

Статья поступила в редакцию: 02.08.2026

Статья принята к публикации: 07.08.2026

Статья опубликована: 28.08.2026

УДК 544.14+546.73

Комплекс Ni(II) на основе тиосемикарбазона 2-ацетил циклопентанона-1

Отамуродова Шахноза Тураевна

базовый докторант

Бухарский государственный университет

Республика Узбекистан, г. Бухара

E-mail: otamurodova086@gmail.com

Турсунов Мурод Амонович

проф.

Бухарский государственный университет

Республика Узбекистан, г. Бухара

E-mail: tursunovma@mail.ru

Умаров Бако Бафаевич

проф.

Бухарский государственный университет

Республика Узбекистан, г. Бухара

E-mail: umarovbb@mail.ru

Тулисова Насиба Зайниддиновна

исследователь, Бухарский государственный университет

Республика Узбекистан, г. Бухара

E-mail: to'lisovanz@mail.ru

Ni(II)-complex 2-(1-(2-acetyl-cyclopent-1-enyl) ethylidene)thiosemicarbazone

Otamurodova Shahnoza Turaevna

PhD student

Bukhara State University

Republic of Uzbekistan, Bukhara

Tursunov Murod Amonovich

professor

Bukhara State University

Republic of Uzbekistan, Bukhara

Umarov Bako Bafaevich

professor

Bukhara State University

Republic of Uzbekistan, Bukhara

Tulisova Nasiba Zayniddinovna

Researcher

Bukhara State University

Republic of Uzbekistan, Bukhara

Библиографическое описание: Комплекс Ni(II) на основе тиосемикарбазона 2-ацетил циклопентанона-1 // Universum: технические науки : электрон. научн. журн. Отамуродова Ш.Т. [и др.]. 2026. 8(149). URL: <https://7universum.com/ru/tech/archive/item/23286>

Аннотация

В данной работе представлены результаты синтеза, строение, спектральная характеристика, рентгеноструктурный анализ и исследование поверхности Хиршфельда комплексного соединения комплекс Ni(II) на основе тиосемикарбозона 2-ацетилциклопентано-1 (H_2L). H_2L и ацетат никеля(II) взаимодействовали в аммиачно-водной среде в молярном соотношении 1:1. Физико-химические свойства полученного соединения изучены методами УФ-, ИК-, ^1H - и ^{13}C -ЯМР-спектроскопии, а также рентгеноструктурным анализом. Рентгеноструктурный анализ комплекса тиосемикарбозона 2-ацетилциклопентано-1 с Ni(II) подтвердил, что центральный ион обладает плоско-квадратной геометрией. В ИК-спектре H_2L наблюдаются характерные колебательные полосы $\nu(\text{Ni-O})$, $\nu(\text{Ni-N})$ и $\nu(\text{Ni-S})$, что подтверждает координацию лиганда с металлом. Данные ^1H и ^{13}C ЯМР также свидетельствуют о формировании комплекса. По результатам рентгеноструктурного анализа установлено, что комплекс кристаллизуется в моноклинной сингонии и принадлежит к пространственной группе C_2 . В кристаллической структуре ион Ni(II) находится в деформированном плоско-квадратном координационном окружении. Поверхность Хиршфельда и двумерные отпечатки-fingerprint показывают, что при стабилизации кристаллической ячейки основную роль играют межмолекулярные взаимодействия типов $\text{H}\cdots\text{H}$, $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$ и $\text{S}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{S}$. Полученные результаты полностью подтверждают строение и координационные особенности синтезированного комплекса.

Abstract

This work presents the synthesis, structural characterization, spectral studies, single-crystal X-ray diffraction analysis, and Hirshfeld surface investigation of a Ni(II) complex with thiosemicarbazone of 2-acetylcyclopentanone-1 (H_2L). The ligand H_2L and nickel(II) acetate were reacted in an ammonia–aqueous medium at a 1:1 molar ratio. The physicochemical properties of the obtained compound were investigated by UV–Vis, IR, ^1H NMR, and ^{13}C NMR spectroscopy, as well as by single-crystal X-ray diffraction analysis.

The X-ray crystal structure of the Ni(II) complex of thiosemicarbazone of 2-acetylcyclopentanone-1 confirmed that the central metal ion adopts a square-planar geometry. The IR spectrum exhibits characteristic vibrational bands assigned to $\nu_{(\text{Ni-O})}$, $\nu_{(\text{Ni-N})}$ and $\nu_{(\text{Ni-S})}$, confirming the coordination of the ligand to the metal center. The ^1H and ^{13}C NMR data also support the formation of the complex.

According to the X-ray diffraction results, the complex crystallizes in the monoclinic crystal system and belongs to the space group C_2 . In the crystal structure, the Ni(II) ion is located in a distorted square-planar coordination environment. Hirshfeld surface analysis and two-dimensional fingerprint plots reveal that intermolecular $\text{H}\cdots\text{H}$, $\text{O}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{O}$, and $\text{S}\cdots\text{H}/\text{H}\cdots\text{S}$ interactions play a dominant role in stabilizing the crystal packing. The obtained results fully confirm the structure and coordination features of the synthesized complex.

Ключевые слова: колебательные частоты, интенсивное поглощение, азометин, таутомерия, диапазон, делокализация, анализ поверхности Хиршфельда.

Keywords: vibrational frequencies, intense absorption, azomethine, tautomerism, spectral region, delocalization, Hirshfeld surface analysis.

Введение

Тиосемикарбазоны и их комплексные соединения с металлами вызывают большой интерес в каталитической и биологической химии, поскольку их электронная структура и координационные свойства непосредственно определяют физико-химические характеристики комплексов. В частности, взаимодействие тиосемикарбазонных лигандов, производных 2-ацетилциклопентанона, с ионами Ni(II) даёт как структурно, так и функционально интересные соединения. Хотя предыдущие исследования подтвердили способность таких лигандов образовывать комплексы, количественный анализ их кристаллографической структуры и межмолекулярных взаимодействий по-прежнему изучен недостаточно.

Целью данной работы: тиосемикарбазон 2-ацетилциклопентанона-1 (H_2L) в соотношении 1:1 с ионом Ni(II) является получение комплекса и установление его строения и спектральных свойств. Для этого поставлены следующие основные задачи: (I) синтез комплекса и его характеристика физико-химическими методами; (II) определение рентгеноструктуры комплекса и подтверждение координационной геометрии иона Ni(II);

(III) количественная оценка вкладов межмолекулярных взаимодействий, стабилизирующих кристаллическую решётку, с помощью анализа поверхности Хиршфельда и 2D-диаграмм отпечатков;

(IV) сопоставление полученных результатов с спектральными данными (UV, ИК, 1H и ^{13}C ЯМР) и обсуждение координационных особенностей комплекса.

