

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ  
ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ  
DSc27.06.2017.К.01.03 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

---

УМУМИЙ ВА НООРГАНИК КИМЁ ИНСТИТУТИ

ТУРАКУЛОВ ЖАХОНГИР УЛУГБЕКОВИЧ

КАЛЬЦИЙ АЦЕТАТИНИНГ АЙРИМ АМИДЛИ, НИКОТИН ВА БЕНЗОЙ  
КИСЛОТАЛИ КООРДИНАЦИОН БИРИКМАЛАРИНИ СИНТЕЗИ,  
ТУЗИЛИШИ ВА ҚЎЛЛАНИЛИШИ

02.00.01 – Ноорганик кимё  
(кимё фанлари)

КИМЁ ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

Тошкент-2019

**Кимё фанлари бўйича фалсафа (PhD) доктори диссертацияси  
автореферати мундарижаси**

**Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD) по  
химическим наукам**

**Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD) on chemical  
sciences**

**Туракулов Жахонгир Улугбекович**

Кальций ацетатининг айрим амидли, никотин ва бензой кислотали  
координацион бирикмаларининг синтези, тузилиши ва  
қўлланилиши..... **3**

**Туракулов Жахонгир Улугбекович**

Синтез, строение и применение координационных соединений ацетата  
кальция с некоторыми амидами, никотиновой и бензойной кислотами  
..... **21**

**Turakulov Jakhongir Ulugbekovich**

Synthesis, structure and using of coordination compounds of calcium acetate  
with some amides, nicotinic and benzoic acids ..... **39**

Список опубликованных работ

Эълон қилинган ишлар рўйхати  
List of published works..... **42**

ЎЗБЕКИСТОН МИЛЛИЙ УНИВЕРСИТЕТИ ҲУЗУРИДАГИ

ИЛМИЙ ДАРАЖАЛАР БЕРУВЧИ

DSc27.06.2017.К.01.03 РАҚАМЛИ ИЛМИЙ КЕНГАШ

---

УМУМИЙ ВА НООРГАНИК КИМЁ ИНСТИТУТИ

ТУРАКУЛОВ ЖАХОНГИР УЛУГБЕКОВИЧ

КАЛЬЦИЙ АЦЕТАТИНИНГ АЙРИМ АМИДЛИ, НИКОТИН ВА БЕНЗОЙ  
КИСЛОТАЛИ КООРДИНАЦИОН БИРИКМАЛАРИНИ СИНТЕЗИ,  
ТУЗИЛИШИ ВА ҚЎЛЛАНИЛИШИ

02.00.01 – Ноорганик кимё  
(кимё фанлари)

КИМЁ ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)  
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ

Тошкент-2019

**Кимё фанлари бўйича фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2017.2.PhD/К31 рақам билан рўйхатга олинган.**

Диссертация Умумий ва ноорганик кимё институтида бажарилган.

Диссертация автореферати уч тилда (ўзбек, рус ва инглиз (резюме)) Илмий кенгаш веб-саҳифаси ([www.ik-kimyo.nuuz.uz](http://www.ik-kimyo.nuuz.uz)) ва «Ziyonet» Ахборот-таълим порталида ([www.ziyonet.uz](http://www.ziyonet.uz)) жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

**Азизов Тохир Азизович**  
кимё фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар:

**Умаров Бако Бафоевич**  
кимё фанлари доктори, профессор

**Кадирова Зухра Чингизовна**  
кимё фанлари доктори

Етакчи ташкилот:

Тошкент фармацевтика институти

Диссертация ҳимояси Ўзбекистон Миллий университети ҳузуридаги DSc27.06.2017.К.01.03 рақамли Илмий кенгашининг “\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2019 йил соат \_\_\_\_\_ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100174, Тошкент, Университет кўчаси, 4-уй, Тел.: (99871) 227-12-24; факс: (99824) 246-53-21, 246-02-24. e-mail: [chem0102@mail.ru](mailto:chem0102@mail.ru). Ўзбекистон Миллий университети Маъмурий биносининг 2-қават 217-хонасида ўтказилади).

Диссертация билан Ўзбекистон миллий университетининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин ( \_\_\_\_\_ рақам билан рўйхатга олинган. Манзил: 100174, Тошкент, Университет кўчаси, 4-уй. Тел.:(99871) 246-67-71).

Диссертация автореферати 2019 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ тарқатилди.  
(2019 йил «\_\_\_» \_\_\_\_\_ даги \_\_\_\_\_ рақамли реестр баённомаси).

**Х.Т. Шарипов**

Илмий даражалар берувчи илмий  
кенгаш раиси, к.ф.д., профессор

**Д.А. Гафурова**

Илмий даражалар берувчи илмий  
кенгаш илмий котиби, к.ф.д., профессор

**Н.А.Парпиев**

Илмий даражалар берувчи илмий  
кенгаш қошидаги илмий семинар раиси,  
к.ф.д., профессор, академик

## Кириш (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

**Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати.** Дунёда кимё, нефть, энергия, енгил ва қурилиш саноатларининг кескин ривожланиши ҳисобига экологик муаммоларни келиб чиқиши, қишлоқ хўжалиги маҳсулотларига бўлган талабнинг йилдан-йилга ошиб бораётганлиги, сув ресурсларидан оқилона фойдаланиш каби масалалар янги турдаги кимёвий бирикмаларга бўлган талабни янада кучайтирмоқда. Бу айниқса, қишлоқ хўжалиги ўсимликларининг ҳосилдорлигини оширишга ҳисса қўшадиган, самарали хусусиятларга эга бўлган, атроф-муҳитга салбий таъсир кўрсатмайдиган янги координацион бирикмаларни синтез қилишда яққол намоён бўлмоқда. Шу сабабли аҳолини сифатли, арзон, захарсиз маҳсулотлар билан таъминлаш алоҳида аҳамият касб этади.

Жаҳонда қишлоқ хўжалиги тармоқлари кенгайиб ва ривожланиб борган сари ўсимликлар ўсишини тезлаштирувчи ва уларнинг ҳосилдорлигини оширувчи кимёвий воситаларга бўлган талаб ҳам ортиб бораверади. Айниқса, комплекс хоссага эга стимуляторларни синтез қилиш юзасидан мақсадли тадқиқотларни амалга ошириш муҳим масалалардан бири бўлиб, бу борада дунёнинг етакчи олимлари томонидан кўпгина ишлар, жумладан, полидентат лигандлар ва металл карбоксилатлари асосида янги биологик фаол моддаларни яратишнинг назарий ва амалий масалаларини ечиш учун маълум таркиб ва тузилишли металлокомплексларни йўналтирилган синтези борасида кўплаб ишлар амалга оширилган.

Республикамизда маҳаллий хом-ашёлар асосида қишлоқ хўжалиги тармоқларини ривожлантириш мақсадида замонавий талабларга жавоб бера оладиган янги турдаги стимуляторлар ишлаб чиқаришга алоҳида эътибор қаратилмоқда. Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантиришга қаратилган Ҳаракатлар стратегиясида «Қишлоқ хўжалиги маҳсулотларини ишлаб чиқаришни изчил ривожлантириш, мамлакатимиз озиқ-овқат хавфсизлигини янада мустаҳкамлаш, экологик тоза маҳсулотлар ишлаб чиқаришни кенгайтириш, аграр секторнинг экспорт салоҳиятини сезиларли даражада ошириш»<sup>1</sup> га қаратилган муҳим вазифалар белгиланган. Бу борада маҳаллий хом ашёлар асосида қишлоқ хўжалиги экинларининг унумдорлигини оширувчи, уларнинг ўсишини тезлаштирувчи, сув сарфини камайтирувчи, полифункционал таъсирли экологик тоза янги турдаги арзон препаратларни яратиш муҳим аҳамият касб этади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида» ги ПФ-4947-сон Фармони, 2018 йил 25 октябрдаги «Ўзбекистон Республикасида кимё саноатини жадал ривожлантириш чоратadbирлари тўғрисида» ги ПҚ-3983-сон, 2018 йил 17 январдаги «Мамлакат

---

<sup>1</sup> Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сон «Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантириш бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисида»ги Фармони.

иктисодиёти тармоқларини талаб юқори бўлган маҳсулот ва хом-ашё турлари билан барқарор таъминлаш чора-тадбирлари тўғрисида» ги ПҚ-3479-сон, 2019 йил 3 апрелдаги «Кимё саноатини янада ислоҳ қилиш ва унинг инвестициявий жозибadorлигини ошириш чора-тадбирлари тўғрисида» ги ПҚ-4265-сон Қарорлари ва шунингдек мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

**Тадқиқотнинг республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги.** Мазкур тадқиқот республика фан ва технологиялар ривожланишининг VII. Кимё технологиялари ва нанотехнологиялар устувор йўналишларига мувофиқ бажарилган.

**Муаммони ўрганилганлик даражаси.** Органик лигандлар билан қатор металл карбоксилатларининг координацион бирикмалари синтези, таркиби, тузилиши, термик таҳлили, электрон тузилиши, реакция қобилияти ва биологик хоссалари бўйича жаҳон миқёсида ва республикамизда қуйидаги тадқиқотчилар томонидан илмий ишлар олиб борилган: М.А. Порай-Кошиц, К.С. Сулаймонкулов, Г.В. Цивадзе, Г.В. Цинцадзе, Ю.А. Харитонов, М.А. Азизов, В.В. Скопенко, W.C. Hamilton, M.E. Stone, H.A. Парпиев, X.T. Шарипов, O.A. Шабилотов, X.X. Ҳақимов, O.Ф. Ҳоджаев, X.X. Тўраев, K.A. Спицин, A.A. Войтук, Ю.М. Возняковская, Ю.Н. Кукушкина, A.Д. Гарновский, T. Uno, L. Steward, E.B. Горенбейн, P.S. Gentile, D.Y. Naumov, Э.Е. Быков, M. Nardelli, A.H. Юнусходжаев, M.H. Набиев, B.T. Ибрагимов, A.Ф. Дусматов, B. Cozlevcar, X. Исаков, A.M. Насимов, B.B. Умаров, Ш.А. Кадирова, Ш.Ш. Даминова, З.Ч. Кадирова ва бошқалар. Бугунги кунга келиб механокимёвий усул билан координацион бирикмаларнинг синтези бўйича катта тажрибалар ва назарий материаллар тўпланган. Бу борада Hao Wu, Qiang Li, И.А. Туманов, Ф. Томислав, X. Иван, С. Вжекослав, E. Merjana, E.D. Robert, A.L. Garay, P. Anne ва L. Stuart каби олимларнинг изланишлари алоҳида эътиборлидир.

Илмий манбаларнинг таҳлили шуни кўрсатадики, металл карбоксилатларнинг амидлар билан комплексларини ўрганиш бўйича кенг тажрибали материаллар бўлишига қарамасдан, кальций ацетатининг аралаш лигандли координацион бирикмаларининг «таркиб-тузилиш-хосса» боғлиқлигини ва уларни олишнинг қонуниятларини аниқлаш, улардан амалда фойдаланиш, биологик фаолликларини ўрганиш бўйича маълумотлар мавжуд эмас.

**Диссертация мавзусининг диссертация бажарилган илмий тадқиқот муассасининг илмий тадқиқот ишлари билан боғлиқлиги.** Диссертация тадқиқоти Умумий ва ноорганик кимё институти илмий тадқиқот ишлари режасининг ФА-Ф7-Т168 «Полифункционал таъсирли қатор металлларнинг синтези, тузилиши, кристалл ва электрон структураси, реакция қобилиятлари, кимёвий ва биологик хоссаларини илмий асосларини қайд қилиниши» (2012-2016 йй.) ва ФА-Ф7-012 «Полифункционал таъсирли янги аралаш лигандли координацион бирикмаларнинг синтези, тузилишининг

ўзига хослиги, реакция қобилиятлари ва биологик хоссаларининг илмий асослари» (2017-2020 йй.) фундаментал лойиҳалари доирасида бажарилган.

**Тадқиқотнинг мақсади** кальций ацетатининг айрим амидли, никотин ва бензой кислоталари билан янги координацион бирикмаларини синтез қилиш, уларнинг таркиби, тузилиши ҳамда хоссаларини аниқлашдан иборат.

**Тадқиқотнинг вазифалари:**

кальций ацетатининг айрим амидлар, никотин ва бензой кислоталари билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларини синтез қилиш;

олинган координацион бирикмаларнинг таркиби, индивидуаллиги, тузилиши ва хоссаларини физик-кимёвий усулларда таҳлил қилиш;

амид молекулалари, бензой, никотин кислоталари ва сирка кислотасининг ацетат анионларининг координацион рақобатланиш сабабларини аниқлаш;

координацион бирикмаларнинг термик хусусиятларини аниқлаш;

кальций ацетатининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг электрон тузилиш геометрияси, энергетик параметрлари ва реакция қобилиятини квант-кимёвий оптималлаштириш усули ёрдамида ҳисоблаш ва таҳлил қилиш;

синтез қилинган координацион бирикмаларнинг биологик фаоллиги, заҳарлилиги ва қўлланилиш соҳасини аниқлаш.

**Тадқиқот объектлари** сифатида кальций ацетат, формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, никотинамид, бензамид, никотин ва бензой кислоталаридан фойдаланилди.

**Тадқиқотнинг предмети** кальций ацетатининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг таркиби, тузилиши, индивидуаллиги, физик-кимёвий хоссалари ҳамда биологик фаоллигини аниқлаш ҳисобланади.

**Тадқиқотнинг усуллари.** Элемент таҳлил, дифференциал термик таҳлил, рентгенофазавий таҳлил, ИҚ-спектроскопия ва квант-кимёвий ҳисоблаш усули.

**Тадқиқотнинг илмий янгилиги** қуйидагилардан иборат:

илк бор кальций ацетатининг 54 та янги айрим амидли, никотин ва бензой кислотали аралаш лигандли координацион бирикмалари синтез қилинган;

рентгенфазовий таҳлил ва ИҚ-спектроскопия усуллари ёрдамида синтез қилинган бирикмаларнинг индивидуаллиги, лигандлар ва ацетат анионининг марказий ионга нисбатан координацияланиши аниқланган;

синтез қилинган бирикмаларнинг термик хоссалари аниқланган ва термолизнинг оралик маҳсулотлари идентификацияланган;

квант-кимёвий усуллар ёрдамида синтез қилинган бирикмаларнинг энергетик параметрлари, атомларда зарядлар тақсимланиши, геометрияси ва реакция қобилияти аниқланган;

ғўза ўсимлигини ўсишини тезлаштирувчи ва пахта ҳосилдорлигини оширувчи янги самарали стимуляторлар яратилган.

