

ТАДЖИКСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

УДК: 546.57+547.425.5
ББК:24.121(2)
М-13

На правах рукописи

МАДЖИДОВ ИКРОМ АХМАДОВИЧ

**«ПРОЦЕССЫ ОБРАЗОВАНИЯ КООРДИНАЦИОННЫХ
СОЕДИНЕНИЙ СЕРЕБРА С МЕТИОНИНОМ»**

Специальность 02.00.04-физическая химия

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата химических наук

Душанбе - 2023

Работа выполнена на кафедре неорганической химии химического факультета Таджикского национального университета.

- Научный руководитель:** **Рахимова Мубаширхон** - доктор химических наук, профессор, профессор кафедры физической и коллоидной химии Таджикского национального университета.
- Научный консультант:** **Нурматов Тошкул Менгликулович** - кандидат химических наук, доцент.
- Официальные оппоненты:** **Березин Михаил Борисович** - доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник Института химии водных растворов АН РФ, г. Иваново.
- Исозода Диловаршох Тарика** - кандидат химических наук, доцент, ректор Института энергетики Таджикистана.
- Ведущая организация:** кафедра общей и неорганической химии химического факультета Таджикского государственного педагогического университета им.С. Айни.

Защита состоится 28 сентября 2023 года в 14:00 часов на заседании Диссертационного совета 6D.КOA-010 при Таджикском национальном университете по адресу: 734025, г. Душанбе, пр. Рудаки, 17, Таджикский национальный университет, главный корпус, зал диссертационного совета, 2 этаж. E-mail: ikromovich80@mail.ru

С диссертацией можно ознакомиться на сайте www.tnu.tj и в центральной библиотеке Таджикского национального университета по адресу: 734025, г. Душанбе, пр. Рудаки, 17.

Автореферат разослан «__» _____ 2023 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
д.х.н., и.о. профессора



С.И. Раджабзода

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Все аминокислоты, встречающиеся в природе, содержат донорные атомы S, O, N. Они могут формировать с различными металлами комплексные соединения, обладающие уникальными свойствами. Они имеют координационный узел $M N_x O_y S_z$ и хелатное строение, служат моделями для изучения конкурентного взаимодействия во внутренней координационной сфере, оказывают специфическое действие на стереохимию формирующихся структур, физические и химические свойства комплексов. Наиболее важные среди них – это являются комплексы d-элементов. Обычно они являются составной частью довольно сложных биологических комплексов или биополимеров. Необходимо отметить, что они крайне важны при выяснении роли координации микроэлементов с лигандами в биообъектах. Серебро и его координационные соединения занимают среди них особое место благодаря своим высоким антимикробным свойствам. Этим объясняется ситуация с интенсивными исследованиями в плане определения антимикробной активности комплексов Ag(I), особенно с биоактивными аминокислотами. Кроме того, на их основе получают без побочного действия эффективные сердечно-сосудистые, ноотропные, противовоспалительные лекарственные препараты, иммуномодуляторы, для лечения остеопороза и функций желудочно-кишечного тракта (ЖКТ). Серебро и его комплексы в виде наносистем применяются при создании материалов (покрытий) протезов, а также в диагностических приборах. Они вводятся во внутрь организма, поэтому должны пройти антимикробную обработку. Следует отметить, что указанные соединения ещё шире используются в аграрной промышленности как стимуляторы роста, а в птицеводстве и ветеринарии, как биологически активные микродобавки к кормам животных и птиц. В связи с изложенным, для разработки высокоэффективных лекарственных средств широкого спектра действия, стимуляторов роста, микроудобрений и микродобавок к кормам наиболее перспективными являются комплексы серебра(I) с природными аминокислотами.

Поэтому, исследование процессов формирования координационных соединений металлов, особенно серебра(I) с природными аминокислотами относится к наиболее приоритетному направлению современной координационной, бионеорганической, неорганической, а также физической химии.

Такие исследования играют большую теоретическую и практическую роль. Они совершенствуют и развивают наши современные представления об основах имеющихся направлений химической науки. Кроме того, они помогают найти ранее неизвестных свойств химических систем. Этим самым, соответственно, выявить новые области применения научных разработок.

Степень научной разработанности, теоретико-методологические основы исследования. В литературе часто можно встретить исследования по образованию комплексов переходных металлов с различными органическими лигандами. Наши коллеги Сафармамадзода С.М., Азизкулова О.А., Мабаткадамова К.С., Содатдинова, А.С., Муудинов, Х.Г. и др. работают с системами медь(II)-серебро(I) тиоамидные и амидные лиганды в водных, неводных, водно-органических растворителях с привлечением различных физико-химических методов, устойчивость комплексов определяют методами Ледена, Бьеррума. Применение комплексных соединений серебра и меди на основе N-ацетилтиомочевины, тиокарбогидразида для электрохимической полировки поверхности металлов и сплавов предложено и внедряется в производство учеными Сафармамадзода С.М., Тегарта В., Jacquet P.A., Bianchi G., Hoar T.P., Francis H.T. и др. В работах Назаровой Л.В., Тулюпа Ф.М., Тудоряну К.И., Пашкова Г.Л., Буду, Г.В., Зевакина М.А. изучены процессы образования комплексных соединений серебра с тиомочевинной, пиридином и никотинамидом в сложных растворителях: водно-спиртовых, ацетоновых, формаamidных, диметилсульфоксидных и диосановых растворах. Определены составы, устойчивость комплексов и установлены закономерности по влиянию природы

растворителя на указанные параметры. Голиков А. Н., Белеванцев В. И. и Ковалева М.А. исследовали комплексообразование серебра(I) с 18-краун-6 в бинарных смесях неводных растворителей, а термодинамические характеристики образования комплексов изучены в водном растворе. Yuan-Gao Wu и Sawzan, Salameh определены кристаллическая структура комплексов меди(II) и серебра(I) с производными триазолов. Установлено, что с серебром образуются димерные комплексы. Qin Zhang, Li W. синтезировали и определили кристаллическую структуру комплексов меди(II) и серебра(I) с лигандами 1,3,4-циадиазол электрохимические, флуорисцентные и магнитные свойства нового комплекса $[Ag(2,2'-bipy)(C_{14}H_9O_3)] \cdot (C_{14}H_{10}O_3)$. Гессе Ж. Ф. изучил образование комплексов серебра(I) с глицинат-ионами в водно-органических растворителях.

Следует отметить, что полный анализ имеющейся литературы по теме диссертационной работы показал, что до настоящего времени по процессам образования комплексов серебра(I) с метионином системных работ нет. Поддымов В.П. в 1977 г. опубликовал данные по образованию комплексов Ag(I) с глицином и метионином при ионных силах раствора 0,0 и 0,1 моль/л. Выявлено, что комплексы состава AgA и AgA_2 образуются при концентрации аминокислот $(1 \div 10) \cdot 10^{-2}$ и серебра(I) – $(5 \div 9) \cdot 10^{-5}$ моль/л. Рассчитаны константы их устойчивости. В литературе часто можно встретить противоречивые результаты, сложности в существующих методиках по определению количества базисных частиц (лигандов, ионов серебра). Устойчивость координационных соединений ионов Ag(I) определена преимущественно при одной ионной силе и температуре. Сведений о термодинамических функциях процессов формирования комплексных соединений Ag(I) с метионином, использовании для предпосевной обработки семян пшеницы нет.

При выполнении расчетных работ по экспериментальным данным использованы современные методики, компьютерные программы. Для выявления достоверности данных осуществлена статистическая их обработка. Результаты диссертационной работы обсуждались с привлечением современных методов изучения состава, строения комплексов, теории координации лигандов центральным атомом комплексообразователя.

Цель работы. Выявление особенностей закономерностей процессов формирования координационных соединений в системе: Ag(I)–метионин – вода, определение состава, базисных свойств, синтез, исследование химических и биологических свойств форм образующихся комплексов.

Для достижения цели были решены следующие задачи:

- исследовать процессы ионизации метионина методом рН-метрии, определить значения первой (pK_1) и второй (pK_2) константы диссоциации в водном растворе при его ионной силе ($I = 0,1$ моль/л $Na(H)ClO_4$), температуре 298,16 К (в условиях проведения эксперимента по комплексообразованию серебра);
- методом рН-метрии изучить процессы формирования комплексов серебра с метионином в водной среде при его ионной силе $I = 0,1$ моль/л $Na(H)ClO_4$, температуре 298,16 К, установить закономерности, которые существуют в системе и найти состав образующихся координационных соединений, их базисные и модельные параметры;
- синтезировать метионинные комплексы серебра, определить состав комплекса и разработать оптимальные условия выделения его из раствора;
- методом ИК-спектроскопии изучить координацию атомов функциональных групп метионина с серебром (I);
- провести рентгенофазовый анализ синтезированных координационных соединений серебра и изучить электрическую проводимость их водных растворов;
- обработать все полученные экспериментальные результаты с использованием современных программ (компьютерных) и новейших методик статистической обработки;
- испытать комплекс серебра с метионином в лабораторных условиях на пшенице сорта «Сафедак» и выявить их физиологические действия и последствия.

Объектами исследования являются системы: метионин ($C_5H_{11}NO_2S$) - вода; серебро(I)- метионин - вода при различных, но постоянных значениях температуры и ионной силе раствора, а также комплексы серебра(I)-с метионином; семена пшеницы-комплекс серебра(I) с метионином.

Предметом исследования является изучение процессов диссоциации метионина при различных температурах, выявление закономерностей, определение термодинамических характеристик, изучение комплексообразования серебра(I) с метионином в водных растворах, физико-химические и биологические свойства комплексов серебра(I) с метионином, возможные области применения.

Научная новизна диссертационной работы.

- Процессы электролитической диссоциации метионина в водной среде впервые исследованы методом рН-метрии при температуре 298,16 К, ионной среде 0,1 моль/л, рассчитаны значения pK_1 , pK_2 , которые необходимы в дальнейшем для термодинамических расчетов процессов комплексообразования.
- С использованием метода рН-метрии, в водных растворах метионина и ионной силе раствора 0,1 моль/л, температуре 298,16 К исследованы процессы формирования комплексов серебра(I).
- Закономерности формирования метионинных комплексов серебра, установленные впервые, определенные их составы, базисные и модельные параметры, области распределения и доминирования.
- Предложены впервые алгоритмы термодинамических расчетов и полной статистической обработки результатов эксперимента методом рН-метрии.
- Получены комплексы серебра с метионином, изучены их составы и впервые предложены оптимальные условия выделения из раствора с максимальным практическим выходом.
- Методом ИК-спектроскопии изучена координация метионина с центральным атомом комплексообразователем – серебром. Проведены рентгенофазовый анализ комплексов серебра с метионином и изучена их электропроводимость. Установлена зависимость электропроводности комплексов от температуры и определены численные значения энергии активации электролитической проводимости координационных соединений.
- Проведены лабораторные испытания комплексов серебра с метионином на семенах пшеницы сорта «Сафедак», выявлены их биологически активные характеристики и положительное их влияние при применении в качестве стимулятора роста семян в результате их увлажнения перед севом.

Теоретическая ценность работы. Выявление закономерностей и механизма влияния рН среды, температуры, концентрационных параметров на образование диссоциированных и недиссоциированных форм метионина, а также диаграммы распределения этих форм. Установление механизма образования комплексов серебра(I) с метионином и закономерностей изменения модельных параметров комплексов, а также областей их доминирования по шкале рН (диаграммы распределения). Определение физико-химических и биологических свойств полученных комплексов, принципов моделирования процессов образования комплексов. Перечисленное будет дополнять теоретические основы комплексов серебра(I) с аминокислотой (метионином) в соответствующих разделах координационной химии, а также составит новые справочные данные по термодинамическим, физико-химическим и биологическим свойствам комплексов серебра.

Практическая ценность работы. Аминокислота метионин и серебро являются важными биологически активными соединениями. Координационные соединения, полученные на их основе на аддитивной основе могут проявлять ещё более активные физиологические и антимикробные свойства. Поэтому, метионин, серебро и все их координационные соединения могут быть применены как лекарственные препараты в медицине, фармакологии, косметологии для омолаживания кожи, во всех областях аграрной промышленности как микроудобрения, в ветеринарии и птицеводстве как биодобавки к кормам животных и птиц. Наиболее устойчивые комплексы серебра с метионином могут способствовать целевой адресной доставке лекарств.

В диссертационной работе использован принцип моделирования процессов комплексообразования, что совместно с предложенными алгоритмами и современного компьютерного обеспечения дало возможность быстро, достоверно определить состав, число, константы устойчивости и степени накопления координационных соединений. Такую основу принципа моделирования можно использовать в системах с любыми другими центральными атомами металлов-комплексообразователей и аминокислотами. Необходимо отметить, что определенные модельные параметры комплексов могут быть применены для выявления стабильных оптимальных условий выделения координационных соединений из раствора, тем самым дают возможность проводить их направленный синтез. Все рассчитанные константы могут быть применены как справочные данные для термодинамических расчетов.

Методы исследования и использованная аппаратура. Экспериментальные результаты диссертационной работы получены с применением метода рН-метрии. Этот метод является достоверным для изучения процессов образования координационных соединений металлов в растворах лигандов органической и неорганической природы. Базисные и модельные параметры определены с привлечением современных расчетных методов и обработки полученных экспериментальных результатов по компьютерным программам «EXCEL» и «SIGMAPLOT-10».

Для определения координации метионина с серебром(I) использован ИК-фурье спектрометр «IRAffinity-1» японской фирмы Shimadzu. Методом кондуктометрии измерена электропроводимость синтезированных координационных соединений. Фазовые свойства синтезированных комплексов изучены методом рентгенофазового анализа. Использованы методы моделирования химических превращений в гомогенных и гетерогенных системах.

Основные положения, выносимые на защиту:

- данные экспериментов по рН-метрическому изучению процесса ионизации метионина в водной среде при ионной силе ($I = 0,1$ моль/л $\text{Na}(\text{H})\text{ClO}_4$) и температуре 298,16 К;
- закономерности распределения и доминирования форм электролитической диссоциации метионина во всем интервале рН;
- результаты изучения методом рН-метрии; процессов формирования комплексов в системе $\text{Ag}(\text{I})$ – метионин – H_2O при разных концентрациях основных базисных частиц;
- установленные закономерности по устойчивости формирующихся комплексов в изученной системе, максимальным степеням их накопления, диаграммам распределения, которые определены при исследовании влияния всех их параметров на области существования, составы, а также модельные параметры;
- химические модели, которые составлены по результатам исследования в изученной системе формирования координационных соединений серебра, дающие возможность достоверно и очень быстро осуществлять компьютерные расчеты значений наиболее важных термодинамических функций и параметров;
- данные по синтезу, составу комплексов серебра с метионином;
- результаты ИК-спектроскопических исследований метионина и его комплексов с серебром;
- данные рентгенофазового анализа координационных соединений серебра с метионином и их электролитическая проводимость;
- результаты испытания комплекса серебра с метионином на семенах пшеницы сорта «Сафедак» для стимулирования их энергии прорастания и всхожести.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, базируется на:

- получении точных, воспроизводимых экспериментальных данных, их критическом анализе с учетом обработки результатов на основе современных компьютерных программ и математической статистики, соответствии их наиболее надежным из известных литературных источников;
- согласованности выявленных закономерностей, выводов работы с теоретическими и экспериментальными результатами, полученными в рамках других подходов и основ физической химии.

Диссертация соответствует паспорту специальности 02.00.04 физическая химия (химические науки) по следующим пунктам:

1. экспериментально-теоретическое определение энергетических параметров молекулярных соединений, а также их спектральных характеристик (глава III, разделы 3.2 и 3.3);
2. экспериментальное определение термодинамических свойств веществ, расчет термодинамических функций (глава II, раздел 2.4);
3. определение термодинамических характеристик процессов (глава II, раздел 2.4);
4. компьютерное моделирование свойств комплексов в растворах жидкостей (главы II и III);
6. химические превращения (глава III, раздел 3.1);
10. создание и разработка компьютерного моделирования механизмов превращений химических соединений (главы II и III);
12. физико-химические основы процессов химического синтеза (глава III, раздел 3.2).

Апробация диссертации и информация об использовании её результатов.

Материалы диссертации докладывались и обсуждались на: Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2015, 2016); Республиканской научно-теоретической конференции «Достижения современной биологии в Таджикистане» (Душанбе, 2016); Международной научной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» (Душанбе 2018); Республиканских научно-теоретических конференциях профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ (Душанбе, 2018-2020); II-IV Международной научной конференции: «Вопросы физической и координационной химии» (Душанбе, 2014, 2016 и 2019).

Реализация и внедрение результатов исследования. Результаты, полученные соискателем в диссертационной работе, внедрены в учебный процесс кафедры неорганической и физической, коллоидной химии Таджикского национального университета. Они применяются при проведении лекционных курсов по специальным дисциплинам, выполнении соискательских (кандидатских и докторских), а также магистерских, курсовых, дипломных работ студентами. (Приложение, акт внедрения результатов исследований соискателя по теме диссертации в учебный процесс).

Проведенные лабораторные испытания комплексов серебра с метионином на семенах пшеницы сорта «Сафедак» показали их биологическую активность и эффективность при использовании для предпосевной обработки семян. Поэтому комплекс серебра с метионином можно рекомендовать для предпосевной обработки семян пшеницы. (Приложение, акт испытаний комплекса серебра с метионином на семенах пшеницы).

Область исследования – физическая химия и координационная химия.

Этапы исследования. На первом этапе (2016-2017 г.г.) проведен полный анализ литературы по теме диссертации за последние 45 лет, определены её актуальность, цель и задачи исследования.

На втором этапе (2018-2020 г.г.) методом рН-метрического титрования исследованы процессы электролитической диссоциации метионина в водной среде и образования комплексных соединений серебра (I) с указанным лигандом в водных растворах, их физико-химические и биологические свойства.

На третьем этапе (2021-2023 г.г.) проведены расчеты, анализ и обобщение всех экспериментально полученных данных, подведены их итоги и сделаны выводы, проделана работа по оформлению диссертации.

Основная информационно-экспериментальная база. Работа выполнена на кафедре неорганической химии химического факультета Таджикского национального университета по темам: «Синтез и исследование координационных соединений рения, молибдена, меди, железа, кобальта, никеля, цинка, серебра, марганца, золота и некоторых лантаноидов в растворах и поиск практических аспектов их применения», номер государственной регистрации TGR 011TG6044 2016-2020 г.г., а также «Комплексообразование d-переходных металлов с участием амидных и тиоамидных лигандов в водных и водно-органических растворах», 2020 -2025 г. г.