Материалы и методы

Для систематического изучения состава, пространственного строения и физико-химических свойств синтезированных комплексных соединений были применены комплексные физико-химические методы анализа. Так, ИК-спектры регистрировались на спектрометре IRTracer-100 (Shimadzu, Япония) в диапазоне $4000-500\text{ см}^{-1}$ (чувствительность сигнал/шум — 60.0:1) и на ATR-Фурье-спектрометре «ATR-Furue-Inventio-S» (Bruker, Германия) в диапазоне $4000-400\text{ см}^{-1}$ с полным внутренним отражением (ATR).

Для спектрофотометрических исследований использовались спектрометры UV-1280 и UV-1900i (Shimadzu, Япония), а также фотометр V-5100 (Китай).

ЯМР (1H и ^{13}C): 1H - и ^{13}C -спектры регистрировались на спектрометре Bruker AVANCE III 400 MHz ($^1H = 400\text{ MHz}$; $^{13}C = 100\text{ MHz}$) в растворе $CDCl_3$ с внутренним стандартом TMS. Обработка спектров выполнялась в программе MestReNova.

Рентгеноструктурный анализ (RCA): данные по одиночным кристаллам собирались на дифрактометре Bruker D8 Venture (или эквивалентном инструменте) с использованием $Mo\ K\alpha$ -излучения ($\lambda = 0.71073\text{ Å}$) при $T = 295(2)\text{ K}$. Структура была решена программой SHELXT и уточнена методом наименьших квадратов в SHELXL-2019/1; визуализация и подготовка иллюстраций выполнялись в интерфейсе Olex2.

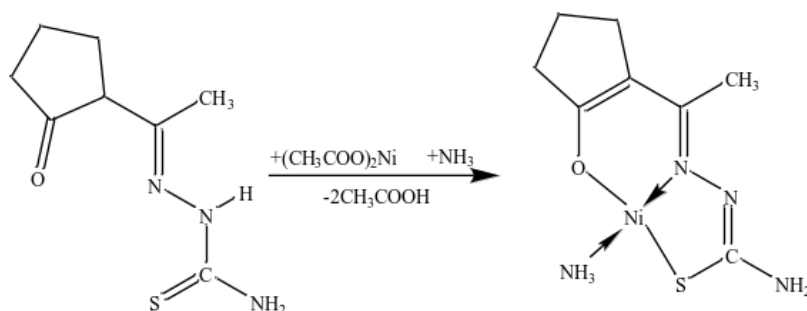
Анализ поверхности Хиршфельда и 2D-диаграммы fingerprint были построены на основе .cif-файла с использованием CrystalExplorer21 (Version 21.5, University of Western Australia; Turner et al.).

Температура плавления комплекса определялась на аппарате WWR MELTING-POINT APPARATUS.

Результаты и их обсуждение Тиосемикарбазоны представляют собой важный класс лигандов, содержащих донорные атомы азота и серы, и вызывают широкий интерес благодаря своему структурному разнообразию и многогранным донорным свойствам. Полезные биологические эффекты тиосемикарбазонов (например, противоопухолевая, антибактериальная, противовирусная и противопаразитарная активность) делают исследование их химических свойств ещё более привлекательным. Координационные свойства тиосемикарбазонов играют важную роль в повышении их биологической активности. После депротонирования лиганды оснований Шиффа переходят из енольной формы в таутомерное состояние, благоприятное для координации. В результате они образуют устойчивые комплексы, связываясь с ионом металла через депротонированные донорные атомы кислорода, азота и серы.

При взаимодействии тиосемикарбазона 2-ацетилциклопентона-1 с ионом Ni(II) в молярном соотношении 1:1 лиганд ведёт себя как тридентатный, занимая три координационных места, а четвертое координационное положение занимает молекула аммиака (1-схема). Комплекс $NiL \cdot NH_3$ синтезирован следующим образом: к раствору 1,99 г (0,01 моль) H_2L в 20 мл этаноле при нагревании и постоянном перемешивании прибывали по каплям водно-аммиачного раствора 2,49 г (0,01 моль) ацетата никеля(II). В 10 ходе реакции через 3–5 минут наблюдалось, комплексообразовались с изменением окраски до тёмно-красного цвета. Через сутки на дне колбы выпали игольчатые кристаллы темно-красного цвета[7].

Полученный комплекс состава $[Ni(C_8H_{11}N_3OS) \cdot NH_3]$ выделяли фильтрованием. Осадок несколько раз промывали этанолом. Продукт сушили в вакуум-эксикаторе над P_2O_5 до постоянной массы. Выход: 84,2 % (2,3 г). Температура плавления комплекса составляет 271–273 °C.



1-схема

В ИК-спектре комплекса $[Ni(C_8H_{11}N_3OS) \cdot NH_3]$ в области 3494–3172 cm^{-1} зарегистрированы валентные колебания N–H молекулы аммиака, что указывает на наличие молекулы NH_3 в координационной сфере. Колебания в областях 2978 и 2897 cm^{-1} соответствуют валентным колебаниям алифатических $\nu(C-H)$. Интенсивные полосы $\nu(C=N)$

в диапазоне (как показано на рисунке-1) $1589\text{--}1533\text{ см}^{-1}$ относятся к азометиновому фрагменту; сдвиг этих полос в сторону более низких частот по сравнению с спектром лиганда подтверждает координацию атома азота азометина с ионом Ni(II) [16]. Колебания в интервале $1443\text{--}1336\text{ см}^{-1}$ в основном соответствуют валентным колебаниям $\nu(\text{C}=\text{N})$, деформационные колебания $\delta(\text{C}=\text{N})$ наблюдаются в области $852\text{--}704\text{ см}^{-1}$.

В диапазоне частот $1262\text{--}1008\text{ см}^{-1}$ зарегистрированы колебания, относящиеся к $\nu(\text{C}=\text{N})$, $\nu(\text{C}=\text{O})$ и колебаниям конъюгированных фрагментов молекулы лиганда. Деформационные колебания видны в области $852\text{--}704\text{ см}^{-1}$. Низкочастотные полосы в области $569\text{--}439\text{ см}^{-1}$ дополнительно подтверждают образование координационных связей $\nu(\text{Ni}=\text{N})$ и $\nu(\text{Ni}=\text{S})$. Полученные данные ИК-спектральных исследований свидетельствуют о том, что лиганд координируется тридентатно к иону Ni(II) через атомы O, N и S [8].

