ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК: 546.57+544.478
ББК: 24.234(2Р)
К-23

На правах рукописи



КАРИМЗОДА ЗАМИРА ИСМАТУЛЛО

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ СЕРЕБРА (I) С 2-МЕРКАПТОБЕНЗИМИДАЗОЛОМ В ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ РАСТВОРАХ

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

Душанбе – 2026

Диссертаци выполнена на кафедре неорганической химии химического факультета Таджикского национального университета

Научный руководитель:	**Баходуров Юсуф Файзуллоевич,** кандидат химических наук, доцент кафедры неорганической химии Таджикского национального университета
Официальные оппоненты:	**Раджабов Умарали Раджабович** – доктор химических наук, профессор кафедры фармацевтической и токсикологической химии Таджикского государственного медицинского университета имени Абуали ибни Сино; **Низомов Исохон Мусоевич** – кандидат химических наук, доцент кафедры общей и неорганической химии Таджикского государственного педагогического университета имени С. Айни.
Ведущая организация:	Кафедра общей и неорганической химии Таджикского технического университета имени академика М.С.Осими

Защита диссертации состоится «17» декабря 2026 года в 10^{00} часов на заседании Диссертационного совета 6D. KOA - 136 при Таджикском национальном университете. Адресу: 734025, г.Душанбе, проспект Рудаки, 17 Таджикский национальный университет, главный корпус, зал диссертационного совета.

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

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

Автореферат разослан «___» _____2026 года.

Ученый секретарь диссертационного совета, к.х.н., доцент  Бобокалонов Т.Б.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования. Вследствие, того, что серебро имеет огромное практическое значение, он является одним из наиболее исследуемых комплексообразователей среди переходных металлов. На его основе получено большое количество комплексных соединений с азот, серу и кислородсодержащими лигандами не только в растворах, но и в твердом виде. Одним из классов органических соединений, который имеют важное значение как в медицинской практике, так и в координационной химии это имидазол и его производные. Сам имидазол является ключевым гетероциклическим компонентом и входит в состав жизненно важных биомолекул (гистамин, витамин кобаламин, гистидин и др.). Наряду с этим, производные имидазола имеют важное значение в ферментативном катализе, регулировании разных аллергических процессов, а также используется как противогрибковые лекарство.

2-меркаптобензимидазол имеет различные области применения. Это органическое гетероциклическое соединение применяется как антидеградационный агент, защиты резины от окисления, в качестве промежуточного продукта при получение некоторых лекарственных средств. Наряду с этим, данное соединение применяется в медицинской практике в качестве компонента противолепрозных средств.

В зарубежных и отечественных литературных источниках имеются работы, в которых представлены закономерности образования имидазолсодержащих координационных соединений серебра(I). Установлены закономерности формирования комплексов в зависимости от положения заместителей в имидазольном кольце, природы органического растворителя и ионной силы раствора. Подобные исследования проведены в основном с участием алкилпроизводных имидазолов, а также некоторых меркаптосодержащих лигандов. Наряду с этим следует отметить, что информации о закономерностях формирования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра в смешанных растворителях в литературе отсутствуют.

Для более подробного механизма воздействия различных

соединений серебра на организм и дальнейшего его использования в других областях важное значение имеет исследование комплексообразования данного металла в широком интервале содержания водно-органических растворов.

В этой связи важной задачей является исследование факторов, которые определяют закономерности образования комплексов серебра с 2-меркаптобензимидазолом и разработка методики выделения данных комплексных соединений в твердом виде.

Степень научной разработанности проблемы. Комплексообразованию серебра с производными триазола, имидазола, тиосемикарбазида, тиомочевины, посвящены ряд работ. Представлены состав моно- би- и тризамещенных координационных соединений серебра. Выявлен механизм влияния природы органического лиганда, растворителя, ионной силы и температуры на равновесие комплексообразования данного металла. В работах Т.Р.Усачевой [3], С.М.Сафармамадзода [4], Раджабова У. Рахимовой М.[10] приводятся данные о кислотно-основных свойствах ряда производных имидазола, некоторых аминокислот в водных и водно-органических растворах. Представлены экспериментальные результаты по закономерности изменения энергии Гиббса переноса некоторых производных имидазола из воды в водно-диметилформамидных, диметилсульфоксидных и спиртовых растворах. Рассмотрены закономерности влияния природы органического растворителя на кислотно-основные свойства имидазолов. Закономерности протекание комплексообразования серебра с некоторыми производными имидазола, тиомочевинной и его производными (N,N-этилентиомочевины, N,N-диэтилентиомочевины и т.), 1,2,4-триазола, 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом, 1-ацетил-тиосемикарбазидом, 1-формил-3-тиосемикарбазидом и 4,4-триметилендипепиридином обсуждены в работах С.М.Сафармамадзода [3,4], А.С.Содатдиновой [3,4] Я.К.Кудратуллозода [6], К.И. Тудоряну [7], Ф.М.Тулюпа [8], П.К.Мигаль, Л.В.Назарова [7,9] , Ю.Е.Горбунова, Е.Я. Байбарова [8] и др. В представленных работах определены состав, устойчивость и закономерности протекания комплексообразования в зависимости от различных факторов.

Вместе с тем, анализ современной и классической литературы показало, что данные по исследованию кислотно-основных свойств 2-меркаптобензимидазола и его комплексообразующей способности с ионом серебра в водно-диметилформамидных, диметилсульфоксидных и спиртовых растворах в настоящее время практически отсутствуют. Также отсутствуют данные о влияние состава и природы органических растворителей на константу ионизации 2-меркаптобензимидазола и комплексообразования с серебром в зависимости от температуры и концентрации органических растворителей.

Связь исследования с программами (проектами) и научными тематиками. Данная диссертационная работа выполнена в соответствие с приоритетными направлениями научных и научно-технических исследований в Республике Таджикистан на 2021-2025 годы, в рамках четвертой цели Национальной стратегии развития Республики Таджикистана-ускоренной индустриализацией страны, и в рамках научной темы кафедры неорганической химии Таджикского национального университета: «Комплексообразование d-переходных металлов с участием амидных, тиоамидных и кислородсодержащих лигандов» (государственный регистрационный номер 0122TJ1434**)** и государственным заказом (проект №ГР 0124Tj158).

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ИССЛЕДОВАНИЯ

Цель данного исследования заключается в определении и оценке кислотно-основных равновесий и комплексообразующих свойств 2-меркаптобензимидазола (2-MBI) с серебром в растворах в зависимости от природы органического растворителя, получении новых 2-меркаптоимидазольных координационных соединений серебра и исследовании их свойств.

Задачи исследования:

-изучить протолитические равновесия 2-меркаптобензимидазола и влияние природы растворителя на доминирования различных форм лиганда в зависимости от кислотности среды;

-исследовать термодинамику комплексообразования Ag(I) с 2-MBI в широком температурном диапазоне. Выявить ключевые закономерности, которые определяют влияние природы неводных растворителей на состав, свойства и термодинамическую стабильность образующихся комплексов в растворе;

-разработать методики синтеза координационных соединений серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом в зависимости от соотношения реагентов. Определить состав и предложить наиболее вероятные реакции образования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра.

Объекты исследования. Координационные соединения серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом, образующиеся в водных средах; **системы** Ag^+–2-MBI-alc.(C_2H_5OH, CH_3OH) –H_2O, Ag^+–2-MBI-ДМСО–H_2O, Ag^+–2-MBI-ДМФА–H_2O.

Предмет исследования. Изучение важнейших физико-химических свойств комплексов Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом и выявление закономерности процесса комплексообразования в зависимости от содержания и природы органического растворителя.

Научная новизна. Впервые определены величины констант ионизации 2-меркаптобензимидазола и области доминирования различных форм данного лиганда в зависимости от природы неводного компонента. Осуществлён процесс формирования комплексных форм серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом в смешанных органических растворителях. Представлена схематическая модель формирования комплексных форм Ag(I) с 2-MBI и предложена матрица их образования. Показано, что в изученных условиях 2-MBI с Ag^+ образует стабильные моно- и билигандные комплексы. Установлены закономерности, связывающие природу и содержание органического растворителя с процессом образования 2-меркаптобензимидазолных комплексов иона серебра.

В результате исследования обнаружено формирование двух стабильных координационных соединения серебра. При этом установлено, что специфика органического растворителя не влияет на число формирующихся комплексов, однако определяет их термодинамическую устойчивость в растворе. Вместе с тем

увеличение содержания ДМФА, ДМСО и спирта приводит к стабильности соединений. На основе полученных результатов рассчитаны ΔG, ΔH, ΔS формирования монолигандных и билигандных комплексных форм серебра с 2-MBI, который позволил установить общие закономерности влияние органических растворителей на характер и устойчивость комплексов. Выявлено, что величина энтальпия на обеих стадиях имеет положительное значение.

Энергия Гиббса образования комплексов сопровождается отрицательным значением, который указывает на самопроизвольном протекание процесса комплексообразования. Определены динамика сольватационных эффектов в зависимости от природы и концентрации органических растворителей. Показано, что стабильность монокомплекса серебра при смене растворителя контролируется изменениями в её сольватном состояние. В результате исследования также впервые синтезированы новые координационные соединения в твердой фазе, которые изучены методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, дериватографии, рентгенофазовым анализом и кондуктометрии. Анализ ИК -спектров некоординированного 2-меркаптобензимидазола и его комплексы с серебром показали, что органический лиганд координируется монодентатно посредством атома серы меркаптогруппы органического лиганда. Определены продукты термолиза некоторых синтезированных комплексов и параметры их кристаллической решетки.

Теоретическая и научно-практическая значимость исследования. Закономерности, выявленные при изменении состава смешанного растворителя, при определении величин констант кислотной ионизации органического лиганда, величины общих констант устойчивости, термодинамических параметров образования комплексов серебро с 2-меркаптобензимидазолом вносят значимый вклад в химию координационных соединений. Численные значения констант устойчивости комплексных частиц, термодинамические характеристики процесса комплексообразования, величины pKa 2-меркаптобензимидазола могут быть использованы как справочный материал при исследовании процесса комплексообразования других металлов с имидазолами.

Определенные фундаментальные параметры комплексообразования серебра с 2- меркаптобензимидазолом, позволяют предсказать химические, некоторые биологические и физические свойства известных или ещё недоступных комплексных соединений с производными имидазола.

Разработанные способы получения координационных соединений могут быть использованы для синтеза комплексных соединений ионов различных металлов с производными имидазола как в водных, так и водно-органических средах. Результаты диссертационной работы могут быть использованы при чтении курсах по соответствующим дисциплинам (химия координационных соединений, методы исследования комплексных соединений и др.), в образовательных учреждениях в области комплексных соединений.

Положения, выносимые на защиту:

-установленные закономерности по влиянию состава водно-органических растворов на кислотно-основное равновесие 2-MBI и посроенные диаграммы области доминирования различных форм 2-MBI (протонированной, нейтральной, депротонированной) в широком диапазоне концентраций органических растворителей.

-величины общих констант устойчивости 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра при 278-318 К и термодинамические характеристики реакции образования комплексных форм $[Ag2\text{-}MBI]^+$ и $[Ag(2\text{-}MBI)_2]^+$. Выявлены закономерности образования комплексных форм $[Ag2\text{-}MBI]^+$ и $[Ag(2\text{-}MBI)_2]^+$ в растворах H_2O-$(CH_3)_2SO$, H_2O-$(CH_3)_2NC(O)H$, H_2O -C_2H_5OH и H_2O -CH_3OH.

-разработанные методики синтеза комплексов, состав и реакции протекаемые при взаимодействии серебра с MBI в зависимости от соотношения реагентов и природы исходных солей серебра, результаты элементного анализа, кондуктометрических, ИК-спектроскопических, термических и рентгенофазовых исследований синтезированных комплексов.

Степень достоверности результатов. Достоверность результатов обеспечена использованием современных методов исследования, программ, высокой сходимостью теории с экспериментальными данными и статистической обработкой полученных результатов; использованием основных принципов

системного подхода, обоснованным выбором основных целей исследования при постановке научной задачи и разработки её решения, непротиворечивостью полученных экспериментальных результатов с известными работами ученных и специалистов в области координационной химии. Диссертация прошла проверку на наличие плагиата, оригинальность текста составила 83%.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. Научная работа соответствует паспорту специальности 1.2.4. Неорганическая химия:

-определение характера взаимосвязи между составом, структурой и свойствами неорганических соединений (Главы 2 и 3);

-разработка методов синтеза неорганических соединений (Глава 2);

-химия координационных соединений (Главы 1-4).

Личный вклад соискателя. Анализ литературных источников по теме диссертации, проведение экспериментальных работ, постановке задач, публикации научных результатов по теме диссертации в рецензируемых научных журналах, активное участие в научных конференциях и семинарах. Обработка и интерпретация полученных экспериментальных результатов исследования.

Апробация и реализация результатов диссертации.

Материалы диссертационной работы докладывались и обсуждались на ежегодных научных конференциях профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2018, 2019, 2020), международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» (Душанбе, 2018, 2025), республиканской научно- теоретической конференции «Основы развития и перспективы химической науки в республики Таджикистан», (Душанбе, 2020), VII международной научной конференции «Вопросы физической и координационной химий» (Душанбе, 2026).

Публикации по теме диссертации. По теме диссертации опубликованы 12 работ. Из них 4 статьи в журналах из Перечня рецензируемых научных изданий, 8 тезисов-докладов на научных конференциях различного уровня.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из введения, актуальность работы, цели, задачи исследования,

положения, выносимых на защиту, научной новизны, теоретической и практической значимости работы, обзора литературы, экспериментальной части, обсуждения результатов, выводы, список использованных научных источников (включающих 126 наименований). Работа изложена на 149 страницах машинописного текста, включает 41 таблиц и 22 рисунков.

Основное содержание работы

Введение содержит актуальность темы, описано текущее состояние исследуемой проблемы. В структуре данного раздела изложены цели и задачи работы. Обоснована научная новизна и доказана достоверность научных результатов, сформулированы положения, выносимые на защиту. При этом раскрыта практическая ценность экспериментальных результаты. В разделе отражены сведения об апробации работы.

Первая глава состоит из трех подразделов, в которых отражены анализ литературы относительно состояния исследования кислотно-основных равновесий серосодержащих органических лигандов, как в водных, так и смешанных растворах. Установлено, что «на величин констант ионизации тиоамидных лигандов влияет как природа заместителя в составе гетероцикла, так и его месторасположение. Наряду с этим, природа растворителя в среде которой исследуется протолитические свойства тех или иного органического соединения также оказывает значительное влияние на значение констант ионизации. Получены информации о химико-аналитических свойств ряда серосодержащих органических лигандов. Установлены формы влияния стереохимических особенностей изомерных тиосодержащих соединений и выявлен области применения изученных органических соединений в химическом анализе. Изучены условия комплексообразования тиоамидных лигандов с разными металлами, определены спектральные характеристики, состав и устойчивость образующихся комплексных соединений» [1].

В результате анализа литературных источников рассмотрен термодинамика образования комплексов серебра с донорными гетероциклическими органическими лигандами и закономерности влияния температуры, состав раствора и природы неводного растворителя на данный процесс. Обобщены

результаты исследований по синтезу комплексов серебра с имидазолами, триазолами, тиомочевины и других органических лигандов и представлены данные об особенности их формирования. Выявлено, что «благодаря имеющиеся донорных гетероатомов в составе органических лигандов данные соединения способны к формированию комплексных соединений с разными металлами-комплексообразователями. Дан краткий обзор литературных сведений о значение имидазолсодержащих лигандов и их комплексов в жизнедеятельности человека и кислотно-основных свойств производных имидазола. Представлены значение констант ионизации в зависимости от расположения радикала в имидазольном кольце. Показано, что наличие метиленового мостика в молекуле бисбензимидазола приводит к увеличению значения первой константы ионизации и существенному различию основности атома бензимидазольных циклов. Протонирование бензимидазольных циклов приводит к батохромному сдвигу спектров поглощения, а протонирование амминогрупп к гипсохромному» [2]. Отмечено, что вопреки существование имеющиеся работ, ещё недостаточно данных для полноценного анализа того, как химические свойства комплексообразователя и органического лиганда, а также природы растворителя влияют на состав, устойчивости и термодинамика образования комплексов в смешанных растворителях.

