

O'ZBEKISTON RESPUBLIKASI OLIY VA O'RTA MAXSUS TA'LIM  
VAZIRLIGI

AL-XORAZMIY NOMIDAGI  
URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI

Qo'lyozma huquqida

UDK 546.73.74:547.826.7: 546.171.2

NURJANOVA FAZILA FARXODOVNA

NIKEL (II) VA KOBALT (II) NIKOTINATLARINING TURLI AMIDLI  
KOMPLEKSLARI SINTEZI

5A140501-Noorganik kimyo (II)

Magistr  
akademik darajasini olish uchun yozilgan

DISSERTATSIYA

Ilmiy rahbar:

dots. SH.B. Hasanov

«    »    2016 y.

URGANCH – 2016 y.



TASDIQLANMAN  
OLIM VAZIRLIGI

-

546.73.74:547.826.7: 546.171.2

(II)

(II)

5 140501

:

. . .

«\_\_\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2016 .

6 2016 .

## OLIV VA O`RTA MAXSUS TA'LIM VAZIRLIGI

## URGANCH DAVLAT UNIVERSITETI

Fakultet Tabiiy fanlarMagistratura talabasi Nurjanova F.F.Kafedra KimyoIlmiy rahbar Hasanov Sh.B.O`quv yili 2014-2016Mutaxassisligi Noorganik kimyo

**Urganch davlat universiteti kimyo kafedrasi magistranti Nurjanova Fazila Farxodovnaning  $\delta$ Nikel (II) va kobalt (II) nikotinatlarining turli amidli komplekslari sinteziö mavzusidagi**

**MAGISTRLIK DISSERTATSIYASIGA ANNOTATSIYA**

**Mavzuning dolzarbligi:** Zamonaviy koordinatsion kimyoning qattiq jism kimyosi bo`limida ligand qurshovida N, O ódonor markazlar tutadigan metallokomplekslar muhim o`rin tutadi. Ular kompleks birikmalar kimyosida poliedrlar stereokimyosiga o`ziga xos ta`sir tufayli raqobatli koordinatsiyalanishni o`rganish uchun yaxshi modellar hisoblanadi.

Shunga bog`liq ravishda polidentat ligandlar va ular asosida talab qilingan xossali yangi avlod materiallari yaratish uchun nazariy va amaliy masalalarni yechish uchun ma`lum tarkib va tuzilishli metallokomplekslar sintez qilish muhim va dolzarb bo`ladi.

**Ishning maqsadi:** amidlar, tioamid va nikotinamidni qator metal nikotinatlari bilan koordinatsion birikmalarini hosil bo`lish sharoitlari, tarkibi va tuzilishini aniqlash; ularni tarkibini tuzilishi, termik xossalariga ta`sirini o`rganish va komplekslar xossalarini tarkibi va tuzilishiga bog`liqligini aniqlash.

**Ishning vazifalari:** oldimizga qo`yilgan maqsadga erishish uchun quyidagi vazifalarni yechish kerak edi:

- Ni(II) va Co(II) nikotinatlarining atsedamid, karbamid, tiokarbamid va nikotinamid bilan turli amidli koordinatsion birikmalarini sintez qilish;

- sintez qilingan koordinatsion birikmalarining tarkibi, tuzilishi va xossalarini taxlilni fizik-kimyoviy usullari bilan aniqlash;

- Ni(II) va Co(II) nikotinatlarining turli amidli koordinatsion birikmalarini kvant kimyoviy usullar bilan geometriyasi, energetik parametrlarini va reaksiyon qobiliyatini hisoblash;

- sintez qilingan moddalarning biologik faolligi va toksikligini tadqiq qilish.

**Tadqiqot obʻekti:** Ni(II) va Co(II) nikotinatlari, atsedamid, karbamid, tiokarbamid va nikotinamid.

**Tadqiqot predmeti:** Ni(II) va Co (II) nikotinatlarining aralash amidli koordinatsion birikmalari, biologik faollik va fizik-kimyoviy xossalar.

**Tadqiqot uslubiyoti va uslubi:** differensial termik taxlil, rentgen fazoviy taxlil, IQ- va elektron-spektroskopiya, hisoblashni kvant-kimyoviy usuli.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy jihatdan yangilik darajasi:** Ilk bor Ni(II) va Co (II) nikotinatlarining atsedamid, karbamid, tiokarbamid va nikotinamid bilan 12 ta yangi aralash amidli koordinatsion birikmalari sintez qilinadi.

Sintez qilingan birikmalarining termik xossalari oʻrganiladi va termoliz mahsulotlari aniqlanadi.

Rentgen fazaviy taxlil, IQ- va DQES-yordamida sintez qilingan birikmalarining individualligi, ligandlarni, salitsil guruhning koordinatsiyalanish usullari va koordinatsion tugunning geometriyasi aniqlanadi.

Kvant kimyoviy usullar yordamida olingan koordinatsion birikmalarining energetik parametrlari, zaryadlarni atomlarda taqsimlanishi, geometriyasi va reaksiyon qobiliyati hisoblanadi.

**Tadqiqot natijalarini amaliy ahamiyati va tadbiqu:** ilk bor Ni(II) va Co (II) nikotinatlarining ayrim amidlar va tiokarbamid bilan aralash amidli koordinatsion birikmalarini olinadi.

Ularning fizik-kimyoviy xossalari taxlil qilinadi va IQ-, DQES-spektrlar, drivatografiya, shuningdek rentgen fazoviy taxlil natijasiga asoslanib olingan birikmalarning struktura formulalari taklif qilinadi. Olingan aralash ligandli birikmalarning biologik xossalari oʻrganiladi.

Olingan natijalar 5140500-Kimyö yoʻnalishi talabalariga Koordinatsion birikmalar kimyosi va Taxlilning fizik-kimyoviy usullari kurslarini oʻqishda maʼlumotnoma sifatida foydalanilishi mumkin.

**Ishning tuzilishi va tarkibi:** Ish kirish, tadqiqot obʼekti va predmeti, tajriba qismi, olingan natijalar taxlili, umumiy xulosalar, foydalanilgan adabiyotlar roʻyxati va ilovadan iborat.

**Bajarilgan ishning asosiy natijalari:** tadqiqot mavzusi boʻyicha 1 ta maqola chop qilingan.

**Xulosa va takliflarni qisqacha umumlashgan ifodasi:** Ni(II) va Co (II) nikitinatlarining ilk bor sintez qilingan 12 ta yangi koordinatsion birikmalari tarkibi, tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalari aniqlandi. Taxlilning fizik-kimyoviy usullari va kvant-kimyoviy hisoblash yordamida sintez qilingan birikmalar tarkibi, individualligi, tuzilishi va energetik parametrlari aniqlandi.

Ilmiy rahbar:

\_\_\_\_\_

(imzo)

Magistratura talabasi

\_\_\_\_\_

(imzo)

MINISTRY OF HIGHER AND SECONDARY SPECIALIZED EDUCATION  
OF THE REPUBLIC OF UZBEKISTAN

Urgench State University

Faculty Natural science

Student magistracy Nurjanova F.F.

Department Chemistry

Scientific supervisor Hasanov Sh.B.

Academic year 2014-2016

Specialty Inorganic chemistry

**ANNOTATION MASTER DISSERTATION**

**the undergraduate chair of Chemistry Urgench State University Nurjanova Fazila Farxadovna on the Synthesis of mixed amides complexes of nickel (II) and cobalt (II) nicotinate**

**Actuality of theme:** In modern coordination chemistry in the section Solid State Chemistry, metal complexes containing N, O-donor centers ligand environment, occupy a special place. They are good models for the study problems of competitive coordination in the chemistry of complex compounds due to the specific action of their environment on the stereochemistry of polyhedra.

In this connection it is important and urgent to find ways directed synthesis of polydentate ligands and their metal complexes based on the specific composition and structure to solve theoretical and practical problems of creating a new generation of materials with predetermined properties.

**The purpose of work:** Determination of the conditions of formation, establishing the composition and structure of coordination compounds of amides, thioamides and nicotinamide nicotinate with rows of metals; study of the effect of composition on the structure, thermal behavior and the identification of the properties of complexes, depending on the composition and structure.

**Work tasks:** To achieve this goal should achieve the following tasks:

- The synthesis of coordination compounds mixed's amide nicotinate Ni (II) and Co (II) with acetamide, urea, thiocarbamide and nicotinamide;
- The establishment of the composition, structure and properties synthesized of coordination compounds by physical and chemical methods of analysis;
- Calculation of geometry, energy parameters and reactivity of complexes of salicylates mixed amide nicotinate Ni (II) and Co (II) quantum-chemical methods;
- The study of the biological activity and toxicity of the compounds synthesized.

**The object of study:** nicotinate Ni (II) and Co (II), acetamide, urea, thiourea, nicotinamide.

**Subject of study:** mixed amid coordination compounds nicotinate Ni (II) and Co (II), biological activity and physicochemical properties.

**Research methods and techniques:** differential thermal analysis, X-ray diffraction, IR and electronic - spectroscopy, quantum-chemical calculation method.

**Degree of novelty of the research results from the scientific point of view:** For the first time will be synthesized 12 new coordination compounds mixed amides nicotinate Ni (II) and Co (II) with acetamide, urea, thiocarbamide and nicotinamide.

Will research the thermal behavior of the synthesized compounds were identified and thermolysis products.

X-ray diffraction analysis, IR spectroscopy and DSR- set individually synthesized compounds, methods of coordination ligands salicylate group and the geometry of coordination unit.

Quantum-chemical methods will calculate the energy parameters, the distribution of charges on the atoms, the geometry and reaction of obtained coordination compounds.

**The introduction and practical value of the results of research:** for the first time obtained new compound mixed amides nicotinate Ni (II) and Co (II) and some amides and thiocarbamide.

Will be examined physico-chemical properties and structural formulas of the proposed compounds on the basis of IR spectroscopy DSR spectra, derivatography and XRD. Will examine the biological properties of the mixed amides complexes .

The research results can be used as reference material for courses "Coordination chemistry" and "Physical and chemical methods of analysis" in "5140500 - Chemistry".

**The structure and composition of the work:** The work consists of an introduction, the subject and object of research, experimental research, analysis of the results, general conclusions, bibliography and appendices.

**The basic results of the work:** at the topic of work published one scientific paper.

**The abbreviated generalized expression of conclusions and suggestions:** The composition of individuality and physico-chemical properties of the newly synthesized compounds 12 nicotinate mixed amides Ni (II) and Co (II). Physico-chemical methods of analysis and quantum chemical calculations to determine the composition, identity, structure and energy parameters of the synthesized compounds.

Scientific supervisor:

\_\_\_\_\_  
(signature)

MA student:

\_\_\_\_\_  
(signature)

## MUNDARIJA

Kirish	5
<b>I BOB. ADABIYOTLAR SHARHI</b>	8
1.1. Nikel va kobaltning koordinatsion birikmalari	8
1.2. Piridin karbon kislotalarning kompleks birikmalari	9
1.3. Amidlarning kompleks birikmalari	13
<b>II BOB. TAJRIBA QISMI</b>	21
2.1. Reaktivlar, tadqiqotning metodlari va analizlari	21
2.2. Ni(II) va Co(II) nikotinati sintezi	22
2.3. Ni(II) va Co(II) nikotinatini amidlar bilan aralash ligandli kompleks birikmalarning sintezi	
<b>III BOB. TADQIQOT NATIJALARI VA ULARNING TAHLILI</b>	24
3.1. Nikotinat kislota va amidlarning hamda ular asosidagi aralash ligandli kompleks birikmalarning reaksiya qobiliyatini kvant-kimyoviy oʻrganish	24
3.2. Nikel va kobalt nikotinatlarining amidlar bilan aralash ligandli kompleks birikmalarni IQ-spektroskopiya asosida oʻrganish	29
3.3. Sintez qilingan kompleks birikmalarning termik analiz usuli boʻyicha tadqiqoti	42
3.4. Kompleks birikmalarni rentgenofazoviy analiz tadqiqoti	47
<b>XULOSA</b>	56
<b>FOYDALANILGAN ADABIYOTLAR ROʻYXATI</b>	57

## KIRISH

**Magistrlik dissertatsiyasi mavzusining asoslanishi va uning dolzarbligi:** Zamonaviy koordinatsion kimyoning qattiq jism kimyosi boʻlimida ligand qurshovida N, O ódonor markazlar tutadigan metallokomplekslar muhim oʻrin tutadi. Ular kompleks birikmalar kimyosida poliedrlar stereokimyosiga oʻziga xos taʼsir tufayli raqobatli koordinatsiyalanishni oʻrganish uchun yaxshi modellar hisoblanadi.

Shunga bogʻliq ravishda polidentat ligandlar va ular asosida talab qilingan xossalari yangi avlod materiallari yaratish uchun nazariy va amaliy masalalarni yechish uchun maʼlum tarkib va tuzilishli metallokomplekslar sintez qilish muhim va dolzarb boʻladi.

**Tadqiqot obʼekti:** Nikel (II) va kobalt (II) nikotinatlarini, amidlar.

**Tadqiqot predmeti:** Nikel (II) va kobalt (II) nikotinatlarining aralash amidli koordinatsion birikmalari, fizik ó kimyoviy xossalari.

**Tadqiqot maqsadi va vazifalari:** amidlar, tioamid va nikotinamidni qator metal nikotinatlarini bilan koordinatsion birikmalarini hosil boʻlish sharoitlari, tarkibi va tuzilishini aniqlash; ularni tarkibini tuzilishi, termik xossalari taʼsirini oʻrganish va komplekslar xossalari tarkibi va tuzilishiga bogʻliqligini aniqlash.

Oldimizga qoʻyilgan maqsadga erishish uchun quyidagi vazifalarni yechish kerak edi:

- Ni(II) va Co(II) nikotinatlarining atsedamid, karbamid, tiokarbamid va nikotinamid bilan turli amidli koordinatsion birikmalarini sintez qilish;

- sintez qilingan koordinatsion birikmalarining tarkibi, tuzilishi va xossalari taxlilni fizik-kimyoviy usullari bilan aniqlash;

- Ni(II) va Co(II) nikotinatlarining turli amidli koordinatsion birikmalarini kvant kimyoviy usullar bilan geometriyasi, energetik parametrlarini va reaksiya qobiliyatini hisoblash;

- sintez qilingan moddalarning biologik faolligi va toksikligini tadqiq qilish.

**Ilmiy yangiligi:** Nikel (II) va kobalt (II) nikotinatlarining 20 ta yangi aralashamidli kompleks birikmalarining olinish usullari, tarkibi va tuzilishi aniqlangan. Spektroskopik maʼlumotlar, kvantokimyoviy hisoblashlar natijalaridan kelib chiqqan xolda amid guruhini, nikotinat ionlarini va suv molekularining koordinatsiyalanish usullari aniqlangan. Amid guruhi, nikotinat ioni va suv molekularini raqobatli koordinatsiyasini belgilovchi faktorlar aniqlangan. Kobaltli birikmalarining koordinatsion tugunini geometrik konfiguratsiyasi asoslandi. Olingan komplekslarning termik xossalari taxlil qilingan va termoparchalanishni oraliq mahsulotlari aniqlandi.

**Tadqiqot gipotezasi:** mexanokimyoviy yoʻl bilan Ni(II) va Co(II) nikotinatlarining ayrim amidlar bilan koordinatsion birikmalarini sintez qilish, sintez qilingan birikmalarining fizik-kimyoviy xossalarini oʻrganish asosida ularning strukturasi va koordinatsion tugun geometriyasini aniqlash.

**Tadqiqot mavzusi boʻyicha adabiyotlar sharxi:** T.A. Azizovning ishlarda qator oʻtish metallarini amido- va akvakarboksilatli kompleks birikmalarini sintezi qilish sharoitlari keltirilgan. Metall karboksilatlarini ayrim organik ligandlar bilan selektiv taʼsiri aniqlangan. Tebranma spektroskopiya, PMR, ESDO, RFA, RSA, EPR va termik usullar, magnitokimyoviy va kvantokimyoviy taxlillar yordamida sintez qilingan komplekslarning tuzilishi, tarkibi va oʻziga xosligi topilgan.

R. Z. Lieberman tomonidan xrom (III) tuzlarini nikotinamid bilan kompleks birikmalari sintez qilingan va fizik-kimyoviy taxlil usullari yordamida oʻrganilgan.

**Tadqiqot metodi va metodikasi:** differentsial termik taxlil, rentgen fazoviy taxlil, IQ- va elektron spektroskopiya, hisoblashni kvant-kimyoviy usuli.

**Tadqiqot natijalarining ilmiy va amaliy ahamiyati:** Keltirilgan ilmiy natijalar metallarni aralashamiodokarboksilatli koordinatsion birikmalarini boshqa amidlar, karboksilat ionlari va ularni hosilalari bilan sintez qilishda ishlatilishi mumkin. Hisoblash natijalari koordinatsion kimyoni maxsus kursida maʼlumotnoma sifatida qoʻllaniladi.

**Ishning aprobatsiyasi.** Ishning asosiy natijalari Novosibirsk shaxrida oʻtkazilgan I . konferensiyasida, shuningdek butun ukrainiya yosh olimlari va talabalari orasida xalqaro ishtirok bilan oʻtkazilgan X konferensiyada maʼruza qilingan.

**Dissertatsiya hajmi va strukturasi.** Dissertatsiya ishi kirish, adabiyotlar sharhi, tajriba qismi, natijalar va ularni taxlili, xulosalar, 140 nomdagi foydalanilgan adabiyotlar roʻyxati va ilovadan iborat. Material 151 sahifadagi kompyuter matnida bayon qilingan, \_\_\_ ta rasm va \_\_\_\_ ta jadvaldan iborat.

## I-BOB. ADABIYOTLAR SHARHI

### 1.1. Nikel va kobaltning koordinatsion birikmalari

Nikel (Niccolum) ó Ni, davriy sistemaning VIII guruhi elementi, tartib raqami 28, atom massasi 58,70. Tabiatda 5 ta barqaror izotopi uchraydi, ular 58, 60-64 lardir. 1751 yilda A. Kronshtedt tomonidan birinchi marta olingan. Yer qobig'ining  $8 \cdot 10^{-3}\%$  ni tashkil qiladi. Asosiy minerallari: pentlandit  $(\text{Fe,Ni})_9\text{S}_8$ , nikelin NiAs, garnierit  $\text{Ni}_4\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , revdinskit  $(\text{Ni, Mg})_6\text{Si}_4\text{O}_{10}(\text{OH})_8$ . Kumush ó oq rangli plastik metall; kristall panjarasi kubsimon, zichligi  $8,90 \text{ kg/m}^3$ , suyuqlanish harorati  $1455^\circ\text{C}$ , qaynash harorati  $2900^\circ\text{C}$ ,  $S_R=25,1 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$ ;  $\hat{\epsilon} N_{\text{suyuq}}=17,5 \text{ kJ/mol}$ ,  $\hat{\epsilon} N_{\text{bug'or}}=370 \text{ kJ/mol}$ . Oksidlanish darajasi +2, kamdan kam xolda +3 va +4.  $800^\circ\text{C}$  dan yuqorida oksidlanadi, suyultirilgan HCl va  $\text{H}_2\text{SO}_4$  larda sekin,  $\text{HNO}_3$  da tez eriydi, konsentrlangan nitrat kislotada passivlanadi; ishqorlar eritmalari bilan ta'xirlashmaydi, galogenlar ta'xiriga chidamli.

Nikel ammiak bilan kompleks birikmalar ammiakatlar hosil qiladi. Ko'pincha geksamminlar  $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_5]\text{X}_2$  va akvotetraamminlar  $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})_2]\text{X}_2$  hosil qiladi, bu yerda X-bir valentli anion. Ko'k yoki binafsha kristall moddalar holda bo'ladilar, eritmalarda asosan to'q-havo rangda. Ko'pchiligi suvda yaxshi eriydi, qaynatganda va kislotalar ta'xirida parchalanadi. Ammiakni nikel tuzlarini eritmalariga yoki suvsiz tuziga ta'xir qilib olinadi. Nikel ammiakatlar asosan nikelli rudalarni ammiak bilan qayta ishlashda olinadi. Akvotetraammin nitrat  $[\text{Ni}(\text{NH}_3)_4(\text{H}_2\text{O})](\text{NO}_3)_2$  elektroliz yo'li bilan nikellash komponenti hisoblanadi.

Nikel dibutilditiokarbamat  $[(\text{C}_4\text{H}_9)_2\text{NC}(\text{S})\text{S}]_2\text{Ni}$ , suyuqlanish harorati  $90^\circ\text{C}$ , suvda erimaydi, atsetonda yaxshi, spirtida chekli eriydi. Dibutilaminni  $\text{CS}_2$  ishtirokida natriy gidroksid bilan ta'xirlashtirib, olingan natriy dibutilditiokarbamatga nikel sulfat qo'shib olinadi. Butadien-stirol va butadien-nitril kauchuklarga stabilizator sifatida qo'shiladi.

Nikel dietilditiofosfat  $[\text{bis}-(\text{O},\text{O}'\text{-dietilfosforoditioato-S,S}') \text{ nikel }]$ ,  $t_{\text{suyuq}}=104-105^\circ\text{C}$ , organik erituvchilarda yaxshi, suvda yomon eriydi. Cu(II),

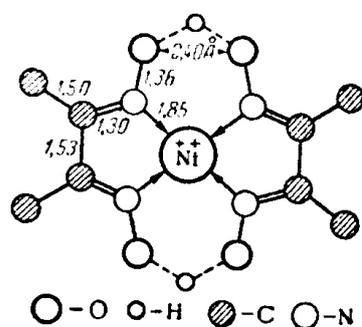
Pb(II), Cd(II), Pd(II) larni gravimetrik va titrimetrik, Cu(II), Pb(II) va Bi(III) ni ekstratsion-fotometrik aniqlash uchun reagent hisoblanadi.

Nikel 2-etilgeksanoat  $[C_4H_9CH(C_2H_5)COO]_2Ni$ . Suvda erimaydi, oʻsimlik moyi va organik erituvchilarda yaxshi eriydi. Sikkativ (sovutdagi shakli 6 toʻq-yashil eritma, 10% nikel va 74% uchmaydigan moddalar tutadi) [1].

Nikel karbonilni trifenilfosfin bilan taʼsirlashishidan  $[(C_6H_5)_3P]_2Ni(NO)Cl$  tarkibli koʻk ignasimon kristallar olinadi. Ularni paramagnit xususiyatga ega. Diamagnit shakli  $[(C_6H_5)_3P]_2Ni(NO)_2$  ham sintez qilingan.

Nikelni sianamidli kompleks birikmalari ham maʼlum. Ulardan biri bu  $Ni_2(CO)_2(NCNR_2)_2$  (bu yerda  $R-SN_3$ ) tarkibli diamagnit kompleks. U pushti-qizil rangli kristallar shaklida boʻladi, havoga sezgir, vakumda qizdirganda Ni, Co va  $(CH_3)_2NCN$  hosil qilib parchalanadi.

Nikelni bir qator sianidli komplekslari ham maʼlum. Ularga  $K_3[Ni(CN)_4]$ ,  $K_4[Ni_2(CN)_6]$  va  $K_4[Ni(CN)_4]$  lar kiradi.



Dimetilglioksim bilan ham suvda erimaydigan kompleks birikma hosil qiladi. Bu reaksiya birinchi marta L.A.Chugaev tomonidan 1906 yilda amalga oshirilgan va hozirda analitik kimyoda nikelni ochish reaksiyasi sifatida qoʻllaniladi. Bu reaksiya suv-ammiakli muhitda borib bunda suvda juda yomon eriydigan qizil choʻkma hosil boʻladi.

Nikel atsetilatsetonatlari ham mavjud boʻlib, ular kristall xolda uchraydi. Bunda uning formulasi  $[Ni(C_5H_7O_2)_2]_3$  boʻladi. Bu birikmaning suvli eritmasining beqarorlik konstantasi  $2 \cdot 10^{-11}$  ga teng.

Nikel tsiklopentadienil bilan hosil qilgan birikmasi yashil rangda boʻlib, uning tarkibi  $Ni(C_5H_5)_2$  ga mos keladi.

Nikel nitril yoki izonitrilni 6 gacha molekulasini tutishi mumkin. Nitril komplekslari quyidagi formulaga mos keladi:  $[Ni(NCCH_8)_6][NiI_4]$ . Nikel turli sonli atsetonitril tutgan birikmalar hosil qilib, ular bir-biridan rangi bilan farq qiladi:

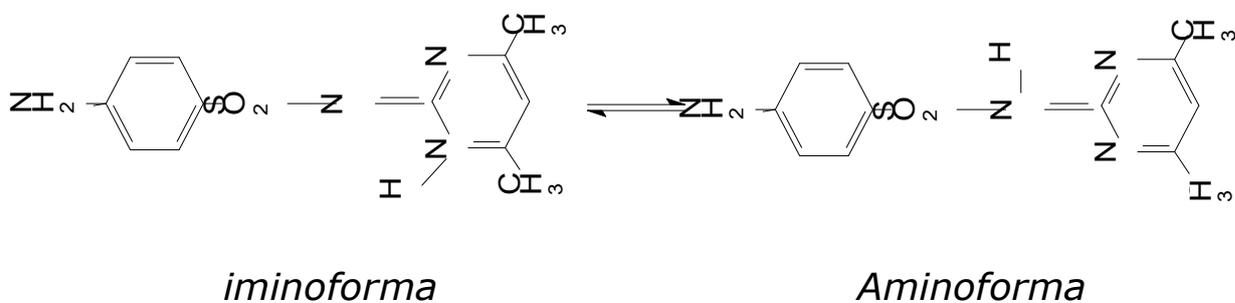
$[\text{Ni}(\text{NCCH}_3)_6](\text{ClO}_4)_2$ -toʻq-qizil,  $[\text{Ni}(\text{NCCH}_3)_4(\text{ClO}_4)_2]$  ó koʻk va  $[\text{Ni}(\text{NCCH}_3)_2(\text{ClO}_4)_2]$  ó ochiq-yashil rangli.