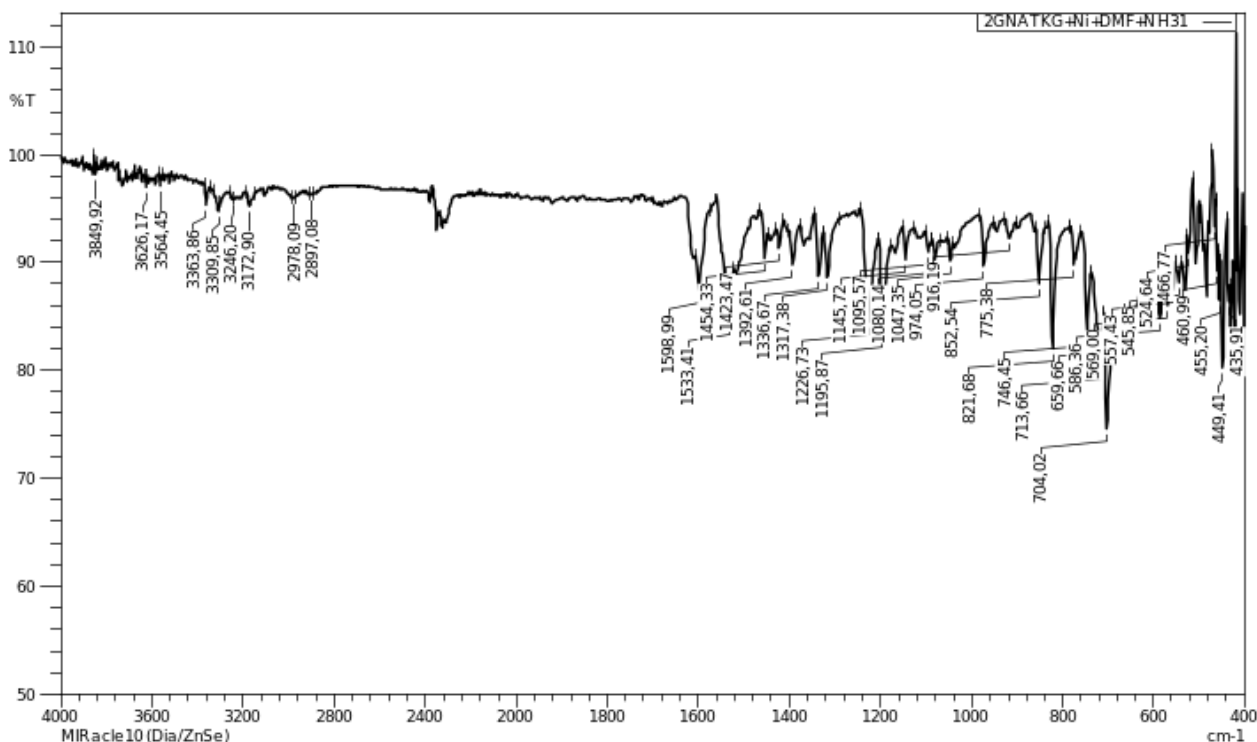


Рисунок 1. ИК-спектр комплекса $[\text{NiL} \cdot \text{NH}_3]$

В электронного спектра поглощения комплекса тиосемикарбозона 2-ацетилциклопентонона-1 с Ni(II) наблюдаются интенсивные полосы в интервале $240\text{--}275\text{ нм}$. Основной максимум поглощения проявляется при $\lambda_{\text{max}} = 263,5\text{ нм}$; тачичие этого сигнала объясняется $\pi \rightarrow \pi$ и $n \rightarrow \pi$ переходами, котори характерны для азометинового и тиосемикарбазонного фрагментов лиганда. В результате образования комплекса енольные атом кислорода, азота азометина, о также серн тиоамида лиганда образуют координатсионные связей с ионом Ni(II) . Это приводит к перераспределению электронной плотности в лиганде и, как следствие, к формированию полос поглощения, наблюдаемых в УФ-спектре. Полосы в диапазоне $240\text{--}245\text{ нм}$ в основном соответствуют $\pi \rightarrow \pi$ переходам лиганда, тогда как поглощения в области $260\text{--}270\text{ нм}$ связаны с $n \rightarrow \pi$ переходами, в которых участвуют неподелённые электронные пары азометина и тиосемикарбазона. Постепенное убывание поглощения при длинах волн $>300\text{ нм}$ указывает на отсутствие в этом диапазоне интенсивных электронных переходов. Поскольку $d\text{--}d$ переходы, характерные для иона Ni(II) ,

обычно наблюдаются в видимой области, в спектре, записанном в диапазоне 200–400 нм, выделенных линий d–d не обнаружено. Полученные данные УФ-спектроскопии подтверждают координацию лиганда к Ni(II) через донорные атомы O, N и S (см. рис. 2).