Экспериментальная часть (глава 1) содержит описание методов синтеза координационных соединений серебра с 2-MBI. Представлены результаты pH-метрического анализа, направленного на исследование кислотно-основных свойств 2-MBI в смешанных водно-органических средах, методика проведения потенциометрического титрования при исследовании комплексообразования серебра. Приводятся реактивы и приборы, используемые в работе. Как исходные реагенты в данной работе применялись соли серебра ($AgNO_3$, Ag_2SO_4, AgГ (Г-Cl, Br), а в качестве органического лиганда использован 2-меркаптобензимидазол марки «ч.д.а». Ионы серебра определяли гравиметрическим методом, основанный на переводе труднорастворимого комплекса в раствор и количественного осаждения его труднорастворимых галогенидов. Ионы хлора и брома в составе синтезированных

координационных соединений определили из труднорастворимых галогенидов серебра гравиметрическим методом. Элементный анализ для определения атомов S, N, H и C проводили на приборе «VarioMICROCHNS». Ионы SO_4^{2-} в составе полученных комплексов определены весовым методом в виде $BaSO_4$.

Электропроводимость растворов комплексов изучено с использованием прибора марки HANNA «HI8733-Conductivity meter» с точностью температуры $\pm 0{,}1^0$C. Опредение ИК-спектра проведено на приборе Specord IR-75 SHIMADZU в области 400-4000 $см^{-1}$ в виде суспензии в вазелином масле и таблеток с бромидом калия. Порошковые рентгенограммы регистрировали с применением метода «Просев» и отражения-дифрактометре «ДРОН-3». Дериватограммы сняты на приборе «Паулик-Паулик-Эрдей» Q-1500D-системы.

Концентрация нитрата серебра при изучение процесса комплексообразования составляла 0,0001 моль/л ($1 \cdot 10^{-4}$). В качестве ионной силы использовали перхлората натрия. Индикаторным электродом служило пластинка из чистого металлического серебра. Электродом сравнения служил хлорсеребряный. Перед изучением комплексообразования серебра проводилось калибровка электрода. В качестве органических растворителей использованы этанол, метанол, диметилсульфоксид, диметилформамид. Концентрации неводных компонентов при изучении кислотно-основных свойств 2-MBI и исследования его комплексообразования с серебром составило 25, 35, 45 и 55 об.%. Расчёты по установлению устойчивости комплексов проведены с использованием нелинейного метода наименьших квадратов (НМНК) и разработанных компьютерных программ (KEV). Процесс потенциометрического титрования в ходе исследования комплексообразования серебра с 2-меркаптобензимидазолом осуществляли с переносом.

Величину констант ионизации рассчитывали по уравнению:

$$Ka=[2\text{-MBI}]\cdot[H^+]/[2\text{-MBIH}^+]$$

В качестве примера в таблице 1 приведены результаты по изучению кислотно-основных равновесий 2-MBI в этанольном растворе.

Таблица 1. – Результаты pH-метрического титрования раствора 2-MBI в среде 25 об.% этанола.T=298 K, J=0.1 моль/л. $C_{2\text{-MBI}}$=0,001моль/л.

Титрант 0,01н., раствор. KOH, мл	pH	C_{HL}, моль/л	$[L^-]$, моль/л	pK_a
1	2	3	4	5
0,0	6,71	0,001	--	--
0,1	9,27	0,000960159	0,0000398406	10,65
0,2	9,59	0,000920635	0,0000793651	10,65
0,3	9,74	0,000881423	0,000118577	10,61
0,4	9,84	0,00084252	0,000157480	10,57
0,5	9,94	0,000803922	0,000196078	10,55
0,6	10,05	0,000765625	0,000234375	10,56
0,7	10,11	0,000727626	0,000272374	10,53
0,8	10,16	0,000689922	0,000310078	10,51
0,9	10,21	0,000652510	0,000347490	10,48
1	10,29	0,000615385	0,000384615	10,49
1,1	10,32	0,000578544	0,000421456	10,46
1,2	10,34	0,000541985	0,000458015	10,41
1,3	10,39	0,000505703	0,000494297	10,39
1,4	10,41	0,000469697	0,000530303	10,36
1,5	10,45	0,000433962	0,000566038	10,33
1,6	10,48	0,000398496	0,000601504	10,30
1,7	10,51	0,000363296	0,000636704	10,27
1,8	10,55	0,000328358	0,000671642	10,24
1,9	10,57	0,000293680	0,00070632	10,19
2,0	10,58	0,000259259	0,000740741	10,12

С учетом экспериментальных результатах, которые получены в процессе титрования раствора 2-MBI при других концентрациях органических растворителей, нами рассчитаны значение $\bar{n}$ и построена зависимость этой функции от pH.

Обработка экспериментальных результатов позволил количественно оценить кислотно-основные свойства лиганда. При этом установлено закономерности влияния органического растворителя на численные значения pK_a.

В качестве иллюстрации на рисунке 1 представлен зависимость от pH при разной содержании метанола в растворе.

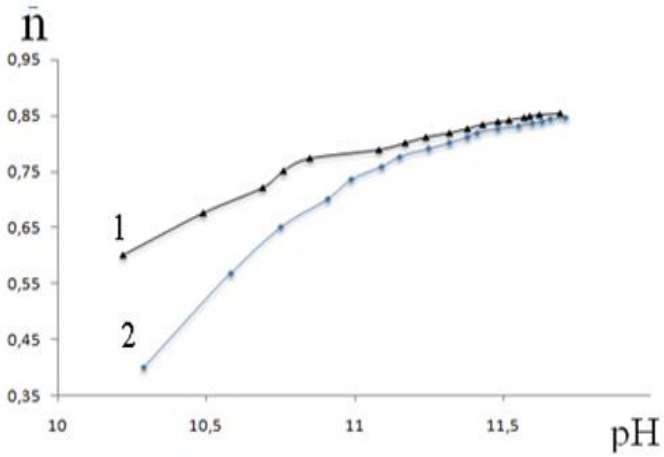


Рисунок 1. – Зависимость $\bar{n}$ от pH при 1-10 и 2-25 об.% метанола при 298К.

Изменения который показывает построенная кривая, характерно для титрования слабой кислоты сильным основанием. Значение $\bar{n}$ в изученной системе изменяется в диапазоне 0,35-0,90. Установлено, что в изученной системе образуется одна заряженная частица 2-MBI, а процесс протонизации вероятно происходит посредством атома азота, который расположена на третьем положение имидазольного фрагмента. Как известно, «наряду с другими факторами на кислотно-основные свойства лигандов оказывают влияние природа органического лиганда, радикалы и их месторасположение. В том числе и среда, в которой исследуется кислотно-основные равновесия того или иного органического лиганда» [1]. На основании этого, исследования были направлены на изучение влияния природы растворителя на кислотно-основные равновесия 2-MBI и численные значения pKa. С учетом pH метрических титрований рассчитаны величины констант ионизации 2-меркаптобензимидазола в смешанных растворах.

В работе определены значения констант ионизации 2-

меркаптобензимидазола в средах органических растворителей разной концентрации.

Величины pK_a в средах разной концентрации неводного компонента представлены в таблице 2.

Таблица 2. – Значение pKa 2-меркаптобензимидазола в зависимости от природы растворителя

Концентрация, объем.%	Растворитель				
	Вода	Этанол	Метанол	ДМСО	ДМФА
10	9,60	10,27	11,50	4,31	5,52
25		10,38	11,55	4,33	5,60
35		10,57	11,59	4,36	5,65
45		10,61	11,65	4,38	5,70
55		10,80	11,69	4,57	5,82

Показано, что при переходе от воды к водно-органическим растворам возрастают константы ионизации. Такая же закономерность изменение наблюдается при возрастании содержание неводного компонента в растворе. Так если сопоставить значение констант ионизации 2-MBI в спиртовых растворах, установлено, что в метаноле величина констант ионизации лиганда превосходит по сравнению с этанольным раствором. Данные значение в дальнейшем были использованы для оценки констант устойчивости комплексов серебра с 2-MBI.

Третья глава содержит данные по изучению образования комплексов Ag(I) с 2-MBI в растворах, содержащих разное количество органического растворителя. Установлено, что по мере увеличения концентрации органического лиганда в растворе потенциал серебряного электрода закономерно уменьшается. При более высокой концентрации лиганда получается осадок, а при снижении концентрации 2-MBI до 0,001моль/л образование осадка не наблюдалось, что дал возможность проводит потенциометрические титрование.

В качестве примера в таблице 3 представлены экспериментальные данные, полученные по измерению электродного потенциала системы Ag^+─2-MBI-этанол 10

об% при разной температуре (278-318 К).

Таблица 3. – Влияние температуры на изменение потенциала системы Ag^+/Ag в процессе титрования раствора нитрата серебра раствором 2-MBI (278-318 К), $C_{Ag^+}=1\cdot10^{-3}$ моль/л, $C_{2\text{-MBI}}=0{,}001$ моль/л. J=0,1 моль/л $NaClO_4$

E,мВ				
278 К	*288 К*	*298 К*	*308 К*	*318 К*
308	288	280	274	264
288	283	250	267	256
284	278	244	264	252
280	274	242	257	244
277	268	236	249	233
271	262	230	242	221
267	257	224	233	210
261	253	218	225	200
257	248	212	218	190
253	244	206	212	184
249	241	201	206	178
245	238	196	202	173
235	231	192	195	166
231	226	185	190	159
226	218	180	184	156
213	208	175	175	148
206	200	166	163	136
200	196	155	153	126
189	185	145	146	120
175	174	140	131	105
170	164	125	122	95
162	160	115	113	87

Полученные данные показывают, что несмотря на изменение температуры опыта при титровании системы Ag^+/Ag раствором 2-MBI наблюдается снижение электродного потенциала. Данный экспериментальный факт является результатом протекания процесса комплексообразования серебра с изученным лигандом.

Значение констант устойчивости комплексов, определённые с помощью компьютерной онлайн программы

KEV представлены в таблице 4.

Таблица 4. – Величины констант устойчивости 2-меркаптобензимидазольных комплексов Ag(I) при 278-318 К

T,K	$lg\beta_1$	$lg\beta_2$
278	5,15±0,1	8,62±0,098
288	5,21±0,09	8,98±0,01
298	5,53±0,1	9,27±0,1
308	5,80±0,2	9,55±0,02
318	5,98±0,1	9,72±0,02

Возрастание температуры приводит к изменению устойчивости как монолигандного, так и билигандного 2-меркаптобензимидазольного комплекса серебра. Сравнивание данных величин $lg\beta_i$ рассчитанные несколькими независимыми методами показало, что величины констант устойчивости мало отличаются друг от друга.

Полученные значения констант устойчивости были использованы для расчета термодинамических характеристик комплексообразования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра(I). На рисунке 2 представлен зависимость $lg\beta i$ от 1/T.

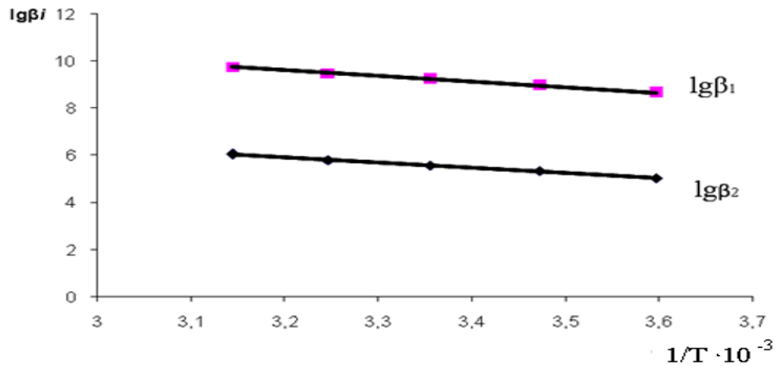


Рисунок 2. – Зависимость $lg\beta i$ от 1/T для образования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра

Величины ΔG^0, ΔS^0 и ΔH^0 образования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра иллюстрированы в виде таблицы 5.

Таблица 5. – Величины ΔG^0, ΔS^0 и ΔH^0 образования 2 меркаптобензимидазольных комплексов серебра (I)

Реакция образования комплексов	ΔH, кДж/моль	ΔG, кДж/моль	ΔS, Дж/моль·К
$Ag^+ + 2\text{-MBI} \rightleftarrows [Ag2\text{-MBI}]^+$	41,99±2,79	-29,40±0,3	247,91±9,39
$Ag^+ + 2(2\text{-MBI}) \rightleftarrows [Ag(2\text{-MBI})_2]^+$	46,24±1,22	-52,76±0,57	332,22±4,12

Установлено, что комплексообразование серебра с 2-MBI протекает по эндотермическому механизму, который выражается в положительном значение энтальпии данной реакции. Скорее всего образование комплексов протекает самопроизвольно с учетом значительного положительного изменения энтропии при высвобождении молекул растворителя из гидратной оболочки иона металла и лиганда.

В продолжении работы нами исследованы процесс комплексообразования Ag(I) с 2-MBI в водно-этанольных и водно-метанольных растворителях переменного состава.

Исследования показали, что для системы Ag(I)-2-MBI-OS, содержащей разное количество этанола и метанола (об. %), величина Е (мВ) имеет разное значение.

В таблицах 6 и 7 приведены величины констант устойчивости комплексов серебра с 2-меркаптобензимидазолом в водно-спиртовых растворах переменного состава.

Таблица 6. – Зависимость констант устойчивости от содержания этанола в растворе при 298 К.

Концентрации этанола, об.%	10	25	35	45	55
$lg\beta_1$	5,58±0,05	5,63±0,04	5,64±0,05	5,84±0,05	5,93±0,1
$lg\beta_2$	9,25±0,11	9,63±0,08	9,67±0,03	9,75±0,06	9,76±0,1

Таблица 7. – Зависимость констант устойчивости от содержания метанола в растворе при 298 К

Концентрации метанола, об.%	10	25	35	45	55
$lg\beta_1$	6,44±0,07	7,12±0,05	7,59±0,04	7,85±0,03	8,10±0,1
$lg\beta_2$	10,62±0,09	11,22±0,08	11,68±0,05	12,02±0,07	12,52±0,01

Выявлено, что природа растворителя оказывает влияние на устойчивость 2-меркаптобензимидазольных комплексов, но не изменяет характер комплексообразования. Общие константы устойчивости комплексов в метанольном растворе имеют большее значение по сравнению с этанолным раствором. В зависимости от природы растворителя константы устойчивости меняются по-разному. Вероятно, это изменение объясняется тем, что в метанолном среде ион Ag^+ слабо сольватируется. Также этот экспериментальный факт можно объяснить тем, что донорное число метанола ниже, и его молекулы слабо координированы с ионом серебра, который дают возможность легче замешать его на 2-меркаптобензимидазола. Сравнивание «нами данных с литературными показали, что производные имидазола с серебром образуют комплексы устойчивости, которых зависит от содержания растворителя. Это объяснено с помощью солватационно-термодинамического подхода» [3].

В таблице 8 представлены данные потенциометрического титрования и результаты обработки с помощью программы KEV для системы Ag+—H_2O-OS (где OS-ДМСО) при 25^0C.

Таблица 8. – Экспериментальные результаты потенциометрического титрования раствора Ag^+ раствором 2-меркаптобензимидазола, рассчитанные равновесны концентрации исходных веществ и продуктов реакции в среде 10 об.% ДМСО при 25^0C. $C_L=1\cdot10^{-3}$ моль/л, $C_{Ag^+}=1\cdot10^{-5}$ моль/л, J=0.1 моль/л $NaClO_4$

E, мВ	$C_{Ag^+}\cdot10^{-6}$ моль/л	$C_L\cdot10^{-4}$ моль/л	$[Ag]\cdot10^{-9}$ моль/л	$[2МБИ]\cdot10^{-4}$ моль/л	$[AgL]^+\cdot10^{-6}$ моль/л	$[AgL_2]^+\cdot10^{-6}$ моль/л
519	9,96	0,0398	0,006478	0,004646	3,44971	0,03222
510	9,92	0,794	0,003631	0,014676	6,10818	0,18024
503	9,88	0,119	0,001909	0,034095	7,45951	0,51134
485	9,84	0,157	0,001125	0,060286	7,77280	0,94213
473	9,81	0,196	0,073400	0,091095	7,66258	1,40342
455	9,77	0,234	0,052598	0,122959	7,41171	1,83231
443	9,73	0,272	0,039726	0,156042	7,10399	2,22875
433	9,69	0,313	0,031186	0,189899	6,78688	2,59125
427	9,65	0,347	0,025322	0,223436	6,48397	2,91283
422	9,62	0,385	0,020935	0,258205	6,19473	3,21592
419	9,58	0,421	0,017731	0,291634	5,92723	3,47542
413	9,51	0,494	0,013170	0,360138	5,43954	3,93866
402	9,43	0,566	0,010196	0,428741	5,00966	4,31838
295	5,41	4,5887	1,051736	4,482367	5,40244	4,86872
294	5,33	4,7033	9,812668	4,598927	5,17159	4,78186
292	5,19	4,8132	9,173535	4,710811	4,95237	4,69057
290	5,08	4,9187	8,609685	4,818098	4,75382	4,60506
288	4,98	5,0199	8,104523	4,921114	4,57058	4,52221

Показано, что в водно-диметилформамидных и диметилсульфоксидных растворах переменного состава образуются моно и бизамешенный 2-меркаптобензимидазольный комплекс Ag(I) не зависимо от природы органического компонента. В работе Сафармамадзода С.М. с коллегами «выявлено, что комплексообразование с имидазольсодержащими лигандами содержащими в составе меркаптогруппы преимущественно координируются через атом серы тионной группы. Данные экспериментальные полученные авторами этих работ подтверждены ИК- спектроскопическими и рентгеноструктурными исследованиями» [3].

