

**ЎЗБЕКИСТОН РЕСПУБЛИКАСИ ОЛИЙ ВА
ЎРТА МАХСУС ТАЪЛИМ ВАЗИРЛИГИ**

**АЛ-ХОРАЗМИЙ НОМИДАГИ
УРГАНЧ ДАВЛАТ УНИВЕРСИТЕТИ**

**Кимё – технология факультети
“Умумий кимё” кафедраси**

Холиллаев Мурод Мухаммадшарипович

Битирув малакавий иш

**Мавзу: Мис(II)-пальмитатнинг карбамид, тиокарбамид ва
нитрокарбамид билан комплекс бирикмалари**

**Илмий рахбар:
Кафедра мудири:**

**к.ф.н. Азизжанов Х.М..
доц. Эшчанов Э.У.**

Урганч .

МУНДАРИЖА

Кириш

I. Адабиётлар шарҳи

- 1.1. Мис ва унинг координацион бирикмалари
- 1.2. Карбамиднинг координацион бирикмалари
- 1.3. Тиокарбамиднинг координацион бирикмалари
- 1.4. Металл карбоксилатларининг амидлар билан координацион бирикмалари

II. Тажриба қисми

- 2.1. Фойдаланилган реактивлар, ускуналар ва таҳлил усуллари
- 2.2. Мис(II)-пальмитат синтези
- 2.3. Мис(II)-пальмитатнинг амидлар билан координацион бирикмалари синтези

III. Олинган бирикмаларнинг физик – кимёвий таҳлили

- 3.1. Олинган моддаларнинг термик таҳлили
- 3.2. Олинган моддаларнинг квант-кимёвий таҳлили

Хулосалар

Фойдаланилган адабиётлар рўйхати

Кириш

Хозирги кунда замонавий кимёнинг долзарб муаммоларидан бири халқ хўжалигида ишлатиладиган биологик фаол моддалар синтез қилишдан иборатдир. 3d-металлар бир қатор ўзига хос хусусиятларга эга бўлганлиги сабабли халқ хўжалигининг турли соҳаларида ўзига хос ўрин тутди. Координацион бирикмаларнинг хоссалари ва қўлланилиш соҳалари уларнинг электрон, стереокимёвий, кинетик ва термодинамик хусусиятларига боғлиқ бўлади.

Алифатик, ароматик, карбон, пиридинкарбон кислоталар амидлари, хусусан, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, никотинамидлар таркибида донор атомлар мавжуд бўлиб, металл ионлари билан координацион боғлар ҳосил қилса, олеин кислота анионлари комплекс ҳосил бўлишини турли йўналишларда олиб борилишига имконият яратади.

Ишнинг мақсади янги синф комплекс бирикмаларни синтез қилиш шароитларини ишлаб чиқиш, мураккаб тузилишли комплекс бирикмаларда марказий иони атрофида икки хил амид гуруҳи, карбоксилат гуруҳи, сув молекулаларининг рақобатли координацияланишини ва уларнинг тузилиши, электрон структураси, реакция қобилиятини ўрганишдан иборат.

Комплекс бирикмалар кимёсининг бундай ўзига хос хусусиятларини Вернер ва бир қатор олимлар ҳам тан олганлар, чунки бу бирикмалар тузилиши жиҳатидан юқори тартибли бирикмалар деб аталади.

Тирик организмларнинг барча ҳаётий жараёнларида иштирок этадиган кимёвий бирикмаларнинг кўпчилиги координацион бирикмалардир. Гемоглобин, хлорофилл, антителолар, карбонилли бирикмалар, буларнинг барчаси комплекс бирикмаларга мисол бўлади.

Ҳозирда қишлоқ хўжалигида ишлатилаётган биостимуляторлар, ҳосилдорликни оширувчи қўшимчалар, дефолиантлар, инсектицидлар, фунгицидлар ва кўпчилик минерал ўғитлар асосан координацион бирикмалардир. Бунинг сабаби шундаки, бу бирикмалар таркибига азот, фосфор, калийдан ташқари ўсимликлар учун оз миқдорда бўлсада, жуда зарур

бўлган микроэлементлар, яъни марганец, мис, никел, кобалт, кадмий, хром, темир кабиларни айнан комплекс бирикмалар ёрдамида ўсимликларга етказиб бериш мумкин. Юқорида келтирилган металларни минерал ўғитлар таркибидаги азот, кислород, олтингугурт каби атомлари билан координацияланишга қодирлигини назарда тутсак, айнан комплекс бирикмалар ушбу долзарб ва муҳим вазифани аъло даражада бажара олиши яққол кўриниб туради.

Микроэлементлар нафақат ўсимликлар, балки одам ва ҳайвонлар организми учун ҳам кераклиги назарда тутадиган бўлсак, бу металларнинг витаминлар ва оксиллар, аминокислоталар билан ҳосил қиладиган комплексларининг одамзод ҳаётидаги роли янада ошади. Ҳақиқатан ҳам ҳозирда аптекаларда сотилаётган “пиковит”, “компливит” ва ҳоказо витамин ва микроэлементлар тутган сироплар таркибига бир назар ташлайдиган бўлсак улар асосан координацион бирикмалардан иборатлигини кўришимиз мумкин бўлади.

Юқорида фикрлардан келиб чиққан ҳолда, бу ва бошқа саволларга жавоб топиш мақсадида биз Кобальт(II)-олеатини танладик, лигандлар сифатида ацетамид (АА), карбамид (К) ва тиокарбамид (ТК) лардан фойдаланишни олдимизга мақсад қилиб қўйдик. Ушбу битирув малакавий иши айнан шу мавзуга бағишланган бўлиб, бу ишда биз замонавий компьютер технологияларидан фойдаландик.

Битирув малакавий ишини ҳажми ва стурктураси. Битирув малакавий иши 70 қўлёзма варақдан, 1 та жадвал ва 2 та расмдан иборат бўлиб, кириш, адабиётлар шарҳи, тажриба қисми, олинган натижалар таҳлили, хулосалар ва 25 номдаги фойдаланилган адабиётлар рўйхатини ўз ичига олади.

I. Адабиётлар шарҳи

1.1. Мис ва унинг координацион бирикмалари

Мис ер қобиғида кенг тарқалган металл ҳисобланади, унинг миқдори 0,003% ни ташкил қилади.

У асосан олтингугуртли бирикмалари ҳолида учрайди. Унинг минералларидан халькопирит (CuFeS_2) ва халькозин (Cu_2S) кенг тарқалган. Кислород тутувчи минералларидан куприт (Cu_2O) ва малахит ($\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$) ҳам учрайди.

Мисни зичлиги юқори, электрётказувчанлиги яхши ва у юмшоқ металл ҳисобланади.

Мис кимёвий жиҳатдан пассив, у кучланишлар қаторида водороддан кейин жойлашган. Суюлтирилган кислоталардан водородни сиқиб чиқара олмайди. Концентрланган кислород тутувчи кислоталар билан таъсирлашганда +2 оксидланиш даражасини намоён қилади.

Бирикмаларида I ва II валентли бўлади. Икки валентли бирикмалари кўпроқ тарқалган.

Мис (I) ни кўпгина сувда эримайдиган тузлари аммиакда эрийди, бунда рангсиз комплекс катион $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]^+$ ҳосил бўлади.

Бундан ташқари мис (I) ни сувда эримайдиган галлоид тузлари галоид кислоталар ва уларнинг ишқорий металллар билан ҳосил қилган тузларини концентрланган эритмаларида эрийдилар. Бунга сабаб мис (I) ни комплекс тузлар ва кислоталар ҳосил қилишидир. Масалан, $\text{H}[\text{CuCl}_2]$ ни бинафша-кул ранг игнасимон кристаллари эритмадан ажратиб олинган [].

Мис (I) цианиди сувда ёмон эрийди, аммо ишқорий металллар цианидлари эритмаларида яхши эрийди, сабаби бунда мисни цианидли комплекс аниони ҳосил бўлади. Бу анион $[\text{Cu}(\text{CN})_2]^-$ формулали бўлиб, у сувда эрувчан, рангсиз эритма ҳосил қилади.

Мис (I) учун катта координацион сонли – $\text{Me}_2[\text{Cu}(\text{CN})_3]$ ва $\text{Me}_3[\text{Cu}(\text{CN})_4]$ типдаги бирикмалар ҳам хос.

Мис (I) роданидлар билан таъсирлашганда олтингугурт орқали бирикиб комплекс анионлар ҳосил қилади. Унинг ишқорий металллар билан ҳосил қилган $Cs[Cu(SCN)_2]$ ва $Na_3[Cu(SCN)_4] \cdot 4H_2O$ комплекс бирикмалари маълум. Натрийли тузнинг ўзига хослиги шундаки, унга фильтр қоғоз туширилганда, қоғоз бўкади, кейинчалик қиздирганда эса шаффоф эритма ҳосил бўлиб, совитилганда гелга айланади.

Мис (I) ацетонитрил билан ҳам комплекс бирикмалар ҳосил қилади. Бундай комплекслар олиш учун мисни мос тузининг CH_3CN даги эритмасига мис кукуни таъсир қилдирилади. Олинадиган комплексларнинг таркиби анион табиатига боғлиқ бўлади. Cl^- ва Br^- бўлган ҳолда комплекслар формуласи $CH_3CN \cdot CuI$ (эхтимол улар электролитмасдир) мос келса, NO_3^- , ClO_4^- ва BF_4^- бўлганда $[Cu(NCCH_3)_4]X$ формула мос келади (ацетонитрил эритмасида бир зарядли ионларга парчаланади). Энг барқарори перхлорат бўлиб, у $175^\circ C$ да суюқланади, $205^\circ C$ да парчаланади (портлаш билан). Бу комплексларнинг барчаси сув таъсирида парчаланади [].

Икки валентли мис комплекс бирикмалар ҳосил қилади. Ишқорий металллар тузлари билан билан Cu^{2+} комплекс бирикмалар бериб, ўзи комплекс анион таркибида бўлади (масалан, $[CuCl_4]^{2-}$). Аммо уларнинг кўпчилиги беқарор бўлиб, эритмаларда таркибий қисмларга парчаланади.

Кучли ишқорларни концентрланган эритмаларида мис (II) гидроксид кўк купритлар ҳосил қилади ($NaHCuO_2$, Na_2CuO_2). Аммо улар жуда беқарор бўлиб, эритма суюлтирилганда $Cu(OH)_2$ ҳолида чўкмага тушади.

Қаттиқ ҳолатда айрим ишқорий ва ишқорий ер металлари купритлари олинган. Кристаллизацион сув миқдorigа қараганда улар комплекс тузилишга эга. Масалан, натрийни кўк купритига $Na_2[Cu(OH)_4]$ формула мос келса, барийни очиқ-кўк куприти – $Ba_2[Cu(OH)_6]$ формулага жавоб беради.

Аммиак билан бир қатор комплекс бирикмалар ҳосил қилади. Унинг кўк рангли комплекс катиони $[Cu(NH_3)_4]^{2+}$ барқарор ҳисобланади. У мис тузларига аммиак эритмаси қўшилишидан ҳосил бўлади:



Интенсив рангли бўлган бу бирикмани ҳосил бўлишини аналитик кимёда мис катионини аниқлашда ишлатиш мумкин.

Ушбу комплекс катионнинг турли тузларидан ташқари, кристалл ҳолатда унинг асоси ажратиб олинган: $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4](\text{OH})_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$. Унинг тузларини 150-250°C гача қиздирганда аммиакни маълум қисми чиқиб кетади ва $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$ ни мос тузлари ҳосил бўлади. Шу билан бирга NH_4OH ни юқори концентрацияли эритмаларида $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5]^{2+}$ ва $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ ионлари ҳосил бўлиши аниқланган. Бундай комплексларнинг айримлари, масалан, $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_5]\text{SO}_4$ ва $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_6]\Gamma_2$ (бу ерда Γ – хлор, бром, иод) қаттиқ ҳолда олинган [15].

