

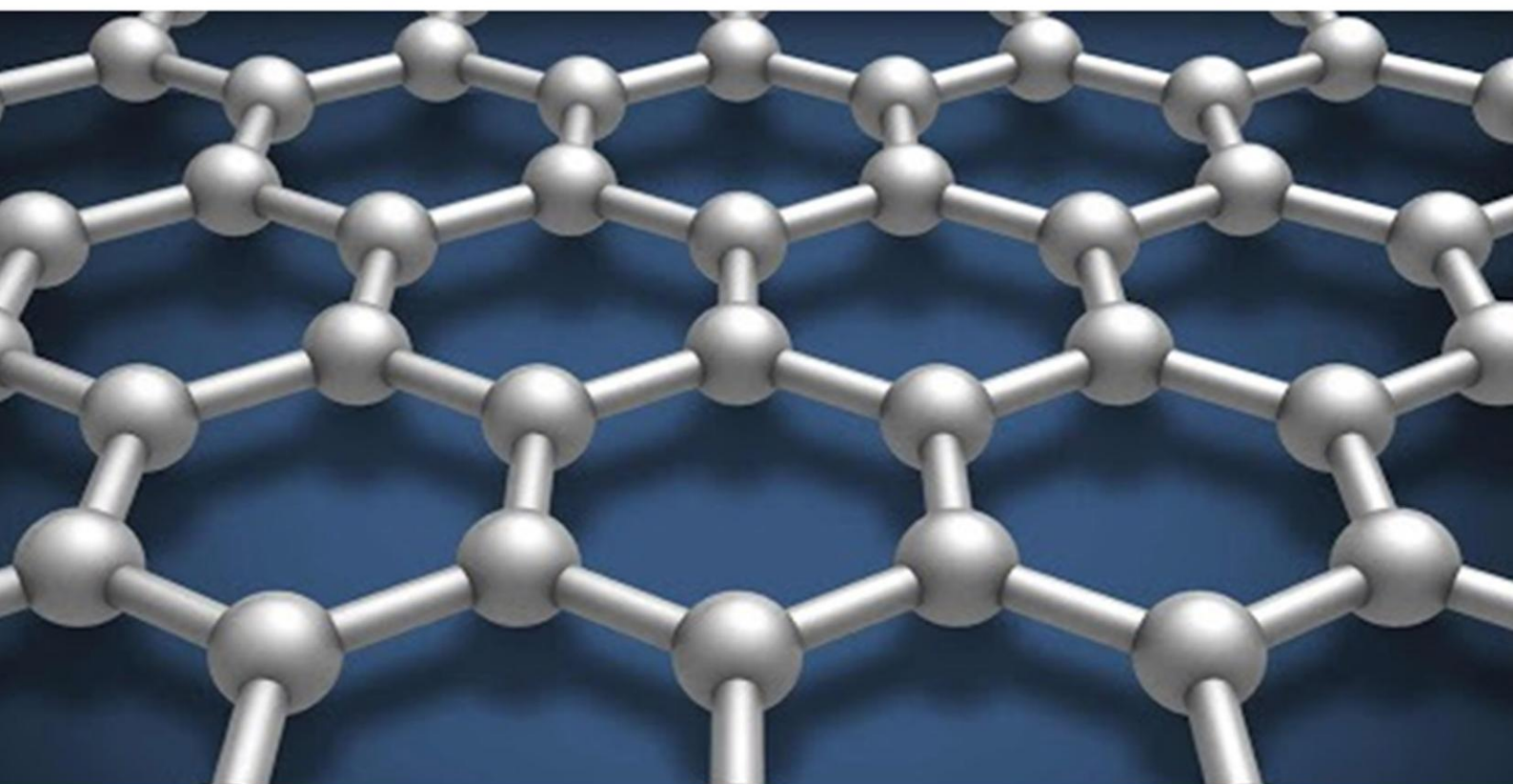
ISSN 2091-5527

№ 3/2026

O'zbekiston

# **K**ompozitsion **M**ateriallar

Ilmiy-texnikaviy va amaliy jurnali



Узбекский научно-технический и производственный журнал  
**Композиционные материалы**

УДК 541.49+ 546.47

**KOBALT(II) NING 2-MERKAPTOBENZOTIAZOL BILAN  
KOMPLEKS BIRIKMASINING SINTEZI VA TADQIQOTI****Abdullayeva Gulchexra Abduxalilovna***O'zbekiston Milliy universiteti, kimyo fakulteti katta o'qituvchisi (PhD)*

**Annotatsiya.** Kobalt (II) nitratning 2-merkaptobenzotiazol bilan kompleks birikmasini 1:2 mol nisbatida sintez qilish usuli ishlab chiqilgan. Sintez qilingan kompleksning tarkibi va tuzilishi element, derivatografik tahlil, IQ-spektroskopiya, SEM-EDX usullari bilan aniqlangan. Metall ionlari bilan koordinatsiyalanish C-S guruhining oltingugurt va tiazol halqasidagi azot atomlari orqali sodir bo'lishi aniqlangan.