**Тадқиқотнинг амалий натижалари** қуйидагилардан иборат:

кальций ацетатининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларини синтез шароитлари аниқланган;

металл ионини органик лигандлар билан комплекс ҳосил қилиш жараёнларини компьютерда моделлаштириш орқали уларнинг тузилишларидаги ўзига хосликлар аниқланган;

қишлоқ хўжалиги экинларини ўстирувчи, ҳосилдорлигини оширувчи, кам захарли ҳамда самарали  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  ва  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  стимуляторлар яратилган.

**Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги** ИҚ-спектроскопия, рентгенфазовий, элемент, дифференциал термик таҳлил, биологик таҳлил, квант-кимёвий ҳисоблаш каби замонавий тадқиқот усулларида фойдаланиб олинганлиги билан асосланади.

**Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти.** Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти синтез қилинган моддаларнинг таркиби, тузилиши, координацион сферага жойлашиш учун лигандлар ўртасидаги рақобат, атомлар орасидаги боғларнинг узунлиги, атомлардаги зарядларнинг тақсимланиши ва кальций иони табиати таъсирининг аниқланганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти пахта учун кам захарли ва самарали ўстирувчи ва ҳосилни эрта етиштирувчи ҳамда сув сарфини камайтирувчи стимуляторлик хоссаларига эга бўлган полифункционал таъсирли координацион янги бирикмалар тақлиф этилганлиги билан изоҳланади.

**Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши.** Кальций ацетатининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларини синтези, тузилиши бўйича олинган илмий натижалар асосида:

СаАКТК стимуляторининг биологик фаоллиги Самарқанд селекция, уруғчилик ва пахта етиштириш агротехнологияси илмий-текшириш институти майдонларида амалиётга жорий этилган (Қишлоқ хўжалиги вазирлигининг 2019 йил 09 январдаги №02-023-7-сон маълумотномаси). Натижада СаАКТК стимулятори билан ишлов берилганда чигитнинг униб чиқиши муддати 5-7 кунга, пахтанинг очилиш муддати 7-10 кунга қисқарган ва ҳосилдорлик 10-15% га ошиш имконини берган;

янги синтез қилинган стимуляторнинг биологик фаоллиги Самарқанд селекция, уруғчилик ва пахта етиштириш агротехнологияси илмий-текшириш институти майдонларида амалиётга жорий этилган (Қишлоқ хўжалиги вазирлигининг 2019 йил 09 январдаги №02-023-7-сон маълумотномаси). Натижада СаАКТК стимулятори билан ишлов берилганда сувнинг транспирация жараёни 15-20% га камайиш имконини берган;

синтез қилинган комплекс бирикмалардан ФА-Ф7-010 рақамли "Наноструктурали фожазит типдаги цеолитлар панжараси юзасида ион-молекуляр кластерларни энергетикаси, тузилиши ва жойлашиши" мавзусидаги фундаментал лойиҳасида комплекс бирикмаларнинг фаол биологик хусусиятлари наноструктурали фожазит типдаги цеолитлар панжараси юзасида ион-молекуляр кластерларни энергетикаси, тузилиши ва жойлашиши аниқлашда фойдаланилган (Ўзбекистон Республикаси Фанлар академиясининг 2018 йил 30 ноябрдаги 4/1255-3139-сон маълумотномаси). Натижада тиокарбамидли комплекс бирикмалар боғлар узунлиги ва атомлардаги зарядларнинг тақсимланишини ҳисоблаш имконини берган.

**Тадқиқот натижаларининг апробацияси.** Мазкур тадқиқот натижалари 12 та, шу жумладан 3 та халқаро ва 9 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган.

**Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши.** Диссертация мавзуси бўйича жами 19 та илмий иш чоп этилган, шулардан, Ўзбекистон Республикаси Олий аттестацияси комиссиясининг фалсафа доктори (PhD) диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этишга тавсия этилган илмий нашрларда 7 та илмий мақола, жумладан 5 та республика ва 2 та хорижий журналларда нашр этилган.

**Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми.** Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва иловалардан иборат. Диссертациянинг ҳажми 118 саҳифани ташкил этади.

## ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

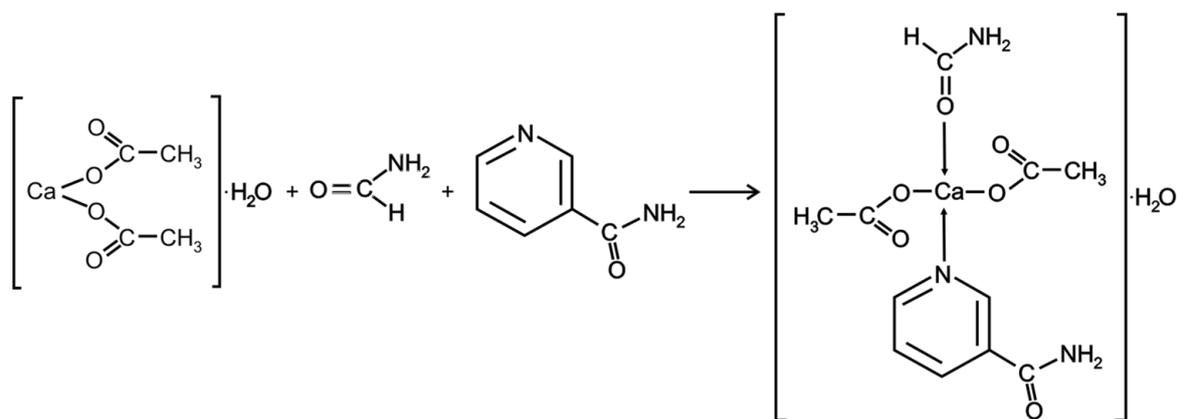
Кириш қисмида тадқиқотларнинг долзарблиги ва зарурати асосланган, тадқиқотнинг мақсади ва вазифалари, объект ва предметлари тавсифланган, Республика фан ва технологиялари ривожланишининг устувор йўналишларига мослиги кўрсатилган, тадқиқотнинг илмий янгилиги ва амалий натижалари баён қилинган, олинган натижаларнинг илмий ва амалий аҳамияти очиқ берилган, тадқиқот натижаларини амалиётга жорий қилиш, нашр этилган илмий ишлар ва диссертация тузилиши бўйича маълумотлар келтирилган.

Диссертациянинг **“Металларнинг координацион бирикмалари билан ёғ кислоталари вакиллари, алифатик амидлар, карбон, тиокарбон, ароматик ва гетероциклик кислоталарининг тадқиқот ҳолати”** деб номланган биринчи бобида синтез бўйича адабиётларни ўрганиш, органик бирикмалар билан карбон кислота тузларининг тузилишини физик-кимёвий хоссаларини, формамид –  $\text{HCONH}_2$ , ацетамид –  $\text{CH}_3\text{CONH}_2$ , карбамид –  $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ , тиокарбамид –  $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ , нитрокарбамид –  $\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ , никотинамид –  $\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ , никотин –  $(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH})$  ва бензой ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ) кислоталар билан ҳосил қилган металл тузларининг координацион бирикмалари ва металл карбоксилатлари асосидаги ўсимликларни ўсишини жадаллаштирувчи стимуляторларни ўрганиш таҳлил қилинган.

Диссертациянинг “Кальций ацетатини бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг олиниши” деб номланган иккинчи бобида реактивларни, қурилмаларни, синтез усулларини ва дастлабки моддаларни танлаш, кальций ацетатининг формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, никотинамид, бензамид, никотин ва бензой кислоталари билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг синтезини амалга ошириш ҳақида маълумотлар келтирилган. Адабиётларда кальций ацетатининг амидлар, никотин ва бензой кислоталари билан координацион бирикмалари ҳақида маълумотлар мавжуд эмас.

Комплекс бирикмаларни синтез қилиш учун биз энг самарали усуллардан бири бўлган механохимёвий усулни танладик, чунки ушбу усулда қимматбаҳо органик эритувчилар талаб қилинмайди.

Дастлабки компонентларнинг ўзаро таъсирлашиш жараёни кальций ацетатининг органик лигандлар билан 1:2, 1:4 ва 1:1:1 нисбатларида шарли тегирмонда жадал таъсирлаштириш орқали амалга оширилди. Ушбу усулда қолган бирикмалар ҳам синтез қилинган.



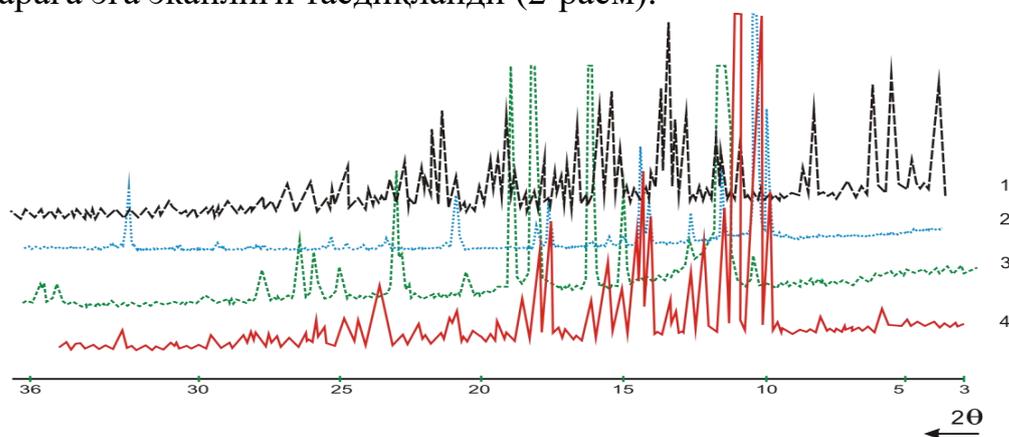
**1-расм. CaA·ФА·АНК·Н<sub>2</sub>О бирикмасининг ҳосил бўлиш реакция тенгламаси.**

CaA·ФА·АНК·Н<sub>2</sub>О таркибли комплекс бирикма синтези 0,4505 г (0,01 моль) формаид, 1,2211 г (0,01 моль) никотинамид ва 1,7619 г (0,01 моль) Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·Н<sub>2</sub>О кальций ацетатини 0,3 соат давомида хона ҳароратда шарли тегирмонда таъсирлаштириш орқали олиб борилди. 1-расмда Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·HCONH<sub>2</sub>·NC<sub>5</sub>H<sub>4</sub>CONH<sub>2</sub>·Н<sub>2</sub>О координацион бирикмасининг реакция тенгламалари келтирилган. Ҳудди шундай усулда қуйидаги таркибий бирикмалар ҳам олинган:

- |   |   |
|---|---|
| 1) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·2HCONH <sub>2</sub> ·Н <sub>2</sub> О,                   | 29) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·O <sub>2</sub> NHNCONH <sub>2</sub> ,                                  |
| 2) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·4HCONH <sub>2</sub> ·2,5Н <sub>2</sub> О,                | 30) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·NC <sub>5</sub> H <sub>4</sub> CONH <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О, |
| 3) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·2CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ,                     | 31) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CONH <sub>2</sub> ,                      |
| 4) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·4CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О, | 32) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·NC <sub>5</sub> H <sub>4</sub> COOH·Н <sub>2</sub> О,                  |
| 5) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·2CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О, | 33) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> ·C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COOH,                                    |
| 6) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·4CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О, | 34) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·CS(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О,                |
| 7) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·2CS(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ,                     | 35) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·O <sub>2</sub> NHNCONH <sub>2</sub> ,                                  |
| 8) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·4CS(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ,                     | 36) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·NC <sub>5</sub> H <sub>4</sub> CONH <sub>2</sub> ·0,5Н <sub>2</sub> О, |
| 9) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·2O <sub>2</sub> NHNCONH <sub>2</sub> ,                   | 37) Ca(CH <sub>3</sub> COO) <sub>2</sub> ·CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> ·C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CONH <sub>2</sub> ·Н <sub>2</sub> О,     |

- 10)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 11)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 12)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  
 13)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,  
 14)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,  
 15)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH}$ ,  
 16)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH}$ ,  
 17)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 18)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 19)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  
 20)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 21)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,  
 22)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  
 23)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 24)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 25)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 26)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 27)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 28)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 38)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 39)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 40)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 41)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  
 42)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 43)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  
 44)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 45)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 46)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 47)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 48)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 49)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,  
 50)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  
 51)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 52)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 53)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,  
 54)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$

Диссертациянинг “Кальций ацетатининг бир турли ва аралаш лигандли комплекс бирикмаларининг физик-кимёвий таҳлили” деб номланган учинчи бобида формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, никотинамид, бензамид, бензой ва никотин кислоталари, кальций ацетати ва уларнинг янги аралаш лигандли координацион бирикмаларининг ўзаро текисликлараро масофалари ва нисбий сезгирликларини солиштирилганда, бир-бирига ўхшамаслиги ва дастлабки бирикмалардан сезиларли даражада фарқланганлиги исботланган. Натижада, олинган координацион бирикмалар ўзларининг индивидуал кристалл панжарага эга эканлиги тасдиқланди (2-расм).



**2-расм. Рентгенограммалар: 1- $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ; 2- $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ ;  
 3- $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  и 4- $\text{CaA} \cdot \text{K} \cdot \text{TK} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ .**

Эркин формаид молекуласининг ИҚ-спектр ютилишидаги иккита частотаси  $1709$  ва  $1316 \text{ см}^{-1}$   $\text{C}=\text{O}$  ва  $\text{C}-\text{N}$  валент тебранишига мос келади.  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  ва  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  комплексларида координациялашган ҳолатга ўтиши билан  $\text{C}=\text{O}$  тебраниш частотаси  $17$  ва  $15 \text{ см}^{-1}$  гача камаяди. Шу пайтда  $\text{C}=\text{N}$  тебраниш частотаси  $32$  ва  $73 \text{ см}^{-1}$  га ошади.

Тебранишдаги бу ўзгаришлар формаид молекулалари карбонил гуруҳининг кислород атоми орқали кальций ионлари билан координациялашганидан далолат беради. Формаид молекулаларини қуйидаги  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  таркибли бирикмаларида  $\text{C}=\text{O}$  ва  $\text{C}=\text{N}$  тебраниш частоталари таққосланганда ҳам, худди шундай координациялашгани қайд қилинди (1-жадвал).