Публикация результатов диссертации: По материалам диссертации опубликовано 16 работ, в том числе 4 научные статьи в ведущих рецензируемых изданиях, определенных Высшей аттестационной комиссией при Президенте Республики Таджикистан, 11 материалов докладов на конференциях различного уровня, имеется 1 малый патент РТ.

Личный вклад соискателя. Автором данной диссертации сформулированы цель и задачи исследования, проведен полный анализ литературных данных по теме за последние 45 лет. Кроме того, им лично проведены все эксперименты, интерпретация и обработка данных, а также сформулированы общие выводы. Полученные экспериментальные результаты оформлены в виде статей, тезисов докладов конференций различного уровня.

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, выводов, списка литературы из 165 наименований, изложенных на 140 страницах компьютерного набора, включает 20 рисунков, 30 таблиц и приложение (6 стр.).

Структура и объем диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения, выводов, списка литературы из 165 наименований, изложенных на 126 страницах компьютерного набора, включает 20 рисунков, 30 таблиц и приложение (6 стр.).

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Введение посвящено актуальности темы диссертации, необходимости проведения данного исследования, представлению цели и задач работы, освещению её научной новизны и научно-практического значения, положениям, выносимым на защиту, описанию структуры.

Первая глава диссертационной работы включает три подраздела и материалы по: метионину, его общим и комплексообразующим свойствам; координационным соединениям серебра и других металлов с аминокислотами; серебру, его физико-химическим и комплексообразующим свойствам.

Вторая глава – начало экспериментальной части, посвященной синтезу реактивов их стандартизации для рН-метрического титрования и изучения протолитических свойств метионина, а также процессов комплексообразования серебра с исследуемым лигандом, методики проведения статистической обработки результатов и расчета констант образования комплексов, изучения процессов протонизации и депротонизации метионина в водной среде.

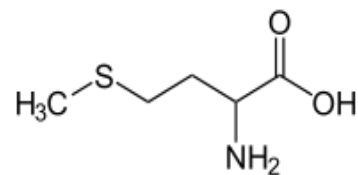
Третья глава диссертации состоит из данных по исследованию системы Ag(I)-аминокислота (метионин)-вода, а именно: исследование процессов комплексообразования в системе Ag(I)-метионин–вода методом рН-метрии; синтез и элементный анализ комплексов серебра с метионином; ИК-спектроскопическому исследованию метионинных комплексов серебра(I), молекулярная электропроводность координационных соединений, электролитические свойства комплексов серебра с метионином, рентгенофазовый анализ комплексов серебра (I) с исследуемым лигандом.

Четвертая глава включает результаты лабораторных испытаний координационного соединения серебра(I) с метионином на пшенице и повышения качества семян (энергии прорастания и всхожести) в результате предпосевной обработки.

Исследование протолитических свойств метионина.

Метионин незаменимая аминокислота, проявляет гетерофункциональные свойства, так как содержит в молекуле карбоксильную, аминогруппу, ещё атом серы. Методом потенциометрического титрования с помощью специальной компьютерной программы определены рК карбоксильной и аминогруппы при различных температурах.

На рисунке 1 представлены кривые титрования метионина при различных температурах, а таблице 1-численные значения рК карбоксильной и аминогрупп.



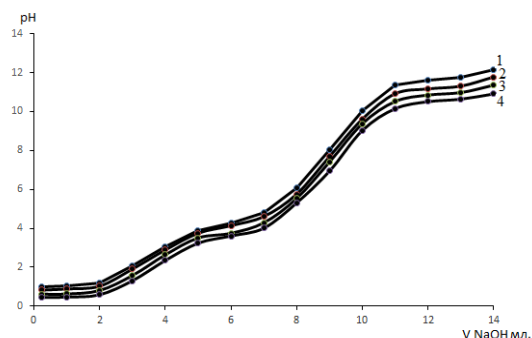


Рисунок 1. Кривая титрования метионина щелочью при концентрации лиганда $C_{HL}=1 \cdot 10^{-2}$; ионной силе раствора 0,1 моль/л и различных температурах. Кривые относятся к температурам, К: 1 - 328,16 2 - 318,16 ; 3 - 308,16; 4-298,16

Таблица 1. Значения рК карбоксильной и аминогрупп метионина при различных температурах

№, п/п	Темпер-ра, К	298.16	308.16	318.16	328.16
1	pK_{COOH}	2.38	2.19	2.05	1.93
2	pK_{NH_2}	9.28	9.12	8.92	8.71

Из представленных рисунка и численных значений рК карбоксильной и аминогруппы видно, что с повышением температуры процесс диссоциации усиливается, что соответствует теории протолитических свойств кислот. Рассчитаны мольные доли диссоциированных и недиссоциированных форм метионина и построены их диаграммы распределения (рис. 3).

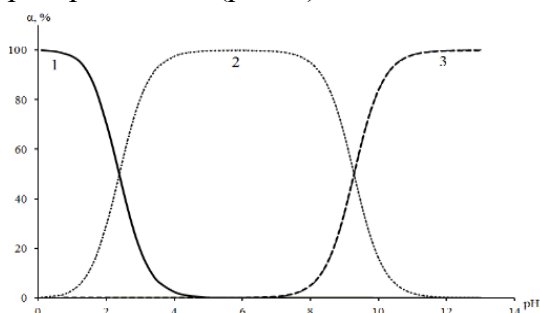
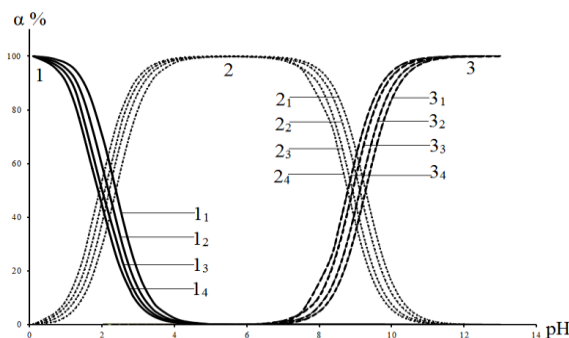


Рисунок 2. Кривые распределения недиссоциированной и диссоциированных форм метионина, полученные при температуре 298,16 К; ионной силе раствора 0,1 и концентрации лиганда $C_{HL}=1 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Кривые относятся: 1- катонная форма; 2-цвиттерионная форма и 3- анион метионина.

Рисунок 3. Влияние температуры на кривые распределения недиссоциированной и диссоциированных форм метионина при ионной силе раствора 0,1 и концентрации лиганда $C_{HL}=1 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Кривые относятся: 1-катонная форма; 2-цвиттер-ионная форма и 3-анион метионина. 1₁₋₄; 2₁₋₄; 3₁₋₄, соответственно при температурах: 298,16; 308,16; 318,16 и 328,16 К.



Из диаграммы видно, что катионная форма аминокислоты доминирует в сильно кислой среде (рН до 1,5). В очень большом интервале рН от 3,0 до 9,5 доминирует цвиттер-ионная форма. В щелочной среде, при рН более 10,5 доминирует анионная форма метионина.

Полученные значения рК карбоксильной и аминогруппы (табл. 2) метионина в интервале температур (298,16 ÷ 328,16) использованы для определения термодинамических функций: энергии Гиббса (ΔG), энтропии (ΔS) и энтальпии (ΔH) процессов диссоциации. (табл. 2 и 3) по известным уравнениям и методикам. С повышением температуры прослеживается увеличение энергии Гиббса, так как в системе

имеет место процесс депротонизации, который является эндотермическим. $\Delta G_{p,T} < 0$ самопроизвольно идет процесс в заданном направлении;

Таблица 2. Численные значения термодинамических функций: энергии Гиббса (ΔG), энтропии (ΔS) и энтальпии (ΔH) при различных температурах процессов депротонизации метионина (а)

№, п/п	Т, К	K_{NH_3}	pK_{NH_3}	Термодинамические функции		
				$\Delta G, кДж/моль$	$\Delta S, Дж/мольК$	$-\Delta H, кДж/мольК$
1	298,16	5,248E-10	9,28	13,58	139,76	28,09
2	308,16	7,586E-10	9,12	12,91	163,54	37,48
3	318,16	1,202E-09	8,92	12,48	170,96	41,91
4	328,16	1,622E-09	8,71	12,12	180,49	47,11

протонизации метионина (б)

№, п/п	Т, К	K_{COO^-}	pK_{COO^-}	Термодинамические функции		
				$-\Delta G, кДж/моль$	$\Delta S, Дж/мольК$	$-\Delta H, кДж/мольК$
1	298,16	4,169E-3	2,38	52,95	289,49	33,36
2	308,16	6,457E-3	2,19	53,79	259,66	26,23
3	318,16	8,913E-3	2,05	54,31	245,96	23,94
4	328,16	1,175E-2	1,93	54,70	227,67	20,01

Энтропия системы является величиной, характеризующей меру её беспорядка. Если энтальпия является энергетической характеристикой системы, энтропия - геометрической. Абсолютные значения энтропии и энтальпии не несут полезной информации, важны величины их изменений (ΔH и ΔS). Так, например, чтобы процесс происходил произвольно, его энтропия должна увеличиваться, т.е. $\Delta S > 0$.

Полученные данные использованы для расчета термодинамических характеристик процессов протонизации и депротонизации метионина в водном растворе. Определены изменения энергии Гиббса, энтропии и энтальпии, показано, что протонизация и депротонизация метионина являются эндотермическим процессом.

Методом потенциометрического титрования изучены процессы комплексообразования $Ag(I)$ с метионином при 298,16 К и ионной силе раствора 0,1 моль/л. Согласно методики титруется отдельно лиганд-метионин, и смесь соли серебра с лигандом. Существует специальная программа, которая по потенциометрическим данным определяет количество и состав образующихся комплексов. Установлено, что в изученной системе образуются 4 комплекса: $[Ag(NA)H_2O]^+$; $[Ag(NA)_2]^+$; $[AgA(H_2O)]^0$ и $[Ag(A)_2]^-$. 2 соединения имеют во внутренней координационной сфере катионную форму лиганда НА, а 2 других – анионную форму A^- .

Реакции образования комплексов серебра, формирующихся в системе $Ag(I)$ -метионин- H_2O при температуре 298,16 К и ионной силе раствора 0,1; $C_{Ag(I)} = 0,01$; $C_{мет.} = 0,01$ моль/л представлены в таблице 3.

Таблица 3. Реакции образования комплексов серебра, образующихся в системе $Ag(I)$ -метионин- H_2O при температуре 298,16 К и ионной силе раствора 0,1; $C_{Ag(I)} = 0,01$; $C_{мет.} = 0,01$ моль/л.

№, п/п	Реакции образования комплексов
1	$[Ag(H_2O)_2]^+ + HA^\pm \leftrightarrow [Ag(NA)(H_2O)]^+ + H_2O$
2	$[Ag(NA)(H_2O)]^+ + HA^\pm \leftrightarrow [Ag(NA)_2]^+ + H_2O$
3	$[Ag(H_2O)_2]^+ + A^- \leftrightarrow [Ag(A)H_2O]^0 + H_2O$
4	$[Ag(A)H_2O]^0 + A^- \leftrightarrow [Ag(A)]^- + H_2O$

Равновесные концентрации комплексов серебра, образующихся в системе Ag(I)-метионин-H₂O, рассчитаны по уравнениям, приведенным в таблице 4.

Таблица 4. Уравнения равновесных концентраций комплексов серебра, образующихся в системе Ag(I)-метионин-H₂O при температуре 298,16 К и ионной силе раствора 0,1; C_{Ag(I)}= 0,01; C_{мет.}=0,01 моль/л.

№,п/п	Равновесная концентрация комплексов
1	$[Ag(HA)(H_2O)]^+ = \beta_{1110} \cdot [Ag^+] \cdot [HA^\pm] \cdot [H_2O]$
2	$[Ag(HA)_2]^+ = \beta_{1220} \cdot [Ag^+] \cdot [HA^\pm]^2$
3	$[Ag(A)(H_2O)]^0 = \beta_{1010} [Ag^+] \cdot [A^-] \cdot [H_2O]$
4	$[AgA_2] = \beta_{1010} \cdot [Ag^+] \cdot [A^-]$

Затем, с учетом выражения материального баланса и каждой константы образования комплексных форм рассчитаны значения теоретической функции образования Бьеррума по следующему уравнению:

$$\bar{n}_T = (\beta_{1110} K_1 h^3 C_A + 2 \beta_{1220} K_1^2 h^2 C_A^2 + \beta_{1010} K_1 K_2 h^2 C_A + \beta_{1020} K_1 K_2 h^2 C_A) / (h^3 + \beta_{1110} K_1 h^3 C_A + 2 \beta_{1220} K_1^2 h^2 C_A^2 + \beta_{1010} K_1 K_2 h^2 C_A + \beta_{1020} K_1 K_2 h^2 C_A)$$

Методом последовательного приближения экспериментальной и теоретической функции образования Бьеррума (рис. 4) (до максимального приближения) определены значения констант образования комплексов.

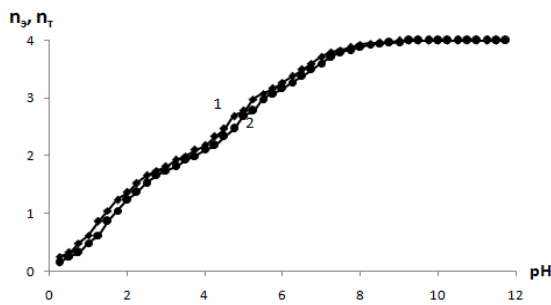


Рисунок 4. Зависимость экспериментальной (кр. 1) и теоретической (кр. 2) функции образования Бьеррума от pH. Из рисунка видно, что приближение осуществлено максимально, обе кривые хорошо совпадают, что говорит о получении достоверных результатов. Полученные таким образом численные значения констант образования комплексов серебра с метионином приведены в таблице 5.

Таблица 5. Численные величины констант образования координационных соединений серебра с метионином при температуре 298,16 К, ионной силе раствора 0,1; C_{Ag(I)}= 0,01; C_{мет.}=0,01 моль/л.

№ п/п	Состав Комплекса	Конст. образования, β_{gslk}	Конст. нестойкости, $K_{нест}$
1	$[Ag(HL)(H_2O)_3]^+$	$1,00 \cdot 10^{12} \pm 0,02$	$1,00 \cdot 10^{-12} \pm 0,02$
2	$[Ag(HL)_2(H_2O)_2]^+$	$3,01 \cdot 10^{14} \pm 0,02$	$3,32 \cdot 10^{-15} \pm 0,02$
3	$[Ag(L)(H_2O)]^0$	$9,15 \cdot 10^{16} \pm 0,02$	$1,09 \cdot 10^{-17} \pm 0,02$
4	$[Ag(L)_2]$	$9,63 \cdot 10^{19} \pm 0,02$	$1,04 \cdot 10^{-20} \pm 0,02$

Наиболее устойчивым соединением является комплекс $[Ag(L)_2]$. Это связано с возрастанием возможности образования комплексных соединений хелатного типа. Константа образования указанного комплекса β_{1020} равна $9,63 \cdot 10^{19} \pm 0,02$.

Рассчитаны мольные доли каждого комплекса и построены диаграммы их распределения по шкале pH (рис. 5).

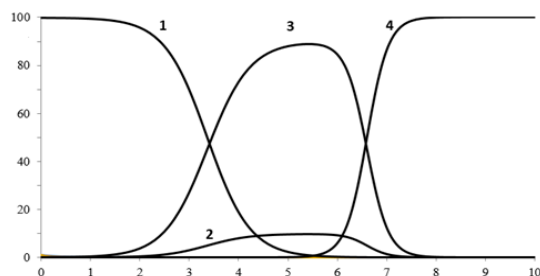


Рисунок 5. Диаграмма распределения координационных соединений, образующихся в системе Ag-метионин-вода по шкале pH при температуре 298,16 К, ионной силе раствора 0,1 и C_{HL}=1 10⁻² моль/л. Кривые относятся: 1-[AgHL]⁺; 2-[Ag(HL)₂]²⁺; 3-[AgL]⁰; 4-[Ag(L)₂].

С увеличением рН количество первого комплекса уменьшается. При значении рН чуть выше 5,0 достигает минимума, комплекс полностью разлагается. Содержание второго комплекса едва достигает 10 % выше рН 4,5. Третий комплекс существует в большом интервале, выше значений рН от 3 и до 7. Во внутреннюю координационную сферу входит анион метионина. Выше рН 7,5 доминирует в растворе комплекс с двумя лигандами $[Ag(L)_2]^-$.

Таблица 6. Максимальная степень накопления комплексных соединений серебра(I) с метионином при температуре 298,16 К, ионной силе раствора 0,1; $C_{Ag(I)} = 0,01$; $C_{мет.} = 0,01$ моль/л.

№, п/п	Состав комплекса	Мак.Степ.накопления,%	рН среды
1	$[Ag(НА)(H_2O)]^+$	100,00	0,8
2	$[Ag(НА)_2]^+$	90,03	4,5
3	$[AgA(H_2O)]^0$	10,04	5,0
4	$[Ag(A)_2]^-$	100,00	8,5

Были сделаны попытки получить образующиеся в растворе комплексы, но удалось выделить только соединения $[Ag(НА)(H_2O)]NO_3$; $[Ag(НА)_2]NO_3$. Использовали 0,01 моль/л нитратной соли серебра, 0,02 молярный раствор метионина, при рН = 1,5 и постоянном перемешивании добавляли в первый раствор при комнатной температуре. Белый (кремовый) осадок промывали эфиром, метилэтилкетон. Изучена их растворимость в растворителях различной природы. Проведены определение содержания серебра (атомно-абсорбционным методом) в комплексах и их элементный анализ (табл.7 и 8).

Таблица 7. Результаты определения содержания серебра в синтезированных комплексных соединениях

Содерж. серебра в комплексе, %		Комплексное соединение	
		$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)(H_2O)]NO_3$	$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)_2]NO_3$
Теоретическое		31.9988	23.0300
Эксп.- Ное	роданид. метод	31,0330	22,3900
	отн. отклонение	0,9658	0,7400
	% отклонение	3,0009	2,7789
	атом. адс. метод	31,8408	23,0028
	отн. отклонение	0,1500	0,0272
	% отклонение	0,4938	0,1181

Экспериментальные результаты по содержанию серебра в обоих комплексах хорошо сочетаются с теоретическими данными. Такое соответствие прослеживается и в данных элементного анализа по содержанию углерода, водорода, азота, кислорода и серы.