Cu^{2+} иони яна бир қатор (айниқса S- ёки N-атоми тутган) молекулалар билан комплекслар ҳосил қилади. Шунингдек, у галоген кислоталар ва уларни ишқорий тузлари билан бирикиб, кўпинча $\text{M}[\text{Cu}\Gamma_3]$ ва $\text{M}_2[\text{Cu}\Gamma_4]$ типигаги комплекс бирикмалар ҳосил қилади. Уларнинг кўпчилиги қаттиқ ҳолатда кристаллизация сувини тутадилар. Бу бирикмаларни ранги турли, масалан:

KCuF_3	KCuCl_3	KCuBr_3	$\text{LiCuCl}_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	Cs_2CuCl_4	Cs_2CuBr_4	$\text{Cs}_2\text{CuCl}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$
рангсиз	қизил	қора	қизил	сарик	қора	кўк-яшил

Cu^{2+} иони тутган эритмага мўл миқдорда калий цианид қўшганда $\text{K}_2[\text{Cu}(\text{CN})_4]$ таркибли, рангсиз кристалл модда олинади. Цианид ионлари концентрацияси жуда катта бўлганда мисни координацион сони юқори бўлган, бинафша рангли комплекс бирикма ҳосил бўлади. Бир ва икки валентли мисни бир вақтда ҳосил бўладиган цианидли комплекси жуда қизик: $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_2]_2[\text{Cu}(\text{CN})_4]$. Бу модда металл ялтироқлигига эга бўлиб, яшил кристаллар шаклда бўлади, ҳавода оксидланмайди ва сувда деярли эримайди. $\text{Cu}_2[\text{Cu}(\text{CN})_4] \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ таркибли комплекс бирикма оддий шароитда $\text{Cu}(\text{CN})_2$ парчаланишидан ҳосил бўлади [16].

Cu^{2+} ни карбонатли комплекслари ҳам маълум. Масалан, мис карбонатни мўл миқдорда карбонат ангидрид эритилган эритмага туширсак, $\text{K}_2[\text{Cu}(\text{CO}_3)_2] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ ҳосил бўлади.

CuCl_2 ни фтор атмосферасида KCl билан қиздиришда $\text{K}_3[\text{CuF}_6]$ формулани очик-яшил комплекс олинди. У сув билан парчаланди.

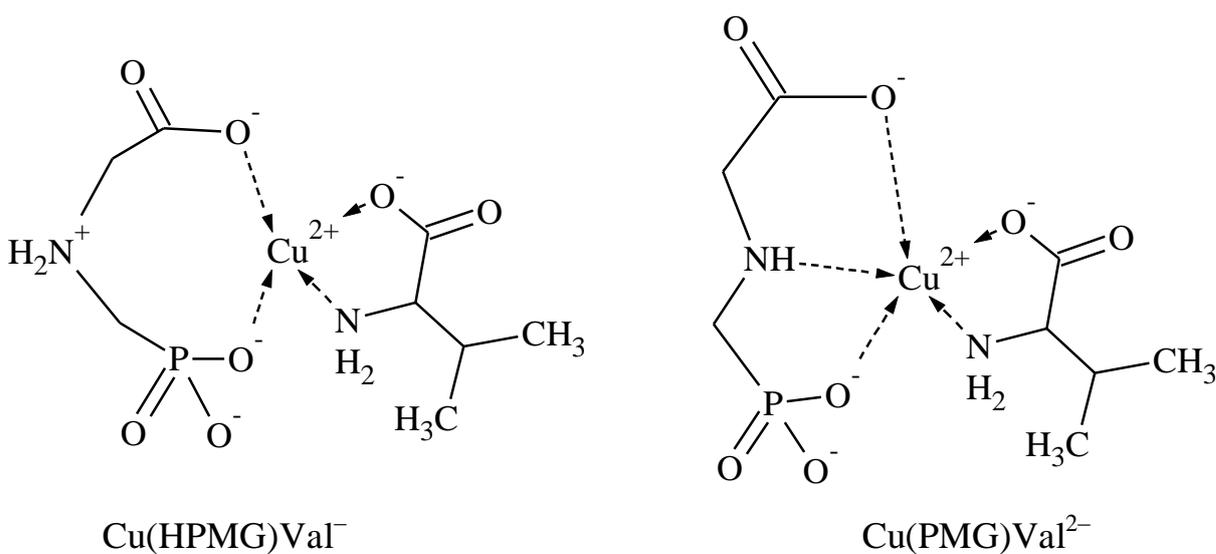
CuCl_2 ни эритмасига NaOCl ни ишқорий эритмасини ва $\text{Na}_2\text{H}_3\text{IO}_6$ ва $\text{Na}_2\text{H}_4\text{TeO}_6$ ни кислотали эритмасини қўшиб $\text{Na}_7[\text{Cu}(\text{IO}_6)_2] \cdot 16\text{H}_2\text{O}$ ва $\text{Na}_9[\text{Cu}(\text{TeO}_6)_2] \cdot 20\text{H}_2\text{O}$ формулага мос келадиган бирикмалар олинади [17].

А.А. Склярнинг номзодлик диссертация ишида мис (II) ни N-фосфонометилглицин ва валин билан ҳосил қилган комплекс бирикмалари кўриб чиқилган. Бу тадқиқотлар натижасида Cu^{2+} - H_3PMG ларни барқарорлик константаси $K_{\text{Cu}}^{\text{CuL}} \gg K_{\text{Cu}}^{\text{Cu(HL)}} \gg K_{\text{Cu}}^{\text{Cu(H}_2\text{L)}}$ каторида пасайиши аниқланган. Cu^{2+} - H_3PMG - HVal учли системада барқарорлик константаси қуйидаги формуладан ҳисобланди:

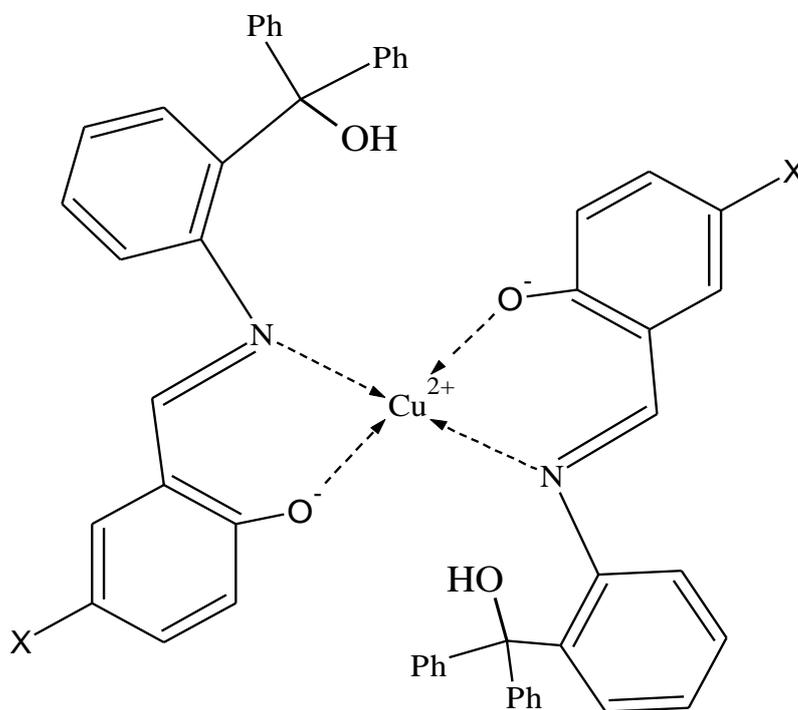
$$\beta_{pqlr} = \frac{|\text{Cu}_p \text{PMG}_q \text{Val}_l \text{H}_r|}{|\text{Cu}|^p |\text{PMG}|^q |\text{Val}|^l |\text{H}|^r}$$

Бунда $\text{Cu}(\text{PMG})\text{Val}^{2-}$ ($\lg\beta_{1110} = 19.81(4)$) ва $\text{Cu}(\text{HPMG})\text{Val}^{-}$ ($\lg\beta_{1111} = 26.02(6)$) бўлиши аниқланган.

Тахлиллар натижасида олинган кўрсаткичларни компьютер ёрдамида қайта ишлаш натижасида аралаш лигандлик комплекслар учун қуйидаги тузилиш таклиф қилинган:



ИҚ-спектрлар кўрсаткичларига кўра координацияда лигандларни айнан азометин шакли қатнашиши аниқланган. ЭПР маълумотларига таянган ҳолда координацион марказ учун қуйидагича тузилиш таклиф қилинган [18]:



Е.В. Елсуфьевнинг кимё фанлари номзоди даражасини олиш учун бажарган ишида мис (I) катионини меркаптопропил ва тиодиазолтиол гуруҳлар билан ҳосил қилган бирикмаларини люминесценцияси асосида мис миқдорини аниқлаш методикаси келтирилган.

Мис (I) катионини люминесценцияси унинг миқдorigа боғлиқлиги ва мис миқдори 0,1 г сорбентга 50 мкг ни ташкил қилганда люминесценцияни ҳаяжонланиш чегараси 351 нм дан 400 нм гача бўлиши аниқланган. 351 нм тўлқин узунлиқлиги билан ҳаяжонлантирганда люминесценция спектри максимуми 580 нм да бўлган [19].

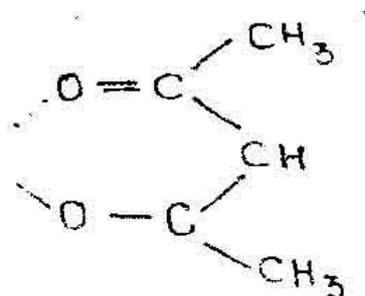
Хозирда координацион бирикмалар 4 синфга бўлинади.

1. Молекуляр монодентат лигандли координацион бирикмалар. Булар жумласига аммиакатлар, гидратлар ҳамда металл карбониллар киради. Масалан, $[\text{Cu}(\text{NH}_3)_4]\text{SO}_4$, $[\text{Al}(\text{H}_2\text{O})_6]\text{Cl}_3$, $[\text{Ni}(\text{CO})_4]$, $[\text{Co}_2(\text{CO})_8]$.

2. Ион лигандли координацион бирикмалар. Буларга лигандлари кислота колдиғидан иборат ацидо комплекслар киради. Масалан: $\text{Na}_3[\text{AlF}_6]$, $\text{Na}_2[\text{HgJ}_4]$,

$\text{Na}_2[\text{PdBr}_4]$, $\text{K}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]$, $\text{K}_2[\text{BeF}_4]$ ва ҳакозолар. Оксо- ва гидроксокоординацион бирикмалар ҳам шу синфга киради.

3. Циклик координацион бирикмалар таркибида бидентат ва полидентат лигандлар булиши мумкин. Масалан: $[\text{Co}[\text{NH}_2(\text{CH}_2)_2\text{NH}_2]_3]\text{Cl}_3$, $[\text{Co}(\text{асос})_3]$ ва ҳакозо. Агар $[\text{Co}(\text{NH}_3)_6]\text{Cl}_3$ таркибидаги 6 та NH_3 ни 3 та этилендиамин молекуласига алмаштирилса, $[\text{CoEn}_3]\text{Cl}_3$ ҳосил булади. Бунда ҳар қайси этилендиамин молекуласи металл билан 2та σ -боғ орқали бирикади. Натижада 3 та беш аъзоли халқага эга бўлган комплекс ҳосил бўлади. (асос – ацетилацетон – $\text{O} = \text{C}(\text{CH}_3) - \text{CH} = \text{C}(\text{CH}_3) - \text{O}^-$ аниони ҳам беш аъзоли халқа ҳосил қилади, унда фрагментидан 3 таси марказий атом атрофида координация ҳолатида бўлади.



Бундай бирикмалар хелат координацион бирикмалар деб аталади.