$\text{NiF}_3$  olish imkoniyati yoʻq, ammo  $150^\circ \text{C}$  da  $\text{NiCl}_2$  ni ftorlash natijasida qoʻngʻir rangli, havoda kuchli bugʻlanadigan  $\text{Ni}_2\text{F}_5$  tarkibli modda olingan.  $3\text{KCl} + \text{NiSO}_4$  aralashmasini  $340^\circ \text{C}$  da ftorlash natijasida  $\text{K}_3[\text{NiF}_6]$  birikma olishga muvaffaq boʻldi.

$\text{NiCl}_2$  ga  $\text{N}_2\text{O}_5$  ni moʻl miqdori bilan taʼsir qilib  $\text{NO}_2[\text{Ni}(\text{NO}_3)_4]$  tarkibli kompleks olingan. U vakuum ostida parchalanishida nikel (II)-nitrat olinadi [2].

Nikel (II) ning sulfanilamid bilan kompleks birikmalari sintezi va tadqiqoti [3] da berilgan boʻlib, kompleks birikmalarning sintez usullari, element analiz natijalari, termik xususiyatlari keltirilgan. Shuningdek donor atomlarning koordinatsiya usullari IQ-spektroskopik usulda oʻrganilgan. Nikel ligand bilan  $L_2 \cdot 3H_2O$  tarkibli kompleks hosil qiladi.

Mazkur ishda oʻrganilgan geterotsiklik sulfanilamidlar ikki xil tautomer shaklda boʻlishi keltirilgan:

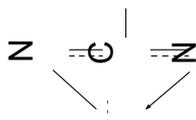


Ligand fragmentlari va funksional guruhlar ishtirokida koordinatsion bogʻ hosil boʻlishini erkin ligand va kompleks birikmalarning IQ-spektrlarini qiyoslash orqali oʻrganilgan.

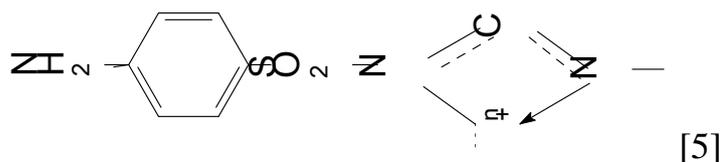
Birikmadagi birlamchi aminoguruhning valent tebranish chastotasi  $3200-3500 \text{ cm}^{-1}$ , deformatsion tebranishi esa  $1620-1640 \text{ cm}^{-1}$  sohada kuzatilgan. Metallarning ushbu ligand bilan komplekslarining spektrida valent va

deformatsion tebranish chastotalari sezilarsiz oʻzgaradi. Bu esa kompleks hosil boʻlishida  $\text{NH}_2$ -guruhi ishtirok etmasligidan dalolat beradi. Maʼlumotlarga koʻra sulfanilamid tarkibidagi imin formaning pirimidin fragmenti  $915\text{-}1000\text{ cm}^{-1}$  sohada, amin fragmenti esa  $840\text{-}870$  va  $1000\text{-}1100\text{ cm}^{-1}$  sohada intensiv chiziq beradi. Kristall holdagi kompleks spektrida imin fragmentining tebranish chizigʻi  $932\text{-}971\text{ cm}^{-1}$  sohada boʻlib, erkin ligand spektriga nisbatan  $15\text{-}35\text{ cm}^{-1}$  ga yuqori chastotali sohaga siljiydi. Bundan kelib chiqadiki, kompleks tarkibida ligand imin formada boʻladi. Kompleksning IQ-spektrida sulfon guruh ( $\text{SO}_2$ ) ning simmetrik va antisimmetrik valent tebranishi  $1129\text{-}1149$  va  $1294\text{-}1300\text{ cm}^{-1}$  sohaga mos keladi. Koordinatsiyalanishda sulfon guruh sulfoksidga oʻtmaydi. Bunda  $\nu(\text{SO}_2)$  chiziqlari spektrda kuzatilmaydi.  $\text{SO}_2$ -guruhning kompleks hosil boʻlishda qatnashishi toʻgʻrisida shu guruhning chastotalar maksimumi nisbati  $\nu_s/\nu_{as}$  boʻyicha xulosa qilish mumkin. Maʼlumki, ular orasida chiziqli koʻrinishdagi bogʻliqlik mavjud:  $\nu_s(\text{SO}_2) = 0,86\text{-}0,88\nu_{as}(\text{SO}_2)$ . Keltirilgan IQ-spektr maʼlumotlari  $\text{SO}_2$  ó guruhning koordinatsiyalanishda ishtirok etishini inkor etadi [4].

Sulfanilamidlarning kislota-asosli xossalardan kelib chiqib, shuningdek, IQ-spektroskopiya va rentgenelektron spektr natijalari asosida quyidagi tautomer shakldagi toʻrt aʼzoli xelat xalqa hosil qiladi:



Imin guruhdagi NH-bogʻi kislotaligi aminoguruhdagi NH-bogʻiga nisbatan besh barobar koʻproq. Bundan tashqari sulfoguruhning asosli xossasi uning elektrondonorlik xossasini birdan kamaytiradi. Shunga koʻra bu kompleks uchun quyidagicha tuzilish taklif etilgan.

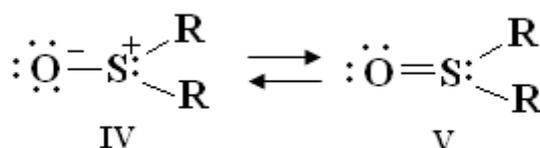


Mochevina komplekslarining IQ - spektrlarini birinchi boʻlib Penlend va uning hamkasblari oʻrgandilar. Bunda koordinatsiya kislorod yoki azot atomlari orqali boʻlinishini koʻrsatib oʻtdilar [6].

Agar koordinatsiya azot atomlari orqali sodir boʻlsa, II va III tuzilishlar kichrayadi. Bu *SO* guruhning valent tebranishlar chastotasining ortishi va *CN* bogʻi valent tebranishlar chastotasining kamayishiga bogʻliq. Agar koordinatsiya kislorod orqali sodir boʻlsa, I tuzilish kamayadi. Bunda *SO* bogʻi valent tebranishlar chastotasi kamayadi, lekin *NH* bogʻida sezilarli oʻzgarish kuzatilmaydi. *Fe(III)*, *Zn(II)*, *Cu(II)* ionlarida koordinatsiya kislorod atomlari orqali boradi.

Yamachuti va hamkasblari IQ-spektroskopiya usuli yordamida tiomochevina komplekslarida  $[(NH_2)_2CS]$  ning metallar bilan (*Rt*, *Pd*, *Zn* va *Cu*) *M-S* bogʻi hosil boʻlishini oʻrgandilar, bunda *CN*- bogʻi valent tebranishlar chastotasi ortib, *CS*- bogʻi valent tebranishlar chastotasi kamayishi, *NH*- bogʻi valent tebranishlar chastotasi oʻzgarmasligini koʻrsatib berdilar. *M-S* bogʻi valent tebranishlar chizigʻi 300-200  $sm^{-1}$  intervalida boʻlishi uzun toʻlqinli IQ - spektroskopiya aniqlandi [7].

Kotton va hamkasblari sulfoksidli komplekslarning IQ -spektrlarini oʻrganib, koordinatsiya kislorod va oltingugurt atomlari sodir boʻlishini aniqladi. Sulfoksidlarning elektron tuzilishini quyidagi rezonans gibrid tuzilish bilan koʻrsatish mumkin.



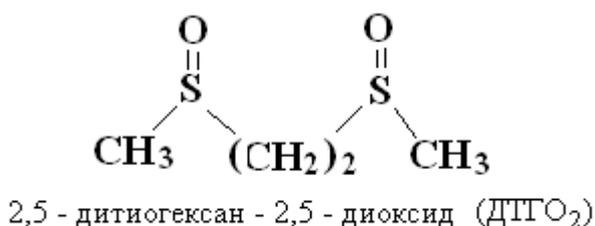
Agar koordinatsiya kislorod atomi orqali sodir boʻlsa ( $S=O$ ) bogʻi chastotasi kamayishi hisobiga V tuzilish kichiklashadi. Shunga koʻra  $Mn(II)$ ,  $Fe(II, III)$ ,  $Zn(II)$ ,  $Cu(II)$ ,  $Cd(II)$  metallari komplekslarida koordinatsiya kislorod atomi orqali sodir boʻladi [8].

Agar koordinatsiya kislorod atomi orqali sodir boʻlsa ( $S=O$ ) chastota kamayishi hisobiga V tuzilishi kichiklashadi. Shunga koʻra  $Mn(II)$ ,  $Fe(II, III)$ ,  $Ni(II)$ ,  $Cu(II)$ ,  $Zn(II)$  metallari komplekslarda koordinatsiya kislorod atomi orqali sodir boʻlib,  $DMSO$  dagi ( $S=O$ ) bogʻi chastotasi  $960-910\text{ cm}^{-1}$  sohasida kuzatiladi. Berni va Ueber  $[M(DMSO)_6]^{n+}$  ionidagi ( $MO$ ) chastotasining oʻzgarish qatorini quyidagicha koʻrsatib berdilar:

$$M = \quad Cr(III), \quad Cu(II), \quad Co(II), \quad Zn(II), \quad Fe(II), \quad Mn(II)$$

$$(MO), \text{ cm}^{-1} \quad 529 > 444 > 436 > 431 > 438 > 418$$

$[M(DTGO_2)_3]^{2+}$  da ( $M=So(II)$ ,  $Cu(II)$ ,  $Mn(II)$ ) va boshqa metallar kislorod atomi orqali koordinatsiyalanadi, shunga koʻra ( $S=O$ ) chizigʻi  $40-22\text{ cm}^{-1}$  da kuzatiladi. Erkin ligand chastotasi  $1055$  ó  $1015\text{ cm}^{-1}$  da kuzatiladi [9].



Sianokomplekslarning spektrlarini oʻrganish boʻyicha ishlar qatori va bu tadqiqotlar natijalarini Sharp, Griffit, Rigo va Turgo, Djons va Svenson ishlari umulashtiradi. ( $CN$ ) tebranishlar chastotasi metalning

- 1) elektromanfiyligi,
- 2) oksidlanish darajasi va
- 3) koordinatsion soniga bogʻliq.

$Na_2[Ni(CN)_4]$ ,  $KCN$  va  $KF$  dan iborat eritmani UB - va IK-spektrlarini oʻrganish shuni koʻrsatadiki, eritmada  $[Ni(CN)_4]^{+2}$  va  $[Ni(CN)_5]^{3+}$  ionlari muvozanatda boʻladi [10].

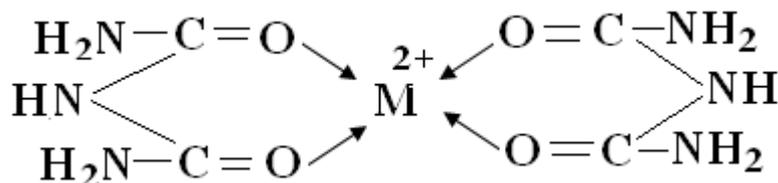
Shuningdek quyida metallarning baʼzi kislota amidlari bilan haosil qilgan kompleks birikmalari ham keltirildi. Jumladan, allofanamid amfoter birikmalar qatoriga kirib, koʻpgina komplekslar xosil qilish qobiliyatiga ega. U kuchli kislotalarning ikkilamchi tuzlari bilan kuchsiz asosli xossasini namoyon qiladi. Suvli eritmada barqaror. Shunga doir ishlarni koʻradigan boʻlsak birinchi boʻlib Shiff preparativ usulda molekulyar birikma oldi [11]. Uning umumiy formulasi quyidagicha:



bu yerda  $Me=Mn, Co, Cu, Zn, Cd, X esa Cl_2, SO_4^{2-}$

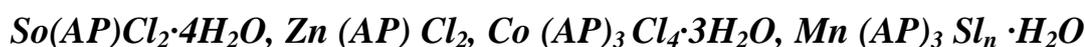
Kryuzer monografiyasida 1956 yilgacha boʻlgan oʻtuvchi metallar tuzlarining allofanamidning turli komponentlari bilan taʼsirlashishi boʻyicha bajarilgan ishlar umumlashtirilgan. Oxirgi yillardagi ishlarni umumlashtirib, shunday xulosaga kelish mumkinki, ayniqsa koʻp sonli ishlar allofanamidning mis, nikel va kobaltning galogenidlari bilan taʼsirlashishiga bagʻishlangan [12].

Mualliflar suvli eritmada sekin bugʻlatish yoʻli bilan bivalentli metall tuzlarining quyidagi komplekslarini oldilar.  $CdCl_2 \cdot 2AD$  ( $AD$ -allofanamid),  $NiCl \cdot 2AD$ ,  $SnSO_4 \cdot 2AD$ ,  $NiSO_4 \cdot 2AD$ . Olingan bu birikmalarning kristalografik maʼlumotlari rentgenstruktur tadqiqotlar yordamida olingan. Mualliflar sintez qilgan komplekslarda metall atomi bidentatli amid molekulasi bilan kislorod atomi orqali koordinatsiyalanadi [14].



Selenokarbamid tiokarbamidga oʻxshab metallar tuzlari bilan mustahkam komplekslar xosil qiladi. Birinchi boʻlib selenokarbamidning metallar tuzlari bilan kompleks xosil qilishini 1886 yil Vernail aniqladi. U  $HgCl \cdot 2CSeN_2H_4$  va  $AgCl \cdot 2CSeN_2H_4$  tarkibli komplekslarni preparativ sintez qildi [15].

E.V.Xlistunov va boshqalar individual xolatdagi  $Ca(NO_3)_2 \cdot 4CSeN_2H_4$ ,  $Ni(NO_3)_2 \cdot 4CSeN_2H_4$  birikmalarini ajratdilar. Erkin selenokarbamid va olingan  $Co(II)$  va  $Cu(II)$  birikmalarining IK - spektrlari taqqoslanganda koordinatsiya selenokarbamidagi selen atomi orqali sodir boʻlishini koʻrsatdi. Atsetonli muhitda amidopirin (AP)  $Co(II)$ ,  $Zn(II)$ ,  $Mn(II)$  va  $Su(II)$  xlorid va nitratlari bilan quyidagi tarkibli mahsulotlar xosil qiladi [16].



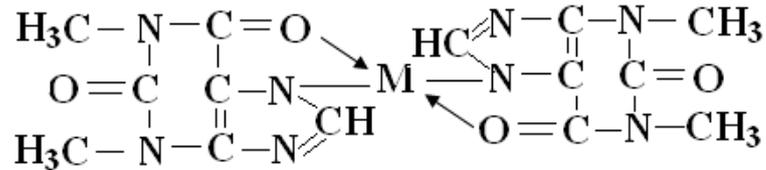
Teofillinning natriyli tuzi bilan mis (II), marganets (II), rux (II) va kobalt (II) xloridlari choʻtkasini ammiakning suvli eritmasida yuvgandan soʻng quyidagi tarkibli birikmalar xosil qiladi:



$M(teof-N)$  tarkibli kompleks birikmalarining IQ - spektrlari oʻrganilganda ( $M_r$   $Cu(II)$   $Mn(II)$   $Co(II)$   $Ni(II)$   $Zn(II)$ ) ularning tuzilishi oʻxshash ekanligi aniqlandi. Komplekslardagi ( $S=O$ ) ning past chastotali IQ - spektr chiziqlari, erkin teofillindagidan farq qiladi. Bu metallarning karbonildagi kislorod orqali

koordinatsiyalanishi bilan bogʻliq. Erkin teofillinning spektri  $3130 \text{ cm}^{-1}$  intensiv chiziqda kuzatiladi. *N-H* bogʻining valent tebranishi kompleks birikma spektridan yoʻqoladi.

Bunday oʻzgarish *N-H* bogʻidagi vodorod harakatchan boʻlib, metall bilan almashinish natijasida mustahkam 5 aʼzoli xalqa xosil boʻlishi bilan bogʻliq [17].



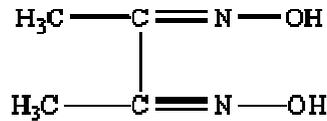
Ikki valentli metallarning xlorid va nitratlari bilan amidopirinning xosil qilgan kompleks birikmalari IQ - spektrlari oʻxshashdir. Erkin amidopirindagi karbonil guruhning valent tebranishlar chizigʻi  $1670 \text{ cm}^{-1}$  sohada joylashgan kompleks birikmalardagi bu chiziq kam chastotali sohada oʻzgaradi. Bu esa koordinatsiya karboksil guruhdagi kislorod orqali sodir boʻlishini koʻrsatadi. Amidopirinning spektri  $2785 \text{ cm}^{-1}$  sohada intensiv chiziq beradi. Bu *N-H* guruhiga bogʻliq xolda yuzaga keladi. Kompleks xosil boʻlish intensivligi chizigʻi yuqori chastotali sohada kamayadi. Bundan koʻrinib turibdiki xalqadagi uchlamchi azot ligandda metalning koordinatsiyalanishini taʼminlaydi, bunda besh aʼzoli metall xalqasi hosil boʻladi.

$\text{Ni}^{2+}$  ionlari dimetilglioksim bilan suvli eritmada, suvda yoki ammiakli suvda oz eriydigan, mineral kislotalarda eruvchan qizil iviq choʻkma hosil qiladi:

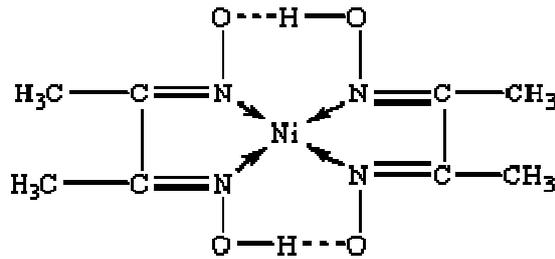


Bu tenglamada HDMG ó dimetilglioksim molekulasining ixcham formulasi. Kompleksning struktura tuzilishi quyida keltirilgan. Choʻktirish suyultirilgan, ammiakli eritmalarda pH=8-9, olib boriladi. Kompleks juda barqaror: uning barqarorlik doimiysining logarifmi  $\lg K = 17,32$ . Reaksiyaning sezgirliги juda yuqori ( $m=0,16 \text{ mg}$ ,  $V_{\text{lim}}=3 \cdot 10^5 \text{ ml/g}$ ). Dimetilglioksim suvda oz erishi sababli uning

suvda eruvchan ikki natriyli tuzini ishlatish tavsiya etiladi. Metallarning dimetilglioksim bilan hosil qilgan



komplekslarida yana murakkabroq metallik xalqalar hosil boʻladi. Masalan, nikel (II) kompleksida



Bu yerda nuqtalar bilan ichki molekulyar vodorod bogʻlar tasvirlangan. Bu neytral kompleks (nikeldimetilglioksim) suvda oz eruvchan qizil rangli birikma nikel (II) ni aniqlashda qoʻllanadi. Bu kompleks birikma lola rangli va suvda deyarli erimasligi, zaxarsizligi sababli ayollar lab ziynati (pomadalarini) tayyorlashda xam ishlatiladi. Olti aʼzolik xelat xalqali komplekslarga nisbatan besh aʼzolik xelat xalqali komplekslarning barqarorligi yuqori.

**2-jadval. Xalqsiz ammiakli va xalqali etilendiaminli nikel (II) komplekslari barqarorlik doimiylari ni solishtirish.**

Reaksiyalar	lg
$\text{Ni}^{2+} + 2\text{NH}_3 = [\text{Ni}(\text{NH}_3)_2]^{2+}$	5,0
$\text{Ni}^{2+} + 4\text{H}_3 = [\text{Ni}(\text{NH}_3)_4]^{2+}$	7,87
$\text{Ni}^{2+} + 6\text{H}_3 = [\text{Ni}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$	8,61
$\text{Ni}^{2+} + \text{En} = [\text{NiEn}]^{2+}$	7,51
$\text{Ni}^{2+} + 2\text{En} = [\text{NiEn}_2]^{2+}$	13,86
$\text{Ni}^{2+} + 3\text{En} = [\text{NiEn}_3]^{2+}$	18,28

Ish [3] da kobaltni monoetanolamin bilan kompleks birikmalari haqida maʼlumotlar keltirilgan. Unda suvli eritmalaridan oltita yangi birikma sintez qilindi, ularning uchasi uchun monokristallar oʻstirilgan; fizik-kimyoviy usullar (IQ va YaMR spektroskopiya, rentgenostruktur, termik, magnetokimyoviy, rentgenofazaviy, konduktometrik) bilan xossalari aniqlangan, tarkibi oʻrganilgan, sintez qilingan birikmalarning tarkibi, koordinatsiyalanish usuli va taxmin qilinayotgan tuzilishi koʻrsatilgan;  $[\text{Co}_2(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3(\text{HOC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3][\text{CoCl}_4]\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (I, II, III) birikma strukturasi unchalik farq qilmaydigan uchta modifikatsiyada boʻlishi aniqlangan;  $[\text{Co}_2(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3(\text{HOC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3][\text{CoCl}_4]\text{Cl} \cdot \text{H}_2\text{O}$  (I, II, III) va  $[\text{Co}(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (V) larning rangi qaytmas oʻzgarishi kuzatilgan.

$[\text{Co}(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  (V) birikma sintezi  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$  va KOH (mol nisbati 1:3) eritmalariga  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}:\text{MEA} = 1:16$  mol nisbatda MEA qoʻshib amalga oshirildi.

$[\text{Co}(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  birikmaning IQ-spektrida 3318  $\text{cm}^{-1}$  da yutilish chastotasi kuzatildi, u MEA ning ON-guruhini valent tebranishlariga tegishli.

(CO) 1036  $\text{cm}^{-1}$  dagi yutilish sohasi ligandni kislorod atomi orqali koordinatsiyalanishidan darak beradi, chunki ushbu chiziqni MEA spektriga nisbatan uzun toʻlqinli sohaga 10  $\text{cm}^{-1}$  siljishi kuzatiladi. 3280-3170  $\text{cm}^{-1}$  sohada kuzatiladigan tebranishlar (NH) guruhni assimmetrik va simmetrik valent tebranishlariga tegishli deb olingan.

$[\text{Co}(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  eritmasida kuzatilgan elektron yutilish spektrlari 27770 va 20500  $\text{cm}^{-1}$  dagi *d-d* oʻtishlarga mos keladi. Kobalt (III) ni past spinli komplekslarida spin boʻyicha ruxsat etilgan  $1A_{1g}$   $1T_{1g}$  va  $1A_{1g}$   $2T_{2g}$  oʻtishlar boʻlishi mumkin. Demak, kobalt (III) kompleksi oktaedrik boʻladi.

$[\text{Co}(\text{OC}_2\text{H}_4\text{NH}_2)_3] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  kompleksni yangi tayyorlangan suvli eritmasining elektrooʻtkazuvchanligi erituvchining elektro oʻtkazuvchanligiga deyarli teng, yaʼni kompleks noelektrolit.

Yangi bimetall komplekslar  $[Ca(BM80)22p(\backslash GS8)4]p$  i  $[Me(\ )b][2p(MS8)4]$  (Me = Co(11), Ni(11); = dimetilsulfoksid (B 80), dimetilformamid (B RL)) olingan. Tekshirilgan komplekslar spirtli eritmalarda komponentlarni stexiometrik nisbatda aralashtirib, choʻkmani ajratib va quritib olingan [4, 5]. Olingan moddalar havoda barqaror, suvda, spirtida yaxshi eriydigan; toluol, xloroform, uglerod toʻrt xloridda erimaydigan moddalar, konsentrlangan kislota va ishqorlar taʼsirida parchalanadi.

Kimyoviy taxlil gravimetrik va hajmiy usulda amalga oshirilgan. Nikel miqdori suvda dimetilglioksim bilan choʻktirib [6], kobalt ó natriy tiosulfat bilan titrlab [7], kadmiya va rux esa ó natriy sulfid bilan kadmiy sulfid va rux sulfid shaklida choʻktiriladi [8], rodanid-ion ó kumush nitrat bilan choʻktiriladi [5], uglerod va vodorod ó kislorod tokida [6].

## 1.2. Karbon kislota tuzlarini amidlar bilan koordinatsion birikmalari

[4, 53-62] ishlarida qator 3d-metallar palmatatlari atsetamid, karbamid, tiokarbamid va nikotinamidni bir jinsli komplekslar birikmalari sintezi keltirilgan. Qattiq xolda 48 ta yangi koordinatsion birikma sintez qilingan, ularni tarkibi, individualigi va tuzilishi aniqlangan. Fizik ó kimyoviy taxlil usullari bilan sintez qilingan birikmalarning markaziy atom qurshovi, ligandlarni koordinatsiyalanish usullari, termik xossalari, elektron strukturasi va reaksiya qobiliyati aniqlangan. Olingan natijalardan koʻrinib turibdiki, atsetamid, karbamid molekullari karbonil guruhi kislorodi, tiokarbamid oltingugurt atomi orqali koordinatsiyalanadi. Nikotinamid piridin xalqasidagi azotni geteroatomi orqali monodentatno koordinatsiyalanadi. Koordinatsiyalanishda yogʻ kislota anionlari mono- va bidentat ligandlar boʻladi. Diffuz qaytarilish spektrlari taxlili koʻrsatishicha atom atomi olti koordinatsiyalangan.

[63-68] ishlarda muallif tomonidan 3d-metallar oleatlarining qator amidlar bilan koordinatsion birikmalari koʻrib chiqilgan. Ilk bor kobalt (II), nikel (II), mis

(II) va rux oleatlarining 33 ta yangi aralashligandli koordinatsion birikmalari sintez qilingan. Sintez qilingan birikmalarning tuzilishi va xossalari oʻrganilgan. Spektroskopik maʼlumotlar, kvant-kimyoviy hisoblar natijasida amidlar, nikotin kislota, oleat anionlarini koordinatsiyalanish usullari aniqlangan va sintez qilingan birikmalarning tuzilishi taklif qilingan. Komplekslarni tarkibi, tuzilishi kompleks hosil qiluvchining, apikal ligandlarning, oleat guruhini va ularning koordinatsiyalanish usullariga bogʻliq boʻladi. Amidlar, nikotin kislotasi, oleat anionlari va suv molekularini raqobatli koordinatsiyalanishini belgilovchi omillar aniqlandi. Olingan komplekslarni termik xossalari oʻrganildi va termoparchalanishni oraliq mahsulotlari identifikatsiyalandi. Kobalt, nikel va mis birikmalarining geometrik konfiguratsiyasi asoslandi.

