

На правах рукописи

УДК: 546.621:622.7(575.3)

ББК:24.5(2Т)

К-18

КАМОЛОВА Икlima Усмоновна

**ПРОЦЕССЫ КОМПЛЕКСОБРАЗОВАНИЯ Fe(II) И Zn(II) С
МЕРКАЗОЛИЛОМ**

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени доктора философии (PhD) – доктор по специальности 6D060600-«Химия» (6D060604-Физическая химия)

Душанбе -2024

Работа выполнена на кафедре физической и коллоидной химии Таджикского национального Университета.

Научный руководитель: **Ёрмамадова Саврибегим Гулмамадовна** - кандидат химических наук, доцент кафедры прикладной химии Таджикского национального Университета

Научный консультант: **Раджабов Умарали** - доктор химических наук, профессор кафедры фармацевтической и токсикологической химии ГОУ «Таджикский государственный медицинский университет имени Абуали ибни Сино»

Официальные оппоненты: **Курбонов Амиршо Сохибназарович** - доктор химических наук, доцент кафедры «Органическая и биологическая химия» Бохтарского государственного университета им. Носира Хусрава

Камилов Хуршед Чулибаевич - кандидат химических наук, старший преподаватель кафедры математики и естественных наук МГУ имени М.В. Ломоносова, филиала МГУ в г. Душанбе

Ведущая организация: **Таджикский государственный педагогический университет им. С. Айни, кафедра общая и неорганическая химия**

Защита диссертации состоится «**05**» **декабря 2024 г.** в «**13:00**» часов на заседании диссертационного совета, главный корпус, зал методического совета 6DKOA-010 при Таджикском национальном университете по адресу 734025, г. Душанбе, проспект Рудаки 17. E-mail: ikromovich80@mail.ru

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

Автореферат разослан « ___ » _____ 2024 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат химических наук



Бекназарова Н.С.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность и необходимость проведения исследований по данной проблеме. Интерес к исследованию и синтезу координационных соединений ионов d-элементов с азотсодержащими гетероциклами в том числе с имидазолами, в последние десятилетия, как показывает приведенный литературный обзор, сильно возрос [Юсупов З.Н. 1998]. Такой интерес, прежде всего вызван тем, что координационные соединения ионов d-элементов на основе азот и серосодержащих лигандов обладают эффективными фармакологическими действиями [Бобиев Г.М., 2000]. Как показывают многочисленные исследования такие вещества широко распространены в природе и являются неотделимыми элементами живых организмов.

В результате реакции Zn(II) и Fe(II) с лигандами т.е. с гетероциклами, получается координационные вещества, которые проявляют фармакологическими свойствами. Алексеевым показано активность Zn(II) которые лежат в пределах от 39 до 89%. [Алексеев В.А. 1992]. В справочниках приведено сообщение про свойства координационных соединений с производными имидазола как в водных растворах, так и в органических веществах.

Производные имидазола занимают особое место. В литературе имеется много информации об этих соединениях с участием d-элементов. Определены состав и устойчивость образующихся комплексов с имидазолом и некоторыми его производными [Раджабов У., Юсуфов З.Н., 2007]. В настоящее время в литературе отсутствуют данные о фармакологических свойствах металлов с мерказолилом. Сегодня широко используются координационные соединения 1-метил-2-меркаптоимидазола с металлами [Комлева Н.А. 2021].

Поэтому исследование комплексов Zn(II) и Fe(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом является актуально.

Степень изученности научной проблемы. В данной работе нами изучены процессы комплексобразования железа(II) и цинка(II) с мерказолилом (мерк), выяснены условия получения комплексов и проверены указанных веществ в практике. С учётом этого исследованы состав и устойчивость образующихся комплексов, изучены закономерности влияния ряда факторов (природа растворитель, влияние неводного растворителя на состав и устойчивость образующихся комплексов).

При этом установлено, что на состав и устойчивость влияет как природа метал-комплексобразователя, растворителя, а также органического и ацидолиганда.

Связь исследований с программами (проектами) или научными темами. Диссертация выполнена на кафедре физколлоидной и прикладной химии Таджикского национального Университета, а биологическая активность полученных соединений проведена на базе кафедры фармацевтической химии и токсикологии Государственного образовательного учреждения «Государственный медицинский университет Таджикистана имени Абуали ибн Сино» в соответствии с заказным проектом бюджета Республики Таджикистан по

теме «Синтез, физико-химические и биологические свойства комплексных соединений биометаллов с количеством азолов и аминокислот» государственный регистрационный номер 0121ТJ1208, дата регистрации 20. 05. 2021 года.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Целью исследования: Настоящая работа выполнена с целью исследовать процесс комплексообразования в системе Fe(II) и Zn(II) – 1-метил-2-меркаптоимидазол (мерказолил)-H₂O посредством метода оксредметрии, изученные термодинамических характеристик реакций комплексообразования Fe(II) и Zn(II) с мерказолилом при различных ионных силах 0,1; 0,25; 0,5; 1,0 моль/л и температурах, нахождение оптимальных условий синтеза комплексов, а также аспектов их применения.

Задачи исследования:

- с использованием метода окислительного потенциала изучить механизмов комплексообразования в системах Fe(0)-Fe(II)–мерк-H₂O и Zn(0)-Zn(II)–мерк-H₂O при различных ионных силах и температурах;

-с помощью окислительного потенциала составление химическое и математическое модели ионных равновесий реакций образования комплексов железа(II) и цинка(II) с мерказолилом;

-уточнить влияние ионной силы раствора на процессы комплексообразования и выявление термодинамических расчётов в системе Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптаимидазолом;

-нахождение оптимальных условий синтеза комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом, определение их состава и предполагаемого строения с помощью физико-химических методов анализа;

-определение токсичных в том числе острых, хронических, а также аллергенных и раздражающих свойств комплексов Fe(II) и Zn(II) с мерказолилом.

Объект исследования: комплексные соединения Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптаимидазолом.

Отрасль исследования: Синтез новых комплексных соединений железа(II) и цинк(II) с мерказолилом физико-химическими методами, изучение биологических свойств комплексных соединений железа(II) и цинк(II) с мерказолилом, внедрения полученных комплексов Fe(II) и Zn(II) с мерказолилом в ветеринарии.

Научная новизна работы:

1. Методом окислительной функции исследованы реакции образования комплексов Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптаимидазол;

2. Установлены химический состав комплексов в области различных рН среды раствора, выявление максимального выхода образующихся комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с 1-метил-2-меркаптаимидазолом;

3. Разработаны впервые условия синтеза комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с 1-метил-2-меркаптаимидазолом в твёрдом виде;

4. Методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, кондуктометрии, криоскопии, молярная электропроводности, дервотография и электропарамагнитным резонансом определены состав и строение комплексное соединение железа(II) и цинка(II) с 1-метил-2-меркаптомидазолом.

5. Для выявления механизмов образования комплексных соединений рассчитаны термодинамические характеристики реакций комплексообразования железа и цинка с 1-метил-2-меркаптамидазолом;

6. Изучены впервые острая, хроническая и раздражающие свойства комплексов Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптомидазолом.

Теоретическая ценность исследования. Результаты, полученные в процессе исследования, имеют фундаментальное значение и могут быть использовано для производство ветеринарных препаратов.

Практическая ценность исследования:

-найденные значения констант устойчивости комплексные соединения железа(II) и цинка(II) с мерказолилом могут послужит в качестве справочного материала, восполняющего существующие пробелы в литературе, и будут полезны ученым –исследователям, изучающим комплексообразование ионов d-переходных металлов с серо- и азотсодержащими лигандами, а также для синтеза новых соединений в области координационной химии;

-разработанные в работе методы синтеза координационных соединений могут быть использованы при целенаправленном синтезе новых координационных соединений других d-переходных металлов, имеющих серо- и азотсодержащие лиганды;

-полученные в диссертационной работе результаты расширяют базу данных о комплексообразованиях биометаллов и могут быть полезными аспирантам, работающим в областях физической и коллоидной химии, а также преподавателям и студентам соответствующих профилей при чтении лекции, спецкурсов и выполнении курсовых и дипломных работ.

-синтезированные вещества на основе координационных соединений железа (II) и цинка (II) с мерказолилом могут быть использованы для профилактики и лечения многих заболеваний связанных с щитовидной железой и иммунной системы.

Результаты, выносимые на защиту:

- в работе приведены результаты получения комплексов Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазолом (мерказолилом), выявлен состав, максимального выхода образования координационного соединения методом оксредметрии и окислительной функции;

- полученные теоретические и экспериментальные данные рассчитаны по уравнению окислительной функции, а также посредством уравнения Юсупова;

- приведены результаты численных значений констант устойчивости комплексных частиц железа(II) и цинка(II) с мерказолилом;

- приведены оптимальные условия и разработка синтеза комплексных частиц железа(II) и цинка(II) с мерказолилом;

- полученные данные подтверждены с помощью элементного анализа, молярной электропроводности, криоскопии, а также с использованием физико-химические методы анализа как ИК-спектроскопии, деривотография и электропарамагнитный резонанс;

- полученные результаты острой, хронической, аллергенных, раздражающих и антиоксидантных свойств синтезированных соединений.

Методы исследования. В исследовании использовались физико-химические методы, рентгенофазовый анализ (РФА), кондуктометрия, ИК-спектроскопии, криоскопия, акваметрия, элементный анализ, УФ-спектроскопии, термогравиметрия, ЭПР-спиновых меток и другие методы химического анализа для получения надежных и обоснованных результатов с высокой точностью и воспроизводимостью экспериментальных данных.

Обработка информации выполнена с помощью программного пакета Microsoft Office Excel и ANSYS CFX.

Этапы исследования. На первом этапе (2020-2021 гг.) был проведен анализ литературы по теме работы; установлена ее актуальность, сформулированы цели и задачи исследования.

На втором этапе (2021-2022 гг.) изучены процессы комплексобразования железа(II) и цинка(II) с мерказолилом в растворе при различных ионных силах и температурах.

На третьем этапе (2022-2023 гг.) синтезированы комплексные соединения железа(II) и цинка(II) с мерказолилом. Проведены исследования физико-химических основ синтезированного комплексного соединения для изучения строения и идентификации полученных комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, молярной электропроводности, деривотографии и ЭПР-спиновый метод. Изучены биологические свойства комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом, обобщены результаты, даны заключения по исследованиям и завершена подготовка диссертации.

Основная информационная и экспериментальная база.

Кафедра физической и коллоидной химии Таджикского национального университета, кафедра фармацевтической и токсикологической химии и ЦНИЛ ГОУ Таджикского государственного медицинского Университета имени А. Сино города Душанбе.

Степень достоверности результатов: достоверность полученных данных гарантирована и обоснована с использованием современных методов физико-химических исследований и статистической обработки результатов.

Окредметрическим методом с использованием теоретической и экспериментальной функции окисления Юсуфова установлены состав, среда образования, константа устойчивости и высокий процент образования комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом. Результаты синтеза, состав и строение комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом определены методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, молярного электропереноса, криоскопии, деривотографии и ЭПР-спинового метода.

Методом Першена определены биологические свойства комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолил(1-метил-2-меркаптамидазолом), острая и хроническая токсичность, аллергенные свойства и раздражающее действие.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности:

Содержанное выполненное диссертационной работы на тему: «Процессы комплексообразования Fe(II) и Zn(II) с мерказолилом» соответствует паспорту специальности: 6D060600 - «Химия» (6D060604-Физическая химия) по следующим пунктам:

- химическая термодинамика; учение о химическом равновесии;
- механизмы сложных химических процессов, процессы растворения и кристаллизации;
- теория растворов, межмолекулярные и межчастичные взаимодействия;
- связь реакционной способности реагентов с их строением и условиями осуществления химической реакции.

Личный вклад автора: автор диссертации сформулировала цели и задачи исследования, получила все экспериментальные данные лично или при непосредственном сотрудничестве с руководителями, интерпретировала результаты, сформулировала выводы, подготовила и опубликовала статьи.

Апробация диссертации и сведения об использовании ее результатов.

Результаты диссертации обсуждались на: научно-практической конференции ТГМУ им. Абуали ибни Сино с международным участием «Роль и место инновационных технологий в современной медицине» (Душанбе 2018), республиканской научно-практической конференции (с участием зарубежных ученых) по теме «Использование новых технологий в образовании», «Естественные науки в учреждениях высшего профессионального образования», посвящённая 150-летию периодической системы химических элементов Д.И. Менделеева (Душанбе, 2019), сборник статей республиканской научно-практической конференции на тему «Развитие и перспективы химической науки в Республике Таджикистан», посвящённой 60-летию химического факультета и чествованию памяти профессора, академика Академии наук Республики Таджикистан Нуъмонов Ишонкул Усмонович (Душанбе, 2020 г.), республиканской научно-практической конференции ассоциации преподавателей и сотрудников ДМТ, посвящённая 30-летию независимости Республики Таджикистан, 110-летию народного поэта Таджикистана, героя Таджикистана Мирзо Турсунзада, 110-летию со дня рождения народного писателя Таджикистана Сотима Улутзоде и «Двадцати лет обучения и развития естественного науки, точные и математические науки в сфере науки и образования 2020-2040 г.», (Душанбе, 2021), республиканской научно-практической конференции профессоров, ППС и сотрудников ДМТ, посвящённая «Годам развития промышленности (2022-2026)» и «Мавлоно Джалалиддин Руми» (Душанбе, 2022), научно-практическая конференция на тему «Современная роль и перспективы

анализа физической химии», посвященная объявлению четвертой цели стратегия индустриализации страны, 2022-2026г., (Душанбе, 2023 г.), Всеславянская школьная конференция молодых ученых «ДНИ НАУКИ В ИрГТУ» (Иванова, 2023 г.)

Опубликование результатов диссертации. По диссертационной теме опубликовано 15 научных работ, в том числе 4 статьи в журналах, рекомендованных ВАК РФ и РТ, 10 тезисов докладов в материалах международных, республиканских, региональных конференций и 1 малой патент Республики Таджикистан.

Структура и объем диссертации: Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, библиографии из 130 названий на русском и иностранных языках. Общий объем диссертации составляет 141 страницы, включает 65 рисунков и 41 таблиц.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертант обосновал актуальность своих исследований, установил задачи, цель исследования, а также в данной разделе приведено основной объект и методы исследования, отрасль и этапы исследования, основная информационная и экспериментальная база, достоверность результатов диссертации, научная новизна работы, теоретическая и практическая ценность исследования. Перечислены основные положения работы, выносимые на защиту.

В первой главе приведен обзор литературы о комплексообразования биометаллов с органическими лигандами, в том числе железа и цинк с мерказолилом.

Во второй главе приведены данные о процессов комплексообразования в системах $\text{Fe(II)-мерк-Na}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ и $\text{Zn(II)-мерк-Na}_2\text{SO}_4\text{-H}_2\text{O}$ при различных ионных силах и температурах и теоретических расчетов.

В третьей главе приведено строения и свойств комплексных соединений с использованием химических, физико-химических методов исследования.

В четвертой главе представлено исследование биологической активности синтизирующих комплексных соединения железа(II) и цинка (II) с мерказолилом.

ПРОЦЕССОВ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В СИСТЕМЕ ЖЕЛЕЗО(0)-ЖЕЛЕЗО(II)-МЕРКАЗОЛИЛ-ВОДА И ЦИНКА(0)-ЦИНКА(II)С МЕРКАЗОЛИЛОМ

Для определения среды образования комплексных соединений в зависимости от pH раствора используют оксредметрический метод. Число лигандов входящих в комплексе рассчитывается по углам наклонов зависимости от pH раствора. По анализу зависимости окислительного потенциала от концентрации ионов водорода определяется протекания реакции образования комплексов и доминирования Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазол. (см.рис.1).

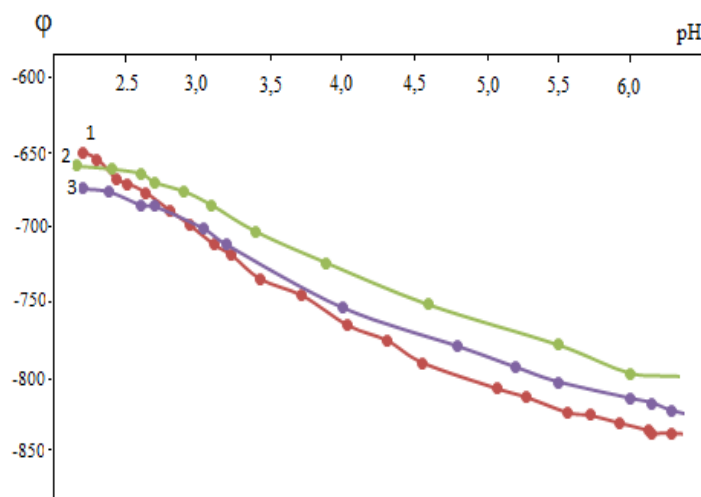


Рисунок 1. Доминирование комплексов в системе железа(II)–Мерк–вода по зависимости (φ) от рН: 298 К и ионной силе 0,1 моль/л; $CL = 1 \cdot 10^{-2}$ и концентрации железа (II)= 1 - $1 \cdot 10^{-4}$; 2 - $2 \cdot 10^{-4}$; 3 - $3 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

Из полученных экспериментальных зависимости в интервале рН от 2,0 до 6,4. При этом потенциал системы уменьшается от -620 до -780 мВ, что говорит об образовании комплексов и формирования каждой частицы в отдельности. Как видно из рисунка 1 по возрастанию концентрации метал комплексообразователь и рН раствора окислительной потенциал уменьшается.

