кондуктометрического и электронно-парамагнитного резонансного и рентгеноструктурного анализов были определены строение и состав комплексных соединений серебра.

Несмотря на существующие исследования, анализ литературы показал отсутствие сведений о комплексообразовании серебра с албендазолом в водно-уксусной среде в зависимости от температуры, ионной силы, константы устойчивости и термодинамических величин.

Связь исследования с программами (проектами) и научными тематиками. Научно-исследовательская работа Бойназарзоды

Кибриё Усмона проводилась на кафедре прикладной химии Таджикского национального университета по научной теме «Переработка местных минералов, промышленных отходов, а также изучение комплексов серебра с медью и железом с органическими лигандами» и на кафедре фармацевтической химии и токсикологии Таджикского государственного медицинского университета имени Абуали ибн Сино в рамках государственного задания Республики Таджикистан, проекты № GR0122TJ1433 и GR0121TJ208.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Целью исследования. Данное исследование направленно на исследование комплексообразования серебра с альбендазолом, изучение физико-химических свойств образующихся веществ, определение значений констант устойчивости координационных соединений, термодинамических функций, влияния факторов на устойчивость образующихся комплексов в среде 6 моль/л уксусной кислоты и ДМСО, изучение их антимикробных, противопаразитарных и противогрибковых свойств.

Задачи исследования: Для достижения поставленной цели было предусмотрено выполнение следующих задач:

- определение процесса комплексообразования в системах $AgNO_3/Ag_0$-Алб-CH_3COOH и $AgNO_3/Ag_0$-Алб -ДМСО с использованием метода потенциометрического титрования;
- определение константы устойчивости и количества комплексных соединений в системах $AgNO_3$/Ag0-Алб-CH_3COOH и $AgNO_3$/Ag0-Алб-ДМСО методом Фридмана, а также нелинейный метод наименьших квадратов;
- исследование влияния температуры, ионной силы и природы лиганда на константу устойчивости и процесс комплексообразования серебра(I) с албендазолом, а также определение термодинамических констант на основе метода, предложенного Васильевым, для системы $AgNO_3$/Ag0-Алб-ДМСО;
-определение энтальпии, энтропии и энергии Гиббса (ΔH^0, ΔS^0,ΔG^0,) для процесса комплексообразования серебра(I) с албендазолом на основе общих термодинамических констант;
- определение количества образующихся комплексных частиц в различных диапазонах концентраций лиганда с использованием результатов диаграмм распределения в растворах 6 моль/л уксусной кислоты и ДМСО, а также применение полученных результатов в синтезе новых комплексных соединений серебра(I) с албендазолом;
- определение состава и строения соединений серебра(I) с албендазолом физико-химическими методами, включая инфракрасную спектроскопию (ИК), масс-спектроскопию, рентгеноструктурный анализ, ЯМР и дериватографию;

- биологическое исследование свойств новосинтезированных соединений серебра(I) с албендазолом.

Объект исследования: Изучение комплексообразования серебра(I) с албендазолом на основе потенциометрического анализа и их синтез. Анализ физико-химических и биологических свойств комплексных соединений серебра(I) с албендазолом

Тема исследования: Комплексообразование серебра (I) с албендазолом в среде 6 моль/л уксусной кислоты и ДМСО.

Научная новизна исследования:

-впервые проанализирован процесс комплексообразования серебра(I) с албендазолом с использованием потенциометрического метода;

-установлены состав, области существования, а также максимальный выход комплексов серебра(I) с албендазолом;

-разработана методика направленного синтеза комплексных соединений серебра(I) с албендазолом;

-состав и структура комплексных соединений серебра(I) и албендазола исследованы с применением методов ИК-спектроскопии, масс-спектроскопии, рентгеноструктурного анализа, ЯМР и дериватографии;

-впервые изучены биологические свойства (безвредность, острая и хроническая токсичность, аллергенные свойства) и антимикробная активность комплексных соединений серебра(I) с данным лигандом.

Теоретическая и практическая значимости исследования:

-полученные результаты исследования комплексов серебра(I) с албендазолом используются для интерпретации и прогнозирования процессов комплексообразования серебра(I);

-установленные значения констант устойчивости комплексов серебра(I) с албендазолом являются справочным материалом, восполняющим пробелы в существующей литературе. Они могут быть использованы учеными, проводящими исследования в области комплексообразования ионов металлов с серо- и азотсодержащими лигандами, а также при синтезе новых соединений в сфере координационной химии;

-результаты диссертационной работы могут быть использованы студентами, магистрантами и соискателями кафедр физической химии, фармакологии и токсикологии при проведении спецкурсов, а также для выполнения научно-исследовательских работ.

-разработанные в данной работе методы синтеза координационных соединений могут быть применены для направленного синтеза новых комплексных соединений других переходных металлов с серо- и азотсодержащими лигандами;

-синтезированные биологически активные вещества на основе комплексов серебра(I) с албендазолом могут широко применяться в

качестве антибактериальных, противогрибковых, антигельминтных и противопаразитарных средств для лечения заболеваний животных, вызываемых микроорганизмами Escherichia coli, сальмонеллой, пастереллой и бруцеллой.

Положения, выносимые на защиту:

- установить законы ионизации альбендазола в исследуемых средах, включая уксусную кислоту с концентрацией 6 моль/л и диметилсульфоксид (ДМСО), на основе результатов потенциометрических исследований. Определить численные значения констант ионизации, зависимость протонированной, нейтральной и дипротонированной форм альбендазола от значений pH различных сред. Определить константы устойчивости комплексов серебра(I) с альбендазолом в заданных экспериментальных условиях с использованием потенциометрического метода и математической обработки методом нелинейных наименьших квадратов. Рассчитать значения изменения энтальпии (ΔH), энтропии (ΔS) и свободной энергии Гиббса (ΔG) образования комплексов на основе экспериментальных результатов;

- предложить методы получения комплексных соединений серебра(I) с альбендазолом и оптимальные условия их синтеза. Анализ элементного состава, функциональных групп, структурных особенностей синтезированных соединений на основе результатов элементного анализа, инфракрасной спектроскопии (ИК), рентгеноструктурного анализа, ядерно-магнитной резонансной спектроскопии (ЯМР), термогравиметрического анализа и масс-спектрометрии. Определение взаимосвязи между составом, стабильностью структуры комплексов и средой раствора. Обоснование соответствующей модели структуры комплексов на основе экспериментальных данных;

- определение биологических свойств и показателей безопасности синтезированных комплексных соединений на основе результатов токсикологических и микробиологических исследований. Анализ уровня острой и хронической токсичности, раздражающего действия, а также антимикробной и противогрибковой активности синтезированных соединений.

Степень достоверности результатов. Достоверность полученных данных была обоснована применением современных методов физических и химических исследований, а также статистической обработкой результатов. Состав и структура продуктов синтеза комплексных соединений серебра с албендазолом были определены на основе инфракрасной спектроскопии (ИК), дериватографии, рентгеноструктурного анализа, масс-спектрометрии и ЯМР-спектроскопии. Биологические свойства данных комплексных

соединений – острая токсичность, антимикробная активность и аллергенность – также были экспериментально установлены.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности:

Диссертация соответствует специальности научных работников 1.4.5. Физическая химия по следующим направлениям:

-термодинамика химических процессов; учение о химическом равновесии; статистическая термодинамика – глава 3; разделы 3.1-3.4.

-механизмы сложных химических процессов, процессы плавления и кристаллизации – глава 3; разделы 3.1-3.2.

-теория растворов, межмолекулярные и межатомные взаимодействия – глава 3; раздел 3.1.

-исследование закономерностей изменения состава химических систем в зависимости от температуры – глава 3; разделы 3.2, 3.3.

Личный вклад соискателя ученой степени в исследование. Автор диссертации принимал непосредственное участие во всех этапах выполнения экспериментов, разработке методов и методик исследования, поиске и анализе существующей научной литературы по данной теме, обсуждении результатов, формулировании выводов и написании научных статей. Исследовательская работа и экспериментальная база были обеспечены на кафедре прикладной химии Таджикского национального университета, кафедре фармацевтической и токсикологической химии, а также в центральной научно-исследовательской лаборатории Таджикского государственного медицинского университета имени Абуали ибни Сино в городе Душанбе.

Утверждение и внедрение результатов диссертации. Основные результаты диссертационной работы были представлены и обсуждены на конференциях:

Международная научно-практическая конференция «Литературное освещение в науке» (Казахстан, Алмата, 2022); международная научно-практическая конференция «Современная медицина: традиции и инновации», посвященная 70-летию (Душанбе, 2022);материалы XVIII научно-практической конференции молодых ученых и студентов ТГМУ имени Абуали ибни Сино «Наука и инновации в медицине-2023» с международным участием (Душанбе, 2023); всероссийская школа-конференция молодых ученых «ДНИ НАУКИ В ИГХТУ» (Иваново, 2023);международная научно-практическая конференция на тему «Развитие новых направлений в химии и химической технологии», посвященная памяти академика АН РТ, доктора химических наук, профессора Сафиева Хайдара (2023);международная научно-теоретическая конференция на тему «Развитие химии, технологии и экологии», посвященная 20-летию

кафедры «Химическая технология и экология» и «Двадцатилетию изучения и развития естественнонаучных, точных и математических дисциплин в сфере науки и образования» (Душанбе, 2023);приоритетные направления исследований в области медицины: медицинская химия, биохимия и биофизика. Сборник тезисов Международной научно-практической конференции» (Бухара, 2024); «Актуальные проблемы современной химии, методы их решения и перспективы развития» (Узбекистан, Денау, 2025); международная научно-практическая конференция на тему «Комплексные соединения и аспекты их применения» (Душанбе, 2025).