Для иллюстрации экспериментально-измеренными и теоретическими данными представлены зависимости изменения величины электродного потенциала от точки титрования в водно-диметилсульфоксидных растворителях.

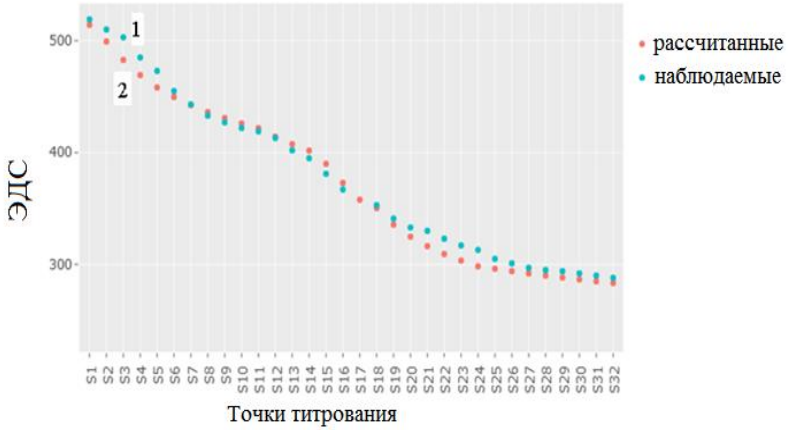


Рисунок.3. – Изменение потенциала системы Ag^{+}/Ag^{0} для образования комплексных форм серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом. 1-Obs.- наблюдаемый и 2-Calc-рассчитанный.

В результате обработки полученных экспериментальных результатов показано, что в системе образуются моно и двухзамешенные 2-меркаптобензимидазольные комплексы серебра. Для каждой ступени процесса комплексообразования рассчитаны их константы устойчивости в широком интервале концентраций водно-органических растворов (табл. 9 и 10).

Таблица 9. – Величины $lg\beta_i$ образования 2-меркаптобензимидазольных комплексов серебра(I) в водных растворах диметилсульфоксида

$C_{ДМСО}$, об.%	$lg\beta_1[AgL]^+$	$lg\beta_2[AgL_2]^+$
10	6,05±0,1	10,36±0,12
25	6,22±0,05	10,34±0,05
35	7,51±0,03	10,48±0,18
45	6,42±0,06	10,00±0,07
55	6,50±0,1	10,91±0,04

Таблица 10. – Величины $lg\beta_i$ образования 2-меркаптобензимидазолных комплексов серебра(I) в водных растворах диметилформамида

$C_{ДМФА}$,об.%	$lg\beta_1[AgL]^+$	$lg\beta_2[AgL_2]^+$
10	6,07±0,03	10,05±0,03
25	6,84±0,07	10,56±0,10
35	7,26±0,06	11,01±0,08
45	7,23±0,06	11,07±0,08
55	7,42±0,06	11,15±0,05

Проведённые нами исследования показали, что комплексообразование Ag(I) с 2-MBI- как в водном растворе, так и в водно-органических растворителях разной концентрации (C_2H_5OH, ДМСО, ДМФА) протекает ступенчато по одному и тому же механизму. Вместе с тем, природа растворителя оказывает определённое влияние на равновесия комплексообразование, вследствие чего изменяются значение констант устойчивости комплексов.

Шарниным В.А. высказано мнение: «для объяснения влияния природы растворителя на равновесие комплексообразование используют разные подходы, в том числе и сольватационо- термодинамический подход» [3].

На рисунке 5 в качестве примера представлен, зависимость энергия Гиббса реакции, ионов серебра и комплексной частицы в водно-диметилсульфоксидных растворах переменного состава. Установлено, что при увеличение содержания диметилсульфоксида в растворе от 10 до 55 об. % величина $\Delta G_{tr.}$ как для реакции, так и комплексной частицы уменьшается.

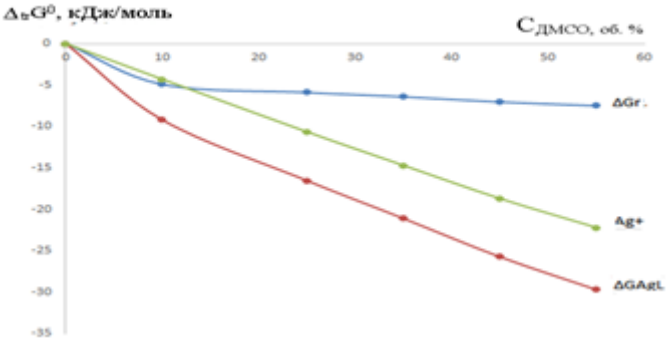


Рисунок 4. – Изменение энергии Гиббса образования комплексов серебра с 2-меркаптобензимидазолом в ДМСО

Выявлено, что для структурно близкого к соединению 2-меркаптобезимидазола «изменение энергии Гиббса переноса из воды в водно-этанолом и водно-ДМСО для 2-меркаптоимидазола в литературе имеются данные. Анализ данных, данной работы показало, что 2-меркаптоимидазол при переносе из воды в этих растворителях сольватируется незначительно» [4]. Анализ сольватации исходных реагентов при образовании комплексов в смешанных растворителях (ДМСО ($(CH_3)_2SO$), ДМФА(-$(CH_3)_2NC(O)H$)) показало, что изменение в сольватном состоянии комплексной частицы определяют устойчивость образования комплексов.

В главе 4 приведены состав и физико-химические свойства комплексов серебра с 2-меркаптобензимидазолом. Проведенные нами исследования показали, что в отличие от ИК-спектра некоординированного 2-меркаптобензимидзола в спектре координационных соединений наблюдается значительные изменения. В ИК- спектре комплексов серебра с 2-MBI по сравнению со спектром некоординированного 2-меркаптобензимидазола интенсивность полосы при 1180 см-1 снижается становясь более слабой. При этом появились новые полосы при 1140 и 1125 $см^{-1}$. Согласно литературным данным «в полосу 1180 см имеет вклад связи C=S» [5].

С учетом этих данных по отнесению полосы данного колебания по интенсивности свидетельствует о том, что в координации с 2-меркаптобензимидазолом. участвует атом серы. В ИК- спектре комплекса $[Ag(2MBI)_2(H_2O)_2]_2SO_4$

наблюдается низкочастотное смещение полос при 450 $см^{-1}$ проявляющиеся в ИК - спектре свободного лиганда при более высоких частотах. Данные полосы поглощения в спектре координационного соединения подвергаются смешению и проявляются при 495 $см^{-1}$. В ИК - спектре $[Ag(2MBI)_2(H_2O)_2]_2SO_4$ нами наблюдаются аналогичные изменения, свидетельствующие в пользу координации 2-меркаптобензимидазола с ионом – комплексообразователем посредством атома серы имидазольного гетероцикла. На основании проведенных исследований показано, что сульфатный ион находится во внешней координационной сфере.

Для подтверждение данного факта проводились также целенаправленные исследования по изучению электрической проводимости синтезированных комплексов. Проведённые исследования показали, что молярная электропроводность растворов исследуемых координационных соединений в ДМФА возрастает с повышением температуры (рисунке 5). Наблюдаемая зависимость согласуется с положениями теории электропроводности электролитов, согласно которой увеличение температуры способствует росту ионной подвижности в растворе. Следует отметить, что при температурах выше 45 °С все синтезированные комплексные соединения демонстрируют поведение, характерное для электролитов типа 1 : 1. Подобное поведение, по-видимому, обусловлено либо частичной сольватацией анионов (NO_3^-, CI^-, Br^-, SCN^-) молекулами растворителя в координационной сфере комплексов, а также их диссоциацией с образованием ионов в растворе.

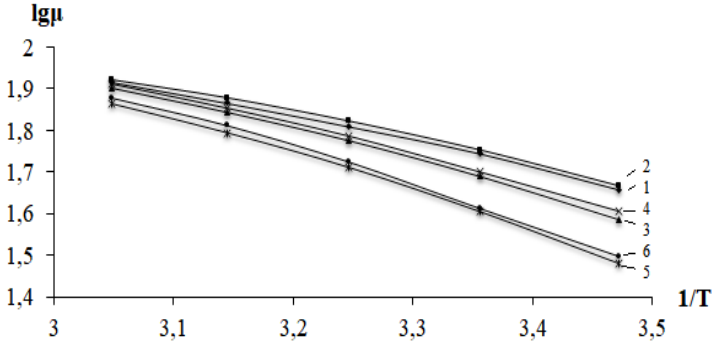


Рисунок 5. – Температурные зависимости молярной электропроводности lgμ от 1/T, 1-$[Ag(C_7H_6N_2S)(H_2O)_3\ NO_3]$; 2-$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)_2NO_3]$; 3-$[Ag(C_7H_6N_2S)_2CI]$; 4-$[Ag(C_7H_6N_2S)_2Br]$; 5-$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)]_2SO_4$ и 6-$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)\ SCN]$

Температурные зависимости молярной электропроводности (lgμ от 1/T) для растворов исследуемых координационных соединений были проанализированы с целью определения энергии активации процесса переноса заряда. Показано, что энергия активации увеличивается в ряду: $[Ag(C_7H_6N_2S)(H_2O)_3NO_3]$ <$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)_2NO_3]$ <$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)_2NO_3]$ <$[Ag\ (C_7H_6N_2S)_2Cl]$ <$[Ag\ (C_7H_6N_2S)_2Br]$ <$[Ag(C_7H_6N_2S)_2(H_2O)SCN]$. Полученные данные свидетельствуют об усложнении строения комплексных частиц, повышении их устойчивости и снижении подвижности ионов в растворе.

В результате исследования термолиза комплексов определены последовательное удаление ацидолиганда, органического лиганда и координационной молекулы воды. При этом терморазложение комплексного соединения существенно отличается от термолиза нитрата серебра. При сравнении штрих диаграмм комплексных соединений серебра, которые содержат разное число органического лиганда во внутренней координационной сфере показано, что в целом общий характер рентгенограмм не меняется. Этот факт свидетельствует в пользу того, что полученные координационные соединения являются изоструктурными. При этом на рентгенограммах комплексов наблюдается перераспределения интенсивности в рефлексах и смещение характеристических полос.

С учётом полученных результатов по изучению состава и строения координационных соединений серебра с 2-MBI (данные потенциометрического титрования, элементный анализ, ИК-спектр координационных соединений и исходных соединений, кондуктометрических измерений и др.), и способности донорных атомов органического лиганда в координации с металлами, координационное число-металла комплексообразователя нами приведены наиболее вероятные процессы образования комплексов.

ВЫВОДЫ

1. Впервые исследованы кислотно-основные равновесия 2-MBI в зависимости от природы и содержания органических растворителей. Установлен характер изменения кислотно-основных равновесий изученного лиганда от содержания

органических компонентов Определены области формирования разных форм органического лиганда в широком интервале pH раствора в средах ДМСО, ДМФА и спирт [1-А, -А, 2-А, 4-А, 5-А, 6-А,7-А, 9-А].

2. С применением метода потенциометрии впервые было исследовано равновесие комплексообразования ионов серебра с 2-MBI. На основе экспериментальных данных определена устойчивость комплексов $[Ag2\text{-}MBI]^+$ и $[Ag(2MBI)_2]^+$, влияние состава, содержания растворителя и температуры на равновесия образования этих комплексных форм. [2-А, 3-А, 4-А, 5-А, 6-А,7-А,8-А, 10-А].

3. Рассчитаны величины ΔG, ΔS, ΔH образования комплексов Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом. Выявлено, что процесс образования комплексов $[Ag2\text{-}MBI]^+$ и $[Ag(2MBI)_2]^+$ сопровождается положительным изменением энтальпии. Установлено, что формирования 2-меркаптобензимидазольных комплексов является самопроизвольным процессом. Изменение энергии Гиббса в процессе комплексообразования определяется разностью между энергиями сольватации комплексной частицы и ионов Ag^+. При этом основной причиной отрицательного изменения энергии Гиббса при переносе служит стабилизации комплексной формы [3-А, 4-А].

4. Синтезированы новые координационные соединения серебра с 2 меркаптобензимидазолом. Представлен состав, некоторые физико-химические свойства и реакции образования координационных соединений.

5. Исследована молярная электрическая проводимость растворов комплексов. Выявлено, что полученные координационные соединения относятся к слабым электролитам, а некоторые к электролитов типа 1:1. Представлен ряд в изменение энергии активации комплексов [11-А].

6. ИК спектроскопическим методом исследования установлен способ координации комплексообразователя к органическому лиганду. Доказано, что координация осуществляется посредством донорной атома серы молекулы 2-меркаптобензимидазола. Определены параметры кристаллических решеток и состав продукта термолиза некоторых координационных соединений серебра.

РЕКОМЕНДАЦИИ ПО ПРАКТИЧЕСКОМУ ИСПОЛЬЗОВАНИЮ РЕЗУЛЬТАТОВ ИССЛЕДОВАНИЯ

1. Полученные экспериментальные данные о комплексообразования Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом могут быть рекомендованы для прогнозирования закономерностей формирования комплексов 2-меркаптобензимидазола в зависимости от различных факторов с другими металлами-комплексообразователями.
2. Результаты протолитических свойств 2-меркаптобензимидазола в водно-органических растворах можно использовать для оценки константы устойчивости комплексов данного лиганда с другими центральными атомами.
3. В связи с тем, что используемый металл и органический лиганд являются биологическими активными веществами, полученные координационные соединения в твердом виде на их основе могут проявлять активные биологические свойства.

Статьи, опубликование в научных журналах рекомендованных ВАК при Президенте РТ:

[1-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразование серебра(I) с 2- меркаптобензимидазолом при 278-318 К / З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. -2018. Т 61, № 4. - С. 759-765.

[2-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразования серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольных растворах / С.М.Сафармамадов, З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Журнал физической химии, 2020. Т 94, № С. 844-849.

[3-А]. **Каримова, З.И.** 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.

[4-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, С.М. Сафармамадзода, Ю.Ф. Баходуров, З.А. Одилова, К.С. Мабаткадамзода // Вестник Хорогского университета. Серия естественных и математических наук. №1 (05) 2026, С. 28-34.

Тезисы статьей в материалах научных конференций:

[5-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом при 298 К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. Душанбе. 2018. С. 74.

[6-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольном растворе / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» (11-12 октября 2018г). Душанбе. 2018 . С. 98-99.

[7-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразование Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольном растворе при 288К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения » (11-12 октября 2018г). Душанбе. 2018. С. 95-96.

[8-А]. **Каримова, З.И.** Влияние водно-спиртового раствора на устойчивость комплексов Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, Том I. Душанбе. 2019. С.75.

[9-А]. **Каримова, З.И.** Изучение устойчивости комплексов серебра (I) с 2-меркптобензимидазолом в этанольном растворе / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. Душанбе. 2020. С.58-59

[10-А]. **Каримова, З.И.** Определение устойчивости комплексов серебра (I) с 2-меркптобензимидазолом в этанольном растворе при 298 К / З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции «Основы развития и перспективы

химической науки в Республики Таджикистан ». Душанбе. 2020. С. 64-67.

[11-А]. **Каримова, З.И**. Изучение молярной электрической проводимости комплексных соединений Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, С.М. Сафармамадзода, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Сборник материалов международной научно-практической конференции на тему «Комплексные соединения и аспекты их применения». – Душанбе. 2025. С. 23-25.

[12-А]. **Каримова, З.И.** Кислотно-основные свойства 2-меркаптобензимидазола в растворах вода-ДМФА при 298 К / З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Материалы VII международной научной конференции: «Вопросы физической и координационной химии». Душанбе. 2026. С. 418- 423.

ДОНИШГОҲИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

ВБД: 546. 57+544.478
ТКБ: 24. 234(2Т)
К-23

Бо ҳуқуқи дастнавис



КАРИМЗОДА ЗАМИРА ИСМАТУЛЛО

КОМПЛЕКСҲОСИЛКУНИИ НУҚРА (I) БО 2-МЕРКАПТОБЕНЗИМИДАЗОЛ ДАР МАҲЛУЛҲОИ ОБӢ-ОРГАНИКӢ

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

Душанбе – 2026

Диссертатсия дар кафедраи химияи ғайриорганикии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро шудааст

Роҳбари илмӣ: **Баҳодуров Юсуф Файзуллоевич** – номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи ғайриорганикии ДМТ

Муқарризони расмӣ: **Рачабов Умаралӣ Рачабович** – доктори илмҳои химия, хими профессори кафедраи химияи фарматсевтӣ ва захршиносии Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи Абӯалӣ ибни Сино;

Низомов Исохон Мусоевич – номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикии Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айни.

Муассисаи пешбар : **Кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикии Донишгоҳи техникии Тоҷикистон ба номи академикм М.С.Осимӣ**

Ҳимояи диссертатсия "17" декабри соли 2026 соати 10^{00} дар ҷаласаи шурои диссертатсионии 6D. KOA - 136-и назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон баргузор мегардад. Суроға:734025, ш.Душанбе, хиёбони Рудакӣ 17, Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

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

Бо мухтавои диссертатсия дар сомонаи www.tnu.tj ва дар китобхонаи илмии Донишгоҳи миллии Точикистон шинос шудан мумкин аст.

Автореферат «___» _____ соли 2026 фиристода шуд.

Котиби илмии шурои
диссертатсионӣ н.и.х., дотсент Бобокалонов Т.Б.

Сарсухан

Мубрами мавзуи таҳқиқот. Азбаски нуқра аҳамияти амалии калон дорад, вай яке аз комплексҳосилкунандаҳои омӯхташуда дар байни металлҳои интиқолӣ ба ҳисоб меравад. Дар асоси он миқдори зиёди пайвастаҳои комплексӣ бо лигандҳои нитроген, сулфур ва оксигендор на ин ки дар махлул, балки дар шакли сахт ҳосил кардаанд. Яке аз синфҳои пайвастаҳои органикӣ, ки ҳам дар тибби амалӣ ва ҳам дар химияи координатсионӣ аҳамияти муҳим доранд ин имидазол ва ҳосилаҳои он ба ҳисоб мераванд. Имидазол компоненти калидӣ буда, дар таркиби биомолекулаҳои (гистамин, витамини кобаламин, гистидин ва ғ.) ҳаётан муҳим дохил мешавад. Дар баробари ин, ҳосилаҳои имидазол дар катализи ферментативӣ, идоракунии равандҳои гуногуни аллергикӣ аҳамияти муҳим дошта, инчунин ҳамчун доруи зидди замбуруғӣ истифода бурда мешаванд.

2-меркаптобензимидазол соҳаҳои гунгогуни истифодабарӣ дорад. Ин пайвастаи лиганди органикии гетеросиклӣ ҳамчун компоненти антидегридитсионӣ, ҳимояи резина аз оксидшавӣ, ба сифати маҳсули мобайнӣ ҳангоми ҳосилкунии баъзе маводҳои доругӣ истифода бурда мешавад. Дар баробари ин, пайваста барои тайёркунии маводи зиддилепзорӣ (противолепзорных) дар тибби амалӣ, инчунин дар дигар соҳаҳо истифода бурда мешавад.

Дар сарчашмаҳои хориҷӣ ва ватанӣ корҳои сершумор мавҷуданд, ки дар онҳо қонуниятҳои ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионии имидазолдори нуқра(I) оварда шудааст. Қонуниятҳои ҳосилшавии комплексҳо вобаста аз ҷойгиршавии намояндаҳо дар ҳалқаи имидазол, табиати ҳалкунандаи органикӣ ва қувваи ионӣ муқаррар карда шудааст. Чунин таҳқиқотҳо асосан бо иштироки алкилҳосилаҳои имидазолҳо, инчунин баъзе лигандҳои сулфурдор гузаронида шудаанд. Дар барорбари ин, қайд кардан зарур аст, ки ахборот оид ба қонунияти ҳосилшавии пайвастаҳои комплексиии 2-меркаптоимидазолии нуқра дар ҳалкунандаҳои омехтаи органикӣ мавҷуд нест. Барои тафсилоти бештари механизми таъсири баъзе пайвастаҳои нуқра ба организм ва истифодабарии минбаъда дар дигар соҳаҳо, таҳқиқи комплексҳосилкунии ин металл дар муҳитҳои гуногуни ҳалкунандаҳои обӣ-органикӣ

муҳим аст.

Бинобар ин таҳқиқи омилҳое, ки қонунияти ҳосилшавиии комплексҳоро бо 2-меркаптобензимидазол ва коркарди усулҳои ҷудокунии ин пайвастҳои комплексиро дар шакли сахт муайян мекунанд, вазифаи муҳим ба ҳисоб меравад.

Дараҷаи коркарди илмии проблемаи мавриди омӯзиш Ба комплексҳосилшавии нуқра бо ҳосилаҳои триазол, имидазол, тиосемикарбазид, тиомочевина як қатор корҳо бахшида шудаанд. Таркиби пайвастаҳои координатсионии моно,- би ва сеивазшудаи нуқра пешниҳод карда шудаанд. Механизми таъсири табиати лиганди органикӣ, ҳалкунанда, қувваи ионӣ ва ҳарорат ба мувозинати комплексҳосилшавии ин металл нишон дода шудааст. Дар корҳои Т.Р.Усачева [3], С.М.Сафармамадзода [4], У. Раҷабов, Рахимова М.[10] маълумот оиди хосиятҳои кислотагӣ-асосии як қатор имидазолҳо, аминокислотаҳо дар маҳлули обӣ ва обӣ-органикӣ оварда шудааст. Натиҷаҳои экспериментӣ оиди қонуниятҳои тағйирёбиии энергияи Гиббси гузариши як қатор ҳосилаҳои имидазол аз об ба маҳлулҳои обӣ-диметилформамидӣ, диметилсулфоксидӣ ва спиртӣ оварда шудааст. Қонуниятҳои таъсири табиати ҳалкунандаи органикӣ ба хосиятҳои кислотагӣ ва асосии имидазолҳо омӯхта шудааст. Қонунияти гузариши комплексҳосилшавии нуқра бо баъзе ҳосилаҳои имидазол ва тиомочевина (N,N-этилентиомочевина, N,N-диэтилентиомочевина ва ғ.), 1,2,4-триазол, 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион, 1-атсетил-тиосемикарбазид, 1-формил-3-тиосемикарбазид, 4,4-триметилендипепирид, дар корҳои С.М.Сафармамадзода[3,4], А.С.Содатдинова, [3,4] Я.К.Кудратуллозода [6], К.И. Тудоряну [7] , Ф.М.Тулюпа [8] , Мигал П.К., Л.В.Назаров [7,9] , Ю.Е.Горбунов, Е.Я. Байбаров [8].ва ғ. оварда шудааст. Дар корҳои пешниҳодшуда таркиб, устуворӣ ва қонунияти гузариши раванди комплексҳосилшавӣ аз омехтаҳои гуногун муайян карда шудааст.

Дар баробари ин, таҳлили адабиёти муосир ва классикӣ оиди таҳқиқи хосиятҳои кислотагӣ-асосии 2-меркаптобензимидазол ва қобилияти комплексҳосилкунии он бо иони нуқра дар маҳлули обӣ-диметилформаидӣ, диметилсулфоксидӣ ва спиртӣ нест. Инчунин маълумот оиди ба такриб ва таъсири табиати ҳалкунанда ба собитаи ионизатсияи

2-меркаптобензимидазол ва комплексҳосилшавӣ бо иони нуқра вобаста аз ҳарорат ва консентратсияи ҳалкунандаҳои органикӣ мавҷуд нест.

Робитаи таҳқиқот бо проблемаҳо (лоиаҳо) мавзӯҳои илмӣ бо барномаҳо (лоиҳаҳо) ва тематикаҳои илмӣ. Рисолаи диссертатсионии мазкур дар доираи самтҳои афзалиятноки таҳқиқоти илмӣ ва илмию-техникӣ дар Ҷумҳурии Тоҷикистон барои солҳои 2021-2025, ҳадафи чоруми Стратегияи миллии рушд – саноатикунонии босуръати мамалакат, инчунин мавзуи илмии кафедраи химияи ғайриорганикии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон «Комплексоҳосилкунии d-металлҳои интиқолӣ бо иштироки лигандҳои амидӣ, тиоамидӣ ва оксигендор» (рақами бақайдгирии давлатии 0122TJ1434) **ва** фармоиши (лоиҳаи №ГР 0124Tj158) иҷро шудааст.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқоти мазкур муайянкунии ва баҳодиҳии мувозинати кислотагӣ асосӣ ва хосияти комплексҳосилшавии 2-меркаптобензимидазол (2-MBI) дар маҳлул вобаста аз табиати ҳалкунандаи органикӣ, ҳосилкунии пайвастаҳои нави координатсионии 2-меркаптобензимидазолдори нуқра ва таҳқиқи хосиятҳои он.

Вазифаҳои таҳқиқот:

- омӯхтани мувозинати протолитикии 2-меркаптобензимидазол ва таъсири табиати ҳалкунанда ба ҳосилшавии шаклҳои гуногуни лиганди мазкур вобаста аз кислотанокии муҳит;
- таҳқиқи термодинамикаи комплексҳосилшавиии Ag(I) бо 2-MBI дар ҳухуди ҳарорати васеъ. Ошкор намудани қонуниятҳои калидие, ки таъсири табиати ҳалкунандаи ғайриобӣ ба таркиб, хосият ва устувории термодинамикии комплексҳои ҳосидшуда дар маҳлул муайян мекунад;
- коркарди усулҳои синтези пайвастаҳои координатсионии нуқра(I) бо 2-меркаптобензимидазол вобаста аз таносуби реагентҳо. Муайян кардани таркиб ва пешниҳоди эхтимоли бештари ҳосилшавии пайвастаҳои комплексиии 2-меркаптобензимидазолии нуқра.

Объекти таҳқиқот. Пайвастаҳои координатсионии нуқра(I) бо 2-меркаптобензимидазолии дар муҳити обӣ

ҳосилшуда; системҳои Ag^+−2-MBI-alc.(C_2H_5OH, CH_3OH) –H_2O, Ag^+−2-MBI-ДМСО−H_2O, Ag^+−2-MBI-ДМФА−H_2O.

Мавзуи таҳқиқот. Омӯзиши хосиятҳои муҳимтарини физико-химиявии пайвастаҳои комплексии Ag(I) бо 2-меркаптобензимидазол ва ошкор намудани қонуниятҳои раванди комплексҳосилшавӣ вобаста аз миқдор ва табиати ҳалкунадаи органикӣ.

Навгонии илмии таҳқиқот. Аввалин маротиба бузургиҳои собитаҳои устувории 2-меркаптобензимидазол ва ҳудуди мавҷудияти шаклҳои гуногуни ин лиганд вобаста аз табиати компоненти ғайриобӣ муайян карда шуд. Раванди ҳосилшавии шаклҳои комплексии нуқра (I) бо 2-меркаптобензимидазол дар ҳалкунандаҳои омехта ба роҳ монда шуд. Нақшаи модели ҳосилшавии комплексҳои Ag(I) бо 2-MBI муқаррар карда шуда, матритсаи ҳосилшавии онҳо пешниҳод карда шуд. Нишон дода шуд, ки дар шароитҳои омухташуда 2-MBI бо Ag^+ комплексҳои моно- ва билигандӣ ҳосил мекунад. Қонуниятҳои таъсири табиат ва таркиби ҳалкунандаи ғайриобӣ ба раванди ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионии Ag(I) бо 2-MBI бароварда шуд. Дар баробари ин муқаррар шуд, ки табиати компоненти ғайриобӣ ба миқдори зарраҳои комплексӣ таъсир нарасонида, устувории термодинамикии ин комплексҳоро дар маҳлул муайян мекунад. Муқаррар карда шуд, ки бо афзоиши консентратсияи ДМСО, ДМФА ва спирт устувории комплексҳо меафзояд. ΔG, ΔH, ΔS –ҳосилшавиии комплексҳои моно ва билигандии нуқра бо 2-MBI муайян карда шуд. Нишон дода шуд, ки бузургии энталпия дар ҳар ду зина мусбат мебошад. Энергияи Гиббси ҳосилшавии комплексҳо манфӣ буда, аз ҳуд ба худгузарии раванди комплексҳосилшавӣ шаҳодат медиҳад. Динамикаи самараи солвататсионӣ дар маҳлулҳои обӣ-органикии вобаста аз табиат ва консентратсияи ҳалкунандаи органикӣ муайян карда шуд. Муқаррар карда шуд, ки ҳангоми гузариши раванди ҳосилшавии зарраи комплексии аввали нуқра дар маҳлули оби-органикӣ тағйирёбӣ дар ҳолати шакли солватиии комплексро устувории комплексҳо муайян мекунад. Дар натиҷаи таҳқиқот аввалин бор пайвастаҳои координатсионии нави нуқра бо 2-MBI бо фазаи сахт ҳосил карда шуданд, ки бо усули таҳлили элементӣ, СИ, дериватографӣ, таҳлили рентгенофазавӣ ва кондуктометрӣ

омӯхта шуданд. Таҳлили СИ лиганди координатсиянашудаи 2-меркаптобензимидазол ва комплексҳои он бо нуқра нишон дод, ки лиганди органикӣ тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионии молекулаи лиганд координатсия мшавад. Маҳсули термолиз ва параметрҳои панҷараи кристалии баъзе комплексҳо муайян карда шуд.

Нуктаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда:

-қонуниятҳои муқарраргардида оид ба таъсири таркиби маҳлули обӣ-органикӣ ба мувозинати кислотагӣ-асосии 2-MBI ва диаграммаи сохташудаи тақсимшавии ҳудуди гуногуни шакли 2-MBI (протонированӣ, нейтралӣ, депротонированӣ) дар ҳудуди васеи консентрастияи ҳалкунандаи органикӣ;

-бузургиҳои собитаҳои умумии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолии нуқра дар 278-318Ква характеристикаҳои термодинамикии реаксияҳои ҳосилшавии комплексҳои $[Ag2\text{-}MBI]^+$ ва $[Ag(2\text{-}MBI)_2]^+$. Қонуниятҳои ошкоршудаи ҳосилшавии шаклҳои комплексии $[Ag2\text{-}MBI]^+$ ва $[Ag(2\text{-}MBI)_2]^+$ дар маҳлулҳои H_2O-$(CH_3)_2SO$, H_2O-$(CH_3)_2NC(O)H$, H_2O -C_2H_5OH и H_2O -CH_3OH.

-усулҳои синтези коркардшудаи пайвастҳои комплексӣ, таркиб ва реаксияҳои гузариш ҳангоми боҳамтаъсиркунии нуқра бо 2-MBI вобаста аз таносуби реагентҳо ва табиати намакҳои аввалаи нуқра, натиҷаҳои таҳлили элементӣ, таҳқиқотҳои кондуктометрӣ, ИК-спектроскопӣ, термикӣ ва рентгенофазафии комплексҳои синтезкардашуда.

Аҳамияти назариявӣ ва илмию-амалии таҳқиқот.

Қонуниятҳое, ки ҳангоми тағйирёбии таркиби ҳалкунандаи омехта ҳангоми муайянкунии собитаи ионизатсияи кислотагии лиганди органикӣ, собитаҳои умумии устуворӣ, параметрҳои термодинамикӣ ҳосилшавии комплексҳои нуқра бо 2-меркаптобензимидазол бароварда шуданд, дар химияи пайвастҳои координатсионӣ саҳми назарраси худро хоҳанд гузошт. Қимматҳои собитаҳои устуворӣ, тавсифи термодинамикӣ, бузургиҳои рКа 2-меркаптобензимидазол ҳамчун маводи маълумотӣ ҳангоми таҳқиқи раванди комплексҳосилкунии дигар металлҳо бо имидазолҳо истифода карда мешаванд.