**1-жадвал. Формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, никотинамид, бензамид, никотин ва бензой кислоталарининг эркин молекулалари ва уларнинг кальций ацетати билан координацион бирикмаларининг ИҚ-спектр ютилишидаги характерли частоталари( $\text{cm}^{-1}$ )**

Бирикмалар	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu(\text{CS}), \sigma(\text{CS})$	$\nu_k, \sigma(\text{C}=\text{O})$	$\nu_{as}(\text{COO}), \nu_s(\text{COO})$
$\text{HCONH}_2$ - (ФА)	1667	1343			
$\text{CH}_3\text{CONH}_2$ - (АА)	1674	1395			
$\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ - (К)	1678	1457			
$\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ - (ТК)			729, 629		
$\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ - (НТК)	1701	1466			
$\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ - (АНК)	1681			1592, 1028, 700	
$\text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ - (БА)	1652			1577, 1024, 703	
$\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ - (БК)	1683			1583, 1026, 705	
$\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH}$ - (НК)	1694			1595, 1030, 745	
$\text{CaA} \cdot 2\text{ФА} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1692	1348			
$\text{CaA} \cdot 4\text{ФА} \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$	1694	1389			
$\text{CaA} \cdot 2\text{АА}$	1656	1405			
$\text{CaA} \cdot 4\text{АА} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	1673, 1653	1395, 1421			
$\text{CaA} \cdot 2\text{К} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	1659	1470			
$\text{CaA} \cdot 4\text{К} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	1678, 1634	1475, 1461			
$\text{CaA} \cdot 2\text{ТК}$			725, 621		
$\text{CaA} \cdot 4\text{ТК}$			729, 616		
$\text{CaA} \cdot 2\text{НТК}$	1677	1470			
$\text{CaA} \cdot 4\text{НТК} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1674	1471			
$\text{CaA} \cdot \text{АНК} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$	1682			1612, 1058, 1029, 703, 779	
$\text{CaA} \cdot 4\text{АНК}$	1682			1611, 1059, 1029, 703, 778	
$\text{CaA} \cdot 2\text{БА}$	1672, 1633			1574, 1026, 697	
$\text{CaA} \cdot 4\text{БА}$	1657			1577, 1025, 704	
$\text{CaA} \cdot 2\text{НК}$	1703			1606, 1030, 746	
$\text{CaA} \cdot 4\text{НК}$	1705			1606, 1031, 747	
$\text{CaA} \cdot 2\text{БК}$	1683	1393			
$\text{CaA} \cdot 4\text{БК}$	1683	1392			

Бирикмалар	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\sigma(\text{CS})$	$\nu_k, \sigma(\text{C}=\text{O})$	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}),$ $\nu_{\text{s}}(\text{COO})$
CaA•ФА•АА•2H <sub>2</sub> O	1698, 1670	1397, 1348			
CaA•ФА•К•0,5H <sub>2</sub> O	1678, 1668	1473, 1348			
CaA•ФА•ТК•2/3H <sub>2</sub> O	1693	1347			
CaA•ФА•НТК•2H <sub>2</sub> O	1685, 1681	1471, 1348			
CaA•ФА•АНК•H <sub>2</sub> O	1691, 1680	1341		1631, 1022, 1053, 709, 766	
CaA •ФА•БА•H <sub>2</sub> O	1656, 1623	1352		1577, 1025, 704	
CaA •ФА•НК•H <sub>2</sub> O	1692, 1605	1453		1562, 1031, 756	
CaA•ФА•БК	1683	1393			
CaA•АА•К•H <sub>2</sub> O	1677, 1631	1469, 1420			
CaA•АА•ТК•0,5H <sub>2</sub> O	1666	1415	675, 618	670, 621	
CaA•АА•НТК	1660, 1677	1423, 1480			
CaA•АА•АНК•0,5H <sub>2</sub> O	1663, 1672	1421		1611, 1058, 1030, 703, 778	
CaA•АА•БА	1660, 1610	1409		1563, 1029, 784	
CaA•АА•НК	1665, 1629	1403		1606, 1043, 767	
CaA•АА•БК	1665, 1628	1392			
CaA•К•ТК•0,5H <sub>2</sub> O	1677	1469	674, 612		1562, 1402
CaA•К•НТК	1677, 1701	1459, 1481			1576, 1401
CaA•К•АНК•0,5H <sub>2</sub> O	1677	1470		1632, 1594, 1027, 1050, 698, 707	1582, 1403
CaA•К•БА•H <sub>2</sub> O	1676, 1629	1461		1537, 1029, 781	1563, 1409
CaA•К•НК•H <sub>2</sub> O	1674, 1628	1460		1583, 1043, 746	1582, 1415
CaA•К•БК	1663, 1631	1395			1531, 1414
CaA•ТК•НТК•0,5H <sub>2</sub> O	1702	1472	696, 627		
CaA•ТК•АНК	1700		696, 627	1634, 1610, 1031, 1050, 721, 696	
CaA•ТК•БА•H <sub>2</sub> O	1657		730, 643	1531, 1029, 704	
CaA•ТК•НК•2H <sub>2</sub> O	1697		730, 642	1605, 1031, 746	
CaA•ТК•БК	1663, 1631	1395	731, 643		
CaA•НТК•АНК•0,5H <sub>2</sub> O	1678, 1695	1473		1631, 1028, 1055, 698, 784	
CaA•НТК•БА•0,5H <sub>2</sub> O	1711, 1677	1448		1552, 1015, 703	

Бирикмалар	$\nu(\text{C=O})$	$\nu(\text{C=N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\sigma(\text{CS})$	$\nu_k, \sigma(\text{C=O})$	$\nu_{as}(\text{COO}),$ $\nu_s(\text{COO})$
CaA•НТК•НК•Н <sub>2</sub> O	1708, 1675	1457		1606, 1031, 746	
CaA•НТК•БК	1663, 1631	1395			
CaA•АНК•БА	1708, 1675			1606, 1581, 1031, 692	
CaA•АНК•НК•0,5Н <sub>2</sub> O	1697			1606, 1029, 693, 674	
CaA•АНК•БК	1663, 1631	1395			
CaA•БА•НК•Н <sub>2</sub> O	1704, 1653			1607, 1537, 1057, 1030, 746, 692	
CaA•БА•БК	1628, 1630	1391			
CaA•НК•БК	1663, 1629	1393			

Эркин ацетамид молекуласи инфрақизил ютилиш спектри бир нечта ўзига хос частоталар билан характерланади. Улардан 1670 ва 1395  $\text{cm}^{-1}$  да, C=O ва C=N боғлари валент тебраниш частоталарига мос келади. Ацетамид молекуласининг координацияси карбонил гуруҳининг кислород атоми орқали содир бўлганда биринчи чизик камаяди. Бу пайтда, C=N боғининг частотаси қиймати ошади. Бу ўзгаришлар қуйидаги таркибли бирикмалар  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  да ҳам кузатилди.

Эркин карбамид молекуласининг ИҚ-ютилиш спектрида бошқа частоталар билан бирга иккита чизик ҳам кузатилади, бу эса марказий ион ва карбамид молекуласи карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали координациялашганини тасдиқлайди. C=O ва C=N боғларининг келтирилган валент тебраниш частоталари қийматлари бир турли ва аралаш лигандли қуйидаги таркибли  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  бирикмаларида ҳам кузатилди.

Эркин тиокарбамид молекуласининг ИҚ-ютилиш спектрида 1413- $\nu(\text{CS})$ , 730-  $\nu(\text{CS})$  ва 631  $\text{cm}^{-1}$  -  $\sigma(\text{CS})$  да учта характерли частоталар кузатилади. Тиокарбамидли координацион бирикмаларда 1413- $\nu(\text{CS})$  частотасининг ўзгаришини кузатиш мумкин эмас, чунки у ацетат гуруҳидаги  $\nu(\text{COO})$  катта чизиги билан қопланган. Аммо, спектрнинг паст частотали соҳасида  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot$

$\cdot\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  нинг бир турли ва аралаш лигандли комплексларида  $730$  ва  $631 \text{ см}^{-1}$  соҳасида тиокарбамид молекуласининг  $1-56$  ва  $4-19 \text{ см}^{-1}$  га камайганини кузатиш мумкин. Спектрдаги тебранишларларнинг бундай ўзгаришларни тиокарбамид молекуласи кальций иони билан олтингугурт атоми орқали координациялашганлиги билан изоҳланади.

Бошқа частоталар билан бир қаторда эркин нитрокарбамид молекуласининг инфрақизил ютилиш спектри  $1704-\nu(\text{CO})$  ва  $1460-\nu(\text{CN})$  соҳасида иккита характерли частотаси кузатилади. Ушбу частоталар нитрокарбамид молекуласини карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали координациялашган пайтда ўзгаришларга учрайди.  $\text{C}=\text{O}$  боғнинг валент тебраниш частотаси пасаяди ва иккинчи частота ошади. Худди шундай ўзгаришлар  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$  таркибли бир турли ва ралаш лигандли бирикмаларда ҳам кузатилди.

Никотинамид молекуласи ИҚ-ютилиш спектрида етарлича частоталар кузатилади ва  $n(\text{халқа})$  частота  $1593 \text{ см}^{-1}$  соҳада кузатилди, айниқса бу комплекда сезиларли даражада ошиши кузатилди.  $1029-\nu_k$  и  $703 \text{ см}^{-1}$  ( $\text{CCN}$ ) частотатлари эса халқа тебранишига мос келади. Худди шундай ўзгаришлар  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  таркибли бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларда ҳам кузатилди. Бу ўзгаришлар никотинамиднинг пиридин халқасидаги гетероатом азот орқали кальций иони билан координацияланишидан далолат беради (1-жадвал).

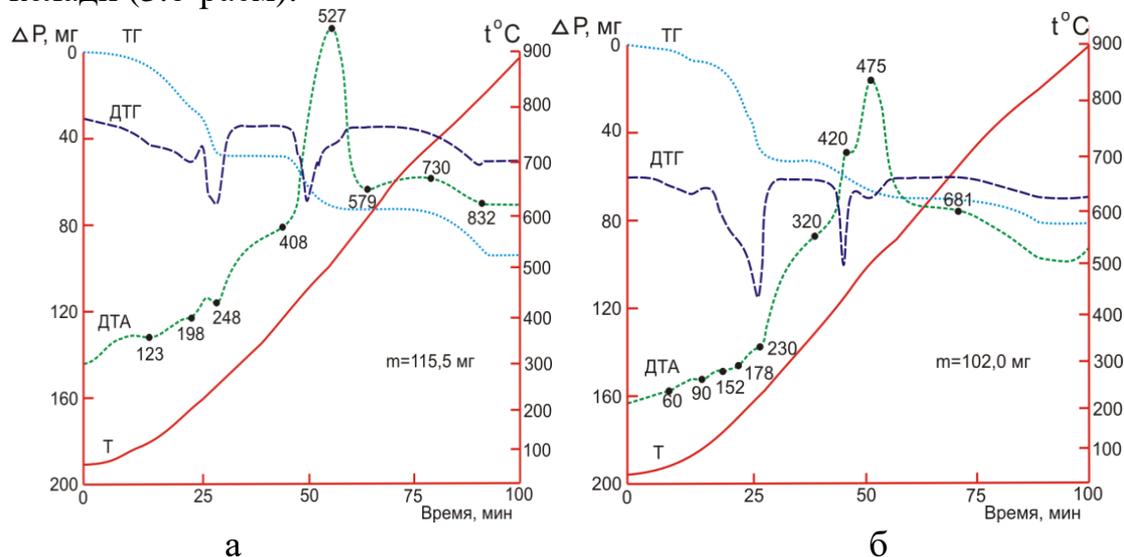
Ацетат гуруҳларининг координацияланиш характери таркиб, ацидо- ва апикал лигандларнинг ўзаро жойлашувига ва ички молекуляр водород боғларнинг мавжудлигига боғлиқ ҳолда ўзгаради.

Барча синтез қилинган бирикмаларнинг термик барқарорлиги тадқиқи қилинди. Термик эффектлар, барча термолиз оралиқларнинг иссиқлик диапазони, массанинг камайиши, умумий массанинг камайиши, ҳосил бўлувчи оралиқ маҳсулотлар таркиби ва эффектларнинг табиати аниқланди.

$\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  бирикмасининг иссиқлик эгри чизиғида еттита эндотермик эффектлар  $123, 198, 248, 408, 527, 579, 850$  ва иккита  $527$  ва  $730^\circ\text{C}$  да экзотермик эффектлар намоён бўлди. Биринчи эндотермик эффектнинг ҳосил бўлиши  $1$  моль сув молекуласининг йўқотилиши билан изоҳланади. Кейинги иссиқлик эффектлари сувсиз бирикманинг босқичма-босқич парчаланиши билан харатерланади.  $70-130, 130-211, 211-307, 307-432, 432-553, 553-633, 633-782, 782-870^\circ\text{C}$  температура оралиқларида масса йўқотилиши мосҳолда  $6,90; 12,39; 17,45; 1,73; 19,18; 0,26; 2,92; 13,63\%$  ни

ташқил этди. ТГ эгри чизиғида 70-870°С гача ораликдаги ҳароратда умумий массанинг йўқотилиши 74,46% ни ташқил этди, бу кальций оксиди ҳосил бўлишига мос келади (3.а-расм).

$\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  комплекс бирикмасининг иссиқлик эгри чизиғида олти та эндотермик эффект 60, 90, 152, 178, 230, 810 да ва тўртта экзотермик эффектлар 320, 420, 475, 681°С да кузатилди. Биринчи учта эндотермик эффектнинг пайдо бўлиши 2,5 моль сув молекуласининг йўқолиши билан характерланади. Кейинги термик эффектларнинг ҳосил бўлиши сувсиз бирикманинг босқичма-босқич парчаланиши билан изоҳланади. Ҳароратнинг 50-84, 84-124, 124-162, 162-208, 208-252, 252-376, 376-450, 450-569, 569-740, 740-840°С ораликларида масса йўқотилиши мос равишда 2,35; 4,60; 4,70; 25,00; 8,82; 7,84; 15,69; 5,39; 7,84; 3.19% га тўғри келади. ТГ эгри чизиғининг 50-840°С ҳарорат оралиғида умумий масса йўқотилиши 85,37% ни ташқил қилади, бу кальций оксиди ҳосил бўлишига мос келади (3.б-расм).



