

ДОНИШГОҶИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

ТДУ: 546.49

ТКБ: 24.122

С – 31

Бо ҳуқуқи дастнавис



СУЛТОНЗОДА РУХШОНА СУЛТАН

**КОМПЛЕКСҲОСИЛКУНИИ СИМОБ (II)
БО N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА**

Автореферати

диссертатсия барои дарёфти дараҷаи илмӣ номзади
илмҳои химия
аз рӯи ихтисоси 1.4.2. Химияи ғайриорганикӣ

ДУШАНБЕ – 2026

Кори диссертатсионӣ дар кафедраҳои химияи ғайриорганикӣ ва аналитикии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон гузаронида шуд.

Рохбари илмӣ: **Қурбонова Фируза Шамсуллоевна** – номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи таҳлилии ДМТ

Муқарризони расмӣ: **Исозода Диловаршох Тарик** – доктори илмҳои техникӣ, профессор, ректори Донишқадаи энергетикӣ Тоҷикистон

Кабирзода Ҷовидон Нурмахмад – номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи фарматсевтӣ ва заҳршиносии МДТ “Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино”

Муассисаи пешбар **Донишгоҳи давлатии омӯзгорӣ Тоҷикистон ба номи С. Айнӣ**

Ҳимояи диссертатсия “12” ноябри соли 2026 соати 15⁰⁰ дар ҷаласаи Шурои диссертатсионӣ 6D. КОА – 136-и назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон баргузор мегардад. Суроға: 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ 17, Донишгоҳи миллии Тоҷикистон
E-mail: tojiddin_8989@mail.ru Тел.: (+992) 936002805

Бо муҳтавои диссертатсия тавассути сомонаи www.tnu.tj ва дар китобхонаи илмӣ Донишгоҳи миллии Тоҷикистон шинос шудан мумкин аст.

Автореферат «_____» _____соли 2026 ирсол гардид.

Котиби Шурои диссертатсионӣ,
н.и.х., дотсент



Бобокалонов Т.Б.

МУҚАДДИМА

Мубрами мавзуи таҳқиқот. Симоб, пайвастаҳо ва ҳулаҳои он соҳаҳои гуногуни илму техника: дар тиб, фарматсевтӣ, технологияи химиявӣ, дар истехсоли рангкунандаҳо ва инчунин дар хоҷагии қишлоқ ба таври васеъ истифода карда мешаванд. Пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои органикӣ ба туфайли хосиятҳои физикӣ-химиявии худ дар химияи координатсионии муосир афзалияти бештареро доро мебошанд. Миёни лигандҳои органикии гуногун N – атсетилтиомочевина ҷойи махсусро ишғол менамояд, зеро дар таркиби он якчанд гурӯҳҳои функционалии тиолӣ (-SH-SH) ва амидӣ (-CONH₂-CONH₂) мавҷуданд, ки бо атомҳои металлҳои интиқоли пайвастаҳои комплекси ҳосил мекунанд. Дар адабиёти илмӣ маълумот оид ба паст гардидани заҳронокӣи металлҳои вазнин (симоб, сурб) дар мавриди комплексҳосилшавӣ бо лигандҳои органикӣ оварда шудаанд. Маълумоти зиёд оид ба заҳролудшавии муҳити атроф дар бораи истифодаи симоб ва намакҳои он оварда шудааст. Миёни лигандҳои органикӣ, ки бо атомҳои симоб ба реаксия дохил мешаванд, пайвастаҳои сулфурдор мавқеи хосро ишғол мекунанд. “Лигандҳои сулфурдор бо ионҳои гуногуни металлҳо ҷафолнокӣи биологиро зоҳир мекунанд (зиддиомосӣ, зиддӣ занбурӯғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғ.)” [1-5]. Пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро метавон дар химияи таҳлилӣ (ҳамчун реагентҳо барои муайянкунӣи ионҳои металлҳо), дар биохимия (моделсозии металлферментҳо) ва дар маводшиносӣ (ба даст овардани маводҳои функционалӣ) истифода кард.

Дарҷаи коркарди илмӣи проблемани мавриди омӯзиш. Дар оғози таҳқиқот доир ба мавзуи диссертатсия ягон маълумот дар бораи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина ва инчунин маълумот дар бораи муайян кардани ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар адабиётҳои илмӣи давравӣ ва монографияҳо, ки дар дохил ва хориҷи кишвар ба таъъ расидаанд, мавҷуд набуд.

Ҳамин тариқ, дар қори диссертатсионии мазкур раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои гуногун, методикаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, ки таркиби онҳо бо истифода аз усулҳои замонавии таҳқиқот исбот карда шудаанд, инчунин методикаи муайянкунӣи симоб (II) бо лиганди мазкур омӯхта шудаанд.

Робитаи таҳқиқот бо барномаҳо (лоиҳаҳо), мавзуҳои илмӣ. Қори диссертатсионӣ дар кафедраи химияи ғайриорганикии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон дар заминаи Самтҳои

афзалиятноки таҳқиқоти илмӣ ва илмию техникӣ дар Ҷумҳурии Тоҷикистон барои солҳои 2021-2025, ки бо қарори Ҳукумати Ҷумҳурии Тоҷикистон аз 26 сентябри соли 2020, № 503 тасдиқ шудааст, ҳамзамон дар доираи ҳадафи чоруми Стратегияи миллӣ – саноатикунории босуръати мамлакат омода шуда, дар доираи мавзӯҳои фармоишии “Комплексҳосилкунии d-металлҳои интиқоли бо иштироки лигандҳои амидӣ, тιοамидӣ ва оксигендор” таҳти рақами бақайдгирии № 0122ТJ1434 иҷро гардидааст.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқот коркарди методикаи синтези пайвастаҳои нави комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, омӯзиши таркиб ва хосиятҳои пайвастаҳо, омӯзиши таъсири омилҳои гуногун ба раванди комплексҳосилшавӣ, муайянкунии бузургҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ, муайянкунии собатаҳои устувории пайвастаҳои ҳосилшуда, инчунин истифодаи амалии пайвастаҳои синтезкардашудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар таҳлил асос карда шудааст.

Вазифаҳои таҳқиқот:

- коркарди методикаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, омӯзиши хосиятҳои физикӣ-химиявии онҳо, таҳлили таркиби пайвастаҳои комплексӣ бо усулҳои спектроскопияи инфрасурх ва рентгенӣ.
- омӯзиши мувозинати кислотагӣ-асосии N – атсетилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ бо усули титркунии потенсиометрӣ ва сохтани диаграммаҳои тақсимшавии шаклҳои ионӣ ва молекулавии N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди васеи рН-и муҳит.
- омӯзиши раванди комплексҳосилкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо истифода аз электроди симоб-селективӣ. Асосноккунии термодинамикии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.
- коркарди методикаи муайянкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо усули турбидиметрӣ. Муайянкунии хосиятҳои токсикологӣ пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Объекти таҳқиқот: пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, хосиятҳои физикӣ-химиявии онҳо, омӯзиши раванди комплексҳосилшавӣ дар системаи $\text{Hg(II)} - \text{N} - \text{атсетилтиомочевина}$ дар ҳароратҳои гуногун.

Мавзӯи (предмет) таҳқиқот: омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K, муайянкунии қонуниятҳои таъсири қувваи ионӣ

ва рН маҳлул ба собитаҳои устувории раванди комплексҳосилшавӣ, ба даст овардани пайвастаҳои комплекси метали таҳқиқшаванда бо N – атсетилтиомочевина, инчунин методикаи муайянкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Навгони илмӣ таҳқиқот:

- шароитҳои оптималии синтези чор пайвастаҳои координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина коркард шуд. Таркиб ва сохти пайвастаҳои синтезкарда бо усулҳои гуногуни замонавии физикӣ-химиявӣ исбот карда шуд;

- аввалин маротиба раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои гуногун омӯхта шуд. Маълум карда шуд, ки дар системаи таҳқиқшаванда чор шакли комплексӣ ҳосил мешаванд. Бо усули коэффитсенти ҳароратӣ бузургӣҳои термодинамикии ҳосилшавии заррачаҳои комплексӣ муайян карда шуд;

- аввалин маротиба дар асоси таҳқиқотҳои спектроскопияи инфрасурх координатсияи монодентатии N – атсетилтиомочевина ба симоб (II) исбот карда шуд;

- маълум карда шуд, ки ба пайвастаҳои координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибашон $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ сингонии орторомбӣ мувофиқат мекунад;

- шароитҳои оптималии муайянкунии ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо усули таҳлили турбидиметрӣ коркард карда шуд;

- баҳодиҳии токсикологӣ пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина гузаронида шуд.

Аҳамияти назариявӣ ва илмӣ амалии таҳқиқот: методикаҳои синтези пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро метавон дар таҳқиқотҳои мақсаднок оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилкунии металиҳои гуногун бо ҳосилаҳои тиомочевина истифода кард. Қиматҳои собитаҳои ҳосилшавии заррачаҳои комплексӣ ҳамчун маводи маълумотӣ хизмат карда метавонанд. Ҷанбаҳои назариявии таҳқиқоти мазкурро дар мавриди хондани лексия, гузаронидани корҳои лабораторӣ, навиштани мақолаҳои илмӣ, рисолаҳои хатмкунӣ, рефератҳо аз ғайриорганикӣ ва таҳлилий истифода кардан мумкин аст. Пайвастаҳои синтезкардаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар химияи таҳлилий ва органикӣ, дар тиб ва катализ ба таври васеъ истифода кардан мумкин. Методикаи пешниҳодгардидаро дар таҳлили объектҳои гуногун дар мавриди таҳлили ионҳои симоб метавонанд истифода карда шаванд.

Нуктаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда:

- Аввалин маротиба методикаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетил пешниҳод карда шуд.

- Дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда қиматҳои собитҳои умумии устувори пайвастаҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина ва инчунин қиматҳои бузургҳои термодинамики (ΔH , ΔG , ΔS) раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина муайян карда шуд.

- Методикаи муайянкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо истифода аз усули турбидиметрӣ коркард карда шуда, инчунин захираҳои пайвастаҳои синтезкардашуда омӯхта шуд.

Дарачаи эътимоднокии натиҷаҳо. Саҳеҳии натиҷаҳои ба даст овардашуда бо асбобҳои эътимоднок (коршоямии таҷҳизоти илмӣ аз рӯи натиҷаҳои дараҷабандӣ тафтиш карда шудааст); аз нав такроршавии натиҷаҳои эксперименталӣ, мувофиқат намудани як қатор қиматҳо бо натиҷаҳои дар адабиёт овардашуда, интишори натиҷаҳои асосии таҳқиқотҳои эксперименталӣ дар маҷалаҳои илмӣ тақризшаванда ва муҳокима намудани натиҷаҳои таҳқиқот, истифода намудани усулҳои замонавии физикию химиявӣ ва коркарди оморӣ натиҷаҳои таҳқиқот таъмин карда шудааст.

Мубоқати диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси илмӣ:

Диссертатсия ба якчанд бандҳои шиносномаи ихтисоси 1.4.2. Химияи ғайриорганикӣ мувофиқат мекунад:

1. Муайянкунии характери бо ҳамалокамандӣ байни таркиб, сохт ва хосияти пайвастаҳои ғайриорганикӣ. Дар зербобҳои 3.1, 3.2, 3.3 ва 3.4 диссертатсия таркиб, сохт ва хосиятҳои пайвастаҳои синтезкардашуда омӯхта шудаанд.
2. Коркарди усулҳои синтези пайвастаҳои ғайриорганикӣ. Дар зербобҳои 2.1, 2.2, 2.3 ва 2.5 диссертатсия методикаҳои синтези пайвастаҳои координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудааст.
3. Синтез ва омӯзиши структура ва хосияти мавод дар асоси пайвастаҳои ғайриорганикӣ. Дар зербобҳои 3.1, 3.2, 3.3 ва 3.4 диссертатсия структура ва хосиятҳои моддаҳои синтезкардашуда бо истифода аз усулҳои замонавии физикӣ-химиявӣ таҳқиқот омӯхта шудаанд.

Саҳми шахсии доктарабон дарёфти дараҷаи илмӣ дар таҳқиқот: дар гузоштани масъалаи таҳқиқот, гузаронидани таҳқиқот, систематизатсия ва таҳлили маълумотҳои адабиёт, банақшагирии ҳисобҳои зарурӣ, таҳқиқотҳои назариявӣ ва амалӣ, коркард ва таҳлили

натичаҳои експерименталӣ, омодакунии мақолаҳои илмӣ асос карда шудааст.

Тасвиб ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия: Натиҷаҳои асосӣ ва муҳимтарини таҳқиқоти диссертатсионӣ мазкур дар: конференсияи якуми байналмилалӣ дар мавзӯи “Дурнамои рушди таҳқиқи химияи пайваستҳои координатсионӣ ва истифодаи амалии онҳо” бахшида ба гиромидошти хотираи профессор Баситова С.М., 80 – умин мавлуд ва 60-солагии фаъолияти илмӣ-педагогии доктори илмҳои химия, профессор Азизкулова О.А. (Душанбе, 2022); конференсияи байналмилалӣ илмию амалӣ дар мавзӯи: “Химияи таҳлилӣ ва аҳамияти он дар рушди илмҳои табиатшиносӣ ва техникӣ” (Душанбе, 2025); конференсияи байналмилалӣ илмию амалӣ дар мавзӯи “Пайваستҳои комплексӣ ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо” (Душанбе, 2025); конференсияи ҷумҳуриявӣ бо иштироки олимони хориҷӣ дар мавзӯи «Пайвастаҳои комплексӣ ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо», бахшида ба 70-солагии хотираи узви вобастаи АИ ҶТ, доктори илмҳои химия, профессор Аминҷонов Азимҷон Олимович (Душанбе, 2021); конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ-амалӣ дар мавзӯи “Вазъи кунунӣ ва дурнамои таҳлили физико-химиявӣ”, бахшида ба эълон гардидани ҳадафи чоруми стратегӣ – Саноатикунории босуръати кишвар, солҳои 2022-2026 – Солҳои рушди саноат, 65-солагии таъсисёбии кафедраи “Химияи умумӣ ва ғайриорганикӣ” ва гиромидошти хотираи арбоби илм ва техникаи Тоҷикистон, доктори илмҳои химия, профессор Лутфулло Солиев (Душанбе, 2023); конференсияи ҷумҳуриявӣ дар мавзӯи “Саҳми усулҳои замонавӣ таҳлил дар рушди илм ва истехсолот”, бахшида ба “20-солаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (Солҳои 2020-2040)” (Душанбе, 2022); конференсияи ҷумҳуриявӣ илмию назариявӣ ҳайати устодону кормандони ИИТ ДМТ бахшида ба “Солҳои рушди саноат (солҳои 2022-2026)” ва “Бузургдошти Мавлоно Ҷалолиддини Балхӣ” (Душанбе, 2022).

Интишорот аз рӯи мавзӯи диссертатсия. Аз рӯи мавзӯи диссертатсия муаллиф 14 кори илмӣ нашр намуда, миёни онҳо 3 мақолаи илмӣ аз ҷониби КОА назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон ва КОА Федератсияи Россия эътирофшаванда ва 11 фишурдаи мақола дар конференсияҳои ҷумҳуриявӣ ва байналмилалӣ мебошанд.

Соҳтор ва ҳаҷми диссертатсия. Диссертатсия аз муқаддима, панҷ боб, аз ҷумла муҳокимаю хулоса иборат буда, дар ҳаҷми 143

саҳифаи компютерӣ таҳия шуда, 36 ҷадвал, 31 расм, инчунин рӯйхати библиографии адабиёт бо 122 номгӯйро дар бар мегирад.

МУНДАРИҶАИ АСОСИИ ДИССЕРТАТСИЯ

Дар муқаддима аҳамияти кори диссертатсионӣ, гузоштани мақсад ва вазифаҳои таҳқиқот оварда шудааст. Навгониҳои илмӣ натиҷаҳои ба даст овардашуда, аҳамияти назариявӣ ва амалии мавзӯи таҳқиқот пешниҳод карда шудааст.

Дар боби якум диссертатсия шарҳи адабиёт аз рӯи мавзӯи таҳқиқот пешниҳод карда шудааст. Маълумот оид ба пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои гуногун, пайвастаҳои комплекси d-металлҳои интиқоли бо ҳосилаҳои тиомочевина ва инчунин ҷанбаҳои истифодабарии пайвастаҳои комплекси инъикос ёфтааст.

Дар боби дуюм маълумот оид ба моддаҳои аввала, ҳосиятҳои физикӣ-химиявии лиганди органикӣ, инчунин методикаи синтези пайвастаҳои координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудааст.

Боби сеюм кори диссертатсионӣ ба таҳқиқоти физикӣ-химиявии пасивастаҳои синтезкардашудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бахшида шудааст.

Дар боби чорум диссертатсия маълумот оид ба таҳқиқи ҳосиятҳои кислотагӣ-асосии N – атсетилтиомочевина, омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионӣ, pH ва ҳароратҳои гуногун оварда шудааст.

Боби панҷум диссертатсия ба истифодаи амалии N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои он бо симоб (II) бахшида шудааст.

2.5. Омӯзиши ҳосиятҳои кислотагӣ-асосии N – атсетилтиокарбамид дар маҳлулҳои обӣ.