**Kalit so'zlar.** ligand, kompleks birikma, tarkib, tuzulish, xossa.

**Kirish.** Zamonaviy kompleks birikmalar kimyosining eng muhim vazifalaridan biri - ma'lum xossalar va tuzilishga ega moddalarni maqsadli sintez qilish hisoblanadi. Bu vazifani hal qilish moddaning tarkibi, tuzilishi va xossalari o'rtasidagi o'zaro bog'liqlikni doimiy o'rganish zarur.

Azot saqllovchi geterotsiklik birikmalar orasida 2-merkaptobenzotiazol va uning hosilalari alohida o'rin egallaydi. 2-merkaptobenzotiazol hosilalari biologik faol bo'lib, zamburug'larga qarshi, fungitsid xususiyatga ega va antioksidant sifatida ham ta'sir ko'rsatadi [1-3]. Sanoatda ular kauchuk vulkanizatsiyasini tezlashtiruvchi moddalar sifatida qo'llaniladi hamda metall komplekslari uchun istiqbolli ligandlar hisoblanadi. Bunday komplekslar lyuminescent materiallar sifatida ham ishlatilishi mumkin [4]. 2-merkaptobenzotiazol molekulasida azot va oltingugurt atomlari mavjud bo'lib, ular metall ionlari bilan koordinatsion bog' hosil qilish imkonini beradi. Shu sababli MBT ligandlari asosida olingan kompleks birikmalar keng miqyosda o'rganilmoqda [5].

**Materiallar va usullar.** Kompleks birikmaning sintez qilish uchun organik ligand 2MBT va  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  tuzlidan foydalanildi. Foydalanilgan organik erituvchilar ma'lum metodika bo'yicha tozalandi va quritildi.

Sintez qilingan kompleks birikmalar tarkibidagi metall, uglerod, azot va oltingugurt miqdori SEM-EDX usuli yordamida aniqlandi. (Jeol IT 100 LA, Yaponiya). Birikmalarining IQ-spektrlari  $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$  soha oralig'ida «SHIMADZU» (Yaponiya) firmasining Spectrum-GX spektrometrida: diametri 13 mm bo'lgan KBr tabletkalari ko'rinishidagi namunalar yordamida,  $4\text{ cm}^{-1}$  aniqlikda foydalanib o'rganildi.

Sintez qilingan kompleks birikmaning termik xossalar SDT 650 (TA Instruments, AQSh) derivatografida o'rganildi. Tajribalar inert azot muhitida 50 ml/min oqim tezligida, 20–800 °C harorat oralig'ida, 20 K/min isitish tezligida o'tkazildi. O'lchovning kalibrlanishi  $\text{KNO}_3$ , In, Bi, Sn, Zn, CsCl standartlari yordamida amalga oshirildi. Tajriba natijalariga ko'ra, harorat ortishi bilan namunalar massasi, parchalanish bosqichlari va termik barqarorlik darajasi aniqlangan.

2MBT ning fizik-kimyoviy xususiyatlari Gaussian 09 dasturiy paketi yordamida kvant-kimyoviy taxlil qilindi. Hisoblashlar DFT nazariyasi doirasida B3LYP usulida amalga oshirildi. Model tizimlarini yaratish va tasvirlash maqsadida Avagadro 1.1, GausView 6.0.16 dasturlaridan foydalanildi.