3d-metallarni psevdamidatsetatli kompleks birikmalari [2, 69-73] ishda koʻrib chiqilgan. Sintez qilish usullari ishlab chiqildi, 41 ta psevdamidatsetatli koordinatsion birikmalarning tuzilish va xossalari aniqlandi. Barcha spektroskopik maʼlumotlar, kvant-kimyoviy xisob natijalaridan kelib chiqib amidlar molekulari, atsetat anionlarini koordinatsiyalanish usuli aniqlangan va sintez qilingan birikmalarning tuzilishi taklif qilingan.

[74-85] ishlar muallifi tomonidan ikki valentli kobalt, nikel va misning psevdamidopalmitatning kompleks birikmalari olingan. Olib borilgan ishlar natijasida sintez sharoitlari ishlab chiqildi, qattiq xolda 30 ta yangi kompleks birikma ajratib olindi. Sintez qilingan birikmalarning tarkibi, individualligi, termik xossasi va tuzilishi aniqlandi. Spektroskopik taxlil asosida atsetamid, karbamid va nitrokarbamid karbonil guruhi kislorodi orqali, tiokarbamid oltingugurt atomi orqali, nikotinamid esa xalqadagi azot geteroatomi orqali koordinatsiyalanishi aniqlandi. Palmitin kislota anioni bidentat koordinatsiyalanadi. Diffuz qaytarilish spektrlari taxlili yordamida So(II), Ni(II) va Cu(II) olti koordinatsiyali boʻlishi aniqlandi.

Kvant kimyoviy usul bilan ikki valentli kobalt, nikel va mis palmitatlarining 5 ta koordinatsion birikmalarini elektron strukturasi va reaksiyon qobiliyati

aniqlangan. Komplekslarni hisoblangan hosil boʻlish issiqliklari asosida eng qulay shakllari taklif qilindi. Donor atomlar tabiatiga bogʻliq ravishda markaziy atomning oʻzi xosligi aniqlandi.

Kompleks birikmalarning termik xossalari metall tabiatiga, markaziy atom qurshoviga va kompleks tarkibiga bogʻliq boʻladi.

Biologik faollikni oʻrganish asosida yangi polifunksional taʼsirga ega gʻoʻza stimulyatori AS-2005 topildi.

### **1.3. Koordinatsion birikmalarning mexanokimyoviy sintezi**

Moddalarni suyuq yoki gazsimon xolatga oʻtkazmasdan quruq texnologik operatsiyalar yordamida qattiq fazada reaksiya olib borish hamisha tadqiqotchilar eʼtiborini jalb qilib kelgan. Qattiq fazali sintezni asosiy kamchiligi bu anʼanaviy jarayonga nisbatan past tezligi boʻladi. Bundan tashqari, qattiq fazali reaksiyada hosil boʻladigan mahsulot qatlami dastlabki reagentlarni ajratadi, jarayonni kinetik rejimdan diffuz oʻtkazadi. Qattiq fazali jarayonlarni intensivatsiyalash uchun qoʻllaniladigan odatiy usullar (reaksiya haroratini oshirish va jarayon davomida reaksiya aralashmani davriy ravishda ishqalash) hamisha ham qulay emas, chunki maqsadga muvofiq boʻlmagan qizdirish tufayli keraksiz oʻzgarishlarga olib kelishi mumkin (termik parchalanish, dezaktivatsiya, yuqori haroratli polimorf shaklga oʻtish). Shuning uchun qattiq fazali reaksiyalarni intensivatsiyalashni muqobil usullari izlanmoqda. Ulardan birisi qattiq reagentlarni mexanik faollashtirish hisoblanadi. Bunda aralashma komponentlari orasida kimyoviy jarayon borishi uchun yaxshi sharoitlar yaratiladi, chunki mexanik qayta ishlashda moddalar gʻalayonlashgan xolatga keladi, yoki qattiq fazali reaksiyaning oʻzi mexanokimyoviy taʼsir vaqtida boradi. Aralashmaga mexanik taʼsir vaqtida reagentlar orasidagi kontaktlar soni ortadi, va kontaktlar maydoni oshadi. Zarrachalar orasida paydo boʻladigan siljish kuchlanishlari mahsulotni kontaktlashuv sohasidan koʻchishiga va yana reagentlar orasida bevosita reaksiya

borishiga moyillik qiladi. Bundan tashqari ishqalanish natijasida issiqlik ajralishi kontaktli suyuqlanishga olib kelishi yoki metall sistemalar va molekulyar kristallar sistemalarida jarayonni jadallashtirishi mumkin boʻladi [86].

Maydalovchi apparatlar ishlatadigan zamonaviy texnologiyalarni rivojlanishi intensiv mexanik taʼsirlar hisobiga kristall materiallar olish muammosini dolzarb qildi. Zamonaviy sanoat texnologiyalarida mexanik energiyadan foydalanish va uni koʻpgina xollarda qoʻllash moddalarni turli texnologik operatsiyalarga tayyorlashni zarur bosqichi hisoblanadi. Turli xom ashyo va materiallar katta miqdorda kimyoviy, metallurgik, oziq-ovqat va boshqa korxonalarda mexanik ishlovga uchratiladi. Energiyani maydalash jarayonlarida uzatishni eng koʻp tarqalgan va samarali usuliga zarbli ó siljituvchi taʼsir kiradi, chunki aynan u mexanik energiyani ishlanayotgan moddaning maʼlum kristall strukturalariga toʻplash imkonini beradi [87-90]. Zamonaviy (sharli, oqimli va vibrotegirmonlar, bolgʻali, zarbli-diskli va boshqa dezintegratorlar) maydalovchi qurilmalarning koʻpchiligida zarbli-siljituvchi taʼsir amalga oshiriladi. Mexanik energiyani maydalanayotgan moddaga uzatish imkoniyati koʻp darajada tegirmon konstruktsiyasi shuningdek maydalash sharoitlariga, masalan, maydalagichni harakatdagi qismlari tezligiga, chastotasiga va amplitudasiga bogʻliq boʻladi. Bunday sharoitlarda oʻrganilgan moddalar xossalari nafaqat amaliy, balki ilmiy qiziqish ham uygʻotadi, chunki kuchli deformatsiyalar sharoitida moddalarni kristall strukturasi barqarorligi kabi savollarga javob beradi. Mexanokimyoviy faollashtirish natijasida maydalash jarayoni samaradorligi va materialni kimyoviy xossalarini oʻzgarishi kimyoviy bogʻ tabiati va moddalarni kristall panjara strukturasi bilan belgilanadi [91].

## **2-BOB. TAJRIBA QISMI**

### **2.1. Reaktivlar, qurilmalar, taxlil va tadqiqot usullari**

Ushbu tadqiqotni bajarish jarayonida kompleks birikmalar sintez qilish uchun ikki valentli metallarni quyidagi tarkibli atsetatlari ishlatildi:

$\text{Co}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot 4\text{N}_2\text{O}$ ,  $\text{Ni}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot 4\text{N}_2\text{O}$  «chda» yoki «xch» markali. Ligandlar sifatida o'chdaö markali atsetamid ( $\text{SN}_3\text{SONH}_2$ ), karbamid ( $\text{SO}(\text{NH}_2)_2$ ), tiokarbamid [ $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$ ], nikotinamid ( $\text{S}_6\text{N}_6\text{N}_2\text{O}$ ) olindi. Sintez qilingan kompleks birikmalarda metall miqdori [135] ga mos ravishda olib borildi. Azot Dyumani mikrometodida [136], uglerod va vodorod kislorod oqimida yondirib aniqlandi. Sintez qilingan kompleks birikmalarni individualligini aniqlash uchun **Cu-antikotodli DRON-2,0** qurilmasida rentgenogrammalar olindi [137]. Tekisliklararo masofalarni hisoblash uchun [138,139] jadvallari qo'llanildi, chiziqlarni nisbiy intensivligi  $J/J_1$  esa eng yuqori refleksi maksimumiga nisbatan foizlarda ifodalandi.

Yutilishni IQ ó spektrlari **Specord-75 IR (400-4000 $\text{cm}^{-1}$  va RUE va NiCAM (400-4000 $\text{cm}^{-1}$ )** spektrofotometriada namunalarni **KVr** bilan presslash metodikasi bo'yicha olib borildi.

Diffuz qaytarilishni elektron spektrlari (DQES) SPECORD M-40 qurilmasida 5000-11000  $\text{cm}^{-1}$  sohada qayd qilindi.

Molekulalarni kvant-kimyoviy hisoblash MO LKAO usuli bilan MNDO va AM-1 yaqinlashuvda to'liq optimallashtirish bilan olib borildi.

Termik taxlil Paulik-Paulik-Erdey [140] tizimidagi derivatografda 10 grad/min tezlikda va namuna massasi 0,1 g bo'lganda, galvanometrlar sezgirligi T-900, TG-100, DTA-1/10, DTG-1/10 da yozildi. Yozish atmosfera sharoitida suv nasosi yordamida gaz muhitni chiqarish yo'li bilan amalga oshirildi. Tutuvchi sifatida 7 mm diametrli qopqoqsiz platina tigeli ishlatildi. Etalon sifatida  $\text{Al}_2\text{O}_3$  olindi.

## 2.2. KOBALT ( II) NIKOTINATINI IKKI TURLI AMID TUTGAN KOORDINATSION BIRIKMALARINI SINTEZ QILISH

Kompleks  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{K} \cdot \text{N}_2\text{O}$  0,5628 g  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 4\text{N}_2\text{O}$  dan 0,1802 g karbamid va 0,1772 g atsetamid bilan xona haroratida agat xovonchada 3 soat davomida ishqalab olindi

Birikma  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{N}_2\text{O}$  ham mos ravishda sintez qilingan:

0,5628 g.  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 4\text{N}_2\text{O}$  0,1772 g. atsetamid va 0,2284 g tiokarbamid bilan agat xovonchada xona haroratida 3 soat ishqalanadi.

$\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2,5\text{N}_2\text{O}$  sintez qilishda 0,5628 g  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 4\text{N}_2\text{O}$  0,1772 g atsetamid va 0,3664 g nikotinamid bilan agat xovonchada xona haroratida 3 soat davomida taʼsirlashtirildi.

Kompleks  $\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{N}_2\text{O}$  agat xovonchada 0,1802 g karbamid va 0,2284 g tiokarbamid bilan taʼsirlashishidan sintez qilindi.

$\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{ANK} \cdot 3\text{N}_2\text{O}$  tarkibli birikmani olish uchun 0,5628 g kobalt nikotinat tetragidrat 0,3664 g nikotinamid va 0,1802 g karbamid bilan xona haroratida agat xovonchada 3 soat davomida ishqalandi.

$\text{So}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{ANK} \cdot 3\text{N}_2\text{O}$  tarkibli birikma 0,2884 g tiokarbamid va 0,3664 g nikotinamid taʼsirlashdi.

Sintez qilingan birikmalarning kimyoviy taxlil natijalari jadval 2 da keltirilgan.

Jadval 2.1.

**Kobalt nikotinatining atsetamid, karbamid, nitrokarbamid, tiokarbamid va nikotinamid bilan kompleks birikmalarining element taxlili natijalari**

Birikma	Me, %		S, %		N, %		C, %		H, %	
	Topildi	Hisoblandi								
So(Nk-N) <sub>2</sub> ·2AA·2K·N <sub>2</sub> O	9,80	9,84	-	-	20,01	20,04	38,13	38,64	4,94	5,01
So(NK-N) <sub>2</sub> ·2AA·2TK·2H <sub>2</sub> O	9,80	9,68	10,6	10,51	18,90	18,39	36,00	35,47	4,50	4,93
So(HK-H) <sub>2</sub> ·2AA·2AHK·2,5H <sub>2</sub> O	8,10	8,31	-	-	16,00	15,77	47,48	47,32	4,80	4,93
So(NK-N) <sub>2</sub> ·2TK·2ANK·3H <sub>2</sub> O	7,79	7,83	8,64	8,50	18,60	18,59	41,70	41,44	4,60	4,52
So(HK-H) <sub>2</sub> ·2K·2TK·2H <sub>2</sub> O	9,87	9,65	10,6	10,48	23,03	22,92	31,64	31,43	4,50	4,58
So(Nk-N) <sub>2</sub> ·2K·2ANK·3N <sub>2</sub> O	8,25	8,18	-	-	19,50	19,42	43,20	43,27	4,70	4,72

Kompleks Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2AA·2K·5H<sub>2</sub>O 0,5628 g Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·4N<sub>2</sub>O dan 0,1802 g karbamid va 0,1772 g atsetamid bilan xona haroratida agat xovonchada 3 soat davomida ishqalab olindi

Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2AA·2TK·4H<sub>2</sub>O 0,5628 g. Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·4N<sub>2</sub>O 0,1772 g. atsetamid va 0,2284 g tiokarbamid bilan agat xovonchada xona haroratida 3 soat ishqalanadi.

Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2AA·2ANK·2H<sub>2</sub>O sintez qilishda 0,5628 g Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·4N<sub>2</sub>O 0,1772 g atsetamid va 0,3664 g nikotinamid bilan agat xovonchada xona haroratida 3 soat davomida taʼsirlashtirildi.

Kompleks Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2K·2TK·4H<sub>2</sub>O agat xovonchada 0,1802 g karbamid va 0,2284 g tiokarbamid bilan taʼsirlashtirishidan sintez qilindi.

Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2K·2ANK·2,5H<sub>2</sub>O tarkibli birikmani olish uchun 0,5628 g nikel nikotinat tetragidrat 0,3664 g nikotinamid va 0,1802 g karbamid bilan xona haroratida agat xovonchada 3 soat davomida ishqalandi.

Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2TK·2ANK·H<sub>2</sub>O tarkibli birikma 0,2884 g tiokarbamid va 0,3664 g nikotinamid taʼsirlashtirdi.

Sintez qilingan birikmalarning kimyoviy taxlil natijalari jadval 2 da keltirilgan.

Jadval 2.2.

**Nikel nikotinatining atsetamid, karbamid, nitrokarbamid, tiokarbamid va nikotinamid bilan kompleks birikmalarining element taxlili natijalari**

Soedinenie	Me, %		S, %		N, %		C, %		H, %	
	Topildi	Hisoblandi								
$\text{Ni}(\text{Nk-H})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{K} \cdot 5\text{N}_2\text{O}$	9,71	9,35	-	-	17,54	17,75	34,40	34,23	5,67	5,71
$\text{Ni}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{TK} \cdot 4\text{N}_2\text{O}$	9,30	9,11	10,01	9,93	17,29	17,37	33,90	33,50	5,62	5,27
$\text{Ni}(\text{Nk-H})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2\text{N}_2\text{O}$	8,19	8,42	-	-	15,95	15,98	47,90	47,93	4,76	4,85
$\text{Ni}(\text{Nk-H})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{TK} \cdot 4\text{N}_2\text{O}$	9,43	9,08	10,13	9,90	21,96	21,65	30,39	29,69	5,31	4,95
$\text{Ni}(\text{Nk-H})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2,5\text{N}_2\text{O}$	8,17	8,29	-	-	19,73	19,67	43,73	43,82	4,95	4,63
$\text{Ni}(\text{Nk-H})_2 \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{ANK} \cdot \text{N}_2\text{O}$	8,48	8,19	9,36	8,93	19,79	19,53	44,33	43,53	4,32	4,19

Sintez qilingan birikmalarning element taxlilida metall miqdori [93,94] boʻyicha, vodorod va uglerod miqdori kislorod tokida yoqib aniqlandi (jadval 2.1., 2.2.).

### **III-BOB. TAXLIL NATIJALARI VA UNING MUXOKAMASI**

Ushbu bobda marganets (II), kobalt (II), nikel (II), rux va mis (II) atsetatni ikkita amid: atsetamid, karbamid, tiokarbamid, nitrokarbamid va nikotinamid bilan sintez qilingan koordinatsion birikmalarining taxlil natijalari keltirilgan. Simob atsetatni kompleksi uchun benzamid va salitsilamid ishlatilgan.

Diffuz qaytarilishni elektron spektrlari, IQ-spektroskopiya, shuningdek rentgenofazaviy, derivatografik taxlil va kvant-kimyoviy xisoblash kabi spektral taxlil usullari yordamida olingan natijalar muhokamasi keltirilgan.

#### **3.1. Kobalt (II) va nikel (II) nikotinatlarining turli amidli koordinatsion birikmalarini rentgenfazaviy taxlili**

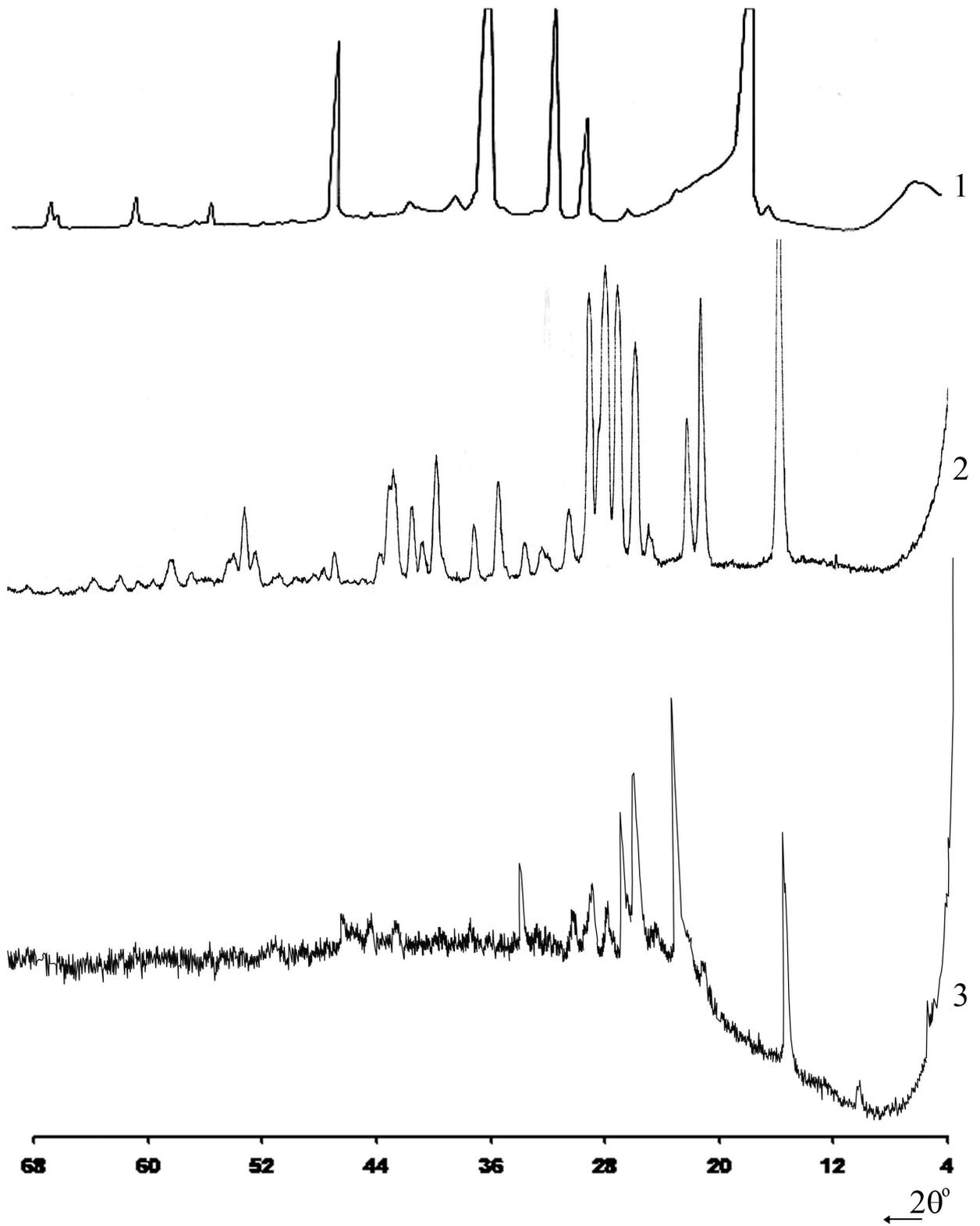
Difraksion usullar kristallni atom panjarasida sodir boʻladigan, boshqa usullar aniqlay olmaydigan oʻzgarishlarni qayd qilishga qodir. Struktur tadqiqotlar ahamiyati juda katta.

Amalda kukunlarni rentgen fazaviy usuli keng tarqalgan. Rentgenfazaviy taxlil muammolariga kristall fazalarni identifikatsiyalash usullari sifatida juda koʻp maqolalar, sharxlar, monografik nashrlar bagʻishlangan (turli qoʻllanmalar va oʻquv qoʻllanmalari). Ushbu usul hozirgi kunda boshqa rentgen usullariga koʻra keng tarqalgan. Bunga sabab, koʻpgina tabiiy va sintetik, texnik muhim materiallar koʻpincha polikristall xolida boʻladi, va faqat shu xolatda ularni strukturasi oʻrganish mumkin [99].

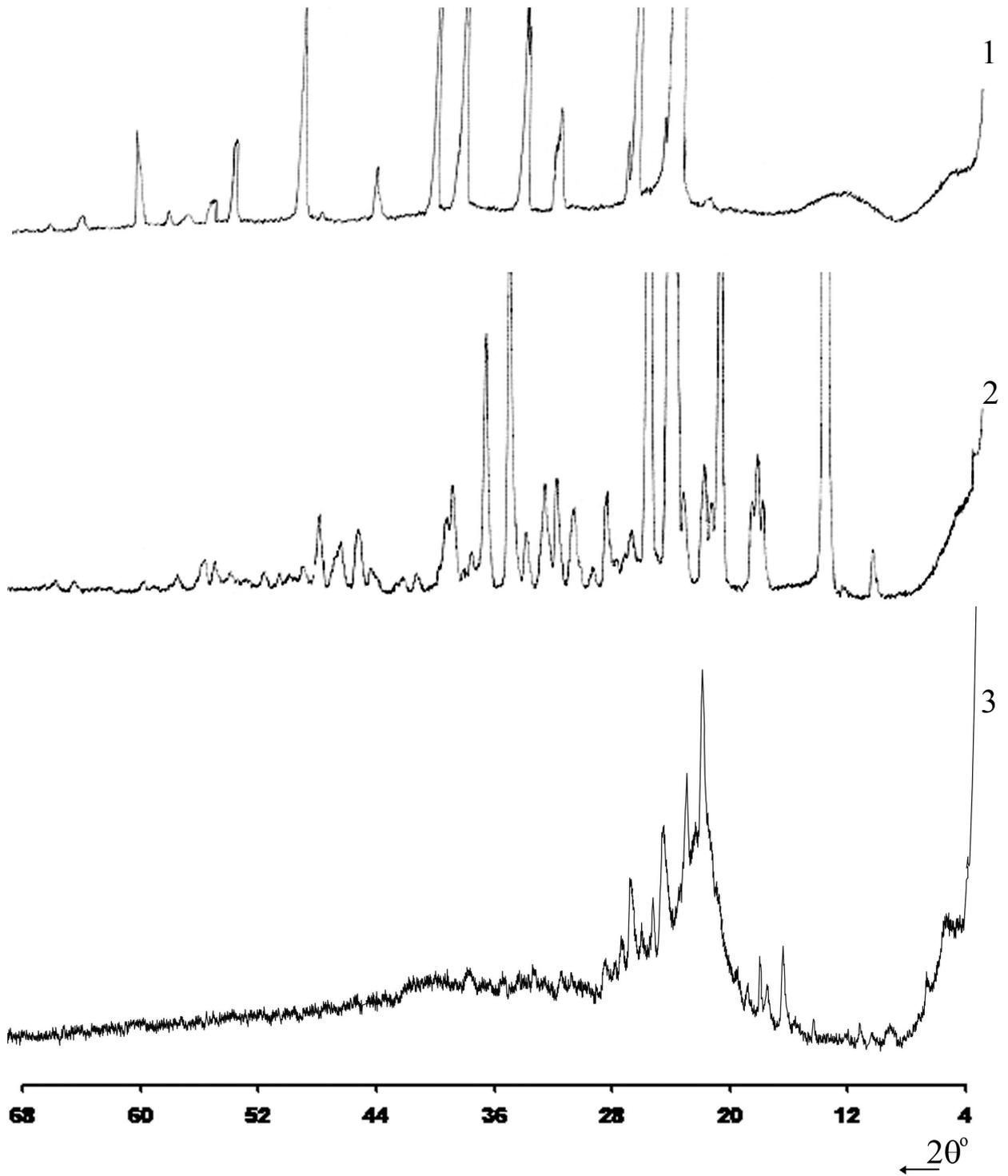
Yuqoridagilardan kelib chiqib, sintez qilingan birikmalarni identifikatsiyalash uchun erkin ligandlar molekulari va metall nikotinatlarini, shuningdek sintez qilingan moddalarni rentgenfazaviy taxlilini olib bordik.

Ligandlar va sintez qilingan moddalarni tekisliklararo masofa va nisbiy intensivligini taqqoslash uchun nisbiy intensivligi 15% dan yuqori boʻlgan tekisliklararo masofalarni tanladik.

Erkin ligandlar molekulari va sintez qilingan moddalarning difraktogrammalarini taqqoslash natijasida ular mos kelmasligi aniqlandi, bu esa sintez qilingan birikmalar individual, dastlabkilardan farq qiluvchi kristall panjalarga ega ekanligini bildiradi.