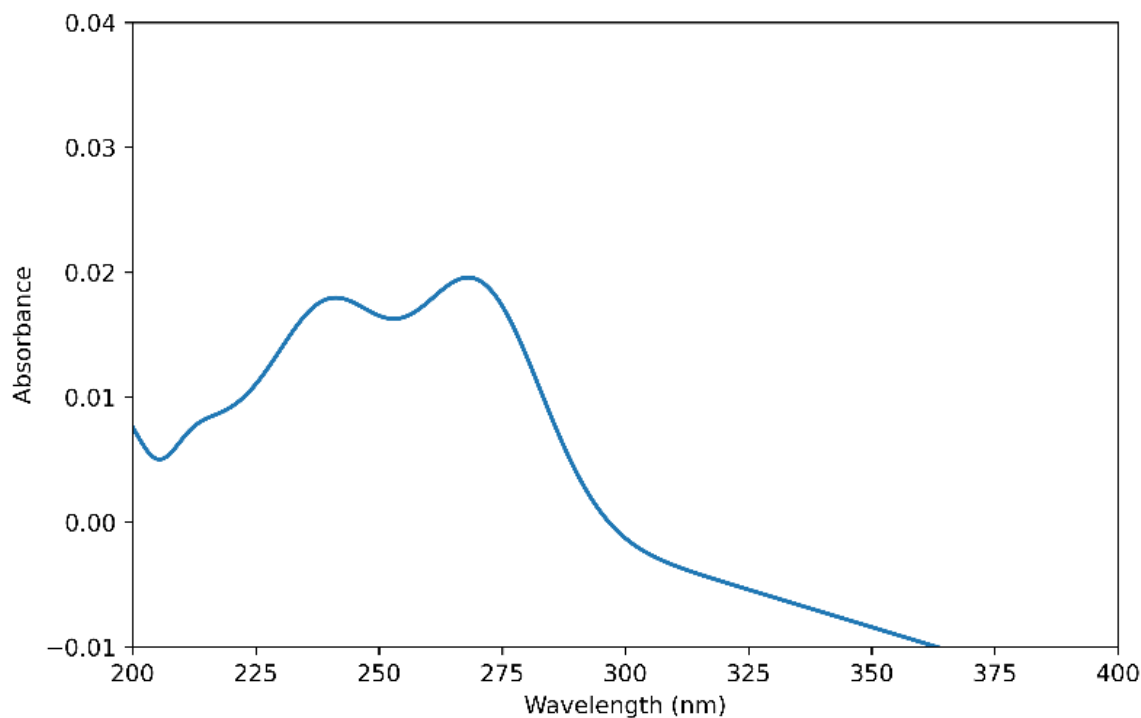


Рисунок 2. УФ-спектр комплекса $NiL \cdot NH_3$

В 1H -ПМР-спектре комплекса $NiL \cdot NH_3$ при $\delta = 3.81$ ppm наблюдается синглет, который приписывается протонам координированной молекулы аммиака. Протоны цикlopентанового фрагмента и метильной группы выделяются в области $\delta = 2.10$ ppm; при этом синглет, соответствующий метильной группе, связанной с азометиновым углеродом, проявляется в этой же области [5]. Небольшое смещение сигналов протонов азометина и NH в область низкого поля подтверждает координацию азотного атома азометина и серы тиоида с ионом Ni(II) [13].

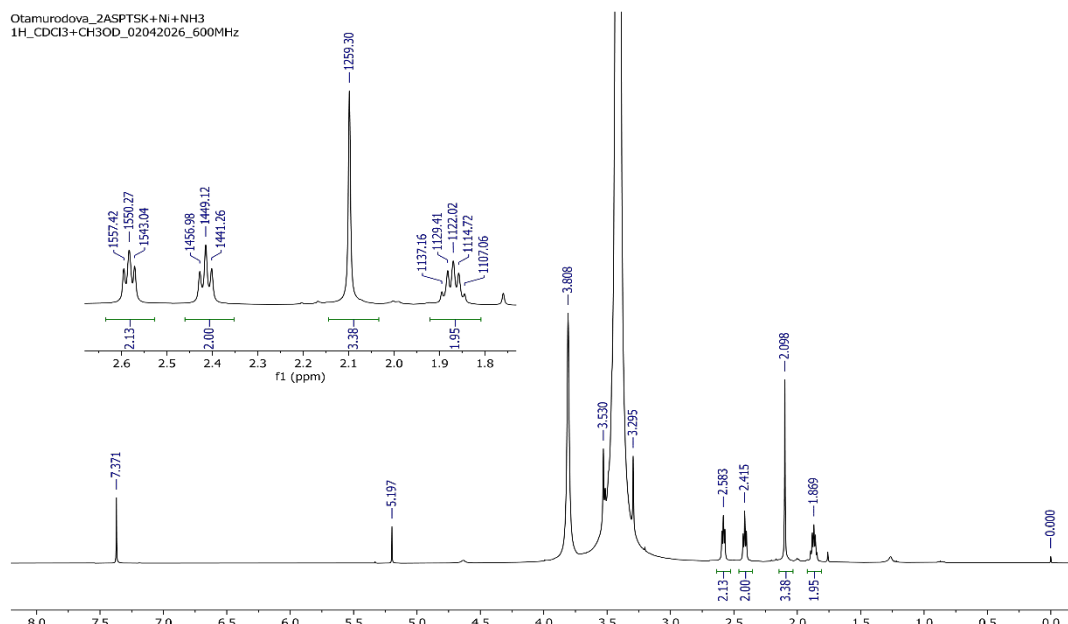


Рисунок 3. 1H - ПМР-спектр комплекса $NiL \cdot NH_3$ в растворе в хлороформе ($CDCl_3$)

В ^{13}C -ЯМР-спектре сильные интенсивные сигналы при $\delta = 192.95$ и 192.98 ppm соответствуют углеродам карбонильной группы, что указывает на сохранность цикlopентанового фрагмента лиганда. Сигнал при $\delta = 165.10$ ppm относится к углероду азометиновой группы ($\text{C}=\text{N}$). Мультиплетные сигналы в интервале $\delta \approx 139\text{--}111.4$ ppm соответствуют sp^2 -гибридизированным углеродам в кольце цикlopентанона. Разнообразие химических сдвигов объясняется делокализацией π -электронов и сопряжённой системой молекулы [3,17]. Резонансы при $\delta = 129.6$; 129.2 ; 127.9 ; 119.4 и 118.7 ppm соответствуют олефинным ($\text{C}=\text{C}$) углеродам (см. рис. 3).

Кроме того, сигнал при $\delta = 96,4$ ppm указывает на наличие углеродного атома, близкого по характеру к енольной форме. Триплет при $\delta = 77,2$ ppm соответствует дополнительному сигналу растворителя ($\text{DMSO-d}_6/\text{CDCl}_3$). Полученные данные ^{13}C - и ^1H -ЯМР, ИК-спектроскопии и рентгеноструктурного анализа (РСА) согласуются между собой и подтверждают тиосемикарбазоновую природу синтезированного координационного комплекса (см. рис. 4).