Чӣ тавре маълум аст, омӯзиши таъсири таркиби пайвастаҳои органикӣ ба ҳосиятҳои кислотагӣ-асосии он, инчунин ба раванди комплексҳосилшавӣ яке аз самтҳои асосӣ дар химияи координатсионӣ ба шумор меравад. Барои муайян намудани собатаҳои ионизатсияи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина мо усули титронидани pH-метриро истифода кардем. Барои муайян кардани консентратсияи ионҳои

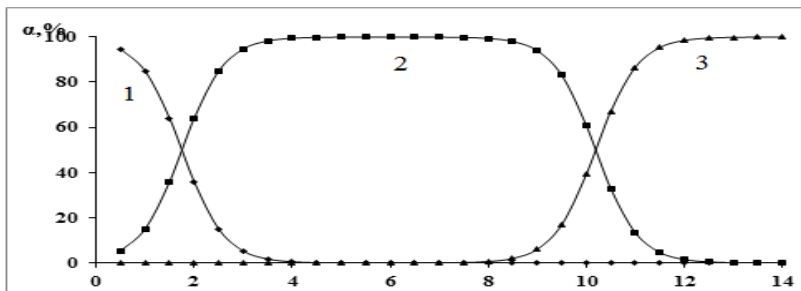
гидроген электроди муштараки шишагин истифода карда шуд. Ба сифати махлулҳои корӣ кислотаи гидрогенхлорид ва гидроксиди натрий бо концентратсияи 0,1 мол/л истифода карда шуд.

Ҷадвали 1. – Натиҷаҳои эксперименталӣ оид ба муайян кардани собитҳои ионизатсияи N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К. $C_L = 0,01$ мол/л; $J = 0,1$ мол/л $NaClO_4$; $V_{06} = 50,0$ мл

Маҳлули титрант: 0,1 мол/л HCl	pH	Концентратсияҳои стехиометрӣ		lgK _a
		$C_L, \text{мол/л} \cdot 10^3$	$[LH^+] \cdot 10^3$	
0	5,69	0,01	0,01	2,131246399
0,05	3,41	0,000999001	0,01998002	2,145757491
0,1	3,1	0,001996008	0,01996008	2,126672333
0,15	2,9	0,002991027	0,019940179	2,147940009
0,2	2,75	0,003984064	0,019920319	2,172878745
0,25	2,65	0,004975124	0,019900498	2,192023215
0,3	2,56	0,005964215	0,019880716	2,221154688
0,35	2,49	0,006951341	0,019860973	2,253908741
0,4	2,43	0,007936508	0,01984127	2,282849824
0,45	2,37	0,008919722	0,019821606	2,32
0,5	2,32	0,00990099	0,01980198	2,367150176
0,55	2,28	0,010880317	0,019782394	2,416091259
0,6	2,24	0,011857708	0,019762846	2,478845312
0,65	2,21	0,012833169	0,019743337	2,537976785
0,7	2,17	0,013806706	0,019723866	2,627121255
0,75	2,15	0,014778325	0,019704433	2,712059991
0,8	2,11	0,015748031	0,019685039	2,843327667
0,85	2,09	0,016715831	0,019665683	3,014242509
0,9	2,06	0,017681729	0,019646365	3,318753601
0,95	2,04	0,018645731	0,019627085	2,131246399
1	2,02	0,019607843	0,019607843	2,145757491
1,05	1,98	0,020568071	0,019588639	lgK _{НН} ⁺ =2,36±0,04

Ҳамин тариқ, собитҳои ионизатсияи лиганд дар ҳарорати 298К ба $2,36 \pm 0,04$ баробар шуд. Қимати собитҳои ионизатсияи муайянкардашуда барои омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина хизмат мекунад.

Дар асоси натиҷаҳои эксперименталӣ диаграммаҳои тақсимашии шаклҳои протинизатсияшуда, молекулавӣ ва депротонизатсияшудаи лиганд сохта шудаанд (расми 1).



Расми 1. - Диаграмми тақсимишавии шаклҳои протонизатсияшуда (1), молекулавӣ (2) ва депротонизатсияшудаи (3) N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К.

Чӣ тавре аз расми 5 бармеояд, дар ҳудуди pH 0,5-2,0 лиганд дар шакли протонизатсияшуда қарор дошта, дар pH=2,0-10,0 дар шакли молекулавӣ ва дар pH=10,0-14,0 дар шакли депротонизатсияшуда мавҷуд аст.

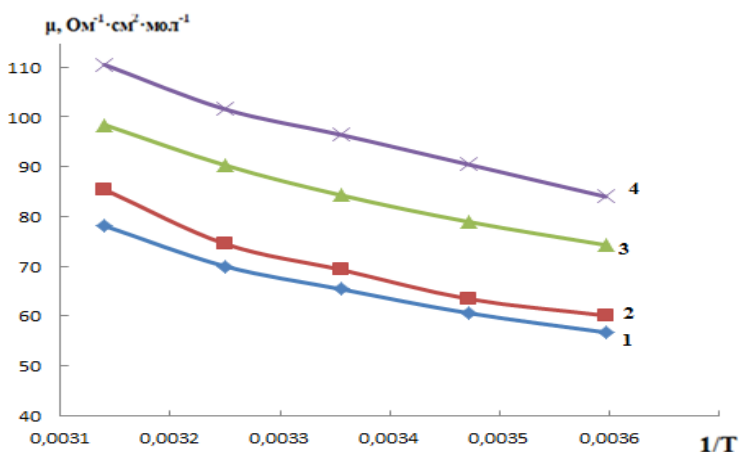
3.1. Омӯзиши чараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда

Бо мақсади муайян намудани навъи электролит, ки ба онҳо пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда тааллуқ доранд, мо чараёнгузаронии маҳлули пайвастаҳоро чен кардем. Аз сабаби он ки аксар пайвастаҳои синтезкардашуда дар об гидролиз мешаванд ва дар баъзе ҳалқунандаҳои инертӣ ҳал намешаванд, мо ба сифати ҳалқунанда барои чен кардани чараёнгузаронӣ диметилформамид ва диметилсулфоксидро истифода намудем. Дар ҷадвали 2 натиҷаҳои эксперименталӣ доир ба муайян кардани чараёнгузаронии молярии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди ҳароратҳои 15-35⁰ оварда шудааст.

Ҷадвали 2. - Натиҷаҳои таҳқиқотҳои кондуктометрии маҳлулҳои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид; $C=1 \cdot 10^{-3}$ мол/л

Пайвасти комплексӣ	$\mu, \text{Ом}^{-1} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{мол}^{-1}$				
	15 °C	20 °C	25 °C	30 °C	35 °C
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{N} \text{O}_3)_2]$	56,7	60,6	67,4	70,0	78,1
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	60,1	63,4	69,3	74,5	86,2
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{N} \text{O}_3$	74,3	78,9	84,3	90,3	98,4
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	86,9	90,4	98,3	101,6	110,5

Таҳлили натиҷаҳои ҷадвали 2 нишон медиҳад, ки барои пайвастиҳои комплекси таркибаш $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ қимати ҷараёнгузаронии молярӣ μ дар ҳарорати 15°C мувофиқи маълумотҳои адабиёт ба ғайриэлектrolитҳо мансуб буда, зимни баланд шудани ҳарорати таҷриба ба электrolитҳои навъи 1:1 наздик мешавад. Аз сабаби он ки диметилформамид ҳалкунандаи қавии донорӣ аст, пас эҳтимол аст, дар маҳлули пайвастаҳои комплекси қисман ҷойивазшавии нитрат-ионҳои дохили сфераи комплекси ба амал меояд. Барои пайвастиҳои комплекси таркибаш $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$ қимати ҷараёнгузаронии молярӣ дар ҳарорати 15°C ба $74,3 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$ баробар буда, ба электrolитҳои навъи 1:1 рост меояд. Ҳамин тариқ, барои пайвастиҳои комплекси таркибаш $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ қимати ҷараёнгузаронӣ дар ҳарорати 15°C ба $86,90 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$ баробар буда, ба он электrolити навъи 1:1 мансуб доништа мешавад. Ин омил бо мавҷудияти ионҳои нитрат дар сфераи берунаи пайвастиҳои комплекси алоқамандӣ дорад. Дар расми 2 графיקи вобастагии ҷараёнгузаронии молярӣ пайвастаҳои як-, ду-, се- ва чоркоординатсияшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудааст.



Расми 2. - Вобастагии $\mu = f(1/T)$ барои пайвастаҳои комплекси таркибашон 1- $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$; 2- $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; 3- $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)](\text{NO}_3)$; 4 - $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Бояд қайд кард, ки вобастагии μ аз $1/T$ (расми 2) хати рост аст ва он имконият медиҳад, то энергияи фаъолнокии чараёнгузаронии пайвастаҳои комплексӣ муайян карда шавад. Дар ҷадвали 3 қиматҳои энергияи фаъолнокии $E_{\text{фаъол}}$ пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудаанд.

Ҷадвали 3. - Қиматҳои $E_{\text{фаъол}}$ пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид

Пайвастаи комплексӣ	$E_{\text{акт.}}, \text{кҶ/мол}$
1	2
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	5,61
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	10,87
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)](\text{NO}_3)$	10,38
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	4,95

Аз натиҷаҳои ҷадвали 3 бармеояд, ки қимати энергияи фаъолнокӣ барои пайвастаҳои моно- ва чоркоординатсияшуда нисбат ба пайвастаҳои ду- ва секоординатсияшуда паस्तтар аст, яъне суръати ҳосилшавии заррачаҳои якум ва чоруми комплексӣ дар системаи омӯхташуда зиёдтар ва самараноктар аст.

Инчунин таҳқиқотҳо доир ба омӯзиши чараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина аз консентратсияи маҳлул (ҷадвали 3) гузаронида шудаанд. Аз натиҷаҳои ҷадвал бармеояд, ки қимати чараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаи комплекси $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ дар мавриди серобкунӣ баланд мешавад, ки омили мазкур ба қонуни серобшавӣ мувофиқат мекунад.

Ҷадвали 4. - Натиҷаҳои ҷенқуниҳои чараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ дар консентратсияҳои гуногуни маҳлул. $T=298\text{K}$.

Консентратсияи маҳлул, мол/л	Қимати χ , мкСм/см
$1,0 \cdot 10^{-3}$	69,56
$6,66 \cdot 10^{-4}$	75,23
$4,95 \cdot 10^{-4}$	83,54
$3,96 \cdot 10^{-4}$	93,48
$3,33 \cdot 10^{-4}$	99,14

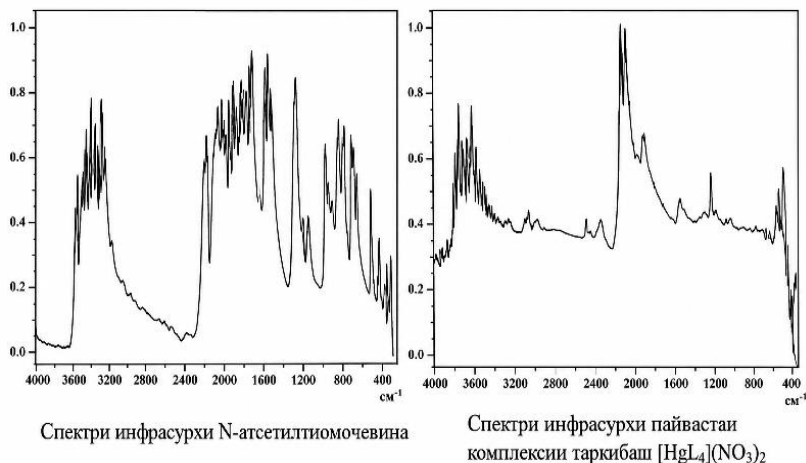
Дар асоси натиҷаҳои таҳқиқоти кондуктометрии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳитҳои диметилформаид ва диметилсулфоксид нишон дода шуд, ки бо зиёд шудани ҳарорати таҷриба қимати чараёнгузаронии молярӣ ба электролитҳои навъи 1:1 мансуб

дониста мешаванд, ки ин омили эксперименталӣ ивазшавии ионҳои нитрати сфераи дохилии пайвасти комплексӣ ба молекулаи ҳалкунандаро ифода мекунад. Омӯзиши тағйирёбии чараёнгузаронӣ аз концентратсияи маҳлул нишон дод, ки бо серобшавӣ қимати χ зиёд мегардад, яъне бо баланд шудани дараҷаи диссотсиатсияи пайвасти комплексӣ, инчунин ивазшавии ионҳои нитрат аз сфераи дарунаи пайвасти комплексӣ бо молекулаи ҳалкунанда ба амал меояд.

3.2. Омӯзиши спектрҳои инфрасурхи фурубарии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид

Барои муайян кардани атомҳои донорие, ки тавассути онҳо координатсияи лиганди органикӣ ба атоми металл – комплексҳосилкунанда ба амал меояд, мо таҳқиқотҳои спектроскопии инфрасурхи лиганди озод ва пайвастаҳои синтезкардари дар ҳудуди басомадҳои $4000-400\text{см}^{-1}$ гузаронидем. Бояд қайд кард, ки дар таркиби лиганди мазкур якҷанд атомҳои донорӣ мавҷуданд, ки онҳо метавонанд бо атоми металл координатсия шаванд. Муаллифони қори [6] дар мавриди омӯзиши спектрҳои инфрасурхи метилтиомочевина ба он хулосае омаданд, ки “метилтиомочевина бо металлҳои Zn(II) ва Cd(II) бандҳои M-S ва банди M-N-ро бо металлҳои Pd(II), Pt(II) ва Cu(II) ҳосил мекунад”. Дар мавриди омӯзиши спектрҳои пайвастаҳои комплексӣ Ямагути [7] ба хулосае омад, ки “ҳамаи металлҳои омӯхташуда (Pt, Pd, Zn и Ni) банди – S ҳосил мекунанд, зеро дар мавриди ҳосил шудани банди M-O басомади лапиши гурӯҳи CN зиёд гардида, лапишҳои валентии банди CS лапишҳои гурӯҳи NH-ро тағйир надода, паст мешаванд”. Спектри инфрасурхи N – атсетилтиомочевина аз ҷониби муаллифони қори [8] омӯхта шудааст: “раҳи фурубариро дар ҳудудҳои 1710 ва 1690см^{-1} ба лапишҳои гурӯҳи карбоксилии лиганд тааллуқ дониста шуд. Раҳи дар ҳудудҳои 835 , 732 ва 620см^{-1} ба лапишҳои гурӯҳи C=S мансуб аст”. Мувофиқ ба ақидаҳои муаллифони қори [9] дар “спектри инфрасурхи атсетилтиомочевина ба лапишҳои банди (C=S) раҳҳои дар ҳудуди 820 , 732 ва 623см^{-1} тааллуқдоранд. Раҳҳо дар ҳудуди

478 cm^{-1} ба лаппишҳои деформатсионӣ бо иштироки гурӯҳи (C=S) дохил мешаванд”.



Расми 3. - Спектрҳои инфрасурхи фуру́барии N – атселиптиомочевина ва пайвастан комплексии он бо симоб (II) таркибаш $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплексии симоб (II) бо N – атселиптиомочевина, раҳи мансуб ба лаппишҳои гурӯҳи C=S мавқеи худро то 17 cm^{-1} ва 31 cm^{-1} тағйир дода, дар ҳудудҳои 852, 749 ва 651 cm^{-1} аён мегарданд. Ин омилҳои эксперименталӣ оид ба координатсияи монодентатии N – атселиптиомочевина ба атоми симоб тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ C=S шаҳодат медиҳад.

Нобаробарии бандҳои C-N бо иштироки раҳҳои фуру́барии гурӯҳҳои $\nu_{\text{as}}(\text{NCN})$, $\nu_{\text{s}}(\text{NCN})$, $\nu_{\text{as}}(\text{NCC})$, $\nu_{\text{s}}(\text{NCC})$ алоқаманд буда, дар ҳудудҳои 1550 ва 1000; 1370 ва 835 cm^{-1} пайдо мегарданд. Дар ҳудуди 1865 cm^{-1} ва 1700 cm^{-1} раҳҳои фуру́барии $\nu(\text{CO})$ аён мегарданд. Дар спектри пайвастан комплексии $[\text{HgL}(\text{NO}_3)_3]$ раҳи мансуб ба фуру́барии гурӯҳи CN мавқеи худро начандон зиёд тағйир дода, дар 1560 ва 1005; 1373 ва 852 cm^{-1} пайдо мегардад. Ин омилҳои эксперименталӣ иштирок надоштани гурӯҳи CN дар координатсия бо симоб (II) шаҳодат медиҳад. Ба лаппишҳои ионҳои нитрат лаппишҳои ноҳамвори

деформатсионӣ дар ҳудуди 830см^{-1} , лаппишҳои валентӣ дар ҳудуди 1390см^{-1} ва лаппишҳои ҳамвори деформатсионӣ дар 720см^{-1} мувофиқат мекунад. Дар спектри инфрасурхи пайвастаҳои синтезкардаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина рахҳои фурубарӣ мансуб ба лаппишҳои нитрат-ионҳо мавҷеи худро наҷандон зиёд тағйир дода, дар ҳудуди 1373см^{-1} ва 1379см^{-1} пайдо мегарданд.

