

ДОНИШГОҲИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

Бо ҳуқуқи дастнавис

ТДУ: 546.49

ТКБ: 24.122

С-31



СУЛТОНЗОДА РУХШОНА СУЛТАН

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

ДИССЕРТАТСИЯ

**барои дарёфти дараҷаи илмӣ номзади илмҳои химия аз рӯи
ихтисосҳои 1.4.2. Химияи ғайриорганикӣ**

Роҳбари илмӣ:

н.и.х., дотсент Қурбонова Ф.Ш.

Душанбе – 2026

МУНДАРИЧА

Муқаддима.....	5
----------------	---

БОБИ 1. ШАРҲИ АДАБИЁТ

1.1. Пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои гуногун.....	12
1.2. Таҳқиқи термикии пайвастаҳои комплекси.....	22
1.3. Пайвастаҳои комплекси металлҳои гуногун бо ҳосилаҳои тиомочевина.....	24
1.4. Хосиятҳои кислотагӣ-асосии лигандҳои амидӣ ва тиаамидӣ.....	33
1.5. Хусусиятҳои асосии истифодабарии пайвастаҳои комплекси.....	35
1.6. Хулосаи умумии шарҳи адабиёт.....	38

БОБИ 2. ҚИСМАТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛӢ

2.1. Маводҳои аввала, усулҳои таҳлил ва таҳқиқи пайвастаҳои комплекси.....	40
2.2. Баъзе хосиятҳои физикӣ-химиявии лиганди N – атсетилтиомочевина.....	41
2.3. Синтези намаки аввалаи нитрати симоб (II).....	42
2.4. Формулаҳои ҳисобӣ барои коркарди натиҷаҳои эксперименталӣ.....	43
2.5. Омӯзиши хосияти кислотагӣ-асосии N – атсетилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ.....	44
2.6. Методикаи синтези пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	49

БОБИ 3. ТАҲҚИҚОТИ ФИЗИКӢ-ХИМИЯВИИ ПАЙВАСТАҲОИ КОМПЛЕКСИИ СИМОБ (II) БО N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА

3.1. Омӯзиши ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда.....	53
3.2. Омӯзиши спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	58
3.3. Таҳқиқоти рентгенографии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	64

3.4. Таҳқиқи термогравиметрии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	70
3.5. Реаксияҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	76
БОБИ 4. ОМУЗИШИ РАВАНДИ КОМПЛЕКСҲОСИЛШАВИИ СИМОБ (II) БО N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА ДАР МАҲЛУЛҲОИ ОБӢ	
4.1. Муайян намудани потенциали стандартӣ электроди симоб-селективӣ.....	79
4.2. Омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ дар ҳароратҳои гуногун.....	80
БОБИ 5. ҶАНБАҲОИ АМАЛИИ ИСТИФОДА НАМУДАНИ N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА ВА ПАЙВАСТАИ КОМПЛЕКСИИ ОН БО СИМОБ (II)	
5.1. Истифода намудани N – атсетилтиомочевина ҳамчун реагент барои муайян кардани симоб (II).....	111
5.2. Коркарди статистикуии натиҷаҳои таҳлили турбидиметрии ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.....	117
5.3. Омӯзиши захрокуии шадиди моддаи аввалаи $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$	118
5.4. Омӯзиши захрокуии шадиди пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}(\text{NO}_3)_2]$	121
ХУЛОСА.....	124
Тавсияҳо оид ба истифодаи амалии натиҷаи таҳқиқот.....	125
РӢЙХАТИ АДАБИЁТ.....	127
Рӯйхати интишороти мақолаҳои илмӣ аз ҷониби ҚОА тақризшаванда.....	142

ИХТИСОРОТ

L – лиганд

Atu – атсетилтиомочевина

ТГ – термогравиметрӣ

ДТГ – темрогравметрии дифференсиалӣ

ТТД – таҳлили термикии дифференсиалӣ

ДМФА – диметилформаид

ДМСО – диметисулфоксид

Мукаддима

Мубрамии мавзуи таҳқиқот. Симоб, пайвастиҳо ва ҳулаҳои он дар соҳаҳои тиб ва технологияи химиявӣ, дар истеҳсоли рангкунандаҳо ва хоҷагии қишлоқ васеъ истифода бурда мешаванд. Пайвастиҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои органикӣ ба тӯфайли хосиятҳои физикию химиявӣ ва аҳаммияти 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 ($-SH-SH$) ва амидиро ($-CONH_2-CONH_2$) дошта, метавонад бо координатсияшавиашон бо металлҳои интиқолӣ рақобат дошта бошанд. Намакҳои симоб (II), ки қобилияти баланди зиддимикробӣ доранд, омӯзиши хосиятҳои пайвастиҳои координатсионии он барои коркарди усулҳои безараргардонӣ аз манфиат дур нест. Як қатор маълумот оид ба паст шудани захрокии металлҳои вазнин (симоб, сурб) дар раванди комплексҳосилшавӣ дар адабиёти илмӣ оварда шудаанд. Маълумоти зиёд оид ба захролудшавии муҳити атроф дар мавриди истифодаи симоб ва намакҳои он оварда шудааст. Миёни лигандҳои органикӣ, ки бо атомҳои симоб ба реаксия дохил мешаванд, пайвастиҳои сулфурдор мавқеи хосро ишғол мекунанд. Лигандҳои сулфурдор бо ионҳои гуногуни металлҳо фаъолнокии биологиро зоҳир мекунанд (зиддиомосӣ, зиддӣ занбӯрӯғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғ.). Пайвастиҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро метавон дар химияи таҳлилӣ (мисол, ҳамчун реагентҳо барои муайянкунии ионҳои металлҳо), дар биохимия (моделсозии металлферментҳо) ва дар маводшиносӣ (ба даст овардани маводҳои функционалӣ) истифода кард.

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

Ҳамин тариқ, дар кори диссертационии 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 муайянкунии симоб (II) бо лиганди мазкур омӯхта шудаанд.

Робитаи таҳқиқот бо барномаҳо (лоиҳаҳо) ва мавзуҳои илмӣ. Кори диссертационӣ 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 милли – саноатикунории босуръати мамлакат омода шуда, дар доираи мавзуҳои фармоишии “Комплексҳосилкунии d-металлҳои интиқолӣ бо иштироки лигандҳои амидӣ, тиаамидӣ ва оксигендор” таҳти рақами бақайдгирии № 0122TJ1434 иҷро гардидааст.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқот: Коркарди методикаи синтези пайвастҳои нави комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, омӯзиши таркиб ва хосиятҳои пайвастҳои комплекси, омӯзиши таъсири омилҳои гуногун ба раванди комплексҳосилшавӣ, муайян намудани бузургҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ, муайян намудани собитҳои устувории зарраҳои комплекси ва инчунин истифодаи амалии пайвастаи комплекси 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 комплекси 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 ҳосиятҳои токсикологӣ пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Объекти таҳқиқот. Пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, ҳосиятҳои 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 собитҳои 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 коэффитсиенти ҳароратӣ бузургҳои 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 $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ сингонияи 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 илмию амалии таҳқиқот: методикаҳои синтези пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро метавон дар таҳқиқотҳои мақсаднок оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилкунии металлҳои 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 ҷанбаҳои химияи ғайриорганикӣ ва таҳлиلى истифода кардан мумкин аст. Пайвастаҳои синтезкардаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар химияи таҳлиلى 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 собитаҳои умумии устувории 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 омории натиҷаҳои таҳқиқот таъмин карда шудааст.

Мутобиқати диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси илмӣ:

Диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси 1.4.2 – Химияи ғайриорганикӣ мутобиқат мекунад:

1. Муайянкунии характери бо ҳамалоқамандӣ 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 пайвастҳои 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 довталаби 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 натиҷаҳои эксперименталӣ, омодакунии мақолаҳои илмӣ асос карда шудааст.

Тасвиб ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия: Натиҷаҳои асосӣ ва муҳимтарини таҳқиқоти диссертатсионии 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 имлию амалӣ дар мавзӯи “Пайвастҳои 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 ҷумҳуриявии 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 замонавии таҳлил дар рушди илм ва истеҳсолот”, бахшида ба “20-солаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (Солҳои 2020-2040)” (Душанбе, 2022); конференсияи ҷумҳуриявии илмию назариявии ҳайати устодону кормандони ИИТ ДМТ бахшида ба “Солҳои рушди саноат (солҳои 2022-2026)” ва “Бузургдошти Мавлоно Ҷалолиддини Балхӣ” (Душанбе, 2022).

Интишорот аз рӯи мавзуи диссертатсия. Аз рӯи мавзуи 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.

Сохтор 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.

БОБИ 1. ШАРҲИ АДАБИЁТ

1.1. Пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои гуногун

Дар манбаъҳои илмӣ иттилоӣ зиёде доир ба синтез ва таҳқиқи як қатор реагентҳои органикӣ бо симоб (II) оварда шудаанд. Аз ҷумла, муҳаққиқон Белевантсев В.И. ва Шураев В.И. собитаҳои мувозинатии ҳосилшавии пайвастаҳои роданид-галогенидии симоб (II)-ро аз асидокомплексҳои мувофиқ дар маҳлули обӣ муайян кардаанд.

“Дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда дар ҳарорати $20 \pm 1^\circ\text{C}$ ва дар қувваи ионии $0,01\text{мол/л}$ (HClO_4) чунин қиматҳои собитаҳо ба даст оварда шудаанд: $\lg K = 1,00 \pm 0,06$ (HgSCNCl) ва $0,81 \pm 0,02$ (HgSCNBr). Қиматҳои ба даст оварда бо қиматҳои дар адабиёт овардашуда барои муайян намудани алоқамандии миқдории тавсифи ҳосилшавии пайвастаҳои якҷинса ва омехта дар маҳлул шарҳ дода шуда, инчунин бо ҳамтаъсиркунии лигандҳо дар сфераи дохилаи пайвастаи комплекси низ омӯхта шудааст” [1].

Бо усулҳои спектрофотометрӣ ва pH – метрӣ дар маҳлули обӣ дар қувваи ионии NaClO_4 ($\mu = 0,1$; $t = 20 \pm 2^\circ\text{C}$) комплексҳосилшавии симоб (II) бо кислотаи себ омӯхта шудаанд. “Ҳудудҳои pH – и ҳосилшавӣ ва мавҷуд будани пайвастаҳои комплекси дар консентратсияи додашудаи симоб (II) ва лиганд, таркиби молӣ ва протонии онҳо муайян карда шудаанд. Вобастагии баромади ҳосилшавии заррачаҳои комплекси аз консентратсияи кислотаи себ нишон дода шудааст. Муайян карда шуааст, ки симоб (II) бо кислотаи себ пайвастаҳои комплекси таркибашон HgMal , $\text{Hg}(\text{OH})\text{Mal}^-$ ва $\text{Hg}(\text{OH})_2\text{Mal}^{2-}$, (дар ин ҷо Mal – кислотаи себ аст) ҳосил мекунад. Қимати логарифмаи даҳии собитаи устувории пайвастаҳои комплекси ҳосилшуда мувофиқан ба: $6,28 \pm 0,04$, $16,24 \pm 0,07$ и $25,02 \pm 0,05$ баробар аст. Маълум карда шудааст, ки дар раванди комплексҳосилшавӣ катионҳои симоб (II) протонҳои гурӯҳҳои гидросилиро аз молекулаҳои кислотаи себ намебароранд. Омили мазкур координатсияи атомҳои оксигени гурӯҳҳои гидросилиро инкор намекунад. Баромади пайвастаҳои комплекси аз консентратсияи кислотаи себ вобастагӣ дорад. Таносубияти оптималӣ, ки дар он баромади пайвастаҳои комплекси

максималӣ аст, ба 1:10 баробар аст” [2].

Қонуниятҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб дар об ва ҳалқунандаҳои ғайриобӣ аз ҷониби мутахассисон омӯхта шудаанд. Алоқамандии устувории пайвастаҳои комплекси ва солватҳои симоб бо хосиятҳои ҳалқунандаҳо муайян карда шудааст. Дар асоси консепсияи ғаёлнокии ионӣ шкалаҳои $pH_{Hg^{2+}}$ - устувории пайвастаҳои комплекси симоб сохта шуда, имконияти пешгӯии ғаёлнокии заррачаҳои комплекси, собитҳои диспропорсионӣ ва қиматҳои ҳосили зарби ҳалшавандагии намакҳои камҳалшавандаи симоб дар муҳитҳои беоб нишон дода шудааст. Вобастагии коррелятсионии қатори пайвастаҳои комплекси ва солватоконкомплексҳои симоб ва ҷанбаҳои истифодаи раванди солвататсия дар химияи пайвастаҳои комплекси муҳокима карда шуд.

“Бо усулҳои рН – потенциометрӣ ва спектрофотометрӣ дар маҳлули обӣ дар иштироки перхлорати натрий ($NaClO_4$, $\mu = 0,1$; $t = 20 \pm 2$ °C) пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо кислотаи шароб, инчунин пайвастаҳои конкомплексҳои-таратрати бо конкомплексҳои моноаминополикарбонӣ: кислотаҳои иминодисирко, 2-гидроксиэтилиминосирко ва сенилтрисирко омӯхта шудаанд” [4].

“Ҳудуди рН –и ҳосилшавӣ ва устувории пайвастаҳои комплекси дар концентратсияҳои додашудаи лигандҳо ва симоб (II), таркиби молӣ ва протонии онҳо муайян карда шудаанд. Қимати собитҳои устувории пайвастаҳои комплекси муайян карда шудаанд. Барои пайвастаи комплекси $HgTart$ собитҳои устуворӣ ба: $5,36 \pm 0,09$ (рН-потенциометрӣ); $5,44 \pm 0,13$ (спектрофотометрӣ) $5,40 \pm 0,11$ (миёна) баробар аст. Барои пайвастаи комплекси $Hg(OH) Tart^-$: $15,38 \pm 0,08$ (рН-потенциометрӣ); $15,66 \pm 0,10$ (спектрофотометрӣ) $15,52 \pm 0,09$ (миёна). Барои пайвастаи комплекси $Hg(OH)_2 Tart^{2-}$ $24,57 \pm 0,10$ (рН-потенциометрӣ); $24,83 \pm 0,14$ (спектрофотометрӣ); $24,70 \pm 0,12$ (миёна). Қимати собитҳои диссолятсияи кислотаи шароб муайян карда шудаанд” [4].

Аз ҷониби муҳаққиқон пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо 3-амино-

5-меркапто-1,2,4-триазол дар муҳити обӣ синтез карда шудааст. “Пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2\text{Br}_2]$ зимни бо ҳамтаъсиркунии 0,1 ммол намаки HgCl_2 дар об (2 мл об ва 2 қатра маҳлули 48 % HBr) бо 0,3 ммол 3-амино-5-меркапто-1,2,4 – триазол дар об (15 мл об ва 2 қатра маҳлули 48% HBr) ҳосил карда шудааст. Инчунин, структураи пайвастаи комплексӣ омӯхта шуда, маълум карда шудааст, ки дар структураи кристаллии моддаи HgL_2Br_2 молекулаҳо миёни ҳам тавассути бандҳои гидрогенӣ пайваст мешаванд” [5].

“Пайвастаи комплексӣ дорои шакли тетраэдр бо кунҷҳои Br-Hg-Br ва S-Hg-S баробар ба $100,50^\circ$ ва дарозии бандҳои Hg-S ва Hg-Br мувофиқан ба 2,134 ва 2,318 Å баробар мебошанд” [6]. Нечаева Е.М. пайвастаҳои комплекси симоб (II)-ро бо ҳосилаҳои пиразолон синтез намудааст. Қонуниятҳои физикӣ-химиявӣ экстраксияи пайвастаҳои мазкур муайян карда шудаанд. “Раванди экстраксияи ионҳои симоб (II) аз маҳлулҳои хлоридӣ, бромидӣ, тиосианидӣ, нитратӣ, атсетатӣ, аммиакатӣ ва ишқорӣ дар хлороформ, 1,2 – дихлорэтан ва карасин дар иштироки 1-фенил-3-метилпиразолин – 5, дипиразолоналканҳо, антипирин ва диантипирилалканҳо омӯхта шудааст” [6]. Мувофиқати собитҳои суръати экстраксия, собитҳои экстраксия ва тақсимшавии симоб (II), инчунин механизмҳои тақсимшавӣ ва тақриби пайвастаҳои экстраксияшаванда нишон дода шудаанд.

Аз ҷониби муаллифони кори [7] маълумот дар бораи ҳосилшавии пайвастаи комплекси симоб (II) бо 8 – меркаптохинолин дар муҳитҳои кислотагӣ ва нейтралӣ таркибаш HgL_2 оварда шудааст.

Бо усули титронидани потенциометрӣ раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 278 К омӯхта шудааст. Муайян карда шудааст, ки дар системаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина чор заррачаи комплексӣ бо қимати собитҳои умумии ҳосилшавии $\lg\beta_1 = 5,80$; $\lg\beta_2 = 14,26$; $\lg\beta_3 = 17,86$ ва $\lg\beta_4 = 21,49$ ҳосил мешаванд. “Диаграммаи ҳосилшавии заррачаҳои комплекси ҳосилшуда сохта шуда, баромади максималии ҳар як шакли комплексӣ муайян карда

шудаанд” [8].

Чараёни координатсияшавии симоб (II) бо 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион дар муҳити 0,1 мол/л HNO_3 дар ҳудуди ҳароратҳои 23-338 К аз ҷониби муаллифон омӯхта шудааст. “Таркиб ва собитҳои устувории пайвастаҳои комплекси муайян карда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки дар системаи мазкур дар ҳама ҳудудҳои ҳароратӣ чор зарраҳои комплекси ҳосил мешаванд. Дар асоси қиматҳои ба даст овардаи собитҳои устуворӣ функсияҳои термодинамикии муайян карда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки бо зиёд шудани шумораи молекулаҳои 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион қимати ΔG мусбат мегардад, ки ин омил бо монеаҳои стерикӣ зимни ворид шудани молекулаи лиганди органикӣ ба сфераи дохилии пайвастаи комплекси алоқаманд аст. Қимати ΔH дар ҳама зинаҳои комплексҳосилшавӣ дорои адади манфӣ мебошад. Қачхатаҳои ҳосилшавии зарраҳои комплекси дар системаи $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ -1-фенил-2,3-диметилпиразолин-2-тион ҳосилшуда, сохта шудаанд. Дар асоси диаграммаи мазкур барои мақсади максималии ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси муайян карда шудааст” [9].

Раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO_4 ва ҳарорати 288К дар қори [10] омӯхта шудааст. Яъне, муайян шудааст, ки симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288К чор шаклҳои комплекси ҳосил мекунад. Собитҳои умумии ҳосилшавии мувозинатии системаи симоб (II) – N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288К муайян карда шудаанд.

“Ҳосиятҳои комплексҳосилкунии глутатион бо ионҳои Hg^{2+} ва Hg_2^{2+} бо усулҳои потенциометри ва спектрофотометри омӯхтаанд. Глутатион ба сифати моддаи стандартӣ аз пайвастаҳои тиолӣ гирифта шудааст, ки он бо ионҳои Hg^{2+} ва Hg_2^{2+} пайвастаҳои комплекси устуворро ҳосил мекунад” [11]. Дар асоси қиматҳои собитҳои устувории пайвастаҳои комплекси ионҳои симоб (I) ва симоб (II) бо глутатион маълум карда шудааст, ки пайвастаи комплекси ионҳои симоб (II) бо лиганди мазкур дорои таркиби

$\text{Hg}[\text{GS}]_2$ нисбат ба пайвастаи комплекси симоб (I) усутвортар мебошад. Яъне, пайвастаи комплекси $\text{Hg}[\text{GS}]_2$ дар ҳолати мавҷуд будани ионҳои симоб (I) ва симоб (II) дар система нисбат ба пайвастаи комплекси таркибаш $\text{Hg}_2[\text{GS}]_2$ бо суръати баланд ҳосил мешавад, ки ин омил бо натиҷаҳои дар адабиёт овардашуда мувофиқат мекунад. Бо усули потенциометрӣ таркиби пайвастаҳои комплекси симоб – глутатион ва собитаҳои устувории онҳо муайян карда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки пайвастаи комплекси таркибаш $\text{Hg}[\text{GS}]_2$ дар таносуби 1:2 нисбат ба пайвастаи комплекси таркибаш $\text{Hg}_2[\text{GS}]_2$ дар таносуби 1:1 усутвортар мебошад. Барои муқоиса намудани натиҷаҳои эксперименталии бо усули потенциометрӣ ба даст овардашуда доир ба муайян кардани таркиби пайвастаи комплекси $\text{Hg}[\text{GS}]_2$ усули спектрофотометрӣ низ истифода карда шуд. Маълум карда шуд, ки натиҷаҳои таҳқиқотҳои гузаронидашуда бо ду усули гуногун бо ҳам мувофиқат мекунад.

Раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо кислотаҳои амидосирко (H_2Ida), 2-гидроксиэтилинминсирко (H_2Heida) ва нитрилсесирко (H_3Nta) бо усулҳои спектрофотометрӣ ва pH-потенциометрӣ аз ҷониби мутахассисон таҳқиқ шудааст. “Дар натиҷаи таҳқиқотҳо пайвастаҳои комплекси таркибашон $[\text{HgIda}]$, $[\text{Hg}(\text{OH})\text{Ida}]^-$, $[\text{HgIda}_2]^{2-}$, $[\text{HgHeida}]$, $[\text{Hg}(\text{OH})\text{Heida}]^-$, $[\text{Hg}(\text{Heida})_2]^{2-}$, $[\text{HgNta}]^-$, $[\text{HgNta}_2]^{4-}$, $[\text{Hg}(\text{Ida})\text{Heida}]^{2-}$, $[\text{Hg}(\text{Ida})\text{Nta}]^{3-}$, $[\text{Hg}(\text{Heida})\text{Nta}]^3$ ҳосил карда шудаанд. Барои пайвастаҳои зерин қимати логарифмаи собитаҳои устуворӣ дар қувваи ионии $I=0,1$ NaClO_4 ва ҳарорати $t=20\pm 2^\circ\text{C}$ муайян карда шудаанд: $11,14\pm 0,07$; $20,33\pm 0,08$; $19,40\pm 0,10$; $11,42\pm 0,04$; $19,68\pm 0,11$; $18,48\pm 0,09$; $13,42\pm 0,05$; $20,80\pm 0,08$; $19,05\pm 0,06$; $20,64\pm 0,11$; $20,53\pm 0,16$. Маълум карда шудааст, ки қимати собитаҳои устувории пайвастаҳои гетеролиганди симоб (II) аз қимати собитаҳои устувории пайвастаҳои гомолигандӣ начандон зиёд фарқ мекунад, ки ин омил оид ба характери яхелаи банди миёни металл-лиганд ва конфигуратсияи электронии пайвастаҳои комплексӣ шаҳодат медиҳад. Масъалаи мутобиқати лигандҳо дар пайвастаи комплекси гетерогенӣ бо

роҳи муайян намудани собитай сопропорсионалӣ (K_a) ҳал карда мешавад” [12]:



Натиҷаҳои таҳқиқот бо ёрии моделҳои математикӣ коркард карда шудаанд. Ин моделҳо имконият медиҳанд то заррачаҳои комплекси ҳосилшуда (аз нав такроршаванда) аз миёни дигар заррачаҳои дар система буда, муайян карда шаванд.

“Бо усулҳои калориметрӣ, pH-метрӣ ва спектроскопияи резонанси ядроии магнитии (РЯМ) ^1H ва ^{13}C ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси дорои лигандҳои гуногуни таркибашон HgEdtaThio^{2-} , $\text{HgEdtaS}_2\text{O}_3^{4-}$, PbEdtaThio^{2-} ва $\text{Pb}(\text{Thio})_i^{2+}$ $i=1,2$, Thio – тиомочевина омӯхта шудаанд” [13]. Таркиб ва устувории пайвастаҳои комплексӣ аз рӯи натиҷаҳои ҷенкуниҳои потенциометрӣ ва калориметрӣ муайян карда шудаанд. Як қатор титркунии pH – метрии маҳлулҳои $\text{K}_2\text{HgEdta} - \text{Thio} - \text{NaClO}_4$ бо маҳлули HNO_3 дар ҳарорати 25°C ва қувваи ионии 0,5 дар таносубияти $\text{HgEdta} : \text{Thio} = 2:1; 1:1$ ва $1:2$ гузаронида шудаанд. Спектрҳои (РЯМ) системаҳои таҳқиқшавандаро дар асбоби Bruker AVANCE III – 500 бо басомадҳои 500,17МГц дар ядроҳои протон ва 125,76 МГц дар ядроҳои карбонӣ дар ҳарорати 292 К ба қайд гирифта шудаанд. Параметрҳои термодинамикии ($\lg K$, ΔG^0 , ΔH , ΔS) реаксияҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ дар ҳарорати 298,15К ва қувваи ионии $I = 0,5$ (NaClO_4) муайян карда шудаанд. Услуби эҳтимолии координатсияи лигандҳо дар таркиби пайвастаи комплекси омехта маълум карда шудааст.

“Таъсири муҳимми қутбноки микромӯҳит (ҳалқунанда) ба таркиб ва структураи пайвастаҳои комплексӣ, ки бо краун-ивазшавандаи гемисианинии катионҳои комплементарӣ ҳосил шудаанд, омӯхта шудааст” [14]. Ин имконият медиҳад, то эҳтимоли ҳосилшавии пайвастаҳои хелатии таркибашон 2:1 дар сарҳади миёни фазавии ҳаво – маҳлули қутбноки обӣ муайян карда шавад.

“Бо усули синтези хемисорбсионӣ пайвастаҳои нави комплекси тилло (III)-симоб(II) навъи ионӣ, ки дар таркибашон лигандҳои дитиокарбамидии

сохташон диалкиливазшуда ва ҳалқагӣ доранд, ҳосил карда шудаанд” [15]. Таркиби умумии пайвастаҳои мазкур чунинанд: $[\text{Au}(\text{S}_2\text{CNR}_2)_2]_2\text{X}$ ($\text{R} - \text{CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7, \text{iso} - \text{C}_3\text{H}_7, \text{C}_4\text{H}_9, \text{iso} - \text{C}_4\text{H}_9$; $\text{R}=(\text{CH}_2)_5, (\text{CH}_2)_6, (\text{CH}_2)_4\text{O}$; $\text{X}=[\text{HgCl}_4]^{2-}, [\text{Hg}_2\text{Cl}_6]^{2-}$). Ба сифати пайвастаҳои комплекси – хемосорбентии аввала дитиокарбаматҳои симоб (II), ки дар шакли биядрой ва моноядрой мавҷуд буда метавонанд, истифода карда шудаанд. Пайвастаҳои мазкур худ таҳшинҳои ҳаҷман калони дорои сатҳи фаъол мебошанд.

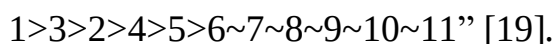
Муаллифон раванди зинагии комплексҳосилшавии симоб (II)-ро дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид омӯхтаанд. “Қимати собитаҳои ноустувории пайвастаҳои комплекси таркибашон $\text{HgCl}_2 \cdot \text{C}_9\text{H}_6\text{NSH}$ ва $\text{HgCl}_2(\text{C}_9\text{H}_6\text{NSH})_2$ дар қувваи ионии $\mu=0,5$ ва ҳарорати 200°C мувофиқан ба: $1,78 \cdot 10^{-21}$ ва $9,60 \cdot 10^{-27}$ баробар мебошанд” [16].

Муҳаққиқ Логинова О.Н. [17] ба омӯзиши раванди боҳамтаъсиркунии систеин ва симоб (II) дар муҳити обӣ машғул шуда, бо усули потенциометрӣ собитаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) дар қувваҳои ионии 0,1 ва 0,3 мол/л (NaClO_4) муайян кардааст: $\lg\beta_1=40,13$; $\lg\beta_2=39,93$. Маълум карда шудааст, ки пайвастшавии симоб (II) бо систеин тавассути атоми сулфур, аз ҳисоби кандашавии протон ба амал меояд, зеро симоб (II) ба металлҳои синфи В дохил шуда, сулфур бошад, дар гурӯҳи сулфгидрилӣ асоси нарм мебошад ва қобилияти пайваст кардани протонро дорад.

“Маълум карда шудааст, ки симоб (II) бо тиомочевина пайвастаҳои комплекси зинагӣ дар таносуби Hg(II):L баробар ба 1:2; 1:3 ва 1:4 ҳосил мекунад. Барои пайвастаҳои мазкур қимати собитаҳои ноустуворӣ мувофиқан ба 21,9; 24,6 ва 27,96 баробар мебошанд” [18].

Маълумот оид ба таҳқиқоти раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо тиомочевина (1), фенил (2), о-толил (3), 1-нафтил (4), N,N-дифенил (5), s-бензил (6), N – атсетилтиомочевина, 1-фенил-4,5-диоксиимидазолиндитион-2 (8), 5-7-диметил-4а-7-адифенилоктгидро-имидазол (4,5e)-1,2,4-триазинон-6-тион-3(9), 4,5 - диметокси - имидазолинтион-2(10), 2,4 – диметил - 2,4,6,8-тетробисикло (3,3) октанон -3-3тион-2(10), 2,4-диметил-2,4,6,8-тетробисикло

(3,3) октанон-3-3-тион (11) дар маҳлулҳои обӣ-диметилфомамидӣ ва обӣ-диметилсулфоксидӣ дар таҳқиқи Мовчан, З.З. мушоҳида мешавад. “Муайян карда шудааст, ки ба устувории пайвастаҳои комплекси ҳосилкардашудаи симоб (II) табиати лиганд таъсир мерасонад. Вобаста ба устувории пайвастаҳои мазкур онҳоро дар қатори зерин ҷойгир намудаанд:



Муҳаққиқ Тропова, Б.Ф. дар мақолаи хеш оид ба ҳосилкунӣ ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии симоб (II) бо ҳосилаҳои тиомочевина маълумот медиҳад. “Маълум карда шудааст, ки дар маҳлул зимни барзиёд будани тиомочевина иони комплекси таркибаш $[HgSCN_2H_4]^{2+}$ ҳосил мешавад. Хосиятҳои физикӣ-химиявӣ ва собитаҳои умумии ноустувории пайвастаҳои ҳосилшуда муайян карда шудаанд. Инчунин таъсири ҳароратӣ ба устувории пайвастаҳои координатисонӣ ва гармии реаксияи комплексҳосилшавӣ омӯхта шудааст” [20].

Пайвастаҳои галогенидии симоб таркибашон $[HgL_2Cl_2]$ ва $[HgL_2Br_2]$ аз ҷониби мутахассисон омӯхта шудааст. “Мувофиқ ба натиҷаҳои таҳлили рентгенӣ-структурӣ маълум карда шудааст, ки структураи пайвастаи комплекси хлоридии дучойкоординатсияшуда ба сингонияи ромбикӣ бо гурӯҳи фазои Pmn мансуб аст. Барои пайвастаи мазкур кунҷҳои $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, дарозии ду бандҳои Hg-S бо ҳам баробар буда, дарозии банди Hg-Cl бо ҳам баробар нестанд, кунҷҳои бандҳо низ гуногунанд. Дар пайвастаи бромидии таркибаш $[HgL_2Br]$ структураи кристаллӣ моноклинӣ буда, дорои гурӯҳи фазои $P2_1/c$ мебошад. Дар пайвастаи комплекси мазкур кунҷҳои $\alpha = \gamma = 90^\circ$, $\beta = 94,708^\circ$, кунҷи банди S(2)-Hg-Br(2) нисбат ба кунҷҳои S(1)-Hg Br(2) калонтар аст. Дарозии банди Hg-Г дар мавриди иваз намудани ионҳои хлоридӣ ва бромидӣ кам мешаванд, дарозии бандҳои Hg-S бошанд, баръакс зиёд мешаванд. Яъне дар пайвастаи хлоридӣ бандҳои дохилимолекулавӣ гидрогенӣ маълум мегарданд, дар пайвастаи комплекси бромидӣ бошад, бандҳои дохилимолекулавӣ ва миёнимолекулавӣ” [21].

Натиҷаҳо оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо

дитиопирилметан, дитиопирилметан ва дитиопирипропилметан дар иштироки ионҳои галогенидӣ дар кори [22] оварда шудаанд. Муайян карда шудааст, ки зимни бо ҳам омехта намудани маҳлулҳои HgCl_2 ва дитиопирипропилметан дар таносубияти 1:1 таҳшин ҳосил мешавад, ки он зимни таккондихӣ ба қабати хлороформ мегузарад. Маълумот доир ба қиматҳои собитаҳои ноустувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо бархе аз лигандҳои органикӣ, аз ҷумла диэтиленсеамин, пиридин, глитсин, этилендиамин, пропилендиамин ва дигар дар кори [23] оварда шудаанд.

Нечаева Е.М. [6] мувозинати комплексҳосилшавӣ ва экстраксияи ионҳои Hg(II) аз маҳлулҳои галогенидӣ, тиосианатӣ, нитратӣ, атсетатӣ, аммиак ва ишқорӣ бо хлороформ, 1,2 – дихлорэтан ва керосин дар иштироки антипирин, диантипирилалкан ва 1-фенил-3-метилпиразолон-5 ва дипиразолонилалкан омӯхтааст. Механизми тақсимшавӣ ва таркиби пайвастаҳои комплекси экстраксияшуда муайян карда шудаанд. Тавсифи миқдории равандҳои экстракционӣ муайян карда шуда, собитаҳои коррелятсияи суръати экстраксия, собитаҳои экстраксия ва тақсимшавии Hg(II) , собитаҳои шартии мувозинати экстракционӣ бо тавсифи индивидуалии реагентҳо ва анионҳо маълум карда шудаанд.

Мувофиқ ба таснифоти Люис симоб ба кислотаҳои нарм дохил мешавад. “Натиҷаҳо доир ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо 8-меркаптохинолин дар муҳити кислотаи H_2SO_4 концентратсияш аз 2 то 18н ва кислотаи нитрат концентратсияш 2-10 н оварда шудаанд, ки дар натиҷа пайвастаҳои катионии ҳалшавандаи таркибашон $[\text{HgL}_n]^{2+}$ (дар ин ҷо $n=1-4$) ҳосил мешаванд. Собиҳои умумии ноустувории пайвастаҳои мазкур ба $1,96 \cdot 10^{-28}$ баробар аст” [24].

Маълумот доир ба синтези пайвастаҳои комплекси моно-, ду-, се- ва чорҷойивазшудаи симоб (II) бо 8-меркаптохинолин дар кори [25] оварда шудааст. Ин омили эксперименталӣ зинагӣ будани раванди комплексҳосилшавиро исбот менамояд.

Дар кори муаллифони [26] қимати собитаҳои ноустувории $pK_{\text{ноуст.}}$

пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо этилентиомочевина дар таносубияти Hg(II):L баробар ба 1:1; 1:2; 1:3 ва 1:4 муайян кардаанд ва ин қиматҳо мувофиқан ба 15,66; 19,24; 23,06 ва 27,29 баробаранд. Қимати умумии

ноустуворӣ аз рӯйи формулаи $\lg K_4 = \frac{\Delta E}{0.025} - \lg K_{\text{Hg}} + 4 \lg [\text{ЭТМ}]$

ҳисобида шудааст, ки дар ин ҷо K_{Hg} – собитаи мувозинатии ноустувории реаксияи $\text{Hg}^{2+} + \text{Hg} \rightarrow \text{Hg}_2^{2+}$ мебошад.

“Қимати pK барои пайвастаи комплекси дучойивазшудаи дитизонати симоб (II) таркибаш HgL_2 дар қувваи ионии $\mu = 0,1$ ба 20,7 баробар аст” [27].

“Муайян намудаанд, ки дар натиҷаи бо ҳам таъсиркунии намаки $\text{Hg(NO}_3)_2$ бо этилентиомочевина комплексҳосилшавии зинагӣ ба амал омада меояд” [28].

“Барои ба даст овардани пайвастаи комплекси симоб бо кислотаи D-глюконат (Gl) реаксияи оксиди симоб (II) бо Gl дар маҳлули обӣ дар таносубияти реагентҳои аввала баробар ба 1:2 гузаронида шудааст” [29]. Мувофиқ ба натиҷаҳои таҳлили элементӣ, ҷараёнгузаронии молярӣ, спектроскопияи инфрасурх, спектроскопияи электронӣ ва РЯМ пайвастаи комплекси синтезкардашуда дорои формулаи $\text{Hg}_2(\text{C}_6\text{H}_{11}\text{O}_7)_2$ (I) буда, дар таркиби худ катиони биядроии $(\text{Hg}_2)^{2+}$ дорад. Маълум карда шудааст, ки пайвастаи комплекси мазкур сохти хелатӣ дорад. Ҳар як атоми симоб (I) бо ду атомҳои оксиген пайваст шудааст: аз атоми гурӯҳи карбоксилӣ ва аз атоми гурӯҳи гидроксиди дар атоми дуҷуи карбон дар молекулаи Gl буда. Ду иони глюконати пайвастаи комплексӣ дорои конфигуратсияи гуногун мебошанд. Заҳрнокии пайвастаҳои симоб (I) нисбат ба заҳрнокии пайвастаи аввалаи симоб даҳҳо маротиба пасттар мебошанд. Истифода намудаи Gl барои реаксия бо оксиди симоби дувалента ба пастшавии заҳрнокии симоб дар натиҷаи барқароршавии он то ҳолати симоби яквалента оварда мерасонад. Натиҷаҳои ба даст овардаи муаллифон метавонад барои омӯзиши равандҳои детоксикатсияи симоб ва истифодаи Gl истифода карда шаванд.

1.2. Таҳқиқи термикии пайвастаҳои комплексӣ

Дар корҳои илмӣ ва таҳқиқотӣ муҳаққиқон [30] асосан барои омӯзиши хосиятҳои термикии пайвастаҳои координатсионӣ аз усули термогравиметрии квазимувозинатӣ истифода кардаанд. Ин усул дар таҳқиқи раванди таҷзияи термикии пайвастаҳои координатсионӣ бештар мушоҳида мешавад. Озмоиш дар ҳолати баландшавии суръати пасти ҳарорат гузаронида мешавад. Барномаи ҳароратии гармкуниро муҳаққиқон квазиизотермикӣ ном бурдаанд. Вале ҷараёни таҷзияи квазиизотермикӣ ва квазиизобарӣ танҳо барои реаксияҳои баргарданда хос аст. Мутахассисони боло ишорашуда дериватограммаҳои таҷзияи термикии пайвастаҳои комплексӣ, равандҳои ҷойивазшавии фазавии лигандҳо, гидролизи баландҳарорати акваасидокомплексҳо ва инчунин устувории пайвастаҳо пешниҳод намудаанд.

“Натиҷаҳои таҳқиқоти таҷзияи термикии қатрони пиролизӣ дар шароитҳои ғайриизотермикӣ бо истифода аз усули коррелятсионии Коутс-Редферн оварда шудаанд. Раванди таҷзияи термикӣ бо усули таҳлили гравиметрӣ омӯхта шудааст” [31].

Моҳияти муайян кардани мустаҳкамии термикии моддаҳои полимерӣ бо ҳадафи муайян кардани шакли лавҳаҳои карбонӣ дар асоси полиэфиркетони ароматикӣ омӯхта шудаанд. “Дар асоси натиҷаҳои таҳлили термикӣ механизм ва параметрҳои кинетикии раванди деструксияи полиэфиркетони ароматӣ ва лавҳаҳои карбонӣ дар асоси онҳо, бо истифода аз муодилаи Коутс-Редферн муайян карда шудаанд” [32].

Кинетикаи деструксияи термикии пайвастаи сульфати аммоний-оҳани дувалента бо усули термогравиметрӣ дар барномаи динамикӣ ва изотермикӣ дар атмосфераи буғҳои худ аз ҷониби муаллифон кор карда шудааст. “Таҳлили термогравиметрӣ дар термотарозуҳои автоматии АТВ – 14М гузаронида шудааст. Нишон дода шудааст, ки раванди деструксияи термикии намаки дучанда дар речаи динамикӣ бо суръати доимии баландкунии ҳарорат аз панҷ зинаҳои пай дар пайи ҳароратӣ иборат аст. Барои муқарар намудани

тартиби реаксия ва ҳисоб намудани параметрҳои кинетикӣ барои панҷ зинаҳои ҳароратӣ усули Редферн-Коутсро истифода карда, аз рӯи қачхатаи дифференциалӣ ҳисобкуниҳо анҷом дода шудаанд. Параметрҳои таъсиррасони кинетикии равандҳои деструксия барои ҳар як зинаи ҳароратӣ – тартиби реаксия, энергияи фаъолнокӣ, собитаи Аррениус ва инчунин собитаи коррелятивии ҳаттӣ муайян карда шудаанд” [33].

Моделсозии кинетикӣ-термодинамикии равандҳои конверсияи биомассаи мағзи чӯб бо истифода аз натиҷаҳои таҳлили термикӣ (вобастагии таркиби элементӣ ва гармиғунҷоиш аз дараҷаи конверсияи сӯзишворӣ, собитаҳои кинетикӣ) аз ҷониби мутахассисон гузаронида шудааст. “Ҳаммонандкунии концентратсияҳои ҳисобидашудаи газҳо ва ҳудудҳои ҳарорат бо натиҷаҳои эксперименталӣ бо концентратсияҳои мувозинатии термодинамикӣ гузаронида шудааст. Ба ҷуз аз ин, дар қори мазкур муқоисакунии таъсири концентратсияҳои газҳо ва ҳудудҳои ҳарорат, усулҳои гуногуни ҳисобкунии гармиғунҷоиши сӯзишворӣ пешниҳод карда шудааст” [34].

