Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

UDK 541.49:546.650
orcid.org/0000-0002-6048-548X
orcid.org/ **0000-0003-2606-3221**

TRIS(2-AMINO-1-METILBENZIMIDAZOLIUM) HEXAKIS(NITRATO-O,O‘)-LANTAN(III)NING SINTEZI, TUZILISHI VA XOSSALARI

Ruziyeva Baxtigul Yuldashovna
kimyo fanlari bo‘yicha falsafa dortori (PhD)
O‘zbekiston-Yaponiya yoshlar innovatsiya markazi,
Alfraganus universiteti
E-mail: baxtigul74@mail.ru
Daminova Shahlo Sharipovna
k.f.d., professor
O‘zbekiston-Yaponiya yoshlar innovatsiya markazi,
Mirzo Ulug‘bek nomidagi O‘zbekiston Milliy universiteti
E-mail: daminova_sh@mail.ru

Annotatsiya: Ilk bor 2-amino-1-metilbenzimidazol (MAB) va La(III) nitratining tarkibi $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$ bo‘lgan yangi kompleks birikmasi sintez qilingan. Olingan kompleks birikmaning tarkibi va tuzilishi element, termogravimetrik, IQ-spektroskopiya va rentgenostrukturaviy tahlil usullari yordamida o‘rganilgan. N-protonlangan 2-amino-1-metilbenzimidazoliy kationlari va nitrat anionlarini o‘z ichiga olgan kompleks $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$ monoklinik singoniyaga ega bo‘lib, fazoviy guruhi $P2_1/c$. Kompleks birikmaning struktur tuzilishida La atomi buzilgan ikosaedral poliedrda o‘n ikki koordinatsiyali tuzilishga ega ekanligi, $[La(NO_3)_6]^{3-}$ anionning nitrat qismlaridagi kislorod atomlari va imidazoliy halqasidagi protonlangan azot kationlari o‘rtasida bir nechta *N-H....O* vodorod bog‘lari mavjud ekanligi aniqlangan. Sintez qilingan $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$ birikmaning Xirshfeld sirt tahlilida O···N/N···O, H···H ва O···H/H···O ta’sirlari ko‘proq kuzatilgan hamda molekulalararo ta’sirlashish energiyalari aniqlangan. Kristalli qadoqning mustahkamligini tekshirish uchun bo‘shliq tahlili o‘tkazilgan.

Kalit so‘zlar: benzimidazoliy, lantan kompleksi, kristall struktura, IQ-spektroskopiya, Xirshfeld sirt tahlili, termogravimetrik analiz, tarkib, tuzilish, xossa.

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА ТРИС(2-АМИНО-1-МЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛИЯ) ГЕКСАКИС(НИТРАТО-O,O')-ЛАНТАНА(III)

Аннотация: В данной работе синтезировано новое комплексное соединение 2-амино-1-метилбензимидазола (MAB) с нитратом La(III) состава [La(NO3)6][(MAB-H)]3. Структура и состав полученного соединения были исследованы с использованием элементного анализа, термогравиметрического анализа, ИК-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа. Комплекс [La(NO3)6][(MAB-H)]3 состоит из N-протонированных катионов 2-амино-1-

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

метилбензимидазолия и нитрат-анионов, и имеет моноклинную сингонию с пространственной группой P21/c. Атом La в комплексе имеет координационное число 12, находясь в искажённом икосаэдрическом полиэдре. В структуре комплекса между атомами кислорода в нитратных группах [La(NO3)6)]3- и протонированными катионами азота в имидазолиевом кольце присутствуют водородные связи N-H...O. Анализ поверхности Хиршфельда показал наличие межмолекулярных взаимодействий O···N/N···O, H···H и O···H/N···O, и были определены их энергии. Также проведен анализ пустот для оценки прочности кристаллической упаковки.

Ключевые слова: бензимидазолий, комплекс лантана, кристаллическая структура, анализ поверхности Хиршфельда, ИК-спектроскопия, термогравиметрический анализ, состав, свойства.

SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTIES OF TRIS(2-AMINO-1-METHYLBENZIMIDAZOLIUM) HEXAKIS(NITRATO-O,O')-LANTHANUM (III)

Abstract: The complex compound of 2-amino-1-methylbenzimidazole (MAB) and La(III) nitrate, with the formula $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$, has been synthesized for the first time. The composition and structure of the obtained complex compound were studied using elemental analysis, thermogravimetric analysis, IR spectroscopy, and X-ray structural analysis. The complex $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$, containing N-protonated cations of 2-amino-1-methylbenzimidazolium and nitrate anions, exhibits a monoclinic syngony with the space group $P2_1/c$. In the structure of the complex, the La atom has a coordination number of twelve in a distorted icosahedral polyhedron. There are several hydrogen bonds N-H...O between the oxygen atoms in the nitrate group of the $[La(NO_3)_6]^{3-}$ anion and the protonated nitrogen cations in the imidazolium ring. Additionally, analysis of the Hirshfeld surface of the synthesized compound revealed intermolecular interactions O···N/N···O, H···H, and O···H/N···O, and their energies were determined. A void analysis was also conducted to check the stability of the crystalline packing.

Keywords: benzimidazolium, lanthanum complex, crystal structure, Hirshfeld surface analysis, IR spectroscopy, thermogravimetric analysis, composition, properties.

KIRISH. Koordinatsion birikmalar kimyosining tez rivojlanayotgan sohalaridan biri bu tarkibida azot tutgan geterohalqali organik ligandlap bilan f-elementlarning kompleks birikmalarini sintezi va xossalarining tadqiqotidir [1, 2].

Lantanoid (III) ionlari va ularning koordinatsion birikmalari turli sohalarda muhim rol o'ynaydi. Ularning ba'zi birikmalari uyali telefonlar, televizor ekranlari, kompyuterlar, monitor displeylari, yorug'lik chiqaradigan diodlar (LED), lyuminessent lampalari, gibrid avtomobillar, avtokatalitik konvertorlar, sanoat katalizatorlarida, optik va magnit-rezonans tomografiyada (MRT), yadro tibbiyot tasvirlari, saratonni davolash ilovalari va genetik skrining testlari, tibbiy va stomatologik lazerlar, optik emissionli materiallarda, yorug'lik konvertatsiyasi plyonkalarida qo'llaniladi. Golmiy eng yuqori magnit xossaga ega va uning birikmalari kuchli magnitlarni yaratish uchun ishlatiladi [3-6].

Benzimidazol tibbiyotda muhim terapevtik vositalarni ishlab chiqish uchun asosiy xom ashyo hisoblanadi. Benzimidazol va uning hosilalari mikroblarga [7], viruslarga [8], saratonga qarshi [9], yallig'lanishga qarshi [10] va og'riq qoldiruvchi [11-12] kabi farmakologik faollikni namoyon etadi.