Таблица 8. Результаты элементного анализа координационных соединений серебра с метионином

Содержание элементов, %	Состав комплекса									
	$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)(H_2O)]NO_3$					$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)_2]NO_3$				
	С	Н	Н	О	S	С	Н	Н	О	S
Теоретическое	17.81	3.89	8,31	28.48	9,51	25,65	4.73	8,97	23,91	13,69
Эксперим.ное	17,54	3,82	8,18	28,07	9,37	25,39	4,68	8,86	23,69	13,48
Отн.отклонение	0,27	0,07	0,13	0,41	0,14	0,26	0,05	0,11	0,22	0,21
% отклонение	1,52	1,80	1,56	1,44	1,47	1,01	1,06	1,23	0,92	1,53

По полученным данным можно утверждать, что комплексные соединения имеет следующий состав: $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$ и $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})_2]\text{NO}_3$, молекулярная масса которых равна, соответственно 337,10 и 468,29.

ИК-спектроскопическое исследование метионинных комплексов серебра(I)

Для определения способа координации метионина с серебром(I) был использован ИК-фурье спектрометр «IRAffinity-1», который работает в пределах частоты волн от 400 до 4000 см^{-1} . Спектры сняты в таблетках бромида калия. Проанализированы спектры чистого лиганда (метионина) (рис.6) и его нитратного комплексного соединения с серебром состава $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$ (рис.7). В таблице представлены отнесения полос поглощения спектров.

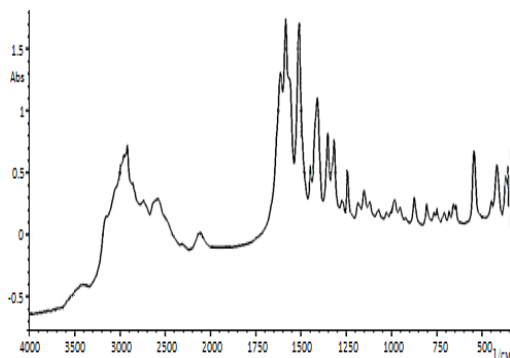


Рисунок 6. ИК-спектр метионина.

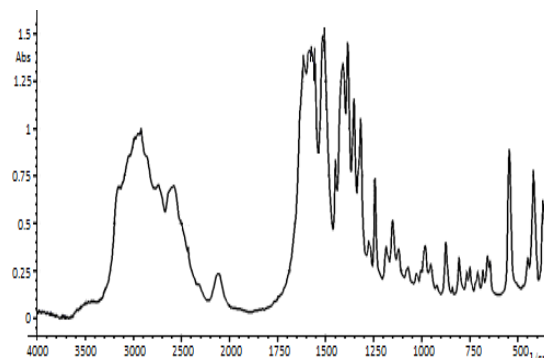


Рисунок 7. ИК-спектр комплекса $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$

В соответствии с общей формулой метионин содержит в своем составе разные функциональные группы: CH_3 -, NH_2 , OH -, CO , S .

Таблица 9. Характеристические частоты и их отнесения в ИК-спектрах метионина и его комплексах с серебром

Область частот	Метионин	Комплексные соединения		Отнесения
		$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	
400-500	460	430	-	$\delta_{(\text{H}_2\text{O})}$ (1)
700-800	740-790	761-750	752-730	$\nu_{(\text{COO})}$ (2)
800-900	820	845	842	$\nu_{(\text{C-S})}$
1000-1100	1360	1055	1035	$\nu_{(\text{C-C})}$ (3)
1600-1700	1668	1670	1685	$\nu_{(\text{C-N})}$ (4)
1300-1500	1360	1361	1450	$\delta_{\text{as}}(\text{CH})$ (5)
3000-3500	3148	3210	3340	$\nu_{(\text{NH})}$ (6)
3000-4000	3150	3420	-	$\delta_{(\text{OH})}$ (7)

В спектрах синтезированных комплексов полосы смещаются в сторону низких частот, что свидетельствует о координации атома азота аминокислоты с серебром. NH_2 -группа свободной аминокислоты дает изменение полосы поглощения при $3148\text{--}3149\text{ см}^{-1}$, которые, как можно увидеть, сохраняются в спектрах комплексов. Эти результаты показывают, что NH_2 -группа аминокислоты взаимодействует с серебром.

На ряду с основными полосами лиганда $3090\text{--}3150\text{ см}^{-1}$ в интервале $820\text{--}845\text{ см}^{-1}$ появляются полосы, которые относятся к валентным колебаниям группы (C-S), свидетельствующие о координации атома серы с серебром. В интервале частот $3235\text{--}3250\text{ см}^{-1}$ полосы поглощения аминогруппы (NH_2) смещаются на $25\text{--}40\text{ см}^{-1}$ в сторону низкочастотных, а также отмечается падение их интенсивности. О существовании

кристаллизационной воды в комплексе свидетельствует широкие полосы в интервале 3370-3410; 3460-3410 см^{-1} .

Молекулярная электропроводность координационных соединений, электролитические свойства комплексов серебра с метионином. Электропроводность растворов комплексов зависит от различных факторов, прежде всего, от их устойчивости к растворителю, следовательно, от состава, природы и размеров внешней и внутренней сфер. Одним из основных требований к соединениям, изучаемым методом кондуктометрии, является их хорошая растворимость в исследуемом растворителе. Комплексы состава $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$; $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})_2]\text{NO}_3$, полученные на нитратном фоне хорошо растворяются в воде.

Для синтезированных соединений измерена электропроводность растворов в различных растворителях.

Таблица 10. Значения молярной электропроводности координационных соединений серебра(I) с метионином в различных растворителях.

№, п/п	Комплексные соединения	Значения молярной электропроводности комплексов в, μ , $\text{Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$		
		Воде	спирте	ДМФА
1	$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	107,3	81,5	53,2
2	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	96,9	94,2	75,4

Наибольшее значение молярной электропроводности у комплексов в водном растворе, следовательно, процесс диссоциации соединений в нем максимальный.

Таблица 11. Значения молярной электропроводности (μ) координационных соединений серебра(I) с метионином при различных температурах

№, п/п	Т, К	μ , $\text{Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{моль}^{-1}$	
		$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$
1	298,16	96,9	103,5
2	303,16	105,0	113,4
3	308,16	114,7	121,6
4	313,16	126,2	132,4
5	318,16	140,2	137,9

Зависимость μ от Т для изученных комплексов имеют линейный характер, с повышением температуры электропроводность возрастает. Это соответствует теории электролитов. Электропроводность комплекс состава $[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$ (кр.1) выше, чем (кр. 2), которая относится комплексу $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$. Такой экспериментальный факт можно объяснить увеличенным объемом второго комплекса по сравнению с первым за счет координации к атому серебра двух молекул лиганда аминокислоты со сложной пространственной структурой.

Изучение концентрационной зависимости молярной электропроводности полученных соединений дало возможность определить численные значения их электролитической проводимости отнести их к электролитам 1:1. Из зависимостей молярной электропроводности от температуры рассчитаны энергии активации электропроводности комплексов.

Таблица 12. Значения энергии активации ($E_{\text{акт}}$) процесса электропроводности комплексов серебра(I) с метионином при различных температурах.

№, п/п	Т, °С	1/Т	[Ag(HA)(H ₂ O)]NO ₃		[Ag(HA) ₂]NO ₃	
			lg μ	$E_{\text{акт}}$, кДж/моль	lg μ	$E_{\text{акт}}$, кДж/моль
1	25	0,00340	1,9863	18,61	1,9581	18,75
2	30	0,00330	2,0212	17,28	1,9703	17,39
3	35	0,00320	2,0595	14,71	2,0306	15,29
4	40	0,00317	2,1011	12,48	2,0692	13,11
5	45	0,00310	2,1467	10,98	2,1106	12,05

Показано, что на электрическую проводимость оказывает влияние природа используемого лиганда и температура среды. С повышением температуры энергия активации уменьшается.

Методом рентгенофазового анализа определены кристаллографические параметры синтезированных комплексов серебра(I) с метионином. Получены рентгенограммы нитрата серебра и синтезированных комплексов: [Ag(HA)(H₂O)]NO₃, [Ag(HA)₂]NO₃,

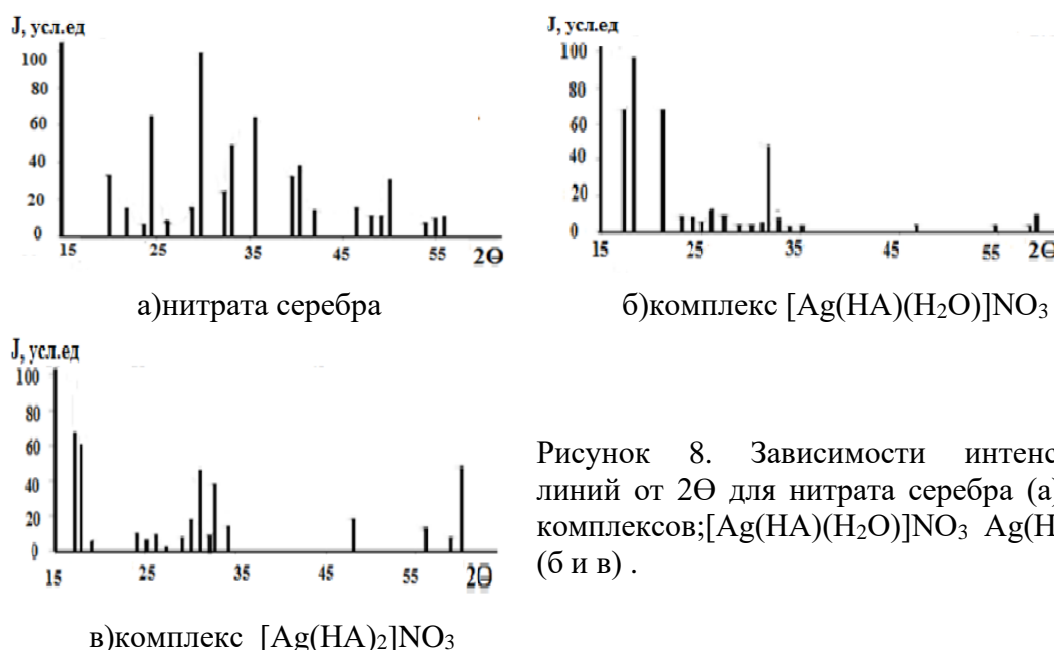


Рисунок 8. Зависимости интенсивности линий от 2Θ для нитрата серебра (а) и двух комплексов; [Ag(HA)(H₂O)]NO₃ Ag(HA)₂]NO₃ (б и в) .

На штрихдиаграммах наблюдается большое количество рефлексов. При переходе от AgNO₃ к комплексам отмечено смещение положения характеристических линий от базисных плоскостей в сторону малых значений 2Θ . Это связано с изменением параметра ячейки при замене молекул воды на цвтер-ионный лиганд метионина.

Таблица 13. Структурные параметры кристаллических решеток синтезированных комплексов серебра (I) с метионином

Комплекс. соедин.	Параметры элементарных ячеек				Чис. Мол. ячк	Пл. эксп г/см ³	Плот. расч. г/см ³	Сингония
	а, А ⁰	в, А ⁰	с, А ⁰	ν, А ³				
[Ag(HA)(H ₂ O)]NO ₃	0,1237	8,3627	7,7100	652,739	2	0,8015	0,8945	Орторомб
[Ag(HA) ₂]NO ₃	2,6434	11,4534	8,7697	1327,75	2	1,21	1,20	Орторомб

На рентгенограммах наблюдается перераспределение интенсивности в рефлексах и смещение положений характеристических отражений в сторону меньших значений углов 2θ . Это свидетельствует об увеличении межatomного расстояния.

Многие соединения серебра широко используются в сельском хозяйстве как регуляторы роста растений. Применение комплексных соединений серебра с органическими лигандами повышает иммунитет растений к различным болезням и неблагоприятным факторам среды, урожайность растений и улучшает качество продукции. В последнее время распространена обработка семян пшеницы перед севом.

Влияние координационных соединений серебра с метионином на прорастание семян изучена нами в лабораторных условиях, в четырехкратной повторности согласно ГОСТам. Предварительно установлены оптимальные концентрации для предпосевной замочки семян пшеницы сорта «Сафедак» и какой из комплексов более эффективен. Перед опытами очищенные семена пшеницы увлажняли в течение 3,0-3,5 часов в растворах комплекса концентраций: 0,001, 0,005, 0,0001 %. Семена контрольного варианта увлажнялись чистой дистиллированной водой. Энергия прорастания рассчитывалась через сутки, а всхожесть ещё через 2 суток. Получены следующие результаты. Наибольшим эффектом обладает 0,005 % концентрация комплекса $[Ag(Met)_2]NO_3$, так как при этом отклонение от контрольного варианта по энергии прорастания составляет 20.75 %, а всхожести – 16,00 %.

Таблица 14. Влияние концентрации комплекса $[Ag(Met)_2]NO_3$ серебра на энергию прорастания и всхожесть пшеницы сорта «Сафедак»

№, п/п	Варианты, % конц. препарат.	Показатель, %	Повторности				Ср.значения	
			1	2	3	4	М	±
1	Контроль (H ₂ O)	Энергия прорастания	53,0	55,0	51,0	54,0	53.25	-
		Всхожесть	74,0	76,0	73,0	75,0	74.50	-
2	Комплекс 0,001	Энергия прорастания	66,0	71,0	65,0	73,0	70,00	16.75
		Всхожесть	80,0	82,0	83,0	81,0	85.75	11.25
3	Комплекс 0,005	Энергия прорастания	68,0	73,0	80,0	76,0	74,00	20.75
		Всхожесть	88,0	84,0	89,0	87,0	90.50	16,00

В результате замочки семян пшеницы в растворе комплекса серебра, кроме того, увеличились длина корней, вес корней и проростков (табл. 15).

Таблица 15. Влияние комплекса $[Ag(Met)_2]NO_3$ на некоторые показатели 4-х дневных проростков пшеницы сорта «Сафедак»

№, п/п	Варианты, % концен. препарат.	Длина корней, мм	Вес			
			Корней		Проростков	
			мг	%	мг	%
1	Контроль (H ₂ O)	73,0	1,08	100,0	1.16	100,0
2	Комплекс 0,005	86,0	1,35	125,0	1,48	127.6

Масса корней опытного варианта превосходит контроль на 25.0 %, что может стать гарантией получения высокого урожая пшеницы. Комплекс $[AgMet_2]NO_3$ является стимулятором роста растений пшеницы, так как содержит ион Ag^+ и биологически активную кислоту – метионин.

ВЫВОДЫ

1. Методом рН-метрии в интервале температур 298,16 ÷ 328,16 и ионной силе раствора 0,1 моль/л изучены процессы депротонизации и протонизации функциональных групп метионина, рассчитаны их значения рК, построены диаграммы распределения катионной,

цвиттер-ионной и анионной форм аминокислоты, определены термодинамические характеристики.

2. Исследованы процессы комплексообразования серебра(I) методом рН-метрии при температуре 298,16 К. Установлено, что комплексы состава $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$; $[Ag(A)(H_2O)]^0$ и $[Ag(A)_2]^-$ формируются в области рН от 2,0 до 9,0. С использованием функции образования Бьеррума определены их константы устойчивости и основные модельные параметры. Установлено, что максимальная степень накопления первых двух и последнего комплекса, равны, соответственно 100,00; 90,03 и 100,00 %.
3. Впервые в кислой среде синтезированы 2 комплекса серебра с цвиттер-ионом метионина состава: $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$, определены их элементный состав, брутто-формула, изучены ИК-спектры и электропроводимость. Показано, что они являются электролитами состава 1:1, а также определены энергия активация и регрессионные зависимости.
4. Методом рентгенофазового анализа определены параметры элементарной ячейки комплексов $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$. На основе штрих-диаграмм установлено, что смещение положения характеристических линий от базисных плоскостей в сторону малых значений 2θ связано с изменением параметра ячейки при замене молекулы воды на цвиттер лиганд метионина.
5. В лабораторных условиях установлена биологическая активность комплекса серебра(I) с метионином при использовании для предпосевного увлажнения семян пшеницы сорта «Сафедак». Показано, что при этом повышаются их посевные качества. Увеличиваются: энергия прорастания на 20,75 %, всхожесть семян - 16,0 %, длина корней -18 %, их вес - 25 % и проростков - 27,6 %.

Список опубликованных работ автора по теме диссертации

Статьи в рецензируемых журналах:

[1-А]. **Маджидов, И.А.** Биологически активный метионин и его протолитические свойства. /И.А. Маджидов// Доклады национальной академии наук Таджикистана. -2021. –Т. 64. -№ 9-10. –С. 547-556.

[2-А]. **Маджидов, И.А.** Исследование комплексообразования в системе Ag(I)-метионин-вода /И.А. Маджидов, М.У. Бобоев, М. Рахимова, Т.М. Нурматов// Вестник педагогического университета. –Душанбе: -2021. -№ 1-2 (9-10). –С. 145-150.

[3-А]. **Мачидов, И.А.** Получение серебра из сульфидных руд./Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Н.У. Кабутаршоева // Вестник Дангаринского государственного университета. – 2016. –№ 1-2 (5-6). – С. 16-20.

[4-А]. **Мачидов, И.А.** Синтези анодии пайваस्ताи координационии нукра бо метионин / Т.М. Нурматов, **И. Мачидов**, И.Р. Раҳмонов, Н.У. Кабутаршоева, А.К. Исмаатов.// Вестник Таджикского национального университета – 2016. -№ 1/4 (216). – С. 162 – 166.

Патент:

[5-А]. **Маджидов, И.А.** Способ синтеза координационных соединений серебра(1) с метионином. /И.А. Маджидов, М. Рахимова, Т.М. Нурматов // патент РТ. ТД №1228 от 19.02.2018. Оpubл. в бюл. 23.12. 2021.

Публикации в других изданиях:

[6-А]. **Мажидов И.А.** /Физико–химические свойства координационных соединений серебра с метионином /И.А. Мажидов, М. Рахимова, Т.М. Нурматов, М.Бобоев / Межд. конференция молодых ученых «Наука и инновации». –Ташкент: -2021. –С. 508-509.

[7=А]. **Мачидов, И.А.** Синтез и физико-химические свойства координационных соединений серебра /И.А. Мачидов, Т.М. Нурматов, Б. Абдурахмонов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ—амалӣ дар мавзӯи «Дурномаи инкишофи саноати кимиёи Тоҷикистон». -Душанбе. -2017. –С. 88-91.