Республиканская научно-теоретическая конференция преподавателей и сотрудников Института информационных технологий Таджикского государственного университета имени Абуабдуллоха Рудаки, посвященная «Годам развития промышленности (2022-2026)» и «Празднованию Мавлоно Джалолиддина Балхи» (Душанбе, 2022); общеуниверситетская научно-теоретическая конференция студентов, магистрантов и аспирантов Таджикского государственного университета имени Абуабдуллоха Рудаки, посвященная сфере развития цифровой экономики и инноваций (2025-2030), «700-летию таджикско-персидского газелиста Хафиза Шерази» и «115-летию народного поэта Таджикистана Баки Рахимзода» (Душанбе, 2025).

Публикации по теме диссертации. По результатам научных исследований опубликовано всего 15 статей и тезисов статей, из которых 4 – в рекомендованных журналах Высшей аттестационной комиссии Республики Таджикистан, а 11 тезисов статей – на международных и внутренних конференциях.

Структура и объем диссертации. Кандидатская диссертация объемом 157 страниц компьютерного набора состоит из введения, четырех глав, заключения и списка из 142 наименований литературы на государственном и иностранных языках. Диссертация содержит 30 рисунков и 32 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ СЕРЕБРА(I) С АЛЬБЕНДАЗОЛОМ В ОРГАНИЧЕСКОМ РАСТВОРИТЕЛЕ

Анализ процесса комплексообразования в системе серебро(I)-альбендазол-уксусная кислота

В рамках данного исследования мы изучили, как сереба(I) взаимодействует с альбендазолом в 6 мол/л растворе уксусной кислоты. Константа кислотной ионизации альбендазола была определенна с помощью pH - метрического титрования (см. рисунок 1). Этот анализ показал, что альбендазол в этих условиях видет себя как

нейтральная молекула.

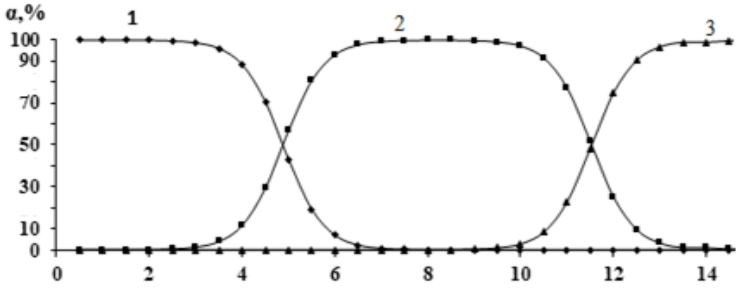


Рисунок 1.- Диаграмма распределения альбендазола и продукта его ионизации в растворе уксусной кислоты в широком диапазоне pH. Кривые: 1-L+, 2-L, 3-L-.

Таким образом, диаграмма распределения альбендазола показывает, что в диапазоне pH от 4,0 до 10,5 лиганд находится в молекулярной форме. Это свидетельствует о его высокой устойчивости в нейтральной среде и способности участвовать в комплексообразовании в этой среде.

При изучении комплексообразующих свойств ионов серебра с органическими лигандами, особенно с альбендазолом, важную роль играет обратимость серебряного электрода (Ag/Ag+) в окислительно-восстановительной системе.

По этой причине для определения стандартного потенциала системы Ag^+-CH_3COOH-H_2O была изучена зависимость окислительного потенциала от различных концентраций серебра в нейтральной среде.

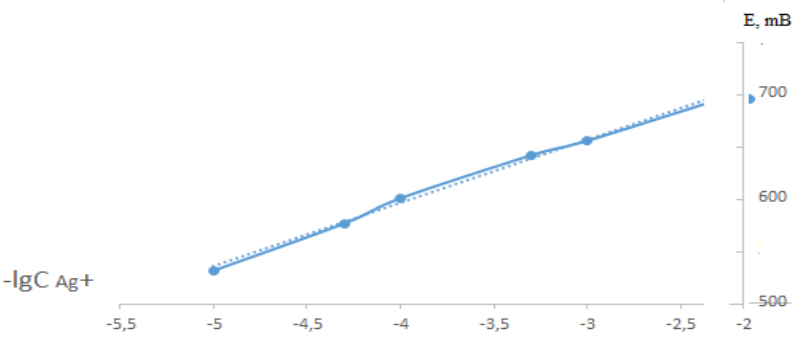


Рисунок 2. -Обратимость серебряного электрода в системе Ag^+-CH_3COOH при концентрациях моль/л: 1) $1\cdot10^{-5}$;2) $5\cdot10^{-5}$; 3) $1\cdot10^{-4}$; 4) $5\cdot10^{-4}$;5) $5\cdot10^{-3}$

Как видно из рисунка, зависимость окислительного потенциала

(E) от концентрации ионов серебра (Ag+) линейна, а тангенс её угла равен 60,36°. При экстраполяции прямой к оси абсцисс был определён стандартный потенциал системы, равный 837,52 мВ.

Максимальное число комплексов альбендазола с ионами серебра(I), т.е. координированных, было определено по зависимости ΔE от -lgC_L (см. рис. 3) с последовательным увеличением органического лиганда. Наклон этой зависимости приведён при различных температурах и ионной силе 0,1 моль/л.

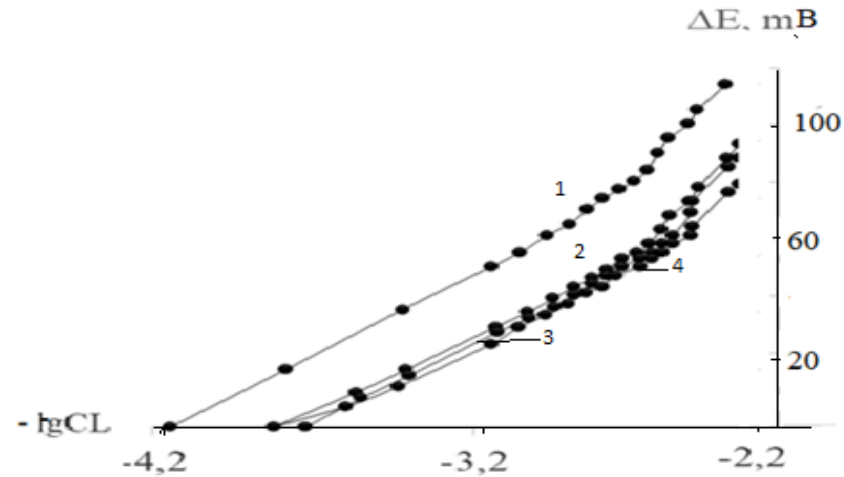


Рисунок 3.-Зависимости ΔE от -lgC_L для комплексных частиц серебра(I) с альбендазолом при темпетарурах от 288,16-318,16 К., I=0,1 мол/л ($NaNO_3$). T(1)=288,16 К,T(2)=298,16 К, T(3)=308,16 К, T(4)=318,16 К

На рисунке 2 показана зависимость ΔE от -lgCL при различных температурах и ионной силе 0,1 моль/л. Как видно из рисунка, эти зависимости нелинейны и состоят из двух прямолинейных участков. Тангенс угла наклона в этих зависимостях равен следующим величинам: при температурах 288,16 К – 0,57168 В/моль, 298,16 К – 0,59153 В/моль, 308,16 К – 0,61136 В/моль, 318,16 К – 0,63124 В/моль.

Из этих результатов следует, что в системе Ag+-CH_3COOH-H_2O в комплексообразовании с серебром участвуют две молекулы албендазола.

В таблице 1 в качестве примера приведены результаты потенциометрического титрования и рассчитанные данные lg[Ag(I)], lg[L], lgφ и F0 для системы Ag(I) – албендазол–CH_3COOH при температурах 288,16-318,16 К.

Таблицы 1. Данные по определению равновесных концентраций ионов серебра (I) и альбендазола при 298,16 К; C_L=1,0·10^{-2} моль/л; $C_{Ag(I)}$= 1·10^{-4} моль/л; J=0,1 моль/л $NaNO_3$.