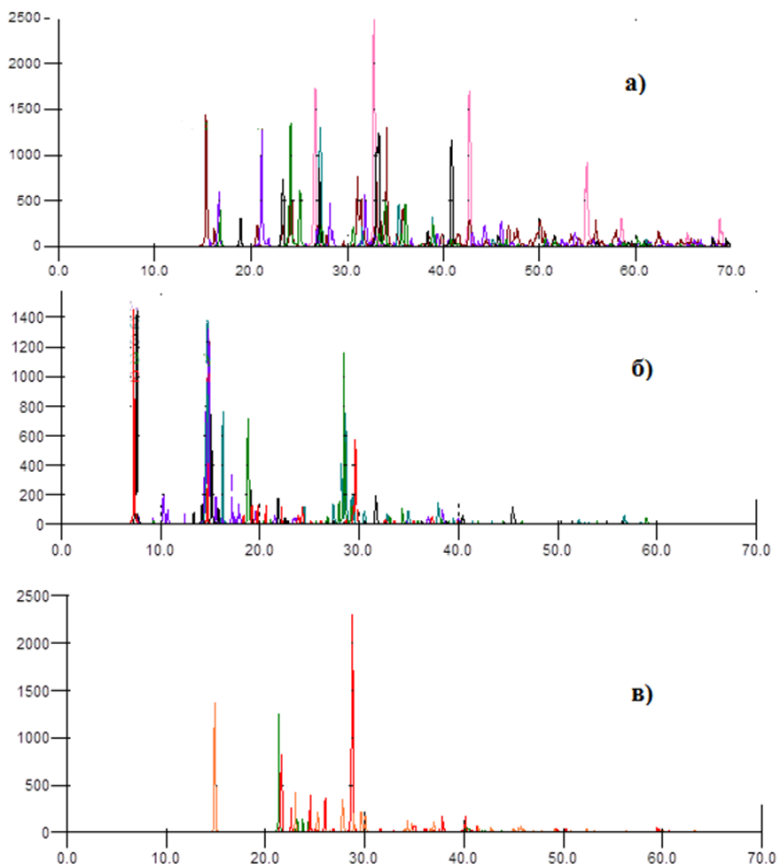
Ҳамин тариқ, дар асоси таҳқиқотҳои спектроскопии инфрасурхи N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лиганди мазкур маълум карда шудааст, ки координатсияи лиганд тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ ба амал меояд. Гурӯҳҳои аминӣ ва атсетилӣ, ки худ атомҳои донорӣ мебошанд, дар координатсия бо атоми металл иштирок намекунад.

3.3. Таҳқиқотҳои рентгении пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо

N – атсетилтиокарбамид

Бо мақсади муайян намудани ячeyкаи кристаллии пайвастаҳои комплекси, мо таҳқиқотҳои рентгенографии хокаи пайвастаҳои комплекси синтезкардари гузаронидем. Рентгенограммаҳои пайвастаҳои комплекси таркибашон $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ дорои рефлексҳои зиёд буда, оид ба кристаллинокии баланди пайвастаҳои комплекси шаҳодат медиҳанд. Интенсивияти хатҳо аз рӯи шкалаи 100 бала баҳо дода шудаанд. Шарҳдиҳии рентгенограммаҳо мувофиқ ба методикаи Липсон [10] гузаронида шуд: “параметрҳои ячeyкаи элементарӣ бо дақиқияти $\pm 0,02^\circ \text{A}$ муайян карда шудаанд”. Дар расми 4 рентгенограммаҳои $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$; $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ оварда шудаанд.

Аз диаграммаҳои мазкур дида мешавад, ки пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид кристаллинокиашон баланд буда, дорои рефлексҳои зиёд мебошанд. Қиёс бо моддаи аввалии $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ дар пайвастаҳои комплекси хатҳои характернок дар қимати пасти 2θ аён мегарданд. Ин гуна тағйирёбиҳо бо дигаргун шудани параметрҳои ячeyка зимни ивазшавии ионҳои нитрат бо лиганди органикӣ алоқамандӣ доранд.



Расми 4. - Рентгенограммаҳои: а) $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$; б) $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; в) $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Муқоисакунии штрихдиаграммаҳои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибашон $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ нишон дод, ки аз навҷойгиршавии интенсивнокии рефлексҳо ва қимати онҳо оид ба зиёд гардидани масофаи миёни атомҳо дар самти муайяни кристаллографӣ маълумот медиҳад.

Ҷадвали 5. - Натиҷаҳои таҳқиқотҳои кристаллографӣ ва параметрҳои структурии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид.

Пайваста	Массаи молекулавӣ, г	Параметрҳои панҷараи кристаллӣ			Сингония	Зичӣ, г/см ³	
		a, Å	b, Å	c, Å		Эксперименталӣ	Ҳисобшуда
[HgL ₂ (NO ₃) ₂]	560,59	10,3	4,52	7,4	Орторомб	4,85	4,80
[HgL ₄](NO ₃) ₂	796,59	10,5	4,38	7,2	Орторомб	4,63	4,62

3.4. Таҳқиқотҳои термогравиметрии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Раванди термолитики лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ва пайвастаи комплекси он бо симоб (II) омӯхта шуд.

Барои муайян намудани тавсифҳои раванди термолитики пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дериватограммаи пайвастаи комплекси таркибаш [HgL₂(NO₃)₂] ба се қисм тақсим карда шуда, барои ҳар як қитъа камшавии массаи пайвастаи комплекси дар ҳарорати муайян, дараҷаи мубаддалшавии пайваста ва дигар параметрҳои муайян карда шудаанд.

Ҷадвали 6. - Тавсифи раванди термолитики пайвастаи комплекси таркибаш [HgL₂(NO₃)₂]

Қитъаи термолитики ва камшавии масса	T _{авв.} , К	T _{мах.} , К	T _{ох.} , К	m ₀ , мг	m _i , мг	Δm _i , (m ₀ -m _i)	α _i (Δm _i /Δm _{оғ} ш.)	T, К
I Δm _{оғ.} = 17,89 мг	383	398	498	100	95,96	15,79	0,18	385
					89,65	42,10	0,47	456
					86,5	65,79	0,73	492
II Δm _{оғ.} = 38,8мг	498	523	563	82,11	76,32	102,61	0,53	502
					65,14	131,55	0,67	530
					54,56	165,76	0,85	542
III Δm _{оғ.} = 49,4 мг	563	593	653	43,31	52,63	0,1162	0,16889	570
					48,56	0,349	0,5073	589
					47,14	0,4354	0,63285	620
					45,46	0,4886	0,71017	640

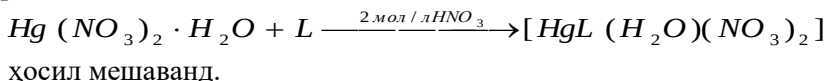
Бо дарназардошти натиҷаҳои ҷадвали 6 барои ҳар як китъаи термоллиз бузургҳои термодинамикии пайвасти комплексӣ ҳисоб карда шудаанд (ҷадвали 7).

Ҷадвали 7. - Тавсифҳои термодинамикии раванди термоллизи пайвасти комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

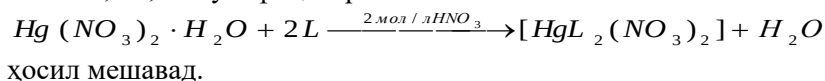
Қитъаи термоллиз	Ҳисоб бо муодилаи Коутс	E, кҶ/мол	-ΔH, кҶ/мол	-ΔG, кҶ/мол	ΔS, Ҷ/К·мол	A, с ⁻¹
I	К.Р.	87,79	82,88	54,50	-48,10	4,0·10 ⁵
II	К.Р.	391,77	386,52	49,19	-469,23	1,12·10 ⁸
III	К.Р.	88,80	82,68	46,55	49,09	5,62·10 ⁵

3.5. Реаксияҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиокарбамид

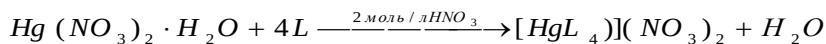
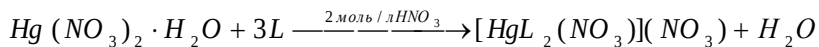
Таҳқиқотҳои гузарониданишуда нишон доданд, ки зимни бо ҳам таъсиркунии маҳлулҳои $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ва N – атсетилтиомочевина дар муҳити 2мол/л HNO_3 дар таносубияти $\text{Me:L}=0,5:1,45$ кристаллҳои рангашон хокистарӣ ҳосил мешаванд. Таркиби пайвасти комплексӣ ба пайвасти яккоординатсияшудаи таркибаш $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)]$ мувофиқ ба реаксияи:



Пайвасти дукоординатсияшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ дар таносубияти $\text{Me:L}=0,5:0,72$ мувофиқ ба реаксияи:



Ҳамин тариқ пайвастаҳои се ва чоркоординатсияшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мувофиқан дар таносубияти лиганд бар металл баробар ба 0,5:0,49 ва 0,5:0,36 ҳосил мешаванд.



Мувофиқ ба натиҷаҳои эксперименталӣ ва инчунин таъя ба адади координатсионии симоб (II) ва дентатнокии N – атсетилтиомочевина равандҳои ҳосилшавӣ ва таркиби

$$\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O} + 2\text{L} \xrightarrow{2 \text{ моль / л HNO}_3} \left[\begin{array}{c} \text{CH}_3 - \text{C} \begin{array}{l} \text{N} \begin{array}{l} \text{H} \\ | \end{array} \\ \parallel \\ \text{O} \end{array} - \text{C} \begin{array}{l} \text{S} \\ | \\ \text{N} \begin{array}{l} \text{H} \quad \text{H} \\ | \quad | \end{array} \end{array} \rightarrow \text{Hg} \begin{array}{l} \text{NO}_3 \\ | \\ \text{NO}_3 \end{array} \leftarrow \text{S} = \text{C} \begin{array}{l} \text{H} \quad \text{H} \\ | \quad | \end{array} - \text{N} \begin{array}{l} \text{O} \\ \parallel \end{array} - \text{C} - \text{CH}_3 \\ | \\ \text{H} \end{array} \right]$$

4.2. Омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – тсетилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ дар ҳароратҳои гуногу

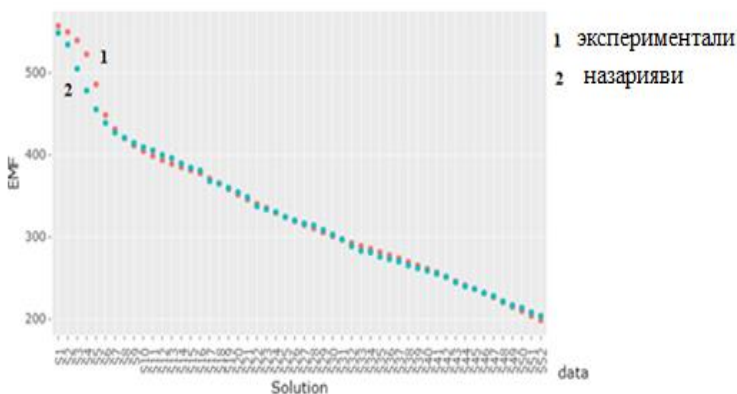
19

Ҷадвали 8. - Натиҷаҳои титркунии потенсиометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N-ацетилтиомочевина дар ҳарорати 278 К. $C_{Hg^{2+}} = 1 \cdot 10^{-4}$ мол/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ мол/л; $J = 0,1$ мол/л $NaClO_4$

Е, мВ	$C_L \cdot 10^5$, мол/л	$C_{Hg^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[Hg^{2+}] \cdot 10^5$, мол/л	$[L] \cdot 10^5$, мол/л
1	2	3	4	5
548,0	4,990	9,980	0,101	1,263
544,0	9,960	9,960	0,169	1,476
540,0	14,911	9,940	0,236	1,724
536,0	19,841	9,921	0,304	2,015
529,0	24,752	9,901	0,422	2,646
520,0	29,644	9,881	0,574	3,756
510,0	34,517	9,862	0,743	5,543
500,0	39,370	9,843	0,912	8,180
490,0	44,204	9,823	1,081	12,073
480,0	49,020	9,804	1,250	17,817
470,0	53,816	9,785	1,419	26,295
460,0	58,594	9,766	1,588	38,807
449,0	63,353	9,747	1,774	59,545
444,0	68,093	9,728	1,859	72,338
439,0	72,816	9,709	1,943	87,878
437,0	77,519	9,690	1,977	94,992
424,0	91,522	9,634	2,197	157,554
413,0	100,768	9,597	2,383	241,750
406,0	105,364	9,579	2,501	317,461
402,0	114,504	9,542	2,569	370,940
392,0	128,083	9,488	2,738	547,440
382,0	150,376	9,398	2,907	807,923
377,0	172,253	9,311	2,991	981,491
372,0	193,727	9,225	3,076	1192,348
368,0	214,808	9,141	3,144	1393,209
357,0	235,507	9,058	3,329	2137,729
354,0	255,835	8,977	3,380	2402,496
351,0	295,414	8,818	3,431	2700,055
342,0	333,622	8,666	3,583	3832,678
331,0	370,528	8,518	3,769	5880,833
322,0	406,198	8,375	3,921	8347,734
318,0	440,692	8,237	3,989	9753,980
310,0	474,068	8,104	4,124	13317,061

Идомаи ҷадвали 8.				
1	2	3	4	5
295,0	506,380	7,974	4,377	23875,808
287,0	537,677	7,849	4,513	32597,522
274,0	568,006	7,728	4,732	54066,425
270,0	597,412	7,610	4,800	63174,368
264,0	625,937	7,496	4,901	79792,263
262,0	653,619	7,386	4,935	86251,650

Бояд қайд кард, ки барои сода намудани таҳлил, дар барномаи KEV имконияти сохтани қачхатаҳои эксперименталӣ ва ҳисобӣ вобаста ба нуқтаи титркунӣ рақами маҳлул мавҷуд аст. Бартарии барномаи KEV дар он мебошад, ки он қимати потенциали назариявиро ҳисоб намуда, бо қиматиҳои эксперименталӣ муқоиса менамояд.



Расми 6. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симо́б (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 278K.

Натиҷаҳои эксперименталии ба даст овардаи таҳқиқи раванди комплексҳосилкунии симо́б (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K ва қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO₄ имконияти муайян намудани собатаҳои устурии чор заррачаҳои комплекси дар системаи мазкур ҳосилшударо фароҳам сохтанд (ҷадвали 9).

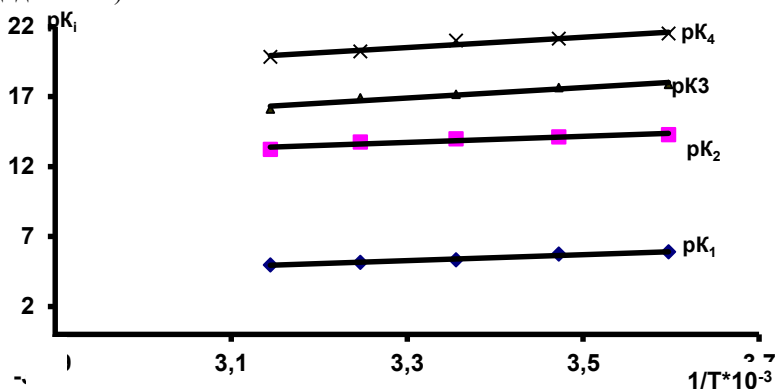
Ҷадвали 9. - Қиматҳои собатаҳои умумии устурии пайвастаҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K, қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO₄

T, K	$\lg\beta_1([HgL]^2+)$	$\lg\beta_2([HgL_2]^2+)$	$\lg\beta_3([HgL_3]^2+)$	$\lg\beta_4([HgL_4]^2+)$
278	5,80±0,02	14,26±0,12	17,86±0,02	21,49±0,01
288	5,74±0,11	14,12±0,78	17,64±0,12	21,13±0,14

Идомаи ҷадвали 9.				
298	$5,32 \pm 0,25$	$13,98 \pm 0,15$	$17,15 \pm 0,16$	$20,99 \pm 0,14$
308	$5,15 \pm 0,02$	$13,74 \pm 0,18$	$16,89 \pm 0,62$	$20,21 \pm 0,32$
318	$4,96 \pm 0,01$	$13,21 \pm 0,04$	$16,11 \pm 0,03$	$19,84 \pm 0,56$

Таҳлили натиҷаҳои ҷадвали 10 нишон дод, ки бо зиёд шудани ҳарорати таҷриба қимати собитаҳои умумии устуворӣ кам мешавад, ки омили мазкур оид ба экзотермӣ будани раванди комплексҳосилшавӣ шаҳодат медиҳад. Муқоисакунии собитаҳои умумии устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо қиматҳои собитаҳои умумии устувории пайвастаҳои комплекси нукра (I) бо лиганди мазкур нишон дод, ки “устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) нисбат ба устувории пайвастаҳои комплекси нукра (I) зиёдтар аст. Ҳамин тариқ, қимати $\lg \beta_1$ барои заррачаи якуми симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298K ба 5,32 баробар буда, барои пайвасти комплекси нукра (I) бо лиганди мазкур ба 4,94 баробар аст” [11].

Исботи гузариши реаксияи комплексҳосилшавӣ ин муайянкунии бузургҳои термодинамикӣ ба шумор меравад. Бо истифода аз муодилаи Кларк-Глю “бо роҳи графикӣ қиматҳои ΔH ва ΔS реаксияи комплексҳосилшавӣ муайян карда шудаанд. Энергияи Гиббс аз рӯи муодилаи $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ҳисоб карда шуд” [12]. (расми 7, ҷадвали 11)



Расми 7. - Вобастагии $\lg \beta_i = f(1/T)$ барои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳити 0,1 мол/л HNO_3 дар ҳароратҳои 278-318K.

