

УДК 54-386

DOI: 10.21779/2542-0321-2026-41-2-96–107

*Х. М. Гасанова*

**Спектральный анализ координационных узлов в бинарной системе «Cu(II) – цефотаксим»: исследование механизма связывания металла с цефалоспориновым лигандом методом ИК-спектроскопии**

*Дагестанский государственный университет; Россия, 367000, г. Махачкала, ул. М. Гаджиева, 43а; [hmgas@mail.ru](mailto:hmgas@mail.ru)*

**Аннотация.** В статье методами ИК-спектроскопии исследованы координационные соединения переходного металла меди(II) с биогенным лигандом – цефотаксимом (цефалоспориновым антибиотиком). Комплекс меди(II) с цефотаксимом выделен в твёрдой фазе; для него, а также для индивидуального лиганда зарегистрированы инфракрасные спектры в диапазоне 4000–500 см<sup>-1</sup>. Осуществлена пробоподготовка путем перевода твёрдого образца в высокодисперсное состояние. Факт комплексообразования и характер координации центрального атома с биолигандом установлены на основании сравнительного анализа колебательных спектров свободного цефотаксима и синтезированного соединения. Полученные спектральные данные позволили предложить вероятное пространственное строение комплекса меди(II) с цефотаксимом.

**Ключевые слова:** комплекс, координация, биогенный лиганд, инфракрасная спектроскопия, связь металл–биолиганд, стехиометрический состав, структура комплекса, пространственная конфигурация.

В последние десятилетия наблюдается не снижение, а закономерное усиление внимания к химии координационных соединений переходных металлов, что объясняется непрерывно растущим внедрением этих объектов в практику – от терапевтических и диагностических подходов в медицине до создания новых функциональных материалов и оптимизации технологических процессов в промышленности и сельском хозяйстве [1–4]. Динамика научного интереса к координационным соединениям переходных металлов демонстрирует устойчивый рост, что напрямую связано с возрастающей востребованностью данных систем в ключевых прикладных областях: биомедицине, агрохимии, промышленном секторе и инновационном материаловедении.

Несмотря на многолетнюю историю изучения координационных возможностей меди(II) с биогенными лигандами, все еще остаются полностью нерешёнными вопросы, касающиеся состава, строения и пространственной конфигурации координационных соединений d-элементов. В первую очередь это связано с тем, что процессы связывания биолиганда с ионами переходных металлов протекают в гетерогенных многокомпонентных средах при участии макромолекулярных частиц.

Цефотаксим, проявляя свойства полидентатного лиганда, вступает в реакции комплексообразования с катионами d-металлов с формированием сложноорганизован-

ных полиядерных координационных полимеров с макромолекулярной структурой [5–7]. Наибольший практический интерес вызывают соединения, содержащие донорные центры (атомы азота, кислорода и серы) и функциональные фрагменты, обладающие высокой комплексообразующей активностью. Одним из таких биолигандов является цефотаксим. Цефалоспориновые антибиотики являются интересными с научной точки зрения лигандами для изучения их способности к комплексообразованию. Наличие в структуре этих соединений гетероатомов (N, O) и широкого набора функциональных групп дает возможность синтеза металлокомплексов с различной геометрией, составом и пространственной конфигурацией.

Спектроскопические методы открывают возможность для установления элементного состава и пространственного строения координационных соединений, включающих биогенные лиганды. Необходимые экспериментальные данные обрабатываются благодаря современным подходам к расшифровке спектральной информации, в том числе с применением вычислительных алгоритмов и профильного программного обеспечения.

В данном исследовании методом инфракрасной спектроскопии впервые проведено детальное описание процессов твердофазного комплексообразования между ионами Cu(II) и цефотаксимом. Кроме того, предложены новые подходы к анализу и интерпретации как теоретических, так и экспериментальных данных, характеризующих комплексообразование двухвалентной меди с азотсодержащими органическими лигандами.