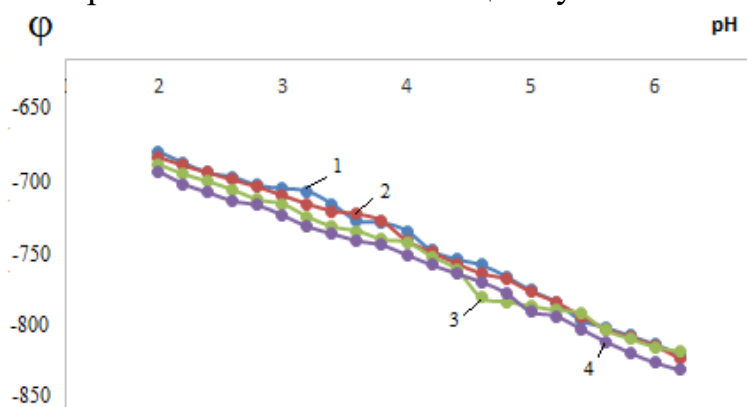


Рисунок 2. Доминирование комплексов в системе железа(II)–Мерк–вода по зависимости (φ) от рН в системе: Fe(II)–Мерк–Н₂O: конц. железа(II) = $1 \cdot 10^{-4}$, $CL = 1 \cdot 10^{-2}$, $T = 288,15$ К и ионной силе 1-0,1; 2-0,25; 3-0,5; 4-1,0 моль/л.

Последовательное образование линейных участков с углами наклона 0, $-v/2$, $-v$ согласно теории метода усреднения, свидетельствует о ступенчатом комплексообразовании металла с органическим лигандом. Горизонтальный участок зависимости φ от рН раствора системы Fe(II)–мерк–Н₂O (см.рис.2. до рН 2,0) показывает отсутствие комплексообразования в кислой среде. При рН > 2,2 наблюдается монотонное снижение окислительного потенциала системы, что указывает на образование комплексов железа(II) с мерказолилом. Зависимость φ от рН позволяет уточнить общее количество координирован-

ных лигандов с металлом комплексобразователем. На рисунке 3 приведена экспериментальная зависимость потенциала окисления φ от $pC_{Fe(II)}$, имеющая угловой коэффициент, равный $-v/2$, где $v = 2,3RT / zF$.

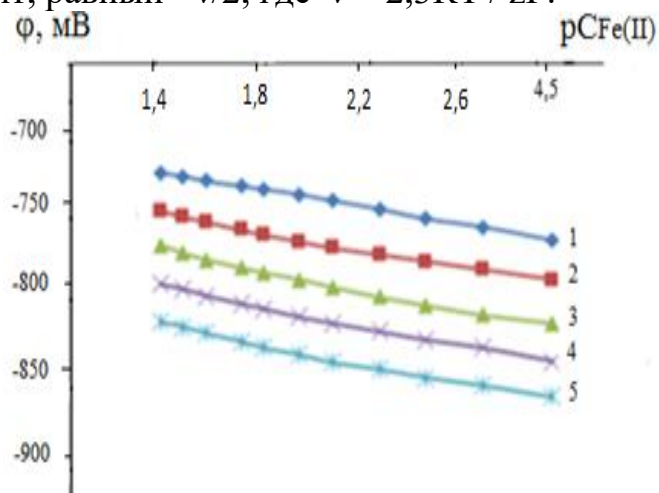


Рисунок 3. Доминирование комплексов в системы железа(II)–Мерк–вода по зависимости φ от $C_{Fe(II)}$ системы Fe(II)–Мерк–H₂O при T = 288,15 К и I = 0,1 моль/л; Кривые относятся к рН: 1 - 2,5; 2 - 3,0; 3 - 3,5; 4 - 4,0; 5 - 4,5.

Из рисунка 3 видно, что при всех данных активности ионов водорода и железа частное производное потенциал окислительный от активности лиганда принимает вид:

$$[\partial\varphi/\partial p_{CL}]_{pH, pC_{Fe(II)}} = v/2n(x/q - u/p) \quad (1)$$

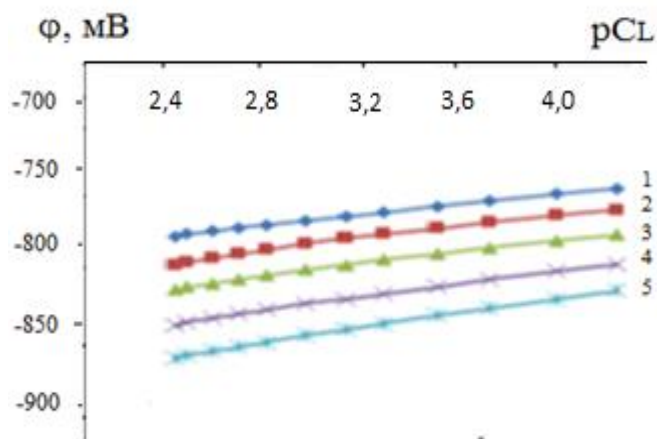


Рисунок 4. Графической зависимости комплексообразования в системы железа(II)–Мерк–вода по зависимости φ от активности лиганда при 288,15 К, I = 1,0 мол/л. Кривые относятся к рН: 1 - 2,5; 2 - 3,0; 3 - 3,5; 4 - 4,0; 5 - 4,5.

Для определения количества координированных лигандов сняты зависимости окислительный потенциал от концентрации лиганда, которые также имеют наклон тета, что говорит о присоединение одного лиганда.

Сопоставив с уравнением (1) легко можно определить, что в изучаемой системе образовались частицы моноядерного комплекса. Затем приведён общий анализ наклонов всех экспериментальных кривых, составлено стехиометрическая матрица (таблица 1).

Таблица 1.

Стехиометрическая (математическая) модель системы железо(II) – мерказолил – вода

| №, п/п | рН | Тангенсы углов наклона зависимостей | | | Состав комплексов |
|--------|-----------|-------------------------------------|-----------------------------|------------------------|--|
| | | $\varphi - \text{pH}$ | $\varphi - \text{pCFe(II)}$ | $\varphi - \text{pCL}$ | |
| 1 | 2,0 - 2,6 | 0 | 0 | 0 | $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ |
| 2 | 2,0 - 5,4 | -v | -v/2 | v/2, | $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ |
| 3 | 3,4 - 6,0 | -2v | -v/2 | v/2 | $[\text{FeHL}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$ |
| 4 | 3,6 - 6,0 | -v | -v/2 | v/2 | $[\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_4]^+$ |
| 5 | 3,8 - 6,0 | -2v | -v/2 | v | $[\text{FeL}_2(\text{H}_2\text{O})_2]^0$ |

Для осуществления расчётов равновесий по компьютерной программе за короткое время и высокой достоверностью составлена химическая модель равновесий с учетом всех существующих в системе базисных частиц которое приведено на таблице 2.

Таблица 2.

Стехиометрическая (математическая) модель системы железо(II) – мерказолил – вода и констант образования комплексных соединений при температуре 288,15 К и ионной силе раствора 0,1 моль/л

| №, n/n | Fe (II) | H | L | OH | Состав комплекса | $\lg \beta_{q,s,l,k}$ |
|------------------------------|---------|---|---|----|---|-----------------------|
| | Q | s | L | k | | |
| Констант протонизации лиганд | | | | | $\text{HL} \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{L}^-$ | $\lg K_a$ |
| Гидролизная форма | | | | | FeOH^+ | K_{1001} |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | $[\text{FeHLOH}]^+$ | β_{1111} |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | $[\text{FeHL}]^{2+}$ | β_{1110} |
| 3 | 1 | 0 | 2 | 0 | $[\text{FeL}_2]^0$ | β_{1020} |
| 4 | 1 | 0 | 1 | 0 | $[\text{FeL}]^+$ | β_{1010} |

Как видно из модели химической реакции, железо образует четырёх мономерных комплексов различного состава.

На основе окредметрических измерений по предполагаемую состава комплексов исследуемой системы была построена стехиометрическая матрица. Как видно из таблицы, в системе Fe(II)–мерк–H₂O вместе с комплексными частицами образуется гидроксоформа двухвалентного железа. Кроме того, в таблице указано значение константы протонирования лиганда (табл. 2).

Теоретическая функция окисления была использована для расчета равновесия в системе и расчета постоянной устойчивости комплексов:

$$f_T^0 = h^5 / (h^5 + \beta_{1010} K_a C_a h^4 + \beta_{1020} K_a^2 C_a^2 h^3 + \beta_{0110} K_a C_a h^3 + \beta_{1011} h^3 + \beta_{1110} K_a C_a h^3 + \beta_{1111} K_a C_a + \beta_{1001} h^2) \quad (2)$$

В уравнении (2) $\beta_{1010} K_a C_a h^4 - [\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_3]^+$; $\beta_{1020} K_a^2 C_a^2 h^3 - [\text{FeL}_2(\text{H}_2\text{O})_2]^0$; $\beta_{0110} K_a C_a h^3 - [\text{FeLOH}(\text{H}_2\text{O})_2]^0$; $\beta_{1011} K_a C_a h^3 - [\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$; $\beta_{1111} K_a C_a h^2 - [\text{FeHLOH}(\text{H}_2\text{O})_2]^+$;

Экспериментальная функция окисления рассчитана:

$$f_3^0 = C_r/C_0 \exp(\varphi - \varphi^0)n/v \quad (3)$$

с учетом уравнений (2) и (3) и позволяют графически представить зависимость окислительной функции $\lg f_3^0$ от рН раствора и показано на рис.5

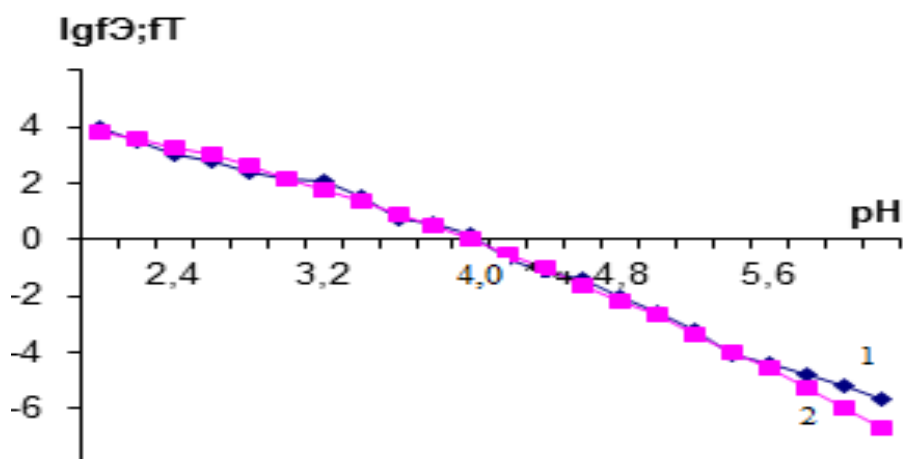


Рисунок 5. Значений экспериментальной функции - fe (1) и теоретической - ft (2) от рН

Диаграммы распределения комплексных соединений железа(II), согласно которым координация моноядерных комплексных соединений в широком диапазоне рН до 100% позволяет без труда их синтезировать. Как видно из диаграммы распределения, максимальная доля частиц FeL и FeL2 составляет от 80% до 90%

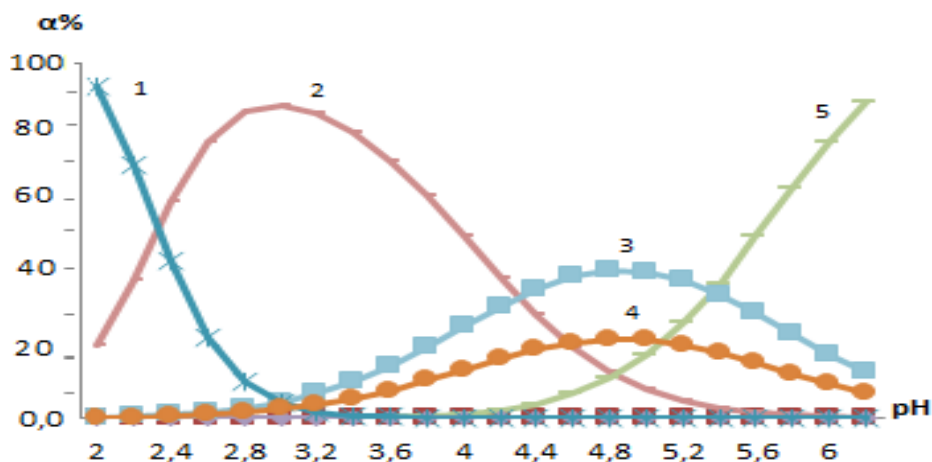


Рисунок 6. Диаграмма распределения ионов и комплексных частиц железа с мерказолилом: 1-[Fe(H₂O)₆]²⁺; 2-[FeHМерк(H₂O)₅]²⁺; 3-[FeМерк (H₂O)₄]⁺; 4-[FeHМерк(H₂O)₃ОН]⁰; 5-[Fe(Мерк)₂(H₂O)₂]⁰. T=288 К, I= 1,0 м.

Влияние ионной силы на процесс комплексобразования железа(II) с мерказолилом в водном растворе

По полученным результатам установлено, что в системе в диапазоне рН от 2,0 до 6,0 присутствуют комплексные частицы биометаллов с мерказолилом. После рН 6,0 потенциал в системе становится нестабильным, что указывает на образование гидроксидов железа(II).

При сравнении результатов констант устойчивости установлено, что с изменением ионной силы раствора изменяется и величина констант. В частности, в системе Fe(II)-мерк-Н₂O в высоком процентном отношении в растворе образуется комплексная частица [FeHL]³⁺ а в очень большом процентном соотношении - комплексное соединение [FeL₂]²⁺, содержащее [FeHLOH], имеющее отрицательное значение небольшое количество в щелочной среде. Для расчёта константы образования от ионной силы используют уравнения Дэвиса (4) и Васильева (5):

$$\lg\beta_c = \lg\beta_0 + \Delta z^2 \cdot A\gamma \cdot [(I^{1/2}/1 + I^{1/2}) - I], \quad (4)$$

$$\lg\beta_c = \lg\beta_0 + \Delta z^2 \cdot A\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + v \cdot I \quad (5)$$

Для этого нами построен график зависимости логарифма $\lg\beta_c - \lg\beta_0 + \Delta z^2 \cdot A\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2})$ от различных ионных сил, которые приведены на рисунок 7.

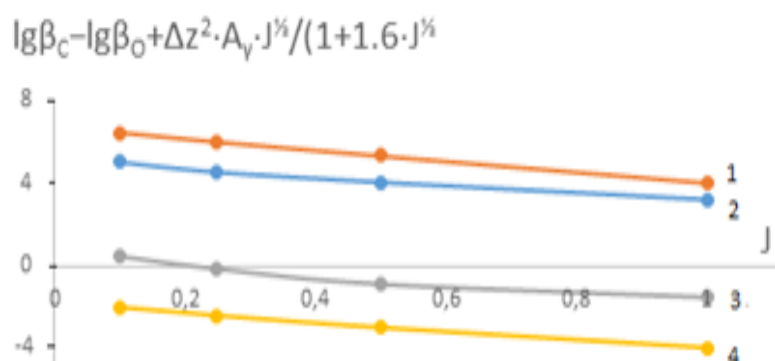


Рисунок 7. Зависимость $(\lg\beta_c - \lg\beta_0 + \Delta z^2 \cdot A\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2}))$ от ионной силы раствора при 288 К в системе Fe(II) – Мерк – Н₂O, $C_{Fe(II)} = 1 \cdot 10^{-4}$ моль/л; Кривые относятся: 1-[FeL₂]⁰, 2-[FeL]⁺, 3-[FeHL]²⁺, 4-FeLONH].

Как видно из графика зависимость $\lg\beta_{c,pslk}$ от ионных сил зависит от состава комплексов и также от природы лиганда. На рисунок 7 приведено констант устойчивости всех комплексных частиц от ионной силы в системе Fe(II)–Мерк- Н₂O и выявлено что константы уменьшаются, а после принимает постоянное значения. Причина такой значение в том, что с повышением ионной силе молекулы воды из внутренней сферы комплекса вытесняются, поэтому констант устойчивости комплексов уменьшается.

Это свидетельствует о том, что с увеличением ионной силе молекулы воды из внутренней сферы комплекса вытесняются что, приводит к незначительному уменьшению константа устойчивости. При дальнейшем увеличении ионной силе раствора сульфат ионы входят во внутреннюю сферу комплекса и констант устойчивости принимает постоянную значение. В исследованной нами системе образуются только моноядерные координационные частицы. (табл.3).

С помощью метода термического коэффициента, т.е. зависимости $\lg\beta_{c,pslk} - 1/T \cdot 10^3$ от ионной силе 0,1 - 1,0 моль/л, вычислено постоянной энтальпии

(ΔH^0) для образующихся комплексных соединений: FeHL^{2+} ; FeHLOH^+ ; FeL^{2+} ; FeL_2^{2+} .