ΔE, мВ	C_L моль/л	C_{Ag} моль/л	Lgφ	[L] моль/л
1,00	1,5·10^{-4}	9,8·10^{-5}	1,6 ·10^{-2}	1,4 ·10^{-4}
13,00	3,4 ·10^{-4}	9,6 ·10^{-5}	2,1 ·10^{-1}	2,7·10^{-4}
21,00	4,9 ·10^{-4}	9,5 ·10^{-5}	3,5 ·10^{-1}	3,8·10^{-4}
36,00	8,7 ·10^{-4}	9,1 ·10^{-5}	6,0 ·10^{-1}	7,3 ·10^{-4}
41,00	1,0 ·10^{-3}	8,9 ·10^{-5}	6,9 ·10^{-1}	9,2 ·10^{-4}
46,00	1,2 ·10^{-3}	8,7 ·10^{-5}	7,7 ·10^{-1}	1,1 ·10^{-3}
50,00	1,4 ·10^{-3}	8,5 ·10^{-5}	8,4 ·10^{-1}	1,2 ·10^{-3}
53,00	1,6 ·10^{-3}	8,3 ·10^{-5}	8,9 ·10^{-1}	1,4 ·10^{-3}
56,00	1,7 ·10^{-3}	8,2 ·10^{-5}	9,4 ·10^{-1}	1,6 ·10^{-3}
60,00	1,9 ·10^{-3}	8,0 ·10^{-5}	1,014	1,8 ·10^{-3}
61,00	2,1 ·10^{-3}	7,8 ·10^{-5}	1,031	2,0 ·10^{-3}
63,00	2,3 ·10^{-3}	7,6 ·10^{-5}	1,064	2,2 ·10^{-3}
66,00	2,5 ·10^{-3}	7,4 ·10^{-5}	1,115	2,3 ·10^{-3}
69,00	2,7 ·10^{-3}	7,2 ·10^{-5}	1,166	2,5 ·10^{-3}
77,00	3,0 ·10^{-3}	6,9 ·10^{-5}	1,301	2,9 ·10^{-3}
81,00	3,2 ·10^{-3}	6,7 ·10^{-5}	1,369	3,1 ·10^{-3}
93,00	3,9 ·10^{-3}	6,0 ·10^{-5}	1,572	3,8 ·10^{-3}
97,00	4,3 ·10^{-3}	5,6 ·10^{-5}	1,639	4,2 ·10^{-3}

Как видно из этих таблиц, с увеличением концентрации лиганда разница потенциальной энергии возрастает, что указывает на уменьшение окислительного потенциала в системе. Причиной уменьшения окислительного потенциала является образование в исследуемой системе частиц комплекса серебра(I) с альбендазолом. Для того чтобы рассчитать общие константы устойчивости образовавшихся комплексов, были задействованых наименьших квадратов (НМНК). Используя метод Фридмана, мы получили график зависимости lgφ то lgC_L. Этот график оказался нелинейным и имел вид двух соединенных под углом прямых линий. Определив точки пересечения каждой из этих прямых с осью абсцисс путем экстраполяции, мы смогли вычислить значения констант общей устойчивости для частиц данного комплекса (см. рис.4.)

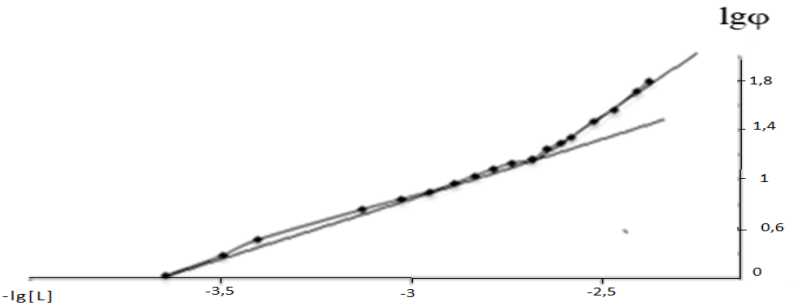


Рисунок 4. - Зависимость Δф от -lg[L] для комплексов серебра(I) с альбендазолом при температуре 298,16 К и ионной силе 0,1 моль/л.

Для того чтобы узнать насколько прочно серебра (i) связывается с альбендазолом, мы использовали специальные комьпютерные программы.Эти программы работают по принципу поиски наилучщего соответствия данных, минизируя ошибки.

В диссертации Содатдиновой А.С. отмечается,что «константы устойчивости серебра(I) с органическими лигандами были рассчитанны методом нелинейных наименьших квадратов,который широко применетс дл обработки данных комплексообразования и определени параметров равновесия»[14].

Согласно данным, приведённым в истечнике для расчёта констант устойчивости комплексов серебра (I) с альбендазолом применялись компьютерные программы, использующие метод нелинейных наименьшиш квадратов. Кроме того, общая константа устойчивости рассчитаны тем же методом, а результаты, полученные двумя независимыми способами, показали хорошее совпадение»[5]. Общая константа устойчивости была определена методом нелинейных наименьших квадратов, а средние результаты, рассчитанные двумя способами, приведены в таблице 2.

Таблица 2. -Константы устойчивости комплексов серебра(I) с альбендазолом при температуре 288,16 -318,16 К и ионной силе 0,1 моль/л ($NaNO_3$).

Методы	B / T, K	288,16	298,16	308,16	318,16
Фридман	$lg\beta_1$	4,19±0,06	3,75±0,05	3,61±0,04	3,40±0,03
	$lg\beta_2$	7,12±0,09	6,61±0,08	6,47±0,07	6,21±0,08
НМНК	lg β_1	4,17±0,07	4,01±0,06	3,63±0,05	3,42±0,04
	$lg\beta_2$	7,14±0,08	6,93±0,07	6,51±0,06	6,25±0,09
Усредённ ое значение	$lg\beta_1$	4,18±0,065	3,88±0,055	3,62±0,045	3,41±0,035
	$lg\beta_2$	7,13±0,085	6,77±0,075	6,49±0,065	6,23±0,085

Как видно из таблицы, для расчета константы устойчивости комплексов были использованы два современных метода. Результаты, полученные обоими методами, очень близки друг к другу, что указывает на правильность механизма реакции. Если мы снова посмотрим на таблицу, то увидим, что с повышением температуры значения $lg\beta_1$ и $lg\beta_2$ постепенно уменьшаются, то есть устойчивость комплексного соединения серебра с альбендазолом снижается сповышением температуры.

После проведения исследования и определения значений их констант устойчивости с использованием следующего уравнения

$$\Delta E_{\text{теоротический}}=\frac{2,3RT}{nFlog(1+\beta\mathbf{1}[\mathbf{Alb}]+lg\beta 2)}+++ \qquad (1)$$

Мы сравнили экспериментальные результаты с теоретическими и подтвердили достоверность предложенной модели, а именно комплексообразования серебра (I) с альбендазолом.

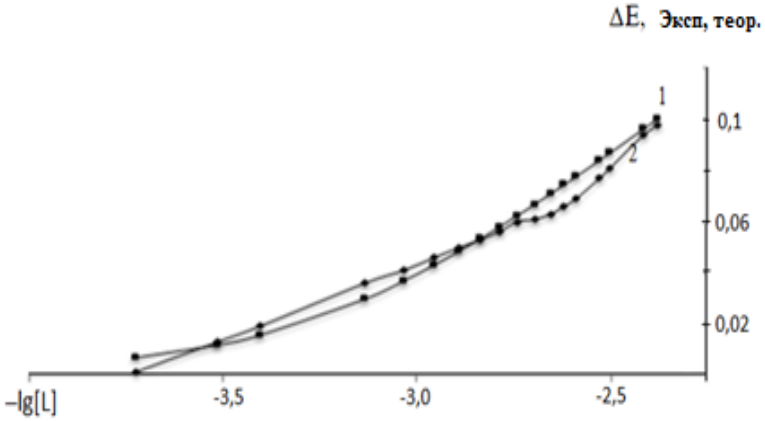


Рисунок 5.- Зависимость ΔE от -lg[L] для системы Ag-альбендазол-ДМСО при температуре 298,16 К. Кривые: 1) – ΔE теоретическое 2) – ΔE экспериментальное

Сравнение процесса комплексообразования серебра(I) с альбендазолом показало, что в системе Ag+-альбендазол-CH3COOH образуются две формы комплексных соединений.

Общая константа устойчивости $lg\beta_2$ для имидазольного комплекса составила 4,12 единиц.

С помощью метода температурного коэффициента из уравнения $\Delta H–T\Delta C=-RTlg\beta i$ графически были найдены значения ΔH и ΔS реакций комплексообразования серебра (I) с альбендазолом (рис. 6). Значение

ΔG было определено из уравнения ΔG=ΔH-TΔS.

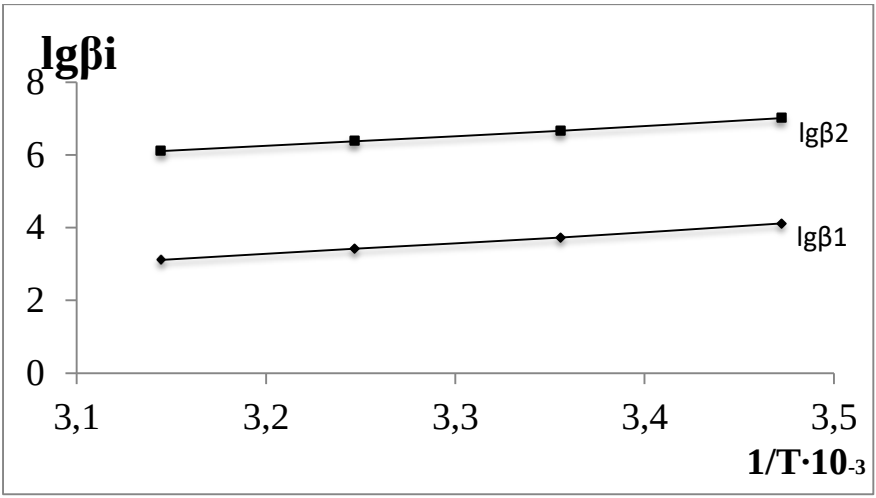


Рисунок 6. -Зависимости $lg\beta_i$ от 1/T до комплекс частиц состава: 1 - $[Ag(L)NO_3]^+$; 2 - $[Ag(L)_2(NO_3)_2]^+$ при 298,16 К

Как видно из рисунка 6, в температурном диапазоне 298,16 К зависимость lgβi от 1/T для всех комплексов является линейной. Для определения термодинамических функций (ΔH, ΔG) использовалось уравнение Кларка-Глю.