Чӣ тавре аз қачхатаҳои расми 7 маълум мегардад, ҳосилшавии чор заррачаҳои комплексӣ дар ҳудуди ҳароратҳои 278-318 вобастагии ҳаттӣ дорад.

Ҷадвали 10. - Термодинамикан ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Муодилаи реаксия	ΔH , кҶ/мол	ΔG , кҶ/мол	ΔS , Ҷ/(мол·К)
$Hg^{2+} + L = HgL^{2+}$	-41,52	-30,79	-36,03
$Hg^{2+} + 2L = HgL_2^{2+}$	-195,74	-88,6	-65,98
$Hg^{2+} + 3L = HgL_3^{2+}$	-97,31	-97,46	0,49
$Hg^{2+} + 4L = HgL_4^{2+}$	-118,65	-119,02	1,24

Тағйирёбии бузургҳои термодинамикӣ оид ба экзотермӣ будани раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина шаҳодат медиҳад. Қимати манфии энталпия дар ҳама зинаҳои комплексҳосилшавӣ тасдиқи он аст, ки банди миёни Hg-L нисбат ба банди Hg-NO₃⁻ устувортар аст. Зимни ворид гардидани молекулаи лиганди органикӣ ба сфераи дохилии пайвастаи комплексӣ қонунияти муайяни камшавии қимати ΔH ба назар мерасад. Тағйирёбии энтропия дар раванди комплексҳосилшавиро чунин метавон шарҳ дод: қимати манфии ΔS бо камшавии зарраҷаҳо дар мавриди комплексҳосилшавӣ ва қимати мусбат гирифтани ΔS оид ба озод шудани молекулаҳои ҳалкунанда аз қабати солватии ионҳои марказӣ ва лигандҳо дар мавриди координатсия маълумот медиҳад. Ин омили эксперименталӣ аз ҷиҳати энергетикӣ ба раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мусоидат мекунад.

Дар баробари дигар омилҳои ба раванди комплексҳосилшавӣ таъсиррасон, таъсири қувваи ионии маҳлул ба қимати собитаҳои устувории зарраҷаҳои комплексӣ низ аз эҳтимолият дур нест. Барои муайян намудани таъсири қувваи ионӣ ба раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мо раванди комплексҳосилшавиро дар қувваи ионии 0,1; 0,25 ва 0,5 мол/л NaClO₄ (ҷадвалҳои 9,10,11) омӯхтем.

Ҷадвали 11. - Қимати собитаҳои умумии устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K дар қувваи ионии 0,25 мол/л NaClO₄.

T, K	$\lg\beta_1([HgL]^{2+})$	$\lg\beta_2([HgL_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([HgL_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([HgL_4]^{2+})$
278	5,71±0,12	13,69±0,14	17,21±0,18	21,21±0,14
288	5,60±0,02	13,24±0,14	16,86±0,41	20,84±0,03
298	5,23±0,14	11,49±0,36	14,99±0,68	18,38±0,62
308	4,72±0,36	11,29±0,45	14,79±0,76	18,32±0,41
318	4,60±0,78	11,01±0,16	14,26±0,02	17,94±0,01

Чадвали 12. - Қимати собатаҳои умумии устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K дар қувваи ионии 0,5 мол/л NaClO₄.

T, K	$\lg\beta_1([\text{HgL}]^{2+})$	$\lg\beta_2([\text{HgL}_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([\text{HgL}_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([\text{HgL}_4]^{2+})$
278	5,69±0,14	13,12±0,01	17,02±0,12	21,16±0,16
288	5,58±0,52	12,98±0,52	16,15±0,42	20,64±0,46
298	5,00±0,36	11,00±0,41	14,26±0,85	18,13±0,62
308	4,59±0,12	10,86±0,42	14,14±0,58	17,88±0,12
318	4,48±0,48	10,99±0,02	13,96±0,48	17,46±0,03

Таҳлили натиҷаҳои чадвалҳои 10,12 ва 13 нишон дод, ки ҳамаи қиматҳои собатаҳои умумии устувории симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо зиёд шудани концентратсияи маҳлули NaClO₄ бо қонунияти муайян паст мешаванд. Маълум аст, ки тағйирёбии устувории пайвастаҳои комплекси вобаста ба қувваи ионӣ аз заряди зарраҳо вобастагӣ дошта, ҳангоми баланд намудани қувваи ионӣ қозибияти миёни ионҳо паст гардида, ионҳои дар маҳлулбуда заряди иони марказиро ҳоилонӣ (экранировать) менамоянд. Омили мазкур ба раванди комплексҳосилшавӣ таъсири назаррас мерасонад.

Ақсар маълумотҳо доир ба таъсири рН муҳит ба раванди комплексҳосилшавии металлҳои интиқолӣ бо ҳосилаҳои тиомочевина дар адабиётҳои илмӣ оварда шудаанд. Маълум аст, ки симоб дар муҳитҳои кислотагӣ дар намуди акваионҳо қарор дошта, зимни баланд бардоштани рН муҳит (одатан >3-4) ба ҳосилшавии гидроксокомплексҳо оварда мерасонад, ки дар натиҷа симоб таҳшин мешавад. Барои муайян намудани муҳити оптималии комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, мо раванди комплексҳосилшавиро дар ҳудуди рН=2-4 омӯхтем (ҷадвали 14).

Чадвали 13. - Қимати $\lg\beta_i$ барои заррачаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298K дар ҳудуди рН=2-4

pH	$\lg\beta_1$	$\lg\beta_2$	$\lg\beta_3$	$\lg\beta_4$
2	5,32±0,3	13,98±0,5	17,15±0,5	20,99±0,5
3	4,68±0,8	12,11±0,4	14,26±0,3	19,01±0,7
4	3,54±0,9	10,21±0,2	11,96±0,8	17,26±0,3

Чӣ тавре аз натиҷаҳои ҷадвали 14 бармеояд, бо зиёд шудани рН муҳити реаксия, ба камшавии собатаҳои устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина меорад. Омили мазкур доир ба ҳосилшавии гидроксокомплексҳои симоб (II) ва қисман гидролиз шудани металл шаҳодат медиҳад.

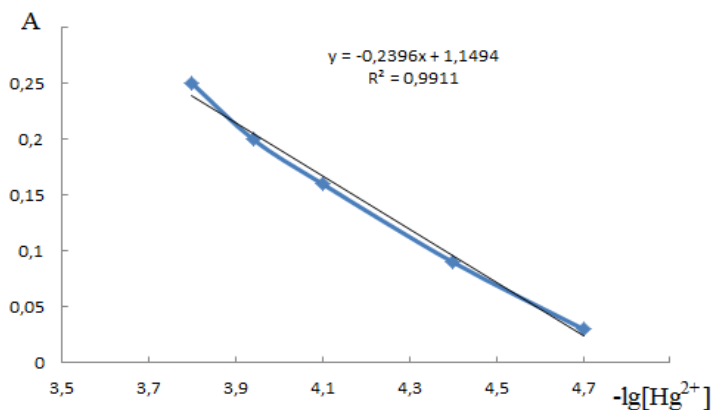
5.1. Истифодабарии N – атсетилтиомочевина ба хайси реагенти органикӣ барои муайян намудани симоб (II)

Ифлосшавии муҳити атроф бо ионҳои симоб яке аз масъалаҳои муҳим дар солҳои охир ба шумор меравад. Коркарди усулҳои муайянкунии симоб, ҳамчун элементи дорои захрнокӣ баланд, ки дорои хосияти кумулятивӣ дар организмҳои зинда дошта ба нестшавии ҳуҷайраҳо меорад, аз манфиат дур нест. Бо ҳамин мақсад, мо методикаи муайян намудани симоб (II) – ро бо N – атсетилтиомочевина ба роҳ мондем. Барои муайян намудани ионҳои симоб (II) дар маҳлулҳои обӣ мо усули графикаи муайян намудани концентратсияро истифода намудем (ҷадвали 14).

Ҷадвали 14. - Натиҷаҳои муайянкунии турбидиметрии маҳлулҳои стандартии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Концентратсияи Hg^{2+} , мол/л	Зичии оптикӣ			
	A_1	A_2	A_3	A_m
$2 \cdot 10^{-5}$	0,030	0,030	0,029	0,030
$4 \cdot 10^{-5}$	0,055	0,055	0,055	0,055
$8 \cdot 10^{-5}$	0,160	0,160	0,160	0,160
$12 \cdot 10^{-5}$	0,200	0,200	0,200	0,200
$16 \cdot 10^{-5}$	0,270	0,270	0,270	0,270

Аз рӯи қиматҳои ба даст оварда графикаи вобастагии $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$ сохта шуда, он хати рост аст (расми 8).



Расми 8. - Графикаи вобастагии $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$

Чй тавре аз график бармеояд, вобастагии $A=f(C_{\text{Hg}}^{2+})$ хати рост буда, онро метавон барои муайян намудани ионҳои симоб (II) истифода кард. Барои муайян намудани аз нав такроршавии натиҷаҳои таҳлил методикаи мазкур якчанд маротиба такрор карда шуд ва дар ҳама маврид натиҷаҳо бо ҳам монанд буданд.

Коркарди статистикуи натиҷаҳои таҳлил имконият дод, то ҳаптои нисбии таҳлил муайян карда шавад, ки он ба $\pm 9,8\%$ баробар аст.

5.4. Омӯзиши захрнокии шадиди пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$

Дар доираи таҳқиқотҳои пешазклиникавии пайвастаҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол баҳодиҳии токсикологии амиқи $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ гузаронида шуд. Зимни ворид намудани воияи 190-207 мг/кг маводи таҳқиқшаванда ба калламушҳои нарина ва модина вазнашон 160-210 г дар як қисми ҳайвонҳо аломатҳои заҳролудшавӣ ба назар мерасид. Дар асоси коркарди статистикуи натиҷаҳои таҳқиқ воияи миёнаи марговари (LD_{50}) пайвастаи $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ 170,5 мг/кг-ро ташкил дод. Мувофиқ ба таснифоти захрнокии моддаҳои химиявӣ, пайвастаи мазкур ба синфи III-юми захрнокӣ дохил мешавад.

Бо мақсади муайян намудани тағйирёбии захрнокии металл дар мавриди комплексҳосилшавӣ, баҳодиҳии токсикологии пайвастаи аввали симоб (II) $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ гузаронида шуд. Таҳқиқотҳои пешазклиникӣ шабеҳ ба омӯзиши захрнокии пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ гузаронида шудаанд. Маълум карда шудааст, ки пайвастаи аввали $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ ба синфи I-уми захрнокӣ дохил мешавад. Ҳамин тариқ муайян карда шудааст, ки дар мавриди координатия бо лиганди органикуи N – атсетилтиомочевина захрнокии симоб паст мегардад.

ХУЛОСА

1. Ҳосиятҳои кислотагӣ-асосии лиганди органикуи N – атсетилтиомочевина бо истифода аз усули потенциометрӣ омӯхта шудаанд. Маълум карда шудааст, ки лиганди органикӣ дорои собитани усутвории баробар ба $\text{pK} = 2,36$ мебошад. Дар асоси қимати ба даст овардашуда раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1; 0,25 ва 0,5 мол/л NaClO_4 ҳудуди ҳароратҳои 278-318 K омӯхта шудаанд. Собитаҳои умумии уствории пайвастҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина бо истифода аз барномаи онлайнӣ компютери KEV муайян карда шудаанд. [1-M; 2-M; 4-M; 5-M; 6-M; 8-M; 9-M; 10-M; 12-M].

2. Бори аввал коркарди методикаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина ба роҳ монда

шуд. Сохт ва таркиби пайвастҳои синтезкардашуда бо усулҳои замонавии физикӣ-химиявӣ (спектроскопияи ИС, кондуктометрӣ, таҳлилҳои рентгенӣ, термогравиметрӣ, потенциометрӣ) муайян карда шуд. Қонуниятҳои ҳосилшавии пайвастҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина вобаста ба қувваи ионӣ муайян карда шудааст. [3-M; 7-M; 13-M]

3. Бо усули спектроскопияи инфрасурх муайян карда шудааст, ки молекулаи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ба симоб (II) тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ монодентатӣ координатсия мешавад. [14-M]

4. Бо усули термогравиметрӣ маҳсули зинаҳои алоҳидаи термотаҷзияи пайвастҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина муайян карда шудаанд. Барои ҳамаи зинаҳои термотаҷзияи бузургҳои термодинамикӣ бо истифода аз муодилаи Коутс ҳисобида шуд.

5. Аз рӯи натиҷаҳои таҳлили рентгенографӣ маълум карда шуд, ки панҷараҳои кристалии пайвастҳои комплекси $[HgL_3(NO_3)]$ ва $[HgL_4]$ ба сингонияи орторомбикӣ тааллуқ доранд. [13-M]

6. Методикаи муайян намудани ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо усули турбидиметрӣ коркард шуда, ба роҳ монда шуд. Маълум карда шуд, ки раванди комплексҳосилшавии системаи мазкурро метавон барои муайян кардани ионҳои симоб (II) дар объектҳои муҳити атроф истифода кард. Омӯзиши захрнокии шадиди пайвастаи комплекси синтезкардашуда гузаронида шуд. [12-M]

Тавсияҳо оид ба истифодаи амалии натиҷаи таҳқиқот

Кори диссертатсионии анҷомдодашуда ба таҳқиқи синтези пайвастаҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, омӯзиши хосиятҳои физикӣ-химиявии онҳо, таҳлили таркиби пайвастаҳо, омӯзиши мувозинати кислотагӣ-асосии лиганд, сохтани диаграммаҳои тақсимшавии шаклҳои ионӣ ва молекулавии N – атсетилтиомочевина дар ҳудудҳои васеи pH, ҳисоби термодинамикии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, муайянкунии хосиятҳои токсикологии пайвастаҳои комплекси бадастомада бахшида шудааст.

Методикаи синтез ва таҳқиқи пайвастҳои нави координатсионии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина метавонанд барои синтези пайвастҳои комплекси металлҳо бо ҳосилаҳои тиомочевина хизмат кунад. Қиммати собитҳои ҳосилшавии заррачаҳои комплекси ҳамчун маълумоти адабиётӣ метавонанд истифода карда шаванд. Пайвастҳои

комплексии синтезкардашуда метавонанд дар химияи таҳлилӣ, органикӣ, тиб ва катализ ба таври васеъ истифода карда шаванд. Методикаи муайянкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина барои муайян кардани ионҳои Hg^{2+} дар объектҳои гуногун метавонад истифода карда шавад.

Пайваستҳои комплексии симоб (II) бо лигандҳои органикӣ ба тифаили ҳосиятҳои физикию химиявӣ ва аҳамияти амалии онҳо дар химияи координатсионии муосир афзалияти бештареро доро мебошанд. Миёни лигандҳои гуногун ҷойи махсусро N – атсетилтиомочевина ишғол менамояд, ки дар таркиби худ гурӯҳҳои функционалии тиолӣ ($-\text{SH}-\text{SH}$) ва амидиро ($-\text{CONH}_2-\text{CONH}_2$) дошта, метавонад бо координатсияшавиашон бо металлҳои интиқоли рақобат дошта бошанд. Намакҳои симоб (II), ки қобилияти баланди зиддимикробӣ доранд, омӯзиши ҳосиятҳои пайвастҳои координатсионии он барои коркарди усулҳои безараргардонӣ аз манфиат дур нест. Як қатор маълумот оид ба паст шудани захираҳои металлҳои вазнин (симоб, сурб) дар раванди комплексҳосилшавӣ дар адабиёти илмӣ оварда шудаанд. Маълумоти зиёд оид ба захираи муҳити атроф дар мавриди истифодаи симоб ва намакҳои он оварда шудааст. Миёни лигандҳои органикӣ, ки бо атомҳои симоб ба реаксия дохил мешаванд, пайвастҳои сулфурдор маъи ҳосро ишғол мекунад. Лигандҳои сулфурдор бо ионҳои гуногуни металлҳо ҷаълоҳои биологиро зоҳир мекунад (зиддиомосӣ, зидди занбурӯғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғ.).

Маҷмӯи васеи тавсифҳои термодинамикии лигандҳои органикӣ ва пайвастаҳои комплексии дар рафти таҳқиқот ҳосилшуда метавонад дар химияи таҳлилӣ, инчунин дар раванди таълим ҳангоми омӯзиши курсҳои химияи координатсионӣ ва химияи физикӣ истифода шаванд. Ин маълумотҳо ҳамчунин метавонанд ҳангоми иҷрои корҳои илмӣ-таҳқиқотӣ аз ҷониби магистрантҳо ва аспирантҳо мавриди истифода қарор гиранд.

Мақолаҳои, ки дар маҷалаҳои тавсияшудаи

Комиссияи олии аттестатсионии назди

Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон нашр шудаанд:

[1-M]. **Халимова, Р.С.** Исследование процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной при ионной силе 0,1 моль/л NaClO_4 и температуре 288K. / Халимова Р.С., Курбонова Ф.Ш., Фирюза Ф. // Вестник педагогического университета. Серия естественных наук. №4(20). УДК 547.554.22.04 ISSN 2707-9996. Душанбе 2023. С.83-88.