Ris. 3.1. Rentgenogramm .  $\text{CH}_3\text{CONH}_2$  (1),  $\text{NS}_5\text{H}_4\text{SOOH}$  (2),  
 $\text{So}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2\alpha\text{CH}_3\text{CONH}_2\alpha\text{NS}_5\text{H}_4\text{SONH}_2\alpha\text{H}_2\text{O}$  (3)



**Ris. 3.2. Rentgenogramm** :  $\text{SO}(\text{NH}_2)_2$  (1),  $\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$  (2),  
 $\text{Ni}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot \text{SO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  (3)

### 3.2. Kobalt (II) va nikel (II) nikotinatlarining turli amidli koordinatsion birikmalarining IQ-spektrlari

Erkin ligandlar molekularining IQ-spektrlari quyidagi yutilish chastotalariga ega boʻladi ( $\text{sm}^{-1}$ )[100]:

Atsetamid: 3377- ( $\text{NH}_2$ ), 3191-2 ( $\text{NH}_2$ ), **1669-** (**C=O**), 1612- ( $\text{NH}_2$ ), (**CO**), **1396-** (**CN**), 1354- ( $\text{CH}_3$ ), 1150- ( $\text{NH}_2$ ), 1047- ( $\text{CH}_3$ ), 1005- (**C-C**), 872- (**C-C**), 582- (**NCO**) i 465- (**CCN**).

Karbamid: 3448- <sub>as</sub>( $\text{NH}_2$ ), 3348 <sub>s</sub>( $\text{NH}_2$ ), 3263-2 ( $\text{NH}_2$ ), **1685-** (**S=O**), ( $\text{NH}_2$ ), 1623- ( $\text{NH}_2$ ), (**CO**), **1464-** (**CN**), 1153, 1061- ( $\text{NH}_2$ ), 1005- (**CN**), 788-2 ( $\text{NH}_2$ ), 583- (**NCO**) i 557- (**NCN**).

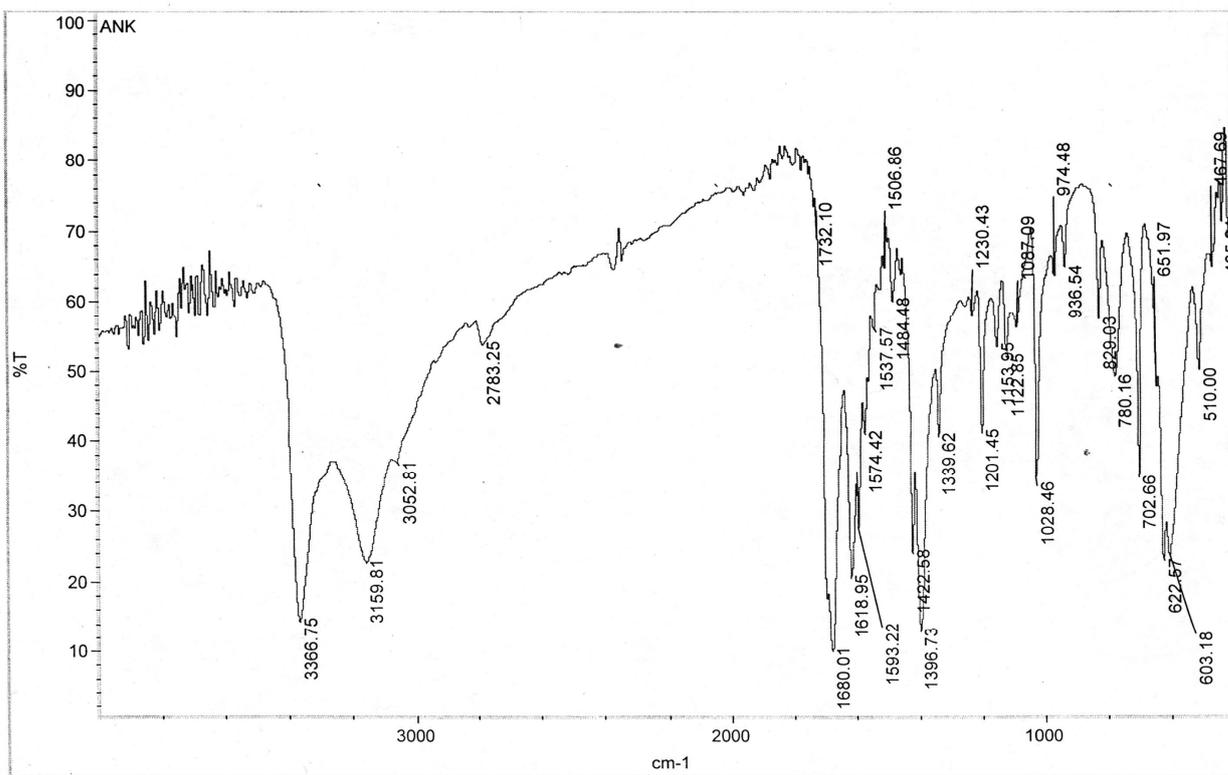
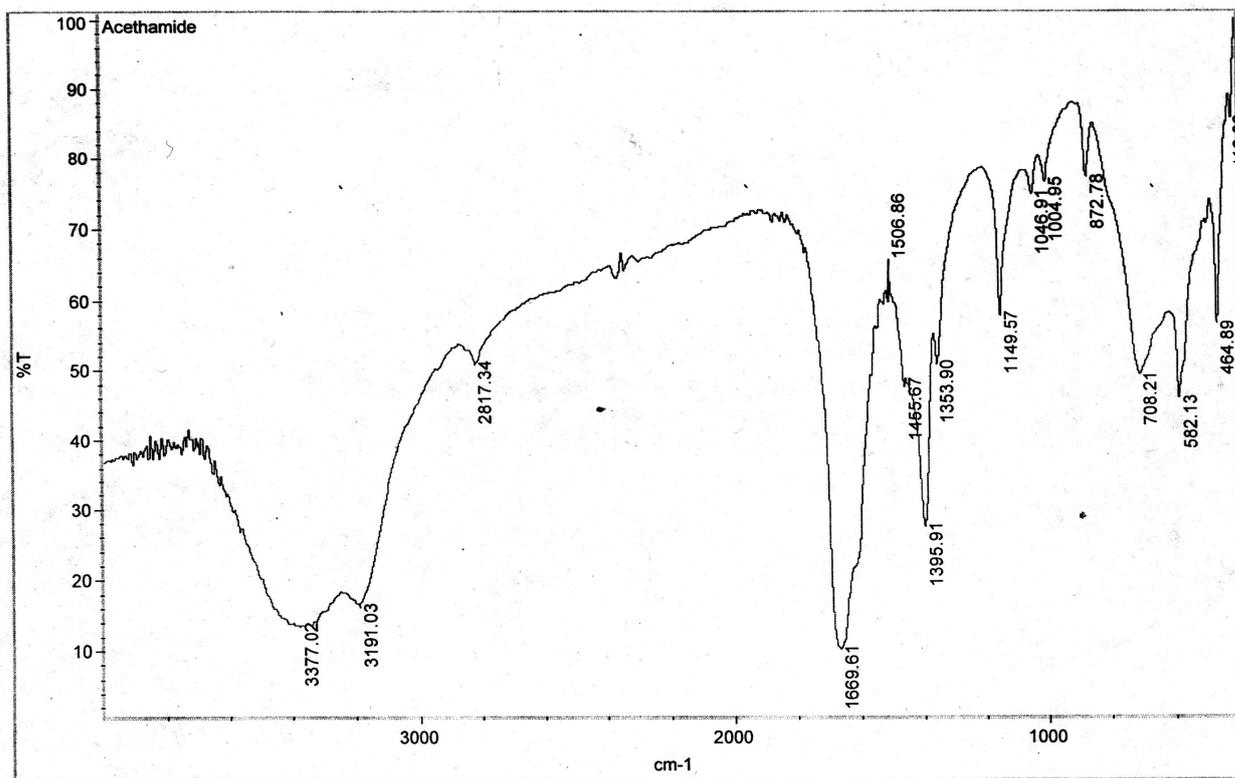
Tiokarbamid: 3365- <sub>as</sub>( $\text{NH}_2$ ), 3260- <sub>s</sub>( $\text{NH}_2$ ), 3167-2 ( $\text{NH}_2$ ), 1631-2 ( $\text{NH}_2$ ), (**NNC**), 1468- (**CN**), **1431-** (**CS**), 1093- (**CN**), 780- ( $\text{NH}_2$ ), **726-** (**CS**), **621-** (**CS**), (**NCS**), 485- (**NCN**) i 459- (**NCS**).

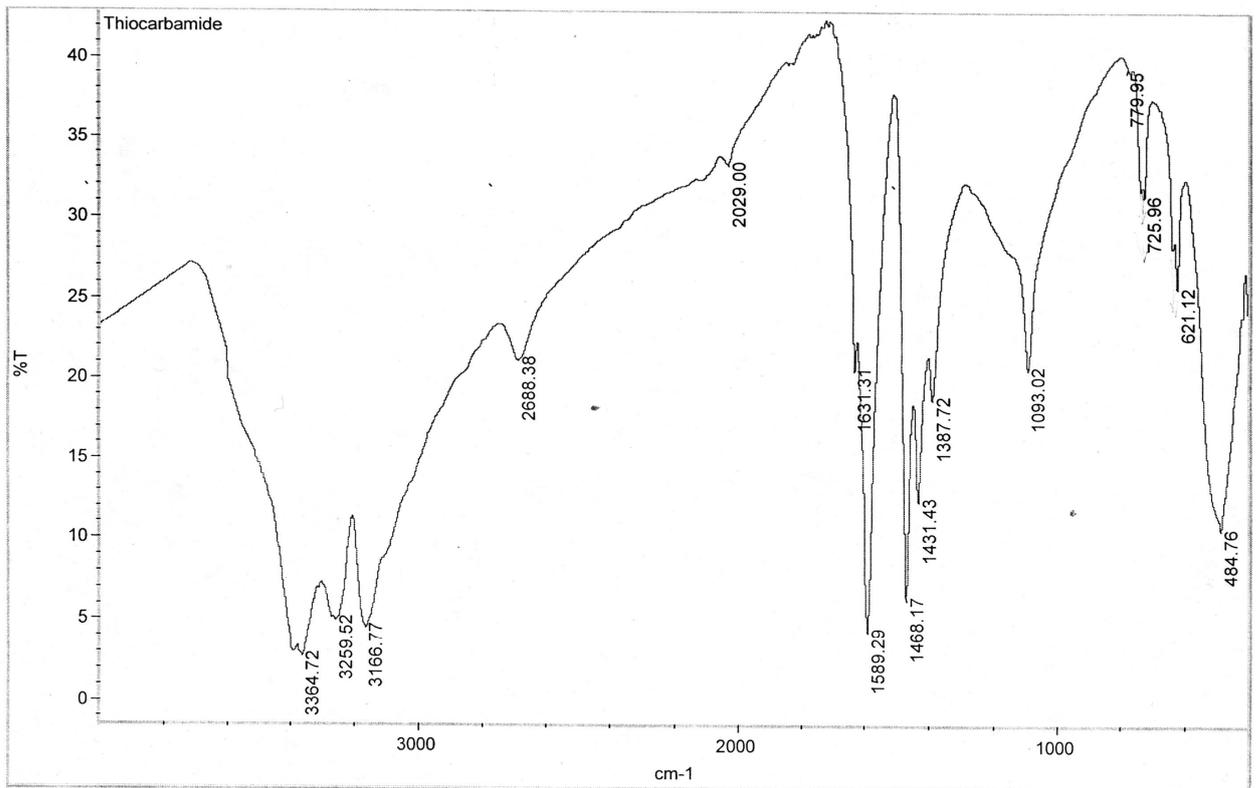
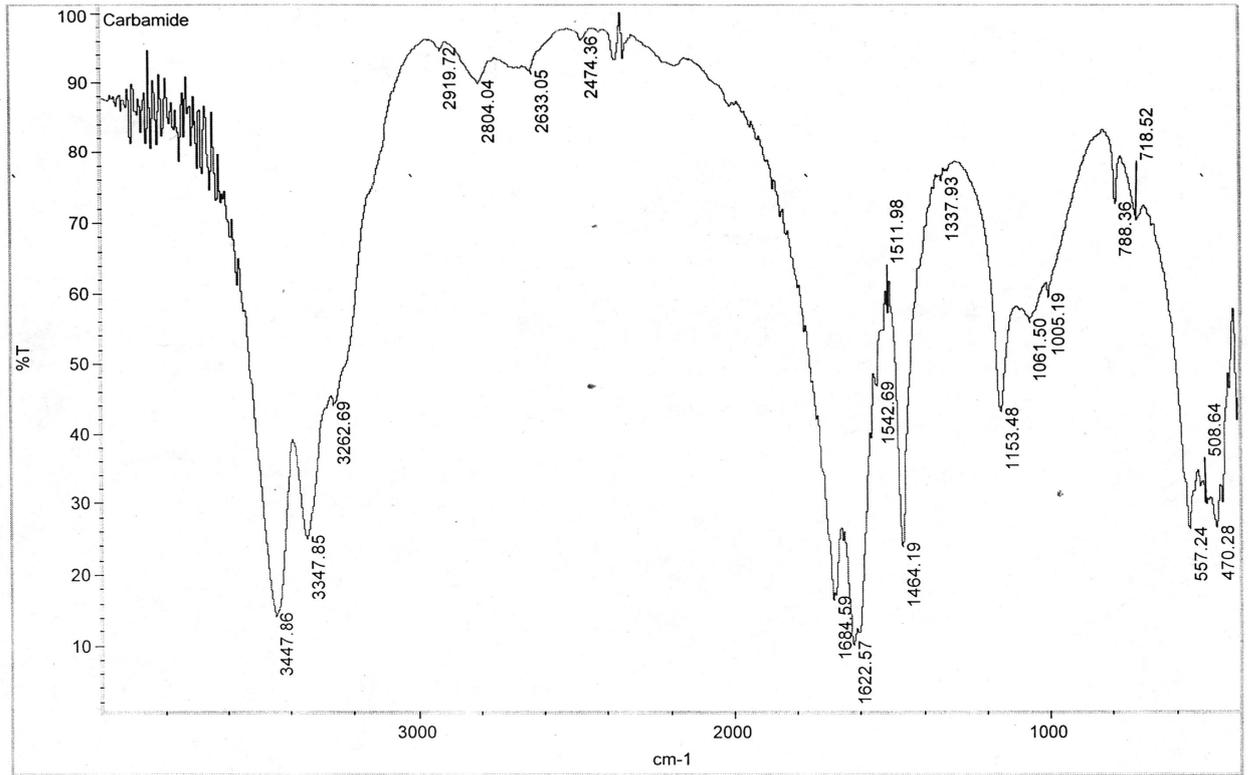
Nikotinamid: 3367- ( $\text{NH}_2$ ), 3160-2 ( $\text{NH}_2$ ), 3053- (**CN**), 1680- (**S=O**), 1619- ( $\text{NH}_2$ ), **1593-** <sub>k</sub>, 1574- <sub>k</sub>, 1484, 1423- <sub>k</sub>, (**SCN**), 1397, 1340- (**CN**), (**SCN**), 1201- (**SCN**), 1154, **1123-** (**NH<sub>2</sub>**), (**SCN**), 1087- (**SCN**), (**SO**), 1028- <sub>k</sub>, (**SCN**), 974- (**SS**), 829- (**SS**), (**SCS**), 780, **703-** (**SCN**), (**SO**), 623, 603- (**SO**), (**SNS**), 510- (**SO**), (**SCS**).

Atsetamid, karbamid, tiokarbamid, nikotinamid va ularning kobalt (II) va nikel (II) nikotinatlarining aralashligandli birikmalarining IQ-spektrlarini taqqoslashda koordinirlangan xolatga oʻtganda amidlarning ayrim chastotalarini qiymatlari oʻzgarishi kuzatiladi. Shuni ham aytish kerakki, kobalt (II) nikotinatini aralashligandli komplekslarini spektrlari murakkabligi tufayli ayrim kuzatilgan chastotalarni mos guruhlarini tebranishlariga bogʻdash imkoni boʻlmadi. Ammo yuqori sezgir qurilmadan foydalanish va spektrlarni chuqur taxlil qilish natijasida koordinatsiyalangan molekularni xarakteristik chastotalari oʻzgarishini baholash, buning natijasida amidlarni koordinatsiyalanish usullarini aniqlash imkoni tugʻildi.

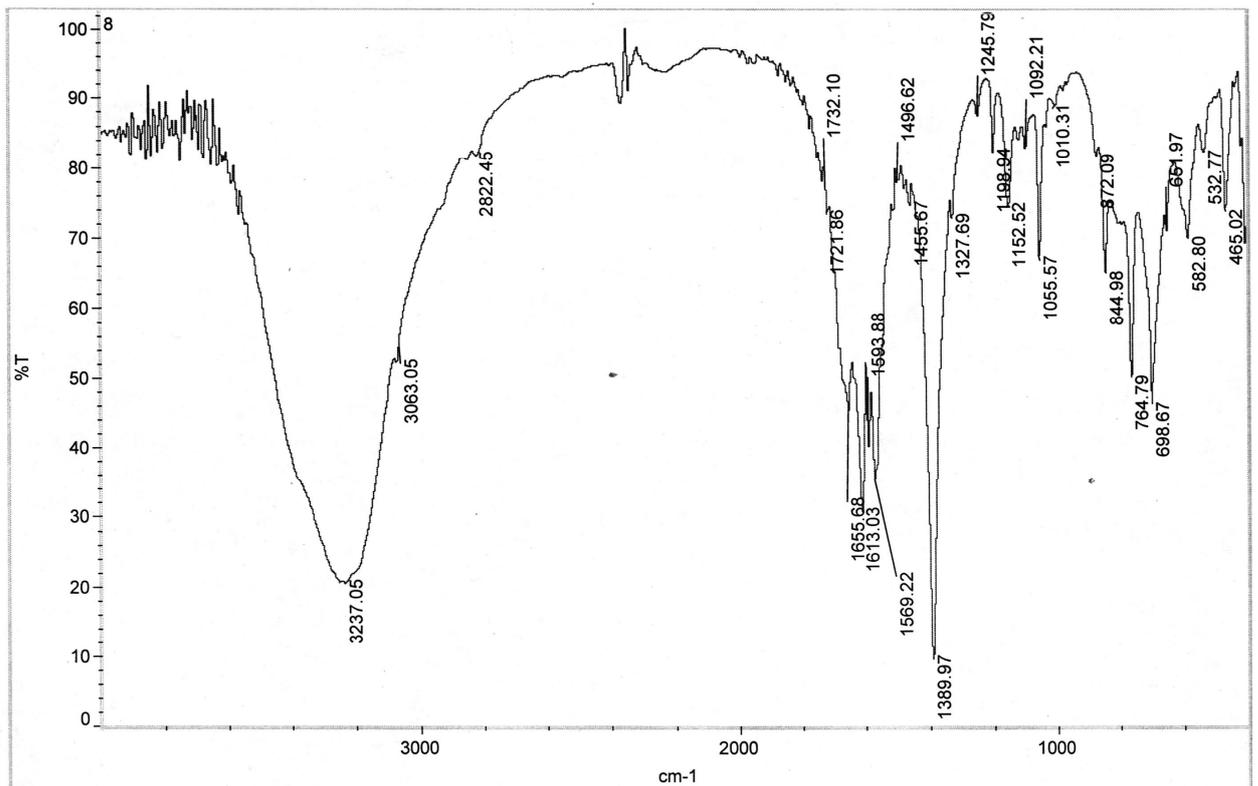
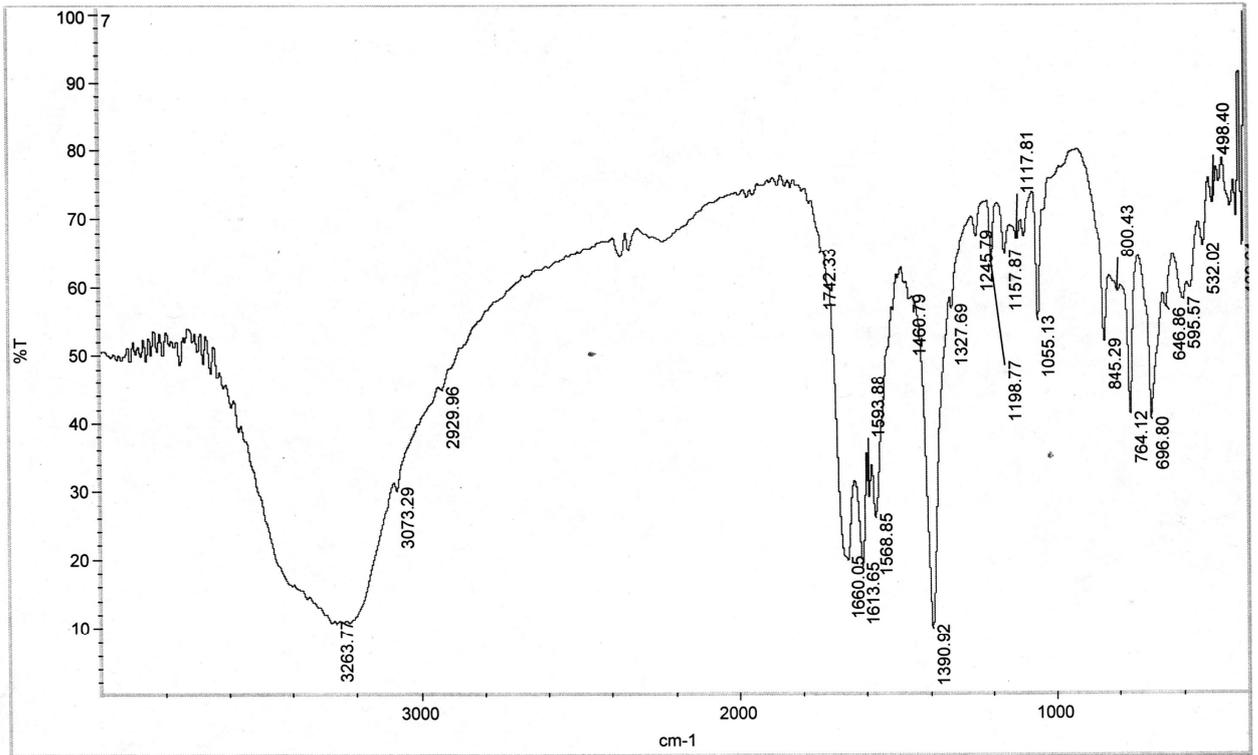
Kobalt (II) va nikel (II) nikotinatlarining atsetamidli va karbamidli komplekslarida **S=O** bogʻning valent tebranishlari  $2-28 \text{ sm}^{-1}$  va  $8-52 \text{ sm}^{-1}$  ga pasaysa, mos ravishda atsetamid va karbamid uchun S-N bogʻning valent tebranishlari AA, K uchun  $4-44 \text{ sm}^{-1}$  va  $3-37 \text{ sm}^{-1}$  ga oshadi. Bu esa koordinatsiyalanish karbonil guruhini kislorod atomi orqali borishini koʻrsatadi. Tiokarbamidli komplekslarda  $1413 \text{ sm}^{-1}$  da chastota oʻzgarishini kuzatish imkoniyati yoʻq, chunki u nikotinat guruhining keng chizigʻi bilan qoplanadi. Ammo spektrni past chastotali sohasida  $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$  ning  $730$  va  $630 \text{ sm}^{-1}$  dagi chastotalarini  $11-60 \text{ sm}^{-1}$  va  $18-62 \text{ sm}^{-1}$  ga pasayishi kuzatiladi. Spektrda chastotalarning bunday oʻzgarishini faqat tiokarbamid markaziy atom bilan oltingugurt orqali koordinatsiyalanishi bilan tushuntirish mumkin. Nikotinamidda xalqani  $703 \text{ sm}^{-1}$  dagi tebranish chastotasi parchalanadi, bunda bir vaqtda mos ravishda  $14-62 \text{ sm}^{-1}$  va  $2-59 \text{ sm}^{-1}$  ham ortishi ham pasayishi kuzatiladi. Ushbu oʻzgarishlar nikotinamid markaziy atom bilan piridin xalqasi azoti orqali koordinatsiyalanishidan darak berishi mumkin.

$3200-3500 \text{ sm}^{-1}$  dagi yutilish chastotalari molekulada kristallizatsion suv borligini isbotlaydi. Shuningdek komplekslarni IQ-spektrlarida  $1563-1617 \text{ sm}^{-1}$  va  $1368-1407 \text{ sm}^{-1}$  sohada ikkita intensiv chiziqlar kuzatilib, ular karboksil guruhni assimetrik va simmetrik tebranishlariga mos keladi.  $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-) - \nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$  qiymati  $170-210 \text{ sm}^{-1}$  mos keladi va karboksil guruhni monodentat koordinatsiyalanishiga guvoxlik qiladi.