Таблица 3.

Выражение зависимость $\lg K_{\text{обр}}$.или $\lg \beta_{\text{гпслк}}$ от ионной силы в системе $\text{Fe(II)} - \text{мерк} - \text{H}_2\text{O}$

| Состав комплекса | Выражение зависимость $\lg K_{\text{обр}}$.или $\lg \beta_{\text{гпслк}}$ от ионной силы раствора 0.1 моль/л |
|---------------------|---|
| $[\text{FeL}_2]$ | $\lg \beta_C = 7,3 + 0,508 I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,027 \cdot I$ |
| $[\text{FeHL}]^+$ | $\lg \beta_C = 5,84 + 0,508 I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,05 \cdot I$ |
| $[\text{FeL}]^{2+}$ | $\lg \beta_C = 1,52 + 0,508 I^{1/2} / (1 + 1,6 I^{1/2}) - 0,016 \cdot I$ |
| $[\text{FeHLOH}]$ | $\lg \beta_C = -1,3 + 0,508 I^{1/2} / (1 + 1,6 I^{1/2}) + 0,049 \cdot I$ |

В основном изменение свободной энергии Гиббса рассчитывалось с использованием значений константы протонирования в результате расчета выяснилось, что реакции системы экзотермичны, повышение температуры приводит к снижению устойчивости образующихся комплексных соединений (см.рис.8).

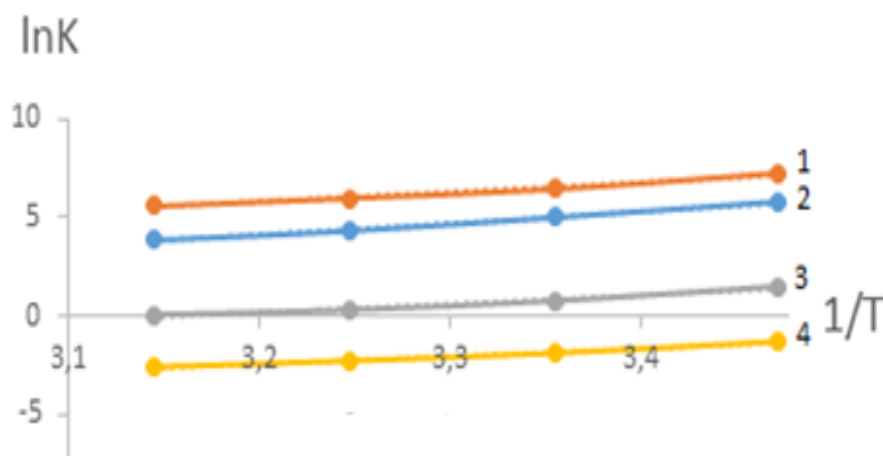


Рисунок 8. Зависимость логарифм констант устойчивости комплексов от температуры системы: $\text{Fe(II)} - \text{мерк} - \text{H}_2\text{O}$ при $J = 0,1$ моль/л. Кривые относятся к: 1 - $[\text{FeL}_2]^0$, 2 - $[\text{FeL}]^+$, 3 - $[\text{FeHL}]^{2+}$, 4 - $[\text{FeLON}]$, 5 - $[\text{FeHLOH}]^+$, 6 - $[\text{FeHL(OH)}_2]$.

На таблице 4 приведенно термодинамические функции реакций образования координационных соединений системы: $\text{Fe(II)} - \text{мерк} - \text{H}_2\text{O}$ при температуре 288 К разных ионных силах. Как видно из табл. 4 температура не оказывает влияние на значениях энтальпия (ΔH) и энтропия (ΔS) во всех комплексных соединениях. То есть с увеличением температуры и постоянной ионной силы энтальпия (ΔH) и энтропия (ΔS) постоянно, а энергия Гиббса увеличивается. Постоянное начение энтальпии согласно уравнение Кирхгоффа и энтропии с повышением температуры свидетельствует о изозарядности координационных соединений, т.е. заряд и число частицы не меняется. Большое отрицательное значение энтальпии для комплексов FeL и FeL_2 по отношению с

другими комплексами связано с образованием хелатов и высокой устойчивости. Увеличение энергии Гиббса (ΔG) с ростом ионной силы и температура на основании уравнение изобары химической реакции говорит об уменьшении устойчивости и самопроизвольности процесса образования комплексов.

Таблица 4.

Термодинамические функции реакций образования координационных соединений системы: Fe(II) – мерк – H₂O при температуре 288 К разных ионных силах

| Комплексы | Термодинамические Функции | Ионная сила, моль/л | | | |
|------------------|---------------------------|---------------------|--------|--------|--------|
| | | 0,1 | 0,25 | 0,5 | 1,0 |
| FeHL | ΔH (КДж/мол) | -115,1 | -117,2 | -118,6 | -123,3 |
| | ΔG (КДж/мол) | -32,1 | -30,8 | -29,2 | -27,2 |
| | ΔS (Дж/мол·К) | -288,3 | -300,0 | -310,2 | -334,1 |
| FeL ₂ | ΔH (КДж/мол) | -100,9 | -105,3 | -117,7 | -103,7 |
| | ΔG (КДж/мол) | -40,1 | -38,5 | -35,6 | -34,1 |
| | ΔS (Дж/мол·К) | -210,5 | -231,5 | -284,6 | -242,2 |
| FeL | ΔH (КДж/мол) | -88,2 | -90,4 | -87,2 | -84,7 |
| | ΔG (КДж/мол) | -8,37 | -6,88 | -4,73 | -3,02 |
| | ΔS (Дж/мол·К) | -276,6 | -290,4 | -286,1 | -283,4 |
| FeHLOH | ΔH (КДж/мол) | -74,3 | -81,3 | -90,4 | -91,8 |
| | ΔG (КДж/мол) | 7,15 | 8,26 | 9,36 | 11,1 |
| | ΔS (Дж/мол·К) | -284,1 | -310,5 | -346,0 | -357,3 |

Физико-химические методы исследования комплексных соединений Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазол

Комплексов железа(II) сульфата с 1-метил-2-меркаптамидазол представляет собой порошок кристаллической, с кровавым запахом и блеском металлическим. Комплексное соединение цинка сульфат с 1-метил-2-меркаптамидазол белый порошок кристаллический, без запаха с металлическим блеском.

Таблица 5

Температура плавления мерказолила, сульфата цинка, сернокислого железа и комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом

| № | Вещество | Температура плавления, °С |
|---|---------------------------------------|---------------------------|
| 1 | FeSO ₄ ·7 H ₂ O | 56-64 |
| 2 | ZnSO ₄ ·7 H ₂ O | 95-100 |
| 3 | Мерказолил | 142-144 |
| 4 | [FeL]SO ₄ | 41-46 |
| 5 | [ZnL]SO ₄ | 66-72 |
| 6 | [ZnL ₂]SO ₄ | 74-82 |

Температура плавления считается одним из важным физическим свойством веществ. Для этого нами было использовано ряд органических и неорганических растворителей чтобы определить растворимости синтезирующего

комплексного соединения железа и цинка с мерказолилом. В ниже приведенные таблицы приведены результаты растворимости полученных комплексных соединений.

Таблица 6.

Свойства растворимости коомплексов железа(II) с мерказолилом:
 $[\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_3]\text{SO}_4 \times 2\text{H}_2\text{O}$

| Природа растворителя | Свойства растворимости | Окраска раствора |
|----------------------|------------------------|-------------------|
| ДМФА | нерастворимый | Беловато - мутный |
| Диметилкетон | Нерастворимый | Беловато - мутный |
| Этанол 96% | хорошо растворимый | Бордово красный |
| Вода чистая | хорошо растворимый | Бордово красный |
| ДМСО | хорошо растворимый | Бордово - яркий |
| Трихлорметан | Нерастворимый | Беловато - мутный |

Определение молекулярной массы комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с мерказолилом криоскопическим методом

Для определения количественных характеристик полученных соединений необходимо экспериментально определить молекулярную массу этих веществ. Для определения молекулярной массы часто метод криоскопии.

$$T = K \cdot w_2 \cdot 1000 / w_1 \cdot M_r, \quad (6)$$

где K- криоскопическая постоянная растворителя, w_1 - масса растворителя, w_2 - масса растворенного вещества, M_r – молекулярная масса растворенного вещества.

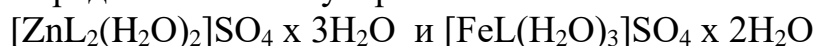
Отсюда уравнение принимает следующий вид:

$$M_r = K \cdot w_2 \cdot 1000 \setminus w_1 \cdot T \quad (7)$$

Полученные данные вычисленных по формуле (7) молярных масс и результаты синтезированных комплексных соединений приведены в таблице 7.

Таблица 7.

Результат определения молекулярная масса комплексного соединения



| Варианты р-р, вода | Масса, г. | | | Изменение температуры (ΔT) | | | Молекулярная масса | | | |
|-----------------------|-----------|-----|------|--------------------------------------|------|------|--------------------|-----|-----|-----|
| | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | Ср. |
| Zn:Merk 1:2 | 0,05 | 0,1 | 0,2 | 0,02 | 0,05 | 0,08 | 465 | 372 | 465 | 434 |
| Fe:Merk 1:1 | 0,05 | 0,1 | 0,15 | 0,03 | 0,06 | 0,08 | 310 | 310 | 348 | 323 |

Концентрационная зависимость молярной электропроводности координационных соединений цинка(II)

С помощью метода кондуктометрии измеряли молярную электропроводность (мк) моноядерных комплексов железа(II) и цинка(II) с лигандом. Как нам известно комплексное соединения которые образованы различными металлами – комплексообразователями значительно отличаются по своей устойчивости к растворителям.

По полученным данным выяснилось что синтезированные мооядерные соединений цинка с мерказолилом относятся к неэлектролитом. На таблице 8 приведено Концентрационная зависимость молярной электропроводности концентрационных соединений цинка(II) с мерказолилом.

Таблица 8

Концентрационная зависимость молярной электропроводности концентрационных соединений цинка(II) с мерказолилом состав комплекса $[Zn(H_2O)_3]SO_4$

| R, мк, Ом ⁻¹ | μ, см ² моль ⁻¹ | C, моль\л | A, нм |
|-------------------------|---------------------------------------|----------------------|-------|
| 166,5 | 166,5 | 1·10 ⁻³ | 9,51 |
| 39,6 | 198,0 | 2·10 ⁻⁴ | 11,3 |
| 10,5 | 262,5 | 4·10 ⁻⁵ | 15,0 |
| 5,90 | 737,5 | 8·10 ⁻⁶ | 42,1 |
| 2,80 | 1750,0 | 1,6·10 ⁻⁶ | 100,0 |

Исследование строения комплексных соединений спектроскопическим методом

В ИК-спектрах мерказолила наблюдаются характерные полосы на частоте 1246 см⁻¹. Таким образом, при образовании комплексной связи цинка с мерказолилом реализуется связь иона цинка с атомом серы функциональной группы тиона и пиридиновым азотом молекулы мерказолила. Результаты элементного анализа, метода дериватографии, ИК-спектроскопии и других методов использованы для определения качественного и количественного состава синтезированных комплексов (см.рис. 9.10.11).

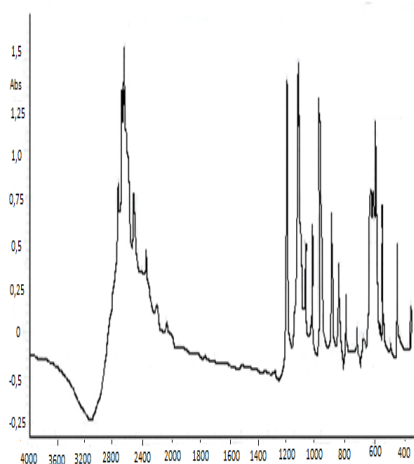


Рисунок 9. ИК спектр мерказолила при 4000 см⁻¹- 400 см⁻¹

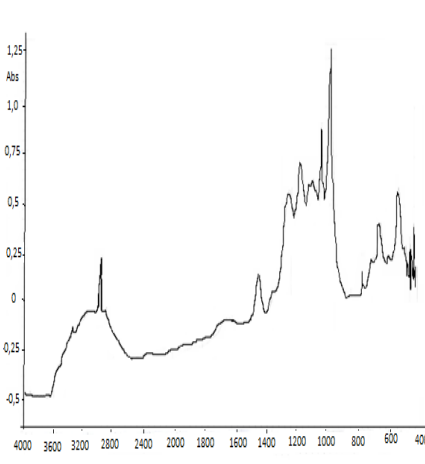


Рисунок 10. ИК спектр комплекса железа(II) при 4000 см⁻¹ - 400 см⁻¹

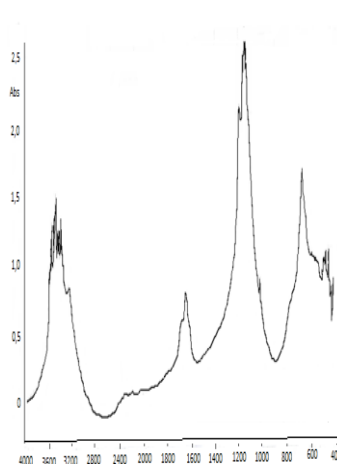
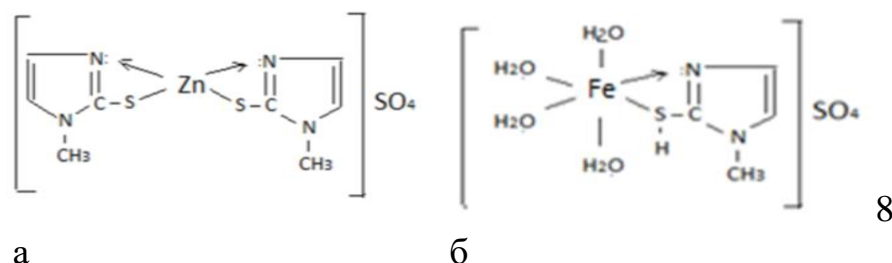


Рисунок 11. ИК спектр сульфата железа(II) при 4000 см⁻¹- 400 см

Строение и получение синтезированных комплексных соединений и их применение

Образование координационного соединения цинка с мерказолилом по номенклатуре координационных соединений представляет собой ЮУПАК - диаквaди 1-метил-2-меркаптоимидазолсульфат цинка(II) или $ZnL_2(H_2O)_2]SO_4$, который имеет строение:



L – лиганд, то есть мерказолил, а формула (8) – его графическая форма, и он был синтезирован при реакции сульфата цинка(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазол (формула 8 а).

Графическая формула железа с мерказолилом. Химическое название по номенклатуре координационных соединений – диаквaди(1-метил-2-меркаптоимидазол) сульфат железа(II)- $[FeL_2(H_2O)_2]SO_4$. (8 б)

Исследование биологической активности координационных соединений железа (II) и цинка (II) с мерказолилом

Эффективность и безопасность этих лекарственных средств устанавливается на основании результатов целого ряда научных исследований, в соответствии с международными стандартами.

В таблице 9 приведены токсичность некоторых веществ (ЛД₀₀, ЛД₅₀, ЛД₁₀₀) взаимодействованные из опыта.

Таблица 9

Токсические свойства комплексов

| Летальная доза | Железа с мерказолилом | Цинк с мерказолилом |
|-------------------|-----------------------|---------------------|
| ЛД ₀₀ | 800мг/кг | 1000мг/кг |
| ЛД ₅₀ | 1000мг/кг | 1200мг/кг |
| ЛД ₁₀₀ | 1320мг/кг | 1600мг/кг |

Для того чтобы определить стимулирующие свойства комплексных соединений на основе цинка и мерказолила, за один-два дня до опыта необходимо аккуратно и осторожно подстричь ножницами волосы на спине кроликов и крыс. Кожа животного не должна иметь механических повреждений, поэтому для очистки кожи не следует использовать депилятор.

После проведения нескольких экспериментов выяснилось, что комплекс цинка с Мерказолилом не обладает раздражающими свойствами кожи и глаз животных в установленном стандарте. Таким образом, после проведенного нами биологического анализа выяснилось, что синтетическое комплексное соединение цинка с мерказолилом в дозе до 1000 мг/кг не причиняет никакого

вреда живому организму. Доза (LD50) составляет 1200 мг/кг, а летальный уровень, при котором наступает смерть экспериментальных животных, составляет 1600 мг/кг.

Определение антиоксидантных свойств синтезированных соединений железа(II) с мерказолилом методом спиновых меток-ЭПР

Для этого в раствор этилового спирта с концентрацией нитроксильного радикала $4 \cdot 10^{-3}$ моль/л добавляли 0,2 г комплекса железа (II) с мерказолилом. Работа проводилась на радиоспектроскопе РЭ-1306. Для изучения изменений молекулярной динамики биологических, химических, медицинских и биофизических соединений наиболее эффективным методом является метод спин-сигнала ЭПР. Этот метод основан на связывании и чувствительности молекулярного движения макромолекул. Методом ЭПР определено количество центров изучаемых объектов, участвующих в связывании комплекса железа(II) с мерказолилом, со спиновыми знаками.