[2-М]. **Халимова, Р.С.** Комплексообразование ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной при ионной силе 0,1 моль/л NaClO_4 и температуре 318K. / Халимова, Р.С., Курбонова Ф.Ш., Сафаров С.И. // Вестник политехнического университета, Серия: Инженерные исследования. № 2 (66) 2024, с. 106-109с.

[3-М]. **Халимова, Р.С.** Синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Вестник педагогического университета. № 3 (31) 2026, С. 137-141.

**Рӯйхати мақолаҳо дар маҷмӯаҳои конферонсиҳо
ҷумҳуриявӣ ва байналмилалӣ**

[4-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N,N –диэтилтиомочевинной при температуре 298K / Ф.Ш. Курбонова, Р.С.Халимова, Ф.Фируза, С.И. Сафаров // Сборник статей VI-ой международной конференции «Вопросы физической и координационной химии». Душанбе 2024. С. 54-58.

[5-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при температуре 278K. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы научно-практической конференции на тему: Современное состояние и перспективы физико-химического анализа. Душанбе 2023. Стр. 224-227.

[6-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной при температуре 318K. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Сборник статей первой международной научно-практической конференции Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений и аспекты их применения. Душанбе. 2023. С. 356-357.

[7-М]. **Халимова, Р.С.** Омӯзиши ҷараёнгузарони пайвастҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина / Ф.Ш.Курбонова, Р.С.Халимова // Маҷмӯи маводи конференсияи байналмилалӣ илмию амалӣ дар мавзӯи Пайвастаҳои комплекси ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо. Душанбе. 2025. С. 146-148.

[8-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N,N –диэтилтиомочевинной при температуре 308K / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, Ф. Фатхуллозода, С.И. Сафаров // Материалы международной научно-практической конференции на тему «Роль химии и химической промышленности в индустриализации Таджикистана». Душанбе. 2024. С. 42-45.

[9-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение кислотно-основных свойств N-ацетилтиомочевины. / Ф.Ш.Курбонова, Р.С. Халимова // Материалы республиканской Комплексные соединения и аспекты их применения. Душанбе. 2021. С. 56-59.

[10-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной при температуре 288К. / Р.С.Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы конференции Комплексны соединения и аспекты их применения. Душанбе. 2021. - С. 59-62.

[11-М]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N- ацетилтиомочевинной при температуре 328К. / республиканской конференции на тему Роль современных методов анализа в развитие науки и производства. Душанбе. 2022. С.165-168

[12-М]. **Халимова, Р.С.** Истифода намудани N – атсетилтиомочевина ҳамчун реагенти органикӣ барои муайян намудани ионҳои симоб (II). / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Маҷлиси конференсияи VII илмӣ байналмилалӣ Масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ. Душанбе. 2026. С.245-249.

[13-М]. **Халимова, Р.С.** Таҳқиқотҳои рентгенографии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Маҷлиси конференсияи VII илмӣ байналмилалӣ Масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ. Душанбе. 2026. С.242-245.

[14-М]. **Халимова, Р.С.** ИК – спектроскопическое исследование комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы международной научно-практической конференции Аналитическая химия и её значение в развитии естественных наук. Душанбе. 2025.С. 118-121.

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК: 546.49

ББК: 24.122

С - 31

На правах рукописи



СУЛТОНЗОДА РУХШОНА СУЛТАН

**КОМПЛЕСКООБРАЗОВАНИЕ РТУТИ (II) С
N – АЦЕТИЛТИОМОЧЕВИНОЙ**

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени кандидата
химических наук по специальности 1.4.2. Неорганическая
химия

ДУШАНБЕ – 2026

Диссертация выполнена на кафедрах «Неорганической химии» и «Аналитической химии» Таджикского национального университета

**Научный
руководитель:**

Курбонова Фируза Шамсуллоевна – кандидат химических наук, доцент кафедры аналитической химии ТНУ

**Официальные
оппоненты:**

Исозода Диловаршох Тарик – доктор технических наук, профессор, ректор Энергетического института Таджикистана

Кабирзода Джовидон Нурмахмад – кандидат химических наук, доцент кафедры ГОУ «Таджикский государственный университет им.А.ибн Сино»

**Ведущая
организация**

Таджикский государственный педагогический университет им. С.Айни

Защита состоится «12» ноября 2026 года в 15⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета 6D. КОА – 136 при Таджикском национальном университете. Адрес: 734025, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17 Таджикский национальный университет, главный корпус, зал диссертационного совета.

E-mail: tojiddin_8989@mail.ru Тел.: (+992) 936002805

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке и на сайте Таджикского национального университета www.tnu.tj

Автореферат разослан «___» _____ 2026 года

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат химических наук



Бобокалонов Т.Б.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Ртуть, соединения ртути и сплавы на её основе, нашли широкое применение в различных отраслях науки и техники: медицине, фармации, химической технологии, производстве красителей, сельском хозяйстве и др. В современной химии координационных соединений, комплексы на основе ртути (II) с органическими лигандами ввиду их физико-химических особенностей и прикладному использованию нашли свое широкое применение. Среди различных органических лигандов важно отметить значимое место N- ацетилтиокарбамида, так как в его составе имеются несколько функциональных тиольных ($-SH-SH$) и амидных ($-CONH_2-CONH_2$) групп, способных к координации с переходными металлами. Имеются некоторые литературные данные о снижении отравляющего действия некоторых тяжелых металлов (кадмий, ртуть, свинец) в процессе комплексообразования с органическими аддентами. Также имеется информация о негативном влиянии ртути и его соединений на окружающую среду. В ряду органических лигандов, способных к реакции комплексообразования с ионами ртути, особое место занимают серусодержащие соединения. “Серусодержащие адденты с ионами различных металлов проявляют биологические свойства (противораковые, противогрибковые, противовирусные и др.)” [1-5]. Комплексные соединения ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом могут быть использованы в аналитической химии (в качестве реагентов для определения ионов металлов), в биохимии (моделирование металлферментов), а также в материаловедении (при получении функциональных материалов).

Степень разработанности изучаемой проблемы. К моменту начала исследовательской работы над темой диссертации в отечественных и зарубежных периодических изданиях и монографиях отсутствовали сведения о комплексных соединениях ртути (II) с N-ацетилтиоомочевинной, методике синтеза комплексных соединений, а также данных об определении ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом.

Таким образом, в данной диссертационной работе исследуется процесс комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом при различных температурах, разработаны методики синтеза четырех комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом, состав и строение которых определены различными современными физико-химическими методами анализа, а также разработана методика определения ртути (II) с указанным органическим лигандом.

Связь проведенного исследования с программы, (проектами) и научной тематикой. Диссертационная работа проводилась на кафедре неорганической химии химического факультета Таджикского национального университета на основе Приоритетных направлений научно-технических исследований в Республике Таджикистан на 2021-2025 годы, утвержденная Постановлением Правительства Республики Таджикистан от 26 сентября 2020 года №503, в рамках четвертой цели Национальной стратегии – ускоренной индустриализации страны и реализована в рамках порученных тем «Комплексообразование d-переходных металлов с участием амидных, тиаамидных и кислородсодержащих лигандов» под регистрационным номером 0122ТЖ1434.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Цель исследования основывается в разработке методики получения новых координационных соединений Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной, исследовании состава и свойств синтезированных соединений, исследовании воздействия различных факторов на комплексообразование, определение значений констант образований образующихся комплексных частиц, применении комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной в анализе.

Задачи исследования:

- выработка условий получения новых комплексных соединений Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом, исследование их физико-химических характеристик, анализ состава координационных соединений ИК-спектроскопическим и рентгенофазовым методами анализа;
- изучение кислотно-основного равновесия N- ацетилтиомочевинной в водных растворах методом потенциометрического титрования и построение диаграмм распределения ионизированных и молекулярных форм N – ацетилтиомочевинной в широком диапазоне pH среды.
- исследование процесса комплексообразования Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом с использованием ртуть-селективного электрода. Термодинамическое пояснение процесса комплексообразования Hg(II) с N – ацетилтиомочевинной.
- разработка методики определения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной турбидиметрическим методом. Определение токсикологического действия комплексов Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом.

Объектами исследования. Комплексные соединения ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной, их физико-химические свойства, изучение

процесса комплексообразования в системе $\text{Hg(II)} - \text{N} -$ ацетилтиомочевина при различных температурах.

Предмет исследования: изучение процессов комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при 278-318K, выявление закономерностей влияния ионной силы и pH раствора на константы устойчивости процесса комплексообразования, получение комплексов исследуемого металла с N – ацетилтиомочевинной, а также методика определения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.

Научная новизна исследования:

- выработаны наиболее эффективные способы синтеза четырех координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной. Состав и структура новых соединений были определены современными физико-химическими методами;
- впервые изучен процесс комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при различных температурах. Выявлено, что в изучаемой системе образуются четыре комплексных форм. Термодинамические величины образования комплексных частиц определены методом температурного коэффициента.
- впервые на основе ИК – спектроскопического анализа была доказана монодентатная координация N- ацетилтиомочевинной к ртути (II);
- выявлено, что координационным соединениям ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной состава $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ и $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ соответствует орторомбическая сингония;
- разработаны оптимальные условия определения ионов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной турбидиметрическим методом анализа
- проведена токсикологическая оценка комплексов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.

Теоретическая и научно-практическая значимость исследования: предложенные методики синтеза комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной могут служить для проведения целенаправленных исследований по изучению процесса комплексообразования различных металлов с производными тиомочевинной. Значения констант образований комплексных частиц могут служить в качестве справочного материала. Теоретические аспекты данного исследования могут быть использованы и внедрены при чтении лекции, проведении лабораторных работ, написании научных статей, выпускных работ, рефератов по предметам неорганическая и аналитическая химия. Синтезированные координационные соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной

могут широко применяться в аналитической и органической химии, в медицине и катализе. Предложенная методика определения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной может быть использована при анализе различных объектов на содержание в них ионов ртути.

Положения, выносимые на защиту:

- Впервые предложены методики синтеза новых координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.
- На основе проведенных исследований определены значения общих констант устойчивости комплексных соединений Hg(II) с N – ацетилтиомочевинной, а также термодинамические величины (ΔH , ΔG , ΔS) процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.
- Разработана методика определения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной, изучена токсичность синтезированных соединений.

Степень достоверности результатов. Точность результатов анализа была доказана надежными приборами (использованные приборы проверены методами калибровки); воспроизводимостью результатов исследования, соответствию полученных результатов с литературными данными, обсуждением и публикацией основных результатов в научных рецензируемых журналах, использованием современных физико-химических методов анализа и статистической обработке результатов исследования.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности: диссертация соответствует нескольким пунктам паспорта специальности 1.4.2. Неорганическая химия (отрасль науки техническая) по следующим параметрам:

1. Определение характера связи между составом и строением неорганических соединений. В подглавах 3.1, 3.2, 3.3 и 3.4 диссертации изучены состав, строение и свойства синтезированных соединений.
2. Разработка методов синтеза неорганических соединений. В подглавах 2.1, 2.2, 2.3 и 2.5 диссертации приведены методики синтеза координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.
3. Синтез и исследование структуры и свойств материалов на основе неорганических соединений. В подглавах 3.1, 3.2, 3.3 и 3.4 диссертации изучены структура и свойства синтезированных соединений с применением современных физико-химических методов анализа.

Личный вклад соискателя ученой степени заключается в постановке задач исследования, проведения эксперимента, систематизации и анализе литературных данных, планировании нужных расчетов, теоретических и практических исследований, обработке и анализе экспериментальных данных, подготовке научных статей.

Аппробация и реализация результатов диссертации. Основные результаты диссертации были представлены и обсуждены на: Первой международной конференции на тему: “Перспективы развития исследования химии координационных соединений и их практическое применение”, посвященной памяти 80-летия Баситовой С.М. и 60-летию научно-педагогической деятельности доктора химических наук, профессора Азизкуловой О.А. (Душанбе, 2022); международной научно-практической конференции на тему: “Аналитическая химия и ее роль в развитии естественных и технических наук” (Душанбе, 2025); Международной научно-практической конференции на тему: “Комплексные соединения и аспекты их применения” (Душанбе, 2025); Республиканской научно-практической конференции с международным участием на тему: “Комплексные соединений и аспекты их применения”, посвященной 70-летию памяти доктора химических наук, профессора Аминджанова А.О. (Душанбе, 2021); Республиканской научно-практической конференции на тему: “Современное состояние и перспективы физико-химического анализа”, посвященной провозглашению четвертой цели – индустриализация страны, 2022-2026 годы, Годами развития промышленности, 65-летию основания кафедры Общая химия и неорганическая химия, и посвященной памяти заслуженного деятеля науки и техники Таджикистана, д.х.н, профессора Лутфулло Солиева (Душанбе, 2023); Республиканской научно-практической конференции “Роль современных методов анализа в развитие науки и производства”, посвященной 20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040годы), (Душанбе, 2022); Республиканской научно-практической конференции преподавательского состава НИИ ТНУ, посвященной “Годы развития промышленности” (2022-2026годы) (Душанбе, 2022).

Публикации по теме диссертации. По теме исследования автор имеет 14 публикаций, из них 3 статьи в рецензируемых журналах ВАК при Президенте Республики Таджикистан и ВАК РФ, 11 тезисов докладов в материалах республиканских и международных конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа включает введение, пять глав, напечатана на 143 страницах компьютерного набора, включает 36 таблиц, 31 рисунка, а также списка литературы из 122 библиографических наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении обоснована значимость актуальности диссертационной работы, сформулированы цель и проблемы исследования. Обозначены научная новизна исследования, теоретическая и практическая ценность темы исследования.

В первой главе диссертационной работы приведен обзор научной литературы по теме исследования. Приведена информация о комплексных соединениях Hg (II) с различными органическими аддентами, координационных соединениях d - переходных металлов с производными тиомочевины, а также практические аспекты применения координационных соединений.

Во второй главе диссертации представлены данные об исходных соединениях, сведения о физических и химических свойствах лиганда, способы получения координационных соединений ртути (II) с N- ацетилтиокарбамидом.

Третья глава диссертационной работы уделена физико-химическому анализу новых координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом.

В четвертой главе диссертационной работы приведены сведения об исследовании кислотно-основных свойств N-ацетилтиомочевины, изучении процесса комплексообразования ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной при различной ионной силе, температуре и pH среды.

Пятая глава диссертационной работы посвящена практическому применению N-ацетилтиомочевины и его комплексных соединений со ртутью (II).

2.5. Изучение кислотно-основных свойств

N- ацетилтиокарбамида в водных растворах

Одним из основных направлений координационной химии является исследование влияния состава органических соединений на кислотно-основные свойства, а также на процесс комплексообразования. С целью определения константы ионизации N - ацетилтиокарбамида нами был использован метод pH-метрии. Концентрацию ионов водорода в реакционной смеси определяли с

помощью комбинированного стеклянного электрода. В качестве рабочих растворов были использованы хлористоводородная кислота и гидроксид натрия с концентрацией 0,1моль/л.

Таблица 1. Данные рН-метрического титрования по определению константы ионизации N – ацетилтиомочевины при 298К. $C_L=0,01$ моль/л; $J=0,1$ моль/л $NaClO_4$; $V_{об}=50,0$ мл

Раствор титранта: 0,1 моль/л раствора HCl	рН	Стехиометрические концентрации		lgK _a
		C_L , моль/л · 10 ³	$[LH^+] \cdot 10^3$	
1	2	3	4	5
0	5,69	0,010	0,01	2,131
0,05	3,41	0,999	19,980	2,146
0,1	3,1	1,996	19,960	2,127
0,15	2,9	2,991	19,940	2,148
0,2	2,75	3,984	19,920	2,173
0,25	2,65	4,975	19,900	2,192
0,3	2,56	5,964	19,881	2,221
0,35	2,49	6,951	19,861	2,254
0,4	2,43	7,936	19,841	2,283
0,45	2,37	8,919	19,822	2,320
0,5	2,32	9,901	19,802	2,367
0,55	2,28	10,880	19,782	2,416
0,6	2,24	11,858	19,763	2,479
0,65	2,21	12,833	19,743	2,538
0,7	2,17	13,807	19,724	2,627
0,75	2,15	14,778	19,704	2,712
0,8	2,11	15,748	19,685	2,843
0,85	2,09	16,716	19,666	3,014
0,9	2,06	17,682	19,646	3,319
0,95	2,04	18,646	19,627	2,131
1	2,02	19,608	19,608	2,146
1,05	1,98	20,568	19,589	lgK _{кн} ±=2,36±0,04

Таким образом, константа ионизации лиганда при температуре 298К составляет 2,36±0,04. Найденное значение константы ионизации служит для изучения процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.

На основе экспериментальных данных были построены кривые распределения протонированной, молекулярной и депротонированной форм N – ацетилтиомочевины (рис.1).