Усулҳои коркардшудаи ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионӣ метавоананд барои синтези пайвастаҳои

координатсионии металлҳои гуногун бо ҳосилаҳои имидазол ҳам дар маҳлулҳои обӣ, ва ҳам дар маҳлулҳои обӣ-органикӣ истифода шаванд. Натиҷаи кори диссертатсионӣ метавонад ҳангоми хондани курсҳои фанҳои мувофиқ (химияи пайвастаҳои координатсионӣ, усулҳои таҳқиқи пайвастаҳои координатсионӣ ва ғ.) дар муассисаҳои таълимӣ дар соҳаи пайвастаҳои комплексӣ истифода шаванд.

Дараҷаи эътимоднокии натиҷаҳо. Эътимоднокии натиҷаҳо бо истифода аз усулҳои муосири таҳқиқот, барномаҳо, баробарии баланди назария ва натиҷаҳои бадастовардашудаи экспериментalӣ ва коркарди омории натиҷаҳои бадастовардашуда; истифодаи принсипҳои асосии тарзи системавӣ, интихоби асосноки мақсади асосии таҳқиқот ҳангоми гузориши вазифаи илмӣ ва коркарди ҳалли он, номуқобилии натиҷаҳои бадастовардашуда бо корҳои маълуми олимон ва мутахассисон дар соҳаи химияи координатсионӣ. Рисола аз асолати матн гузаронида шуда, асолати матн 83%-ро ташкил дод.

Мутобиқати диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси илмӣ. Кори илмӣ ба шиносномаи ихтисоси 1.2.4. Химияи ғайриорганикӣ мувофиқат мекунад:

-муайянкунии характери алоқаманди байни таркиб, сохт ва хосияти моддаҳои ғайриорганикӣ (Бобҳои 2 ва 3);

-коркарди усулҳои синтези моддаҳои ғайриорганикӣ (Боби 2);

-химияи пайвастаҳои координатсионӣ (Бобҳои 1-4);

Саҳми шахсии довталаби дараҷаи илмӣ дар таҳқиқот. Таҳлили сарчашмаҳои адабиёт оиди мавзуи рисола, гузаронидани корҳои экспериментalӣ, вазифа гузоштан, нашри натиҷаҳои илмӣ дар маҷаллаҳои илмии тақризшаванда ва конференсияҳои илмӣ, семинарҳо. Коркард ва таҳлили натиҷаҳои экспериментalии таҳқиқот.

Тавсиб ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия.

Маводҳои кори диссертатсионӣ дар конференсияҳои ҳарсолаи илмии устодону кормандони ДМТ (Душанбе, 2018, 2019, 2020), конференсияи байналмилалии «Пайвастаҳои комплексӣ ва ҷабҳаҳои истифодабарии онҳо» (Душанбе, 2018, 2025), конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-назариявии «Основы развития и перспективы химической науки в республике Таджикистан», (Душанбе,2020),VII конференсияи

байналмилалии илмии «Вопросы физической и координационной химии» (Душанбе, 2026).

Интишорот аз рӯй мавзуи диссертатсия. Мувофиқи мавзуи рисола 12 кор нашр шудааст. Аз ин, 4 мақола дар маҷаллаҳои руйхати аз ҷониби КОА-и назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон тақризшаванда, 8-фишурда дар конференсияҳои дараҷаҳои гуногун.

Сохтор ва ҳаҷми диссертатсия. Рисола аз сарсухан, мубрамияти кор, мақсад, вазифаҳои таҳқиқот, нуқтаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда, навгониҳои таҳқиқот, аҳамияти назариявӣ ва амалии кор, шарҳи адабиёт, қисмати экспериментал̄, муҳокимаи натиҷаҳо, хулосаҳо, руйхати сарчашмаҳои истифодашудаи илмӣ, (126 номгуро дар бар мегиранд). Кор дар ҳаҷми 149 саҳифаи компютерӣ навишта шуда, 41 ҷадвал ва 22 расмро дар бар мегирад.

Мундариҷаи асоси таҳқиқот

Сарсухан мумбрамияти мавзуъ, ҳолати кунунии масъалаи таҳқиқотро мавриди омӯзиш тавсиф додааст. Дар ин бахш ҳадафҳо ва вазифаҳои кор муайян карда шудаанд. Навоварии илмӣ ва эътимоднокии натиҷаҳо асоснок карда шудаанд ва муқаррарот барои дифоъ таҳия шудаанд. Арзиши амалии натиҷаҳои таҷрибавӣ низ ошкор карда шудааст. Дар ин бахш инчунин маълумот дар бораи интишороти кор мавҷуд аст.

Боби якум аз сето зербоб иборат аст, ки дар онҳо таҳлили адабиёт оиди ҳолати омӯзиши хосияти кислотагӣ-асосии баъзе лигандҳои тиоамидӣ дар ҳалкунандахои обӣ ва обӣ-органикии таркибашон тағйирёбанда оварда шудааст. Муқаррар карда шудааст, ки «ба бузургиҳои собитаи ионизатсияи лигандҳои тиоамидӣ ҳам табиати радикалҳои таркиби гетероҳалқа ва ҳам ҷойгиршавии онҳо таъсир мерасонад. Дар баробари ин, муҳите ки дар он хосияти протолитии ин ё он лиганди органикӣ омӯхта мешавад ба собитаи ионизатсия таъсир мерасонад. Ахбор оид ба хосияти химиявӣ ва таҳлилии як қатор лигандҳо ба даст оварда шудааст. Хусусияти стехиометрии изомерии пайвастаҳои тиолӣ муқаррар карда шуда, соҳаи истифодабарии пайвастаҳои омӯхташуда дар таҳлили химиявӣ бароварда шуд. Шароити комплексҳосилшавии лигандҳои тиоамидӣ бо лигандҳои гуногун омӯхта шуда, тавсифи спектралӣ, таркиб ва устувории

пайвастаҳои комплексии ҳосилшуда муайян карда шудааст» [1]. Таҳлили маълумотҳо дар адабиёти илмӣ мавҷудбуда оид ба термодинамикаи ҳосилшавии лигандҳои донории гетероҳалқагӣ бо ионҳои нуқра ва қонунияти таъсири ҳарорат, таркиби маҳлул ва табиати ҳалкунандаи ғайриобӣ-органикӣ ба раванди мазкур гузаронида шудааст. Хусусиятҳои ҳосилшавии пайвастаҳои комплексии нуқра бо имидазолҳо, триазолҳо, тиомочевина ва дигар лигандҳои органикӣ дида баромада шудааст, ҷамъбаст карда шудаанд. Нишон дода шудааст, ки «ба шарофати гетероатомҳои мавҷудбудаи таркиби лигандҳои органикӣ ин пайвастаҳо қобилияти ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ бо металлҳо-комплексҳосилкунандаҳои гуногунро доранд. Оид ба аҳамияти лигандҳои имидазолӣ ва пайвастаҳои комплексии онҳо дар фаъолияти ҳаёти инсон ва хосияти кислотагӣ-асосии дар шарҳи адабиёти мухтасар оварда шудааст. Қиматҳои собитаҳои ионизатсия вобаста аз ҷойгиршавии радикал дар ҳалқаи имидазолӣ оварда шудааст. Маълум шудааст, ки мавҷудияти купурки метиленӣ дар молекулаи бензимидазол ба афзудани қиммати собитаи аввали ионизатсия ва фарқи калони асоснокии атоми ҳалқаҳои бензимидазолӣ оварда мерасонад. Протонизатсияи ҳалқаҳои бензимидазолӣ ба тағйирёбии батохромии спектрҳои фурубарӣ, ва протонизатсияи аминногурӯҳ ба тағйирёбии гипсохропӣ оварда мерасонад» [2]. Қайд карда шудааст, ки новобаста ба мавҷуд будани корҳо дар ин самт барои таҳлили пурраи таъсири хосияти металл-комплексҳосилкунанда, лиганд, хосияти физико-химявии ҳалкунандаи органикии омехта ба устуворӣ ва термодинамикаи ҳосилшавии комплексҳо дар ҳалкунандаи органикӣ маълумот кам аст.

Қисми эксперименталӣ (боби 2) усули синтези пайвастаҳои комплексии 2-меркаптобензимидазолии нуқраро дар бар мегирад. Инчунин натиҷаҳои санҷиши pH-метрӣ оиди омӯзиши хосиятҳои кислотагӣ-асосии 2-МВІ дар маҳлулҳои обӣ-органикӣ, усули гузаронидани титронии потенсиометрӣ ҳангоми таҳқиқи комплексҳосилкунии нуқра оварда шудаанд. Реактивҳо ва таҷҳизоте, ки дар кор истифода карда шуд, оварда шудааст. Ҳамчун моддаҳои аввала намакҳои нуқра ($AgNO_3$, Ag_2SO_4, AgГ (Г-Cl, Br) ва ба сифати лиганди органикӣ 2-меркаптобензимидазоли тамғааш «т.б.т» истифода шуд. Ионҳои

нуқра бо усули гравиметрӣ, миқдоран ки ба гузариши комплекси бадҳалшаванда дар маҳлул асос шудааст аз галогенидҳои бадҳалшавандаи он муайян намудем. Ионҳои хлор ва бром дар таркиби пайвастаҳои синтезкардашуда бо усули гравиметрӣ муайян карда шуд.

Таҳлили элементӣ барои муайянкунии атомҳои S, N, H ва C бо истифода аз асбоби «VarioMICROCHNS» гузаронида шуд.Ионҳои SO_4^{2-} дар таркиби пайвастаҳо бо усули массавӣ муайян карда шуданд. .Ҷараёнгузаронии молярии маҳлулҳо бо ёрии кондуктометри HANNA “HI8733-Conductivity meter” гузаронида шуд. Саҳеҳии нигоҳдории ҳарорат дар ячейка $\pm 0{,}1^0$C-ро ташкил дод. Таҳқиқоти спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои синтезкардашуда дар асбоби Specord IR-75 SHIMADZU дар ҳудуди 400-4000 $см^{-1}$ дар шакли суспензия дар равғани вазелинӣ ва ҳаб бо бромиди калий ба қайд гирифтем. Рентгенограммаҳои хокаҳоро бо истифода аз усули «рушноидиҳӣ» ва «инъикос» дар дифрактометри «ДРОН-3» ба қайд гирифтем. Дреавтограммаҳои пайвастаҳои комплексӣ дар асбоби «Паулик-Паулик-Эрдей» Q-1500D-система ба қайд гирифта шуданд .

Консентратсияи нитрати нуқра ҳангоми омӯзиши комплексҳосилшавӣ 0,0001мол/л ($1\cdot10^{-4}$)-ро ташкил дод. Барои нигоҳ доштани қувваи ионӣ перхлорати натрий истифода бурда шуд. Электроди индикаторӣ аз нуқраи тозаи холиси металлӣ истифода шуд. Ба сифати электроди муқоисавӣ электроди хлорнуқраги хизмат кард. Пеш аз омӯзиши комплексҳосилшавии нуқра эътимоднокии кори электрод гузаронида шуд. Ба сифати ҳалкунандаҳои органикӣ, этанол, метанол, диметилсулфоксид, диметилформамид истифода бурда шуд. Консентрастияи компонентҳои ғайриобӣ ҳангоми омӯзиши хосияти кислотагӣ-асосии 2-MBI ва таҳқиқи комплексҳосилкунии он бо нуқра 25, 35, 45 ва 55 ҳаҷм %-ро ташкил дод. Ҳисобҳо оиди муқарраркунии устувории комплексҳо бо истифода аз усули квадратҳои хурдтарини ғайрихатӣ (УКХҒ) ва барномаҳои махсуси компютерӣ (KEV) гузаронида шуд. Раванди таҳқиқи титронии потенсиометрӣ дар раванди таҳқиқи комплексҳосилкунии нуқра бо 2-меркаптобензимидазол бо истифода аз купрукча гузаронида шуд.

Бузургии собитаи ионизатсияи лигандро тибқи муодилаи зерин ҳисоб намудем:

$$Ka=[2\text{-MBI}]\cdot[H^+]/[2\text{-MBIH}^+]$$

Ба сифати мисол дар ҷадвали 1 натиҷаҳои экспериментalии титронии pH-метрӣ ва бузургии pKa 2-меркаптобензимидазол дар маҳлули этанол оварда шудааст.

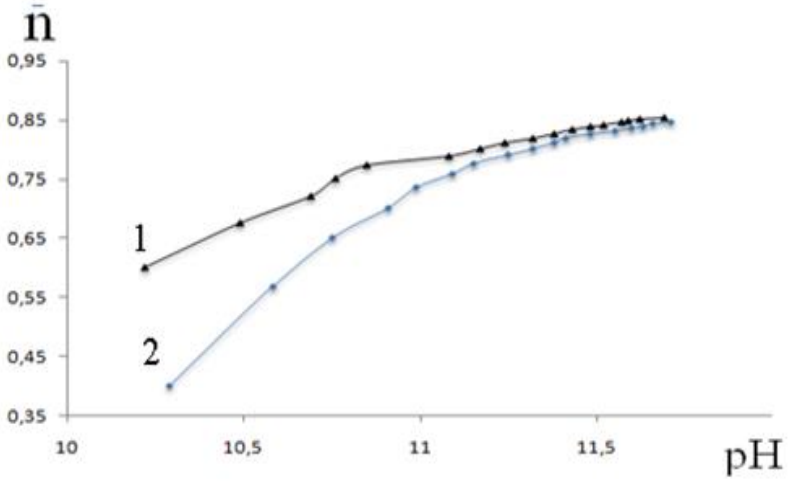
Ҷадвали 1. - Натиҷаҳои экспериментalии титронии маҳлули 2-MBI дар ҳалкунандаи оби-этанолӣ, ки 25 ҳаҷм.% этанол дорад.T=298 K, J=0.1 мол/л. $C_{2\text{-MBI}}$=0,001мол/л.

Титрант 0,01н., маҳлул. KOH, мл	pH	C_{HL}, мол/л	$[L^-]$, мол/л	pK_a
1	2	3	4	5
0,0	6,71	0,001	--	--
0,1	9,27	0,000960159	0,0000398406	10,65
0,2	9,59	0,000920635	0,0000793651	10,65
0,3	9,74	0,000881423	0,000118577	10,61
0,4	9,84	0,00084252	0,000157480	10,57
0,5	9,94	0,000803922	0,000196078	10,55
0,6	10,05	0,000765625	0,000234375	10,56
0,7	10,11	0,000727626	0,000272374	10,53
0,8	10,16	0,000689922	0,000310078	10,51
0,9	10,21	0,000652510	0,000347490	10,48
1	10,29	0,000615385	0,000384615	10,49
1,1	10,32	0,000578544	0,000421456	10,46
1,2	10,34	0,000541985	0,000458015	10,41
1,3	10,39	0,000505703	0,000494297	10,39
1,4	10,41	0,000469697	0,000530303	10,36
1,5	10,45	0,000433962	0,000566038	10,33
1,6	10,48	0,000398496	0,000601504	10,30
1,7	10,51	0,000363296	0,000636704	10,27
1,8	10,55	0,000328358	0,000671642	10,24
1,9	10,57	0,000293680	0,00070632	10,19
2,0	10,58	0,000259259	0,000740741	10,12

Бо назардошти натиҷаҳои экспериментalӣ, ки ҳангоми титронии маҳлули 2-MBI дар дигар консентратсияҳои ҳалкунандаҳои органикӣ ба даст оварда шуданд, мо қиммати $\bar{n}$ -ро ҳисоб намудем ва вобастагии ин функсияро аз pH сохтем. Коркарди натиҷаҳои экспериментalӣ имконият дод, ки характеристикаи миқдории хосияти кислотагӣ-асосии лигандро муайян кунем.

Дар баробари ин, қонуниятҳои таъсири ҳалкунадаҳои

органикӣ ба қимматҳои pK_a муқаррар карда шуд. Ба сифати мисол дар расми 1 вобастагии $\bar{n}$ аз pH дар консентратсияи гуногуни метанол дар маҳлул оварда шудааст.



Расми 1. - Вобастагии $\bar{n}$ аз pH 2-25 ҳаҷм.% метанол дар 298 К.