[8-А]. **Мачидов, И.А.** Синтез ва омӯзиши пайвасти координатсионии нуқра бо метионин /Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Н.У. Кабутаршоева //Материалы Международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». – Душанбе: Сино. -2018. – С. 82-83.

[9-А]. **Мачидов, И.А.** Таҳқиқи спектрҳои инфрасурхи пайвастиҳои комплекси нуқра бо метионин /**И.А. Мачидов**, Н. Кабутаршоева, Т.М. Нурматов, Б. Абдурахмонов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ—амалӣ –Душанбе: Сино. -2017 –С. 78-81.

[10-А]. **Мажидов, И.А.** Комплексные соединения серебра с метионином и их характеристики /**И.А. Мажидов**, М. Рахимова, Т. М. Нурматов, М.У. Бобоев //Материалы Межд. конференции молодых ученых «Наука и инновации» –Ташкент: - 2021 , -С. 480-481.

[11-А]. **Мачидов, И.А.** Омӯзиши хосияти термикии пайвастиҳои комплекси нуқра бо метионин / Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Р. Саиди, А. Раҳмони// Материалы конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. –Душанбе: Сино. -2019. -С. 20-21.

[12-А]. **Мачидов, И.А.** Аҳамияти биологии метионин дар организми инсон / **Мачидов И.А.**, Абдурахмонов Б, Нурматов Т.М.//Материалы конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, -Душанбе: Сино. -2019.-С. 79-81.

[13-А]. **Мачидов, И. А.** Координационные соединения серебра и их значение в медицине/ **И.А. Мачидов**, Х. Шарипов, Н.У. Кабутаршоева, Т.М. Нурматов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ—амалӣ дар мавзӯи «Дурномаи инкишофи саноати кимиёи Тоҷикистон». – Душанбе: Сино. -2017. –С.91-94

[14-А]. **Мачидов, И.А.** Координационные соединения серебра с аминокислотами и их значение в медицине / Т.М. Нурматов, М. Рахимова, **И.А. Мачидов** // Маводи конференсияи Байналмилалии «Пайвастиҳои комплекси ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо». –Душанбе: Сино. –2018. -С.86-87

[15-А]. **Мачидов, И.А.** Синтези пайвастиҳои координатсионии нуқра бо усули электрохимиявӣ. / **И.А. Мачидов**, Т.М. Нурматов, Н.У. Кабутаршоева // Материалы республиканской конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» - Душанбе: Сино.- 2018. - С.116-124.

[16-А]. **Мачидов, И.А.** Омӯзиши спектрҳои пайвастиҳои координатсионии нуқра бо аминокислотаҳо. / **И.А. Мачидов**, Т.М. Нурматов, Н.У. Кабутаршоева// Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. –Душанбе: Сино. -2017. - С.42-44.

ДОНИШГОҲИ МИЛЛИИ ТОҶИКИСТОН

DC: 546.57+547.425.5

BBC: 24.121(2)

M-13

Ҳамчун дастнавис

МАЧИДОВ ИКРОМ АҲМАДОВИЧ

**«РАВАНДҲОИ ҲОСИЛКУНИИ ПАЙВАСТАҲОИ
КООРДИНАТСИОНИИ НУҚРА БО МЕТИОНИН»**

Ихтисос 02.00.04-химияи физикӣ

АВТОРЕФЕРАТИ
рисола барои дарёфти дараҷаи илмӣ
номзади илмҳои химия

Душанбе – 2023

Таҳқиқот дар назди кафедраи химияи ғайриорганикии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро карда шудааст.

- Роҳбарони илмӣ:** **Раҳимова Мубаширхон** - доктори илмҳои химия, профессор, профессори кафедраи химияи физикӣ ва коллоидии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон.
- Мушовири илмӣ:** **Нурматов Тошкул Менгликулович** - номзади илмҳои химия, дотсент.
- Муқаризони расмӣ:** **Березин Михаил Борисович** - доктори илмҳои химия, профессор, корманди калони илмии Донишкадаи химияи маҳлулҳои обӣ АИ Федератсияи Россия шаҳри Иваново.
- Муассисаи пешбар:** **Исозода Диловаршоҳ Тарика** - номзади илмҳои химия, дотсент, ректори Донишкадаи энергетикӣ Тоҷикистон.
- кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикӣ, факултети химияи Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айни.

Ҳимояи диссертатсия санаи 28 сентябри соли 2023, соати 14:00 дар ҷаласаи шурои диссертатсионии 6D.КOA-010 назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бо нишонаи 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рудақӣ, 17, Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, бинои асосӣ, толори шурои диссертатсионӣ, ошӯнаи дуюм. E-mail: ikromovich80@mail.ru

Бо матни пурраи диссертатсия дар сомонаи интернетии www.tnu.tj ва дар китобхонаи марказии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бо нишонаи 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рудақӣ, 17 шинос шудан мумкин аст.

Автореферат «__» _____ соли 2023 ирсол гардид.

Котиби илмӣ
Шурои диссертатсионӣ,
д.и.х., и.в. профессор



С.И. Рачабзода

ТАВСИФИ УМУМИИ КОР

Аҳамияти мавзӯ. Ҳамаи аминокислотаҳои табиат мавҷуда атомҳои донории S, O, N доранд. Онҳо метавонанд пайвастаҳои мураккабро бо металлҳои гуногун, ки хосиятҳои беназир доранд, ташкил кунанд. Онҳо гиреҳи координатсионии $M N_xO_yS_z$ ва структураи хелатӣ дошта, барои омехтани таъсири мутақобилаи рақобатӣ дар сфераи дохилии координатсионии ҳамчун намуна хизмат мекунанд ва ба стереохимияи структураҳои ташкилшуда ва хосиятҳои физикию химиявии комплексҳо таъсири хос доранд. Дар байни онҳо комплексҳои d-элементҳо муҳимтарин мебошанд. Одатан, онҳо қисми ҷудонашавандаи комплексҳои хеле мураккаби биологӣ ё биополимерҳо мебошанд. Бояд гуфт, ки онҳо барои равшан кардани роли координацияи микроэлементҳо бо лигандҳо дар объектҳои биологӣ аҳамияти ниҳоят калон доранд. Нукра ва пайвастагӣҳои координатсионии он аз сабаби хосиятҳои баланди зиддимикробӣ доштаниш, дар байни онҳо ҷои махсусро ишғол мекунанд. Ин вазъияти тадқиқоти пуршиддатро дар робита ба муайян кардани фаъолияти зиддимикробии комплексҳои $Ag(I)$, махсусан аминокислотаҳои биофаъл шарҳ медиҳад. Илова бар ин, дар асоси онҳо, доруҳои самараноки дилу рағҳо, ноотропӣ, зидди илтиҳобӣ бидуни таъсири иловагӣ ба даст оварда мешаванд. Нукра ва комплексҳои он дар шакли наносистема барои истеҳсоли мавод (қаппӯшҳо) барои протезҳо, инчунин дастгоҳҳои ташхис истифода мешаванд. Дастгоҳҳо ба бадан ворид карда мешаванд, бинобар ин онҳо бояд поксозии зиддимикробӣ гузаранд. Бояд гуфт, ки ин пайвастагӣҳо дар саноати кишоварзӣ ҳамчун стимуляторҳои афзоиш, дар мурғпарварӣ ва ветеринария ҳамчун микроиловаҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъл барои ҳӯроки ҳайвонот ва паррандагон боз ҳам васеътар истифода мешаванд. Вобаста ба гуфтаҳои боло, комплексҳои нукра (I) бо аминокислотаҳои табиӣ барои таҳияи доруҳои хеле самарабахши васеъ, стимуляторҳои афзоиш, нуриҳои микроэлементҳо ва иловаҳои ғизоии хурд умедбахштарин мебошанд.

Аз ин рӯ, омӯзиши равандҳои ташаккули пайвастагӣҳои координатсионии металлҳо, махсусан нукра(I) бо аминокислотаҳои табиӣ яке аз самтҳои афзалиятноки химияи координатсионии муосир, биоорганикӣ, ғайриорганикӣ ва инчунин физикӣ мебошад.

Чунин тадқиқотҳо роли муҳими назариявӣ ва амалӣ мебозанд. Онҳо идеяҳои ҳозиразамони моро дар бораи асосҳои соҳаҳои мавҷудаи илми химия такмил ва инкишоф медиҳанд. Илова бар ин, онҳо барои пайдо кардани хосиятҳои қаблан номаълуми системаҳои химиявӣ кӯмак мекунанд. Ба ҳамин тариқ, мувофиқи мақсад соҳаҳои нави татбиқи корнамоиҳои илмӣ муайян карда шаванд.

Дарачаи инкишофи илмӣ, асосҳои назариявӣ ва методологии тадқиқот.

Дар адабиёт аксар вақт тадқиқотҳоро оид ба ташаккули комплексҳои металлҳои гузаранда бо лигандҳои гуногуни органикӣ пайдо кардан мумкин аст. Ҳамкасбони мо Сафармамадзода С.М., Азизкулова О.А., Мабаткадамова К.С., Содатдинова, А.С.Мудинов, Х.Г. ва дигарон бо системаҳои мис(II)-нукра(I), лигандҳои тиоамид ва амид дар ҳалқунандаҳои обӣ, ғайри обӣ, обии органики бо усулҳои гуногуни физикию химияви кор мекунанд, устувории комплексҳоро бо усули Леден ва Бжеррум муайян мекунад. Истифодаи пайвастагӣҳои мураккаби нукра ва мис дар асоси N-ацетилтиомочевина, тиокарбондразид барои сайқал додани электрохимиявии сатҳи металлҳо ва ҳӯлаҳо аз ҷониби олимони Сафармамадзода С.М., Тегарт В., Жакет П.А., Бианчи Г., Ноаг ТР., Francis Н.Т. ва ғайра. Дар осори Назарова Л.В., Тулюп Ф.М., Тудорян К.И., Пашков Г.Л., Буда, Г.В., Зевакин М.А. процессҳои ҳосилшавии пайвастагӣҳои комплекси нукра бо тиокарбамид, пиридин, никотинамид дар ҳалқунандаҳои мураккаб: гидроспирт, ацетон, формамид, диметилсульфоксид ва диозан тадқиқ карда шудаанд. Таркибҳо ва устувории комплексҳо муайян карда, қонуниятҳои таъсири табиати ҳалқунанда ба параметрҳои нишон додашуда муқаррар карда шуданд. Голиков А.Н., Белеванцев В.И. ва Ковалева М.А. ҳосилшавии комплекси нукра(I)-ро бо 18-точ-6 дар омехтаҳои бинарии ҳалқунандаҳои ғайриобӣ ва характеристикаҳои термодинамикии ҳосилшавии

комплексҳоро дар маҳлули обӣ омӯхтанд. Юан-Гао Ву ва Савсан, Саламе сохтори кристаллии комплексҳои мис(II) ва нукра(I)-ро бо ҳосилаҳои триазол муайян карданд. Мукаррар карда шудааст, ки комплексҳои димерӣ бо нукра ҳосил мешаванд. Цин Чжан, Ли В. синтез ва сохтори кристаллии комплексҳои мис (II) ва нукра (I)-ро бо лигандҳои 1,3,4-циадиазол, ҳосиятҳои электрохимиявӣ, флуоресцентӣ ва магнитии комплекси нав $[Ag(2,2')\text{-bipy}](C_{14}H_9O_3)] \cdot (C_{14}H_{10}O_3)$ -ро муайян карданд. Ч.Ф.Гессе пайдоиши комплексҳои нукра(I)-ро бо ионҳои глицинат дар ҳалқунандаҳои органикии обӣ омӯхтааст.

Бояд гуфт, ки таҳлили мукаммали адабиёти мавҷуда оид ба мавзуи рисола нишон дод, ки то ҳол оид ба процессҳои ҳосилшавии комплексҳои нукра(I) бо метионин ягон кори системавие мавҷуд нест. Поддымов В.П. соли 1977 маълумотро дар бораи пайдо шудани комплексҳои Ag(I) бо глицин ва метионин дар ҳолати қувваи ионии маҳлул 0,01 ва 0,1 моль/л чоп кардааст. Муайян карда шуд, ки комплексҳои таркибашон AgA ва AgA_2 дар концентратсияи аминокислотаҳо $(1 \div 10)10^{-2}$ ва нукра(I) – $(5 \div 9)10^{-5}$ моль/л ба вучуд меоянд. Константаҳои устувории онҳо ҳисоб карда мешаванд. Дар адабиёт аксар вақт натиҷаҳои ба ҳам зид, душворихоии усулҳои мавҷудаи муайян кардани миқдори зарраҳои асосӣ (лигандаҳо, ионҳои нукра) пайдо мешаванд. Устувории пайвастиҳои координатсионии ионҳои Ag(I) асосан дар як қувваи ионӣ ва ҳарорат муайян карда мешуд. Дар бораи вазифаҳои термодинамикии процессҳои ҳосилшавии пайвастиҳои комплекси Ag(I) бо метионин, истифодаи тухмии гандум барои коркарди пеш аз кишт маълумот нест.

Ҳангоми иҷрои корҳои ҳисоббарорӣ аз рӯи маълумоти таҷрибавӣ усулҳои муосир ва барномаҳои компютерӣ истифода мешуданд. Барои муайян кардани эътимоднокии маълумот коркарди омӯри гузаронида шуд. Натиҷаҳои кори диссертационӣ бо ҷалб намудани усулҳои ҳозиразамони омӯзиши таркиб ва сохти комплексҳо, назарияи координацияи лигандҳо аз тарафи атоми марказии агенти комплексҳосилкунанда муҳокима карда шуданд.

Мақсади кор. Муайян кардани хусусиятҳо қонуниятҳо ва равандҳои ташаккули пайвастиҳои координатсионӣ дар системаи: Ag(I)-метионин-об, муайян кардани таркиб, ҳосиятҳои асосӣ, синтез, омӯзиши ҳосиятҳои химиявӣ ва биологӣ шаклҳои комплексҳои ҳосилшуда.

Барои ноил шудан ба ҳадаф вазифаҳои зерин ҳал карда шуданд:

- омӯзиши равандҳои ионизатсияи метионин бо рН-метрия, муайян кардани қимати константаҳои якум (pK_1) ва дуюм (pK_2) диссоциатсияи дар маҳлули оби бо қувваи ионии он ($I = 0,1$ моль/л $Na(H)ClO_4$), ҳарорат 298,16 К (дар шароити таҷриба оид ба ҳосилшавии комплекси нукра);

- бо истифода аз рН-метрия барои омӯхтани равандҳои ҳосилшавии комплексҳои нукра бо метионин дар муҳити обӣ бо қувваи ионии он $I = 0,1$ моль/л $Na(H)ClO_4$, ҳарорати 298,16 К, намунаҳои дар система мавҷудбударо мукаррар кунед ва таркиби пайвастиҳои координатсионии ташкилшуда, параметрҳои асосӣ ва намунавии онҳоро пайдо кунед;

- синтези комплексҳои метионинии нукра, муайян кардани таркиби комплекс ва ба вучуд овардани шароити оптималии аз маҳлул ҷудо кардани он;

- бо усули спектроскопияи ИС барои омӯхтани координацияи атомҳои гуруҳҳои функционалии метионин бо нукра (I);

- таҳлили фазаҳои рентгении пайвастиҳои координатсионии синтезшудаи нукра ва омӯхтани электргузаронии маҳлулҳои обии онҳо;

- коркарди тамоми натиҷаҳои таҷрибавӣ бо истифода аз барномаҳои муосиртарин (компютерӣ) ва усулҳои наватарини коркарди омӯри гирифта шуда;

- комплекси нукра бо метионинро дар шароити лабораторӣ дар навъи гандуми «Сафедак» санҷида, таъсири физиологӣ ва таъсири баъдинаи онҳоро муайян намудан.

Объекти тадқиқот системаҳои зерин мебошанд: метионин ($C_5H_{11}NO_2S$) - об; нукра (I)

- метионин - об дар ҳарорати ва қувваи ионии доимӣ маҳлул, инчунин комплексҳои нукра (I) - бо метионин .

Мавзӯи тадқиқот омӯзиши равандҳои диссоциатсияшавии метионин дар ҳароратҳои гуногун, муайян кардани қонуниятҳо, муайян кардани хусусиятҳои термодинамикӣ, омӯзиши комплексҳосилкунии нукра (I) бо метионин дар маҳлулҳои обӣ, хосиятҳои физикӣ, физико-химиявӣ ва биологии комплексҳои нукра (I) бо метионин ва татбиқи имконпазири онҳо мебошад.

Навоариҳои илмӣ кори рисола.

- Процесси диссоциатсияи электролити метионин дар муҳити обӣ бори аввал бо усули рН-метрия дар ҳарорати 298,16 К, дар муҳити ионии 0,1 моль/л омӯхта шуданд;
- Бо усули рН-метрия, дар маҳлулҳои обии метионин ва қувваи ионии маҳлули 0,1 моль/л, дар ҳарорати 298,16 К, равандҳои пайдоиши комплексҳои нукра(I) омӯхта шуданд.
- Тартиби ташаккули комплексҳои метионини нукра, ки бори аввал таъсис дода шудаанд, таркибҳои муайяни онҳо, параметрҳои асосӣ ва моделӣ, минтақаҳои паҳншавӣ ва бартарият.
- Бори аввал алгоритмҳои ҳисобҳои термодинамикӣ ва коркарди пурраи статистикуии натиҷаҳои таҷрибавӣ бо роҳи рН-метрия пешниҳод карда шуданд.
- Комплексҳои нукра бо метионин ба даст оварда шуданд, таркибҳои онҳо омӯхта шуданд ва бори аввал шароити оптималии аз маҳлул бо ҳосилнокии максималии амалӣ ҷудо кардан пешниҳод карда шуданд.
- Барои омӯختани координатсияи метионин бо атоми марказӣ — агенти комплекси нукра, спектроскопияи ИС истифода бурда шуд. Таҳлили марҳилаи рентгении комплексҳои нукра бо метионин гузаронида шуда, гузариши барқи онҳо омӯхта шуд. Вобастагии ҳарорати электргузаронии комплексҳо муқаррар карда шуда, қиматҳои адабии энергияи фаъолгардонии ноқилияти электролити пайвастагӣҳои координатсионӣ муайян карда шуданд.
- Дар тухмии гандуми навъи «Сафедак» озмоишҳои лаборатории комплексҳои нукра бо метионин гузаронида шуда, хосиятҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол ва таъсири мусбати онҳо ҳангоми стимулятори нашъунамои тухмӣ дар натиҷаи нам кардани пеш аз кишт муайян карда шуданд.