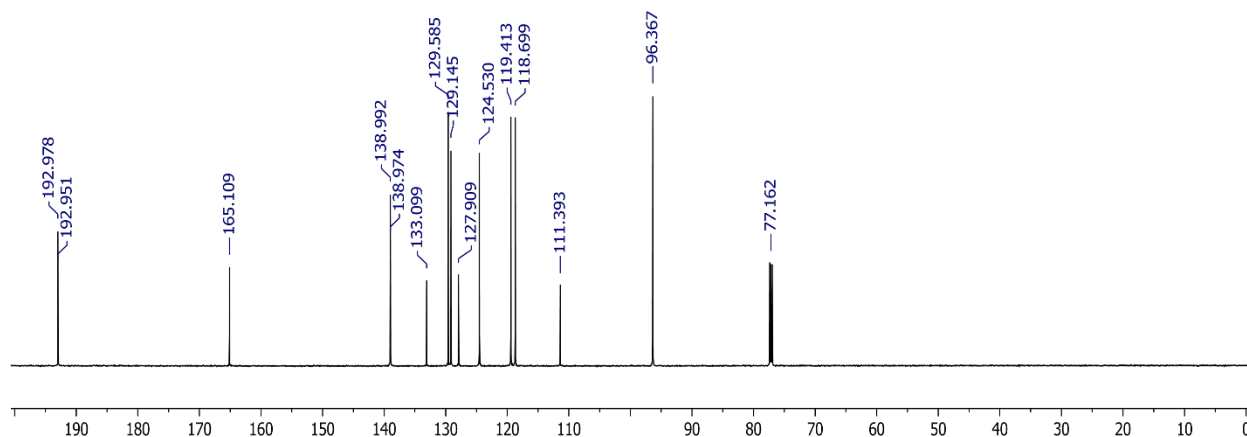


Рисунок 4. ^{13}C -ЯМР-спектр комплекса $\text{NiL}\cdot\text{NH}_3$

По результатам рентгеноструктурного анализа установлено, что синтезированный комплекс Ni(II) кристаллизуется в моноклинной сингонии и принадлежит к пространственной группе C_2 [2]. Молекулярная формула комплекса выражается как $[\text{Ni}(\text{C}_8\text{H}_{11}\text{N}_3\text{OS})\cdot\text{NH}_3]$. Параметры элементарной ячейки: $a = 19.0822(13)$ Å, $b = 7.0559(5)$ Å, $c = 9.5113(7)$ Å, $\beta = 115.302(3)^\circ$; объем $V = 1157.77(14)$ Å³. Число формульных единиц в элементарной ячейке $Z = 4$. Длины связей (Å) приведены в табл. 1 и составляют: $\text{Ni}(1)\text{--S}(1) = 2.1411(8)$, $\text{Ni}(1)\text{--O}(1) = 1.8572(18)$, $\text{Ni}(1)\text{--N}(8) = 1.879(2)$, $\text{Ni}(1)\text{--N}(12) = 1.931(3)$, $\text{S}(1)\text{--C}(10) = 1.733(3)$, $\text{O}(1)\text{--C}(1) = 1.311(3)$, $\text{C}(1)\text{--C}(2) = 1.358(4)$, $\text{C}(1)\text{--C}(5) = 1.502(4)$, $\text{C}(2)\text{--C}(3) = 1.511(3)$, $\text{C}(2)\text{--C}(6) = 1.424(3)$, $\text{C}(3)\text{--C}(4) = 1.548(4)$, $\text{C}(4)\text{--C}(5) = 1.527$, $\text{C}(6)\text{--C}(7) = 1.495$, $\text{C}(6)\text{--N}(8) = 1.327(3)$, $\text{N}(8)\text{--N}(9) = 1.411(3)$, $\text{N}(9)\text{--C}(10) = 1.299(4)$, $\text{C}(10)\text{--N}(11) = 1.362(3)$. (1-Таблица) При сравнении полученных результатов с координацией иона Ni(II) в комплексе с другим тиосемикарбазонным лигандом, где длины связей с центральным атомом составляют $\text{Ni}(1)\text{--S}(1) 2.3899$ Å, $\text{Ni}(1)\text{--N}(1) 2.101$ Å, $\text{Ni}(1)\text{--N}(2) 2.028$ Å и $\text{Ni}(1)\text{--N}(6) 2.021$ Å [2] (DOI: 10.1016/j.molstruc.2021.130362), в кристалле комплекса 2-ацетилциклопентанон тиосемикарбазона с Ni(II) наблюдается связь $\text{Ni}(1)\text{--O}(1)$ длиной 1.8572 Å (отличие заключается в том, что вместо шестого координированного к Ni атома азота связан атом кислорода). В соответствии с этим, хотя значения длин связей с центральным атомом

в никелевом комплексе 2-ацетилциклопентанон тиосемикарбазона отличаются некоторой укороченностью, различие длин связей в окружении центрального иона подтверждает деформированную плоско-квадратную геометрию (рис. 5).

Полученные кристаллографические параметры чётко характеризуют монокристалл комплекса и подтверждают координацию лиганда к иону Ni(II) через донорные атомы O, N и S. Структура была уточнена методом наименьших квадратов с использованием программы SHELXL-2019/1.

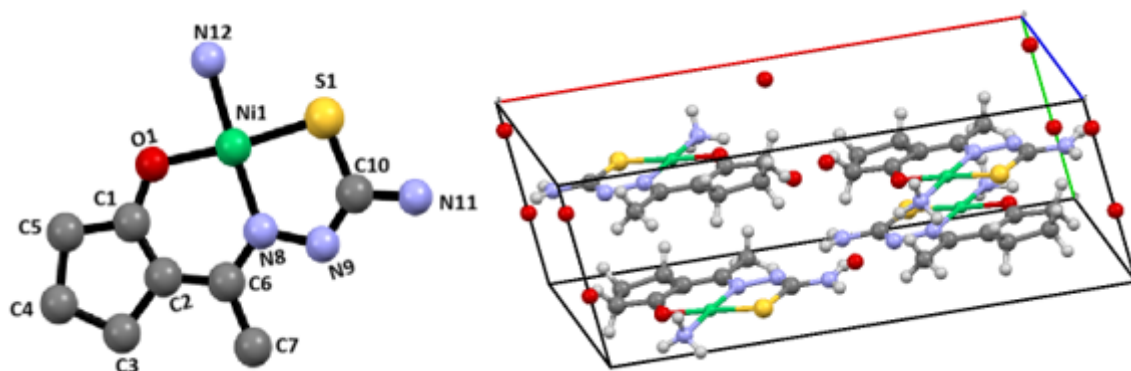


Рисунок 5. Молекулярная структура комплекса $NiL \cdot NH_3$ — (a); расположение молекул комплекса в элементарной ячейке — (b)

Таблица 1.

Длины связей (Å) в комплексе $NiL \cdot NH_3$

Atom	Atom	Length/Å	Atom	Atom	Length/Å
Ni1	S1	2.1411(8)	C2	C6	1.424(3)
Ni1	O1	1.8572(18)	C3	C4	1.548(4)
Ni1	N8	1.879(2)	C4	C5	1.527(4)
Ni1	N12	1.931(3)	C6	C7	1.495(3)
S1	C10	1.733(3)	C6	N8	1.327(3)
O1	C1	1.311(3)	N8	N9	1.411(3)
C1	C2	1.358(4)	N9	C10	1.299(4)
C1	C5	1.502(4)	C10	N11	1.362(3)
C2	C3	1.511(3)			

Таблица 2.