Тағйироте, ки каҷхатаи сохташуда нишон медиҳад, барои титронии кислотаи заиф бо асоси қавӣ мувофиқ аст. Қиммати $\bar{n}$ дар системаи омӯхташуда дар ҳудуди 0,35-0,90 тағйир меёбад. Муқаррар карда шуд, ки дар системаи омухташуда як заррачаи зарядноки лиганд ҳосил мешавад. Раванди протонизатсия бошад, эҳтимол тибқи атоми нитрогене, ки дар ҳолати сеюми фрагменти имидазолӣ мавҷуд аст, мегузарад. Чи тавре маълум аст, «дар баробари дигар омилҳо, ба хосияти кислотагӣ асосии лигандҳо табиати лиганди органикӣ, радикалҳо ва ҷойгиршавии онҳо таъсир мерасонад. Инчунин муҳите, ки дар он хосияти-кислотагӣ асосӣ гузаронида мешавад» [1]. Дар асоси ин, таҳқиқотҳо ба омӯзиши таъсири табиати ҳалкунанда ба мувозинати кислотагӣ-асосии 2-MBI ва қимматҳои pKa равона карда шуданд. Бо дар назардошти натиҷаҳои титронии pH - метрӣ, бузургиҳои собитаи ионизатсия дар маҳлулҳои обӣ-органикии таркиби тағйирёбанда ҳисоб карда шуд.

Дар кор қимматҳои собитаи ионизатсияи 2-меркаптобензимидазол дар муҳити ҳалкунандаҳои органикии

консентратсияашон гуногун таҳқиқ карда шудааст.

Бузургиҳои pK_a дар муҳит ва консентратсияҳои гуногуни компонентӣ ғайриобӣ дар ҷадвали 2 оварда шудаанд.

Ҷадвали 2. - Қиммати pKa 2-меркаптобензимидазол вобаста аз табиати ҳалкунанда

Консентратсия, ҳаҷм.%	Ҳалкунанда				
	Об	Этанол	Метанол	ДМСО	ДМФА
10	9,60	10,27	11,50	4,31	5,52
25		10,38	11,55	4,33	5,60
35		10,57	11,59	4,36	5,65
45		10,61	11,65	4,38	5,70
55		10,80	11,69	4,57	5,82

Нишон дода шуд, ки ҳангоми гузариш аз об ба маҳлулҳои обӣ-органикӣ собитаи ионизатсия зиёд мешавад. Чунин қонунияти тағйирёбӣ ҳангоми афзудани миқдори компоненти ғайриобӣ дар маҳлул мушоҳида карда мешавад. Агар собитаҳои ионизатсияи 2-MBI-ро дар маҳлулҳои спиртӣ муқоиса кунем муқаррар карда шуд, ки дар метанол собитаи ионизатсия нисбат ба маҳлули этанолӣ зиёдтар аст. Ин қимматҳо минбаъд барои арзиши собитаи устуоврии пайвастаҳои комплексии нуқра бо лиганди органикии мазкур истифода бурда шудаанд.

Боби 3 натиҷаҳои таҳқиқоти ҳосилшавии комплексҳои нуқра Ag(I) бо 2-MBI, ки миқдори гуногуни ҳалкунандаҳои обӣ-органикӣ дорад, оварда шудаанд. Муайян карда шуд, ки бо афзоиши консентратсияи лиганди органикӣ дар маҳлул, потенсиали электродии нуқра мунтазам коҳиш меёбад. Дар консентратсияҳои баланди лиганд, таҳшин ба вуҷуд меояд, аммо вақте ки консентратсияи 2-MBI то 0,001 мол/л кам карда шуд, ҳеҷ гуна таҳшиншавӣ мушоҳида нашуд, ки имкон дод титркунии потенсиометрӣ анҷом дода шавад.

Дар ҷадвали 3 натиҷаҳои экспериментали, таъғирёбии потенсиали электродии системаи Ag^+—2-MBI-этанол 10 ҳаҷм % ва ҳароратҳои гуногун (278-318 К), оварда шудаанд.

Ҷадвали 3. - Таъсири ҳарорат ба тағйирёбии потенсиали системаи Ag^+/Ag дар раванди титронии маҳлули нитрати нуқра бо маҳлули 2-MBI (278-318K), $C_{Ag^+}=1\cdot10^{-3}$ мол/л, $C_{2\text{-MBI}}=0{,}001$мол/л. J=0,1моль/л $NaClO_4$

E,мВ				
278 K	***288 K***	***298 K***	***308 K***	***318 K***
308	288	280	274	264
288	283	250	267	256
284	278	244	264	252
280	274	242	257	244
277	268	236	249	233
271	262	230	242	221
267	257	224	233	210
261	253	218	225	200
257	248	212	218	190
253	244	206	212	184
249	241	201	206	178
245	238	196	202	173
235	231	192	195	166
231	226	185	190	159
226	218	180	184	156
213	208	175	175	148
206	200	166	163	136
200	196	155	153	126
189	185	145	146	120
175	174	140	131	105
170	164	125	122	95
162	160	115	113	87

Натиҷаҳои бадастовардашуда нишон медиҳанд, ки новобаста ба тағйирёбии ҳарорат, ҳангоми титронии системаи Ag^+/Ag бо маҳлули 2-MBI камшавии потенсиали электродӣ ба назар мерасад. Ин натиҷаи экспериментал аз натиҷаи гузариши раванди комплексҳосилшавии нуқра бо лиганди омӯхташуда шаҳодат медиҳад.

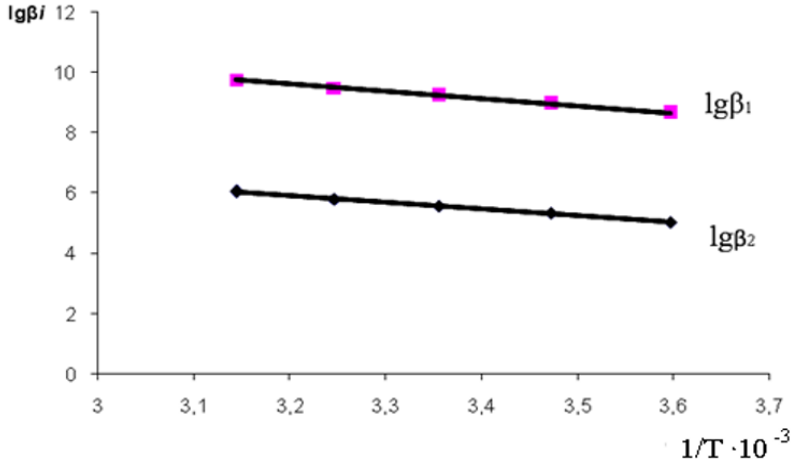
Қимматҳои собитаҳои умумии устуворӣ, ки бо истифода аз барномаи KEV ҳисоб карда шуд, дар ҷадвали 4 оварда шудааст.

Ҷадвали 4. - Қимматҳои собитаҳои устуворӣ пайвастаҳои комплексии 2-меркаптобензимидазолии Ag(I) дар 278-318K

T,K	$\lg\beta_1$	$\lg\beta_2$
278	5,15±0,1	8,62±0,098
288	5,21±0,09	8,98±0,01
298	5,53±0,1	9,27±0,1
308	5,80±0,2	9,55±0,02
318	5,98±0,1	9,72±0,02

Зиёдшавии ҳарорат ба тағйирёбии устувории пайвастаҳои комплексии монолигандӣ ва билигандии 2-меркаптобензимидазолии нукра оварда мерасонад. Муқоисаи натиҷаҳои бузургиҳои $lg\beta_i$, ки бо якчанд усулҳои новобаста аз ҳамдигар ҳисоб карда шудаанд, нишон дод, ки онҳо аз ҳамдигар кам фарқ мекунанд.

Қимматҳои собитаҳои устувории бадастовардашуда барои ҳисоби тавсифи термодинамикии комплексҳосилшавии 2-меркаптобензимидазолии нукра(I) истифода шуданд. Дар расми 2 вобастагии $lg\beta i$ от 1/T оварда шудааст.



Расмми 2. - Вобастагии $lg\beta i$ аз 1/T барои ҳосилшавии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолии нукра

Бузургиҳои ΔG^0, ΔS^0 ва ΔH^0 ҳосилшавии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолии нукра дар ҷадвали 5 оварда шудааст.

Ҷадвали 5. - Бузургиҳои ΔG^0, ΔS^0 ва ΔH^0 ҳосилшавии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолии нукра (I)

Реаксияи ҳосилшавии комплексҳо	ΔH,кҶ/мол	ΔG, кҶ/мол	ΔS, Ҷ/мол·К
Ag^{+}+2-MBI $\rightleftarrows$ [Ag2-MBI]$^{+}$	41,99±2,79	-29,40±0,3	247,91±9,39
Ag^{+}+2(2-MBI) $\rightleftarrows$ [Ag(2-MBI)$_2$]$^{+}$	46,24±1,22	-52,76±0,57	332,22±4,12

Муқаррар карда шуд, ки комплексҳосилшавии нукра бо 2-

MBI тибқи механизми эндотермӣ мегузарад, ки бо мусбат будани қиммати энталпияи реаксияи мазкур ифода меёбад. Ҳосилшавии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолии нуқра бо ҳосилшавии комплексҳо худ ба худ бо дар назрдошти бештар тағйирёбии мусбии энтропия ҳангоми озодшавии молекулаи ҳалкунанда аз абри гидратии иони металл ва лиганд мегузарад.

Дар давоми кор мо раванди комплексҳосилшавиии Ag(I) бо 2-MBI-ро дар ҳалкунандаҳои обӣ-этанолӣ, обӣ-метанолии таркибашон гуногунро таҳқиқ намудем.

Таҳқиқот нишон дод, ки барои системаи Ag(I)-2-MBI-OS, ки миқдори гуногуни этанол ва метанол (ҳаҷм. %), дорад, қиммати E (мВ) бузургии гунонун дорад.

Дар ҷадвалҳои 6 ва 7 қимматҳои собитаҳои устувории комплексҳои нуқра бо 2-меркаптобензимидазол дар маҳлулҳои обӣ-спиртии таркибашон гуногун оварда шудааст.

Ҷадвали 6. - Вобастагии собитаи устуворӣ аз миқдори этанол дар маҳлул дар 298 К

Конс. этанол, ҳаҷм.%	10	25	35	45	55
$lg\beta_1$	5,58±0,05	5,63±0,04	5,64±0,05	5,84±0,05	5,93±0,1
$lg\beta_2$	9,25±0,11	9,63±0,08	9,67±0,03	9,75±0,06	9,76±0,1

Ҷадвали 7. - Вобастагии собитаи устуворӣ аз миқдори метанол дар маҳлул дар 298 К

Конс. метанол, об.%	10	25	35	45	55
$lg\beta_1$	6,44±0,07	7,12±0,05	7,59±0,04	7,85±0,03	8,10±0,1
$lg\beta_2$	10,62±0,09	11,22±0,08	11,68±0,05	12,02±0,07	12,52±0,01

Нишон дода шуд, ки табиати халкунанда ба устувории комплексҳои 2-меркаптоимидазолӣ таъсир расонида, характери комплексҳосишавиро тағййир намедиҳад. Собитаҳои умумии устувории комплексҳо дар маҳлули метанолӣ нисбат ба мухити этанолӣ қиммати калонтар дорад. Вобаста аз хусусияти ҳалкунанда, константаҳои устуворӣ ба таври гуногун тағйир меёбанд. Эҳтимол аст ин тағйирёбӣ чунин шаҳр дода мешавад, ки дар муҳити метанолӣ Ag^+ суст солвататсия мешавад. Инчунин ин омили экспериментолӣ бо он фаҳмонида мешавад, ки адади донории метанол камтар буда, молекулаҳои он бо иони нуқра

суст алоқаманданд, ва он имконият медиҳад то ба осонӣ бо 2-меркаптобензимидазол иваз карда шавад. Ҳангоми «муқоисаи қимматҳои мо, бо адабиёт муайян карда шудааст, ки ҳосилаҳои имидазол бо нуқра комплексҳо ҳосил мекунанд, ки устувориашон аз миқдори ҳалкунанда вобаста аст. Ин тағйирёбӣ аз нуқтаи назарияи солвататсионӣ-термодинамикӣ фаҳмонида шудааст» [3].

Дар ҷадвали 8 натиҷаҳои титронии потенсиометрӣ барои системаи Ag+─H_2O-OS (OS-ДМСО) дар 25^0C ва коркарди онҳо бо ёрии барномаи KEV ба роҳ монда шудааст, оварда шудааст.

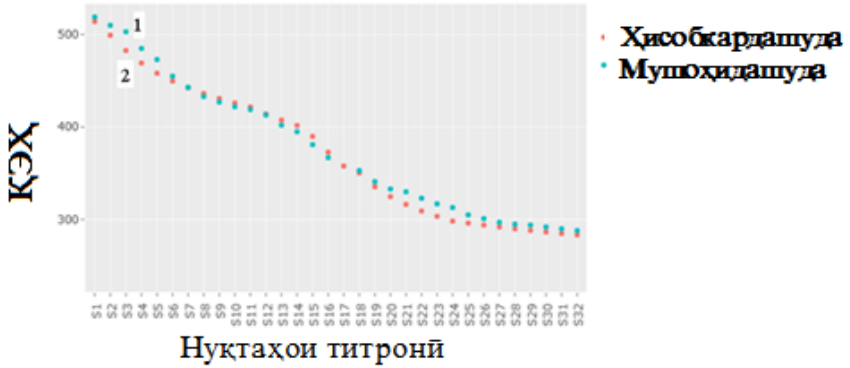
Ҷадвали 8. - Натиҷаҳои экспериментали титронии потенсиометрии маҳлули Ag^+ бо 2-меркаптобензимидазол, консентратсияи мувозинатии моддаҳои аввала ва маҳсули реаксия дар муҳити 10 ҳаҷм.% ДМСО дар 25^0C. $C_L=1\cdot10^{-3}$ мол/л, $C_{Ag^+}=1\cdot10^{-5}$ мол/л, J=0.1 мол/л $NaClO_4$

E, мВ	$C_{Ag^+}\cdot10^{-6}$ мол/л	$C_L\cdot10^{-4}$ мол/л	$[Ag]\cdot10^{-9}$ мол/л	[2МБИ]·10^{-4} мол/л	$[AgL]^+\cdot10^{-6}$ мол/л	$[AgL_2]^+\cdot10^{-6}$ мол/л
519	9,96	0,0398	0,006478	0,004646	3,44971	0,03222
510	9,92	0,794	0,003631	0,014676	6,10818	0,18024
503	9,88	0,119	0,001909	0,034095	7,45951	0,51134
485	9,84	0,157	0,001125	0,060286	7,77280	0,94213
473	9,81	0,196	0,073400	0,091095	7,66258	1,40342
455	9,77	0,234	0,052598	0,122959	7,41171	1,83231
443	9,73	0,272	0,039726	0,156042	7,10399	2,22875
433	9,69	0,313	0,031186	0,189899	6,78688	2,59125
427	9,65	0,347	0,025322	0,223436	6,48397	2,91283
422	9,62	0,385	0,020935	0,258205	6,19473	3,21592
419	9,58	0,421	0,017731	0,291634	5,92723	3,47542
413	9,51	0,494	0,013170	0,360138	5,43954	3,93866
402	9,43	0,566	0,010196	0,428741	5,00966	4,31838
295	5,41	4,5887	1,051736	4,482367	5,40244	4,86872
294	5,33	4,7033	9,812668	4,598927	5,17159	4,78186
292	5,19	4,8132	9,173535	4,710811	4,95237	4,69057
290	5,08	4,9187	8,609685	4,818098	4,75382	4,60506
288	4,98	5,0199	8,104523	4,921114	4,57058	4,52221

Нишон дода шуд, ки дар маҳлулҳои тағйирёбандаи обӣ-диметилформамидӣ ва обӣ-диметилсулфоксидӣ пайвастаҳои комплексии нуқра бо 2-меркаптобензимидазолии моно ва биивазшуда новобаста аз табиати компоненти органикӣ ҳосил мешаванд.

Дар кори Сафармамадзода С.М. бо ҳамкоронаш «муайян кард, ки дар комплексҳосилшавӣ бо лигандҳои имидазолдор, ки дар таркибашон гурӯҳи меркапто доранд, координатсия бо атоми металл-комплексосилкунанда асосан тавасути атоми гурӯҳи тионии ин лигандҳо мегузарад. Чунин натиҷаҳои эксперименталии муаллифони кор бо таҳқиқотҳои спектрҳои инфрасурх ва рентгеноструктурӣ тасдиқ карда шудаанд» [3].

Барои нишон додани натиҷаҳои таҷрибавӣ ченкардашуда бо назариявӣ вобастагии бузургии потенсиали электродӣ аз нуқтаи титронӣ дар ҳалкунандаи обӣ-диметилсулфоксидӣ оварда шудааст (рас.3.).



Расми 3. - Тағйирёбии потенсиали системаи Ag^{+}/Ag^{0} барои ҳосилшавиии шаклҳои комплексии нуқра (I) бо 2-меркаптобензимидазол. Calc-ҳис. ва Obs.-мушоҳ.