Для подтверждения строения синтезированного комплекса использовали метод ИК-спектроскопии. Физическая основа данного подхода заключается в избирательном поглощении молекулами инфракрасного излучения, которое стимулирует колебательные переходы в пределах основного электронного состояния [6–8]. Высокая диагностическая значимость метода связана с тем, что каждая молекулярная система характеризуется строго индивидуальной совокупностью спектральных параметров – положением максимумов полос, их полушириной и относительной интенсивностью. Эти признаки являются уникальными «отпечатками» молекулярной системы, что делает ИК-спектроскопию эффективным инструментом структурной идентификации. Они неразрывно связаны с массами атомов, их пространственной организацией, природой межатомных сил и характером распределения заряда. Высокая избирательная способность ИК-спектров позволяет эффективно использовать их для распознавания комплексных соединений, определения пространственного строения координационного центра и анализа характерных особенностей геометрической формы [4; 5].

Установлено, что с помощью инфракрасной спектроскопии с высокой степенью достоверности регистрируются незначительные перестройки атомного каркаса и избирательное образование химических связей в соединениях, синтезированных в настоящей работе. Экспериментально обнаружено, что характеристические пики поглощения, соответствующие определённому типу колебаний атомных группировок, сосредоточены в узкой спектральной зоне ИК-диапазона. Предложенная методика в равной степени успешно применима для исследования биологических проб как в твёрдом, так и в жид-

ком агрегатном состоянии. Важным преимуществом инфракрасной спектроскопии выступает возможность анализа вещества без его деструкции в его эндогенной конгруэнтности исходных структур – без фракционирования, механической дезинтеграции и какой-либо предварительной пробоподготовки. При этом достаточными оказываются навески массой всего 8–10 мг.

Для регистрации инфракрасных спектров спектральная ось (координата длин волн) задавалась в обратных сантиметрах – величинах, обратных длине волны. Интенсивность сигнала измерялась в относительных процентах пропускания либо поглощения, причём для части исследуемых образцов дополнительно проводилось определение оптической плотности в соответствующих единицах [8].

Для выявления зависимости координационного взаимодействия от концентрации компонентов исходные водные растворы цефотаксима и сульфата меди(II) смешивали в молярном соотношении 1:1 (эквимольные количества). Формирование биометаллических комплексов медь–цефотаксим инициировали в мягких термодинамических условиях – без внешнего нагрева, при ambientной температуре, что позволило избежать термической деструкции лиганда и определить условия комплексообразования методом подбора концентрационных пределов [8].

В ходе работы осуществлен синтез комплекса цефотаксима с ионами меди(II), зарегистрированы ИК-спектры лиганда и комплекса. Для получения комплекса раствора сульфата меди и цефотаксима смешивали в эквимольном соотношении [8], переливали в фарфоровую чашу и упаривали на водяной бане. Выделенное в твердом виде соединение измельчали до состояния мелкодисперсного порошка.

Регистрацию ИК-спектров осуществляли с преобразованием Фурье на спектрофотометре модели VERTEX 70 (Bruker, Германия) в спектральной области 4000–500 см<sup>-1</sup>. Подготовку образцов выполняли с использованием методики гомогенного распределения вещества в матрице бромида калия (KBr), реализуемой посредством холодного прессования таблеток. Данный подход заключался в тщательной механической гомогенизации тонкодисперсного анализируемого материала с мелкокристаллическим порошком KBr с последующим прессованием полученной смеси в специальной пресс-форме, что позволяло получать оптически прозрачные либо полупрозрачные таблетированные диски, пригодные для дальнейшего спектрального анализа.

В настоящем исследовании интерпретация ИК-спектров исходного лиганда и полученных координационных соединений базировалась на сравнительном анализе характеристических полос поглощения, соответствующих колебаниям аминогрупп (-NH<sub>2</sub>) и карбоксилат-анионов (-COO<sup>-</sup>). Наблюдаемые сдвиги частот указанных полос служат надёжным индикатором потенциальной координации данных функциональных фрагментов, что, в свою очередь, позволяет обоснованно судить о структурной организации формируемых комплексов. Руководствуясь этим подходом, в ходе наших экспериментов в спектрах цефотаксима были однозначно идентифицированы характерные пики, отвечающие колебаниям указанных групп (табл. 1, рис. 1).