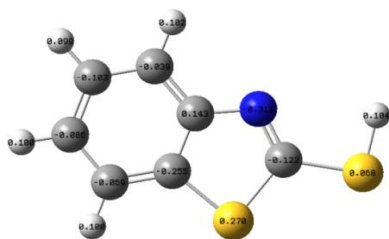
**[Co(MBT)<sub>2</sub>] kompleks birikmaning sintezi:**

2 merkaptobenzotiazolning 0.1672 g (0,001 mol) miqdori 96 % li 5 ml etanolda eritildi va doimiy magnitli aralashtirgichda aralashtirgan holda KOH ning 0,002 mol suvdagi eritmasi tomchilatib qo'shildi, eritmaning muhiti pH=7,0 keltirildi. Reaksiya 1,5 soat davomida 70–80°C haroratda qizdirildi unga  $\text{Co}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  ning 0,1455 g (0,0005 mol) miqdori 5 ml etanolda eritib, aralashtirib turgan holatda tomchilatib qo'shildi. Yashil rangli cho'kma hosil bo'ldi. Hosil bo'lgan cho'kma filtrlindi, distillangan suv va etanol bilan bir necha bor yuvildi hamda havo oqimida quritildi.  $T_s=380\text{--}382^\circ\text{C}$ , reaksiya unumi 78% ni tashkil etdi.

Massa ulushi bo'yicha hisoblandi (%): C - 41,98; N - 7,12; S - 31,48; Co - 14,98. Topildi (%): C - 42,26; N - 7,16; S - 32,76; Co - 15,06.

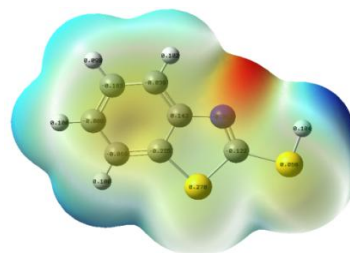
Sintez qilingan kompleks DMFA da yaxshi, etanolda oz eriydi, atseton va benzolda erimaydi.

**Natijalar va ularning muhokamasi:** Sintez qilingan komplekslarning reaksiyon markazlarini aniqlash va ligandlarning elektron tuzilishini baholash maqsadida Gaussian dasturiy majmuasida (B3LYP/6-31G(d,p) usuli asosida) kvant-kimyoviy hisoblashlar amalga oshirildi [6-8]. Ligandlarning koordinatsion qobiliyatini belgilovchi asosiy omil - bu ulardagi donor markazlarning elektron zichligidir. 2MBT molekulasida azot atomining manfiy zaryadi -0.311 ga teng. 1-rasm. 2MBT molekulasidagi ekzosiklik oltingugurtdagi manfiy zaryad miqdori pastroq bo'lsa-da, molekulyar elektrostatik potensial (MEP) xaritasida (2-rasm) azot va oltingugurt atrofida qizil rang (yuqori elektron zichligi) yaqqol ko'rinadi. Bu sohalar elektrofil hujumi yoki metall bilan bog'lanish uchun qulay nuqtalardir. Benzol xalqasidagi uglerodlarning zaryadlari deloksizasiya tufayli turlicha taqsimlangan, lekin asosiy reaksiyon markazlar geteroxalqada joylashgan.



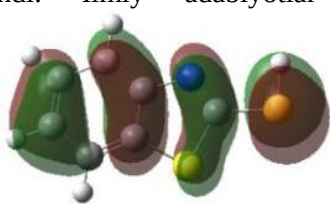
1- rasm. 2MBT molekulasiining manfiy effektiv zaryadi

Nazariy kvant-kimyoviy tadqiqotlar doirasida L ning asosiy va qo'zg'algan holatlaridagi molekulyar orbitallari holati va elektron qo'zg'alishlarning energetik ko'rsatkichlari aniqlandi. Ilmiy adabiyotlar tahlili shuni

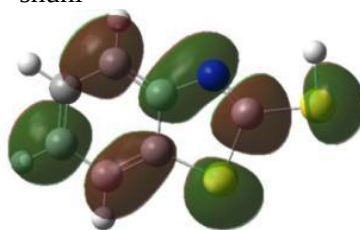


2- rasm. 2MBT molekulasiining molekulyar elektrostatik potentsiali

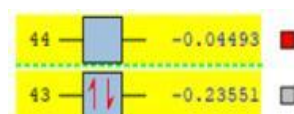
ko'rsatadiki, HOMO va LUMO orbitallari orasidagi energetik farq ( $\Delta E$ ) «taqiqlangan zona» yoki elektronlar tomonidan egallanishi mumkin bo'lmagan energetik soha hisoblanadi [9] (3-rasm).



a)



b)

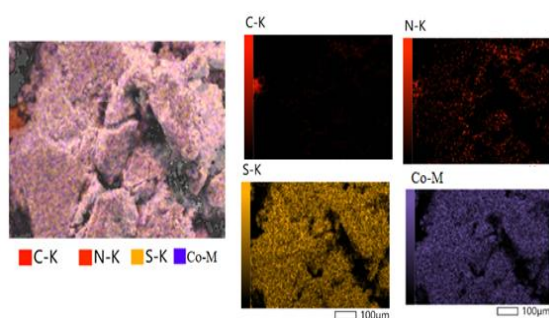


c)