Таҳқиқотҳо вобаста ба омӯзиши мубаддалшавии пайвастагиҳои комплексӣ дар фазаи сахт аз ҷониби муҳаққиқ Кукушкин, Ю.Н. баррасӣ шудааст [35]. Омӯзиши равандҳои термолизи пайвастаҳои комплексӣ бошад дар қори дигари ин муаллиф таҳқиқ шудааст. “Навъҳои асосии табдилёбии фазаҳои сахти пайвастаи координатсионии металлҳо, тарзи координатсия ва параметрҳои кинетикӣ, инчунин механизми табдилёбии ҳароратӣ пешниҳод карда шудаанд” [36].

“Натиҷаҳо доир ба омӯзиши раванди термолизи пайвастаи координатсионии рений (V) бо 2-этил-1,3,4-тиадиазол бо истифода аз муодилаи Коутс – Редферн ва Хоровитс-Метсгер пешниҳод карда шудаанд” [37,38,39].

“Натиҷаҳои эксперименталӣ доир ба омӯзиши раванди термолизи пайвастаи координатсионии тиосианатии рений (V) бо 1-атсетил-4-метилтиосемикарбазид таркибаш $[\text{ReOCl}(\text{SCN})_2\text{L}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ бо истифода аз

муодилаҳои Коутс-Редферн ва Хоровитс – Метсгер тавсифи термодинамикии раванди термолизро ҳисоб намудаанд. Нишон дода шудааст, ки қиматҳои ҳисобидаи тавсифи термодинамикӣ, ки аз рӯи ду муодила ҳисоб карда шудаанд, бо ҳам наздиканд. Дар асоси қимати энергияи ғайноқӣ $E_{\text{ғайноқ}}$ (кҶ/мол) барои ҳар як зинаи термолиз қимати собитҳои Аррениус $A(\text{с}^{-1})$ ҳисоб карда шудааст. Натиҷаҳо доир ба омӯзиши хосиятҳои термикии пайвастаҳои комплекси дучандаи тилло (III) оварда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки раванди термолизи пайвастаҳои комплекси дучандаи тилло бо катионҳои $[M(\text{NH}_3)_x\text{Hal}(6-x)]$ (3-х) ($M = \text{Rh, Ir; } x = 4-6$) тавассути зинаи ҳосилшавии маҳсули реаксияи мобайнӣ гузашта, он моддаҳо омехтаи тиллои металлӣ ва пайвастаҳои галогенамминии металлҳои платинагӣ $\{M(\text{NH}_3)_x\text{Hal}_3\}$ ($x \leq 5$) мебошанд. Раванди термолизи пайвастаҳои комплекси оксохлориди рений (V)-ро бо N – атсетилтиомочевина омӯхтаанд. Тавсифи термодинамикии ҳар як зинаи термотаҷзия ҳисоб карда шудааст. Омӯзиши хосиятҳои термикии пайвастаҳои координатсионии нукра (I) бо 1,2,4 – триазолҳо бахшида шудааст. Муайян карда шудааст, ки ҳарорати дегидрататсияи пайвастаҳои комплексӣ аз табиати пайвастаи комплексӣ ва тарзи координатсияи молекулаҳои об вобастагӣ дорад” [40, 41, 42, 43].

1.3. Пайвастаҳои комплекси металлҳои гуногун бо ҳосилаҳои тиомочевина

Маълумот оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии рений (V) бо N,N – диэтилтиомочевина дар муҳити 4,0 мол/л кислотаи гидрогенхлорид дар ҳарорати 308K дар кори муаллифони [44] оварда шудааст. Муайян карда шудааст, ки дар системаи мазкур чор заррачаи комплексӣ бо қиматҳои $pK_1=3,69$; $pK_2 = 2,54$; $pK_3 = 2,35$ ва $pK_4 = 2,09$ ҳосил мешаванд.

“Равандҳои комплексҳосилкунии рений (V) бо N,N – этилтиомочевина дар маҳлулҳои кислотаҳои галогенгидрогенӣ омӯхта шудаанд. Муайян карда шудааст, ки раванди комплексҳосилшавӣ миёни рений (V) ва N,N-этилтиомочевина зинагӣ гузашта, дар натиҷа чор шакли комплексӣ ҳосил мешаванд. Бо усули Беррум собитҳои зинагии ҳосилшавии пайвастаҳои

комплексӣ муайян карда шуда, қонуниятҳои таъсири кислотаҳои галогенгидрогенӣ ба устувории пайвастаҳои комплексӣ маълум карда шудааст. Раванди комплексҳосилшавии зинагии рений (V) бо N – атсетилтиомочевина омӯхта шудааст. Бо истифода аз атсетилтиомочевина ва шакли оксидшудаи он ба сифати системаи оксиду-барқароршавӣ, собитаҳои устувории пайвастаҳои комплекси рений (V)-ро бо N – атсетилтиомочевина муайян намудаанд [45,46].

Методикаи синтези пайвастаҳои комплекси ду ва чоркоординатсияшудаи рений (V) бо N,N – этилентиомочевина ба роҳ монда шуд [47].

“Шароитҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси ду-, се- ва чоркоординатсияшудаи рений (V) бо фенилтиомочевина, этилфенилтиомочевина ва дифенилтиомочевина. Дар асоси натиҷаҳои таҳқиқотҳои таҳлили спектроскопияи инфрасурх муайян карда шудааст, ки координатсияи фенилтиомочевина, этилфенилтиомочевина ва дифенилтиомочевина ба рений (V) тавассути атоми сулфур мегузарад, зеро ададҳои мавҷии банди C=S дар мавриди координатсия аз 35 то 725 см^{-1} ва аз 1420 то 1412 см^{-1} паст мешаванд” [48].

Имкониятҳои оптималии синтези пайвастаҳои координатсионии рений (V) бо 2-пиридилтиомочевинаро нишон додаанд. “Нишон дода шудааст, ки зимни бо ҳамтаъсиркунии рений (V) бо 2-пиридилтиомочевина дар муҳити 7 мол/л HCl вобаста ба таносуби моддаҳои пайвастаҳои комплекси таркибашон $[\text{ReOLCl}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ва $[\text{ReOL}_2\text{Cl}]\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ дар муҳити 6 мол/л HCl бошад, пайвастаҳои комплекси таркибашон $[\text{Re}_2\text{O}_3(\mu\text{-L})\text{Cl}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ва $[\text{Re}_2\text{O}_3\text{L}_2\text{Cl}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ҳосил мешаванд” [49].

“Маълумот оид ба пайвастаи нави комплекси кадмий бо атсетилтиокарбамид таркибаш CdLCl_2 , ки дар ин ҷо L – атсетилтиокарбамид $\text{CH}_3\text{CONHCSNH}_2$ аст. Дар спектри нурфурубарии атсетилтиокарбамид рахҳо дар ҳудудҳои 835, 733 ва 620 см^{-1} ба лаппишҳои банди CS тааллуқдошта пайдо мешаванд. Дар спектри пайвастаи комплексӣ рах дар ҳудуди 732 см^{-1}

ба самти лапишҳои мавҷии паст гузаша, интенсивияти рахҳо дар 835 ва 620 см^{-1} нисбат ба спектри лиганди координатсиянашуда тағйир меёбанд. Дар ҳудуди 200-500 см^{-1} раҳи номаълум пайдо мегардад, ки он дар спектри лиганди холис мавҷуд нест” [50]. Дар асоси ин муаллиф ба хулоса омадаст, ки атсетилтиокардамид дар пайвасти мазкур ҳамчун лиганди монодентатӣ ба атоми металл тавассути атоми сулфур координатсия мешавад. Инчунин баландшавии басомади лапиши гурӯҳи $\nu(\text{CN})$ дар спектри инфрасурхи пайвасти комплекси нисбат ба спектри атсетилтиокарбамид низ ба координатсияи мазкур ишора мекунад.

Бо усули спектрофотометрӣ дар қувваи ионии 2 мол/л ва ҳарорати 298K собитаҳои устувории пайвастаҳои комплекси монокоординатсионии Bi (III) бо тиомочевина (Tu), N-фенилтиомочевина (Ptu), N-фенил, N-пропилтиомочевина (Pptu), N,N-дифенилтиомочевина (Bptu), N-пропилтиомочевина (APtu) аз ҷониби мутахассисон муайян карда шудаанд [51]. Инчунин собитаҳои протонизатсияи лигандҳои мазкур дар маҳлули кислотаи хлорат низ маълум карда шудаанд. Муайян карда шудааст, ки устувории пайвастаҳои комплекси мазкур дар қатори лигандҳои омӯхташуда чунин тағйир меёбад:



Бобоев Ш.А. дар таҳқиқоти худ [52] усулҳои муайян кардани собитаҳои устувории пайвастаҳои комплекси нукларо дида баромадаст. Раванди ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси тиокарбогидразини нукра (I) дар маҳлулҳои обӣ-спиртӣ, ки дар таркиби худ 25,50 ва 75% спирти метил ва этил доранд, дар ҳарорати 298 K бо усули титркунии потенциометрӣ омӯхтааст. Дар қатори мазкур тавсифи мухтасари раванди мазкур ва муайянкунии собитаҳои устуворӣ бо истифода аз усули мураббаи хурдтарин (метод наименьших квадратов) оварда шудааст. Раванди комплексҳосилшавии Ag(I) дар ҳароратҳои 321, 325 ва 335K омӯхта шудааст. Қиматҳои ба даст овардаи собитаҳои устувории пайвастаҳои комплекси Ag(I) бо тиокарбогидразид бо ду усул ба даст овардари, яъне усули мураббаи

хурдтарин ва LS–SVM муқоиса намудааст. Ба сифати функсияи ядрой барои усули LS–SVM ядрой полиномиалӣ истифода карда шудааст. Натиҷаҳои маҳаки детерминатсия, ки бо усули мураббаи хурдтарин ва LS–SVM ба даст оварда шудаанд, дар намуди ҷадвал оварда шуда, инчунин вобастагии ΔE аз $\lg[L]$ барои пайвастаҳои комплекси нукра (I) дар маҳлулҳои обӣ-метанолӣ, ки дар таркибашон 25, 50 ва 75 % спирт дар ҳарорати 298K сохта шудаанд. Хулосаҳо доир ба истифодаи усули LS–SVM барои муайян кардани собиҳои устувори пайвастаҳои комплекси металлҳои интиқоли бо ҳосилаҳои тиомочевина дар маҳлулҳои обӣ ва спирти-обӣ бароварда шудаанд.

“Ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо тиомочевина (L_1), фенил (L_2), о-толил- (L_3), 1-нафтил- (L_4), N,N-дифенил- (L_5), S-бензил- (L_6), N-атсетил - (L_7) тиомочевина, 1-фенил-4,5-диокси-имидазол-идинтион-2 (L_8), 5,7-диметил-4а-7а-дифенил-октагидро-имидазол (4,5-е)-1,2,4-триазинон-6-тион-3 (L_9), 4,5-диметокси-имидазолиндинтион-2 (L_{10}), 2,4-диметил-2,4,6,8-тетрозобитсикло (3,3) октанон-3-тион-7 (L_{11}) дар маҳлулҳои обӣ-диметилформамидӣ, обӣ-формамидӣ ва обӣ-диметилсулфоксидӣ бахшида шудааст. Таҳлили натиҷаҳои ба даст оварда нишон медиҳад, ки табиати лиганд ба устувори пайвастҳои комплекси омӯхташавандаи симоб (II) таъсири калон мерасонад. Устувори пайвастҳои координатсионии лигандҳои мазкур бо ионҳои симоб (II) дар қатори зерин ҷойгир мешаванд:

$$“L_1 > L_3 \geq L_2 \geq L_4 > L_5 > L_6 \sim L_7 > L_8 \sim L_9 \sim L_{10} \sim L_{11}”$$

Ворид намудани радикалҳои фенил-, о-толил-, бензил-, атсетил-, нафтил- ба камшавии зичии электронӣ дар болои атоми сулфур оварда мерасонад ва инчунин пастшавии утсвори пайвастҳои комплекси ба назар мерасад” [53].

Муаллифони кори [54] пайвастаҳои нави координатсионии Pd(II) бо 1-аллил-3-пиридин-2-ил-тиомочевина таркибашон $[Pd(C_9H_{11}N_3S)Cl_2]$ (I) ва $[Pd(C_9H_{11}N_3S)_2]Cl_2$ (II) синтез намуда, онҳоро бо усулҳои спектроскопияи электронӣ, спектроскопияи инфрасурх ва РЯМ таҳқиқ намудаанд. Аз ҷониби

муаллифони кори мазкур шароитҳои оптималии гузариши реаксияи комплексҳосилшавӣ муайян карда шудаанд. Собитаҳои ноустувории пайвастаҳои комплексӣ ва коэффитсиентҳои молярии нурфурӯбарии онҳо ҳисоб карда шудааст. Зимни қиёспазии спектрҳои электронӣ ва инфрасурхи пайвастаҳои комплексӣ ва лиганди органикии координатсиянашуда муайян гашт, ки дар ҳар ду пайвастаҳо молекулаҳои лиганди органикӣ ба атоми металл дар шакли тионии таутомерӣ бидентатӣ-ҳалқагӣ тавассути атоми мулфури гурӯҳи тиоуреидӣ ва атоми нитрогени пиридинӣ пайваст мешаванд. Масъалаҳои синтез ва омӯзиши хосиятҳои физикӣ-химиявии пайвастаҳои координатсионии мис (II) бо N – атсетилтиомочевина дар кори муаллифони [55] оварда шудааст. Муайян карда шудааст, ки мис (II) вобаста ба таносубияти N – атсетилтиомочевина дар муҳитҳои кислотагӣ ва этанолий пайвастаҳои комплекси таркибашон гуногунро ҳосил мекунанд. Формулаҳои тахминии пайвастаҳои ҳосилшуда мувофиқ ба натиҷаҳои таҳлили элементӣ пешниҳод карда шудаанд. Дар асоси таҳқиқотҳои спектрскопияи инфрасурх аз рӯи тағйирёбии хатҳои фурубарии валентӣ (ν_S) ва деформатсионии (ν_δ) гурӯҳҳои банди химиявии C = S, C = O ва -HC - NH - NH₂ – и порчаи гидразинӣ муайян карда шудааст, ки молекулаи N – атсетилтиомочевина дар пайвастаҳои координатсионии дукоординатсияшудаи мис (II), ки дар муҳити кислотагӣ ҳосил карда шудаанд, тавассути атоми сулфур монодентатӣ координатсия мешаванд. Дар пайвастаҳои координатсионии монокоординатсияшуда лиганди органикӣ бидентатӣ тавассути атомҳои сулфури гурӯҳи тиолӣ ва оксигени гурӯҳи карбонилӣ координатсия мешаванд. Бо истифода аз усулҳои гуногуни инструменталӣ таркиб ва хосиятҳои пайвастаҳои нави координатсионии мис (II) бо N – атсетилтиомочевина муайян карда шудаанд. Имконияти истифода намудани пайвастаҳои синтезкардашуда дар соҳаҳои гуногуни химияи ғайриорганикӣ ва органикӣ муҳокима карда шудаанд.

Натиҷаҳо оид ба таҳқиқи спектрҳои инфрасурхи пайвастаи комплекси рений (V) бо N,N – диэтилтиомочевина дар кори муаллифон оварда шудааст.

“Дар асоси таҳиқотҳо муаллифони кор ба хулоса омадаанд, ки молекулаҳои лиганди органикӣ N,N – диэтилтиомочевина новобаста ба консентратсияи НГ ба атоми марказӣ монодентатӣ тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ координатсия мешаванд” [56].

Зимни бо ҳам таъсирунии пайвастаҳои хлоридии осмий (IV) ва маҳлулҳои OsO₄ дар H₂SO₄ бо тиомочевина пайвастаҳои нави комплекси таркибашон [Os(Thio)₆]Cl₃·H₂O; [H₂SO₄(Thio)₆]₃·3H₂O; [Os(Thio)₆][OsCl₆]Cl; [Os(Thio)₆][OsCl₆]; [Os(Thio)₅Cl]Cl₂; [Os(Thio)₅Cl][OsCl₆] ҳосил карда шудаанд. “Таркиб ва хосиятҳои пайвастаҳои нави комплекси синтезкардашуда бо усулҳои гуногуни физикӣ-химиявӣ: резонанси парамагнитӣ, спектроскопияи инфрасурх, кондуктометрӣ, термогравиметрӣ, таҳлили рентгении фазаӣ муайян карда шудаанд. Нишон дода шуд, ки вобаста ба консентратсияи HCl ва таносубияти Os:Thio пайвастаҳои таркибашон гуногун ҳосил мешаванд. Дар спектрҳои инфрасурхи ин пайвастаҳои комплексӣ рахҳои фурӯбарӣ дар ҳудуди ададҳои мавҷии 680-700 см⁻¹ ба лаппишҳои валентии гурӯҳи CS мансуб дониста шудаанд, ки он нисбат ба тиомочевинаи озод (730см⁻¹) то 30-50см⁻¹ дар ҳудудҳои ададҳои мавҷии паст аён мегарданд” [57]. Рахҳои фурӯбарии интенсивнок дар спектрҳои пайвастаҳои комплексӣ дар ҳудуди 1620см⁻¹ ба лаппишҳои деформатсионии гурӯҳи δ (NH₂) ва дар ҳудуди 3100-3400см⁻¹ бошад, ба лаппишҳои валентии ν(NH₂) мансуб дониста шудаанд ва онҳо аз

δ (NH₂) ва ν (NH₂)-и тиомочевинаи озод фарқ намеkunанд. Дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои таркибашон [Os(Thio)₆]Cl₃·H₂O; [H₂SO₄(Thio)₆]₃·3H₂O ва [Os(Thio)₅Cl]Cl₂ рахҳои интенсивияташон пасти лаппишҳои валентии гурӯҳи Os-S дар ҳудуди 263-278см⁻¹ мавҷуданд. Барои пайвастаҳои комплекси таркибашон [Os(Thio)₆][OsCl₆]Cl; [Os(Thio)₆][OsCl₆] ва [Os(Thio)₅Cl][OsCl₆] ин рахҳо бо рахҳои фурӯбарии δ(Os - Cl) ва ν(Os - Cl) дар ҳудуди 278-308см⁻¹ пӯшонида мешаванд. Аз ин сабаб басомади лаппишҳои ν(Os-s) дар намуди раҳи интенсивияташ паст (китф) аён мегарданд.

Аз ҷониби муаллифони кори [58] пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина омӯхта шуда, шароитҳои оптималии синтези пайвастаҳои комплекси муайян карда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки ба таркиби пайвастаҳои комплекси концентратсияи кислота таъсири назаррас мерасонад. Нишон дода шуд, ки лиганди органикӣ ба рений (V) тавассути атоми сулфур координатсия мешавад. Сахарова Н.Н. дар кори илмӣ худ [59] маълумот оид ба пайвастаҳои комплекси лантан, серий, празеодим ва неодим бо тиомочевина пешниҳод намудааст. Дар кори [60] натиҷаҳо доир ба синтез, сохт, қобилияти реаксионӣ ва истифодаи амалии изотиосианатҳои кислотаҳои се-, чор-, панҷ- ва шашкоординатсияшудаи фосфор, тио- ва дитиокарбаматҳои N-фосфорилӣ ва N-тиофосфорилӣ ва тиомочевинаҳо оварда шудаанд. Аз ҷониби муаллифони кори [49] шароитҳои оптималии синтези пайвастаҳои комплекси рений (V) бо 2-пиридилтиомочевина муайян карда шудаанд. Нишон дода шудааст, ки концентратсияи реагентҳои аввала ва кислотаи гидрогенхлорид ба раванди ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси рений (V) бо 2-пиридилтиомочевина таъсир мерасонад. Ҳамин тариқ, зимни бо ҳамтаъсиркунии рений (V) бо 2-пиридилтиомочевина дар муҳити 7 мол/л HCl вобаста ба таносубияти реагентҳои аввала пайвастаҳои комплекси таркибашон $[\text{ReOLCl}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ва $[\text{ReOL}_2\text{Cl}]\text{Cl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ҳосил мешаванд. Дар мавриди концентратсияи кислотаи гидрогенхлорид 6 мол/л будан, пайвастаҳои димерии таркибашон $[\text{Re}_2\text{O}_3(\mu\text{-L})\text{Cl}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ва $[\text{Re}_2\text{O}_3\text{L}_2\text{Cl}_4] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ҳосил мешаванд. Маълумот оид ба синтези пайвастаҳои комплекси гафний (IV), германий (IV) ва манган (II) бо тиомочевина, фенилтиомочевина ва дифенилтиомочевина дар этилатсетат, кислотаи сирко ва этанол дар кори муаллифони [61] оварда шудаанд. Маълум карда шудааст, ки тетраҳлориди германий бо лигандҳои мазкур пайвастаҳои комплекси таркибашон $\text{GeCl}_4 \cdot \text{L}$ ҳосил мекунад ва барои ин пайвастаҳо қимати собитаҳои устуворӣ муайян карда шудаанд. Устувории термӣ пайвастаҳои комплекси манган (II) бо тиомочевина ва фенилтиомочевина таркиби умумиашон $\text{MnCl}_2 \cdot 4\text{L}$ омӯхта шудааст. Дар асоси таҳқиқотҳои

термогравиметӣ муайян карда шудааст, ки характери таҷзияи термиковии пайвастаҳои комплекси яхела аст, аммо устувории пайвастаи комплекси тиомочевинагӣ нисбат ба пайвастаи фенилтиомочевина устувортар аст.

Маълумот оид ба синтез ва омӯзиши пайвастаҳои координатсионии мис (II) бо N – атсетилтиомочевина дар кори муаллифони [62] оварда шудааст. Аниқ карда шудааст, ки лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ба атоми металл – комплексҳосилкунанда ба воситаи атоми сулфури гурӯҳи тионӣ пайваст шудааст.

Дар таҳқиқоти Илина И.Г. ва дигарон [63] натиҷаҳо доир ба коркарди усулҳои имконпазири синтези силсилаи тиомочевинаҳо, тиюамидҳо ва тиюксамидҳои ҷойивазшуда барои ба даст овардани пайвастаҳои хелатии Co (II) оварда шудаанд. Масъалаҳои табдилёбии таутомерии тион-тиолӣ, инчунин сис- ва транс-конформатсияҳо баррасӣ шудаанд. Дар асоси усулҳои спектри инфрасурх натиҷаҳо оид ба координатсияи имконпазири тиюксамидҳои монокоординатсияшуда ба Co (II) ба воситаи атомҳои нитроген ва сулфур пешниҳод карда шудаанд. Муаллифони кори [64] пайвастаҳои координатсионии рутений бо тиомочевина таркибашон $RuBr_3 \cdot 2Thio$; $[Ru(Thio)_6]Br_2$; $[Ru(Thio)_5(H_2O)]Br_2$; $[Ru(Thio)_5Br]Br_2$ синтез кардаанд. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси $[Ru(Thio)_6]Br_2$ хати интенсивияташ паст дар ҳудуди 262 см^{-1} пайдо гардидааст, ки онро муаллифон ба лаппишҳои валентии Ru-S мансуб донистаанд. Инчунин дар ҳудуди 195 см^{-1} хати интенсивияташ миёна пайдо мегардад, ки он эҳтимолан ба лаппишҳои деформатсионии Ru-S-C тааллуқ дониста мешавад. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи $[Ru(Thio)_6]Br_2$ хати мансуб ба лаппишҳои валентии $\nu(Ru-Br)$ пайдо намегардад. Дар кори муаллифони [65] раванди комплексҳосилшавии рений (V) бо 2-пиридилтиомочевина дар муҳити 6 мол/л HCl бо усули спектрофотометрӣ омӯхта шудааст. Таркиби шаклҳои комплекси ҳосилшуда муайян карда шудаанд. Бо усули мувофиқати маҳлулҳо қиматҳои собитҳои зинагии устуворӣ муайян карда шудаанд: $K_1=4,67 \cdot 10^2$; $K_2=1,55 \cdot 10^2$.

Аз ҷониби муаллифи кори [66] собитаҳои устуворӣ ва функсияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси ионҳои нуқра (I) бо тиомочевина (Tu), N-фенилтиомочевина (Phtu), N,N'-дифенилтиомочевина (BPhtu), тиосемикарбазид (Tsc) ва N – атсетилтиомочевина (Atu) дар маҳлули обӣ муайян карда шудаанд. Инчунин таъсири ҳарорат ба устувории пайвастаҳои комплекси Ag(I) бо тиомочевина ва N- ва N,N'- ҳосилаҳои он муайян карда шудааст.

N,N'-бис (м-этоксикарбонилфенил) мочевина ва пайвастаҳои комплекси он бо мис, рӯҳ ва кадмий дар кори [67] синтез карда шудаанд. Тарзи координатсияи лиганд ба металлҳо муайян карда шудааст. Баъзе омилҳои ба қобилияти донорӣ таъсиррасони атоми нитроген ва оксигени молекулаи лиганд муҳокима карда шудаанд. Натиҷаҳо доир ба омӯзиши маҳсули реаксияи тиомочевина ва этилентиомочевина бо тиосемикарбазидатсетати кобалт (II) дар кори муаллифони [68] оварда шудааст.

Маълумот оид ба пайвастаҳои комплекси металлҳои платинагӣ бо тиокарбамид дар кори муаллифони [69] оварда шудааст.

Дар кори [70] бо усули полярографӣ раванди комплексҳосилшавии мис (I) бо тиомочевина дар маҳлули 0,2 н кислотаи сулфат омӯхта шудааст. Ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси таркибашон $\text{Cu}[\text{SC}(\text{NH}_2)_2]^{n+}$, дар ин ҷо: $n=1-4$ аст, муайян карда шудааст. Пайвастаҳои координатсионии манган (II) бо фенилтиокарбамид таркибашон $\text{MnL}_2\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{MnL}_2(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$, $\text{MnL}_2\text{SO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{MnL}_2(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{MnL}_2(\text{NCS})_2 \cdot \text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ дар кори муаллиф омӯхта шудааст. Хосиятҳои пайвастаҳои комплекси ҳосилшуда ва равандҳои термолизи онҳо баҳо дода шудаанд. Рахҳои ба $\nu(\text{CS})$ иртиботдошта дар спектрҳои пайвастҳои комплекси ҷиҳати ба спектри фенилтиокарбамиди ҳолис ба самти басомадҳои паст мегузаранд, ки ин омил вобаста ба координатсияи лиганди органикӣ тавассути атоми сулфур далолат мекунад. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси сулфатӣ тақсимшавии назарноки рахҳои сулфатӣ: $\nu_{\text{as}}(\text{SO}_4)=1110, 1165$ ва 1210 см^{-1} ба

назар мерасад. Басомади нофаъол дар спектр барои иони сулфати тетраэдрӣ дорои лаппишҳои валентии симметрӣ бо интенсивнокии назаррас тақрибан дар 1010см^{-1} дар спектри пайвастаи комплекси сулфатии манган (II) бо фенилтиокарбамид аён мегардад. Ин гуна характери гурӯҳи сулфатӣ оид ба мавҷуд будани он дар сфераи дохилӣ ва ба таври бидентатӣ бо атоми манган (II) координатсия шудани он шаҳодат медиҳад. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси тиосианатӣ рахҳои ионҳои тиосианатии беруни сферавӣ маълум карда нашудаанд, аммо рахҳои гурӯҳҳои дохилисферавии изотиосианатӣ муайян гардидаанд: $\nu(\text{CN})\text{CNS}=2044, 2085, 2113\text{см}^{-1}$, $\nu(\text{CS})\text{NCS}=800\text{см}^{-1}$. Раҳи гурӯҳи $\nu(\text{NCS})$ бо рахҳои фенилтиокарбамин пӯшида шудааст. Координатсияи гурӯҳҳои NCS- тавассути атоми нитроген ба амал меояд. Пайдошавии рахҳои $\nu(\text{COO}) \approx 1580\text{ см}^{-1}$, $\nu(\text{COO}) \approx 1405\text{ см}^{-1}$, $\delta(\text{CH}_3) \approx 1351\text{см}^{-1}$, $\rho(\text{CH}_3) \approx 1035\text{ см}^{-1}$, 1055 см^{-1} , $\nu(\text{C-C}) \approx 900\text{ см}^{-1}$, 940 см^{-1} ва 960 см^{-1} дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаи комплекси атсетатӣ низ оид ба мавҷуд будани гурӯҳи атсетатӣ дар сфераи дохилии пайвастаи комплексӣ гувоҳӣ медиҳад. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси нитратӣ рахҳои гурӯҳи нитратии дохили сферавӣ тақрибан дар ҳудудҳои $\sim 1490, 1335, 1350$ ва 835 см^{-1} пайдо шудаанд. Инчунин раҳи дар ҳудудҳои 1040см^{-1} , ки ба лаппишҳои валентии ионҳои нитрати аввала тааллуқ дорад, пайдо мешавад. Ин гуна хусусиятҳои спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплексӣ одатан ба воридшавии гурӯҳҳои нитратӣ ба сфераи дохилии пайвастаҳои комплексӣ маълумот медиҳанд.

1.4. Хосиятҳои кислотагӣ – асосии лигандҳои амидӣ ва тиоамидӣ

Таҳқиқи мувозинатҳои кислотагӣ-асосӣ дар маҳлулҳои обӣ, ки дар он лигандҳои органикии нитроген ва сулфур мавҷуданд, муҳиммияти азими илмиро доро мебошанд, зеро, ин элементҳо дар равиши ҳаёти нақши ҳалқунанда доранд. Маълум аст, ки лигандҳои органикии сулфурдор ва пайвастаҳои он бо ионҳои металлҳо ҷаълонокии биологиро зоҳир намуда, аз ҷумла зиддиомосӣ, зиддизанбуруғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғайра буда метавонад [72]. Реаксияҳои депротонизатсияи пиразол ва ҳосилаҳои он аз ҷониби

муаллифони кори [73] омӯхта шуда, дар таҳқиқ бо истифода аз маҳлули обии атсетати мис дар маҳлули бензол дар ҳарорати хона асос қарор додааст. Муҳаққиқи кори [74] ба омӯзиши хосиятҳои кислотагӣ-асосии кислотаи сулфонӣ ва диоксидҳои тиомочевина ва қобилияти реаксионии онҳо дар равандҳои оксиду-барқароршавӣ бахшида шудааст. “Дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда хосиятҳои кислотагӣ-асосии тиомочевина ва N,N – диэтилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ омӯхта шудаанд. Маълум карда шуд, ки қимати pK барои дуоксиди тиомочевина ва диоксиди N,N – диэтилтиомочевина мувофиқан ба $9,5 \pm 0,01$ ва $10,47 \pm 0,01$ (дар қувваи ионии $I=0,1$) баробар аст” [74]. Муҳаққиқ маълум намудааст, ки зимни ба гурӯҳҳои амидии диоксиди тиомочевина воридкунии гурӯҳҳои электродонории метилӣ ба камшавии хосиятҳои кислотагии пайвастаҳои органикӣ оварда мерасонад. Собитаҳои ионизатсияи кислотагии (pK_a) лиганди органикии 2-меркаптоимидазол дар маҳлулҳои обӣ-метанолии таркибашон гуногун дар кори муаллифони [75] омӯхта шудааст. Муайян карда шудааст, ки қимати собитаи ионизатсияи 2-меркаптобензимидазол зимни гузаштан аз маҳлулҳои обӣ ба маҳлулҳои обӣ-метанолӣ кам мегардад. Барои муайян кардани ҳудудҳои ҳосилшавии максималии шаклҳои лиганди органикӣ диаграммаи тақсимшавии ҳиссавӣ сохта шуд.

Собитаи ионизатсияи 2-меркаптоимидазол дар маҳлули обӣ-этанолӣ таркибашон гуногун муайян карда шудааст. “Дар натиҷа муайян карда шудааст, ки табиати ҳалкунандаи органикӣ ба хосиятҳои кислотагӣ – асосии 2-меркаптоимидазол таъсир мерасонад ($pK_a=10,24$ ҳ.%; $pK_a=10,38-25$ ҳ.%; $pK_a=10,57-35$ ҳ.%, ва ғ.). Маълум карда шудааст, ки 2-меркаптоимидазол ба пайвасткунии протон қобилият дорад. Дар ин маврид собитаи ионизатсияи молекулаи мазкур ба $4,45 \pm 0,05$ баробар аст, яъне пайвастшавии меркапто-гурӯҳ ба молекулаи бензимидазол ба камшавии хосиятҳои асосӣ оварда мерасонад” [76].

“Хосиятҳои кислотагӣ-асосии 1-метил-2-меркаптоимидазолро дар маҳлулҳои органикии таркибашон гуногун омӯхтаанд. Дар ин маврид

конуниятҳои таъсири таркиби ҳалқунандаи обӣ-органикӣ ба собитаи ионизатсияи 1-метил-2-меркаптоимидазол муайян карда шудаанд” [77].

“Ба омӯзиши хосиятҳои протонизатсияи қатори диаминбензимидазолӣ бахшида шудааст. Маълум карда шудааст, ки дар муҳити кислотагӣ протонизатсияи гурӯҳи аминӣ ба амал меояд. Барои баҳодиҳии ҳудуди рН мавҷудияти ҳиссаҳои мувозинатӣ вобастагии зичии оптикӣ аз рН муҳити маҳлул сохта шудааст. Аз натиҷҳои омӯзиши спектрҳои фурӯбарӣ ва вобастагии D аз рН ҳудуди протонизатсияи атоми нитрогени ҳалқаҳои имидазолӣ муайян карда шудаанд” [78].

1.5. Хусусиятҳои асосии истифодабарии пайвастаҳои комплекси

Пайвастаҳои координатсионӣ дар илм, дорусозӣ, тиб, соҳаҳои гуногуни саноат ва инчунин барои муҳофизат намудани табиат ба таври васеъ истифода карда мешаванд. Мисол, дар химияи таҳлилӣ бо истифода аз пайвастаҳои координатсионӣ ҳадди минималии муайянкунии аксар пайвастаҳо кам карда мешавад. Дар системаҳои биохимиявӣ синтези бархе аз пайвастаҳои координатсионӣ нақши модели равандҳоро, ки дар организми зинда мегузаранд, мебозанд. Дар технологияи химиявӣ истифодаи пайвастаҳои координатсионӣ бо лигандҳои гуногун бо бартарии ҷудокунии компонентҳо дар омехтаҳо вобастагӣ дорад. Дар қори муаллифони [79] натиҷаҳо доир ба таҳқиқотҳои пайвастаҳои комплекси бо лигандҳои органикӣ пешниҳод карда шудаанд.

Холов Х.М. [80] натиҷаҳо оид ба омӯзиши сохти пайвастаҳои комплекси хлоридӣ, нитратӣ ва атсетатии Co(II), Ni(II), Cu(II) ва Zn(II) бо тиосемикарбазон п-N, N – диметиламинобензалдегидро бо усули таҳқиқи спектроскопияи инфрасурх овардааст. Қайд карда шудааст, ки фаъолнокии биологии пайвастаҳои комплекси металлҳо бо лигандҳои органикӣ нисбат ба намакҳои одӣ зиёдтар аст ва ин имконият медиҳад то пайвастаҳои комплекси ба сифати маводҳои зиддиомосӣ, зиддивирӯсӣ, бактерисидӣ, лахташавии хун истифода карда шаванд. Эҳтимол аст, ки пайвастаҳои нави синтезкардашуда аз ҳисоби дар онҳо пайдо шудани гурӯҳҳои нави

функционалӣ, метавонанд ҳосияти зиёди ғаёлнокии биологиро нисбат ба намакҳои аввалии металлҳои интиқоли ва молекулаҳои лигандҳои органикӣ зоҳир намоянд. Бояд қайд кард, ки дар пайвастаҳои нави синтезкардашуда омилҳои нави стереохимиявӣ пайдо мегарданд, ки ба ғаёлияти атомҳои алоҳидаи таркиби лиганди аввала таъсир расонида, инчунин таъсири поляризатсионии атоми марказиро зиёд кунанд, яъне дар пайвастаҳо ҳосиятҳои нави химиявӣ пайдо мешаванд.

Муаллифи кори [81] раванди ҳосил намудани пайвастаҳои комплекси Co , Zn , Fe , Cu ва Mn -ро бо глитсин ва кислотаи аспаргинат ба роҳ монда, нақша ва вояи ворид кардани онҳоро ба организми ҳайвонот ба роҳ мондааст. Усутирии пайвастаҳои комплекси, захинокии он ва инчунин таъсири онҳо ба пардаи луобии аъзои ҳозимаи ҳайвонот муайян карда шудаанд. Динамикаи тағйирёбии нишондодҳои гематологӣ ва биохимиявӣ, инчунин мавҷуд будани металлҳои Co , Zn , Fe , Cu , Mn дар таркиби хуни гӯсолаҳо ва барраҳо зимни ворид намудани пайвастаҳои комплекси металлҳои мазкур муайян карда шудаанд.

Дар кори [82] маълумот оид ба таъсири пайвастаи комплекси оксохлоридии рений (V) ба рӯшноиустутирии диатсетати селлюлоза оварда шудааст. Муайян карда шудааст, ки N – атсетилтиомочевина ва пайвастаи оксохлоридии он бо рений (V) таъсири рӯшноиустутиро нисбат ба диатсетати селлюлоза зоҳир намуда, электризатсияи онро паст мекунад.

Маълумот доир ба эҳтимоляти истифодаи пайвастаҳои хелатии мис (I) ва нуқра (I), ҳамчунин реагентҳои аввала барои ба даст овардани нанопленкаҳо ва нанозарраҳо бо истифода аз усули CVD ва модификатсияи онҳоро пешниҳод намудааст. “Қайд карда шудааст, ки пайвастаҳои комплекси тиомочевинаҳо, ки дар таркибашон порчаи макроҳалқагӣ доранд, метавонанд ба сифати экстрагентҳо, гузаронандаҳои мембранагӣ, комплексҳосилкунандаҳо дар химияи аналитикӣ баҳусус дар мавриди сохтани электродҳои ион-селективӣ истифода карда шаванд” [83]. Атомҳои мис (I) ва нуқра (I) дар таркиби хелатҳои полиадроии $[\text{ML}]_n$ аз ҷиҳати

координатсионӣ сер буда, хосиятҳои электрофилиро зоҳир мекунанд. Аз ин лиҳоз, онҳоро метавон ба сифати катализатор, инчунин дар синтези як қатор ҳосилаҳои гетеролигандӣ истифода кард. Натиҷаҳои таҳқиқот оид ба пайвастаҳои комплекси 8-оксихинолин бо симоб ва камшавии захрнокии пайвастаҳои симоб, ки дар муолиҷаи бемориҳои пӯст (псориаз) истифода карда мешаванд, дар кори муаллифони [84] оварда шудаанд. Қайд карда шудааст, ки маводҳои доругӣ дар асоси намакҳои симоби дувалента ва псориазин бар зидди бемориҳои пӯст (псориаз) ба таври васеъ истифода карда мешаванд.

Кори муаллифони [85] ба коркарди сенсори хиралии флуоресцентӣ дар асоси кумарин бо тиомочевина барои муайян кардани N-Вос пролини муҳофизаткарда бахшида шудааст. Дар мақолаи мазкур нишон дода шудааст, ки сенсори мазкур флуоресценсияи пасти манзарро ва зиёдшавии флуоресценсияи сенсор зимни тағйирёбии ранги кабуд ба 18нм ба амал меорад. Дар кори муаллифони [86] усули спектрофотометрии муайян кардани катионҳои симоб коркард карда шудааст. Ба сифати реагенти органикӣ барои муайян кардани симоб, кислотаи мурча истифода карда шудааст. Дар кори [87] як қатор омилҳои ба раванди комплексҳосилшавии ионҳои симоб (II) бо 5МПААН₃S – 2,4 таъсиркунанда оварда шуда, шароитҳои оптималии муайянкунии спектрофотометрии он коркард шудааст. Бо истифода аз методикаи спектрофотометрии мазкур таҳлили омехтаҳои намунавӣ гузаронида шуда, баҳодиҳии метрологии натиҷаҳои ба даст оварда, гузаронида шуд.

Сохтор ва ғаёлнокии зиддиомосии пайвастаҳои комплекси платина дар кори муаллифони [88] оварда шудааст. Дар кори мазкур муваффақиятҳо дар соҳаи сохтори пайвастаҳои комплекси платина солҳои охир оварда шудааст. Аҳаммияти махсус ба пайвастаҳои ғайрианъанавии платина, бахусус ба пайвастаҳои комплекси дорои транс-конфигуратсия, пайвастаҳои комплекси Pt^{IV}, пайвастаҳои комплекси платина бо S- ва P- лигандҳои донорӣ, пайвастаҳои полиядрой дода шудааст.

Муаллифони кори [89] хосиятҳои нави пайвастаҳои комплекси аксар металлҳоро бо истифодаи маводҳои зиддимикробӣ дар речаҳои *in vitro* ва *in vivo* омӯхта, баҳодиҳии истифодаи ин пайвастаҳо дар шакли маводи доругӣ барои муолиҷаи захми эксперименталӣ гузаронида шудааст. Бахусус, пайвастаҳои нави комплекси рӯҳ бо ҳосилаҳои адамантан, нитроимидазол ва нитрофуран синтез карда шудаанд. Нишон дода шудааст, ки як қатор пайвастаҳои биоконкомплексӣ дорои фаъолнокии зиддимикробӣ ва зиддизанбурӯғӣ буда, худ маводҳои иммуномодуляторӣ мебошанд. Моддаҳои мазкур ба синфи пайвастаҳои камзаҳрнок дохил шуда, дар маводҳои дорувории полимерӣ истифода карда мешаванд.

Кори [90] ба муайян намудани механизми ташаккули қабатҳои сульфидҳои нимноқилӣ аз пайвастаҳои координатсионии тиомочевинагӣ ва дар ин асос, ба даст овардани пленкаҳо бо таркиб ва хосиятҳои додашуда бахшида шудааст. Муаллифи кори мазкур равандҳои комплексҳосилшавии маҳлулҳои обии намакҳои металлҳоро бо тиомочевина омӯхтааст. Дар асоси ин моделсозии таркиби маҳлул барои ба даст овардани пленкаҳо гузаронида шудааст.