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

Tibbiyotda benzimidazol hosilalari bioaktiv birikmalardan biri bo‘lib hisoblanadi. Benzimidazol asosidagi ko‘plab kompleks birikmalar sintez qilingan bo‘lsada, kamyob-yer elementlarining ushbu guruh organik ligandlar bilan aralash ligandli kompleks birikmalari deyarli o‘rganilmagan. Shu sababli bu ish nazariy va amaliy ahamiyatga ega bo‘lib, sintez qilingan koordinatsion birikmalarning elektron, stereokimyoviy, kinetik va termodinamik xossalarini o‘rganishga imkon beradi.

Ushbu ishning maqsadi, La(III) ionlarining 2-amino-1-metilbenzimidazol bilan koordinatsion birikmasini sintezi, ularning tarkibi va tuzilish xususiyatlarini aniqlashdan iborat.

ADABIYOTLAR TAHLILI VA METODLAR. Lantanoidlarning elektron konfiguratsiyasi La, Ce, Gd va Lu [Xe] $4f^n6s^2$, qolgan lantanoidlarning konfiguratsiyasi [Xe] $4f^{n-1}5d^16s^2$. Lantanoid (III) ionlari ksenon yadrosida chegaralangan 4f valent elektronga ega. Koordinatsion birikmalarda lantanoid (III) ionlari va ligandlar orasidagi o‘zaro ta’sirlar to‘liq elektrostatikdir, chunki 4f orbitallari 5s va 5p orbitallari bilan himoyalangan va bog‘lanishda ishtirok eta olmaydi. Lantanoid (III) ionlarining elektr va magnit xususiyatlari asosan ligand simmetriyasi bilan belgilanib, metall ligand bog‘iga bog‘liq emas. Lantanoid (III) ionlari katta hajmga ega bo‘lib, yuqori koordinatsion sonni talab qiladi, shuning uchun ular eritmada 8 dan 12 gacha va qattiq holatda 6 dan 12 gacha koordinatsion sonni namoyon qiladi. Lantanoidlar La (III) dan Lu (III) qatorida atom hajmining pasayishi (lantanidli siqilish) kuzatiladi [13-14].

Kompleks birikmani sintez qilish uchun “k.t.” bo‘lgan $La(NO_3)_3•6H_2O$ tuzi, 2-amino-1-metil-1H-benzimidazol (MAB), limon kislotasi shuningdek erituvchi – etanol ishlatildi.

Sintez metodikasi: $La(NO_3)_3·6H_2O$ dan 0,05 mmol olib 10 ml absolyut etil spirtida eritildi va unga tomchilatib turgan holda limon kislotasining (0,015 mmol) etanoldagi eritmasidan 10 ml qo‘shildi. Hosil bo‘lgan aralashma xona haroratida magnitli aralashtirgichda bir soat davomida intensiv aralashtirildi. So‘ngra unga 0,15 mmol MAB ning 10 ml etanoldagi eritmasi aralashtirib turgan holda tomchilab qo‘shildi. Reaksion aralashma qaytarma sovutgichda 50 ^{0}C haroratda 30 daqiqa davomida qizdirildi. Qaynoq holda filtrlab, aralashma xona haroratida sekin bug‘latishga qoldirildi. Bir haftadan keyin oq rangli kristallar shakllanganligi aniqlandi. Cho‘kma eritmadan filtrlab ajratildi va spirtda bir necha bor yuvilib, xona haroratida ochiq havoda quritildi. Unumi 75%, T_{erish}=**176 ^{0}C.** Sintez reaksiya tenglamasi:

$$2La(NO_3)_3·6H_2O+3MAB \rightarrow [La(NO_3)_6][MAB\text{-}H]_3+ La(OH)_3 + 3H_2O$$

Kompleks tarkibidagi C, H, N elementlar tahlili “FlashSmart” (Thermo Fisher Scientific, Germaniya) uskunasida aniqlangan. Olingan kompleks birikmadagi uglerod, azot va lantanoidlar miqdori energiya-dispersion tahlilli skanerlovchi elektron mikroskop SEM-EDS (JSM-IT200LA, JEOL, Yaponiya) orqali ham aniqlangan.

Kompleks birikma hamda ligandlarning IQ spektrlari 400–4000 sm^{-1} oralig‘ida Spectrum Two (Perkin Elmer, AQSh) spektrometrida qayd etilgan. Shuningdek, komplekslarning tuzilishi 100-3400 sm^{-1} sohada Raman spektroskopiya usulida “MacroRAM” (Horiba Scientific, Yaponiya) da aniqlangan. O‘lchashlar “O‘zbekiston-Yaponiya yoshlar innovatsiya markaz” DM da amalga oshirilgan.

Termik tahlillar Tokio texnologiya institutida Netzsch Simporary Analyzer STA 409 PG (Germaniya) termodinamik

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

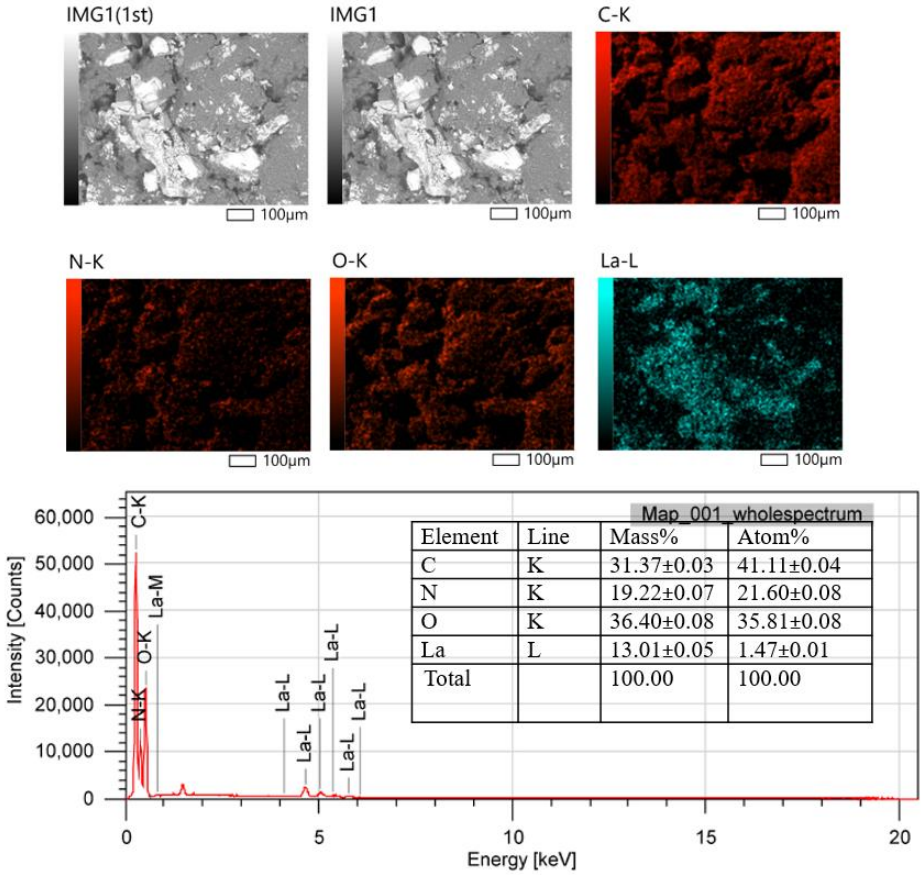
TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

uskunasida o'tkazildi. Barcha o'lchovlar inert azot atmosferasida 50 ml/min oqim tezligida, tahlil harorati oralig'i 20-1000 °S, isitish 5 K/min tezlikda amalga oshirildi. Bir o'lchovdagi namuna miqdori 6-10 mg ni tashkil qiladi. Namuna qopqoqsiz diametri 10 mm bo'lgan korund tigel joylashtirildi. Namunaning massasi, komplekslarning parchalanish massasi va termik barqarorlik harorat oshishi bilan o'zgaradi.