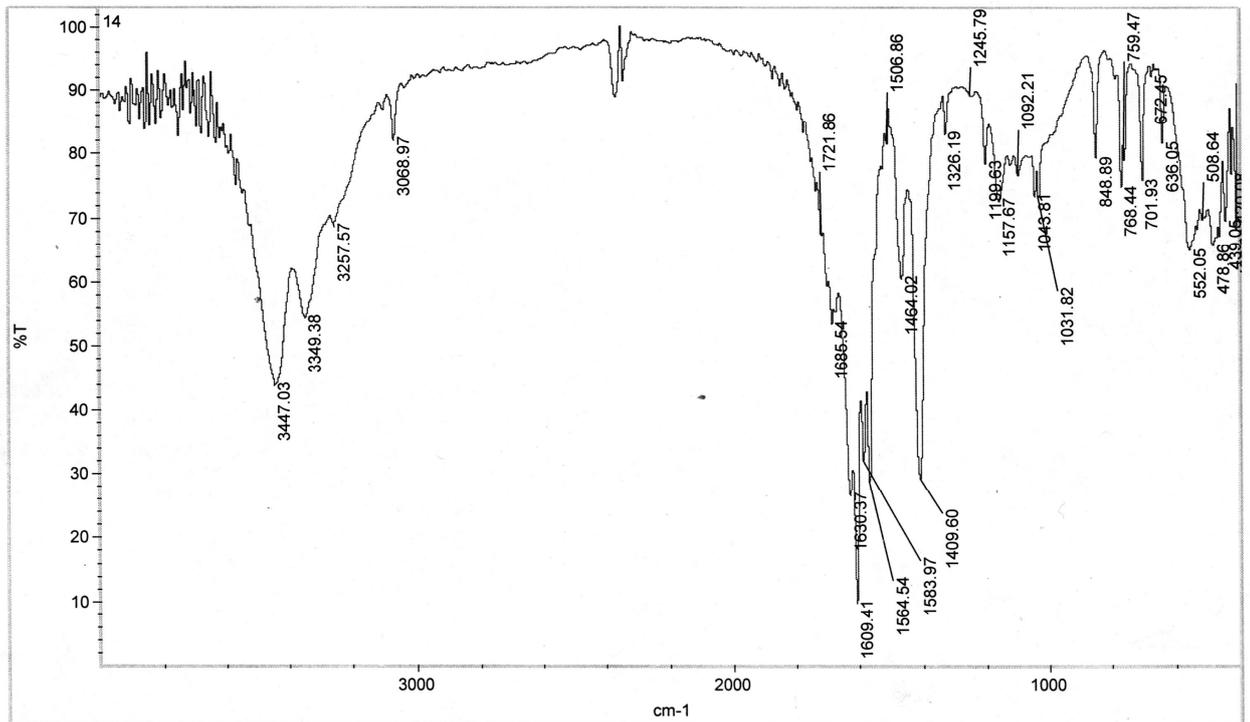
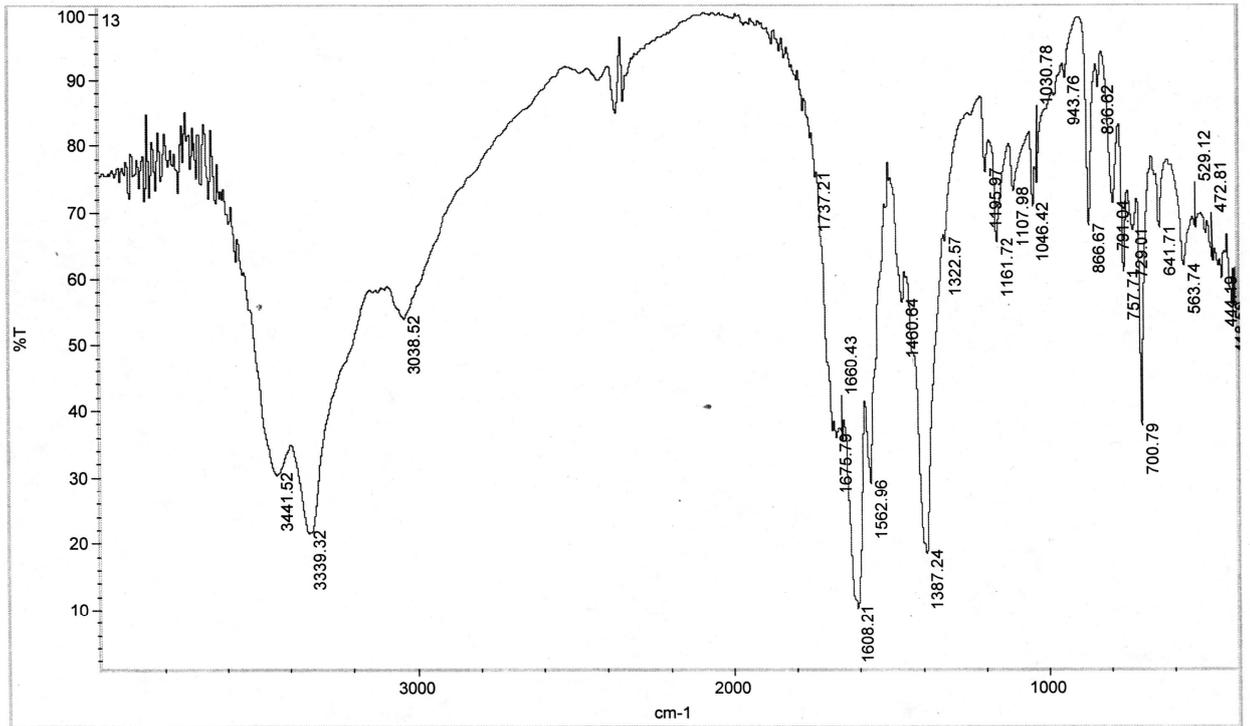




**Rasm 3.x: Erkin ligandlar molekulari IQ-spektrlari**



Rasm 3.x: Kobalt niconitani komplekslarini IQ-spektlari



**Rasm 3.x: Nikel nikonitani komplekslarini derivatogrammalari**

### 3.3. Kobalt (II) va nikel (II) nikotinatinining turli ligandli koordinatsion birikmalarini termik xossalari

$\text{So}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{K} \cdot \text{H}_2\text{O}$  105, 140, 237 i  $380^\circ\text{C}$  endotermik va 460 i  $572^\circ\text{C}$  da ekzotermik effektlarga ega. Birinchi endoeffektни boʻlishi  $\text{N}_2\text{O}$  ni yoʻqolishi bilan bogʻliq. Keyingi endotermik effektlar karbamid molekulasini bosqichli parchalanishiga va atsetamidni chiqib ketishiga hamda atsetat guruhlarni parchalanishiga mos keladi. Uchta ekzotermik effektlar tabiati kompleksni organik qismini parchalanishini tugashiga va termolizni gazsimon mahsulotlarini yonishiga mos keladi. Termolizni ohirgi mahsuloti  $\text{Co}_2\text{O}_3$  boʻladi.

$\text{Co}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  derivatogrammasini DTA egrisida toʻrtta endotermik effekt 120, 140,  $254^\circ\text{C}$  da va ekzotermik effektlar 324, 446, 571 va  $684^\circ\text{C}$  da aniqlangan. Birinchi ikki endoeffektни boʻlishi ikki molekula suvni chiqib ketishi bilan bogʻliq. Keyingi endoeffektlar tiokarbamidni, atsetamidni va atsetat guruhni parchalanishi va chiqib ketishiga mos keladi. Birinchi toʻrtta ekzotermik effekt xarakteri organik ligandlarni parchalanishi tugashiga va kobalt sulfid hosil boʻlishiga mos keladi. Oxirgi ekzoeffektни paydo boʻlishi kobalt sulfidni havo kislorodi bilan taʼsirlashishi hisobiga kobalt sulfat hosil boʻlishi bilan bogʻliq.

$\text{Co}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  kompleksni qizdirish egrisi 78, 120 va  $146^\circ\text{C}$  dagi endotermik effektlar va 248, 310, 394 va  $598^\circ\text{C}$  dagi ekzotermik effektlar bilan xarakterlanadi. Birinchi endotermik effekt ikki molekula suv ajralishi bilan paydo boʻladi. Keyingi endoeffektlar atsetamid, nikotinamid va nikotinat guruhlarni chiqib ketishi va parchalanishi bilan boradi.  $394^\circ\text{C}$  dagi intensiv ekzoeffekt kompleksni parchalanishini tugashiga va termoparchalanish mahsulotlarini yonishiga mos keladi. Oxirgi kam intensiv ekzoeffektlar termoliz mahsulotlarini fazaviy oʻtishlariga mos keladi.

$\text{Co}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  kompleks birikmaning qizdirish egrisi 101, 138, 230 va  $266^\circ\text{C}$  dagi endotermik effektlar va 300, 441 va  $584^\circ\text{C}$  dagi ekzotermik

effektlar bilan xarakterlanadi. Birinchi ikki effektni paydo boʻlishi  $2N_2O$  ni bosqichli ajralishi bilan bogʻliq. Keyingi endotermik effektlar tabiati karbamid, tiokarbamid va atsetat guruhlarni parchalanishiga mos keladi.  $441^{\circ}C$  dagi ekzoeffekt termoliz mahsulotlarini yonishiga va kobalt sulfidi hosil boʻlishiga mos keladi. Oxirgi ekzotermik effekt kobalt sulfidni xavo kislorodi bilan taʼsirlashuviga mos keladi.

$Co(NK-N)_2 \cdot 2K \cdot 2ANK \cdot 3H_2O$  kompleksni qizdirish egrisi  $137, 257$  va  $332^{\circ}C$  dagi endotermik effektlar va  $456$  va  $534^{\circ}C$  dagi ekzotermik effektlar bilan xarakterlanadi. Birinchi endotermik effekt uch molekula suv ajralishi bilan paydo boʻladi. Keyingi endoeffektlar atsetamid, nikotinamid va nikotinat guruhlarni chiqib ketishi va parchalanishi bilan boradi.  $456^{\circ}C$  dagi intensiv ekzoeffekt kompleksni parchalanishini tugashiga va termoparchalanish mahsulotlarini yonishiga mos keladi. Oxirgi kam intensiv ekzoeffektlar termoliz mahsulotlarini fazoviy oʻtishlariga mos keladi.

$Co(NK-N)_2 \cdot 2TK \cdot 2ANK \cdot 3H_2O$  kompleksni qizdirish egrisi  $100, 134, 180$  va  $228^{\circ}C$  dagi endotermik effektlar va  $292, 386, 476$  va  $582^{\circ}C$  dagi ekzotermik effektlar bilan xarakterlanadi. Birinchi ikki endotermik effekt uch molekula suvni bosqichli ajralishi bilan paydo boʻladi. Keyingi endoeffektlar atsetamid, nikotinamid va nikotinat guruhlarni chiqib ketishi va parchalanishi bilan boradi.  $386^{\circ}C$  dagi intensiv ekzoeffekt kompleksni parchalanishini tugashiga va termoparchalanish mahsulotlarini yonishiga mos keladi. Oxirgi kam intensiv ekzoeffektlar termoliz mahsulotlarini fazoviy oʻtishlariga mos keladi.

$Ni(NK-N)_2 \cdot 2AA \cdot 2K \cdot 5H_2O$   $135, 156, 216$  va  $380^{\circ}C$  endotermik va  $460$  i  $572^{\circ}C$  da ekzotermik effektlarga ega. Birinchi ikki endoeffektning boʻlishi  $5N_2O$  ni bosqichli yoʻqolishi bilan bogʻliq.  $90-120^{\circ}C$  harorat oraligʻida TG egrisi boʻyicha massa yoʻqotilishi  $13,65\%$ , hisoblangan  $13,61\%$ . Keyingi endotermik effektlar karbamid molekulasini bosqichli parchalanishiga va atsetamidni chiqib ketishiga hamda nikotinat guruhlarni parchalanishiga mos keladi. Uchta ekzotermik effektlar

tabiati kompleksni organik qismini parchalanishini tugashiga va termolizni gazsimon mahsulotlarini yonishiga mos keladi.

$\text{Ni}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{TK} \cdot \text{H}_2\text{O}$  birikma derivatogrammasi DTA sida 120, 170, 224, 263 va  $328^\circ\text{C}$  endoeffektlar va 453, 540 va  $574^\circ\text{C}$  da ekzoeffektlar kuzatilgan. Birinchi ikki endoeffekt suv molekulasini chiqishiga mos keladi. Uchinchi endoeffekt kompleksni suvsizlanishini bildiradi.  $224^\circ$ ,  $263^\circ$  dagi endoeffektlar va  $453^\circ\text{C}$  dagi ekzoeffekt atsetamid molekulasini chiqib ketishi, tiokarbamidni koordinatsiyalangan molekulasini va bogʻlangan atsetat guruhlarini parchalanishi bildiradi.  $540^\circ\text{C}$  dagi ekzoeffekt termolizni gazsimon mahsulotlarini yonishiga mos keladi.  $574^\circ\text{C}$  da intensiv ekzoeffekt hosil boʻlgan nikel sulfidni havo kislorodi bilan taʼsirlashib nikel sulfatga oʻtishini bildiradi [142].

$\text{Ni}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{AA} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  birikmaning qizdirish egrilari 98, 190, 254 va  $294^\circ\text{C}$  dagi endoeffektlar va 442, 518 va  $576^\circ\text{C}$  dagi uchta ekzotermik effektlar bilan xarakterlanadi. Birinchi endoeffektни paydo boʻlishi ikki molekula suv ajralishi bilan boradi. Keyingi ikki endoeffekt koordinatsiyalangan atsetamid molekulasini chiqishiga mos keladi.  $254^\circ$  va  $294^\circ$  da endoeffektlar boʻlishi nikotinat guruhni va koordinatsiyalangan nikotinamidni parchalanishiga bogʻliq boʻladi.  $442^\circ\text{C}$  dagi intensiv ekzotermik effekt boʻlishi kompleks molekulasini organik qismi parchalanishi tugashiga va termolizni gazsimon mahsulotlarini yonishiga mos keladi. Oxirgi kam intensiv ekzoeffekt termoliz mahsulotini havo kislorodi bilan taʼsirlashuvi hisobiga boradi.

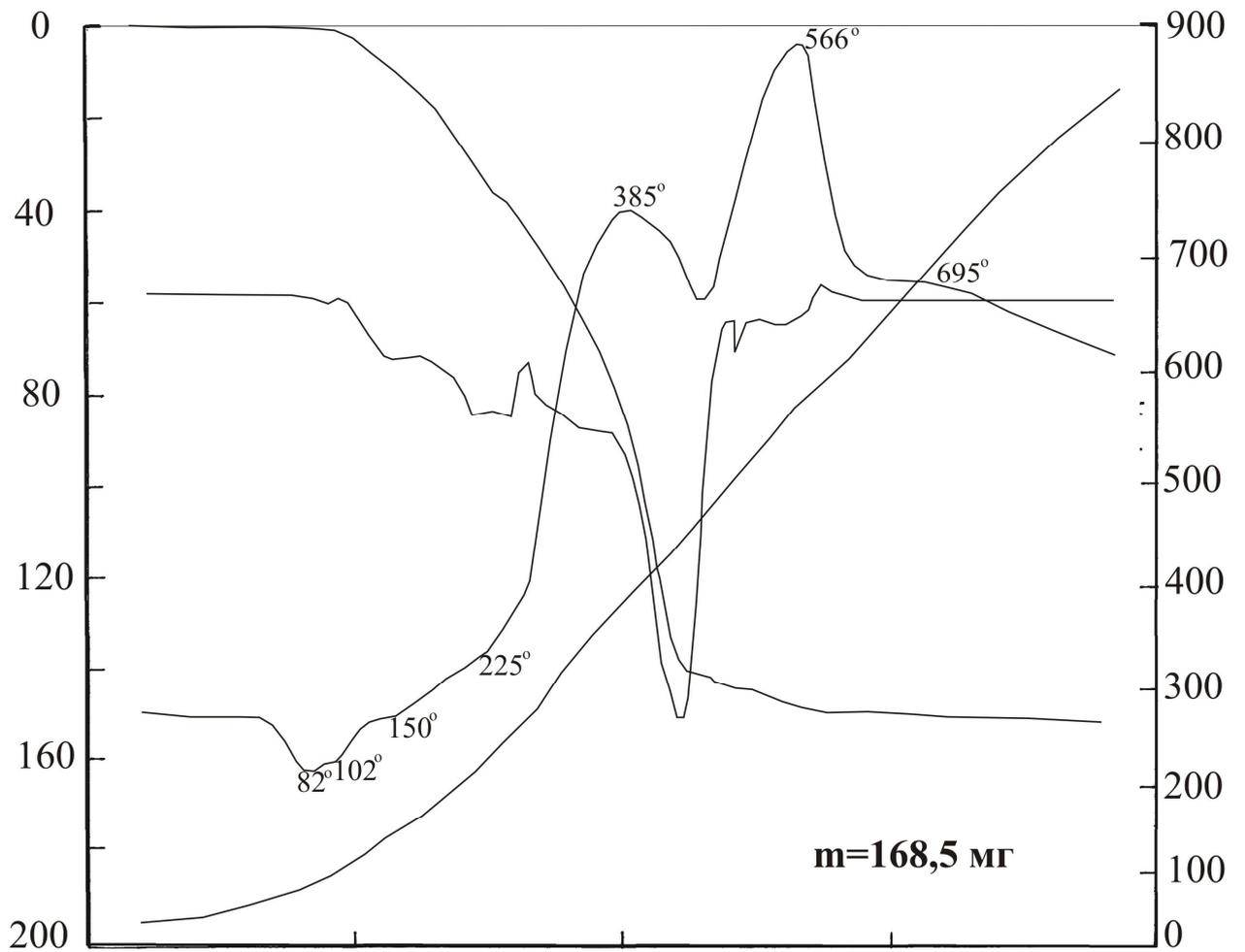
$\text{Ni}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{TK} \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  kompleksni qizdirish egrisida toʻrtta endoeffekt 101, 138, 230 va  $266^\circ\text{C}$  hamda uchta ekzotermik effekt 300, 441 va  $584^\circ\text{C}$  boʻladi. Birinchi ikki effektни boʻlishi ikki molekula suvni chiqishiga mos keladi.  $120\text{-}180^\circ\text{C}$  da TG egrisi boʻyicha massa yoʻqotilishi 10,21%, hisoblangan 10,41%. Keyingi ikki termoeffektlar tiokarbamid molekulasini ajralishiga va karbamid molekulasini bosqichli parchalanishi bilan tushuntiriladi. Keyin ekzotermik effektlar karbamidni qolgan qismini, nikotinat guruhlarini parchalanishi va termoliz mahsulotlarini nikel oksidi hosil qilib yonishiga mos keladi.

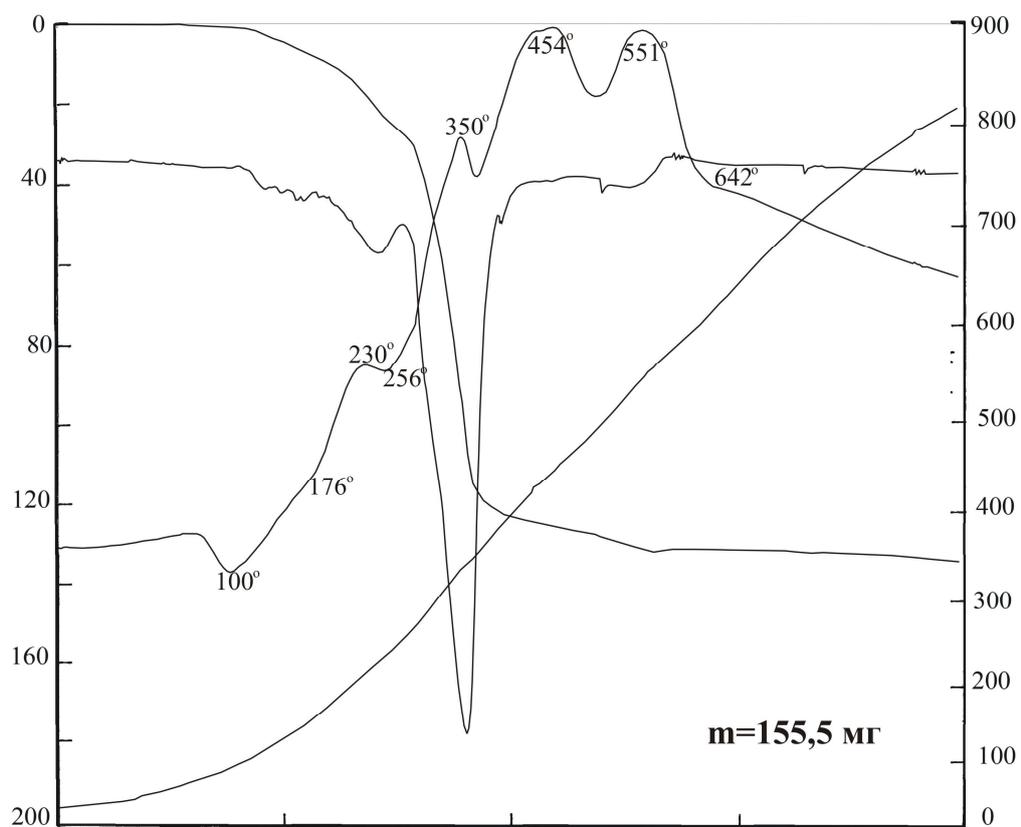
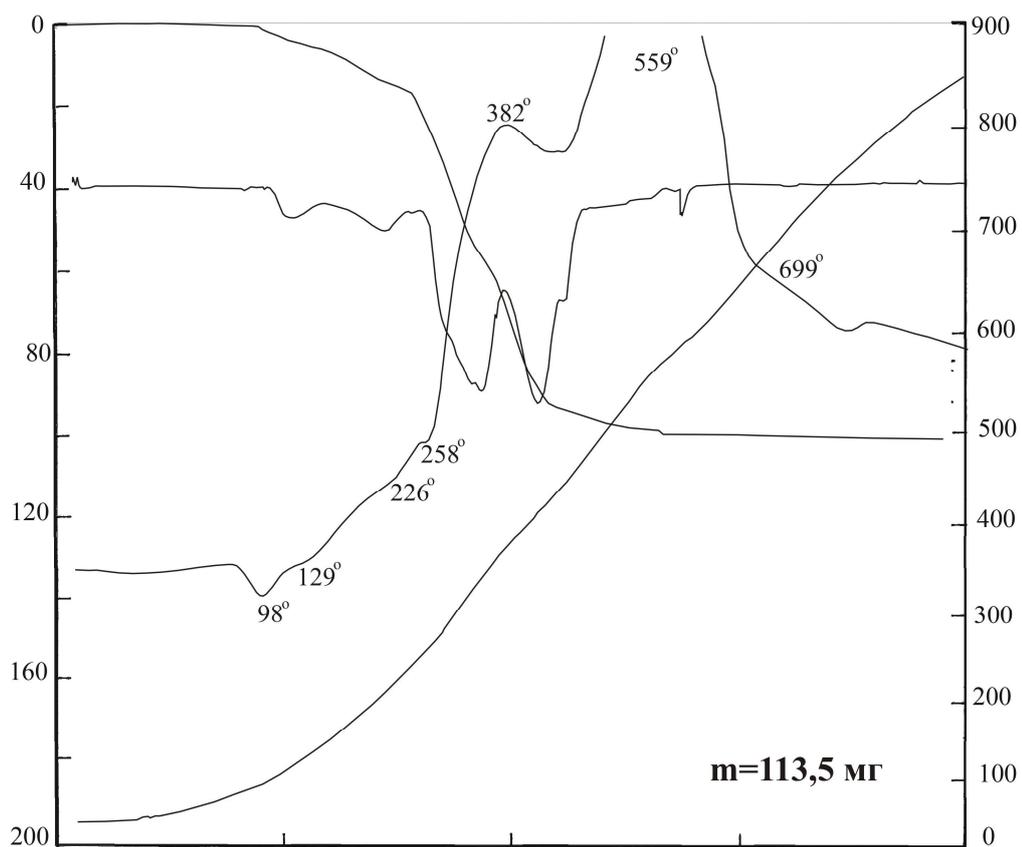
$\text{Ni}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{K} \cdot 2\text{ANK} \cdot 2,5\text{H}_2\text{O}$  derivatogrammasi 137, 257 va 332°S da uchta endotermik effektga, shuningdek 456 va 534°S da ikkita ekzotermik effektga ega. Birinchi endoeffekt sintez qilingan moddadagi suvlarni chiqishini koʻrsatadi. Massa yoʻqotilishi 6,39%, hisoblangan 6,15%. 147-350°S dagi endoeffektlar karbamid molekulasini parchalanishiga va nikotinamidni bosqichli parchalanishi boshlanishiga mos keladi. Keyin effektlar tabiati nikel (II) nikotinatini parchalanishi, termoliz mahsulotlarini yonishi va nikel ni kislorodli birikmalari hosil boʻlishi bilan tushuntiriladi.

$\text{Ni}(\text{NK-N})_2 \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{ANK} \cdot \text{H}_2\text{O}$  ning qizdirish egrisi 120, 140, 186 va 328° C dagi toʻrtta endotermik hamda 460, 490, 576 va 614° C dagi toʻrtta ekzotermik effektga ega. Birinchi endotermik effektning paydo boʻlishi suv molekulasini chiqishi bilan boradi. 90-130° C oraligʻida TG egrisi boʻyicha massa yoʻqotilishi 2,29%, hisoblangan 2,20%. Keyingi uch termoeffektlar koordinatsiyalangan nikotinamid molekulasini ajralishiga va koordinatsiyalangan tiokarbamid molekulasini bosqichli parchalanishiga mos keladi. Keyingi ekzotermik effektlar tabiati koordinatsiyalangan tiokarbamid molekulasini qolgan qismini, nikotinat guruhlarini parchalanishi va termolizni gazsimon mahsulotlarini yonishi bilan tushuntiriladi.