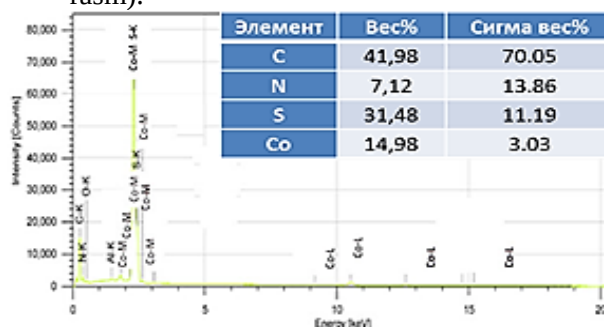
3-rasm. 2MBT molekulasiining chegaraviy molekulyar orbitallari HOMO a), LUMO (b) va molekulyar orbital energiyalari (c)

Molekulalarning kimyoviy faolligi ularning HOMO va LUMO orbitallari orasidagi energiya farqi ( $\Delta E$ ) bilan belgilanadi. 2MBT molekulasi  $\Delta E=0.19058$  a.u. ni tashkil etgan. Xulosa qilib aytganda, kvant-kimyoviy hisoblashlar natijalari MBT ning metall ionlari bilan kompleks hosil qilishda asosiy donor markazi ham azot, ham oltingugurt atomlari potensial donor markazlari hisoblanadi, bu esa uning bidentat yoki ko'priq hosil qiluvchi ligand sifatida ishtirok etishini ta'minlaydi.

Sintez qilingan kompleks birikmaning tarkibidagi azot, oltingugurt va metallning miqdoriy ulushi SEM-EDX (energiya-dispersion rentgen spektroskopiyasi) usuli yordamida aniqlandi. SEM-EDX tahlili natijalariga ko'ra, metall ioni 2MBT bilan koordinatsiyalanishi natijasida ligand mikrostrukturasi o'zgarishi kuzatildi. Xususan, olingan spektrlarda metalga tegishli xarakterli intensiv piklarning paydo bo'lishi kompleks birikma hosil bo'lganligini hamda element tahlili natijalarining ishonchliligini to'liq tasdiqlaydi (4-rasm).



a



b

4-rasm.  $[\text{Co}(\text{MBT})_2]$  kompleks birikmasining mikrostrukturasi va EDA (energiya-dispersion tahlil) ma'lumotlari

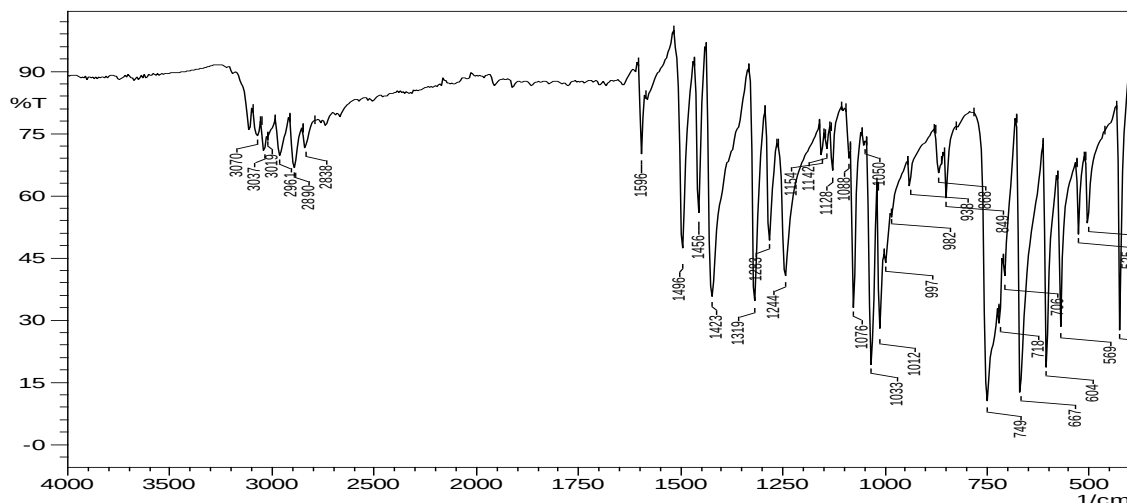
SEM-EDX tahlili natijalariga ko'ra,  $[\text{Co}(\text{MBT})_2]$  kompleksi tarkibidagi metall:ligand nisbati 1:2 ekanligi aniqlandi. Shuningdek, spektr ko'rsatkichlari birikmalar tarkibida uglerod, azot, oltingugurt va tegishli metall elementlari mavjudligini tasdiqladi.