Иккинчи мисол тарикасида ички координацион бирикмаларни курсатиш мумкин. Агар полидентат лиганднинг бир атоми марказий атоми билан каволент (баъзан ионли) тарзда бирикиб, лиганднинг иккинчи атоми донор-акцептор механизми буйича марказий атом билан бириккан бўлса, ҳосил булган ҳолатни **ички координацион бирикма** деб аталади. Масалан: глицин номли аминокислота мис сульфат билан реакцияга киришганда миснинг ички комплекс бирикмаси ҳосил булади:



бис (глицинато) мис(II)

Комплексонлар, сэндвич ва π -комплекслар ҳам шу синфга киради.

Этилендиаминтетраацетат кислотанинг иони полидентат лигандлар жумласига киради. Бу кислота қисқача ЭТДА ёки ЭДТУК билан ишораланади. Унинг икки натрийли гидротузи



трилон-Б номи билан аналитик кимёда металл ионлари микдорини аниқлашда ишлатилади. ЭДТА нинг иони олти дентатли лиганд ҳисобланади. Агар металлнинг координацион сони 6 дан ортиқ булса, ортика уринларни эритувчи молекулалари банд килади.

4. Сэндвич бирикмалар. 1951 йилда ферроцен $[\text{Fe}(\text{C}_5\text{H}_5)_2]$ синтез килинди. Кейинчалик унинг сэндвич тузилишга эга эканлиги исботланди. Унинг таркибида темир иони 2 та циклопентадиенил иони C_5H_5 билан бириккан. Унинг тузилишини аниқлаган Э. Фишер ва Ж. Уилконсон Нобель мукофотини олишга сазовор бўдилар. Ферроценнинг тузилиши куйидагича. Унда темирнинг координацион сони 6 та тенг.

Ферроцендаги темир ўрнини бошқа металл, масалан, никель эгаллаши мумкин, у холда никелоцен $[\text{Ni}(\text{C}_5\text{H}_5)_2]$ ҳосил бўлади. Бундан ташқари ферроценнинг циклопентадиенил халқалари ҳам алмашиниш реакцияларига киришади [2].

1.2. Карбамиднинг координацион бирикмалари

Карбамид (К) – $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ техника ва саноатнинг турли соҳаларида пластик массалар олишда, коррозияни секинлаштиришда ва нодир металлларни аниқлашда ишлатилади. Кўп миқдорда қишлоқ хўжалигида азот тутувчи ўғит сифатида ишлатилади.

Карбамид монокристалларини рентгеноструктур тахлили C-N ва C=O боғлар орасидаги масофа 1,356 ва 1,276 Å тенг бўлиб, бу стандарт қийматларга мос келишини кўрсатди. Карбамидни гексагонал ва тетрагонал кристалл модификациялари борлиги исботланди.

Карбамид ва унинг дейтероаналогларини ИҚ- ва КРҒютилиш спектрларини ўрганишга [5] ишлар бағишланган бўлиб, улар асосида функционал гуруҳлар частоталарини нисбатлари аниқланган.

Карбамидни органик ва аорганик кислоталар билан таъсирлашишини ўрганишга кўпгина ишлар бағишланган. Кислоталар билан реакцияларда карбамид асос хоссаларини намоён қилиши аниқланган. К. Сулайманқуловнинг монографиясида карбамидни аорганик тузлар билан таъсирлашиш реакциялари натижалари умумлаштирилган. Карбамид сувли мухитда металлари галогенидлари, сульфатлари, нитратлари ва бошқа тузлари билан реакцияга киришиши аниқланган.

Карбамидни адабиётларда маълум комплексларини тахлили натижасида у типик комплекс ҳосил қилувчи металллар тузлари билан концентрациясига, синтез шароитларига ва анион турига боғлиқ ҳолда турли таркибли ва турли координацияланган бирикмалар ҳосил қилиши аниқланди. Икки валентли марганец, никель ва кобальт хлоридлари карбамидни тўрт молекуласини тутса, тўлган d-қаватлилари фақат иккита карбамид бириктирадилар. Типик комплекс ҳосил қилувчи металллар бромидлари ва иодидлари ўнтагача лиганд молекулалари тутади, рух, кадмий ва симоб тузлари эса иккитадан кўп тутмайди ва улар гидратланмаган бўлади. Карбамид металл нитратлари, тиоцианатлари ва сульфатлари билан ҳам худди шундай комплекслар ҳосил қилади.

К. С. Сулейманқуловнинг ишига кўра карбамидни комплексларини ИҚ-спектри бўйича учга бўлиш мумкин.

Биринчи гуруҳга кумуш (I) нитрат, платина (II) ва палладий (II) хлоридларни карбамид билан ҳосил қилган комплекслари $\text{AgNO}_3 \cdot \text{K}$, $\text{PtCl}_2 \cdot 2\text{K}$ ва $\text{PdCl}_2 \cdot 2\text{K}$ киради.

Бу комплексларни ИҚ-спектрларида N-C-N боғни ассиметрик тебраниш чегараси C-N боғни куч константалари камайиши ҳисобига камаяди, бу эса уни қўшбоғлилик даражасини пасайтиради. Карбамидли комплексларда ИҚ-спектрларни бундай ўзгариши амидни азот атоми орқали координацияланиши

билан тушунтирилади. C=O боғни валент тебраниш частотаси ошиши ҳам ушбу хулосага мос келади.

Иккинчи гуруҳга икки валентли марганец, рух ва кадмий ионлари кириб уларда марказий атомни координацион сони 3 дан 6 гача бўлади. Ушбу бирикмаларнинг ИҚ-спектрларини ўзига хослиги шундаки, улардаги карбамидни барча чизиқлари нозик, координирланмаган карбамид учун хос бўлган молекулалараро водород боғни кенг чизигини юқори частотали спектр соҳасида умуман кузатилмаслиги, водород боғларни узилганлигидан далолат беради. Карбамид молекулаларини координациясини карбонил гуруҳи кислороди орқали амалга оширилиши натижасида $\nu(\text{CN})$ ошади ва $\nu(\text{C=O})$ камаяди.

Бирикмаларнинг охириги гуруҳи таркибида олтига карбамид молекуласи тутади ва қуйидаги формулага эга бўлади: $\text{MX}_2 \cdot 6\text{K}$. Бу ерда лигандни координацияланиши карбонил гуруҳ кислороди орқали амалга оширилади. Шунини айтиш керакки, олдинги иккинчи гуруҳдан фарқли холда карбамид учун ман қилинган $\tau(\text{NH}_2)$ ва $\omega(\text{NH}_2)$ чизиқлар ИҚ- ва КР-спектрларда актив бўлади. Бу бирикма симметрияга эга эмаслигини, бошқача қилиб айтганда, марказий атом молекула ўқида ётмаслигини кўрсатади. NH_2 гуруҳини валент тебранишлари намоён бўладиган спектрни юқори частотали соҳаси жуда хиралашган. N-C-N гуруҳни симметрик валент тебранишларига асосланган чизиқ эркин карбамиддагига нисбатан юқори частотали томонга $20\text{-}25 \text{ см}^{-1}$ га оғади.

Юқоридагиларга хулоса қилиб карбамидни барча комплекслари карбонил гуруҳдаги кислород орқали координацияланади ва фақат кумуш нитрат, палладий ва платина хлоридларда координацияланиш азот орқали содир бўлади дейиш мумкин.

Рентгеноструктур анализни шиддат билан ривожланаётганлиги натижасида охириги йилларда карбамидли комплекс бирикмаларнинг кристалл тузилишига бағишланган ишлар кўпаймоқда. Бу ишлар муаллифлари томонидан координационро полиэдрларни ўзига хосликлари кўриб чиқилган.

$\text{NiJ}_2 \cdot 10\text{K}$ (I), $\text{Ni}(\text{NSC})_2 \cdot 8\text{K}$ (II), $\text{Ni}(\text{NCS})_2 \cdot 4\text{K}$ (III) каби бирикмалар учун тузилишни айрим турлари кўрсатилган. (I) да координация $[\text{CoK}_6]^{2+}$, II да транс $[\text{Co}(\text{NCS})_2 \cdot \text{K}_4]$, III да цис- $[\text{Co}(\text{NCS})_2 \cdot \text{K}_4]$ шаклида бўлиши аниқланган. Барча холларда карбамид молекулалари (I ва II да сфера ичида ва ташқарисида, III сфера ичида) водород боғлари каркасини ҳосил қилади. Кўриб чиқилган рентгеноструктуралар натижалари металл ва ацидолигандлар табиати карбамидни координацияланишига таъсир қилмасда, у комплексни тузилиши ва хоссаларига сезиларли таъсир кўрсатишидан далолат бермоқда. Комплексларни термик хоссаларини ўрганиш уларни катализаторлар сифатида ишлатиш ва оралиқ координацион бирикмалар олиш нуқтаи назаридан қизиқиш уйғотади. Умумий ҳолда карбамидли комплексларга термик таъсир қилинганда улар суюқланади, сувсизланади ва комплекс парчланади. Кўп холларда карбамидли комплекслар $130\text{-}140^\circ\text{C}$ атрофида суюқланиши ва бунга металл ҳамда ацидолигандлар таъсир қилмаслиги аниқланган, айрим холларда эса термик таъсир натижаларига таянган ҳолда комплекс бирикманинг барқарорлигини кислота қолдиғи ва амидли лигандга боғлиқлиги ҳақида ва уларни термолиз схемасига таъсири ҳақида мулоҳаза юритиш мумкин. $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 6\text{K}$ (I) $\text{Co}(\text{ClO}_4)_2 \cdot 4\text{K} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (II) таркибли комплексларни ДТА сени тахлил қилиш натижасида муаллифлар $\text{Co} \leftarrow \text{O} = \text{C} =$ боғ кобальт перхлорат гексакарбамиддагига нисбатан II комплексда барқарор деган хулосага келдилар. Кобальт (II) ни мос комплексларини қиздириш эгриларида сувсизланиш ва парчланиш термоэффектлари билан бир қаторда изоморф ўзгаришларга мос келувчи эффектлар ҳам кузатилади. Турли кислота қолдиқлари тутган марганец ва рухни карбамидли комплексларини термик парчланишини кузатиш натижасида $\Delta\nu = \nu(\text{CO})_{\text{комп.}} - \nu(\text{CO})_{\text{карб.}}$ қанчалик юқори бўлса, термик барқарорлик ҳам шунчалик юқори ва металл-лиганд боғ шунчалик мустаҳкам бўлиши аниқланган. Рух ва марганец хлоридлар энг яхши акцепторлар деб топилди[].

1.3. Тиокарбамиднинг координацион бирикмалари

Тиокарбамид (ТК) – H_2NCSNH_2 карбамид каби иккита донор атоми – амин гуруҳини азоти ва тиогуруҳни олтингугуртини тутати. Эркин ва комплекс тиокарбамидни нормал тебранишлари Ю. Я. Харитонов томонидан тахлил қилинган. Қатор муаллифлар томонидан тиокарбамидни марганец, темир, кобальт ва кадмийни галогенидлари, сульфатлари ва перхлоратлари билан ҳосил қилган тузлари тахлил қилинган. Кобальт галогениди, сульфати ва перхлорати тиокарбамид билан $\text{CoX}_2 \cdot n\text{TK}$, бу ерда $n=2,4$ таркибли, никель бромиди ва иодиди эса $\text{MX}_2 \cdot 6\text{TK}$ таркибли бирикмалар ҳосил қилиши аниқланди. Тиокарбамидни мис тузлари билан комплекслар ҳосил қилишида мис бир валентли ҳолатгача қайтарилади, темир, марганец, никель ва кобальт тузлари билан шу шароитда реакцияга киришишида эса оксидланиш даражасини ўзгариши кузатилмайди. Юқоридагидан келиб чиққан ҳолда темир гуруҳи металлларини мис тузларидан тозалаш усули ишлаб чиқилди. Тиокарбамидни координацияланиш турини аниқлаш карбамидга нисбатан қийин, чунки у олтингугуртни тақсимланмаган иккита жуфт электронлари ҳисобига кўприкли боғланиш ҳосил қилиши мумкин. Кўп ҳолларда координация олтингугурт атоми орқали амалга оширилади. Бу тахмин тиокарбамид ва унинг ҳосилаларини рентгеноструктур тахлил қилиш ёрдамида исботланган. N-фенилтиокарбамид никелли комплексида эса азот атомлари орқали координацияланиб депротонирланган шаклда бўлади.