При идентификации функциональных групп в процессе расшифровки ИК-спектров полученных соединений мы руководствовались справочными и эксперимен-

тальными значениями характеристических частот колебаний. Исходя из проведенного анализа, можно сделать следующие выводы:

а) в высокочастотной области ( $3600\text{--}2800\text{ см}^{-1}$ ) фиксируются полосы поглощения, обусловленные валентными колебаниями связей водорода с атомами малой массы – углеродом, азотом и кислородом. Наличие этих полос позволяет достоверно отнести наблюдаемые пики к соответствующим структурным фрагментам: C-H, N-H и O-H;

б) в колебательной спектроскопии обнаружено: при неизменном порядке химических связей рост массы атомов, входящих в состав молекулярных фрагментов, вызывает смещение полос поглощения в длинноволновую область (батохромный эффект), что эквивалентно переходу в зону меньших волновых чисел. В свою очередь, сигналы, обусловленные колебаниями остова органического лиганда (прежде всего валентными и деформационными модами связей C-C, C-O и C-N), как правило, регистрируются в интервале  $1500\text{--}700\text{ см}^{-1}$ . Здесь важно понимать: эти сигналы не относятся к какой-то одной конкретной связи и не являются локальными. На самом деле они носят коллективный характер и показывают, как движется в целом вся молекулярная сеть. Каждое химическое соединение характеризуется строго уникальным набором низкочастотных спектральных компонентов. Данный частотный интервал в спектроскопии принято называть «зоной спектральной идентификации»; по сути, он выполняет функцию молекулярного кода, позволяющего однозначно распознать конкретное вещество;

в) при координации лиганда с центральным атомом-комплексобразователем в молекуле нередко возникают дополнительные кратные связи (двойные или тройные). Это вызывает перестройку геометрии молекулы и, как следствие, заметное смещение характеристических частот колебаний в высокочастотную область. Особый интерес представляет диапазон  $1800\text{--}1500\text{ см}^{-1}$ , в котором проявляются групповые колебания ненасыщенных фрагментов – карбонильной (C=O), олефиновой (C=C) или азометиновой (C=N) групп. Данная область спектра представляет аналитическую ценность при исследовании внутримолекулярных переходов, т. к. эти полосы редко отвечают чисто валентным колебаниям, и смещение полос в указанном интервале служит надежным показателем структурных перестроек внутри комплекса;

г) в диапазоне волновых чисел  $2000\text{--}2300\text{ см}^{-1}$  наблюдаются специфические полосы поглощения, возникающие за счет валентных колебаний фрагментов с тройными связями, например,  $\text{C}\equiv\text{C}$  или  $\text{C}\equiv\text{N}$ . Столь высокочастотное положение этих полос закономерно следует из прямой корреляции между силовым коэффициентом связи и ее кратностью: возрастание последней влечет за собой увеличение жесткости химического соединения и, как следствие, рост частоты нормальных колебаний. Однако в полной картине колебательного спектра нелинейных молекул не существует строгого разделения на "чисто валентные" и "чисто деформационные" моды. Напротив, для них типичны деформационные колебания смешанного (гибридного) типа, в которых участвуют изменения как валентных углов, так и частично длин связей. Иными словами, в силу отсутствия элементов симметрии высокого порядка многие колебательные акты носят комбинированный характер, что делает отнесение полос нетривиальной задачей;

д) диагностическими признаками ароматических систем служат: в инфракрасном спектре исследуемого соединения регистрируется полоса, соответствующая валентным колебаниям связей С-Н, с максимумом в области около  $3300\text{ см}^{-1}$ . Для него также характерны реперные пики, обусловленные скелетными колебаниями углеродной цепи. Дополнительно наблюдается высокоинтенсивная зона деформационных колебаний тех же связей, которая проявляется в длинноволновой части спектра – при волновых числах менее  $900\text{ см}^{-1}$  [10; 11].