Результаты показали, что появление нового компонента сигнала ЭПР, связанного с быстро циркулирующим радикалом, свидетельствует о появлении ультратонкой структуры (СТС) и повышении антиоксидантных свойств исследованных образцов.

ВЫВОДЫ

1. Методом окислительного потенциала изучены процессы комплексообразования в системах Fe(0)-Fe(II)-мерказолил-вода и Zn(0)-Zn(II)-мерказолил-вода с применением стального и амальгамированного электрода цинка. Выявлено образование четырёх координационных соединений двухвалентного железа: FeHL, FeHLOH, FeL, FeL₂ и трёх координационных соединений цинка с мерказолилом: ZnHL, ZnL, ZnL₂ [1-A, 2-A, 3-A].

2. С помощью метода окислительного функции Юсуфова впервые определены равновесные модели комплексов железа(II) и цинк(II) с мерказолилом [4-A, 5-A, 6-A].

3. Для систем Fe(0)-Fe(II)-мерк-вода и Zn(0)-Zn(II)-мерк-вода впервые составлены химические равновесия комплексообразования, выведены эмпирические уравнения зависимостей логарифмов констант образования комплексов от ионной силы раствора. Рассчитаны стабильности моноядерных комплексов при различных ионных силах и температурах по сравнению с уравнением Васильева [7-A, 8-A, 9-A, 10-A, 11-A, 12-A, 13-A].

4. Анализированы и усовершенствованы методы синтеза комплексов железа(II) и цинка(II) с мерказолилом. Оказалось, координирование атомов цинка(II) и железа(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазолом происходит через атом серы, азота пиридина имидазольного цикла [14-A].

5. Изучены хронические, острые, токсические, аллергенные, раздражающие и антиоксидантных свойств комплексов цинка(II) и железа(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазола. Установлено, что синтезированные комплексы цинка(II) и железа(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазола является малотоксичным, не вызывают раздражения и аллергии [15-A].

Рекомендации по практическому использованию результатов

-Полученные научные результаты по комплексообразованию цинка (II) и железа (II) с мерказолилом могут быть использованны для объяснения и прогнозирования процессов комплексообразования биометаллов с биолигандами.

-Результаты полученные экспериментальными данными и расчёты констант устойчивости цинка(II) и железа(II) с мерказолилом могут использоваться как справочный материал, для научных сотрудников в сфере синтеза, а также может быть использован для студентов кафедры физической и коллоидной химии Таджикского национального университета, возможное применение при выполнении научных, исследовательских работ аспирантами и соискателями, студентами вузов химического и медицинского профиля.

Список публикаций соискателя учёной степени

Статьи в рецензируемых журналах:

[1–А]. **Камолова И.У.** Комплексообразование железа(II) с мерказолилом при 298К и ионной силе 1,0 моль/ С.Г Ёрмамадова., И.У Камолова., У.Р. Раджабов// Доклады национальной академии наук Таджикистана -2021. -Т.64. - №11-12. –С. 694-700.

[2–А]. **Камолова И.У.** Соединения железа(II, III) с метионином. / С.Г Ёрмамадова., И.У Камолова., У.Р. Раджабов, А Мадиномов // Доклады национальной академии наук Таджикистана. - 2022. –Т.65 -№:11-12. -С.761-767.

[3–А]. **Камолова И.У.** Исследование процессов комплексообразования в системе Fe(II)–Мерказолил–Н₂O-методом оксредметрии/ С.Г Ёрмамадова., И.У Камолова., У.Р. Раджабов// Весник МГТУ им. Н.Э.Баумана. серии Естественные науки. -2023. С.70-82

[4–А] **Камолова И.У.** Зависимость процессов комплексообразования железа(II) с мерказолилом от ионной силы раствора. / И. Камолова // Известия национальной академии наук Таджикистана. -2023. -№1(190). -С. 72-78.

Публикация в других изданиях:

Статьи, опубликованные в материалах международных и республиканских конференций:

[5-А]. **Камолова И.У.** Комплексообразование железа (II) с мерказолилом при 298К / С.Г. Ёрмамадова., И.У. Камолова., У.Р. Раджабов // Республиканская научно-практическая конференция профессорско-преподавательского состава и сотрудников ДМТ, посвященная 30-летию Независимости Республики Таджикистан, 110-летию Народного Поэта Таджикистана, Героя Таджикистана Мирзо Турсунзаде. 110-летию писатель Таджикистана Сотим Улугзода и «Двадцать лет изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)», – Душанбе. - 2021. – С.48.

[6-А]. **Камолова И.У.** Зависимость процессов комплексообразования железа(II) с мерказолилом от ионной силы раствора / С.Г. Ёрмамадова, И.У Камолова, У. Раджабов // Республиканская научно-практическая конференция преподавателей и сотрудников ДМТ, посвященная «Годам индустриального

развития (2022-2026)» и «Мавлоно Джалалиддин Балхи». - Душанбе, -2022. С. 291-293.

[7-А]. **Камолова И.У.** Исследование процессов комплексобразования Zn(II) и Fe(II) с ацетилцистеином / У.Р. Раджабов., Р.А. Султонов., С.Г. Ёрмамадова., Г. Наврузова, И.У. Камолова // Сборник статей республиканской научно-практической конференции на тему «Развитие и перспективы химической науки в Республике Таджикистан», посвященной 60-летию химического факультета и чествованию памяти химического факультета, профессора, академика Академии наук Республики Таджикистан Нуъмонов Ишанкул Усмонович (12-14 сентября 2020 г.). -Душанбе - 2020. -С. 67-71.

[8-А]. **Камолова И.У.** Комплексное соединение железа(II) с мерказолилом при 298 К, $J=0,25$ моль/л/ С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раджабов // Материалы республиканской конференции с участием зарубежных ученых по теме «Сложные соединения и аспекты их использования», посвященной «70-летию памяти члена-корреспондента НАНТ, доктора химических наук, профессор Аминжонов Азимжон Олимович» (20-21 октября 2021 г.) – Душанбе. - 2021. - С. 147-149.

[9-А]. **Камолова И.У.** Комплексообразование железа (II) с мерказолилом при 298 К и ионной силе 1,0 моль/л/ С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раджабов // Материалы международной научно-практической конференции на тему «Развитие химической науки и областей ее применения», посвященной 80-летию чествования памяти д.х.н., члена-корреспондента НАНТ, профессора Кимсанова Бури Хакимовича (10 ноября 2021 г.) - Душанбе. - 2021. - С. 197-199.

[10-А]. **Камолова И.У.** Изучение комплексобразование железа(II) с мерказолилом при 298 К и ионной силе 0,1 моль/л./ У. Раджабов, С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова. // Сборник статей 5-й научно-международной конференции по теме «Проблемы физической и координационной химии», посвященной чествованию памяти докторов химических наук, профессоров Хамида Мухсиновича Якубова и Зухуриддина Нуриддиновича Юсупова (15-16 ноября 2021 г.) - Душанбе. - 2021. - С.87-90.

[11-А]. **Камолова И.У.** Комплексное соединение железа(II) с мерказолилом при 298 К и ионной силе 0,1 моль/л./ И.У. Камолова, С.Г. Ёрмамадова, У. Раджабов // «Современная медицина: Традиции и инновации». Юбилейная (70-я) научно-практическая конференция ГОУ ТГМУ им. Абуали ибни Сино с международным участием. -Душанбе -2022. -С.133-136.

[12-А]. **Камолова И.У.** Зависимость ионной силы раствора в системе Fe(II) – Fe (0) – Мерк – H₂O. / И.У. Камолова, С.Г. Ёрмамадова, У. Раджабов // Республиканская научно-практическая конференция на тему «Современное состояние и перспективы физико-химического анализа», посвященная объявлению четвертой стратегической цели индустриализации страны, 2022-2026 годы промышленного развития, 65-летию со дня создания кафедры «Общей и

неорганической химии» и чествование чести деятеля науки и техники Таджикистана, доктора химических наук, профессора Лутфулло Солиева (15-16 марта 2023 г.) – Душанбе. - 2023,- С.45

[13-А]. **Камолова И.У.** Влияние ионной силы на процесс комплексообразования в системе Fe(II)-Мерк-Н₂O при температуре 308 К. / И.У. Камалова, С.Г. Ёрмамадова, У. Раджабов // Международная научно-практическая конференция на тему «Развитие новых направлений в химии и химической технологии», посвященная чествованию памяти академика НАНТ, доктора химических наук, профессора Сафиева Хайдара (26 октября 2023 г.). - Душанбе, - 2023, С.172-175

[14-А]. **Камолова И.У.** Комплексообразования Fe(II) – мерказолил – Н₂O методом оксрeдметрии. / И.У. Камалова, С.Г. Ёрмамадова, У. Раджабов. // Всероссийская школа – конференция молодых ученых «Дни науки в ИГХТУ» (24-28 апреля 2023 года).-г.Иванова. -2023,- С.124-126.

Патент Республики Таджикистан

[15-А] **Камолова И.У.** Комплексное соединение диаквaди (1-метил-2-меркаптоимидазол) цинк (II) сульфата, обладающий метаболической активностью./ С.Г. Ёрмамадова, У.Р. Раджабов, И.У. Камолова, К. Далери, З.А. Шоздарова // Патент РТ № ТJ/1217. 2021.

Ба ҳуқуқи дастнавис

ВБД: 546.621:622.7(575.3)

ТБК:24.5(2Т)

К-18

КАМОЛОВА Иқлима Усмоновна

**РАВАНДҲОИ КОМПЛЕКСҲОСИКУНИИ Fe(II) ВА Zn(II) БО
МЕРКАЗОЛИЛ**

АВТОРЕФЕРАТИ

диссертатсия барои дарёфти

дараҷаи доктори фалсафа (Ph.D) – доктор аз рӯи ихтисос

6D060600 - «Химия» (6D060604- Химияи физикӣ)

Душанбе -2024

Тадқиқотҳо дар кафедраи химияи физикию коллоидӣ ва кафедраи татбиқии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро шудааст.

Роҳбари илмӣ: **Ёрмамадова Саврибегим Гулмамадовна** - номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи татбиқии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Мушовири илмӣ: **Раҷабов Умаралӣ** - доктори илмҳои химия, профессори кафедраи химияи фарматсевтӣ ва захршиносии МДТ «Донишгоҳи давлатии тибби Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино»

Муқарризон: **Қурбонов Амиршо Соҳибназарович** - доктори илмҳои химия, дотсенти кафедраи “Химияи органикӣ ва биологӣ”-и Донишгоҳи миллии Бохтар ба номи Носири Хусрав

Камилов Хуршед Чулибаевич - номзади илмҳои химия, муаллими калони кафедраи математика ва табиатшиносии ДДМ ба номи М.В. Ломоносов, филиали ДДМ дар ш. Душанбе

Ташкилоти пешбар Донишгоҳи давлатии омӯзгории Тоҷикистон ба номи С. Айнӣ, кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикӣ

Ҳимояи диссертатсия « 05 » декабри _____ соли 2024, соати « 13:00 » дар ҷаласаи шурои диссертатсионии 6D.KOA-010 назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон дар бинои асоси, ошёнаи 2, ТШД баргузор мегардад. Суруға 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ, 17.

E-mail: ikromovich80@mail.ru

Бо мухтавои диссертатсия ва фишурдаи он тавассути сомонаи интернетии www.tnu.tj ва дар китобхонаи марказии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бо нишонаи 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ, 17 шинос шудан мумкин аст.

Автореферат санаи « _____ » _____ соли 2024 ирсол гардидааст.

Котиби илмии Шурои диссертатсионӣ,
номзади илмҳои химия



Бекназарова Н.С

Муқаддима

Мубрамии мавзӯи таҳқиқот. Дар асоси таҳлили адабиёт маълум гардид, ки солҳои охир оид ба синтез ва таҳқиқи хосиятҳои физикӣ-химиявии пайвастагиҳои нави координатсионии ионҳои металлҳои интиқоли бo гетеросиклҳои нитрогендор, аз ҷумла имидазолҳо асарҳои зиёде ба таърифи расидаанд [Юсупов З.Н. 1998]. Пайвастҳои координатсионии ионҳои металлҳои интиқоли дар асоси лигандҳои нитрогендор ва сулфурдор хосияти баланди фармакологӣ доранд [Бобиев Г.М., 2000]. Муқаррар карда шудааст, ки ин моддаҳо қисми таркибии организмҳои зинда буда, дар табиат васеъ паҳн шудаанд.

Бояд гуфт, ки ҳангоми бo пайвастагиҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол, аз ҷумла азолҳо таъсир намудани биометалҳои руҳ ва оҳан пайвастагиҳои комплексие ҳосил мешаванд, ки дорои фаъолияти биологӣ хос мебошанд. Самаранокӣ ва мавҷудияти руҳ дар меъдаи ҳоли аз 39 то 89% аст. [Алексеев В.А.1992]. Дар адабиёти илмӣ оид ба синтез ва сохти пайвастагиҳои мураккаби металлҳои гуногун бo ҳосилаҳои имидазол ҳам дар маҳлулҳои обӣ ва ҳам дар моддаҳои органикӣ маълумоти зиёде мавҷуд аст.

Дар соҳаи химияи доруворӣ ҳосилаҳои имидазол мавқеи муҳимро ишғол мекунанд. Таркиб ва устувории комплексҳои ҳосилшуда бo имидазол ва баъзе ҳосилаҳои он муайян карда шудаанд [Раҷабов У., Юсуфов З.Н., 2007]. Дар айни замон дар адабиёт оид ба хосиятҳои фармакологии металлҳо бo мерказолил маълумот мавҷуд нест. Имрӯз пайвастагии координаторӣ (1-метил-2-меркаптамидазол) бo металлҳо васеъ истифода мешавад. [Комлева Н.А. 2021]. Аз ин рӯ, омӯзиши комплексҳои Zn(II) ва Fe(II) бo (1-метил-2-меркаптамидазол) муҳим аст.

Дарачаи таҳқиқи мавзӯи илмӣ. Дар ин қор равандҳои комплексҳосилкунии мерказолил бo оҳан (II) ва руҳ (II) омӯхта шуд, шароитҳои ҳосилшавии комплексҳо аниқ карда шуда, моддаҳои ҳосилшуда дар таҷриба санҷида шуданд. Инро ба назар гирифта, ҳангоми омӯзиши комплексҳо таъсири омилҳо (табиати ҳалкунанда, таъсири ҳалкунандаи ғайриобӣ ба таркиб ва устувории комплексҳои ҳосилшаванда) санҷида шуд. Муқаррар карда шуд, ки ба таркиб ва устувории пайвастагиҳои комплекси ҳосилшуда ҳам табиати метал-комплексҳосилкунанда, ҳалкунанда ва ҳамчунин ацидолигандҳои органикӣ таъсир мерасонанд.

Пайвастанӣ тадқиқот бo барномаҳо (лоиҳаҳо) ё мавзӯҳои илмӣ.

Рисола дар кафедраи химияи физикӣ ва коллоидӣ, химияи татбиқии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, Институти илми таҳқиқотии назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, кафедраи химияи фарматсевтӣ ва захршиносӣ, Пажӯҳишгоҳи марказии илми тадқиқотии тиббӣ бунёдии Муассисаи давлатии таълимии «Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи Абӯалӣ ибни Сино» мутобиқ ба лоиҳаи

фармоишии буҷети Ҷумҳурии Тоҷикистон аз рӯи мавзуи «Синтез, хосияти физико-химиявӣ ва биологии пайвастагиҳои комплекси биометалҳо бо як қатор азолҳо ва аминокислотаҳо» рақами бақайдгирии давлатиаш 0121ТJ1208, санаи бақайдгирӣ 20. 05 соли 2021.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқот: таҳқиқи равандҳои комплексҳосилкунии Fe(II) ва Zn(II) бо 1-метил-2-меркаптомидазол (мерказолил) бо истифода аз усули оксредметрӣ, тавсифи термодинамикии реаксияи комплексҳосилкунии Fe(II) ва Zn(II) с бо мерказолил дар қувваҳои ионии гуногун 0,1; 0,25; 0,5; 1,0 мол/л ва ҳароратҳои гуногун, ёфтани шароити ҳосилшавии пайвастагиҳои координасионӣ, инчунин истифодаи онҳо мебошад.

Вазифаҳои таҳқиқот:

- бо истифода аз усули потенциали оксидшавӣ, механизмҳои пайдоиши комплексо дар системаҳои Fe(0)-Fe(II)-Мерк-Н₂O ва Zn(0)-Zn(II)-Мерк-Н₂O дар қувваҳои гуногуни ионӣ ва ҳароратҳо омӯхта шуданд;

- бо истифода аз потенциали оксидшавӣ, реаксияҳои мувозинати ҳосилшавии комплексҳои оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил тартиб дода шуданд;

- муайян кардани табиати лиганд ва таъсири он ба раванди комплексҳосилкунӣ дар маҳлул, ва ҳисоби термодинамикӣ дар системаи Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазолом;

- ёфтани шароити оптималӣ барои синтези пайвастиҳои координатсионии Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил, муайян кардани сохт ва таркиби онҳо бо ёрии усулҳои физикию химиявӣ;

- муайян кардани захнокӣ аз ҷумла (захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагии комплексҳои Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил.