Кадмийни тиокарбамидли бирикмаларида октаэдрлар ҳосил қилиш усуллари қизиқарли. Кадмий бис –(этилентиокарбамид)-роданидда ва кадмий бис – (тиокарбамид)-роданидда (NSC) кислота қолдиғи кўприк вазифасини бажаради, шу вақтнинг ўзида кадмий бис(тиокарбамид)формиат ва ацетатларда кўприк вазифасини тиокарбамиддаги олтингугурт бажаради, аммо бундай функция формиат ва ацетат гуруҳлари учун ҳам хос бўлади.

Хулоса қиладиган бўлсак, карбамид комплекс бирикмаларда кўпинча монодентант ҳолда карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали

координирланса, тиокарбамид металл, ацидолиганд ва алмашувчи радикал табиатига боғлиқ холда олтингугурт атоми орқали моно – ёки бидентант ёки азот атоми орқали моно- ёки бидентант координирланиши мумкин.

Адабиётлар шарҳидан карбамид ва тиокарбамид ҳамда уларнинг ҳосилаларини комплексли бирикмалари бўйича кўпгина ишлар қилинганлиги кўриниб турибди. Карбамид ва тиокарбамидни кислота қолдиғи сифатида галогенидлар, сульфат, нитрат, роданид, формиат, ацетат гуруҳлари тутган металллар билан комплекслари синтез қилинган. Уларни таркиби, ўзига хослиги, амидо ва ацидолигандларни координацияланиш усуллари аниқланган. Қатор холларда карбамидли ва тиокарбамидли комплексларни кристалл ва молекуляр структуралари очилган. Координацион бирикмаларнинг кристаллик ва геометрик ўзига хосликлари аниқланган [].

1.4. Металл карбоксилатларининг аралаш амидли координацион бирикмалари

Ушбу адабиётлар шарҳида алифатик, тиокарбон, ароматик ва гетероциклик карбон кислоталар амидларини металл формиатлари, ацетатлари, тартратлари, сукцинатлари ва бошқа карбоксилатлари билан координацион бирикмалари келтирилган[].

Бу ишларда баъзи d-металларнинг амидо- ва аквакарбоксилатли комплекс бирикмаларини синтези қилиш шароитлари келтирилган. Металл карбоксилатларини айрим органик лигандлар билан селектив таъсири аниқланган. Ажратилган бирикмаларнинг физик-кимёвий хоссалари (ранги, эрувчанлиги, суюқланиш ҳарорати, парчаланиш ҳарорати ва моляр электрўтказувчанлиги) аниқланган. Тебранма спектроскопия, ПМР, ЭСДО, РФА, РСА, ЭПР ва термик усуллар, магнитокимёвий ва квантокимёвий таҳлиллар ёрдамида синтез қилинган комплексларнинг тузилиши, таркиби ва ўзига хослиги топилган [].

Спектроскопик кўрсаткичлар асосида формаамид, ацетамид ва пропионамидларни бирикмаларида координация кислород атоми орқали содир бўлиши аниқланган. Ацидолигандларнинг $\nu(\text{H-C})$ ва $\nu(\text{C-C})$ частоталари холатидан келиб чиққан холда карбоксил гуруҳини дентантлиги аниқланган. Сукцинатли дианион комплекс таркибига кўра би-, три- ва тетрадентант бўлишини намоён қилди. Амидларни комплекс ҳосил қилиш хусусиятлари формаамиддан пропионамидга қараб камайиши кўрсатилган, бу амидларда углеводород радикали ошиши билан асослик хоссаси камайиши ва стерик тўсиқлар ҳосил қилишига мос келади. Пропионамидни имидоалкоголли шакли вужудга келиши сабаблари кўриб чиқилган. Карбамидли, тиокарбамидли комплексларда металл ва ацидолиганд табиатидан қатъий назар координация карбоксил гуруҳ кислороди орқали амалга ошади [] карбоксилат аниони бидентантлик намоён қилиб, гидроксил гуруҳ кислороди ва карбоксил гуруҳ кислороди орқали координацияланиб беш аъзоли хелат цикл ҳосил қилади, лимон кислотани трианиони эса гептандентантли кўприкли координация намоён қилиб полимер тузилишли комплекслар ҳосил қилади. Метилендикарбамидни металл ва ацидолиганд табиатига боғлиқ холда карбоксил гуруҳ кислороди орқали; кислород атоми ва иккиламчи амин гуруҳи азоти орқали олти аъзоли циклли комплекс ҳосил қилиб; карбоксил гуруҳлар кислородлари атомлари орқали кўприкли координацияланиб, иккиламчи амин гуруҳларидаги кислород ва азот атомлари орқали иккита олти аъзоли металлоцикллар ҳосил қилиб бирикиши кўрсатилган. Бунда карбоксил гуруҳларни дентантлиги нўлдан иккигача ўзгаради []. Пиразинамидли бирикмаларда лиганд координацияси марказий атом табиатига ва комплекс таркибига боғлиқ бўлади. Пиразинкарбон кислота ва пиразинамидни металлоцикл ҳосил қилишга мойиллиги таққосланган. Пиразинкарбон кислота анионини беш аъзоли цикл ҳосил қилишига кучли мойиллиги C-O боғни узайиши ва натижада цикл ёпилиб хелат эффекти ҳосил бўлишига олиб келиши сабаб бўлиши кўрсатилди. Никотинамид молекуласи барча бирикмаларда монодентант бўлиб азотни гетероатоми орқали координацияланади.

Комплекслар ацидолигандлар табиатига боғлиқ холда марказий атом М-М боғли мономер икки ядроли, димер ва полимер тузилишли октаэдр ва камдан – кам холда тетраэдр конфигурацияли бўлади. Сукцинатлар ва цитратлар учун сув молекулалари ва карбоксил гуруҳ кислородини рақобатли координацияланиши муҳокама қилинган. Изоникотин кислота гидразиди комплексида амидли лиганд азот гетероатоми, ёки беш аъзоли цикл ҳосил қилиб азот ва кислород атомлари орқали координирланади. Фтивазид комплексларда фтивазидни координацияланиши металлоцикл ҳосил бўлиши билан фенол ва метоксил гуруҳлар орқали амалга оширилади. Ларусан барча комплекс бирикмаларда азот гетероатоми орқали координирланади. Ацидолигандлар би- ва тридентант бўладилар. Метазид металл карбоксилатлари билан уч хил координацияланади: азот гетероатомлари орқали, кислород ва азот атомлари орқали беш аъзоли цикл ҳосил қилиб ва юқоридаги иккита усул биргаликда амалга ошади[].

Квант кимёвий усуллари билан амидларни реакцион қобилиятини аниқлашга имкон берадиган чегара орбиталлари энергияларига таъсир қилувчи ва шу билан атомда зарядларни сезиларли даражада қайта тақсимланишига олиб келувчи эркин ва координирланган лигандларни тузилиши, конформацияси, электрон структураси ва реакцион қобилиятлари ўрганилган.

Синтез қилинган координацион бирикмаларга термик таҳлил қилинганда кузатиладиган ўзгаришлар аниқланган ва формаид ва ацетаидли комплексларда органик лиганд парчаланмасдан ажралиб чиқиши билан босқичма – босқич ажралиши аниқланган. Термолизни босқичлари ацидолиганд ва марказий ион характерига боғлиқ бўлиши аниқланди. Комплексларни деактивацияси карбоксил гуруҳлар дентантлиги кўпайиши билан ошиб бориши кўрсатилган. Комплексларни дегидратация ва деактивация механизмларини кинетик параметрлари ҳисобланган. Текширилаётган моддаларда доминант механизмлар сифатида цилиндрик симметрия фазалараро диффузиясидаги ва Журавлев-Лесохин-Темпельман моделини уч ўлчамли диффузияси реакциялари бўлиши аниқланган.

Бир гуруҳ олимлар томонидан [] хром (III) ни никотинамид билан $[\text{Cr}_3\text{O}(\text{O}_2\text{CCH}_3)_6(\text{HKA})_3]\cdot\text{PF}_6\cdot 3\text{CH}_3\text{CN}$ (I) таркибли комплекс бирикмасини синтез қилиш усули келтирилган. Кукунсимон (I) намунани магнитга сезгирлиги 200-300 К да ўлчанганда, хром (III) ионлари антиферромагнит $j=-10,4 \text{ см}^{-1}$ боғланганлиги аниқланди. (I) бирикманинг кристалл структураси РСТА усулида аниқланди. Бошқа олимлар [] томонидан мис карбоксилатини мочевина билан $[\text{Cu}_2(\text{O}_2\text{CC}_n\text{H}_{2n+1})_4(\text{KA})]$ ($n=5$ дан 11 гача) ва $[\text{Cu}_2(\text{O}_2\text{CC}_5\text{H}_{11})(\text{KA})_2]$ (I) таркибли бирикмалари синтез қилинган. Комплекслар элементар анализ, электрон спектроскопия, тебранма спектроскопия, рентген нурлари дифракцияси, магнит хоссаларини таҳлил қилиш усуллари билан текширилган. (1) ни РСА усулида кристалл структураси аниқланган.

II. Тажриба қисми

2.1. Ишлатилган препаратлар, ускуналар ва таҳлил усуллари

Миснинг амидпальмитатли комплекс бирикмаларини синтез қилиш учун биз дастлаб мис(II)-пальмитатни синтез қилдик. Бунинг учун “чда” маркали пальмитин кислота, “чда” маркали мис купоросини ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) ишлатдик. Лигандлар сифатида “чда” маркали карбамид ($\text{CO}(\text{NH}_2)_2$) (К), тиокарбамид ($\text{CS}(\text{NH}_2)_2$) (ТК), ва нитрокарбамид ($\text{NH}_2\text{CONHNO}_2$) (НК) лар ишлатилди.

Азот Дюма микрометоди бўйича, углерод ва водород кислород токида ёқиш йўли билан аниқланди.

Миснинг амидопальмитатли координацион бирикмалари молекуласининг квант-кимёвий ҳисоблари NauperChem дастури яримэмпирик методини РМ-3 яқинлашувида ўтказилди.

Термик анализ Паулик-Паулик-Эрдей [] системасидаги дериватографда 10 град/мин тезлик билан 0,1 г намунада, гальванометрлар сезгирлиги Т-900, ТГ-100, ДТА-1/10, ДТГ-1/10 бўлганда ўтказилди. Ёзувлар атмосферали шароитида газларни доимий равишда насос билан чиқариб турган холда ўтказилди. Ушлагич сифатида 7 мм диаметри қопқоқсиз платина тигели ишлатилди. Эталон сифатида Al_2O_3 ишлатилди.

2.1. Мис(II)- пальмитат синтези

9,04 г (0,04 моль) пальмитин кислота олиб, уни сувдаги суспензияси тайёрланди. Бу суспензия устига 3,2 г (0,08 моль) натрий гидроксидни сувли эритмасидан қўйдик, олинган аралашмани яхшилаб аралаштирдик ва бир оз вақт қўйиб қўйдик. Маълум вақт ўтгач ва эритма аралаштирилганда совунга хос бўлган кўпиклар ҳосил бўла бошлагач аралашмага 5 г (0,02 моль) мис купоросини сувли эритмани аралаштириб турган холда аста-секин қўшдик. Бунда аралашманинг бутун ҳажми бўйлаб оч яшил чўкма ҳосил бўлди. Шундан кейин чўкма сув насоси ёрдамида филтрлаб олинди. Филтрда қолган чўкмани реакцияга киришмай қолган пальмитин кислотадан тозалаш мақсадида этил

спирти билан бир нечта марта ювдик. Кейин чўкма яна филтрланди ва очик хавода қуритилди.



Мис(II)-пальмитатнинг ранги оч яшил, аниқ суюқланиш ҳароратига эга эмас. Дериватограммалар таҳлили натижасида унинг молекуласи сувсиз бўлиши аниқланди.