**3-расм. а)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  таркибли координацион бирикмасининг дериватограммаси; б)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  таркибли координацион бирикманинг дериватограммаси.**

Молекуляр орбитал усули (МО ЛКАО) ёрдамида РМЗ ярим-эмпирик усулдан фойдаланиб, саккизта аралашлигандли кальций ацетатининг координацион бирикмаларини электрон структуралари ҳисобланди.

Саккизта комплекс бирикманинг энергия хусусиятларини таққослаш шуни кўрсатадики, умумий энергия қийматлари яқин. Шу билан бирга, боғ энергияси, электрон энергияси, ядровий энергия, ҳосил бўлиш иссиқлиги, юқори банд этилган ва қуйи вакант молекуляр орбиталларнинг энергиялари сезиларли даражада фарқ қилади. Боғларнинг узунликлари, атомлар зарядлари ҳам фарқ қилади.  $\Delta = \text{ЮБМО} - \text{ҚВМО}$  фарқи қийматининг ошиши кальцийнинг комплекс бирикмаларининг нуклеофил моддалар учун реакцион қобилияти юқори эканлигини кўрсатади ва бу кальцийнинг бошқа комплекс бирикмаларига қараганда ўсимликларнинг ўсишини тезлаштирувчи фаоллигини кўпроқ оширади.

Маълумки, марказий атом билан координациялашган ҳолда бир нечта донор атомларини ўз ичига олган полифункционал лигандлар бир-бири билан рақобатлашади, бу муаммони ва лигандларнинг рақобатбардошлигини ўрганиш координацион кимёсининг муҳим вазифасидир. Ушбу муаммони анъанавий усуллар билан ўрганиш кўп вақт талаб қилади. Шу сабабли, бугунги кунда бундай муаммоларни ҳал қилишда компьютер дастурларидан фойдаланишга кўпроқ эътибор қаратилмоқда. Шунини таъкидлаш керакки, органик молекулалар ва лигандлар марказий атом билан координациялашганда, уларнинг хоссаларини ўзгартиради ва айни пайтда электрон жуфтларининг таъсирлари координацион бирикмаларга хос хусусиятларнинг пайдо бўлишига олиб келади.

Кальций ацетатининг саккизта аралаш лигандли координацион бирикмалари бизнинг квант кимёвий тадқиқотларимизнинг объектлари сифатида олинди. Ҳисоб-китоблар Hyper-Chem.8-07 дастурий пакетининг РМЗ ярим-эмпирик усули ёрдамида амалга оширилди.

Элемент, термик ва рентген таҳлиллари, ИҚ-спектр ютилиш усуллари орқали қуйидаги моддаларнинг таркиби, индивидуаллиги, амид молекулалари ва ацетат фрагментининг координацияланиш усуллари қайд қилинди:  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NH}_2\text{CONHNO}_2$  (I-2),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II-1),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (III-2),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (IV-5),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (V-6),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (VI-6),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (VII-6) ва  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$  (VIII-6).

Координацион тугунларнинг геометриясини аниқлаш учун, биз бир нечта мумкин бўлган тузилмаларнинг квант-кимёвий ҳисоблашларини амалга оширдик.

$\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NH}_2\text{CONHNO}_2$  (I) таркибли комплекс бирикмасининг ацетат гуруҳларини координацияланишининг турли усуллари ва ички молекуляр водород боғларнинг мавжудлигини ҳисобга олган ҳолда, тўртта тетраэдрик ва тўртта октаэдрик структуралар таклиф этилди. Саккизта тузилишдан марказий кальций атомининг тетраэдрик тугуни билан ацетат фрагментларини монодентатли координацияланиши ва карбонил гуруҳининг кислород атоми орқали ацетамид ва нитрокарбамид молекулаларининг донор қабул қилувчига координациялашуви туфайли қурилган структураси ҳосил бўлиш иссиқлигига кўра энергетик самарали деб топилди. Ички молекуляр водород боғлари битта ацетат гуруҳининг кислород атомлари ва ацетамиднинг амина гуруҳидаги водород орқали амалга оширилади. Бошқа бир ички молекуляр боғ нитрокарбамид молекулаларининг кислород ва водород атомлари орқали амалга ошади (I-3).

**2-жадвал.  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$  (I),  
 $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II),  
 $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (III) ва**

**Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·CH<sub>3</sub>CONH<sub>2</sub>·CO(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (IV) таркибли кальций ацетатининг  
аралашлигандли комплекс бирикмаларининг ҳисобланган энергетик  
кўрсаткичлари қийматлари**

Бирикма	I-3	II-1	III-2	IV-5
Умумий энергия, ккал/моль	-94235,157	-95820,056	-89916,861	-84897,536
Умумий энергия (а.е.)	-150,173	-152,699	-143,292	-135,293
Боғловчи энергия, ккал/моль	-3749,235	-4476,657	-4354,601	-3814,438
Қуршалган атомлар энергияси, ккал/моль	-90485,922	-91343,399	-85562,260	-81083,099
Электрон энергия, ккал/моль	-646020,116	-723869,623	-688114,498	-579991,486
Ядролараро ўзаро таъсирлашиш энергияси, ккал/моль	551784,959	628049,567	598197,636	495093,950
Ҳосил бўлиш иссиқлиги, ккал/моль	-852,505	-912,620	-782,384	-933,961
Градиент	0,009	0,009	0,007	0,008
ЮБМО	-10,151	-9,655	-8,918	-9,936
ҚВМО	-0,855	-1,198	-1,560	-0,486
ЮБМО-ҚВМО	-9,296	-8,457	-7,358	-9,450

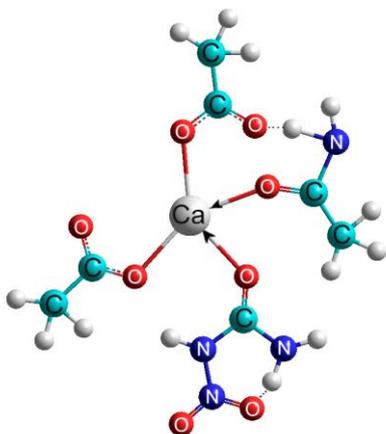
Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·NC<sub>5</sub>H<sub>4</sub>CONH<sub>2</sub> (III) комплекс бирикма учун тўртта тетраэдрик ва тўртта октаэдрик тузилиш таклиф қилинди. Ҳосил бўлиш иссиқлигига кўра, энергетик энг самарали тузилиш деб, тетраэдрик қуршовли, яъни тиокарбамиднинг олтингургрт атоми, никотинамид молекуласи пиридин халқасидаги азот ва монодентат ҳолатдаги иккита ацетат гуруҳининг молекулалари билан қуршалган бирикма аниқланди. Ацетат гуруҳи, тиокарбамид ва никотинамид молекулаларининг кислород атомлари орқали иккита ички молекуляр боғлар мавжуд (III-2).

Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·CH<sub>3</sub>CONH<sub>2</sub>·CO(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (IV) комплекс бирикмаси учун тўртта тетраэдрик ва тўртта октаэдрик таклиф қилинди. Ҳосил бўлиш иссиқлигига кўра, октаэдрик шаклдаги марказий кальций атомига ацетамид ва карбамид молекулаларининг иккита кислороди орқали, ҳамда иккита ацетат гуруҳининг тўртта кислороди орқали транс ҳолатида бидентат-циклик координациялашуви энг самарали эканлиги аниқланди. Сув молекуласи сувнинг кислород ва водород атомлари иштирокида, карбамиднинг амид гуруҳидаги водород ва ацетат фрагментидаги кислород билан водород боғ ҳосил қилади (IV-5).

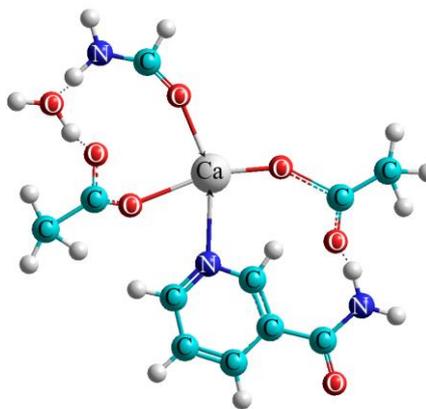
**3-жадвал. Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·HCONH<sub>2</sub>·NC<sub>5</sub>H<sub>4</sub>COOH·H<sub>2</sub>O (V-6),  
Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·CO(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CONH<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (VI-6),  
Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>·C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CONH<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O (VII-6) и  
Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·NC<sub>5</sub>H<sub>4</sub>CONH<sub>2</sub>·C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CONH<sub>2</sub> (VIII-6) таркибли кальций**

**ацетатининг аралашлигандли комплекс бирикмаларининг ҳисобланган  
энергетик кўрсаткичлари қийматлари**

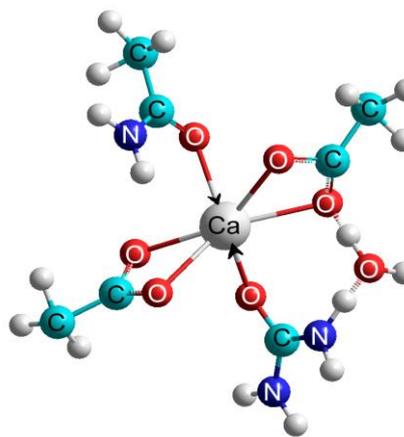
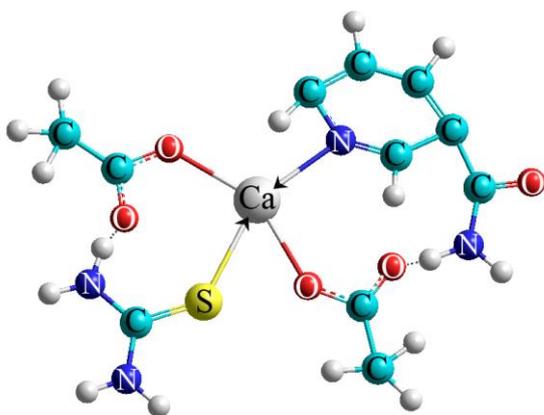
Бирикма	V-6	VI-6	VII-6	VIII-6
Умумий энергия, ккал/моль	-94235,157	-95820,056	-89916,861	-84897,536
Умумий энергия (а.е.)	-150,173	-152,699	-143,292	-135,293
Боғловчи энергия, ккал/моль	-3749,235	-4476,657	-4354,601	-3814,438
Қуршалган атомлар энергия, ккал/моль	-90485,922	-91343,399	-85562,260	-81083,099
Электрон энергия, ккал/моль	-646020,116	-723869,623	-688114,498	-579991,486
Ядролараро ўзаро таъсирлашиш энергияси, ккал/моль	551784,959	628049,567	598197,636	495093,950
Ҳосил бўлиш иссиқлиги, ккал/моль	-852,505	-912,620	-782,384	-933,961
Градиент	0,009	0,009	0,007	0,008
ЮБМО	-10,151	-9,655	-8,918	-9,936
ҚВМО	-0,855	-1,198	-1,560	-0,486
ЮБМО-ҚВМО	-9,296	-8,457	-7,358	-9,450



I-3



II-1



**4-расм.  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$  (I-3),  
 $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II-1),  
 $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (III-2) и  
 $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (IV-5) таркибли  
 бирикмаларнинг фазовий тузилиши.**

Диссертациянинг “Кальций ацетатининг координацион бирикмаларининг агрохимёвий ва токсикологик тадқиқотлари” деб номланган 4 бобида олинган аралаш лигандли комплекс бирикмаларининг агрохимёвий ва токсикологик хоссалари ўрганилди.

### ХУЛОСАЛАР

1. Кальций ацетатининг формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, бензамид, никотинамид, бензой ва никотин кислоталари билан 54 та янги координацион бирикмалари синтез қилинди.

2. ИҚ-спектроскопик усул асосида формаид, ацетамид, карбамид, нитрокарбамид, бензамид ва бензой кислотали бирикмаларида лигандларнинг металл атоми билан координацияланиши карбонил гуруҳидаги кислород атоми, тиокарбамидли комплексларда олтингугурт атоми, никотинамид ва никотин кислотаси пиридин халқадаги азот гетроатоми орқали амалга ошиши билан ҳамда сирка кислотаси аниони кальций катионига нисбатан моно- ва бидентат шаклда координацияланиши билан изоҳланди.

3. Барча синтез қилинган комплексларнинг термик хусусиятлари тадқиқ қилинганда комплекс бирикмаларнинг термик барқарорлиги лигандлар табиатига, марказий атом қуршовига ва комплекслар таркибига боғлиқ бўлиши кўрсатилди.

4. Кальций ацетатининг 8 та аралаш лигандли комплексларининг электрон тузилиши, структураси, реакция қобилияти квант кимёвий усул ёрдамида аниқланди.

5. Полифункционал таъсирли стимуляторларнинг вегетацион тадқиқот натижаларига кўра, чигитни экиш олдида ҳамда ғўзани шоналаш ва гуллаш даврида препаратлар билан ишлов берилганда энг самарали натижаларга эришилди.

6.  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$  ҳамда  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$  комплекс бирикмаларининг биометрик ва фенологик кўрсаткичлари назорат вариантыга нисбатан юқори натижа олинганлиги сабабли, пахта ўсимлигининг ўсиши ва ҳосил берувчи навалари кўпайишига олиб келди.

7.  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$  комплекс бирикмасининг токсикологик хоссалари бўйича бирламчи тадқиқотлари натижаларига кўра, бирикманинг захарлилик даражаси 6667мг/кг ни ташкил этиб, захарлилик кўрсаткичи бўйича бешинчи синфга мансуб бўлиб “Амалда захарсиз” лиги аниқланди.

НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc27.06.2017.К.01.03  
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНЫХ СТЕПЕНЕЙ ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ  
УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА

---

ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

ТУРАКУЛОВ ЖАХОНГИР УЛУГБЕКОВИЧ

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ КООРДИНАЦИОННЫХ  
СОЕДИНЕНИЙ АЦЕТАТА КАЛЬЦИЯ С НЕКОТОРЫМИ АМИДАМИ,  
НИКОТИНОВОЙ И БЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТАМИ

02.00.01 – Неорганическая химия  
(химический наук)

АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)  
ПО ХИМИЧЕСКИМ НАУКАМ

Ташкент-2019

**Тема диссертации доктора философии (PhD) по химическим наукам зарегистрирована в Высший аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номеров В2017.2.PhD/К31**

Диссертация выполнена в Институте общей и неорганической химии АН РУз.