**Таблица 1. Спектральные данные (волновые числа), характерные для цефотаксима и его координационного соединения с ионами меди(II)**

| Характеристика полосы       | Лиганд (цефотаксим), $\nu$ , $\text{см}^{-1}$ | Комплекс Cu(II) – цефотаксим, $\nu$ , $\text{см}^{-1}$ | Комментарии и ссылки на источники                                                                                                                                                                                                                           |
|-----------------------------|-----------------------------------------------|--------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\nu$ (О-Н, N-Н)            | $\sim 3344$                                   | $\sim 3301$                                            | Широкая интенсивная полоса валентных колебаний гидроксильных (вода/карбоксил) и аминогрупп. В комплексе наблюдается небольшой низкочастотный сдвиг, что может указывать на участие $\text{NH}_2$ -группы в координации или изменение водородных связей [9]. |
| $\nu$ (C=O) $\beta$ -лактам | 1780                                          | $\sim 1742$                                            | Очень сильная полоса, характерная для карбонильной группы $\beta$ -лактамного кольца. В комплексе полоса сохраняется на близких частотах ( $\sim 1742\text{ см}^{-1}$ ), что убедительно доказывает неучастие этой группы в координации с ионом металла.    |

|                                                         |           |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|---------------------------------------------------------|-----------|-------|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\nu$ (C=O)<br>амидная,<br>сложно-<br>эфирная<br>группы | 1650–1675 | 1655  | Данная полоса, относящаяся к карбонильным группам (амидная связь и сложно-эфирная группировка), не имеет значимого сдвига, значит эти атомы кислорода не участвуют в координации с медью (II).                                                                                                         |
| $\delta$ (N-H);<br>$\nu$ (C=N)                          | 1645–1608 | 1620  | В этой области спектра существенны деформационные колебания NH <sub>2</sub> - и NH-групп, а также колебания, связанные с C=N связями тиазольного цикла и оксиминной группы. А сдвиг полосы в спектре комплекса (приблизительно 1620 см <sup>-1</sup> ) подтверждает координацию именно по атому азота. |
| $\nu_{as}$ (COO <sup>-</sup> )                          | ~1580     | ~1570 | Среди сигналов, которые дает анион карбоновой кислоты (COO <sup>-</sup> ), выделяется полоса, соответствующая асимметричным валентным колебаниям.                                                                                                                                                      |
| $\nu_{s}$ (COO <sup>-</sup> )                           | 1386      | 1356  | Для карбоксилат-иона (COO <sup>-</sup> ) характерна полоса симметричных валентных колебаний. При связывании в комплекс Cu(II) уменьшаются частоты обоих типов колебаний – и асимметричного, и симметричного.                                                                                           |

|                                    |       |           |                                                                                                                                                                                                                                                                                        |
|------------------------------------|-------|-----------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| $\Delta\nu = \nu_{as} - \nu_s$     | ~203  | ~215      | Разница между частотами асимметричных и симметричных колебаний карбоксильной группы ( $\Delta\nu$ ). Увеличение $\Delta\nu$ в комплексе (с ~203 до ~215 $\text{см}^{-1}$ ) однозначно свидетельствует о монодентатной координации карбоксильной группы через один из атомов кислорода. |
| $\nu(\text{C-O-C})$                | ~1230 | ~1230     | Полоса сложноэфирной связи C-O-C (сложный эфир).                                                                                                                                                                                                                                       |
| $\nu(\text{M-O}), \nu(\text{M-N})$ | —     | 588 / 454 | Появление новых слабых полос в низкочастотной области (обычно ниже 600 $\text{см}^{-1}$ ) является прямым доказательством образования связи металл-лиганд. Полосы в районе 588 $\text{см}^{-1}$ относят к $\nu(\text{M-O})$ , а 454 $\text{см}^{-1}$ – к $\nu(\text{M-N})$ .           |

На рисунках 1 и 2 представлены инфракрасные спектры цефотаксима и продукта его взаимодействия с ионами Cu(II) соответственно.