Объекти омӯзиш: пайвастагиҳои мураккаби Fe(II) ва Zn(II) бо 1-метил-2-меркаптоимдазол

Соҳаи тадқиқот: Синтези пайвастагиҳои нави мураккаби оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил бо усулҳои физикӣ-химиявӣ, омӯзиши хосиятҳои биологии пайвастагиҳои мураккаби оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил дар тибби байторӣ.

Навоварии илмии кор:

1. бо усули функцияи оксидонӣ реаксияи ҳосилшавии пайвасти комплекси Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил омӯхта шуд;

2. таркиби комплексҳои Fe(II) ва Zn(II) бо 1-метил-2-меркаптоимдазол дар муҳити обӣ дар ҳудудҳои гуногун муайян карда шуд.

3. бори аввал шароити синтез кардани пайвастагиҳои координатории оҳан(II) ва руҳ(II) бо 1-метил-2-меркаптамидазол муайян карда шуданд;

4. Бо усулҳои таҳлили элементӣ, спектроскопияи инфрасурх, кондуктометрия, криоскопия, дервотография ва резонанси электропарамагнитӣ таркиб ва сохти пайвасти комплекси Fe(II) ва Zn(II) бо 1-метил-2-меркаптоимидазол муайян карда шуд;

5. Барои муайян кардани механизмҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ характеристикаҳои термодинамикии реаксияҳои комплекси ҳосилшавии оҳан ва руҳ бо 1-метил-2-меркаптоимидазол ҳисоб карда шуданд;

6. Хосиятҳои захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагии комплексҳои Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазол бори аввал омӯхта шуданд.

Аҳамияти назариявӣ тадқиқот. Натиҷаҳои дар рафти тадқиқот ба даст овардашуда аҳамияти таҳкурсии доранд ва онҳоро барои истеҳсоли доруҳои ветеринарӣ истифода бурдан мумкин аст:

Аҳамияти илмию амалии тадқиқот:

-қиматҳои пайдошудаи константаҳои устувории пайвастагиҳои мураккаби оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил метавонанд ҳамчун маводи истинодӣ барои пур кардани камбудии мавҷуда дар адабиёт хидмат кунанд ва барои олимони тадқиқотӣ, ки комплексҳои металлҳои интиқолий бо лигандҳои сулфурдор ва нитрогендорро меомӯзанд, муфид хоҳад буд, инчунин барои синтези пайвастагиҳои нав дар соҳаи химияи координационӣ;

-тарзи синтези пайвастагиҳои координатсионие, ки дар ин кор омӯхта шудаанд, метавонанд дар синтези мақсадноки пайвастагиҳои нави координатсионии дигар металлҳои гузаранда, ки лигандҳои сулфурдор ва нитрогендор доранд, истифода шаванд;

-натиҷаҳои дар кори диссертационӣ ба даст овардашуда базаи маълумотро оид ба ташаккули комплекси биометаллҳо васеъ намуда, барои аспирантҳо, ки дар соҳаҳои химияи физикӣ ва коллоидӣ кор мекунанд, инчунин барои устодон ва донишҷӯён ҳангоми хондани лексияҳо, курсҳои махсус ва навиштани рисолаи хатмии онҳо муфид бошанд;

-моддаҳои синтезшуда дар асоси пайвастагиҳои координатсионии оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил метавонанд барои пешгирӣ ва табобати бисёр бемориҳои, ки бо ғадуди сипаршакл ва системаи иммунӣ алоқаманданд, истифода шаванд.

Нуқтаҳои ба ҳимоя пешниҳодшаванда:

- натиҷаҳои комплексҳои ҳосилшудаи Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил, таркиб ва бо усули потенциали оксидонӣ нуқтаи максималии ҳосилшавии комплексҳо дар кор оварда шудааст;

- бо ёрии муодилаи функцияи оксидонӣ ва инчунин муодилаи Юсупов натиҷаҳои амалию назариявӣ ҳисоб карда шуданд;

- натиҷаҳои константаҳои устувории Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил

оварда шудааст;

- шароитҳои оптималии синтези комплексҳои Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил

- натиҷаҳо аз рӯи усулҳои таҳлили элементарӣ, спектроскопияи инфрасурх, гузаронандагии электрӣ, криоскопия, дервотография ва резонанси электропарамагнитӣ;

- натиҷаҳои хосиятҳои захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагӣ ва антиоксидантии пайвастагиҳои синтезшуда;

Усулҳои тадқиқот. Дар тадқиқот усулҳои физикӣ-химиявӣ, таҳлили марҳилаи рентгенӣ (ТРФ), кондуктометрия, ИС-спектроскопияи криоскопия, акваметрия, таҳлили элементӣ, спектроскопияи ултрабунафш (УФ), термогравиметрия, ЭПР-нишони спинӣ ва дигар усулҳои таҳлили кимиёвӣ барои ба даст овардани натиҷаҳои дуруст бо дақиқии баланд истифода шуданд.

Коркарди иттилоот бо истифода аз бастаи нармафзори Microsoft Office Excel ва ANSYS CFX анҷом дода шуд.

Марҳилаҳои тадқиқот. Дар марҳилаи аввал (2020-2021) таҳлили адабиёт оид ба мавзӯи кор гузаронида шуд; Аҳамияти он муқаррар карда шуда, ҳадаф ва вазифаҳои тадқиқот муайян карда мешаванд.

Дар марҳилаи дуюм (2021-2022) равандҳои координатсияшавии оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил дар маҳлул дар қувваҳои ионӣ ва ҳароратҳои гуногун омӯхта шуданд.

Дар марҳилаи сеюм (2022-2023) пайвастагиҳои мураккаби оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил синтез карда шуданд. Оид ба асосҳои физикӣ-химиявии пайвастагии комплекси синтезшуда барои омӯхтани сохтор ва муайян кардани пайвастагиҳои комплекси оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил бо истифода аз усулҳои таҳлили элементарӣ, ИС-спектроскопияи гузарониши молярии электрикӣ гузаронида шуданд, деривотография ва усули ЭПР-спин хосиятҳои биологӣ пайвастагиҳои оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил омӯхта, хулосаҳои аз рӯи тадқиқот оварда шудаанд ва нақшаҳои рисола анҷом дода шуданд.

Маълумоти асосӣ ва базаи таҷрибавӣ. Кафедраи химияи физикии коллоидӣ ва амалии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон, кафедраи химияи фармасевтию токсикологӣ ва лабораторияи марказии тадқиқотии Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи А.Сино дар шаҳри Душанбе.

Дарҷаи эътимоднокии натиҷаҳо: эътимоднокии маълумоти гирифташуда бо истифода аз тариқаҳои муосири таҳқиқоти физикӣ ва химиявӣ ва коркарди омории натиҷаҳо кафолат ва асоснок карда шуд. Таркиб, муҳити ҳосилшавӣ, константаи устуворӣ ва фоизи зиёди ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ, оҳани(II) ва руҳ(II) бо мерказолил тавассути тариқаи оксредметрӣ ва истифодаи функсияи оксидонии назариявӣ ва таҷрибавии Юсуфов амалӣ карда шуд; натиҷаҳои синтез

таркиб ва сохти пайвастагиҳои комплекси оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил бо усулҳои таҳлили элементӣ, спектроскопияи ИС, интиқоли барқи молярӣ, криоскопия, дервотография ва усули ЭПР-спинӣ муайян карда шуд; хосиятҳои биологии пайвастагиҳои комплекси оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил (1-метил-2-меркаптамидазол) захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагӣ тавассути тариқаи Першен муайян карда шуд.

Мутобиқати диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси илмӣ.

Мазмуни кори диссертатсия дар мавзуи «Раванди комплексошавии Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил» ба паспорти ихтисоси 6D060600 - «Химия» (6D060604-Химияи физикӣ) аз руи пунктҳои зерин мувофиқ аст:

- термодинамикаи химиявӣ; омӯзиши мувозинати химиявӣ;
- механизмҳои мураккаби равандҳои химиявӣ, равандҳои обшавӣ ва кристалшавӣ;
- назарияи маҳдудҳо, таъсири мутақобилаи байнимолекулаҳо ва байнизарраҳо;
- алқамандии қобилияти реаксионии реагентҳо сохти онҳо ва шароити ба амал омадани реакцияҳои химиявӣ

Саҳми шахсии муаллиф: муаллифи рисола ҳадаф ва вазифаҳои тадқиқотро мураттаб кардааст, ҳама маълумоти таҷрибавиро шахсан ё дар ҳамкорӣ бо роҳбари илмӣ ба даст овардааст, натиҷаҳоро шарҳ додааст, хулосаҳо таҳия кардааст, мақолаҳо омода ва нашр кардааст.

Тасвиб ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия:

Натиҷаҳои диссертатсия дар конференсияҳои ҷумҳуриявӣ ва берун аз он муҳокима шуданд: конференсияи илмию амалии МДТ «ДДТТ ба номи Абуалӣ ибни Сино» бо иштироки олимони хориҷӣ «Нақш ва ҷойгоҳи технологияҳои инноватсионӣ дар тибби муосир» (Душанбе 2018), Конференсияи ҷумҳуриявии илми-амалӣ бо (иштироки олимони хориҷӣ) дар мавзуи " Истифодабарии технологияи нав дар илм», «Илмҳои дақиқ дар муассисаҳои олий», бахшида ба 150-солагии системаи даврии элементҳои химиявии Д.И. Менделеев (Душанбе, 2019), Маҷмӯаи мақолаҳои конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-амалӣ дар мавзӯи «Рушд ва дурнамои илми кимиё дар Ҷумҳурии Тоҷикистон» бахшида ба 60-солагии факултети химия ва гиромидошти хотираи олими факултети химия, профессор, академики Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон Нӯъмонов Ишонқул Усмонович (Душанбе 2020), конференсияи ҷумҳуриявии илмию амалии факултети химия иттиҳодияи муаллимон ва кормандони ДМТ бахшида ба 30-солагии истиқлолияти Ҷумҳурии Тоҷикистон, 110-солагии шоири халқии Тоҷикистон, Қаҳрамони Тоҷикистон Мирзо Турсунзода, 110-солагии зодрузи нависандаи халқии Сотим Улуғзода ва «Бист соли таълим ва рушди илмҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (2020-2040)» (Душанбе 2021),

конференсияи ҷумҳуриявии илмию амалии профессорону омӯзгорон ва кормандони ДМТ, баҳшида ба «Солҳои рушди саноат (2022-2026)» ва «Мавлоно Ҷалололдини Румӣ» (Душанбе 2022), конференсияи илмию амалии МДТ “ДДТТ ба номи Абуалӣ ибни Сино” бо иштироки байналмилали «Тибби муосир, анъана ва инноватсия» (Душанбе-2022), конференсияи илмӣ-амалӣ дар мавзуи «Нақши муосир ва дурнамои таҳлили химияи физикӣ», баҳшида ба эълони Ҳадафи чоруми АМИ ҶТ Стратегияи индустрикунонии кишвар, солҳои 2022-2026, (Душанбе 2023), Конфоронсияи умумиславонии олимони ҷавон «Рузҳои илм дар ИрГТУ» (Иванов, 2023 с.)

Интишорот аз рӯйи мавзӯи диссертатсия. Доир ба мавзӯи диссертатсия 15 мақолаи илмӣ, аз ҷумла 4 мақола дар маҷаллаҳои тавсиякардаи Комиссияи олии аттестатсионии Федератсияи Россия ва Ҷумҳурии Тоҷикистон, 10 тезисҳои маърузаҳо дар маҷлаҳои конференсияҳои байналмиллалӣ, ҷумҳуриявӣ, минтақавӣ ва 1 патенти хурди Ҷумҳурии Тоҷикистон ба таърифи расидаанд.

Соҳтор ва ҳаҷми диссертатсия: Рисола аз мукаддима, чор боб, хулоса, рӯйхати адабиёт 130 номгӯй ба забонҳои хориҷӣ иборат аст. Ҳаҷми умумии рисола 141 саҳифа буда, аз 65 расм ва 41 ҷадвал иборат аст.

МУНДАРИҶАИ АСОСИИ ҚОР

Дар сарсухан диссертант дар аввал мубрамияти тадқиқот, вазифаҳои тадқиқот, мақсади тадқиқотро оварда боз дар қисмати маскур оиди объекти асосӣ ва усули таҳқиқот, соҳа ва марҳилаи тадқиқот, маълумоти асосӣ ва базаи таҷрибавӣ, дараҷаи эътимоднокии натиҷаҳо ва нағзони қор, аҳмияти назариявӣ ва илмии тадқиқот овардааст. Нуқтаҳои асосии рисола ба ҳимоя пешниҳодшуда номбар шудаанд.

Дар боби аввал шарҳи адабиёт оиди комплексҳосилкунии биометалҳо бо лигандҳои органикӣ хусусан оҳан ва руҳ бо мерказолил оварда шудааст.

Дар боби дуюм натиҷаҳои раванди комплексҳосилкунӣ дар системаи $Fe(II)$ –мерк- Na_2SO_4 – H_2O и $Zn(II)$ –мерк- Na_2SO_4 – H_2O дар қувваҳои ионӣ ва ҳарорати гуногун оварда шудааст.

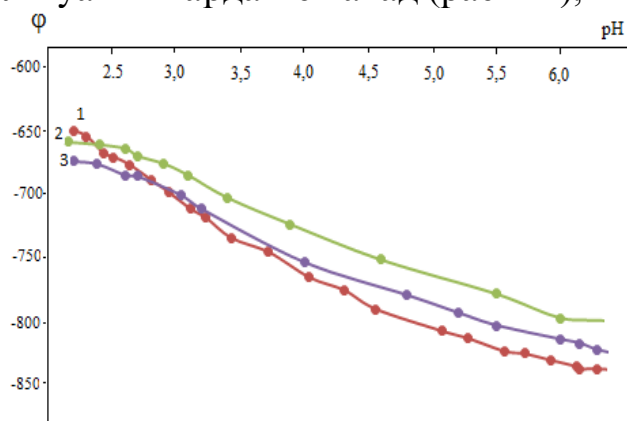
Дар боби сеюм соҳт ва ҳосияти пайвастагиҳои комплекси бо истифода аз усулҳои физикӣ-химиявӣ оварда шудааст.

Дар боби чорум оиди фаъолияти биологии пайвастагиҳои синтезкардашудаи оҳан (II) ва руҳ(II) бо мерказолил оварда шудааст.

ТАҲҚИҚИ РАВАНДИ КОМПЛЕКСҲОСИЛКУНӢ ДАР СИСТЕМАИ $Fe(0)$ – $Fe(II)$ –МЕРК– H_2O ВА $Zn(0)$ – $Zn(II)$ –МЕРК– H_2O

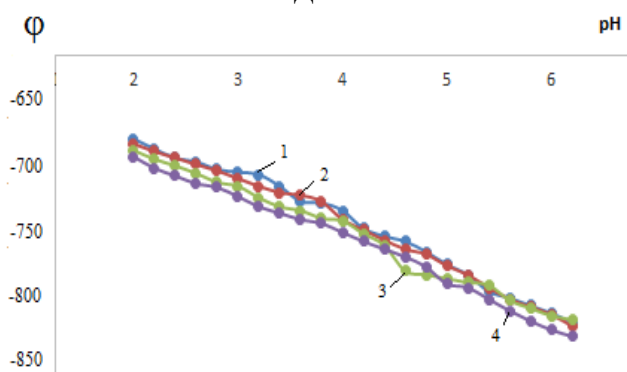
Барои муайян кардани муҳити ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ вобаста ба рН-и маҳлул усули оксирадиометрӣ истифода мешавад. Таваҷҷути зарифи кунҷӣ миқдори умумии лиганд дар таркиби

пайвасти комплекси ҳосилшуда муайян карда мешавад. Бо таҳлили вобастагии потенциали оксидшавӣ ба консентратсияи ионҳои гидроген, реаксияи ҳосилшавии комплексҳо ва бартарии Fe(II) ва Zn(II) бо 1-метил-2-меркаптамидазол муайян карда мешавад (расми 1);



Расми 1. Вобастагии графикаи потенциали оксидонӣ (ϕ) аз рН маҳлул дар системаи Fe(II)–Мерк–H₂O дар ҳарорати 298,15 К ва қувваи ионии 0,1 моль/л; $C_L = 1 \cdot 10^{-2}$ ва $C_{Fe(II)}: 1 - 1 \cdot 10^{-4}; 2 - 2.0 \cdot 10^{-4}; 3 - 3.0 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

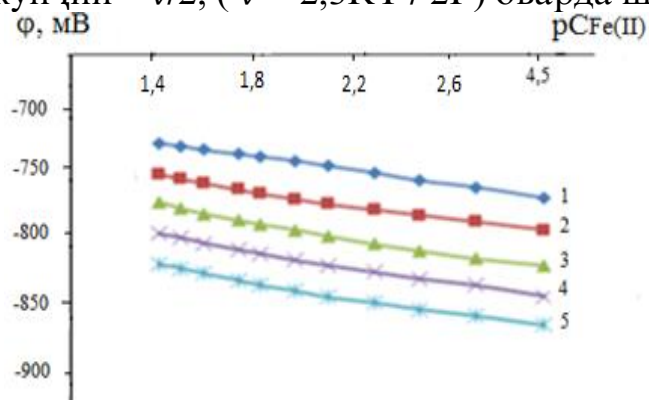
Аз натиҷаҳои таҷрибавии вобастагиҳо муайян гардидааст, ки раванди комплексҳосилкунӣ дар интервали рН аз 2,0 то 6,4 давом мекунад. Дар ин вақт потенциали оксидонии система аз -620 то -780 мВ кам мешавад ки ин гувоҳи дар система ҳосилшавии зарраҳои комплексӣ ба шумор меравад. Чунон, ки аз расми 1 дида мешавад, баробари зиёд шудани консентратсияи металлкомплексҳосилкунанда ва рН-и маҳлул потенциали оксидшавӣ кам мешавад.



