

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

УМУМИЙ ВА НООРГАНИК КИМЁ ИНСТИТУТИ

ДЖУМАНАЗАРОВА ЗУЛФИЯ КОЖАБОЕВНА

**МАГНИЙ ВА КАЛЬЦИЙ НИТРАТЛАРИНИНГ БИР ТУРЛИ ВА
АРАЛАШ ЛИГАНДЛИ КООРДИНАЦИОН БИРИКМАЛАРИНИНГ
СИНТЕЗИ, ТУЗИЛИШИ ВА ХОССАЛАРИ**

02.00.01 – Ноорганик кимё

**КИМЁ ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент-2018

Фалсафа (PhD) доктори диссертацияси автореферати мундарижаси
Оглавление автореферата диссертации доктора философии (PhD)
Contents of dissertation abstract of doctor of philosophy (PhD)

Джуманазарова Зулфия Кожабоевна

Магний ва кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг синтези , тузилиши ва хоссалари 3

Джуманазарова Зулфия Кожабоевна

Синтез, строение и свойства однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция 21

Djumanazarova Zulfiya

Synthesis, structure and property of monotype and mixed coordination compounds of calcium and magnesium nitrate 39

Эълон қилинган ишлар рўйхати

Список опубликованных работ
List of published works..... 42

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

УМУМИЙ ВА НООРГАНИК КИМЁ ИНСТИТУТИ

ДЖУМАНАЗАРОВА ЗУЛФИЯ КОЖАБОЕВНА

**МАГНИЙ ВА КАЛЬЦИЙ НИТРАТЛАРИНИНГ БИР ТУРЛИ ВА
АРАЛАШ ЛИГАНДЛИ КООРДИНАЦИОН БИРИКМАЛАРИНИНГ
СИНТЕЗИ, ТУЗИЛИШИ ВА ХОССАЛАРИ**

02.00.01 – Ноорганик кимё

**КИМЁ ФАНЛАРИ БЎЙИЧА ФАЛСАФА ДОКТОРИ (PhD)
ДИССЕРТАЦИЯСИ АВТОРЕФЕРАТИ**

Тошкент-2018

Фалсафа доктори (PhD) диссертацияси мавзуси Ўзбекистон Республикаси Вазирлар Маҳкамаси ҳузуридаги Олий аттестация комиссиясида В2018.2.PhD/K58 рақам билан рўйхатга олинган.

Диссертация Умумий ва ноорганик кимё институтида бажарилган.

Диссертация автореферати учта тилда (рус, ўзбек, инглиз (резюме)) илмий кенгаш веб саҳифада ik-kinuо.nuu.uz ҳамда «ZiyоNET» ахборот-таълим портали (www.ziyonet.uz) га жойлаштирилган.

Илмий раҳбар:

Азизов Тохир Азизович
кимё фанлари доктори, профессор

Расмий оппонентлар:

Умаров Бақо Бафоевич
кимё фанлари доктори, профессор

Нуралиева Гўзал Абдухамидовна
кимё фанлари номзоди, доцент

Етакчи ташкилот:

Самарқанд давлат университети

Диссертация химояси Ўзбекистон Миллий университети ҳузуридаги DSc.27.06.2017.К.01.03. рақамли Илмий кенгашнинг 2018 йил «__» _____ соат ____ даги мажлисида бўлиб ўтади. (Манзил: 100174, Тошкент, Университет кўчаси, 4 уй. Тел.: (+99871)227-12-24, факс: (+99824) 246-53-21; 246-02-24. E-mail:chem0102@mail.ru).

Диссертация билан Ўзбекистон Миллий университетининг Ахборот-ресурс марказида танишиш мумкин (№ __ рақами билан рўйхатга олинган). Манзил: 100174, Тошкент, Университет кўчаси, 4 уй. Тел.: (+99871) 246-67-71.

Диссертация автореферати 2018 йил «__» _____ куни тарқатилди.
(2018 йил «__» _____ даги _____ рақамли реестр баённомаси).

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

Д.А. Гафурова
Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш илмий котиби, к.ф.д.

Н.А. Парпиев
Илмий даражалар берувчи илмий
кенгаш қошидаги илмий семинар раиси,
к.ф.д., академик

Кириш (фалсафа доктори (PhD) диссертацияси аннотацияси)

Диссертация мавзусининг долзарблиги ва зарурати. Дунёда полидентат лигандлар асосида оралик ва ишқорий-ер металл ионларининг координацион бирикмаларини олиш ва уларнинг хоссаларини аниқлаш амалий ва назарий жиҳатдан муҳим аҳамият касб этади. Бугунги кунда бундай координацион бирикмалардан тиббиёт амалиётида доривор препаратлар, саноатда биологик фаол моддалар ва қишлоқ хўжалик экинларида эса юқори ва сифатли ҳосил етиштиришда ишлатиладиган кимёвий препаратлар: стимулятор, пестицид, минерал ўғит, шунингдек дефолиант ва десикантлар сифатида фойдаланиш орқали юқори самарадорликка эришилмоқда.

Жаҳонда юқори самарадорликка ва комплекс таъсир этиш хусусиятига эга бўлган стимуляторлар синтез қилиш шароитларини ишлаб чиқишни ривожлантириш бўйича изланишлар олиб борилмоқда. Бу борада ўсимликларнинг ҳосилдорлигини оширувчи, физиологик жараёнларини тезлаштирувчи стимуляторлар яратиш бўйича илмий ечимларни асослаш, жумладан магний ва кальций ионларининг полидентат органик лигандлардан амидлар билан координацион бирикмаларини олиш ва синтез қилишнинг оптимал шароитларини ишлаб чиқиш; уларнинг таркиби ва хоссаларини аниқлаш; лигандларни марказий ионга координацияланишида ва лигандларни ўзаро ўрин олишида координацион боғ табиати ҳамда синтез қилинган бирикмаларнинг термик барқарорлигини аниқлаш муҳим вазифалардан ҳисобланади.

Республикамизда қишлоқ хўжалиги соҳасини ривожлантириш мақсадида маҳаллий хом-ашёлар асосида юқори самарали, импорт ўрнини босувчи, кам ҳаражатли, ўсимликлар ўсишини стимулловчи воситалар яратиш борасида янги турдаги маҳсулотлар ишлаб чиқариш ва уларни амалиётда қўллашга эришилмоқда. Ўзбекистон Республикасини янада ривожлантиришга қаратилган Ҳаракатлар стратегиясининг учинчи йўналишида «Қишлоқ хўжалиги маҳсулотларини ишлаб чиқаришни изчил ривожлантириш, мамлакатимиз озиқ-овқат хавфсизлигини янада мустаҳкамлаш, экологик тоза маҳсулотлар ишлаб чиқаришни кенгайтириш, аграр секторнинг экспорт салоҳиятини сезиларли даражада ошириш»¹ га қаратилган муҳим вазифалар белгиланган. Бу борада, жумладан, қишлоқ хўжалиги экинларининг ҳосилдорлигини оширувчи, уларнинг ўсишини тезлаштирувчи ва сувни тежовчи янги турдаги арзон препаратларни яратиш муҳим аҳамият касб этади.

Ўзбекистон Республикаси Президентининг 2017 йил 7 февралдаги ПФ-4947-сон «2017-2021 йилларда Ўзбекистон Республикасини ривожлантиришнинг бешта устувор йўналиши бўйича Ҳаракатлар стратегияси тўғрисидаги» Фармони ва 2017 йил 14 мартдаги ПҚ-2831 сон «Иқтисодиётнинг базавий тармоқларида лойиҳа ишлари самарадорлигини ошириш чора-тадбирлари тўғрисида»ги Қарори ҳамда мазкур фаолиятга тегишли бошқа меъёрий-ҳуқуқий ҳужжатларда белгиланган вазифаларни

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

амалга оширишга ушбу диссертация тадқиқоти муайян даражада хизмат қилади.

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

Муаммонинг ўрганилганлик даражаси. Дунёда бир неча металл тузларининг органик лигандлар билан синтези, таркиби, тузилиши, термик таҳлили, электрон тузилиши, реакцион қобиляти ва биологик хоссалари бўйича катта ҳажмда тадқиқотлар олиб боришга Возняковская Ю.М., Кукушкин Ю.Н., Иманакунов Б.И., Сулаймонкулов К.С., Цинцадзе Г.В., Харитонов Ю.А., Б.Кол, М.Холт, Хамилтон В.С., Козлова И.А., Савинкина Е.В., Кузьмина Н.Е., Палкина К.К., Пенланд Р.Б., Рау Т.Ф., Дурсун А.К. ва бошқа машхур олимларнинг илмий изланишлари бағишланган.

Ҳозирги кунда комплекс бирикмаларни механокимёвий усулда синтез қилиш бўйича катта ҳажмдаги тажрибавий ва назарий материал тўпланган. Бу борада Hao Wu, Qiang Li, Туманов И.А., Tomislav F, Ivan H., Vjekoslav Š, Mirjana E., Robert E. D., Garay A.L, Anne P., Stuart L каби олимларнинг изланишлари алоҳида эътиборлидир.

Республикамизда тиббиётда, қишлоқ хўжалигида ва бошқа соҳаларида ишлатилаётган қатор биологик фаол координацион бирикмаларни синтез қилишга академик Н.А.Парпиев бошчилигидаги илмий мактаб, профессор Х.Т.Шарипов гуруҳи, профессор А.А.Шабилолов ва к.ф.д. Т.А.Азизов раҳбарлигидаги гуруҳ олимлари, О.Ф.Ходжаев, Х.Х. Хакимов, Кадилова Ш.К., Кадырова З.Ч. ва уларнинг ўқувчилари катта ҳиссасини қўшишган.

Оралиқ металлларнинг турли тузларини органик лигандлар билан комплекс бирикмаларини олиш технологияси ишлаб чиқилган, координацион бирикмаларнинг эритмалар ва қаттиқ фазаларда ҳосил бўлиш жараёнлари аниқланган. Синтез қилинган бирикмаларнинг физик-кимёвий хоссалари таҳлил қилинган. Оралиқ металл тузларининг амидлар билан комплексларини таҳил қилиш бўйича кенг миқёсда тажриба материаллари бўлишига қарамасдан, ишқорий-ер металлларининг нитратлари билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмалари аниқланмаган. Чунки оралиқ металллар типик комплекс ҳосил қилувчилар деб қаралган, ишқорий-ер металлари эса комплекс ҳосил қилиши қийин металллар қаторида деб қаралган.

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

реакцион қобилиятлари ва биологик хоссаларининг илмий асослари» (2017-2020 йй.) фундаментал лойиҳалари доирасида бажарилган.

Тадқиқотнинг мақсади магний ва кальций нитратларини амидли ҳосилалар билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг синтези, тузилиши ва хоссаларини аниқлашдан иборат.

Тадқиқотнинг вазифалари:

магний ва кальций нитратларининг ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид ва никотинамид билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларини синтез қилиш;

синтез қилинган координацион бирикмаларнинг таркиби, тузилиши ва хоссаларини физик-кимёвий таҳлил қилиш;

магний ва кальций нитратларнинг бир ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг электрон тузилиш геометрияси, энергетик параметрлари ва реакцион қобилиятини квант – кимёвий усуллар ёрдамида ҳисоблаш;

синтез қилинган бирикмаларнинг биологик фаоллиги ва заҳарлилигини таҳлил қилиш.

Тадқиқотнинг объекти формаид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид ва никотинамидлари, магний ва кальций нитратлари.

Тадқиқотнинг предмети магний ва кальций нитратларнинг бир турли ва аралашлигандли координацион бирикмаларининг таркиби, тузилиши, индивидуаллиги ва физик хоссалари ҳамда биологик фаоллиги аниқлаш.

Тадқиқотнинг усуллари. Дифференциал термик таҳлил, рентгенофазавий таҳлил, рентген структуравий таҳлил, ИҚ- спектроскопия ва квант-кимёвий ҳисоблаш усули.

Тадқиқотнинг илмий янгилиги қуйидагилардан иборат:

магний, кальций нитратларининг 54 та бир турли ва аралаш лигандли янги координацион бирикмалари синтез қилинган;

рентгенфазавий таҳлил ва ИҚ-спектроскопия усуллари ёрдамида синтез қилинган бирикмаларнинг индивидуаллиги ҳамда лигандлар ва нитрат анионининг марказий ионга координацияланиши аниқланган;

илк бор рентгенструктуравий таҳлил ёрдамида $[\text{Ca}(\text{NO}_3)_2(\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ координацион бирикманинг кристалл структураси аниқланган;

синтез қилинган бирикмаларнинг термик хоссалари аниқланган ва термолиз маҳсулотлари идентификацияланган;

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

Тадқиқотнинг амалий натижалари қуйидагилардан иборат:

олинган магний, кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмалари натижаларидан металл тузларининг бошқа лигандлар билан аралаш молекулали координацион бирикмаларини синтез қилиш шароитлари аниқланган;

олинган кальций нитратининг никотинамидли бирикмасининг

кристаллографик маълумотлари Cambridge Crystallographic Data Center базасига киритилганлиги натижасида уларнинг фазовий тузилиши ва барча кристаллографик катталиклари исботланган;

ишлаб чиқилган синтез усуллари ўхшаш комплексларни ёки уларнинг турига ва тузилишига яқин бўлган синтез учун шартларни танлаш имконини берган;

физик-кимёвий хоссаларини ўзаро боғлиқлиги орасида ўзига хослик қайд қилинган (бирикма тури, марказий атом табиати, координациялашган нейтрал ва ацидолигандлар, ҳамда биологик фаоллик) ва биофаол бирикмаларнинг синтез қилиш шароитлари аниқланган;

рентгенфазавий таҳлил, электрон тузилишини ҳисоблаш, термик таҳлил ва реакцион қобилиятлари аниқланган;

қишлоқ хўжалиги экинларини ўстирувчи ва ҳосилдорликни оширувчи фойдали стимуляторлар яратилган.