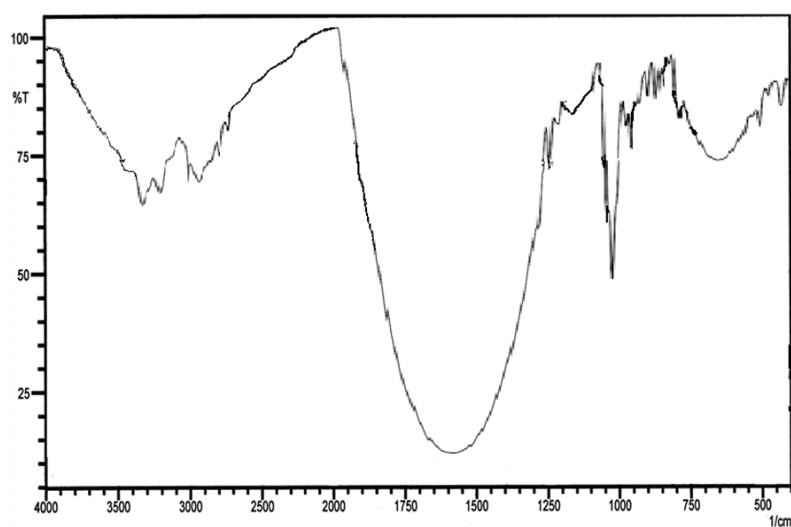


Рис. 1. ИК-спектр образца цефотаксима

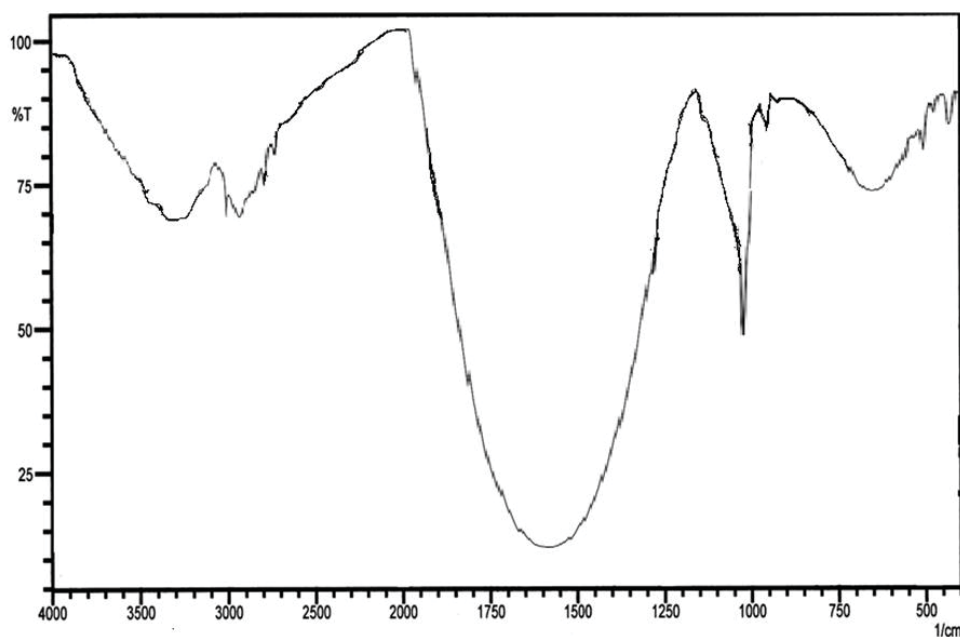


Рис. 2. ИК-спектр комплекса медь(II)–цефотаксим

На основе анализа экспериментальных данных сделан вывод об образовании координационного комплекса с молярным отношением металл:лиганд, отвечающим стехиометрическому составу 1:1. С целью проверки данной гипотезы представляется целесообразным провести сопоставительный анализ инфракрасных спектров, приведённых на рис. 1 и 2.