Нуқтаҳои титронӣ

Дар натиҷаи коркарди натиҷаҳои таҷрибавӣ нишон дода шуд, ки дар система моно ва дуивазшудаи пайвастаҳои комплексиии нуқра бо 2-меркаптобензимидазол ҳосил

мешавад. Барои ҳар як зинаи раванди комплексҳосилшавӣ собитаҳои устувории онҳо вобаста аз табиат ва консентратсияи ҳалкунандаҳои ғайриобӣ оварда шудааст (ҷадвалҳои 9, 10).

Ҷадвали 9. - Бузургиҳои $lg\beta_i$ ҳосилшавиии 2-меркаптобензимидазолии комплексҳои нуқра(I) дар маҳлулҳои диметилсулфоксидӣ

$C_{ДМСО}$, об.%	$lg\beta_1[AgL]^+$	$lg\beta_2[AgL_2]^+$
10	6,05±0,1	10,36±0,12
25	6,22±0,05	10,34±0,05
35	7,51±0,03	10,48±0,18
45	6,42±0,06	10,00±0,07
55	6,50±0,1	10,91±0,04

Ҷадвали 10. - Бузургиҳои $lg\beta_i$ ҳосилшавиии 2-меркаптобензимидазолии комплексҳои нуқра(I) дар маҳлулҳои диметилформамидӣ

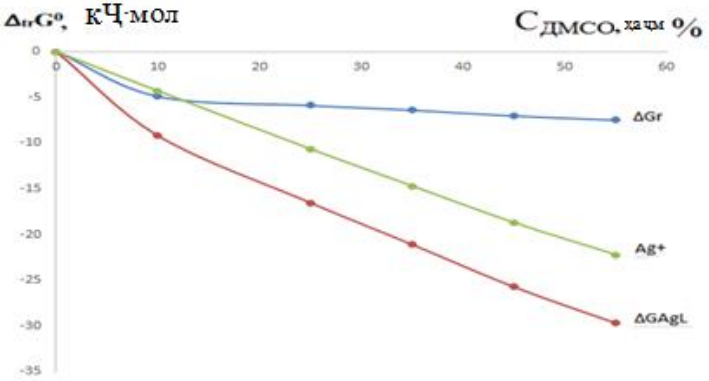
$C_{ДМФА,ҳаҷм}$%	$lg\beta_1[AgL]^+$	$lg\beta_2[AgL_2]^+$
10	6,07±0,03	10,05±0,03
25	6,84±0,07	10,56±0,10
35	7,26±0,06	11,01±0,08
45	7,23±0,06	11,07±0,08
55	7,42±0,06	11,15±0,05

Таҳқиқотҳои гузаронидашудаи мо нишон доданд, комплексҳосилшавии Ag(I) бо 2-МБИ дар маҳлулҳои обӣ ва ҳалкунандаҳои обӣ-органикии консентратсияашон гуногун (C_2H_5OH, ДМСО, ДМФА) зинагӣ тибқи як механизм мегузарад. Дар баробари ин табиати ҳалкунанда ба мувозинати комплексҳосилшавӣ таъсири муайян мерасонад, ки дар натиҷа қиммати собитаи устуворӣ тағйир меёбад.

Аз тарафи Шарнин В.А. «барои фаҳмонидани таъсири ҳалкунанда ба мувозинати комплексҳосилшавӣ тарзҳои гуногунро истифода мекунанд, дар қатори ин, тарзи солвататсионӣ-термодинамикӣ истифода мешавад» [3].

Дар расми 4 вобастагии энергияи Гиббси реаксия, иони нуқра ва заррaҳои комплексӣ дар маҳлули обӣ-

диметилсулфоксидии таркибашон тағйирёбанда оварда шудааст. Нишон дода шуд, ки бо афзоиши миқдори диметилсулфоксид дар маҳлул аз 10 то 55 ҳаҷм.% бузургии $\Delta G_{tr.}$ ҳам барои реаксия ва барои зарраи комплексӣ паст мегардад.



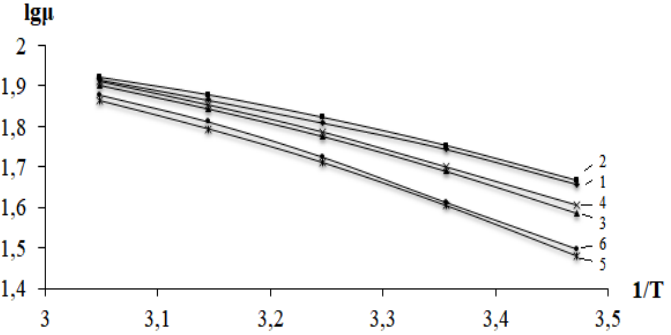
Расми 4.- Тағйирёбии энергияи Гиббси ҳосилшавии комплексҳои нуқра бо 2-меркаптобензимидазол дар ДМСО

Барои структураи наздик «ба пайвастаи 2-меркаптобезимидазол тағйирёбии энергияи Гиббси гузариш аз об ба ҳалкунадаҳои обӣ –этанолӣ ва обӣ-ДМСО мавҷуд аст. Таҳлили кори мазкур нишон дод, ки 2-меркаптоимидазол ҳангоми гузариш аз об ба ин ҳалкунандаҳо кам солвататсия мешавад» [4]. Таҳлили солвататсияи моддаҳои ба реаксия дохилшаванда ҳангоми гузариши раванди комплексҳосилшавии моно2-меркаптобензимидазоли нуқра аз маҳлули обӣ ба обӣ-органикӣ (ДМСО ($(CH_3)_2SO$), ДМФА(-$(CH_3)_2NC(O)H$)) нишон дод, ки тағйирёбӣ дар ҳолати солватии зарачаи комплексӣ бо устувории ҳосилшавии комплексҳо муайян карда мешавад.

Дар боби IV таркиб ва хосиятиҳои физико-химиявии пайвастаҳои комплексии нуқра (I) бо 2-меркаптобензимидазол оварда шудааст. Таҳқиқотҳои гузаронидашуда нишон доданд, ки дар СИ 2-меркаптобензимидазоли координатсиянашуда нисбат ба

СИ пайвастаҳои компллексӣ тағйиротҳои фарқкунанда мушоҳида мешаванд. Дар СИ пайвастаи комплексии нуқра бо 2-МВІ нисбат ба спектри 2-меркаптобензимидазоли координатсиянашудаи шадиди рахи дар 1180 $см^{-1}$ кам шуда сустар мешавад. Дар ин маврид раҳҳои нав дар ҳудудҳои 1140 ва 1125 $см^{-1}$ пайдо мешаванд. Мувофиқи маълумотҳои адабиёт, «дар рахи 1180$см^{-1}$саҳми банди C=S мавҷуд аст» [5]. Бо дар назардошти ин маълумот ва пайдошавии лаппиши шадид аз он шаҳодат медиҳад, ки дар кординатсияи 2-меркаптобензимидазол ба металл атоми сулфур иштирок мекунад. Дар спектри IR-и комплекси $[Ag(2MBI)_2(H_2O)_2]_2SO_4$, тағйирёбии басомади пасти бандҳо дар 450 $см^{-1}$ мушоҳида мешавад, ки дар спектри ИС-и лигандҳои озод дар басомадҳои баландтар намоён мебошанд. Ин бандҳои ҷаббида дар спектри пайваста ҳамоҳангсозӣ ба омехташавӣ дучор мешаванд ва дар 495 $см^{-1}$ пайдо мешаванд. Дар спектри ИС-и $[Ag(2MBI)_2(H_2O)_2]_2SO_4$, мо тағйироти монандро мушоҳида мекунем, ки координатсияшавии 2-меркаптобензимидазолро бо иони комплексҳосилкунанда тавассути атоми сулфури гетеросикли имидазол нишон медиҳад. Дар асоси таҳқиқотҳои гузаронидашуда нишон дода шуд, ки ионҳои сулфат дар сфераи берунаи пайвастаи комплексӣ ҷойгир аст. Барои тасдиқ, инчунин таҳқиқоти мақсаднок оиди омӯзиши ҷараёнгузаронии маҳлули пайвастаҳои комплексӣ гузаронида шуд. Таҳқиқотҳои гузаронидашуда нишон доданд, ки ҷараёнгузаронии молярии маҳлули пайвастаҳои координатсионӣ дар ДМФА бо афзоиши ҳарорат зиёд мешавад (расми 5.). Вобастагии мушоҳидашуда бо назарияи ҷараёнгузаронии электролитҳо мувофикат мекунад, ки тибқи он афзоиши ҳарорат ба баландшавии ҳаракатнокии ионҳо дар маҳлул оварда мерасонад. Қайд кардан бо маврид аст, ки аз ҳарорати 45^0 С баланд ҳамаи пайвастаҳои комплексии синтезкардашуда ҳамчун электролитҳои 1:1 рафтор мекунанд. Чунин рафтор

ё қисман солвататсияшавии анионҳоро (NO_3^-, Cl^-, Br^-, SCN^-) бо молекулаи ҳалкунанда дар сфераи координатсионӣ вобаста аст, ё диссотсиатсияи онҳо дар маҳлул бо ҳосилшави ионҳо.



Расми 5. - Вобастагии ҳароратии ҷараёнгузаронии молярии lgμ аз 1/T, 1-[Ag($C_7H_6N_2S$)(H_2O)$_3$ NO_3]; 2-[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O)$_2NO_3$]; 3-[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$Cl]; 4-[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$Br]; 5-[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O)$_2$]$_2SO_4$ и 6-[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O) SCN]

Вобастагии ҳароратии ҷараёнгузаронии молярӣ (lgμ от 1/T) барои маҳлулҳои пайвастаҳои координатсионии бо мақсади муайянкунии энегияи фаъолнокии гузариши заряд гузаронида шуд. Нишон дода шуд, ки энергияи фаъолнокӣ бо қатори зерин меафзояд: [Ag($C_7H_6N_2S$)(H_2O)$_3NO_3$] < [Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O)$_2NO_3$] < [Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O)$_2NO_3$] < [Ag ($C_7H_6N_2S$)$_2$Cl] < [Ag ($C_7H_6N_2S$)$_2$Br] <[Ag($C_7H_6N_2S$)$_2$(H_2O) SCN]. Натиҷаҳои бадаст оврадашуда аз мураккабии таркиби зарраҳои комплексӣ, баландшавии устувории онҳо бо афзоиши ҳарорат ва камшавии ҳаракати ионҳо дар маҳлул шаҳодат медиҳад.

Дар натиҷаи таҳқиқи термолизи комплексҳо пайдарпайии ҷудошавии лиганди атсидӣ, органикӣ ва молекулаи оби координатсионӣ муайян карда шуд. Термотаҷзияи пайвастаи комплексӣ аз термолизи нитарти нуқра ба таври назаррас фарқ мекунад. Ҳангоми муқоисаи штрихдиаграмми пайвастаҳои комплексии нуқра, ки миқдори гуногуни лиганди органикӣ дар сфераи дохилии координатсионӣ доранд, нишон дода шуд, ки характери

умумии рентгенограммаҳо тағйир намеёбад. Ин омил аз он шаҳодат медиҳад, ки пайвастаҳои координатсионӣ изоструктурӣ мебошанд. Дар баробари ин, дар рентенограммаҳо тақсимшавии шидатнокии дар рефлексҳо ва лағжиши раҳҳои хос мушоҳида мешавад. Бо дарназардошти натиҷаҳои ба дастоврдашуда оиди омузиши таркиб, сохти пайвастаҳои координатсионии нуқра бо 2-MBI (натиҷаҳои титронии потенсиометрӣ, таҳлили элементӣ, СИ-и пайвастаҳои координатсионӣ ва моддаҳои аввала, ченкунии кондуктометрӣ ва ғ.) ва қобилияти донории атомҳои лиганди органикӣ бо металлҳо, адади координатсионии металл-комплексҳосилкунанда, мо эҳтимолияти равандҳои ҳосилшавии комплексҳоро пешниҳод намудем.

Хулоса

1. Бори аввал мувозинати кислотагӣ-асосии 2-MBI вобаста аз табиат ва миқдори ҳалкунандаҳои органикӣ таҳқик карда шуд. Характери тағйирёбии мувозинати кислотагӣ-асосии лиганди омӯхташуда вобаста аз компонентҳои органикӣ муқаррар карда шуд. Ҳудуди ҳосилшавии шаклҳои гуногуни лиганди органикӣ дар доираи васеи pH-и маҳлул дар муҳитҳои ДМСО, ДМФА ва спирт муайян карда шуд [1-М, 2-М, 4-М, 5-М, 6-М,7-М, 9-М].

2. Бо истифода аз усули потенсиометрӣ бори аввал мувозинати комплексҳосилшавии иони нуқра бо 2-MBI таҳқиқ карда шуд. Дар асоси натиҷаҳои экспериментали устувории комплексҳои $[Ag2\text{-}MBI]^+$ ва $[Ag(2MBI)_2]^+$ муайян шуда, таъсири таркиб, миқдор ва ҳарорат ба мувозинати ҳосилшавии ин шаклҳои комплексӣ муқаррар карда шуд [2-М, 3-М, 4-М, 5-М, 6-М,7-М,8-М, 10-М].

3. Бузургиҳои ΔG, ΔS, ΔH ҳосилшавии комплексҳои Ag(I) бо 2-меркаптобензимидазол ҳисоб карда шуданд. Нишон дода шуд, ки раванди ҳосилшавии $[Ag2\text{-}MBI]^+$ ва $[Ag(2MBI)_2]^+$ бо тағйирёбии мусбати энталпия мегузарад.

Муқаррар карда шуд, ки ҳосилшавиии комплексҳои 2-меркаптобензимидазолӣ раванди худбахудгузарӣ мебошад. Тағйирёбии энергияи Гиббс дар раванди комплексҳосилшавӣ бо фарқияти байни энергияи солвататсияи зарраи комплексӣ ва ионҳои Ag^+ муайян карда мешавад. Дар ин ҳолат сабаби асосии тағйирёбии манфии энергияи Гиббс ҳангоми гузариш устуворшавии шакли комплексӣ ба ҳисоб меравад [3-М, 4-М].

4. Пайвастаҳои нави координатсионии нуқра бо 2-меркаптобензимидазол синтез карда шуданд. Таркиб, сохт, ва баъзе хосиятҳои физико-химиявӣ ва реаксияи ҳосилшавии онҳо пешниҳод карда шуд.

5. Ҷараёнргузаронии молярии маҳлули комплексҳо таҳқиқ карда шуд. Нишон дода шуд, ки пайвастаҳои комплексии синтезкардашуда заиф ва баъзеашон ба электролитҳои намуди 1:1 таалуқ доранд. Қатори тағйирёбии энергияи фаъолнокии комплексҳо пешниҳод шуд. [11-М].

6. Бо усули таҳқиқи СИ тарзи координатсияи комплексҳосилкунанда бо лиганди органикӣ муқаррар карда шуд. Нишон дода шуд, ки дар координатсия атоми донории сулфури молекулаи 2-меркаптобензимидазол иштирок мекунад. Маҳсули термолизи пайвастахои комплексии синтезкардашуда ва парметрҳои панҷараи кристалии онҳо муайян карда шуд.

ТАВСИЯҲО ОИД БА ИСТИФОДАИ АМАЛИ НАТИҶАҲОИ ТАҲҚИҚОТ

1.Натиҷаҳои таҳқиқоти экспериментолӣ оиди комплексҳосилкунии нуқра бо 2-меркаптобензимидазол барои пешгӯии қонунияти ҳосилшавиии комплексҳои 2-меркаптобензимидазол вобаста аз омилҳои гуногун бо дигар металл-комплексҳосилкунандаҳо истифода кардан тавсия дода мешаванд.

2.Натиҷаҳои протолитикии 2-меркаптобензимидазол дар маҳлулҳои обӣ-органикӣ барои баҳо додан ба

собитаҳои устувории ин лиганд бо дигар атомҳои марказӣ истифода хоҳанд шуд.

3.Азбаски ҳам металл ва ҳам лиганди органикии истифодашуда моддаҳои биологии фаъол ба ҳисоб мераванд, пайвастаҳои координатсионии ҳосилкардашуда дар асоси онҳо дар шакли сахт метавонанд хосияти фаъоли биологӣ дошта бошанд.

Адабиёт

1. Аль Азрак А.К. Химико-аналитические свойства некоторых органических реагентов на основе тиосемикарбазида. Автореф. дисс. канд. хим. наук.– Одесса. 2006. 18с.

2. 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.