Ma'lumki, koordinatsion birikmalarning IQ-spektrlari erkin ligandlar spektri bilan qiyosiy tahlil

qilinganda, metall-ligand koordinatsiyasi natijasida funksional guruhlarining tebranish chastotalarida sezilarli siljishlar ( $\Delta\nu$ ) kuzatiladi yoki yangi yutilish chiziqlari paydo bo'ladi. 2MBT ning tarkibida turli donor markazlarni (azot, oltingugurt atomlarini) saqlaganligi sababli, ularning metall ionlari bilan bog'lanish imkoniyatlari ko'p qirralidir.

MBT ligandining IQ-spektri tahlil qilinganda, 3070-3019  $\text{cm}^{-1}$  sohasida aromatik halqaning C-H bog'lariga tegishli valent tebranish chiziqlari namoyon bo'ldi (5-rasm). Tiazol halqasidagi C=N funksional guruhining assimetrik va simmetrik tebranishlariga xos bo'lgan xarakterli yutilish chiziqlari 1496-1456  $\text{cm}^{-1}$  sohasida qayd etildi [10]. Spekrning 2600-2550  $\text{cm}^{-1}$  oralig'ida merkaptoguruh S-H valent tebranishlariga tegishli

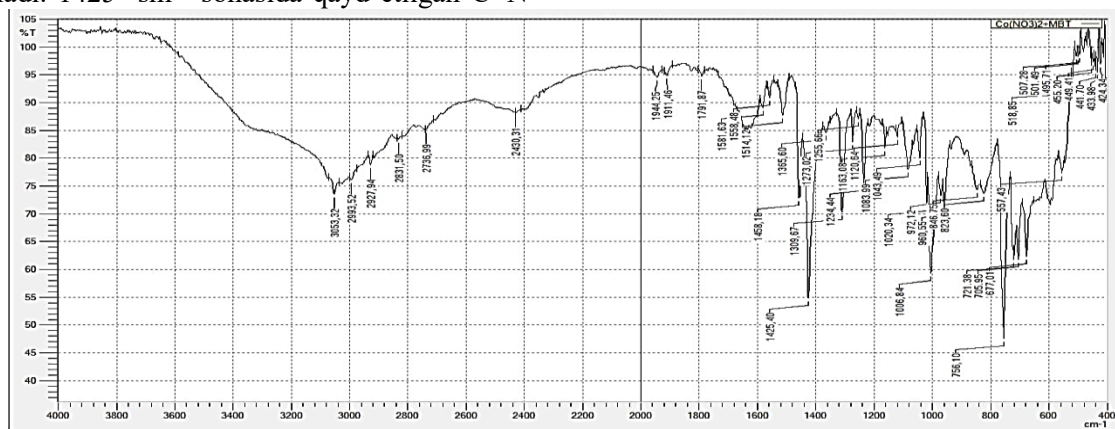
yutilish chiziqlarining kuzatilmasligi, ligandning qattiq holatda tion shaklida ekanligidan dalolat beradi. Shuningdek, 1244  $\text{cm}^{-1}$  sohasida C-N bog'ining valent tebranishlari uchun xos bo'lgan yutilish chizig'i kuzatildi [11]. Spekrning quyi chastotali  $\sim 749 \text{ cm}^{-1}$  sohasidagi chiziq esa adabiyot ma'lumotlariga [6, 12] ko'ra, C-S bog'ining valent tebranishlariga tegishlidir.



5-rasm. 2-merkaptobenzotiazolning IQ-spektri

6-rasmda sintez qilingan kompleks birikmalarning IQ-spektri keltirilgan bo'lib, unda kompleks hosil bo'lishi natijasida yuzaga kelgan siljishlar ligandga tegishli bo'lgan yutilish chiziqlari kuzatiladi. 1425  $\text{sm}^{-1}$  sohasida qayd etilgan C=N

guruhi yutilish chizig'ining xarakterli siljishi ( $\Delta\nu=31 \text{ sm}^{-1}$ ), tiazol halqasidagi azot atomining metall ionlari bilan koordinatsiyalanganligidan dalolat beradi [13].