Автореферат диссертации на трех языках (узбекский, русский, английский (резюме)) размещен на веб-странице Научного совета [www.ik-kimyo.nuuz.uz](http://www.ik-kimyo.nuuz.uz) и на Информационно-образовательном портале «ZiyoNet» по адресу [www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz).

Научный руководитель: **Азизов Тохир Азизович**  
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты: **Умаров Бако Бафоевич**  
доктор химических наук, профессор

**Кадирова Зухра Чингизовна**  
доктор химических наук

Ведущая организация: Ташкентский фармацевтический институт

Защита диссертации состоится «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 г. в «\_\_\_» часов на заседании Научного совета DSc27.06.2017.K.01.03 при Национальном университете Узбекистана имени Мирзо Улугбека. (Адрес: 100174, г.Ташкент, ул. Университетская 4, Тел.: (99871) 227-12-24; факс: (99824) 246-53-21, 246-02-24. e-mail: chem0102@mail.ru).

Диссертация зарегистрирована в Информационно ресурсном центре Национального университета Узбекистана за №\_\_\_, с которой можно ознакомиться в ИРЦ. (100174, Ташкент, ВУЗ городок, Фундаментальная библиотека НУУз. Тел.:(99871) 246-67-71).

Автореферат диссертации разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 года.  
(протокол рассылки №\_\_\_ от «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2019 года).

**Х.Т. Шарипов**

Председатель научного совета по  
присуждению учёных степеней,  
д.х.н., профессор

**Д.А. Гафурова**

Учёный секретарь научного совета по  
присуждению учёных степеней,  
д.х.н., профессор

**Н.А. Парпиев**

Председатель научного семинара при  
научном совете по присуждению учёных  
степеней, д.х.н., профессор, академик

## **ВВЕДЕНИЕ (аннотация диссертации доктора философии (PhD))**

**Актуальность и востребованность темы диссертации.** В мире за счет интенсивного развития химической, нефтяной, энергетической, легкой и строительной промышленности, появления экологических проблем, повышения спроса на сельскохозяйственной продукции, задачи эффективного использования водных ресурсов увеличивает требования к новым типам химических соединений. Это особенно проявляется при синтезе новых координационных соединений, которые повышают урожайность сельскохозяйственных культур, имеющие эффективные свойства и не оказывающие отрицательного воздействия на окружающую среду. По этой причине, обеспечение населения качественными, дешёвыми и безопасными продуктами имеет особое важное значение.

В мире, с развитием и расширением сельскохозяйственных отраслей, увеличивается и требования к химическим соединениям ускоряющих рост растений и повышающих их урожайность. Особенно, одной из важных задач является проведение целенаправленных исследований по синтезу стимуляторов комплексного действия, и в этом направлении выполнены множество работ ведущими учеными мира, в частности, были проведены множество работ по направленному синтезу металлокомплексов с определённым составом и строением для решения теоретических и практических задач создания биологически активных веществ на основе полидентатных лигандов и карбоксилатов металлов.

В нашей Республике, в целях развития сельскохозяйственных отраслей, уделяется большое внимание производству новых видов стимуляторов на основе местного сырья, отвечающие современным требованиям. В Стратегии действий по дальнейшему развитию Республика Узбекистана определены важные задачи по «Углублению реформ и динамичному развитию сельского хозяйственного производства, дальнейшему укреплению продовольственной безопасности страны, развитию производства экологически чистой продукции, значительному повешению экспортного потенциала аграрного сектора»<sup>1</sup>. В этой сфере, на основе местного сырья создание экологически чистых полифункциональных дешевых препаратов нового типа, повышающих урожайность сельскохозяйственных культур, ускоряющих их рост и снижающих потери воды, приобретает важное значение.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, предусмотренных в указе и постановлении Президента Республики Узбекистан УП-4947 от 7 февраля 2017 года «О стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан», ПП-3983 от 25 октября «О мерах по ускоренному развитию химической промышленности Республики Узбекистан», УП-3479 от 17 января 2018 года «О мерах по

---

<sup>1</sup> Указ Президента Республики Узбекистан УП-4947 от 7 февраля 2017 года «О Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан»

стабильному обеспечению отраслей экономики страны востребованными видами продукции и сырья», ПП-4265 от 3 апреля 2019 года «О мерах по дальнейшему реформированию и повышению инвестиционной привлекательности химической промышленности», а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

**Соответствие исследованию с приоритетными направлениями развития науки и технологий Республики.** Данное исследование выполнено в соответствии с приоритетными направлениями науки и технологии VII. Химическая технология и нанотехнология.

**Степень изученности проблемы.** Исследования по синтезу, установлению состава, строения, термическому анализу, электронному строению, реакционной способности и биологическим свойствам карбоксилатов ряда металлов с органическими лигандами в мировом масштабе и в нашей республике проводилась следующими исследователями: Порай-Кошиц М.А., Сулаймонкулов К.С., Цивадзе Г.В., Цинцадзе Г.В., Харитонов Ю.А., Азизов М.А., Скопенко В.В., Hamilton W.S., Stone M.E., Парпиев Н.А., Шарипов Х.Т., Шабилолов О.А., Хакимов Х.Х., Ходжаев О.Ф., Спицин К.А., Войтюк А.А., Возняковская Ю.М., Кукушкина Ю.Н., Гарновский А.Д., Uno T., Steward I.E., Горенбейн Е.Я., Gentile P.S., Naumov D.Y., Быков И.Е., Nardelli M., Тураев Х.Т., Алавия М.К., Юнусходжаев А.Н., Набиев М.Н., Ибрагимов Б.Т., Дусматов А.Ф., Kozlevcar B., Исаков Х., Насимов А.М., Умаров Б.Б., Кадилова Ш.А., Даминова Ш.Ш., Кадырова З.Ч. и др. К настоящему времени накоплен огромный экспериментальный и теоретический материал по синтезу координационных соединений механохимическим способом. В этом направлении изыскания таких учёных как Hao Wu, Qiang Li, Туманов И.А., Томислав Ф., Иван Х., Mirjana E., Robert E.D., Garay A.L, Anne P. и Stuart L. требуют особенного внимания.

Анализ научных источников показал, что несмотря на обширный экспериментальный материал по изучению комплексов карбоксилатов металлов с амидами, отсутствуют сведения об определении связи «состава-строения-свойства» координационных соединений смешаннолигандного кальций ацетата и закономерностей их получения, применение их на практике, изучению их биологической активности.

**Связь тема диссертации с научно-исследовательскими работами выполняемыми в организации, где выполняется диссертация.** Диссертационное исследование выполнено в рамках плана научно-исследовательских работ Института общей и неорганической химии по теме ФА-Ф7-Т168: «Установление научных основ синтеза и особенности строений, кристаллических и электронных структур, реакционных способностей, химических и биологических свойств новых координационных соединений ряда металлов полифункционального действия» (2012-2016 гг.) и ФА-Ф7-012: «Научные основы синтеза, особенности строений, реакционных способностей и биологических свойств новых смешаннолигандных координационных соединений ряда металлов полифункционального действия» (2017-2020 гг.).

**Целью исследования** является, синтез новых координационных соединений ацетата кальция с некоторыми амидными, никотиновой и бензойной кислотами, определение их состава, строения и свойств.

**Задачи исследования:**

синтез однородных и смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция с некоторыми амидами, никотиновой и бензойной кислотами;

анализ состава, индивидуальности, строения и свойств полученных координационных соединений физико-химическими методами;

определение термических свойств координационных соединений ;

оценка и анализ геометрии электронного строения, энергетических параметров и реакционных способностей однородных и смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция на основе метода квантовохимической оптимизации;

установление биологической активности, токсичности и сферы применения синтезированных координационных соединений.

**Объектами исследования** являются ацетат кальция, формамид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид, никотинамид, бензамид, никотиновая и бензойная кислоты.

**Предметом исследований** является изучение состава, строения, индивидуальности, физико-химических свойств, а также биологической активности однородных и смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция.

**Методы исследования.** В диссертационной работе использованы методы элементного анализа, дифференциально-термического анализа, рентгенофазного анализа, ИК-спектроскопия и метод квантовохимического вычисления.

**Научная новизна исследования:**

впервые синтезированы 54 новых смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция с некоторыми амидами, никотиновой и бензойной кислотами;

определены индивидуальность синтезированных соединений, способы координации лигандов и аниона ацетата по отношению к центральному иону с помощью методов рентгенофазного анализа и ИК-спектроскопии;

определены термические свойства синтезированных соединений и идентифицированы промежуточные продукты термолиза;

определены энергетические параметры, распределение зарядов на атомах, геометрия и реакционная способность синтезированных соединений на основе квантовохимического метода;

создан новый эффективный стимулятор ускоряющий рост и повышающий урожайность хлопчатника.

**Практические результаты исследования** заключаются в следующем:

определены условия синтеза координационных соединений однородного и смешаннолигандного ацетата кальция;

установлена образования комплексов иона металлов с органическими лигандами особенности их строения с методом компьютерного моделирования процессов;

созданы малотоксичные эффективные, повышающие урожай стимуляторы роста сельскохозяйственных растений  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ .

**Достоверность полученных результатов.** Обосновывается использованием современных исследовательских методов, таких как, ИК-спектроскопия, рентгенофазный, элементный, дифференциально-термического анализа, биологический анализ, метод квантовохимического вычисления.

**Научная и практическая значимость результатов исследования.** Научная значимость результатов исследования заключается в определении состава, строения, конкуренция между лигандами для размещения в координационной сфере, определение длины связей, распределение зарядов на атомах и установлением природы влияния иона кальция.

Практическая значимость результатов исследования заключается предоставлением координационных соединений полифункционального действия для хлопчатника, обладающего качеством снижения потери воды, ускорения скороспелости, низкой токсичностью и эффективными рост стимулирующими свойствами.

**Внедрение результатов исследования.** На основе полученных научных результатов по синтезу, строению координационных соединений однородного и смешаннолигандного ацетата кальция:

биологическая активность полученного стимулятора CaАКТК исследована на полях Самаркандского научно-исследовательского института селекции, семеноводства и агротехнологии хлопчатника (Справка Министерства сельского хозяйства №02-023-7 от 9 января 2019 года). В результате исследований достигнуто сокращение сроков всхожести семян на 5-7 дней, срок раскрываемости на 7-10 дней и дало возможность повышения урожайности на 10-15%;

биологическая активность нового синтезированного стимулятора CaАКТК исследована на полях Самаркандского научно-исследовательского института селекции, семеноводства и агротехнологии хлопчатника (Справка Министерства сельского хозяйства №02-023-7 от 9 января 2019 года). В результате обработки стимулятором CaАКТК дало возможность снижение процесса транспирации воды на 15-20%;

синтезированные комплексные соединения были использованы при определении активных биологических свойств комплексных соединений, изучении энергетики, строения и локализации ион-молекулярных кластеров на поверхности решётки цеолитов типа наноструктурного фожазита, в рамках научного проекта ФА-Ф7-010 «Энергетика, строение и локализация внерешеточных ион-молекулярных кластеров в наноструктурированных

цеолитах типа фожазит» (справка Академии Наук Республики Узбекистан №4/1255-3139 от 30 ноября 2018 года). В результате, дало возможность вычисления длины связей и локализации атомных зарядов тиокарбамидных комплексных соединений.

**Апробация результатов исследования.** Результаты данного исследования, в общем, были обсуждены на 12 конференциях, из них 9 республиканские и 3 международные научно-практические конференции.

**Опубликованность результатов исследования.** По теме диссертации опубликованы 19 научных работ, из них 7 научных статей в научных журналах, в том числе, 5 в Республиканских и 2 в зарубежных журналах, рекомендованных Высшей Аттестационной Комиссией Республики Узбекистан для публикации основных научных результатов докторских диссертаций.

**Структура и объем диссертации.** Структура диссертации состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы и приложений. Объем диссертации составляет из 118 страниц.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обосновываются актуальность и востребованность проведенного исследования, цель и задачи исследования характеризуется объект и предмет, показано соответствие исследования приоритетным направлением развития науки и технологии Республики, излагаются научная новизна и практические результаты исследования, раскрываются научная и практическая значимость полученных результатов. Внедрение в практику результатов исследования путем практической реализации результатов завершенных исследований, сведения по опубликованным работам и структуре диссертации.

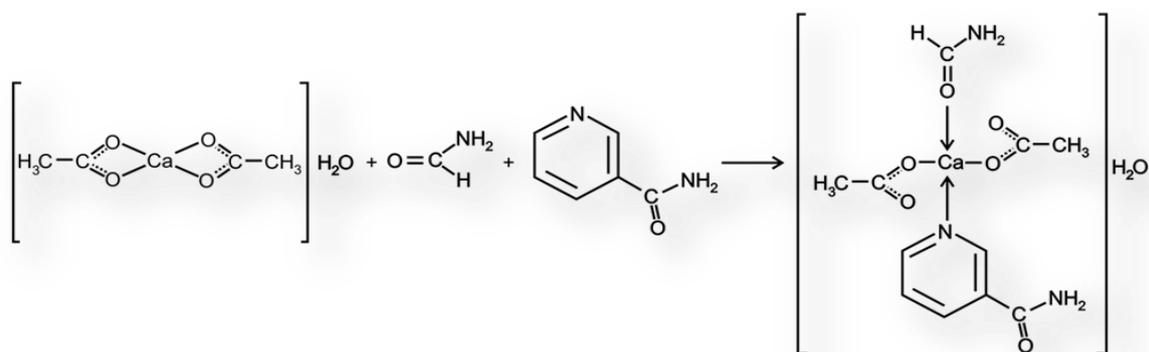
В первой главе диссертации анализирован литературный обзор по получению, изучению строения и физико-химических свойств солей жирных кислот с органическими веществами, координационных соединений солей металлов с формамидом –  $\text{HCONH}_2$ , ацетамидом -  $\text{CH}_3\text{CONH}_2$ , карбамидом –  $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ , тиокарбамидом –  $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ , нитрокарбамидом –  $\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ , никотинамидом –  $\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ , никотиновой -  $(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH})$  и бензойной ( $\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ) кислотами и стимуляторов роста растений на основе карбоксилатов металлов.

Во второй главе диссертации описан выбор реактивов, приборов, методика анализов, получения исходного ацетата кальция. Осуществление синтеза однородных и смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция с формамидом, ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидом, никотинамидом, бензамидом, никотиновой и бензойной кислотами. В литературе отсутствуют данные о смешаннолигандных координационных соединениях ацетата кальция с амидами, бензойной и никотиновой кислотами.