Monokristallarning kristallografik kattaliklari Bioorganik kimyo instituti qoshidagi "Ilmiy asbob uskunalardan jamoaviy foydalanish" markazidagi avtomatik Xcalibur® Oxford Diffraction difraktometrida (grafitli monoxromator, Cu-K_α-nurlanish λ=1,54184 Å) amalga oshirildi. Yutilish tuzatmalari *CrysAlisPro* dastur ta'minoti to'plamida «multi-scan» usulida amalga oshirildi. Kristallar strukturasini keltirib chiqarish va aniqlash uchun SHELXS-97, SHELXL97 va Olex2 [15] dasturlari majmuasidan foydalanildi. Geometrik hisoblar PLATON dasturi yordamida amalga oshirildi [16]. Molekulyar diagramma va qadoqlash diagrammasini qurish uchun MERCURY dasturiy paketidan foydalanilgan [17].

NATIJALAR VA MUHOKAMA. Sintez qilingan $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleks birikmaning mikrostrukturasi va tarkibi SEM-EDX usulida o'rganildi (1-rasm). SEM-EDX natijalari ligandlarning mikro tuzilishidagi o'zgarishlar bilan bir qatorda metall ionlariga xos bo'lgan ko'p sonli cho'qqilari mavjudligini ko'rsatdi. Elementlarning foiz miqdori amalda topilgan elementlarning foiz miqdoriga deyarli tengligi aniqlandi.



1-rasm. Kompleks $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ ning mikrostrukturasi, xaritalash va element tahlil natijalari

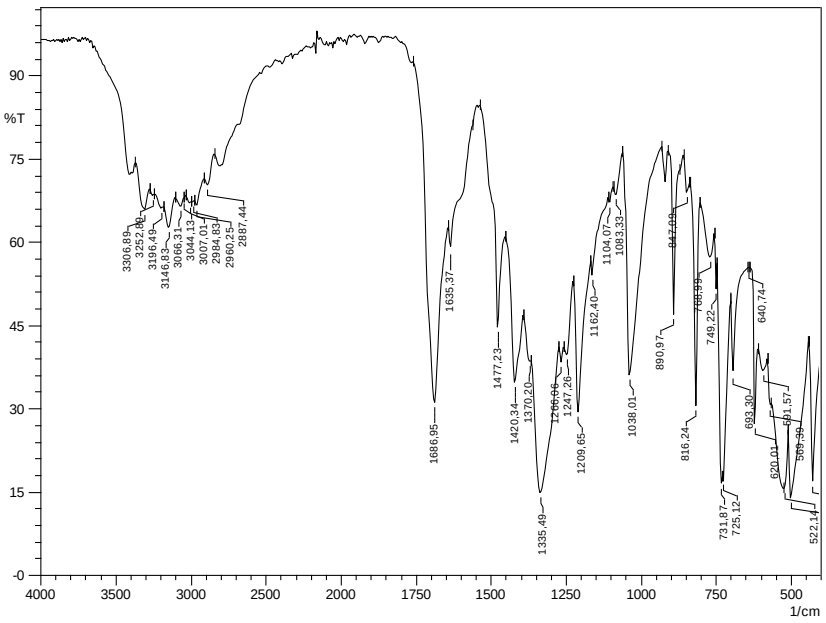
Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

Kompleks $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ ning tuzilishi IQ-spektroskopiya usulida o'rganildi (2-rasm). Bunda kompleks birikmaning IQ-spektri dastlabki ligand MAB ning IQ-spektri bilan solishtirildi. MAB ning IQ-spektrida 3451 va 3045 sm^{-1} sohada $\nu(NH_2)$ guruhning simmetrik ν_s va asimmetrik ν_{as} valent tebranishlari, 1615-1655 sm^{-1} sohada birlamchi, 1546 sm^{-1} da esa ikkilamchi aminoguruhning deformatsion tebranishlari kuzatiladi. ν(NH) (3087 sm^{-1}) va ν(CH) (3034 sm^{-1}) ga tegishli bo'lgan keng chiziqlar ham mavjud. Geteroaromatik sistemadagi ν(C=N) guruh 1655 sm^{-1} sohada tebranishlar beradi. Benzol halqasidagi C-N gupuhining valent tebpanishlapi 2728-3086 cm^{-1} sohada kuzatiladi. Imin guruhining valent tebranishlari 3198–3308 cm^{-1} sohada namoyon bo'ladi.

Kompleks birikma $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ ning IQ-spektrlarida yuqoridagi deyarli barcha tebranish chastotalar saqlanib qolingan, faqat ular o'zlarining qiymatlari va shaklini qisman o'zgartirgan. Asosiy o'zgarish geterohalqadagi *ν(C=N)* guruhda ketgan. Ushbu guruhning protonlanishi natijasida tebranish chastotasi to'lqin uzunligi yuqori tomonga siljib, 1686 sm^{-1} sohada intensiv pik bergan. IQ-spektrida 1336 sm^{-1} sohada namoyon bo'lgan kuchli chiziqlar bidentat-koordinatsiyalangan NO_3^- guruhga tegishli. Ligand spektrida mavjud bo'lmagan 522-569 cm^{-1} sohalarda O-La bog'iga tegishli bo'lgan yutilish chiziqlarining kuzatilishi mapkaziy atom nitrat kislota qoldig'i bilan bidentat bog'langanligidan dalolat beradi.



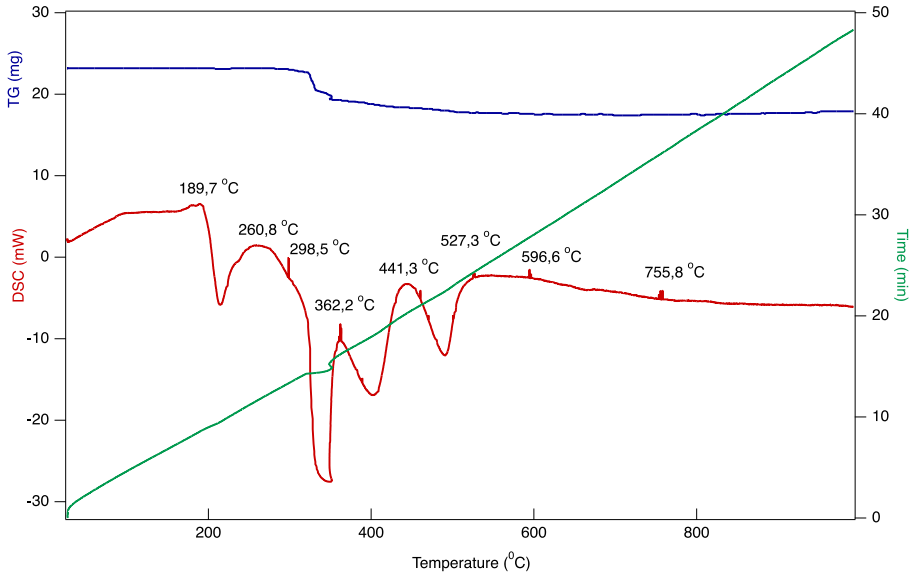
2-rasm. $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleks birikmaning IQ-spektri

$[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleks birikmaga haroratning ta'sirini o'rganish, parchalanishning oraliq mahsulotlarini identifikatsiya qilish maqsadida differensial termik tahlil o'tkazildi. Kompleksning derivatogrammasi 3-rasmda keltirilgan.