1.6. Хулосаи умумии шарҳи адабиёт

Таҳлили адабиёти илмӣ нишон медиҳад, ки назарияи химияи координатсионии ҳосилаҳои тиомочевина бо металлҳои интиқоли хеле васеъ аст. Пайвастаҳои координатсионии металлҳо бо лигандҳои гуногуни органикӣ дар соҳаи дорусозӣ, тиб, таҳлил, соҳаҳои илм ва истеҳсолот ва инчунин барои муҳофизат намудани табиат ба таври васеъ истифода карда мешаванд. Дар химияи таҳлилӣ бо истифода аз пайвастаҳои координатсионӣ минимуми муайянкунии аксар пайвастаҳо кам карда мешавад. Маводҳои доругӣ дар асоси намакҳои симоби дувалента ва псориазин бар зидди бемориҳои пӯст (псориаз) ба таври васеъ истифода карда мешаванд. Як қатор маълумот оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии металлҳои интиқоли бо тиомочевинаҳо дар маҳлулҳои обӣ ва ғайриобӣ оварда шудаанд. Вобастагии қимати собитҳои устуворӣ аз табиати металл ва лиганд дарч

карда шудаанд. Дар баробари ин, маълумот оид ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар адабиёти илмӣ ошкор карда нашудааст. Аз ин лиҳоз, мавзуи таҳқиқоти илмии рисолаи мазкур ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бахшида шудааст.

БОБИ 2. ҚИСМАТИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛӢ

2.1. Маводҳои аввала, усулҳои таҳлил ва таҳқиқи пайвастаҳои комплексӣ

Ба сифати моддаҳои аввала дар кори мазкур намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ аз симоби металлӣ зимни таъсир намудан бо кислотаи нитрат (конс.) мувофиқ ба методикаи [91] синтез карда шудааст. Лиганди органикии N – атсетилтиомочевина мувофиқ ба методикаи [92] ба даст оварда шуд. Маҳлули кислотаи нитрат (консентронида) дорои тамғаи «х.т.» (химиявӣ тоза) истифода карда шуд. Қувваи ионии маҳлулро дар мавриди омӯзиши раванди комплексҳосилкунӣ бо ёрии намаки NaClO_4 , ки дорои тамғаи «т.б.т.» буд, нигоҳ доштем.

Миқдори элементҳои C, H, N ва S дар таркиби пайвастаҳои комплексӣ дар хроматографи газии тамғаи CHNS – анализатори «Vario micro cube» истеҳсоли ширкати Elementar (Олмон) муайян карда шудаанд. Миқдори симоб дар таркиби пайвастаҳои комплексӣ бо усули гравиметрӣ зимни барқароркунӣ бо аррамайдаи рӯҳ мувофиқ ба методикаи кори [93] муайян карда шудааст.

Цараёнгузаронии молярии маҳлулҳои пайвастаҳои комплексӣ дар ячейкаи термостатӣ дар асбоби «HI 8733 Conductivity meter» чен карда шуд. Спектрҳои инфрасурхи омехтаи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро бо намаки бромиди калий дар шакли ҳаб (таблетка) дар ИК – Фурье спектрометри тамғаи IRAffinity – 1 (истеҳсоли ширкати Shimadzu, Ҷопон) дар фосилаи басомади $4000\text{--}400\text{см}^{-1}$ сабт карда шуд. Таҳқиқотҳои термогравиметрии пайвастаҳои комплексӣ дар асбоби TGA – PL гузаронида шуд. Рентгенограммаҳои хокаи пайвастаҳои комплекси дар дифрактометри тамғаи «Дрон –3» бо истифодаи усули дифраксияи нури рентгенӣ сабт карда шудаанд.

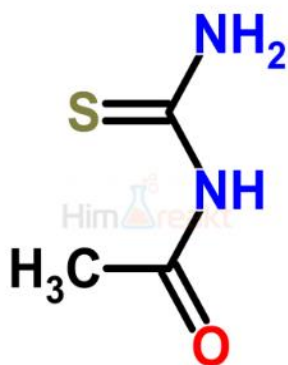
Титркуниҳои потенциометрӣ дар асбоби тамғаи рН метр 150 МИ гузаронида шудаанд. Барои нигоҳ доштани ҳарорати дохили ячейкаи потенциометрӣ (элементи галванӣ) термостат бо дақиқияти $\pm 0,10$ °C

истифода карда шудааст. Элементи галвани аз ду электрод – электроди индикаторӣ ва электроди муқоисавӣ иборат буд. Ба сифати электроди потенциалмуайянкунанда электроди симоб – индикаторӣ системаи ХС-Hg-001 02-01 истифода карда шудааст. Ба сифати электроди муқоисавӣ – электроди хлорнуқрагин истифода карда шуд.

Ҳисоби шумораи заррачаҳои комплекси ва устувории онҳо бо усули барномаи онлайнӣ компютери KEV, ки аз ҷониби муаллифони кори [94] пешниҳод карда шудаанд, гузаронида шудааст. Саҳеҳкунии собитҳои устуворӣ, қимати функсияҳои термодинамикӣ, баромади максималии пайвастиҳои комплекси бо истифода аз барномаҳои «Excel», «Borland Delphi», системаи амалиётӣ «Windows seven» тариқи компютерӣ гузаронида шудаанд.

2.2. Баъзе хосиятҳои физикӣ - химиявии лиганди

N – атсетилтиомочевина



Формулаи
молекулавӣ

Формулаи структурӣ

N – атсетилтиомочевина (N – acetylthiourea) хокаи сафеди кристаллӣ ва ё зардча мебошад. Баъзе хосиятҳои физикии лиганд дар ҷадвали 1 оварда шудаанд.

Ҷадвали 2.1. - Баъзе тавсифҳои N – атсетилтиомочевина

Массаи молекулавӣ	118.15 мол/л
Зичӣ	1.275 г/см ³
Ҳарорати ҷӯшиш	208.6°C дар 760 мм сут. Сим.
Ҳарорати гудозиш	166-168°C

Идомаи ҷадвали 1.	
Нишондоди шикаст	1.5690

Ҷадвали 2.2. - Ҳалшавандагии N – атсетилтиомочевина г/100 мл

Об	Камҳалшаванда
Оби гарм	Ҳалшаванда
Маҳлули серобшудаи NaOH	Ҳалшаванда
Этанол	Камҳалшаванда
1,4-диоксан	Камҳалшаванда
Диметилформамид	Ҳалшаванда
Диметилсулфоксид	Ҳалшаванда
Атсетон	Ҳалшаванда
Эфир	Камҳалшаванда

- Зимни гарм кардан ноустувор аст. Дар мавриди гармкунӣ оксидҳои сулфур ва нитрогенро ҳосил мекунад;
- Дар муҳитҳои кислотаҳои қавӣ ва асосҳои қавӣ ба реаксияи гидролиз дучор мегардад;
- Бо моддаҳои қавии оксидкунанда, кислотаҳо ва оксидҳои қавӣ мутобиқ нест
- Бо аксар металлҳои интиқоли пайвастаҳои координатсионӣ ҳосил мекунад, зеро дар таркиби он чор атомҳои донорӣ мавҷуд аст.

2.3. Синтези намаки аввалаи нитрати симоб (II)

Нитрати симоб (II)-ро мо аз симоби металлӣ мувофиқ ба реаксияи зерин ҳосил намудем:



Барои ин мо омехтаи 100мл кислотаи нитратро зичиаш 1,4 г/см³ ва 60 мл обро зери ҷевони ҳавокаш то ҳарорати 50-60⁰С гарм намуда, ба болои он 100 мл симоби металлӣ илова намудем. Маҳлулро гарм карда омехта кардем ва баъд аз 20-30 дақиқа ба болои он бо вояҳои 10 мл маҳлули кислотаи нитрат

(1:1) то пурра оксидшавии Hg_2^{2+} илова намудем (дар маҳлул на бояд тирашавии ранги маҳлул зимни илова намудани кислотаи нитрат ба назар расад).

Маҳлули ҳосилшударо дар ҳаммоми обӣ дар ҳарорати $70-80^\circ\text{C}$ то пайдо шудани пленкаи кристаллӣ бугронӣ намудем, ва ба маҳлули гарм 7 мл маҳлули кислотаи нитрат (1:1) илова намудем. Зимни илова намудани воия кислотаи нитрат кристаллҳои ҳосилшуда ҳал шуданд. Маҳлули ҳосилшударо муддати як шабонарӯз дар ҳарорати $5-10^\circ\text{C}$ нигоҳ доштем. Кристаллҳои ҳосилшударо бо ёрии қифи Бюхнер чудо намуда, онро бо 20мл маҳлули кислотаи нитрат (1:1) шустем. Баромади намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ 120-130 граммро, яъне 80 % - ро ташкил намуд.

2.4. Формулаҳои ҳисобӣ барои коркарди натиҷаҳои эксперименталӣ

Ҷиҳати ошкор кардани концентратсияи мувозинатии симоб (II) дар мавриди титронидани потенциометрӣ мо муодилаи Нернстро дар истифода қарор додем. Концентратсияи мувозинатии симоб (II) бо истифода аз муодилаи:

$$\lg [\text{Hg}^{2+}] = \lg C_{\text{Hg}^{2+}} - \frac{\Delta E}{1.985 \cdot 10^{-4} \cdot T} \quad (1)$$

ки дар ин ҷо $[\text{Hg}^{2+}]$ концентратсияи иони Hg^{2+} дар ҳар як нуқтаи титркунии потенциометрӣ; $C_{\text{Hg}^{2+}}$ - концентратсияи ионҳои нуқра дар ҳар як нуқтаи титронӣ бо дарназардошти серобшавӣ; T – ҳарорат (К, Келвин); ΔE – тағйирёбии потенциал дар ҳар як нуқтаи титронидан, ки бо ёрии формулаи зерин ҳисобида шудааст:

$$\Delta E = E_1 - E_i$$

ки дар ин ифода E_1 – потенциали аввалаи системаи Hg^{2+}/Hg

E_i – потенциали система дар ҳар як нуқтаи титронӣ муайян карда шуд.

Концентратсияи мувозинатии тиопирин (мувофиқ ба натиҷаҳои титркунии потенциометрӣ) мувофиқ ба муодилаи мазкур ҳисобида шуд:

$$\lg [Atu] = C_{\text{Acet}} - n(C_{\text{Hg}^{2+}} - [\text{Hg}^{2+}]) \quad (2)$$

дар ин ҷо: $[Atu]$ – консентратсияи мувозинатии атсетилтиомочевина дар ҳар як лаҳзаи титронӣ; n – шумораи молекулаҳои атсетилтиомочевина, ки ба иони симоб (II) пайваست шудаанд.

Собитаи ионизатсияи атсетилтиомочевина бо усули титронидани рН-метрӣ мувофиқ ба кори [95] муайян карда шуд. Собитаҳои ионизатсияи атсетилтиомочевина аз рӯи муодилаи $pK_a = [L] \cdot [H^+] / [HL^+]$ ҳисоб карда шудаанд. “Бо истифода аз қиматҳои собитаҳои устувории пайваستҳои комплексӣ функсияҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина муайян карда шудаанд. Барои ҳисобкунӣ муодилаи Кларк ва Глю [96]:

$$\lg K = - \frac{\Delta_r G^0}{R \cdot 298,15 \cdot 2,3} + \frac{\Delta H}{R \cdot 2,3} \left[\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T} \right]$$

истифода бурда, ба таври графикӣ қиматҳои ΔG ва ΔH ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ муайян карда шудаанд».

Қимати ΔS бо ёрии муодилаи Гиббс муайян карда шуд. Ҳисоббарориҳои муайянкунӣ ва дурустгардониҳои собитаҳои устуворӣ, собитаҳои ионизатсияи лиганди органикӣ, бузургҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ дар маҳлулро дар компютер бо истифода аз барномаҳои «Excel», «BorlanDelphi», «KEV» [94] ва рН-metr гузаронида шудаанд.

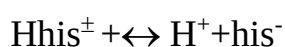
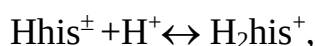
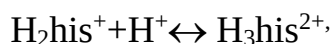
2.5. Омӯзиши хосияти кислотагӣ – асосии N – атсетилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ

Омӯзиши таъсири таркиби пайвастаҳои органикӣ ба хосиятҳои кислотагӣ – асосӣ ва комплексҳосилшавӣ яке аз самтҳои асосӣ дар химияи пайвастҳои координатсионӣ ба шумор меравад. Натиҷаҳои ба даст омада имконият медиҳанд, то ҳудуди истифодабарии лигандҳои органикӣ васеъ карда шаванд ва асоси коркарди принципҳои синтези пайвастаҳои синфи муайяни дорои хосиятҳои муайян гарданд. Тиомочевина ва ҳосилаҳои он дорои як қатор хосиятҳои фармакологӣ буда, дар синтези пайвастаҳои

гетероҳалқагӣ ба таври васеъ истифода карда мешаванд.

Чӣ тавре маълум аст, аксар пайвастаҳои органикӣ дорои хосиятҳои ҳам кислотагӣ ва ҳам асосӣ мебошанд (яъне метавонанд ҳам донор ва ҳам аксептори протон шаванд). Кислота ва ё асос будани моддаи органикӣ аз моддаи дуюм вобастагии калон дорад, зеро кислота танҳо дар иштироки асос метавонад қобилияти худро зоҳир намояд. Ин гуна равандҳо худ аз худ мегузаранд, зеро бо камшавии энергияи озод ба амал меоянд ($\Delta G < 0$). Аз ин лиҳоз, дар реаксияҳои комплексҳосилшавӣ бояд қувваи нисбии кислотаҳо ва ё асосҳо муайян карда шаванд, зеро он худ аз худ гузаштани боҳамтаъсиркунии кислотагӣ – асосиро муайян мекунад.

Муҳаққиқон омӯзиши хосиятҳои кислотагӣ – асосии диоксидҳои тиомочевина ва қобилияти реаксионии онҳоро дар равандҳои оксиду-барқароршавӣ зери таваҷҷуҳ қарор додаанд. “Дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда хосиятҳои оксиду-барқароршавии тио- ва N,N'-диэтилтиомочевина дар маҳлулҳои обӣ омӯхта шудааст. Нишон дода шудааст, ки қиматҳои рК барои диоксиди тиомочевина ва диоксиди N,N'-диэтилтиомочевина мувофиқан ба $50 \pm 0,01$ ва $10,47 \pm 0,01$ ($J=0.1$) баробар аст” [97]. Муаллиф муайян кардааст, ки зимни ба гурӯҳи амидии молекулаи диоксиди тиомочевина ворид намудани гурӯҳҳои электродонории метилӣ ба камшавии хосиятҳои кислотагии ин пайвастаҳои органикӣ оварда мерасонад. “Натиҷаҳои эксперименталӣ доир ба хосиятҳои кислотагӣ – асосии L-гистидин дар маҳлулҳои обӣ-атсетонитрилӣ ва обӣ-диметилформамидии таркибашон гуногун оварда шудаанд” [98]. Хосиятҳои кислотагӣ-асосии лиганди мазкур бо реаксияҳои мувозинатии зерин шарҳ дода мешавад:



“Аз рӯи натиҷаҳои эксперименталии титркунии рН метрӣ вобастагии функцияи Беррум аз рН-и маҳлул сохта шудаанд. Нишон дода шудааст, ки бо ворид намудани ҳалкунандаи апротонии диполярӣ собитаҳои мувозинатӣ

тағйир меёбанд. Дар асоси омӯзиши таъсири концентратсияи компоненти органикӣ ба хосиятҳои кислотагӣ-асосии лиганд маълум карда шудааст, ки бо зиёд шудани концентратсияи аминокислотаи ҳалшуда ва зиёдшавии миқдори компоненти органикӣ шаклҳои димеризатсияшудаи L-гистидин нисбат ба шаклҳои мономерӣ афзалияти бештаре доранд. Зиёд шудани миқдори компоненти органикӣ ба ҳосилшавии шаклҳои иловагии димерии лиганд оварда мерасонад, ки он бо дараҷаи баланди протонизатсия фарқ мекунад [98].

Кори [99] ба хосиятҳои кислотагӣ-асосии диаминҳои қатори бензимидазол бахшида шудааст. Маълум карда шудааст, ки дар муҳити кислотагӣ раванди протонизатсияи гурӯҳи аминӣ ба амал меояд. Барои баҳодиҳии қимати pK_a ва муайян кардани ҳудуди баромади максималии заррачаҳои комплексӣ графики вобастагии зичии оптикӣ аз pH маҳлул сохта шудааст. Мувофиқи ин вобастагӣ ҳудуди протонизатсияи атоми нитрогени ҳалқаҳои имидазолӣ дар бисбензимидазол баҳо дода шудааст. Дар кори [100] натиҷаҳои омӯзиши хосиятҳои кислотагӣ – асосии бис (гидразинокarbonилметил) сулфоксид оварда шудааст.

Барои муайян кардани собитҳои ионизатсияи пайвастаҳои органикӣ усули титронидани потенциометрӣ яке аз усулҳои асосӣ ба шумор меравад. Дар мавриди титркунии потенциометрӣ тағйирёбии концентратсияи ионҳои гидрогенро дар маҳлул чен мекунанд. Барои чен кардани концентратсияи ионҳои гидроген дар маҳлули обии N – атсетилтиомочевина электроди муштарак (комбинированный) истифода карда шуд, ки дар он электроди шишагӣ бо электроди хлорнукрагин дар як корпус ҷойгир карда шудааст. Ба сифати маҳлулҳои корӣ маҳлулҳои обии кислотаи гидрогенхлорӣ ва гидроксиди калий концентратсияшон 0,1 мол/л истифода кардем. Ҳарорати ячейкаи потенциометриро бо дақиқияти $\pm 0,1$ °C бо ёрии термостат доимӣ нигоҳ доштем. Қувваи ионии маҳлулро бо намаки 0,1 мол/л NaClO₄ нигоҳ доштем.

Дар ҷадвалҳои 2.3.-2.4. натиҷаҳои титркунии маҳлули обии N –

атсепилтиомочевина бо кислотаи гидрогенхлорид дар ҳароратҳои гуногун оварда шудаанд.

Ҷадвали 2.3. - Натиҷаҳои эксперименталии муайянкунии собитҳои ионизатсияи N – атсепилтиомочевина дар ҳарорати 298 К; $C_L = 0,01$ мол/л; $J=0,1$ мол/л $NaClO_4$; $V_{\text{умумӣ}}=50,0$ мл

Титрант: маҳлули 0,1 мол/л HCl	pH	Концентрацияҳои стехиометрӣ		lgK _a
		$C_L, \text{мол/л} \cdot 10^3$	$[LH^+] \cdot 10^3$	
0	5,69	0,01	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	19,860	2,254
0,4	2,43	7,936	19,84	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	19,665	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 _{NH+} =2,36±0,04

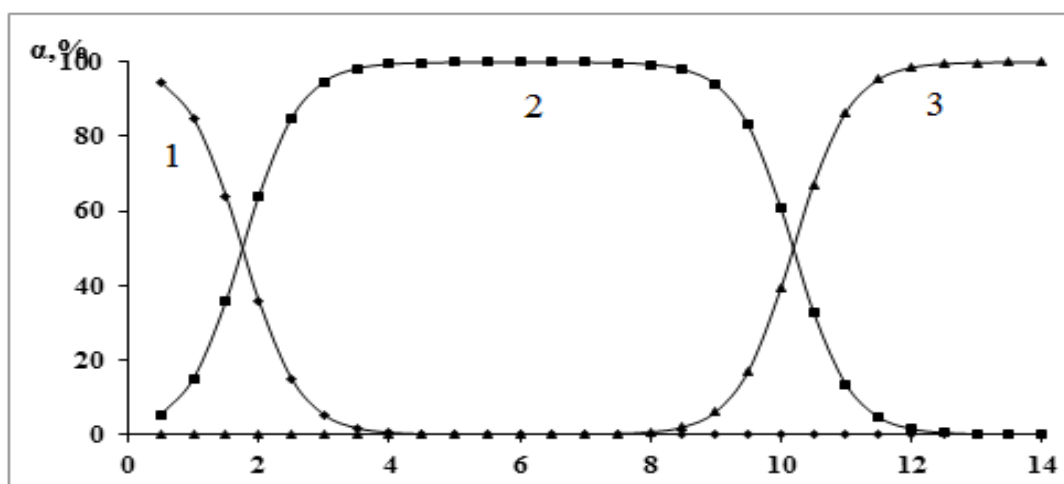
Чадвали 2.4. - Натиҷаҳои эксперименталии муайянкунии собитай ионизатсияи N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288 К; $C_L = 0,01$ мол/л; $J=0,1$ мол/л $NaClO_4$; $V_{\text{умумӣ}} = 50,0$ мл

Титрант: маҳдули 0,1 мол/л HCl	pH	Концентрацияҳои стехиометрӣ		lgK _a
		$C_L, \text{мол/л} \cdot 10^3$	$[LH^+] \cdot 10^3$	
0	5,7	0,01	0,01	2,121
0,1	3,4	0,999	19,981	2,146
0,2	3,1	1,996	19,962	2,047
0,3	2,8	2,991	19,943	2,098
0,4	2,7	3,984	19,921	2,123
0,5	2,6	4,975	19,902	2,132
0,6	2,5	5,964	19,882	2,131
0,7	2,4	6,951	19,863	2,124
0,8	2,3	7,936	19,843	2,193
0,9	2,28	8,919	19,822	2,250
1,0	2,25	9,901	19,803	2,307
1,1	2,22	10,880	19,784	2,386
1,2	2,21	11,858	19,7629	2,3689
1,3	2,1	12,833	19,742	2,448
1,4	2,08	13,807	19,722	2,537
1,5	2,06	14,778	19,705	2,642
1,6	2,04	15,748	19,686	2,733
1,7	1,98	16,716	19,667	2,914
1,8	1,96	17,682	19,647	3,219
1,9	1,94	18,646	19,628	2,121
2,0	1,91	19,608	19,609	2,146
2,1	1,85	20,568	19,590	lgK _{кн+} =2,37±0,02

Аз натиҷаҳои ҷадвалҳои 2.3.-2.4. бармеояд, ки омили ҳароратӣ ба собитай ионизатсияи N – атсетилтиомочевина хеле кам таъсир мерасонад. Ҳамин тариқ, собитай ионизатсияи лиганд дар ҳарорати 298 К ба $2,37 \pm 0,04$

баробар буда, дар ҳарорати 288 К ба $2,36 \pm 0,02$ баробар мешавад. Қимати собитай ионизатсияи N – атсетилтиомочевина барои муайян намудани собитаҳои умумии ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина ба матритсаи барномаи онлайнӣ KEV ворид карда мешавад.

Бо истифода аз натиҷаҳои эксперименталӣ диаграммаи тақсимшавии шаклҳои протонизатсияшуда, депротонизатсияшуда ва молекулавии лиганди органикии N – атсетилтиомочевина сохта шуд.



Расми 2.1. - Диаграммаи тақсимшавии шаклҳои протонизатсияшуда (1), молекулавӣ (2) ва депротонизатсияшудаи (3) маҳдули обии N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К.

Чӣ тавре аз расми 2.1 бармеояд, дар ҳудуди $pH=0,5-2,0$ шакли протонизатсияшудаи лиганд қарор дорад. Дар ҳудуди $pH=2,0-10,0$ шакли молекулавии N – атсетилтиомочевина мавҷуд аст. Шуруъ аз $pH = 10$ то $pH=14$ дар маҳлул шакли депротонизатсияшудаи лиганд қарор дорад.

Натиҷаҳои эксперименталӣ оид ба муайян намудани собитай ионизатсияи N – атсетилтиомочевина барои омӯзиши раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо лиганди мазкур истифода карда шудаанд.

2.6. Методикаи синтези пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Синтези пайвастаи комплекси таркибаш $[HgL(H_2O)(NO_3)_2]$.

Массаи баркаши 0,5 г. N – атсетилтиомочевинаро дар 10мл маҳлули

2мол/л кислотаи нитрат ҳал намудем. Баъдан ба болои он 10мл маҳлули HNO_3 ки дар он 1,45г. намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ҳал карда шудааст, илова мекунем. Омехтаи реаксиониро муддати 5-6 соат омехта намудем, ки дар натиҷа таҳшини рангаш хокистаранг ҳосил шуд. Таҳшини ҳосилшударо бо маҳлули 2мол/л HNO_3 (50мл) ва оби дистиллат шустем. Баъдан дар вакуум эксикатор бар болои KOH хушк намудем. Пайвастаи комплекси ҳосилшуда дар диметилформамид, диметилсулфоксид, атсетон (қисман) ҳал мешавад. Дар натиҷа, баромади пайвасти комплексӣ 70 % ҳосил шуд.

Синтези пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$.

Массаи баркаши 0,5 г. N – атсетилтиомочевинаро дар 10 мл маҳлули 2 мол/л кислотаи нитрат ҳал намудем. Баъдан ба болои он 10 мл маҳлули HNO_3 ки дар он 0,72 г. намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ҳал карда шудааст, илова мекунем. Омехтаи реаксиониро муддати 5-6 соат омехта намудем, ки дар натиҷа таҳшини рангаш хокистаранги торик ҳосил шуд. Таҳшини ҳосилшударо бо маҳлули 2 мол/л HNO_3 (50 мл) ва оби дистиллат шустем. Баъдан дар вакуум эксикатор бар болои KOH хушк намудем. Пайвастаи комплекси ҳосилшуда дар диметилформамид, диметилсулфоксид, атсетон (қисман) ҳал мешавад. Баромади пайвасти комплексӣ 65 % - ро ташкил дод.

Синтези пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$.

Массаи баркаши 0,5 г. N – атсетилтиомочевинаро дар 10мл маҳлули 2 мол/л кислотаи нитрат ҳал намудем. Баъдан ба болои он 10 мл маҳлули HNO_3 ки дар он 0,49 г. намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ҳал карда шудааст, илова мекунем. Омехтаи реаксиониро муддати 5-6 соат омехта намудем, ки дар натиҷа таҳшини рангаш хокистаранги торик ҳосил шуд. Таҳшини ҳосилшударо бо маҳлули 2 мол/л HNO_3 (50 мл) ва оби дистиллат шустем. Баъдан дар вакуум эксикатор бар болои KOH хушк намудем. Пайвастаи комплекси ҳосилшуда дар диметилформамид, диметилсулфоксид, атсетон (қисман) ҳал мешавад. Баромади пайвасти комплексӣ 72 % - ро ташкил дод.

Синтези пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$.

Массаи баркаши 0,5 г. N – атсетилтиомочевинаро дар 10 мл маҳлули 2

мол/л кислотаи нитрат ҳал намудем. Баъдан ба болои он 10мл маҳлули HNO_3 ки дар он 0,36 г. намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ ҳал карда шудааст, илова мекунем. Омехтаи реаксиониро муддати 5-6 соат омехта намудем, ки дар натиҷа таҳшини рангаш хокистаранги торик ҳосил шуд. Таҳшини ҳосилшударо бо маҳлули 2 мол/л HNO_3 (50 мл) ва оби дистиллат шустем. Баъдан дар вакуум эксикатор бар болои KOH хушк намудем. Пайвастаи комплекси ҳосилшуда дар диметилформамид, диметилсулфоксид, ацетон (қисман) ҳал мешавад. Баромади пайвасти комплексӣ 60 %-ро ташкил дод.

Таркиби элементии пайвастаҳои комплекси синтезкардашударо муайян кардем. Натиҷаҳои таҳлили элементии пайвастаҳои комплексӣ дар ҷадвали 1.3. оварда шудааст.

Ҷадвали 2.5. - Натиҷаҳои таҳлили элементии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Пайвастаи комплексӣ	Ҳиссаҳои массавии элементҳо, %											
	Таҷрибавӣ						Ҳисобидашуда					
	Hg	N	O	S	H	C	Hg	N	O	S	H	C
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	44, 25	14,21	26,49	7,59	1,74	8,24	43,6	12,15	27,76	6,94	1,52	7,80
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	34,96	15,25	22,86	12,64	2,68	12,96	35,71	15,0	22,86	11,43	2,14	12,86
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$	30,23	17,85	20,98	13,68	2,15	16,58	29,60	16,50	21,21	14,14	2,65	15,90
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	24,0	15,85	19,89	14,56	3,05	18,52	25,12	17,59	20,10	16,08	3,01	18,09

БОБИ 3. ТАҲҚИҚОТИ ФИЗИКӢ-ХИМИЯВИИ ПАЙВАСТАҲОИ КОМПЛЕКСИИ СИМОБ (II) БО N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА

3.1. Омӯзиши ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда

Усули кондуктометрӣ (чен кардани ҷараёнгузаронӣ) ба таври васеъ дар таҳқиқотҳои фундаменталии маҳлулҳои электролитҳо ва инчунин барои ҳалли аксар масъалаҳои амалӣ истифода карда мешавад. Ин усул яке аз усулҳои сода ва дақиқ ба шумор меравад. Бо усули таҳлили кондуктометрӣ метавон намуди электролит, яъне маълумот дар бораи сфераи дохила ва берунаи пайвастаи комплексӣ ба даст овард. Усули мазкурро барои омӯзиши пайвастаҳои комплекси устувор, ки дар ҳолати индивидуалӣ мавҷуданд, истифода меkunанд ва пайвастаҳои таҳқиқшаванда на бояд бо ҳалкунанда ба реаксияи химиявӣ дохил шаванд.

Барои муайян кардани намуди электролит, ки ба онҳо пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда тааллуқ доранд, мо ҷараёнгузаронии маҳлули пайвастаҳои синтезкардари чен кардем. Аз сабаби он ки аксар пайвастаҳои синтезкардашуда дар об гидролиз мешаванд ва дар баъзе ҳалкунандаҳои инертӣ ҳал намешаванд, мо ба сифати ҳалкунанда барои чен кардани ҷараёнгузаронӣ диметилформамид ва диметилсулфоксидро истифода намудем.

Дар ҷадвали 3.1. натиҷаҳои эксперименталӣ оид ба ченкунии ҷараёнгузаронии молярии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсептилтиомочевина дар ҳудуди ҳароратҳои 15-35 °C оварда шудааст.

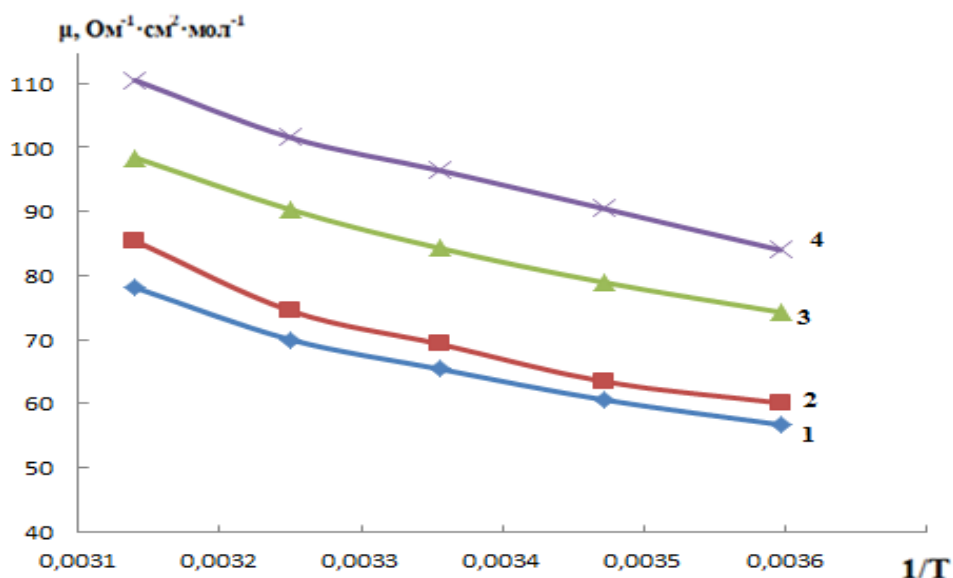
Ҷадвали 3.1. – Натиҷаҳои таҳқиқоти кондуктометрии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсептилтиомочевина дар ДМФА. $C = 1 \cdot 10^{-3}$ мол/л

Пайвастаи комплексӣ	$\mu, \text{Ом}^{-1} \cdot \text{см}^2 \cdot \text{мол}^{-1}$				
	15 °C	20 °C	25 °C	30 °C	35 °C
2	3	4	5	6	7

Идомаи ҷадвали 3.1.					
2	3	4	5	6	7
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	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
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$	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

Аз рӯи натиҷаҳои бадастомада бар меояд, ки барои пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}(\text{NO}_3)_3]$ 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 диметилформаид ҳалкунандаи қавии донорӣ аст, пас эҳтимол аст, дар маҳлули пайвастаҳои комплекси қисман ҷойивазшавии нитрат-ионҳои дохили сфераи комплекси ба амал меояд. Барои пайвастаи 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 пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ қимати ҷараёнгузаронӣ дар ҳарорати 15°C ба $86,90 \text{ Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{молл}^{-1}$ баробар буда, ба он электrolити навъи 1:1 мансуб доништа мешавад. Ин омил бо мавҷудияти ионҳои нитрат дар сфераи берунаи пайвастаи комплекси алоқамандӣ дорад.

Дар расми 3.1. графики вобастагии ҷараёнгузаронии молярии пайвастҳои комплекси як-, ду-, се- ва чоркоординатсияшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина аз ҳарорат оварда шудааст.



Расми 3.1. - Вобастагии $\mu = f(1/T)$ барои пайваستҳои 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 - $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Аз графикаи мазкур бармеояд, ки қимати ҷараёнгузаронии молярии пайвастаҳои комплекси як- ва ду- координатсияшуда нисбат ба қимати ҷараёнгузаронии молярии пайвастҳои комплекси се- ва чор- координатсияшуда пасттар мебошанд. Бо баланд шудани ҳарорат қимати ҷараёнгузаронии молярӣ барои ҳамаи пайвастҳои комплекси баланд мешавад ва ин омил оид ба назарияи зиёдшавии мутаҳаррикии ионҳо дар мавриди баланд намудани ҳарорати таҷриба шаҳодат медиҳад.

Бояд қайд кард, ки вобастагии қимати μ аз $1/T$ (расми 3.1.) барои пайвастаҳои комплекси омӯхташуда хаттӣ мебошад. Ин натиҷаҳои эксперименталӣ ба мо имконият доданд, то энергияи фаъолнокии ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси ҳисоб карда шудаанд. Энергияи фаъолнокии мувофиқ ба муодилаи мазкур ҳисоб карда шудааст:

$$E_{\phi} = \frac{2,3RT_1 \cdot T_2 \cdot \lg \frac{\mu_{T_2}}{\mu_{T_1}}}{T_2 - T_1}$$

Дар ҷадвали 5 қиматҳои ҳисобкардашудаи $E_{\text{фаъол.}}$ ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудааст.

Чадвали 3.2. - Қиматҳои $E_{\text{фаъл.}}$ ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Пайвастаи комплексӣ	$E_{\text{фаъл.}}, \text{кҶ/мол}$
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	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 3.2. бармеояд, ки энергияи фаълнокии пайвастаҳои комплекси як- ва чоркоординатсияшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина нисбат ба қимати $E_{\text{фаъл.}}$ пайвастаҳои ду- ва секоординатсияшуда пасттар аст. Яъне, суръати ҳосилшавии заррачаҳои якум ва чоруми пайвастаҳои комплексӣ дар системаи мазкур нисбатан тезтар ва самараноктар мегузарад.

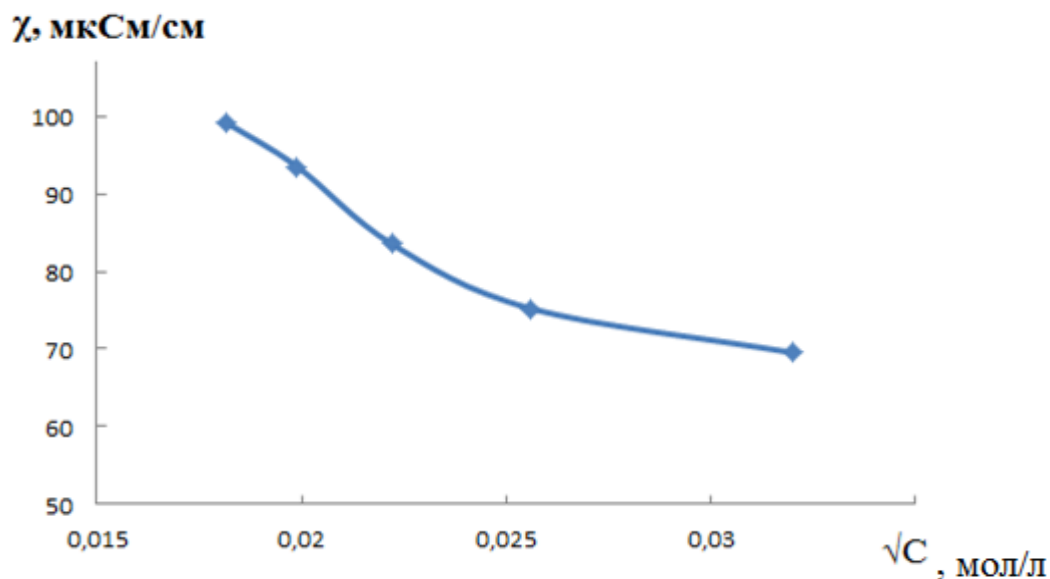
Дар кори мо инчунин, таҳқиқотҳо доир ба вобастагии тағйирёбии қимати ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси синтезкардашудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина аз консентратсияи маҳлул гузаронида шудаанд. Дар ҷадвали 3.3. натиҷаҳо доир ба тағйирёбии ҷараёнгузаронии маҳлулҳои консентратсияшон гуногуни пайвастаҳои комплекси $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$ оварда шудааст.

Чадвали 3.3. - Натиҷаҳо доир ба тағйирёбии ҷараёнгузаронии маҳлулҳои консентратсияшон гуногуни пайвастаи комплекси $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ дар ҳалкунандаи ДМСО. $T = 298 \text{ K}$.

Консентратсияи маҳлул, мол/л	Қимати χ , мкСм/см
1	2
$1,0 \cdot 10^{-3}$	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

Аз натиҷаҳои ҷадвали 3.3. маълум гашт, ки бо сероб шудани маҳлул ба

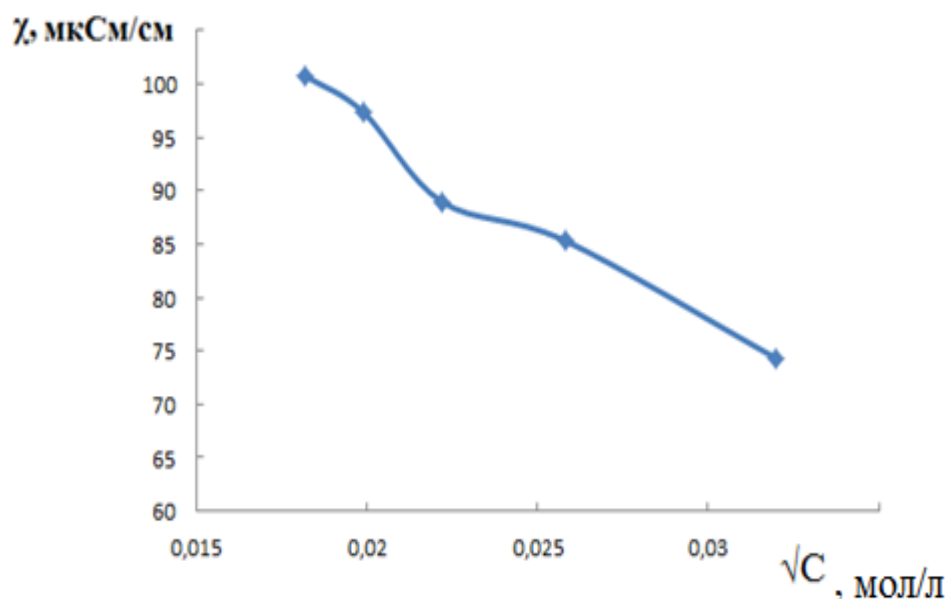
чуз аз зиёд шудани дараҷаи диссоциатсияи пайвастаи комплексӣ, инчунин ҷойивазшавии иони нитрати дохили сфера ба амал меояд.



Расми 3.2. - Вобастагии ҷараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаи комплекси $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ аз консентратсияи маҳлул дар ҳалқунандаи диметилсулфоксид дар ҳарорати 298K.

Ҷадвали 3.4. - Натиҷаҳо доир ба тағйирёбии ҷараёнгузаронии маҳлулҳои консентратсияшон гуногуни пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$ дар ҳалқунандаи диметилформамид. $T = 298 \text{ K}$.

Консентратсияи маҳлул, мол/л	Қимати χ , мкСм/см
$1,0 \cdot 10^{-4}$	74,30
$6,66 \cdot 10^{-4}$	85,33
$4,95 \cdot 10^{-4}$	88,96
$3,96 \cdot 10^{-4}$	97,34
$3,33 \cdot 10^{-4}$	100,75



Расми 3.3. - Вобастагии чараёнгузаронии маҳлулҳои пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$ аз концентратсияи маҳлул дар ҳалқунандаи диметилсулфоксид дар ҳарорати 298 К.

Натиҷаҳои бадастомада нишон доданд, ки қимати чараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда дар ҳалқунандаҳои диметилсулфоксид ва диметилформамид ба пайвастаҳои намуди ғайриэлектролит мансубанд. Бо баланд намудани ҳарорати таҷриба чараёнгузаронии молярӣ ба электролити намуди 1:1 рост меояд. Аз рӯи вобастагии қимати чараёнгузаронии молярӣ аз ҳарорат, қимати энергияи ғаълонокии пайвастаҳои комплекси ҳисобид карда шудаанд. Омӯзиши вобастагии қимати чараёнгузаронӣ аз концентратсияи маҳлул нишон дод, ки бо серобшавии маҳлул қимати μ зиёд мегардад, яъне бо зиёд шудани дараҷаи диссоциатсияи пайвастаи комплекси, инчунин ҷойивазшавии иони нитрати дохили сфера бо молекулаи лиганди органикӣ ба амал меояд.