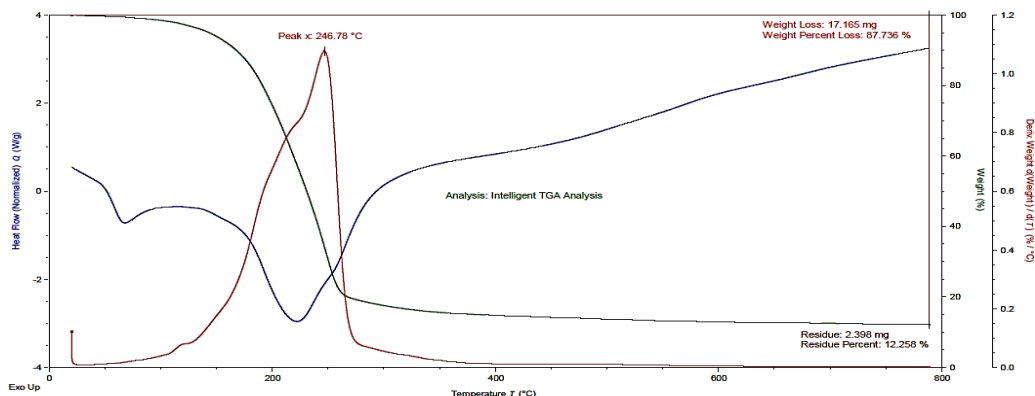


6-rasm. [Co(MBT)<sub>2</sub>]ning IQ-spektri

Ushbu holatni kompleks hosil bo'lish jarayonida donor azot atomidagi elektron zichligining siljishi (delokalizatsiyasi) bilan izohlash mumkin. C-S bog'ining valent tebranish chiziqlari 756  $\text{sm}^{-1}$  past chastotali soha tomon siljishi kuzatildi ( $\Delta\nu=7 \text{ sm}^{-1}$ ). Erkin ligand spektri bilan solishtirilganda, past chastotali diapazonda 677  $\text{sm}^{-1}$  va 424  $\text{sm}^{-1}$  sohalarida M-S va M-N bog'larining hosil bo'lganligini tasdiqlovchi yangi xarakterli yutilish chiziqlari namoyon bo'ladi [14]. Bu esa geterosiklik ligandning oltingugurt va azot atomlari orqali bidentat holatda koordinatsiyalanganligidan dalolat beradi.

Shunday qilib, MBT ligandi funksional guruhlarining yutilish chiziqlari siljishini tahlil qilish asosida, ligandning markaziy ion bilan koordinatsiyalanishi tiazol halqasining azot atomi hamda C-S guruhi orqali amalga oshishi to'g'risida xulosa qilish mumkin.

Termik analiz usuli kompleks birikmalarning termik barqarorligini o'rganishda juda muhim ahamiyatga ega, bu usul yordamida kompleksning barqarorligi, ligandlarning bog'lanish kuchi, parchalanish bosqichlari va strukturaviy o'zgarishlar haqida aniq ma'lumotlar olish mumkin.



7-rasm.  $[\text{Co}(\text{MBT})_2]$  kompleks birikmasining derivatogrammasi

7-rasmda  $[\text{Co}(\text{MBT})_2]$  tarkibli kompleks birikmaning derivatogrammasi keltirilgan. DTGA egri chizig'i umumiy parchalanish oralig'i 30-800°C temperaturaga mos keladi. 75°C va 246.78°C da endotermik effektlar kuzatilib, asosiy massani kamayishi 87.736 % tashkil etadi. Bunda ligand molekulasining parchalanishi va uchuvchan gazlarni (vodorod sulfid, azot oksidi, ammiak va karbonat ангидрид kabi qismlar) chiqib ketish hisobiga sodir bo'ladi. Termik tahlil yakunida

800°C kuzatilgan 12.26% miqdoridagi qoldiq, kompleks tarkibidagi metall oksidi qolganligini tasdiqlaydi [15].

**Xulosa.** Sintez qilingan kompleks birikmaning tarkibi, tuzilishi SEM-EDT, IQ-spektroskopiya va termik analiz usullari yordamida tadqiq etilganda polidentant ligand 2-merkaptobenzotiazol azot va oltingugurt atomlari bilan bidentat holatda birikib, 1:2 tarkibli metallkompleksni hosil qilishi aniqlandi.