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

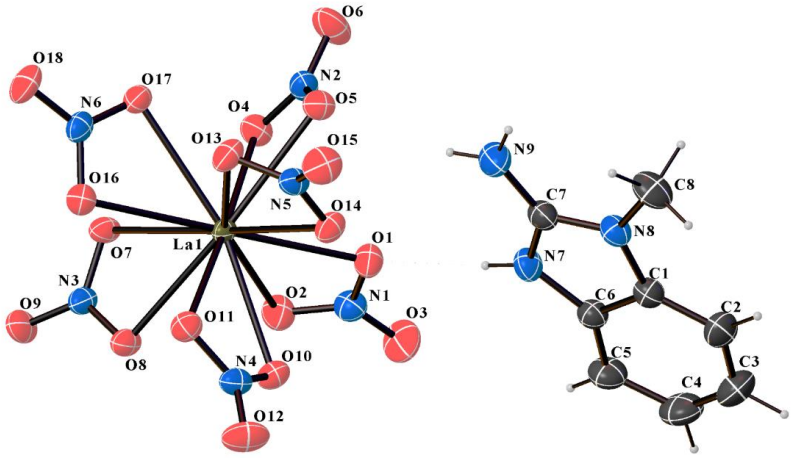
TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz



3-rasm. $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleks birikmaning derivatogrammasi

Kompleksdagi dastlabki endoeffekt 216,6 ^{0}C da kuzatilib, bunda massa o‘zgarishi sodir bo‘lmaydi, asosan kompleksning erishi uchun energiya sarflanadi. Dinamik termogravimetrik analiz egri chizig‘i (DTGA) tahlili shuni ko‘rsatadiki, jarayon asosan ikkita intensiv parchalanadigan temperatura oralig‘ida amalga oshadi. La^{+3} kompleksi uchun birinchi parchalanish oralig‘i 261-360 ^{0}C temperaturaga, ikkinchi parchalanish oralig‘i esa 365-780 ^{0}C temperaturaga mos keladi. Tahlillar shuni ko‘rsatadiki, birinchi parchalanish oralig‘ida intensiv jarayon sodir bo‘lib, asosiy massasining 75% ga kamayishi kuzatiladi. Bunda kompleksning termik parchalanish jarayoni suv, nitrat va organik ligandning parchalanishi kabi oraliq mahsulotlarning hosil bo‘lishi bilan bog‘liq bo‘lgan katta miqdordagi issiqlik chiqishi bilan sodir bo‘ladi. Parchalanishning ikkinchi bosqichini anionning qolgan qismining yo‘qolishi va La_2O_3 hosil bo‘lishi bilan izohlash mumkin.



1-rasm. Kompleksning molekulyar tuzilishi

Olingan kompleks birikma $[La(NO_3)_6][(MAB\text{-}H)]_3$ ning kristall tuzilishi rentgenstruktura usulida tahlil qilindi. Ushbu kompleks birikma monoklinik singoniyaga ega bo'lib, fazoviy guruhi $P2_1/c$, elementar yacheyka (Z=1) parametrlari quyidagicha: a=11.78754(10) Å, b=17.59536(14) Å, c=17.79338(15) Å, β=99.4928(8)°, V=3639.92(5) Å^3, Z=4, T=293 K. Kompleks birikmaning kristallografik ma'lumotlari 1-jadvalda keltirilgan.Kompleks birikmaning struktur tuzilishida La atomi buzilgan ikosaedral poliedrda o'n ikki koordinatsiyali tuzilishga ega (1-rasm).

1- jadval

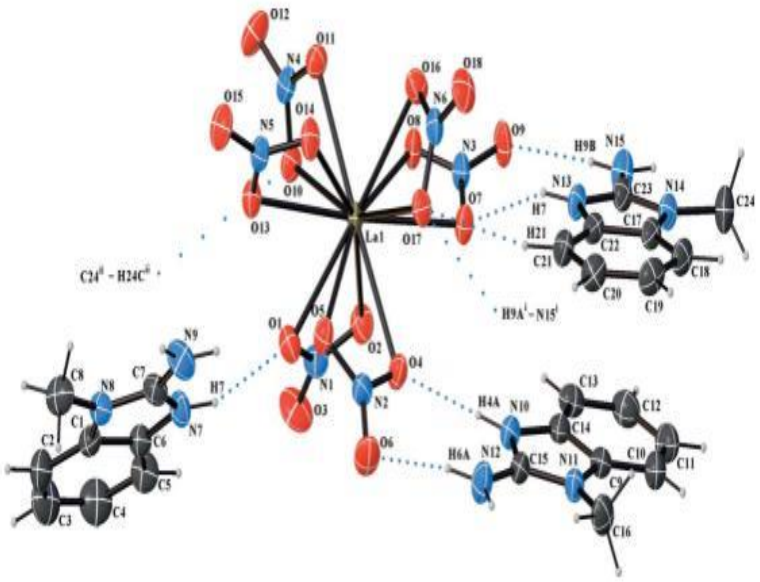
Kompleks $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ ning kristallografik ma'lumotlari

Parametr	Qiymatlar	Parametr	Qiymatlar
Formula	$C_{24}H_{30}N_{15}LaO_{18}$	Kristall o'lchami, mm	0,21 × 0,18 × 0,12
Molekulyar massa	955.54	Harorat T, °K	296(2)
Singoniya	Monoklinik	Skanerlash oralig'i θ,°	3.4 −76.0
Fazoviy guruh	$P2_1/c$	Interval h,k,l	−4:6; −8:8; −16:15
a, Å	11.78754(10)	Jami reflekslar	5985
b, Å	17.59536(14)	Mustaqil reflekslar soni	971
c, Å	17.79338(15)	R_{int}	0.042
α °	81.783(16)	$F^2 \geq 2\sigma(F^2)$ kriteriy	882
β °	99.4928(8)	Aniqlagan parametrlar	527
γ °	76.367(15)	Strukturani aniqlash sifati	1.08
V, Å^3	3639.92(5)	R_1, wR_2 ($I>2\sigma(I)$)	0.0318, 0.0891, 1.04
Z	4	$\Delta\rho_{min/max}$, eÅ^{-3}	0.69/-0.73
D_x, g/cm^3	1.700	CCDC-raqami va ref-kod	2132821
$\mu(CuK_\alpha)$, mm^{-1}	1.54184		