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

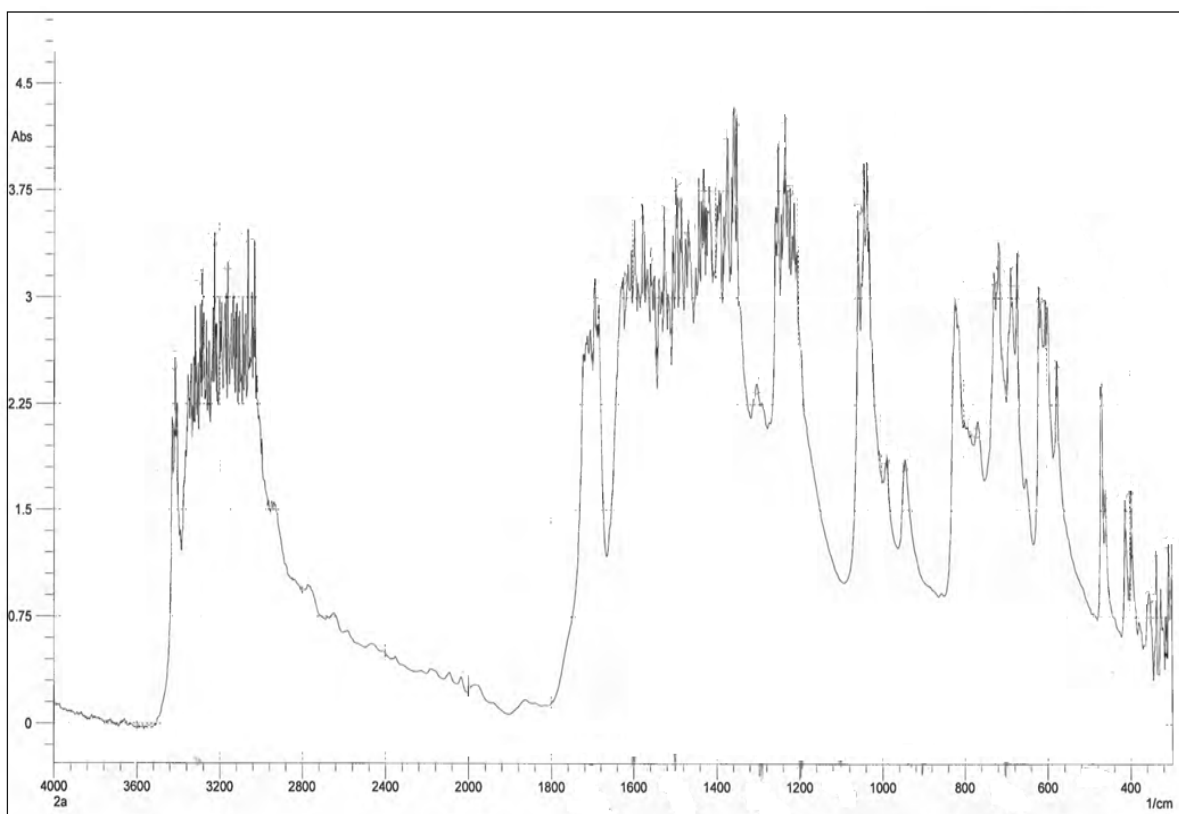
Барои муайян кардани атомҳои донорие, ки тавассути онҳо координатсияи лиганди органикӣ ба атоми металл – комплексҳосилкунанда ба амал меояд, мо таҳқиқотҳои спектроскопии инфрасурхи лиганди озод ва пайвастаҳои синтезкардари дар ҳудуди басомадҳои $4000-400\text{см}^{-1}$

гузаронидем. Бояд қайд кард, ки дар таркиби лиганди мазкур якчанд атомҳои донорӣ мавҷуданд, ки онҳо метавонанд бо атоми металл координатсия шаванд.

Муаллифони кори [101] спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплекси метилтиомочевинаро омӯхта, ба хулосае омаданд, ки метилтиомочевина банди M-S бо металлҳои Zn(II) ва Cd(II) ва банди M-N бо Pd(II), Pt(II) ва Cu(II) ҳосил мекунад. “Зимни омӯхтани спектрҳои пайвастаҳои комплекси тиомочевина $[(\text{NH}_2)_2\text{CS}]$ Ямагути [102] ба хулосае омаданд, ки ҳамаи металлҳои омӯхташуда (Pt, Pd, Zn ва Ni) банди M-S ҳосил мекунанд, зеро дар мавриди ҳосилшавии банди M-O басомади лаппишҳои CN афзуда, лаппишҳои валентии банди CS бе тағйирёбии лаппишҳои валентии гурӯҳи NH паст мешаванд”.

Кори муаллифони [103] ба омӯзиши пайвастаҳои координатсионии як қатор d- ва f- металлҳо бо лигандҳои амидӣ бахшида шудааст. Муаллифи кори мазкур маълумотҳои адабиётиро оид ба тааллуқ доштани рахҳои $\nu(\text{C}=\text{S})$ дар ҳудуди басомадҳои 1100cm^{-1} баҳснок мешуморад. Ақидаи муаллиф бештар ба қорҳои муаллифони [104,105] наздик аст ва барои тиомочевина лаппишҳои гурӯҳи $\nu(\text{C}=\text{S})$ -ро дар ҳудуди 1414, 734 ва 634 cm^{-1} дуруст мешуморанд. Мувофиқ ба ақидаҳои муаллифони кори [102+99] дар спектри инфрасурхи атсетилтиомочевина ба лаппишҳои банди (C=S) рахҳои дар ҳудуди 820, 732 ва 623 cm^{-1} тааллуқ доранд. Рахҳо дар ҳудуди 478 cm^{-1} ба лаппишҳои деформатсионӣ бо иштироки гурӯҳи (C=S) дохил мешаванд.

Спектри инфрасурхи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина дар кори муаллифони [106] оварда шудааст. Онҳо рахҳоро дар басомади 1710 ва 1690 cm^{-1} ба лаппишҳои гурӯҳи карбонилӣ мансуб донистаанд. Банди C=S дар ҳудуди басомадҳои 835, 732 ва 620 cm^{-1} аён мегарданд.



Расми 3.4. - Спектри инфрасурхи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина

Нобаробарии бандҳои C-N оид ба мавҷуд будани якчанд рахҳои лапишҳои валентии CN шаҳодат медиҳад ва онҳоро бо $\nu_{as}(\text{NCN})$, $\nu_s(\text{NCN})$, $\nu_{as}(\text{NCC})$, $\nu_s(\text{NCC})$ ифода меkunанд ва дар ҳудуди 1550 ва 1000; 1370 ва 835 cm^{-1} аён мегарданд. Дар ҳудуди 1865 cm^{-1} ва 1700 cm^{-1} рахҳои лапиши $\nu(\text{CO})$ пайдо мешаванд. Дар спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси $[\text{HgL}(\text{NO}_3)_3]$ раҳи ба лапишҳои гурӯҳҳои CN тааллуқдошта мавқеашон начандон зиёд тағйир ёфта, дар ҳудуди басомадҳои 1560 ва 1005; 1373 ва 852 пайдо мегарданд. Ин омили эксперименталӣ вобаста ба иштирок надоштани гурӯҳи CN дар координатсия бо симоб (II) маълумот медиҳад.

Дар ҷадвали 3.5. ададҳои мавҷии максимумҳои фурӯбарии лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лиганди мазкур оварда шудаанд.

Ҷадвали 3.5. - Ададҳои мавҷии максимумҳои фурӯбарии N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо он

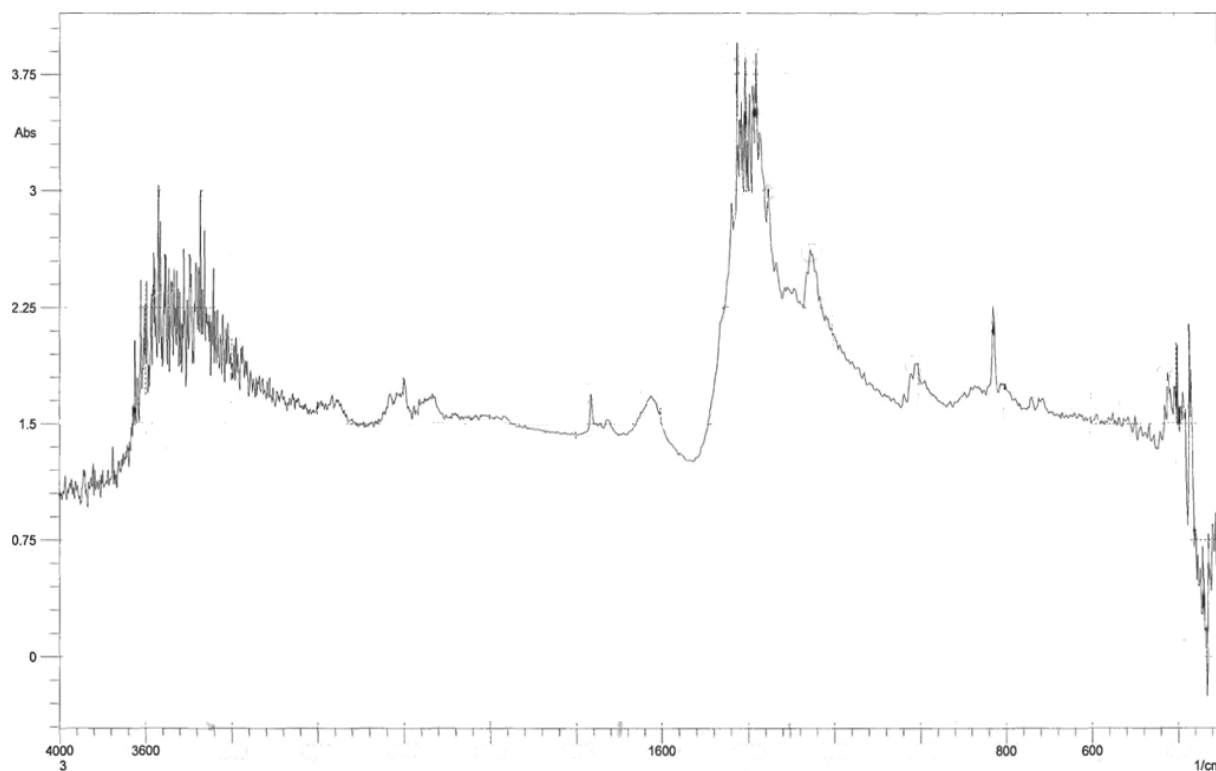
Худудҳои ададҳои мавҷӣ, см ⁻¹	Лиганд N – атсетилтиомочевина	[HgL ₂ (NO ₃) ₂]	[HgL ₄](NO ₃) ₂
1	2	3	4
400-600	460 (паст) 468 (баланд) 576 (баланд) 597 (баланд)	410 (паст) 468 (баланд) 555 (баланд)	
600-1000	620 (миёна) 650 (баланд) 667 (паст) 677 (баланд) 684 (баланд) 727 (баланд) 732 (баланд) 761 (паст) 835 (баланд) 943 (баланд) 987 (паст)	651 (миёна) 678 (паст) 732 (баланд) 802 (баланд) 852 (миёна) 884 (паст) 901 (паст) 958 (баланд)	825 (баланд) 950 (паст)
1000-1400	1026 (баланд) 1031 (баланд) 1210 (паст) 1231 (баланд) 1250 (баланд) 1300 (паст) 1340 (баланд) 1374 (баланд)	1049 (баланд) 1080 (паст) 1153 (баланд) 1234 (миёна) 1259 (баланд) 1264 (баланд) 1373 (баланд)	1045 (паст) 1247 (баланд) 1330 (паст) 1379 (баланд) 1411 (баланд)
1400-1800	1410 (баланд) 1415 (миёна) 1455 (миёна)	1402 (паст) 1408 (паст) 1458 (миёна)	1640 (миёна) 1700 (миёна)

Идомаи ҷадвали 8.			
	1490 (баланд) 1520 (баланд) 1540 (миёна) 1570 (баланд) 1605 (баланд) 1620 (паст) 1700 (баланд)	1512 (миёна) 1533 (миёна) 1568 (баланд) 1587 (баланд) 1602 (баланд) 1610 (паст) 1629 (паст) 1680 (баланд) 1699 (баланд)	
1800-4000	3110 (баланд) 3180 (паст) 3210 (баланд) 3340 (баланд)	2528 (паст) 2652 (паст) 3001 (баланд) 3169 (паст) 3188 (паст)	2445 (паст) 2582 (паст) 2968 (баланд) 3003 (баланд) 3508 (баланд)

Гурӯҳи атсетилии лиганд, ки дорои рахи баландшиддат дар ҳудуди басомадҳои 1700 см^{-1} мебошад, дар спектри пайвасти комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ дар ҳудуди 1699 см^{-1} аён гардида, дар спектри пайвасти комплекси $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ бошад, мавқеи худро тағйир надида, дар 1700 см^{-1} пайдо мешавад. Ин омили эксперименталӣ иштирок надида гурӯҳи атсетилиро дар координатсия бо симоб (II) исбот мекунад.

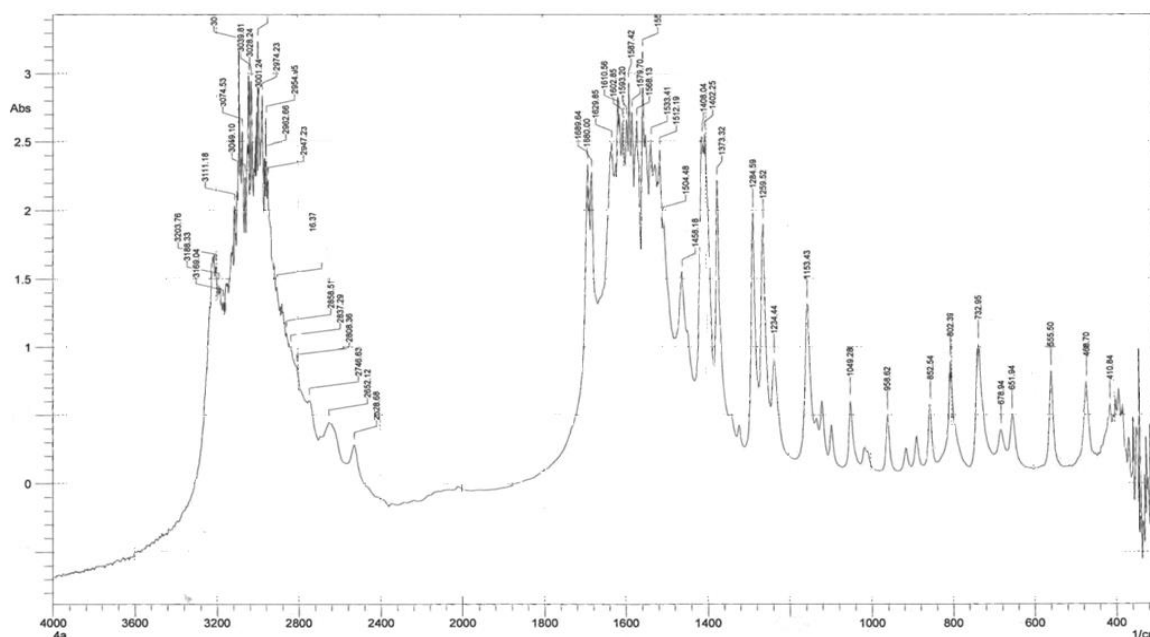
Дар спектрҳои инфрасурх барои иони озоди нитрат лаппишҳои ноҳамвори деформатсионӣ дар ҳудуди 830 см^{-1} , лаппишҳои валентӣ дар 1390 см^{-1} ва лаппиши ҳамвори деформатсионӣ дар 720 см^{-1} хос аст. Мувофиқ ба маълумоти қори [107] дар мавриди координатсия бо атоми металлҳо симметрияи иони нитрат паст мешавад. Дар мавриди бо дилхоҳ тариқа координатсияшавии лиганди нитратӣ бояд шаш рахҳои лаппиши дорои фаъолиятшон баробар мавҷуд бошанд. Лаппишҳои валентии иони нитрати координатсияшуда ба ду рах тақсим шуда, дар ҳудуди басомади лаппишҳои $1480\text{-}1530\text{ см}^{-1}$ ва $1250\text{-}1290\text{ см}^{-1}$ пайдо мешавад. Лаппиши

деформатсионии ноҳамворӣ дар ҳудуди $815-830\text{ см}^{-1}$ аён мегарданд. Дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплекси синтезкардашуда зимни бо ҳамтаъсиркунии $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ бо N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди $800-825\text{ см}^{-1}$ рахҳои ба лаппишҳои деформатсионии ноҳамвори иони нитрат аён мегарданд. Яъне, дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои комплекси лаппиши деформатсионии ноҳамвори иони нитрат каме ба самти ҳудуди басомадҳои паст мегузарад, раҳи лаппишҳои валентии ионҳои нитрат бошад, бетағйир монда, дар ҳудуди басомадҳои лаппишҳои валентии иони нитрати озод аён мегарданд. Рахҳои фурӯбарии интенсивнокиашон баланд дар ҳудуди 1373 см^{-1} ва 1379 см^{-1} дар спектри пайвастаи $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ба лаппишҳои аниони нитрат мувофиқат мекунанд.



Расми 3.5. - Спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Раҳи ба лаппишҳои гурӯҳи $\text{C}=\text{S}$ мансуб дар спектрҳои пайвастаҳои комплекси мавқеи ҳудро аз 17 см^{-1} то 31 см^{-1} тағйир дода, дар ҳудудҳои 852, 749 ва 651 аён мегарданд. Ин омили экспериментали аз координатсияи N – атсетилтиомочевина ба атоми симоб монодентатӣ тавассути гурӯҳи $\text{C}=\text{S}$ шаҳодат медиҳад.



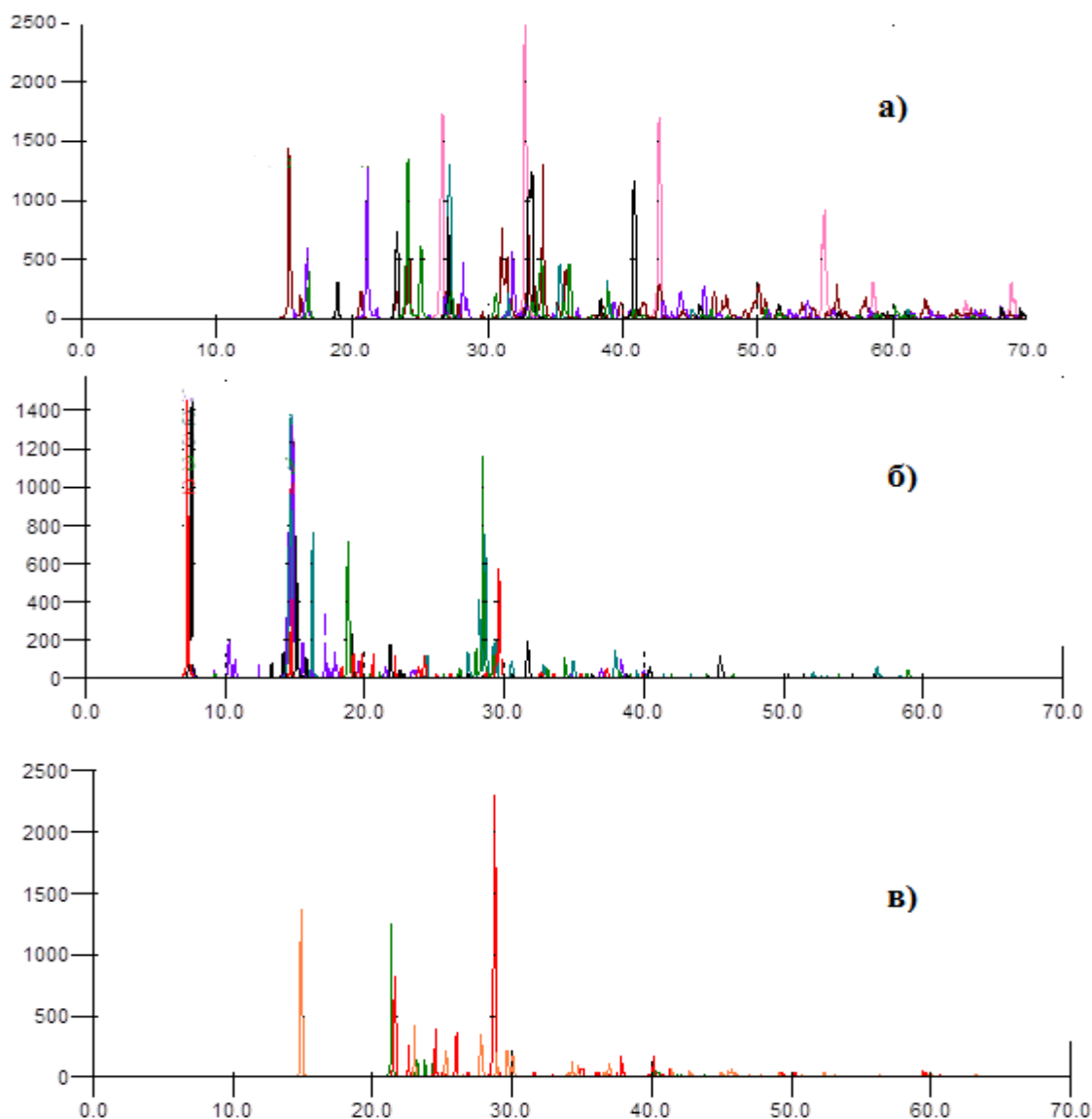
Расми 3.6. - Спектри инфрасурхи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$

Ҳамин тариқ, дар асоси таҳлили спектрҳои инфрасурхи N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо он маълум карда шуд, ки лиганди мазкур бо иони симоб тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ координатсия мешавад. Аминогурӯҳҳо ва гурӯҳи атсетилӣ, ки худ дорои атомҳои донорӣ мебошанд, дар координатсия бо атоми металл иштирок намеkunанд.

3.3. Таҳқиқотҳои рентгенографии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Бо мақсади муайян намудани параметрҳои ячeyкаи кристаллӣ, мо таҳқиқотҳои рентгенографии хокаи пайвастаҳои комплекси синтезкардашударо 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 дараҷаи баланди кристаллнокии пайвастаи комплексӣ шаҳодат медиҳад. Интенсивнокии рахҳо аз рӯи шкалаи 100 бала баҳо дода шудаанд. Шарҳдиҳии рентгенограммаҳо мувофиқ ба методикаи Липсон [108] гузаронида шуд. Параметрҳои ячeyкаи элементарӣ бо саҳеҳии $\pm 0,02^\circ \text{Å}$ муайян карда шуд. Дар расми 3.7 рентгенограммаҳои N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо он оварда шудаанд.

Аз расми 7 маълум аст, ки пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина кристаллнокии баланд дошта, дорои рефлексҳои зиёд мебошанд. Зимни таҳлили рентгенограммаҳо маълум гашт, ки нисбат ба намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ рахҳои характерноки пайвастаҳои комплексӣ дар киматҳои пасти 2θ аён мегарданд. Ин гуна тағйиротҳо бо иваз шудани параметри ячейка зимни иваз шудани ионҳои нитрат ба лиганди органикӣ алоқаманд мебошанд.



Расми 3.7. - Рентгенограммаҳо: а) $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$; б) $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; в) $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

Дар ҷадвалҳои 3.6.-3.8. натиҷаҳои шарҳдиҳии рентгенограммаи пайвастаи аввалаи $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибашон $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ ва $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$ оварда шудааст.

Чадвали 3.6. - Шархдиҳии рентгенограммаи пайвастан аввалии $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$

2-Theta	D- Spacing	Inten sity	Width	Confid ence	Match es
1	2	3	4	5	6
8.238	10.7236	54	0.110	97.9 %	
14.119	6.2678	26	0.130	92.3 %	
15.646	5.6590	28	0.099	95.0 %	
17.925	4.9444	120	0.115	100 %	
18.236	4.8607	98	0.123	100 %	
18.916	4.6875	183	0.118	100 %	E
19.097	4.6436	112	0.115	100 %	
19.437	4.5630	40	0.105	99.0 %	
20.746	4.2781	27	0.098	95.9 %	B
21.033	4.2202	26	0.100	95.8 %	B
22.439	3.9590	65	0.144	100 %	
24.180	3.6776	37	0.121	99.2 %	BF
25.451	3.4969	53	0.165	99.9 %	
25.983	3.4265	114	0.141	100 %	
26.400	3.3732	479	0.124	100 %	
27.233	3.2720	74	0.134	100 %	DF
27.745	3.2127	72	0.120	100 %	B
29.768	2.9988	45	0.148	100 %	
31.107	2.8727	25	0.121	96.7 %	B
31.502	2.8375	32	0.108	99.1 %	BD
32.005	2.7941	74	0.132	100 %	C
33.262	2.6913	31	0.117	96.0 %	EF
33.847	2.6462	150	0.150	100 %	F
35.579	2.5212	217	0.137	100 %	BCF
36.015	2.4917	129	0.134	100 %	F
36.724	2.4452	27	0.116	96.1 %	BC
37.463	2.3986	48	0.112	100 %	B

Идомаи ҷадвали 3.6.					
1	2	3	4	5	6
38.563	2.3327	232	0.130	100 %	B
39.204	2.2960	41	0.123	99.9 %	
40.737	2.2131	79	0.105	100 %	CF
40.998	2.1996	79	0.115	100 %	B
42.796	2.1113	100	0.142	100 %	AB
43.327	2.0866	140	0.140	100 %	E
45.738	1.9821	56	0.124	100 %	BEF
46.359	1.9569	26	0.104	96.7 %	C
47.723	1.9042	138	0.135	100 %	BEF
48.115	1.8896	146	0.138	100 %	D
48.657	1.8701	62	0.149	98.1 %	C
49.542	1.8384	99	0.187	100 %	B
49.980	1.8233	35	0.107	99.2 %	B
52.750	1.7339	87	0.148	100 %	C
56.205	1.6352	25	0.144	95.9 %	CD
56.679	1.6227	24	0.111	96.6 %	
57.741	1.5953	31	0.124	98.9 %	B
58.427	1.5782	35	0.152	99.3 %	AC
59.301	1.5570	56	0.135	100 %	BCE
60.658	1.5254	36	0.096	90.7 %	BF
63.030	1.4735	34	0.102	94.8 %	
63.812	1.4574	46	0.108	99.9 %	F
64.561	1.4428	41	0.095	98.9 %	CF
65.229	1.4291	30	0.115	98.2 %	ABF
65.536	1.4232	32	0.103	98.9 %	B
65.855	1.4171	35	0.101	99.7 %	BDF
66.652	1.4022	108	0.114	100 %	BCEF
68.710	1.3650	58	0.117	100 %	ABF

Чадвали 3.7. - Шархдихии рентгенограмм пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$

2-Theta	D-Spacing	Intensity	Width	Confidence	Matches
1	2	3	4	5	6
8.491	10.4055	62	0.074	98.8 %	
13.339	6.6322	29	0.085	92.8 %	C
14.605	6.0599	79	0.080	100 %	AB
14.866	5.9544	87	0.080	100 %	A
21.641	4.1030	21	0.077	91.5 %	A
21.901	4.0550	24	0.078	95.4 %	C
23.545	3.7753	23	0.080	90.4 %	A
23.807	3.7345	22	0.089	91.2 %	E
28.419	3.1380	50	0.077	96.2 %	D
28.629	3.1155	54	0.107	95.8 %	BCE
29.650	3.0104	37	0.071	97.7 %	E
30.239	2.9532	31	0.084	92.2 %	
39.415	2.2842	26	0.072	92.6 %	C
43.520	2.0778	25	0.085	94.6 %	
44.637	2.0284	32	0.088	98.8 %	CD
50.450	1.8074	36	0.078	98.6 %	B
63.473	1.4647	36	0.073	97.3 %	
68.405	1.3703	35	0.070	90.0 %	B

Чадвали 3.8. - Шархдихии рентгенограмм пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$

2-Theta	D-Spacing	Intensity	Width	Confidence	Matches
1	2	3	4	5	6
8.247	10.7122	43	0.083	90.9 %	
10.212	8.6552	50	0.104	98.0 %	

Идомаи ҷадвали 3.8.					
1	2	3	4	5	6
11.926	7.4147	48	0.078	99.0 %	
14.959	5.9173	74	0.111	99.9 %	C
17.028	5.2029	28	0.076	91.4 %	
21.401	4.1486	29	0.075	90.5 %	A
21.573	4.1158	34	0.077	90.1 %	B
22.853	3.8881	28	0.072	92.8 %	
25.830	3.4464	49	0.086	99.8 %	
26.391	3.3744	43	0.106	98.9 %	
26.940	3.3069	48	0.131	99.1 %	B
27.881	3.1974	52	0.119	99.3 %	C
28.501	3.1292	58	0.082	99.8 %	
28.721	3.1057	43	0.078	97.8 %	B
30.988	2.8835	74	0.086	100 %	
32.423	2.7590	65	0.086	99.8 %	
34.113	2.6261	32	0.079	96.5 %	BC
34.949	2.5652	37	0.075	99.3 %	B
36.171	2.4813	34	0.079	98.0 %	AB
38.807	2.3186	24	0.082	91.2 %	B
40.723	2.2138	24	0.074	92.3 %	B
40.984	2.2003	43	0.084	99.6 %	B
43.089	2.0976	33	0.081	97.5 %	
43.637	2.0725	30	0.083	95.4 %	A
43.972	2.0575	28	0.089	90.2 %	B
46.373	1.9564	35	0.087	98.4 %	B
50.170	1.8168	28	0.076	96.6 %	B
53.018	1.7258	29	0.085	95.0 %	B
55.598	1.6516	38	0.084	93.3 %	B
62.445	1.4860	56	0.087	99.7 %	BC

Идомаи ҷадвали 3.8.					
1	2	3	4	5	6
62.734	1.4798	41	0.080	96.5 %	B
65.764	1.4191	37	0.072	96.9 %	B

Дар ҷадвали 3.9. қимати параметрҳои ячейкаҳои элементарӣ, шумораи ададҳои формалӣ ва дигар параметрҳои панҷараҳои кристаллии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудааст.

Ҷадвали 3.9. - Натиҷаҳои кристаллографӣ ва параметрҳои структуравии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

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	Ортором б.	4,85	4,80
[HgL ₄](NO ₃) ₂	796,59	10,5	4,38	7,2	Ортором б.	4,63	4,62

Муқоисакунии штрихдиаграммаҳои пайвастаҳои комплекси симоб таркибашон [HgL₂(NO₃)₂] ва [HgL₄](NO₃)₂ нишон дод, ки тавсифи умумии рентгенограммаҳо тағйир наметабд ва ин оид ба изоструктурӣ будани онҳо шаҳодат медиҳад. Дар рентгенограммаҳо танҳо аз нав ҷойгиршавии интенсивнокии рефлексҳо ва тағйирёбии онҳо ба назар мерасад, ки ин омил дар бораи зиёд шудани масофаи миёни атомҳо дар самтҳои муайяни кристаллографӣ маълумот медиҳад.

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

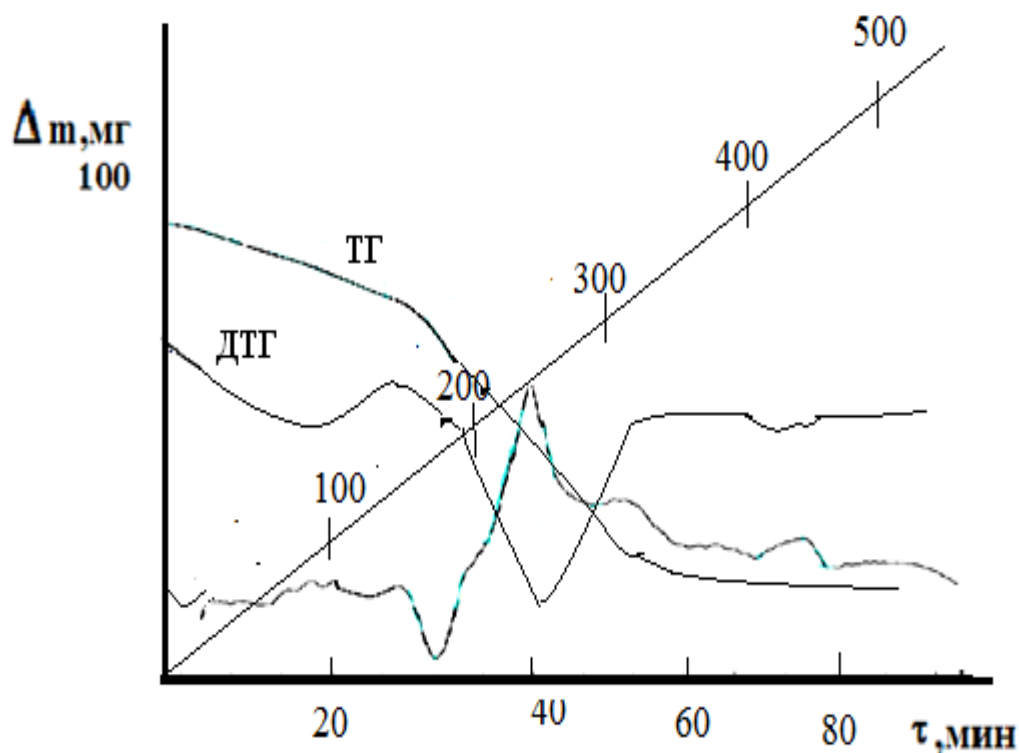
Дар таҳқиқотҳои замони муосир таҳлили термикӣ мақоми бештар пайдо кардааст, зеро он имконият медиҳад то маводҳо ва равандҳои гуногун дар фазоҳои гуногун, махсусан дар вакуум, таҳти фишор дар ҳудуди ҳароратҳои 190-2400 °C дар мавриди бақайдгирии хосиятҳои физикӣ-

химиявии моддаҳо ва ё маҳсули реаксияи онҳо таҳти омӯзиш қарор дошта бошанд [109].

Таваҷҷуҳ ба масъалаҳои табодули пайвастаҳои органикӣ ва пайвастаҳои комплекси металлҳои гуногун зимни термолиз сол то сол зиёд мегардад. Дар натиҷаи гузаштани раванди термолиз термоизомеризатсияи моддаҳо, ғудохташавӣ, реаксияҳои оксиду-барқароршавӣ, димеризатсия ва ё полимеризатсия, таҷзияшавӣ ва ҳосилшавии пайвастаҳои нав ба амал меояд, ки ба тғйирёбии масса ва хосиятҳои физикӣ-химиявӣ меорад. Инчунин, маводҳои техникии нав барои омӯзиши мубаддалшавии фазаҳои сахт вобаста ба як қатор омилҳо коркард карда шудаанд. Як қатор усулҳои математикии ҳисобкунии параметрҳои кинетикии термолизи ҳар гуна пайвастаҳо аз рӯи натиҷаҳои ҷенкуниҳои ғайриизотермикӣ бо истифода аз қачхатаҳои ТГ, ДТГ ва ТТД коркард карда шудаанд [110]. Аммо ин равандҳо барои аксар пайвастаҳои органикӣ ва пайвастаҳои комплексӣ бо иштироки онҳо то ҳол пурра омӯхта нашудаанд.

Дар мавриди иҷро намудани рисолаи диссертатсионӣ, мо раванди термотаҷзияи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ва пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лиганди мазкурро омӯхтем. Бо мақсади омӯзиши раванди термолизи пайвастаҳои нави комплексӣ мо қачхатаҳои ТГ, ДТГ ва ТТД-ро истифода намудем.

Дар расми 3.8 натиҷаҳои эксперименталии раванди термотаҷзияи N – атсетилтимочевина оварда шудааст.



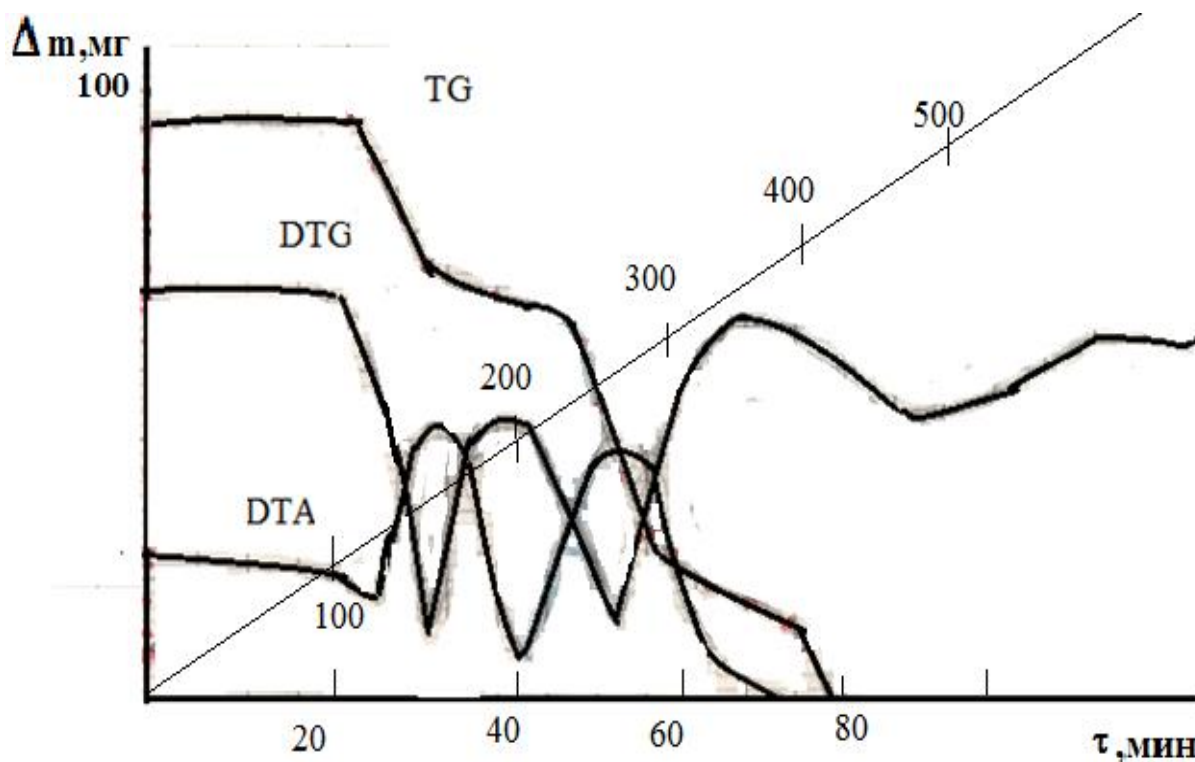
Расми 3.8. - Дериватограммаи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина.

Аз расми 3.8 бармеоҷад, ки дар қатъатаи ТТД-и пайвастаи мазкур дар ҳарорати 120⁰С эндоэффект начандон аён мешавад. Эҳтимол аст, дар ин ҳарорат аз таркиби N – атсетилтиомочевина об ва ё дигар омехтаҳо бухор мешаванд. Дар ҳарорати 170⁰С дар қатъатаи ТТД эндоэффекти дуҷум ба назар мерасад, ки он ба ғудохташавии N – атсетилтимочевина мувофиқ аст. Шуруъ аз ҳарорати 180⁰С раванди вайроншавии ҳароратии лиганд бо суръати баланд ба назар мерасад. Дар ин ҳолат камшавии массаи пайвасти органикӣ аз 4,5 мг то 2,98 мг ба вуқӯъ меояд. Мувофиқ ба натиҷаҳои қатъатаи ТГ ҳарорати таҷзияшавии N – атсетилтимочевинаро 170⁰С қабул кардан мумкин аст. Зимни муқоиса намудани раванди термотаҷзияи N – атсетилтимочевина бо таҷзияи N,N'-этилентиомочевина метавон қайд намуд, ки зимни гузаштан аз N – атсетилтимочевина ба N,N'-этилентиомочевина зиёдшавии ҳарорати ғудозиш дар мавриди термолиз дида мешавад. Ҳамин тариқ, ҳарорати ғудозиши N,N'-этилентиомочевина 210⁰С буда, ҳарорати ғудозиши N – атсетилтимочевина 170⁰С-ро ташкил медиҳад.

Бояд қайд намуд, ки раванди термолизи пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтимочевина аз раванди термотаҷзияи лиганди

координатсиянашуда, куллан фарқ мекунад.

Дар расми 3.9 дериватограммаи пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсепилтиомочевина таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ оварда шудааст.



Расми 3.9. - Дериватограммаи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$.

Раванди термолизи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ -ро ба се қитъа тақсим намуда, барои ҳар як зинаи термолиз параметрҳои мувофиқи термодинамикро ҳисоб намудем, ки он дар ҷадвали 3.10. оварда шудааст.

Ҷадвали 3.10. - Таснифоти раванди термолизи пайвастаи комплекси $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ мувофиқ ба қатъаҳои ТГ ва ДТГ.

Қитъаи термолиз ва талафоти масса	$T_{\text{оғоз.}}$, К	$T_{\text{мах.}}$, К	$T_{\text{охир.}}$, К	m_0 , мг	m_i , мг	Δm_i , ($m_0 - m_i$)	α_i ($\Delta m_i / \Delta m_{\text{ум}}$)	T, К
I $\Delta m_{\text{ум}} = 17,89$	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 $\Delta m_{\text{ум}} = 38,8\text{мг}$	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

Идомаи ҷадвали 3.10.								
III	563	593	653	43,31	52,63	0,1162	0,16889	570
$\Delta m_{\text{ум}} =$ 49,4 мг					48,56	0,349	0,5073	589
					47,14	0,4354	0,63285	620
					45,46	0,4886	0,71017	640

Аз расми 3.9 маълум мегардад, ки дар қатъҳои ТГ пайвасти комплексӣ дар ҳудуди ҳароратҳои 25-126 °С ягон тағйирёбии масса ба назар намерасад.