Арзиши назариявии асар. Ошкор кардани қонуниятҳо ва механизми таъсири рН, ҳарорат, параметрҳои консентратсия ба ташаккули шаклҳои диссоциатсияшуда ва диссоциатсияшудаи метионин, инчунин диаграммаҳои тақсимои ин шаклҳо. Муқаррар намудани механизми ташаккули комплексҳои нукра(I) бо метионин ва қонунҳои тағйирёбии параметрҳои намунавии комплексҳо, инчунин минтақаҳои бартарии онҳо дар шкалаи рН (диаграммаҳои тақсимкуни). Муайян намудани хосиятҳои физикӣ-химиявӣ ва биологии комплекси ба даст овардашуда, принципҳои моделсозии равандҳои ташаккули комплексҳо. Дар боло асосҳои назариявии комплексҳои нукра (I)-ро бо аминокислотаҳо (метионин) дар фаслҳои дахлдори химияи координатсия пурра карда, инчунин маълумотҳои навро оид ба хосиятҳои термодинамикӣ, физикӣ-химиявӣ ва биологии комплексҳои нукра пешниҳод мекунанд.

Арзиши амалии кор. Кислотаи аминокислотаи метионин ва нукра пайвастагӣҳои муҳими биологӣ фаъол мебошанд. Пайвастҳои координатсионие, ки аз онҳо дар асоси илова ҳосил мешаванд, метавонанд хосиятҳои боз ҳам фаъолтари физиологӣ ва зиддимикробӣ нишон медиҳанд. Аз ин рӯ, метионин, нукра ва тамоми пайвастагӣҳои координатории онҳоро метавон ҳамчун доруворӣ дар тиб, фармакология, косметология барои ҷавонсозии пӯст, дар тамоми соҳаҳои саноати кишоварзӣ ҳамчун микро нуриҳо, дар тибби байторӣ ва паррандапарварӣ ҳамчун иловаҳои биологӣ ба хуроки чорво ва парранда истифода бурд. Комплексҳои устувортарини нукра-метионин метавонанд интиқоли мақсадноки маводи дорӯгиро осон кунанд.

Дар кори диссертатсия принципи моделсозии равандҳои мураккаби ташаккулёбӣ истифода шудааст, ки дар якҷоягӣ бо алгоритмҳои пешниҳодшуда ва нармфзори муносири компютерӣ имкон дод, ки таркиб, адад, константаҳои устуворӣ ва дараҷаи ҷамъшавии

пайвастагиҳои координатсионӣ зуд ва боэтимод муайян карда шаванд. . Ин асоси принципи моделсозӣ метавонад дар системаҳои дорои ҳама гуна дигар атомҳои металлҳои марказӣ ва аминокислотаҳо истифода шаванд. Бояд гуфт, ки параметрҳои алоҳидаи модели комплексҳоро барои муайян кардани шароити устувори оптималии аз маҳлул ҷудо кардани пайвастагиҳои координатсионӣ истифода бурдан мумкин аст ва ҳамин имкон медиҳад синтези мақсадноки онҳо анҷом дода шаванд. Ҳама константаҳои ҳисобшуда метавонанд ҳамчун маълумоти истинодӣ барои ҳисобҳои термодинамикӣ истифода шаванд.

Усулҳо ва таҷҳизоти истифодашавандаи тадқиқот. Натиҷаҳои таҷрибавии кори диссертатсионӣ бо усули рН-метрӣ ба даст оварда шуданд. Ин усул барои омӯхтани равандҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои координатсионии металлҳо дар маҳлулҳо бо лигандҳои органикӣ ва гайриорганикӣ боэтимод аст. Параметрҳои асосӣ ва моделӣ бо ҷалби усулҳои муосири ҳисоб ва коркарди натиҷаҳои таҷрибавии бадастомада бо истифода аз барномаҳои компютери «EXCEL» ва «SIGMAPLOT-10» муайян карда шудааст.

Барои муайян кардани координатсияи метионин бо нукра(I) спектрометри IRAffinity-1 IR Фурье (Шимадзуи ҷопонӣ) истифода шуд. Кондуктометрия барои ҷен кардани гузаронандагии электрикӣ пайвастагиҳои координатсионии синтезшуда истифода шуд. Хусусиятҳои фазавии комплексҳои синтезшуда тавассути таҳлили рентгенофазӣ омӯхта шуданд. Усулҳои моделсозии тағироти химиявӣ дар системаҳои якхела ва гетерогенӣ истифода мешаванд.

Муқаррароти асосии дифоъ:

- маълумоти таҷрибаҳо оид ба омӯзиши рН-метрикӣ раванди ионизатсияи метионин дар муҳити обӣ дар қувваи ионӣ ($I = 0,1$ моль/л $\text{Na}(\text{H})\text{ClO}_4$) ва ҳарорати 298,16 К;
- шакли тақсимот ва бартарияти шаклҳои диссоциатсияи электролитии метионин дар тамоми диапазони рН;
- натиҷаҳои тадқиқот бо усули рН-метрия; процессҳои ба вучуд омадани комплексҳо дар системаи $\text{Ag}(\text{I}) - \text{метионин} - \text{H}_2\text{O}$ дар концентратсияи гуногуни заррачаҳои асосии асосӣ;
- қонуниятҳои муқарраркардаи устувори комплексои пайдошаванда дар системаи таҳқиқшаванда, дараҷаҳои максималии ҷамъшавии онҳо, диаграммаҳои тақсимот, ки ҳангоми омӯзиши таъсири ҳамаи параметрҳои онҳо ба минтақаҳои мавҷуда, таркиб, инчунин параметрҳои моделӣ муайян карда мешаванд;
- моделҳои химиявӣ, ки дар асоси натиҷаҳои тадқиқот дар системаи омӯхташудаи ташаккули пайвастагиҳои координатсионии нукра тартиб дода шудаанд, ки имкон медиҳанд, ки ҳисобҳои компютери қиматҳои муҳимтарини функцияҳо ва параметрҳои термодинамикӣ боэтимод ва хеле зуд анҷом дода шаванд. ;
- маълумот дар бораи синтез, таркиби комплексои нукра бо метионин;
- натиҷаҳои тадқиқоти спектроскопияи ИС метионин ва комплексои он бо нукра;
- маълумоти таҳлилий рентгенофазии пайвастагиҳои координатсионии нукра бо метионин ва гузарониши электролитии онҳо;
- натиҷаи санҷиши комплекси нукра бо метионин дар тухмии гандуми навъ «Сафедак» ба сабзиш ва нашъунамои онҳо қувват медиҳад.

Этимоднокӣ натиҷаҳо, ки дар кори диссертатсионӣ ба даст оварда шудаанд, ба инҳо асос меёбад:

- ба даст овардани маълумоти дақиқ, такроршавандаи таҷрибавӣ, таҳлили интиқодии онҳо бо назардошти коркарди натиҷаҳо дар асоси барномаҳои компютери муосир ва омори математикӣ, мувофиқати онҳо ба боэтимодтарин сарчашмаҳои адабии маълум;
- Мутобиқати қонунҳои ошкоршуда, хулосаҳои кор бо натиҷаҳои назариявӣ ва таҷрибавӣ, ки дар доираи дигар равандҳои асосҳои химияи физикӣ ба даст оварда шудаанд.

Рисола ба шиносномаи ихтисоси 02.00.04 химияи физикӣ (илмҳои кимиё) аз рӯи бандҳои зерин мувофиқат мекунад:

1. муайян кардани таҷрибавӣ ва назариявии параметрҳои энергетикӣ пайвастагӣҳои молекулавӣ, инчунин характеристикаҳои спектрии онҳо (боби III, қисмҳои 3.2 ва 3.3);
2. ба таври таҷрибавӣ муайян кардани хосиятҳои термодинамикӣ моддаҳо, ҳисоб кардани функсияҳои термодинамикӣ (боби II, фасли 2.4);
3. муайян кардани характеристикаҳои термодинамикӣ процессҳо (боби II, фасли 2.4);
4. моделсозии компютерӣ хосиятҳои комплексҳо дар маҳлулҳои моеъ (бобҳои II ва III);
6. табдилоти химиявӣ (боби III, фасли 3.1);
10. синтез ва таҳияи моделсозии компютерӣ механизмҳои табдилёбии пайвастагӣҳои химиявӣ (бобҳои II ва III);
12. асосҳои физикию химиявии процессҳои синтези химиявӣ (боби III, фасли 3.2).

Санчиши рисола ва маълумот дар бораи истифодаи натиҷаҳои он. Маводҳои диссертатсия дар конференсияи ҷумҳуриявии илмию назариявии ҳайати профессорону кормандони ДМТ (Душанбе, 2015, 2016); Конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-назариявии «Комёбиҳои биологияи муосир дар Тоҷикистон» (Душанбе, 2016); Конфронси байналмилалӣ илмӣ «Комплексҳои пайвастагӣҳо ва ҷанбаҳои татбиқи онҳо» (Душанбе 2018); Конфронси ҷумҳуриявии илмию назариявии ҳайати омӯзгорон ва кормандони ДМТ (Душанбе, 2018-2020); II-IV Конфронси байналмилалӣ илмӣ: «Масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ» (Душанбе, 2014, 2016 ва 2019).

Татбиқ ва вориднамоии натиҷаҳои тадқиқот. Натиҷаҳои дар қори рисолаи илмӣ ба даст овардаи довтолаб ба раванди таълими кафедраи химияи ғайриорганикӣ ва физикӣ, коллоидии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон ворид карда мешаванд. Онҳо ҳангоми гузаронидани курсҳои лексионӣ аз рӯи фанҳои махсус, ҳангоми иҷрои довтолабон (номзадӣ ва докторӣ), инчунин қорҳои магистрӣ, курсӣ ва рисолаҳои донишҷӯён истифода мешаванд. (Замима, акти ворид намудани натиҷаи таҳқиқоти довтолаб оид ба мавзӯи рисола ба раванди таълим).

Санчишҳои лаборатории комплексҳои нукра бо метионин дар тухмии навъҳои гандуми «Сафедак» фаъолияти биологӣ ва самаранокии онҳоро ҳангоми қорқарди тухмии пеш аз кишт нишон доданд. Бинобар ин комплекси нукра бо метионинро барои қорқарди пеш аз кишти тухмии гандум тавсия қардан мумкин аст. (Замима, акти санчиши комплекси нукра бо метионин дар тухми гандум).

Соҳаи тадқиқот - химияи физикӣ ва химияи координатсионӣ мебошад.

Марҳилаҳои тадқиқот. Дар марҳалаи аввал (солҳои 2016-2017) таҳлили пурраи адабиёти марбут ба мавзӯи рисола дар тӯли 45 соли охир гузаронида шуда, аҳамияти он, мақсад ва вазифаҳои тадқиқот муайян қарда шуд.

Дар марҳилаи дуюм (2018-2020) равандҳои диссоциатсияи электролитии метионин дар муҳити обӣ ва пайдоиши пайвастагӣҳои мураккаби нукра (I) бо лигандҳои нишондодашуда дар маҳлулҳои обӣ, хосиятҳои физикӣ-кимиёвӣ ва биологияи онҳо бо усули титркунии рН-метрӣ омӯхта шуданд.

Дар марҳалаи сеюм (солҳои 2021-2023) ҳисобҳо, таҳлил ва ҷамъбасти ҳамаи маълумоти аз тариқи таҷриба гирифташуда гузаронида шуда, натиҷаҳои онҳо ҷамъбаст ва хулосаҳо бароварда шуда, қорҳо оид ба тарҳрезии рисола анҷом дода шуданд.

Пойгоҳи асосии иттилоотӣ ва таҷрибавӣ. Қор дар кафедраи химияи ғайриорганикӣ факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон дар мавзӯҳои: «Синтез ва омӯзиши пайвастагӣҳои координатсионии рений, молибден, мис, оҳан, кобальт, никел, руҳ, нукра, марганец, тилло ва баъзе лантанидҳо дар маҳлулҳо ва ҷустуҷӯи ҷанбаҳои амалии татбиқи онҳо», рақами бақайдгирии давлатии TGR 011TG6044 2016-2020, инчунин «Мушкилоти металлҳои d-гузаришӣ бо иштироки лигандҳои амидӣ ва тиамидӣ дар маҳлулҳои обӣ ва оби-органикӣ», 2020-2025.

Наشري натиҷаҳои рисола: Дар асоси маводи рисола 16 мақола, аз ҷумла 4 мақолаи илмӣ дар нашрияҳои пешбари рецензияи аз ҷониби Комиссияи олии аттестатсионии назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон муайянгардида, 11 маводи маъруза ба таъб расидаанд. дар конференсияҳои сатҳи гуногун 1 патенти хурди Љумъурии Тоҷикистон.

Саҳми шахсии довталаб. Муаллифи ин рисола ҳадаф ва вазифаҳои тадқиқотро мурабтаб сохта, маълумоти пурраи адабиётро оид ба мавзӯ дар тӯли 45 соли охир таҳлил кардааст. Илова бар ин, ӯ шахсан тамоми таҷрибаҳо, тафсир ва коркарди маълумотро анҷом дода, хулосаҳои умумиро таҳия кардааст. Натиҷаҳои таҷрибавии бадастомада дар шакли мақолаҳо, тезисҳои маърузаҳои конференсияҳои сатҳҳои гуногун пешниҳод карда мешаванд.

Соҳтор ва доираи қори диссертатсия. Рисола аз муқаддима, 4 боб, хулоса, рӯйхати адабиёти 171 номгӯй, ки дар 139 саҳифаи маҷмӯи компютерӣ оварда шудааст, аз 20 расм, 30 ҷадвал ва замима (6 саҳифа) иборат аст.

МУНДАРИҶАИ АСОСИИ ҚОР

Муқаддима ба аҳамияти мавзӯи рисола, зарурати таҳқиқоти мазкур, муаррифии мақсад ва вазифаҳои қор, инъикоси навигарии илмӣ ва аҳамияти илмию амалии он, муқаррароти ба ҳимоя пешниҳодшуда ва тавсифи соҳтор бахшида шудааст..

Боби якуми қори диссертационӣ се зерфасл ва материалдо оид ба: метионин, ҳосиятҳои умумӣ ва комплекси он; пайвастагиҳои координатсияи нукра ва дигар металлҳо бо аминокислотаҳо; нукра, ҳосиятҳои физикию химиявӣ ва комплекси онро дар бар мегирад.

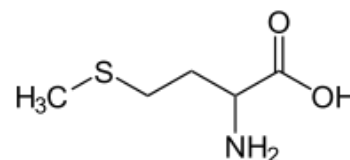
Боби дуюм - ибтидои қисми таҷрибавӣ мебошад, ки ба синтези реагентҳо барои стандартизатсияи онҳо барои титркунии рН-метрикӣ ва омӯзиши ҳосиятҳои протолитикии метионин, инчунин равандҳои комплекси нукра бо лигандҳои омӯхташаванда, методология бахшида шудааст. барои коркарди статистикии натиҷаҳо ва ҳисоб кардани константаҳои комплексҳосилшавӣ, омӯхтани протессҳои протонизация ва депротонизатсияи метионин дар муҳити обӣ.

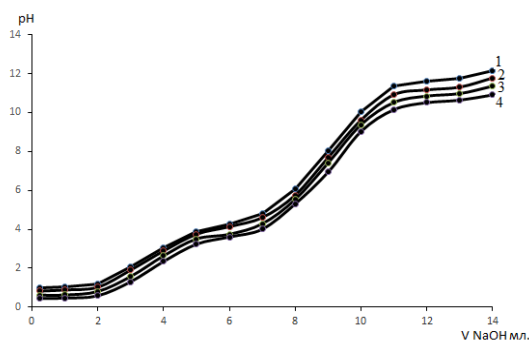
Боби сеюми рисола аз маълумотҳо оид ба омӯзиши системаи Ag(I)-аминокислота (метионин)-об иборат аст, аз ҷумла: омӯзиши равандҳои комплекси дар системаи Ag(I)-метионин-об бо усули рН-метрӣ; синтез ва таҳлили элементарии комплексҳои нукра бо метионин; Омӯзиши ИК-спектроскопии комплексҳои метионинии нукра (I), электргузaronии молекулавии пайвастагиҳои координатсионӣ, ҳосиятҳои электролитии комплексҳои нукра бо метионин, таҳлили рентгенофазавии комплексҳои нукра (I) бо лигандҳои омӯхташуда.

Боби чорум натиҷаҳои санҷиши лаборатории пайвастагиҳои координатсионии нукра(I) бо метионинро дар гандум ва баландшавии сифати тухмӣ (энергияи сабзиш ва афзоиш) ҳангоми коркарди пеш аз киштро дар бар мегирад

Омӯзиши ҳосиятҳои протолитикии метионин.

Метионин аминокислотаи ивазнашаванда аст, ки ҳосиятҳои гетерофункционалиро зоҳир мекунад, зеро он дорои гурӯҳҳои карбоксилӣ, аминӣ ва як атоми сулфур дар молекулааш дорад. Бо усули титркунии потенциометрӣ ва бо ёрии барномаи махсуси компютерӣ рК-и гурӯҳи карбоксилӣ ва аминӣро дар ҳароратҳои гуногун муайян карда шуд. Дар расми 1 қачхатаи титркунии метионин дар ҳароратҳои гуногун нишон дода шудаанд ва ҷадвали 1 қиматҳои адабии рК-и гурӯҳҳои карбоксилӣ ва аминӣ нишон дода шудааст.



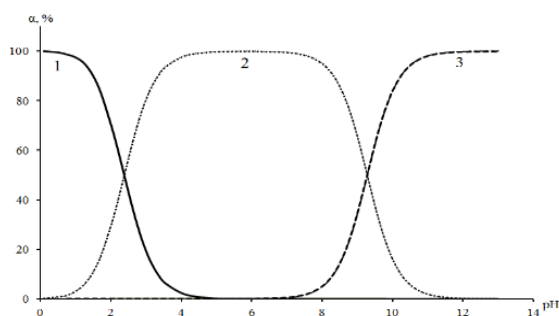


Расми 1. Качхатаи титркунии метионин бо ишқор дар концентрасияи лиганд $C_{HL}=1 \cdot 10^{-2}$; қувваи ионии маҳлул 0,1 моль/л ва ҳароратҳои гуногун. Качхатаҳо ба ҳароратҳои К: 1 - 328,16; 2 - 318,16; 3 - 308,16; 4-298.16 мансубанд.