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

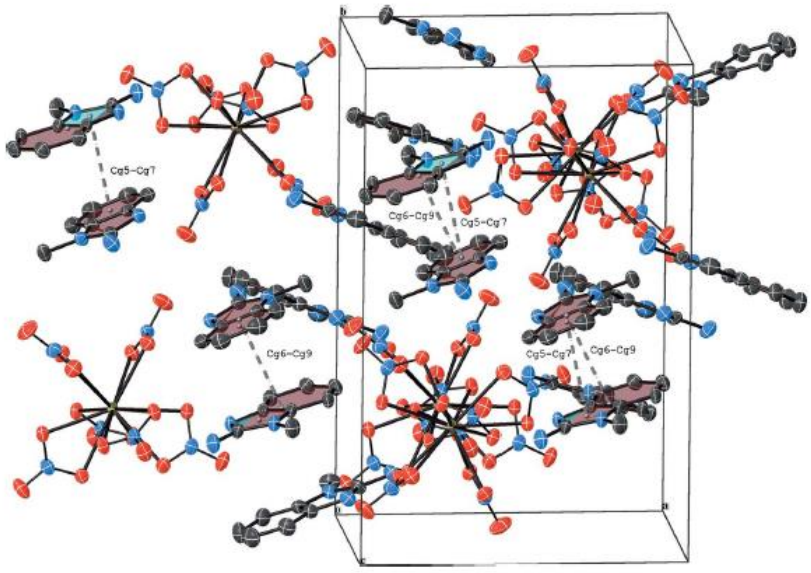
TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz



2-rasm. Molekulyar N—H···O o'zaro ta'sirlarning ko'rinishi. Vodorod bog'lar ko'k punktr chiziqlar bilan keltirilgan

Elementar yacheykada lantan atomlarining har bir jufti deyarli har bir kristallografik siljish tekisliklarida yotadi, mos ravishda 03/20 va 040 (o'rtacha tekislikdan og'ish bilan = 0,00(7)-0,02(1) Å). 12,67(6) Å masofadagi qo'shni siljish tekisliklarida yotuvchi La atomlari orasidagi kesishma elementar yacheykaning inversiya markazidan o'tadi. Benzimidazoliy birliklari mos ravishda 3,256 va 4,414 Å masofadagi benzol halqalarining tekis (C9-C14)-markazli π-π -o'zaro ta'sirini hosil qiladi [simmetriya kodi: -x+1; -y+1; -z+1] va bularning barchasida markaz elementar yacheykaning inversiya markaziga mos keladi (3-rasm).



3- rasm. Kompleksning kristall tuzilishidagi π-π o'zaro ta'sir

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

Benzimidazoliy birligining N8—C24 bog‘ uzunligi 1,455(4) Å sirpanish tekisligida yotgan bo‘lsa, imidazoliy birligi bu kristallografik tekisliklarning yarmini kesib o‘tadi. Bog‘ uzunligi 2,699(2) Å bo‘lgan La1←O7 koordinasion bog‘i ham kristallografik sirpanish tekisligida yotadi. Lantan atomi kislorod atomlari bilan o‘n ikkita koordinasion bog‘ hosil qilgan. La—O va La←O bog‘ uzunligi 2.612(2) Å va 2.707(2) Å, O—La—O bog‘ burchaklari esa 47.44 (6)° (O1—La1—O2), 47.93 (6)° (O4—La1—O5), 47.68 (9)° (O7—La1—O8), 47.97 (6)° (O10—La1—O11), 48.26 (2)° (O13—La1—O14) va 47.80 (0)° (O16—La1—O17) oralig‘ida o‘zgarib turadi. Simmetriya natijasida ikki va to‘rtta nitrat anionlarining koordinatsiyasi t12 = 0,00 dan turli qiymatlarga ega bo‘lgan trans burchaklarni hosil qiladi va shuning uchun geometrik tavsifni tartibsiz kubsimon ikosaedral ko‘pburchak tartibiga yaqin deb hisoblash mumkin. $[LaN_6O_{18}]^{3-}$ birliklarining geometrik parametrlari bir-biriga o‘xshash va lantan nitrat/suv koordinatsiyalangan molekulalarining geometrik parametrlarining boshqa tuzilmalarda kuzatilgan qiymatlardan sezilarli og‘ishlarini ko‘rsatmaydi [4, 18-19]. Sintez qilingan kompleks birikmaning ba’zi muhim bog‘lanish parametrlari (bog‘ uzunligi va bog‘ burchaklari) 2-jadvalda keltirilgan. Lantan kompleksining kristall tuzilishi ham koordinasion, ham oddiy La-O bog‘lanishlarini o‘z ichiga oladi.

2-Jadval

Kompleksning ba’zi geometrik parametrlari (Å, °)

La1 – O1	2.646 (2)	La1 – O10	2.652 (1)
La1 – O2	2.707 (2)	La1 – O11	2.632 (2)
La1 – O4	2.650 (2)	La1 – O13	2.612 (2)
La1 – O5	2.661 (2)	La1 – O14	2.655 (2)
La1 – O7	2.699 (2)	La1 – O16	2.674 (2)
La1 – O8	2.646 (8)	La1 – O17	2.662 (2)
O1 – La1 – O2	47.44 (6)	O10 – La1 – O11	47.97 (6)
O4 – La1 – O5	47.93 (6)	O13 – La1 – O14	48.26 (2)
O7 – La1 – O8	47.68 (9)	O16 – La1 – O17	47.80 (0)
N7 – C7	1.335 (4)	N8 – C7	1.341 (4)
N7 – C6	1.388 (3)	N8 – C8	1.455 (4)
N9 – C7	1.314 (4)	N8 – C1	1.395 (3)

4-rasmda ko‘rsatilganidek, qo‘shni benzimidazolium molekulalari lantan/nitrat birligini uch tomonlama tartibga solingan kuchli o‘zaro ta’sirlar orqali barqarorlashtiradi. Oltita nitrat birligidagi azot atomlari har bir mos keladigan La—O—N—

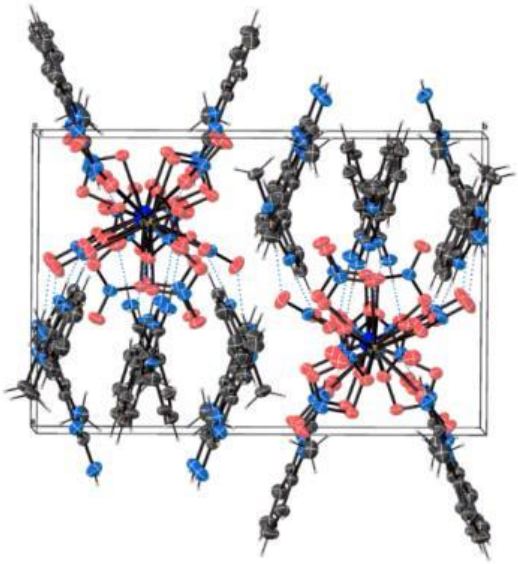
Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