В этом уравнении анализировалась зависимость lgβi от 1/T. Значение ΔH определялось понаклон упрямой, означение ΔG — поточке пересечения прямой с осью ординат. Значение ΔS рассчитывал ось по уравнению Гиббса. В таблице 3 представлены термодинамические функции реакции образования комплексов серебра(I) с альбендазолом, рассчитанные методом температурных коэффициентов (а) и с использованием уравнения Кларка-Глю (б).

Таблица 3.-Величины термодинамических функций процесса образования комплексов серебра(I) с альбендазолом по методу Кларка-Глю.

Реаксия и образования комплексов	ΔH,кДж/мол	ΔG,кДж/мол	ΔS,кДж/мол
$Ag+L\rightarrow[AgL]^+$	-58,62±2,3	-21,40±4,8	-61,13±7,8
$Ag+2L\rightarrow[Ag(L)_2]^+$	-53,0±0,8	-43,16 ±1,6	-49,89±0,7

Данные в таблице показывают, что термодинамические функции, рассчитанные двумя методами, очень близки друг к другу. Как известно, на всех стадиях комплексообразования серебра(I) с альбендазолом значение ΔG отрицательно, что указывает неспонтанный характер процесса. С точки зрения энергии,

образование биядерных комплексов серебра с альбендазолом более стабильно, чем моноядерных. То есть, при образовании моноядерного комплекса серебра(I) с альбендазолом выделяется 21,0 кДж/моль энергии, а для биядерных комплексов — 43,16 кДж/моль энергии.

Если известны константы устойчивости комплексного соединения, можно легко рассчитать его молярную долю.

С этой целью, для определения области образования комплексных соединений в системе $AgNO_3$-альбендазол-CH_3COOH при температуре 298,16 К, была построена диаграмма распределения комплексных частиц, образовавшихся в системе (рис. 7).

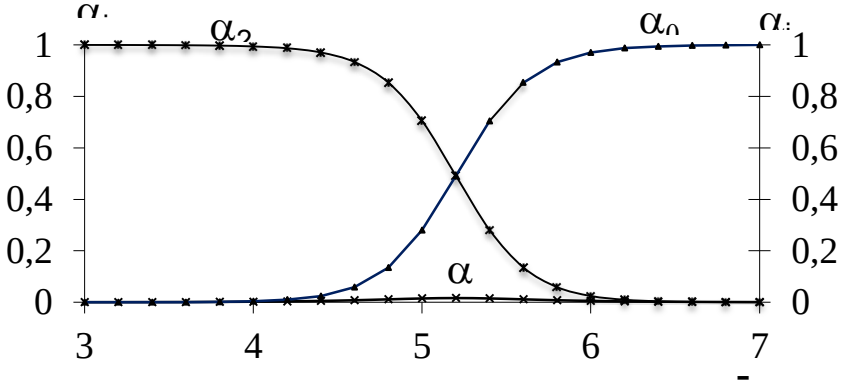


Рисунок 7.- Кривые диссоциации комплексов альбендазола с Ag(I) при 298,16 К, гдеα_0- Ag+ ;α_1-$[AgL]^+$; α_2-$[AgL_2]^+$

Диаграммы распределения продемонстрировали, что при реакции ионов серебра(I) с альбендазолом в растворе образуется около 99% моноядерных комплексов. Это говорит о высокой термодинамической устойчивости таких комплексов.

Комплексообразование серебра(I) с альбендазолом в органическом растворителе – ДМСО – также изучалось при тех же температурах от 288,16 до 318,16 К и ионной силе 0,05, 0,1, 0,5, 1,0 моль/л, и были получены значимые результаты.

На этой основе были синтезированы комплексы ионов серебра(I) с альбендазолом в твердом виде как в 6 моль/л уксусе, так и в ДМСО. Из раствора были выделены комплексные соединения в соотношении 1:1 и 1:2 в виде серовато-белого и коричневого порошка.

В целом, результаты показали, что альбендазол образует стабильные комплексы с ионами серебра(I) в 6 моль/л уксусной кислоте, хотя их устойчивость ниже, чем у лигандных комплексов, образующихся в ДМСО.

Элементный анализ комплексов серебра(I) с альбендазолом

На основании вышеизложенных исследований мы изучили методику синтеза 8 комплексов серебра с альбендазолом. В таблице 4 представлен количественный анализ наличия элементов в синтезированных комплексных соединениях

Таблица 4. – Элементный анализ комплексов серебра (I) с альбендазолом

Соединение	теоретическое, % / практическое, %					
	Ag	**C**	**H**	**N**	**S**	**O**
[AgLCH3COO]-(1:1)	24,96	38,90	4.20	9,72	7,42	14,81
	24,89	38,2	4.1	9,56	7,4	14,2
[AgL$_2$ CH3COO] -(1:2)	15,40	41,15	4,32	14,0	9,15	15,99
	15,0	41,0	4,7	13,9	9,1	16,2
[AgLДМСО]NO$_3$ -(1:1)	24,79	33,12	3,47	12,8	7,37	18,38
	24,0	32,8	3,8	12,5	7,3	18,5
[AgL$_2$ ДМСОNO$_3$]- (1:2)	15,4	41,15	4,32	14,0	9,15	14,05
	15,3	40,5	4,4	13,7	9,11	13,96
[AgLДМСО]NO$_3$ -99%	20,09	4,5	4,30	9,72	7,4	14,81
	21,00	4,53	4,5	9,90	7,42	14,00
[AgL$_2$ ДМСОNO$_3$]-99%	15,0	40,9	4,9	15,0	9,2	13,99
	14,98	41,0	4,87	14,8	9,21	14,0
[AgL(C_2H_5OH)]NO$_3$	24,78	33,5	3,3	12,5	7,1	18,38
	24,5	33,0	3,4	13,0	7,3	18,3
[AgL$_2$(C_2H_5OH)]NO$_3$	17,5	33,82	2,5	11,5	5,30	20,8
	17,8	33,7	3,0	12,0	5,7	21,0

ИК-спектроскопическое исследование комплексов серебра(I) с альбендазолом

Инфракрасная спектроскопия (ИК) применялась для установления структурных характеристик и идентификации функциональных групп в новых соединениях, полученных путем координации иона серебра(I) с альбендазолом.

Ефимовой А.И и соавторами сказанно что «колебательная спектроскопия может быть весма информативной, поскольку взаимосвязь между электронной и молекулярной структурой приводит к изменениям инфрокрасных полос, которые часто позволяют интерпретировать строение координационных комплексов» [15].

Путем интерпретации и анализа инфракрасного (ИК) спектра комплексного соединения [AgL$_2$NO$_3$] было установлено, что в его спектральной картине должны проявляться специфические линии поглощения. Эти линии связаныс наличием в структуре вещества монозармещенного бензольного кольца, метиленовой группы и гетероциклической системы. Рисунок 8 демонстрирует ИК-спектр, полученный для соединениий серебра с альбендазолом в условиях 6 моль/ л раствора уксусной кислоты. На этом спектре отчетливо видны характерные полосы поглощения, которые подтверждают наличие указанных функциональных групп и их возможные модификации.

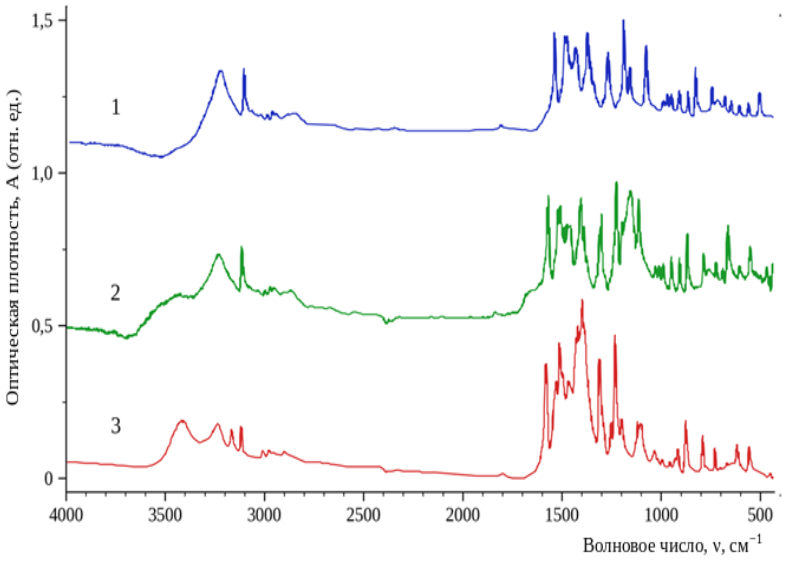


Рисунок 8. -ИК спекторы молекулы: 1) альбендазола; 2) [AgLCHзCOO], 3) [AgLДMCO]NO_3

Как видно из рисунка 8, образование комплекса вызывает значительные изменения в ИК-спектрах лиганда во всем диапазоне частот от 4000 до 400 $см^{-1}$.

Анализи ИК сперот показывают, что, анализа, пик в области свободного альбендазола от 1620 $см^{-1}$до 1650 $см^{-1}$ смещается, а как видно из спектра комплекса, в этой области происходит общее смещение. То есть, электронная плотность N-H в области 3300–3400 уменьшается, что указывает на участие азота бензимидазольного кольца в координации.

Также известно, что в области от 700 до 750 $см^{-1}$ происходит деформационный сдвиг C-S, чтотакже указывает на участие серы тиольной группы молекулы альбендазола в координации.

Следовательно, установлено, что координация между ионом металла и альбендазол-серебряным лигандром происходит посредством взаимодействия как с атомом азота пиридинового цикла, так и с атомом серы тиольной группы.