2.2. Мис(II)-пальмитатнинг амидлар билан координацион бирикмалари синтези

Координацион бирикмалар синтези учун энг қулай ва самарали механо-кимёвий усулдан фойдаландик чунки бу усулда қисқа вақт ичида юқори унум билан турли таркибли комплекс бирикмалар синтез қилиш мумкин. Механо-кимёвий усул танладик. Бундай усулни танлашимизнинг сабаби шундаки, бу усул ҳозирда кенг қўлланиладиган илғор усуллардан бири ҳисобланади. Бундан ташқари қаттиқ фазада синтезларни амалга ошириш самарали усуллардан бири бўлиб, синтез қилинган моддаларнинг унуми ва тозалик даражаси юқори бўлади.

Мис(II)-пальмитатнинг амидлар билан координацион бирикмаларини синтез қилиш методикаси қуйидагича:

Мис(II)-пальмитатнинг амидлар билан координацион бирикмалари синтези механо-кимёвий усулда 1:2 моль нисбатларда хона ҳароратида чинни хавончада мунтазам аралаштириш орқали олиб борилди. Бунда эквимольяр нисбатда олинган мис(II)-пальмитат ва амидлар аралашмаси ховончада аралаштирилиб вақти-вақти билан ховонча ва эзгич юзасига ёпишган моддаларни скальпель билан тозалаб турилди. Бунда 15 минут аралаштирилгач, 5 минут ховонча ва эзгич скальпель билан тозаланади ва аралаштириш яна давом қилдирилди. Бу жараён камида 12 марта такрорланади. 10 марта такрорлашдан кейин аралашма ўзгармас таркибга эга бўлиб қолди, бу эса ўз навбатида доимий таркибли бирикма ҳосил бўлганидан далолат беради.

Барча амидопальмитатли координацион бирикмалар бир хил методикада синтез қилинди. Битирув малакавий ишини бажариш давомида қуйидаги моддалар синтез қилинди:

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ олиш учун 2,304 г $\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2$ ни 0,48 г карбамид билан хона шароитида 3 соат давомида чинни ховончада аралаштирдик.

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ синтез қилиш учун 2,304г $\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2$ ни 0,608 г тиокарбамид билан хона шароитида 3 соат давомида чинни ховончада аралаштирдик.

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{NO}_2\text{NHCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ни синтез қилишда 2,304г $\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2$ ни 0,832 г нитрокарбамид билан хона шароитида 3 соат давомида чинни ховончада куч билан эзиб аралаштирдик.

Олинган бирикмаларнинг элемент таҳлили натижалари жадвал 1 да келтирилган.

Жадвал 1.

Мис(II)-пальмитатининг карбамид (К), тиокарбамид (ТК) ва нитрокарбамид (НК) билан ҳосил қилган комплекс бирикмаларининг элемент таҳлили натижалари (Пл-Н - $\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO}^-$)

Бирикма	Ме%		С%		Н%		N%		S%	
	Ҳис.	Топ.	Ҳис.	Топ.	Ҳис.	Топ.	Ҳис.	Топ.	Ҳис.	Топ.
$\text{Cu}(\text{Пл-Н})_2 \cdot 2\text{К}$	9,20	9,18	55,20	62,07	10,34	10,22	7,05	7,08	-	-
$\text{Cu}(\text{Пл-Н})_2 \cdot 2\text{ТК}$	8,80	8,68	59,34	59,28	9,85	9,80	7,69	7,54	8,79	8,65
$\text{Cu}(\text{Пл-Н})_2 \cdot 2\text{НК} \cdot \text{H}_2\text{O}$	7,98	7,89	53,88	53,77	9,75	9,55	10,47	10,32	-	-

III. Олинган бирикмаларнинг физик – кимёвий таҳлили

3.1. Олинган бирикмаларнинг термик таҳлили

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2$ таркибли комплекснинг дериватограммасини киздириш эгричиликлари 182, 276, 308° да учта

эндотермик ва 422, 576, 758°C да учта экзотермик эффектга эга эканлиги аниқланди. Биринчи эффект табиати карбамид молекуласининг парчаланиши билан боғлиқ. Иккинчи эндотермик эффектнинг характери бир вақтнинг ўзида карбамиднинг парчаланиши ва координирланган пальмитат анионининг парчаланишига асосланган. Навбатдаги эндотермик эффектнинг кузатилиши карбамид молекулаларининг парчаланиши ва пальмитат гуруҳининг деструкцияси давом қилаётгани билан боғлиқ. Кейинчалик яна температура кўтарилиши парчаланиш маҳсулотларининг ёнишига олиб келади. Ёниш эгричизикларида 50-800°C интервалда умумий масса камайиши 88,45% ни ташкил қилади. Бу CuO ҳосил бўлиши билан тушинтирилади.

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ бирикманинг киздириш эгричизиклари 125, 250, 357° да эндотермик эффектга эга ва 420, 528, 668 ва 755°C да экзотермик эффектларга асосланади. Биринчи эффект тиокарбамид молекуласини парчаланишига мос келади. 358°C даги эндоэффект пальмитат гуруҳини парчаланиши бошланишини кўрсатади. Қолган эффектлар парчаланишдан ҳосил бўладиган маҳсулотларни ёнишига мос келади. Навбатдаги термоэффектларнинг табиати комплекснинг органик қисми парчаланиши билан боғлиқдир. 870°C да массанинг умумий камайиши жами 78,10% ни ташкил қилади. Бу ўз навбатида CuSO_4 ҳосил бўлиши билан боғлиқ.

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot 2\text{NO}_2\text{NHCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ координацион бирикманинг дериватограммасида 3 та эндо ва 2 та экзоэффектлар кузатилади. Эндоэффектлар: 105, 200, 343°C; экзоэффектлар: 690 ва 800°C. Биринчи эндоэффект бир молекула сувнинг чиқиб кетиши билан тушинтирилади. Бунда ТГ эгри чизиклари бўйича массанинг камайиши 2,26 % ни, ҳисобланганда 2,24 % ни ташкил қилди. Кейинги эндоэффектлар нитрокарбамидни парчаланишига мос келса, учинчи эндоэффект пальмитат гуруҳ парчаланишига мос келади. Экзоэффектлар органик қатламнинг ёниши ва CuO ҳосил бўлиши билан боғлиқ. 80-870 °C температура интервалида массанинг умумий камайиши 90,1% ни ташкил қилди [].

3.2. Олинган моддаларнинг квант-кимёвий таҳлили

Квантокимёвий ҳисоблашлар Hyper Chem 8.07 дастурида олиб борилди.

$\text{Cu}(\text{C}_{15}\text{H}_{31}\text{COO})_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2$ координацион бирикмаси учун математик моделлаштиришнинг semi-empirical (ярим эмпирик) усулидан фойдаландик. Геометрик оптималлаштириш МОРАС РМ-3 дастурида олиб борилди. Текшириш диапазони 0,1 ккал/(А·моль) энергия қадами билан 11725 циклда борди. Оптимал молекула шакли 226 циклда энг кам энергия бўйича топилди. Олинган натижалар қуйидагича:

HyperChem log start -- Mon Jun 13 16:50:23 2011.

Geometry optimization, SemiEmpirical, molecule = (untitled).

PM3

PolakRibiere optimizer

Convergence limit = 0.0100000 Iteration limit = 50

Accelerate convergence = YES

Optimization algorithm = Polak-Ribiere

Criterion of RMS gradient = 0.1000 kcal/(A mol) Maximum cycles = 1725

RHF Calculation:

Doublet state calculation

The half-electron approximation will be used

Number of electrons = 273

Number of Double Occupied Levels = 136

Number of Single Occupied Levels = 1

WARNING message received from node=0:

The optimized geometry may not correspond to the geometry with the minimum energy because of the half electron approximation.

Charge on the System = 0

Total Orbitals = 255

Starting PM3 calculation with 255 orbitals

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=1 Diff=47979.44190]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=2 Diff=42517.47173]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=3 Diff=79388.99080]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=4 Diff=4457.82612]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=5 Diff=13515.67673]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=6 Diff=16849.10502]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=7 Diff=7054.10610]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=8 Diff=11233.42354]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=9 Diff=10816.01397]

E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=10 Diff=4972.72840]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=11 Diff=7806.16085]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=12 Diff=9058.87100]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=13 Diff=3202.64578]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=14 Diff=9593.87517]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=15 Diff=6419.64737]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=16 Diff=664.76459]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=17 Diff=3110.70374]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=18 Diff=1726.12685]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=19 Diff=602.51852]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=20 Diff=642.71140]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=21 Diff=3007.51361]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=22 Diff=2946.75722]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=23 Diff=6259.00746]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=24 Diff=8161.33129]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=25 Diff=3036.72193]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=26 Diff=417.12431]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=27 Diff=300.80624]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=28 Diff=141.56412]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=29 Diff=136.32715]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=30 Diff=93.04916]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=31 Diff=62.26019]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=32 Diff=21.45469]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=33 Diff=20.47216]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=34 Diff=19.31798]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=35 Diff=11.33965]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=36 Diff=6.53228]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=37 Diff=0.36077]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=38 Diff=0.09919]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=39 Diff=0.02854]
 E=0.0000 Grad=0.000 Conv=NO(0 cycles 0 points) [Iter=40 Diff=0.00834]
 E=-10867.0566 Grad=0.074 Conv=YES(0 cycles 1 points) [Iter=1 Diff=0.00006]

ENERGIES AND GRADIENT

Total Energy = -200964.9651787 (kcal/mol)
 Total Energy = -320.251663135 (a.u.)
 Binding Energy = -10867.0540747 (kcal/mol)
 Isolated Atomic Energy = -190097.9111040 (kcal/mol)
 Electronic Energy = -1863378.3745618 (kcal/mol)
 Core-Core Interaction = 1662413.4093831 (kcal/mol)
 HE Energy Correction = -44.5090914 (kcal/mol)
 Heat of Formation = -519.6000747 (kcal/mol)
 Gradient = 0.0710679 (kcal/mol/Ang)

MOLECULAR POINT GROUP

C1

EIGENVALUES(eV)

Symmetry:	1 A	2 A	3 A	4 A	5 A
Eigenvalue:	-40.944122	-40.874340	-40.266766	-40.087807	-39.154343
Symmetry:	6 A	7 A	8 A	9 A	10 A
Eigenvalue:	-38.984085	-37.682541	-37.458370	-37.346283	-37.144871
Symmetry:	11 A	12 A	13 A	14 A	15 A
Eigenvalue:	-35.222233	-35.179993	-33.617859	-33.440800	-32.751301
Symmetry:	16 A	17 A	18 A	19 A	20 A
Eigenvalue:	-32.720490	-31.272268	-31.222746	-30.215469	-30.183100
Symmetry:	21 A	22 A	23 A	24 A	25 A
Eigenvalue:	-28.063053	-27.881168	-27.739969	-27.698759	-25.425352
Symmetry:	26 A	27 A	28 A	29 A	30 A
Eigenvalue:	-25.374903	-23.325155	-23.304234	-21.779676	-21.721811
Symmetry:	31 A	32 A	33 A	34 A	35 A
Eigenvalue:	-21.694084	-21.672997	-21.269152	-21.221779	-20.899271
Symmetry:	36 A	37 A	38 A	39 A	40 A
Eigenvalue:	-20.863081	-20.811255	-20.717903	-20.264957	-20.234520
Symmetry:	41 A	42 A	43 A	44 A	45 A
Eigenvalue:	-20.180334	-20.118876	-20.067623	-19.902296	-19.527752
Symmetry:	46 A	47 A	48 A	49 A	50 A
Eigenvalue:	-19.110147	-18.480719	-18.320341	-17.991180	-17.744387
Symmetry:	51 A	52 A	53 A	54 A	55 A
Eigenvalue:	-17.641441	-17.551836	-17.500074	-17.317907	-17.311031
Symmetry:	56 A	57 A	58 A	59 A	60 A
Eigenvalue:	-17.159191	-17.086628	-16.647734	-16.603960	-16.349373
Symmetry:	61 A	62 A	63 A	64 A	65 A
Eigenvalue:	-16.234859	-16.146606	-15.860432	-15.780807	-15.669185
Symmetry:	66 A	67 A	68 A	69 A	70 A
Eigenvalue:	-15.629070	-15.590164	-15.471971	-15.403517	-15.279029