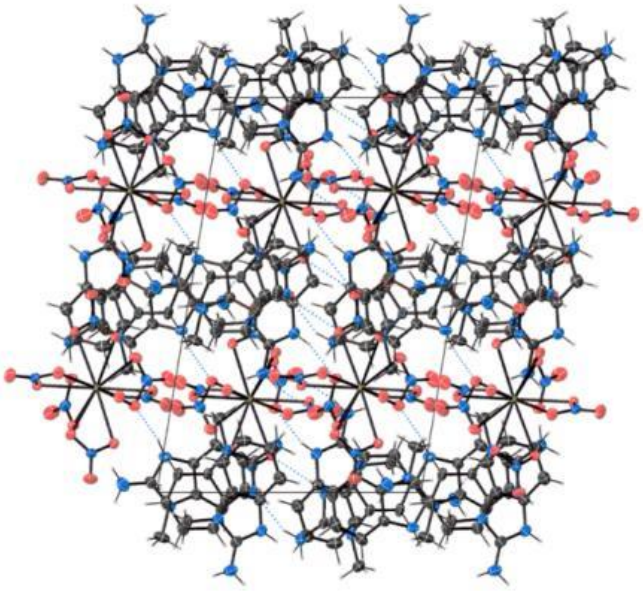
www.xabarnoma.terdpi.uz

O tekisligiga koplanarga yaqin, ya'ni 180° dan biroz og'ishgan. Kompleks uchun c o'qi yo'nalishi bo'yicha lantan zanjiri tartibini tashkil etuvchi qo'shni La/nitrat anionlari va benzimidazoliy kationlari o'rtasida bitta N—H···O va ikkita zaif C—H···O o'zaro ta'sirlari (3-jadval) mavjud va bir vaqtning o'zida La-atomlari strukturaning taxlami natijasida hosil bo'lgan trubka kanallariga kirishi mumkin (4-rasm). Bundan tashqari, nitrat qismlarining kislorod atomlari va $C_8H_{10}N_3$ molekulalari o'rtasida beshta kuchli N—H···O o'zaro ta'siri mavjud bo'lib, ular zanjir tartibini barqarorlashtiradi va b o'qi yo'nalishiga perpendikulyar joylashadi (5-rasm). Tris(2-amino-1-metilbenzimidazol) geksa kis(nitrato-O,O) lantan (III) kompleksining uch o'lchovli tuzilishi ushbu molekulalararo bog'lar va o'zaro ta'sirlardan yig'iladi

.



4-rasm. c o'qi bo'ylab La/nitrat anionlari zanjirining tartibi. Vodorod bog'lari ko'k punktir chiziqlar bilan ko'rsatilgan



5-rasm. Uch o'lchovli supramolekulyar tarmoqni tasvirlaydigan molekulaning b o'qi bo'yicha taxlami

3-Jadval

Vodorod bog'lar geometriyasi (Å, °)

C–H···O are the vdW contacts

D – H···*A*	*D* – H	H···*A*	*D*···*A*	*D* – H···*A*
N15^{i}–H9A^{i}···O17	0.86	2.32	3.001 (3)	136.0
C24^{ii}–H24C^{ii}···O10	0.96	2.52	3.348 (5)	137.7
C21–H21···O17	0.93	2.64	3.530 (5)	160.9
N7–H7···O1	0.86	2.01	2.819 (3)	157.0
N10–H4A···O4	0.86	2.05	2.889 (3)	163.9

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

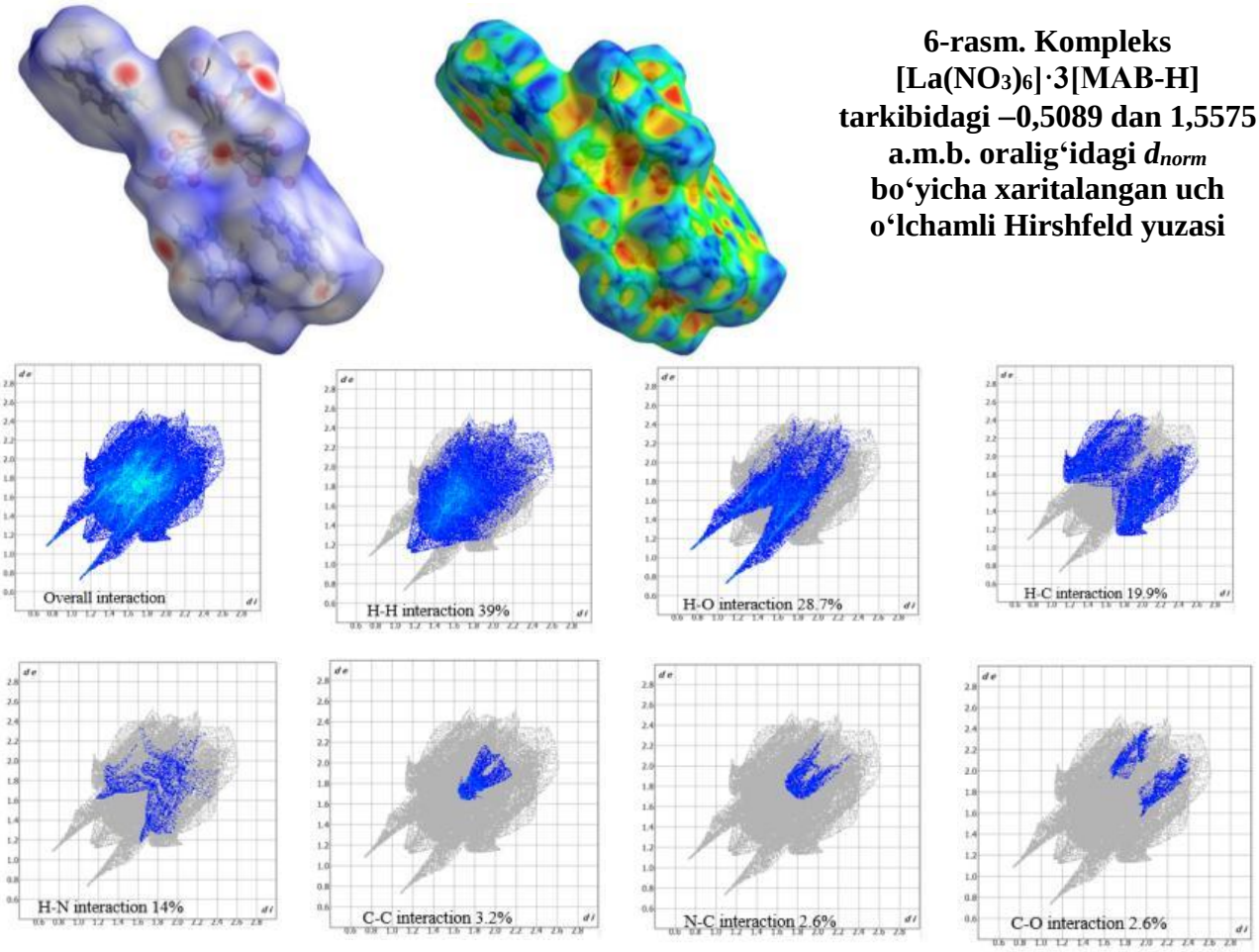
TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

N12–H6A···O6	0.86	2.10	2.944 (3)	164.7
N13–H7···O7	0.86	2.11	2.920 (4)	156.2
N15–H9B···O9	0.86	2.14	2.946 (3)	154.9

Symmetry codes: (i) x, -y + ½, z – ½; (ii) x - 1, -y + ½, z – ½.