Тадқиқот натижаларининг ишончлилиги олинган моддаларнинг тузилиши кимёвий моддаларнинг структурасини аниқлашнинг энг тўғри ҳисобланган рентген структура таҳлили усули ёрдамида аниқланганлиги билан изоҳланади, илмий натижалар ва хулосаларнинг асосланганлиги, изланишларнинг замонавий ИҚ- спектроскопия, рентгенфазавий, термик таҳлил, биологик ва бошқа тадқиқот усулларида олинган натижалар билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг илмий ва амалий аҳамияти. Тадқиқот натижаларининг илмий аҳамияти магний ва кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли комплекс бирикмалари синтез қилишнинг мақбул шароитлари аниқланганлигида ҳамда диаква-динитрато-бис-никотинамид комплекс бирикманинг барқарор кристаллар шаклида ажратиб олинганлиги ва назарий координацион бирикмалар кимёсини бойитганлиги билан изоҳланади.

Тадқиқот натижаларининг амалий аҳамияти олинган кальций нитратининг никотинамид билан ҳосил қилган янги координацион бирикмасининг тузилиши ҳалқаро Кембриж маълумотлар базасига киритилганлиги ҳамда қишлоқ хўжалиги экинларини ўстирувчи ва ҳосилдорликни оширувчи юқори самарали стимуляторлар яратишга хизмат қилади.

Тадқиқот натижаларининг жорий қилиниши. Магний, кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмалари синтези, тузилиши ва қўлланишини тадқиқ қилиш бўйича олинган илмий натижалар асосида:

СаНит·К·ТК стимулятори Қорақалпоғистон деҳқончилик ва пахта етиштириш агротехнологияси илмий-текшириш институтида амалиётга жорий этилган (Қорақалпоғистон Республикаси Қишлоқ хўжалиги вазирлигининг 2018 йил 4июндаги 07/23-208-сон маълумотномаси). Натижада СаНит·К·ТК стимулятори билан ишлов берилган чигитнинг униб чиқиши муддатини 3–5 кунга, пахтанинг очилиш муддатини 7–10 кунга қисқартириш ва ҳосилдорликни 15–20 % ошириш имконини берган;

СаНит·К·ТК стимулятори Қорақалпоғистон Республикаси Беруний тумани фермер хўжаликлари майдонларида амалиётга жорий этилган (Қорақалпоғистон Республикаси Қишлоқ хўжалиги вазирлигининг 2018 йил 4 июндаги 07/23-208-сон маълумотномаси). Натижада СаНит·К·ТК стимулятори билан ишлов берилган чигитнинг униб чиқиши муддатини 3–5 кунга, пахтанинг очилиш муддатини 5–8 кунга қисқартириш ва ҳосилдорликни 10–15 % ошириш имконини берган;

диаква-динитрато-бис-никотинамид бирикманинг рентген тузилиш таҳлил натижалари Кембриж марказий кристаллографик маълумотлар базасига киритилган (The Cambridge Structural Database, <https://www.ccdc.cam.ac.uk/CCDC>, 1850646). Натижада базага киритилган янги модда ўхшаш моддаларни синтез қилишда фойдаланиш имконини берган.

Тадқиқот натижаларининг апробацияси. Мазкур тадқиқот натижалари 14 та, жумладан, 3 та халқаро ва 11 та республика илмий-амалий анжуманларида маъруза қилинган ва муҳокамадан ўтказилган.

Тадқиқот натижаларининг эълон қилиниши. Диссертация мавзуси бўйича жами 20 та илмий ишлар, жумладан, Ўзбекистон Республикаси Олий аттестация комиссиясининг фалсафа доктори (PhD) диссертациялари асосий илмий натижаларини чоп этиш тавсия этилган илмий нашрларда 5 та мақола республика ва 1 та мақола хорижий журналларда нашр этилган.

Диссертациянинг тузилиши ва ҳажми. Диссертация таркиби кириш, тўртта боб, хулоса, фойдаланилган адабиётлар рўйхати ва иловалардан иборат. Диссертация ҳажми 120 бетни ташкил этади.

ДИССЕРТАЦИЯНИНГ АСОСИЙ МАЗМУНИ

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

Диссертациянинг «**Оралик металл тузларининг органик фаол лигандлар билан ҳосил қилган координацион бирикмаларини синтези**» деб номланган биринчи бобида синтез, органик бирикмалар ва карбон кислота тузларининг физик-кимёвий хоссалари, формаид – HCONH_2 , ацетамид – CH_3CONH_2 , карбамид – $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, тиокарбамид – $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$, нитрокарбамид – $\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$, никотинамид – $\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ билан ҳосил қилган металл тузларининг координацион бирикмалари ва металл карбоксилатлари асосидаги ўсимликни ўстирувчи стимуляторларни ўрганиш бўйича адабиётлар шарҳи таҳлил қилинган.

Диссертациянинг «**Магний, кальций нитратларининг координацион бирикмаларининг синтези ва уларнинг таркибини аниқлаш**» иккинчи бобида реактивларни, қурилмаларни, синтез усулларини танлаш, магний ва

кальций нитратларининг дастлабки моддаларини олиш, магний ва кальций нитратларининг формаид, ацетаид, карбаид, тиокарбаид, нитрокарбаид ва никотинаидлар билан аралаш лигандли координацион бирикмаларини олиш ҳақида маълумотлар келтирилган.

Комплекс бирикмаларни синтез қилиш учун механохимёвий усул танланган, бу усул қимматбаҳо органик эритувчиларни ва маҳсулотни эритувчидан ажратишни талаб қилмайди.

Магний ва кальций нитратлари: лиганд 1: лиганд 2 аралашмаси 1:2, 1:4 ва 1:1:1 нисбатларда шарли тегирмонда хона ҳароратида олиб борилди. Магний ва кальций нитратнинг амидлар билан шарли тегирмонда механохимёвий синтезининг оптимал шароитлари аниқланди: реакция давомийлиги 0,15-0,20 соат, бир ишчи жисм (диаметри 20 мм бўлган пўлат шар), вибрация даври 10 секунд. Барча координацион бирикмалар ушбу шароитларда синтез қилинган.

Азот Дюманинг микроусулида, углерод ва водород кислород окимида ёқиб аниқланди. Синтез қилинган бирикмаларни индивидуаллигини исботлаш учун Cu-антикатодли ДРОН-2,0 қурилмасида комплекс бирикмаларнинг рентгенограммалари олинди. Текисликлараро масофаларни ҳисоблаш учун жадваллардан фойдаланилди, чизикларнинг нисбий сезгирлиги I/I_1 максимумда энг яққол намоён бўлган рефлексга нисбатан фоизда ифодаланди.

Ютилишнинг ИҚ-спектрлари намуналарни KBr билан пресслаш усули бўйича «Shimadzu» фирмасининг IRTracer-100, IR Tracer-100 ($400-4000\text{cm}^{-1}$) ва PUE и NiCAM ($400-4000\text{cm}^{-1}$) спектрометрларида олинди.

Акс этиш массивлари йиғиш «Xcalibur, Oxford Diffraction» ($\text{CuK}\alpha$ -нурланиш ($\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$) CCD-дифрактометрида олиб борилди, бунда ўткир фокусли найча «Enhance (Cu) X-ray Source» ва графитли монохроматор ишлатилди. Суратга олиш хона ҳароратида олиб борилди. Элементар ячейка параметрлари куйидагича бўлди: кристаллар уч понали, P-1, $a=10.683(1) \text{ \AA}$, $b=10.9615(9) \text{ \AA}$, $c=13.5156(11) \text{ \AA}$, $\alpha=97.726(7)^\circ$, $\beta=105.798(8)^\circ$, $\gamma=98.315(7)^\circ$. $V=1481.6(2) \text{ \AA}^3$, $Z=2$, $D_{\text{выч.}}=1.342 \text{ г/см}^3$. Тажрибавий маълумотларни йиғиш стратегияси CrysAlisPro дастурида олиб борилди. Эквивалент қайтишларни ўрталаштириш ва кучсиз қайтишларни йўқотишдан кейин 3335 қайтишдан иборат ишчи массив $I < 2\sigma(I)$ билан олинди. Ютилишга тузатиш «multi-scan» усулида CrysAlisPro дастурлар пакетида амалга оширилди. Структура бевосита усулда SHELXS-97 дастурлар комплексида тузилган ва ушбу дастурни энг кичик квадратларини тўлиқ матрицали усулида аниқлаштирилган. Барча водородсиз атомлар анизатроп аниқланган. Водород боғланиш ҳосил қилишда қатнашмаган водород атомларининг ҳолати стереокимёвий омиллар асосида ҳисобланган ва “чавандоз” моделида аниқлаштирилган. Қолган водород атомлари синтез фарқидан аниқланган ва изотроп аниқлаштирилган. Позцион ва анизатроп иссиқлик параметрларни аниқлаштиригандан кейин мос келмаслик омили $R=0,086$ га тенг бўлди. Молекуляр графикнинг тузиш SHELXTL-Plus дастурлар пакетида XP дастури ёрдамида амалга оширилди.

Молекулаларнинг квант-кимёвий ҳисоблашлари HyperChem дастурлар пакетида РМЗ яримэмпирик усулда тўлиқ оптималлаштириш йўли билан олиб борилди.

Термик таҳлил Паулик-Паулик-Эрдей тизимидаги дериватографда 10 град/мин тезликда 0,1 г намуна билан гальванометрлар сезгирлиги Т-900, ТГ-100, ДТА-1/10, ДТГ-1/10 бўлганда амалга оширилди. Натижалар атмосфера шароитида газли мухитни сув насоси билан чиқариб ёзиб олинди. Ушлагич сифатида қопқоқсиз 7 мм диаметрли платина тигели ишлатилди. Эталон сифатида Al_2O_3 олинди.

Агрокимёвий ва микробиологик таҳлил олиб бориш учун тупроқ ва ўсимлик намуналарини олиш «Методах агрохимических анализов почв и растений Средней Азии» қўлланмаси, суғориладиган пахта районларида агрокимёвий ва микробиологик тадқиқотлар услубларида амалга оширилди. Пахтани йиғиб олиш қўл ёрдамида бажарилди. Кузатувлар, тавсифлар ва ҳисоботлар «Методика полевых и вегетационных опытов с хлопчатником» усул ёрдамида бажарилди. Ҳосил кўрсаткичларини математик қайта ишлаш Б.А.Доспехов усулида амалга оширилди.

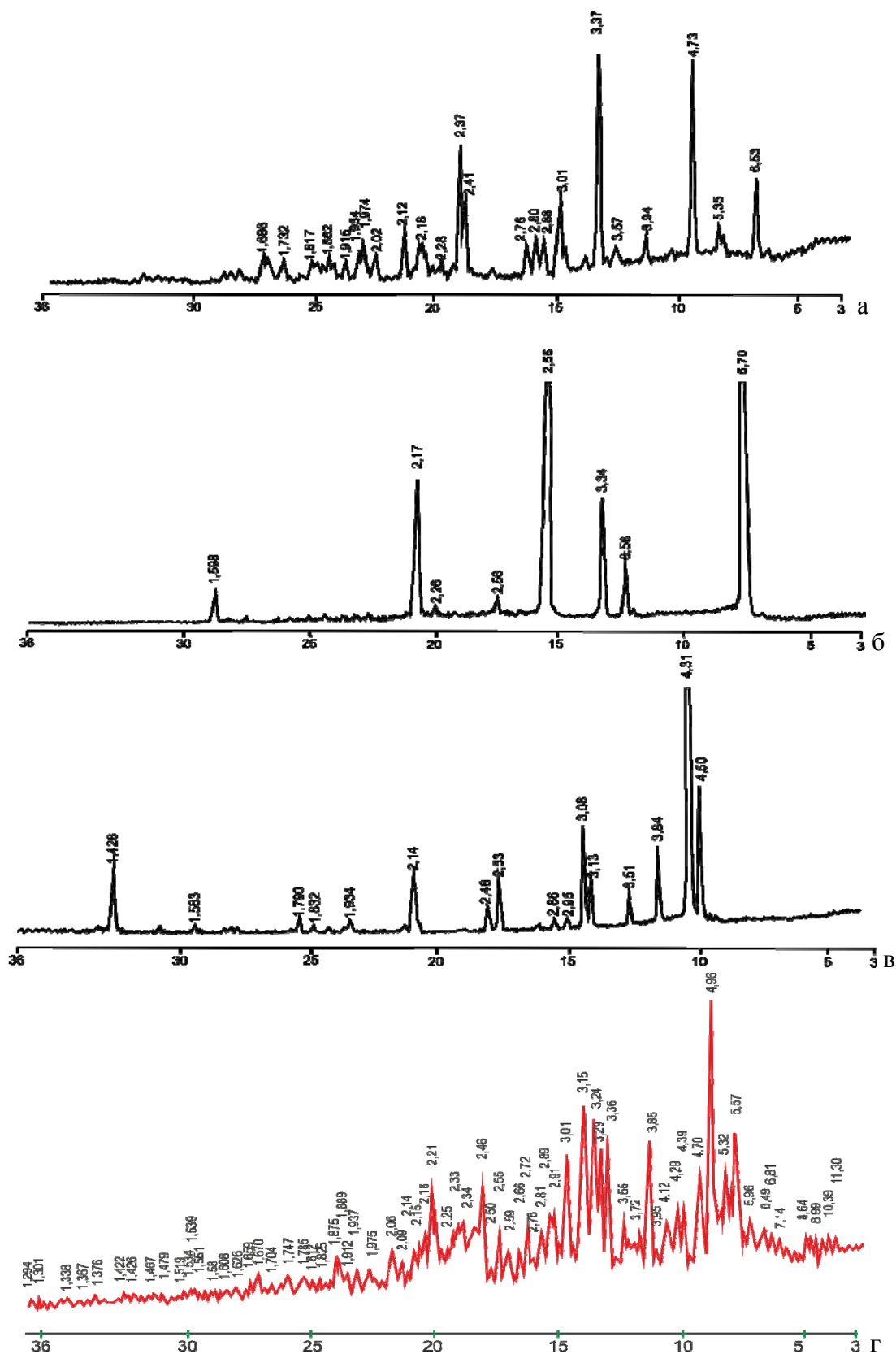
Ғўзанинг ўсиши ва ривожланишини фенологик кузатиш «Методика полевых и вегетационных опытов с хлопчатником» бўйича олиб борилди.