Ҷадвали 1. Қиматҳои рК-и гурӯҳҳои карбоксилӣ ва аминии метионин дар ҳароратҳои гуногун

№, р/т	Ҳарорат, К	298.16	308.16	318.16	328.16
1	pK_{COOH}	2.38	2.19	2.05	1.93
2	pK_{NH_2}	9.28	9.12	8.92	8.71

Аз расми овардашуда ва қиматҳои адабии рК-и гурӯҳҳои карбоксилӣ ва аминӣ дида мешавад, ки бо баланд шудани ҳарорат раванди диссоциатсия шиддат мегирад, ки ба хосиятҳои назарияи протолитикии кислотаҳо мувофиқат мекунад. Фраксияҳои молярии шаклҳои диссоциатсияшуда ва диссоциатсиянашудаи метионин ҳисоб карда, диаграммаҳои тақсимоти онҳо тасвир шуданд (расми 3).



Расми 2. Хатти тақсимоти шаклҳои диссоциатсиянашудаи ва диссоциатсияшудаи метионин, ки дар ҳарорати 298,16 К ба даст оварда шудаанд; қувваи ионии маҳлул 0,1 ва концентрасияи лиганд $C_{HL}=1 \cdot 10^{-2}$ моль/л аст. Качхатаҳо инҳоянд: 1-шакли катоникӣ; 2-шакли свиттер-ионӣ ва 3-шакли анионӣ метионин.

Расми 3. Таъсири ҳарорат ба хатти тақсимоти шаклҳои диссоциатсиянашуда ва диссоциатсияшудаи метионин дар қувваи ионии маҳлул 0,1 ва концентрасияи лиганд $C_{HA}=1 \cdot 10^{-2}$ моль/л. Качхатаҳо инҳоянд: 1-шакли катонӣ; 2- шакли свиттер-ионӣ ва 3-шакли анионӣ метионин. 1₁₋₄; 2₁₋₄; 3₁₋₄, мутаносибан, дар ҳарорати: 298,16; 308,16; 318,16 ва 328,16 К.

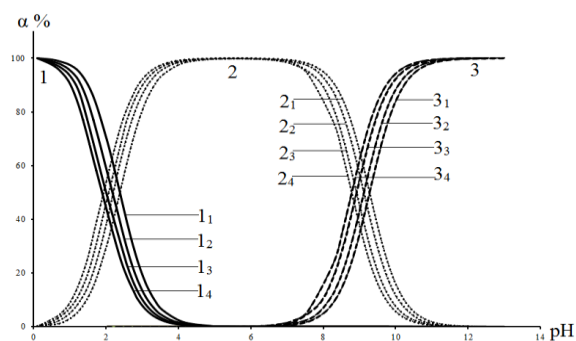


Диаграмма нишон медиҳад, ки шакли катонии аминокислотаҳо дар муҳити қавии кислотагӣ (рН то 1,5) бартарӣ дорад. Дар ҳудуди хеле калони рН аз 3,0 то 9,5 шакли свиттер-ионӣ бартарӣ дорад. Дар муҳити қавии ишқорӣ, дар рН зиёда аз 10,5 шакли анионии метионин бартарӣ дорад.

Барои муайян кардани функсияҳои термодинамикӣ: энергияи Гиббс (ΔG), энтропия (ΔS) ва энталпия (ΔH) қиматҳои рК, ки барои гурӯҳҳои карбоксилӣ ва аминӣ метионин (Ҷадвали 2) дар ҳудуди ҳароратҳо (298,16 ÷ 328,16) аз равандҳои диссоциатсия гирифта шуда, (Ҷадвалҳои 2 ва 3) мувофиқи муодилаҳо ва усулҳои маълум истифода шуданд. Бо баланд шудани ҳарорат афзоиши энергияи Гиббс мушоҳида мешавад, зеро раванди депротонизатсия дар система, ки эндотермикӣ аст, сурат мегирад. $\Delta G_{p,T} < 0$ процесс стихиявӣ ба самти додасуда пеш меравад;

Чадвали 2. Қиматҳои адабии функсияҳои термодинамикӣ: Энергияи Гиббс (ΔG), энтропия (ΔS) ва энталпия (ΔH) дар ҳароратҳои гуногун равандҳои депротонизатсияи метионин (а)

№, р/т	Т, К	K_{NH_3}	pK_{NH_3}	Функсияҳои термодинамикӣ		
				$-\Delta G$, кДж/моль	ΔS , Дж/мольК	$-\Delta H$, кДж/мольК
1	298,16	5,248E-10	9,28	13,58	139,76	28,09
2	308,16	7,586E-10	9,12	12,91	163,54	37,48
3	318,16	1,202E-09	8,92	12,48	170,96	41,91
4	328,16	1,622E-09	8,71	12,12	180,49	47,11

протонизатсияи метионин (б)

№, п/п	Т, К	K_{COO^-}	pK_{COO^-}	Функсияҳои термодинамикӣ		
				$-\Delta G$, кДж/моль	ΔS , Дж/мольК	$-\Delta H$, кДж/мольК
1	298,16	4,169E-3	2,38	52,95	289,49	33,36
2	308,16	6,457E-3	2,19	53,79	259,66	26,23
3	318,16	8,913E-3	2,05	54,31	245,96	23,94
4	328,16	1,175E-2	1,93	54,70	227,67	20,01

Энтропияи система бузургист, ки ченаки бетартибии онро тавсиф мекунад. Агар энталпия хусусияти энергетикӣ система бошад, энтропия геометрӣ аст. Қиматҳои мутлақи энтропия ва энталпия маълумоти муфид надоранд, қиматҳои тағйирёбии онҳо (ΔH ва ΔS) муҳиманд. Ҳамин тавр, масалан, барои худбахуд рух додани раванд, энтропияи он бояд афзоиш ёбад, яъне $\Delta S > 0$.

Маълумотҳои гирифташуда барои ҳисоб кардани характеристикаҳои термодинамикӣ процессҳои протонизатсия ва депротонизатсияи метионин дар маҳлули об истифода бурда шуданд. Тағйирёбии энергияи Гиббс, энтропия ва энталпия муайян карда шуда, нишон дода шудааст, ки протонизатсия ва депротонизатсияи метионин раванди эндотермикӣ мебошад.

Бо роҳи титркунии потенциометрӣ равандҳои мураккаби ҳосилшавии $Ag(I)$ бо метионин дар ҳарорати 298,16 К ва қувваи ионии маҳлул 0,1 моль/л омӯхта шуданд. Мувофиқи усул лиганд-метионин алоҳида ва омехтаи намаки нукра бо лиганд титр карда мешавад. Програмаи махсусе мавҷуд аст, ки миқдор ва таркиби комплексҳои ҳосилшударо бо ёрии маълумотҳои потенциометрӣ муайян мекунад. Муайян карда шуд, ки дар системаи тадқиқшуда чор комплекс ҳосил мешавад: $[Ag(NA)H_2O]^+$; $[Ag(NA)_2]^+$; $[AgA(H_2O)]^0$ ва $[Ag(A)_2]^-$ 2 пайвастагӣҳо дар сфераи координатсионии дохилии шакли катионии лиганд НА доранд ва 2 дигараш намуди анионӣ A^- доранд.

Реаксияҳои ба вучуд омадани комплексҳои нукра, ки дар системаи $Ag(I)$ -метионин- H_2O дар ҳарорати 298,16 К ва қувваи ионии маҳлул 0,1 ба вучуд меоянд; $C_{Ag(I)}=0,01$; $C_{мет.}=0,01$ моль/л дар чадвали 3 оварда шудааст.

Чадвали 3. Реаксияҳои ташаккули комплексҳои нукра дар системаи $Ag(I)$ -метионин- H_2O дар ҳарорат 298,16 К ва қувваи ионии маҳлул 0,1; $C_{Ag(I)}=0,01$; $C_{мет.}=0,01$ моль/л.

Концентрацияи мувозинати комплексҳои нукра, ки дар системаи $Ag(I)$ -метионин- H_2O та...

№, р/т	Реаксияҳои ҳосилшавии комплексҳо
1	$[Ag(H_2O)_2]^+ + HA^\pm \leftrightarrow [Ag(NA)(H_2O)]^+ + H_2O$
2	$[Ag(NA)(H_2O)]^+ + HA^\pm \leftrightarrow [Ag(NA)_2]^+ + H_2O$
3	$[Ag(H_2O)_2]^+ + A^- \leftrightarrow [Ag(A)H_2O]^0 + H_2O$
4	$[Ag(A)H_2O]^0 + A^- \leftrightarrow [Ag(A)]^- + H_2O$

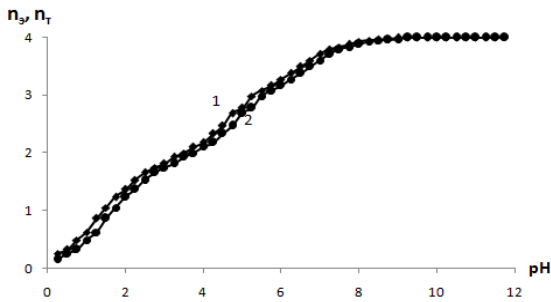
Чадвали 4. Муодилаҳои концентратсияи мувозинати комплексҳои нукра, дар системаи Ag(I)-метионин-H₂O дар ҳарорати 298,16 К ба вуҷуд омадааст ва қувваи ионии маҳлул 0,1; C_{Ag(I)}=0,01; C_{мет.}=0,01 моль/л.

№, р/г	Концентратсияи муносибии комплексҳо
1	$[Ag(HA)(H_2O)]^+ = \beta_{1110} \cdot [Ag^+] \cdot [HA^+] \cdot [H_2O]$
2	$[Ag(HA)_2]^+ = \beta_{1220} \cdot [Ag^+] \cdot [HA^+]^2$
3	$[Ag(A)(H_2O)]^0 = \beta_{1010} [Ag^+] \cdot [A^-] \cdot [H_2O]$
4	$[AgA_2]^- = \beta_{1010} \cdot [Ag^+] \cdot [A^-]$

Сипас, бо назардошти ифодаи тавозуни моддӣ ва ҳар як собитаи ташаккули шаклҳои комплексӣ, қиматҳои функсияи назариявии ташаккули Беррум мувофиқи муодилаи зерин ҳисоб карда мешаванд:

$$\bar{n}_T = (\beta_{1110} K_1 h^3 C_A + 2 \beta_{1220} K_1^2 h^2 C_A^2 + \beta_{1010} K_1 K_2 h^2 C_A + \beta_{1020} K_1 K_2 h^2 C_A) / (h^3 + \beta_{1110} K_1 h^3 C_A + 2 \beta_{1220} K_1^2 h^2 C_A^2 + \beta_{1010} K_1 K_2 h^2 C_A + \beta_{1020} K_1 K_2 h^2 C_A)$$

Бо усули наздикшавии пайдарпайи функсияи ташаккули амалӣ ва назариявии Беррум (расми 4) (то наздикшавии максималӣ) қиматҳои константаҳои ҳосилшавии комплексҳо муайян карда шуданд.



Расми 4. Вобастагии функсияҳои ташаккулёбии амалӣ (қачхатаи 1) ва назариявӣ (қачхатаи 2) аз рН.

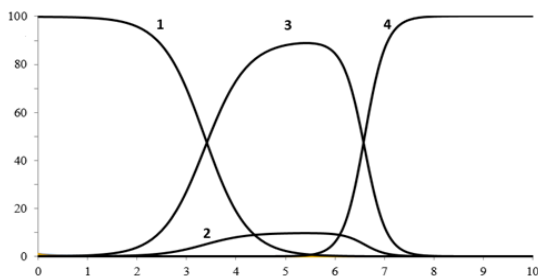
Аз расм дида мешавад, ки наздикшавӣ то ҳадди аксар анҷом дода шудааст, ҳарду қачхата ба ҳам мувофиқанд, ки ин нишон медиҳад, ки натиҷаҳои бозътимод ба даст оварда шуданд. Ҳамин тариқ, қиматҳои ададии бадастомадаи собитаҳои ҳосилшавии комплексҳои нукра бо метионин дар чадвали 5 нишон дода шудаанд.

Чадвали 5. Қиматҳои адабии собитаҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои координатсионии нукра бо метионин дар ҳарорати 298,16 К, қувваи ионии маҳлул 0,1; C_{Ag(I)} = 0,01; C_{мет.} = 0,01 моль/л.

№ р/г	Таркиби Комплекс	Собит. ҳосилшавӣ, β_{gslk}	Собит. ноустуворӣ, $K_{\text{ноуст}}$
1	$[Ag(HL)(H_2O)_3]^+$	$1,00 \cdot 10^{12} \pm 0,02$	$1,00 \cdot 10^{-12} \pm 0,02$
2	$[Ag(HL)_2(H_2O)_2]^+$	$3,01 \cdot 10^{14} \pm 0,02$	$3,32 \cdot 10^{-15} \pm 0,02$
3	$[Ag(L)(H_2O)]^0$	$9,15 \cdot 10^{16} \pm 0,02$	$1,09 \cdot 10^{-17} \pm 0,02$
4	$[Ag(L)_2]^-$	$9,63 \cdot 10^{19} \pm 0,02$	$1,04 \cdot 10^{-20} \pm 0,02$

Пайвастагии устувортарин комплекси $[Ag(L)_2]^-$ мебошад. Ин ба зиёд шудани имконияти ба вуҷуд омадани пайвастагиҳои комплекси типии хелат вобаста аст. Собитаи ҳосилшавии ин комплекс β_{1020} баробари $9,63 \cdot 10^{19} \pm 0,02$ аст.

Ҳиссаи молии ҳар як комплекс ҳисоб карда шуда, диаграммаҳои тақсимоти онҳо аз руи шкалаи рН тасвир шуданд (расми 5).



Расми 5. Диаграммаи тақсимоти пайвастагиҳои координатсионие, ки дар системаи Ag -метионин-об пайдо мешаванд, аз рӯи шкалаи рН дар ҳарорати 298,16 К, қувваи ионии маҳлул 0,1 ва C_{HL}=1 10⁻² моль/л. Қачхатаҳо инҳоянд: 1-[AgHL]⁺; 2-[Ag(HL)₂]²⁺; 3-[AgL]⁰; 4-[Ag(L)₂]⁻.

Бо баланд шудани рН миқдори комплекси якум кам мешавад. Дар қимати рН каме болотар аз 5,0, он ба ҳадди ақал мерасад, комплекс

комилан таҷзия мешавад. Мавҷудияти комплекси дуҷум болотар аз рН 4,5 ба 10% мерасад. Комплекси сеҷум дар доираи васеъ мавҷуд аст, ки қимати рН болотар аз 3 то 7 аст. Аниони метионин ба сфераи координатсионии дохилӣ ворид мешавад. Ҳангоми рН аз 7,5 зиёд шудан дар маҳлул комплекси дорои ду $[Ag(L)_2]^-$ лиганд бартарӣ дорад.

Ҷадвали 6. Дараҷаи максималии ҷамъшавии пайвастагиҳои мураккаби нукра (I) бо метионин дар ҳарорати 298,16 К, қувваи ионии маҳлул 0,1;

$$C_{Ag(I)} = 0,01; C_{мет} = 0,01 \text{ моль/л.}$$

№, р/т	Таркиби комплекси	Дараҷ.мак. ҷамъшави, %	рН муҳит
1	$[Ag(НА)(H_2O)]^+$	100,00	0,8
2	$[Ag(НА)_2]^+$	90,03	4,5
3	$[AgA(H_2O)]^0$	10,04	5,0
4	$[Ag(A)_2]^-$	100,00	8,5

Кӯшишҳо барои ба даст овардани комплексиҳои дар маҳлул ҳосилшуда анҷом дода шуданд, аммо танҳо пайвастагиҳои $[Ag(НА)(H_2O)]NO_3$; $[Ag(НА)_2]NO_3$ ҷудо карда шуданд. Маҳлули 0,01 моль/л намаки нитрати нукра ва 0,02 молярии метионин дар рН = 1,5 истифода бурда бо омехтани доимӣ ба маҳлули аввал дар ҳарорати хонагӣ маҳлули метионин илова карда шуд. Таҳшини сафед (бурранг) бо эфир ва метилэтилкетон шуста шуд. Ҳалшавандагии онҳо дар ҳалқунандҳои гуногун омехта шуд. Муайян кардани нукра (бо усули атомӣ-абсорбционии) дар таркиби комплексиҳо ва таҳлили элементии онҳо гузаронида шуд (ҷадвалҳои 7 ва 8).

Ҷадвали 7. Натиҷаҳои муайян намудани нукра дар таркиби пайвастагиҳои комплексии ҳосилшуда

Натиҷаҳои таҷрибавӣ оид ба таркиби нукра дар ҳар ду комплексиҳо бо маълумотҳои

Миқдори нукра дар комплексиҳо, %		Пайвастагиҳои комплекси	
		$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)(H_2O)]NO_3$	$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)_2]NO_3$
Назариявӣ		31.9988	23.0300
Таҷриба вӣ	Усули роданид.	31,0330	22,3900
	Ҳатогии нисбӣ	0,9658	0,7400
	Ҳатогии %	3,0009	2,7789
	Усули атом. адсор.	31,8408	23,0028
	Ҳатогии нисбӣ	0,1500	0,0272
	Ҳатогии %	0,4938	0,1181

назариявӣ комилан мувофиқанд. Ин мувофиқат инчунин дар маълумотҳои таҳлили элементӣ оид ба таркиби карбон, гидроген, нитроген, оксиген ва сулфур мушоҳида мешавад.

Ҷадвали 8. Натиҷаҳои таҳлили элементии пайвастагиҳои координатсионии нукра бо метионин

Мавҷудияти элементҳо, %	Таркиби комплекси									
	$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)(H_2O)]NO_3$					$[Ag(C_5H_{11}NO_2S)_2]NO_3$				
	C	H	N	O	S	C	H	N	O	S
Назариявӣ	17.81	3.89	8,31	28.48	9,51	25,65	4.73	8,97	23,91	13,69
Таҷрибавӣ	17,54	3,82	8,18	28,07	9,37	25,39	4,68	8,86	23,69	13,48
Ҳатогии нисбӣ	0,27	0,07	0,13	0,41	0,14	0,26	0,05	0,11	0,22	0,21
Ҳатогии %	1,52	1,80	1,56	1,44	1,47	1,01	1,06	1,23	0,92	1,53

Аз руи маълумотҳои ба даст овардашуда метавон гуфт, ки пайвастагиҳои комплекси чунин таркиб доранд: $[Ag(C_5H_{11}NO_2S)(H_2O)]NO_3$ ва $[Ag(C_5H_{11}NO_2S)_2]NO_3$, ки вази молекулавии онҳо мутаносибан 337,10 ва 468,29 мебошад. .