Расми 2. Вобастагии потенциали оксидонӣ (ϕ) аз рН-и маҳлул дар системаи Fe(II)–Мерк–H₂O ҳангоми $C_{Fe(II)} = 1 \cdot 10^{-4}$, $C_L 1 \cdot 10^{-2}$, $T = 288,15$ К ва қувваи ионии маҳлул 1-0,1; 2-0,25; 3-0,5; 4-1,0 моль/л.

Пай дар ҳам пайдошавии хатҳои рости дорои кунҷҳои $-v/2$, $-v$ мувофиқи назарияи тарикаи оксредметрӣ гувоҳи ҳосилшавии зарраҳои комплексӣ дар система ба шумор меравад. Хати горизонталӣ дорои кунҷи 0 дар вобастагии ϕ аз рН-и маҳлул дар системаи Fe(II)–мерк–H₂O (расми 2) то рН 2,0 нишон медиҳад, ки дар муҳити турши қавӣ пайвастагиҳои комплексӣ ҳосил намешавад. Камшавии потенциали система дар соҳаи $pH > 2,2$ шаҳодати дар комплексҳосилкунӣ иштирок

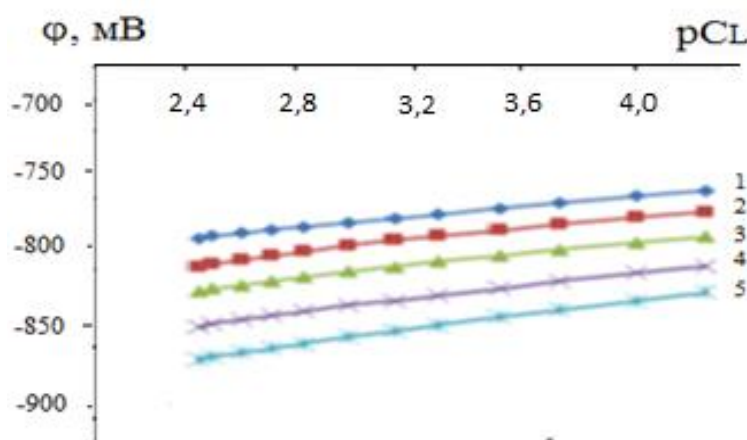
намудани оҳан(II) ва мерказолил ба шумор меравад. Вобастагии φ аз pH миқдори умумии лигандҳои мерказолили координасияшударо бо металл мефаҳмонад. Дар расми 3 вобастагии потенциали оксидонӣ (φ) аз $pC_{Fe(II)}$, ки дорой зароби кунҷии $-v/2$, ($v = 2,3RT / 2F$) оварда шудааст.



Расми 3. Вобастагии потенциали оксидонӣ (φ) аз $C_{Fe(II)}$ дар системаи $Fe(II)$ –Мерк– H_2O , $T = 288,15$ К ва $I = 0,1$ мол/л; қиматҳои pH : 1 - 2,5; 2 - 3,0; 3 - 3,5; 4 - 4,0; 5 - 4,5.

Аз расми 3 маълум мешавад, ки барои ҳама натиҷаҳо оид ба фаъолияти ионҳои гидроген ва оҳан ҳосилаи потенциали оксидшавӣ аз фаъолияти лиганд чунин шакл мегирад:

$$\left[\frac{\partial \varphi}{\partial pC_L} \right]_{pH, pC_{Fe(II)}} = v/2n (u/p + x/q) \quad (1)$$



Расми 4. Вобастагии потенциали оксидонӣ (φ) аз pC_L барои системаи $Fe(II)$ – Мерк – H_2O дар $T = 288,15$ К, $I = 1,0$ мол/л. Хатҳои қачи вобастагӣ мутааллиқ ба pH : 1 - 2,5; 2 – 3,0; 3 – 3,5; 4 – 4,0; 5 - 4,5.

Барои муайян кардани миқдори лигандҳои координасияшуда вобастагии потенциали оксидонӣ аз консентрасияи лиганд гирифта шуд, ки дорой қачхатҳои тета мебошанд ва ин гувоҳи пайвастишии як лигандро дорад. Онро бо муодилаи (1) муқоиса намуда, ба осонӣ муайян кардан мумкин аст, ки дар системаи тадқиқшаванда зарраҳои комплекси як ядрой ба вучуд омадаанд. Сипас баъди таҳлили умумии зароби кунҷии ҳамаи хатҳои таҷрибавӣ матрицаи стехиометрӣ тартиб дода мешавад, яъне (Ҷадвали 1)

Моделҳои стехиометрии (математикии) системаи оҳан(II) – мерказолил – об

| №, р/т | рН | Тангенсҳои вобастагии зарби кунҷӣ | | | Таркиби комплексҳо |
|--------|-----------|-----------------------------------|---------------------------------------|-------------------------|--|
| | | $\varphi - \text{pH}$ | $\varphi - \text{pC}_{\text{Fe(II)}}$ | $\varphi - \text{pC}_L$ | |
| 1 | 2,0 - 2,6 | 0 | 0 | 0 | $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_4]^{2+}$ |
| 2 | 2,0 - 5,4 | $-\nu/2$ | $-\nu/2$ | $\nu/2$, | $[\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$ |
| 3 | 3,4 - 6,0 | $-\nu$ | $-\nu/2$ | $\nu/2$ | $[\text{FeHL}(\text{OH})(\text{H}_2\text{O})_4]^+$ |
| 4 | 3,6 - 6,0 | $-\nu$ | $-\nu/2$ | $\nu/2$ | $[\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_4]^+$ |
| 5 | 3,8 - 6,0 | -2ν | $-\nu/2$ | ν | $[\text{FeL}_2(\text{H}_2\text{O})_2]^0$ |

Барои ҳисоби мувозанати химиявӣ аз рӯи барномаҳои компютерӣ дар муддати кӯтоҳ ва натиҷаҳои хуб модели мувозанати химиявӣ бо ҳисоби ҳамаи зарраҳои дар система мавҷуда тартиб дода шуд, ки он дар ҷадвали 2 нишон дода шудааст.

Моделҳои стехиометрии (математикии) системаи оҳан (II) – мерказолил – об ва константаҳои ҳосилшавии пайвастиҳои мураккаб дар ҳарорати 288,15 К ва қувваи ионии маҳлул 0,1 моль/л.

| №, n/n | Fe (II) | H | L | OH | Таркиби комплекс | lg $\beta_{q,s.l.k}$ |
|----------------------------------|---------|---|---|----|---|----------------------|
| | q | S | l | K | | |
| Константаи протонизатсияи лиганд | | | | | $\text{HL} \leftrightarrow \text{H}^+ + \text{L}^-$ | lg K_a |
| Шакли гидролиз | | | | | FeOH^+ | K_{1001} |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | $[\text{FeHLOH}]^+$ | β_{1111} |
| 2 | 1 | 1 | 1 | 0 | $[\text{FeHL}]^{2+}$ | β_{1110} |
| 3 | 1 | 0 | 2 | 0 | $[\text{FeL}_2]^0$ | β_{1020} |
| 4 | 1 | 0 | 1 | 0 | $[\text{FeL}]^+$ | β_{1010} |

Чӣ хеле, ки аз модели реаксияҳои химиявӣ дида мешавад оҳан пайвастиҳои комплексҳои моноҳастаиро ҳосил мекунад. Дар асоси ченкунии оксидметрӣ аз рӯи таркиби тахминии комплексҳои системаи таҳқиқшаванда матрисаи стехиометрӣ тартиб дода шуд. Чӣ хеле ки аз ҷадвал дида мешавад дар системаи Fe(II)–мерк–H₂O дар баробари зарраҳои комплексӣ пайвастиҳои гироксилии оҳани дувалента ҳосил мешаванд. Ғайр аз ин дар ҷадвал натиҷаҳои константаи протонизатсияи лиганд низ оварда шудааст. (ҷадвали 2).

Функсияи оксидонии назариявӣ барои ҳисоби мувозанати химиявӣ дар система ва ҳисоби константаи устувории комплексҳо истифода карда мешавад.

$$f_T^0 = \frac{h^5}{(h^5 + \beta_{1010}K_a C_a h^4 + \beta_{1020}K_a^2 C_a^2 h^3 + \beta_{1011}h^3 + \beta_{1110}K_a C_a h^3 + \beta_{1111}K_a C_a + \beta_{1001}h^2)} \quad (2)$$

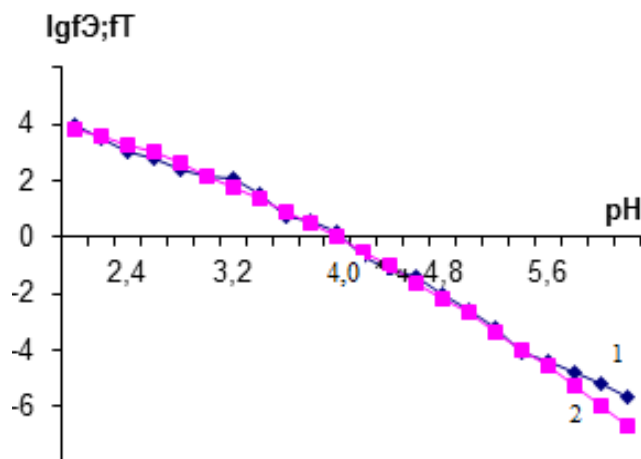
Дар муодилаи (2) чунин мафҳумҳо оварда шудаанд: $\beta_{1010}K_a C_a h^4$ –

$[\text{FeL}(\text{H}_2\text{O})_3]^+$; $\beta_{1020}K_a^2C_a^2h^3 - [\text{FeL}_2(\text{H}_2\text{O})_2]^0$; $\beta_{1011}K_aC_a h^3 - [\text{FeLOH}(\text{H}_2\text{O})_2]^0$;
 $\beta_{1110}K_aC_a h^3 - [\text{FeHL}(\text{H}_2\text{O})_3]^{2+}$; $\beta_{1111}K_aC_a h^2 - \text{FeHLOH}(\text{H}_2\text{O})_2]^{+}$.

Функсияи потенциали оксидонии таҷрибавӣ f_3 бо истифода аз муодилаи зерин ҳисоб карда шуд:

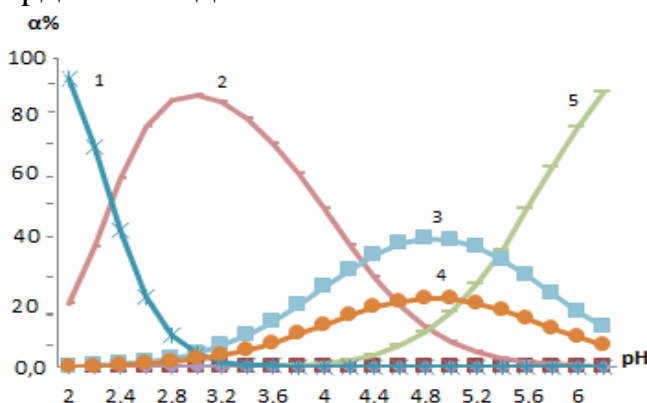
$$f_3^0 = C_r/C_0 \exp(\varphi - \varphi^0)n/v \quad (3)$$

Ҳисобҳои таҷрибавӣ ва назариявӣ мафҳуми функсияи оксидонӣ аз руи муодилаҳои (2) ва (3) ҳисоб карда шуда имконият дод, ки бо таври графикаи вобастагии функсияи оксидонӣ $\lg f_{3,T}$ аз pH-и маҳлул сохта шавад. (расми 4).



Расми 5. Қиматҳои функсияи таҷрибавӣ - f_e (1) ва назариявӣ - f_t (2) аз pH

Диаграммаҳои тақсироти пайвастагиҳои комплекси оҳан(II) ки мувофиқи он координатсияҳои пайвасти комплекси моноядроӣ дар ҳудуди васеи pH ки то 100% ташкил медиҳад имкон медиҳад, ки онҳо бе душворӣ синтез карда шаванд.



Расми 6. Диаграммаи тақсимшавии ионҳои оҳан ва зарраҳои комплекси бо мерказолил: 1- $[\text{Fe}(\text{H}_2\text{O})_6]^{2+}$; 2- $[\text{FeHМерк}(\text{H}_2\text{O})_5]^{2+}$; 3- $[\text{FeМерк}(\text{H}_2\text{O})_4]^+$; 4- $[\text{FeHМерк}(\text{H}_2\text{O})_3\text{OH}]^0$; 5- $[\text{Fe}(\text{Мерк})_2(\text{H}_2\text{O})_2]^0$. $T=288 \text{ K}$, $I=0.1 \text{ мол/л}$

Тавре ки аз диаграммаи тақсирот дида мешавад, таносуби максималии зарраҳои FeL ва FeL_2 аз 80% то 90% аст.

Таъсири қувваи ионӣ ба раванди комплексҳосилшавии оҳани(II) бо мерказол дар маҳлули обӣ

Дар асоси натиҷаҳои бадастомада муқаррар карда шуд, ки зарраҳои

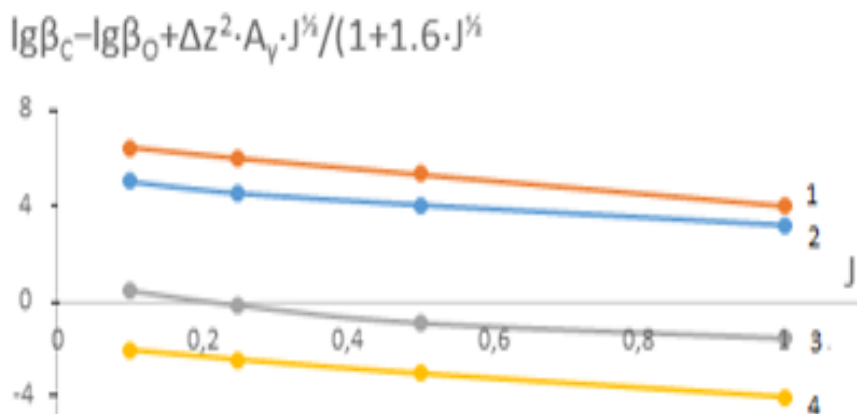
мураккаби биометаллҳо бо мерказолил дар система дар диапазони рН аз 2,0 то 6,0 ҷой доранд. Пас аз рН 6,0, потенциал дар система ноустувор мешавад, ки ба ташаккули гидроксидҳои оҳан (II) ишора мекунад.

Ҳангоми муқоисаи натиҷаҳои константаҳои устуворӣ муқаррар карда шуд, ки ҳангоми тағйир ёфтани қувваи ионии маҳлул қимати константаҳо низ тағйир меёбад. Аз ҷумла, дар системаи Fe(II)-Мерк-Н₂O дар фоизи банди маҳлул заррачаи мураккаб [FeHL]³⁺ ва дар фоизи хеле калон пайвастигии мураккаб [FeL₂]²⁺ ба вуҷуд меояд, ки комплекси [FeHLOH], ки дар муҳити ишкорӣ миқдори кам ҳосил мешавад. Барои ҳисоб кардани константаҳои устуворӣ вобаста ба қувваи ионӣ муодилаҳои Дэвис (4) ва Васильев (5) истифода мешаванд

$$\lg\beta_c = \lg\beta_o + \Delta z^2 \cdot A_\gamma \cdot [(I^{1/2}/1 + I^{1/2}) - I], \quad (4)$$

$$\lg\beta_c = \lg\beta_o + \Delta z^2 \cdot A_\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + v \cdot I, \quad (5)$$

Барои ин мо графики вобастагии логарифми $\lg\beta_c - \lg\beta_o + \Delta z^2 \cdot A_\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2})$ аз қувваҳои гуногуни ионӣ тартиб додем, ки он дар расми 7 нишон дода шудааст.



Расми 7. Вобастагии ($\lg\beta_c - \lg\beta_o + \Delta z^2 \cdot A_\gamma \cdot I^{1/2}/(1 + 1,6 \cdot I^{1/2})$) аз қувваи ионии маҳлули дар ҳарорати 288 К дар системаи Fe(II) – мерк – Н₂O, C_{Fe(II)} = 1·10⁻⁴ моль/л; Хатҳо: 1-[FeL₂]⁰, 2-[FeL]⁺, 3-[FeHL]²⁺, 4-FeLONH].

Чи хеле ки аз графики вобастагии $\lg\beta_{\text{gplk}}$ аз қувваи ионӣ дида мешавад қувваи ионии маҳлул аз таркиби комплекс ва табиати лиганд вобастааст. Чи хеле, ки дар расми 7 оварда шудааст константаи устувории ҳамаи зарраҳои комплексӣ дар системаи Fe(II)– мерк - Н₂O дар аввал кам мешаванд пасон як киммати мувофиқро мегиранд. Сабаб дар он аст, ки бо зиёдшавии қувваи ионии маҳлул молекулаҳои об аз сфераи дохилии комплекс фишурда бароварда мешаванд, барои ҳамин константаи устувории зарраҳои комплексӣ кам мешавад.