Диссертациянинг «Тадқиқотлар натижалари ва уларни муҳокамаси» номли учинчи бобида магний ва кальций нитратларнинг ацетамид, карбамид, нитрокарбамид, тиокарбамид ва никотинамид билан бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмалари таҳлили натижалари кўриб чиқилади. Синтез қилинган бирикмалар рентген фазавий, дериватографик усуллар ва ИҚ-спектроскопия ёрдамида таҳлил қилинган. Олинган натижалар асосида синтез қилинган бирикмаларнинг структураси таклиф қилинган ва таклиф қилинаётган структураларнинг квант-кимёвий ҳисоби олиб борилган.

Диссертациянинг «**Магний ва кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг рентгенфазавий таҳлили**» деб номланган учинчи бобининг биринчи бўлимида магний ва кальций нитратларининг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг индивидуаллигини аниқлаш учун рентгенфазавий таҳлил натижалари келтирилган. Олинган бирикмаларнинг индивидуаллиги лигандларнинг эркин молекулалари ва синтез қилинган бирикмаларнинг дифрактограммаларини таққослаш йўли билан исботланган. Текисликлараро масофалар ва нисбий сезгирликлар орасидаги фарқ синтез қилинган бирикмалар индивидуал кристалл панжарага эга эканлигини кўрсатади (1-расм).

Диссертациянинг учунчи бобининг иккинчи қисмида ИҚ-спектроскопия маълумотлари асосида лигандлар ва олинган комплекс бирикмаларнинг тебраниш частоталари ўрганилган. Карбамид, формаид, ацетамид, нитрокарбамид лигандларида координацияланиш кислород ёки азот атомлари орқали содир бўлиши маълум. Агар координация азот атомлари орқали содир бўлса, у ҳолда $C=O$ гуруҳининг валент тебраниш частотаси ортиши ва $C-N$

боғи валент тебранишлар частотасининг камайиши кузатилади. Агар координация кислород орқали содир бўлса, у ҳолда C=O гуруҳининг валент тебраниш частотаси камайиш ҳолати кузатилади.



1-расм. Рентгенограмма: а- $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; б- CH_3CONH_2 ; в- $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$, г- $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Диссертациянинг «Магний ва кальций нитратларининг бир ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг ИҚ-спектроскопияси» деб номланувчи учинчи бобнинг иккинчи бўлимида ИҚ-спектроскопия маълумотлари асосида лигандларнинг ва олинган комплекс бирикмаларнинг тебраниш частоталари тахлил қилинган. Карбамидли, формаидли, ацетаидли, нитрокарбамидли лигандларда координацияланиш кислород ёки азот ҳисобига бориши мумкин. Агарда координация азот атоми орқали борса, C=O гуруҳнинг тебраниш частотаси ортиши ва C-N гуруҳнинг тебраниш частотаси пасайиши кузатилади. Агарда координацияланиш кислород атоми орқали содир бўлса, C=O гуруҳнинг валент тебраниш частотаси камайди.

Янги синтез қилинган комплекс бирикмаларнинг ИҚ-спектрларининг келтирилган қийматларидан кўришиб турибдики, ацетаид, карбамид, формаид ва нитрокарбамидлардаги C=O гуруҳининг валент тебраниш частотаси 5-40см⁻¹га камайди, бу эса кислород атоми орқали координацияланганлигини кўрсатади.

Тиокарбамиднинг координацияланиши олтингугурт ёки азот атоми орқали бориши мумкин. Тиокарбамид билан ҳосил қилган комплекс бирикмаларида CS- боғининг валент тебранишлар частотаси эркин ҳолатига нисбатан камайиши, CN- боғининг валент тебранишлар частотаси ортиши кузатилди. Бу эса тиокарбамид молекуласи марказий атом билан олтингугурт атоми орқали координацияланишини исботлайди.

Никотинаид молекуласини ИҚ-спектрида халқа тебраниши 1593см⁻¹ кузатилди. Аралаш лигандли комплексларда ушбу тебраниш 22-44см⁻¹ га ортган, 1029- ν_к ва 703 см⁻¹ даги ютилиш частоталари халқа тебранишига мос келади ва комплексларда у ўзгармаган. Ушбу ўзгаришлар аралаш комплекс бирикмаларда магний ва кальций атомлари билан никотинаид молекуласини карбонил гуруҳи кислороди орқали координацияланишини кўрсатади, аммо бир хил комплексларда никотинаидда 1646-1650см⁻¹ да кузатиладиган тебранишлар 1590-1625см⁻¹ га пасайган ва ушбу комплексларда координацияланиш никотинаиднинг карбоксил гуруҳи кислороди орқали боришидан дарак беради.

1-жадвал

Формаид, ацетаид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид ва никотинаидларнинг эркин молекулалари ва уларнинг магний ва кальций нитратлари билан координацион бирикмаларининг ИҚ-спектр ютилишидаги характерли частоталари (см⁻¹)

Бирикмалар	ν(C=O)	ν(C-N)	ν(CS), δ(CS)	ν _к , δ(C=O)
HCONH ₂	1709	1316		
CH ₃ CONH ₂	1670	1390		
CO(NH ₂) ₂	1680	1466		
CS(NH ₂) ₂			730,632	
O ₂ NHNCONH ₂	1701	1466		
Mg(NO ₃) ₂ ·2HCONH ₂ ·H ₂ O	1680	1400		
Mg(NO ₃) ₂ ·4HCONH ₂ ·2H ₂ O	1685	1390		
Ca(NO ₃) ₂ ·2HCONH ₂ ·H ₂ O	1675	1425		

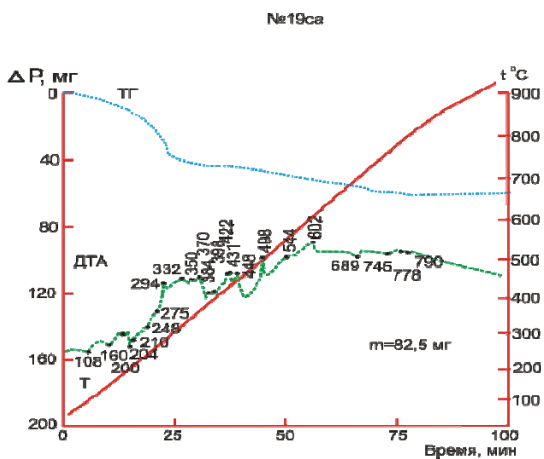
Бирикмалар	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}-\text{N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\delta(\text{CS})$	$\nu_{\text{C}},$ $\delta(\text{C}=\text{O})$
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{HCONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1650	1410		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1660	1428		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1415		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1670	1474		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1473		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$			715, 632	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$			725, 632	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2$	1680	1490		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1650	1475		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680, 1650	1470		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1680, 1655	1472		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$				1625, 1684, 718
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$				1621, 1670, 719
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1670	1392		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1682	1455, 1380		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680		730, 665	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1683	1620		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690, 1685	1590, 1623		1615
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1390, 1504		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1660	1460	730, 625	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1450		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1670	1425		1590, 1025, 703
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot (\text{CONH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1685	1460		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1710, 1675	1485		1590, 1025, 690
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1671	1455	730, 665	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1715	1460	720, 680	1615, 1030, 695
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1710	1470		1630, 1025, 690
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665, 1690	1334, 1390		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1695, 1673	1380, 1430		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690		735, 665	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1685	1380		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680,	1323		1615, 1030,

Бирикмалар	$\nu(\text{C=O})$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\delta(\text{CS})$	$\nu_{\text{C}},$ $\delta(\text{C=O})$
	1635			710
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690	1325		1590, 1030, 712
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1433		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1424	722, 665	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1660	1452		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2$	1675	1470	733, 675	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1660	1465		1622, 1021, 675
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1668	1464		1633, 1032, 700
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1672	1460		1634, 1029, 695
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1674	1465		1624, 1034, 675
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1715	1420	726, 663	1614, 1030, 663
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1635	1427	735, 710	1618, 1035, 704
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1675	1469		1637, 1023

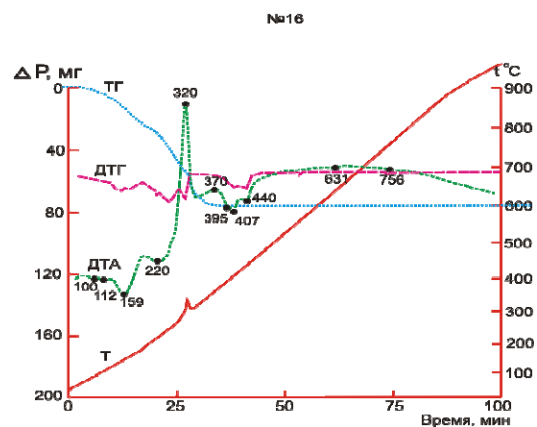
Диссертациянинг “Магний ва кальций нитратларнинг бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларини дериватографик таҳлил қилиш” номли учинчи бобининг учинчи бўлимида синтез қилинган бирикмаларнинг термик хоссалари, термик эффектлар ва термолиз маҳсулотлари келтирилган.

Термик анализ жараёнларида дегидратация, декарбониллаш, оксидланиш, қайтариллиш, парчаланиш ва ўрин олиш каби реакцияларни кузатишимиз мумкин. Синтез қилинган комплекс бирикмалар 80-120°C гача қиздирилганда ташқи сферадаги сув молекулаларининг чиқиб кетиши кузатилади. Ацетамидли координацион бирикмаларни 200-220°C гача қиздирилганда карбонат кислота ва аммиакгача парчаланиши, карбамидли бирикмаларнинг 160-180°C да аммиак ва карбонат ангидридга парчаланиши, формамидли бирикмаларнинг 155-165°C да аммиак ва ис газига парчаланиши кузатилиб, газ моддаларнинг учиб кетиши, бошқа моддаларнинг деструкцияси кузатилади. Нитрокарбамидли координацион бирикмаларимиз 150-160°C да изоциан кислота ва нитрамидга парчаланиши кузатилиб, температуранинг кўтариллиши ҳисобига изоциан кислота аммиак ва карбонат ангидридга, нитрамид эса азот (I) оксиди ва сувга парчаланиб кетиши аниқланган.

450-500°C дан юқори ҳароратда содир бўладиган экзотермик эффектларда кальций нитратининг парчаланиб кальций нитрити, кейинги қиздиришда (561°C дан юқори) кальций оксиди ҳосил қилиши, 300°C дан юқори ҳолатда магний нитратининг парчаланиб магний оксидини ҳосил қилиши аниқланган (2- ва 3-расм).



2-расм. $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ нинг дериватограммаси

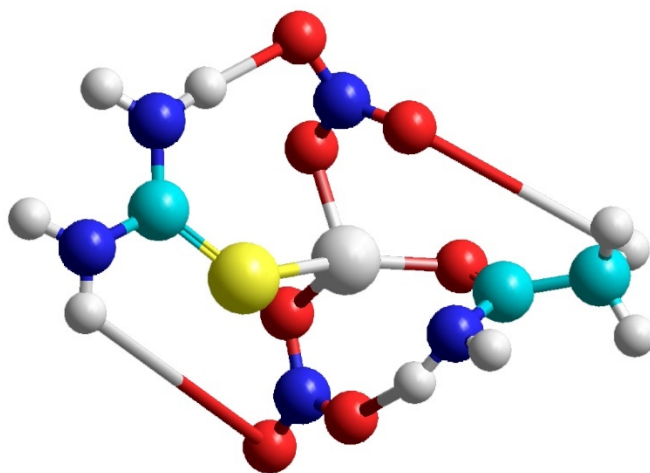


3-расм. $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ нинг дериватограммаси

Диссертациянинг учунчи бобининг тўртинчи бўлимида квант-кимёвий ҳисоблаш натижалари келтирилган. Бу бобда $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ бирикмаларининг молекулаларини геометриясини аниқлаш мақсадида квант-кимёвий ҳисоблашлар амалга оширилган.

Ҳисоблашлар NupercChem 8.07 дастурида яримэмперик усулда PM3 олиб борилган.