Қитъаи аввали термолизи пайвасти комплексӣ аз ҳарорати 126 °С оғоз мегардад. Дар ҳудуди ҳароратҳои 150-294 °С пайвасти комплексӣ 17,89 % массаи худро талаф медиҳад. Дуюм зинаи термолизи пайвасти комплексӣ дар ҳудуди ҳароратҳои 294-379 °С қарор дошта, дар ин ҳудуд пайвасти комплексӣ то 38,8 % массаи худро талаф медиҳад. Дар ин қитъаи термолиз пайвасти комплексӣ пайвасти дорои массаи молекулавӣ баробар ба 245,9 г/мол-ро гум мекунад. Зинаи сеюми термолиз ҳудуди ҳароратҳои 379-505 °С дар бар гирифта, дар ин ҳудуд пайвасти комплексӣ 49,4 % массаи худро гум мекунад.

Бо назардошти натиҷаҳои ҷадвали 3.10 барои ҳар як зинаи термолизи пайвасти комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ параметрҳои кинетикӣ бо истифода аз муодилаи Коутс – Редферн:

$$\ln\left[\frac{1 - (1 - \alpha)^{1-n}}{(1 - n) T^2}\right] = \frac{-E}{RT} + \ln\left[\frac{AR}{\Phi E}\right] \text{ барои } n \neq 1, \quad (1)$$

$$\ln\left[\frac{-\ln(1 - \alpha)}{T^2}\right] = \frac{-E}{RT} + \ln\left[\frac{AR}{\Phi E}\right] \text{ барои } n = 1, \quad (2)$$

ҳисобида шудаанд.

Дар ин муодила:

α – дараҷаи мубаддалшавии пайвасти комплексӣ дар ҳарорати додашудаи $T(K)$;

R – доимии универсалии газӣ;

E – энергияи фаъолнокӣ, кҶ/мол;

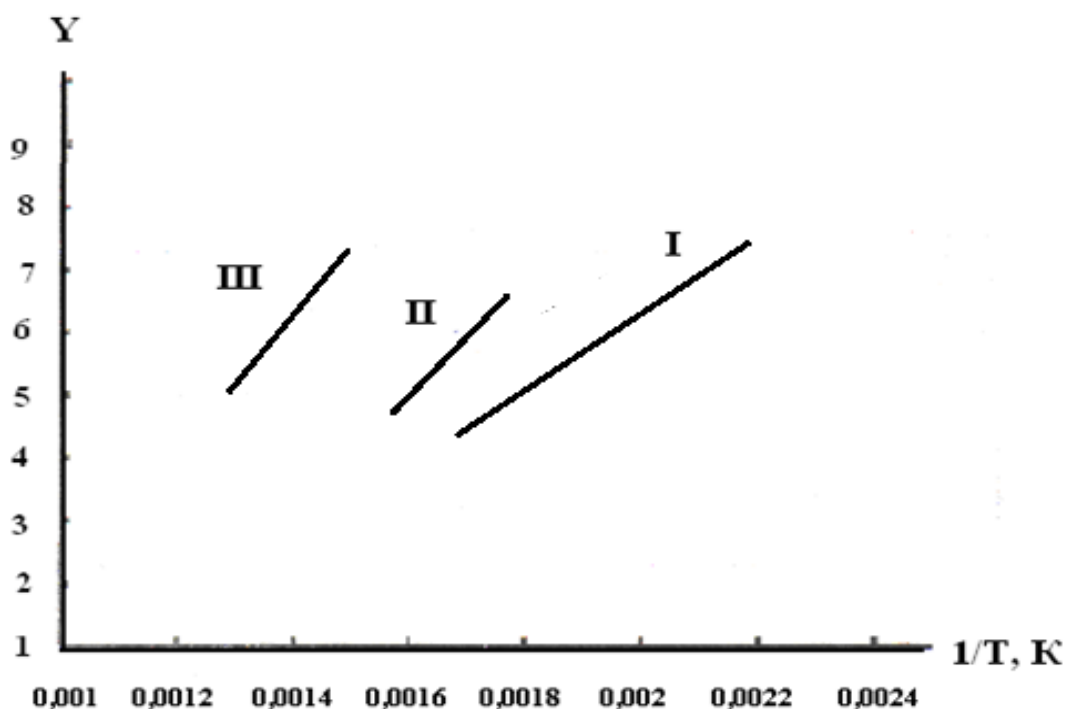
Φ – суръати гармкунӣ мебошанд.

Зимни ба қисмати чапи муодилаҳои (1) ва (2) қимати ҳисобидашудаи

α_i (ҷадвали 3.10.) ворид намуда, қимати $\ln\left[\frac{1-(1-\alpha)^{1-n}}{(1-n)T^2}\right]$ (1) ва ё $\ln\left[\frac{-\ln(1-\alpha)}{T^2}\right]$ (2),

графики вобастагии онро аз $1/T$ месозем. Аз рӯи кунҷи тамоили φ хати рост қимати энергияи фаъолнокиро мувофиқ ба муодилаи $E=-R\varphi$ ҳисоб намудем. Қимати собитҳои Аррениусро A (C^{-1}) аз рӯи порчаи хати рости ориданатара буранда муайян кардем.

Қиматҳои энергияи фаъолнокӣ ва собитҳои Аррениус барои ҳисоб намудани тавсифи термодинамикии раванди термолизи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]\cdot\text{H}_2\text{O}$ истифода бурда шудаанд. Дар ҷадвали 3.11. қиматҳои собитҳои термодинамикии (ΔS , ΔH ва ΔG) раванди термолизи пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудаанд.



Расми 3.10. - Вобастагии Y (ҳалли муодилаи Коутс-Редферн) аз $1/T$ раванди термолизи пайвастаи комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$; дар ин ҷо: $Y=\ln\left[\frac{1-(1-\alpha)^{1-n}}{(1-n)T^2}\right]$ ва ё $\ln\left[\frac{-\ln(1-\alpha)}{T^2}\right]$;

I – қитъаи якуми термолиз;

II – қитъаи дуюми термолиз;

III – қитъаи сеюми термолиз.

Ҷадвали 3.11. - Тавсифи термодинамикии раванди таҷзияи термикии пайвасти комплекси таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Қитъаи термолиз	Ҳисоб бо муодилаи Коутс – Редферн	E, кҶ/мол	$-\Delta H$, кҶ/мол	$-\Delta G$, кҶ/мол	ΔS , Ҷ/К·мол	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	$5,62 \cdot 10^5$

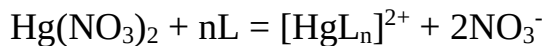
Дар иртибот ба ин, натиҷаҳои таҳқиқотҳои гузаронидашуда оид ба омӯзиши раванди термолизи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ва пайвасти комплекси он бо симоб (II) таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ нишон дод, ки дар натиҷаи координатсия ҳарорати термотаҷзияи пайвасти комплекси меафзояд. Муайян карда шудааст, ки зинаи якуми термотаҷзияи пайвасти комплекси бо ҷудо шудани молекулаҳои оби кристаллизатсионӣ алоқамадӣ дорад. Бо истифода аз муодилаи Коутс-Редферн функсияҳои термодинамикии пайвасти комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина барои ҳамаи қитъаҳои термолиз ҳисобида шудаанд. Қимати энергияи фаъолнокии зинаи якуми термотаҷзия ба 87,79 кҶ/мол баробар буда, зини гузаштан ба зинаи дуюми термотаҷзия ба 391,77 баробар мешавад. Ҳамин тариқ, собитҳои Аррениус дар зинаи якум $4,0 \cdot 10^5$ буда, дар зинаи дуюм ба $1,12 \cdot 10^8$ баробар мешавад, яъне бетартибии система 3 маротиба меафзояд.

3.5. Реаксияҳои ҳосилшавии пайвасти комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Мувофиқ ба таснифоти Пирсон симоб (II) ба кислотаҳои нарм дохил мешавад. Аз ин лиҳоз, он ба осонӣ метавонад бо лигандҳои дорои S^{2-} , RS^- (тиолҳо), ки ҳамчун асосҳои нарм дониста мешаванд, ба реаксия дохил шаванд. Ҷойивазшавии ионҳои нитрат бо молекулаи лиганди органикии N – атсетилтиомочевина аз намаки $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, ки ба сифати моддаи аввалаи

симоб гирифта шуд, ба осонӣ мегузарад. Реаксияи мазкур ҳамчун реаксияи мубодилаи лигандҳо бо иштироки лиганди «наrm» мегузарад. Бо дарназардошти таснифоти Пирсон:

$\text{Hg}^{2+} + \text{S}^{2-}$ (донор) $\rightarrow$ пайвастаи комплекси устувор



Аломатҳои кислотаҳои наrm мувофиқ ба таснифоти Пирсон, дорони якчанд хусусиятҳо мебошанд:

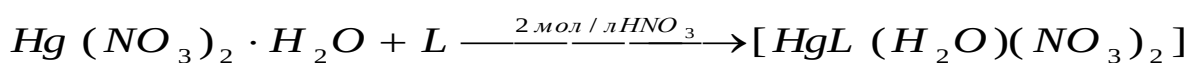
- Радиуси калони атоми элемент
- Қутбнокшавии баланд
- Эҳтимолияти бо ҳамтаъсиркунии ковалентӣ

Лиганди органикӣ тавассути атоми сулфур S, ки донори асосӣ аст, ба металл пайваст мешавад.

Дар асоси гуфтаҳои дар боло қайдшуда, шароитҳои оптималии синтези пайвастаҳои комплекси симоб (II)-ро бо N – атсетилтиомочевина коркард намудем. Таркиби пайвастаҳои комплекси ҳосилшуда бо усулҳои замонавии физикӣ-химиявии таҳлил ба монанди спектроскопияи ИС, кондуктометрӣ, термогравиметрӣ, таҳлили рентгенӣ-фазаӣ муайян ва исбот карда шуд.

Дар асоси таҳлилҳои мазкур мо тавонистем реаксияҳои имконпазири пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро пешниҳод намоем.

Таҳқиқотҳои гузаронидашуда нишон доданд, ки зимни бо ҳам таъсиркунии маҳлулҳои $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ бо маҳлули N – атсетилтиомочевина дар муҳити 2 мол/л HNO_3 дар таносубияти Me:L=0,5:1,45, кристаллҳои хурди рангашон хокистари паст ҳосил мешаванд. Таркиби пайвастаи мазкур ба пайвастаи як-координатсияшудаи таркибаш $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$ мувофиқат мекунад.



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

БОБИ 4. ОМУҶИШИ РАВАНДИ КОМПЛЕКСҲОСИЛШАВИИ СИМОБ (II) БО N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА ДАР МАҲЛУЛҲОИ ОБӢ

4.1. Муайян намудани потенциали стандартии электроди симоб-селективӣ

Барои омӯхтани раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсептилтиомочевина дар маҳлули обӣ электроди симоб-селективии халкогенидии навъи ХС-Hg-001 истифода карда шуд. Устувории химиявии мембранаи шишагини халкогенидӣ коршоямии давомнок, ҳассоснокии баландро, баҳусус дар мавриди кор кардан дар муҳитҳои хатарнок фароҳам месозад. Потенциали электроди симоб-селективӣ ба таври хаттӣ аз фаъолнокӣ (концентратсия) ионҳои симоб вобастагӣ дошта, бо муодилаи Нернст муайян карда мешавад:

$$E = E^0 + S \lg a_{\text{Hg}^{2+}}$$

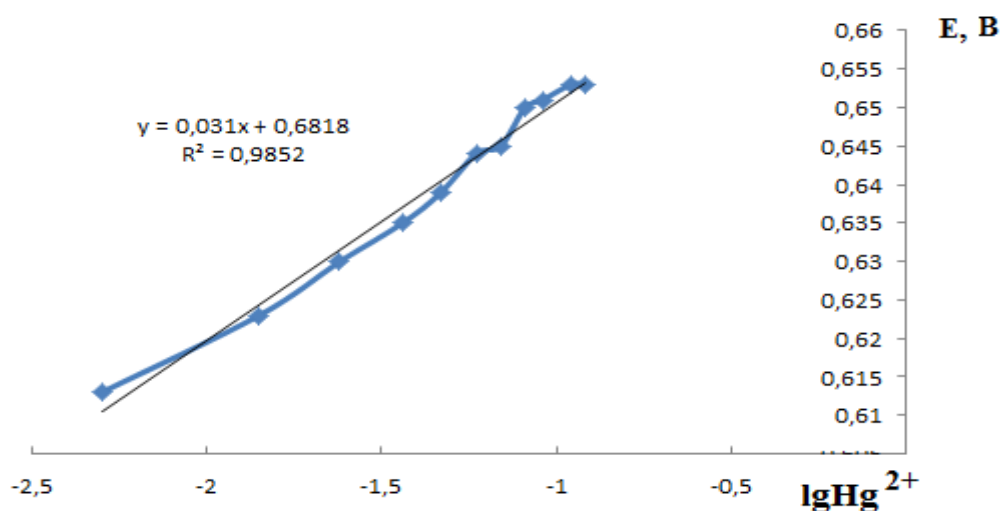
ки дар ин ҷо: E^0 – потенциали стандартии электрод, мВ;

S – нишебии тавсифи электрод, мВ/рНг;

$a_{\text{Hg}^{2+}}$ - фаъолнокии ионҳои симоб дар маҳлул.

Ба сифати электроди муқоисавӣ – электроди хлорнукрагин истифода карда шуд.

Барои муайян намудани потенциали стандартии электроди симоб-селективӣ усули графикаро истифода намудем. Усули мазкур дар сохтани графики ченақдор ва таҳлили вобастагии потенциали электроди индикаторӣ аз концентратсия (фаъолнокӣ) ионҳои симоб асос карда шудааст. Барои ин, силсила маҳлулҳои стандартии нитрати симоб (II) дар ҳудуди концентратсияи $1 \cdot 10^{-1}$ - $1 \cdot 10^{-6}$ мол/л тайёр намуда, потенциали электроди индикаториро нисбат ба электроди муқоисавии хлориднукрагин дар асбоби рН-метр чен намудем. Ченкуниҳоро дар ячейкаҳои аз ду зарф иборат буда, ки бо купруқчаи намакин пайваست карда шудаанд, гузаронидем. Дар асоси қиматҳои ба даст овардашуда графики вобастагии $E=f(C_{\text{Hg}^{2+}})$ сохтем.



Расми 4.1. - Вобастагии потенциали системаи электроди индикатории симоб (II) селективӣ аз $\lg$ консентратсияи ионҳои симоб.

Ҳамин тариқ, ба таври эксперименталӣ баргарданда будани электроди симоб-селективӣ муайян карда шуд, ки дар ҳарорати 298K он ба 0,618V баробар буда, мувофиқ ба қунии таъоил наздик ба қимати муодилаи Нернст (29,0) 31,0 В аст.

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

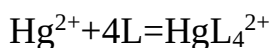
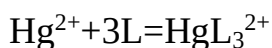
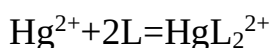
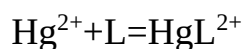
Собитаи устуворӣ аз ҳар гуна омилҳо, ба монанди электроманфӣят, нармаӣ ва ё саҳтии атомҳои лиганд ва иони металл, табиати лиганд, радиуси ионӣ ва заряди ядроии металл вобастагии калон дорад. Гузаронидани таҳқиқотҳо дар ин самт имконият медиҳад, то механизми ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ маълум карда шавад.

Титркунии потенциометрӣ ин худ усули муайянкунии нуқтаи охири титронидан ба шумор рафта, дар вобастагии қимати потенциали электроди индикаторӣ аз ҳаҷми маҳлули кории иловакарда асос карда шудааст. Қиёс бо усулҳои потенциометрии рост натиҷаҳои таҳқиқоти титронидани потенциометрӣ консентратсияи моддаи таҳлилшавандаро дуруст тавсиф медиҳанд, зеро аз ғайрароии онҳо вобастагӣ надоранд. Усулҳои титронидани потенциометрӣ имконият медиҳанд, то консентратсияи маҳлули моддаи таҳлилшаванда дар иштироки ионҳои ҳалалрасон муайян карда шаванд, дар он ҳолате агар маҳлули корӣ (титрант) бо моддаи таҳлилшаванда

ба таври селективӣ ба реаксия дохил шавад. Усули титронидани потенциометрӣ барои омӯзиши раванди комплексҳосилшавии иони металлҳо бо лигандҳои органикӣ ба таври васеъ истифода карда мешавад.

Потенсиали элементи галванӣ дар мавриди омӯзиши раванди комплексҳосилкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо ёрии асбоби pH-метри тамғаи pH-150 МИ чен карда шуд. Ченкуниҳо дар ячейкаҳои аз ду зарф иборат буда, ки бо купруқчаи намакин пайваست карда шудаанд, гузаронидем. Таҷҳизоти потенциометриро бо ёрии маҳлулҳои буферӣ дараҷабандӣ намудем. Ҳарорати ячейка бо ёрии термостати обӣ ($\pm 0,1^{\circ}\text{C}$) доимӣ нигоҳ дошта шудааст. Қимати потенциали электродии электроди индикаторӣ муддати 10-15 дақиқа чен карда шудааст. Концентратсияи мувозинатии моддаҳои аввала ва маҳсули реаксияро бо истифода аз барномаи KEV [87] ҳисоб намудем.

Реаксияҳои имконпазири комплексҳосилкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина чунинанд:



Аз рӯи натиҷаҳои эксперименталӣ, барномаи KEV қиматҳои дар таҷриба ба даст овардари бо қиматҳои назариявӣ ($E_{\text{таҷ.}}$ ва $E_{\text{наз.}}$) бо ҳам муқоиса мекунад. Дар ҳолати дуруст будани таҷриба барнома қиматҳои имконпазири собитҳои устувор ва ҳудудҳои бовариноки онро ҳисоб мекунад.

Бояд қайд кард, ки барои сода кардани таҳлил дар барномаи KEV имконияти сохтани графики (plot) натиҷаҳои эксперименталӣ ва ҳисобкардашуда вобаста ба рақами нуқтаи титронидан/рақами маҳлул фароҳам сохта шудааст. Бартарии барномаи KEV ба асос ёфта шудааст, ки он потенциали назариявиро ҳисоб намуда, бо натиҷаи титронидани потенциометрӣ муқоиса менамояд.

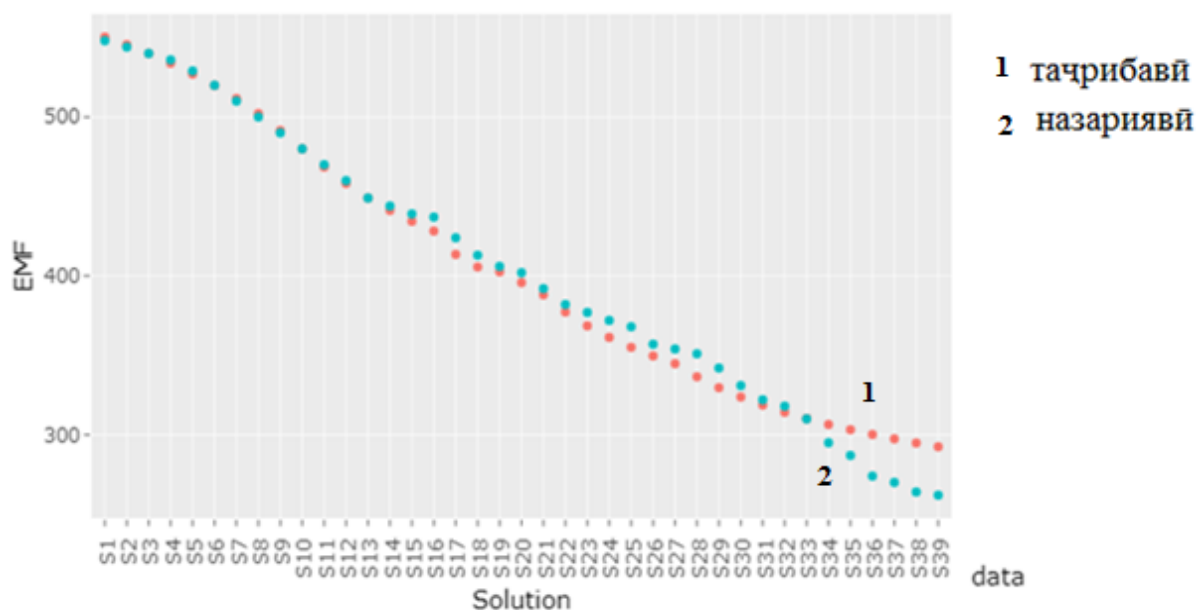
Таҳқиқотҳои гузаронидашуда нишон додаанд, ки потенциали электроди индикаторӣ зимни илова намудани лиганди органикии N – атсетилтиомочевина ба маҳлули нитрати симоб (II) паст мешавад. Пастшавии қимати потенциал аз раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина шаҳодат медиҳад.

Дар ҷадвалҳои 4.1. – 4.5. натиҷаҳои эксперименталии титркунии потенциометрии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO_4 ва ҳароратҳои гуногун оварда шудаанд.

Ҷадвали 4.1. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 278 К; $C_{\text{Hg}^{2+}}=1 \cdot 10^{-4}$ 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	$C_{\text{Hg}^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[\text{Hg}^{2+}] \cdot 10^5$, 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

Идомаи ҷадвали 4.1.				
1	2	3	4	5
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

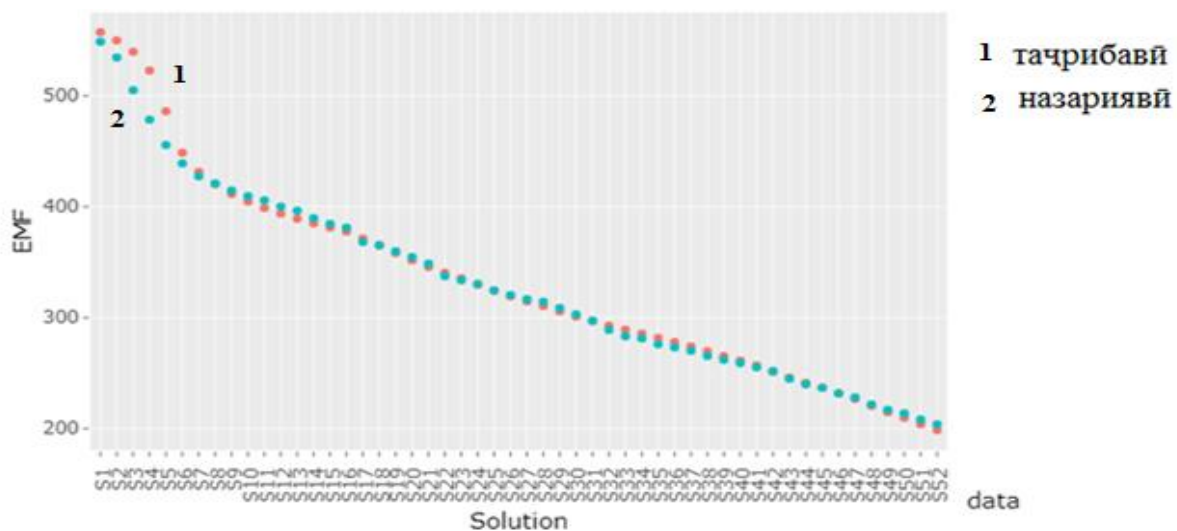


Расми 4.2. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина $E_{\text{таҷ.}}$ ва $E_{\text{наз.}}$ дар ҳарорати 278 К; $J = 0,1$ мол/л NaClO_4 ;

Ҷадвали 4.2. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288 К; $C_{\text{Hg}^{2+}} = 1 \cdot 10^{-4}$ мол/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ мол/л; $J = 0,1$ мол/л NaClO_4

E, мВ	$C_L \cdot 10^5$, мол/л	$C_{\text{Hg}^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[\text{Hg}^+] \cdot 10^5$, мол/л	$[\text{L}] \cdot 10^5$, мол/л
1	2	3	4	5
539,0	4,990	9,980	0,185	1,534
533,0	9,960	9,960	0,287	1,938
524,0	14,911	9,940	0,439	2,751
514,0	19,841	9,921	0,608	4,060
504,0	24,752	9,901	0,777	5,992
490,0	29,644	9,881	1,014	10,332
477,0	34,517	9,862	1,233	17,137
462,0	39,370	9,843	1,487	30,725
444,0	44,204	9,823	1,791	61,909
434,0	49,020	9,804	1,960	91,366
426,0	53,816	9,785	2,096	124,741
390,0	63,353	9,747	2,704	506,442

Идомаи ҷадвали 4.2.				
1	1	1	1	1
410,0	58,594	9,766	2,366	232,522
374,0	68,093	9,728	2,974	944,024
354,0	72,816	9,709	3,313	2056,124
337,0	77,519	9,690	3,600	3984,792
309,0	82,205	9,671	4,073	11849,457
292,0	86,873	9,653	4,361	22964,382
283,0	91,522	9,634	4,513	32597,522
275,0	96,154	9,615	4,648	44505,234
267,0	100,768	9,597	4,783	60762,774
257,0	105,364	9,579	4,952	89674,863
248,0	109,943	9,560	5,104	127291,833
242,0	114,504	9,542	5,206	160775,704
237,0	119,048	9,524	5,290	195315,624
233,0	128,083	9,488	5,358	228218,179
224,0	172,253	9,311	5,510	323951,544
216,0	214,808	9,141	5,645	442289,428
212,0	255,835	8,977	5,713	516796,794
209,0	295,414	8,818	5,764	580804,202
205,0	352,234	8,591	5,831	678645,544



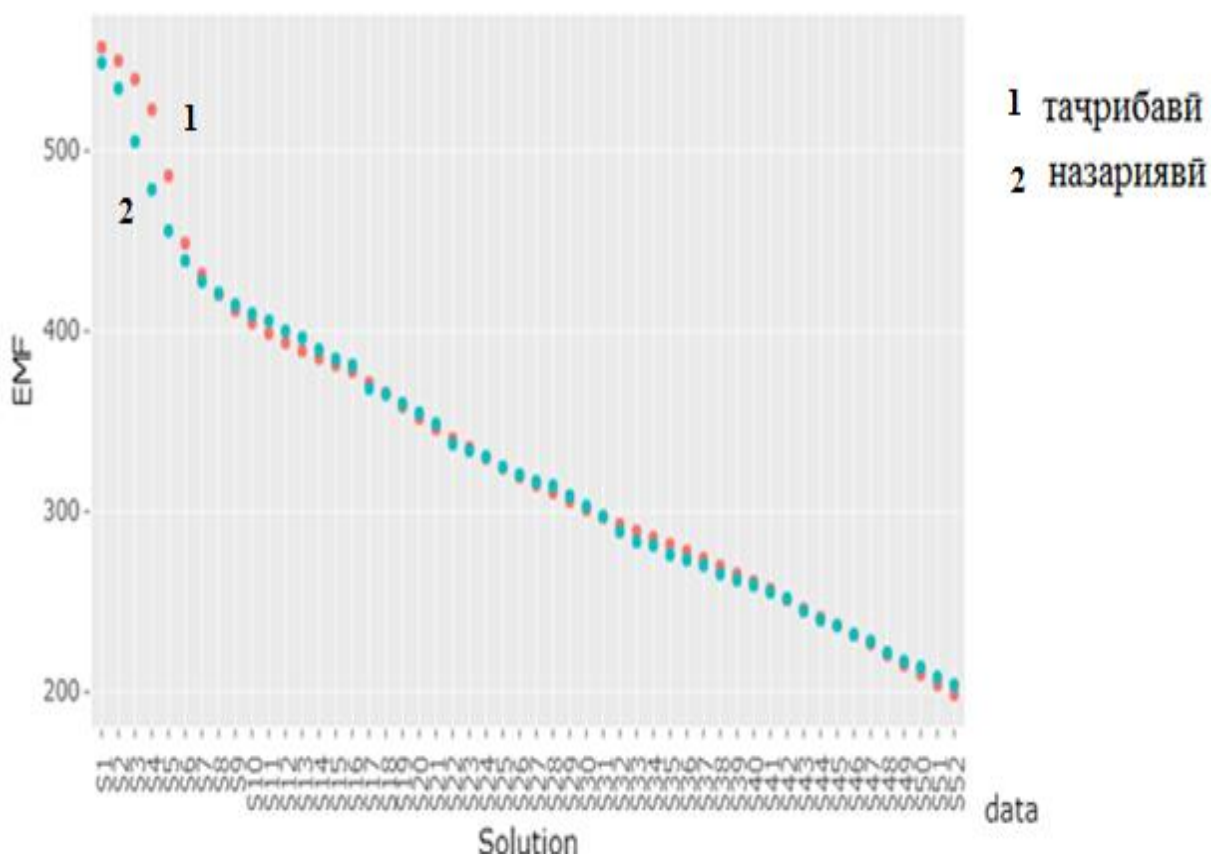
Расми 4.3. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина Еэкс. ва Еназ. (Observed, Calculated) дар ҳарорати

288 К; J = 0,1 мол/л NaClO₄

Чадвали 4.3. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К; C_{Hg²⁺} = 1·10⁻⁴ мол/л; C_L = 1·10⁻² мол/л; J = 0,1 мол/л NaClO₄

E, мВ	C _L ·10 ⁵ , мол/л	C _{Hg²⁺} ·10 ⁵ , мол/л	[Hg ⁺]·10 ⁵ , мол/л	[L]·10 ⁵ , мол/л
1	2	3	4	5
538,0	4,990	9,980	0,118	1,313
534,0	9,960	9,960	0,185	1,534
526,0	14,911	9,940	0,321	2,095
520,0	19,841	9,921	0,422	2,646
510,0	24,752	9,901	0,591	3,905
499,0	29,644	9,881	0,777	5,992
488,0	34,517	9,862	0,963	9,194
472,0	39,370	9,843	1,233	17,137
457,0	44,204	9,823	1,487	30,725
447,0	49,020	9,804	1,656	45,345
435,0	53,816	9,785	1,859	72,338
427,0	58,594	9,766	1,994	98,762
416,0	63,353	9,747	2,180	151,540
407,0	68,093	9,728	2,332	215,108
402,0	72,816	9,709	2,417	261,321
395,0	77,519	9,690	2,535	343,160
389,0	82,205	9,671	2,636	433,428
384,0	86,873	9,653	2,721	526,542
381,0	91,522	9,634	2,772	591,757
380,0	96,154	9,615	2,789	615,243
378,0	105,364	9,579	2,822	665,048
366,0	128,083	9,488	3,025	1060,945
358,0	150,376	9,398	3,160	1448,503
351,0	172,253	9,311	3,279	1902,141
341,0	193,727	9,225	3,448	2807,216

Идомаи ҷадвали 4.3.				
1	1	1	1	1
336,0	214,808	9,141	3,532	3410,299
331,0	235,507	9,058	3,617	4142,943
326,0	255,835	8,977	3,701	5032,984
323,0	275,801	8,897	3,752	5656,340
322,0	295,414	8,818	3,769	5880,833
316,0	333,622	8,666	3,870	7427,774
312,0	370,528	8,518	3,938	8679,045
304,0	406,198	8,375	4,073	11849,457
297,0	440,692	8,237	4,192	15560,432
288,0	474,068	8,104	4,344	22087,749

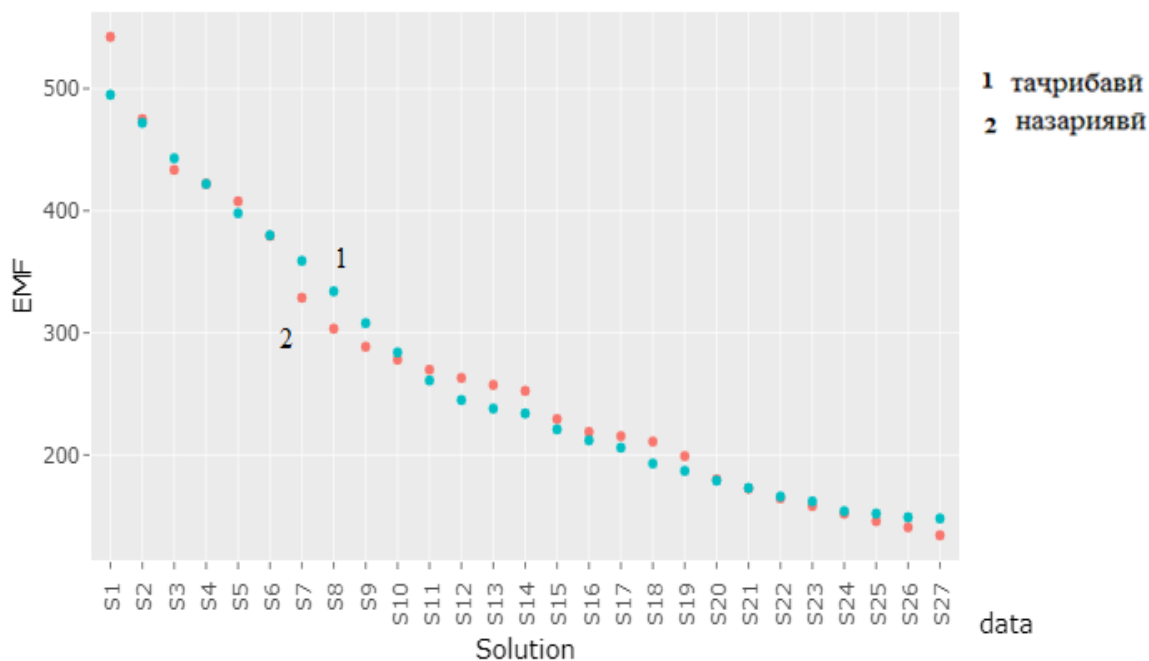


Расми 4.4. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина Еэкс. ва Еназ. (Observed, Calculated) дар ҳарорати 298 К; J = 0,1 мол/л NaClO₄

Ҷадвали 4.4. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 308K; $C_{Hg^{2+}}=1 \cdot 10^{-4}$ мол/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ мол/л; $J = 0,1$ мол/л $NaClO_4$

E, мВ	$C_L \cdot 10^5$, мол/л	$C_{Hg^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[Hg^+] \cdot 10^5$, мол/л	$[L] \cdot 10^5$, мол/л
522,0	4,990	9,980	0,321	2,095
515,0	9,960	9,960	0,4394	2,751
507,0	14,911	9,940	0,574	3,756
498,0	19,841	9,921	0,726	5,331
479,0	24,752	9,901	1,048	11,169
469,0	29,644	9,881	1,217	16,483
457,0	34,517	9,862	1,419	26,295
443,0	39,370	9,843	1,656	45,345
430,0	44,204	9,823	1,876	75,209
418,0	49,020	9,804	2,079	119,980
402,0	53,816	9,785	2,349	223,646
375,0	58,594	9,766	2,805	639,661
352,0	63,353	9,747	3,194	1565,764
334,0	68,093	9,728	3,498	3154,901
316,0	72,816	9,709	3,803	6356,901
285,0	77,519	9,690	4,327	21244,580
267,0	82,205	9,671	4,631	42806,308
250,0	86,873	9,653	4,918	82959,113
234,0	91,522	9,634	5,189	154638,314
226,0	96,154	9,615	5,324	211126,919
225,0	100,768	9,597	5,341	219506,267
220,0	123,574	9,506	5,425	266663,447
216,0	145,951	9,416	5,493	311585,143
210,0	189,464	9,242	5,594	393547,012
206,0	231,397	9,074	5,662	459843,309
203,0	291,519	8,834	5,713	516796,794
200,0	366,894	8,532	5,764	580804,202

Идомаи ҷадвали 4.4.				
197,0	454,173	8,183	5,814	652739,191
194,0	549,922	7,800	5,865	733583,624

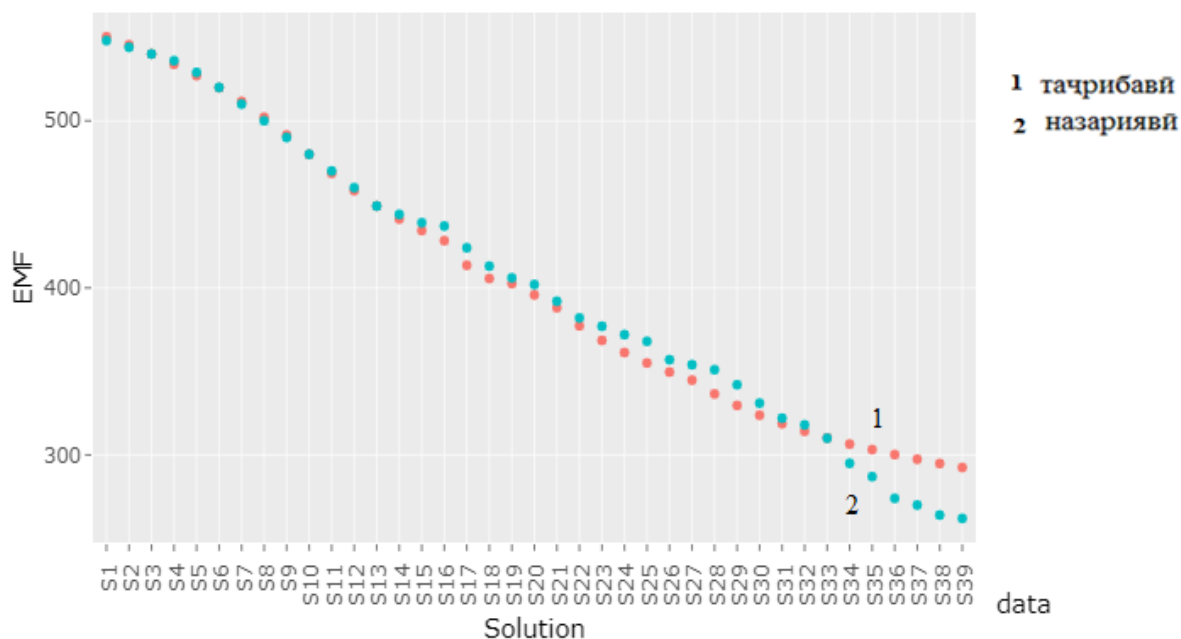


Расми 4.5. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина Еэкс. ва Еназ. (Observed, Calculated) дар ҳарорати 308 К; J = 0,1 мол/л NaClO₄

Ҷадвали 4.5. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 318 К; C_{Hg²⁺}=1·10⁻⁴мол/л; C_L = 1·10⁻² мол/л; J = 0,1 мол/л NaClO₄

Е, мВ	C _L ·10 ⁵ , мол/л	C _{Hg²⁺} ·10 ⁵ , мол/л	[Hg ⁺]·10 ⁵ , мол/л	[L]·10 ⁵ , мол/л
1	2	3	4	5
507,0	4,990	9,980	2,078	1,885
497,0	9,960	9,960	3,211	2,099
490,0	14,911	9,940	4,176	6,566
466,0	19,841	9,921	4,997	10,546
460,0	24,752	9,901	6,159	15,346
446,0	29,644	9,881	7,250	20,049
435,0	34,517	9,862	8,082	24,841
422,0	39,370	9,843	8,639	29,639

Идомаи ҷадвали 4.5.				
1	2	3	4	5
408,0	44,204	9,823	9,009	34,446
395,0	49,020	9,804	9,254	39,255
382,0	53,816	9,785	9,413	44,055
369,0	58,594	9,766	9,514	48,842
349,0	63,353	9,747	9,583	53,613
333,0	68,093	9,728	9,593	58,369
320,0	72,816	9,709	9,598	63,109
306,0	77,519	9,690	9,588	67,831
292,0	82,205	9,671	9,572	72,534
272,0	86,873	9,653	9,558	77,220
255,0	91,522	9,634	9,548	81,888
246,0	96,154	9,615	9,516	86,538
238,0	100,768	9,597	9,470	91,171
227,0	105,364	9,579	9,387	95,785
210,0	109,943	9,560	9,301	100,382
200,0	114,504	9,542	9,217	104,961
194,0	119,048	9,524	9,134	109,524
192,0	123,574	9,506	9,054	114,068
190,0	128,083	9,488	8,972	118,596
189,0	137,051	9,452	8,815	127,599
183,0	167,910	9,328	8,663	158,582
179,0	189,464	9,242	8,516	180,222



Расми 4.6. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина $E_{таҷ.}$ ва $E_{наз.}$ (Observed, Calculated) дар ҳарорати 318 K; $J = 0,1$ мол/л $NaClO_4$.

Новобаста бар ҳарорати гузаронидани таҷриба бо илова намудани N – атсетилтиомочевина ба системае, ки электроди симобӣ дорад, потенциали электродӣ паст мешавад. Ин омили эксперименталӣ доир ба гузариши раванди комплексҳосилшавӣ миёни комплексҳосилкунанда ва лиганди органикӣ шаҳодат медиҳад. Бояд қайд кард, ки потенциали система вобаста ба ҳарорати таҷриба аз 320 то 25 мВ тағйир меёбад, ки омили мазкур оид ба ҳосилшавии пайвастаҳои устувори комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина маълумот медиҳад. Дар асоси қиматҳои ба даст овардаи натиҷаҳои титркунии потенциометрӣ графики вобастагии ΔE аз консентратсияи N – атсетилтиомочевина (L) дар ҳар як лаҳзаи титронидан сохта шуд. Нишон дода шуд, ки зимни титронидани тағйирёбии потенциал новобаста ба ҳарорат дида мешавад.

Натиҷаҳои эксперименталии ба даст овардашуда барои муайян кардани собатаҳои устувори пайвастаҳои комплекси симоб (II) N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1 мол/л $NaClO_4$ дар ҳароратҳои гуногун истифода карда шудаанд.

Дар ҷадвали 4.6. қимати собатаҳои умумии устувори заррачаҳои

комплексии ҳосилшудаи симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди ҳароратҳои 278-318 К оварда шудаанд.