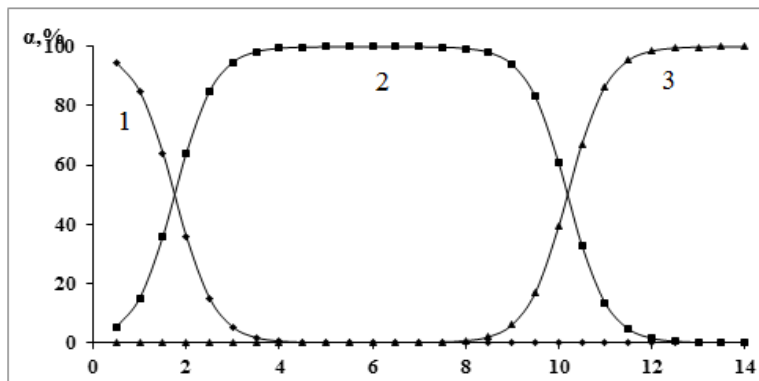


Рисунок 1. - Кривые распределения протонированной (1), молекулярной (2) и депротонированной (3) форм N – ацетилтиомочевины при 298К.

Как видно из рисунка 1, в области рН 0,5-2,0 лиганд находится в протонированной форме, рН=2,0-10,0 в молекулярной и рН=10,0 – 14,0 в депротонированной форме.

3.1. Исследование электропроводимости растворов комплексов ртути (II) с N- ацетилтиомочевинной

С целью определения типа электролита, к которым относятся синтезированные комплексные соединения, нами были проведены кондуктометрические исследования растворов комплексов. В связи с тем, что координационные соединения не растворяются в воде и других растворителях, кондуктометрические исследования проводились в среде ДМФА и ДМСО. Полученные экспериментальные данные по определению молярной электропроводимости координационных соединений Hg(II) с N – ацетилтиомочевинной при 15-35⁰С представлены в таблице 2.

Таблица 2. - Данные по изучению электропроводимости растворов координационных соединений Hg(II) с N- ацетилтиокарбамидом; $C=1 \cdot 10^{-3}$ моль/л

Состав комплекса	$\mu, \text{Ом}^{-1} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{моль}^{-1}$				
	15 ⁰ С	20 ⁰ С	25 ⁰ С	30 ⁰ С	35 ⁰ С
[HgL(H ₂ O)(NO ₃) ₂]	56,7	60,6	67,4	70,0	78,1
[HgL ₂ (NO ₃) ₂]	60,1	63,4	69,3	74,5	86,2
[HgL ₃ (NO ₃)]NO ₃	74,3	78,9	84,3	90,3	98,4
[HgL ₄](NO ₃) ₂	86,9	90,4	98,3	101,6	110,5

Анализ данных таблицы показывает, что значения молярной электропроводности комплекса $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ при температуре 15°C равно $56,7 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$, что соответствует к неэлектролитам, при повышении температуры опыта до 35°C становится ближе к электролитам типа 1:1. Так как, диметилформамид является сильным донорным растворителем, в растворе комплекса может замещать нитрат-ионы внутренней сферы комплексного соединения. Для комплексного соединения состава $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$ значение молярной электропроводности при 15°C равно $74,3 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$, что соответствует значению электролитам типа 1:1. На основании полученных данных было доказано присутствие NO_3^- - ионов во внешней сфере коомплексного соединения. На рис.2 приведены кривые зависимости μ для одно-, двух-, трех- и четырёхкоординированных координационных соединений $\text{Hg}(\text{II})$ с N-ацетилтиомочевинной.

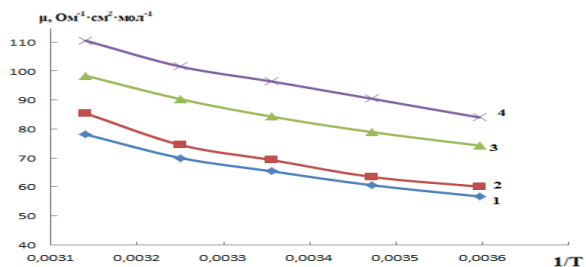


Рисунок 2. - График зависимости $\mu = f(1/T)$ для комплексов состава 1 - $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$; 2 - $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; 3 - $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)](\text{NO}_3)$; 4 - $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Следует отметить, что зависимость μ от $1/T$ (рисунок 1) является линейной, что позволяет определить энергию активации электропроводности комплексных соединений. Экспериментально найденные значения энергии активации $E_{\text{акт.}}$ комплексов ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом приведены в таблице 3.

Таблица 3. Экспериментально найденные значения энергии активации $E_{\text{акт.}}$ комплексов ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом.

Состав комплекса	$E_{\text{акт.}}, \text{кДж/моль}$
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	5,61
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	10,87
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)](\text{NO}_3)$	10,38
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	4,95

Из данных таблицы 3 следует, что значение энергии активации для моно- и четырёхкоординированных комплексов по сравнению с двух- и трехкоординированных комплексов ниже, т.е. скорость

образования первой и четвертой частиц в изучаемой системе выше и эффективнее.

Также были проведены исследования по изучению электропроводимости растворов комплексов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной от концентрации раствора (таблица 4). Из данных таблицы 4 следует, что значения удельной электропроводимости растворов комплекса состава $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ при разбавлении увеличивается, что соответствует закону разведения.

Таблица 4. - Результаты измерения электропроводности растворов комплексного соединения состава $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ при различных концентрациях раствора; T=298K

Концентрация раствора, моль/л	Значение χ , мкСм/см
$1,0 \cdot 10^{-3}$	69,56
$6,66 \cdot 10^{-4}$	75,23
$4,95 \cdot 10^{-4}$	83,54
$3,96 \cdot 10^{-4}$	93,48
$3,33 \cdot 10^{-4}$	99,14

На основе полученных результатов кондуктометрического исследования комплексов ртути (II) с N - ацетилтиомочевинной в средах диметилформамида и диметилсульфоксида показано, что с повышением температуры эксперимента значения молярной электропроводимости соответствуют электролитам типа 1:1, что показывает замещение нитрат-ионов внутренней сферы комплексов на молекулу растворителя. Изучение изменения электропроводности от концентрации раствора показывает, что с разбавлением значение χ увеличивается, то есть с повышением степени диссоциации комплекса также происходит замещение NO_3^- - ионов внутренней сферы комплекса молекулой органического лиганда.

3.2. Изучение инфракрасных спектров поглощения комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной

С целью определения донорных атомов, посредством которых происходит координация органического лиганда к атому – комплексообразователю, мы провели ИК – спектроскопические исследования некоординированного лиганда и синтезированных комплексов в интервале волновых чисел $4000\text{-}400\text{см}^{-1}$. Важно отметить, что в составе лиганда имеются несколько донорных атомов, способных к координации с ионами ртути (II). При изучении инфракрасных спектров метилтиомочевинны сделаны выводы о том, “что метилтиомочевина образует связи M-S с металлами Zn(II) и Cd(II) и связь M-N с металлами Pd(II), Pt (II) и меди(II)” [6]. При изучении спектров тиомочевинных комплексных соединений Ямагути пришел к

выводу, “что все исследуемые металлы (Pt, Pd, Zn и Ni) образуют S – связь, так как при образовании связи M-O частота колебаний CN увеличивается, валентные колебания связи CS не изменяя колебания NH уменьшаются” [7]. По мнению авторов “Полосы поглощения при 1710 и 1690 см^{-1} были отнесены колебаниям карбоксильной группы лиганда. Полосы при 835, 732 и 620 см^{-1} соответствуют колебаниям группы C=S” [8]. Согласно данным авторов “в инфракрасном спектре ацетилтиомочевины колебаниям связи C=S соответствуют полосы в интервале 820, 732 и 623 см^{-1} . Полосы при 478 см^{-1} деформационным колебаниям с участием группы C=S” [9].

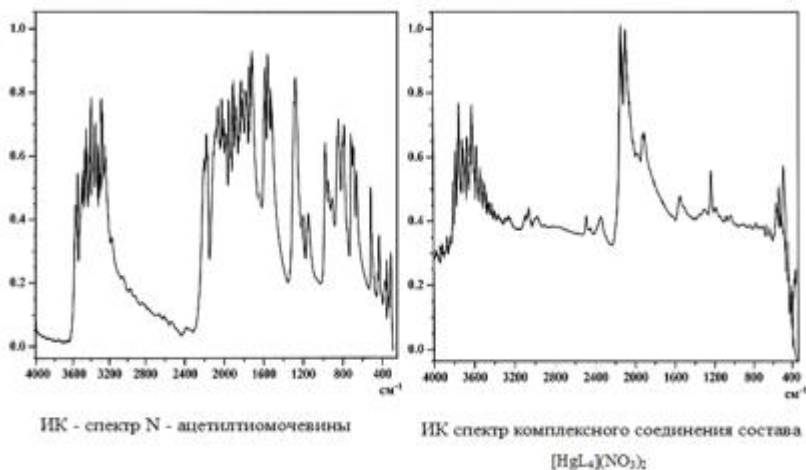


Рисунок 3. - Инфракрасный спектры N – ацетилтиокарбамида и координационного соединения Hg(II) состава $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

В ИК – спектрах комплексных соединений Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом полоса поглощения связи C=S претерпевает изменение на 17 см^{-1} и проявляется в области 852, 749 и 651 см^{-1} . Этот экспериментальный факт доказывает о монодентатной координации N – ацетилтиомочевины к атому ртути посредством атома серы группы C=S.

Неравномерность связей C-N связано с присутствием полос поглощения групп $\nu_{\text{as}}(\text{NCN})$, $\nu_{\text{s}}(\text{NCN})$, $\nu_{\text{as}}(\text{NCC})$, $\nu_{\text{s}}(\text{NCC})$ и проявляется в области 1550 и 1000; 1370 и 835 см^{-1} . В области 1865 см^{-1} и 1700 см^{-1} появляются полосы поглощения $\nu(\text{CO})$. В спектре комплекса $[\text{HgL}(\text{NO}_3)_3]$ полоса, ответственная за поглощение группы CN незначительно меняет свое положение и

проявляется при 1560 и 1005; 1373 и 852 см^{-1} . Этот экспериментальный факт доказывает о неучастии групп CN при координации со ртутью (II). Колебаниям нитрат-ионов соответствуют внеплоскостные деформационные колебания в области 830 см^{-1} , валентные колебания при 1390 см^{-1} и плоскостные деформационные колебания при 720 см^{-1} . В ИК – спектре синтезированных нами комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом полосы поглощения, относящиеся колебаниям нитрат-ионов незначительно меняют свое положение и наблюдаются в области 1373 см^{-1} и 1379 см^{-1} .

Таким образом, на основе ИК-спектроскопических исследований N – ацетилтиокарбамида и комплексных соединений ртути с указанным аддентом показано монодентантное координирование лиганда посредством атома S группы C=S. Аминная и ацетильная группы, имеющие донорные атомы в координации с атомом металла не участвуют.

3.3. Рентгенографические исследования комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом

Для получения информации о кристаллической структуре синтезированных комплексов Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом, нами был проведен рентгенографический анализ порошков комплексов. На рентгенограммах координационных соединений составов $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ и $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ выявлено множество рефлексов, наличие которых доказывает о кристалличности комплексов. Выраженность линий оценивались по стобальной шкале. Детализацию рентгенограмм проводили в соответствии с методикой Липсона. “Параметры элементарной ячейки были определены с точностью $\pm 0,02^\circ \text{A}$ ” [9]. На рисунке 3 приведены рентгенограммы $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$; $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ и $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$.

Из указанных диаграмм видно, что комплексные соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной высоко кристаллические и обладают большим количеством рефлексов. По сравнению с исходным соединением $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ проявляются характерные линии при малых значениях 2θ . Такого рода изменения связаны с изменением параметров ячейки при замене нитрат-ионов органическим аддентом.

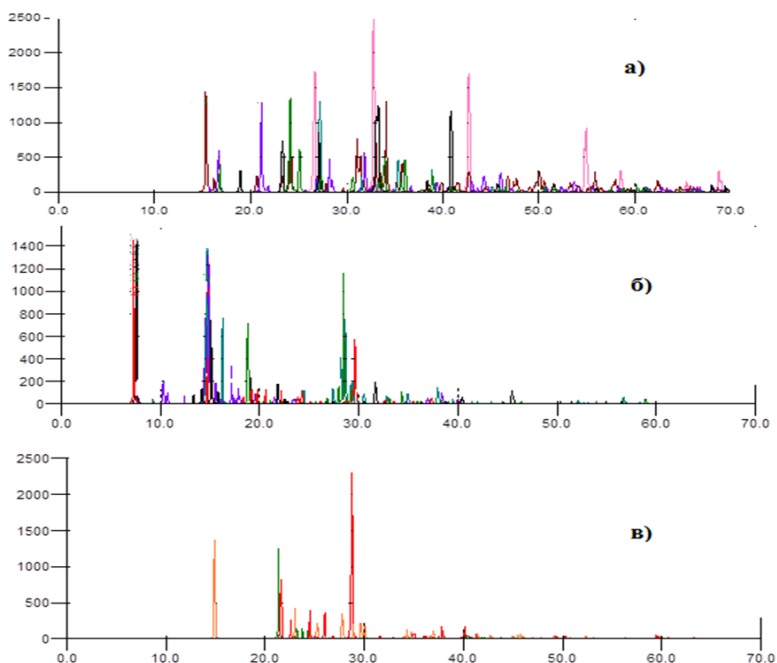


Рисунок 4. - Рентгенограммы: а) $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$; б) $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; в) $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Сравнение штрихдиаграмм комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной состава $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ и $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ показало, что перераспределение интенсивности рефлексов и их изменение даёт информацию об увеличении межатомного расстояния в определенном кристаллографическом направлении.

Таблица 5. - Результаты кристаллографического исследования и структурных параметров комплексных соединений ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной.

Соединение	Молекулярная масса, г	Параметры кристаллической решетки			Сингония	Плотность, г/см ³	
		a, Å	b, Å	c, Å		Экспериментально	Расчитанная
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	560,59	10,3	4,52	7,4	Орторомб.	4,85	4,80
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	796,59	10,5	4,38	7,2	Орторомб.	4,63	4,62

3.4. Термогравиметрические исследования комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом

Нами изучен процесс термолита органического лиганда N-ацетилтиомочевинны и его комплексного соединения со ртутью (II).

Для определения характеристик процесса термолита комплексного соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной дериватограмма комплекса $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ была разделена на три части и для них были рассчитаны: потеря массы комплекса при определенной температуре, степень превращения комплекса и другие параметры.

Таблица 6. - Параметры процесса терморазложения координационного соединения состава $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$

Участок термолита и потеря массы	$T_{\text{нач.}}$, К	T_{max} , К	$T_{\text{кон.}}$, К	m_0 , мг	m , мг	Δm , (мг-мг)	α ($\Delta m/\Delta m_0$ б.ш.)	T, К
I $\Delta m_{\text{общ}} = 17,89$ мг	383	398	498	100	95,96	15,79	0,18	385
					89,65	42,10	0,47	456
					86,5,	65,79	0,73	492
II $\Delta m_{\text{общ}} = 38,8$ мг	498	523	563	82,1 1	76,32	102,61	0,53	502
					65,14	131,55	0,67	530
					54,56	165,76	0,85	542
III $\Delta m_{\text{общ}} = 49,4$ мг	563	593	653	43,3 1	52,63	0,1162	0,16889	570
					48,56	0,349	0,5073	589
					47,14	0,4354	0,63285	620
					45,46	0,4886	0,71017	640

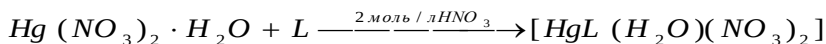
С учетом данных таблицы 6 для каждого участка термолита были рассчитаны термодинамические характеристики комплекса (таблица 6).

Таблица 7. - Термодинамические параметры термограммы координационного соединения Hg(II) с N – ацетилтиомочевинной.

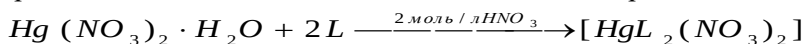
Участок термолита	Расчет по уравнению Коутса	E, кДж/моль	$-\Delta H$, кДж/моль	$-\Delta G$, кДж/моль	ΔS , Дж/К·моль	A, с ⁻¹
I	К.Р.	87,79	82,88	54,50	-48,10	$4,0 \cdot 10^5$
II	К.Р.	391,77	386,52	49,19	-469,23	$1,12 \cdot 10^8$
III	К.Р.	88,80	82,68	46,55	49,09	$5,62 \cdot 10^5$

3.5. Реакции образования комплексов Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной

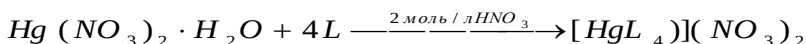
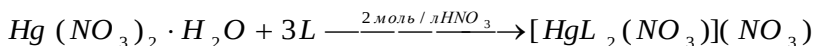
На основе проведенных исследований показано, что при взаимодействии первичных соединений $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и N – ацетилтимочевины при соотношении реагентов $\text{Me}:\text{L}=0,5:1,45$ в среде 2моль/л азотной кислоты приводит к образованию кристаллов серого цвета. В соответствии с реакцией ниже, образуется монокоординированное соединение:



Двухкоординированное комплексное соединение ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной состава $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ образуется при соотношении $\text{Me:L}=0,5:0,72$ в соответствии с реакцией:



Таким образом, трех- и четырехкоординированные комплексы ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной образуются при соотношении лиганда к металлу, равным 0,5:0,49 и 0,5:0,36 соответственно.



В соответствии с экспериментальными данными, а также опираясь на координационное число ртути (II) и дентатности N – ацетилтимочевины были определены процессы образования и состав комплексных соединений. Схема образования двухкоординированного комплекса ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной приведена на рисунке ниже.