Для проведения синтеза комплексных соединений нами выбран наиболее эффективный механохимический способ, так как он не требует дефицитных органических растворителей.

Механохимический процесс взаимодействия исходных компонентов осуществляется путем интенсивного растирания в шариковой мельнице при комнатной температуре, взятых в мольных соотношениях ацетата кальция, а также амидов 1:2, 1:4 и 1:1:1, соответственно.

При синтезе комплексного соединения состава  $\text{CaA} \cdot \text{ФА} \cdot \text{АНК} \cdot \text{H}_2\text{O}$  1,7619 г (0,01 моль)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  перетирала с 0,4505 г (0,01 моль) формамида и 1,2211 г (0,01 моль) никотинамида в шаровой мельнице при комнатной температуре в течение 0,3 часов. В рисунке 1 приведены уравнения превращения координационного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ .



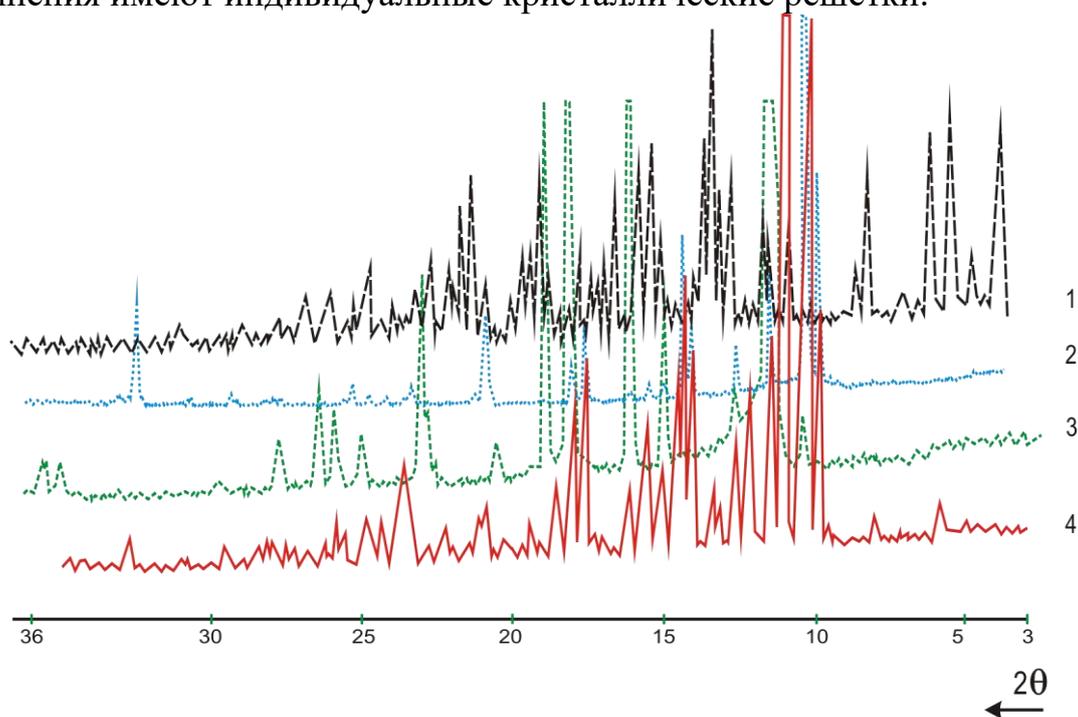
**Рис.1. Уравнение реакции получения комплексного соединения состава  $\text{CaA} \cdot \text{ФА} \cdot \text{АНК} \cdot \text{H}_2\text{O}$**

Аналогично получены все следующие соединения:

- 1)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 2)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 3)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CONH}_2$ ,
- 4)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 5)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 6)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 7)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,
- 8)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,
- 9)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ ,
- 10)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 11)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 12)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,
- 13)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,
- 14)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,
- 15)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH}$ ,
- 16)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH}$ ,
- 17)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 18)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 19)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,
- 20)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 21)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,
- 22)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,
- 23)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 24)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 25)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 26)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 29)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ ,
- 30)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 31)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,
- 32)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 33)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 34)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 35)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$ ,
- 36)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 37)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 38)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 39)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 40)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 41)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,
- 42)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 43)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,
- 44)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 45)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 46)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 47)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 48)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 49)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$ ,
- 50)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,
- 51)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 52)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,
- 53)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$ ,
- 54)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{COOH}$

- 27)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  
 28)  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,

Сравнение межплоскостных расстояний и относительных интенсивностей формамида, ацетамида, карбамида, тиокарбамида, нитрокарбамида, никотинамида, бензамида, бензойной и никотиновой кислоты и новых комплексных соединений ацетата кальция показало, что они существенно различаются между собой, от подобных им и исходных соединений (Рис.2). Следовательно, синтезированные координационные соединения имеют индивидуальные кристаллические решетки.



**Рис. 2. Рентгенограммы: 1-CS(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>; 2-CO(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>; 3-Ca(CH<sub>3</sub>COO)<sub>2</sub>·H<sub>2</sub>O и 4-CaA·K·TK·0,5H<sub>2</sub>O**

В ИК-спектре поглощения свободной молекулы формамида две частоты при 1709 и 1316 см<sup>-1</sup> соответствуют преимущественно валентному колебанию связей С=О и С=N. С переходом в координированное состояние т.е. в комплексах  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  значения частоты С=О понижается на 17 и 15 см<sup>-1</sup>. в то время как значение частоты С=N повышается на 32 и 73 см<sup>-1</sup>. Такое изменение частот свидетельствует о координации молекул формамида с ионом кальция через атом кислорода карбонильной группы. Аналогичным сравнением значений частот связей С=О и С=N установлены координации молекул формамида в смешанноамидных комплексах составов  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (табл.1).

**Таблица-1. Значения характеристических частот (см<sup>-1</sup>) в ИК-спектрах поглощения свободных и координированных молекул**

**формамида, ацетамида, карбамида, тиокарбамида, нитрокарбамида и  
никотинамида с ацетатом кальция**

Соединение	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}=\text{N})$	$\nu(\text{CS}), \delta(\text{CS})$	$\nu_{\text{к}}, \delta(\text{C}=\text{O})$	$\nu_{\text{ас}}(\text{COO}),$ $\nu_{\text{с}}(\text{COO})$
HCONH <sub>2</sub> - (ФА)	1667	1343			
CH <sub>3</sub> CONH <sub>2</sub> - (АА)	1674	1395			
CO(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - (К)	1678	1457			
CS(NH <sub>2</sub> ) <sub>2</sub> - (ТК)			729, 629		
O <sub>2</sub> NHNCONH <sub>2</sub> - (НТК)	1701	1466			
NC <sub>5</sub> H <sub>4</sub> CONH <sub>2</sub> - (АНК)	1681			1592, 1028, 700	
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> CONH <sub>2</sub> - (БА)	1652			1577, 1024, 703	
C <sub>6</sub> H <sub>5</sub> COOH - (БК)	1683			1583, 1026, 705	
NC <sub>5</sub> H <sub>4</sub> COOH - (НК)	1694			1595, 1030, 745	
CaA•2ФА•H <sub>2</sub> O	1692	1348			
CaA•4ФА•2,5H <sub>2</sub> O	1694	1389			
CaA•2АА	1656	1405			
CaA•4АА•0,5H <sub>2</sub> O	1673, 1653	1395, 1421			
CaA•2К•0,5H <sub>2</sub> O	1659	1470			
CaA•4К•0,5H <sub>2</sub> O	1678, 1634	1475, 1461			
CaA•2ТК			725, 621		
CaA•4ТК			729, 616		
CaA•2НТК	1677	1470			
CaA•4НТК•H <sub>2</sub> O	1674	1471			
CaA•АНК•0,5H <sub>2</sub> O	1682			1612, 1058, 1029, 703, 779	
CaA•4АНК	1682			1611, 1059, 1029, 703, 778	
CaA•2БА	1672, 1633			1574, 1026, 697	
CaA•4БА	1657			1577, 1025, 704	
CaA•2НК	1703			1606, 1030, 746	
CaA•4НК	1705			1606, 1031, 747	
CaA•2БК	1683	1393			
CaA•4БК	1683	1392			
CaA•ФА•АА•2H <sub>2</sub> O	1698, 1670	1397, 1348			
CaA•ФА•К•0,5H <sub>2</sub> O	1678, 1668	1473, 1348			
CaA•ФА•ТК•2/3H <sub>2</sub> O	1693	1347			
CaA•ФА•НТК•2H <sub>2</sub> O	1685, 1681	1471, 1348			
CaA•ФА•АНК•H <sub>2</sub> O	1691, 1680	1341		1631, 1022, 1053, 709, 766	
CaA •ФА•БА•H <sub>2</sub> O	1656, 1623	1352		1577, 1025, 704	
CaA •ФА•НК•H <sub>2</sub> O	1692, 1605	1453		1562, 1031, 756	

Соединение	$\nu(\text{C=O})$	$\nu(\text{C=N})$	$\nu(\text{CS}), \delta(\text{CS})$	$\nu_k, \delta(\text{C=O})$	$\nu_{\text{as}}(\text{COO}), \nu_{\text{s}}(\text{COO})$
CaA•ФА•БК	1683	1393			
CaA•AA•K•H <sub>2</sub> O	1677, 1631	1469, 1420			
CaA•AA•TK•0,5H <sub>2</sub> O	1666	1415	675, 618	670, 621	
CaA•AA•HTK	1660, 1677	1423, 1480			
CaA•AA•ANK•0,5H <sub>2</sub> O	1663, 1672	1421		1611, 1058, 1030, 703, 778	
CaA•AA•БА	1660, 1610	1409		1563, 1029, 784	
CaA•AA•НК	1665, 1629	1403		1606, 1043, 767	
CaA•AA•БК	1665, 1628	1392			
CaA•K•TK•0,5H <sub>2</sub> O	1677	1469	674, 612		1562, 1402
CaA•K•HTK	1677, 1701	1459, 1481			1576, 1401
CaA•K•ANK•0,5H <sub>2</sub> O	1677	1470		1632, 1594, 1027, 1050, 698, 707	1582, 1403
CaA•K•БА•H <sub>2</sub> O	1676, 1629	1461		1537, 1029, 781	1563, 1409
CaA•K•НК•H <sub>2</sub> O	1674, 1628	1460		1583, 1043, 746	1582, 1415
CaA•K•БК	1663, 1631	1395			1531, 1414
CaA•TK•HTK•0,5H <sub>2</sub> O	1702	1472	696, 627		
CaA•TK•ANK	1700		696, 627	1634, 1610, 1031, 1050, 721, 696	
CaA•TK•БА•H <sub>2</sub> O	1657		730, 643	1531, 1029, 704	
CaA•TK•НК•2H <sub>2</sub> O	1697		730, 642	1605, 1031, 746	
CaA•TK•БК	1663, 1631	1395	731, 643		
CaA•HTK•ANK•0,5H <sub>2</sub> O	1678, 1695	1473		1631, 1028, 1055, 698, 784	
CaA•HTK•БА•0,5H <sub>2</sub> O	1711, 1677	1448		1552, 1015, 703	
CaA•HTK•НК•H <sub>2</sub> O	1708, 1675	1457		1606, 1031, 746	
CaA•HTK•БК	1663, 1631	1395			
CaA•ANK•БА	1708, 1675			1606, 1581, 1031, 692	
CaA•ANK•НК•0,5H <sub>2</sub> O	1697			1606, 1029, 693, 674	
CaA•ANK•БК	1663, 1631	1395			
CaA•БА•НК•H <sub>2</sub> O	1704, 1653			1607, 1537, 1057, 1030, 746, 692	
CaA•БА•БК	1628, 1630	1391			

Соединение	$\nu(\text{C=O})$	$\nu(\text{C=N})$	$\nu(\text{CS}), \delta(\text{CS})$	$\nu_k, \delta(\text{C=O})$	$\nu_{as}(\text{COO}), \nu_s(\text{COO})$
CaA•НК•БК	1663, 1629	1393			

ИК-спектр поглощения свободной молекулы ацетамида характеризуется несколькими частотами. Из них при 1670 и 1395  $\text{см}^{-1}$  наблюдается полосы соответствующие валентным колебаниям связей  $\text{C=O}$  и  $\text{C=N}$ . Первая полоса понижается когда координация молекулы ацетамида осуществляется через атом кислорода карбонильной группы. В этом случае значение частоты связи  $\text{C=N}$  повышается. Такие изменения обнаружены в комплексах составов  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ .

В ИК - спектре поглощения свободной молекулы карбамида вместе с другими частотами наблюдаются две полосы, которыми подтверждается наличие координационной связи между центральным ионом и атомами кислорода молекулы карбамида. Приведенные значения частот валентных колебаний связей  $\text{C=O}$  и  $\text{C=N}$  в однородных и смешанноамидных координационных соединениях  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  (табл.1).

В ИК-спектре поглощения свободной молекулы тиокарбамида наблюдаются три характеристические частоты при 1413- $\nu(\text{CS})$ , 730-  $\nu(\text{CS})$  и 631  $\text{см}^{-1}$  -  $\delta(\text{CS})$ . В комплексных соединениях тиокарбамида не удается наблюдать изменение значения частоты 1413  $\text{см}^{-1}$ -  $\nu(\text{CS})$ , так как она перекрывается широкой полосой  $\nu(\text{COO})$  ацетатной группы. Однако в низкочастотной области спектра частоты молекулы тиокарбамида при 730 и 631  $\text{см}^{-1}$  понижаются соответственно на 1-56 и 4-19  $\text{см}^{-1}$  в случаях однородных и смешанноамидных комплексов  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2/3\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ . Такое изменение частот в спектре можно объяснить координацией молекулы тиокарбамида с ионом кальция через атом серы.

ИК-спектр поглощения свободной молекулы нитрокарбамида вместе с другими частотами имеет две характеристические частоты при 1704- $\nu(\text{CO})$  и 1460- $\nu(\text{CN})$ . Указанные частоты претерпевают изменение, когда молекула нитрокарбамида координируется через атом кислорода карбонильной группы претерпевают изменению. Частота валентного колебания связи  $\text{C=O}$  понижается а вторая частота повышается. Подобные изменения обнаружены в

однородных и смешанноамидных комплексах составов  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ .