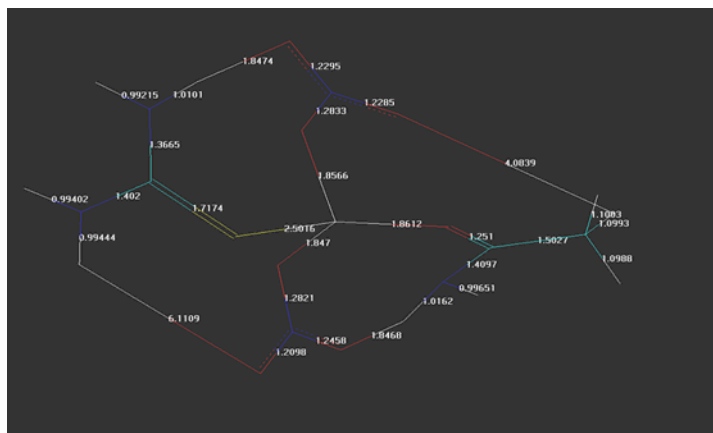
Квант-кимёвий ҳисоблаш асосида бирикмаларнинг фазовий тузилиши таклиф қилинди (4- расм).



4-расм. $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ молекуласининг фазовий тузилиши

Ҳар бир координацион бирикма учун тўртта тетраэдрик ва тўртта октаэдрик формулалари, тузилишлари таклиф қилинган. Октаэдрик формада нитрат кислота қолдиғи бидентан ҳолатда бўлиши белгиланди. Уларнинг оптимал геометрияси, атомлар орасидаги боғ узунликлари, атомларнинг заряд қийматлари, ҳосил бўлиш иссиқлиги, юқори эгаллаган ва қуйи вакант молекуляр орбиталлар энергиялари аниқланган. Бу параметрлар асосида энг

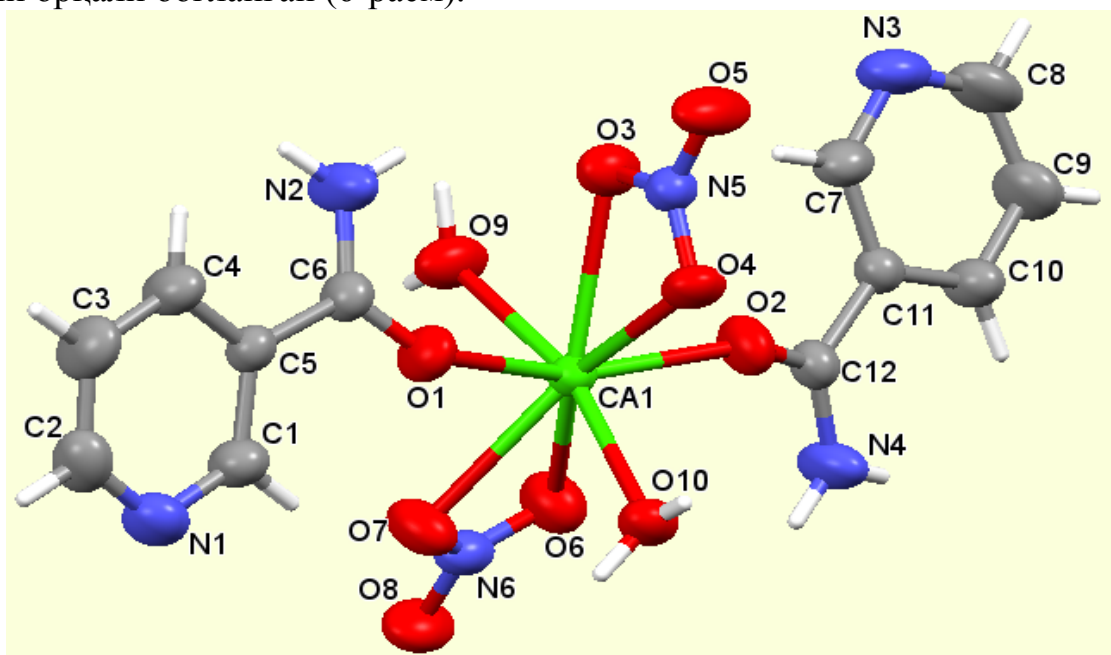
барқарор комплекс танланди. Шунга кўра марказий атом билан лиганд молекуласидаги электродонор атом орасидаги боғ узунлиги қанча катта бўлса уларнинг барқарорлиги шунча камаяди. (5-расм)



5-расм. $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ молекуласида атомлар орасидаги боғ узунликлари

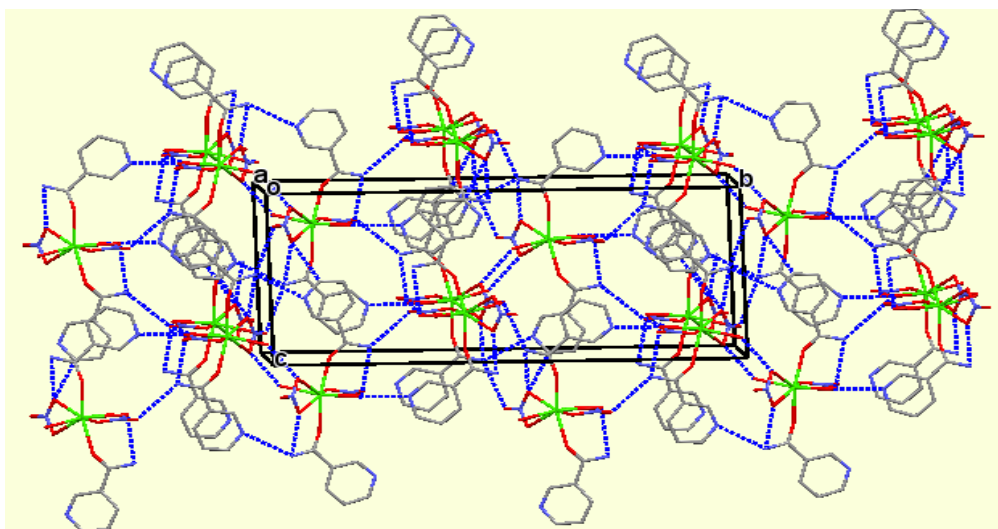
Диссертациянинг “Кальций нитратининг никотинамид билан комплекс бирикмасининг кристалл структураси” номли учунчи бобининг бешинчи қисмида кальций нитратининг никотинамид билан ҳосил қилган координацион бирикмасининг рентген структура таҳлили келтирилган.

Биринчи марта янги координацион бирикма диаква-динитрато-бис-никотинамид кальций синтез қилинган. Олинган комплекснинг тригонал додекаэдр шаклда марказий кальций атоми лигандлар билан саккизта кислород атоми орқали боғланган. Бунда иккита нитрат кислота қолдиғи бидентат шаклда бириккан, никотинамид эса карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали боғланган (6-расм).



6-расм. $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ молекуласининг фазовий тузилиши.

Олинган координацион бирикмада марказий атом билан ҳамма лигандлар кислород атоми орқали боғланса ҳам улар орасидаги боғ узунлиги ҳар хиллиги аниқланди. Масалан кальций ва нитрат кислота қолдиғидаги кислород атоми (Ca1 -O3 2.5754 (16) Ca1 -O4 2.5824 (17)) ўртасидаги боғ узунлиги кальций ва никотинамид карбоксил гуруҳидаги кислород (Ca1 -O1 2.3361 (16) Ca1 -O2 2.3150 (16)) атомига нисбатан узунроқ эканлиги аниқланди. Икки атом электроманфийликлари айирмаси қанча катта бўлса боғ узунлиги шунча ортади, лекин ушбу комплексида тригонал додекаэдр шаклини ҳосил қилишда қатнашган барча тугунларда кислород атоми бўлишига қарамай боғ узунлиги ҳар хил бўлди. Бунга сабаб кислород атомларининг азот, углерод ва водород атомлари билан боғланганлигидадир. Улардаги электрон зичликлар турлича ҳолда марказий атом ва кислород ўртасидаги боғга таъсир қилганлиги сабабли боғ узунлиги ҳар хил бўлишига олиб келади. Олинган координацион бирикманинг кристалл структурасида икки молекула никотинамиднинг бир-бирига симметрик ҳолда озгина бурчак остида (O1 - Ca1 -O2 158.80 (8)), икки молекула нитрат кислота қолдиғининг бир-бирига нисбатан перпендикуляр ҳолатда (O1 -Ca1 -O3 80.95(6) , O1 -Ca1 -O4 79.17(7), O1 -Ca1 -O6 124.34(7), O1 -Ca1 -O7 75.65(7)) жойлашганлигини кўриш мумкин.



7-расм. $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ элементар ячеяда кристаллнинг жойлашиши.

Диссертациянинг тўртинчи «Олинган натижаларнинг ўрганиш ва амалиётда қўлланилиши» бобида синтез қилинган бирикмаларнинг биологик фаоллиги ўрганилди.

Олиб борилган тадқиқотлар натижасида ғўзанинг ривожланишини барча фазаларига ижобий таъсир кўрсатувчи ўстирувчи стимулятор $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ аниқланган. Эталон сифатида Т-86 препарати қўлланилди. Назорат сифатида стимулятор препаратлар билан ишланмаган ўсимликлар хизмат қилди. Стимулятор қўллаб кўрилганда

пахтанинг ҳосилдорлиги ошганлиги, кўсаклар сони кўпайганлиги, ҳосилга эртароқ кирганлигини кузатилган.(2-жадвал)

2-жадвал

Ўсиш стимуляторининг пахта ривожланиши ва ҳосилдорлигига таъсири

№	Вариантлар	Пахта массаси г/4 та идишда			Жами			
		1 терим	2 терим	Жами	Кўсаклар сонидона/идиш	Бир кўсак оғирлиги г да	Пахта оғирлиги г/идиш	%
1	N ₂₀₀ P ₁₄₀ K ₆₀ -назор	235,7	206,6	442,3	17,8	6,5	114,5	100
2	T-86-эталон	267,3	200,7	467,9	19,6	6,2	123,0	107,2
3	Ca(NO ₃) ₂ ·K·TK·H ₂ O	292,3	211,6	503,9	21,5	5,7	125,9	112,6

Шундай қилиб янги координацион бирикма Ca(NO₃)₂·K·TK·H₂O пахтанинг фенологик ва ҳосилдорлигига таъсири ўрганилди. Олинган натижалардан келиб чиқиб, Ca(NO₃)₂·K·TK·H₂O препаратни ғўзанинг ўстирувчи стимулятор сифатида тавсия қилиш мумкин.

ХУЛОСАЛАР

1. Илк бор магний ва кальций нитратларнинг формаид, ацетаид, карбаид, тиокарбаид, нитрокарбаид ва никотинаид билан 54 та янги бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмалари синтез қилинди.

2. Ренгенофазовий таҳлил усули ёрдамида формаид, ацетаид, карбаид, тиокарбаид, нитрокарбаид ва никотинаид ҳамда магний ва кальций нитратларининг янги бир турли ва аралаш лигандли координацион бирикмаларининг ўзаро текисликлари орасидаги масофа ва нисбий сезгирликларини мос келмаслиги аниқланди, бу эса синтез қилинган координацион бирикмаларнинг индивидуал кристалл панжарага эга эканлиги билан изоҳланади.

3. Синтез қилиб олинган бирикмаларнинг дериватографик усул ёрдамида термик барқарорлиги аниқланган, эндо- ва экзоэффектлар топилган ҳамда термолиз маҳсулотлари идентификацияланади.

4. Синтез қилинган бирикмаларнинг ИҚ-спектрларини таҳлил қилиш натижасида карбаид, ацетаид, формаид, нитрокарбаид молекулаларини карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали, тиокарбаидли комплексларда бўлса олтингугурт атоми орқали, бир хил лигандли координацион бирикмаларда никотинаид молекуласи карбонил гуруҳи кислород атоми орқали, аралашлигандли координацион бирикмаларда эса гетерохалқа азоти орқали координацияланиши кўрсатилди.

5. Синтез қилинган бирикмаларнинг тузилиши, координацион тугун геометрияси, валент бурчаклари, боғ узунликлари ва атомларда заряд тақсимланиши минимал ҳосил бўлиш иссиқлиги принциpidан келиб чиқиб учта синтез қилинган бирикма учун квант-кимёвий усулда ҳисобланади.

6. Рентгенструктуравий таҳлил усули ёрдамида $[Ca(H_2O)_2(C_5H_4NC(O)NH_2)_2(NO_3)_2]$ таркибли координацион бирикманинг тузилиши аниқланиб, бунда сувнинг кислород атоми ва никотинамиднинг карбонил гуруҳидаги кислород атоми орқали монодентат, нитрат-анионлар эса кислород атомлари орқали бидентат координацияланиши кўрсатилди.

7. Биологик фаолликни таҳлил қилиш натижасида синтез қилинган бирикмалар қаторида қишлоқ хўжалиги экинлари учун янги стимулятор $Ca(NO_3)_2 \cdot CO(NH_2)_2 \cdot CS(NH_2)_2 \cdot H_2O$ аниқланди. Препаратни қўлланилиши чигитни униб чиқиш муддатини камайтиришга, вегетация даврининг қисқаришига ва пахта ҳосилдорлигини оширишга олиб келади.

**НАУЧНЫЙ СОВЕТ DSc27.06.2017.К.01.03
ПО ПРИСУЖДЕНИЮ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ПРИ НАЦИОНАЛЬНОМ
УНИВЕРСИТЕТЕ УЗБЕКИСТАНА**

ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ И НЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ

ДЖУМАНАЗАРОВА ЗУЛФИЯ КОЖАБОВНА

**СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И СВОЙСТВА ОДНОРОДНЫХ И
СМЕШАННОЛИГАНДНЫХ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ
НИТРАТОВ МАГНИЯ И КАЛЬЦИЯ**

02.00.01 – Неорганическая химия

**АВТОРЕФЕРАТ ДИССЕРТАЦИИ ДОКТОРА ФИЛОСОФИИ (PhD)
ПО ХИМИЧЕСКИМ НАУКАМ**

Ташкент-2018

Тема диссертации доктора философии (PhD) зарегистрирована в Высший аттестационной комиссии при Кабинете Министров Республики Узбекистан за номером В2018.2.PhD/К58.