Ин аз он шаҳодат медиҳад, ки бо зиёд шудани қувваи ионӣ молекулаҳои об аз сфераи дохилии комплекс кучида мешаванд, ки ин

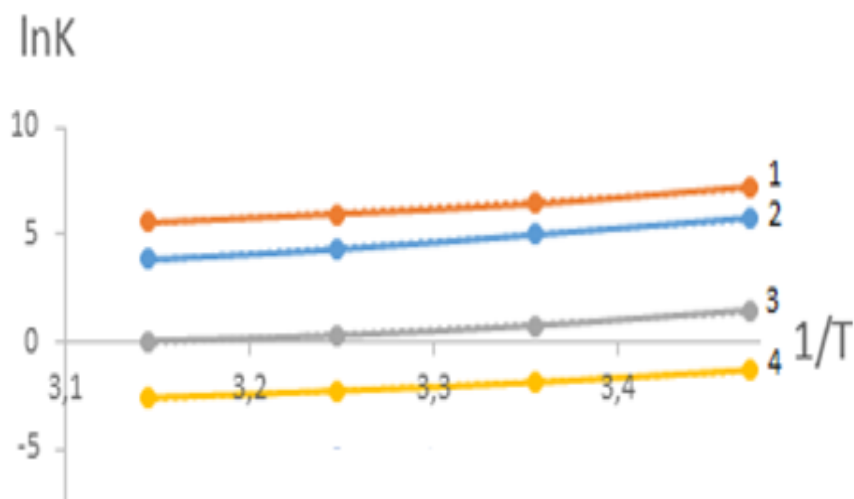
боиси каме паст шудани константаи устуворӣ мегардад. Бо афзоиши минбаъдаи қувваи ионии маҳлул ионҳои сулфат ба доираи дохилии комплекс дохил мешаванд ва константаи устуворӣ қимати доимӣ мегирад. Дар системае, ки мо омӯхтем, танҳо заррачаҳои координатсияи як ядрой ба вуҷуд меоянд. (Ҷадвали 3)

Ҷадвали 3.

Ифодаи вобастагии $\lg K_{\text{обр.ё}}$ ё $\lg \beta_{\text{гпслк}}$ аз қувваи ионӣ дар системаи $\text{Fe(II)} - \text{мерк} - \text{H}_2\text{O}$

| Таркиби комплекс | Муодилаи вобастагии $\lg K_{\text{обр.ё}}$ ё $\lg \beta_{\text{гпслк}}$ аз қувваи ионии маҳлул |
|---------------------|--|
| $[\text{FeL}_2]$ | $\lg \beta_{\text{C}} = 6,62 + 0,508 \cdot I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,06 \cdot I$ |
| $[\text{FeHL}]^+$ | $\lg \beta_{\text{C}} = 5,03 + 0,508 \cdot I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,33 \cdot I$ |
| $[\text{FeL}]^{2+}$ | $\lg \beta_{\text{C}} = 0,97 + 0,508 \cdot I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,031 \cdot I$ |
| $[\text{FeHLOH}]$ | $\lg \beta_{\text{C}} = -1,78 + 0,508 \cdot I^{1/2} / (1 + 1,6 \cdot I^{1/2}) + 0,063 \cdot I$ |

Бо истифода аз усули коэффисиенти гармӣ, яъне вобастагии $\lg \beta_{\text{гпслк}} - 1/T \cdot 10^3$ аз қувваи ионии 0,1 – 1,0 мол/л тайғирёбии мафҳуми доимии энталпия (ΔH^0) барои пайвастагиҳои комплекси ҳосилшуда: FeHL^{2+} ; FeHLOH^+ ; FeL^{2+} ; FeL_2^{2+} ҳисоб карда шуд. Асосан тағйирёбии энергияи озоди Гиббс бо ёрии бузургиҳои константаи протонизасия маълум мешавад, ки реаксияҳои система экзотермикӣ буда, баландшавии ҳарорат ба паст шудани устувории пайвастагиҳои комплексӣ оварда мерасонад;



Расми 8. Вобастагии логарифмаи константаи ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ аз ҳарорат дар системаи: $\text{Fe(II)} - \text{Мерк} - \text{H}_2\text{O}$ ҳангоми $J = 0,1$ моль/л. Хатҳо: 1- $[\text{FeL}_2]^0$, 2- $[\text{FeHL}]^+$, 3- $[\text{FeL}]^{2+}$, 4- $[\text{FeHLOH}]$

Ҷадвали 4.

Функсияи термодинамикии реаксияи пайвасти комплексӣ дар системаи Fe(II) – мерк – H₂O дар қувваҳои ионии гуногун ва ҳарорати 288 К

| Комплексҳо | Функсияҳои термодинамикӣ | Қувваи ионӣ, мол/л | | | |
|------------------|--------------------------|--------------------|--------|--------|--------|
| | | 0,1 | 0,25 | 0,5 | 1,0 |
| FeHL | ΔH (Кҷ/мол) | -115,1 | -117,2 | -118,6 | -123,3 |
| | ΔG (Кҷ /мол) | -32,1 | -30,8 | -29,2 | -27,2 |
| | ΔS (Ҷ/мол·К) | -288,3 | -300,0 | -310,2 | -334,1 |
| FeL ₂ | ΔH (Кҷ /мол) | -100,9 | -105,3 | -117,7 | -103,7 |
| | ΔG (Кҷ /мол) | -40,1 | -38,5 | -35,6 | -34,1 |
| | ΔS (Ҷ/мол·К) | -210,5 | -231,5 | -284,6 | -242,2 |
| FeL | ΔH (Кҷ /мол) | -88,2 | -90,4 | -87,2 | -84,7 |
| | ΔG (Кҷ /мол) | -8,37 | -6,88 | -4,73 | -3,02 |
| | ΔS (Ҷ/мол·К) | -276,6 | -290,4 | -286,1 | -283,4 |
| FeHLOH | ΔH (Кҷ /мол) | -74,3 | -81,3 | -90,4 | -91,8 |
| | ΔG (Кҷ /мол) | 7,15 | 8,26 | 9,36 | 11,1 |
| | ΔS (Дж/мол·К) | -284,1 | -310,5 | -347,0 | -357,3 |

Чи хеле, ки аз ҷадвали 4 дида мешавад ҳарорат ба қимати энталпия (ΔH) ва энтропия (ΔS) заррачаҳои комплекси дар система ҳосилшуда таъсир намерасонад. Яъне бо зиёдшавии ҳарорат ва қувваи ионӣ энталпия (ΔH) ва энтропия (ΔS) доими мемонад, ва энергияи Гиббс меафзояд. Қиммати доимии энтальпия бо баландҳавии ҳарорат дар асоси муодилаи Кирхгофф шаҳодати изозаряднокии пайвастагиҳои комплексӣ буда заряди заррачаи комплексӣ тағйир намеёбад. Қимати калони манфии энтальпия барои комплексҳои FeL ва FeL₂ нисбат ба дигар комплексҳо гувоҳи ҳосилшавии пайвастагиҳои комплекси хелатӣ аст, ки аз ҳама устуворанд. Зиёдшавии энергияи Гиббс (ΔG) бо афзоиши қувваи иони ва ҳарорат дар асоси муодилаи изобараи реаксияи химиявӣ аз камшавии устуворӣ ва раванди маҷбурии реаксияи ҳосилшавии пайвастаҳои комплексӣ гувоҳи медиҳад.

Тарикаҳои физико-химиявии таҳқиқи пайвастҳои комплекси оҳан (II) ва руҳ (II) бо мерказолил

Пайвастагии комплекси сульфати оҳан(II) бо 1-метил-2-меркаптамидазол хокаи кристалии ранги баланди сабзчатоб буда буй надорад, ҷилои металлӣ дорад. Пайвасти комплекси сульфати руҳ бо мерказолил хокаи кристалии сафед буда буй надорад ва ҷилои металлӣ дорад.

Нуқтаи ғудохташавӣ яке аз хосиятҳои муҳими физико химиявии моддаҳо ба шумор меравад. Барои ин як қатор ҳалқунандаҳои органикӣ ва ғайриорганикӣ барои муайян кардани ҳалшавандагии пайвастагиҳои комплекси синтезкардашудаи оҳани (II) ва руҳ(II) бо мерказолил истифода карда шуданд.

Ҳарорати гудохташавии мерказолил, сулфати руҳ, сулфати оҳан ва пайвасти комплекси оҳани (II) ва руҳ(II) бо мерказолил

| № | Моддаҳо | Ҳарорати гудохташавӣ, °C |
|---|---------------------------------------|--------------------------|
| 1 | FeSO ₄ ·7 H ₂ O | 56-64 |
| 2 | ZnSO ₄ ·7 H ₂ O | 95-100 |
| 3 | Мерказолил | 142-144 |
| 4 | [FeL]SO ₄ | 40-45 |
| 5 | [ZnL]SO ₄ | 66-72 |
| 6 | [ZnL ₂]SO ₄ | 75-83 |

Дар чадвали 6 натиҷаи ҳалшавандагии пайвасти комплекси оҳани (II) ва руҳ(II) бо мерказолил оварда шудааст.

Ҳалшавандагии пайвасти комплекси оҳани(II) бо мерказолил
[FeL(H₂O)₃]SO₄ x 2H₂O

| Ҳалкунанда | Ҳалшавандагӣ | Ранги маҳлул |
|------------------|-----------------|-----------------|
| Диметилформамид | Ҳалнашаванда | Сафед, ношаффоф |
| Ацетон | Ҳалнашаванда | Сафед, хира |
| Спирт этил- 96% | Нағз ҳалшаванда | Сурхи чигарӣ |
| Об | Нағз ҳалшаванда | Сурхи чигарӣ |
| Диметилсулфоксид | Нағз ҳалшаванда | Сурхи баланд |
| Хлороформ | Ҳалнашаванда | Сафед, хира |

Муайян намудани массаи молекулавии пайвастигиҳои комплекси оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил тавассути тариқаи криоскопӣ

Барои муайян намудани характикаи миқдории пайвастигиҳои таҳқиқшаванда вазни молекулавии ин моддаҳо ба таври таҷрибавӣ муайян кардан лозим аст. Криоскопия одатан барои муайян кардани вазни молекулавӣ истифода мешавад.

$$\Delta T = K w_2 1000/w_1 M_r, \quad (6)$$

ки дар он K- константаи криоскопии маҳлул, w₁- миқдори ҳалкунанда, w₂ – миқдори моддаи ҳалшаванда, M_r – массаи молекулавии ҳалшаванда. Аз ин ҷо, муодила чунин намуд мегирад:

$$M_r = K \cdot w_2 \cdot 1000 / w_1 \cdot \Delta T \quad (7)$$

Натиҷаҳои ба даст омадаро дар формулаи 8 гузошта массаи молярии пайвастигиҳои нави синтезкардашуда муайян карда мешавад, ки дар чадвали 7 оварда шудааст.

Натиҷаи массаи молекулавии пайвастагиҳои координатсионии муайяншуда: $[ZnL_2(H_2O)_2]SO_4 \cdot 3H_2O$ ва $[FeL(H_2O)_3]SO_4 \cdot 2H_2O$

| Вариантҳо | Масса, г. | | | Тағйирёбии ҳарорат (ΔT) | | | Массаи молекулавӣ | | | | |
|-------------|-----------|-----|------|-----------------------------------|------|------|-------------------|-----|-----|--------------|------------|
| | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | 1 | 2 | 3 | Ба ҳис миёна | Назар иявӣ |
| Zn:merk 1:2 | 0,05 | 0,1 | 0,2 | 0,02 | 0,05 | 0,08 | 465 | 372 | 465 | 434 | 427 |
| Fe:merk 1:1 | 0,05 | 0,1 | 0,15 | 0,03 | 0,06 | 0,08 | 310 | 310 | 348 | 323 | 321 |

Вобастагии концентратсионии электргузаронии пайвастагиҳои комплекси руҳ(II)

Тавассути тариқаи кондуктометрӣ электргузаронии молярии (μ) пайвастагиҳои моноҳастаии руҳ (II) бо мерказолил чен карда шуд.

Чуноне, ки маълум аст, пайвастагиҳои мураккабе, ки аз металлҳои гуногун ҳосил мешаванд, аз рӯи собитаи устувори нисбати ҳалқунанда фарқ мекунад. Аммо маълумоти бадастомада нишон дод, ки пайвастагиҳои моноядроии руҳи синтезшуда бо мерказолил ба ғайриэлектролитӣ тааллуқ доранд.

Ҷадвали 8

Вобастагии электргузаронии молярии руҳ(II) бо мерказолил таркиби комплекс $[Zn(HL)_2(H_2O)_4]SO_4$ $M_r=427$

| R, мк, Ом ⁻¹ | μ см ² моль ⁻¹ | C, мол/л | α , % |
|-------------------------|--|---------------------|--------------|
| 166,5 | 166,5 | $1 \cdot 10^{-3}$ | 9,51 |
| 39,6 | 198,0 | $2 \cdot 10^{-4}$ | 11,3 |
| 10,5 | 262,5 | $4 \cdot 10^{-5}$ | 15,0 |
| 5,90 | 737,5 | $8 \cdot 10^{-6}$ | 42,1 |
| 2,80 | 1750,0 | $1,6 \cdot 10^{-6}$ | 100,0 |

Омузиши сохти пайвастагиҳои комплекси тавассути тариқаи спектроскопӣ

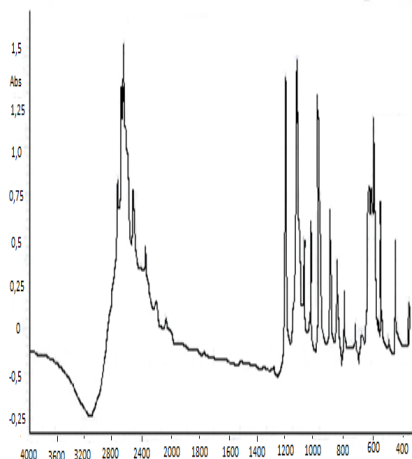
Дар спектрҳои ИС-и мерказолил раҳҳои характернок дар басомадҳои 1246 см^{-1} арзи вучуд мекунад. Ин нишонаи координатсияи иони руҳ бо мерказолил ба воситаи атоми сулфурӣ гуруҳи тионии мерказолил ба амал меояд.

Ин нишонаи иштироки атоми нитрогени пиридин аз молекулаи мерказолил барои ҳосилшавии пайвастагиҳои комплекси бо иони руҳ ба шумор меравад.

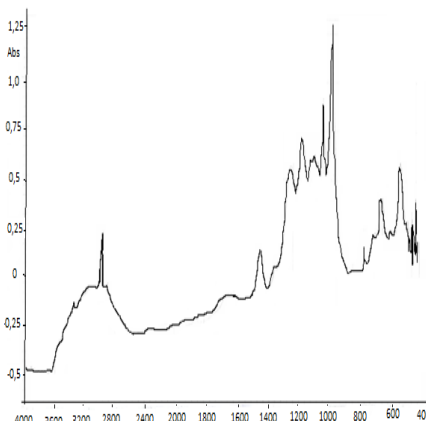
Ҳамин тавр, ҳосилшавии пайвасти комплекси руҳ бо мерказолил банди байни иони руҳ бо атоми сулфур аз ҳисоби гуруҳи функционалии тиони ва нитрогени пиридин аз молекулаи мерказолил амалӣ мешавад. Натиҷаҳои таҳлили элементӣ, усули дериватография, ИС- ултрабунафш ва дигар усулҳо барои муайян кардани таркиби сифатӣ ва микдорӣ

комплексҳои синтезшуда истифода шудаанд.

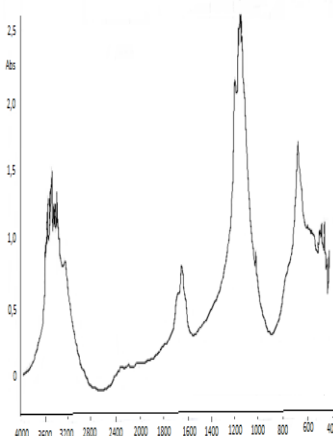
Ҳамин тариқ, бо пайдоиши пайванди мураккаби руҳ бо мерказолил пайванди иони руҳ бо атоми сулфури гурӯҳи функционалӣ ба амал меояд. аз тион ва нитрогени пиридини молекулаи мерказолил. Натиҷаҳои таҳлили элементарӣ, дерватография, ИК-и ултрабунафш ва дигар усулҳо барои муайян кардани таркиби сифатӣ ва микдори комплексҳои синтезшуда истифода бурда шуданд (Расми 9,10,11).