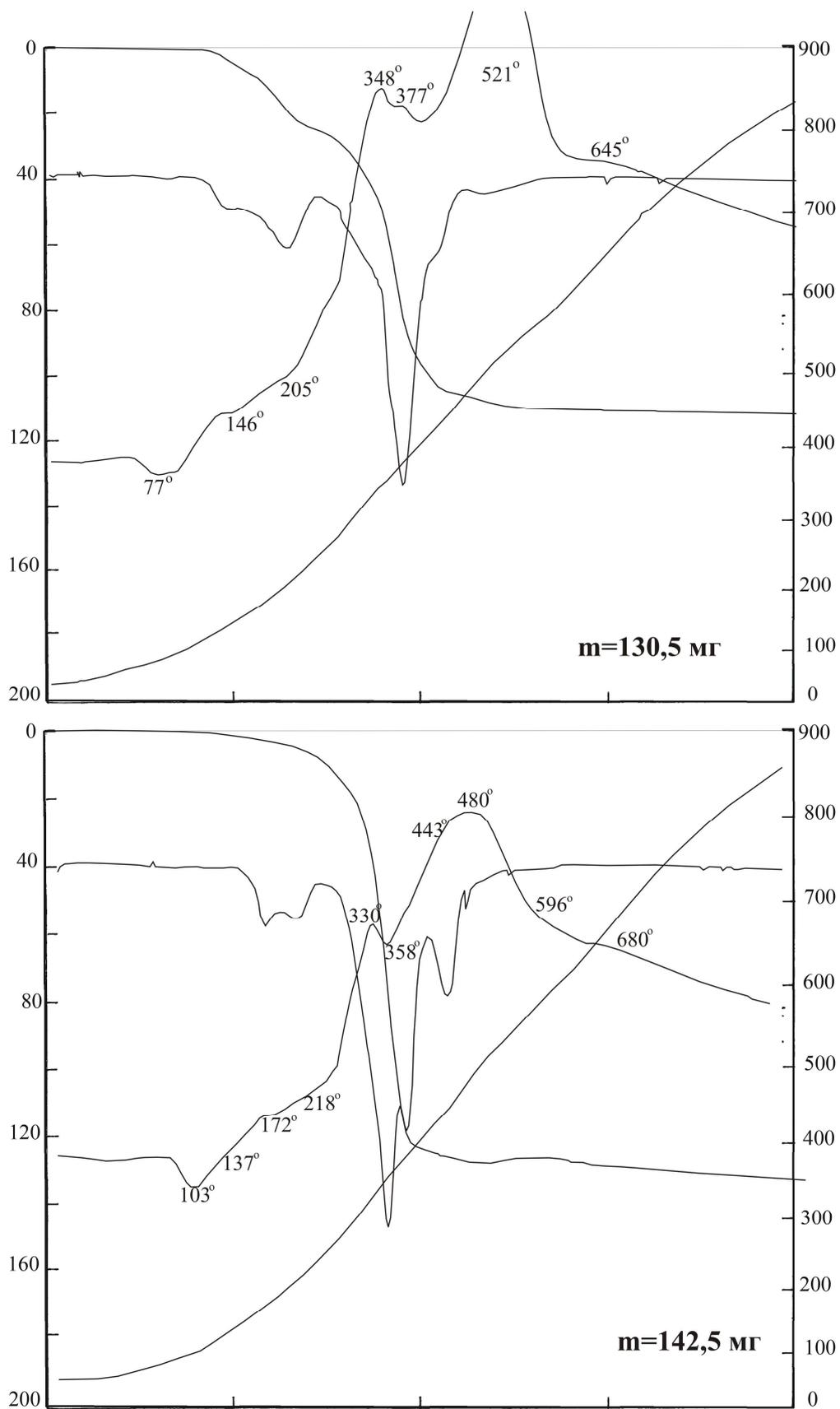
Differensial termik analiz maʼlumotlari (termoeffektlar qiymatlari, TG egrisi boʻyicha massa yoʻqotilishi) va adabiyotlar manbalari asosida aniqlanishicha, 80-140 °C gacha qizdirganda tashqi sferadagi suv molekulalari ajraladi. Atsetamidli va karbamidli koordinatsion birikmalarda 150-250° C gacha qizdirishda koordinatsion birikmani parchalanishi va atsetamid va karbamid molekulalarini mos ravishda bosqichli ajralishi va parchalanishi sodir boʻladi. Tiokarbamidli birikmalarda 200° C dan yuqorida tiokarbamid molekulasini  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{CS}_2$ ,  $\text{NH}_2\text{CN}$  gacha parchalanishi va mos metallar sulfidlari hosil boʻlishi kuzatiladi. Nikotinamidni koordinatsion birikmalaridagi 250-300° C da kuzatiladigan endotermik effektlar nikotinamid molekulasini dekarboksillanishiga mos keladi. Keyingi qizdirishda nikotinatlar parchalanishi, termoliz mahsulotlari yonishi va mos metall oksidlari

hasil bođishi sodir bođadi, buni  $400^{\circ}\text{C}$  dan yuqoridagi ekzotermik effektlarda kořish mumkin [105].





**Rasm 3.x: Kobalt niconitani komplekslarini derivatogrammalari**

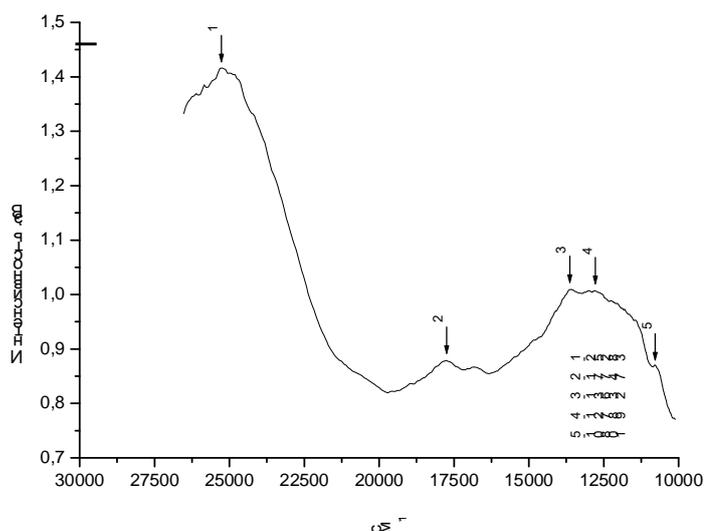


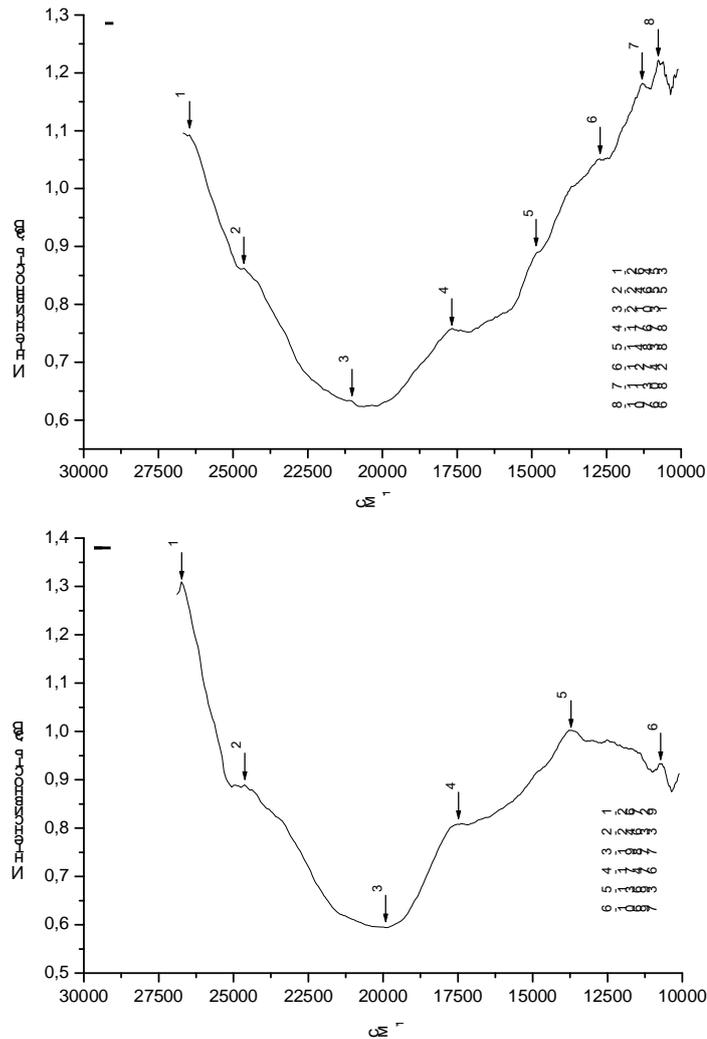
**Rasm 3.x: Nikel nikonita komplekslarini derivatogrammalari**

### 3.4. Olingan komplekslarda markaziy atomning koordinatsion sonini aniqlashda elektron spektrlar

Kobalt (II) komplekslarini elektron spektrlari ko'p xollarda struktura haqida yetarlicha ma'lumot berishi mumkin. Ko'pchilik olti koordinatsion kobalt komplekslari yuqori spinli elektron konfiguratsiyaga ega bo'ladi.

Ularni asosiy holati  $o^4T_{1g}$ , va spin-orbital ta'asirlashuvi sezilarli. Ushbu guruh komplekslarida nazariy jihatdan ruxsat etilgan uch o'tish bo'ladi:  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4T_{2g}$ ,  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4A_{2g}$  va  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4T_{1g}(R)$ .  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4A_{2g}$  o'tish ikki elektronli va kuzatilmaydi. Oktaedrik kompleksni  $\sim 20\,000\text{ sm}^{-1}$  dagi chiziq  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4T_{1g}(R)$  ga taalluqli deyiladi. Yelka hosil bo'lishiga  $o^4T_{1g}(R)$  qo'zg'algan xolatda spin-orbital ta'asir ayniylikni yo'qotishi sabab bo'ladi.  $8350\text{ sm}^{-1}$  dagi boshqa chiziq  $o^4T_{1g}(F) \rightarrow o^4T_{2g}$  o'tishga mos keladi [133].





**Rasm 3.3. DQES** I -  $\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{AA})_2\text{TK}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ;  
 II -  $\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{K})_2\text{TK}\cdot\text{H}_2\text{O}$ ;  
 III -  $\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{TK})_2\text{ANK}\cdot\text{H}_2\text{O}$ .

$\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{AA})_2\text{TK}\cdot\text{H}_2\text{O}$  birikmaning DQES larida 25283, 17747, 13642, 12789 va 10801  $\text{cm}^{-1}$  maksimumlar va egilishlar kuzatilgan.

$\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{K})_2\text{TK}\cdot\text{H}_2\text{O}$  birikmaning elektron spektri 26543, 24655, 21031, 17678, 14838, 12742, 11308 va 10766  $\text{cm}^{-1}$  da egilish va maksimumlarga ega bo'ladi.

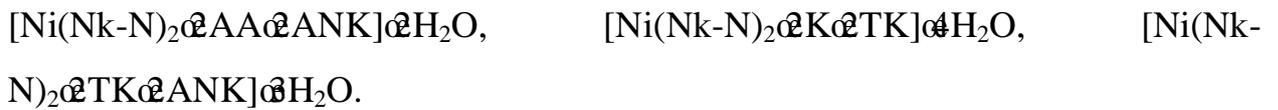
Koordinatsion birikma  $\text{Co}(\text{Nk-N})_2(\text{TK})_2\text{ANK}\cdot\text{H}_2\text{O}$  26729, 24633, 19877, 17476, 13693 va 10697  $\text{cm}^{-1}$  da maksimum va egilishlarga ega.

Kobalt (II) nikotinatining koordinatsion birikmalarini elektron spektrlari rasm 3.3. da keltirilgan.

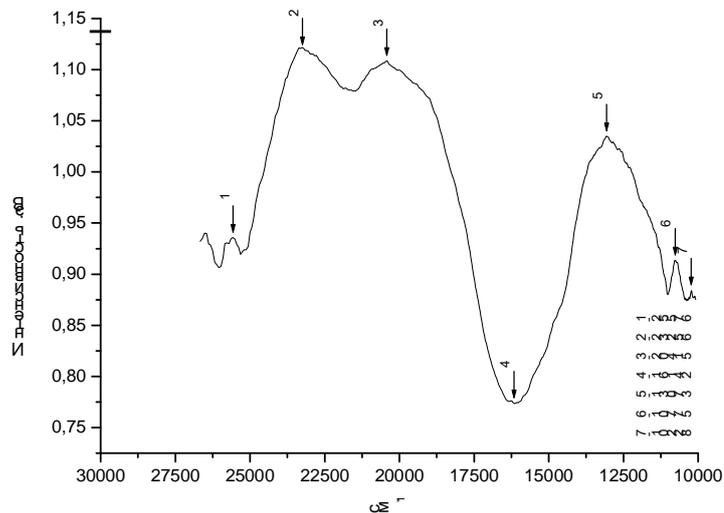
Kuzatilayotgan spektrlardan kelib chiqqan xolda ikki valentli kobaltni turli ligandli koordinatsion birikmalarda koordinatsion soni 6 ga teng, tugun geometriyasi esa oktaedrga mos keladi deyish mumkin.

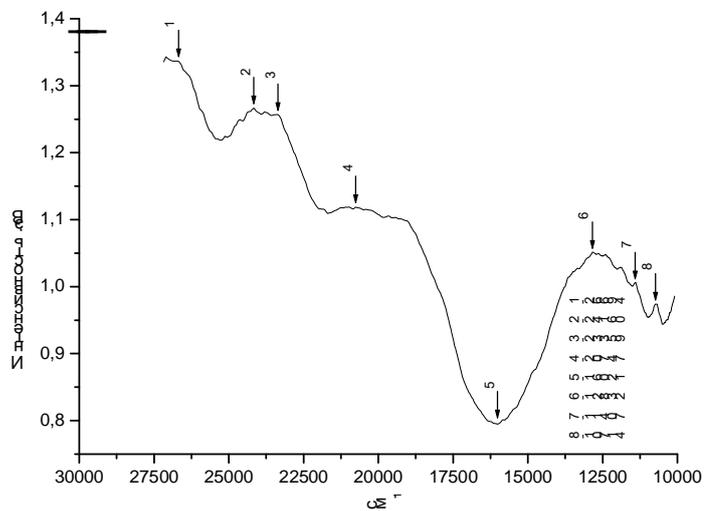
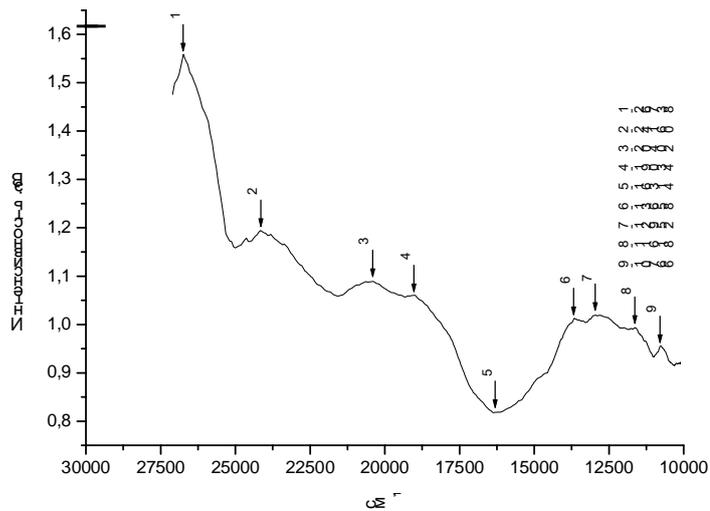
Nikel (II) ni oktaedrik komplekslari 8000-13000, 15000-19000 va 25000-29000  $\text{sm}^{-1}$  intervallarda uchta yutilish sohasiga ega. Ushbu sohadagi chiziqlarni aniq joylashuvi  $\Delta$  va parametrlariga bogʻliq boʻladi [134].

Nikel (II) nikotinatinining quyidagi tarkibli turli amidli koordinatsion birikmalarning elektron spektrlari qayd qilingan:



Rasm 3.4. dan koʻrinib turibdiki xar bir spektrda bir necha egriliklar mavjud. Chiziqlarni taxlil qilish uchun eng katta maksimumlar tanlangan. Oʻrganilgan komplekslar taklif qilingan tartibda uchta maksimumga ega: 25576, 16142, 10228; 26738, 16314, 10766; 26694, 16021, 10714  $\text{sm}^{-1}$ , ular spin boʻyicha ruxsat etilgan  ${}^3\text{A}_{2g}(\text{F})$  dan  ${}^3\text{T}_{2g}(\text{F})$ ,  ${}^3\text{T}_{1g}(\text{F})$  va  ${}^3\text{T}_{1g}(\text{R})$  bilan bogʻliq.





**Ris. 3.4.ESDO.** I ó  $[\text{Ni}(\text{Nk-N})_2(\text{AA})(\text{ANK})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ;  
 II ó  $[\text{Ni}(\text{Nk-N})_2(\text{K})(\text{TK})] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ;  
 III ó  $[\text{Ni}(\text{Nk-N})_2(\text{TK})(\text{ANK})] \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ .

$\Delta$ ,  $\beta$  va  $r$  qiymatlari umumqabul qilingan metodika boʻyicha hisoblandi.  $p$  ni hisoblash uchun quyidagi tenglamadan foydalanildi:

$$[6Dqr \text{ ó } 16(Dq)^2] + (-6Dq-r)E + E^2=0$$

$\text{Ni}^{2+}$  ioni uchun  **$r=15V$**  ga teng, bu yerda  $V$  ó Rak parametri, nikel kompleksi uchun esa  $\text{Ni(II)}$   $p=15B'$ . Kompleksda  ${}^3R$  va  ${}^3F$  xolatlari uchun energiyalar orasidagi farq kovalent taʼsir ostidagi gazsimon ion uchun kabi oʻzgaradi, yaʼni  ${}^3R$  kovalentlik oʻlchovi boʻlib xizmat qiladi.

**Jadval 3.1.**

**Nikel (II) nikotinatining turli ligandli koordinatsion birikmalarini topilgan va hisoblangan elektron spektrlari qiymatlarini taqqoslash**

Birikma	Topilgan qiymat			Hisoblangan qiymat			%	p=15V V- Rak parametr i, sm <sup>-1</sup>
	<sup>3</sup> A <sub>2g</sub> <sup>3</sup> T <sub>2g</sub>	<sup>3</sup> A <sub>2g</sub> <sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (F)	<sup>3</sup> A <sub>2g</sub> <sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (P)	<sup>3</sup> A <sub>2g</sub> <sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (F)	<sup>3</sup> A <sub>2g</sub> <sup>3</sup> T <sub>1g</sub> (P)	$\hat{\epsilon}=10Dq$		
Ni(Nk-N) <sub>2</sub> ·2AA·2ANK·2H <sub>2</sub> O	10228	16142	25576	16075	25576	10228	69,23	10967
Ni(St-H) <sub>2</sub> ·2K·2TK·4H <sub>2</sub> O	10766	16314	26738	16859	26738	10766	71,33	11299
Ni(St-H) <sub>2</sub> ·2TK·2ANK·3H <sub>2</sub> O	10714	16021	26694	16806	26694	10714	71,71	11358

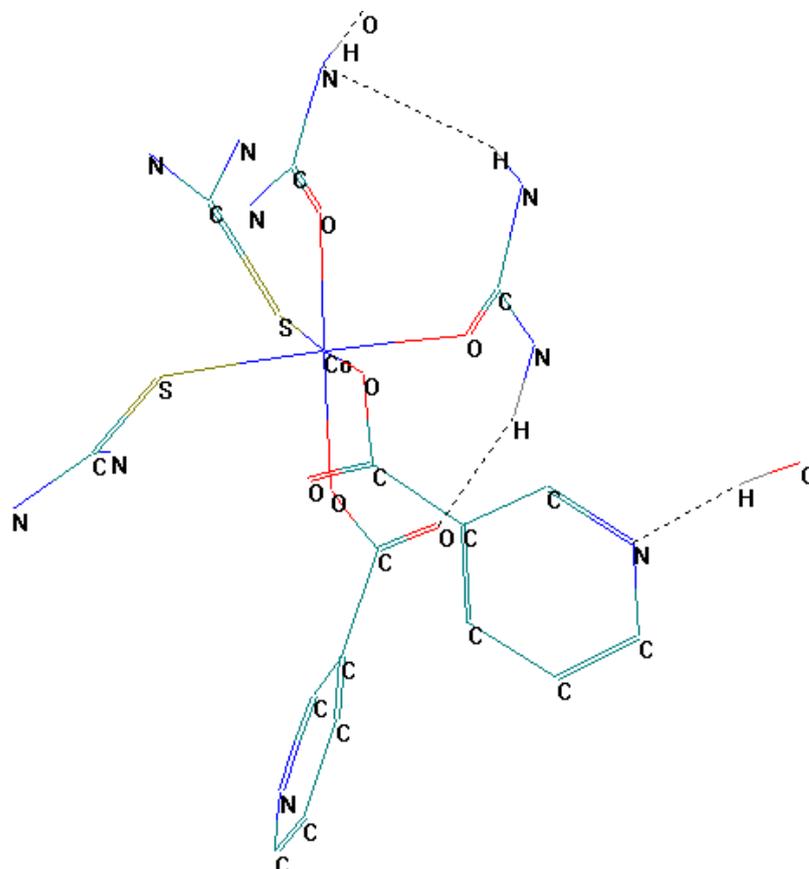
Jadval 3.1. dan ko'rinib turibdiki, <sup>3</sup>A<sub>2g</sub> <sup>3</sup>T<sub>1g</sub>(F) energiyalarini hisoblangan va topilgan qiymatlari orasida farq kuzatiladi, bu esa markaziy ion va ligand o'rtasidagi bog'oz miqdorda kovalentlik ko'rsatishini bildiradi. Bu esa koordinatsion tugunni oktaedrik geometriyasini siljishiga olib keladi [135].

### 3.5. Ayrim sintez qilingan birikmalarini struktur va energetik parametrlarini hisoblashda kvant kimyoviy modellashtirish

Hisoblash texnikasi sohasidagi shiddatli taraqqiyot va dasturiy ta'minotni rivojlanishi ushbu sohada ilmiy inqilobga olib keldi, endilikda noma'lum molekullarni, intermediantlarni, kimyoviy reaksiyalardagi oraliq xolatlarni va hatto mavjud bo'lmagan kimyoviy ob'ektlarni o'rganish imkonini berdi. Tajribalar ko'rsatishicha, hisoblashlar yordamida olingan natijalarga ishonish mumkin, va ularni tajriba bilan tasdiqlash hamisha ham shart emas [136].

Energetik parametrlarni, shuningdek molekula geometriyasini aniqlash maqsadida biz nikel va kobalt nikotinatlarining turli amidli koordinatsion birikmalarini kvant-kimyoviy hisobini amalga oshirdik.

Hisoblashlar HyperChem 8.07 dasturida yarim empirik usulda RM3 yaqinlashuvida, kengaytirilgan Xartri-Fok usulida kelishuv gradienti 0.059 kkal/mol /ang da olib boriladi.

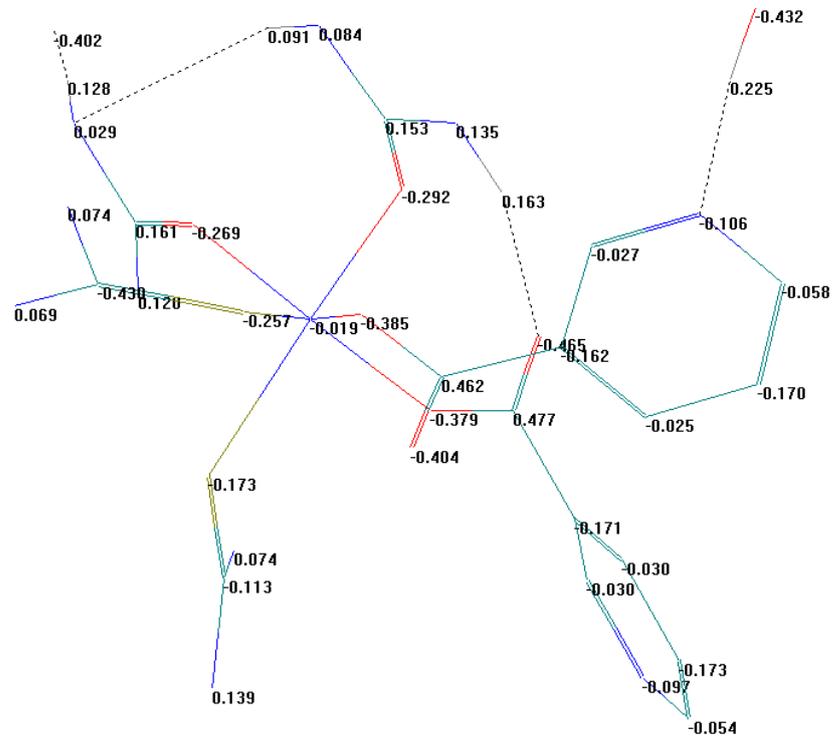


**Rasm 3.5.  $\text{So}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  molekulası (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)**

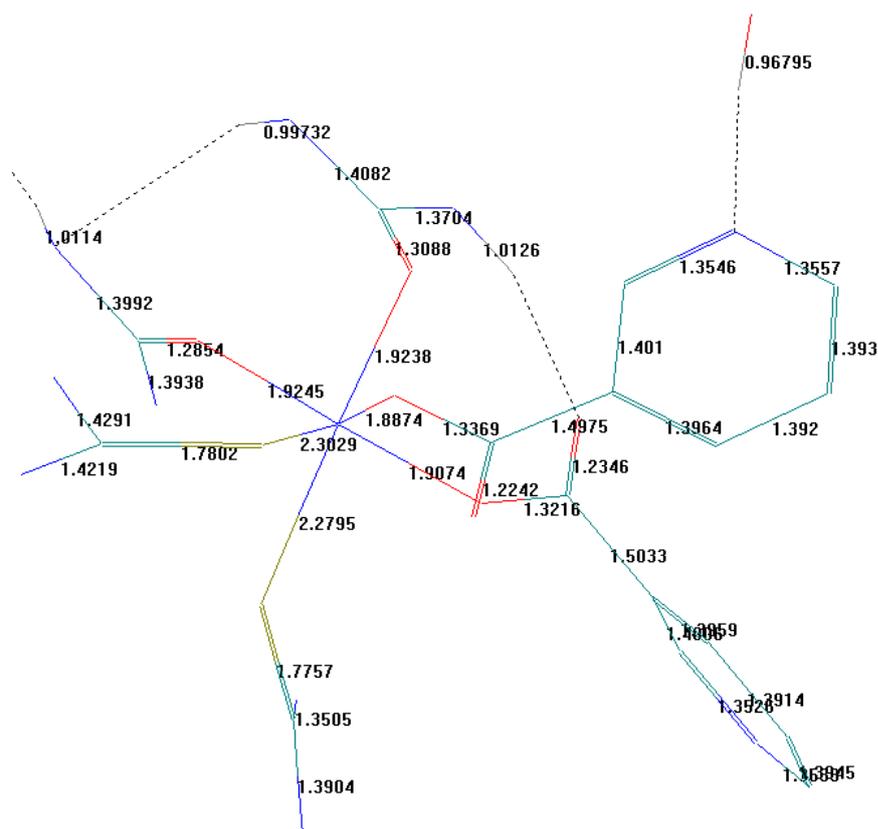
Tiokarbamidni koordinatsiyalangan xolatga o'tishida oltingugurt atomidagi zaryad taqsimlanmagan elektron juftni markaziy atomni bo'sh orbitallariga o'tishi hisobiga pasayadi. Nikotin kislota qoldig'i monodentat bo'ladi. Tiokarbamidagi oltingugurtni va karbamiddagi kislorodni taqsimlanmagan elektron juftlarini markaziy atomni bo'sh orbitaliga o'tishidan markaziy atom qisman manfiy zaryadga ega bo'ladi.