Symmetry:	71 A	72 A	73 A	74 A	75 A
Eigenvalue:	-15.233742	-15.069880	-15.039721	-15.024907	-14.982162
Symmetry:	76 A	77 A	78 A	79 A	80 A
Eigenvalue:	-14.862419	-14.811436	-14.748157	-14.682978	-14.444465
Symmetry:	81 A	82 A	83 A	84 A	85 A
Eigenvalue:	-14.390887	-14.299155	-14.219884	-14.154158	-14.060891
Symmetry:	86 A	87 A	88 A	89 A	90 A
Eigenvalue:	-13.864989	-13.719049	-13.683085	-13.564161	-13.451311
Symmetry:	91 A	92 A	93 A	94 A	95 A
Eigenvalue:	-13.413027	-13.315225	-13.172314	-13.139102	-13.113725
Symmetry:	96 A	97 A	98 A	99 A	100 A
Eigenvalue:	-12.895912	-12.867008	-12.801511	-12.727499	-12.684319
Symmetry:	101 A	102 A	103 A	104 A	105 A
Eigenvalue:	-12.647183	-12.522822	-12.464850	-12.422815	-12.366020
Symmetry:	106 A	107 A	108 A	109 A	110 A
Eigenvalue:	-12.312244	-12.274163	-12.258214	-12.230670	-12.195832
Symmetry:	111 A	112 A	113 A	114 A	115 A
Eigenvalue:	-12.182286	-11.963017	-11.892242	-11.839921	-11.808621
Symmetry:	116 A	117 A	118 A	119 A	120 A
Eigenvalue:	-11.759009	-11.710663	-11.608726	-11.532800	-11.472618
Symmetry:	121 A	122 A	123 A	124 A	125 A
Eigenvalue:	-11.398894	-11.381761	-11.328804	-11.324615	-11.299649
Symmetry:	126 A	127 A	128 A	129 A	130 A
Eigenvalue:	-11.291919	-11.278160	-11.135314	-10.822437	-10.677705
Symmetry:	131 A	132 A	133 A	134 A	135 A
Eigenvalue:	-10.568640	-10.409647	-10.137188	-9.855110	-9.815126
Symmetry:	136 A	137 A	138 A	139 A	140 A
Eigenvalue:	-8.104438	-3.563055	0.887650	0.936746	1.214541
Symmetry:	141 A	142 A	143 A	144 A	145 A
Eigenvalue:	1.283925	1.693118	1.851962	2.539148	2.645061

Symmetry:	146 A	147 A	148 A	149 A	150 A
Eigenvalue:	2.916745	2.956376	3.050893	3.098307	3.274388
Symmetry:	151 A	152 A	153 A	154 A	155 A
Eigenvalue:	3.327290	3.332688	3.404892	3.452338	3.489965
Symmetry:	156 A	157 A	158 A	159 A	160 A
Eigenvalue:	3.521239	3.573590	3.577387	3.613896	3.652487
Symmetry:	161 A	162 A	163 A	164 A	165 A
Eigenvalue:	3.668822	3.701115	3.742411	3.782203	3.829571
Symmetry:	166 A	167 A	168 A	169 A	170 A
Eigenvalue:	3.841857	3.863174	3.873017	3.879906	3.903960
Symmetry:	171 A	172 A	173 A	174 A	175 A
Eigenvalue:	3.922247	3.947927	3.959587	3.966243	3.972868
Symmetry:	176 A	177 A	178 A	179 A	180 A
Eigenvalue:	3.981928	3.994692	3.998199	4.015358	4.015536
Symmetry:	181 A	182 A	183 A	184 A	185 A
Eigenvalue:	4.031474	4.032294	4.041685	4.047076	4.051283
Symmetry:	186 A	187 A	188 A	189 A	190 A
Eigenvalue:	4.058863	4.068535	4.080102	4.084513	4.096713
Symmetry:	191 A	192 A	193 A	194 A	195 A
Eigenvalue:	4.108404	4.153586	4.163993	4.185920	4.196150
Symmetry:	196 A	197 A	198 A	199 A	200 A
Eigenvalue:	4.202273	4.223850	4.326737	4.343447	4.365910
Symmetry:	201 A	202 A	203 A	204 A	205 A
Eigenvalue:	4.389224	4.400271	4.436923	4.477282	4.489917
Symmetry:	206 A	207 A	208 A	209 A	210 A
Eigenvalue:	4.520466	4.555722	4.574012	4.612477	4.622876
Symmetry:	211 A	212 A	213 A	214 A	215 A
Eigenvalue:	4.635027	4.638764	4.653342	4.660413	4.687622
Symmetry:	216 A	217 A	218 A	219 A	220 A
Eigenvalue:	4.754070	4.792380	4.800431	4.810956	4.837036

Symmetry: 221 A 222 A 223 A 224 A 225 A
Eigenvalue: 4.860764 4.873805 4.913076 4.928971 4.929634

Symmetry: 226 A 227 A 228 A 229 A 230 A
Eigenvalue: 4.982055 4.983329 4.987898 5.029378 5.035123

Symmetry: 231 A 232 A 233 A 234 A 235 A
Eigenvalue: 5.045220 5.079205 5.122326 5.143979 5.151035

Symmetry: 236 A 237 A 238 A 239 A 240 A
Eigenvalue: 5.158742 5.185689 5.191263 5.198225 5.270493

Symmetry: 241 A 242 A 243 A 244 A 245 A
Eigenvalue: 5.273919 5.302548 5.304396 5.843175 5.937810

Symmetry: 246 A 247 A 248 A 249 A 250 A
Eigenvalue: 6.006700 6.068833 6.393682 6.451420 6.849599

Symmetry: 251 A 252 A 253 A 254 A 255 A
Eigenvalue: 7.160866 7.925018 8.794660 9.458592 9.613062

ATOMIC ORBITAL ELECTRON POPULATIONS

AO: 27 S Cu 27 Px Cu 27 Py Cu 27 Pz Cu 27 Dz2 Cu
0.524164 0.351169 0.450815 0.333363 1.899517

AO: 27 Dxz Cu 27 Dyx Cu 27 Dx2 Cu 27 Dxy Cu 2 S C
1.969615 1.929954 1.967118 1.716878 1.256683

AO: 2 Px C 2 Py C 2 Pz C 3 S N 3 Px N
0.840945 0.917151 0.906882 1.373304 1.544314

AO: 3 Py N 3 Pz N 4 S O 4 Px O 4 Py O
0.983618 1.056574 1.818014 1.375263 1.194866

AO: 4 Pz O 5 S N 5 Px N 5 Py N 5 Pz N
1.844455 1.370946 1.017724 1.265567 1.308698

AO: 6 S C 6 Px C 6 Py C 6 Pz C 7 S N
1.257167 0.910553 0.882976 0.863448 1.374091

AO: 7 Px N 7 Py N 7 Pz N 8 S O 8 Px O
0.987409 1.258822 1.340439 1.816606 1.707618

AO: 8 Py O 8 Pz O 9 S C 9 Px C 9 Py C

	1.381855	1.318683	1.138374	0.992130	0.977956
AO:	9 Pz C	10 S C	10 Px C	10 Py C	10 Pz C
	1.000862	1.158628	0.993725	0.948016	0.997420
AO:	11 S C	11 Px C	11 Py C	11 Pz C	12 S C
	1.163000	0.994807	0.946211	0.999087	1.162567
AO:	12 Px C	12 Py C	12 Pz C	13 S C	13 Px C
	0.994981	0.945586	0.998636	1.162509	0.995256
AO:	13 Py C	13 Pz C	14 S C	14 Px C	14 Py C
	0.945553	0.998400	1.162769	0.995580	0.945369
AO:	14 Pz C	15 S C	15 Px C	15 Py C	15 Pz C
	0.998319	1.162454	0.995496	0.945616	0.997836
AO:	16 S C	16 Px C	16 Py C	16 Pz C	17 S C
	1.162905	0.995970	0.945281	0.998282	1.162227
AO:	17 Px C	17 Py C	17 Pz C	18 S C	18 Px C
	0.994912	0.945904	0.997856	1.162967	0.995426
AO:	18 Py C	18 Pz C	19 S C	19 Px C	19 Py C
	0.945330	0.998860	1.162085	0.993189	0.946634
AO:	19 Pz C	20 S C	20 Px C	20 Py C	20 Pz C
	0.998756	1.162978	0.993300	0.944746	1.001127
AO:	21 S C	21 Px C	21 Py C	21 Pz C	22 S C
	1.162424	0.991082	0.948101	1.000059	1.160228
AO:	22 Px C	22 Py C	22 Pz C	23 S C	23 Px C
	0.990857	0.931797	1.012284	1.153943	0.990289
AO:	23 Py C	23 Pz C	24 S C	24 Px C	24 Py C
	0.943868	1.012379	1.201900	0.797747	0.785881
AO:	24 Pz C	25 S O	25 Px O	25 Py O	25 Pz O
	0.861096	1.845125	1.640958	1.534795	1.203835
AO:	26 S O	26 Px O	26 Py O	26 Pz O	1 S N
	1.849593	1.431661	1.446123	1.564281	1.372832
AO:	1 Px N	1 Py N	1 Pz N	28 S C	28 Px C

	1.561187	0.997491	1.027796	1.138325	1.008339
AO:	28 Py C	28 Pz C	29 S C	29 Px C	29 Py C
	0.956583	1.006025	1.158553	0.987482	0.963150
AO:	29 Pz C	30 S C	30 Px C	30 Py C	30 Pz C
	0.988619	1.163060	0.989878	0.959598	0.990690
AO:	31 S C	31 Px C	31 Py C	31 Pz C	32 S C
	1.162481	0.988567	0.960667	0.990022	1.162639
AO:	32 Px C	32 Py C	32 Pz C	33 S C	33 Px C
	0.989046	0.960143	0.990331	1.162495	0.987976
AO:	33 Py C	33 Pz C	34 S C	34 Px C	34 Py C
	0.960513	0.990736	1.162709	0.988269	0.960227
AO:	34 Pz C	35 S C	35 Px C	35 Py C	35 Pz C
	0.990916	1.162489	0.986816	0.960559	0.992013
AO:	36 S C	36 Px C	36 Py C	36 Pz C	37 S C
	1.162669	0.987194	0.960072	0.992069	1.162390
AO:	37 Px C	37 Py C	37 Pz C	38 S C	38 Px C
	0.985088	0.960747	0.993555	1.162759	0.986105
AO:	38 Py C	38 Pz C	39 S C	39 Px C	39 Py C
	0.959497	0.993638	1.162212	0.982719	0.961650
AO:	39 Pz C	40 S C	40 Px C	40 Py C	40 Pz C
	0.994879	1.163077	0.987095	0.956795	0.995114
AO:	41 S C	41 Px C	41 Py C	41 Pz C	42 S C
	1.159764	0.976578	0.966288	0.995677	1.153498
AO:	42 Px C	42 Py C	42 Pz C	43 S C	43 Px C
	1.009011	0.930076	1.005300	1.202795	0.849978
AO:	43 Py C	43 Pz C	44 S O	44 Px O	44 Py O
	0.866360	0.725938	1.847861	1.423902	1.469733
AO:	44 Pz O	45 S O	45 Px O	45 Py O	45 Pz O
	1.533117	1.845756	1.287889	1.382707	1.708940
AO:	46 S H	47 S H	48 S H	49 S H	50 S H