Диссертация выполнена в Институте общей и неорганической химии.

Автореферат диссертации на трёх языках (узбекский, русский и английский(резюме)) размещен на веб-странице ученого совета по адресу ik-kimyo.nuu.uz и информационно-просветительском портале «ZiyoNET» (www.ziyo.net).

Научный руководитель:

Азизов Тохир Азизович
доктор химических наук, профессор

Официальные оппоненты:

Умаров Бако Бафоевич
доктор химических наук, профессор
Нуралиева Гузал Абдухамидовна
кандидат химических наук, доцент

Ведущая организация:

Самаркандский государственный университет

Защита диссертации состоится « ____ » _____ 2018 года в ____ часов на заседании Научного совета DSc.27.06.2017.K.01.03 при Национальном университете Узбекистана. (Адрес: 100174, Ташкент, ул. Университетская 4, Тел: (99871) 227-12-24; факс: (99824) 246-53-21, 246-02-24. e-mail: chem0102@mail.ru Административное здание Национального университета Узбекистана).

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-ресурсном центре Национального университета Узбекистана за № ____ 100174, Ташкент, ул. Университетская 4, Тел.: (99871) 246-67-71)

Автореферат диссертации разослан « ____ » _____ 2018 года.
(протокол рассылки № ____ от _____ 2018 года)

Х.Т. Шарипов

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

Д.А.Гафурова

Ученый секретарь научного совета
по присуждению ученых степеней, д.х.н.

Н.А.Парпиев

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

Введение (Аннотация диссертации доктора философии (PhD))

Актуальность и необходимость темы диссертации. В мире получение координационных соединений переходных и щелочно-земельных ионов на основе полидентатных лигандов и определение их свойств имеет практическое и теоретическое важное значение. В настоящее время достигается высокая эффективность за счет использования данных координационных соединений в качестве лекарственных средств в медицине, биологически активных веществ в промышленности и химических препаратов: стимуляторов, пестицинов, минеральных удобрений, а также дефолиантов и десикантов в сельском хозяйстве.

В мире настоящее время ведутся исследования по развитию разработки условий синтеза высоко эффективных и имеющих комплексное действие стимуляторов. В этом отношении важной задачей является обоснование создания стимуляторов повышающих урожайность растений, ускоряющих физиологические процессы, в том числе разработка оптимальных условий синтеза и получения; определения состава и строения координационных соединений ионов кальция с магния с полидентатными органическими лигандами - амидами; определение природы координационной связи при координации лигандов к центральному иону и при взаимном замещении лигандов, а также определение термической устойчивости синтезированных соединений.

В Республике налажено производство и внедрение на практику высокоэффективных, импортозамещающих, ресурсосберегающих средств стимулирующих рост растений на основе местного сырья для развития сельского хозяйства. В третьем направлении Стратегии действий по дальнейшему развитию Республики Узбекистан определены важные задачи по «углублению структурных реформ и динамичному развитию сельскохозяйственного производства, дальнейшему укреплению продовольственной безопасности страны, расширению производства экологически чистой продукции, значительному повышению экспортного потенциала аграрного сектора»¹. В этой сфере, в том числе, создание дешевых препаратов нового типа, повышающих урожайность сельскохозяйственных культур, ускоряющих их рост и экономящих воду является актуальной задачей, приобретает важную роль.

Данное диссертационное исследование в определенной степени служит выполнению задач, Указе Президента Республики Узбекистан УП-4947 «Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года и в Постановление от 14 марта 2017 года № ПП-2831 «О дополнительных мерах по повышению эффективности проектных работ в базовых отраслях

¹Указ Президента Республики Узбекистан за №УП 4947 «Стратегия действий по пяти приоритетным направлениям развития Республики Узбекистан в 2017-2021 годах» от 7 февраля 2017 года.

экономики», а также в других нормативно-правовых документах, принятых в данной сфере.

Соответствие исследования приоритетным направлениям развития в республике науки и технологий. Настоящее исследование выполнено в соответствии с приоритетными направлениями развития науки и технологий VII. Химические технологии и нанотехнологии.

Степень изученности проблемы. Работы Возняковской Ю.М., Кукушкина Ю.Н., Иманакунова Б.И., Сулаймонкулова К.С., Цивадзе Г.В., Цинцадзе Г.В., Харитоновой Ю.А., Б.Кола, М.Холта, Хамилтона В.С., Козловой И.А., Савинкиной Е.В., Кузьминой Н.Е., Палкиной К.К., Пенланда Р.Б., Рау Т.Ф., Дурсуна А.К. и других ученых мира посвящены изучению реакций органических лигандов с солями нескольких металлов, исследованию состава, строения, термического поведения, электронного строения, реакционной способности и биологической активности данных соединений.

В настоящее время накоплен большой объем опытного и теоретического материала по механохимическому синтезу комплексных соединений. Особое внимание заслуживают работы Hao Wu, Qiang Li, Туманов И.А., Tomislav F, Ivan H., Vjekoslav Š, Mirjana E., Robert E. D., Garay A.L, Anne P., Stuart L и др.

В республике синтезу биологически активных координационных соединений используемых в медицине, сельском хозяйстве и в других отраслях значительный вклад внесли научная школа академика Н.А.Парпиева, группа профессора Х.Т.Шарипова, группа ученых под руководством профессора А.А.Шабилолова и д.х.н. Т.А.Азизова, О.Ф.Ходжаев, Х.Х. Хакимов, Кадирова Ш.К., Кадырова З.Ч. и их ученики.

Разработана технология получения комплексных соединений солей переходных металлов с органическими лигандами, определены процессы образования координационных соединений в растворах и твердой фазе. Исследованы физико-химические свойства синтезированных координационных соединений. Несмотря на обширный экспериментальный материал по исследованию комплексов солей переходных металлов с амидами, отсутствовали материалы по однородным и смешаннолигандным координационным соединениям нитратов щелочно-земельных металлов с амидами. Потому что, переходные металлы рассматриваются как типичные комплексообразователи, при этом щелочно-земельные металлы рассматриваются как вещества трудно образующие комплексные металлы.

Связанность темы диссертации с научно-исследовательскими работами научно-исследовательского учреждения, в котором была выполнена диссертация. Исследование диссертации выполнено в рамках фундаментальных проектов Плана научно-исследовательских работ Института Общей и неорганической химии ФА-Ф7-Т168 «Регистрация научных основ синтеза ряда металлов с полифункциональным воздействием, их строение, кристаллическая электронная структуры, реакционные способности, химические и биологические свойства» (2012-2016 года) и ФА-Ф7-012 «Научные основы синтеза координационных соединений

полифункционального воздействия с новым смешанным лигандом, их строение, реакционные способности и биологические свойства » (2017-2020 года).

Целью исследования являлось синтез однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с амидами и определение строения и свойств синтезированных соединений.

Задачи исследования:

синтез однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидом и никотинамидом;

физико-химическое исследование состава, строения и свойств синтезированных координационных соединений;

расчет геометрии электронного строения, энергетических параметров и реакционной способности однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция квантовохимическими методами;

исследование биологической активности и ядовитости синтезированных соединений.

Объектом исследования формамид, ацетамид, карбамид, тиокарбамид, нитрокарбамид и никотинамиды, нитраты магния и кальция.

Предметом исследования определение состава, строения, индивидуальности и физических свойств, а также биологической активности однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция.

Методы исследования. Дифференциальный термический анализ, рентгенофазовый анализ, рентгеноструктурный анализ, ИК-спектроскопия и квантовохимические методы расчета.

Научная новизна исследования заключается в следующем:

синтезировано 54 новых однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция;

определены методами рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии индивидуальность синтезированных соединений и координация лигандов и нитрат анионов к центральному иону;

впервые определена методом рентгеноструктурного анализа кристаллическая структура координационного соединения состава $[\text{Ca}(\text{NO}_3)_2(\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$;

идентифицированы продукты термолиза и определены термические свойства синтезированных соединений;

определены квантовохимическими методами энергетические параметры, распределение зарядов на атомах, геометрия и реакционные способности синтезированных соединений.

Практические результаты исследования состоят из следующих:

определены по результатам синтеза однородных и смешанолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция условия синтеза

смешанномолекулярных координационных соединений солей металлов с другими лигандами;

доказаны в результате внесения в кристаллографическую базу Cambridge Crystallographic Data Center кристаллической структуры никотинамидного соединения нитрата кальция пространственное строение и все кристаллографические величины;

разработанные методы синтеза дали возможность выбора условий для проведения аналогичных синтезов других комплексов;

определены условия синтеза биоактивных соединений и зафиксирована специфичность взаимосвязи физико-химических свойств (тип соединения, природа центрального атома, координированные нейтральные и ацидолиганды, биологическая активность);

определены рентгенофазовый анализ, расчет электронного строения, термический анализ и реакционная способность;

создан полезный стимулятор роста и повышения урожайности сельскохозяйственных растений.

Надежность результатов исследования объясняется определением строения полученных веществ при помощи метода анализа рентгеновой структуры (АРС), являющейся абсолютным методом определения, обоснованность научных результатов и заключений объясняется результатами, полученными с помощью современной ИК- спектроскопии, рентгенофазового, термического анализа, биологических и других методов исследования.

Научное и практическое значение результатов исследования. Научная значимость результатов исследования заключается в том, что определены оптимальные условия синтеза однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция, а также выделен в устойчивый кристалл комплексного соединения диаква-динитрато-бис-никотинамид и обогащена теоретическая химия координационных соединений.

Практической значимостью результатов исследований заключается в том является включение в базу данных Кембриджа строения нового координационного соединения нитрата кальция с никотинамидом, а также создание эффективного стимулятора роста и повышения урожайности сельскохозяйственных растений.

Внедрение результатов исследования. На основе научных результатов, полученных при исследовании синтеза, строения и использования однородных и смешанных лигандных координационных соединений нитратов магния и кальция было достигнуто следующее:

СаНит·К ТК стимуляторы внедрены на практику в научно-техническом институте земледелия и агротехнологии хлопководства Каракалпакстана (справка Министерства сельского хозяйства Республики Каракалпакстан за № 07/23-208 от 4 июня 2018 года). В результате этого появляется возможно сроков прорастания семян хлопчатника, обработанных стимулятором СаНит·

К·ТК сократить на 3-5 дней, срок распускания коробочек сократить на 7-10 дней, а урожайность повысилась на 15-20 %;

CaНит· К·ТК стимуляторы внедрены на полях фермерских хозяйств Берунийского района Республики Каракалпакстан (справка Министерства сельского хозяйства Республики Каракалпакстан за № 07/23-208 от 4 июня 2018 года). В результате этого появляется возможно сроков прорастания семян хлопчатника, обработанных стимулятором CaНит· К·ТК сократить на 3-5 дней, срок распускания коробочек сократить на 5-8 дней, а урожайность повысилась на 10-15%;

результаты рентгеноструктурного анализа строения диаква-динитрато-бис-никотинамида включены в базу кристаллографических данных Кембриджа (The Cambridge Structural Database, <https://www.ccdc.cam>, CCDC, 1850646). Это даст возможность использования этих данных при синтезе аналогичных веществ.

Апробация результатов исследования. Результаты исследования были доложены и обсуждены на 14 конференциях, в том числе на 3 международных и 11 республиканских научно-практических конференциях.

Публикация результатов исследования. По теме диссертации опубликовано всего 20 научных работ, из них 6 научных статей, в том числе 5 в республиканских и 1 в международных журналах, рекомендованных для публикации основных научных результатов диссертации доктора философии (PhD) Высшей аттестационной комиссией Республики Узбекистан

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка использованной литературы и приложения. Объем диссертации составляет 120 страниц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В **Введении** обоснованы актуальность и необходимость проведенных исследований, определены цели и задачи, объекты и предметы, соответствие приоритетным направлениям развития науки и технологий в республике, изложены научная новизна и практические результаты исследования, раскрыты научное и практическое значение полученных результатов, практическое внедрение результатов исследования, сведения об опубликованных работах и структуре диссертации.

В первой главе диссертации «**Синтез координационных соединений с активными органическими лигандами и промежуточными солями металлов**» проанализирована литература по синтезу, физико-химическим свойствам органических соединений и солей карбоновых кислот, координационным соединениям солей металлов с формамидом – HCONH_2 , ацетамидом – CH_3CONH_2 , карбамидом – $\text{CO}(\text{NH}_2)_2$, тиокарбамидом – $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$, нитрокарбамидом – $\text{O}_2\text{NHNCONH}_2$, никотинамидом – $\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$ стимуляторов на основе карбоксилатов металлов, ускоряющих развитие растений.

Во второй главе диссертации «**Синтез координационных соединений**

нитратов магния, кальция и определение их состава» приведены сведения о реактивах, выборе устройств, методов синтеза, получения первичных веществ нитратов магния и кальция, получения смешанных лигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с формамидом, ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидом и никотинамидом. В литературе нет сведений об амидах нитрата магния и кальция и смешанных лигандных координационных соединениях.

Для синтеза комплексных соединений выбран механохимический метод, этот метод не требует дорогостоящих органических растворов и отделения растворителей от продуктов реакций.