Elektronodonor atomlarni markaziy ion bilan hosil qilgan bog' uzunliklari ko'rsatishicha, atomni markaziy atomdan uzoqlashishi atom radiusiga bog'liq bo'ladi. Karbamidning kislorod atomlarini markaziy ion bilan hosil qilgan bog'

uzunliklari deyarli bir xil, shu bilan birga oltingugurtni hosil qilgan bogʻi ancha uzun.



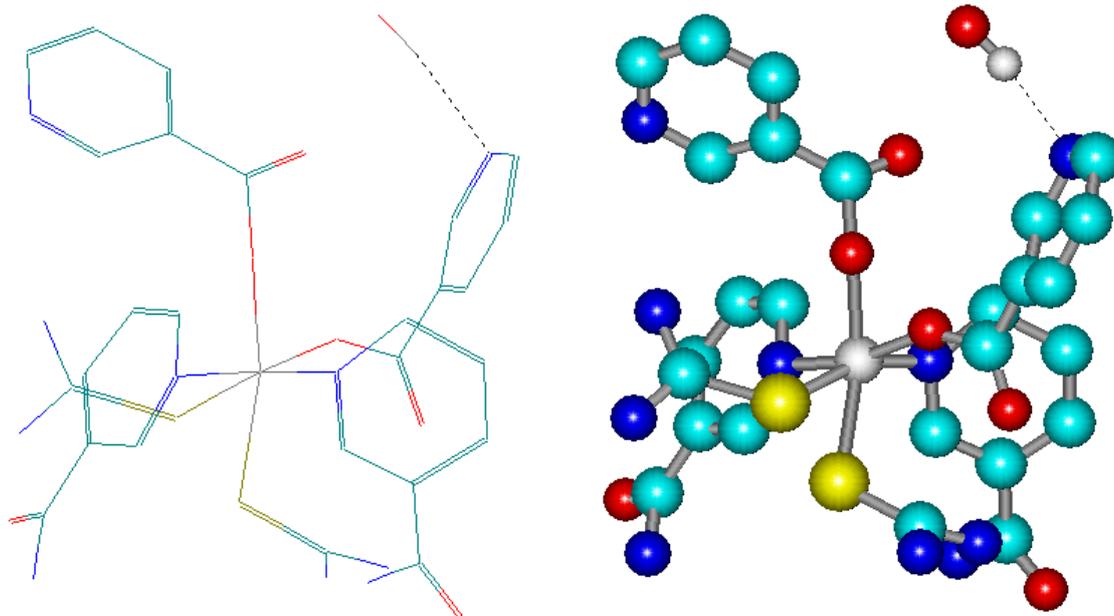
**Rasm 3.6.  $\text{So}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  zaryadlar taqsimlanishi (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)**



**Rasm 3.7.  $\text{So}(\text{NC}_5\text{H}_4\text{COO})_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$  bogʻ uzunliklari (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)**

Ushbu birikmaning hosil boʻlish issiqligi  $-629,63$  kkal/mol, yuqori egallangan va quyi vakant molekulyar orbitallarining energiyalari mos ravishda  $-7,43$  va  $-0,47$  eV ga teng [138].

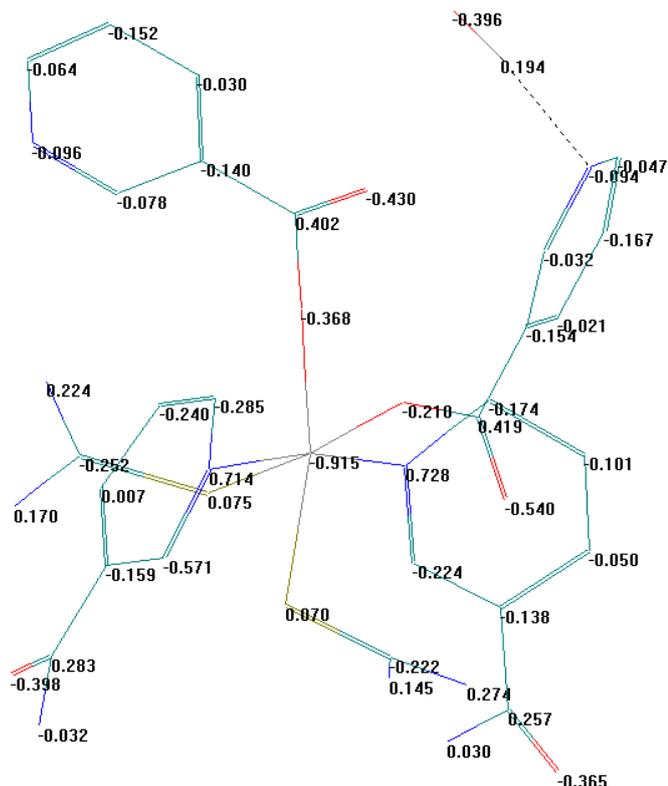
Biz  $\text{Ni}(\text{Hk-N})_2 \cdot 2\text{TA} \cdot 2\text{ANK} \cdot \text{N}_2\text{O}$  tarkibli koordinatsion birikmani kvant-kimyoviy hisobini amalga oshirdik. IQ-, DQES ó spekroskopiya va derivatografik taxlil natijasida olingan maʼlumotlar asosida tiokarbamid oltingugurt atomi, nikotinamid esa piridin halqasidagi azot atomi orqali koordinatsiyalanishini aniqladik. Bir molekula suv kompleks tarkibida tashqi sferada joylashgan yoki markaziy atom bilan vodorod bogʻ orqali bogʻlanishi mumkin (rasm 3.8).



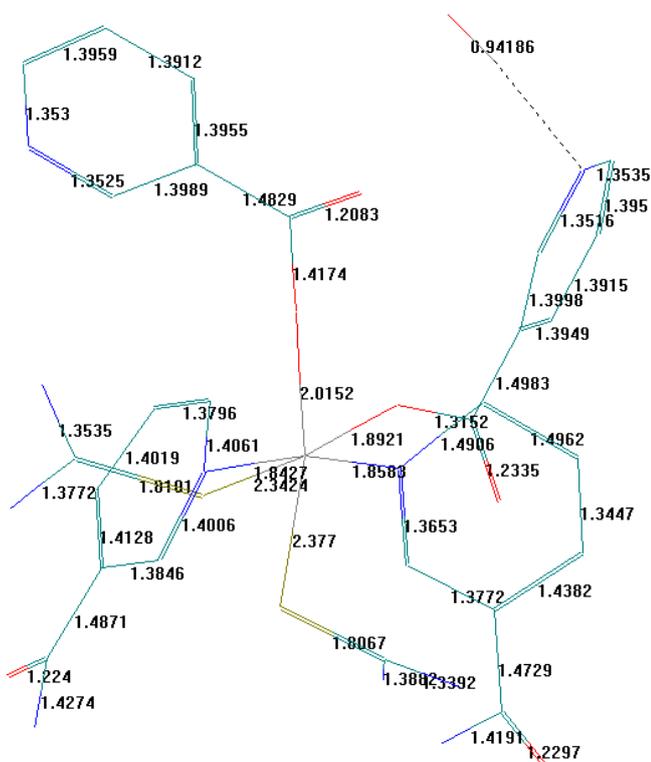
**Rasm 3.8. Ni(Nk-N)<sub>2</sub>·2TK·2AHK·N<sub>2</sub>O molekulasini va koordinatsion tugunning fazoviy modeli (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)**

Tiokarbamidni oltingugurt atomi va piridin xalqasining azot geteroatomi elektron zichlikni markaziy atom tomon siljishi natijasida qisman musbat zaryadga ega boʻladilar, nikel atomi esa qisman manfiy zaryadli boʻlib qoladi (rasm 3.9). suv molekulasidagi vodorod va niktin kislotasi anioni tarkibidagi azot atomlari orasidagi vodorod bogʻlanish bogʻ uzunligiga sezilarli taʼsir koʻrsatmaydi (rasm 3.10).

Shunday qilib, kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida koordinatsion tugunni eng optimal geometriyasi aniqlandi, bogʻ uzunliklari, atomlardagi zaryadlar qiymati hisoblandi. Hosil boʻlish issiqliklari, yuqori egallangan va quyi vakant molekulyar orbitallar energiyalari aniqlangan.



**Rasm 3.9.**  $\text{Ni}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{AHK} \cdot \text{N}_2\text{O}$  koordinatsion tugunida atom zaryadlari (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)



**Rasm 3.10.**  $\text{Ni}(\text{Nk-N})_2 \cdot 2\text{TK} \cdot 2\text{AHK} \cdot \text{N}_2\text{O}$  koordinatsion tugunida bog'uzunliklari (modelni aks ettirishni qulaylashtirish maqsadida vodorod atomlari tushirib qoldirilgan)

**Co(HK-N)<sub>2</sub>·2TK·2K·2H<sub>2</sub>O kompleks birikmasini atomlaridagi zaryadlari, bogʻ uzunliklari va valent burchaklarini kvant-kimyoviy hisoblash natijalari**

	Birinchi atom	Ikkinchi atom	Bogʻ uzunligi	Uchinchi atom	Valent burchagi	Toʻrtinchi atom	Diedrik burchak	Birinchi atom zaryadi
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Co(33)							-0.09500
2.	N(4)	Co(33)	1.8796					0.343674
3.	O(14)	Co(33)	1.9275	N(4)	91.4844			-0.283575
4.	O(52)	Co(33)	1.9420	N(4)	101.3221	O(14)	161.4895	-0.305999
5.	O(53)	Co(33)	1.9504	N(4)	167.7288	O(14)	99.2099	-0.325000
6.	O(54)	Co(33)	1.9478	N(4)	92.2970	O(14)	67.5637	-0.287000
7.	C(3)	N(4)	1.3890	Co(33)	132.9424	O(14)	-19.9231	-0.288956
8.	C(5)	N(4)	1.3681	C(3)	120.2475	Co(33)	106.7708	-0.120022
9.	C(2)	C(3)	1.3944	N(4)	119.5306	C(5)	0.0962	-0.069208
10.	C(1)	C(2)	1.3828	C(3)	120.7030	N(4)	0.8133	-0.082116
11.	C(6)	C(5)	1.3873	N(4)	121.1840	C(3)	-1.1396	-0.151949
12.	C(13)	O(14)	1.3126	Co(33)	89.4969	N(4)	-103.133	0.403558
13.	C(51)	O(52)	1.3027	Co(33)	91.3862	N(4)	174.2194	0.407036
14.	C(7)	C(6)	1.4737	C(1)	119.0601	C(5)	121.8409	0.433952
15.	C(32)	C(13)	1.4902	O(14)	124.5867	O(54)	124.6135	-0.100440
16.	C(50)	C(51)	1.4895	O(52)	124.8385	O(53)	124.4838	-0.096622
17.	S(12)	Co(33)	2.2568	N(4)	92.9576	O(14)	103.5723	-0.148797
18.	C(10)	S(12)	1.7471	Co(33)	118.3948	N(4)	-64.5712	-0.299089
19.	N(11)	C(10)	1.4017	S(12)	116.0695	Co(33)	-175.012	0.148611
20.	N(134)	C(10)	1.3990	N(11)	117.3383	S(12)	125.9339	0.134264
21.	O(8)	C(7)	1.3563	C(6)	116.7183	C(1)	174.0154	-0.302327
22.	O(9)	C(7)	1.2218	C(6)	128.4214	O(8)	114.8601	-0.410699
23.	C(31)	C(32)	1.5226	C(13)	110.9245	O(14)	49.3149	-0.104081
24.	C(30)	C(31)	1.5200	C(32)	110.9447	C(13)	-177.905	-0.100503
25.	C(29)	C(30)	1.5208	C(31)	111.0983	C(32)	-179.476	-0.102413
26.	C(28)	C(29)	1.5203	C(30)	111.1659	C(31)	-176.724	-0.102033
27.	C(27)	C(28)	1.5204	C(29)	111.4584	C(30)	-179.771	-0.101811
28.	C(26)	C(27)	1.5204	C(28)	111.1317	C(29)	-176.477	-0.102280
29.	C(25)	C(26)	1.5203	C(27)	111.5311	C(28)	-179.740	-0.101662
30.	C(24)	C(25)	1.5203	C(26)	111.1636	C(27)	-177.646	-0.102305
31.	C(23)	C(24)	1.5202	C(25)	111.5227	C(26)	-179.131	-0.101628
32.	C(22)	C(23)	1.5204	C(24)	111.1403	C(25)	-178.850	-0.102237
33.	C(21)	C(22)	1.5201	C(23)	111.5281	C(24)	-178.703	-0.101714
34.	C(20)	C(21)	1.5205	C(22)	111.2300	C(23)	-179.538	-0.102070
35.	C(19)	C(20)	1.5202	C(21)	111.3992	C(22)	-178.843	-0.101814
36.	C(18)	C(19)	1.5204	C(20)	111.3176	C(21)	-179.816	-0.101823
37.	C(17)	C(18)	1.5201	C(19)	111.3721	C(20)	-179.210	-0.103110
38.	C(16)	C(17)	1.5204	C(18)	111.4233	C(19)	-179.910	-0.097764
39.	C(15)	C(16)	1.5121	C(17)	111.4907	C(18)	-179.639	-0.109366

Jadval 3.2. ni davomi

40.	C(49)	C(50)	1.5240	C(51)	110.1753	O(52)	-72.9097	-0.100768
41.	C(48)	C(49)	1.5200	C(50)	110.6598	C(51)	177.2507	-0.101276
42.	C(47)	C(48)	1.5201	C(49)	111.0334	C(50)	177.7092	-0.103052
43.	C(46)	C(47)	1.5201	C(48)	111.2183	C(49)	178.8186	-0.101671
44.	C(45)	C(46)	1.5201	C(47)	111.2541	C(48)	176.5689	-0.102579
45.	C(44)	C(45)	1.5202	C(46)	111.2999	C(47)	179.5690	-0.101832
46.	C(43)	C(44)	1.5201	C(45)	111.3072	C(46)	176.7746	-0.102189
47.	C(42)	C(43)	1.5202	C(44)	111.2952	C(45)	-179.954	-0.102000
48.	C(41)	C(42)	1.5200	C(43)	111.3189	C(44)	177.6627	-0.102068
49.	C(40)	C(41)	1.5201	C(42)	111.3161	C(43)	179.9069	-0.101979
50.	C(39)	C(40)	1.5201	C(41)	111.3223	C(42)	178.7731	-0.102013
51.	C(38)	C(39)	1.5202	C(40)	111.3346	C(41)	179.5327	-0.101911
52.	C(37)	C(38)	1.5203	C(39)	111.3106	C(40)	179.5805	-0.101866
53.	C(36)	C(37)	1.5201	C(38)	111.3373	C(39)	179.4717	-0.103114
54.	C(35)	C(36)	1.5205	C(37)	111.4183	C(38)	179.8885	-0.097816
55.	C(34)	C(35)	1.5119	C(36)	111.4917	C(37)	179.7013	-0.109335
56.	H(129)	C(1)	1.0965	C(2)	121.0596	C(6)	119.7188	0.131989
57.	H(130)	C(2)	1.0950	C(1)	120.3022	C(3)	118.9940	0.110674
58.	H(131)	C(3)	1.1031	C(2)	121.3817	N(4)	119.0864	0.150180
59.	H(132)	C(5)	1.1232	N(4)	115.3794	C(6)	123.4291	0.212006
60.	H(60)	C(16)	1.1083	C(15)	109.9628	C(17)	109.8793	0.048366
61.	H(61)	C(16)	1.1083	C(15)	109.9455	C(17)	109.8820	0.048426
62.	H(62)	C(17)	1.1087	C(16)	109.8652	C(18)	109.9918	0.050989
63.	H(63)	C(17)	1.1086	C(16)	109.8836	C(18)	110.0114	0.050901
64.	H(64)	C(18)	1.1087	C(17)	109.9646	C(19)	109.9558	0.050659
65.	H(65)	C(18)	1.1088	C(17)	109.9247	C(19)	109.9506	0.050763
66.	H(66)	C(19)	1.1088	C(18)	109.9637	C(20)	109.9353	0.051036
67.	H(67)	C(19)	1.1088	C(18)	109.9613	C(20)	109.9801	0.050903
68.	H(68)	C(20)	1.1088	C(19)	109.9730	C(21)	109.9292	0.050846
69.	H(69)	C(20)	1.1090	C(19)	109.9271	C(21)	109.9487	0.050977
70.	H(70)	C(21)	1.1088	C(20)	109.9760	C(22)	109.9718	0.051133
71.	H(71)	C(21)	1.1088	C(20)	109.9885	C(22)	110.0056	0.050958
72.	H(72)	C(22)	1.1089	C(21)	109.9406	C(23)	109.8979	0.050862
73.	H(73)	C(22)	1.1089	C(21)	109.8805	C(23)	109.8989	0.051049
74.	H(74)	C(23)	1.1087	C(22)	110.0469	C(24)	109.9594	0.051240
75.	H(75)	C(23)	1.1088	C(22)	109.9905	C(24)	110.0492	0.051037
76.	H(76)	C(24)	1.1090	C(23)	109.8793	C(25)	109.9218	0.050917
77.	H(77)	C(24)	1.1087	C(23)	109.9165	C(25)	109.9395	0.051057
78.	H(78)	C(25)	1.1087	C(24)	110.0522	C(26)	109.9954	0.051415
79.	H(79)	C(25)	1.1087	C(24)	109.9153	C(26)	110.0313	0.051278
80.	H(80)	C(26)	1.1089	C(25)	109.8808	C(27)	109.8508	0.051003
81.	H(81)	C(26)	1.1087	C(25)	109.9327	C(27)	109.9581	0.051083
82.	H(82)	C(27)	1.1086	C(26)	110.0794	C(28)	110.0169	0.052100
83.	H(83)	C(27)	1.1089	C(26)	109.9331	C(28)	110.0335	0.051897
84.	H(84)	C(28)	1.1091	C(27)	109.8881	C(29)	109.8550	0.051082
85.	H(85)	C(28)	1.1087	C(27)	109.9059	C(29)	110.0130	0.051370
86.	H(86)	C(29)	1.1089	C(28)	110.1248	C(30)	109.9633	0.055015

Jadval 3.2. ni davomi

87.	H(87)	C(29)	1.1089	C(28)	109.9103	C(30)	109.9915	0.054405
88.	H(88)	C(30)	1.1090	C(29)	110.0154	C(31)	109.8837	0.051518
89.	H(89)	C(30)	1.1089	C(29)	109.9991	C(31)	110.1359	0.053003
90.	H(90)	C(31)	1.1125	C(30)	110.1781	C(32)	109.7365	0.070307
91.	H(91)	C(31)	1.1092	C(30)	110.1222	C(32)	110.1730	0.073916
92.	H(92)	C(32)	1.1094	C(13)	109.8798	C(31)	110.8123	0.088701
93.	H(93)	C(32)	1.1095	C(13)	108.3211	C(31)	110.7024	0.086719
94.	H(97)	C(35)	1.1084	C(34)	109.9738	C(36)	109.8556	0.048475
95.	H(98)	C(35)	1.1084	C(34)	109.9752	C(36)	109.8625	0.048353
96.	H(99)	C(36)	1.1087	C(35)	109.8803	C(37)	110.0012	0.050855
97.	H(100)	C(36)	1.1089	C(35)	109.8852	C(37)	109.9982	0.050981
98.	H(101)	C(37)	1.1088	C(36)	109.9377	C(38)	109.9732	0.050828
99.	H(102)	C(37)	1.1088	C(36)	109.9667	C(38)	109.9398	0.050679
100.	H(103)	C(38)	1.1086	C(37)	109.9722	C(39)	109.9638	0.050832
101.	H(104)	C(38)	1.1087	C(37)	109.9599	C(39)	109.9501	0.051016
102.	H(105)	C(39)	1.1086	C(38)	109.9702	C(40)	109.9530	0.051098
103.	H(106)	C(39)	1.1088	C(38)	109.9665	C(40)	109.9570	0.050892
104.	H(107)	C(40)	1.1087	C(39)	109.9213	C(41)	109.9876	0.050875
105.	H(108)	C(40)	1.1087	C(39)	110.0059	C(41)	109.9307	0.051042
106.	H(109)	C(41)	1.1088	C(40)	110.0058	C(42)	109.9761	0.051191
107.	H(110)	C(41)	1.1088	C(40)	109.9290	C(42)	109.9408	0.051040
108.	H(111)	C(42)	1.1088	C(41)	109.9035	C(43)	109.9507	0.050910
109.	H(112)	C(42)	1.1087	C(41)	110.0361	C(43)	109.9724	0.051033
110.	H(113)	C(43)	1.1087	C(42)	109.9875	C(44)	110.0267	0.051440
111.	H(114)	C(43)	1.1089	C(42)	109.9534	C(44)	109.8977	0.051234
112.	H(115)	C(44)	1.1091	C(43)	109.9038	C(45)	109.9402	0.050821
113.	H(116)	C(44)	1.1087	C(43)	110.0302	C(45)	109.9877	0.051069
114.	H(117)	C(45)	1.1086	C(44)	109.9795	C(46)	110.0545	0.052315
115.	H(118)	C(45)	1.1090	C(44)	109.9629	C(46)	109.8786	0.051794
116.	H(119)	C(46)	1.1091	C(45)	109.8882	C(47)	109.9982	0.050726
117.	H(120)	C(46)	1.1087	C(45)	110.0277	C(47)	109.9680	0.051318
118.	H(121)	C(47)	1.1088	C(46)	110.0160	C(48)	110.0398	0.055361
119.	H(122)	C(47)	1.1087	C(46)	110.0075	C(48)	109.8758	0.054073
120.	H(123)	C(48)	1.1090	C(47)	109.9578	C(49)	110.0522	0.051755
121.	H(124)	C(48)	1.1088	C(47)	110.0317	C(49)	110.0367	0.052743
122.	H(125)	C(49)	1.1087	C(48)	110.0878	C(50)	110.1570	0.073235
123.	H(126)	C(49)	1.1086	C(48)	110.1679	C(50)	109.8629	0.068464
124.	H(127)	C(50)	1.1089	C(49)	110.6362	C(51)	108.9606	0.084615
125.	H(128)	C(50)	1.1101	C(49)	110.6323	C(51)	109.9192	0.083080
126.	H(55)	N(11)	0.9971	C(10)	116.2177	S(12)	138.0428	0.026609
127.	H(56)	N(11)	0.9949	C(10)	113.2764	H(55)	113.0643	0.068286
128.	H(57)	C(15)	1.0974	C(16)	111.3088	C(17)	-179.918	0.037042
129.	H(58)	C(15)	1.0981	C(16)	111.6506	H(57)	107.3834	0.037697
130.	H(59)	C(15)	1.0982	C(16)	111.6517	H(57)	107.3765	0.037729
131.	H(94)	C(34)	1.0974	C(35)	111.2944	C(36)	179.9535	0.036943
132.	H(95)	C(34)	1.0983	C(35)	111.6351	H(94)	107.3893	0.037715
133.	H(96)	C(34)	1.0983	C(35)	111.6537	H(94)	107.3943	0.037623

134.	H(133)	O(8)	0.9521	C(7)	109.0444	C(6)	179.2863	0.226003
135.	H(135)	N(134)	1.0024	C(10)	114.3164	N(11)	-146.740	0.063799
136.	H(136)	N(134)	0.9959	C(10)	115.3112	H(135)	111.9774	0.035126
137.	H(2)	O(53)	1.8145	C(51)	118.563	C(50)	1.7716	0.212000

Jadval 3.9

**Ni(Nk-N)<sub>2</sub>2TK<sub>2</sub>AHK<sub>2</sub>N<sub>2</sub>O koordinatsion birikmasini atomdagi zaryadlari, bog'uzunligi va valent burchaklarini kvant-kimyoviy hisoblash natijalari**