Ҷадвали 4.6. - Қимати собитаҳои ҳосилшавии умумии заррачаҳои комплексии Hg (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318 К дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO₄

T, K	$\lg\beta_1([HgL]^{2+})$	$\lg\beta_2([HgL_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([HgL_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([HgL_4]^{2+})$
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

Аз рӯи қиматҳои ба даст оварда маълум гашт, ки бо зиёд шудани ҳарорати таҷриба қиматҳои собитаҳои умумии ҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина паст мешаванд. Омили мазкур оид ба экзотермӣ будани раванди комплексҳосилшавӣ миёни ионҳои симоб (II) ва N – атсетилтиомочевина шаҳодат медиҳад. Ҳамин тариқ, собитаи заррачаи якуми комплексӣ дар ҳарорати 278 К ба 5,8 баробар буда, дар ҳарорати 288 он ба 5,74 баробар мешавад, яъне 1,01 маротиба кам мешавад. Собитаи заррачаи дуюми комплексӣ дар ҳарорати 278 К ба 14,26 баробар буда, дар ҳарорати 318К ба 13,21 баробар мешавад, яъне камшавӣ то 1,08 маротиба ба назар мерасад.

Зимни муқоиса намудани қиматҳои собитаҳои умумии устувории пайвастаҳои комплексии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо натиҷаҳои адабиёт маълум гашт, ки дар маҳлул пайвастаҳои устувори атсетилтиомочевинагии симоб (II) ба таври зинагӣ ҳосил мешаванд. Муайян карда шудааст, ки устувории пайвастаҳои комплексии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина нисбат ба пайвастаҳои комплексии нукра бо лиганди мазкур зиёдтар аст. Ҳамин тариқ қимати $\lg\beta_1$ барои заррачаҳои комплексии Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К ба 5,32 баробар буда, барои пайвастаи комплексии нукра (I) бо лиганди мазкур ба 4,94 [66] баробар

аст. Муқоисакунии қимати собитаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина бо қиматҳои собитаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси рений (V) бо лиганди мазкур нишон дод, ки устувории пайвастаҳои комплекси атсетилтиомочевинагии симоб (II) нисбат ба пайвастаҳои комплекси атсетилтиомочевинагии рений (V) устувор аст. Ҳамин тариқ, қимати pK_1 барои пайвастаи комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288K ба 4,12 баробар буда, барои пайвастаи комплекси симоб (II) бо лиганди мазкур ба 5,74 баробар аст. Ин омили эксперименталӣ исботи он аст, ки симоб (II) нисбат ба рений (V) ба раванди комплексҳосилшавӣ бештар қобилият дорад.

Дар мавриди ҳисоб намудани қимати собитаҳои зинагии устуворӣ бо истифода аз қимати собитаҳои умумии устуворӣ маълум мегардад, ки бо зиёд шудани молекулаи лиганди органикӣ қимати собитаҳои зинагии ҳосилшавӣ ба таври гуногун тағйир меёбанд, яъне қонуниятҳои муайян мавҷуд нест, ки омили мазкур ба табиати металл ва лиганди органикӣ алоқаманд аст. Аммо бо зиёд шудани ҳарорати таҷриба ҳамаи собитаҳои зинагии ҳосилшавӣ паст мешаванд, ва ин омил экзотермӣ будани раванди комплексҳосилшавиро исбот мекунад. Дар ҷадвали 4.7. қимати собитаҳои зинагии устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои гуногун оварда шудаанд.

Ҷадвали 4.7. - Қимати собитаҳои зинагии заррачаҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318 K дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO_4

T, K	$\lg K_1$	$\lg K_2$	$\lg K_3$	$\lg K_4$
278	$5,80 \pm 0,05$	$8,46 \pm 0,02$	$3,6 \pm 0,02$	$3,63 \pm 0,07$
288	$5,74 \pm 0,13$	$8,38 \pm 0,08$	$3,52 \pm 0,04$	$3,49 \pm 0,03$
298	$5,32 \pm 0,52$	$8,66 \pm 0,12$	$3,17 \pm 0,02$	$3,84 \pm 0,14$
308	$5,15 \pm 0,03$	$8,59 \pm 0,06$	$3,15 \pm 0,06$	$3,32 \pm 0,32$
318	$4,96 \pm 0,04$	$8,25 \pm 0,13$	$2,9 \pm 0,02$	$3,73 \pm 0,17$

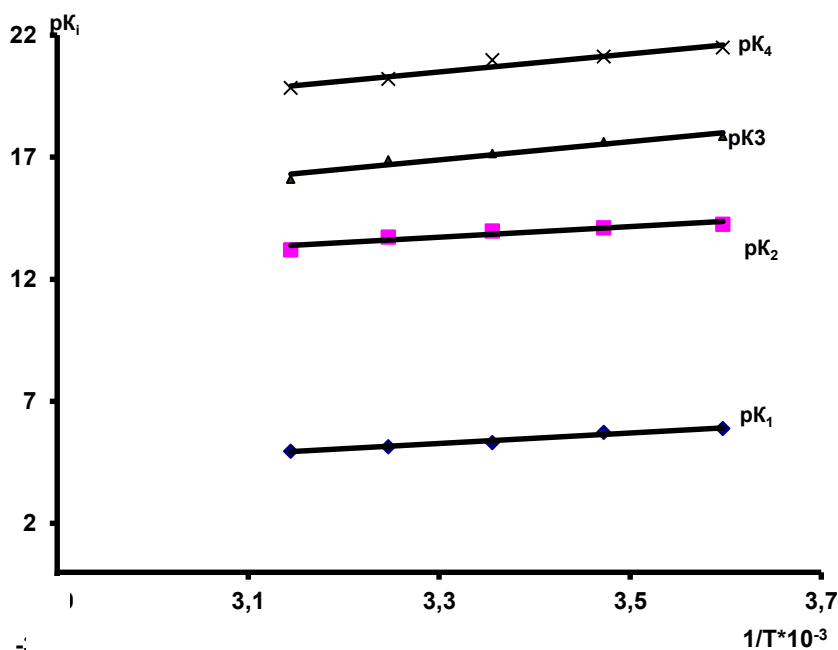
Барои реаксияи комплексҳосилшавӣ донишҷӯи тағйирёбии

функсияҳои термодинамикӣ бисёр муҳим аст. Бо истифода аз муодилаи Кларк-Глю [96] мо ба таври графикӣ қиматҳои ΔH ва ΔG реаксияҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II)-ро бо N – атсетилтиомочевина муайян намудем.

$$\lg = -\frac{\Delta G^0}{R \cdot 298,15 \cdot 2,3} + \frac{\Delta H}{R \cdot 2,3} \left[\frac{1}{298,15} - \frac{1}{T} \right]$$

Дар расми 5 вобастагиҳои $\lg\beta_i = f(1/T)$ барои системаи Hg(II) – N – атсетилтиомочевина – 0,1 мол/л NaClO₄ оварда шудааст.

Аз рӯйи тангенс кунчи хамиши вобастагиҳои $\lg\beta_i = f(1/T)$ (расми 4.7.) қимати ΔH -ро муайян карда, қимати ΔS -ро аз рӯи порчаи тири ординатаро бурандаи ин вобастагиҳо маълум кардем. Энергияи Гиббс аз рӯи муодилаи $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ ҳисоб карда шуд.



Расми 4.7. - Вобастагии $\lg\beta_i = f(1/T)$ барои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳити 0,1 мол/л HNO₃ дар ҳароратҳои 278-3318К.

Аз расми 4.7. бармеояд, ки дар ҳосилшавии чор заррачаи комплексӣ дар ҳудуди ҳароратҳои 278-318 К вобастагиҳои мазкур хати рост мебошанд. Қиматҳои ΔG , ΔH ва ΔS ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҷадвали 4.8. оварда шудааст.

Ҷадвали 4.8. - Термодинамикаи 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 бузургиҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавӣ аз он шаҳодат медиҳанд, ки комплексҳосилкунии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина экзотермӣ мебошад. Қимати манфии энталпия дар ҳама зинаҳои комплексҳосилшавӣ ба он ишора мекунад, ки банди Hg-L нисбат ба банди Hg-NO₃⁻ устувортар мебошад. Зимни ворид гаштани молекулаҳои лиганди органикӣ ба сфераи дохилии пайвастаҳои комплексӣ қонунии камшавии қимати ΔH ба назар мерасад. Тафовут бо қимати энталпия, қимати энтропия ΔS дар мавриди комплексҳосилшавӣ аз манфӣ ба мусбат тағйир меёбад. Тағйирёбии энтропия дар раванди комплексҳосилшавиро метавон бо ду нуқтаи назар шарҳ дод: қимати манфии ΔS бо камшавии шумораи заррачаҳо дар мавриди комплексҳосилшавӣ алоқаманд аст ва ΔS қимати мусбат дар мавриди озод шудани молекулаҳои ҳалкунанда аз қабатҳои солватии ионҳои марказӣ ва лигандҳо дар мавриди координатсия. Омили мазкур аз ҷиҳати энергетикӣ ба раванди комплексҳосилшавӣ мусоидат мекунад.

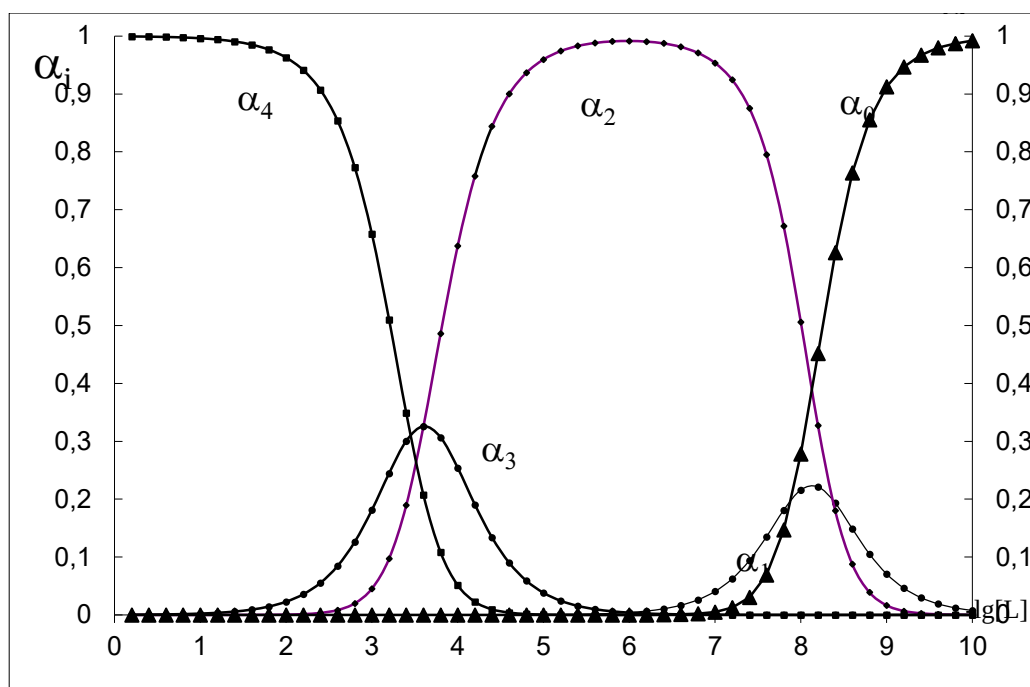
Зимни муқоиса намудани бузургиҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо бузургиҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси рений (V) бо лиганди мазкур [75] муайян карда шудааст, ки ба комплексҳосилшавӣ табиати металл – комплексҳосилкунанда таъсир мерасонад. Ҳамин тариқ, қимати ΔG дар раванди комплексҳосилшавӣ дар системаи Re(V) – N – атсетилтиомочевина – 6мол/л HCl барои заррачаи

якуми комплексӣ $[\text{ReOLCl}_4]^-$ ба $-23,36$ кҶ/мол баробар буда, барои заррачаи дуҷум ба $-18,23$ кҶ/мол баробар мешавад, яъне зиёд мегардад. Дар раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина қимати ΔG барои HgL^{2+} ба $30,79$ кҶ/мол баробар буда, барои заррачаи дуҷуми комплексӣ ба $-88,6$ кҶ/мол. Яъне, аз нигоҳи термодинамикӣ раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина нисбат ба раванди комплексҳосилшавии рений (V) бо лиганди мазкур афзалияти бештар дорад. Ба тарафи мусбат гузаштани қимати энтропия дар системаи омӯхташаванда бо камшавии шумораи зарраҳо дар мавриди комплексҳосилкунӣ алоқамат аст. Ин қонуниятҳо дар мавриди тағйирёбии ΔS комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина низ ба назар мерасанд.

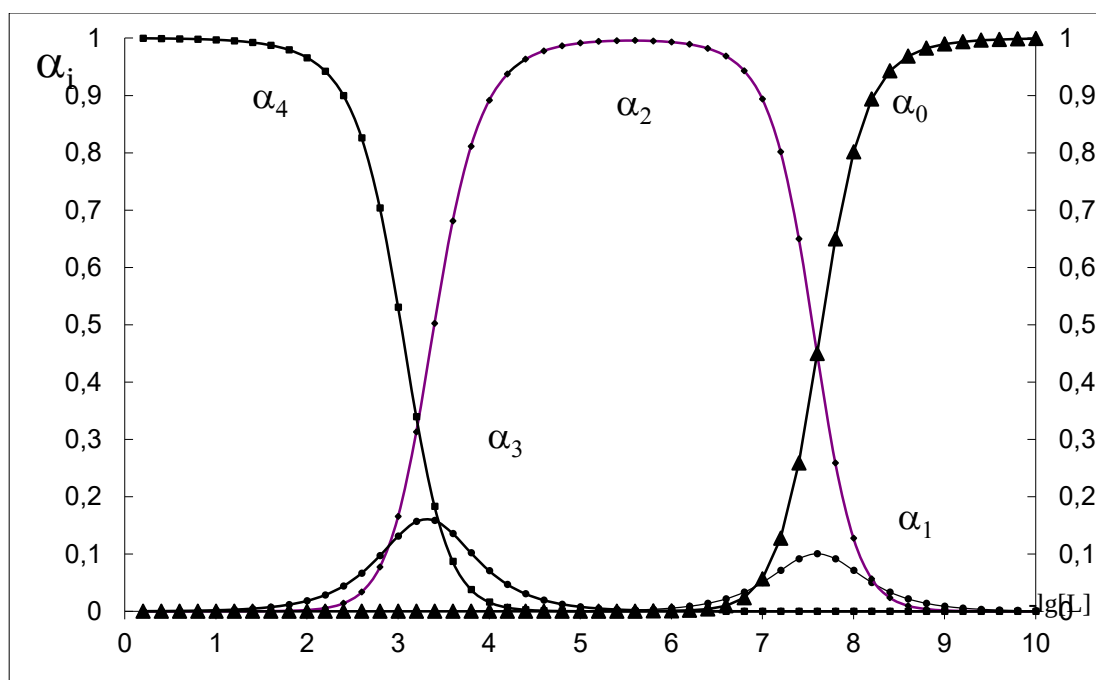
Ҷадвали 4.9. - Бузургҳои термодинамикии раванди комплексҳосилшавии пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳити 6 мол/л HCl.

Таркиби пайваста	ΔH , кҶ/мол	ΔG , кҶ/мол	ΔS , Ҷ/(мол·К)
$[\text{ReOLCl}_4]^-$	-37,42	-23,36	-47,17
$[\text{ReOL}_2\text{Cl}_3]$	-27,12	-18,23	-29,85
$[\text{ReOL}_3\text{Cl}_2]^+$	-17,02	-14,94	-7,00
$[\text{ReOCl}_4]^{2-}$	-10,28	-11,40	+3,76

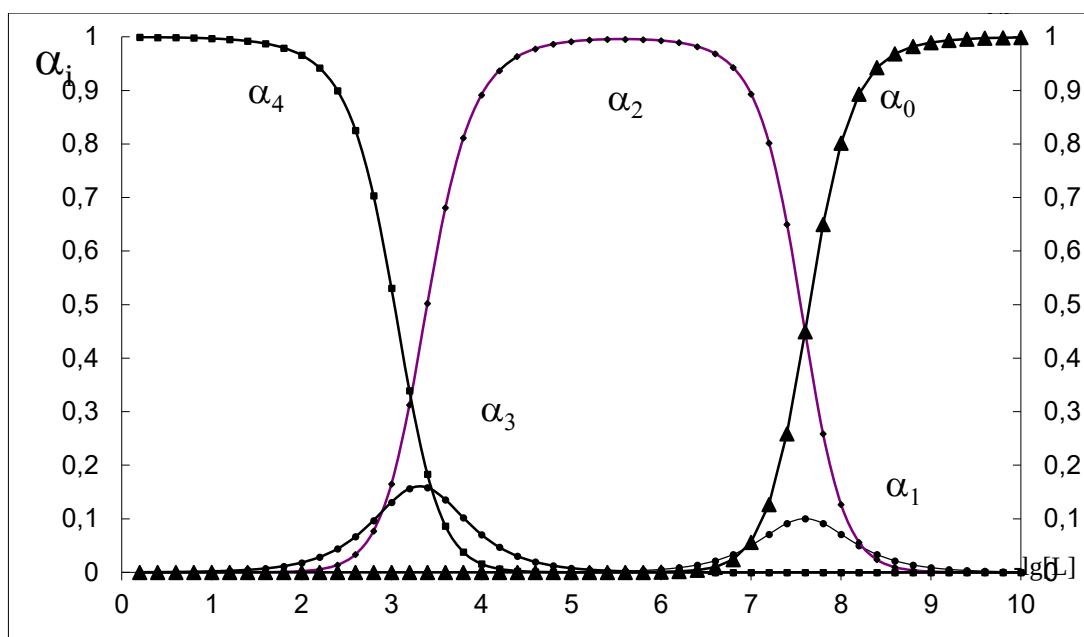
Собитаҳои умумии ҳосилшавӣ барои муайян намудани баромади максималии заррачаҳои комплексӣ дар системаи Hg (II) – N – атсетилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO_3 истифода карда шудаанд. Дар расмҳои 4.8.-4.12. диаграммаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318 К оварда шудаанд. Мувофиқ ба диаграммаи мазкур метавон баромади максималии заррачаҳои комплекси дар ҳудуди консентратсияи мувозинатии лиганд муайян кард.



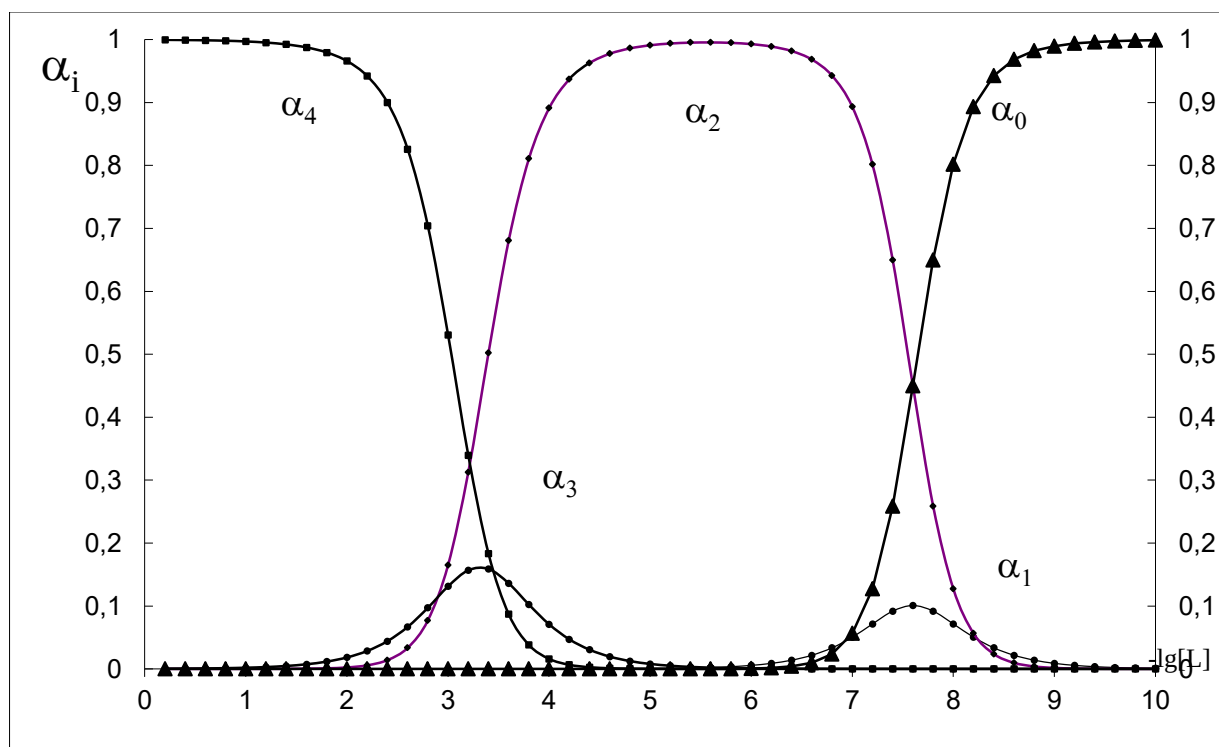
Расми 4.8. - Баромади заррачаҳои комплекси системаи Hg(II) – N – атселилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO₃ дар ҳарорати 278 K; дар ин ҷо: α_0 - Hg(NO₃)₂·2H₂O, α_1 - [HgL(H₂O)(NO₃)₂]⁰; α_2 - [HgL₂(NO₃)₂]⁰; α_3 - [HgL₃(NO₃)]⁺; α_4 - [HgL₄]²⁺



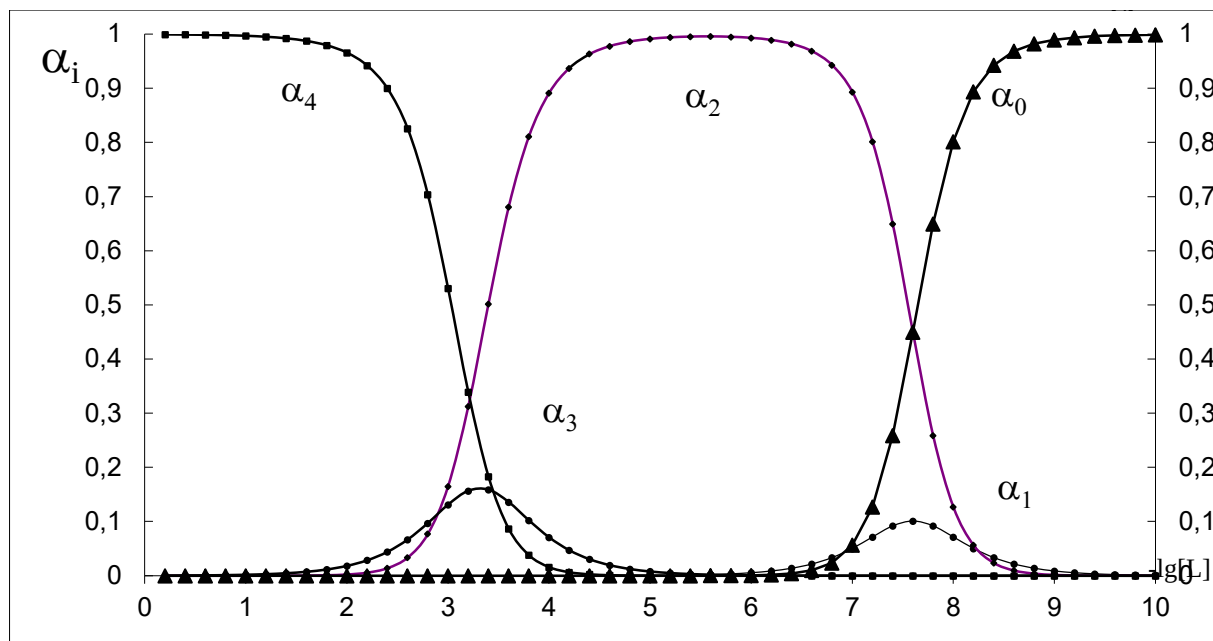
Расми 4.9. - Баромади заррачаҳои комплекси системаи Hg(II) – N – атселилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO₃ дар ҳарорати 288K; дар ин ҷо: α_0 - Hg(NO₃)₂·2H₂O, α_1 - [HgL(H₂O)(NO₃)₂]⁰; α_2 - [HgL₂(NO₃)₂]⁰; α_3 - [HgL₃(NO₃)]⁺; α_4 - [HgL₄]²⁺



Расми 4.10. - Баромади заррачаҳои комплекси системаи Hg(II) – N – атселилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO₃ дар ҳарорати 298K; дар ин ҷо: α_0 – Hg(NO₃)₂·2H₂O, α_1 – [HgL(H₂O)(NO₃)₂]⁰; α_2 – [HgL₂(NO₃)₂]⁰; α_3 – [HgL₃(NO₃)₂]⁺; α_4 – [HgL₄]²⁺



Расми 4.11. - Баромади заррачаҳои комплекси системаи Hg(II) – N – атселилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO₃ дар ҳарорати 308K; дар ин ҷо: α_0 – Hg(NO₃)₂·2H₂O, α_1 – [HgL(H₂O)(NO₃)₂]⁰; α_2 – [HgL₂(NO₃)₂]⁰; α_3 – [HgL₃(NO₃)₂]⁺; α_4 – [HgL₄]²⁺



Расми 4.12. - Баромади заррачаҳои комплекси системаи Hg(II) – N – атсетилтиомочевина – 0,1 мол/л HNO_3 дар ҳарорати 318K; дар ин ҷо: α_0 – $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, α_1 – $[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]^0$; α_2 – $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]^0$; α_3 – $[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]^+$; α_4 – $[\text{HgL}_4]^{2+}$

Таҳлили диаграммаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина нишон медиҳад, ки бо зиёд шудани ҳарорати системаи таҳқиқшаванда баромади пайвастаҳо кам мегардад. Омили мазкурро метавон бо реаксияи экзотермикии раванди комплексҳосилшавӣ алоқаманд намуд.

Дар ҷадвали 4.10. қиматҳои $-\lg [L]$ дар $\alpha_i^{\max}$ дар ҳароратҳои гуногун барои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO_4 оварда шудааст.

Ҷадвали 4.10. - Қиматҳои $-\lg [L]$ дар $\alpha_i^{\max}$ дар ҳароратҳои гуногун барои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина.

Таркиби пайваста	Қимати $-\lg [L]$ дар $\alpha_i^{\max}$				
	278	288	298	308	318
$[\text{HgL}(\text{H}_2\text{O})(\text{NO}_3)_2]$	8,2	7,6	7,5	7,4	7,4
$[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$	5,8	5,4	5,5	5,4	5,4
$[\text{HgL}_3(\text{NO}_3)]\text{NO}_3$	3,6	3,4	3,2	3,4	3,4
$[\text{HgL}_4](\text{NO}_3)_2$	1,2	1,0	1,2	1,0	1,0

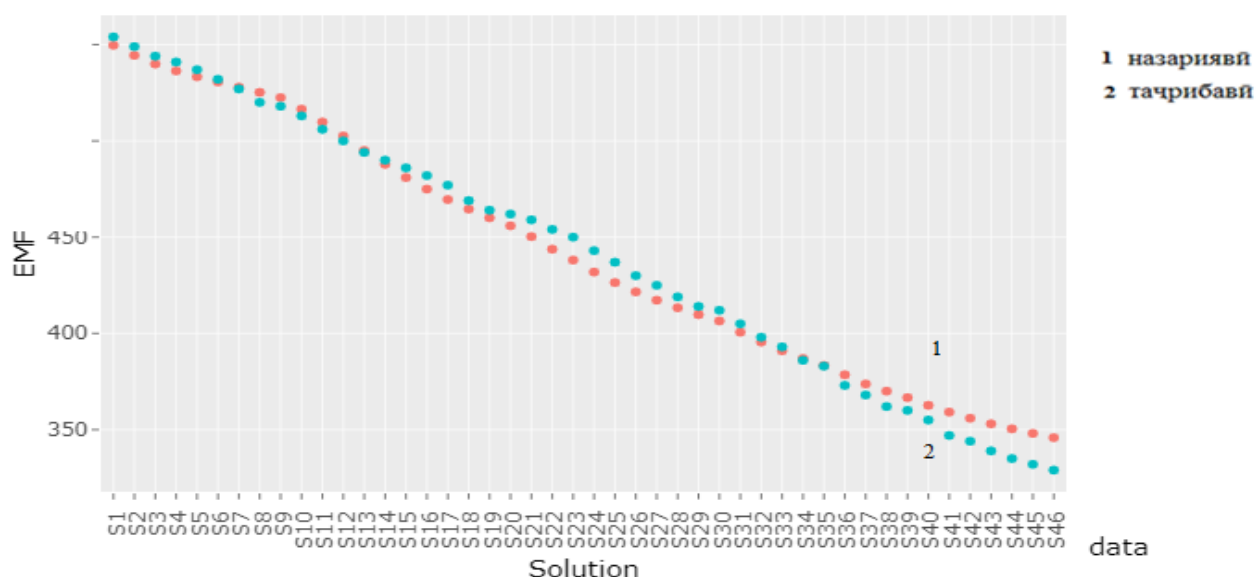
Таҳлили қачхатаҳои ҳосилшавӣ нишон медиҳад, ки тағйирёбии ҳарорат то як дараҷаи муайян ба баромади максималии шаклҳои комплексӣ таъсир мерасонад, аммо бо зиёдшавии ҳарорат қимати $\alpha_i^{\max}$ ба самти қиматҳои баланди консентратсияи мувозинатии лиганд мегузарад.

Ба раванди комплексҳосилшавӣ ба қатори дигар омилҳо боз таркиби ионии маҳлул низ таъсири муайян мерасонад. Барои нигоҳ доштани қувваи ионӣ дар таҷриба мо маҳлули 0,1 мол/л NaClO_4 -ро истифода намудем. Оид ба таъсир расонидани қувваи ионии маҳлул ба раванди комплексҳосилшавӣ мо таҳқиқотҳоро дар қувваи ионии 0,25 мол/л NaClO_4 ва 0,5 мол/л NaClO_4 низ гузаронидем. Ба сифати мисол, дар ҷадвалҳои 4.11.-4.13. натиҷаҳои титркунии потенциометрии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-298 К дар қувваи ионии 0,25 мол/л NaClO_4 оварда шудааст.

Ҷадвали 4.11. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 278 К; $C_{\text{Hg}^{2+}}=1 \cdot 10^{-4}$ мол/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ мол/л; $J = 0,25$ мол/л NaClO_4

Е, мВ	$C_L \cdot 10^5$, мол/л	$C_{\text{Hg}^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[\text{Hg}^+] \cdot 10^6$, мол/л	$[\text{L}] \cdot 10^5$, мол/л
1	2	3	4	5
554,0	4,990	9,980	92,326	2,748
549,0	9,960	9,960	75,878	2,834
544,0	14,911	9,940	62,311	3,783
541,0	19,841	9,921	55,334	6,679
537,0	24,752	9,901	47,262	9,228
532,0	29,644	9,881	38,827	11,648
527,0	34,517	9,862	31,898	14,500
520,0	39,370	9,843	24,243	17,115
518,0	44,204	9,823	22,383	21,449
513,0	53,816	9,785	18,353	29,968
506,0	63,353	9,747	13,921	38,289
500,0	72,816	9,709	10,979	46,983
494,0	82,205	9,671	8,659	55,789

Идомаи ҷадвали 4.11.				
1	1	1	1	1
490,0	91,522	9,634	7,382	64,835
486,0	100,768	9,597	6,294	73,865
482,0	109,943	9,560	5,366	82,872
477,0	119,048	9,524	4,399	91,796
469,0	128,083	9,488	3,210	100,584
464,0	137,051	9,452	2,633	109,485
462,0	145,951	9,416	2,426	118,430
459,0	159,176	9,363	2,147	131,730
454,0	176,580	9,294	1,754	149,225
450,0	193,727	9,225	1,490	166,498
443,0	214,808	9,141	1,124	187,723
437,0	235,507	9,058	0,882	208,598
430,0	255,835	8,977	0,666	229,104
425,0	275,801	8,897	0,543	249,273
419,0	295,414	8,818	0,426	269,087
414,0	314,685	8,741	0,348	288,566
412,0	333,622	8,666	0,319	307,721
405,0	370,528	8,518	0,239	345,046
398,0	406,198	8,375	0,223	362,045
393,0	440,692	8,237	0,147	381,116
386,0	474,068	8,104	0,108	449,789
383,0	506,380	7,974	0,095	482,485
373,0	552,960	7,788	0,063	529,614
368,0	603,187	7,587	0,050	580,440
362,0	645,401	7,418	0,039	623,157
360,0	685,776	7,257	0,035	664,016

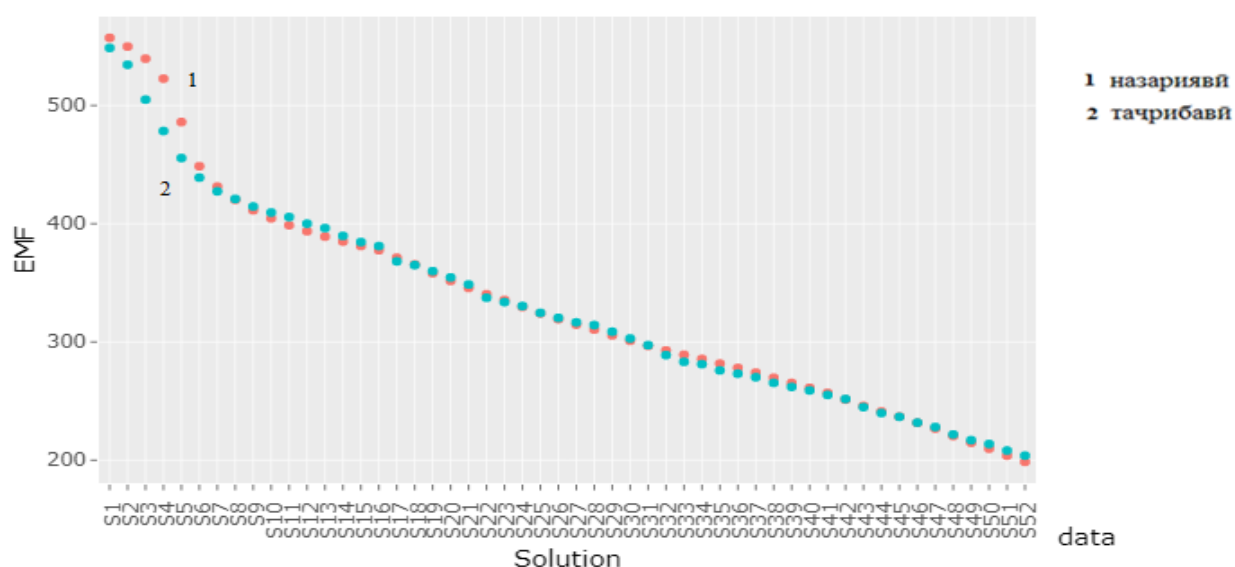


Расми 4.13. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина $E_{\text{экс.}}$ ва $E_{\text{наз.}}$ (Observed, Calculated) дар ҳарорати 278 К; $J = 0,25$ мол/л NaClO_4

Ҷадвали 4.12. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 288 К; $C_{\text{Hg}^{2+}} = 1 \cdot 10^{-4}$ мол/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ мол/л; $J = 0,25$ мол/л NaClO_4

E, мВ	$C_L \cdot 10^5$, мол/л	$C_{\text{Hg}^{2+}} \cdot 10^5$, мол/л	$[\text{Hg}^+] \cdot 10^6$, мол/л	$[\text{L}] \cdot 10^5$, мол/л
1	2	3	4	5
539,0	4,990	9,980	92,326	2,748
535,0	9,960	9,960	78,858	3,737
530,0	14,911	9,940	64,784	4,524
522,0	19,841	9,921	47,356	4,286
518,0	24,752	9,901	40,448	7,184
513,0	29,644	9,881	33,229	9,969
509,0	34,517	9,862	28,383	13,446
492,0	39,370	9,843	14,616	14,228
487,0	44,204	9,823	12,008	18,337
485,0	49,020	9,804	11,087	22,934
477,0	53,816	9,785	8,105	26,893
470,0	58,594	9,766	6,160	31,145
361,0	63,353	9,747	4,148	34,139
453,0	68,093	9,728	3,166	39,860

Идомаи ҷадвали 4.12.				
1	1	1	1	1
447,0	72,816	9,709	2,502	44,439
439,0	77,519	9,690	1,829	48,998
432,0	82,205	9,671	1,390	53,608
426,0	86,873	9,653	1,098	58,244
420,0	91,522	9,634	0,868	62,881
412,0	96,154	9,615	0,634	67,498
405,0	100,768	9,597	0,482	72,122
396,0	105,364	9,579	0,339	76,730
387,0	109,943	9,560	0,238	81,333
379,0	114,504	9,542	0,174	85,930
372,0	119,048	9,524	0,132	90,516
363,0	123,574	9,506	0,093	95,085
355,0	128,083	9,488	0,068	99,641
342,0	132,576	9,470	0,041	104,179
334,0	137,051	9,452	0,029	108,705
323,0	141,509	9,434	0,019	113,213
312,0	145,951	9,416	0,013	117,706
303,0	154,784	9,381	0,009	122,183
297,0	159,176	9,363	0,007	131,088



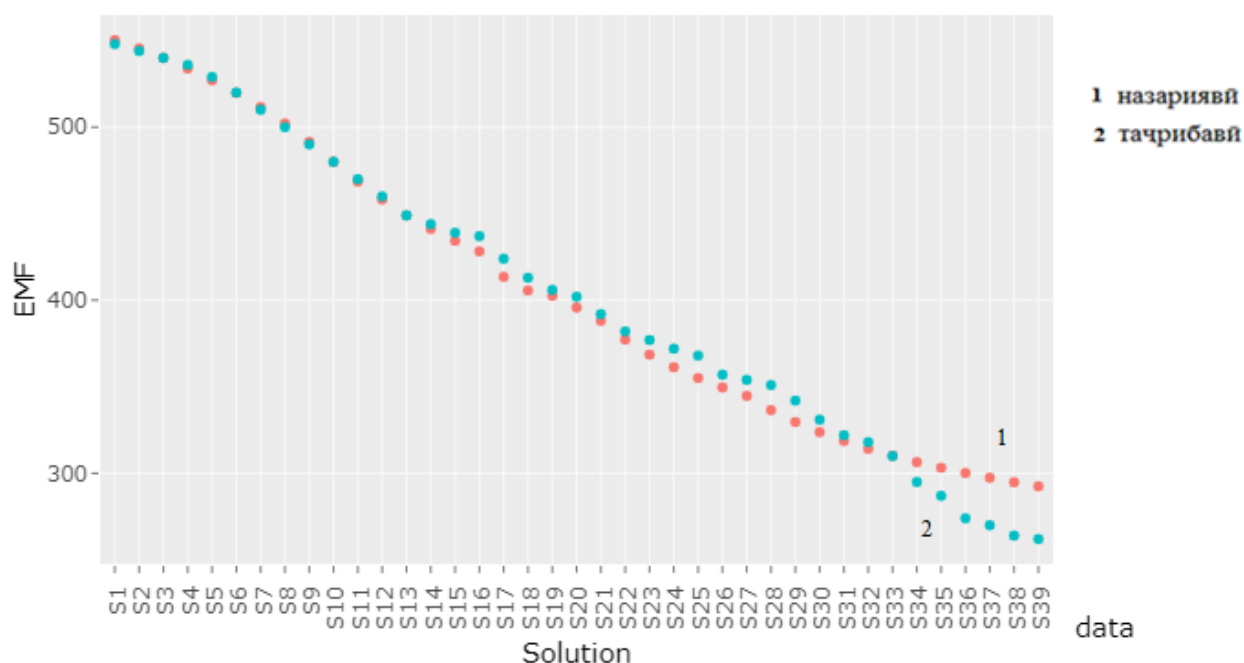
Расми 4.14. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина $E_{таҷ.}$ ва $E_{наз.}$ (Observed, Calculated) дар ҳарорати

288 К; J = 0,25 мол/л NaClO₄

Чадвали 4.13. - Натиҷаҳои титркунии потенциометрии раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К; C_{Hg²⁺}=1·10⁻⁴ мол/л; C_L = 1·10⁻² мол/л; J = 0,25 мол/л NaClO₄

E, мВ	C _L ·10 ⁵ , мол/л	C _{Hg²⁺} ·10 ⁵ , мол/л	[Hg ⁺]·10 ⁶ , мол/л	[L]·10 ⁵ , мол/л
1	2	3	4	5
537,0	4,990	9,980	70,308	3,858
531,0	9,960	9,960	55,554	3,254
526,0	14,911	9,940	45,639	1,219
521,0	19,841	9,921	37,493	1,327
512,0	24,752	9,901	26,361	2,958
504,0	29,644	9,881	19,269	5,781
500,0	34,517	9,862	16,459	9,869
492,0	39,370	9,843	12,032	13,452
483,0	44,204	9,823	8,459	17,273
478,0	49,020	9,804	6,949	21,693
467,0	53,816	9,785	4,520	25,818
462,0	58,594	9,766	3,714	30,411
457,0	63,353	9,747	3,051	35,028
450,0	68,093	9,728	2,319	39,606
445,0	72,816	9,709	1,905	44,261
435,0	77,519	9,690	1,288	48,836
422,0	82,205	9,671	0,775	53,424
412,0	86,873	9,653	0,524	58,072
403,0	91,522	9,634	0,369	62,731
396,0	96,154	9,615	0,280	67,392
384,0	100,768	9,597	0,175	72,029
377,0	105,364	9,579	0,133	76,668
370,0	109,943	9,560	0,101	81,292
362,0	114,504	9,542	0,074	85,900
353,0	119,048	9,524	0,052	90,492
349,0	123,574	9,506	0,044	95,070

Идомаи ҷадвали 4.13.				
1	1	1	1	1
340,0	128,083	9,488	0,031	99,629
337,0	132,576	9,470	0,028	104,175
332,0	141,509	9,434	0,023	113,214
327,0	150,376	9,398	0,019	122,186
326,0	159,176	9,363	0,018	131,091
321,0	172,253	9,311	0,0123	132,896



Расми 4.15. - Вобастагии нуқтаи титронидани комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина $E_{\text{таҷ.}}$ ва $E_{\text{наз.}}$ (Observed, Calculated) дар ҳарорати 298 К; J = 0,25 мол/л NaClO₄

Ҷадвали 4.14. - Қимати собитҳои умумии заррачаҳои комплекси Hg(II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318 К дар қувваи ионии 0,25 мол/л NaClO₄

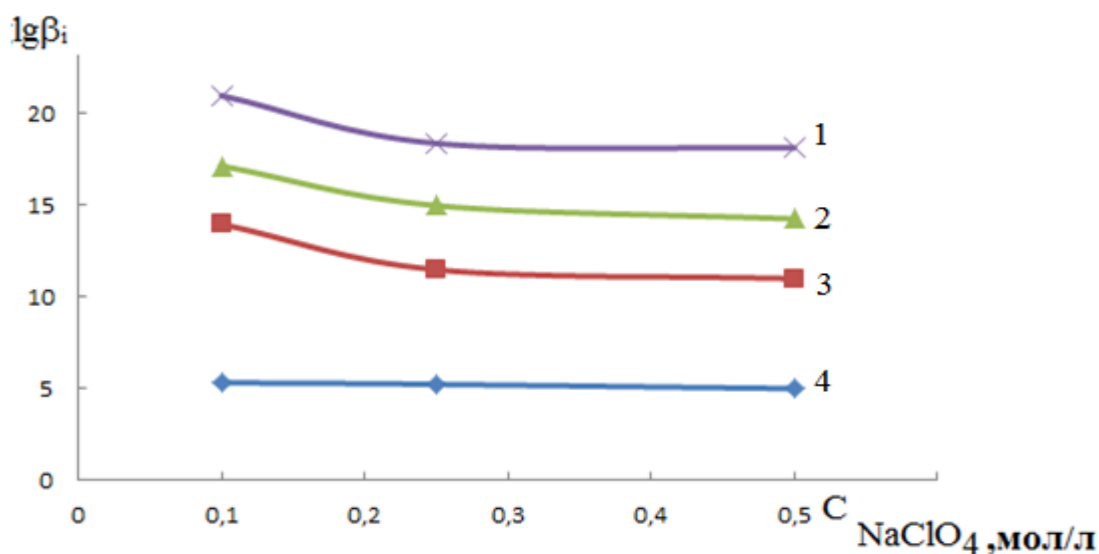
T, K	$\lg\beta_1([\text{HgL}]^{2+})$	$\lg\beta_2([\text{HgL}_2]^{2+})$	$\lg\beta_3([\text{HgL}_3]^{2+})$	$\lg\beta_4([\text{HgL}_4]^{2+})$
278	5,71±0,12	13,69±0,14	17,21±0,18	21,21±0,14
288	5,60±0,02	13,24±0,14	16,86±0,41	20,84±0,03
298	5,23±0,14	11,49±0,36	14,99±0,68	18,38±0,62
308	4,72±0,36	11,29±0,45	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 4.15. - Қимати собитаҳои умумии заррачаҳои комплекси Hg (II) бо N – атсепилтиомочевина дар ҳароратҳои 278-318K дар қувваи ионии 0,5 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	5,69±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

Нишон дода шуд, ки бо зиёдкунии қувваи ионӣ собитаҳои устуворӣ бо як қонуният кам мешаванд. Маълум аст, ки тағйирёбии устувори пайвастаҳои комплексӣ вобаста ба қувваи ионӣ аз заряди зарраҳо вобастагӣ дошта ва ҳангоми баланд намудани қувваи ионӣ ҳолати миёни ионҳо паст гардида, ионҳои дар маҳлулбуда заряди иони марказиро ҳоилонӣ (экранировать) менамоянд. Омили мазкур ба раванди комплексҳосилшавӣ таъсири назаррас мерасонад.