Углы связей (°) в комплексе $NiL \cdot NH_3$

Atom	Atom	Atom	Angle/°	Atom	Atom	Atom	Angle/°
O1	Ni1	S1	174.62(7)	C2	C3	C4	104.8(2)
O1	Ni1	N8	97.76(8)	C5	C4	C3	107.3(2)
O1	Ni1	N12	84.66(10)	C1	C5	C4	104.2(2)
N8	Ni1	S1	87.61(6)	C2	C6	C7	117.8(2)
N8	Ni1	N12	177.50(18)	N8	C6	C2	121.5(2)
N12	Ni1	S1	89.96(8)	N8	C6	C7	120.7(2)
C10	S1	Ni1	96.30(9)	C6	N8	Ni1	125.15(17)
C1	O1	Ni1	122.17(18)	C6	N8	N9	114.4(2)
O1	C1	C2	127.6(3)	N9	N8	Ni1	120.44(16)

Atom	Atom	Atom	Angle/°	Atom	Atom	Atom	Angle/°
O1	C1	C5	119.0(2)	C10	N9	N8	112.8(2)
C2	C1	C5	113.2(2)	N9	C10	S1	122.7(2)
C1	C2	C3	110.4(2)	N9	C10	N11	121.0(3)
C1	C2	C6	125.6(2)	N11	C10	S1	116.1(2)
C6	C2	C3	123.9(2)				

Центральный ион Ni(II) в комплексе координируется через атом азота азометиновой группы, атом кислорода карбонильного фрагмента и атом серы тиоамида. Кроме того, молекула аммиака также координирует металл, завершая общее координационное окружение. При координации лиганда формируется пятиядерное металлическое кольцо [18]. В процессе координации перераспределяется электронная плотность в связи C=N азометиновой группы и в связи C=S тиоамидного фрагмента. Это согласуется с данными ИК- и ЯМР-спектров [6]. Конформация лиганда при координации частично сохраняет плоско-квадратный характер и сопряжённую π -электронную систему. Для более глубокого понимания упаковки в кристалле и количественной оценки вкладов различных межмолекулярных взаимодействий в стабильность структуры были использованы геометрические параметры, полученные методом РТТ, для построения и анализа поверхностей Хиршфельда. Анализ поверхности Хиршфельда позволяет выявить природу внутримолекулярных и межмолекулярных водородных взаимодействий в кристаллической структуре комплекса. По результатам «отпечатков-fingerprint» наибольший вклад в ячейку вносит контакт $H\cdots H$ (35,7 %), что указывает на значимую роль взаимодействий Ван-дер-Ваальса в стабилизации кристаллической структуры (рис.6). Контакты $O\cdots H/H\cdots O$ составляют 18,2 % и играют заметную роль, подтверждая важность водородных связей в кристаллической решётке. Доли $O\cdots O/O\cdots O$ и $H\cdots O/O\cdots H$ составляют 12,2 % и 7,7 % соответственно [15]. Кроме того, контакты $S\cdots H/H\cdots S$ демонстрируют вклад в размере 5,8 % и 4,4 %, что указывает на активное участие тиосемикарбазонного фрагмента во внутримолекулярных взаимодействиях. Контакты $H\cdots N/N\cdots H$ равны 5,1 % и 1,5 %. Контакты $C\cdots H/H\cdots C$ дают вклад 4,2 % и 3,2 % соответственно, оказывая дополнительное стабилизирующее влияние на элементарную ячейку. Доля контактов $C\cdots C/C\cdots C$ составляет 1,4 %, что свидетельствует о слабой, но имеющейся роли $\pi\cdots\pi$ взаимодействий. В целом анализ поверхности Хиршфельда подтверждает результаты РТТ: кристаллическая структура комплекса стабилизируется водородными связями и слабыми дисперсионными силами (Ван-дер-Ваальса)