Масс-спектроскопический анализ альбендазола и синтезированных соединений серебра(1) с альбендазолом

Для определения молекулярного состава и подтверждения структуры соединений был проведен масс-спектрометрический анализ с использованием метода электрораспылительной ионизации (HR-

ESI-MS) в положительном режиме. Анализ проводился на приборе Agilent 129-6545 UHPLC-QTOF LC/MS, расположенном в Китае, в сотрудничестве с коллегами.

В полученном спектре основной пик соответствует иону $(M+H)^+$, что соответствует молекулярной формуле альбендазола $C_{12}H_{16}N_3O_2S$. Экспериментальное значение m/z составляет 266,0958, что очень близко к расчетному теоретическому значению m/z - 266,0958.

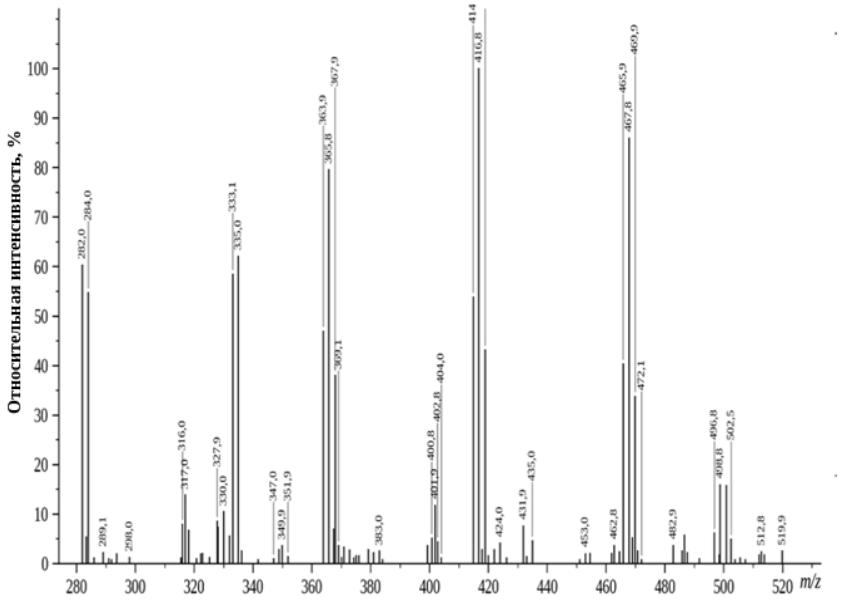


Рисунок 9.- Комплексное соединение серебра (I) - альбендазол–ДМСО.

По сравнению со спектром 1H NMR чистого альбендазола, в спектре комплекса серебра с альбендазолом наблюдается значительное изменение химического сдвига и формы сигналов. Прежде всего, изменились сигналы, связанные с группами -NH в низкополевой области β-11-12 мсд. Это изменение свидетельствует обучастии атомов азота в координации с ионом серебра.

Небольшой сдвиг этих сигналов внизко по левую сторону указывает на уменьшение электронной плотности протонов -NH, которое происходит в результате действия акцептора электронов Ag+. Результаты HRMS согласуются с данными ЯМР-спектроскопии и другими методами, предоставляя полную картину структуры исследуемого комплекса.

Рентгеноструктурный анализ кристаллов комплексного соединения серебра (I) с альбендазолом

Рентгеноструктурный анализ кристаллов синтезированного комплексного соединения состава $C_{12}H_{19}H_3AgO_4$, образованного на основе нитрата серебра и химически чистого альбендазола, проводился на автоматическом монокристаллическом дифрактометре модели «Malvern Panalytical Empyrean» Республики Узбекистан с использованием источника излучения SiKα (γ=1,54 Å0).

Как показанно на рисунке, координация происходит через атом азота бензимидазольного кольца, а также, возможно, через атом серы тиольной группы функциональных группы-если лиганд в растворе гидролизуеттся или претекрпивает таутомерные превращения. Кроме тог, наблюдается водородные связы между NH-группами альбендазола и кислород содержащими лигандами (например, ацетат –ионами или молекулами растворителя), которые играют важную роль в устойчивости кристаллической упаковки. Рентгеноструктурный анализ подтвердил образование устойчивого комплекса серебра(I) с альбендазолом в среде 6мол/л уксусной кислоте. Структура полеченного комплекса показывает, что альбендазол действует как бидентатного лиганда, способного стабилизировать ион Ag^+ за счет донорно-акцепторных взаимодействий. Сттруктурные параметры комплекса серебро с альбендазолом согласуются со спектроскопическими даннимы и допускают включение растворителья в координационную сферу или кристаллическую упаковку.

Было установлено, что параметры структуры согласуются с результатами спектроскопии SI и указывают на возможность участия растворителя в координационной сфере или кристаллической решетке.

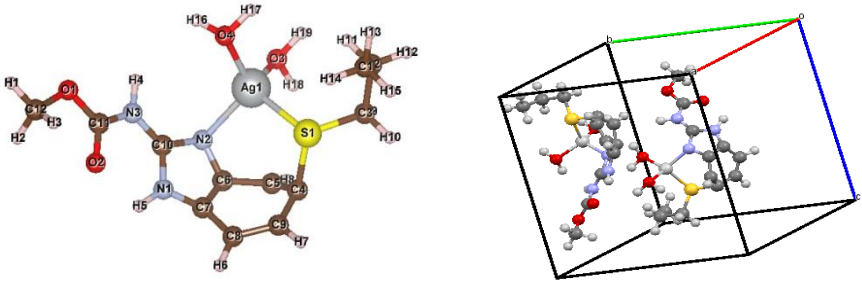


Рисунок 10.- Молекулярная структура комплекса серебра(I) и альбендазола.

Атом серебра в окружении двух донорных атомов, состоящих из молекул альбендазола и аниона, образует координационную геометрию, напоминающую бидентатную координационную структуру. В координации участвуют атомы азота бензимидазольного кольца и атомы серы тиольных групп, что подтверждается длинами связей Ag-N и Ag-S в диапазоне 2,10-2,30 Å.

Структура также содержит межмолекулярные водородные

связи, играющие ключевую роль в устойчивости кристаллической упаковки, а также существует вероятность слабых π–π взаимодействий между ароматическими частями молекул.

Исследование термической характеристики синтезированных соединений серебра(I) с альбендазолом с использованием метода дериватографии

Проведенные исследования показали, что термическое разложение комплексов серебра(I) с альбендазолом является сложным процессом и проходит несколько стадий с поглощением и выделением тепла.

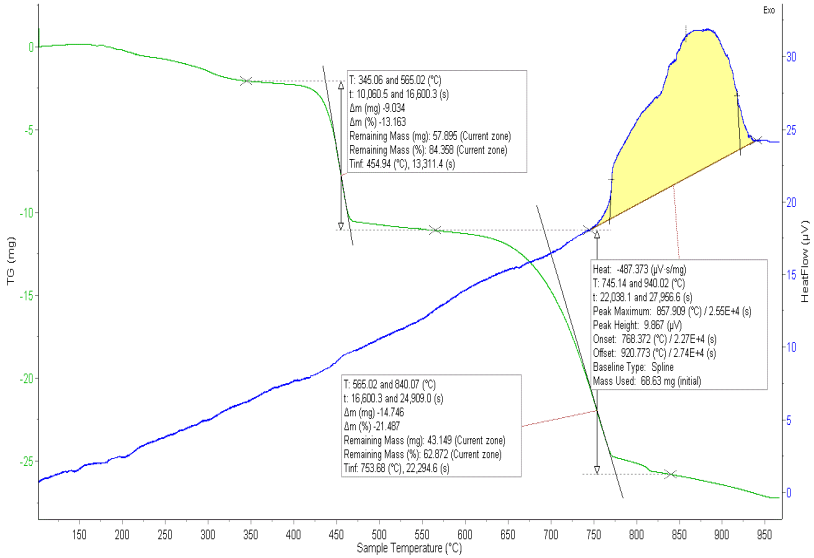


Рисунок 11. - Термическая устойчивость комплекса серебра с альбендазолом в 6 моль/л растворе уксуса

Примечание: Т: 345,06 и 565,02 °C;t: 10 060 и 16 600 секунд;Δm (мг) = -9,034;Δm (%) = -13,163;остаточная масса (мг): 57,895 (текущий диапазон);остаточная масса (%): 84,358 (текущий диапазон); температура точки перегиба: 454,94 °C, 13 311,4 секунды.

Т: 565,02 и 840,07 °C; t: 16 600 и 24 909 секунд; Δm (мг) = -14,746

Δm (%) = -21,487; остаточная масса (мг): 43,149 (текущий диапазон); остаточная масса (%): 62,872 (текущий диапазон); температура точки перегиба: 753,68 °C, 22 294,6 секунды.

Тепловой эффект процесса (количество тепла, выделившееся или поглощенное в ходе пика): -487,373 мкВ·с; Т: 745,14 и 940,02 °C; t: 22 038,1 и 27 909,6 с; максимум пика: 857,909 °C; высота пика: 9,867 мкВ; начало:

768,372 °C / 2,27E+4 с; положение пика: 920,773 °C / 2,74E+4 с; тип базовой линии: Базовая линия; масса образца: 68,63 мг (начальная).

Рисунок 11 демонстрирует дериватограмму комплекса $[AgLCH_3COO]NO_3$. Запис термограммы для системы серебро(I)-альбендазол-уксусная кислота проводилось в диапазоне температуре 250-950°С при скорости нагрева 2К/мин. Масса полученного комплекса в начале эксперимента составляла 68,63 мг.