	0.932561	0.967705	0.925350	0.966345	0.934299
AO:	51 S H	52 S H	53 S H	54 S H	55 S H
	0.966523	0.920312	0.965623	0.962974	0.962315
AO:	56 S H	57 S H	58 S H	59 S H	60 S H
	0.962268	0.951664	0.951565	0.949008	0.949101
AO:	61 S H	62 S H	63 S H	64 S H	65 S H
	0.949353	0.949250	0.948961	0.949076	0.949232
AO:	66 S H	67 S H	68 S H	69 S H	70 S H
	0.948994	0.948825	0.949034	0.949341	0.948917
AO:	71 S H	72 S H	73 S H	74 S H	75 S H
	0.948519	0.948941	0.949697	0.948546	0.947790
AO:	76 S H	77 S H	78 S H	79 S H	80 S H
	0.948634	0.950965	0.947019	0.945495	0.947775
AO:	81 S H	82 S H	83 S H	84 S H	85 S H
	0.953413	0.933382	0.925843	0.921044	0.963050
AO:	86 S H	87 S H	88 S H	89 S H	90 S H
	0.962346	0.962363	0.951563	0.951560	0.949120
AO:	91 S H	92 S H	93 S H	94 S H	95 S H
	0.949083	0.949143	0.949256	0.949205	0.949058
AO:	96 S H	97 S H	98 S H	99 S H	100 S H
	0.948872	0.948969	0.949214	0.949050	0.948655
AO:	101 S H	102 S H	103 S H	104 S H	105 S H
	0.948889	0.949415	0.949063	0.948184	0.948466
AO:	106 S H	107 S H	108 S H	109 S H	110 S H
	0.949704	0.949178	0.946561	0.946485	0.950658
AO:	111 S H	112 S H	113 S H	114 S H	115 S H
	0.949050	0.937453	0.930995	0.924642	0.931923

NET CHARGES AND COORDINATES

Atom	Z	Charge	Coordinates(Angstrom)			Mass
			x	y	z	
27	29	-0.142593	2.98983	-0.95536	2.01028	63.54000

2	6	0.078338	5.25224	1.08716	2.06045	12.01100
3	7	0.042191	5.21391	1.87489	3.24406	14.00700
4	8	-0.232597	4.78890	-0.07925	2.04327	15.99900
5	7	0.037066	3.05438	-2.21992	5.93692	14.00700
6	6	0.085855	3.82438	-1.71360	4.85207	12.01100
7	7	0.039238	5.23975	-1.85697	4.87721	14.00700
8	8	-0.224763	3.24401	-1.00480	3.99653	15.99900
9	6	-0.109322	-3.31914	18.83228	0.06392	12.01100
10	6	-0.097789	-2.45981	17.74583	0.67021	12.01100
11	6	-0.103106	-2.80754	16.37874	0.10283	12.01100
12	6	-0.101770	-1.94654	15.28754	0.71804	12.01100
13	6	-0.101719	-2.28961	13.92235	0.14370	12.01100
14	6	-0.102037	-1.43501	12.83023	0.76622	12.01100
15	6	-0.101403	-1.76818	11.46469	0.18571	12.01100
16	6	-0.102438	-0.91289	10.37768	0.81627	12.01100
17	6	-0.100899	-1.22895	9.00695	0.23852	12.01100
18	6	-0.102583	-0.35324	7.93654	0.86948	12.01100
19	6	-0.100664	-0.64628	6.55736	0.30030	12.01100
20	6	-0.102151	0.27334	5.51407	0.91441	12.01100
21	6	-0.101666	0.00531	4.12363	0.36042	12.01100
22	6	-0.095165	0.97181	3.11296	0.95812	12.01100
23	6	-0.100480	0.71490	1.71157	0.42529	12.01100
24	6	0.353375	1.68782	0.72605	1.00913	12.01100
25	8	-0.224713	1.81775	0.52015	2.29527	15.99900
26	8	-0.291657	2.50271	0.01028	0.33904	15.99900
1	7	0.040694	5.99511	1.54029	0.93483	14.00700
28	6	-0.109272	-5.62003	-17.12971	-8.05422	12.01100
29	6	-0.097805	-5.55404	-15.64921	-7.75442	12.01100
30	6	-0.103226	-4.48471	-15.33768	-6.71978	12.01100
31	6	-0.101738	-4.42085	-13.84912	-6.41842	12.01100
32	6	-0.102160	-3.34547	-13.54243	-5.38907	12.01100
33	6	-0.101720	-3.27659	-12.05502	-5.08358	12.01100
34	6	-0.102120	-2.18811	-11.75317	-4.06630	12.01100
35	6	-0.101877	-2.11134	-10.26606	-3.76092	12.01100
36	6	-0.102005	-1.00266	-9.96578	-2.76538	12.01100
37	6	-0.101779	-0.91841	-8.47900	-2.45996	12.01100
38	6	-0.102000	0.21603	-8.18055	-1.49361	12.01100
39	6	-0.101460	0.30274	-6.69553	-1.17901	12.01100
40	6	-0.102082	1.46103	-6.40535	-0.23875	12.01100
41	6	-0.098307	1.53341	-4.92919	0.12016	12.01100
42	6	-0.097884	2.71629	-4.66341	1.03784	12.01100
43	6	0.354929	2.77911	-3.23468	1.49594	12.01100
44	8	-0.274613	1.82162	-2.55405	1.99630	15.99900
45	8	-0.225291	3.89248	-2.54640	1.47455	15.99900
46	1	0.067439	5.85280	0.98813	0.11795	1.00800

47	1	0.032295	5.90306	2.51467	0.75328	1.00800
48	1	0.074650	4.55710	1.54487	3.91712	1.00800
49	1	0.033655	5.12229	2.85153	3.07489	1.00800
50	1	0.065701	2.07172	-2.19919	5.77536	1.00800
51	1	0.033477	3.36377	-3.10047	6.28344	1.00800
52	1	0.079688	5.68382	-1.58134	4.02826	1.00800
53	1	0.034377	5.54560	-2.75163	5.18863	1.00800
54	1	0.037026	-3.06411	19.81779	0.47425	1.00800
55	1	0.037685	-3.19305	18.88777	-1.02568	1.00800
56	1	0.037732	-4.38621	18.66129	0.25976	1.00800
57	1	0.048336	-1.38857	17.96657	0.49104	1.00800
58	1	0.048435	-2.58069	17.73847	1.77190	1.00800
59	1	0.050992	-3.88017	16.15953	0.27793	1.00800
60	1	0.050899	-2.68249	16.38481	-0.99878	1.00800
61	1	0.050647	-0.87389	15.51123	0.54829	1.00800
62	1	0.050750	-2.07673	15.27916	1.81910	1.00800
63	1	0.051039	-3.36373	13.70186	0.30762	1.00800
64	1	0.050924	-2.15257	13.92977	-0.95651	1.00800
65	1	0.050768	-0.36060	13.05557	0.60946	1.00800
66	1	0.051006	-1.57810	12.81878	1.86579	1.00800
67	1	0.051175	-2.84271	11.23882	0.33918	1.00800
68	1	0.050966	-1.62090	11.47391	-0.91319	1.00800
69	1	0.050659	0.16112	10.61090	0.66809	1.00800
70	1	0.051083	-1.06509	10.36780	1.91461	1.00800
71	1	0.051481	-2.29908	8.76469	0.39615	1.00800
72	1	0.051059	-1.08537	9.01626	-0.86075	1.00800
73	1	0.050303	0.71589	8.18781	0.71539	1.00800
74	1	0.051454	-0.50015	7.92865	1.96854	1.00800
75	1	0.052210	-1.70544	6.28675	0.48335	1.00800
76	1	0.051366	-0.52834	6.56712	-0.80196	1.00800
77	1	0.049035	1.33122	5.79322	0.73223	1.00800
78	1	0.052981	0.15365	5.50875	2.01692	1.00800
79	1	0.054505	-1.04044	3.82347	0.57301	1.00800
80	1	0.052225	0.09421	4.12955	-0.74470	1.00800
81	1	0.046587	2.01456	3.41486	0.73386	1.00800
82	1	0.066618	0.88869	3.11943	2.06387	1.00800
83	1	0.074157	0.78102	1.69832	-0.68118	1.00800
84	1	0.078956	-0.31407	1.38335	0.67443	1.00800
85	1	0.036950	-6.39216	-17.35079	-8.80208	1.00800
86	1	0.037654	-4.66593	-17.50664	-8.44623	1.00800
87	1	0.037637	-5.85627	-17.71494	-7.15547	1.00800
88	1	0.048437	-5.35286	-15.08310	-8.68571	1.00800
89	1	0.048440	-6.53994	-15.29108	-7.39664	1.00800
90	1	0.050880	-4.68431	-15.90481	-5.78814	1.00800
91	1	0.050917	-3.49782	-15.69437	-7.07795	1.00800

92	1	0.050857	-4.22625	-13.28160	-7.35090	1.00800
93	1	0.050744	-5.40609	-13.49329	-6.05525	1.00800
94	1	0.050795	-3.54065	-14.11097	-4.45742	1.00800
95	1	0.050942	-2.36124	-13.89998	-5.75383	1.00800
96	1	0.051128	-3.09181	-11.48509	-6.01658	1.00800
97	1	0.051031	-4.25681	-11.69882	-4.70727	1.00800
98	1	0.050786	-2.37362	-12.32217	-3.13280	1.00800
99	1	0.050950	-1.20902	-12.11260	-4.44298	1.00800
100	1	0.051345	-1.94457	-9.69514	-4.69669	1.00800
101	1	0.051111	-3.08368	-9.90940	-3.36540	1.00800
102	1	0.050585	-1.17027	-10.53555	-1.82912	1.00800
103	1	0.050937	-0.03176	-10.32616	-3.16190	1.00800
104	1	0.051816	-0.77645	-7.90634	-3.39871	1.00800
105	1	0.051534	-1.87982	-8.12339	-2.03777	1.00800
106	1	0.050296	0.07655	-8.75811	-0.55727	1.00800
107	1	0.050822	1.17728	-8.53367	-1.91907	1.00800
108	1	0.053439	0.42055	-6.11393	-2.11553	1.00800
109	1	0.053515	-0.64919	-6.34657	-0.73036	1.00800
110	1	0.049342	1.35925	-7.01370	0.68296	1.00800
111	1	0.050950	2.41391	-6.72924	-0.70462	1.00800
112	1	0.062547	1.62085	-4.31680	-0.79928	1.00800
113	1	0.069005	0.59030	-4.60724	0.60560	1.00800
114	1	0.075358	3.66363	-4.93574	0.52898	1.00800
115	1	0.068077	2.65832	-5.30944	1.93728	1.00800

ATOMIC GRADIENTS

Atom Z		Gradients(kcal/mol/Angstrom)		
		x	y	z
27	29	-0.27957	0.13058	0.42557
2	6	0.20876	0.28717	0.02911
3	7	-0.05678	0.01500	-0.07985
4	8	-0.02218	-0.08337	0.06703
5	7	0.03888	0.05167	0.01010
6	6	-0.05531	0.07365	-0.20850
7	7	0.00011	0.00672	-0.00600
8	8	-0.01859	0.02392	-0.19424
9	6	-0.01610	0.02676	-0.00725
10	6	0.00607	-0.04549	0.00450
11	6	0.00892	-0.07508	0.00365
12	6	0.02367	-0.00567	-0.00225
13	6	0.01285	0.05840	0.00472
14	6	0.00746	0.09266	0.04868
15	6	0.01091	0.08424	-0.00415
16	6	-0.00473	-0.03933	-0.06567
17	6	-0.01036	-0.11186	0.01932