#### АДАБИЙОТЛАР РО'ЙХАТИ

1. Рамазанова П.А., Абакаров Г.М., Дадашева С.Г., Курбанова Г.Н. Синтез биологически активных производных 2-меркаптобензотиазола // Вестник Дагестанского Государственного Университета. Серия 1: Естественные науки. -2021. –Т. 36. №1. -С.94-105.
2. Рамазанова П. А., Али А. М. М., Магомедова Х. А., Гаджимурадова Р. М. Синтез производных 2-меркаптобензотиазола // Известия Дагестанского Государственного Педагогического Университета. Естественные и точные науки. -2017. -Т. 11. № 3. -С. 27-34.
3. Pratiush Saxena, D.C.P. Singh, Abid Ali, Vijay Sharma. Synthesis Of Some Derivatives Of 2-Mercaptobenzothiazole And Their Evaluation As Anti-Inflammatory Agents // International Journal of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences. -2013. –V. 5. Issue 1. –P. 454-458.
4. Lou C. et al. Highly efficient synthesis of 2-mercaptobenzothiazole derivatives in water: metal sulfide–disulfide dynamic interchange reaction // Green Chemistry. – 2017. – V. 19. – N 4. – P. 1102-1108.
5. Wang L. et al. Synthesis and characterization of transition metal complexes with 2-mercaptobenzothiazole ligands.// Journal of Coordination Chemistry, 2001.
6. Рамазанова П.А., Гаджимурадова Р.М., Мусакадиева Б.Ш., Хибиев Х.С. Реакции 2-меркаптобензотиазола с различными галогеналканами //Вестник Дагестанского Государственного Университета. Серия 1: Естественные науки. 2020. –Т. 35. № 1. –С.93-112.
7. Серб П.В., Блинов Ю.Ф., Мирошниченко С.П. Квантово-химические расчеты в программе Gaussian по курсу «Физика низкоразмерных структур» // Таганрог: Изд-во ТТИ ЮФУ. -2012. -С.100.
8. Барановский В.И. Квантово химические расчеты повышенной точности. Учебное пособие. -2015. -С.89.
9. Abdullayeva G.A., Ziyatov D.A., Daminova Sh.Sh. Piridilazonaftol molekulasining kvant-kimyoviy tadqiqoti. Материалы Международной научно-технической конференции, посвященной 90-летию со дня создания Института общей и неорганической химии Академии наук Республики Узбекистан. -2023. – С. 497-498.
10. Тарасевич Б.Н. ИК спектры основных классов органических соединений. Справочные материалы – Москва: МГУ, 2012, 54 с.
11. Маткаримова Н.О., Парпиев Н.А., Хасанов Ш.Б. Синтез и исследование координационных соединений двухвалентных кобальта, никеля и меди с 2-меркаптобензотиазолом // Universum: технические науки: электрон. научн. журн. -2019.- № 11 (68). С.1039-1043.
12. Рамазанова П. А., Али А. М. М., Магомедова Х. А., Гаджимурадова Р. М. Синтез производных 2-меркаптобензотиазола// Известия Дагестанского государственного педагогического университета. Естественные и точные науки. 2017.- Т. 11. № 3. С. 27-34.
13. Abdullayeva G.A., Primova M.A., Daminova Sh.Sh. 2-merkaptobenzotiazol bilan Cd(II) kompleksini fizik tadqiqot usullari yordamida o'rganish//“Koordinatsion birikmalar kimyosining hozirgi zamon muammolari” mavzusida xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari to'plami -2022. -193-195 b.
14. Накамото К. ИК-спектры неорганических и координационных соединений. -М.: Мир. – 1996. 206 с.
15. Азизов Т.А., Туракулов Ж.У. Синтез и исследование координационных соединений ацетата кальция с ацетамидом//Universum: химия и биология:электрон. научн. журн. 2018. № 9 (51). URL: <https://7universum.com/ru/nature/archive/item/6315>