В ИК-спектре поглощения молекулы никотинамида имеется достаточное количество частот и частота  $\nu(\text{кольца})$  наблюдается при  $1593 \text{ см}^{-1}$ , которая в случае комплекса значительно повышается. Полосы поглощения при  $1029$ -  $\nu_{\text{к}}$  и  $703 \text{ см}^{-1}$  ( $\text{CCN}$ ), принадлежащие к колебаниям кольца. Аналогичные изменения частот наблюдаются в однородных и смешанноамидных комплексных соединениях составов –  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ ,  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 0,5\text{H}_2\text{O}$ . Эти изменения могут быть свидетельством координации никотинамида с ионом кальция через гетероатом азота пиридинового кольца (табл.1).

Характер координации ацетатных групп меняется в зависимости от состава, взаимного расположения ацидо- и апикальных лигандов и наличия внутримолекулярных водородных связей.

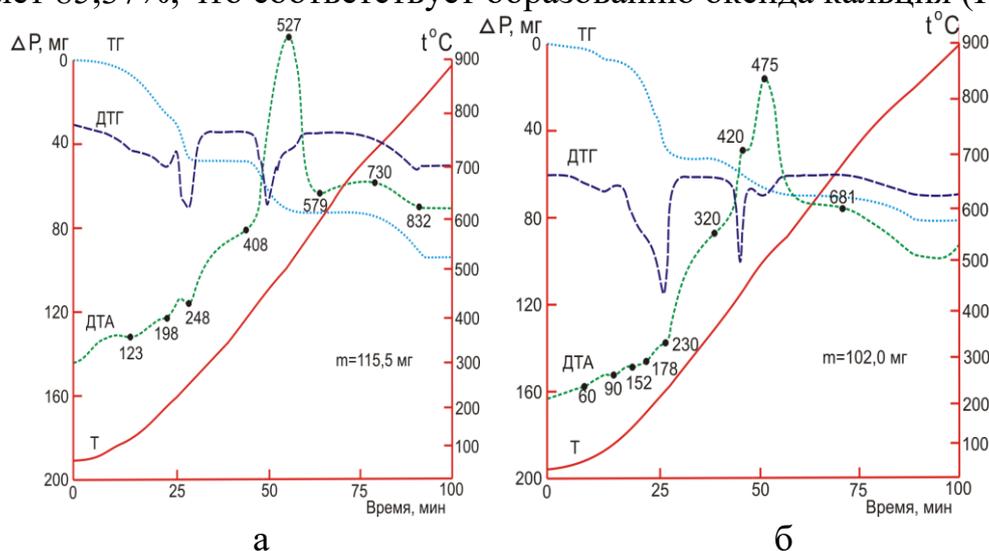
Исследована термическая устойчивость всех синтезированных соединений. Определены значения термических эффектов, температурных диапазонов всех стадий термоллиза, убиты массы, общий убыли массы, природы эффектов и составов образовавшихся продуктов.

Молекулы воды удерживаются за счет водородных связей. Термическое исследование синтезированных комплексных соединений показало, что на кривых ДТА дериватограмм обнаружены эндотермические эффекты, соответствующие удалению и разложению связанных и координированных молекул воды, формамида, ацетамида, карбамида, тиокарбамида, нитрокарбамида, никотинамида, бензамида, ниотиновой и бензойной кислот, а также экзотермические эффекты, обусловленные разрушением ацетатных фрагментов, горением продуктов термораспада и образованием оксида или сульфида кальция.

На кривой нагревания соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  обнаружены семь эндотермических эффектов при  $123, 198, 248, 408, 527, 579, 850$  и два экзотермических эффекта при  $527$  и  $730 \text{ }^\circ\text{C}$ . Появление первого эндоэффекта обусловлено удалением одной молекулы воды. Характер последующих термоэффектов сопровождается ступенчатым разложением безводного соединения. В температурных диапазонах  $70$ - $130, 130$ - $211, 211$ - $307, 307$ - $432, 432$ - $553, 553$ - $633, 633$ - $782, 782$ - $870 \text{ }^\circ\text{C}$  потери массы соответственно составляют  $6,90; 12,39; 17,45; 1,73; 19,18; 0,26; 2,92; 13,63\%$ .

Общая убыль массы в интервале температур 70-870 °С по кривой ТГ составляет 74,46%, что соответствует образованию оксида кальция (Рис. 3.а).

Кривая нагревания комплексного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  характеризуется шестью эндотермическими эффектами при 60, 90, 152, 178, 230, 810 и четырьмя экзотермическими эффектами при 320, 420, 475, 681 °С. Появление первого из трех эндоэффектов обусловлено удалением по одной молекуле воды. Характер последующих термоэффектов сопровождается ступенчатым разложением безводного соединения. В температурных диапазонах 50-84, 84-124, 124-162, 162-208, 208-252, 252-376, 376-450, 450-569, 569-740, 740-840 °С потери массы соответственно составляют 2,35; 4,60; 4,70; 25,00; 8,82; 7,84; 15,69; 5,39; 7,84; 3,19%. Общая убыль массы в интервале температур 50-840 °С по кривой ТГ составляет 85,37%, что соответствует образованию оксида кальция (Рис.3.б).



**Рис.3. а) дериватограмма координационного соединения состава  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{HCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ; б) дериватограмма координационного соединения состава  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$ .**

Таким образом, термическое поведение исследованных комплексных соединений зависит от состава, способов координации апикальных лигандовисукцинатного фрагмента, окружения центрального атома и геометрических конфигураций координационных узлов.

Нами проведен расчет электронной структуры восьмьсмешанноамидных координационных соединений ацетата кальция с помощью полуэмпирического метода РМЗ в рамках модели самосогласованного поля по методу молекулярных орбиталей (МО ЛКАО), позволяющий производить учет водородных связей при расчете.

Сравнение энергетических характеристик восьми комплексных соединений показывает, что значения общей энергии близки. В то время как, значения энергий связей, электронной энергии, межъядерной энергии, теплоты образования, энергии верхних занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей значительно отличаются. Значения длин связей, зарядов на атомах также отличаются. Повышение значения разности

Д=ВЗМО-НВМО свидетельствует о том, что комплексные соединения кальция являются более реакционноспособными к нуклеофильным агентам и это более повышает стимулирующую активность роста растения, чем соединения кальция другого состава.

Как известно, полифункциональные лиганды, содержащие несколько донорных атомов при координации с центральным атомом проявляют конкурентность по отношению друг к другу, изучение данной проблемы и установление конкурирующей способности лигандов является актуальной задачей координационной химии. Изучение данной проблемы традиционными методами требует большой затраты времени. Поэтому в настоящее время все больше внимания при решении таких задач обращается на использование вычислительных программ. Следует отметить, что органические молекулы и лиганды при координации с центральным атомом меняют свои свойства, и в то же время влияние электронных пар лигандов приводит к появлению в координационных соединениях, присущих им свойств.

Объектами наших квантовохимических исследований стали восемь смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция. Расчеты проведены полуэмпирическим методом PM3 в пакете программ HyperChem.8-07.

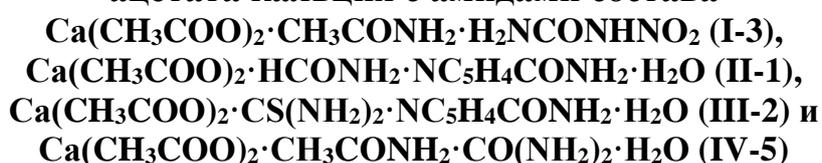
Методами элементного, дериватографического и рентгенофазового анализов и ИК-спектров поглощения установлены состав, индивидуальность и способы координации молекул амидов и ацетатных фрагментов следующих соединений  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NH}_2\text{CONHNO}_2$  (I),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (III),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (IV),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (V),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (VI),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (VII) и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{C}_6\text{H}_5\text{CONH}_2$  (VIII).

С целью определения геометрии координационных узлов, нами проведен квантовохимический расчет нескольких возможных структур координационного узла.

Для комплексного соединения состава  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NH}_2\text{CONHNO}_2$  (I) предложены четыре тетраэдрических строений и четыре октаэдрических окружений с различными способами координации ацетатных групп и наличием внутримолекулярных водородных связей. Из восьми строений оказалась энергетически выгодной по значению теплоты образования структура, где центральный атом кальция окружен тетраэдрическим узлом за счет монодентатной координации ацетатных фрагментов и донорно-акцепторной координации молекул ацетамида и нитрокарбамида через атом кислорода карбонильной группы. Внутримолекулярные водородные связи осуществляются за счет атомов кислорода одной ацетатной группы и водорода аминной группы ацетамида. Другая внутримолекулярная связь проявляется за счет атомов кислорода и водорода молекулы нитрокарбамида (I-3).

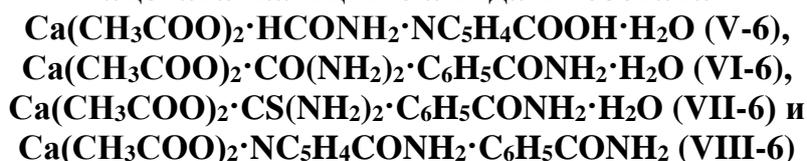
Для комплексного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II) предложены также четыре тетраэдрических окружений и четыре октаэдрических строения. По значению теплоты образования наиболее энергитически выгодным оказалось строение, где ион кальция окружен атомами кислорода молекул формамида и никотинамида и двумя атомами кислорода от двух ацетатных групп и проявляет тетраэдрическое окружение. Молекула воды удерживается за счет наличия двух связей между атомами кислорода и водорода воды с участием атомов кислорода и водорода молекулы формамида и ацетатной группы, внутримолекулярная водородная связь осуществляется между атомами кислорода и водорода с участием ацетатной группы и молекулы никотинамида (II-1).

**Таблица-2. Расчет энергетических параметров комплексных соединений ацетата кальция с амидами состава**



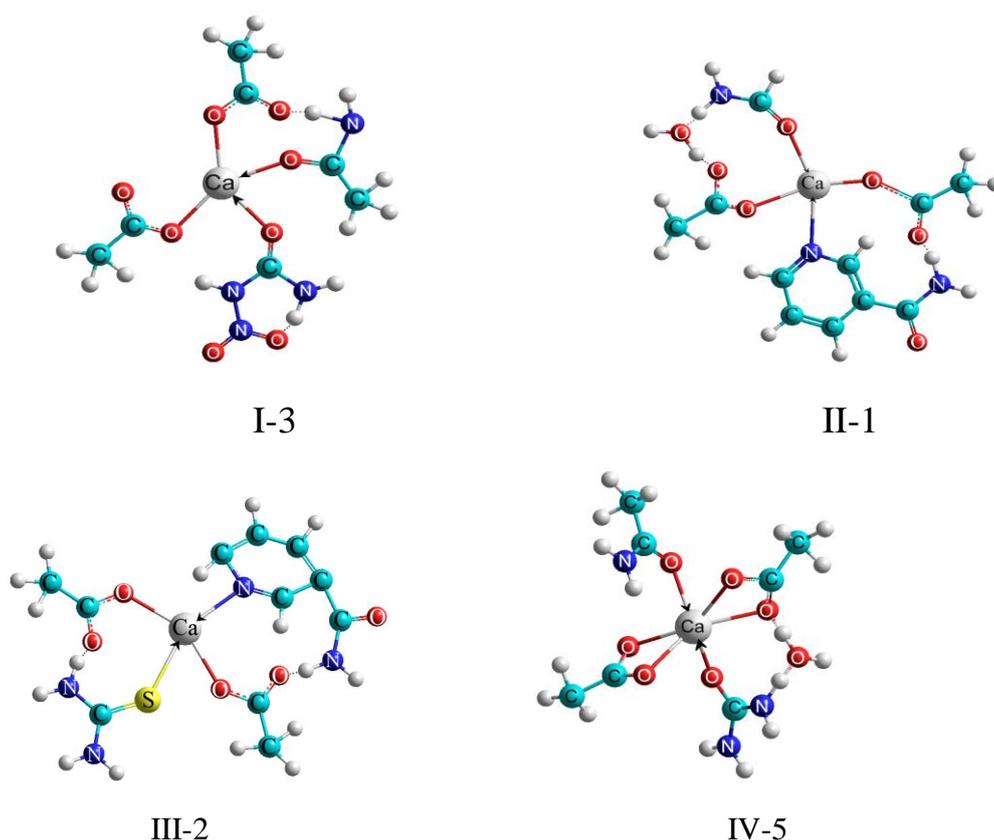
Соединения	I-3	II-1	III-2	IV-5
Общая энергия, ккал/моль	-94235,157	-95820,056	-89916,861	-84897,536
Общая энергия (а.е.)	-150,173	-152,699	-143,292	-135,293
Связывающая энергия, ккал/моль	-3749,235	-4476,657	-4354,601	-3814,438
Энергия изолированных атомов, ккал/моль	-90485,922	-91343,399	-85562,260	-81083,099
Электронная энергия, ккал/моль	-646020,116	-723869,623	-688114,498	-579991,486
Энергия межъядерного взаимодействия, ккал/моль	551784,959	628049,567	598197,636	495093,950
Теплота образования, ккал/моль	-852,505	-912,620	-782,384	-933,961
Градиент	0,009	0,009	0,007	0,008
ВЗМО	-10,151	-9,655	-8,918	-9,936
НВМО	-0,855	-1,198	-1,560	-0,486
ВЗМО-НВМО	-9,296	-8,457	-7,358	-9,450

**Таблица-3. Расчет энергетических параметров комплексных соединений ацетата кальция с амидами состава**



Соединения	V-6	VI-6	VII-6	VIII-6
Общая энергия, ккал/моль	-90977.371	-91781.213	-89277.649	-106140.420

Соединения	V-6	VI-6	VII-6	VIII-6
Общая энергия (а.е.)	-144.981	-146.262	-142.272	-169.145
Связывающая энергия, ккал/моль	-4173.139	-4545.255	-4483.574	-5476.134
Энергия изолированных атомов, ккал/моль	-86804.232	-87235.957	-84794.074	-100664.285
Электронная энергия, ккал/моль	-637050.013	-693690.324	-681572.093	-914903.153
Энергия межъядерного взаимодействия, ккал/моль	546072.641	601909.110	592294.443	808762.732
Теплота образования, ккал/моль	-878.408	-869.887	-801.365	-842.112
Градиент	0.0054863	0.0099021	0.0083918	0.0069232
ВЗМО	-10.218055	-10.084900	-8.743964	-9.956254
НВМО	-2.153327	-1.111696	-1.653750	-1.367209
ВЗМО-НВМО	-8,064728	-8,9732	-7,090214	-8,58905



**Рис. 4. Пространственные модели молекул составов  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{NCONHNO}_2$  (I-3),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (II-1),  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (III-2) и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (IV-5).**

Для комплексного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (III) предложены четыре тетраэдрических и четыре октаэдрических окружений. По значению теплоты образования наиболее энергитически выгодным оказалось строение, где центральной атом кальция окружен тетраэдрическим узлом, т.е. атомами серы тиокарбамида, азота пиридинового кольца, молекулы никотинамида и двумя атомами монодентатных, ацетатных фрагментов. Существуют две внутримолекулярных связи с участием атомов кислорода, двух ацетатных групп и молекул тиокарбамида и никотинамида (III-2).