18	6	-0.02093	-0.03923	0.00472
19	6	-0.02408	0.09886	-0.03993
20	6	-0.05840	0.10483	-0.00857
21	6	-0.00892	-0.02193	0.03564
22	6	-0.02494	-0.14126	0.02525
23	6	-0.04462	-0.04488	-0.09221
24	6	-0.03450	0.08059	0.10554
25	8	-0.15519	-0.08422	-0.28084
26	8	-0.00628	0.02309	0.01440
1	7	0.01451	-0.10934	0.02263
28	6	0.00337	-0.00176	0.00421
29	6	0.02709	0.01139	0.03796
30	6	0.03900	0.02291	0.04191
31	6	0.03731	0.02592	-0.00512
32	6	-0.00328	0.05095	-0.02215
33	6	-0.05471	0.02925	0.00173
34	6	-0.00739	-0.05579	0.00553
35	6	0.03557	-0.02582	-0.00538
36	6	0.00745	0.01147	0.04270
37	6	0.02468	-0.00847	0.03824
38	6	-0.00284	-0.04284	0.01023
39	6	-0.05837	-0.03738	-0.05541
40	6	-0.03149	-0.03891	-0.04367
41	6	0.02250	-0.03297	-0.00158
42	6	0.06607	-0.07477	-0.06185
43	6	-0.26118	0.26729	0.32604
44	8	0.27283	-0.18725	-0.12801
45	8	-0.04683	-0.19309	-0.19410
46	1	0.15036	0.02999	-0.01614
47	1	0.06234	-0.14790	0.09490
48	1	0.00379	0.19729	-0.00619
49	1	0.06254	0.01356	0.03094
50	1	-0.08367	0.00244	0.21883
51	1	0.12601	-0.00485	0.18643
52	1	0.04428	-0.19885	-0.05669
53	1	-0.01398	-0.06419	-0.06736
54	1	0.03100	0.09258	0.03604
55	1	0.01378	0.00290	-0.07421
56	1	-0.07363	-0.01951	0.02620
57	1	0.02391	0.01298	-0.00897
58	1	0.00670	0.01714	0.03831
59	1	0.00478	0.03431	-0.00496
60	1	-0.01114	0.00919	0.01965
61	1	-0.01167	0.04760	0.02483
62	1	0.01160	0.06249	-0.02459

63	1	0.03739	0.02852	0.02965
64	1	0.01900	0.03775	0.01791
65	1	0.05743	0.00969	-0.00522
66	1	0.00255	-0.01703	0.05848
67	1	-0.03594	0.01403	-0.00777
68	1	0.00724	0.03023	-0.04555
69	1	-0.00242	0.03105	0.00922
70	1	-0.01144	-0.01317	-0.01729
71	1	0.01493	-0.01338	-0.02699
72	1	0.00702	0.03615	0.01715
73	1	-0.07224	-0.02534	0.02768
74	1	-0.00137	-0.03917	-0.05718
75	1	0.02988	-0.01182	0.01642
76	1	-0.04540	-0.00381	0.01926
77	1	-0.00032	-0.03768	-0.00946
78	1	-0.02318	-0.03299	0.00178
79	1	-0.05574	-0.04983	-0.02679
80	1	-0.02202	0.00142	-0.01853
81	1	-0.05721	0.05625	-0.03540
82	1	0.01250	-0.01749	0.02139
83	1	0.01989	-0.00570	0.04111
84	1	0.08531	-0.00489	-0.00955
85	1	0.00207	0.01748	-0.01002
86	1	0.00359	-0.01242	0.00265
87	1	0.01018	-0.00687	0.00706
88	1	0.03419	-0.00450	0.02061
89	1	0.00002	0.00445	0.01316
90	1	0.00513	-0.00682	0.03956
91	1	0.05007	0.02840	0.01901
92	1	-0.03815	0.01932	-0.02819
93	1	0.01415	-0.01226	-0.03848
94	1	-0.00766	0.03334	-0.05518
95	1	-0.04050	-0.04653	-0.02476
96	1	0.02643	-0.01996	-0.03224
97	1	-0.04035	0.03490	0.04087
98	1	-0.00742	-0.04258	0.06513
99	1	0.01308	0.01644	0.00157
100	1	-0.01125	0.00523	0.03235
101	1	0.00634	-0.01013	-0.02611
102	1	-0.01889	0.00216	-0.03129
103	1	-0.00639	-0.04230	-0.00168
104	1	-0.00202	-0.01420	0.02566
105	1	0.06181	-0.00853	0.03030
106	1	-0.00462	-0.03312	0.04333
107	1	0.00542	-0.02738	0.03295

108	1	0.04317	0.00407	-0.00837
109	1	-0.06323	-0.02389	-0.04759
110	1	-0.00191	-0.01504	-0.03322
111	1	-0.01868	0.00409	-0.03515
112	1	-0.02961	-0.05990	-0.06184
113	1	0.05491	0.02647	-0.01327
114	1	0.05045	0.04912	-0.02384
115	1	0.03642	0.00437	-0.14305

Dipole (Debyes)	x	y	z	Total
Point-Chg.	2.205	1.061	2.217	3.302
sp Hybrid	-2.149	-1.059	-1.982	3.109
pd Hybrid	-0.132	-0.054	-0.128	0.192
Sum	-0.076	-0.052	0.107	0.141

HyperChem log stop -- Mon Jun 13 16:51:37 2011.

ХУЛОСА

1. Ушбу координацион бирикмаларнинг кўпчилиги аналитик кимёда, медицинада, қишлоқ хўжалиги ва ишлаб чиқаришда кенг қўлланилмоқда. Адабиётларда амидларнинг металл карбоксилатлари ҳақида жуда оз маълумотлар келтирилган. Бундан хулоса қилиб шуни айтиш мумкинки бу синф координацион бирикмалар ҳосил бўлишининг ўзига хослиги, тузилиши, реакция қобилияти ва турли хил қўлланилаш соҳаларига кўра жуда муҳим илмий ва амалий аҳамиятга эгадир.

2. Юқорида келтирилган адабиётлар шарҳидан кўриниб турибдики амидларни турли металл тузлари билан ҳосил қилган бирикмаларига кўпгина ишлар бағишланган. Алифатик, карбон, тиокарбон, ароматик, гетероциклик кислоталар амидларини ацидолиганд сифатида галогенид, сульфат, нитрат, роданид, формиат, ацетат, тартрат гуруҳлар тутган металл билан комплекс бирикмалари синтез қилинган. Карбоксил гуруҳ металл табиатига боғлиқ ҳолда турлича координацияланиши мумкин.

3. Карбоксилатлар, айниқса турли хил амидлар тутган металл пальмитатлари, уларда иккита амид, пальмитат иони ва сувни марказий атом атрофида координацияланишини ўрганиш жуда муҳим. Демак, мис(II)-пальмитатнинг амидлар (ацетамид, карбамид, нитрокарбамид) билан комплекс бирикмаларининг синтези ва уларни таҳлил қилиш пальмитат ионини координацияланиш усуллари ва комплекс ҳосил бўлишига таъсирини ўрганишга ёрдам беради. Бундан ташқари янги биологик фаол моддалар олиш мумкин, чунки амидлар биологик фаол моддалар ҳисобланади, пальмитат иони эса кўпгина препаратлар таркибига киради.

4. Механокимёвий усулда мис(II)-пальмитатнинг 3 та комплекс бирикмалари синтез қилинди. Элемент таҳлили ёрдамида мис(II)-пальмитатнинг амидлар билан комплекс бирикмаларининг таркиби ва тузилиши ўрганилди.

5. Синтез қилинган координацион бирикмалар термик таҳлил қилиниб баъзи термолиз махсулотлари идентификация қилинди.

6. Квант-химёвий таҳлиллар натижасида синтез қилинган комплекс бирикмаларнинг фазовий тузилиши, боғ узунликлари, валент боғлар орасидаги бурчаклари аниқланди.

Фойдаланилган адабиётлар

1. Кукушкин Ю.Н. Химия координационных соединений. М.: «Высшая школа». 1985. – 413с.
2. Костромина Н. А, Кумок В.Н, Скорин Н.А. Химия координационных соединений. Москва «Высшая школа» 1990 – 340с.
3. Парпиев Н.А., Рахимов Х.Р., Муфтахов А.Г.Анорганик кимё. Тошкент «Ўзбекистон» 2000
4. Сулайманкулов К.С. Соединения карбамида с неорганическими солями. – Фрунзе: Илим. 1976.-223с.
5. Азизов Т. А. Псевдоамидо-, amino и аквакарбоксилатные координационные соединения ряда металлов.: Дис. докт.хим.наук – Ташкент: 1993.-459с.
6. Азизов О.Т. Комплексные соединения пальмитатов, олеатов, стеаратов ряда 3d-металлов с некоторыми амидами: Автореф. дис. ...канд. хим. наук. –Т.: 2006.- 22 с.
7. Сулейманова Г.Х. Особенности строения комплексных соединения пальмитатов ряда 3d-металлов с некоторыми амидами: Автореф. дис. ...канд. хим. наук. –Т.: 2006.- 22 с.
8. Половняк В.К., Саниева Д.В., Половняк С.В., Дебердеев Р.Я. Механохимический синтез пигментов на основе гексацианоферратов (II, III) 3d-элементов // Вест. Удм. Универ.- 2005.- №8.-111-116.
9. Климова В.А. Основы микрометода анализа органических соединений. – М.: Химия, 1967. – 19 с.
10. Пришибл П. Комплексоны в химическом анализе. – Москва: ИЛ. 1960. -72 с.
11. Методы химического анализа минерального сырья. М.: Недра 1966. В.Г.Сочеванов, Г.А.Волкова, Л.Т.Матынова, Н.В. Шмакова.-111с.
12. Paulik F., Paulik Y., Erdeg I., Derivatograph, I Mittelung Ein automatish registrierender Apparat Zur gleichzeitigen Ausguchrund der Differential-thermoqravimetrischen untersuchugen. // Z.Anal. Chem. 1958. V. 160 №4. P.241-250.

13. О.Т.Азизов, А.Т.Дуйсебекова, О.В.Мячина, Т.А.Азизов, Г.Г.Сулейманова, Х.М.Азизжанов, Ш.Б.Хасанов. Квантовохимическое исследование электронной структуры и реакционной способности ряда свободных и координированных молекул N, O, S – содержащих органические соединения // Академия Наук Республики Узбекистан институт химии растительных веществ имени академика С.Ю.Юнусова Конференция актуальные проблемы химии природных соединений, Сборник тезисов 12-13 октября 2010 г. г.Ташкент. С. 141-142.

14. Сулейманова Г.Г., Азизов Т.А., Мелдебекова С.У., Алимходжаева Н.Т. Смешанноамидные комплексные соединения пальмитата меди (II) // Узб.хим. журн. -Ташкент, 2007.-№6. - С. 41-46.

15. Азизов Т.А., Азизжонов Х.М., Сулейманова Г.Г., Азизов О.Т., Хасанов Ш.Б., Жуманазарова Р.Р. Смешанноамидные комплексные соединения некоторые карбоксилатов металлов // Химическая технология: Тез. докл. международной конференции по химической технологии. -Москва, 2007. Т.5. - С. 220-221.

16. Азизов. О.Т, Шарипов Х.Т, Азизов Т.А. Синтез и исследование координационных соединений солей жирных кислот с некоторыми амидами // Ўзбекистонда кимё таълими Фани ва технологияси: Тез.докл. респ. илмий-амалий конф. 28-29 ноябрь 2002.- Тошкент, 2002.- Б. 62-63.

17. Азизов О.Т., Азизов Т.А., Шарипов Х.Т. Координационные соединения стеарата меди (II) с некоторыми амидами кислот // Химия природ. соедин. – Ташкент, 2002. - спец. вып.- С. 64-65.

18. Хасанов Ш. Б. Термическое исследование смешанноамидных комплексных соединений стеарата кобальта (II). // Узб. хим. журн. – Ташкент, 2010. -№3. - С.71-74.

19. Сулейманова Г.Г., Азизов Т.А., Миркамилов Ш.М., Азизов О.Т. Дериватографическое исследование смешанноамидных комплексов пальмитата никеля (II) // Актуальные проблемы создания и использования высоких технологий переработки минерально-сырьевых ресурсов Узбекистана: Сборник

материалов Республиканской научно-технической конференции.- Ташкент, 2007. - С. 163-166.

20. Сулейманова Г.Г., Азизов Т.А., Алимходжаева Н.Т. Псевдоамидные комплексные соединения пальмитата меди (II) // Молодость и наука: от мечты к открытию: Материалы международной конференции молодых ученых.- Алмата, 2006. - С. 112-113.