Омӯзиши спектроскопияи ИС комплексҳои метионини нуқра (I)

Барои муайян кардани ҳолатҳои координацияи метионин бо нуқра(I) спектрометри ИК-фурьеи «IRAffinity-1» истифода шуд, ки дар доираи дарозии мавҷи аз 400 то 4000 cm^{-1} кор мекунад. Спектрҳо дар ҳаббҳои бромиди калий гирифта шуданд. Спектрҳои лиганди ҳолис (метионин) (расми 6) ва пайвастиҳои комплекси нитратҳои он бо нуқра $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$ (расми 7) таҳлил карда шуданд. Дар ҷадвал таъиноти бандҳои абсорбсияи спектрҳо оварда шудаанд.

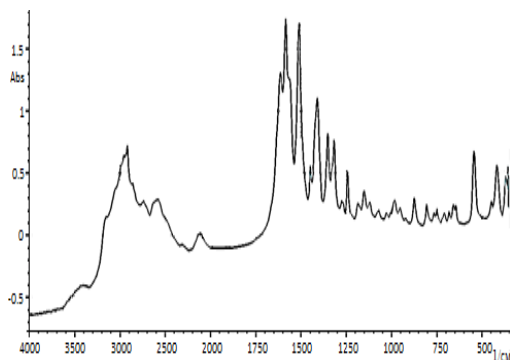


Рисунок 6. Спектри ИС метионина.

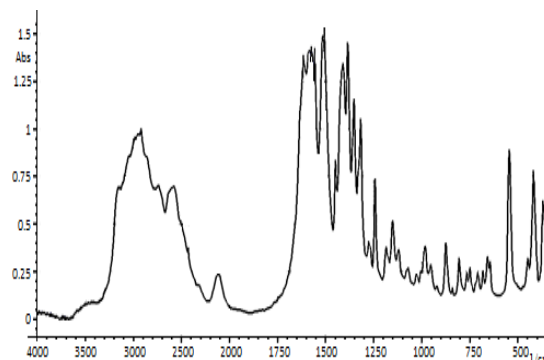


Рисунок 7. Спектри ИС комплекса $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$

Мувофиқи формулаи умумӣ, метионин дорои гурӯҳҳои гуногуни функционалӣ: CH_3 , NH_2 , OH , CO , S .

Ҷадвали 9. Басомадҳои хarakterистики ва таъиноти онҳо дар спектри ИС-и метионин ва комплекси он бо нуқра.

Ҳудуди басомадҳо	Метионин	Пайвастиҳои комплекси		Басомадҳо
		$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	
400-500	460	430	-	$\delta_{(\text{H}_2\text{O})}$ (1)
700-800	740-790	761-750	752-730	$\nu_{(\text{COO})}$ (2)
800-900	820	845	842	$\nu_{(\text{C-S})}$
1000-1100	1360	1055	1035	$\nu_{(\text{C-C})}$ (3)
1600-1700	1668	1670	1685	$\nu_{(\text{C-N})}$ (4)
1300-1500	1360	1361	1450	$\delta_{\text{as}}(\text{CH})$ (5)
3000-3500	3148	3210	3340	$\nu_{(\text{NH})}$ (6)
3000-4000	3150	3420	-	$\delta_{(\text{OH})}$ (7)

Дар спектрҳои комплекси синтезшуда раҳҳо ба сӯи басомадҳои паст ҳаракат мекунанд, ки ин координатсияи атоми нитрогени аминокислотаро бо нуқра нишон медиҳад. Гурӯҳи NH аминокислотаҳои озод боиси тағирёбии раҳҳои фурубари дар 3148-3149 cm^{-1} мегардад, ки дар спектрҳои комплексо дида мешавад. Ин натиҷаҳо нишон медиҳанд, ки гурӯҳи NH_2 аминокислотаҳо бо нуқра таъсири мутақобила мекунанд.

Дар баробари раҳҳои асосии лиганд 3090÷3150 cm^{-1} дар доираи 820-845 cm^{-1} раҳҳои пайдо мешаванд, ки ба лапишҳои дарозкашии гурӯҳи (C-S) тааллуқ доранд, ки координатсияи атоми сулфурро бо нуқра нишон медиҳанд. Дар фосилаи басомад 3235-3250 cm^{-1} -и гурӯҳи аминӣ (NH_2) ба 25-40 cm^{-1} сӯи басомадҳои паст ҳаракат мекунанд ва коҳиши шиддатнокии онҳо низ мушоҳида мешавад. Мавҷудияти оби кристаллизатсия дар комплексо бо ҳудуди васеъ дар фосилаи 3370-3410; 3460-3410 cm^{-1} шаҳодат медиҳад.

Кобилияти электргузариҳои молекулавии пайвастиҳои координационӣ, хосиятҳои электролитии комплекси нуқра бо метионин. Гузаронидани барқи маҳлулҳои комплексо аз омилҳои гуногун, пеш аз ҳама ба муқовимати онҳо ба ҳалкунанда ва аз ин рӯ ба таркиб, табиат ва андозаҳои берунӣ ва дохилӣ вобаста аст.

соҳаҳо. Яке аз талаботҳои асосии пайвастагиҳое, ки тавассути кондуктометрия омӯхта мешаванд, ҳалшаванда будани онҳо дар маҳлули таҳқиқшуда мебошад. Комплекси таркибӣ $\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})(\text{H}_2\text{O})\text{NO}_3$; $[\text{Ag}(\text{C}_5\text{H}_{11}\text{NO}_2\text{S})_2]\text{NO}_3$, ки дар заминаи нитратӣ гирифта шудааст, дар об хуб ҳал мешавад.

Барои пайвастагиҳои синтезшуда гузариши электрикии маҳлулҳо дар ҳалқунандаҳои гуногун чен карда шуд.

Ҷадвали 10. Қиматҳои молярии гузаронадагии электрикии пайвастагиҳои координатсионии нукра (I) бо метионин дар ҳалқунандаҳои гуногун.

№, р/т	Пайвастагиҳои комплекси	Қим.барқгузар. молярии комплексҳо, μ , $\text{Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{мол}^{-1}$		
		Воде	Спирте	ДМФА
1	$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	107,3	81,5	53,2
2	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	96,9	94,2	75,4

Қимати баландтарини барқгузаронии молярии комплексҳо дар маҳлули обӣ мушоҳида мешавад, бинобар ин, раванди диссоциатсияшавии пайвастагиҳо дар он максимум аст.

Ҷадвали 11. Қиматҳои гузаронадагии электрикии молярии (μ) пайвастагиҳои координатсионии нукра (I) бо метионин дар ҳароратҳои гуногун

№, р/т	Т, К	μ , $\text{Ом}^{-1}\cdot\text{см}^2\cdot\text{мол}^{-1}$	
		$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$	$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$
1	298,16	96,9	103,5
2	303,16	105,0	113,4
3	308,16	114,7	121,6
4	313,16	126,2	132,4
5	318,16	140,2	137,9

Вобастагии μ аз Т барои комплекси таҳқиқшуда хаттӣ буда, бо баланд шудани ҳарорат электргузарони зиёд мешавад. Ин ба назарияи электролитҳо мувофиқ аст. Электргузаронии электрикии комплекси $[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$ (қачхатаи 1) аз (қачхатаи 2) баландтар аст, ки ба комплекси $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$ дахл дорад. Ин далели таҷрибавиро бо зиёд шудани ҳаҷми комплекси дуюм нисбат ба комплекси якум бинобар координацияи ду молекулаи лигандҳои аминокислота ва ҳосил кардани сохти мураккаби фазой ба атоми нукра шарҳ додан мумкин аст.

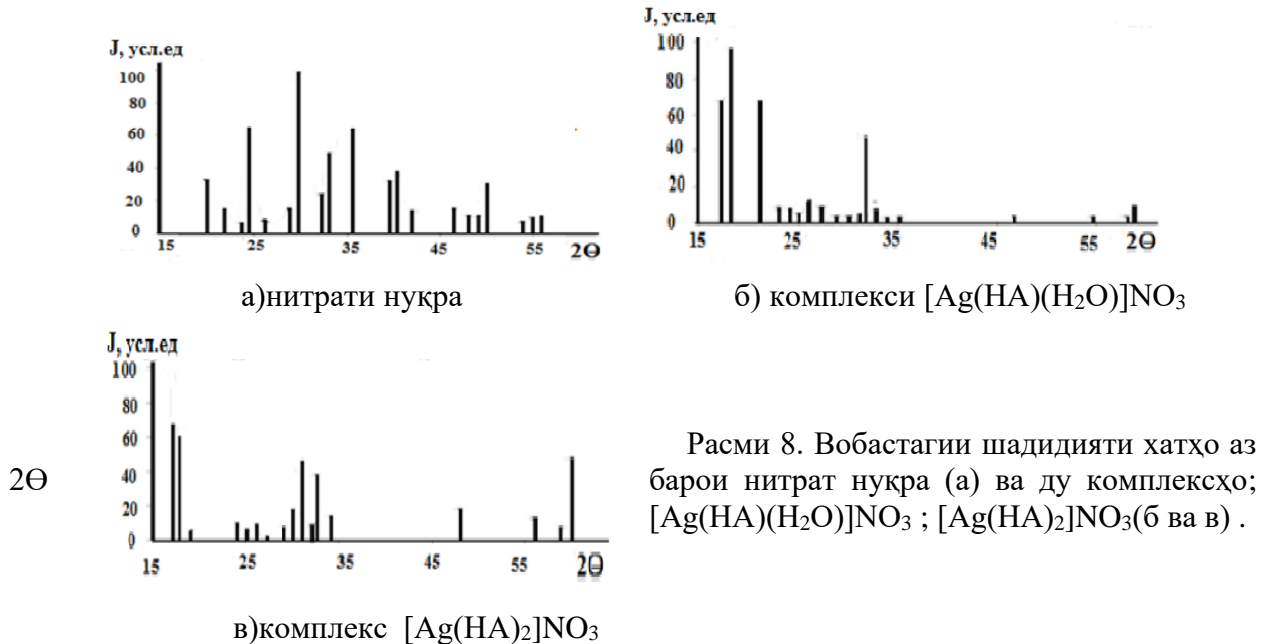
Омӯзиши вобастагии консентратсионии барқгузаронии молярии пайвастагиҳои бадастомада имкон дод, ки қиматҳои ададии гузаронадагии электролитии онҳоро муайян карда, онҳоро ба электролитҳои 1:1 тасниф карда шаванд. Энергияҳои фаългардонии гузаронадагии электрикии комплексҳо аз руи вобастагии гузаронадагии электрикии молярӣ ба ҳарорат, ҳисоб карда шуданд.

Ҷадвали 12. Қиматҳои энергияи фаългардонӣ ($E_{\text{акт}}$)-и раванди гузариши электрии комплексҳои нукра (I) бо метионин дар ҳароратҳои гуногун.

№, р/т	Т, °С	1/T	$[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$		$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	
			$\lg \mu$	$E_{\text{ф.}}^{\text{кЧ}}/\text{мол}$	$\lg \mu$	$E_{\text{ф.}}^{\text{кЧ}}/\text{мол}$
1	25	0,00340	1,9863	18,61	1,9581	18,75
2	30	0,00330	2,0212	17,28	1,9703	17,39
3	35	0,00320	2,0595	14,71	2,0306	15,29
4	40	0,00317	2,1011	12,48	2,0692	13,11
5	45	0,00310	2,1467	10,98	2,1106	12,05

Нишон дода шудааст, ки табиати лиганд истифодашаванда ва ҳарорати муҳит ба гузарониши барқ таъсир мерасонад. Бо баланд шудани ҳарорат энергияи ҷабболошаванда кам мешавад.

Параметрҳои кристаллографии комплексҳои синтезшудаи нукра(I) бо метионин тавассути таҳлили рентгенофазагӣ муайян карда шуданд. Намудҳои дифраксияи рентгени нитратҳои нукра ва комплексҳои синтезшуда ба даст оварда шуданд: $[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$, $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$,



Расми 8. Вобастагии шадидияти хатҳо аз барои нитрат нукра (а) ва ду комплексо; $[\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})]\text{NO}_3$; $[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$ (б ва в).

Миқдори зиёди инъикос дар диаграммаҳои бар мушоҳида мешавад. Ҳангоми гузаштан аз AgNO_3 ба комплексо, тағирёбии мавқеи хатҳои характеристика аз ҳамвории базалӣ ба қиматҳои хурди 2θ қайд карда шуд. Ин ба тағирёбии хусусияти хучайраи воҳидӣ ҳангоми иваз кардани молекулаи об бо лиганди свиттер-ионӣ метионин вобаста аст.

Ҷадвали 13. Параметрҳои сохтори торҳои кристаллии комплексҳои нукраи (I) синтезшуда бо метионин

Пайвастиҳои комплекси	Андозаҳои хучраҳои воҳидӣ				Адад. Мол хучра	Зичии таҷр. г/см^3	Зичии ҳисоб. г/см^3	Панҷараи Кристаллӣ
	а, Å	в, Å	с, Å	ν, Å^3				
$\text{Ag}(\text{HA})(\text{H}_2\text{O})\text{NO}_3$	0,1237	8,3627	7,7100	652,739	2	0,8015	0,8945	Орторомб.
$[\text{Ag}(\text{HA})_2]\text{NO}_3$	2,6434	11,4534	8,7697	1327,75	2	1,21	1,20	Орторомб

Намунаҳои рентгенӣ аз нав тақсим кардани шиддат дар инъикосҳо ва тағирёбии мавқеҳои инъикоси характеристикоро ба қиматҳои хурдтари кунҷҳои 2θ нишон медиҳанд. Ин аз зиёд шудани масофаи байниатомӣ шаҳодат медиҳад.

Бисёр пайвастиҳои нукра дар кишоварзӣ ҳамчун танзимгари афзоиши растаниҳо ба таври васеъ истифода мешаванд. Истифодаи пайвастиҳои комплекси нукра бо лигандҳои органикӣ иммунитетии растаниро ба касалиҳои гуногун ва омилҳои номусоиди муҳити зист, ҳосилнокии растаниҳоро баланд бардошта, сифати маҳсулотро беҳтар мекунад. Дар вақтҳои охир қор карда баромадани тухмии гандум пеш аз кишт маъмул шудааст.

Таъсири пайвастиҳои координатсионии нукра бо метионин ба нашъунамои тухмӣ аз тарафи мо дар шароити лабораторӣ, бо такрори чоркарата мувофиқи ГОСТҳо омӯхта шуд. Концентрацияи оптималии тухмӣ гандуми навъи «Сафедак» пеш аз кишт ва кадоме аз комплексо самараноктар аст, пешаки муқаррар карда шуданд. Пеш аз

гузарондани таҷрибаҳо тухмии гандуми тозашуда дар давоми 3,0—3,5 соат дар маҳлулҳои комплекс бо концентратсияҳои: 0,001, 0,005, 0,0001 фоиза нам карда шуд. Тухмиҳои варианти назоратӣ бо оби софи муқаттар нам карда шуданд. Энергияи нешзанӣ дар як руз ва сабзиш баъд аз 2 рузи дигар ҳисоб карда шуд. Натиҷаҳои зерин ба даст оварда шудаанд. Таъсири зиёдтаринро маҳлули концентратсияи 0,005% комплекси $[Ag(Met)_2]NO_3$ мерасонад, зеро дар ин маврид дуршавӣ аз варианти назоратӣ аз рӯи энергияи нешзанӣ 20,75% ва сабзиш 16,00% мебошад.

Ҷадвали 14. Таъсири концентратсияи комплекси нукра $[Ag(Met)_2]NO_3$ ба энергияи нешзанӣ ва сабзиши гандуми навъи «Сафедак».

№, р/т	намудҳои % конс. мавод.	Нишондиҳанда, %	Такроркарда				Қимат.миёна	
			1	2	3	4	М	±
1	Назоратӣ (H ₂ O)	Энергия нешзанӣ	53,0	55,0	51,0	54,0	53.25	-
		Сабзиш	74,0	76,0	73,0	75,0	74.50	-
2	Комплекси 0,001	Энергия нешзанӣ	66,0	71,0	65,0	73,0	70,00	16.75
		Сабзиш	80,0	82,0	83,0	81,0	85.75	11.25
3	Комплекси 0,005	Энергия нешзанӣ	68,0	73,0	80,0	76,0	74,00	20.75
		Сабзиш	88,0	84,0	89,0	87,0	90.50	16,00

Дар натиҷаи дар маҳлули комплекси нукра нам кардани тухмии гандум дарозии реша, вазни реша ва майса низ зиёд шуд (Ҷадвали 15).

Ҷадвали 15. Таъсири комплекси $[Ag(Met)_2]NO_3$ ба баъзе нишондиҳандаҳои майсаи гандуми 4 рӯзаи навъи «Сафедак».

№, р/т	Намудҳои % концен. мавод	Дарозии решаҳо	Вазн			
			Решаҳо		Майса	
			мг	%	мг	%
1	Назоратӣ (H ₂ O)	73,0	1,08	100,0	1.16	100,0
2	Комплекси 0,005	86,0	1,35	125,0	1,48	127,6

Вазни решаи варианти таҷрибавӣ аз назоратӣ 25,0 фоиз зиёд аст, ки ин метавонад ҳосили баланди гандумро кафолат диҳад. Комплекси $[AgMet_2]NO_3$ як стимулятори афзоиши рости гандум аст, зеро дар таркибаш иони Ag^+ ва кислотаи метионини аз ҷиҳати биологӣ фаъол мавҷуд аст.

ХУЛОСАҲО

1. Бо усули рН-метрия дар доираи ҳарорати 298,16 ÷ 328,16 ва қувваи ионии маҳлул 0,1 моль/л равандҳои депротонизатсия ва протонизатсияи гурӯҳҳои функционалии метионин омӯхта шуда, қиматҳои рК-и онҳо ҳисоб карда шуданд ва диаграммаҳои тақсими шаклҳои аминокислотаҳои катионӣ, цвтер-ионӣ ва анионӣ, характеристикаҳои термодинамикӣ муайян карда мешаванд.

2. Равандҳои комплексшавии нукра(I) бо усули рН-метрӣ дар ҳарорати 298,16 К омӯхта шуданд. Муайян карда шуд, ки комплекси $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$; $[Ag(A)(H_2O)]^0$ ва $[Ag(A)_2]^-$ дар ҳудуди рН аз 2,0 то 9,0 ҳосил мешаванд. Бо истифода аз функсияи ташаккули Беррум константаҳои устувории онҳо ва параметрҳои асосии моделӣ муайян карда шуданд. Муқаррар карда шудааст, ки дараҷаи максималии ҷамъшавии ду комплекси аввал ва охири мутаносибан 100,00; 90,03 ва 100,00%.