Дар расми 4.16. вобастагии қимати собитаҳои умумии устувори пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсепилтиомочевина дар ҳарорати 298 K аз консентратсияи маҳлули NaClO₄ оварда шудааст.



Расми 4.16. - Вобастагии қимати собитаҳои умумии устувори пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсепилтиомочевина дар ҳарорати 298 K аз консентратсияи маҳлули NaClO₄

Зимни таҳлил намудани қимати собитаҳои умумии ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди ҳароратҳои 278-318 К дар қувваи ионии 0,1 мол/л NaClO₄ бо қиматҳои мазкур дар қувваи ионии 0,25 мол/л NaClO₄ маълум гардид, ки бо зиёд гардидани консентратсияи маҳлули перхлорати натрий дар система, дар маҷмӯъ камшавии қимати собитаҳои умумии устуворӣ ба назар мерасад. Дар асоси ин метавон гуфт, ки баланд шудани консентратсияи маҳлули NaClO₄ дар мавриди комплексҳосилшавӣ рақобати миёни молекулаи лиганд ва перхлоратро зиёдтар намуда, устувории заррачаҳои комплексӣ паст мешаванд.

“Муҳити омӯзиши раванди комплексҳосилкунӣ ба устувории заррачаҳои комплексӣ таъсири назаррас дорад. Муқоисакунии собитаҳои устувории пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳити 5 ва 6 мол/л HCl собитаҳои умумии ҳосилшавии симоб (II) бо лиганди мазкур маълум гашт, ки дар системаи Re (V) - N – атсетилтиомочевина – 6 мол/л HCl бо кам шудани консентратсияи кислотаи гидрогенхлорид қимати собитаҳои устуворӣ паст мешаванд. Дар мавриди комплексҳосилшавии симоб (II) бо лиганди мазкур бо зиёд шудани қувваи ионӣ собитаҳои умумии зинагӣ паст мешаванд” [75].

Чадвали 4.16. - Қиматҳои рК барои пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар муҳити 5 ва 6 мол/л HCl.

T, K	5 мол/л HCl				6 мол/л HCl			
	pK ₁ [*]	pK ₂ [*]	pK ₃ [*]	pK ₄ [*]	pK ₁ [*]	pK ₂ [*]	pK ₃ [*]	pK ₄ [*]
273	4,93	3,81	3,14	2,43	4,83	3,76	2,96	2,20
288	4,57	3,64	3,00	2,34	4,22	3,28	2,70	2,05
298	4,25	3,41	2,86	2,25	4,10	3,16	2,58	1,97
308	4,10	3,27	2,73	2,13	3,77	2,93	2,45	1,90
318	3,88	3,10	2,63	2,08	3,60	2,84	2,40	1,88
328	3,75	2,99	2,54	1,99	3,53	2,81	2,38	1,85
338	3,63	2,88	2,44	1,90	3,44	2,73	2,32	1,81

Дар корҳои муаллифони [66, 75] натиҷаҳо доир ба омӯзиши раванди комплексҳосилшавии Ag(I) ва Re(V) бо N – атсетилтиомочевина оварда шудаанд. Барои баҳодиҳии табиати металл-комплексҳосилкунанда мо қиматҳои собитаҳои устувории симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро бо натиҷаҳои таҳқиқот муқоиса намудем. Дар натиҷа қатори тағйирёбии собитаҳои устувории пайвастҳои комплекси Re(V) , Ag(I) ва Hg(II) бо N – атсетилтиомочевинаро тартиб додем:

$$\beta_{\text{Hg}} > \beta_{\text{Ag}} > \beta_{\text{Re}}$$

Дар асоси натиҷаҳои ба даст омада ва инчунин таҳлили адабиёти илмӣ метавон гуфт, ки устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо лиганди N – атсетилтиомочевина нисбат ба дигар металлҳо зиёд аст.

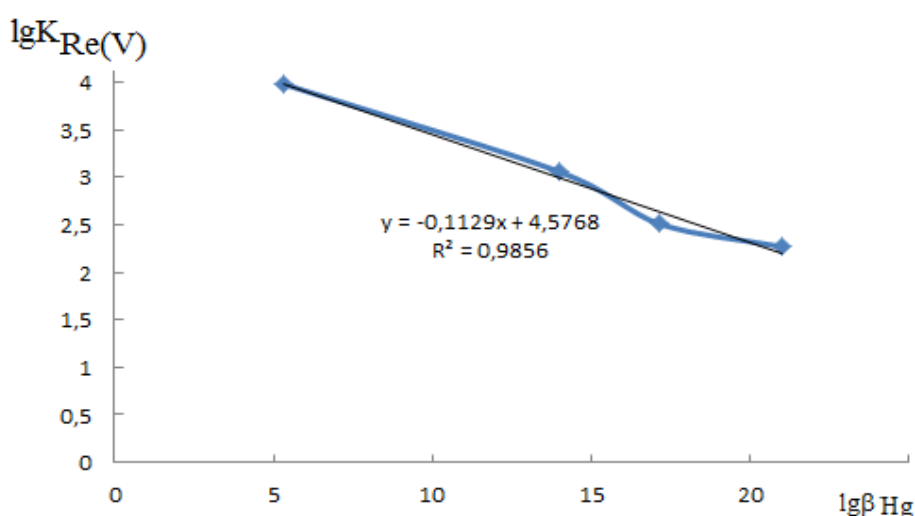
Чӣ тавре маълум аст, мувофиқакунии собитаҳои ҳосилшавӣ маълумот оид ба алоқамандии статистикӣ миёни қиматҳои мазкур, вобастагии онҳо ва имконияти истифода кардани онҳо хизмат мекунад. Барои муайян намудани яқинии раванди комплексҳосилшавии метали таҳқиқшавандаи симоб (II) ва Re(V) бо N – атсетилтиомочевина, мувофиқакунии собитаҳои зинагии пайвастаҳои комплекси металлҳои мазкур бо лиганд дар ҳарорати 298K гузаронида шуд. Дар ҷадвали 4.17. собитаҳои зинагии устувории пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина, ки дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид концентратсияш 6мол/л омӯхта шудаанд, оварда шудааст. Дар расми 4.17. вобастагии собитаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) ва рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298K оварда шудааст.

Ҷадвали 4.17. - Қиматҳои pK_i барои пайвастаҳои комплекси рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298K.

Т, К	pK1^*	pK2^*	pK3^*	pK4^*
1	2	3	4	5
273	4,83	3,76	2,96	2,20
288	4,22	3,28	2,70	2,05
298	4,10	3,16	2,58	1,97

Идомаи ҷадвали 4.13.				
1	2	3	4	5
308	3,77	2,93	2,45	1,90
318	3,60	2,84	2,40	1,88
328	3,53	2,81	2,38	1,85
338	3,44	2,73	2,32	1,81

Дар расми 4.17. вобастагии собатаҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплекси симоб (II) ва рений (V) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298K оварда шудааст.



Расми 4.17. - Коррелятсияи собатаҳои устувори пайвастаҳои комплекси симоб (II) ва рений (V) бо N – атсетилтиомочевина.

Мувофиқакунии натиҷаҳои ба даст оварда нишон медиҳад, ки вобастагии $lg\beta_{iHg}=f(lgK_{iRe})$ хати рост аст ва коэффитсиенти мувофиқакунии ин қачхата баланд аст, яъне ба $r=0.9856$ баробар аст. Омили мазкур оид ба мувофиқаткунии собатаҳои ба даст оварда миёни худ шаҳодат медиҳад.

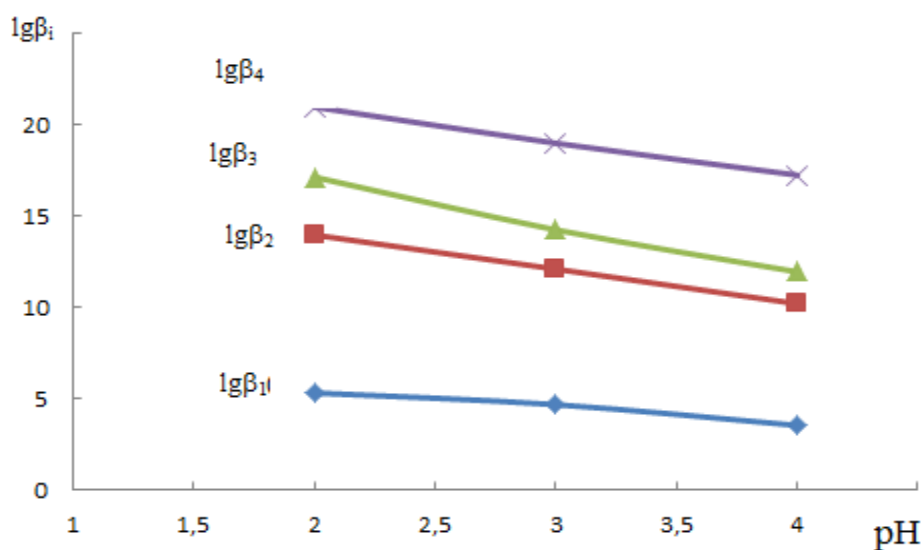
Маълумотҳои зиёде оид ба таъсири муҳити реаксия ба раванди комплексҳосилшавии металлҳои интиқоли бо ҳосилаҳои тиомочевина таъсири назаррасро мерасонад. рН-и муфид барои комплексҳосилшавӣ аз таносубияти металл ва лиганд вобастагии зиёд дорад. Дар муҳити турш симоб дар шакли акваионҳо қарор дошта, зимни зиёд шудани рН (одатан $>3-4$) ба ҳосилшавии гидрокомплексо оварда мерасонад, ки дар натиҷа таҳшинҳо ҳосил мешаванд. Дар боло қайд карда шуда буд, ки лиганди

органикии N – атсетилтиомочевина дар ҳудуди рН 0,5-2,0 дар шакли протонизатсияшуда қарор дошта, дар ҳудуди 2,0-10,0 шакли молекулавӣ ва дар ҳудуди рН = 10-14 шакли депротонизатсияшудаи лиганд қарор дорад. Барои муайян намудани таъсири рН-и муҳит ба раванди комплексҳосилшавии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мо раванди мазкурро дар ҳудуди рН = 2-4 омӯхтем.

Ҷадвали 4.18. - Қимати $\lg\beta_i$ барои пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар ҳарорати 298 К дар ҳудуди рН = 2-4

рН	$\lg\beta_1$	$\lg\beta_2$	$\lg\beta_3$	$\lg\beta_4$
1	2	3	4	5
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

Дар асоси қиматҳои ба даст овардашуда графיקи вобастагии $\lg\beta_i$ аз рН муҳити реаксия сохта шуд (расми 4.18).



Расми 4.18. - Графיקи вобастагии $\lg\beta_i$ аз рН муҳити реаксия.

Чӣ тавре аз расми 4.18. дида мешавад, бо зиёд шудани рН муҳити реаксия қимати собитҳои умумии устувории пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина ба таври хаттӣ кам мешаванд. Ин омили эксперименталӣ исботи он аст, ки бо зиёдшавии рН муҳити реаксия эҳтимол аст, раванди ҳосилшавии гидрокосокомплексҳо гузарад ва ионҳои симоб (II) қисман гидролиз шаванд.

БОБИ 5. ЧАНБАҲОИ АМАЛИИ ИСТИФОДАБАРИИ N – АТСЕТИЛТИОМОЧЕВИНА ВА ПАЙВАСТАИ КОМПЛЕКСИИ ОН БО СИМОБ (II)

5.1. Истифода намудани N – атсетилтиомочевина ҳамчун реагент барои муайян намудани симоб (II)

Ифлосшавии объектҳои муҳити атроф бо ионҳои симоб дар солҳои охир яке аз проблемаҳои калон ба шумор меравад. Коркарди усулҳои муайянкунии симоб, ҳамчун элементи дорои захрнокиаш баланд, ки дорои хосияти аккумулятивӣ дар организмҳои зинда ба нестшавии ҳуҷайраҳо меорад, аз манфиат дур нест. Миёни усулҳои сершумори муайянкунии симоб, усулҳои электрохимиявӣ ва оптикӣ ба таври васеъ истифода карда мешаванд. Яке аз самтҳои ояндадор дар усулҳои электрохимиявӣ ин коркарди системаҳои нави электродӣ ба шумор меравад. Ба сифати электродҳои индикаторӣ дар усули потенциометрӣ барои ҳалли масъалаҳои мушаххас электродҳои металлӣ, металлоксидӣ, ионселективӣ ва дигар истифода карда мешаванд. Дар натиҷаи модификасияи химиявӣ, механикӣ ва ё электрохимиявии сатҳи болоии электродҳо метавон тавсифи электроаналитикии функсияҳои электродиро баланд намуд: кам кардани вақти ҷавоби электрод, баланд бардоштани селективнокӣ, баланд бардоштани аз нав такроршавӣ ва паст кардани ҳудуди муайянкунии элемент. Аммо тақсир кардани сенсорҳои универсалӣ барои таҳлили системаҳои бисёркомпонента ҳоло ҳам масъалаи мураккаб ба шумор меравад. Дар қатори [111] ба сифати объекти таҳқиқот электродҳои композитии дорои як қатор бартариҳо ба монанди нархи паст, хосиятҳои баланди истифодабарӣ, устувории механикӣ, имконияти модификасияи сатҳи болоии электрод ва имконияти истифодабарӣ дар муҳитҳои шадид, истифода карда шудааст. Аз ҷониби муаллифи қори мазкур имконияти муайянкунии ионҳои Hg (II) бо як қатор электродҳои индикаторӣ: электроди композитии карбонӣ (ЭКК), нанонайчаҳои карбонии модификасияшуда (НКМ) ва электроди платинагӣ омӯхта шудааст.

Нишон дода шудааст, ки барои электроди модификасияшуда нишебии

функсияи электродӣ қариб ду маротиба нисбат ба қимати Нернст кам аст, ки ин омил ба зиёд шудани хатогиҳо зимни истифодаи сенсори мазкур дар системаи индикаторӣ оварда мерасонад. Омӯзиши дигар тавсифҳои электрохимиявӣ (вақти ҷавоби электрод, ҳудуди хати рост ва дигарон) нишон дод, ки электроди карбонӣ-композитӣ дорои як қатор бартарихо мебошад. Дар қори мазкур ба сифати маҳлули қорӣ диэтилдитиокарбамати натрий ($C_5H_{10}NS^2-Na^+$) истифода карда шудааст, ки реагенти мазкур аз ҳисоби дар таркибаш мавҷуд будани гурӯҳҳои функционалии донории тионӣ ва тиолӣ ҳосиятҳои комплексҳосилшавиро доро мебошад. Бо ионҳои симоб (II) ДДТК – Na пайвасти камҳалшавандаи рангаш сафеди таркибаш ($Hg(ДДТК)_2$)-ро ҳосил мекунад ва раванди комплексҳосилшавӣ зинагӣ ба амал меояд. Дар аввал пайвасти комплекси таркибаш 1:1, баъдан пайвасти таркибаш 1:2 ҳосил мешавад. Дар қачхатаҳои титронидани маҳлулҳои симоб (II) бо ДДТК-Na ба ҳайси маҳлули титрант ду ҷаҳиши потенциал ба назар мерасанд, ки оид ба комплексҳосилшавии зинагӣ шаҳодат медиҳанд. Ба сифати электролитҳои манзар барои бартараф намудани раванди гидролизи ионҳои симоб ва нигоҳдории қувваи ионии маҳлулҳои серобшуда чунин маҳлулҳо истифода карда шудаанд: маҳлулҳои буферии фосфатӣ ($pH=3,5$), атсетатӣ ($pH=4,4$), аммиакатӣ ($pH=8,0$) ва инчунин тартрати калий ва натрий [112]. “Дар натиҷаи таҳқиқотҳои гузаронидашуда таркиби оптималии электролитҳои манзар ва қимати pH барои титркунии потенциометрии ионҳои симоб (II) бо маҳлули диэтилдитиокарбамати натрий пешниҳод карда шудааст. Диэтилдитиокарбамати натрий бо як қатор катионҳо пайваستҳои комплекси устуворро ҳосил мекунад” [112]. Лигандҳои сулфурдор бо ионҳои гуногуни металлҳо ғайринокии биологиро зоҳир мекунанд (зиддиомосӣ, зиддӣ занбурӯғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғ.) [113-117].

Дар асоси тиомочевина ва ҳосилаҳои он як қатор сенсорҳои ҳискунанда, яъне воситаҳои, ки маълумоти химиявиро (концентратсияи компоненти ҳос, таҳлили таркиби намунаи таҳлилшаванда) ба сигнали аналитикӣ табдил медиҳанд, коркард карда шудаанд.

Тиомочевина ва ҳосилаҳои он дар сенсорҳо барои муайян намудани ионҳои металлҳои вазнин ба тӯфайли ҳосилкунии пайвастаҳои устувори комплекси бо ионҳои металлҳо тавассути атомҳои сулфур ва нитроген ба таври васеъ истифода карда мешавад. Ин имконият медиҳад то таҳҷизотҳои селективӣ ва устувор барои таҳлили муҳитҳои обӣ ташкил карда шаванд [118].

Якчанд соҳае, ки дар онҳо тиомочевина ҳамчун ҷузъи асосӣ истифода карда мешавад:

• **Таҳшинкунии химиявии плёнкаҳои сульфидҳои металлҳо.**

Тиомочевина дар муҳити ишқорӣ бо ҳосилшавии ионҳои сульфид таҷзия мешавад, ки ионҳои мазкур бо ионҳои металлҳои вазнин (сурб, кадмий) ба реаксия дохил шуда, пленкаи тунуки сульфиди металлҳо ҳосил мекунад (PbS, CdS). Ин гуна пленкаҳо дар элементҳои сенсории нимоқили ҳамчун қабати ҳискунанда хизмат мекунанд [119].

• **Сенсорҳои оптикӣ бо тиомочевинаи иммобилизатсияшуда.**

Тиомочевина ҳамчун агенти хелатҳосилкунанда дар матритсаҳои полимерӣ ва ё гидрогелҳо истифода карда мешавад. Зимни бо ҳамтаъсиркунӣ бо ионҳои металл он лағжиши гипсохромиро (тағйирёбии ранг ва ё спектри фурӯбарӣ) ба вуҷуд оварда, омили мазкур бо усули спектрофотометрӣ муайян карда мешавад. Мисол, ин гуна сенсор барои муайян намудани ионҳои кадмий дар маҳлули обӣ дар $pH=4$ будан ба таври васеъ истифода карда мешавад [120].

• **Сенсорҳои электрохимиявӣ.** Тиомочевина дар таркиби мембранаҳои функционалӣ ва ё қабатҳои модификатсионӣ дохил шуда, он бо ҳамтаъсиркуниро бо ионҳои металл ва генератсияи сигнали аналитикиро (потенциал, ҷараён) таъмин менамояд. Дар мониторинги экологӣ ин гуна сенсорҳо – электродҳои ион-селективӣ яке аз самтҳои асосӣ ба шумор мераванд. Аксар электродҳои ион-селективӣ дар асоси мембранаҳои пластикӣ, ки дар таркиби худ ҳар гуна ионофорҳоро (лигандҳои ба як навъ ионҳо ҳассоснок) доранд, коркард мешаванд. Дар ин ҳолат ионҳои

гидрофилӣ, аз ҷумла ионҳои сулфат ба мембранаҳо бо мушкилиҳои зиёд ворид мегардад, аз ин сабаб коркарди сенсорҳо барои муайянкунии ионҳои сулфат масъалаи душвор ба шумор меравад [121].

Лигандҳои органикӣ (хелатонҳо) барои ба таври селективӣ муайян кардани металлҳои вазнин (Cd, Pb, Hg, Cu, Zn) бо роҳи ҳосил намудани пайвастиҳои ранга ва ё люминесцентӣ истифода карда мешаванд. Ин гуна пайвастаҳо дар таркиби худ атомҳои донорӣ (O,N,S) доранд, ки онҳо бо ионҳои металлҳо координатсия шуда, ин боиси истифода намудани онҳо дар усулҳои спектрофотометрӣ, флуориметрӣ ва электрохимиявӣ мегардад.

Муайянкунии ионҳои симоб бо тиомочевина бо истифода аз усули турбидиметрӣ – усуле мебошад, ки дар он интенсивнокии рӯшноии дорои дарозии мавҷи муайяндошта, ки аз дохили кювета бо маҳлули коллоидӣ (одатан – суспензия), ки бо заррачаҳои моддаи таҳлилшаванда ҳосил мешавад, асос карда шудааст. Усули мазкур барои миқдоран муайян кардани ионҳои симоб аз рӯи тирашавии ранги маҳлул, ки бо ёрии асбоби спектрофотометр чен карда мешавад, истифода шуда, бештар барои таҳлил намудани об истифода мегардад. Тиомочевина бо ионҳои симоб (II) пайвасти устувории комплексиرو ҳосил мекунад ва он имконият медиҳад то ионҳои симоб бо усули миқдорӣ муайян карда шаванд [122]. Усули мазкур барои таҳлили моддаҳои дорои ҳалшавандагиашон баланд истифода карда намешавад – ҳар қадаре, ки сибитаи ҳалшавӣ паст бошад, ҳамон қадар дақиқияти муайянкунӣ баланд аст. Барои пурра бартараф намудани таҳшиншавӣ коллоидҳои муҳофизатиро (желатин, агар-агар, оҳар) истифода меkunанд. Як қисми равшанӣ аз тарафи заррачаҳои фазаи дисперсӣ инъикос мешавад, як қисми дигар бошад аз дохили маҳлул мегузарад. Интенсивнокии рӯшноии аз дохили кювета гузашта паст аст, зеро як қисми селай рӯшноӣ фурӯ бурда мешавад ва қисми дигараш паҳн мегардад. Дарачаи пастшавии рӯшноӣ ба консентратсияи фазаи дисперсӣ, яъне моддаи таҳлилшаванда мутаносибан рост аст. Зимни тайёр намудани маҳлулҳои стандартӣ бояд тартиби омехтакунии моддаҳо қатъиян нигоҳ дошта шавад, зеро дақиқияти

таҳлил аз раванди тайёркунии суспензияҳо вобастагӣ дорад.

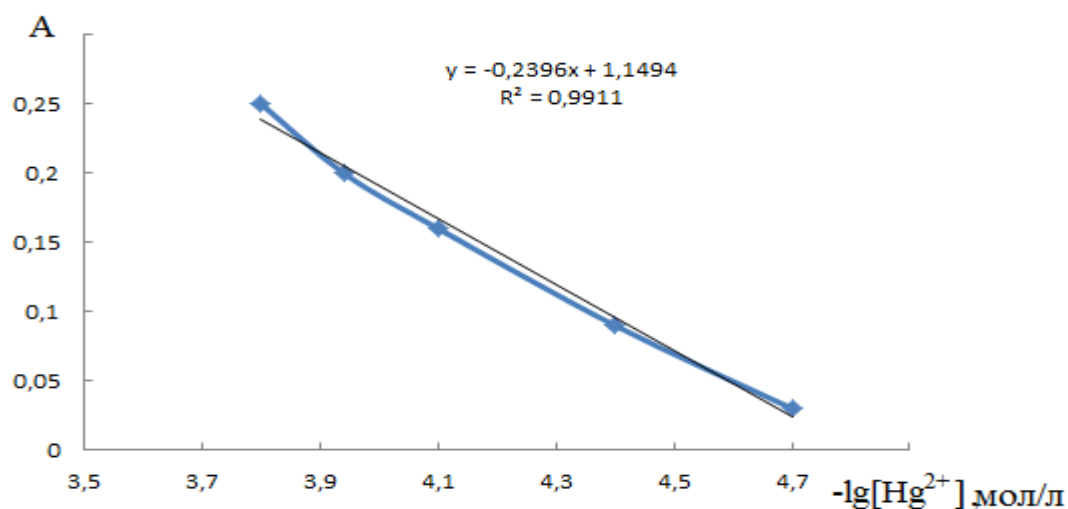
Таҳлили адабиёт нишон медиҳад, ки маълумот оид ба муайян кардани симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мавҷуд нест. Аз ин лиҳоз, дар кори диссертатсияи мазкур мо методикаи муайян кардани ионҳои симоб (II)-ро бо лиганди органикии N – атсетилтиомочевина коркард намудем. Аз сабаби он ки раванди комплексҳосилшавӣ миёни симоб (II) ва N – атсетилтиомочевина ба зудӣ мегузарад, инчунин пайвастаҳои комплекси синтезкарда хеле устуворанд ва дар об ҳал намешаванд, бинобар ин, метавон онро барои муайян кардани ионҳои симоб (II) бо лиганди мазкур истифода кард.

Барои коркард намудани методикаи муайян кардани симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина мо усули графикаро истифода кардем. Барои ин силсила маҳлулҳои стандартӣ $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2$ -ро концентратсияш $2 \cdot 10^{-5}$ то $16 \cdot 10^{-5}$ дар муҳити HNO_3 (сероб) бо илова намудани 2мл маҳлули обии N – атсетилтиомочевина тайёр кардем. Маҳлулҳои тайёркунашуда тирашакл буда, рангашон хокистарӣ буд. Суспензияи тайёркунаро муддати 15 дақиқа нигоҳ дошта, барои пешгирӣ кардани таҳшиншавии пайвастаи комплексӣ ба маҳлул ба сифати тасбитгар (стабилизатор) агар-агар илова намудем. Зичии оптикии маҳлулҳои стандартиро дар дарозии мавҷи 440нм дар фотоэлектроколриметри тамғаи КФК-2 чен кардем. Натиҷаҳои ченкунии фотометрӣ дар ҷадвали 5.1. оварда шудааст.

Ҷадвали 5.1. - Натиҷаҳои ченкунии турбидиметрии маҳлулҳои стандартӣ пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина; ($\text{C}_{\text{Hg}^{2+}} = 2 \cdot 16 \cdot 10^{-5}$)

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
$4 \cdot 10^{-5}$	0,090	0,090	0,090	0,090
$8 \cdot 10^{-5}$	0,160	0,160	0,160	0,160
$12 \cdot 10^{-5}$	0,200	0,210	0,200	0,200
$16 \cdot 10^{-5}$	0,250	0,260	0,250	0,250

Дар асоси қиматҳои ба даст оварда, мо графикои ченакдори вобастагии $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$ сохтем (расми 30).



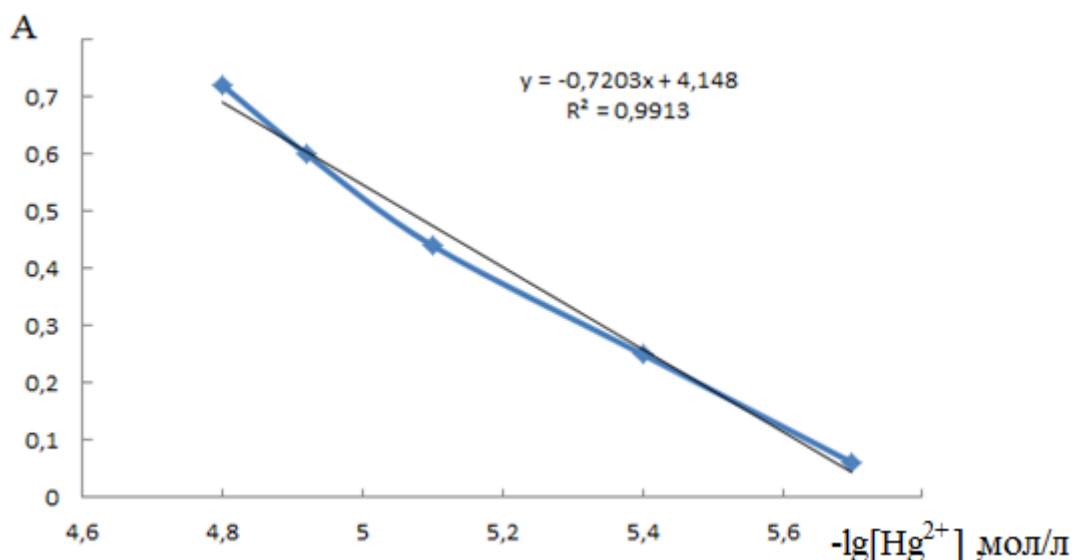
Расми 5.1. - Графики вобастагии $A=f(C_{Hg^{2+}})$

Чӣ тавре аз график бармеояд, ин вобастагӣ хати рост аст ($r^2 = 0,9824$) ва онро метавон барои муайян кардани ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина истифода кард. Консентратсияи маҳлули контролии гирифташудаи симоб (II) бо N – атсетилиомочевина, ки аз рӯи график ёфта шуд, ба $6 \cdot 10^{-5}$ мол/л баробар буда, ҳаҷми иловакардаи симоб (II) ба ҳаҷми ҳисобкардашуда (бо истифода аз қонуни эквивалентҳо) мувофиқат мекунад.

Барои санҷидани аз нав такроршавии таҳлил, мо якчанд маротиба маҳлулҳои стандартӣ симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро тайёр намуда, зичии оптикӣ онро дар асбоб чен намудем. Бояд қайд кард, ки барои муайян намудани ҳудуди қорӣ муайянкунии консентратсияи симоб (II), мо консентратсияи металлро як дараҷа паст намуда, ченкуниҳоро гузаронидем. Натиҷаи ченкуниҳоро дар ҷадвали 5.2. оварда шудаанд.

Ҷадвали 5.2. - Натиҷаҳои ченкуниҳои турбидиметрии маҳлулҳои стандартӣ пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина ($C_{Hg^{2+}} = 2 \cdot 10^{-6}$)

Консентратсияи Hg^{2+} , мол/л	Зичии оптикӣ			
	A_1	A_2	A_3	A_m
$2 \cdot 10^{-6}$	0,060	0,060	0,058	0,06
$4 \cdot 10^{-6}$	0,25	0,25	0,25	0,25
$8 \cdot 10^{-6}$	0,44	0,43	0,44	0,44
$12 \cdot 10^{-6}$	0,61	0,61	0,60	0,61
$16 \cdot 10^{-6}$	0,72	0,72	0,72	0,72



Расми 5.2. - Графики вобастагии $A=f(\text{C}_{\text{Hg}^{2+}})$

Бояд қайд кард, ки дар методикаи мазкур азнавтакроршавии натиҷаҳои таҳлил хеле хуб ба назар мерасад. Методикаи мазкурро метавон барои муайян кардани ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар обҳои гуногун истифода кард.

5.2. Коркарди статистикии натиҷаҳои таҳлили турбидиметрии ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина

Бо мақсади муайян намудани характеристикаи метрологии натиҷаҳои ҷенкунӣ дар усули турбидиметрӣ ҳисоббарориҳои статистикии панҷ, натиҷаҳои ҷенкунии ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевинаро дар маҳлулҳои гуногуни дорои ионҳои таҳлилшаванда гирифтем. Ҳисобкунии хатоӣ.

Натиҷаҳои ба даст оварда:

$$X_1 = 8 \cdot 10^{-5}$$

$$X_1 = 6,5 \cdot 10^{-5}$$

$$X_1 = 6,8 \cdot 10^{-5}$$

$$X_1 = 6,6 \cdot 10^{-5}$$

$$X_1 = 6,3 \cdot 10^{-5}$$

Қимати миёна:

$$X_m = (8 + 6,5 + 6,8 + 6,6 + 6,3) / 5 \cdot 10^{-5} = 6,84 \cdot 10^{-5}$$

Майлқунӣ:

$$d_1 = 8,6,84 / \cdot 10^{-5} = 1,16 \cdot 10^{-5}$$

$$d_2 = 6,5-6,84 / \cdot 10^{-5} = 0,34 \cdot 10^{-5}$$

$$d_3 = 6,8-6,84 / \cdot 10^{-5} = 0,04 \cdot 10^{-5}$$

$$d_4 = 6,6-6,84 / \cdot 10^{-5} = 0,24 \cdot 10^{-5}$$

$$d_5 = 6,3-6,84 / \cdot 10^{-5} = 0,54 \cdot 10^{-5}$$

Суммаи майлқуниҳо:

$$\sum d_i = 2,32 \cdot 10^{-5}$$

Квадрати майлқуниҳо:

$$\sum d_i^2 = 1,812 \cdot 10^{-10}$$

Майлқунии стандартӣ:

$$S = \frac{\sum d_i^2}{n-1} = \sqrt{(1,812 \cdot 10^{-10}) / 4} = 6,73 \cdot 10^{-6}$$

Хатогии нисбӣ:

$$S_r = \frac{S}{C} \cdot 100 \% = (6,73 \cdot 10^{-6} / 6,84 \cdot 10^{-5}) \cdot 100 \% = 9,8 \%$$

Хатогии миёна:

$$S_{x_m} = \frac{S_r}{\sqrt{n}} = 6,73 \cdot 10^{-6} / \sqrt{5} = 3,01 \cdot 10^{-6}$$

Фосилаи эҳтимолии эътимоднок: ΔX ; $t_{n,p}$; S_{xm}

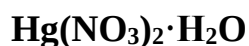
$$\Delta X = 2,78 \cdot 3,01 \cdot 10^{-6} = 8,37 \cdot 10^{-6}$$

$$X = \bar{C} \pm \Delta X (6,84 \pm 0,84) \cdot 10^{-5}$$

Хатогии нисбӣ 9,8 % -ро ташкил медиҳад.

Хамин тариқ, дар асоси ҳисобқуниҳои статистикӣ маълум гашт, ки хатогии нисбии муайянқунии ионҳои симоб дар маҳлулҳои обӣ 9,8%-ро ташкил медиҳад.

5.3. Омӯзиши захрнокии шадиди моддаи аввалаи намаки



Дар доираи таҳқиқотҳои пешазклиникавии пайвастаҳои аз ҷиҳати

биологӣ фаъол, баҳодиҳии токсикологии амиқи $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ гузаронида шуд.

Мақсади таҳқиқоти мазкур – муайян намудани нишондоди токсикологии шадид ва ҳисобкунии вояи миёнаи марговари (LD_{50} – летальная доза) намаки нитрати симоб (II) гузаронида шуда, инчунин омӯзиши ҳамаҷонибаи ҳодисаҳои клиникий таъсири токсикологӣ ба организми ҳайвонот мебошад. Аҳамияти бештар ба омилҳои вояи моддаи захрвар ва инчунин баҳодиҳии равандҳои барқароршавӣ пас аз давраи захролудшавӣ дода мешавад.

Таҳқиқотҳои эксперименталӣ дар пойгоҳи пажӯҳишгоҳи тибби фундаменталӣ дар иштироки кормандони озмоишгоҳи илмӣ-таҳқиқотӣ гузаронида шудаанд. Ҳамаи таҳқиқотҳо дар мувофиқа бо ҳуҷҷатҳои меъёрии байналмилалӣ ва миллӣ, ки гузаронидани таҷрибаҳо дар ҳайвоноти лабораторӣ ба танзим медароранд, бо дарназардошти принципҳои биоэтика ва муносибати гуманӣ гузаронида шуданд.

Дар таҳқиқотҳои клиникӣ калламӯшҳои нарина ва модинаи вазнашон 170-200г истифода карда шудаанд, ки онҳо аз ҷиҳати клиникӣ солим буданд ва дар шароитҳои виварӣ (нигоҳдорӣ дар лаборатория) мутобиқ шуда буданд.

Ҳайвоноти санчидашуда дар шароитҳои стандартӣ, дар ҳарорат ва рутубати ҳавои назоратшаванда, рӯзи равшании муътадил (12 соат рӯшноӣ, 12 соат торикӣ) нигоҳ дошта, вояи ҳӯроки ҳаррӯзаро қабул мекарданд ва дастрасӣ ба об доштанд. Пеш аз оғози таҷриба баҳодиҳии ҳолати умумии ҳайвонот бо мақсади муайян намудани калламӯши бемор ва ё тамоилдошта гузаронида шуд. Барои омӯзиши захрнокии шадиди маводи таҳқиқшаванда калламӯшҳо ба панҷ гурӯҳи таҷрибавӣ тақсим карда шуданд, ки дар ҳар як гурӯҳи таҷрибавӣ 6 калламӯш дохил мешуд. Пайвастаи комплексии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибаш $\text{Hg}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ -ро як маротиба ба дохили меъдаи ҳайвонот дар намуди маҳлули 1,3% дар ҳудуди вояҳои аз 10 то 250 мг/кг аз вазни калламӯшҳо ворид карда шуд. Чунин интиҳоби воридкунии моддаи таҳқиқшаванда бо мақсади моделсозии роҳҳои

перроралии воридшавӣ модда ба организм гузаронида шуд. Баъд аз ворид намудани маводи таҳқиқшавандаи пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибаш $[HgL_2(NO_3)_2]$ назорати пайвастаи ҳайвонот дар соатҳои аввали воридкунӣ, баъдан назорати вақт-вақт муддати 28 шабонарӯз таҷриба гардид. Дар мавриди назораткунӣ тағйирёбӣ дар ҳолати умумии ҳайвонот, рафтор, фаъолнокии ҳаракат, ҳолати пашми пӯст ва қабатҳои луобӣ, хусусиятҳои нафаскашӣ ва фаъолияти дил, хӯрдани хӯрок ва об ва инчунин динамикаи вазни танаи ҳайвонот ба қайд гирифта мешуд. Аҳамияти махсус ба муҳлати пайдошавии аломатҳои захролудшавӣ равона гардид. Муриши ҳайвонот ҳар рӯз бо бақайдгирии вақти вафоти онҳо дақиқан натиҷагирӣ шуд. Натиҷаҳои таҳқиқот нишон дод, ки таъсири захрнокии пайвастаи таҳқиқшавандаи $[HgL_2(NO_3)_2]$ дорои характери воятобё (дозозависисмый) мебошад. Зимни ворид намудани вояҳои паст (то 18,5 мг/кг) ҳайвонҳо маводро хуб ҳазм намуданд: муриши онҳо ба назар намерасид, тағйирёбии қатъии ҳолати физиологӣ ба қайд гирифта нашуд. Реаксияи рафтор ва фаъолнокии ҳаракат ба меъёри физиологӣ мутобикат мекарданд, нишондодҳои вазни танаи ҳайвонҳо ва инчунин хӯрдани хӯрок ва об аз нишондодҳои назоратӣ фарқ намекарданд. Зимни баланд намудани вояи маводи таҳқиқшаванда то 22,5 мг/кг дар як қисми ҳайвонот аломатҳои аввалаи захролудшавӣ, яъне беҳолӣ, паст шудани фаъолияти ҳаракат ва пастшавии реаксия ба ангеаҳои беруна дида шуд. Ин гуна тағйирот дорои характери баргарданда буда, дар муддати шабонарӯзи дигар нест мешуданд. Вояи 150мг/кг маводи таҳқиқшаванда ба сатҳи наздик ба муриши миёнаи ҳайвонот оварда расонида, бо нишонаҳои клинӣ захролудшавӣ, инчунин, вайрон шудани координатсияи ҳаракат, гиподинамия ва аломатҳои вайроншавии системаи асаб аён мегардад.