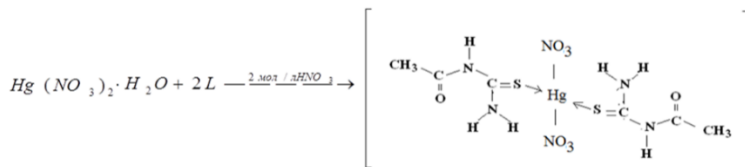


Рисунок 5. - Схема образования двухкоординированного комплекса ртути (II) с N – ацетилтиокарбамидом

4.2. Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной в водной среде при различных температурах

Константа устойчивости зависит от различных факторов, таких как: электроотрицательность, «мягкости» или «жесткости» атомов лиганда и иона металла, природы лиганда, ионного радиуса и др. Проведение исследований в этом направлении дает возможность выявить механизм образования комплексных соединений. В связи с вышеуказанным, процесс комплексообразования системы Hg(II) - N – ацетилтиокарбамид мы исследовали методом потенциометрического титрования. Значение потенциала гальванической ячейки с переносом определяли с помощью рН-метра марки рН-150МИ. Рабочим индикаторным электроом служил халькогенидный ртуть-селективный электрод, электродом сравнения – хлоридсеребряный электрод второго рода. Проведенные исследования показали, что потенциал индикаторного электрода при добавлении N – ацетилтиомочевинны к раствору нитрата ртути (II) уменьшается, что свидетельствует о протекании реакции комплексообразования в указанной системе.

Таблица 8. - Результаты потенциометрического титрования процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтимочевинной при температуре 278К. $C_{Hg^{2+}}=1 \cdot 10^{-4}$ моль/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ моль/л; $J = 0,1$ моль/л $NaClO_4$

Е, мВ	$C_L \cdot 10^5$, моль/л	$C_{Hg^{2+}} \cdot 10^5$, моль/л	$[Hg^{+}] \cdot 10^5$, моль/л	$[L] \cdot 10^5$, моль/л
1	2	3	4	5
548,0	4,990	9,980	0,101	1,263
544,0	9,960	9,960	0,169	1,476
540,0	14,911	9,940	0,236	1,724
536,0	19,841	9,921	0,304	2,015
529,0	24,752	9,901	0,422	2,646
520,0	29,644	9,881	0,574	3,756
510,0	34,517	9,862	0,743	5,543
500,0	39,370	9,843	0,912	8,180
490,0	44,204	9,823	1,081	12,073
480,0	49,020	9,804	1,250	17,817
470,0	53,816	9,785	1,419	26,295

Продолжение таблица 8.				
1	2	3	4	5
460,0	58,594	9,766	1,588	38,807
449,0	63,353	9,747	1,774	59,545
444,0	68,093	9,728	1,859	72,338
439,0	72,816	9,709	1,943	87,878
437,0	77,519	9,690	1,977	94,992
424,0	91,522	9,634	2,197	157,554
413,0	100,768	9,597	2,383	241,750
406,0	105,364	9,579	2,501	317,461
402,0	114,504	9,542	2,569	370,940
392,0	128,083	9,488	2,738	547,440
382,0	150,376	9,398	2,907	807,923
377,0	172,253	9,311	2,991	981,491
372,0	193,727	9,225	3,076	1192,348
368,0	214,808	9,141	3,144	1393,209
357,0	235,507	9,058	3,329	2137,729
354,0	255,835	8,977	3,380	2402,496
351,0	295,414	8,818	3,431	2700,055
342,0	333,622	8,666	3,583	3832,678
331,0	370,528	8,518	3,769	5880,833
322,0	406,198	8,375	3,921	8347,734
318,0	440,692	8,237	3,989	9753,980
310,0	474,068	8,104	4,124	13317,061
295,0	506,380	7,974	4,377	23875,808
287,0	537,677	7,849	4,513	32597,522
274,0	568,006	7,728	4,732	54066,425
270,0	597,412	7,610	4,800	63174,368
264,0	625,937	7,496	4,901	79792,263
262,0	653,619	7,386	4,935	86251,650

Следует отметить, что в целях оптимизации анализа в программе KEV имеется возможность построения экспериментального и рассчитанного графика в зависимости от точки титрования/номер раствора. Преимуществом программы KEV является то, что она рассчитывает теоретический потенциал и сравнивает с экспериментальными значениями.

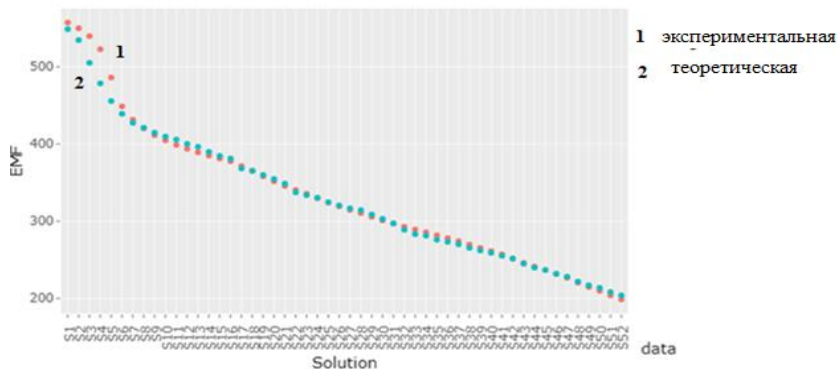


Рисунок 6 - Зависимость точки титрования комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиокарбамидом при температуре 278К.

На основе полученных экспериментальных данных по исследованию процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиокарбамидом при 278-318К и поддержании ионной силы равной 0,1 моль/л NaClO₄ нам удалось определить величины констант устойчивости для четырех комплексных частиц (таблица 9).

Таблица 9 - Значения общих констант устойчивости комплексов Hg(II) с N – ацетилтиомочевинной при 278-318К, ионной силе 0,1 моль/л NaClO₄

T, K	$\lg\beta_1([HgL]^2+)$	$\lg\beta_2([HgL_2]^2+)$	$\lg\beta_3([HgL_3]^2+)$	$\lg\beta_4([HgL_4]^2+)$
1	2	3	4	5
278	5,80±0,02	14,26±0,12	17,86±0,02	21,49±0,01
288	5,74±0,11	14,12±0,78	17,64±0,12	21,13±0,14
298	5,32±0,25	13,98±0,15	17,15±0,16	20,99±0,14
308	5,15±0,02	13,74±0,18	16,89±0,62	20,21±0,32
318	4,96±0,01	13,21±0,04	16,11±0,03	19,84±0,56

Анализ данных таблицы 10 показал, что с повышением температуры опыта значения общих констант устойчивости уменьшаются, что свидетельствует об экзотермичности процесса комплексообразования. Сравнение значений общих констант образований для комплексов ртути (II) с N-ацетилтиокарбамидом со схожими значениями комплексных соединений серебра (I) с указанным лигандом показало, что “устойчивость ртутных комплексов с N-ацетилтиокарбамидом больше, по сравнению с устойчивостью комплексов серебра с данным лигандом. Так, значение $\lg\beta_1$ для первой комплексной частицы Hg(II) с N- ацетилтиомочевинной при температуре

298К равно 5,32, тогда когда для аналогичного комплекса лиганда с серебром этой величиной является 4,94” [10].

Подтверждением реакции комплексообразования является определение изменений термодинамических функций. С использованием уравнения Кларка-Глю “графическим методом были определены значения энтропии и энтальпии (ΔH , ΔS) реакций комплексообразования. Энергию Гиббса определяли по формуле: $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ” [11]. (рисунок 7, таблица 11)

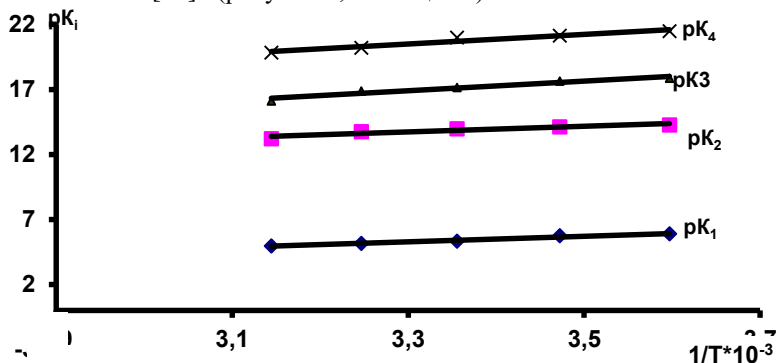


Рисунок 7. - Графики зависимости $\lg \beta_i = f(1/T)$ для комплексов ртути (II) с N- ацетилтиокарбамидом при 278-318К в среде 0,1моль/л азотной кислоты

Анализ кривых зависимости $\lg \beta_i = f(1/T)$ показал, что образование четырёх комплексов при температурах 278-318К имеет прямолинейную особенность.

Таблица 10 - Термодинамика образования комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной

Уравнение реакции	ΔH , кДж/моль	ΔG , кДж/моль	ΔS , Дж/(моль·К)
1	2	3	4
$Hg^{2+} + L = HgL^{2+}$	-41,52	-30,79	-36,03
$Hg^{2+} + 2L = HgL_2^{2+}$	-195,74	-88,6	-65,98
$Hg^{2+} + 3L = HgL_3^{2+}$	-97,31	-97,46	0,49
$Hg^{2+} + 4L = HgL_4^{2+}$	-118,65	-119,02	1,24

Изменение термодинамических величин свидетельствует о том, что процесс комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной является экзотермичным. Отрицательное значение энтальпии во всех стадиях процесса комплексообразования указывает на устойчивую связь между Hg-L по сравнению со связью

Hg-NO_3^- . При вхождении молекулы органического соединения во внутреннюю сферу координационных соединений, можно наблюдать закономерность в уменьшении значений ΔH . Изменение энтропии в процессе комплексообразования можно интерпретировать следующим образом: отрицательное значение ΔS связано с уменьшением частиц при комплексообразовании, и, положительное значение ΔS говорит об освобождении молекул растворителя от сольватных оболочек центральных ионов и лигандов при координации. Данный экспериментальный факт энергетически благоприятствует процессу комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной.

Наряду с другими факторами, влияющими на процесс комплексообразования, также возможно влияние ионной силы раствора на константы устойчивости комплексных частиц. Для определения влияния ионной силы на процесс комплексообразования Hg(II) с N – ацетилтиокарбамидом нами был изучен процесс комплексообразования при ионной силе равной 0,1, 0,25 и 0,5 моль/л NaClO_4 (таблицы 10,12,13).

Таблица 11 - Значения общих констант устойчивости комплексов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при 278-318K при 0,25 моль/л NaClO_4

Т, К	$\lg\beta_1([\text{HgL}]^{2+})$	$\lg\beta_2([\text{HgL}_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([\text{HgL}_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([\text{HgL}_4]^{2+})$
278	5,71±0,12	13,69±0,14	17,21±0,18	21,21±0,14
288	5,60±0,02	13,24±0,14	16,86±0,41	20,84±0,03
298	5,23±0,14	11,49±0,36	14,99±0,68	18,38±0,62
308	4,72±0,36	11,29±0,45	14,79±0,76	18,32±0,41
318	4,60±0,78	11,01±0,16	14,26±0,02	17,94±0,01

Таблица 12. - Значения общих констант устойчивости комплексов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при 278-318K при 0,5 моль/л NaClO_4

Т, К	$\lg\beta_1([\text{HgL}]^{2+})$	$\lg\beta_2([\text{HgL}_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([\text{HgL}_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([\text{HgL}_4]^{2+})$
278	5,69±0,14	13,12±0,01	17,02±0,12	21,16±0,16
288	5,58±0,52	12,98±0,52	16,15±0,42	20,64±0,46
298	5,00±0,36	11,00±0,41	14,26±0,85	18,13±0,62
308	4,59±0,12	10,86±0,42	14,14±0,58	17,88±0,12
318	4,48±0,48	10,99±0,02	13,96±0,48	17,46±0,03

Анализ данных таблиц 10,12 и 13 показывает, что все значения общих констант устойчивости ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной с увеличением концентрации раствора NaClO_4 уменьшаются с определенной закономерностью. Этот экспериментальный факт свидетельствует о том, что при повышении ионной силы раствора межйонное притяжение уменьшается, ионы, находящиеся в растворе экранируют центальный ион, что существенно влияет на процесс комплексообразования.

Имеются множество сведений о влиянии pH среды на процесс комплексообразования переходных металлов с производными тиомочевинны. Как известно, ртуть в кислых средах находится в виде акваионов, при повышении pH среды (обычно $>3-4$) приводит к образованию гидросокомплексов, в результате чего ртуть осаждается. Для определения оптимальной среды комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной мы изучали процесс комплексообразования при pH = 2-4 (таблица 13).

Таблица 13. - Значение $\lg\beta_i$ для комплексных частиц ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при температуре 298K при pH=2-4

pH	$\lg\beta_1$	$\lg\beta_2$	$\lg\beta_3$	$\lg\beta_4$
1.	$5,32\pm 0,3$	$13,98\pm 0,5$	$17,15\pm 0,5$	$20,99\pm 0,5$
2.	$4,68\pm 0,8$	$12,11\pm 0,4$	$14,26\pm 0,3$	$19,01\pm 0,7$
3.	$3,54\pm 0,9$	$10,21\pm 0,2$	$11,96\pm 0,8$	$17,26\pm 0,3$

Как видно из данных таблицы 13 с увеличением pH среды реакции происходит уменьшение значений констант устойчивости комплексов ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной, что вероятно связано с возможным образованием гидросокомплексов ртути (II) и частичном гидролизе металла.

5.1. Применение N – ацетилтиомочевинны в качестве органического реагента для определения ртути (II)

Загрязнение окружающей среды ионами ртути является одной из важных проблем за последние годы. Разработка методик определения ртути, как высокотоксичного металла, имеющего кумулятивные свойства, приводящие к исчезновению живых организмов и клеток, является актуальной задачей современности. В этой связи, нами была разработана методика турбидиметрического определения ртути (II) с N –

ацетилтиомочевинной. Для определения ртути в водных растворах был применен графический способ определения концентрации (таблица 14).

Таблица 14. - Результаты турбидиметрического определения стандартных растворов ртути (II) с N- ацетилтиомочевинной.

Концентрация Hg^{2+} , моль/л	Оптическая плотность			
	A_1	A_2	A_3	A_m
$2 \cdot 10^{-5}$	0,030	0,030	0,029	0,030
$4 \cdot 10^{-5}$	0,055	0,055	0,055	0,055
$8 \cdot 10^{-5}$	0,160	0,160	0,160	0,160
$12 \cdot 10^{-5}$	0,200	0,200	0,200	0,200
$16 \cdot 10^{-5}$	0,270	0,270	0,270	0,270

По полученным данным был построен график зависимости $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$, который имеет прямолинейный характер (рисунок 8).

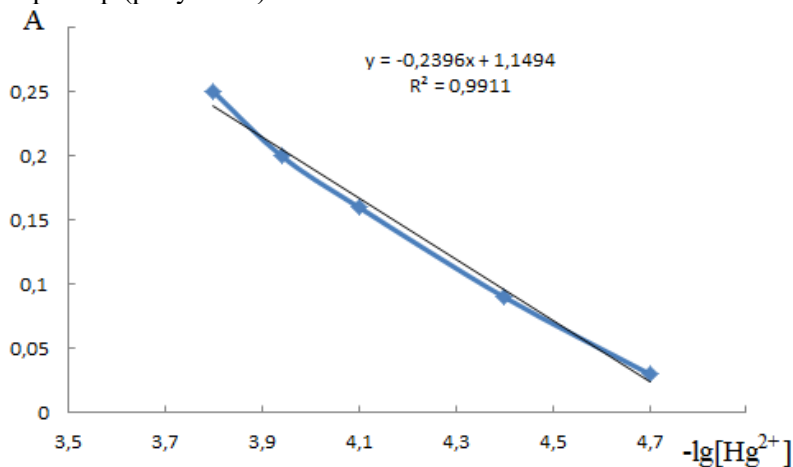


Рисунок 8. - График зависимости $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$

Как видно из графика, зависимость $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$ имеет прямолинейный характер и может быть использован для определения ионов ртути (II). Для выявления воспроизводимости результатов анализа, данная методика была проведена несколько раз, и были получены аналогичные результаты.

Статистическая обработка результатов анализа дала возможность определения относительной ошибки результатов анализа, которая равна $\pm 9,8\%$.

5.3. Изучение острой токсичности комплексного соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной состава $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$

В рамках доклинических исследований биологически активных координационных соединений была проведена углублённая токсикологическая оценка нового соединения $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$. При пероральном введении дозы 190-207 мг/кг препарата беспородным крысам обоего пола массой 160-210 г. у части животных отмечались начальные признаки интоксикации, проявляющиеся кратковременной вялостью, снижением двигательной активности и замедлением реакции на внешние раздражители. На основании статистической обработки экспериментальных данных среднелетальная доза (LD_{50}) препарата $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ составила 170,5 мг/кг. Согласно классификации токсичности химических веществ, данное соединение было отнесено к III-ему классу токсичности.

С целью выявления изменения токсичности металла при комплексообразовании, параллельно была проведена токсикологическая оценка исходного соединения ртути (II) $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$. Доклинические исследования проводились аналогично исследованиям комплекса $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$. Выявлено, что исходное соединение $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ относится I-ому классу токсичности. Таким образом, показано, что при координации с органическим лигандом N-ацетилтиомочевинной токсичность ртути уменьшается.