3. Бори аввал дар муҳити турш 2 комплекси нукра бо цвтер-иони метионин синтез карда шуд: $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$, таркиби элементарии онҳо, формулаи молекулавӣ, Спектрҳои ИС ва гузарониши барқ омӯхта шуданд. Нишон дода шудааст, ки онҳо электролитҳои таркибашон 1:1 буда, энергияи фаъолсозӣ ва вобастагии регрессионӣ низ муайян карда шуданд.

4. Хусусияти ҳучраҳои воҳидӣ комплексҳои $[Ag(НА)(H_2O)]^+$; $[Ag(НА)_2]^+$ тавассути таҳлили рентгенофазӣ муайян карда шуданд. Дар асоси штрих-диаграммаҳо нишон дода шудааст, ки гузаштани мавқеи хатҳои характеристикӣ аз ҳамворихоии базавӣ ба қиматҳои хурди 2θ бо тағирёбии хусусияти ҳучра ҳангоми иваз шудани молекулаҳои об бо свиттер лигандҳои метионин алоқаманд аст.

5. Дар шароити лабораторӣ фаъолияти биологии комплекси нукра (I) бо метионин ҳангоми пеш аз кишт нам кардани тухми гандуми навъи «Сафедак» муқаррар карда шуд. Нишон дода шудааст, ки дар баробари ин сифати кишти онҳо баланд мешавад. Баланд бардоштани: энергияи нешзанӣ 20,75 фоиз, сабзиши тухмӣ — 16,0 фоиз, дарозии реша — 18 фоиз, вазни онҳо — 25 фоиз ва майсаҳо — 27,6 фоиз.

Феҳристи корҳои ҷопшудаи муаллиф доир ба мавзӯи диссертатсия

Мақолаҳо дар маҷаллаҳои тақризшаванда:

[1-А]. **Маджидов, И.А.** Биологически активный метионин и его протолитические свойства. /И.А. Маджидов// Доклады национальной академии наук Таджикистана. -2021. –Т. 64. -№ 9-10. –С. 547-556.

[2-А]. **Маджидов, И.А.** Исследование комплексообразования в системе $Ag(I)$ -метионин-вода /И.А. Маджидов, М.У. Бобоев, М. Рахимова, Т.М. Нурматов// Вестник педагогического университета. –Душанбе: -2021. -№ 1-2 (9-10). –С. 145-150.

[3-А]. **Мачидов, И.А.** Получение серебра из сульфидных руд./Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Н.У. Кабутаршоева// Вестник Дангаринского государственного университета. – 2016. –№ 1-2 (5-6). – С. 16-20.

[4-А]. **Мачидов, И.А.** Синтези анодии пайвастаи координационии нукра бо метионин / Т.М. Нурматов, **И. Мачидов**, И.Р. Раҳмонов, Н.У. Кабутаршоева, А.К. Исмаатов.// Вестник Таджикского национального университета – 2016. -№ 1/4 (216). – С. 162 – 166.

Патент:

[5-А]. **Маджидов, И.А.** Способ синтеза координационных соединений серебра(1) с метионином. /И.А. Маджидов, М. Рахимова, Т.М. Нурматов // патент РТ. ТҶ №1228 от 19.02.2018. Оpubл. в бюл. 23.12. 2021.

Корҳои дар дигар нашрияҳо ҷопшуда:

[6-А]. **Мажидов И.А.** /Физико–химические свойства координационных соединений серебра с метионином /И.А. Мажидов, М. Рахимова, Т.М. Нурматов, М.Бобоев / Межд. конференция молодых ученых «Наука и инновации». –Ташкент: -2021. –С. 508-509.

[7=А]. **Мачидов, И.А.** Синтез и физико-химические свойства координационных соединений серебра /И.А. Мачидов, Т.М. Нурматов, Б. Абдурахмонов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ—амалӣ дар мавзӯи «Дурномаи инкишофи саноати кимиёи Тоҷикистон». -Душанбе. -2017. –С. 88-91.

[8-А]. **Мачидов, И.А.** Синтез ва омӯзиши пайвасти координатсионии нукра бо метионин /Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Н.У. Кабутаршоева /Материалы Международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». – Душанбе: Сино. -2018. – С. 82-83.

[9-А]. **Мачидов, И.А.** Таҳқиқи спектрҳои инфрасурхи пайвастиҳои комплекси нукра бо метионин /И.А. Мачидов, Н. Кабутаршоева, Т.М. Нурматов, Б. Абдурахмонов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ—амалӣ –Душанбе: Сино. -2017 –С. 78-81.

[10-А]. **Мажидов, И.А.** Комплексные соединения серебра с метионином и их характеристики /И.А. Мажидов, М. Рахимова, Т. М. Нурматов, М.У. Бобоев //Материалы Межд. конференции молодых ученых «Наука и инновации» –Ташкент: - 2021 , -С. 480-481.

[11-А]. **Мачидов, И.А.** Омӯзиши ҳосияти термикии пайвастаҳои комплекси нукра бо метионин / Т.М. Нурматов, **И.А. Мачидов**, Р. Саиди, А. Раҳмони// Материалы конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. –Душанбе: Сино. -2019. -С. 20-21.

[12-А]. **Мачидов, И.А.** Аҳамияти биологии метионин дар организми инсон / **Мачидов И.А.**, Абдурахмонов Б, Нурматов Т.М.//Материалы конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, -Душанбе: Сино. -2019.-С. 79-81.

[13-А]. **Мачидов, И. А.** Координационные соединения серебра и их значение в медицине/ **И.А. Мачидов**, Х. Шарипов, Н.У. Кабутаршоева, Т.М. Нурматов //Маводи конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ—амалӣ дар мавзӯи «Дурномаи инкишофи саноати кимиёи Тоҷикистон». – Душанбе: Сино. -2017. –С.91-94

[14-А]. **Мачидов, И.А.** Координационные соединения серебра с аминокислотами и их значение в медицине / Т.М. Нурматов, М. Раҳимова, **И.А. Мачидов** // Маводи конференсияи Байналмилалии «Пайвастаҳои комплексӣ ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо». –Душанбе: Сино. –2018. -С.86-87

[15-А]. **Мачидов, И.А.** Синтези пайвастаҳои координатсионии нукра бо усули электрохимиявӣ. / **И.А. Мачидов**, Т.М. Нурматов, Н.У. Кабутаршоева // Материалы республиканской конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения» - Душанбе: Сино.- 2018. - С.116-124.

[16-А]. **Мачидов, И.А.** Омӯзиши спектрҳои пайвастаҳои координатсионии нукра бо аминокислотаҳо. / **И.А. Мачидов**, Т.М. Нурматов, Н.У. Кабутаршоева// Материалы республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ. –Душанбе: Сино. -2017. - С.42-44.

А Н Н О Т А Ц И Я

диссертации Маджидова Икрома Ахмадовича на тему: «Процессы образования координационных соединений серебра(I) с метионином», представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.04- физическая химия

Ключевые слова: аминокислота, метионин, серебро(I), константа ионизации, комплексообразование, константа образования, диаграмма распределения, пшеница, всхожесть семян.

Объектами исследования являются системы: метионин ($C_5H_{11}NO_2S$)–вода; серебро(I) - метионин - вода при различных, но постоянных значениях температуры и ионной силе раствора, а также комплексы серебра(I)-с метионином; семена пшеницы-комплекс серебра(I) с метионином.

Цель исследования: выявление особенностей закономерности процессов формирования координационных соединений в системе: $Ag(I)$ –метионин – вода, определение состава, базисных свойств, синтез, исследование химических и биологических свойств форм образующихся комплексов.

Методы исследования: при выполнении диссертационной работы применены метод рН-метрического титрования со специальной компьютерной программой для определения рК карбоксильной и аминогруппы метионина, состава комплексов $Ag(I)$ с указанным лигандом, Базисные и модельные параметры определены с привлечением современных расчетных методов и компьютерных программ «EXCEL» и «SIGMAPLOT-10». Для изучения свойств комплексов использован ИК-фурье спектрометр «IRAffinity-1», метод кондуктометрии, рентгенофазового анализа, методы моделирования химических превращений в гомогенных системах.

Полученные результаты и их новизна: процессы электролитической диссоциации метионина в водной среде впервые исследованы методом рН-метрии при температуре 298,16 К, ионной силе 0,1 моль/л, рассчитаны значения pK_1 , pK_2 . Указанным методом при тех же экспериментальных условиях исследованы процессы формирования комплексов серебра(I), впервые установлены закономерности формирования метионинных комплексов серебра, определены их составы, базисные и модельные параметры, области распределения и доминирования. Впервые предложены алгоритмы термодинамических расчетов и полной статистической обработки экспериментальных данных. Получены комплексы серебра с метионином, изучены их составы и впервые предложены оптимальные условия выделения из раствора с максимальным практическим выходом. Методом ИК-спектроскопии изучена координация метионина с атомом серебра. Проведен рентгенофазовый анализ комплексов и изучена их электропроводимость. Установлена зависимость электропроводности комплексов от температуры и определены энергия активации электролитической проводимости координационных соединений. Проведены лабораторные испытания комплексов серебра с метионином на семенах пшеницы сорта «Сафедак», выявлены их биологически активные характеристики и положительное влияние при предпосевном увлажнении семян.

Степень использования: установленные закономерности процессов электролитической диссоциации метионина при 5 температурах и комплексообразования его лиганда с серебром(I), могут стать важным дополнением в теорию электролитической диссоциации слабых элетролитов и химическую теорию координационных соединений. Используемые принципы моделирования процессов могут быть применены для изучения любых систем с другими металлами и аминокислотами.

Область применения: разработанные методики синтеза комплексов могут быть использованы при получении основ лечебных препаратов, микроудобрений, микродобавок к кормам животных и птиц, стимуляторов роста и прорастания семян сельхоз культур. Общие положения диссертационной работы могут быть использованы при чтении лекций по координационной химии и специальным курсам этого профиля, моделированию процессов образования комплексов. Рассчитанные константы являются готовым справочным материалом для специалистов химического профиля.

А Н Н О Т А Ц И Я И

рисолаи номзиди Мачидов Икром Аҳмадович дар мавзӯи: «Раванди ҳосилкунии пайвастагиҳои координатории нукра (I) бо метионин», барои дарёфти дараҷаи илмӣ номзиди илмҳои кимиё аз рӯи ихтисоси 02.00.04 – химияи физикӣ.

Калидвожаҳо: аминокислотаҳо, метионин, нукра(I), собитаи ионизатсия, комплексҳосилкунӣ, собитаи ҳосилшавӣ, диаграммаи тақсимот, гандум, сабзиши тухм. Объекти тадқиқот системаҳои зерин мебошанд: метионин ($C_5H_{11}NO_2S$) - об; нукра (I) - метионин - об дар қиматҳои гуногун, вале доимии ҳарорат ва қувваи ионии маҳлул, инчунин комплексҳои нукра (I) - бо метионин; тухмии гандум-комплекси нукра (I) бо метионин..

Мақсади таҳқиқ: муайян кардани хусусиятҳои қонуниятҳои равандҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои координатсионӣ дар системаи: Ag (I) - метионин - об, муайян кардани таркиб, ҳосиятҳои асосӣ, синтез, омӯзиши ҳосиятҳои химиявӣ биологӣ шаклҳои комплексҳои ҳосилшуда.

Усулҳои таҳқиқотӣ: ҳангоми иҷрои кори диссертатсия усули титркунии рН-метрӣ бо барномаи махсуси компютерӣ барои муайян кардани рК-и гурӯҳҳои карбоксилӣ ва аминии метионин, таркиби комплексҳои Ag (I) бо лиганд нишон дода шудааст. Хусусиятҳои модел бо истифода аз усулҳои муосири ҳисоб ва барномаҳои компютери «EXCEL» ва «SIGMAPLOT-10» муайян карда шуданд. Барои омӯхтани ҳосиятҳои комплексҳои спектрометри ИФ-фурье «ИРаффинити-1», усули кондуктометрия, таҳлили рентгенофазаӣ, усулҳои моделсозии дигаргуниҳои химиявӣ дар системаҳои яхела истифода бурда шуданд.

Натиҷаҳои бадастомада ва навоариҳои онҳо: равандҳои диссоциатсияи электролитии метионин дар муҳити обӣ бори аввал тавассути рН-метрии дар ҳарорати 298,16 К, қувваи ионии 0,1 моль/л, рК₁ ва рК₂ ҳисоб карда шуданд. Бо истифода аз ин усул дар як шароити таҷрибавӣ равандҳои пайдоиши комплексҳои нукра(I) омӯхта шуда, аввалин маротиба қонунҳои ҳосилшавии комплексҳои метионини нукра муқаррар карда шуда, таркиб, хусусиятҳои асосӣ ва моделӣ, тақсимот ва минтақаҳои бартарият муайян карда шуданд. Бори аввал алгоритмҳои ҳисобҳои термодинамикӣ ва коркарди пурраи статистикӣ маълумотҳои таҷрибавӣ пешниҳод карда шуданд.

Комплексҳои нукра бо метионин ба даст оварда шуда, таркиби онҳо омӯхта шуданд. Бори аввал шароитҳои оптималии аз маҳлул ҷудо кардани ҳосилнокии максималии амалӣ пешниҳод карда шуданд. Координацияи метионин бо атоми нукра тавассути спектроскопияи ИС омӯхта шуд. Таҳлили рентгенофазагии комплексҳои гузаронда, электргузаронии онҳо омӯхта шуд. Аз ҳарорат вобастагии электргузаронии комплексҳои муқаррар карда шуда, энергияи ҷаъолшавии гузаронандагии электролитии пайвастагиҳои координатсионӣ муайян карда шуд. Дар тухмии гандуми навъи «Сафедак» озмоиши лаборатории комплексҳои нукра бо метионин гузаронда, хусусиятҳои фаъоли биологӣ ва таъсири мусбати намии пеш аз кишт маълум гардид.

Дараҷаи истифода: қонунҳои муқарраршудаи равандҳои диссоциатсияи электролитии метионин дар 4 ҳарорат ва ташаккули комплекси лиганд бо нукра (I) метавонад, иловаи муҳим ба назарияи диссоциатсияи электролитии электролитҳои заиф ва назарияи химиявӣ пайвастагиҳои координатсионӣ гардад.. Принсипҳои моделсозии равандҳои истифодашударо барои омӯзиши ҳама гуна системаҳо бо дигар металлҳо ва аминокислотаҳо истифода бурдан мумкин аст.

Доира: усулҳои кор карда баромадашудаи синтези комплексҳоро барои ба даст овардани асосҳои доруҳои табобати, микронуриҳо, микроиловаҳои хуроки ҳайвонот ва паррандаҳо, стимуляторҳои нашъунамо ва сабзиши тухмии зироатҳои хочагии қишлоқ истифода бурдан мумкин аст. Муқаррароти умумии кори диссертатсионӣ метавонад ҳангоми хондани лексияҳо оид ба химияи координатсия ва курсҳои махсуси ин соҳа, моделсозии равандҳои ташаккули комплекс истифода шавад. Собитаҳои ҳисобшуда барои мутахассисони соҳаи кимиё маводи тайёр меҷобшанд

ANNOTATION

**dissertation of Majidov Ikrom Akhmadovich on the topic:
"The processes of formation of coordination compounds of silver (I)
with methionine", submitted for the degree of Candidate
chemical sciences in specialty 02.00.04 - physical chemistry**

Key words: amino acid, methionine, silver(I), ionization constant, complex formation, formation constant, distribution diagram, wheat, seed germination.

The objects of study are the following systems: methionine (C₅H₁₁NO₂S)–water; silver (I) - methionine - water at different, but constant values of temperature and ionic strength of the solution, as well as complexes of silver (I) - with methionine; wheat seeds-silver(I) complex with methionine..

The purpose of the study: to identify the features of the regularity of the processes of formation of coordination compounds in the system: Ag (I) - methionine - water, determine the composition, basic properties, synthesis, study of the chemical and biological properties of the forms of the resulting complexes.

Research methods: when performing the dissertation work, the method of pH-metric titration with a special computer program was used to determine the pK of the carboxyl and amino groups of methionine, the composition of Ag (I) complexes with the indicated ligand. Basic and model parameters were determined using modern calculation methods and computer programs "EXCEL " and "SIGMAPLOT-10". To study the properties of the complexes, an IR Fourier spectrometer "IRAffinity-1", the method of conductometry, X-ray phase analysis, and methods for modeling chemical transformations in homogeneous systems were used.

The results obtained and their novelty: the processes of electrolytic dissociation of methionine in an aqueous medium were first studied by pH-metry at a temperature of 298.16 K, ionic strength of 0.1 mol/l, pK₁, pK₂ values were calculated. Using this method under the same experimental conditions, the processes of formation of silver(I) complexes were studied, the patterns of formation of silver methionine complexes were established for the first time, their compositions, basic and model parameters, distribution and dominance regions were determined. Algorithms for thermodynamic calculations and complete statistical processing of experimental data are proposed for the first time. Silver complexes with methionine were obtained, their compositions were studied, and for the first time optimal conditions for isolation from solution with the maximum practical yield were proposed. Coordination of methionine with a silver atom was studied by IR spectroscopy. X-ray phase analysis of the complexes was carried out and their electrical conductivity was studied. The temperature dependence of the electrical conductivity of the complexes was established, and the activation energy of the electrolytic conductivity of the coordination compounds was determined. Laboratory tests of silver complexes with methionine were carried out on wheat seeds of the Safedak variety, their biologically active characteristics and a positive effect on pre-sowing seed moisture were revealed.

Degree of use: the established patterns of the processes of electrolytic dissociation of methionine at 5 temperatures and the complex formation of its ligand with silver (I) can become an important addition to the theory of electrolytic dissociation of weak electrolytes and the chemical theory of coordination compounds. The used process modeling principles can be applied to study any systems with other metals and amino acids.

Scope: the developed methods for the synthesis of complexes can be used to obtain the bases of medicinal preparations, microfertilizers, microadditives for animal and bird feed, growth stimulants and germination of seeds of agricultural crops. The general provisions of the dissertation work can be used in lecturing on coordination chemistry and special courses in this field, modeling the processes of complex formation. The calculated constants are ready reference material for chemical specialists.