Анализ данных табл. 1 и рис. 1, 2 показывает, что:

а) в исходном ИК-спектре несвязанного лиганда (рис. 1) наблюдается характеристическая полоса поглощения в интервале  $3304\text{--}3111\text{ см}^{-1}$ , которая при координации замещается широким сигналом, относящимся к связанной  $\text{NH}_2$ -группе. Последний проявляется в области  $3445\text{--}3245\text{ см}^{-1}$  и обусловлен валентными колебаниями аминогруппы, участвующей в донорно-акцепторном взаимодействии;

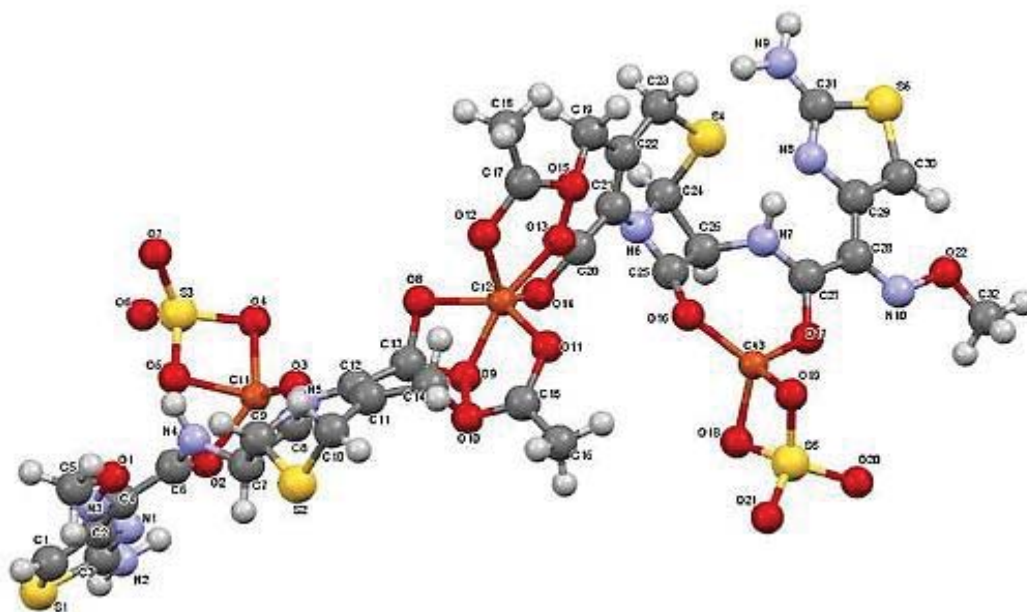
б) карбоксильная группа ( $-\text{COO}^-$ ) участвует в координации в монодентатной манере, о чем свидетельствует увеличение разности частот асимметричных и симметричных колебаний ( $\Delta\nu$ , табл. 1);

в) смещение полосы деформационных колебаний аминогруппы ( $\text{NH}_2$ ) с  $1640\text{ см}^{-1}$  до  $1620\text{ см}^{-1}$  дополнительно подтверждает вовлечение атома азота данной группы в координационную связь. В совокупности с другими данными это позволяет утверждать, что в процессе комплексообразования меди(II) с цефотаксимом донорными центрами выступают  $\text{NH}_2$ - и  $\text{COO}^-$  фрагменты лиганда, следовательно, реализуется N,O-хелатирование иона металла.