Hirshfeld sirt tahlili Crystal Explorer dasturi yordamida amalga oshiriladi va u Hirshfeld yuzasi va moddalarning ikki o'lchovli barmoq izlari tasvirlari yordamida kovalent bo'lmagan o'zaro ta'sirlarni aniqlash uchun amalga oshiriladi (6-rasm). Molekulaning Hirshfeld yuzasi kristallning elektron zichligi qayerda joylashganligini ko'rsatadi. Hirshfeld yuzasi tasvirlarida molekulalardagi atomlarning o'zaro ta'siri Van-der-Vaals radiuslari yig'indisiga nisbatan uch xil holatda joylashganligini ko'rishimiz mumkin. Masalan, uzunroq joylar ko'k, teng joylar oq va qisqaroq joylar qizil rangga ega. d_{norm} tasvirlari ustida qizil rangda ko'rsatilgan soha molekulalararo vodorod bog'lariga tegishli bo'lgan atomlarni ko'rsatadi. Molekulalarda C−H· · ·π va π· · ·π mavjudligi vodorod bog'lar bor yoki yo'qligini aniqlash uchun Hirshfeld sirt tahlilidagi Shape Index tasvirlari qo'llaniladi.



6-rasm. Kompleks $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ tarkibidagi –0,5089 dan 1,5575 a.m.b. oralig'idagi d_{norm} bo'yicha xaritalangan uch o'lchamli Hirshfeld yuzasi

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

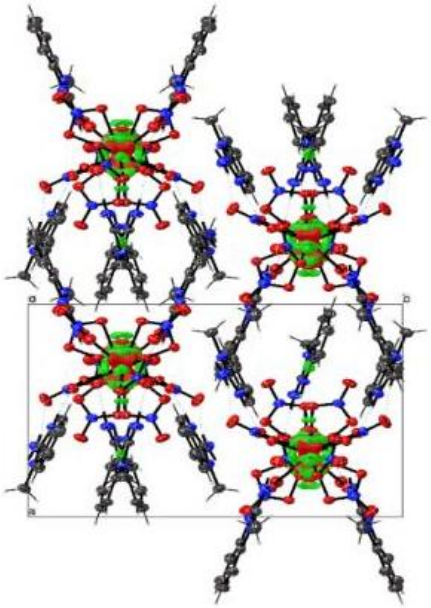
TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz

7-rasm. $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ ning to'liq ikki o'lchamli barmoq izlari sohasi. Hirshfeld yuzasida berilgan nuqtadan eng yaqin ichki va tashqi masofada (Å) joylashgan d_i va d_e qiymatlari

Aromatik halqalar atrofidagi ko'k uchburchaklar va qizil doiralar bu sohadagi atomlarning aloqalari o'rtasida o'zaro ta'sir mavjudligini anglatadi. Hirshfeld sirt tahlili bu kompleks orasidagi o'zaro ta'sirlarni miqdoriy jihatdan tahlil qilish imkonini beradi. Kuchli o'zaro ta'sirni ko'rsatadigan qizil dog'lar 2-amino-1-metil benzimidazoldagi aminodagi ikkala vodorod atomida ham va shuningdek lantanga birikib turgan kislorod atomlarida ham uchraydi. Buni barmoq izi tahlilida ko'radigan bo'lsak H-H orasidagi bog'lanish qadoqlashning 39% ini tashkil qilib eng yuqori ko'rsatgichga ega bo'lgan. Keyingi o'rinda H-O va H-C o'rtasidagi bog'lanishlarga tegishli bo'lib 28,7% hamda 19,9% ni tashkil qilgan. Oraliqdagilar H-N va C-C larga tegishli bo'lib mos ravishda 14% va 3.2% ni tashkil qilgan va qolgan atomlar o'rtasidagi ta'sirlashuvlarning barchasi 5,2% ni tashkil etadi (7-rasm).

Sintez qilingan$[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleks birikma zich taxlangan yoki yo'qligini aniqlash uchun molekulaning bo'shliq tahlili amalga oshirildi. Kristalning elektron zichligi yuzasi va elektron zichligini xaritalashga (8-rasm) asoslanib, kristaldagi bo'shliqni aniqlash va vizualizatsiya qilish uchun o'zgaruvchan radiusli zond sharini eritilgan sfera tasviri bo'ylab aylantirish orqali, bo'shliqni xaritalashning an'anaviy yondashuvidan foydalanish yordamida molekulaning sirt maydonlari va bo'shliqlar hajmini osongina hisoblash mumkin [20-21].



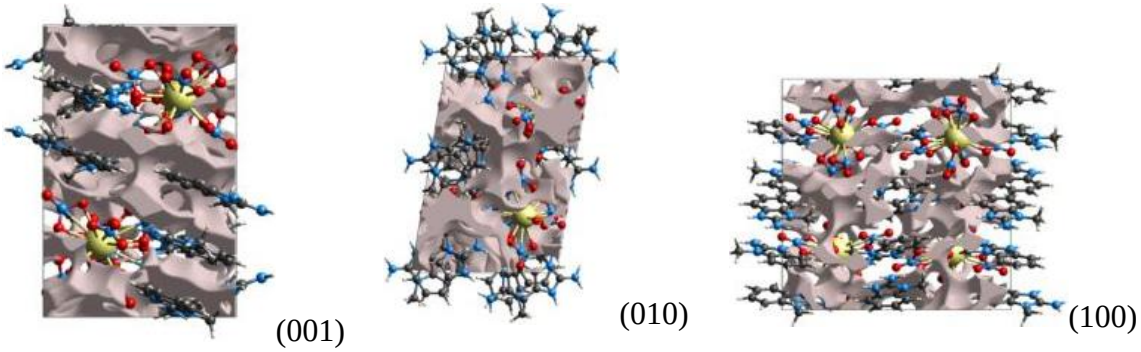
8-rasm. Lantanning $[La(NO_3)_6]\cdot 3[MAB\text{-}H]$ kompleksi uchun elektron zichlik xaritasining c o'qi bo'ylab ko'rinishi

9-rasmda bo'shliq yuzasi 0,002 au va elementar yacheykaning hajmi 388,80 $Å^3$ bo'lgan kompleks birikma elementar yacheykasining taxlami (upakovka) o'rami ko'rsatilgan. Bu bo'shliqning 10,68% bo'sh joyni egallaganligini va shuning uchun ushbu kompleks molekulalari kuchli o'ralganligini ko'rsatadi.