На рисунке представленны две кривые: зелёная (ТГ-линия) отражает изменение массы полученного комплекса, синная(ДТА)-тепловые эффекты. В ходе термогравиметрического анализа завиксированного три этаппа потери массы.

Первый этап наблюдается в интервале 170 - 350 ^{0}С и связвн с удалением координационной воды или частично уксусной кислоты В диапазоне 3450 ^{0} С-5650 ^{0} С потеря массы составляет около 9,03мг, что составляет 13,16%. При этом на участке 170 - 350 ^{0}С масса образца остаётся практически неизменной.Потерия интервале 345-5650^{0}С обусловленно выделением массы составляет около 9,03мг, что соответствует 13,16%. Эта потеря массы связана с выделением нестабильных соединений, включая уксусную кислоту или координационную воду.

Второй этап фиксируется в диапазоне 565-840^{0}С. Потерия массы достигает 14-87мг или (21,4%). Данная стадия указывает на глубокое разложение органической части компекса и полное разложение уксуской кислоты.

В третом этапе **н**а кривой ДТА в диапазоне 750–840°С наблюдается полное разложение линады, т.е. альбендазола. На этой стадии наблюдается выделение газов NO_2 и CO_2. После завершения процесса приблизительно 62-63% массы комплекса серебра(I) с альбендазолом остается в среде 6 моль/л уксусной кислоты. Это, вероятно, связано с образованием металлического серебра или оксида серебра.

В заключение, анализ термического разложения показал, что комплекс альбендазола в среде 6 моль/л уксусной кислоты обладает относительно высокой термической устойчивостью, а его разложение ускоряется в два основных этапа.

Исследование биологической активности координационных соединений

При образовании комплексного соединения на основе альбендазола с серебром количество ионов серебра в растворе уменьшается, что является одним из факторов, снижающих биологическую токсичность соединения.

Результаты термодинамических величин и констант устойчивости показывают, что ионы серебра(I) образуют устойчивые комплексы с

альбендазолом. Синтезированное комплексное соединение $[Ag(L)_2]+$ обладает высокой константой устойчивости.

В частности, в патенте Республики Таджикистан Раджабов У. с соавторами указано, что «сульфат медь-альбендазол обладает противопаразитарными свойствами» [16].

Для определения острой токсичности вновь синтезированного соединения серебра(I) с альбендазолом были проведены токсикологические исследования на белых лабораторных мышах в течение 14 дней. В таблице 5 показаны токсические эффекты комплексных соединений серебра(I) с альбендазолом.

Таблица 5.-Токсичность комплексных соединений серебра(I) с альбендазолом

Вещество	Масса вещества г/кг	Масса в-в мг/кг	Масса Крыс(г)	Количества крыс	токсичность	LD (летальная доза)
$[Ag(LCH_3COO)_2]$	0.03	30	20	6	0/6	0
$[Ag(LCH_3COO)_2]$	0.3	300	20	6	0/6	0
$[Ag(L)_2CH_3COO]$	1	1000	20	6	0/6	0
$[Ag(L)_2CH3COO]$	3	3000	20	6	1/6	16
$[Ag(L)_2CH_3COO]$	6	5000	20	6	2/6	33
$[Ag(L)_2CH3COO]$	8	6000	20	6	3/6	50
$[Ag(L)_2]CH_3COO$	10	8000	20	6	6/6	100

Исследование антимикробных и противогрибковых свойств комплексных соединений серебра(I) с альбенадазолом

Исследование антимикробной и противогрибковой активности препаратов проводилось с использованием метода диффузии в агаре (МПА). В качестве тест-культур использовались однодневные суспензии микроорганизмов в изотоническом растворе хлорида натрия (2-10 м.с./мл). Для проведения эксперимента в стерильные чашки Петри объемом 100 мм наливали 15 мл разбавленний питательной среды. Чашки предварительно высушивались в термостате (36-37 ^{0}C) в течение 45-60 минут с открытыми кришками. Затем на поверхность агара вносили 1 мл суспензии тест-культур и равномерно распределяли ее по всей площади путем встряхивания. Избыток жидкости удалялся пипеткой после наклона чашки. Инкубация чашки проводилась в перевернутом паложенни при 36-37 ^{0}C на протяжении 24 часов для предотвращения конденсации и вымывания микробного слоя. Размер зон ингибирования роста микроорганизмов вокруг дисков измерялся штангенцикулем штангенциркулем.

В таблице 6 представлены результаты исследования антимикробной активности вновь синтезированного соединения серебра с альбендазолом и известным веществом анпенициллином против Escherichia coli, Salmonella и Pasteurella.

Таблица 6.- Зона увеличения антимикробной активности комплексов серебра с альбендазолом и ампициллином против трех бактерий.

Вещество	Количество в лунке, мг	Размеры областей, мм		
		E.Coli	Salmonella	Pasterella
Комплексо оброзавания серебро с альбендазол	100	≤ 16-17	≤ 14-15	≤ 14-15
Ампициллин	100	≤ 11-12	≤ 10-11	≤ 6-8

Как видно из результатов таблицы, синтезированный альбендазол обладает хорошим антимикробным действием против всех трех исследованных штаммов. Наибольший диаметр наблюдался против штамма Ershiha kol. Ампициллин оказывает меньшее воздействие на штаммы, особенно против штамма Ershiha kol.

Таким образом, полученные результаты показывают, что синтезированное химическое вещество серебра с альбендазолом обладает более высокими антимикробными свойствами, чем ампициллин, и может быть использовано в будущем в качестве фармакологического средства для лечения бактериальных заболеваний.

Выводы

1. Кислотно-основные свойства альбендазола и его формы существования в 6 моль/л уксусе и ДМСО были изучены в широком диапазоне pH методом титрования. Было показано, что значения констант ионизации, в зависимости от природы заместителя в молекуле альбендазола, изменяются следующим образом: pKa(Alb-CH3COOH) = 12,89; pKa(Alb-DMSO) = 12,01. [2-A; 4-A; 9-A; 11-A; 13-A; 14-A]

2. Потенциометрическим методом было показано, что серебро(I) образует два типа комплексных соединений с альбендазолом поэтапно. Были определены константы стабильности комплексных соединений серебра(I) с альбендазолом в 6 моль/л уксусе и ДМСО. [3-A; 4-A; 9-A; 13-A; 14-A].

3. С помощью термодинамического метода, включая использование температурных коэффициентов, были определены значения lgβ, ΔH0, ΔS0 и ΔG0 для реакции комплексообразования серебра(I) с альбендазолом. [1-A; 11-A;

14-А].

4 Были разработаны оптимальные условия синтеза 8 новых типов комплексов серебра(I) с альбендазолом. Состав и структура полученных соединений были определены на основе данных физико-химического анализа, инфракрасной спектроскопии, рентгеноструктурного анализа, масс-спектроскопии, ЯМР-спектроскопии и термогравиметрического анализа. [5-А; 10-А].

5. По результатам физико-химических исследований инфракрасного спектра и рентгеновской структуры установлено, что молекулы альбендазола координируются через атом азота пиридинового кольца и атом серы тиольной группы. [8-А; 14-А].

6. Изучены биологические свойства комплексов серебра(I) с альбендазолом, включая их острую, хроническую, аллергенную и антимикробную активность. Установлено, что вновь синтезированные соединения обладают не только неаллергенными и нераздражающими свойствами, но и низкой токсичностью и антимикробными свойствами. [6-А; 7-А; 8-А; 10-А; 12-А].

Рекомендации по практическому применению результатов исследовани:

Результаты диссертационных исследований направлены на фундаментальные исследования и физическую химию, включая координационную химию и процессы комплексообразования биометаллов с биолигандами.

Полученные научно-исследовательские данные о комплексообразующих соединениях серебра(I) с альбендазолом, стехиометрическом составе образующихся комплексов, последовательных стадиях их формирования и стабильности комплексов могут быть использованы для расширения научно-исследовательских работ по механизму взаимодействия ионов переходных металлов с биолигандами.

Определение кислотно-основных и донорно-акцепторных свойств альбендазола, а также влияния растворителя на состояние ионизации и способность лиганда к комплексообразованию позволит более точно определить роль структуры альбендазола в образовании координационных

соединений серебра(I). Сравнение полученных научных результатов по составу, стабильности и физико-химическим свойствам комплексов серебра(I) с альбендазолом в растворе и твердом состоянии помогает определить состав комплекса, его координационное окружение и кристаллическую структуру. Данный процесс имеет практическое значение для выбора оптимальных условий синтеза новых координационных соединений серебра(I).

В рамках исследования также были изучены биологические свойства комплексных соединений серебра(I) с альбендазолом. Полученные результаты по биологической активности синтезированных соединений и их сравнение с исходными материалами имеют большое значение. Если биологическая эффективность синтезированных соединений подтвердится, эти результаты могут послужить основой для отбора соединений с биологической активностью и проведения дальнейших фармакологических и токсикологических исследований.

Разработанные методы синтеза комплексов рекомендуются ученым в области синтеза координационных соединений, студентам, магистрам и докторантам кафедр прикладной, физической и коллоидной химии Таджикского национального университета, а также кафедры фармацевтической химии и токсикологии Таджикского государственного медицинского университета имени А. Сино для определения биологической активности соединений.