Определение наиболее вероятной пространственной конфигурации исследуемого координационного соединения Cu(II) с цефотаксимом и расчёт его инфракрасного спектра в настоящей работе выполнялись с применением современного квантово-химического расчёта B97-3с, разработанного Гриммом [13]. Все вычислительные опе-

рации реализованы в программной среде Orca 5.0.2. Отбор начальных модельных структур лиганда и координационных частиц проводили на основе симметричных критериев. Первым этапом вычислений служила оптимизация геометрических параметров полученных моделей в вакууме в рамках приближения B97-3с, характеризующегося умеренными вычислительными затратами и пригодного для применения на стандартных персональных компьютерах. На следующем этапе для каждой модельной структуры подтверждалась её динамическая устойчивость – отсутствие мнимых колебательных частот в рассчитанных колебательных спектрах, что свидетельствует о корректности выбранной геометрии. Окончательный выбор модели осуществлялся на основе критерия минимальной полной энергии среди всех рассмотренных конфигураций, что согласуется с подходами, предложенными в работе [13]. Для структуры, признанной оптимальной, дальнейшая оптимизация геометрии и расчёт инфракрасного спектра проводились без наложения ограничений по симметрии, что позволило учесть все возможные искажения равновесной конфигурации.

Результаты выполненных расчётов позволили обосновать и предложить наиболее вероятную пространственную конфигурацию координационного соединения, формирующегося в изучаемой системе между катионами меди(II) и молекулами цефотаксима:



Для целенаправленного синтеза соединений с заданными свойствами необходимо установить корреляции между электронным строением и поведением молекул, которые определяются пространственной топологией атомных остовов.

Ключевым фактором комплексообразования выступает донорно-акцепторное взаимодействие, реализуемое за счёт перераспределения электронной плотности между ионом меди(II) и цефотаксимом. В ходе процесса меняется геометрия ионных связей – в первую очередь это касается расположения атомов, которые непосредственно участвуют в образовании связей. Когда лиганды цефотаксима образуют координационную

сферу вокруг ионов меди, их геометрия определяется тремя ключевыми факторами. Это, во-первых, эффективный радиус ионной связи С-О, во-вторых, электронное строение самого лиганда и, в-третьих, стерические затруднения, которые возникают при связывании меди с цефотаксимом.

Для определения строения комплексного соединения мы проанализировали, как располагаются донорные атомы относительно центрального иона в пространстве. Использовались методы ИК-спектроскопии, что позволило предположить, какую именно структуру имеют комплексы в системе Cu(II)–цефотаксим. Данные квантово-химических расчетов, в свою очередь, дали возможность воссоздать вероятную пространственную структуру координационного соединения, причем с теоретическим обоснованием выбранной конфигурации.

Установленные в работе особенности координации d-элементов с биогенными лигандами открывают возможность перехода к целенаправленному синтезу, позволяющему заранее прогнозировать свойства синтезируемых комплексов. Наиболее показательной в этом отношении является химическая активность солей меди(II) в присутствии полидентатных биолигандов (на примере цефотаксима), где координация с отдельными центрами может существенно различаться.

При детальном рассмотрении механизма координации в подобных системах становится возможным не только восстановить молекулярную структуру образующихся аддуктов, но и проследить прямую связь между тем, как устроен координационный узел и насколько активным будет соединение с биологической точки зрения. А такие данные, в свою очередь, помогают глубже интерпретировать химические, биохимические и даже фармакологические свойства комплексов переходных металлов с биолигандами.

### Литература

1. Алексеев, В. Г. Металлокомплексы пенициллинов и цефалоспоринов / В. Г. Алексеев // Химико-фармацевтический журнал. 2010. Т. 44, № 1. – С. 16–26.
2. Маякова, М. Н. Твердые комплексы цинка (II) с цефазолином и цефотаксимом / М. Н. Маякова, В. Г. Алексеев, А. И. Иванова, С. С. Рясенский // Вестник ТвГУ. Сер.: Химия. 2015. № 3. – С. 5–13.
3. Anacona, J. R. Synthesis and antibacterial activity of cefixime metal complexes / J. R. Anacona, J. Estacio // Transition Metal Chemistry. 2006. No. 2. – Pp. 227–231.
4. Anacona, J. R. In vitro, antibacterial activity of metal complexes containing a cephaclor derivative ligand / J. R. Anacona, J. J. Santaella // Latin American Journal of Pharmacy. 2013. No. 1. – Pp. 101–106.
5. Ibragimov, B. T. Synthesis and analysis of coordination compounds of nickel(II) acetate with monoethanolamine and p-nitrobenzoic acid / B. T. Ibragimov, Sh. B. Khasanov, O. I. Khudoyberganov, Z. Sh. Abdullaeva // Azerbaijan Chemical Journal. 2022. No. 4. – Pp. 43–47.
6. Karekal, M. R. Synthesis, characterization, antimicrobial, DNA cleavage, and antioxidant studies of some metal complexes derived from Schiff base containing indole and