Смесь нитратов магния и кальция:лиганд1:лиганд2 в соотношении 1:2, 1:4 и 1:1:1 растирали при комнатной температуре в шаровой мельнице. Определены оптимальные условия для проведения механохимического синтеза координационных соединений нитратов магния и кальция с амидами в шаровой мельнице: продолжительности реакции 0,15-0,20 часов, одно рабочее тело (стальной шар диаметром 20 мм), период вибрации 10 секунд. Все реакции синтеза координационных соединений проведены в этих условиях.

Азот определялся по микрометоду Дюма, углерод и водород сжиганием в токе кислорода. Для установления индивидуальности синтезированных комплексных соединений снимались рентгенограммы на установке ДРОН-2,0 с Cu-антикатодом. Для расчета межплоскостных расстояний использовались таблицы, а относительная интенсивность линии I/I_1 , определялась в процентах от наиболее сильно выраженного рефлекса в максимуме.

ИК - спектры поглощения записывали на спектрофотометрах, IRTracer-100 фирмы «Shimadzu». IRTracer-100 ($400-4000\text{см}^{-1}$) и PУE и NiCAM ($400-4000\text{см}^{-1}$) с применением методики прессования образцов с KBr.

Сбор массива отражений производился на CCD-дифрактометре «Xcalibur, OxfordDiffraction» ($\text{CuK}\alpha$ -излучения ($\lambda = 1.5418\text{Å}$), использовалась острофокусная трубка «Enhance (Cu) X-ray Source» и графитовый монохроматор. Съёмка проводилась при комнатной температуре. Параметры элементарной ячейки были следующими: кристаллы триклинные, пр.гр. P-1, $a=10.683(1)\text{Å}$, $b=10.9615(9)\text{Å}$, $c=13.5156(11)\text{Å}$, $\alpha=97.726(7)^\circ$, $\beta=105.798(8)^\circ$, $\gamma=98.315(7)^\circ$. $V=1481.6(2)\text{Å}^3$, $Z=2$, $D_{\text{выч.}} = 1.342\text{ г/см}^3$. Стратегия сбора экспериментальных данных осуществлялась с помощью программы CrysAlisPro. После усреднения эквивалентных и удаления слабых отражений с $I < 2\sigma(I)$ получен рабочий массив, состоящий из 3335 отражений. Поправка на поглощение производилась методом «multi-scan», в пакете программ CrysAlisPro. Структура расшифрована прямым методом с помощью комплекса программ SHELXS-97 и уточняли полноматричным методом наименьших квадратов программой SHELXL-97. Все неводородные атомы уточнялись анизотропно. Положения атомов водорода, не задействованных в водородных связях, были рассчитаны на основе стереохимических критериев и уточнялись по модели "наездника". Остальные атомы водорода устанавливались из разностного синтеза и уточнялись изотропно. Фактор расходимости после

окончательного этапа уточнения позиционных и анизотропных тепловых параметров равен $R=0,086$. Построение молекулярной графики осуществляли программой XP в пакете программ SHELXTL-Plus

Квантовохимические расчеты молекул проведены полуэмпирическим методом PM3 в пакете программ HyperChem полной оптимизацией.

Термический анализ проводили на дериватографе системы Паулик-Паулик-Эрдей со скоростью 10 град/мин и навеской 0,1 г. при чувствительности гальванометров Т-900, ТГ-100, ДТА-1/10, ДТГ-1/10. Запись проводили при атмосферных условиях с постоянным удалением газовой среды с помощью водоструйного насоса. Держателем служил платиновый тигель диаметром 7 мм без крышки. В качестве эталона использовали Al_2O_3 .

Отбор почвенных и растительных образцов для проведения агрохимических и микробиологических исследований осуществлен по методике, изложенной в «Методах агрохимических анализов почв и растений Средней Азии», методиках агрохимических и микробиологических исследований в поливных хлопковых районах. Сбор урожая хлопка-сырца производился вручную. Наблюдения, описания и учеты в опытах проведены в соответствии с «Методикой полевых и вегетационных опытов с хлопчатником». Математическая обработка урожайных данных проведена по методу Б.А.Доспехова.

Фенологические наблюдения за ростом и развитием хлопчатника проведены по «Методике полевых и вегетационных опытов с хлопчатником».

В третьей главе диссертации **«Результаты исследований и их обсуждение»** рассматриваются результаты анализов однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с ацетамидом, карбамидом, нитрокарбамидом, тиокарбамидом и никотинамидом. Синтезированные соединения анализированы рентгенофазовым, дериватографическими методами и ИК-спектроскопией. На основании полученных данных предложены структуры синтезированных соединений и проведен квантовохимический расчет прогнозируемых структур.

В первом разделе третьей главы диссертации под названием **«Рентгенофазовый анализ однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция»** приведены результаты рентгенофазового анализа для определения индивидуальности однородных и смешанных лигандных координационных соединений нитратов магния и кальция. Индивидуальность полученных соединений доказано сравнением дифрактограмм свободных молекул лигандов и синтезированных соединений. Различия в значениях межплоскостных расстояний и относительной интенсивности показывает, что синтезированные вещества обладают индивидуальной кристаллической решеткой (рис. 1).

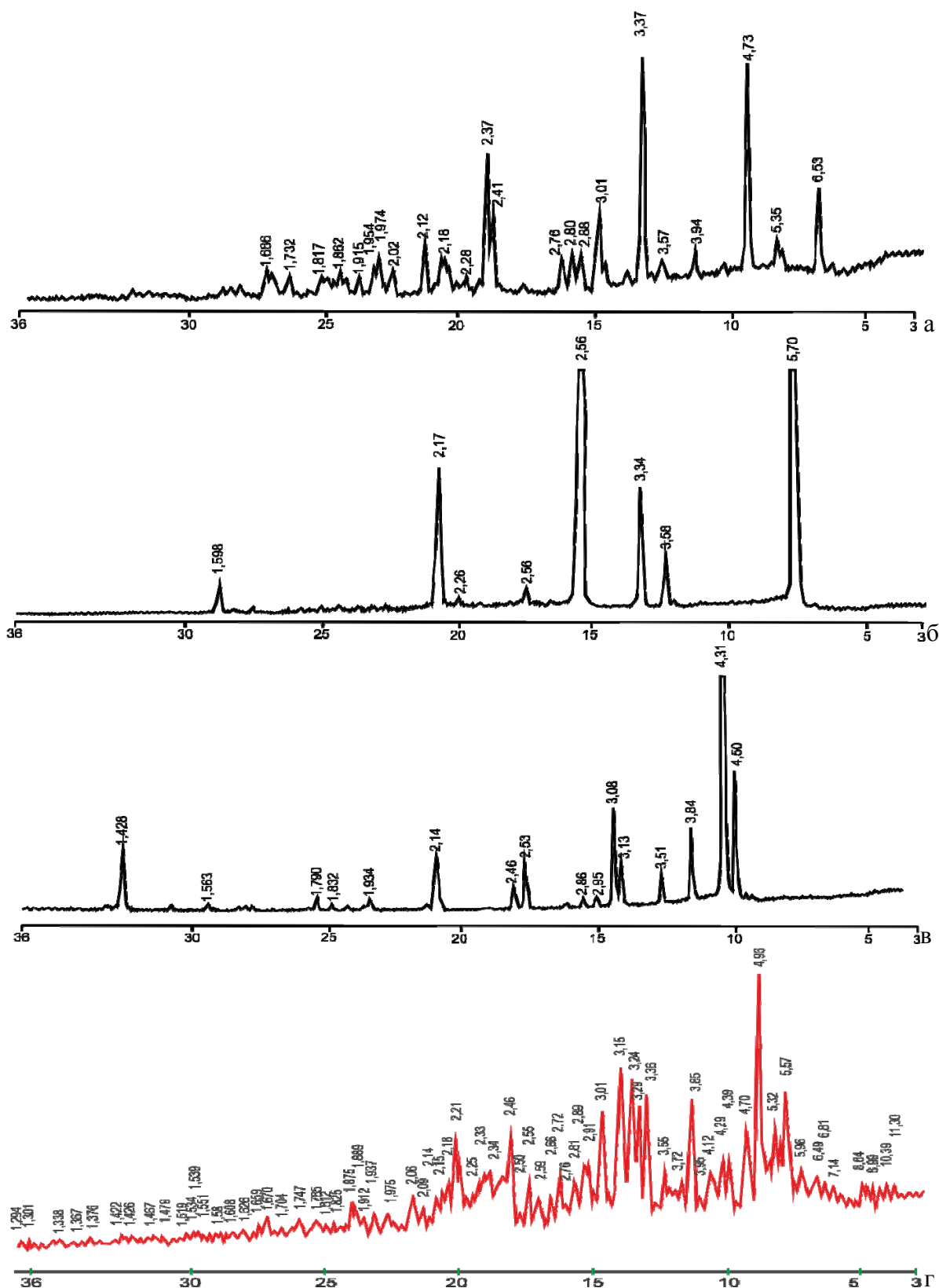


Рис 1. Рентгенограмма: а- $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2$; б- CH_3CONH_2 ; в- $\text{CS}(\text{NH}_2)_2$, г- $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Во втором разделе третьей главы диссертации «ИК-спектроскопия однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция» на основе данных ИК -спектроскопии изучены частоты колебаний лигандов и полученных нами комплексных соединений. В карбамидных, формамидных, ацетамидных, нитрокарбамидных лигандах

координация может происходить за счет атомов кислорода или азота. Если координация происходит за счет атомов азота, то наблюдается повышение частоты валентного колебания группы C=O и уменьшение частоты валентного колебания связи C-N. Если координация происходит за счет атомов кислорода, тогда наблюдается уменьшение частоты валентного колебания группы C=O.

Как видно из приведенных значений ИК-спектров новых синтезированных комплексных соединений частота валентного колебания группы C=O в ацетамиде, карбамиде, формамиде и нитрокарбамиде уменьшилась на 5-40 см⁻¹, что показывает координацию данных лигандов за счет атомов кислорода.

Координация тиокарбамида может идти за счет атомов серы или азота. В ИК-спектрах синтезированных комплексных соединений наблюдается уменьшение частоты валентного колебания связи CS относительно свободного состояния, и повышение частоты валентного колебания связи CN. Это свидетельствует о координации молекулы тиокарбамида за счет атома серы.

Частота карбонильной группы в свободной молекуле никотинамида наблюдается при 1593 см⁻¹, а в координационном соединении она повышена на 22-44 см⁻¹. Полосы поглощения при 1029 и 703 см⁻¹ принадлежащие к колебаниям кольца, в случае комплексов изменений не наблюдается. Указанные изменения свидетельствуют о координации никотинамида с ионами магния и кальция через атом кислорода карбонильной группы, но в однородных комплексах частота колебания карбонильной группы никотинамида при 1646-1650 см⁻¹ сдвигается в низкую область при 1590-1625 см⁻¹, что свидетельствует о координации никотинамида через атом кислорода карбонильной группы.

Таблица 1

Характерные частоты ИК спектрального поглощения свободных молекул формамида, ацетамида, карбамида, тиокарбамида, нитрокарбамида и никотинамида и их координационных соединений с нитратами магния и кальция (см⁻¹)

Соединения	$\nu(\text{C=O})$	$\nu(\text{C-N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\delta(\text{CS})$	$\nu_k,$ $\delta(\text{C=O})$
HCONH ₂	1709	1316		
CH ₃ CONH ₂	1670	1390		
CO(NH ₂) ₂	1680	1466		
CS(NH ₂) ₂			730,632	
O ₂ NHNCONH ₂	1701	1466		
Mg(NO ₃) ₂ ·2HCONH ₂ ·H ₂ O	1680	1400		
Mg(NO ₃) ₂ ·4HCONH ₂ ·2H ₂ O	1685	1390		
Ca(NO ₃) ₂ ·2HCONH ₂ ·H ₂ O	1675	1425		
Ca(NO ₃) ₂ ·4HCONH ₂ ·2H ₂ O	1650	1410		
Mg(NO ₃) ₂ ·CH ₃ CONH ₂ ·H ₂ O	1660	1428		
Ca(NO ₃) ₂ ·CH ₃ CONH ₂ ·H ₂ O	1665	1415		
Mg(NO ₃) ₂ ·CO(NH ₂) ₂ ·H ₂ O	1670	1474		

Соединения	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}-\text{N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\delta(\text{CS})$	$\nu_{\text{к}},$ $\delta(\text{C}=\text{O})$
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1473		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$			715, 632	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$			725, 632	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2$	1680	1490		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1650	1475		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680, 1650	1470		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 4\text{H}_2\text{NCONHNO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1680, 1655	1472		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$				1625, 1684, 718
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$				1621, 1670, 719
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1670	1392		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1682	1455, 1380		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680		730, 665	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1683	1620		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690, 1685	1590, 1623		1615
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1390, 1504		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1660	1460		730, 625
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1450		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1670	1425		1590, 1025, 703
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot (\text{CONH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1685	1460		
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1710, 1675	1485		1590, 1025, 690
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1671	1455	730, 665	
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1715	1460	720, 680	1615, 1030, 695
$\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1710	1470		1630, 1025, 690
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665, 1690	1334, 1390		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1695, 1673	1380, 1430		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690		735, 665	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1685	1380		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1680, 1635	1323		1615, 1030, 710
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1690	1325		1590, 1030, 712
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1433		

Соединения	$\nu(\text{C}=\text{O})$	$\nu(\text{C}-\text{N})$	$\nu(\text{CS}),$ $\delta(\text{CS})$	$\nu_k,$ $\delta(\text{C}=\text{O})$
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1665	1424	722, 665	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	1660	1452		
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2$	1675	1470	733, 675	
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1660	1465		1622, 1021, 675
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1668	1464		1633, 1032, 700
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1672	1460		1634, 1029, 695
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2$	1674	1465		1624, 1034, 675
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1715	1420	726, 663	1614, 1030, 663
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{COOH} \cdot \text{H}_2\text{O}$	1635	1427	735, 710	1618, 1035, 704
$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2$	1675	1469		1637, 1023

В третьем разделе третьей главы диссертации «**Дериватографическое исследование однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция**» приведены результаты анализа термического поведения синтезированных соединений, термические эффекты и продукты термолитиза.