Для комплексного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$  (IV) предложены четыре тетраэдрических и четыре октаэдрических окружений. По значению теплоты образования наиболее энергитически выгодным оказалось строение, где центральный атом кальция окружен октаэдрическим узлом за счет координации монодентатной координации молекул ацетамида, карбамида и четырех атомов кислорода в транс положении двух ацетатных групп с бидентатно-циклической координацией. Молекула воды удерживается за счет образования водородных связей с участием атомов кислорода и водорода воды, амидной группы карбамида и одним ацетатным фрагментом (IV -5).

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Осуществлён синтез 54 новых координационных соединений ацетата кальция с формамидом, ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидом, бензамидом, никотинамидом, бензойной и никотиновой кислотой.

2. Установлено, что в соединениях формамида, ацетамида, карбамида, нитрокарбамида, бензамида и бензойной кислотой координация лигандов осуществляется через атом кислорода карбонильной группы, в комплексах тиокарбамида координация осуществляется через атом серы, молекула никотинамида и никотиновой кислоты координируется через гетероатом азота пиридинового кольца, а также анион уксусной кислоты по отношению к катиону кальция координируется моно- и бидентатным способом.

3. При исследовании термических свойств всех синтезированных соединений, показана термическая устойчивость всех координационных соединений, которая зависит от природы лигандов, окружения центрального атома и состава комплексов.

4. Квантовохимическим методом проанализировано электронное строение, структура и реакционная способность 8 смешаннолигандных комплексов ацетата кальция.

5. Результаты вегетационных исследований стимуляторов роста полифункционального действия показали, что сочетание предпосевной обработки семян и с опрыскиванием в фазах массовой бутонизации и цветения оказывает ярко выраженный положительный эффект.

6. По всему ряду биометрических и фенологических показателей комплексных соединений  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ ,

$\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$  превышают фоновые значения, и наблюдается значительное увеличение скорости роста растений и плодоносных веток.

7. По первичным результатам исследования токсикологических свойств комплексного соединения  $\text{Ca}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$  установлено, что ориентировочная среднесмертельная доза вещества составляет - 6667 мг/кг и относится к пятому классу токсичности, которое определено как «Нетоксичен».

**SCIENTIFIC COUNCIL ON AWARD OF SCIENTIFIC DEGREES  
DSc27.06.2017.K.01.03 AT  
THE NATIONAL UNIVERSITY OF UZBEKISTAN**

---

**INSTITUTE OF GENERAL AND INORGANIC CHEMISTRY**

**TURAKULOV JAKHONGIR ULUGBEKOVICH**

**SYNTHESIS, STRUCTURE AND USING OF COORDINATION COMPOUNDS OF  
CALCIUM ACETATE WITH SOME AMIDES, NICOTINE AND BENZOIC ACIDS**

**02.00.01 - Inorganic chemistry  
(chemical sciences)**

**ABSTRACT OF THE DISSERTATION  
OF DOCTOR OF PHILOSOPHY (PhD)  
ON CHEMICAL SCIENCES**

**Tashkent-2019**

**The title of the dissertation(PhD) has been registered by the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan with registration numbers of B2017.2.PhD/K31**

The dissertation has been carried out at the Institute of General and Inorganic Chemistry

The abstract of dissertation in three languages (Uzbek, Russian, English (resume)) is available online [www.ik-kimyo.nuuz.uz](http://www.ik-kimyo.nuuz.uz) and on the website of "ZiyoNet" information-educational portal [www.ziynet.uz](http://www.ziynet.uz).

**Scientific supervisor:** **Azizov Tokhir**  
Doctor of Chemical Sciences, Professor

**Official opponents:** **Umarov Bako**  
Doctor of Chemical Sciences, Professor

**Kadirova Zukhra**  
Doctor of Chemical Sciences

**Leading organization:** **Tashkent Pharmaceutical Institute**

Defense of the dissertation will be held on " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019 at " \_\_\_\_ " hours at the meeting of the Scientific Council DSc27.06.2017.K.01.03 at the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek. (Address: 100174, Tashkent, Universitetskaya St.4, Tel.: (99871) 227-12-24, fax: (99824) 246-53-21, 246-02-24. e-mail: chem0102@mail.ru).

The dissertation has been registered at the Information Resource Center of the National University of Uzbekistan under No.\_\_\_\_, from which it can be found in the IRC. (100174, Tashkent, Administrative Building of the National University of Uzbekistan, Phone: (99871) 246-67-71).

The abstract of the dissertation has been distributed on " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019.  
Protocol at the register No. \_\_\_\_ dated " \_\_\_\_ " \_\_\_\_\_ 2019.

**Kh. Sharipov**  
Chairman of the Scientific Council  
for the Award of Scientific Degrees,  
Doctor of Chemical Sciences, Professor

**D. Gafurova**  
Academic Secretary of the Scientific Council  
for the Award of Scientific Degrees,  
Doctor of Chemical Sciences

**N. Parpiev**  
Chairman of the Scientific Seminar at the Scientific  
Council for the Award of Scientific Degrees,  
Doctor of Chemical Sciences, Professor

## INTRODUCTION (abstract of PhD dissertation)

**The aim of the research work** concluded synthesis and establishment of the structure and properties of mixed ligand coordination compounds of calcium acetate with some amides, nicotinic and benzoic acids.

**The object of the research work** are calcium acetate, formamide, acetamide, urea, tiourea, nitrocarbamide, nicotinamide, benzamide, nicotinic and benzoic acids.

### **Scientific novelty of the research work are as follows:**

the synthesis conditions have been developed, the structure and properties of new 54 homogeneous and mixed-amide coordination compounds of calcium acetate have been established. The composition and individuality of the synthesized compounds are established;

methods for the coordination of amides, acidoligands and the structure of isolated compounds have been established by methods of vibrational, electronic, spectroscopy, and in a number of cases of chemical analysis;

the character of the structural function of the acetate group is shown, and the composition, structure and properties of the compounds depend significantly on the nature of the complexing agent, organic ligands, and their coordination methods;

the factors determining the competitive coordination ability of amides, acetate fragments and water molecules are revealed. The thermal behavior of the isolated complexes was studied and the intermediate products of thermolysis were identified;

effective growth stimulators and increased productivity of agricultural crops have been created.

**Implementation of the research results.** Based on the obtained scientific results on the synthesis, structure and study of the use of coordination compounds of homogeneous and mixed ligand calcium acetate:

biological activity of the obtained stimulator CaAKTK was investigated on the fields of the Samarkand research institute of Selection, Seed-growing and Agrotechnology of Cotton (certificate No. 02-023-7 of the Ministry of Agriculture of dated January 9, 2019). As a result, treatment of cotton seeds with the stimulator CaAKTK, their germination period was reduced by 5-7 days, the detection period was 7-10 days and the yield increased by 10-15%;

biological activity of the new synthesized stimulator CaAKTK was investigated on the fields of the Samarkand Research Institute of Selection, Seed-growing and Agrotechnology of Cotton (certificate No. 02-023-7 of the Ministry of Agriculture of dated January 9, 2019). As a result, treatment with the CaAKTK stimulator, a decrease in the process of water transpiration by 15–20% was revealed;

the synthesized complex compounds were used to determine the active biological properties of complex compounds, the study of energy, the structure and localization of ion-molecular clusters on the surface of the ceramites of the nanostructured fiber type, within the framework of the scientific project FA-F7-010 "Energy, structure and localization of extra-lattice ion-molecular clusters in nanostructured fujazite-type zeolites "(certificate No. 4/1255-3139 of the Uzbek Academy of Sciences of dated November 30, 2018). As a result, this made it possible

to calculate the bond length and localize the atomic charges of the thiocarbamide complex compounds.

**Structure and volume of the dissertation.** The structure of dissertation consists of an introduction, four chapters, conclusions, a list of references and supplement. The volume of the dissertation is 118 pages.

## **ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАРИ РЎЙХАТИ СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ LIST OF PUBLISHED WORKS**

### **I-бўлим (I-часть; part 1)**

1. Ж.У. Туракулов, О.Т. Азизов, Т.А. Азизов, Д.М. Хайдаров. Смешаннолигандные координационные соединения ацетата кальция. //Узбекский химический журнал. 2013, №1. С. 3-6 (02.00.00. №6).
2. Ж.У. Туракулов, О.Т. Азизов, Т.А. Азизов, Д.М. Хайдаров. Разнолигандные координационные соединения ацетата кальция. //Узбекский химический журнал. 2013, №2. С. 3-8 (02.00.00. №6).
3. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов, А.Д. Дусматова, Д.М. Хайдаров. Формамидные координационные соединения ацетата кальция. //Журнал химия и химическая технология. №4. 2013г. С.36-39 (02.00.00. №5).
4. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов, З.К. Джуманазарова, Т.А. Ибодуллаева. Термическое исследование смешанноформамидных координационных соединений ацетата кальция. //Узбекский химический журнал. №3. 2014г. С.3-7 (02.00.00. №6).
5. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов, З.К. Джуманазарова, Т.А. Ибодуллаева. Термическое исследование смешанноацетамидных комплексных соединений ацетата кальция. //Журнал химия и химическая технология. №2. 2015г. С.22-26 (02.00.00. №5).
6. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов. Синтез и исследование координационных соединений ацетата кальция с ацетамидом. //Научный журнал. Universum: Химия и биология. №9 (51). Москва, 2018. С.18-24 (02.00.00. №2).
7. Ж.У. Туракулов. Complex compounds of calcium acetate with nitrocarbamide. //Austrian Journal of Technical and Natural Sciences. №7-8. Vienna, 2018. P.67-72 (02.00.00. №1).

### **II-бўлим (II-часть, part-2)**

1. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов. Координационные соединения ацетата кальция с тиокарбамидом. //International scientific journal. The way of Science. №10 (44). Volgograd, 2017, P.8-13.
2. Туракулов Ж.У., Азизов Т.А. Синтез и исследование комплексных соединений ацетата кальция с тиокарбамидом. Материалы Республиканской научно-технической конференции, Навоийский

- горно-металлургический комбинат и Навоийский государственный горный институт. - Навоий, 2012. - С. 414-415.
3. Туракулов Ж.У., Азизов Т.А., Семенова О.И., Погосян А.Г. Координационные соединения ацетата кальция с никотиномидом. «Кимё ва озик-овкат саноатлари ҳамда нефт-газ қайта ишлашнинг инновацион технологияларини долзарб муаммолари» илмий-техникавий анжуманининг мақолалар тўплами. Тошкент, 2012 й. 22 ноябрь. Б. 270-271.
  4. Туракулов Ж.У., Азизов Т.А. Координационные соединения ацетата кальция с ацетамидом и карбамидом. Сборник материалов Республиканской научно-технической конференции, ИОНХ АН РУз, - Ташкент, 2013, 16-17 мая. – С. 186-188.
  5. Азизов Т.А., Азизов О.Т., Туракулов Ж.У. Дериватографическое исследование термолита координационных соединений ацетата кальция с нитрокарбамидом и никотиномидом. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, I-қисм. Термиз- 2014, С.22-23.
  6. Т.А. Азизов, Ж.У. Туракулов, Б.Р. Нарматов, О.Т. Азизов. Анализ строения смешаннолигандных координационных соединений ацетата кальция методом квантовохимической оптимизации. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, II-қисм. Термиз- 2014, С.68-69.
  7. Т.А. Азизов, О.Т. Азизов, Ж.У. Туракулов, М.И. Ибодуллаева. Квантовохимическое исследование электронной структурой и реакционной способности ряда смешанноамидных координационных соединений ацетата кальция. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, II-қисм. Термиз- 2014, С.70-71.
  8. Азизов Т.А., Азизов О.Т., Туракулов Ж.У., Хайдаров Д.М. Термическое исследование координационных соединений ацетата кальция с тиокарбамидом, нитрокарбамидом и никотиномидом. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, II-қисм. Термиз- 2014, С.79-80.
  9. Азизов Т.А., Туракулов Ж.У., Азизов О.Т., Хайдаров Д.М., Нарматов Б.Р. Термолит разноамидных координационных соединений ацетата кальция с карбамидом. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, II-қисм. Термиз- 2014, С.81-82.
  10. Азизов Т.А., Азизов О.Т., Туракулов Ж.У., Хайдаров Д.М., Холмуродова Д. Дериватографическое исследование термолита координационных соединений ацетата кальция с нитрокарбамидом и никотиномидом. IV-Республика илмий-амалий анжумани “Аналитик кимё фанининг долзарб муаммолари” илмий мақолалар тўплами, II-қисм. Термиз- 2014, С.82-83.

11. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов, О.Т. Азизов, З.К. Джуманазарова. Координационные соединения ацетатов, нитратов магния и кальция с амидами. Материалы IX-Международной научно-технической конференции: “Достижения, проблемы и современные тенденции развития горно-металлургического комплекса”. Навои- 2017, С.327.
12. Ж.У. Туракулов, Т.А. Азизов, М.Р. Ибрагимова. Смешаннолигандные координационные соединения ацетатов магния и кальция. Сборник материалов Международной научно-технической конференции «Современное состояние и перспективы развития производства фосфорсодержащих удобрений на основе фосфоритов Центральные Кызылкумов и Каратау». Ташкент-2018. С.147.

Автореферат «Ўзбекистон кимё журнали» таҳририятида  
таҳрирдан ўтказилди.

Бичими 60x84 1/16. Ризограф босма усули. «Times New Roman». гарнитураси.

Шартли босма табағи 3. Адади 100. Буюртма № 24.

Баҳоси келишилган нархда.

«ЎзР Фанлар Академияси Асосий кутубхонаси» босмахонасида чоп этилган.

Босмахона манзили: 100170, Тошкент ш., Зиёлилар кўчаси, 13-уй.