	Perv y atom	Vtoroy atom	Dlina svyazi	Tretiy atom	Valentn y ugol	CHetvert y atom	Diedricheskiy ugol	Zaryad pervogo atoma
1	2	3	4	5	6	7	8	9
1.	Ni(34)							-0.730998
2.	N(4)	Ni(34)	1.8213					0.896424
3.	O(15)	Ni(34)	1.8621	N(4)	92.1080			-0.224756
4.	O(53)	Ni(34)	1.8969	N(4)	100.5391	O(15)	167.0857	-0.242996
5.	O(54)	Ni(34)	1.8874	N(4)	168.6633	O(15)	98.7480	-0.132294
6.	O(55)	Ni(34)	2.1618	N(4)	99.4423	O(15)	62.6604	-0.363161
7.	C(3)	N(4)	1.3623	Ni(34)	131.7037	O(15)	9.3417	-0.288772
8.	C(5)	N(4)	1.3604	C(3)	119.7460	Ni(34)	108.5497	-0.306787
9.	C(2)	C(3)	1.3945	N(4)	120.3409	C(5)	-0.3937	-0.069378
10.	C(1)	C(2)	1.3907	C(3)	120.3858	N(4)	0.2240	-0.054637
11.	C(6)	C(5)	1.3928	N(4)	121.7255	C(3)	0.2276	-0.086181
12.	C(14)	O(15)	1.3217	Ni(34)	98.5717	N(4)	-107.5963	-0.038891
13.	C(52)	O(53)	1.3155	Ni(34)	87.5849	N(4)	161.1710	0.383993
14.	C(7)	C(6)	1.4923	C(1)	120.5862	C(5)	120.4016	0.261900
15.	C(33)	C(14)	1.4965	O(15)	121.7925	O(55)	128.1097	-0.096697
16.	C(51)	C(52)	1.4940	O(53)	124.9824	O(54)	126.0350	-0.099909
17.	O(13)	Ni(34)	1.9743	N(4)	103.9240	O(15)	84.1148	-0.038891
18.	C(11)	O(13)	1.2368	Ni(34)	129.8590	N(4)	32.6651	-0.028397
19.	C(10)	C(11)	1.5000	O(13)	122.8679	Ni(34)	80.7862	-0.095655
20.	N(12)	C(11)	1.4447	C(10)	118.2052	O(13)	117.8649	-0.026236
21.	N(8)	C(7)	1.4159	C(6)	117.7972	C(1)	-152.1393	0.005077
22.	O(9)	C(7)	1.2234	C(6)	123.8198	N(8)	118.2575	-0.356692
23.	C(32)	C(33)	1.5216	C(14)	111.3147	O(15)	59.6249	-0.099101
24.	C(31)	C(32)	1.5202	C(33)	110.6169	C(14)	-173.0211	-0.102763
25.	C(30)	C(31)	1.5202	C(32)	111.5119	C(33)	-178.6172	-0.101208
26.	C(29)	C(30)	1.5202	C(31)	110.9431	C(32)	-176.3434	-0.102620
27.	C(28)	C(29)	1.5201	C(30)	111.6341	C(31)	-177.1814	-0.101336
28.	C(27)	C(28)	1.5203	C(29)	110.9992	C(30)	-178.0794	-0.102596
29.	C(26)	C(27)	1.5200	C(28)	111.6159	C(29)	-176.4351	-0.101401
30.	C(25)	C(26)	1.5202	C(27)	111.0294	C(28)	-179.2556	-0.102543
31.	C(24)	C(25)	1.5200	C(26)	111.5791	C(27)	-176.6672	-0.101537
32.	C(23)	C(24)	1.5202	C(25)	111.0813	C(26)	-179.7726	-0.102409
33.	C(22)	C(23)	1.5200	C(24)	111.4978	C(25)	-177.4622	-0.101696
34.	C(21)	C(22)	1.5202	C(23)	111.1679	C(24)	-179.7947	-0.102217

Jadval 3.3ni davomi

35.	C(20)	C(21)	1.5200	C(22)	111.4155	C(23)	-178.3478	-0.101748
36.	C(19)	C(20)	1.5201	C(21)	111.2382	C(22)	-179.6411	-0.101980
37.	C(18)	C(19)	1.5200	C(20)	111.3918	C(21)	-179.0914	-0.103045
38.	C(17)	C(18)	1.5204	C(19)	111.3535	C(20)	-179.6373	-0.097856
39.	C(16)	C(17)	1.5119	C(18)	111.5040	C(19)	-179.6154	-0.109261
40.	C(50)	C(51)	1.5221	C(52)	110.4689	O(53)	-74.0950	-0.095259
41.	C(49)	C(50)	1.5205	C(51)	111.1435	C(52)	177.3187	-0.101749
42.	C(48)	C(49)	1.5202	C(50)	110.7817	C(51)	178.6775	-0.102124
43.	C(47)	C(48)	1.5203	C(49)	111.6769	C(50)	179.4398	-0.100965
44.	C(46)	C(47)	1.5202	C(48)	110.8799	C(49)	178.1563	-0.102528
45.	C(45)	C(46)	1.5202	C(47)	111.7503	C(48)	179.9690	-0.101030
46.	C(44)	C(45)	1.5203	C(46)	110.8895	C(47)	178.0134	-0.102631
47.	C(43)	C(44)	1.5202	C(45)	111.7395	C(46)	-179.9969	-0.101172
48.	C(42)	C(43)	1.5203	C(44)	110.9408	C(45)	178.2416	-0.102592
49.	C(41)	C(42)	1.5200	C(43)	111.6657	C(44)	179.8354	-0.101359
50.	C(40)	C(41)	1.5203	C(42)	111.0108	C(43)	178.7564	-0.102423
51.	C(39)	C(40)	1.5199	C(41)	111.5707	C(42)	179.6876	-0.101548
52.	C(38)	C(39)	1.5203	C(40)	111.1253	C(41)	179.2905	-0.102079
53.	C(37)	C(38)	1.5198	C(39)	111.4480	C(40)	179.6832	-0.103026
54.	C(36)	C(37)	1.5205	C(38)	111.3262	C(39)	179.6841	-0.097829
55.	C(35)	C(36)	1.5119	C(37)	111.4916	C(38)	179.8085	-0.109334
56.	H(133)	C(1)	1.0973	C(2)	120.9134	C(6)	120.2955	0.138563
57.	H(134)	C(2)	1.0960	C(1)	120.2629	C(3)	119.3513	0.123147
58.	H(135)	C(3)	1.1046	C(2)	119.4159	N(4)	120.2423	0.168241
59.	H(136)	C(5)	1.1221	N(4)	115.3391	C(6)	122.9354	0.205534
60.	H(64)	C(17)	1.1082	C(16)	109.9753	C(18)	109.8558	0.048353
61.	H(65)	C(17)	1.1083	C(16)	109.9549	C(18)	109.8620	0.048442
62.	H(66)	C(18)	1.1088	C(17)	109.9068	C(19)	109.9905	0.050954
63.	H(67)	C(18)	1.1087	C(17)	109.9133	C(19)	110.0163	0.050864
64.	H(68)	C(19)	1.1089	C(18)	109.9649	C(20)	109.9427	0.050662
65.	H(69)	C(19)	1.1088	C(18)	109.9248	C(20)	109.9497	0.050778
66.	H(70)	C(20)	1.1088	C(19)	109.9797	C(21)	109.9537	0.051011
67.	H(71)	C(20)	1.1087	C(19)	109.9998	C(21)	109.9980	0.050843
68.	H(72)	C(21)	1.1088	C(20)	109.9798	C(22)	109.9346	0.050810
69.	H(73)	C(21)	1.1089	C(20)	109.8990	C(22)	109.9509	0.051045
70.	H(74)	C(22)	1.1088	C(21)	109.9829	C(23)	109.9535	0.051116
71.	H(75)	C(22)	1.1086	C(21)	110.0277	C(23)	110.0349	0.050820
72.	H(76)	C(23)	1.1088	C(22)	109.9773	C(24)	109.9250	0.050763
73.	H(77)	C(23)	1.1090	C(22)	109.8513	C(24)	109.9220	0.051153
74.	H(78)	C(24)	1.1088	C(23)	109.9980	C(25)	109.9668	0.051202
75.	H(79)	C(24)	1.1086	C(23)	110.0462	C(25)	110.0881	0.050761
76.	H(80)	C(25)	1.1087	C(24)	109.9628	C(26)	109.9160	0.050657
77.	H(81)	C(25)	1.1090	C(24)	109.8080	C(26)	109.9009	0.051231
78.	H(82)	C(26)	1.1088	C(25)	110.0339	C(27)	109.9520	0.051287
79.	H(83)	C(26)	1.1085	C(25)	110.0486	C(27)	110.1142	0.050742
80.	H(84)	C(27)	1.1088	C(26)	109.9573	C(28)	109.9006	0.050514
81.	H(85)	C(27)	1.1091	C(26)	109.8114	C(28)	109.8826	0.051281

Jadval 3.3.ni davomi

82.	H(86)	C(28)	1.1087	C(27)	110.0796	C(29)	109.9508	0.051473
83.	H(87)	C(28)	1.1085	C(27)	110.0188	C(29)	110.1284	0.050951
84.	H(88)	C(29)	1.1089	C(28)	109.9036	C(30)	109.8702	0.050209
85.	H(89)	C(29)	1.1090	C(28)	109.8505	C(30)	109.9049	0.051430
86.	H(90)	C(30)	1.1086	C(29)	110.1466	C(31)	109.9807	0.052576
87.	H(91)	C(30)	1.1086	C(29)	109.9890	C(31)	110.1206	0.052655
88.	H(92)	C(31)	1.1091	C(30)	109.8332	C(32)	109.8629	0.049403
89.	H(93)	C(31)	1.1089	C(30)	109.9261	C(32)	109.9970	0.052811
90.	H(94)	C(32)	1.1081	C(31)	110.2584	C(33)	109.9009	0.060711
91.	H(95)	C(32)	1.1090	C(31)	110.1894	C(33)	110.1896	0.070195
92.	H(96)	C(33)	1.1097	C(14)	109.9023	C(32)	110.4824	0.082819
93.	H(97)	C(33)	1.1088	C(14)	108.4551	C(32)	110.4825	0.067305
94.	H(101)	C(36)	1.1082	C(35)	109.9725	C(37)	109.8677	0.048371
95.	H(102)	C(36)	1.1084	C(35)	109.9698	C(37)	109.8604	0.048400
96.	H(103)	C(37)	1.1087	C(36)	109.9096	C(38)	110.0153	0.051018
97.	H(104)	C(37)	1.1087	C(36)	109.9181	C(38)	110.0073	0.050978
98.	H(105)	C(38)	1.1089	C(37)	109.9307	C(39)	109.9375	0.050668
99.	H(106)	C(38)	1.1089	C(37)	109.9308	C(39)	109.9248	0.050735
100.	H(107)	C(39)	1.1087	C(38)	109.9872	C(40)	110.0232	0.051083
101.	H(108)	C(39)	1.1087	C(38)	110.0285	C(40)	110.0107	0.051005
102.	H(109)	C(40)	1.1088	C(39)	109.9012	C(41)	109.9173	0.050832
103.	H(110)	C(40)	1.1089	C(39)	109.8880	C(41)	109.8884	0.050972
104.	H(111)	C(41)	1.1087	C(40)	110.0027	C(42)	110.0491	0.051224
105.	H(112)	C(41)	1.1086	C(40)	110.0654	C(42)	110.0453	0.051052
106.	H(113)	C(42)	1.1089	C(41)	109.8841	C(43)	109.9079	0.050812
107.	H(114)	C(42)	1.1090	C(41)	109.8588	C(43)	109.8503	0.051083
108.	H(115)	C(43)	1.1087	C(42)	110.0065	C(44)	110.0637	0.051415
109.	H(116)	C(43)	1.1085	C(42)	110.0916	C(44)	110.0726	0.051098
110.	H(117)	C(44)	1.1088	C(43)	109.8623	C(45)	109.9072	0.050758
111.	H(118)	C(44)	1.1090	C(43)	109.8322	C(45)	109.8107	0.051263
112.	H(119)	C(45)	1.1086	C(44)	110.0259	C(46)	110.0630	0.051766
113.	H(120)	C(45)	1.1085	C(44)	110.1074	C(46)	110.0883	0.051222
114.	H(121)	C(46)	1.1089	C(45)	109.8560	C(47)	109.9072	0.050738
115.	H(122)	C(46)	1.1090	C(45)	109.8413	C(47)	109.7999	0.051721
116.	H(123)	C(47)	1.1088	C(46)	110.0218	C(48)	110.0640	0.052565
117.	H(124)	C(47)	1.1086	C(46)	110.1050	C(48)	110.0928	0.051612
118.	H(125)	C(48)	1.1089	C(47)	109.8508	C(49)	109.9267	0.051199
119.	H(126)	C(48)	1.1091	C(47)	109.8715	C(49)	109.8132	0.053380
120.	H(127)	C(49)	1.1086	C(48)	110.0699	C(50)	110.0950	0.055129
121.	H(128)	C(49)	1.1087	C(48)	110.0942	C(50)	110.0972	0.053347
122.	H(129)	C(50)	1.1088	C(49)	109.9071	C(51)	110.0651	0.059646
123.	H(130)	C(50)	1.1087	C(49)	109.9921	C(51)	109.8874	0.062401
124.	H(131)	C(51)	1.1083	C(50)	110.8369	C(52)	108.6621	0.081533
125.	H(132)	C(51)	1.1083	C(50)	110.7437	C(52)	109.7081	0.082762
126.	H(56)	C(10)	1.0982	C(11)	110.9917	N(12)	-164.2227	0.057101
127.	H(57)	C(10)	1.0971	C(11)	112.5150	H(56)	107.9028	0.047303
128.	H(58)	C(10)	1.1004	C(11)	109.9945	H(56)	107.1933	0.048306

Jadval 3.3. ni davomi

129.	H(59)	N(12)	0.9984	C(11)	112.2899	C(10)	166.7433	0.048903
130.	H(60)	N(12)	0.9964	C(11)	110.6591	H(59)	110.7529	0.036040
131.	H(61)	C(16)	1.0974	C(17)	111.2896	C(18)	-179.8405	0.036889
132.	H(62)	C(16)	1.0982	C(17)	111.6454	H(61)	107.3932	0.037634
133.	H(63)	C(16)	1.0982	C(17)	111.6507	H(61)	107.3846	0.037678
134.	H(98)	C(35)	1.0974	C(36)	111.3001	C(37)	179.9194	0.037053
135.	H(99)	C(35)	1.0982	C(36)	111.6354	H(98)	107.3951	0.037726
136.	H(100)	C(35)	1.0982	C(36)	111.6345	H(98)	107.3965	0.037760
137.	H(137)	N(8)	0.9946	C(7)	115.7534	C(6)	-162.4037	0.066147
138.	H(138)	N(8)	0.9992	C(7)	113.9619	H(137)	113.7791	0.056359
139.	N(3)	O(55)	1.7708	O(1)	170.0000	N(2)	28.6757	0.225267

## XULOSA

Ilk bor nikel (II) va kobalt (II) nikotinatlari asosida ikkita turli amid tutgan 12 ta koordinatsion birikma sintez qilingan va ularning tarkibi, individualligi va fizik-kimyoviy xossalari aniqlandi. Fizik-kimyoviy taxlil usullari yordamida ularning tuzilishi, tarkibi, energetik va struktur parametrlari aniqlangan.

Magistrlik dissertatsiyasi ishi bo'yicha quyidagi xulosalar qilish mumkin:

1. Ilk bor mexanokimyoviy usulda 20 ta yangi ikkita amid tutgan koordinatsion birikmalar sintez qilindi.

2. Rentgenfazoviy taxlil natijasida erkin ligandlar va sintez qilingan birikmalarning tekisliklararo masofalari va nisbiy intensivliklarini solishtirish yo'li bilan olingan koordinatsion birikmalar individual kristall panjaraga egaligi isbotlandi.

3. IQ-spektrlardagi yutilish sohalari taxlili asosida: karbamid, va atsetamid markaziy atom bilan karbonil guruhi kislorodi, tiokarbamid oltingugurt atomi va nikotinamid piridin xalqasidagi azot atomi orqali koordinatsiyalanishi ko'rsatildi.

4. Nikel (II) va kobalt (II) uchun diffuz qaytarilishni elektron spektrlari o'rganildi va ular koordinatsion soni 6 ga teng bo'lgan koordinatsion birikmalarga mos kelishi aniqlandi. Topilgan va hisoblangan elektron spektrlar natijalaridan nikel (II) birikmalarida kovalentlik mavjudligi sababli koordinatsion tugun siljigan oktaedr bo'lishi isbotlandi.

5. Spektroskopiya usullarida olingan natijalardan foydalangan xolda sintez qilingan birikmalar uchun taklif qilingan fazoviy tuzilishlarni kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida modellashtirish natijasida energetik jihatdan eng qulay modellar tanlandi va ularda atomlarda zaryad taqsimlanishi, bog' uzunliklari, hosil bo'lish energiyalari qiymatlari aniqlandi.



7. Lepnev L., Vaschenko A., Vitukhnovsky A., Eliseeva S., Kotova O., Torgova S., Kuzmina N. Two-diode organic light amplifiers/converters and peculiarities of photocurrent multiplication // *Synthetic Metals*. - Moscow, 2006. - V. 156. - P. 6246632.

8. . . . .  
 . . . . .  
 // . ó . , 2006. -  
 . 6. - C. 48654.

9. . . . .  
 (Ln(bz)<sub>3</sub>, Ln=La<sup>3+</sup>, Eu<sup>3+</sup>, Lu<sup>3+</sup>) //  
 . . . . . ó . , 2007. - .33. 6. - . 463 ó 467.

10. . . . .  
 c  
 // . . . . . ó . , 2007. -  
 4.- C. 2776280.

11. . . . .  
 . . . . .  
 2- (III) //  
 . - . , 2007. - . 4. - C. 12620.

12. . . . .  
 -  
 //  
 , , :  
 . - . , 2009. - . 20.

13. . . . .  
 -  
 (II)  
 //  
 , , : . . . . . , 2009. - . 22.

14. . . -, -  
2-(2ø  
) 4,4ø //  
, , ::  
. .- ., 2009.- . 23.
15. e . .  
//  
, ,  
: . .- ., 2009.- . 26.
16. Fromm J.R., Hileman R. E., Caldwell E.E.O., Weiler J.M. Pattern and spacing of basic amino acids in heparin binding sites // Archives of Biochemistry and Biophysics. ó Bethesda, 1997. - V. 343. 1. - P.92-100.
17. Wiseman, T., Williston, S., Brandt, J.F. & Lin, L.-N. Rapid measurement of binding constants and heats of binding using a new titration calorimetry // Anal. Biochem. ó Bethesda, 1989. - V. 179. - P.131-137.
18. . .  
, //  
, ,  
: . .- ., 2009.- . 29.
19. . . 3d- N-  
( ) N, N- ( )  
.: . . í . . ó .: , 2002. ó 24 .
20. . .  
III-  
í . . .- : 1973. ó 123 .
21. . ., .C. 2-  
-3,5- -4 - -4- ,  
:  
//

- .- ., 2009.- . 2.
22. N-  
//
- : . .- ., 2009.- . 48.
- 23.
- : . . . . . - .: 2002. - 18 .
- 24.
2001. - 19 .
25. // X
- 62004": . .- ., 2004. - 1.- . 3766377.
26. // III "
- ": . .- ., 2004. ó . 152.
27. Savinkina E.V., Zamilatskov I.A., Al Ansari Ya.F., Albov D.V., Tsivadze A.Yu. A woven structure of hexaacetamidocadmium(II) polyiodide // Acta Cryst. ó Chester, 2005. - E61. ó m 237162373.
28. [Cd(C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>CONH<sub>2</sub>)<sub>2</sub>I<sub>2</sub>] //
- . ó , 2005. - . 50. 10. - . 1632-1635.
29. Savinkina E.V., Buravlev E.A., Zamilatskov I.A., Palkina K.K., Tsivadze A.Yu. Crystal structures of molecular complexes [CdL<sub>4</sub>I<sub>2</sub>] (L =

formamide, benzamide) // XXII

: . . - , 2005. ó . 2586259.

30. Savinkina E.V., Tashlitskaya S.M., Zamilatskov I.A. Complex polyiodides: transition metal complexes with acetamide // XXII

: . . - ,

2005. ó . 260.

31. . . , . . , . .

,

// . ó ,

2006. - 2. ó . 12.

32. Savinkina E.V., Zamilatskov I.A., Kuz'mina N.E., Palkina K.K. Chains, Rings and other Structural Motifs in Transition-Metal Amide Complex Polyiodides // Program and Abstracts. 11th International Symposium on Inorganic Ring Systems - Oulu, 2006. ó . 146.

33. Savinkina E.V., Buravlev E.A., Zamilatskov I.A., Albov D.V. Bis(acetamide- O)diiodozinc(II) // Acta Cryst. ó Chester, 2007. - E63. - m10946 m1095.

34. Zamilatskov I. A., Albov D. V., Zaitseva M. G., Kravchenko V. V. and Savinkina E. V. Tris(1,3-dimethylurea)diiodidocadmium(II) // Acta Cryst. ó Chester, 2007. - E63 - m1335-m1336

35. . . , . . , . .

$[\text{Cd}(\text{CH}_3\text{CONH}_2)_6][\text{Cd}_2\text{I}_6]$   $[\text{Cd}(\text{C}_2\text{H}_5\text{CONH}_2)_6][\text{Cd}_2\text{I}_6]$  // . . . - , 2007. - .33. 6. - . 407 ó 410.

36. . . , . . , . . , . .

// . . . ó , 2007. - .52. 7. - . 1133-

1139.





49. . . , . . , . . .  
(II) //  
. ó , 2004. - 3-4. ó .50-52
50. . . K  
// . . - , 2004.- 3- . 42-44.
51. . . , . . .  
(II) // . . . - ,  
2004. - 6. - . 3-6.
52. . . , . . , . . .  
(II) //  
. . ó , 2002. - . . - . 64-65.
53. . . , . . , . . ,  
3d- // . . .  
: . . - , 2005. - . 49.
54. . . , . . , . . .  
// . . .  
. . . . 50- 60- . . .  
. - , 2000.- . 15-17.
55. . . , . . , . . .  
// . . . - . . « , , -  
»: . . . - , 2002. - .  
255-257.

56. Azizov O.T., Meldebekova S.U., Azizov T.A. About the opportunity of using carbon acids for sewage treatment from ions of heavy metals // Coordination chemistry division of inorganic chemistry. The 228<sup>th</sup> ACS National meeting. Philadelphia, ugust 22-26. ó Philadelphia, 2004. - P. 459.

57. . . , . . , . .

// : . . . -

. 28-29 2002.- , 2002.- . 62-63.

58. . . , . .

(II) //

. . . ó , 2007.- 2. ó . 3-7.

59. . . , . . , . .

(II) //

. ó , 2007 - 3(29). - . 91-95.

60. . . , . . , . . ,

. . , . .

// . . . ó , 2007.- 5. - . 3-6.

61. . .

(II), (II) // -

« -

», 17-

. 3-4 2008. ó , 2008 ó . 8-12.

62. . . , . . , . .

2004 // «

». 18-19 2009. - , 2009.- . 174.

63. . . , . . , . .

(II) // . . . . - , 2009. -

4. ó . 37-39.

64. . .

3d- : í . . . ó : , 2006.ó

65. . . . .  
(II) // . . . . . 50-  
. . . . . , 2001. - 3 - . 40-43.

66. . . . .  
(II)// . . . . . 6 , 2002.- 5.- . 23-

27.

67. . . . .  
(II) // . . . . .  
. 6 , 2002.- 5-6. - . 50-51.

68. . . . .  
(II)// . . . . . , 2004. - 2. - . 34-39.

69. . . . .  
(II) //  
: II - .-  
, 2006. - . 296-297.

70. . . . .  
(II) // . . . . . , 2006. - 6. -  
. 7-14.

71. . . . .  
. . . . .  
// : . . . . . - - ,  
2006. - . 40-41.

72. . . . .  
(II) //  
:  
:- , 2006. - . 112-113.

73. . . . .  
(II) // . . . . . , 2007.- 1. - . 3-7.

74. . . . . (II) //  
 . . . . . , 2007.- 6. - . 41-46.  
 75. . . . . C  
 // :  
 . . . . .  
 2007. - .5. - . 220-221.

76. . . . .  
 (II) //  
 -  
 : -  
 .- , 2007. - . 163-166.

77. . . . .  
 . . . . .  
 //  
 - : -  
 .- , 2007. - . 30-33.

78. . . . .  
 //  
 - : -  
 17-  
 . . . . . 6 , 2008. - . 57-58.

79. . . . .  
 (II) // . . . . . 6 , 2008. - 5. - . 54-57.

80. . . . .  
-2005  
//  
: . . . . . - , 2009. - . 176.
81. . . . . « . »  
// . ó ,  
1997.- 12. - . 48-52.
82. . . . .  
. - : , 1986. - 305 .
83. . . . . ó : , 1987. - 582 .
84. . . . . ,  
//  
. ó , 1972. - 13. - C. 1411-1421.
85. . . . .  
// . ó , 1991. - . 60, 3.- . 586-594.
86. . . . .  
// . ó  
, 1998. - . 5., 1.- . 55-58.
87. . . . .  
(II, III)
- 3d- // . . . . . - , 2005.- 8.-111-116.
88. Thiessen P.A., Meyer K., Heinicke G. Grundlagen der Tribochemie // Akad. Verlag - Berlin, 1996.- 1.- P. 194.
89. Heinicke G. Tribochemistri // Akad. Verlag - Berlin, 1984.- 1.-P. 495.
90. . . . . - . . . . :  
, 1972. - 479 .
91. . . . .  
. ó .: . . . . , 1974.- 992 .

92. . . , . . .  
//  
2092440, 12.03.1996 .
93. . . . ó : .  
1960. -72 .
94. . . .  
. ó : , 1967. ó 19 c.
95. . . , . . . :- : ,  
1976. ó 232 .
96. . . . :- :  
, 1966. .1. ó 362 .
97. . . . ó :  
, 1975. ó 423 .
98. Paulik F., Paulik J., Erdey L. Derivatograph. I Mittelung Ein  
automatish registrierender Apparat zur gleichzeitigen Ausguchrund der Differential ó  
ther moqravimetrishen Untersuchungen //Z. Anal. Chem. ó Berlin, 1958. -V.160.,  
4. - P. 241-250.
99. . . . ó  
: 2005. ó 28 .
100. . -  
. ó : , 1991.- 536 c.
101. . . , . . , . . .  
(II)// . . . ó  
, 2010. - 5. - .11-14.
102. . . , . . , . . . -  
(II)// -

»: . . . .

. . - , 2010. - .177-179.

103. . . , . . , . .

(II)//

. . « , ».- , 2010. ó . 23 (62),  
2.- . 263-269.

104. . .

(II)// . . . ó ,

2010. - 3. - .71-74.

105. . . , . .

(II)//

, ,  
: . . .- , 2011.- .33.

106. . . , . . , . . , . .

(II)//

- «

»: . . . . . - , 2010. -

.179-180.