|                                                                                                                                                                                                                                                                |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Джандуллаева М.С., Бекчанов Б.Б., Эркаев А.У., Кучаров Б.Х. Влияние режима термической обработки на физико-химические свойства серпентинита Султануиздагского месторождения .....                                                                              | 137 |
| Бобокулова О.С., Зулярова Н.Ш., Самадий М.А., Тожиев Р.Р., Усманов И.И., Кенжаев М.Э. Кинетические характеристики процесса разложения доломита азотной кислотой .....                                                                                          | 140 |
| <b>5. Методы исследования, приборов и оборудования композиционных материалов</b>                                                                                                                                                                               |     |
| Утемуратов Б.М., Тўраев Т.Б., Алламбергенов А.Дж. Табиий газни кувур оркали ташишда иссиқлик алмашинув жараёنларини интенсивлаштириш ва қурилмани танлаш .....                                                                                                 | 144 |
| Radjabov O.I., Muinova N.B., Azimova L.B., Filatova A.V., Turaev A.S. Kollagen va inulin kompozitsiyasini molekulyar modellashirilishda strukturaviy xususiyatlar .....                                                                                        | 147 |
| Alimov A.F., Qurbanova L.M., Eshmamatova N.B., Akbarov X.I., Kuronboyev D.P., Norqobilova Sh.D., Ismoilova D.F. Po'lat korroziyasida mahalliy xom ashyolar asosida olingan yashil ingibitorlarning fizik-kimyoviy xususiyatlari .....                          | 150 |
| Orzikulov B.T., Xaydarova S.R. Poliakrilonitril asosida tarkibida sulfo guruh tutgan ion almashinuvchi materiallar sintezi .....                                                                                                                               | 154 |
| Алимджанова Дж.И., Бабаханова З.А. Оптимизация процесса измельчения керамической массы в шаровых мельницах .....                                                                                                                                               | 157 |
| Axmedova M.F., Ubaydullayeva D.H. Trikotaj matolarining ko'p davrli cho'zilish deformatsiyasini aniqlashda sinov ko'rsatkichlarini optimallashtirish .....                                                                                                     | 160 |
| Ergashev M.A., Qulmatov R.B. Markazdan qochma konsentratorda oltin va kumushni ajratib olishda yuvuvchi suv bosimi, pulpa qattiqligi va oziq sarfining ta'siri .....                                                                                           | 162 |
| Тажиева Г.Р., Сафаров А.Р. Спектроскопическое исследование комплексов Co(II) и Cu(II) с семикарбазидом .....                                                                                                                                                   | 165 |
| Djumayeva M.S., Amonov M.R. Modifikatsiyalangan va bo'yalgan matolarning mikroskopik tahlili .....                                                                                                                                                             | 169 |
| Abdullayeva G.A. Kobalt(II) ning 2-merkaptobenzotiazol bilan kompleks birikmasining sintezi va tadqiqoti ....                                                                                                                                                  | 171 |
| <b>6. Проблемные обзоры</b>                                                                                                                                                                                                                                    |     |
| Холмуродова Д.К., Негматова К.С., Иброхимова Д.М. Анализ состояние технологии и применения хлопкового линта и основание требование к хлопковой целлюлозы на их основе для ацетилирования (Краткий обзор) .....                                                 | 175 |
| Каримов Ш.А., Шакиров Ш.М., Мирзарахимова З.Б. Отходы резиновых производств – перспективный материал для создания новых изделий .....                                                                                                                          | 179 |
| Кабулова Л.Б., Оразимбетова Г.Ж. Фазовые превращения в портландцементе при введении механоактивированного глинистого сланца .....                                                                                                                              | 182 |
| Razzoqov H.Q., Amonov M.R., Askarova G.A. Shofirkon bentoniti va sapropel asosidagi kompozitsion sorbentlarni shakllantirish hamda ularning koagulyant va polimer flokulyantlar ishtirokida sanoat oqova suvlarini tozalash samaradorligini tadqiq etish ..... | 185 |
| Suyarova D.A., Erbo'tayev D.Sh., Djurayev T.A., Usmonov F.D. Indol-3-sirka kislotasi va aminokislotalar asosida sintez qilingan yangi amid hosilalarining arpa (Hordeum Vulgare L.) o'sishi va rivojlanishiga biologik ta'siri .....                           | 188 |
| Холмуродова Д.К., Негматова К.С. Изучение и анализ влияния органоминеральных ингредиентов и технологических фаторов на процесс ацетилирования. <i>Краткий обзор</i> .....                                                                                      | 192 |
| Файзиев М.М., Каршиев М. Газ ва суюқликларни чуқур тозалашга мўлжалланган анизотроп структурали фильтрлар олишнинг илғор технологиялари тахлили .....                                                                                                          | 195 |
| Panjiyev A.X. Kalsiy siyanamidini olish jarayonining kinetik tahlili .....                                                                                                                                                                                     | 199 |
| Gulova M., Bo'rixonov B., Sapayev F. Monoxlorsirka kislotasining butil efirining uchlamchi aminlar bilan kvaternizatsiya reaksiyalarini o'rganish .....                                                                                                        | 201 |
| Kasimova A.B., Yoqubjonova O'F. Antibakterial materiallar asosida erkaklar uchun zamonaviy sport kostyumini ishlab chiqish (tennis sporti misolida) .....                                                                                                      | 205 |