quinoline moieties / M. R. Karekal, V. Biradar, M. B. N. Mathada // Bioinorganic Chemistry and Applications. 2013. Article ID 315972. – 16 p.

7. Журавлев, Е. В. Комплексообразование Cu(II) с цефотаксимом в растворе NaCl / Е. В. Журавлев, В. Г. Алексеев, М. А. Феофанова, С. С. Рясенский // Журнал неорганической химии. 2016. Т. 61, № 7. – С. 917–919.

8. Гасанова, Х. М. Изучение координационных свойств переходного металла меди и способности его к комплексообразованию с биолигандом – цефотаксимом / Х. М. Гасанова, М. Н. Суракатова // Вода: химия и экология. 2024. № 1. – С. 64–70.

9. Накамото, К. ИК-спектры и спектры КР неорганических и координационных соединений / К. Накамото. – Москва: Мир, 1991. – 536 с.

10. Вилков, Л. В. Физические методы исследования в химии. Резонансные и электрооптические методы / Л. В. Вилков, Ю. А. Пентин. – Москва: Высшая школа, 1989. – 336 с.

11. Speier, G. The preparation and characterization of some solid copper dioxygen complexes / G. Speier, Z. Tyeklar // Inorg. Chim. Acta. 1982. Vol. 66, no. 2. – Pp. 69–70.

12. Supuran, C. T. Carbonic-Anhydrase Inhibitors. 13. Complex-Type Mechanism-Based Inhibitors / C. T. Supuran // Rev. Roum. Chim. 1992. Vol. 37, no. 7. – Pp. 849–855.

13. Grimme, S. A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H/Pu / S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg // J. Chem. Phys. 2010. Vol. 132, no. 15. 154104.

*Поступила в редакцию 23 мая 2026 г.*

*Принята 12 июня 2026 г.*

UDC 54-386

DOI: 10.21779/2542-0321-2026-41-2-96–107

**Spectral Analysis of Coordination Nodes in the Binary System "Cu(II)-Cefotaxime":  
Study of the Mechanism of Metal Binding to Cephalosporin Ligand by the Method  
of IR Spectroscopy**

***Kh. M. Gasanova***

*Dagestan State University; Russia, 367000, Makhachkala, M. Gadzhiev st., 43a;  
[hmgas@mail.ru](mailto:hmgas@mail.ru)*

**Abstract.** Using the methods of IR spectroscopy, a study of coordination compounds of the transition metal of copper(II) with a biogenic ligand – cefotaxime (cephalosporin antibiotic) was conducted. The complex of copper(II) with cefotaxime is isolated in the solid phase; for it, as well as for an individual ligand, infrared spectra in the range 4000–500 cm<sup>–1</sup> are recorded. Sampling was carried

out by transferring a solid sample to a high-dispersed state. The fact of complex formation and the nature of the coordination of the central atom with the bioligand are established on the basis of a comparative analysis of the oscillatory spectra of free cefotaxime and the synthesized compound. The obtained spectral data made it possible to propose the probable spatial structure of the copper(II) complex with cefotaxime.

**Keywords:** complex, coordination, biogenic ligand, infrared spectroscopy, metal-bioligand communication, stoichiometric composition, complex structure, spatial configuration.

*Received 23 May, 2026*

*Accepted 12 June, 2026*