Список статей, опубликованных в научных журналах по рекомендации Высшей аттестационной комиссии при Президенте Республики Таджикистан:

[1-А]. Бойназарова К.У. Физико-химических свойств координационного соединения серебра(I) с альбендазолом/ С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов// Доклади Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон. 2023. Т. 66. -№ 8-7. -С. 445-452.

[2-А]. Бойназарова К.У. Исследование комплексообразования в системе Ag(I)-альбендазол-уксусная кислота/ С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов// Доклади Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон. 2025. Т. 68. -№ 9-10. -С. 879-888.

[3-А]. Бойназарзода К.У.Комплексообразование серебра(I) с алӣбендазолом /К.У. Бойназарзода// Вестник Бохтарского государственногоуверистета имени Носири Хусрава (научный

журнал)серия естесвенных наук.-Бохтар.-2026.-№2/2.-С.122

[4-А]. Бойназарзода К.У.

Комплесообразование серебра(I) с альбендазолом в органическом растворителе-ДМСО/К.У. Бойназарзода С.Г. Ёрмамадова, У. Раджабов// Вестник Дангарского государственного университета, раздел естественных наук. -Дангара. -2026.-№1(35).-С.149-155.

Мақалоҳо ва фишурдаҳо дар маводи конференсияҳо:

[5-А]. Бойназарова К.У. Синтез и исследование серебра(I) с альбендазолом / С.Г. Ёрамамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Международная научно-практическая конференция «Литературное просвещение в науке», Алматы. - 2022. - С. 116-119

[6-А]. Бойназарова К.У. Синтез и биологические свойства комплексного соединения Ag(I) с альбендазолом / С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Республиканская научно-теоретическая конференция преподавателей и сотрудников Института промышленной технологии Республики Узбекистан, посвященная «Годам промышленного развития (2022-2026)» и «Величие Мавлоно Джалолиддина Балхи». Душанбе. - 2022. - С. 301-302.

[7-А].Бойназарова К.У. Биологические свойства нитрата серебра с альбендазолом/С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Международная научно-практическая конференция «Международная научно-практическая конференция по случаю 70-летия «Современной медицины: традиции и инновации». – Душанбе. – 2022. – Т.-2. – С. 566-567

[8-А]. Бойназарова К.У. Физико-химические и биологические свойства сульфата меди с альбендазолом // С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Материалы XVIII Научно-практической конференции молодых ученых и студентов Государственного университета имени Абу Али ибн Сино «Наука и инновации в медицине-2023». – Душанбе. – 2023. – Т.-2. – С. 250.

[9-А].Бойназарова К.У. Изучение процессов комплексообразования серебра(I) с альбендазолом в уксусно-водных растворах // С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Всероссийская школьная конференция молодых ученых «ДНИ НАУКИ В ИГТУ». Иваново.-2023.-С.188.

[10-А].Бойназарова К.У. Физико-химические и биологические свойства серебра(I) с альбендазолом // С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Международная научно-практическая конференция на тему «Развитие новых направлений в химии и химической технологии», посвященная памяти академика НИАТ, доктора химических наук, профессора Сафьева Хайдара.-2023.-С.149-150.

[11-А].Бойназарова К.У. Изучение образования комплексов Ag(I) с

метил (5-(пропилтио)-1Н бензимидазол-2-ил)карбамидом кислота// С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов// Международная научно-теоретическая конференция на тему «Развитие химических наук, техники и экологии», посвященная 20-летию создания кафедры «Технология и химическая экология» и «Двадцать лет преподавания и развития естественных, точных и математических наук в области науки и образования». — Душанбе. — 2023. — С. 86.

[12-А].Бойназарова К.У. Свойства комплексных соединений серебра с альбендазолом// С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов// Приоритетные направления исследований в области медицины: медицинская химия, биохимия и биофизика. Сборник тезисов Международной научно-практической конференции». — Бухара. — 2024. — С. 343-344.

[13-А].Бойназарова К.У. Изучение комплексообразования серебра () с альбендазолом при температуре 298 К // С.Г. Ёрмамадова, К.У. Бойназарова, У. Раджабов // Всеуниверситетская научно-теоретическая конференция студентов, магистрантов и докторантов Государственного технического университета, посвященная развитию цифровой экономики и инноваций (2025-2030), «700-летие таджикско-персидского поэта-газеля Хафиза Ширози» и «115-летие народного поэта Таджикистана Боки Рахимзоды». – Душанбе. – 2025. – С. 449-454.

[14-А].Бойназарова К.У. Комплексообразование серебра(I) с альбендазолом в среде ДМСО // Международная научно-практическая конференция по теме «Актуальные проблемы, их решения и перспективы развития современной химии» в Институте предпринимательства и педагогики им. Денова, Республика Узбекистан. – 2025. – С. 179.

Патент

[15-А]. Бойназарова К.Ю. Медный купорос альбендазол обладает противопаразитарными свойствами/ Раджабов У.Р., Ермамадова С.Г., Ибодзода С.Т., Султонов Р.А., Бойназарова К.У.// Патент РТ № TJ.1432.
2023.

РӮЙХАТИ АДАБИЁТ

1. Суфиев Т.Д. Биологическое свойства координациионных соединений серебра и триптофана: автореф.дис…кан. биол.наук: 03.04.00/Т.Д.Суфиев. -Душанбе.2009. 24с.
2. Усачева Т.Р., Содатдинова А.С., Сафармамадзода С.М., , Мабаткадамзода К.С. Комплексообразование серебра(I) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом в водно-диметилсульфоксидном растворителе.

«Журнал физической химии» -2024. -Том 98. -№ 4. -С 24-30.
3. Падейская, Е.Н. Фармакокинетика, левофлоксацина как основа режима дозирования и оптимизации схем лечения. «Качественная клиническая прктика». - 2005. -№ 2(3).С. 55-68.
4. Леглер, Е.В. Исследование комплексообразования серебра(I) с трифункциональными аминокислотами: дис. канд. хим. наук. – Красноярск. -2001.-С.173.
5. Белеванцев В.И. Об изменении констант равновесия комплексообразования в зависимости от состава водно-органического растворителя /В.И. Белеванцев, В.А. Федров // Координационная химия. -1977.-Том.3.-№5.-С.638-642.
6. Снесарев С.В., Кулапинна, Е.Г. Комплексообразование серебра (I) с ампициллином, оксациллином, цефвзолином, цефотаксимом в водных растворах // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Химия. Биология. Экология.-2012 .-Том.12.-вып 1.-С.17-21.
7. Буду Г.В. Комплексообразование серебра с некоторыми гетероциклическими аминами в водно этанольных растворах / Г.В. Буду, А.П. Тхоряк // Журнал неорганической химии. -1980.-вып.4.-С.1006-1008.
8. Юсупов З.Н. Способ определения состава и констант образования координационных соединений: патент РТ № TJ 295. -Заявка № 37000501 от 21.12.2000.- Опубликовано в бюллетене № 21.- 2001.
9. Рахимова М.М. Биоактивные координационное соединения железа и цинка в цитрусоводстве / Т.М. Нурматов, М.М. Рахимова, З.Н. Юсупов, А.И.Гайваронская // Материалы научной конференции «Координационное соединения и аспекты их применения». –Душанбе: ТГУ. Сино,- 1996. -С.77
10. Аминджанов А. А. Комплексные соединения серебра (I) с N,N-этилентиомочевиной / А. С. Содатдинова, С. М. Сафармамадов, К. С. Мабаткадамова, А. А Аминджанов // Вестник Пермского университета. Серия Химия».- 2016.-№ 1 (21).-С.69-77.
11. Сафармамадов С.М. Комплексообразование золота(III) с 1-фурфурилиденамино-1,3,4-триазолом / С.М.Сафармамадов, Д.А. Мубораккадамов, К.С. Мабаткадамова // Вестник Таджикского национального университета. -2015. - № 1/5 (188). - С.154-159.
12. Бекназарова Н.С., Изучение острой токсичности комплекса Fe (III) с тиопирином / Н.С. Бекназарова, Р.А. Атовуллозода, С.Х. Нарзуллозода, Б.К. Рахматуллоев, Х.И. Раджабов, О.К. Хасанов // Медиинский вестник Национальной академии наук Таджикистана.-2022.-Т.XII.-№1(41).-С.91-95.
13. Мудинов, Х.Г. Комплексообразования серебра (I) с 1,2,4-триазолом в интервале температур 288,16-318,16 К / Х.Г.

Мудинов, С.М Сафармамадов // Вестник Таджикского национнального университет. -2015.- № 1/5(188) - С. 136-142.
14. Содатдинова, А.С. «Комплексообразование серебра(I) с N,N-этилентиомочевиной, 1-формил- и 1-ацетил-3-тиосемикарбазидом» Диссертация на соискание учёной степени кандидата химических наук. Институт химии им. В.И. Никитина АН Республики Таджикистан. - 2016.
15. Ефимона, А.И., Зайцев, В.Б., Казанцев, Д.В., Болдырев, Н.Ю. Современная инфракрасная спектроскопия: основы, методы, приборная база.-Санкт-Петербург:-Лань.-2023.-С.-356.
16. Раджабов У.Р., Ёрмамадова С.Г., Ибодзода С.Т., Султонов Р.А., Бойназарова К.У. Патент РТ №TJ.1432. Сулфати мис албендазол дорои хосияти зиддигиҷҷавӣ (Медь сульфат альбендазол, обладающий антигельминтной активностью. Заявка №2301822 от 12 04 2023г. В гос. Реестре зарегистрирован 24 октября 2023г.