Зимни ворид намудани вояҳои баланди маводи таҳқиқшаванда (200-277,5 мг/кг) реаксияҳои шадиди захролудшавӣ ба назар расида, дар натиҷа муриши зиёд дар муҳлати кам оварда расонид. Вояи 205 мг/кг маводи таҳқиқшаванда то 100 %-и муриши ҳайвонотро дар шабонарӯзии аввал

оварда мерасонад, ки омили мазкур доир ба дараҷаи захрнокии баланди мавод дар вояи додашуда шаҳодат медиҳад. Дар асоси коркарди статистикии натиҷаҳои эксперименталӣ вояи миёнаи марговари (LD_{50}) маводи таҳқиқшавандаи $Hg(NO_3)_2 \cdot H_2O$ 150,5 мг/кг вазни ҳайвонотро дар мавриди истеъмоли дохили меъда нишон дод.

Мувофиқ ба таснифоти гигиении захрнокии моддаҳои химиявӣ зимни воридшавии дохили меъда маводи таҳқиқшаванда бо қимати LD_{50} ба **синфи I хатарнок** (моддаҳои хатарноки бо эътидол) дохил мешавад. Омили мазкур доир ба мавҷудияти таъсири захрноки воягӣ шаҳодат медиҳад: дар вояи пасти моддаи таҳқиқшаванда хуб ҳазм мешавад, аммо дар мавриди баланд бардоштани вояи модда захролудшавӣ аён гардида, системаи марказии асаб ва ғавти ҳайвонот ба назар расид. Марбут донистани пайвастаи таҳқиқшавандаи таркибаш $Hg(NO_3)_2 \cdot H_2O$ ба моддаҳои захрноки миёнаи хатарнок, имконият медиҳад то соҳаи токсикологӣ зимни гузаронидани таҳқиқотҳои минбаъдаи пеш аз клиникӣ дар мавриди интиҳоби речаи воя ва баҳодиҳии «эффektivноқӣ-хатар» ба инобат гирифта шавад.

5.4. Омӯзиши захрнокии шадиди пайвастаи комплекси

таркибаш $[HgL_2(NO_3)_2]$

Дар ҳамин мазмун монанд, мо таҳқиқотҳои пешазклиникавии пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина, таркибаш $[HgL_2(NO_3)_2]$ -ро гузаронидем, то фарқият миёни моддаи аввала ва пайвастаи синтезкарда муайян карда шавад. Нишондоди захрнокии шадид ва инчунин муайянкунии вояи миёнаи марговари пайвастаи таҳқиқшаванда гузаронида шуд. Омӯзишҳо дар Пажуҳишгоҳи тиббӣ-фундаменталӣ гузаронида шуда, ҳамаи таҳқиқотҳо мувофиқ ба ҳуҷҷатгузории меъёрии байналмилалӣ ва миллӣ, ки раванди таҳқиқотро назорат мекунанд, гузаронида шудаанд.

Дар таҳқиқотҳои клиникавӣ калламушҳои нарина ва модинаи массаашон 160-210 грамм гирифта шуд. Калламушҳои озмоишӣ солим буда, дар шароитҳои муқаррарӣ (ҳарорат ва рутубати ҳаво, речаи равшании мӯътадил, вояи хӯрок ва дастрасӣ ба об) нигоҳ дошта шудаанд. Пеш аз шуруъ

намудани таҷриба ҳолати умумии калламушҳо мушоҳида карда шуд. Бо мақсади омӯзиши заҳрнокии моддаи таҳқиқшавандаи таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ калламӯшҳоро ба панҷ гурӯҳи таҷрибавӣ тақсим намудем, ки ҳар як гурӯҳ аз шаш калламӯш иборат буд. Моддаи таҳқиқшавандаро маротибаи аввал ба меъдаи ҳайвонот тавассути перроралӣ маҳлули концентратсияш 1,8% бо вояҳои 10-270 мг/кг ворид намудем. Пас аз ворид намудани моддаи таҳқиқшаванда ба организми ҳайвонот назорати онҳо соатҳои аввали воридкунӣ, баъдан назорати вақт-вақт муддати 28 шабонарӯз гузаронида шуд. Тағйирёбии ҳолати умумии ҳайвонот, рафтор, ҳаракат, ҳолати пашми пӯст ва қабатҳои лӯобӣ, нафасгирӣ ва вазни онҳо назорат карда мешуд. Ҳалокати калламӯшҳо зимни ворид намудани вояи баланди моддаи таҳқиқшаванда 23,5 мг/кг ба назар мерасид, ки дар он маврид дар як қисми ҳайвонот аломатҳои заҳролудшавӣ ба назар мерасид, яъне беҳолӣ, паст гардидаи фаъолияти ҳаракат ва кам шудани аксуламал ба ангезаҳои беруна дида мешуд. Дар муддати як шабонарӯз ин аломатҳо нест шуданд. Воридкунии вояи моддаи таҳқиқшаванда 150 мг/кг вазни ҳайвонот ба дараҷаи муриши миёнаи ҳайвонот баробар буда, бо аломатҳои клиникалии заҳролудшавӣ, яъне вайрон шудани ҳаракати калламӯшҳо, ҳиподинамия ва аломатҳои вайрон шудани системаи асаб мерасонад.

Воридкунии вояи баланди (190-207 мг/кг) пайвастаи комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина таркибаш $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ реаксияи шадиди заҳролудшавӣ ба амал омада, ҳалокати зиёди калламӯшҳо дар соатҳои аввали воридкунӣ ба назар расид. Зимни ворид намудани вояи 210 мг/кг моддаи таҳқиқшаванда ба талафоти 100%-и ҳамаи калламӯшҳо оварда расонид. Омили мазкур оид ба заҳрнокии баланди моддаи таҳқиқшаванда маълумот медиҳад.

Дар доираи коркарди статистикуии натиҷаҳои эксперименталӣ вояи миёнаи марговари (LD_{50}) маводи таҳқиқшавандаи $[\text{HgL}_2(\text{NO}_3)_2]$ 170,5 мг/кг вазни ҳайвонотро дар мавриди истеъмоли дохили меъда (перрорально) ташкил дод. Мувофиқ ба таснифоти гигиении заҳрнокии моддаҳои химиявӣ

зимни воридшавии дохили меъда маводи таҳқиқшаванда бо қимати LD_{50} ба **синфи III хатарнокӣ** (моддаҳои хатарноки бо эътидол) дохил мешавад. Омили мазкур доир ба мавҷудияти таъсири заҳрноки воягӣ шаҳодат медиҳад: дар вояи паст моддаи таҳқиқшаванда хуб ҳазм мешавад, аммо дар мавриди баланд бардоштани вояи модда заҳролудшавӣ аён гардида, системаи марказии асаб ва муриши ҳайвонот ба назар мерасид. Марбут дониستاني пайвастаи таҳқиқшавандаи таркибаш $[HgL_2(NO_3)_2]$ ба моддаҳои заҳрноки миёнаи хатарнок, имконият медиҳад то соҳаи токсикологӣ зимни гузаронидани таҳқиқотҳои минбаъдаи пеш аз клиникӣ дар мавриди интиҳоби речаи воя ва баҳодиҳии «эффektivноки-хатар» ба инобат гирифта шавад.

Ҳамин тариқ, дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда маълум карда шудааст, ки моддаи аввалаи нитрати симоб (II), ки дорои заҳрнокии баланд аст, ба **синфи I хатарнокӣ** дохил мешавад. Дар мавриди комплексҳосилшавӣ бо лиганди органикии N – атсетилтиомочевина заҳрнокии он кам гашта, ба **синфи III хатарнокӣ** дохил мешавад. Ин омил оид ба камшавии заҳрнокии пайвастаҳои металлҳои вазнини заҳрнок, зимни ҳосил намудани пайвастаҳои комплексӣ бо лигандҳои органикӣ шаҳодат медиҳад.

ХУЛОСА

1. Хосиятҳои кислотагӣ-асосии лиганди органикии N – атсетилтиомочевина бо истифода аз усули потенциометрӣ омӯхта шудаанд. Маълум карда шудааст, ки лиганди органикӣ дорои собитаи усутвории баробар ба $pK = 2,36$ мебошад. Дар асоси қимати ба даст овардашуда раванди комплексҳосиллашвии симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина дар қувваи ионии 0,1; 0,25 ва 0,5 мол/л $NaClO_4$ ҳудуди ҳароратҳои 278-318K омӯхта шудаанд. Собитаҳои умумии уствории пайваستҳои 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 ҳосиллашвии 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.

4. Бо усули термогравиметрӣ маҳсули зинаҳои алоҳидаи термотаҷзияи пайвастҳои комплекси симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина муайян карда шудаанд. Барои ҳамаи зинаҳои термотаҷзия 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 таалуқ доранд.

6. Методикаи муайян намудани ионҳои симоб (II) бо N – атсетилтиомочевина бо усули турбидиметрӣ коркард шуда, ба роҳ монда шуд. Маълум карда шуд, ки раванди комплексҳосиллашвии системаи

мазкурро метавон барои муайян кардани ионҳои симоб (II) дар объектҳои муҳити атроф истифода кард. Омӯзиши захрокии шадиди пайвастаи комплекси синтезкардашуда гузаронида шуд.

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 токсикологӣ 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 зарраҳои комплексӣ ҳамчун маълумоти адабиётӣ метавонанд истифода карда шаванд. Пайвастҳои комплекси 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.

Пайвастҳои комплекси симоб (II) бо лигандҳои органикӣ ба туфайли хосиятҳои физикию химиявӣ ва аҳаммияти 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 (-SH-SH) ва амидиро (-CONH₂-CONH₂) дошта, метавонад бо координатсияшавиашон бо металлҳои интиқолӣ рақобат дошта бошанд. Намакҳои симоб (II), ки қобиляти баланди зиддимикробӣ доранд, омӯзиши хосиятҳои пайвастҳои координатсионии он

барои коркарди усулҳои безараргардонӣ аз манфиат дур нест. Як қатор маълумот оид ба паст шудани захронокӣи металлҳои вазнин (симоб, сурб) дар раванди комплексҳосилшавӣ дар адабиёти илмӣ оварда шудаанд. Маълумоти зиёд оид ба захролудшавии муҳити атроф дар мавриди истифодаи симоб ва намакҳои он оварда шудааст. Миёни лигандҳои органикӣ, ки бо атомҳои симоб ба реаксия дохил мешаванд, пайвастиҳои сулфурдор мавқеи хосро ишғол мекунанд. Лигандҳои сулфурдор бо ионҳои гуногуни металлҳо фаъолнокии биологиро зоҳир мекунанд (зиддиомосӣ, зиддӣ занбурӯғӣ, зиддивирӯсӣ ва ғ.).

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

АДАБИЁТ

1. Белеванцев, В.И. Роданогалогенидные комплексы ртути (II) в водном растворе / В.И. Белеванцев, В.И. Шуваев // Журнал неорганической химии. Том 23. № 4 1978. С. 924-928. УДК: 541.49, 123.22+492\131\141\151\268.5\212.
2. Корнев В.И. Комплексы ртути (II) с яблочной кислотой в водных растворах / В.И. Корнев, А.А. Кардапольцев // Вестник Удмуртского Университета. Серия физика и химия. № 2. 2008. -С. 58-64. УДК: 541.49+546.49.
3. Балятинская, Л.Н. Сольватация и комплексообразование ионов ртути в воде и неводных растворителях. Успехи химии, 1979, 48 (4), 772–791.
4. Корнев, В.И. Поликарбосилатные комплексы ртути (II) в водно-тартратных растворах. / В.И. Корнев, А.А. Кардапольцев // Вестник Удмуртского университета. Серия физика и химия. № 8. 2007. - С.73-84. УДК: 541.49+546.49.
5. Wanda Malavasi Mercuvy (11) dibromo-bis (3-amino-5-mercapto-1.2.4-triazole) / Wanda Malavasi. // Journal of Chemical crystallography, Vol.26, №1. (1996)- P.63-99.
6. Нечаева, Е.М. Физико-химические закономерности экстракции комплексных соединений ртути (II) с производными пиразолона: автореф. дис. канд. хим. наук / Нечаева Екатерина Михайловна.– Пермь, 2009.-18 с.
7. Кузнецов, В.И. Аналитическое применение 8-меркаптохинолина (тиооксина) и его производных / В.И. Кузнецов, Ю.А. Банковский, А.Ф. Иевиньш // Журн. аналит. химии.– 1958. -Т .XIII, вып.3.-С. 268-273.
8. Халимова, Р.С. Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с N – ацетилтиомочевинной при температуре 278 К. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова Материалы республиканской научно-практ. конф. «Современное состояние и перспективы физико-химического анализа». Душанбе 2023. С.224-227.

9. Бекназарова, Н. С. Комплексообразование ртути (II) с 1-фенил-2,3-диметилпиразолит-5-тионом в среде 0,1 моль/л HNO_3 в интервале температур 273–338 К. / Н.С. Бекназарова, Дж. О. Шоалифов, Амиджанов А.А., С. М. Сафармамадов // Журнал физической химии. Том 90. №12. 2016 г. С.1833-1837.
10. Халимова, Р.С. Исследование процесса комплексообразования Hg(II) с N – ацетилтимочевиной при ионно силе 0,1 моль/л NaClO_4 и температуре 288К. / Р.С. Халимова, Ф.Ш. Курбонова, Ф. Фируза // Вестник педагогического университета. Серия естественных наук. №4(20). Душанбе. 2023. С. 83-88. ISSN 2707-9996.
11. Дорожко, Е.В., Исследование комплексообразующих свойств глутатиона с ионами ртути потенциометрическим и спектрофотометрическим методами. / Е.В. Дорожко, Е.И.Короткова, О.А.Воронова, Е.В.Плотников, Д.А.Вишенкова, К.В. Дерина // Фундаментальные исследования. №8. 2013. -С.601-604. УДК 543.3.
12. Корнев В.И., Гомо- и гетеролигандные комплексы ртути (II) с моноаминными комплексонами в водном растворе. / В.И. Корнев, А.А. Кардапольцев // Координационная химия. 2008. Том 34. №8. С.571-576.
13. Пыреу, Д.Ф. Смешанное комплексообразование этилендиаминтетраацетатов свинца (II) и ртути (II) с тиомочевиной в водном растворе. / Д.Ф. Пыреу, Е.В. Козловский, М.С. Груздев, Р.С. Кумеев // Координационная химия, 2011. Том. 37, №10., С. 733-740.
14. Александрова, А.В. Влияние сольватации на структуру комплексов гемецианинового хромоинофора с катионами ртути. / А.В. Александрова, А.В. Шокуров, В.В. Арсланов, С.Л. Селектор // Физическая химия краун – соединений, порфиринов и фталоцианинов. Сборник статей. Выпуск VII. 2018. -С.6-8.
15. Иванов, А.В. Синтез и структура дитиокарбаматно-хлоридных комплексов золота(III) - ртути (II). / А.В. Иванов, О.В.Лосева, Т.А. Родина // XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии.

Тезисы докладов. Том 2b. Уральское отделение РАН. 2016.

16. Супрунович, В.И. Изучение процесса комплексообразования ртути (II) с 8-меркаптохинолином в солянокислых средах / В.И. Супрунович, С.Т. Ващенко // Журн. неорг. химии. – 1979. –Т. XXIV, вып. 9. –С. 2371-2377.
17. Логинова, О. Н. Взаимодействие цистеина и ртути (II) в водном растворе: автореф. дис. ... канд. хим. наук: 02.00.01. / Логинова Ольга Николаевна.– АН СССР. - Новосибирск, 1987. – 14 с.
18. Шульман, В.М. К вопросу об аналитическом использовании комплексообразования с тиомочевинной / В.М. Шульман, З.А. Савельева, Л.Ф. Игрунова // Изв. СО АН СССР, серия хим.наука.- 1966.-№3.Вып.54.
19. Мовчан, З.З. Комплексные соединения ртути (II) с некоторыми серусодержащими лигандами в смешанных растворителях. / З.З. Мовчан, Ф.М. Тулюпа, Э.Я. Байдарова, М.В. Повчстяной // Журн. неорг. химии.-1978. С. 2057-2059.
20. Тропова, Б.Ф. Изучение устойчивости тиомочевинных комплексных соединений ртути. / Б.Ф. Тропова // Журн. неорг. химии. – 1956. –Т.1, вып. 5. - С. 930-934.
21. Дустмохаммад, С. Комплексы ртути (II), свинца (II) и 3d-металлов с 4-метил-1,2,4-триазолтиолом: автореф. дисс. канд. хим. наук: 02.00.01. / Дустмохаммад Самиипагале . – Душанбе, 2012. - 20 с.
22. Биккулова, А.Т. Нейтронно-активационный и атомноабсорбционный методы определения ртути в сточных водах с применением производных 1-фенил-2,3-диметилпиразолон-5-тиона / А.Т. Биккулова, В.М. Иванов // Журн. аналит. химии. – 1986. Т. 31, вып. 2. –С. 262-265.
23. Гладышев, В.П. Аналитическая химия ртути /В.П. Гладышев, С.А. Левицкая, Филиппова Л.М.- М.: Наука, 1974. -228с.
24. Супрунович, Ж.Б. Куликовская, Ю.И. Усатенко // «Хим. технология», 1971. Вып. 17,-С. 191-197 (Харьков); Усатенко, Ю.И. Синтез и исследование смешанных комплексных

- соединений ртути с тиооксином и галогенами / Ю.И. Усатенко, В.И. Супрунович, Ж.Б. Куликовская // Журн. неорган. химии. – 1971. – Т. 16, вып. 12.-С. 3200-3205.
25. Куликовская, Ж.Б. Изучение реакций комплексообразования ртути (II) с 8-меркаптохинолином и их применение в аналитической химии: автореф. дисс... канд. хим. наук: Ж.Б. Куликовская.- Днепропетровск, 1971. -23 с.
26. Усатенко, Ю.И. Комплексообразование ртути и серебра с этилентииомочевинной и их амперометрическое титрование / Ю.И. Усатенко, Е.А. Климкович, Л.В. Чеботарува // Укр. хим. журн.- 1964.Т.30. С. 979-983.
27. Buisson C., Breant M. *Analyt. Chim. acta.* 56. 197(1971).
28. Усатенко, Ю.И. Комплексообразование ртути и серебра с этилентииомочевинной и их амперометрическое титрование / Ю.И. Усатенко, Е.А. Климкович Л.В. Чеботарева // Укр. хим. журн. – 1964. Т.30.–С.979.
29. Конкина И.Г., С.П. Иванов, Ю.И.Муринов Биядерный комплекси ртути (II) с D-глоконовой кислотой. Журнал неорган.химии. Том.64, №2. 2019. С.165-171.
30. Логвиненко В. А., Паулик Ф., Паулик И. Квазиравновесная термогравиметрия в современной неорганической химии - Новосибирск: Наука, Сибирское отделение, 1989 - 111 с.
31. Малько, М.В., Новый метод анализа термогравиметрических данных / М.В. Малько, С.В. Василевич, А.В. Митрофанов, В.Е. Мизонов. // Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2021. Т. 64. Вып. 3. С. 24-32.
32. Буря, А.И. Применение кинетических уравнений для описания термодеструкции полиэфрикетона и углепластиков на его основе / А.И.Буря, Н.Т.Арламова, Л.В.Чайка, Цуй Хун // Вестник Новгородского государственного университета. №6(89) 2015. С. 43-47.
33. Цыганова, И.В. Термогравиметрический анализ аммоний-железо(II)

сульфата / И.В.Цыганова, В.П.Балыгин // Бутлеровские сообщения. Казань. 2018. Т.55. №8.С.102-108.

34. Козлов Александр Николаевич. Экспериментальное определение теплофизических характеристик и кинетико-термодинамический анализ гетерогенных систем на примере твёрдых топлив. Дисс.на соис. уч.степ. канд. техн.наук Иркутск. 2016. – 152С.
35. Кукушкин, Ю.Н. Термические превращения координационных соединений в твёрдой фазе. / Ю.Н. Кукушкин, В.Ф.Буданова, Г.Н.Седова. – Л.: Изд-во ЛГУ, 1981. – 178с
36. Кукушкин, Ю.Н. Термолиз координационных соединений / Ю.Н.Кукушкин, О.Ф. Ходжаев. – Ташкент.: Фан, 1986. – 197с.
37. Аминджанов, А.А. Синтез и исследование процесса термолиза оксохлоро-2-этил-1,2,4-тиадиазольного комплекса рения (V) / А.А.Аминджанов, Г.Абделрахман, Н.Г. Кабиров // Изв. АН РТ. Отдел физ.-мат., хим., геол. и техн. наук. – 2011г. - №2 (143). – С.80-87.
38. Coats A.W., Redfern J.P. Kinetics parameters from thermogravimetric data // Nature. 1964. V. 201. P. 68 – 69.; Coats A.W., Redfern J.P. Kinetics parameters from thermogravimetric data. II // Journal of Polymer Science. 1965. V. 3. P. 917 – 920.
39. Horowitz, H. Thermoanalytical Investigation of Terazosin Hydrochloride / Horowitz H., Metzger G. // Anal. Chem. - 1963. - V.35. - P.1464.
40. Курбонова, Ф.Ш. Исследование процесса термолиза тиоцианатного комплекса рения (V) с 1 – ацетил – 4 – метилтиосемикарбазидом / Ф.Ш. Курбонова, А.С. Содатдинова, С.И. Сафаров // Вестник таджикского национального университета. -2018. - №4. – С.189-196.
41. Семитут Евгений Юрьевич Двойные комплексные соли золота (III): синтез, структура, термические свойства. Дисс. на соис. уч. степ.канд. хим. наук. Новосибирск. 2014. -177С.
42. Курбонова, Ф.Ш. Исследование процесса темолиза оксохлоро-N-ацетилтиомочевинного комплекса рения (V). / Ф.Ш. Курбонова, С.И.

- Сафаров С.И., М.М. Низомов // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. №4. 2020. С. 261-268.
43. Сафармамадзода, С.М. Исследование термических свойств координационных соединений серебра (I) с 1,2,4 – триазолами. / С.М.Сафармамадзода, Х.Г. Мудинов, К.С. Мабаткадамзода // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. №1. 2024. С.156-164
44. Курбонова Ф.Ш., Сафаров С.И., Муродов К.С. Исследование процесса комплексообразования рения (V) с N,N – диэтилтиомочевинной. Материалы научно-практич.конф. преподавателей, сотрудников НИИ ТНУ. Душанбе. 2022. С.340-342.
45. Котегов, К.В. Исследование комплексообразования рения (V) с N,N-этилтиомочевинной/ Т.В.Зегжда, Н.В.Фадеева, Ю.Н. Кукушкин // Журн. неорган. химии. –1974. – Том 19. – Вып. 8. – С. 2118-2123.
46. Курбонова, Ф.Ш. Комплексообразование рения (V) с ацетилтиомочевинной в среде 5 моль/л HCl при 288K / Ф.Ш. Курбонова, Сафармамадов С.М, Аминджанов А.А // – ДАН РТ, – Том 55. - №7. - С. 567-572.
47. Гозиев, Э.Дж. N,N-этилтиомочевинные комплексы рения(V) и некоторые их применения: автореф. дис... канд. хим. наук. / Э.Дж. Гозиев. – Душанбе, 2007. – 22 с.
48. Фадеева, Н.В. Исследование комплексообразования рения (V) с тиомочевинной и ее производными: автореф. дис. ...канд. хим. наук. /Н.В. Фадеева. – Ленинград, 1973. – 15 с.
49. Аминджанов, А.А. Комплексные соединения рения (V) с 2-пиридилтиомочевинной / А.А. Аминджанов, М.М. Машали // Координационные соединения и аспекты их применения: сб. науч.тр. / Тадж. гос. ун-т. – Душанбе, – 1991. – Вып. 1. – С.18-25.
50. Харитонов, Ю.Я. Комплекс хлорида кадмия с ацетил-тиокарбамидом Ю.Я. Харитонов. // Журн. неорг. химии. – 1987. – С.1051-1166.

51. Головнев, Н.Н. Комплексообразование Bi (III) с некоторыми N-и N,N-замещенными тиомочевинами / Н.Н. Головнев, Г.В. Новикова, А.А. Лешок // Журн. неорган. химии. – 2009. – Том 54. – Вып. 2. – С. 374-376.
52. Бобоев, Ш.А. Использование метода LS-SVM для изучения процесса комплексообразования переходных металлов с производными тиомочевины в водных и водно-органических растворах. Сборник научных трудов Новосибирского государственного технического университета. №1 (94). 2019. С. 71-84. ISSN 2307-6879.
53. Мовчан, В.В. Комплексообразование ртути (II) с некоторыми серосодержащими лигандами в смешанных растворителях / В.В Мовчан, Ф.М. Тулюпа, Е.Я. Байбарова, М.В. Повстаной. // Журн. неорган. химии. –1978.–С.2557-2559.
54. Орысык С.И., Рыбачук Л.Н., Пехньо В.И., Орысык В.В. Синтез и спектральная характеристика комплексов палладия (II) с 1-аллил-3-пиридин-2-ил-тиомочевинной. Журнал неорганической химии. Том. 56. №11. 2011. С. 1830-1834. ISSN: 0044-457X.
55. Давлатова, Х.С. Синтез и ИК – спектроскопическое исследование координационных соединений меди (II) с N-ацетилтиомочевинной. / Х.С. Давлатова, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков // Вестник Таджикского национального университета. Серия естественных наук. №1. 2021. С. 157-167. ISSN: 2413-452X.
56. Курбонова, Ф.Ш. Таҳқиқи пайвастиҳои комплекси рений (V) бо N,N – диэтилтиомочевина. / Ф.Ш. Курбонова, С.И. Сафаров // Паёми донишгоҳи омӯзгорӣ. Бахши илмҳои табиӣ. №3 (19). Душанбе 2023. С.74-78с.
57. Большаков, К.А. Синтез и изучение тиокарбамидных комплексов осмия / К.А.Большков, Н.М. Сеницын, В.Н. Пичков, М.Г. Грибановская // Журн. неорган. химии. – 1986. – Том 31.– Вып. 3. – С. 720-724.

58. Аминджанов, А.А. Комплексные соединения рения (V) с N – ацетилтиомочевинной. / А.А. Аминджанов, С.М. Сафармамадов, Ф.Ш.Курбонова // Доклады Академии наук РТ 2011, том 54, №10. С.831-836.
59. Сахарова, Н.Н. О комплексных соединениях лантана, церия, празеодима и неодима с тиомочевинной, Докл. АН СССР, 1957, том 113, номер 5, 1073–1075.
60. Камалов, Р.М., Зимни М.Г., Пудовик А.Н. Изотиоцианаты фосфора, N – фосфорилированные тионкарбаматы и тиомочевинны. / Р.М. Камалов, М.Г. Зимни, А.Н. Пудовик // Успехи химии. LIV. 1985. Вып. 12. С. 2044-2075.
61. Никитин, В.И., Гудимович Т.Ф., Ровная Н.И., Мишарина Н.А. Исследование процесса комплексообразования некоторых d- металлов с тиомочевинной и ее производными в неводных средах// Тезисы докладов VI Всесоюзного совещание по химии неводных растворов неорганических и комплексных соединений М.- 1987.- С.84
62. Х.С. Давлатова, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков Синтез и исследование координационных соединений меди (II) с N – ацетилтиомочевинной. Академический журнал Западной Сибири. №1 (56). Том 11. 2015. С. 121-122.
63. Ильина И.Г. и др. Тиоамиды, тииооксамиды и тиомочевинны как лиганды для синтеза хелатных комплексов с N,S–хелатным узлом // Матер. XXI межд. Чугаевской конф. по коорд. химии. г. Киев, 2003,-С. 226.
64. Рудницкая О.В., Пичков В.Н., Новицкий Г.Г. Взаимодействие бромосоединений рутения с тиомочевинной// Журн. неорган. химии.- 1988.-Т.33, вып. 9.-С.2333-2339
65. Аминджанов А.А, Махмуд Мухамад Машали. Комплексообразование рения (V) с 2-пиридилтиомочевинной в среде 6 моль/л HCl// Комплексообразование в растворах.- Душанбе,1991.- С. 80-88.
66. 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.

67. Ибрагимова, Ю.Э. О.Ф.Ходжаев, Н.А. Парпиев Координационные соединения некоторых металлов с N,N'-бис(м-этоксикарбонилфенил)мочевинной. Журнал общей химии. 2013. Т. 83. Вып. 7. С. 1170-1174.
68. Малиновский Т.Н., Петухов Л.И., Гэрбелэу Н.В. Строение аддуктов тиомочевинны и этилентиомочевинны к тиосемикарбазидацетату кобальта (II). Доклады Академии наук СССР. Том 266. №4. 1982. С. 857-861.
69. Рудницкая О.В., Култышкина Е.К., Доброхотова Е.В., Хрусталеv В.Н., Зубавичус Я.В. Тиокарбамидные комплексы платиновых металлов. Materials of the international scientific conference dedicated to the 85 th anniversary of the academician Rafiga Alirza gizi Aliyeva "Chemistry of coordination compounds: actual problems of analytical chemistry" Baku, 2017. С.52
70. Хоцяновский, О.И. Полярографическое изучение процессов комплексообразования тиомочевинны с одновалентной медью в сернокислом растворе / О.И. Хоцяновский, В.М. Ледовских // Журн. общ.химии. – 1973. – Том 44. – Вып. 4. – С.727-730.
71. Харитонов, Ю.Я. Координационные соединения двухвалентного марганца с фенилтиокарбамидом / Ю.Я. Харитонов, Л.Н. Амбролазде //Журн. неорган. химии. – 1987. –Том 32. – Вып.3, – С. 657-664.
72. Hernandez W., Paz Ju., Vaisberg A. et al. // Bioinorganic Chemistry and Applications. 2008. Article ID.690952. 9 pages. doi:10.1155/2008/690952.
73. Яковлева, М.А. Депротонирование пиразола и его аналогов водным ацетатом меди в присутствии триэтиламина / М.А. Яковлева, Е.В. Кушан, Н.С. Болтачева, В.И. Филякова, С.Е. Нефедо // Журнал неорганической химии. - 2012. - Т. 57. - № 2. - С. 222–234.
74. Сальников, Д.С. Кислотно-основные свойства сульфоксиловой кислоты

и диоксидов тиомочевины и их реакционная способность в редокс процессах: автореф. дис. ... канд. хим. наук / Сальников Д.С. – Иваново, - 2008. – 16 с.

75. Сафармамадов, С.М. Устойчивость 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра(I) в водно-метанольных растворах / С.М. Сафармамадов, З.И. Каримова, К.С. Мабаткадамзода, Ю.Ф. Баходуров, А.С. Содатдинова // Вестник Таджикского национального университета, серия естественных наук. - 2020. - № 2. - С. 168-176.
76. Safarmamadova S.M., Karimova Z.I., Bakhodurova Yu.F., and Mabatkadamzoda K.S. Formation of Complexes of Silver (I) and 2-Mercaptobenzimidazole in Water–Ethanol Solutions. ISSN 0036-0244, Russian Journal of Physical Chemistry A, 2020, Vol. 94, No. 6, pp. 1119–1124. Pleiades Publishing, Ltd., 2020, Russian Text ©The Author(s), 2020, published in Zhurnal Fizicheskoi Khimii, 2020, Vol. 94, No. 6, pp. 844–849.
77. Содатдинова, А.С. Комплексообразование серебра (I) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом в растворителе вода-этанол / А.С. Содатдинова, Т.Р. Усачева, С.М. Сафармамадзода / Журнал физической химии. 2020. - Т. 94. - № 6. - С. 22-31.
78. Некрасова, Л.П. Кислотно-основные свойства и спектральные эффекты протонирования диаминов бензимидазольного ряда / Л.П. Некрасова // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. – 2017. - № 8. – С. 231-236.
79. Маткаримова Н.А., Парпиев Н.А., Хасанов Ш.Б. Комплексы металлов с органическими лигандами. Modern scientific challenges and trends. Science Centrum. PL ISSUE 9. ISBN 978-83-949403-3-1. Warsaw, Poland. 2018. С. 9-10.
80. Х.М. Холов Спектроскопическое исследование комплексов 3-d металлов с тиосемикарбазоном п-N, N – диметиламинобензальдегида. Наваийский государственный педагогический институт, г. Наваи, Узбекистан. Том:

2, Номер: 2 Год: 2014 С. 120-122.

81. Куликов А.Н. Дефицит комплекса микроэлементов в организме животных и их коррекция. Автореф. дисс.канд.вет.наук. Санкт-Петербург. 2019. – 20С.
82. Курбонова Ф.Ш. Комплексные соединения рения (V) с N – ацетилтиомочевинной и 1-ацетил-4-метилтиосемикарбазидом. Автореф. дисс. канд. хим. наук. Душанбе. 2015. -23С.
83. Шакирова Э.Р. Комплексы N-тиофосфорилированных тиомочевин, тиаамидов и тиосемикарбазодов с катионами меди (I) и серебра(I). Автореф. дисс. канд. хим. наук. Казань. 2010. -18С.
84. Печенкин А.Г., Ярославцева С.Д. Комплексные соединения 8-оксихинолина. Изв. Томского ордена трудового красного знамени политех. института им. С.М.Кирова. Том.112. 1963. С. 98-99.
85. Z. Xing, Y. Fu, J. Zhou, C. Zhu and Y. Cheng, Org. Biomol. Chem., 2012, 10, 4024 DOI: 10.1039/C2OB25311A.
86. Хабаров, Ю.Г., Яковлев М.С. Спектрофотометрический метод определения катионов ртути. / Ю.Г.Хабаров, М.С. Яковлев // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. Т.50 (5). 2007. С. 17-20.
87. Турабов, Н.Т., Тоджиев Ж.Н. Спектрофотометрическое определение ионов ртути (II). / Н.Т.Турабов, Ж.Н. Тоджиев // Universum: Химия и биология. №11 (65). 2019. С.52-55
88. Критченков А.С., Станишевский Я.М., Скорик Ю.А. Дизайн и противоопухолевая активностей комплексных соединений платины. Химико-фарм. журнал. №1. Том 53. 2019. С. -16
89. Басарева О.И., Заикин А.В., Хапчаева Д.А., Костров С.В., Букреева Е.В., Калуцкий П.В., Лазурина Л.П. Изучение биологической активности комплексных соединений металлов с некоторыми антимикробными средствами. Курский научно-практический вестник “Человек и его здоровье”, 2007, № 4. С. 5-11.

90. Семенов В.Н. Процессы формирования тонких слоев полупроводниковых сульфидов из тиомочевинных координационных соединений. Автореф. дисс.док.хим.наук. Воронеж. 2002. -46С.
91. Карякин, Ю.В. Чистые химические вещества / Ю.В. Карякин, И.И. Ангелов. - М.: Изд. во «Химия», 1974. – 407 с.
92. Физер Л., Физер М. Реагенты для органического синтеза. Т. III. М.: Мир. 1970.-278С.
93. Гладышев, В.П. Аналитическая химия ртути /В.П. Гладышев, С.А. Левицкая, Филиппова Л.М.- М.: Наука, 1974. -228с.
94. Mehkov, A.N., Gamov G.A. KEV: a free software composition and determining the equilibrium constant using UV-Vis and potentiometric data. Talanta. – 2019. – V. 198. – P.200
95. Альберт А. Константы ионизации кислот и оснований / А.Альберт, Е. Сергент // Перевод с английского Е.Ю. Беляева, В.И. Зайонца, И.Я. Квитко и Б.В. Пассета. М.: Химия. – 1964. – Ленинград. – 180 с.
96. 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.
97. Девятков, Ф.В. Кислотно-основные свойства L-гистидина в средах вода-ацетонитрил и вода-диметилформамид переменного состава / Ф.В. Девятков, К.А. Игнатьева // Учёные записки Казанского государственного университета. Естественные науки. 2005.–Т. 147. – С. 49-64.
98. Неклюдов, В.В. Кислотно-основные свойства бис(гидразинокарбонилметил)сульфоксида и его комплексообразующая способность в отношении меди(II) и никеля(II) / В.В. Неклюдов, С.Г. Фаттахов и др. // Журнал общей химии. – 2014. – Т. 84. – Вып. 3. – С. 508-512.
99. Носкова Г.Н. Твердые углеродсодержащие композитные электроды для определения элементов вольтамперометрическими методами: Автореф. Диссертация на соискание научной степени доктора химических наук -

Томск: ТГУ, 2012. – 12 с.

100. Кузьминская Е.А., Шумар С.В. Потенциометрическое определение некоторых тяжелых металлов с использованием твердых композитных электродов // Актуальные проблемы гуманитарных и естественных наук: Материалы III научно-практической конференции «Общество, наука, инновации». Москва. 2015. - С. 8-11.
101. Lane T.J., Yamaguchi A., Quagliano J.V, Ryan J.A., Mizushima S.J. Am. Chem. Soc., 81, 3824. 1959
102. Yamaguchi A., Penland R.B., Mizushima S., Lane T.J., Curran C., Quagliano J.V. J. Am. Chem. Soc., 80, 527. 1958.
103. 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.
104. Харитонов, Ю.Я. К вопросу об интерпретации ИК-спектров поглощения селеномочевины и дейтероселеномочевины. / Ю.Я. Харитонов, В.Д. Берега, А.В. Аблов // Журн. неорган. химии. – 1970. Том 15, – №11. – С.3163-3166.
105. Харитонов Ю.Я. ИК спектры поглощения и нормальные колебания комплексов металлов с тиомочевиной / Ю.Я.Харитонов, В.Д.Берега, А.В. Аблов, Н.Н. Проскина // Журн.неорган. химии. 1973. Т.16. С.2166-2167.
106. Харитонов Ю.Я. ИК спектры поглощения N – ацетилтиокарбамида. / Ю.Я. Харитонов, Т.Н. Гущина // Журн. неорган. химии. 1988. Т.33. №9. С.2228-2233.
107. Кукушкин, Ю.Н. Химия координационных соединений/Ю.Н.Кукушкин. – Москва, 1987. 454 с.
108. Липсон Г., Стипл Г., Интерпретация порошковых рентгенограмм. - М.: Мир, 1972. - С.384.
109. Technical Program of the 15-th International Congress on Thermal Analysis and Calorimetry, (August 2012, Osaka, Japan) [Электрон. ресурс]. – Osaka: ICTAC15, 2012. –Электрон. опт. диск (CD-ROM).

110. Логвиненко В.А. Термический анализ координационных соединений и клатратов. - Новосибирск: Наука, СО, 1982. - 128 с.
111. Afkhami, A. Construction of a modified carbon paste electrode for the highly selective simultaneous electrochemical determination of trace amounts of mercury(II) and cadmium(II)/ Afkhami A., Madrakian T., Sabounchei S.J., Rezaei M., Samiee S., Pourshahbaz M.// Sensors and Actuators B: Chemical, 2012, Vol. 161, p. 542.
112. Шумар С.В. Анализ некоторых многокомпонентных систем потенциометрическим титрованием с применением ЭВМ: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.02 — Аналитическая химия. Томск, 1995. — 22 с.
113. 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.
114. 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.
115. 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.
116. 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.
117. 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.
118. Большаков, Е.С. Фотонные кристаллы и их аналоги как средство

химического анализа / Е. С. Большаков а, И. С. Щемелев, А. В. Иванов, А. А. Козлов // Журнал аналитической химии, 2022, Т. 77, № 10, стр. 875-898.

119. Катышева, А.С. Применение химически осажденных тонких пленок сульфида свинца в качестве материалов датчиков контроля содержания свинца в водных средах / А.С. Катышева, В.Ф. Марков, И.В. Зарубин, Л.Н. Маскаева, А.Ф. Никифоров // Водное хозяйство России. №4. 2011. С. 64-73. УДК 543.33:574.
120. Большаков, Е.С. Фотонные кристаллы и их аналоги как средство химического анализа / Е. С. Большаков, И. С. Щемелев, А. В. Иванов, А. А. Козлов // Журнал аналитической химии, 2022, Т. 77, № 10, стр. 875-898.
121. Михельсон, К. Н. Химические сенсоры на основе ионофоров: достижения и перспективы. /К.Н. Михельсон, М.А. Пешкова // Успехи химии. – 2015 – Т. 84 – №. 6 – С. 555-578.
122. Дарбинян, Г.Г. Взаимодействие ртути (II) с аллил-и фенилтиомочевинами и ее определение в ртутьсодержащей руде. / Г. Г. Дарбинян, Ш.С. Закарян, Г.Н.Шапошникова, и А. Г. Хачатрян // Химический журнал Армении. 62. №1-2. 2009. С.106-110.

**Рӯйхати интишороти мақолаҳои илмӣ аз ҷониби
КOA тақризшаванда**

1. 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). С.83-88. УДК 547.554.22.04 ISSN 2707-9996. Душанбе 2023.

2. 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, 106-109с.

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

Фишурдаи мақолаҳо

1. 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.

2. 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.

3. 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.

4. Халимова, Р.С. Омӯзиши ҷараёнгузаронии пайвастаҳои комплекси симоб (II) бо N – ацетилтиомочевина / 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.

5. 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.
6. Халимова, Р.С. Изучение кислотно-основных свойств N-ацетилтиомочевина. / Ф.Ш.Курбонова, Р.С. Халимова // Материалы республиканской Комплексные соединения и аспекты их применения. Душанбе. 2021. С. 56-59.
7. 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.
8. 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.
9. 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.
10. Халимова, Р.С. Таҳқиқоти 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.
11. 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.