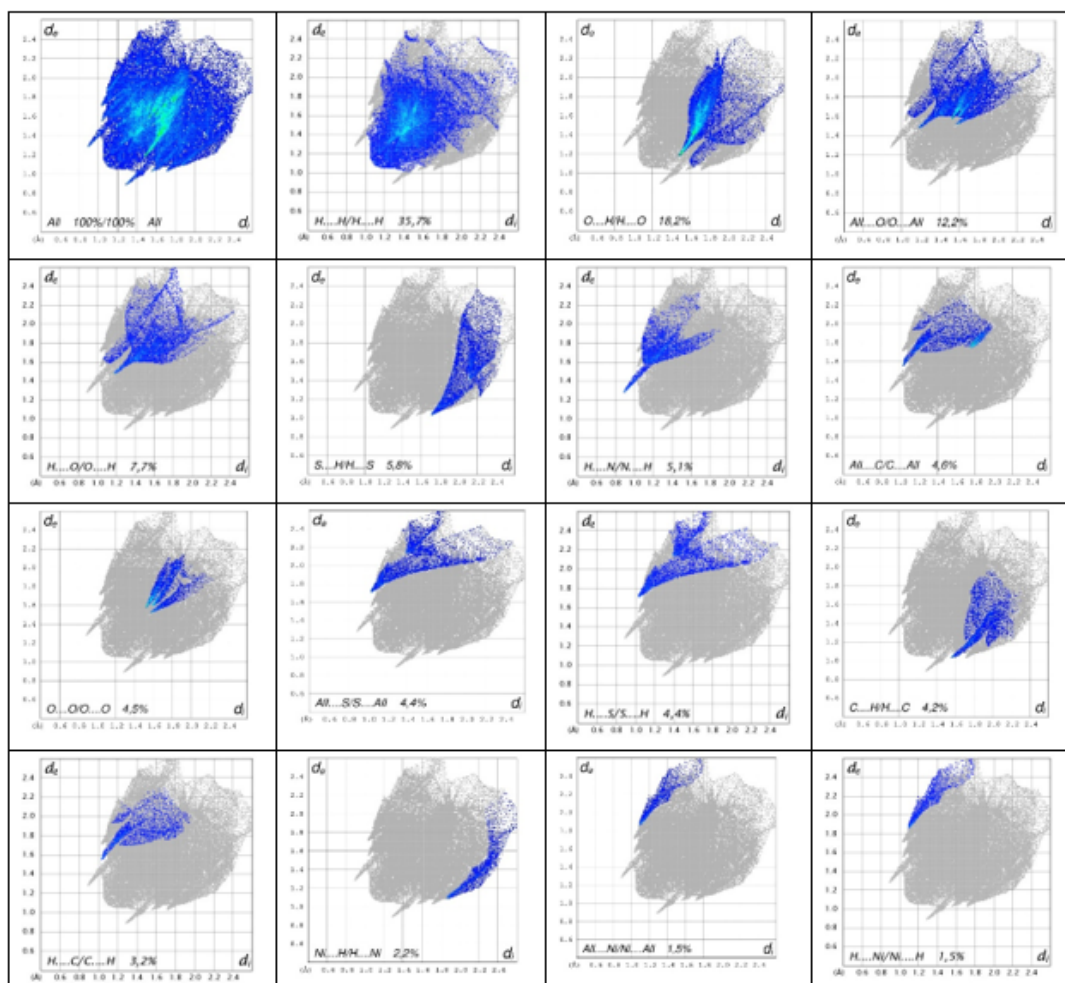


Рисунок 6. Двухмерные диаграммы отпечатков-fingerprint комплекса $NiL \cdot NH_3$ и относительные характеристики поверхности Хиршфельда

Заключение

Синтезирован комплекс тиосемикарбозона 2-ацетилциклопентонона-1 с $Ni(II)$. Спектроскопические исследования показали координацию лиганда к иону $Ni(II)$ через атом серы. Ион $Ni(II)$ обладает преимущественно деформированной плоско-квадратной геометрией. Анализ по методу Хиршфельда показал, что кристаллическая решётка в основном стабилизируется водородными связями и Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями. Полученные результаты представляют собой научную основу для дальнейших исследований и изучения свойств комплексов. Панова Е.В., Турсунов М.А., Отамуродова Ш.Т., Сафин Д.А. синтезировали пиразолино-тиоамидный гибрид, охарактеризовали его кристаллическую структуру, электронные свойства, а также продемонстрировали потенциал его связывания с гемоглобином S, что указывает на перспективность использования лигандов данного типа для биологического таргетинга. В связи с этим, благодаря аналогичным координационным и электронным характеристикам, комплекс $Ni(II)$ также заслуживает дальнейшего тестирования в рамках биологических испытаний, а сопоставление наших экспериментальных данных подтверждает научную обоснованность проведения последующих биологических и электрокаталитических исследований этих комплексов. Полученные результаты служат научной основой для дальнейших изысканий и детального изучения свойств комплексных соединений.

Список литературы

1. Аvezов Қ.Ғ. [Synthesis, structures and properties of Ni(II) and Cu(II) complexes based on fluorinated β -diketone derivatives]. (In Uzb) PhD dissertatsiya.- O'zMU.- 120 b. – 2018.
2. Рафаэль, П.Ф. и др. Комплексы никеля (II) с N(4) замещёнными тиосемикарбазами, полученными из пиридин-2-карбальдегида: кристаллические структуры, спектральные аспекты и анализ поверхности Хиршфельда / П.Ф. Рафаэль [и др.] // Журнал молекулярной структуры = Journal of Molecular Structure. – 2021. – Т. 1237.
3. Севинчова, Д.Н. Study of Ni(II) complexes with aroylhydrazones of the ethyl ester of 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexanoic acid / Д.Н. Севинчова, М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров // Развитие науки и технологий. – 2022. – № 1. – С. 29–33.
4. Турсунов М.А., Умаров Б.Б., Аvezов К.Г. // Журнал структурной химии. – 2021. – Т. 62, № 3. – С. 394–403.
5. Турсунов, М.А. Synthesis and crystal structures of nickel(II) complexes with derivatives of benzoylacetalddehydes / М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров, Қ. Ғ. Аvezов // Название журнала. – 2023. – Т. 15, № 3. – Р. 45–58.
6. Турсунов, М.А. Structure and tautomerism in a series of aroylhydrazones of benzoylacetalddehyde / М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров, М.М. Амонов, Г.К. Холиқова, Г.Г. Садуллаева; пер. с рус // Развитие науки и технологий. – 2020. – № 4. – С. 59–64.
7. Турсунов, М.А. Synthesis and crystal structure of nickel(II) and zinc(II) complexes with benzoylacetalddehyde derivatives / М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров, К.Г. Аvezов; на рус. яз // Вестник Московского университета. Серия 2, Химия. – 2019. – Т. 74, № 3. – С. 138–142.
8. Турсунов, М.А. Synthesis and crystal structure of the nickel(II) complex with aroyl hydrazone of ethyl ether of 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexane acid / М.А. Турсунов, Б.Б. Умаров, М.Я. Эргашов, К.Г. Аvezов; на рус. яз // Журнал структурной химии. – 2020. – Т. 61, № 1. – С. 73–85.
9. Otamurodova, Sh. T. 2 gidroksi 1 naftaldegid hosilalari sintezi, tuzilishi va xossalari / Sh. T. Otamurodova, M.A. Tursunov; на узб. яз // Development of Science. – 2010. – Т. 2. – Р. 266–270.
10. Otamurodova, Sh. T. Structure and properties of synthesis of benzoyl hydrazones of monocarbonyl compounds / Sh. T. Otamurodova, M.A. Tursunov, B. Sh. Ganiev; на англ. яз // «Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo'llash orqali qishloq xo'jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari»: материалы Междунар. науч.-практ. конф. – 2025. – Р. 352–353.
11. Otamurodova, Sh. T. Nicotinic- and isonicotinic-acid hydrazones of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde / Sh. T. Otamurodova, M.A. Tursunov; на узб. яз // «Neft-gazkimyo, yoqilgi sanoati, polimerlar va yuqori molekulyar birikmalar sohasida innovatsion ishlanmalarni raqamlashtirish istiqbollari hamda ekologik jihatlarning ilgor muhandislik yechimlari»: материалы науч.-техн. Междунар. конф. – 2026. – Р. 135–140.