Sifatli ta'lim-yorqin kelajak
ISSN: 3060-4761

TerDPI ILMIY XABARNOMASI
SCIENTIFIC BULLETIN OF THE TerSPI
НАУЧНЫЙ ВЕСТНИК ТерГПИ

www.xabarnoma.terdpi.uz



9-rasm. Lantan kompleksining uch o'lchamda grafik ko'rinishi

XULOSA. Ilk bor lantan (III) ning tarkibi $[La(NO_3)_6]\cdot[MAB\text{-}H]_3$ bo'lgan kompleks birikmasi sintez qilindi. Sintez qilingan kompleks birikmaning tarkibi, kimyoviy bog' tabiati, termik xususiyatlari fizik-kimyoviy tahlillar yordamida aniqlandi. Rentgen struktur tahlil usulida ushbu kompleksning kristall va molekular tuzilishlari o'rganildi. $[La(NO_3)_6]\cdot[MAB\text{-}H]_3$ ikosaedral tuzilishda bo'lib, unda lantan ionining koordinatsion soni o'n ikkiga teng ekanligi aniqlandi. [La(NO3)6]·[MAB-H]3 kompleksida molekulalararo o'zaro ta'sirlarda asosiy ulushlar O···H/H···O (50.8%), H···H (26.6%), H···C (6.3%) H···N/N···H (4.6%), N···C (3.7%) atomlari orasidagi ta'sirlarga mos kelishi isbotlandi.

ADABIYOTLAR RO'YXATI

1. del C. Fernández-Fernández M. et al. Lanthanide (III) complexes with a tetrapyridine pendant-armed macrocyclic ligand: 1H NMR structural determination in solution, X-ray diffraction, and density-functional theory calculations //Inorganic chemistry. – 2006. – V. 45. – N 11. – P. 4484-4496. https://doi.org/10.1021/ic0603508

2. Olea-Román D. et al. Lanthanide coordination compounds with benzimidazole-based ligands. luminescence and EPR //Journal of Molecular Structure. – 2018. – V. 1163. – P. 252-261. https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2018.02.062

3. Barry D. E., Caffrey D. F., Gunnlaugsson T. Lanthanide-directed synthesis of luminescent self-assembly supramolecular structures and mechanically bonded systems from acyclic coordinating organic ligands //Chemical Society Reviews. – 2016. – V. 45. – N. 11. – P. 3244-3274. https://doi.org/10.1039/C6CS00116E

4. Bezzubov S. I. et al. Synthesis, structure, and optical properties of lanthanum (III), cerium (III), praseodymium (III), and nickel (II) heterometallic complexes with glycine //Russian Journal of Inorganic Chemistry. – 2017. – V. 62. – P. 1197-1201. https://doi.org/10.1134/S0036023617090030

5. Chen W. et al. The construction of homochiral lanthanide quadruple-stranded helicates with multiresponsive sensing properties toward fluoride anions //Chemistry–A European Journal. – 2017. – V. 23. – N. 41. – P. 9804-9811. https://doi.org/10.1002/chem.201700827

6. Terada N., Mamiya H. High-efficiency magnetic refrigeration using holmium //Nature communications. – 2021. – V.12. – N.1. – P. 1212. https://doi.org/10.1038/s41467-021-21234-z

7. Ganie A. M. et al. Benzimidazole derivatives as potential antimicrobial and antiulcer agents: A mini review //Mini reviews in medicinal chemistry. – 2019. – V.19. – N 16. – P. 1292-1297. https://doi.org/10.2174/1381612824666181017102930

8. Moharana A. K. et al. Synthesis and anti-inflammatory activity evaluation of some benzimidazole derivatives //Pharmaceutical Chemistry Journal. – 2022. – V. 56. – N. 8. – P. 1070-1074. https://doi.org/10.1007/s11094-022-02755-3

9. El-Gohary N. S., Shaaban M. I. Synthesis and biological evaluation of a new series of benzimidazole derivatives as antimicrobial, antiquorum-sensing and antitumor agents //European journal of medicinal chemistry. – 2017. – V.131. – P. 255-262. https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2017.03.018

10. Taha M. et al. Synthesis, antiglycation and antioxidant potentials of benzimidazole derivatives //Journal of King Saud University-Science. – 2020. – V. 32. – N.1. – P. 191-194. https://doi.org/10.1016/j.jksus.2018.04.003

11. Hernández-López H., Tejada-Rodríguez C. J., Leyva-Ramos S. A panoramic review of benzimidazole derivatives and their potential biological activity //Mini Reviews in Medicinal Chemistry. – 2022. – V. 22. – N. 9. – P. 1268-1280. https://doi.org/10.2174/1389557522666220104150051

12. Nardi M. et al. A review on the green synthesis of benzimidazole derivatives and their pharmacological activities //Catalysts. – 2023. – V. 13. – N. 2. – P. 392. https://doi.org/10.3390/catal13020392

13. Li X. Z., Tian C. B., Sun Q. F. Coordination-directed self-assembly of functional polynuclear lanthanide supramolecular architectures //Chemical Reviews. – 2022. – Т. 122. – №. 6. – С. 6374-6458. https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.1c00602

14. Gawryszewska P., Ślepokura K., Lisowski J. Triple-Decker Hexaazamacrocyclic Lanthanide (III) Complexes: Structure, Magnetic Properties, and Temperature-Dependent Luminescence //Inorganic Chemistry. – 2024. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.4c02047

15. Sheldrick G.M. Crystal structure refinement with SHELXL // Acta Crystallogr. Sect. C. –2015. –V.71. –P. 3-8

16. Spek A.L. Checkcif validation ALERTS: What they mean and how to respond// Acta Cryst. E. – 2020. –V.76. –P. 1–11.

17. Macrae C.F., Sovago I., Cottrell S.J., Galek P.T.A., McCabe P., Pidcock E., Platings M., Shields G.P., Stevens J.S., Towler M., Wood P.A. Mercury 4.0 from visualization to analysis, design and prediction // J Appl Crystallogr. –2020. –V.53. –P. 226–235. https://doi.org/10.1107/S1600576719014092

18. Burk J. et al. DFT study of 2, 9-bis (1, 2, 4-triazin-3-yl)-1, 10-phenanthroline (BTPhen) and its derivatives complexation with lanthanide series //Computational and Theoretical Chemistry. – 2020. – T. 1175. – C. 112729. https://doi.org/10.1016/j.comptc.2020.112729

19. Fowkes A., Harrison W. T. A. Bis (homopiperazinium) diaquapentakis (nitrato-κ2O,O′) lanthanate (III) dinitrate //Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online. – 2006. – V. 62. – N. 6. – P. 1301-1303. https://doi.org/10.1107/S1600536806017235

20. Spackman P. R. et al. CrystalExplorer: A program for Hirshfeld surface analysis, visualization and quantitative analysis of molecular crystals // Journal of Applied Crystallography. – 2021. – V. 54. – N. 3. – P. 1006-1011. https://doi.org/10.1107/S1600576721002910

21. Scimeca M. et al. Energy Dispersive X-ray (EDX) microanalysis: A powerful tool in biomedical research and diagnosis // European journal of histochemistry: EJH. – 2018. – V. 62. – N. 1. –P.1-10. https://doi.org/10.4081/ejh.2018.2841