В процессе термического анализа можно наблюдать такие реакции как дегидратация, декарбанизация, восстановление, окисление, расщепление и замещение. В синтезированных комплексных соединениях при нагревании до 80-120°C наблюдается удаление внешнесферных молекул воды. При нагревании до 200-220°C наблюдается разложение ацетамидных координационных соединений до углекислого газа и аммиака, карбамидные комплексы при нагревании до 160-180°C образуют аммиак и углекислый газ, формамидные соединения при нагревании до 155-165°C разлагаются с образованием аммиака и угарного газа, при этом происходит улетучивание газообразных продуктов и деструкция оставшихся веществ. В случае нитрокарбамидных соединений при 150-160°C образуется изоциановая кислота и нитроамид, при дальнейшем повышении температуры изоциановая кислота разлагается на аммиак и углекислый газ, а нитрамид образует оксид азота (I) и воду.

Определено, что экзоэффекты при 450-500°C соответствуют разложению нитрата кальция до нитрита кальция, дальнейшее нагревание (выше 561°C) приводит к образованию оксида кальция, в случае нитрата магния при 300°C образуется оксид магния (рис. 2 и 3).

В четвертом разделе третьей главы диссертации приведены результаты квантово-химического расчета. В этой главе в целях определения геометрии молекул соединений $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$,

$\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ были осуществлены квантово-химические расчеты.

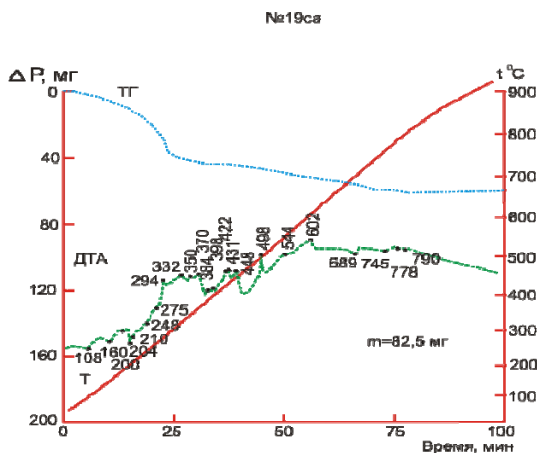


Рис 2. Дериватограмма
 $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

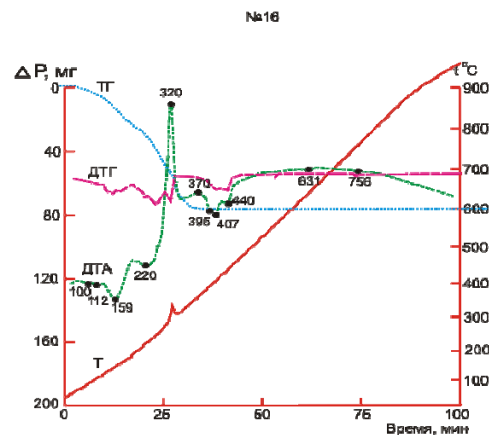


Рис 3. Дериватограмма
 $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{O}_2\text{NHNCONH}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$

Расчеты проводились в программе HyperChem 8.07 полуэмпирическим методом PM3.

На основе квантово-химического расчета были предложены пространственные строения соединений (рис.4).

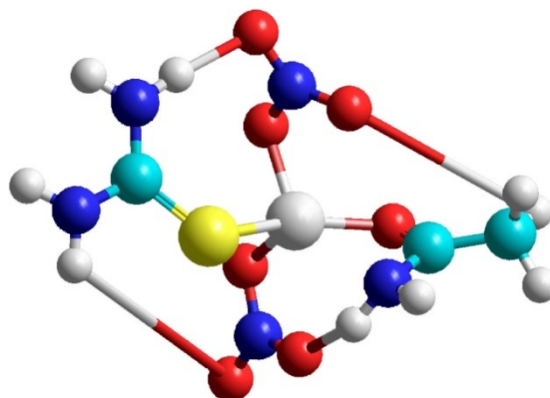


Рис 4. Пространственное строение молекул $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Для квантово-химического расчета выбранных соединений были предложены четыре тетраэдрические и четыре октаэдрические формы. В октаэдрической форме остаток азотной кислоты остается в бидентантном состоянии. Для предложенных структур были рассчитаны оптимальная геометрия, длины связей между атомами, значения зарядов на атомах, теплота образования, энергия верхних занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей. Исходя из минимума теплоты образования выбран самый устойчивый комплекс. На основе квантово-химических расчетов установлено, что чем больше длина связей между центральным атомом и электродонорным атомом лигандной молекулы, тем более понижается их устойчивость (рис.5).

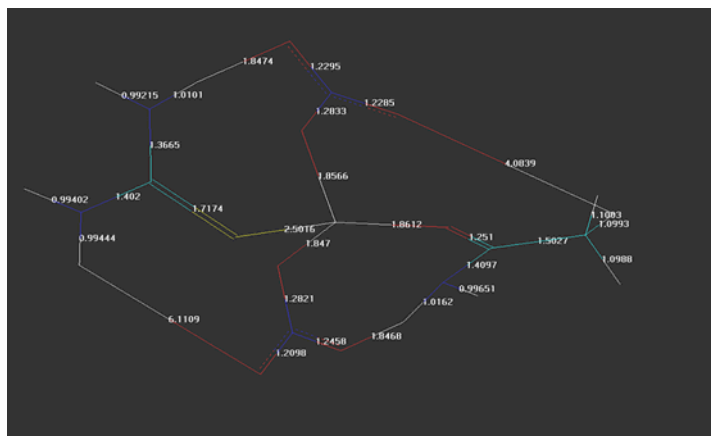


Рис 5. Длины связей между атомами в молекуле $\text{Mg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CH}_3\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

В пятом разделе третьей главы диссертации «Кристаллическая структура комплексного соединения нитрата кальция с никотинамида» приведен рентгеноструктурный анализ координационного соединения нитрата кальция с никотинамидом.

Впервые синтезировано новое координационное соединение - диаквадинитрато-бис-никотинамид кальция. В полученном комплексном соединении тригональный додекаэдр формы центральный атом кальция связывается восемью атомами кислорода лигандов. При этом остатки двух нитрат-анионов связываются бидентантно, а никотинамид через кислород карбонильной группы (рис.6).

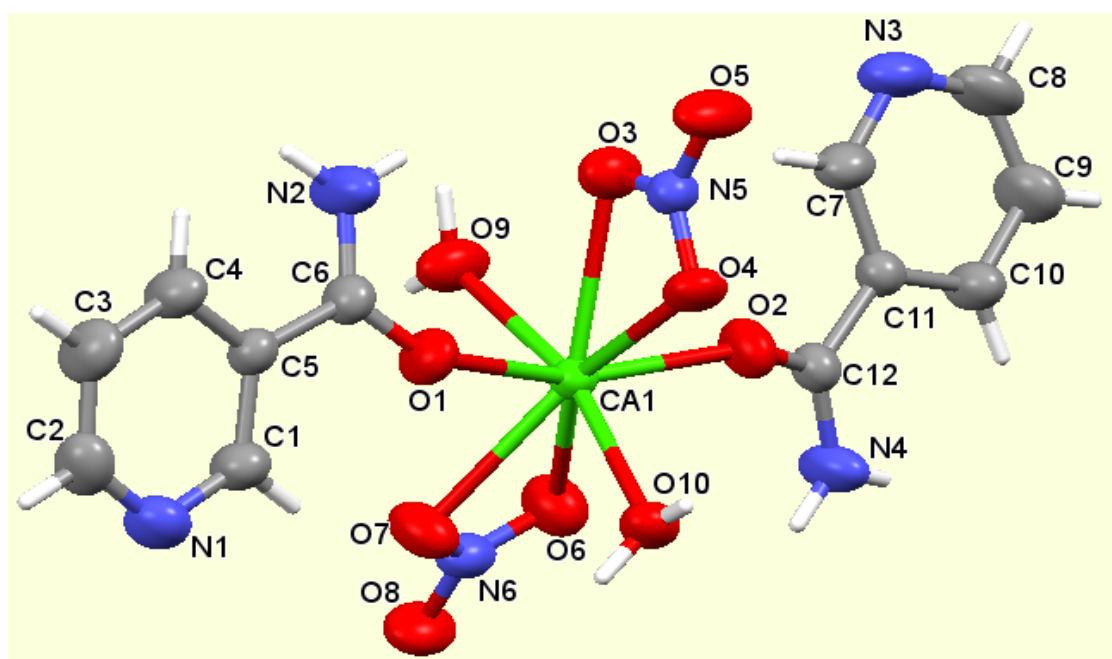


Рис 6. Пространственное строение молекул $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Хотя центральный атом образует координационную связь со всеми лигандами через атом кислорода, длина связей различается. Например, длина связи между атомами кислорода нитрат-аниона и атома кальция (Ca1-O3

2.5754(16) Ca1-O4 2.5824(17)) оказывается длиннее, чем длина связи между атомами кальция и кислорода никотинамидо-карбоксильной группы (Ca1-O1 2.3361(16) Ca1-O2 2.3150(16)). Нам известно, что чем больше разница электроотрицательности двух атомов, тем больше длина связи, и несмотря на присутствие кислорода во всех связях, участвовавших в образовании тригональный додекаэдр формы, длина связей разная. Причина этого в том, что атомы кислорода связаны с атомами азота, углерода и водорода. Электронная плотность в них различна и влияет на связи между центральным атомом и атомом кислорода, в связи с чем длина связи становится разной. В кристаллической структуре полученных координационных соединений можно увидеть, что две молекулы никотинамида симметрично находятся под небольшим углом друг к другу (O1-Ca1-O2 158.80(8)), две молекулы нитрат-аниона перпендикулярны друг к другу (O1 -Ca1 -O3 80.95(6), O1-Ca1-O4 79.17(7), O1-Ca1-O6 124.34(7), O1-Ca1-O7 75.65(7)).

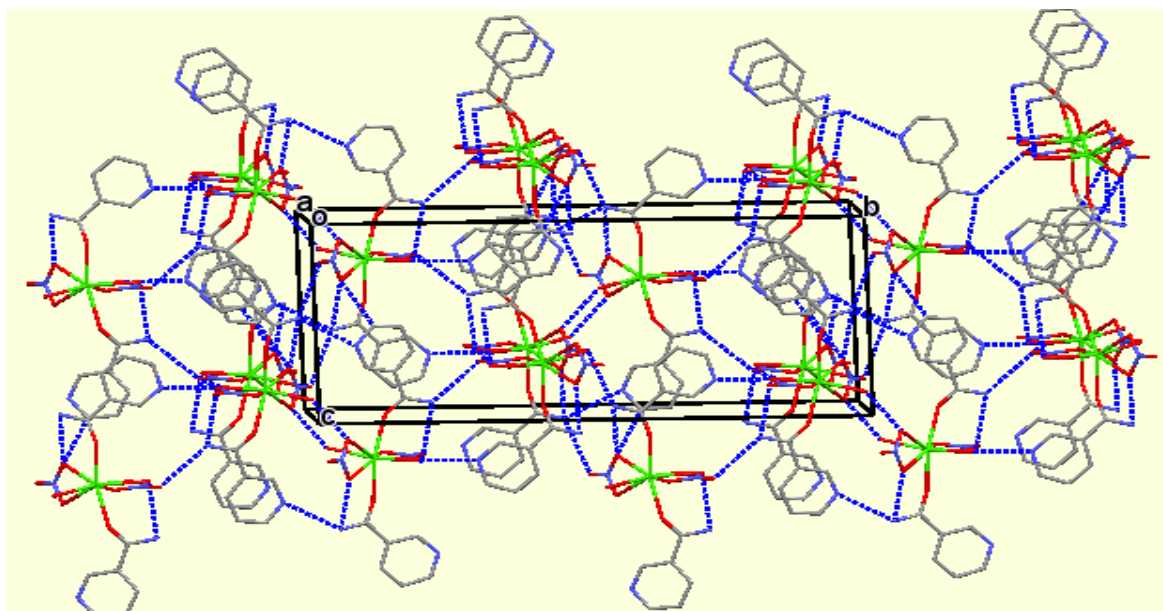


Рис.7. Расположение кристалла в элементарной ячейке $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

В четвертой главе диссертации под названием «**Изучение и применение на практике полученных результатов**» рассматриваются возможности использования синтезированных соединений в биологических целях и внедрение результатов диссертационной работы в учебный процесс. На основе проведенных исследований выявлен стимулятор роста $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, оказывающий положительное влияние на все фазы роста хлопчатника. В качестве эталона использован препарат Т-86. В качестве контроля служили растения, не обработанные препаратами стимулятора. При применении стимулятора наблюдалось повышение урожайности хлопка, возросло количество коробочек хлопка, и сократился срок созревания (Табл.2).