3. Содатдинова А.С., Сафармамадзода С.М., Усачева Т.Р., Мабаткадамзода К.С. Комплексообразование серебра(I) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом в водно-диметилсульфоксидном растворителе. Журн.физич. химии. Том: 98. № 4. 2024. С. 25-31.

4. Сураёи С.Б. Влияние состава растворителя на кислотно-основные и комплекссообразующие свойства 2-меркаптоимидазола / С.Б. Сурайё, А.С Содатдинова, С.М. Сафармамадзода, С.С. Саидов // Вестник Таджикского национального университета Серия естественных наук. 2022. №3. С. 327-339.

5. Баходуров, Ю.Ф. Комплексные соединения рения (V) с 1-этил-2-меркаптоимидазолом/ Ю.Ф. Баходуров //Автореф. дис. ... канд. хим. наук. – Душанбе. 2007. 24 с.

6. Кудратуллоев, Ё.К. Комплексообразование серебра(I) с N,N-диэтилтиомочевиной в водно-диметилформамидных и водно-диметилсульфоксидных растворах / Ё.К. Кудратуллоев // Политехнический вестник. – 2024. – № 1 (65). – С. 98–102.

7. Тудоряну, К.И. Исследование смешанного комплексообразования ионов серебра с тиомочевиной и роданид-ионом в водно-ацетоновых растворах / К.И. Тудоряну, П.К. Мигаль,

С.И. Вражмаш // Журн. неорган. химии. – 1981. – Т. 26, № 10. – С. 2786–2791.

8. Тулюпа, Ф.М. Состав и устойчивость комплексов серебра с производными тиомочевины в смесях воды с формамидом и диметилсульфоксидом / Ф.М. Тулюпа, Е.Я. Байбарова, В.В. Мовчан, О.Г. Дзюба // Журн. неорган. химии. – 1979. – Т. 24, вып. 4. – С. 988–993.

9. Назарова, Л.В. Устойчивость комплексных соединений серебра с тиомочевиной в водно-спиртовых растворах / Л.В. Назарова, В.И. Прижилевская // Журн. неорган. химии. – 1967. – Т. 12, вып. 11. – С. 3051–3054.

10. Раджабов, У. Термодинамические характеристики реакций комплексообразования железа(II) и железа(III) в водных растворах имидазола / У. Раджабов, М.М. Рахимова // Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем (Крестовские чтения): материалы XI Международной научно-практической конференции. – Иваново, 2011. – С. 17–18.

Феҳристи интишороти илмии довталаби дарёфти дарҷаи илмии аз руй мавзуи диссертатсия

Мақолаҳои дар мачаллаҳои илмии тақризшавандаи тавсиянамудаи КОА назди Президенти ҶТ:

[1-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразование серебра (I) с 2- меркаптобензимидазолом при 278-318 К / З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С.Мабаткадамзода // Доклады Академии наук Республики Таджикистан. 2018. Т 61, № 4. С. 759-765.

[2-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразования серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольных растворах / С.М.Сафармамадов, З.И.Каримова, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Журнал физической химии, 2020. Т 94, № 6. С. 844-849.

[3-А]. **Каримова, З.И.** 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. № 2. 2020. С. 168-176.

[4-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, С.М.

Сафармамадзода, Ю.Ф. Баходуров, З.А. Одилова, К.С. Мабаткадамзода // Вестник Хорогского университета. Серия естественных и математических наук. № 1 (05) 2026, С. 28-34.

Фишурдаи мақолаҳо дар маводи конференсияҳои илмӣ :

[5-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом при 298К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. Душанбе. 2018. С. 74.

[6-А]. **Каримова, З.И.** Комплексные соединения серебра (I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольном растворе / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» (11-12 октября 2018г). Душанбе . 2018 . С. 98-99.

[7-А]. **Каримова, З.И.** Комплексообразование Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом в водно-этанольном растворе при 288 К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения » (11-12 октября 2018г). Душанбе 2018. С. 95-96.

[8-А]. **Каримова, З.И.** Влияние водно-спиртового раствора на устойчивость комплексов Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. Душанбе. 2019. С.75.

[9-А]. **Каримова, З.И.** Изучение устойчивости комплексов серебра (I) с 2-меркптобензимидазолом в этанольном растворе / З.И. Каримова, Ю.Ф. Баходуров // Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. Душанбе. 2020. С.58-59

[10-А]. **Каримова, З.И.** Определение устойчивости комплексов серебра (I) с 2-меркптобензимидазолом в этанольном растворе при 298 К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции «Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан », Душанбе. 2020. С. 64-67.

[11-А]. **Каримова, З.И**. Изучение молярной электрической проводимости комплексных соединений Ag(I) с 2-меркаптобензимидазолом / З.И. Каримова, С.М. Сафармамадзода, Ю.Ф. Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Сборник материалов международной научно-практической конференции на тему «Комплексные соединения и аспекты их применения » (17 сентября 2025 г).- Душанбе. 2025. С. 23-25.

[12-А]. **Каримова, З.И.** Кислотно-основные свойства 2-меркаптобензимидазола в растворах вода-ДМФА при 298 К / З.И. Каримова, Ю.Ф.Баходуров, К.С. Мабаткадамзода // Материалы VII международной научной конференции: «Вопросы физической и координационной химий. Душанбе. 2026. С. 418- 423.

Аннотация

диссертации Каримзода Замиры Исматулло тему «Комплексообразование серебра (I) с 2- меркаптобензимидазолом в водно-органических растворах» на соискание ученной степени кандидата химических наук по специальности 1.4.2. Неорганическая химия

Ключевые слова: серебро, 2-меркаптобензимидазол, комплексообразования, общие константы устойчивости, константа ионизация, кислотно-основные свойства, водно-органические растворители, термодинамические функции, равновесная концентрация, сольватация, энергия Гиббса, ИК-спектр, молярная электрическая проводимость рентгенофазовый анализ, термолиз.

Объект исследования: Системы Ag^{+}–2-MBI-alc.(C_2H_5OH, CH_3OH) –H_2O, Ag^{+}–2-MBI-ДМСО–H_2O, Ag^{+}–2-MBI-ДМФА–H_2O.

Цель исследования: определении и оценка кислотно-основных равновесий и комплексообразующих свойств 2-меркаптобензимидазола в растворах в зависимости от природы органического растворителя, разработка получения новых 2-меркаптоимидазольных координационных соединений иона серебра и исследование их свойств.

Методы исследования: Использованы методы препаративной координационной химии, pH-метрия, потенциометрия, метод Бьеррума, метод Ледена, ИК-спектроскопия, дериватография, кондуктометрия, рентгенография, статистическая обработка результатов потенциометрического титрования изученных систем проведена с помощью программы KEV

Полученные результаты и их новизна: впервые определены величины констант ионизации 2-меркаптобензимидазола и области доминирования различных форм данного лиганда в зависимости от природы неводного компонента. Осуществлён процесс формирования комплексных форм серебра(I) с 2-меркаптобензимидазолом в смешанных органических растворителях. Представлена схематическая модель формирования комплексных форм Ag(I) с 2-MBI и предложена матрица их образования. Определены динамика сольватационных эффектов в зависимости от природы и концентрации органических растворителей. Показано, что стабильность монокомплекса серебра при смене растворителя контролируется изменениями в её сольватном состояние. В результате исследования также впервые синтезированы новые координационные соединения в твердой фазе, которые изучены методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, дериватографии, рентгенофазовым анализом и кондуктометрии. Анализ ИК -спектров некоординированого 2-меркаптобензимидазола и его комплексы с серебром показали, что органический лиганд координируется монодентано посредством атома серы меркапто группы органического лиганда. Определены продукты термолиза некоторых синтезированных комплексов и параметры их кристаллической решетки.

Степень использования: Закономерности, которые выявлены при изменение смешанного растворителя при определение величин констант кислотной ионизации, величины общей константы устойчивости, термодинамические параметры образования комплексов серебро с 2-меркаптобензимидазолом вносят значимый вклад в координационною химию. Численные значение констант устойчивости, термодинамические характеристики, величины pKa 2-меркаптобензимидазола могут быть использованы как справочный материал при изучении процесса комплексообразования других металлов.

Область применения: Разработанные способы получения координационных соединений могут быть использованы для синтеза комплексных соединений ионов разных металлов с производными имидазола как в водных, так и водно-органических средах. Результаты диссертационной работы могут быть использованы при чтении курсах по соответствующим дисциплинам (Химия координационных соединений, методы исследования комплексных соединений и др.) в образовательных учреждениях.

Аннотатсияи
диссертатсияи Каримзода Замира Исматулло
дар мавзуи «Комплексҳосилкунии нуқра (I) бо 2-меркаптобензимидазол дар маҳлуҳои обӣ-органикӣ» барои дарёфти дараҷаи илмии номзади илмҳои химия аз руи ихтисоси 1.4.2. Химияи ғайриорганикӣ

Калидвожаҳо: нуқра, 2-меркаптобензимидазол, комплексҳосилшавӣ, собиатҳои умумии устуворӣ, собитаи ионизатсия, хосияти кислотагӣ асосӣ, ҳалкунандаҳои обӣ-органикӣ, функсияҳои термодинамикӣ, консентратсияи мувозинатӣ, солвататсия, энергияи Гиббс, СИ, ҷараёнгузаронии молярӣ, таҳлили рентгенофазавӣ, термолиз.

Объекти таҳқиқот: Системаҳои Ag^{+}−2-MBI-alc.(C_2H_5OH, CH_3OH) –H_2O, Ag^{+}−2-MBI-ДМСО−H_2O, Ag^{+}−2-MBI-ДМФА−H_2O.

Ҳадафи таҳқиқот: муайянкунӣ ва баҳо додан ба мувозинати кислотагӣ асосӣ ва хосияти комплексҳосилкунии 2-меркаптобензимидазол дар маҳлул вобаста аз табиати ҳалкунандаи органикӣ, коркарди ҳосилкунии пайвастҳои нави координатсионии иони нуқра бо 2-меркаптоимидазол ва таҳқиқи хосиятҳои онҳо.

Усулҳои таҳқиқот: Усулҳои препаративии химияи координатсионӣ, pH-метрӣ, потенсиометрия, усули Беррум, усули Леден, спектроскопияи инфрасурх, дериватографӣ, кондуктометрӣ, рентгенографӣ, коркарди омории натиҷаҳои бадастовардашудаи титронии потенсиометрии системаҳои омӯхташуда бо ёрии барномаи KEV гузаронида шуд.

Натиҷаҳои таҳқиқот ва навгониҳо: Аввалин маротиба бузургиҳои собитаҳои устувории 2-меркаптобензимидазол ва ҳудуди мавҷудияти шаклҳои гуногуни ин лиганд вобаста аз табиати компоненти ғайриобӣ муайян карда шуд. Раванди ҳосилшавии шаклҳои комплексии нуқра (I) бо 2-меркаптобензимидазол дар ҳалкунандаҳои омехта ба роҳ монда шуд. Нақшаи модели ҳосилшавии комплексҳои Ag(I) бо 2-MBI муқаррар карда шуда, матритсаи ҳосилшавии онҳо пешниҳод карда шуд. Динамикаи самараи солвататсионӣ дар маҳлулҳои обӣ-органикии вобаста аз табиат ва консентратсияи ҳалкунандаи органикӣ муайян карда шуд. Муқаррар карда шуд, ки ҳангоми гузариши раванди ҳосилшавии зарраи комплексии аввали нуқра дар маҳлули оби-органикӣ тағйирёбӣ дар ҳолати шакли солватиии комплексро устуворii комплексҳо муайян мекунад. Дар натиҷаи таҳқиқот аввалин бор пайвастаҳои координатсионии нави нуқра бо 2-MBI бо фазаи сахт ҳосил карда шуданд, ки бо усули таҳлили элементӣ, СИ, дериватографӣ, таҳлили рентгенофазавӣ ва кондуктометрӣ омӯхта шуданд. Таҳлили СИ лиганди координатсиянашудаи 2-меркаптобензимидазол ва комплексҳои он бо нуқра нишон дод, ки лиганди органикӣ тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионии молекулаи лиганд координатсия мшавад. Маҳсули термолиз ва параметрҳои панҷараи кристалии баъзе комплексҳо муайян карда шуд.

Дараҷаи истифода: Қонуниятҳое, ки ҳангоми тағйирёбии ҳалкунадаи омехта ҳангоми муайянкунии собитаи ионизатсияи кислотагии лиганди органикӣ, собитаҳои умумии устуворӣ, параметрҳои термодинамики ҳосилашвии комплкексҳои нуқра бо 2-меркаптобензимидазол бароварда шуданд, дар химияи координатсионӣ саҳм хоҳанд гузошт. Қимматҳои собитаҳои устуворӣ, тавсифи термодинамикӣ, бузургиҳои pKa 2-меркаптобензимидазол ҳамчун маводи барои маълумотнома ҳангоми омӯзиши раванди комплексҳосилкунии дигар металлҳо бо имидазолҳо истифода мешавад.

Соҳаи истифодабарӣ: Усулҳои коркардшудаи ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионӣ метавонанд барои синтези пайвастаҳои координатсионии металлҳои гуногун бо ҳосилаҳои имидазол ҳам дар маҳлули обӣ, ва ҳам дар маҳлулҳои обӣ-органикӣ истифода шаванд. Натиҷаи кори диссертатсионӣ метавонад ҳангоми хондани курсҳои фанҳои мувофиқ (Химияи пайвастҳои координатсионӣ, Усулҳои таҳқиқи пайвастҳои координатсионӣ ва ғ.) дар муассисаҳои таълимӣ дар соҳаи химияи пайвастҳои комплексӣ истифода карда шаванд.

ABSTRACT

of the dissertation of Karimzoda Zamira Ismatullo on the topic "Complexation of silver (I) with 2-mercaptobenzimidazole in aqueous-organic solutions" for the degree of candidate of chemical sciences in specialty 1.4.2. Inorganic chemistry

Keywords: silver, 2-mercaptobenzimidazole, complexation, general stability constants, ionization constant, acid-base properties, aqueous-organic solvents, thermodynamic functions, equilibrium concentration, solvation, Gibbs energy, IR spectrum, molar electrical conductivity, X-ray phase analysis, thermolysis.

Object of study: Ag^{+}–2-MBI-alc. (C_2H_5OH, CH_3OH) –H_2O, Ag^{+}–2-MBI-ДМСО–H_2O, Ag^{+}–2-MBI-ДМФА–H_2O systems.

Objective of study: To determine and evaluate the acid-base equilibria and complexing properties of 2-mercaptobenzimidazole in solutions depending on the nature of the organic solvent, to develop new 2-mercaptoimidazole coordination compounds of silver ions, and to study their properties.

Research methods: Preparative coordination chemistry, pH-metry, potentiometry, the Bjerrum method, the Leden method, IR spectroscopy, derivatography, conductometry, and X-ray diffraction were used. Statistical processing of the potentiometric titration results for the studied systems was performed using the KEV program.

Results and their novelty:

The ionization constants of 2-mercaptobenzimidazole and the regions of dominance of various forms of this ligand depending on the nature of the non-aqueous component were determined for the first time. The process of formation of complex forms of silver(I) with 2-mercaptobenzimidazole in mixed organic solvents was carried out. A schematic model of the formation of complex forms of Ag(I) with 2-MBI is presented, and a matrix for their formation is proposed. The dynamics of solvation effects depending on the nature and concentration of organic solvents were determined. It was shown that the stability of the silver monocomplex upon changing the solvent is controlled by changes in its solvate state. As a result of the study, new coordination compounds in the solid phase were also synthesized for the first time, which were studied using elemental analysis, IR spectroscopy, derivatography, X-ray phase analysis, and conductometry. Analysis of the IR spectra of uncoordinated 2-mercaptobenzimidazole and its silver complexes revealed that the organic ligand is coordinated monodentately via the sulfur atom of the mercapto group of the organic ligand. The thermolysis products of some synthesized complexes and their crystal lattice parameters were determined.

Purpose: The patterns revealed by varying the mixed solvent during the determination of the acid ionization constants, the overall stability constant, and the thermodynamic parameters of silver complex formation with 2-mercaptobenzimidazole contribute to coordination chemistry. The numerical values of the stability constants, thermodynamic characteristics, and pKa values of 2-mercaptobenzimidazole can be used as reference material for the complexation of other metals.

Scope: The developed methods for producing coordination compounds can be used to synthesize complex compounds of various metal ions with imidazole derivatives in both aqueous and aqueous-organic media. The results of this dissertation can be used in courses on relevant subjects (Chemistry of Coordination Compounds, Methods of Complex Compound Research, etc.) at educational institutions or for continuing professional education in the field of complex compounds.