АННОТАТСИЯ

ба диссертатсияи Бойназарзода Кибриё Усмон дар мавзуи «Комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол» барои дарёфти дараҷаиномзадиилмҳоихимияазрӯиихтисоси1.4.5. Химияифизикӣ

Калидвожаҳо: нуқра(I), албендазол, синтез, константаи устуворӣ, бузургиҳои термодинамикӣ, титронидани потенсиометрӣ, заррааҳои комплексӣ.

Объекти таҳқиқот:таҳқиқи комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол дар муҳити уксусӣва ДМСО.

Мақсади таҳқиқот: таҳқиқ васинтези комплексҳосилкунии нуқра бо албендазол, омӯхтани хосиятҳои физикӣ-химиявии онҳо,муайян кардани бузургиҳои константаи устуворӣ пайвастагиҳои координатсионӣ, функсияҳои термодинамикӣ, таъсири омилҳо ба устуворӣ комплексҳои ҳосилшуда дар муҳити обӣ- кислотагӣ (сирко) ва омӯхтани хосиятҳои зиддимикробӣ, зидди паразитӣ, зидди занбӯруғии онҳо мебошад.

Усулҳои таҳқиқот: Электроди нуқрагӣ, кислотаи сирко, элементҳои галваникии Ag(0)-Ag(I)-CH_3COOH-/AgCl/Ag,Ag(0)-Ag(I)-ДМСО-H_2Oва албендазол истифода шудаанд.

Навгонии илмии таҳқиқот. бори аввал раванди комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол бо истифода аз усули потенсиометрӣ ва усули ғайрихатии камтарини квадрати омӯхта шудаанд;

- бори аввал раванди комплексҳосилкунии нуқра(I) бо албендазол бо истифода аз усули потенсиометрӣ таҳлил карда шудааст;
- таркиб, ҳудуди мавҷудият, инчунин баромади максималии комплексҳои нуқра(I) бо албендазол муқаррар карда шуд;
- методикаи синтези мақсадноки пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо албендазол гузаронида шуд;
- таркиб ва сохти пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) ва албендазол бо истифода аз усулҳои спектри инфрасурх(СИ), масс-спектроскопӣ, ренгеноструктурӣ, РМЯ, дериватография таҳқиқ карда шуд;
- бори нахуст хосияти биологии (безарар будан,заҳролудшавии шадид ва музмин, хосиятҳои аллергенӣ) ва зиддимикробии пайвастагиҳои комплексии нуқра(I) бо лиганд омӯхта шудаанд;

Дараҷаи истифодабарӣ: Синтез намудани намаки нитрати нуқра бо албендазол,омӯзиши раванди комплексҳосилкунии нуқра бо албендазол бо усули потенсиометрӣ, истифодаи таҳлилҳои физики-химиявии таҳлил,омӯзиши хосиятҳои биологии пайвастагиҳои мураккаби нуқра бо албендазол ва татбиқи он дар тибби бойторӣ истифода хоҳандшуд.

Татбиқи амалии натиҷаҳои таҳқиқот:Натиҷаҳои бадастомадаи комплексҳои нуқра(I) бо албендазол барои шарҳ додан ва пешгӯии равандҳои комплексҳосилшавии нуқра(I) истифода мешаванд.

Қиматҳои бадастомади константаҳои устуворӣ нуқра(I) бо албендазол маводи истинодӣ буда, холигиҳҳои мавҷудаи адабиётро пур мекунанд, барои олимоне, ки дар соҳаи комплексҳосилкунии ионҳои металл бо лигандҳои сулфурдор ва нитрогендор кор мекунанд ва инчунин барои синтези пайвастагиҳои нав дар соҳаи химияи координатсионӣ истифода мешаванд;

Натиҷаҳои кори диссертатсионӣ метавонад барои донишҷӯён ва магистрони кафедраи физики-химиявӣ, фармасефтию токсикологӣ,барои гузаронидани лексияҳо дар курсҳои махсус дар давоми корҳои имлӣ-тадқиқотӣаз ҷониби аспирантҳо ва довталабон, корҳои курсӣ ва дипломӣ-аз ҷониби донишҷӯёни донишгоҳҳои профили химия ва тиб истифода шавад.

АННОТАТЦИЯ

диссертации Бойназарзода Кибриё Усмон на тему
«Комплексообразование серебра(I) с альбендазолом» для получения степени кандидата химических наук по специальности 1.4.5. Физическая химия.

Ключевые слова: серебро(I), альбендазол, синтез, константа устойчивости, термодинамические величины, потенциометрическое титрование, комплексные частицы.

Объект исследования: исследование комплексообразования серебра(I) с альбендазолом в среде уксусной кислоты и ДМСО.

Цель исследования: Исследовать и синтезировать комплексы серебра с альбендазолом, изучить их физико-химические свойства, определить величины константы устойчивости координационных соединений, термодинамические функции, влияние факторов на устойчивость образующихся комплексов в водно-кислотной (уксусной) среде, а также изучить их противомикробные, противопаразитарные и противогрибковые свойства.

Методы исследования: Использовались серебряный электрод, уксусная кислота, гальванические элементы Ag(0)-Ag(I)-CH_3COOH-/AgCl/Ag, Ag(0)-Ag(I)-ДМСО-H_2O, ДМСО и альбендазол.

Научная новизна исследования:

-впервые проанализирован процесс комплексообразования серебра(I) с албендазолом с использованием потенциометрического метода;

-установлены состав, области существования, а также максимальный выход комплексов серебра(I) с албендазолом;

-разработана методика направленного синтеза комплексных соединений серебра(I) с албендазолом;

-состав и структура комплексных соединений серебра(I) и албендазола исследованы с применением методов ИК-спектроскопии, масс-спектроскопии, рентгеноструктурного анализа, ЯМР и дериватографии;

-впервые изучены биологические свойства (безвредность, острая и хроническая токсичность, аллергенные свойства) и антимикробная активность комплексных соединений серебра(I) с данным лигандом

Степень использования: Будут использованы синтез нитрата серебра с альбендазолом, изучение процесса комплексообразования серебра с альбендазолом потенциометрическим методом, применение физико-химических анализов, изучение биологических свойств комплексов серебра с альбендазолом и их применение в ветеринарной медицине.

Полученные данные о комплексах серебра(I) с альбендазолом используются для объяснения и прогнозирования процессов комплексообразования серебра(I).

Определенные значения констант устойчивости комплексов серебра(I) с альбендазолом являются справочным материалом, заполняющим пробелы в существующей литературе. Они будут полезны ученым, работающим в области комплексообразования ионов металлов с серо- и азотсодержащими лигандами, а также для синтеза новых соединений в координационной химии.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы студентами и магистрами кафедр физико-химического, фармацевтического и токсикологического профиля. Они также пригодятся для проведения лекций в рамках специальных курсов, в научно-исследовательской работе аспирантов и соискателей, а также при выполнении курсовых и дипломных работ студентами химических и медицинских вузов.

ABSTRACT

For the dissertation by Boynazarzoda Kibriyo Usmon on the topic «Complex Formation of Silver(I) with Albendazole» for the degree of Candidate of Chemical Sciences in specialty 1.4.5. Physical Chemistry.

Keywords:silver(I), albendazole, synthesis, stability constant, thermodynamic parameters, potentiometric titration, complex species.

Object of Study: Investigation of the complex formation of silver(I) with albendazole in acetic acid and DMSO media.

Aim of the Study: To investigate and synthesize silver complexes with albendazole, study their physicochemical properties, determine the stability constants of coordination compounds, thermodynamic functions, the influence of factors on the stability of the formed complexes in an aqueous-acidic (acetic) medium, and also study their antimicrobial, antiparasitic, and antifungal properties.

Research Methods: A silver electrode, acetic acid, galvanic cells Ag(0)-Ag(I)-CH_3COOH-/AgCl/Ag, Ag(0)-Ag(I)-DMSO-H_2O /AgCl/Ag, DMSO, and albendazole were used.

Scientific Novelty of the Research:

-- the complexation process of silver(I) with albendazole has been analyzed for the first time using a potentiometric method;

- the composition, ranges of existence, and maximum yield of silver(I)–albendazole complexes have been determined;

- a procedure for the targeted synthesis of silver(I) complex compounds with albendazole has been developed;

- the composition and structure of silver(I)–albendazole complexes have been investigated using infrared (IR) spectroscopy, mass spectrometry, X-ray structural analysis, nuclear magnetic resonance (NMR) spectroscopy, and thermal analysis (derivatography);

- the biological properties (safety, acute and chronic toxicity, allergenic potential) and antimicrobial activity of silver(I) complex compounds with this ligand have been studied for the first time.

Degree of Utilization: The synthesis of silver nitrate with albendazole, the study of the complex formation process of silver with albendazole by potentiometric method, the application of physicochemical analyses, the study of the biological properties of silver complexes with albendazole, and their application in veterinary medicine will be utilized.

The obtained data on silver(I)-albendazole complexes will be used to explain and predict silver(I) complexation processes.

The determined stability constant values for silver(I)-albendazole complexes serve as reference material, filling gaps in existing literature. They will be useful to scientists working in the field of metal ion complexation with sulfur- and nitrogen-containing ligands, as well as for the synthesis of new compounds in coordination chemistry.

The results of this dissertation work can be used by students and master's degree candidates in departments of physicochemical, pharmaceutical, and toxicological profiles. They will also be useful for conducting lectures within special courses, in the research work of postgraduate students and applicants, and in the completion of coursework and diploma projects by students of chemical and medical universities.