12. Panova, E.V. A pyrazoline-thioamide hybrid: synthesis, crystal structure, electronic landscape and in silico targeting of hemoglobin S / E.V. Panova, M.A. Tursunov, S.T. Otamurodova, D.A. Safin // Journal of Molecular Structure. – 2026. – Т. 146649. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286026014092?via%3Dihub> (дата обращения: 04.08.2026).
13. Rapheal, P.F. Copper(II) complexes of N(4)-substituted thiosemicarbazones derived from pyridine-2-carbaldehyde: crystal structure of a binuclear complex / P.F. Rapheal, E. Manoj, M.R. P. Kurup // Polyhedron. – 2007. – Т. 26. – P. 818–828.
14. Sh. T. Otamurodova, M.A. Tursunov; на узб. яз // «Zamonaviy farmatsiyaning dolzarb muammolari va yechimlari»: materials Rep. scientific-practical conf. – 2025. – P. 326–328.
15. Spackman, M.A. Hirshfeld surface analysis / M.A. Spackman, D. Jayatilaka // CrystEngComm. – 2009. – Т. 11. – P. 19–32.
16. Tursunov, M.A. Synthesis and crystal structure of nickel(II) and zinc(II) complexes with benzoylacetate derivatives / M.A. Tursunov, B.B. Umarov, K.G. Avezov; на англ. яз // Moscow University Chemistry Bulletin. – 2019. – Т. 74, № 3. – P. 138–142.
17. Tursunov, M.A. Synthesis and crystal structure of nickel(II) complexes with benzoylacetate aldehyde / M.A. Tursunov, B.B. Umarov, M. Ya. Ergashov, K.G. Avezov; на англ. яз // Journal of Structural Chemistry. – 2021. – Т. 62, № 3. – P. 369–378.
18. Tursunov, M.A. Nickel(II) and zinc(II) complexes with benzoylacetate aldehyde derivatives / M.A. Tursunov, K.G. Avezov, B.B. Umarov // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2019. – Т. 45, № 7. – P. 484–488.

References

1. [Synthesis, structures and properties of Ni(II) and Cu(II) complexes based on fluorinated β -diketone derivatives].- O'zMU.- 120 b. – 2018. (In Russ.)
2. [Nickel(II) complexes with N(4)-substituted thiosemicarbazones obtained from pyridine-2-carbaldehyde: crystal structures, spectral aspects and Hirshfeld surface analysis]. – 2021. – Т. 1237. – S. 130362 (In Russ.)
3. [Study of Ni(II) complexes with aroylhydrazones of the ethyl ester of 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexanoic acid].- BukhITI.- 2022.- № 1.- S. 29–33 (In Russ.)
4. [Journal of Structural Chemistry. 2021. P. 394–403] // Zhurnal strukturnoj khimii. – 2021. – Т. 62, № 3. (In Russ.)
5. [Synthesis and crystal structures of nickel(II) complexes with derivatives of benzoylacetate aldehydes] (In Russ.)
6. [Structure and tautomerism in a series of aroylhydrazones of benzoylacetate aldehyde].- BukhITI.- 2020.- № 4.- S. 59–64 (In Russ.)
7. Tursunov M.A., Umarov B.B., Avezov K.G. [Synthesis and Crystal Structure of Nickel(II) and Zinc(II) Complexes with Benzoylacetate Aldehyde Derivatives]. ISSN 0027–1314, Moscow University Chemistry Bulletin, 2019, Vol. 74, No. 3, P. 138–142. (In Russ.)

8. Tursunov M.A., Umarov B.B., Ergashov M.Ya., Avezov K.G. [Synthesis and crystal structure of the nickel(II) complex with aroyl hydrazone of ethyl ether of 5,5-dimethyl-2,4-dioxohexane acid]. ISSN 0022–4766, Journal of Structural Chemistry, 2020, Vol. 61, No. 1, P. 73–85. (In Russ).
9. Otamurodova Sh.T., Tursunov M.A. [2-gidroksi-1-naftaldegid hosilalari sintezi, tuzilishi va xossalari.] (In Uzb) // Development of science Volume3/ 10 oktyabr/11. P. 266–270.
10. Otamurodova Sh.T., Tursunov M.A., Ganiev B.Sh. [Structure and properties of synthesis of benzoyl hydrazones of monocarbonyl compounds]. (In Engl) “Noqulay iqlim sharoitida zamonaviy agrotexnologiyalar qo'llash orqali qishloq xo'jaligini kompleks rivojlantirish istiqbollari” mavzusidagi xalqaro ilmiy-amaliy konferensiya materiallari. Buxoro. 21-22-aprel. 2025. B.352–353.
11. Otamurodova Sh.T., Tursunov M.A. [Nicotinic- and isonicotinic-acid hydrazones of 2-hydroxy-1-naphthaldehyde] (In Uzb) // «Neft-gazkimyo, yoqilg'i sanoati, polimerlar va yuqori molekulyar birikmalar sohasida innovatsion ishlanmalarni raqamlashtirish istiqbollari hamda ekologik jihatlarning ilg'or muhandislik yechimlari” mavzusidagi ilmiy-texnikaviy xalqaro konferensiya materiallari. Buxoro-2026.10-aprel. III-tom. B.135–140. – 2026.
12. Panova E.V., Tursunov M.A., Otamurodova S.T. & Safin D.A. A pyrazoline-thioamide hybrid: Synthesis, crystal structure, electronic landscape and in silico targeting of hemoglobin S. Journal of Molecular Structure, 146649.(InEngl) – 2026. – URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0022286026014092?via%3DiHub> (дата обращения: 04.08.2026).
13. Rapheal P.F., Manoj E., Kurup M.R.P. Copper (II) complexes of N (4)-substituted thiosemicarbazones derived from pyridine-2-carbaldehyde: Crystal structure of a binuclear complex // Polyhedron. – 2007. – T. 26.
14. Otamurodova Sh.T., Tursunov M.A. [Synthesis, structure and properties of benzalacetone acid hydrazides].(In Uzb) “Zamonaviy farmatsiyaning dolzarb muammolari va yechimlari” mavzusiga bag'ishlangan Respublika ilmiy-amaliy anjuman to'plami. 2025-yil, 16–17-may. B. 326–328.
15. Spackman M.A., Jayatilaka D. Hirshfeld surface analysis. CrystEngComm, 2009, 11, 19–32. (In Engl.).
16. Tursunov M.A., Umarov B.B., Avezov K.G. Synthesis and Crystal Structure of Nickel(II) and Zinc(II) Complexes with Benzoylactic Aldehyde Derivatives. (In Engl) ISSN 0027–1314, Moscow University Chemistry Bulletin, 2019, Vol. 74, No. 3, P. 138–142.
17. Tursunov M.A., Umarov B.B., Ergashov M.Ya., Avezov K.G. [Synthesis and crystal structure of nickel(II) complexes with benzoylactaldehyde].(In Engl) ISSN 0022–4766, Journal of Structural Chemistry, 2021, Vol. 62, No. 3, P. 369–378.
18. Tursunov M.A., Avezov K.G., Umarov B.B. [Nickel(II) and Zinc(II) Complexes with Benzoylactaldehyde Derivatives. Russian Journal of Coordination Chemistry].(In Eng) 2019, Vol. 45, No. 7, P. 484–488.