Таблица 2

Влияние стимулятора роста на развитие и урожайность хлопчатника

№	Варианты	Масса хлопка г/ в 4 ёмкостях			Всего			
		1-й сбор	2-й сбор	Всего	Кол ичес т во короб очек штук/ ёмкос ть	Вес одной коробоч ки в граммах	Вес хлопка г/ём кость	%
1	N ₂₀₀ P ₁₄₀ K ₆₀ -фон	235,7	206,6	442,3	17,8	6,5	114,5	100
2	T-86-контр	267,28	200,7	467,9	19,6	6,2	123,0	107,2
3	Ca(NO ₃) ₂ ·K·TK·H ₂ O	292,3	211,6	503,9	21,5	5,7	125,9	112,6

Таким образом, было изучено фенологическое влияние полученных новых координационных соединений Ca(NO₃)₂·K·TK·H₂O на хлопчатник и его урожайность. Исходя из полученных результатов, можно рекомендовать препарат Ca(NO₃)₂·K·TK·H₂O в качестве стимулятора роста хлопчатника.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Впервые синтезировано 54 однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с формамидом, ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидами никотиномидом.

2. Методом рентгенофазового анализа установлено несоответствие межплоскостных расстояний и относительной интенсивности однородных и смешанных лигандных координационных соединений нитратов магния и кальция с формамидом, ацетамидом, карбамидом, тиокарбамидом, нитрокарбамидом и никотиномидом, что подтверждает индивидуальность кристаллической решетки синтезированных координационных соединений.

3. Методами дериватографического анализа установлено термическое поведение синтезированных соединений, выявлены эндо- и экзоэффекты, идентифицированы продукты термолиза.

4. Исследование ИК-спектров, синтезированных соединений показало, что в формамидных, ацетамидных, карбамидных, нитрокарбамидных соединениях координация осуществляется за счет атомов кислорода карбонильной группы, в тиокарбамидных комплексах наблюдалось координирование за счет атома серы. В однороднолигандных комплексах никотиномидом координация осуществляется за счет атома кислорода карбонильной группы, в то же время координация никотиномидом в смешаннолигандных комплексах происходит через атом азота гетерокольца.

5. Строение, геометрия координационного узла, валентные углы, длины связей и распределение зарядов на атомах для трех синтезированных

соединений рассчитаны методами квантовохимического анализа в соответствии с принципом наименьшей теплоты образования.

6. Методом рентгеноструктурного анализа установлена структура координационного соединения состава $[\text{Ca}(\text{H}_2\text{O})_2(\text{C}_5\text{H}_4\text{NC}(\text{O})\text{NH}_2)_2(\text{NO}_3)_2]$. Определено, что молекулы воды и никотинамида координируются монодентатно через атомы кислорода воды и атомы кислорода карбонильной группы никотинамида, нитрат - анионы координируются бидентатно через атомы кислорода.

7. На основе анализа биологической активности в ряду синтезированных соединений выявлен новый стимулятор для сельскохозяйственных растений - $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$. Применение препарата привело к ускорению сроков прорастания, сокращению периода вегетации и повышению урожайности хлопчатника.

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

INSTITUTE OF GENERAL AND INORGANIC CHEMISTRY

DJUMANAZAROVA ZULFIYA KOJABOEVNA

**SYNTHESIS, STRUCTURE AND PROPERTY OF HOMOGENEOUS AND
MIXEDLIGAND COORDINATION COMPOUNDS OF CALCIUM AND
MAGNESIUM NITRATE**

02.00.01 - Inorganic chemistry

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

Tashkent-2018

The title of the dissertation (PhD) has been registered by the Supreme Attestation Commission at the Cabinet of Ministers of the Republic of Uzbekistan with registration numbers of B2018.2.PhD/K58

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

The abstract of the dissertation is posted in three languages (Uzbek, Russian and English (resume)) on the scientific council website ik-kimyo.nuu.uz and Information-educational portal "Ziyonet" www.ziyonet.uz.

Scientific supervisor:

Azizov Tohir

Doctor of chemical sciences, professor

Official opponents:

Umarov Bako

Doctor of chemical sciences, professor

Nuraliyeva Guzal

Candidate of chemical sciences, dotsent

Leading organization:

Samarkand State University

Defense of the dissertation will be held on "___" _____ 2018 at ___ o'clock at the meeting of the Scientific Council DSc27.06.2017.K.01.03 at the National University of Uzbekistan named after Mirzo Ulugbek. (Address: 100174, Tashkent, Universitetskaya St.4, Tel.: (99871) 227-12-24, fax: (99824) 246-53-21, 246-02-24. e-mail: chem0102@mail.ru).

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

The abstract of the dissertation has been distributed on "___" _____ 2018.
Protocol at the register No. ___ on "___" _____ 2018.

Kh. Sharipov

Chairman of the Scientific Council for the
Award of Scientific Degrees,
Doctor of Chemical Sciences, Professor

D. Gafurova

Academic Secretary of the Scientific Council
for the Award of Scientific Degrees,
Doctor of Chemical Sciences

N. Parpiyev

Chairman of the Scientific Seminar at the
Scientific Council for the Award
of Scientific Degrees,
Doctor of Chemical Sciences, akademik

INTRODUCTION (abstract of PhD thesis)

The aim of research work synthesis and elucidation of a structure, studying of biological activity and determination of physical properties of uniform and mixed ligand coordination compounds of magnesium and calcium nitrates with amide.

The objects of the research work magnesium and calcium nitrates, acetamide, carbamide, thiocarbamide, nitrocarbamide, nikotinamide.

The scientific novelty of the consists in the following:

54 new mixed amide coordination compounds of of magnesium and calcium nitrates with acetate amide, a carbamide, a thiocarbamide, a nitrocarbamide and nikotinamide were synthesized;

the identity of the synthesized substances, ways of coordination of ligands and nitrate group to the central atom was established by methods of the X-ray analysis and IR-spectroscopy;

by method of the X-ray diffraction analysis the crystal structure of a complex $[\text{Ca}(\text{NO}_3)_2(\text{NC}_5\text{H}_4\text{CONH}_2)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ was decrypted for the first time;

the thermal behavior of the synthesized substances was established and products of their thermolysis were identified;

the energy parameters, distribution of charges on atoms, geometry and ability of reaction of the received coordination compounds were calculated by quantum-chemical methods;

Implementation of the research results. On the basis of the received scientific results at a studying of synthesis and a structure and application of the uniform and mixed ligand coordination compounds of magnesium and calcium nitrates the following outputs was reached:

tests of biological activity of the synthesized stimulator of CaNit·K·TK passed in the Karakalpak scientific and technical institute of a dekhkanstvo and agrotechnology of cotton breeding (Certificate of the Ministry of Agriculture Resources of the Republic of Karakalpakstan for No. 07/23-208 dated on June 4,). By results, the stimulator gives the chance to reduce terms of germination of seeds of a cotton by 3-5 days, the term of blooming of cotton is reduced by 7-10 days, and productivity increased by 15-20%;

The practice using of a stimulator of CaNit·K·TK passed on farms fields of Beruniydistrict of the Republic of Karakalpakstan (Certificate of the Ministry of Agriculture Resources of the Republic of Karakalpakstan for No. 07/23-208 dated on June 4,). As a result it gave the chance to reduce terms of germination of the seeds of a cotton processed by a stimulator of CaNit·K·TK for 3-5 days, the term of blooming of cotton is reduced by 5-8 days, and productivity increased by 10-15%;

Results of the X-ray diffraction analysis of a structure diaqua-dinitrato of bis-nikotinamide were included in base of crystallographic data of Cambridge (The Cambridge Structural Database, <https://www.ccdc.cam>, CCDC, 1850646) and the new substances gave the chance of their use at the proof of structures of analogue substances;

The structure and volume of the thesis. The thesis consists of introduction, four chapters, the conclusion, the list of the used literature and the applications. The volume of the thesis is 120 pages

ЭЪЛОН ҚИЛИНГАН ИШЛАРИ РЎЙХАТИ
СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ
LIST OF PUBLISHED WORKS

I бўлим (I часть; part I)

Илмий мақолалар (научные статьи, scientific articles)

1. Джуманазарова З.К. Синтез и ИК-спектроскопическое исследование смешанноамидных координационных соединений нитрата кальция // Узб.хим.журн. - Ташкент, 2011. – Спец. вып. -С. 35-37. (02.00.00.№6)
2. Джуманазарова З.К., Азизов О.Т., Азизов Т.А. Синтез и термическое исследование смешаннолигандных координационных соединений нитрата кальция // Кимё ва кимёвий технология - Ташкент, 2012. - №1 - С. 4-6. (02.00.00.№3)
3. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Азизов О.Т., Туракулов Ж.У. Смешанноамидные координационные соединения нитрата кальция// Фармацевтический журнал. -Ташкент, 2012, №1.-С58-61. (02.00.00.№2)
4. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А. Синтез и исследование однородных комплексных соединений нитрата магния с нитрокарбамидом и никотинамидом. // UNIVERSUM: Химия и биология: электрон научный журнал. - Россия, 2018. - № 6(48). (02.00.00.№2)
5. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А. Смешанноамидные комплексы нитрата магния. // ЎзМУ Хабарлари. – Ташкент, 2018, №3/1. С.3-6. (02.00.00.№12)
6. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А. Смешанноамидные комплексы нитрата магния // Кимё ва кимёвий технология - Ташкент, 2018. - №3 - С.54-57. (02.00.00.№3)

II бўлим (II часть, II part)

7. Jumanazarova Z.K., Azizov T. A.Mixed amide complexes of magnesium nitrate // International Journal of Recent Advancement In Engineering & Research, Ijraer, 4, 5, 2018.
8. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Туракулов Ж.У., Шодмонов Б.Б., Тахирова Н.Б. Координационные соединения ацетата и нитрата магния с карбамидом и тиокарбамидом. // Материалы международной научно-практической конференции «Актуальные проблемы отраслей химической технологии». Бухара-2015. 10-12 ноябрь. С. 282-284
9. Djumanazarova Z.K., Azizov T.A.Coordination compounds based on magnesium nitrate// XIV Internatioinal scientific and practical conference «International Scientific Review of the problems and Prospects of Modern Science and education» USA, Boston, May 25, 2018-P.13-14.
10. Djumanazarova Z.K. Thermal investigation of ligand coordination magnesium nitrate compounds. // XVI Международной научно-практической конференция «European Research: Innovation in Science, Education and Technology/Европейские научные исследования: инновации в науке, образовании и технологиях » London, Great Britain. Oktober 9-10, 2018-P.6-9.

11. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А. Синтез и исследование комплексных соединений нитрата кальция с некоторыми амидами. // «Кимё саноатида инновацион технологиялар ва уларни ривожлантириш истиқболлари» Республика илмий-амалий анжумани. Урганч, 2017. - С.199-200.

12. Азизов Т.А., Джуманазарова З.К., Азизов О.Т. Координационные соединения нитрата магния с формамидом. // VIII Республика ёш кимёгарлар конференцияси материаллари. Наманган, 2014. 21-22 ноябр, -С. 126-128.

13. Азизов Т.А., Джуманазарова З.К., Туракулов Ж.У. Смешанноформамидные координационные соединения нитрата кальция с ацетамидом и карбамидом. // VIII Республика ёш кимёгарлар конференцияси материаллари. Наманган, 2014. 21-22 ноябр, -С.128-130.

14. Азизов Т.А., Джуманазарова З.К., Туракулов Ж.У. Смешанноамидные комплексные соединения нитрата кальция на основе формамида, тиокарбамида и никотинамида. // VIII Республика ёш кимёгарлар конференцияси материаллари. Наманган, 2014. 21-22 ноябр, -С. 131-133.

15. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Туракулов Ж.У. Смешаннолигандные координационные соединения ацетата и нитрата кальция с амидами. // Сборник тезисов Республиканская научная конференция молодых ученых «Высокотехнологические разработки в производстве». Ташкент-2016, -С.28-29.

16. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Азизов О.Т. Хайдаров Д.М. Смешанноамидные координационные соединения нитрата кальция с ацетамидом и карбамидом. // “Аналитика кимё фанининг долзарб муаммолари” IV- Республика илмий–амалий анжумани илмий мақолалар тўплами. II-қисм. Термиз, 2014. -С. 76-78.

17. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Ибодуллаева Т.А., Туракулов Ж.У. Координационные соединения нитрата кальция с формамидом. // “Аналитика кимё фанининг долзарб муаммолари” IV- Республика илмий–амалий анжумани илмий мақолалар тўплами. II-қисм. Термиз, 2014. -С. 78-79.

18. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Азизов О.Т. Ибодуллаева Т.А. Термолиз смешанноамидных координационных соединения нитрата кальция. // “Аналитика кимё фанининг долзарб муаммолари” IV- Республика илмий–амалий анжумани илмий мақолалар тўплами. II-қисм. Термиз, 2014. -С. 71-73.

19. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Азизов О.Т., Туракулов Ж.У. ИК-спектроскопическое исследование комплексных соединений нитрата кальция с амидами. // “Аналитика кимё фанининг долзарб муаммолари” V- Республика илмий–амалий анжумани илмий мақолалар тўплами. Термиз, 2017. 26-28 апрель -С. 468-469.

20. Джуманазарова З.К., Азизов Т.А., Туракулов Ж.У., Азизов О.Т., Дериватографическое исследование однородных и смешаннолигандных координационных соединений нитрата кальция. Сборник “Актуальные проблемы физики и химии полимерных композитов, а также технология конструктивных материалов” Наманган, 2017. 12-13 июль –С. 77-78.

Автореферат «Ўзбекистон кимё журнал» тахририятида
тахрирдан ўтказилди

Бичими 60x84¹/₁₆. «Times New Roman» гарнитура босма усулида босилди.
Шартли босма табағи: 2,75. Адади 100. Буюртма № 23.

«Тошкент кимё-технология институти» босмахонасида чоп этилди.
100011, Тошкент, Навоий кўчаси, 32-уй.