ВЫВОДЫ

1. Изучены кислотно-основные свойства органического лиганда N – ацетилтиомочевинной методом потенциометрии. Выявлено, что значение константы ионизации лиганда составляет $2,36 \pm 0,04$. С учетом полученных данных изучен процесс комплексообразования $\text{Hg}(\text{II})$ с N-ацетилтиомочевинной при 0,1; 0,25 и 0,5 моль/л NaClO_4 при 278-318K. Численные значения констант образований ($\lg \beta_1$) были определены с помощью онлайн программы KEV [1-A, 2-A, 4-A, 5-A, 6-A, 8-A, 9-A, 10-A, 11-A].

2. Впервые были предложены методики синтеза новых комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной. Состав и строение синтезированных комплексов были определены современными физико-химическими методами исследования (ИК – спектроскопия, кондуктометрия, рентгено-фазовый анализ, термогравиметрия, потенциометрия). Определены закономерности образования комплексных соединений ртути (II) в зависимости от ионной силы раствора. [3-A, 7-A, 13-A]

3. Методом инфракрасной спектроскопии определена монодентатная координация N - ацетилтиомочевины посредством атома серы тионной группы. [14-A]

4. Методом термографического анализа определены основные стадии терморазложения комплексного соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной. Для всех стадий терморазложения комплексов рассчитаны термодинамические характеристики с применением уравнения Коутса.

5. На основании рентгенографических исследований показано, что кристаллическая решетка комплексов $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]$ и $[\text{HgL}_4]$ относится к орторомбической сингонии. [13-A]

6. Разработана методика определения ионов ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной. Показано, что процесс комплексообразования данной системы можно использовать для определения ртути (II) в объектах окружающей среды. Изучена острая токсичность синтезированного комплексного соединения ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной [12-A].

Рекомендации по практическому применению результатов исследования

Выполненная диссертационная работа посвящена исследованию синтеза новых координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной, изучению их физико-химических свойств, анализу состава соединений, изучению кислотно-основного баланса лиганда, построению диаграмм распределения ионных и молекулярных форм N – ацетилтиомочевины в широких диапазонах pH, термодинамическому расчету процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной, определению токсикологических свойств соединений полученный комплекс посвящен.

Методика синтеза и исследования новых координационных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной может служить для синтеза комплексных соединений металлов с производными тиомочевины. Значения констант образования комплексных частиц могут использоваться в качестве литературных данных. Синтезированные комплексные соединения могут широко использоваться в аналитической, органической химии, медицине и катализе. Метод определения ртути (II) с помощью N – ацетилтиомочевины может быть использован для обнаружения ионов Hg^{2+} в различных объектах.

Комплексные соединения ртути (II) с органическими лигандами имеют наибольшее преимущество в современной координационной химии благодаря своим физико-химическим свойствам и практическому значению. Среди различных лигандов особое место занимает N – ацетилтиомочевина, которая содержит в своем составе тиольные (-SH-SH) и амидные (-CONH₂-CONH₂) функциональные группы, способные конкурировать по координации с переходными металлами. Соли ртути (II), обладающие высокой антимикробной активностью, изучение свойств ее координационных соединений для разработки методов дезинфекции далеко не бесполезно. Ряд сведений о снижении токсичности тяжелых металлов (ртути, свинца) в процессе комплексообразования приводится в научной литературе. Существует много информации о токсичности для окружающей среды, связанной с использованием ртути и ее солей. Среди органических лигандов, вступающих в реакцию с атомами ртути, сернистые соединения занимают характерное положение. Сернистые лиганды с различными ионами металлов проявляют биологическую активность (противоопухолевую, грибковую, противовирусную и т. д.).

Широкий спектр термодинамических характеристик органических лигандов и комплексных соединений, полученных в ходе исследований, может быть использован в аналитической химии, а также в учебном процессе при изучении курсов координационной химии и физической химии. Эти данные также могут быть использованы при проведении научно-исследовательских работ магистрантами и аспирантами.

Статьи, опубликованные в научных журналах, рекомендованных

ВАК при Президенте Республики Таджикистан:

[1-А]. **Халимова, Р.С.** Исследование процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной при ионной силе 0,1 моль/л NaClO₄ и температуре 288K./ Халимова Р.С., Курбонова Ф.Ш., Фируза Ф.// Вестник педагогического университета. Серия естественных наук. №4(20). УДК 547.554.22.04 ISSN 2707-9996. Душанбе 2023. С. 83-88.

[2-А]. **Халимова, Р.С.** Комплексообразование ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной при ионной силе 0,1 моль/л NaClO₄ и температуре 318K./ Халимова, Р.С., Курбонова Ф.Ш., Сафаров С.И.// Вестник политехнического университета, Серия: Инженерные исследования. № 2 (66) 2024, С. 106-109.

[3-А]. **Халимова, Р.С.** Синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Вестник педагогического университета. № 3 (31) 2026, С. 137-141.

Тезисы статей в материалах научных конференций:

[4-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N,N – диэтилтиомочевинной при температуре 298K / Ф.Ш. Курбонова, Р.С.Халимова, Ф.Фируза, С.И. Сафаров // Сборник статей VI-ой международной конференции «Вопросы физической и координационной химии». Душанбе 2024. С. 54-58.

[5-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при температуре 278K. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы научно-практической конференции на тему: Современное состояние и перспективы физико-химического анализа. Душанбе 2023. С. 224-227.

[6-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной при температуре 318K. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Сборник статей первой международной научно-практической конференции Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений и аспекты их применения. Душанбе. 2023. С. 356-357.

[7-А]. **Халимова, Р.С.** Омӯзиши ҷараёнгузарони пайвастҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина / Ф.Ш.Курбонова, Р.С.Халимова // Маҷмӯи маводи конференсияи байналмилалӣ илмию амалӣ дар мавзӯи Пайвастаҳои комплекси ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо. Душанбе. 2025. С. 146-148.

[8-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N,N – диэтилтиомочевинной при температуре 308K / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, Ф. Фатхуллозода, С.И. Сафаров // Материалы международной научно-практической конференции на тему «Роль химии и химической промышленности в индустриализации Таджикистана». Душанбе. 2024. С. 42-45.

[9-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение кислотно-основных свойств N-ацетилтиомочевины. / Ф.Ш.Курбонова, Р.С. Халимова // Материалы республиканской Комплексные соединения и аспекты их применения. Душанбе. 2021. С. 56-59.

[10-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N-ацетилтиомочевинной при температуре 288K. / Р.С.Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы

конференции Комплексы соединения и аспекты их применения. Душанбе. 2021. - С. 59-62.

[11-А]. **Халимова, Р.С.** Изучение процесса комплексообразования Hg(II) с N-ацетилтиомочевинной при температуре 328 К. / республиканской конференции на тему Роль современных методов анализа в развитие науки и производства. Душанбе. 2022. С.165-168.

[12-А]. **Халимова, Р.С.** Истифода намудани N – атсетилтиомочевина ҳамчун реагенти органикӣ барои муайян намудани ионҳои симоб (II). / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Маводи конференсияи VII илмӣ байналмилалӣ Масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ. Душанбе. 2026. С.245-249.

[13-А]. **Халимова, Р.С.** Таҳқиқотҳои рентгенографии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Маводи конференсияи VII илмӣ байналмилалӣ Масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ. Душанбе. 2026. С.242-245.

[14-А]. Халимова, Р.С. ИК – спектроскопическое исследование комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова // Материалы международной научно-практической конференции Аналитическая химия и её значение в развитии естественных наук. Душанбе. 2025.С. 118-121.

СПИСОК ИСПОЛЬЗУЕМОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zhong Z. et al. Synthesis of acyl thiourea derivatives of chitosan and their antimicrobial activities in vitro // Carbohydrate Research. – 2008. –Т. 343. – № 3. – С. 566-570.

2. Isab A. A. et al. Synthesis, characterization and antimicrobial studies of mixed ligand silver (I) complexes of thioureas and triphenylphosphine; crystal structure of $\{[Ag(PPh_3)(thiourea)(NO_3)]_2 \cdot [Ag(PPh_3)(thiourea)]_2(NO_3)_2\}$ // Polyhedron. – 2010. –Т. 29. – № 4. –С. 1251-1256.

3. Wan Zullkiplee W. S. H. et al. Bis-thiourea bearing aryl and amino acids side chains and their antibacterial activities //Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements. – 2014. – Т. 189. – № 6. –С. 832-838.

4. del Campo R. et al. N-benzoyl-N'-alkylthioureas and their complexes with Ni(II), Co(III) and Pt(II)–crystal structure of 3-benzoyl-1-butyl-1-methylthiourea: activity against fungi and yeast

//Journal of Inorganic Biochemistry. – 2004. –Т. 98. – № 8. –С. 1307-1314.

5. Saeed S. et al. Synthesis, characterization and biological evaluation of some thiourea derivatives bearing benzothiazole moiety as potential antimicrobial and anticancer agents // European journal of medicinal chemistry. – 2010. –Т. 45. – № 4. – С. 1323-1331.

6. Lane T.J., Yamaguchi A., Quagliano J.V, Ryan J.A., Mizushima S.J. Am. Chem. Soc., 81, 3824. 1959

7. Yamaguchi A., Penland R.B., Mizushima S., Lane T.J., Curran C., Quagliano J.V. J. Am. Chem. Soc., 80, 527. 1958.

8. Харитонов Ю.Я. ИК спектры поглощения N – ацетилтиокарбамида. / Ю.Я. Харитонов, Т.Н. Гущина // Журн.неорган.химии. 1988. Т.33. №9. С.2228-2233.

9. Мирзобраимов Б. Координационные соединения ряда d и f металлов с амидными лигандами / Б. Мирзобраимов и др. // Коорд. химия. – Москва. – 1985. –Том 11. – С.1587-1605.

10. Липсон Г., Стипл Г., Интерпретация порошковых рентгенограмм. - М.: Мир, 1972. - С.384

11. Самадов Абдурасул Саидович Термодинамические характеристики равновесных реакций комплексообразования ионов серебра (I)(I, II) с тиомочевинной и её производными в водных растворах. Автореф. дисс. на соис. уч.ст. канд.хим.наук.Москва 2021. -22с.

12. Clarke, E. C., Evaluation of Thermodynamic Functions from Equilibrium Constants. / E. C. Clarke, D.N. Glew // Trans. Faraday Soc. –1966. – Vol. 62, P. 539-547.

АННОТАТСИЯ

Диссертатсияи Ҳалимова Рухшона Султановна дар мавзӯи:
“Комплексҳосилкунии симоб (II) бо N – атсетилтимочевина” барои
дарёфти дараҷаи илмӣ номзади илмҳои химия аз рӯи ихтисоси 1.4.2
– химияи ғайриорганикӣ

Калидвожаҳо: симоб (II), N – атсетилтимочевина, раванди
комплексҳосилшавӣ, собитаи ҳосилшавӣ, барномаи KEV, пайвастаҳои
координатсионӣ.

Объекти таҳқиқот: объекти таҳқиқот пайвастаҳои комплекси
симоб (II) бо N – атсетилтимочевина, ҳосиятҳои физикӣ-химиявӣ
онҳо, омӯзиши раванди комплексҳосилшавӣ дар системаи Hg(II) – N –
атсетилтимочевина дар ҳароратҳои гуногун.

Мақсади таҳқиқот: коркарди методикаи ба даст овардани
пайвастаҳои нави комплекси симоб (II) бо N – атсетилтимочевина,
омӯзиши таркиб ва ҳосиятҳои пайвастаҳои синтезкардашуда, муайян
намудани параметрҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ,
муайян намудани собитаҳои утсувории заррачаҳои ҳосилшуда,
инчунин истифодаи амалии пайвастаҳои комплекси ҳосилшуда.

Усулҳои таҳқиқот: таркиб ва сохти пайвастаҳои комплекси
симоб (II) бо N – атсетилтимочевина бо усулҳои замонавии физикию
химиявӣ (кондуктометрӣ, спектроскопияи инфрасурх, рентгенӣ ва
дериватографӣ) исбот карда шудаанд. Собитаҳои ҳосилшавии
пайвастаҳои комплексӣ бо усулҳои Леден, Фридман, бузургҳои
термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ бо усулҳои Кларк ва
Глю бо истифода аз барномаҳои компютери «Excel», «BorlandDelhi»
ва «KEV» муайян карда шудаанд.

Навгониҳои илмӣ: Аввалин маротиба раванди
комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтимочевина дар
худуди ҳароратҳои 278-318K омӯхта шуда, собитаҳои утсувории онҳо
муайян карда шудаанд. Қонуниятҳои умумӣ дар тағйирёбии
собитаҳои утсуворӣ аз қувваи ионии маҳлул, инчунин pH реаксияи
комплексҳосилшавӣ дар маҳлулҳои обӣ маълум карда шуд. Чор
пайвастаи комплекси нави симоб (II) бо N – атсетилтимочевина
синтез карда шуда, таркиб ва сохти онҳо бо усулҳои замонавии
физикӣ-химиявӣ исбот карда шуд. Методикаи турбидиметрии
муайянкунии симоб (II) бо N – атсетилтимочевина коркард карда
шуд.

Дарачаи истифодакунӣ: собитаҳои утсувории
муайянкардашудаи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N –
атсетилтимочевина метавонанд ҳамчун маводи маълумотӣ истифода
карда шаванд. Методикаи муайянкунии турбидиметрии симоб (II) бо N
– атсетилтимочевинаро дар таҳлили металли симоб дар маҳлулҳои
обӣ истифода намуд.

АННОТАЦИЯ

Диссертации Халимовой Рухшоны Султановной на тему: «Комплексообразование Hg(II) с N – ацетилтимочевинной» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Неорганическая химия

Ключевые слова: ртуть (II), N – ацетилтимочевина, процесс комплексообразования, константа образования, программа KEV, координационные соединения.

Объект исследования: объектами исследований являлись комплексные соединения ртути (II) с N-ацетилтимочевинной, их физико-химические свойства, изучение процесса комплексообразования в системе Hg(II) – N – ацетилтимочевина при различных температурах.

Цель исследования: разработка методики получения новых комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтимочевинной, изучение состава и свойств полученных комплексов, изучение влияния различных факторов на процесс комплексообразования, определение термодинамических параметров процесса комплексообразования, определение констант устойчивости комплексных частиц, а также практическое применение полученных комплексных соединений.

Методы исследования: состав и строение комплексных соединений ртути (II) с N – ацетилтимочевинной доказаны современными физико-химическими методами исследования (кондуктометрия, ИК спектроскопия, рентгено-фазовый и дериватографический анализ). Константы образований комплексных частиц были оценены методами Ледена, Фридмана, термодинамические величины процесса комплексообразования определены методами Кларка и Глю с использованием компьютерных программ «Excel», «BorlandDelhi» и «KEV».

Научная новизна: Впервые исследован процесс комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтимочевинной в области температур 278-318K и определены их константы устойчивости. Выявлена общая закономерность в изменении констант устойчивости от ионной силы раствора, а также pH реакции комплексообразования в водных растворах. Синтезированы 4 новых координационных соединений ртути, состав и строение которых доказаны современными физико-химическими методами анализа. Разработана методика турбидиметрического определения ртути (II) с N – ацетилтимочевинной.

Степень использования: определенные константы устойчивости комплексных соединений ртути (II) с N-ацетилтимочевинной могут служить справочным материалом, разработанная методика определения ртути (II) с N – ацетилтимочевинной может быть использована при определении металла в водных растворах.

ABSTRACT

Dissertation by Rukhshona Sultanovna Khalimova on the topic:
"Complexation of Hg(II) with N-acetylthiurea" for the degree of Candidate
of Chemical Sciences in the specialty 1.4.2. Inorganic Chemistry

Keywords: mercury (II), N-acetylthiurea, complexation process, formation constant, KEV program, coordination compounds.

Object of study: The objects of study were mercury (II) complex compounds with N-acetylthiurea, their physicochemical properties, and the study of the complexation process in the Hg(II) – N-acetylthiurea system at various temperatures.

Objective of the study: development of a method for obtaining new complex compounds of mercury (II) with N-acetylthiurea, study of the composition and properties of the obtained complexes, study of the influence of various factors on the complex formation process, determination of the thermodynamic parameters of the complex formation process, determination of the stability constants of complex particles, as well as practical application of the obtained complex compounds.

Research methods: The composition and structure of mercury(II) complex compounds with N-acetylthiurea were confirmed using modern physicochemical research methods (conductometry, IR spectroscopy, X-ray diffraction, and derivatographic analysis). The formation constants of the complex particles were estimated using the Leden and Friedman methods, while the thermodynamic parameters of the complexation process were determined using the Clarke and Glue methods using Excel, BorlandDelhi, and KEV computer programs.

Scientific novelty: The complexation of mercury(II) with N-acetylthiurea in the temperature range of 278-318 K was studied for the first time, and their stability constants were determined. A general pattern in the change in stability constants depending on the ionic strength of the solution, as well as the pH of the complexation reaction in aqueous solutions, was revealed. Four new mercury coordination compounds have been synthesized, the composition and structure of which have been confirmed using modern physicochemical analytical methods. A method for the turbidimetric determination of mercury(II) with N-acetylthiurea has been developed.

Usability: The determined stability constants of mercury(II) complexes with N-acetylthiurea can serve as reference material. The developed method for determining mercury (II) with N-acetylthiurea can be used to determine the metal in aqueous solutions.