Расми 9. ИС- спектри мерказолил дар 4000 cm^{-1} - 650 cm^{-1}



Рами 10. ИС- спектр комплекси оҳан(II) дар 4000 cm^{-1} - 650 cm^{-1}

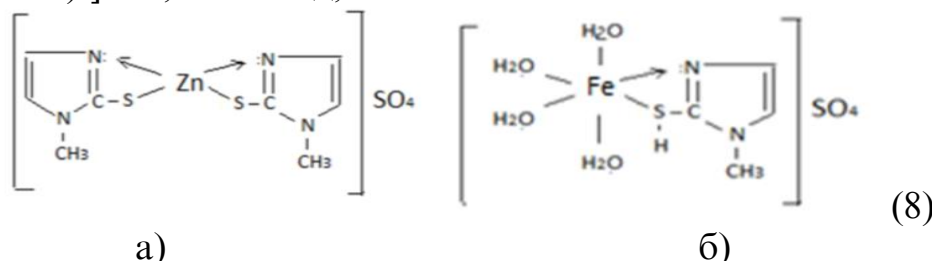


Рами 11. ИС спектри 1:1 сульфати оҳан(II) дар 4000 cm^{-1} - 650 cm^{-1}

Сохт ва формулаи пайвастиҳои комплекси синтезшуда ва татбиқи он

Таркиби пайвастиҳои комплекси синтезшуда одатан бо истифода аз потенциали оксидшавӣ, таҳлили элементӣ, спектроскопияи ултрабунафш, инфрасурх дериватография ва интиқоли барқии молярӣ муайян карда шуд, ки ин имкон дод сохтори пайвастиҳои координатсионӣ пешниҳод карда шавад.

Ҳосилшавии пайвастиҳои координатсионии руҳ бо мерказолил мувофиқи номенклатураи пайвастиҳои координатсионӣ ЮОРАК –ди аква ди 1-метил-2-меркаптоимидазол сульфати руҳ(II) ё ки $[\text{ZnL}_2(\text{H}_2\text{O})_2]\text{SO}_4$, мебошад, ки сохти он:



L – лиганд, яъне мерказолил мебошад ва формулаи (8) шакли графикии он мебошад ва ҳангоми таъсири мутақобилаи сульфати руҳ (II) бо 1-метил-2-меркаптоимидазол синтез карда шудааст (8а).

Формулаи графикии оҳан бо мерказолил. Номи кимиёвӣ аз рӯи номенклатураи пайвастагиҳои координатсионӣ ди аква ди (1-метил-2-меркаптоимидазол) оҳан (II) сулфат $[FeL_2(H_2O)_2]SO_4$ мебошад (8б).

Таҳқиқи фаъолияти биологии пайвастагиҳои координатсионии оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил

Самаранокӣ ва бехатарии пайвастагиҳои координатсионӣ дар асоси натиҷаҳои як қатор таҳқиқоти илмӣ, мутобиқи стандартҳои байналмилалӣ муқаррар шудааст. Дар ҷадвали 9 натиҷаҳои меъёр ва дараҷаи захрнокии пайвастагиҳои комплекси оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил ки ҳангоми омузиши хосиятҳои биологӣ ба даст омаданд, (LD00, LD50, LD100) оварда шудааст.

Ҷадвали 9

Меъёри истифодабарии пайвастагиҳои комплекси оҳан (II) мерказолил, руҳ (II) ва мерказолил ва дараҷаи захрнокии онҳо

| Меъёри муайян | Оҳан (II) ва мерказолил | Руҳ(II) ва мерказолил |
|-------------------|-------------------------|-----------------------|
| ЛД ₀₀ | 800 мг/кг | 1000мг/кг |
| ЛД ₅₀ | 1000мг/кг | 1200мг/кг |
| ЛД ₁₀₀ | 1320мг/кг | 1600 мг/кг |

Барои муайян кардани хосиятҳои ангезандаи пайвастагиҳои мураккаби дар асоси руҳ ва мерказолил гирифташуда як ё ду рӯз пеш аз таҷриба мӯйҳои пушти харгӯшҳо ва каламушҳоро бо кайчӣ бодикқат ва эҳтиёткорона тарошидан лозим аст. Пӯсти ҳайвонот набояд ягон осеби механикӣ дошта бошад, бинобар ин барои тоза кардани пӯст шумо набояд аз депиллятор истифода баред.

Баъд аз чанд маротиба гузаронидани таҷрибаҳо маълум гардид ки пайвасти комплекси руҳ бо мерказолил дар меъёри муқарраргардида ба пӯст хосияти ангезандагӣ ва чашми ҳайвонот ягон хосияти ангезандагӣ дида намешавад. Ҳамин тариқ, пас аз таҳлили биологии мо маълум шуд, ки пайвастагии комплекси синтетикии руҳ бо мерказолил дар воҷи то 1000 мг/кг ба организми зинда қобили истифода, ягон зараре намерасонад. Воҷи (LD50) 1200мг/кг ва меъёри марговар, ки дар он марги ҳайвоноти таҷрибавӣ руҳ медиҳад 1600 мг/кг аст.

Бо усули ЭПР –спинӣ муайян кардани хосияти антиоксидантии пайвастагиҳои синтезкардашудаи оҳан(II) бо мерказолил

Дар ин бахш концентратсияи гуногуни руҳ ва сулфати оҳан бо мерказолил тайёр карда шуда бо ёрии усули ЭПР таъсири онҳоро ба ҳаракатнокии тамғакоғазҳои спин ки ба сохтори комплекс ворид карда шудаанд, муайян карда шуданд. Ин усул ба пайвастшавӣ ва ҳассосияти ҳаракати молекулавии макромолекула асос ёфтааст. Бо истифода аз усули ЭПР шумораи марказҳои объектҳои омӯхташуда, ки дар иштироки пайвасти комплекси оҳан (II) бо мерказолил бо нишонаҳои спинӣ дучор мешаванд, муайян карда мешавад.

Натиҷаҳо нишон доданд, ки тағйирот дар параметрҳои спектрҳои ЭПР ва ҳаракати гардиши спин –нишона дар ҳарорати хонагӣ аз баландӣ ва шароити муҳити зисти ҷои ҳосилшавии намунаҳо вобаста аст. Пайдоиши ҷузъи нави сигнали РЭП, ки бо радикали зуд гардишкунанда алоқаманд аст, аз пайдоиши сохти беҳадтунуки (СТС) ва афзоиши хосиятҳои антиоксидантии намунаҳои омӯхташуда шаҳодат медиҳад.

ХУЛОСА

1. Бо усули потенциали оксидшавӣ раванди комплексҳосилшавӣ дар системаҳои Fe(0)-Fe(II)-мерказолил-об ва Zn(0)-Zn(II)-мерказолил-об бо истифода аз электроди пулодӣ ва амалгамашудаи руҳ таҳқиқ карда шуданд. Муайян карда шуд, ки дар системаи мазкур чор заррачаи комплекси оҳани(II) аз ҷумла: FeHL, FeHLOH, FeL, FeL₂ ва сето пайвасти комплекси руҳ(II) бо мерказолил: ZnHL, ZnL, ZnL₂ ҳосил мешаванд [1–А, 2–А, 3–А].

2. Бо истифода аз усули функцияи оксидонии Юсуфов бори аввал моделҳои мувозинати химиявии оҳан ва руҳ бо мерказолил муайян карда шуд [4–А, 5–А, 6–А].

3. Бори аввал барои системаҳои Fe(0)- Fe(II)-мерк- H₂O ва Zn(0)-Zn(II)-мерк- H₂O мувозинати химиявии комплексҳосилкунӣ, муодилаи эмперикии вобастагии логарифмаи константаҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ аз қувваи ионии маҳлул тартиб дода шуд, константаҳои устувории термодинамикии пайвастагиҳои комплекси моноҳастаи дар ҳарорат ва қувваи ионии гуногун дар муқоиса бо муодилаи Василев ҳисоб карда шуд [7–А, 8–А, 9–А, 10–А, 11–А, 12–А, 13–А].

4. Тариқаҳои синтези комплексҳои оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил коркард карда шуда, пайвастаҳои нави аз ҷиҳати биологӣ фаъол синтез карда шуданд. Таҷрибаҳо нишон доданд, ки координатсияи атомҳои оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил тавассути атомҳои сулфур ва нитрогени атоми пиридини ҳалқаи имидазол амалӣ мешавад [14–А].

5. Хосиятҳои биологии пайвастагиҳои комплекси оҳан(II) ва руҳ(II) бо мерказолил(1-метил-2-меркаптамидазол) захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагӣ, антиоксидантӣ муайян карда шуданд. Маълум шуд, ки пайвастагиҳои нави синтезкардашуда аллергенӣ ва ангезанда набуда камзаҳранд ва хосияти антиоксидантӣ доранд [15–А].

Тавсияҳо оид ба истифодаи амалии натиҷаҳои таҳқиқот

-Натиҷаҳои илмии бадастомадаро оид ба пайвастаҳои комплекси руҳ (II) ва оҳан (II) бо мерказолил барои шарҳ додан ва пешгуии равандҳои комплексҳосилшавии биометалҳо бо биолигандҳо истифода бурдан мумкин аст.

-Усулҳои синтези комплексҳои барои олимони соҳаи синтези пайвастаҳои координатсионӣ ва донишҷӯёни кафедраи химияи физикӣ ва

коллоидии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон ва тибби тавсия дода мешавад.

ИНТИШОРОТ АЗ РҶҲИ МАВЗҶИ ДИССЕРТАТСИЯ:

Рӯйхати мақолаҳое, ки дар маҷаллаҳои илмӣ ба тавсияи Комиссияи Олии Аттестатсионии назди Президенти Ҷумҳурии Тоҷикистон нашр шудаанд:

[1–А]. **Камолова И.У.** Комплексоилкунии оҳан (II) бо мерказолил дар 298 К ва қувваи ионӣ 1,0 мол/л / С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раҷабов // Доклад Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон. 2021. Т.64. №11-12. -С. 694-700.

[2–А]. **Камолова И.У.** Пайвасти оҳан(II,III) бо метионин / А. Маданомов С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раҷабов // Доклад Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон 2022 Том: 65 №: 11-12. 2022 -С. 761-767.

[3–А]. **Камолова И.У.** Омӯзиши равандҳои комплексоилкунии дар системаи Fe(II)–Мерказолил–H₂O бо усули оксредметрия / С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раҷабов // ISSN.1812-3368. Весник MSTU ба номи Н.Э. Баумана. Силсилаи илмҳои табиатшиносӣ.

[4–А]. **Камолова И.У.** Вобастагии равандҳои комплексоилкунии оҳан(II) бо мерказолил аз қувваи ионии маҳлул / И. Камолова // Известия Академияи илмҳои Ҷумҳурии Тоҷикистон. №1(190), 2023, -С. 72-78.

Мақолаҳо ва фишурдаҳо дар маводи конференсияҳо:

[5–А] **Камолова И.У.** Комплексообразование железа (II) с мерказолилом при 298К / С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова, У.Р. Раҷабов // Конференсияи ҷумҳуриявии илмию амалии ҳайъати устодону кормандони ДМТ баҳшида ба ҷашни 30-солагии Истиқлоли давлатии ҷумҳурии Тоҷикистон, 110-солагии Шоири халқии Тоҷикистон, Каҳрамони Тоҷикистон Мирзо Турсунзода, 110-солагии Нависандаи халқии Тоҷикистон Сотим Улуғзода ва “ Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (солҳои 2020-2040), - Душанбе. - 2021. – С.48

[6–А] **Камолова И.У.** Зависимость процессов комплексообразования железа(II) с мерказолилом от ионной силы раствора /С.Г.Ёрмамадова, Камолова И.У, У.Раҷабов //Конференсияи ҷумҳуриявии илмию амалии ҳайъати устодону кормандони ДМТ баҳшида ба «Солҳои рушди саноат (солҳои 2022-2026)» ва «Бузургдошти Мавлоно Ҷалолиддини Балхӣ». -Душанбе, -2022. С.291-293.

[7–А] **Камолова И.У.** Исследование процессов комплексообразования Zn(II) и Fe(II) с ацетилцистеином / У.Р. Раҷабов., Р.А. Султонов., Ёрмамадова С.Г., Наврузова Г., Камолова И.У.// Маҷмӯаи мақолаҳои конференсияи ҷумҳуриявии илмию амалӣ дар мавзӯи “Заминаҳои рушд ва дурнамои илми химия дар ҚТ” баҳшида ба 60-солагии факултети химия ва

гиромидошти хотираи д.и.х., профессор, академики АИ ЧТ Нӯъмонов Ишонқул Усмонович (12-14 сентябри 2020). - Душанбе - 2020. С. 67-71.

[8–А] Камолова И.У. Комплексное соединение железа(II) с мерказолиллом при 298 К, $J = 0,25$ моль/л/ Ёрмамадова С.Г., Камолова И.У., Раджабов У.Р. // Маводи конференсияи ҷумҳуриявӣ бо иштироки олимони хориҷи дар мавзӯи “пайвастиҳои комплекси ва ҷанбаҳои истифодабарии онҳо”, бахшида ба “70-солагии хотираи узви вобастаи АИ ЧТ, доктори илмҳои химия, профессор Аминҷонов Азимҷон Олимович” (20-21 октябри соли 2021) - Душанбе. - 2021. – С.147-149

[9–А] Камолова И.У. Комплексообразование железа (II) с мерказолиллом при 298 К и ионной силе 1,0 моль/л/ Ёрмамадова С.Г., Камолова И.У., Раджабов У.Р. // Маводи конференсияи байналмилалӣ илмию амали дар мавзӯи “рушди илми химия ва соҳаҳои истифодабарии он”, бахшида ба 80-солагии гиромидошти хотираи д.и.х, узви вобастаи АМИТ, профессор Кимсанов Бури Ҳақимович (10 ноябри соли 2021) - Душанбе. - 2021. – С.197-199

[10–А] Камолова И.У. Изучение комплексобразование железа(II) с мерказолиллом при 298К и ионной силе 0,1 моль/л./ У.Раджабов, С.Г.Ёрмамадова, И.У.Камолова. // Маҷмуи мақолаҳои конференсияи V илмӣ-байналмилалӣ дар мавзӯи “масъалаҳои химияи физикӣ ва координатсионӣ” бахшида ба гиромидошти хотираи докторони илмҳои химия, профессорон Ҳомид Муҳсинович Якубов ва Зухуриддин Нуриддинович Юсупов (15-16 ноябри соли 2021) - Душанбе. - 2021. – С.87- 90

[11–А] Камолова И.У. Комплексное соединение железа(II) с мерказолиллом при 298 К и ионной силе 0,1 моль/л./ И.У. Камолова, С.Г. Ёрмамадова, У.Раджабов. “Современная медицина: Традиции и инновации”. Юбилейная (70-я) научно-практическая конференция ГОУ ТГМУ им. Абуали ибни Сино с международным участием. -Душанбе -2022. С.133-136.

[12–А] Камолова И.У. Зависимость ионной силы раствора в системе Fe(II) - Fe(0) – мерк – H₂O./ И.У.Камолова, С.Г.Ёрмамадова, У.Раджабов. Конференсияи ҷумҳуриявӣ илмӣ-амалӣ дар мавзӯи “Вазъи кунунӣ ва дурнамои таҳлили физико-химиявӣ”, бахшида ба эълон гардидани ҳадафи чоруми стратегӣ-саноаткунони кишвар, солҳои 2022-2026-солҳои рушди саноат, 65-солагии таъсисёбии кафедраи “химияи умумӣ ва ғайриорганикӣ ва гиромидошти хотири арбоби илм ва техникаи Тоҷикистон, доктори илмҳои химия, профессор, Лутфулло Солиев (15-16-уми март соли 2023) -Душанбе. – 2023 . – С.45

[13–А] Камолова И.У. Таъсири қувваи ионӣ ба раванди комплексҳосилкунӣ дар системаи Fe(II)-мерк-H₂O дар ҳарорати 308К. /И.У.Камолова, С.Г.Ёрмамадова, У.Раджабов. // Конференсияи байналмилалӣ илмӣ-амалӣ дар мавзӯи “Рушди самтҳои нав дар химия ва технологияи химиявӣ” бахшида ба гиромидошти хотираи академики АМИТ,

доктори илмҳои химия, профессор Сафиев Ҳайдар (26 – октябри соли 2023). – Душанбе, -2023, С.172-175.

[14–А] Камолова И.У. Комплексообразования Fe(II) – мерказолил – H₂O методом оксредметрии. / И.У.Камолова, С.Г.Ёрмамадова, У.Раджабов. // Всероссийская школа – конференция молодых ученых «ДНИ НАУКИ В ИГХТУ» (24-28 апреля 2023 года).-Иванова, 2023, -С.124-126.

Патент

[15–А]. Камолова И.У. Пайвастагии комплекси диаква ди (1-метил 2 меркапто имидазол) руҳ (II) сульфат, дорои фаъолияти метаболикӣ. / С.Г. Ёрмамадова, И.У. Камолова., У.Р. Раджабов, К. Далери, З.А. Шоэдарова. // Патент РТ № ТҶ/1217. 2021 г..

АННАТАЦИЯ

на диссертационную работу Камоловой Иклимы Усмоновне на тему : «Процессы комплексообразования Fe(II) и Zn(II) с мерказолилом» на соискание ученой степени доктора философии (PhD) – доктор по специальности 6D060600 – 02.04.00. Физическая химия

Актуальность и необходимость проведения исследований по данной проблеме. Интерес к исследованию и синтезу координационных соединений ионов d-элементов с азотсодержащими гетероциклами в том числе с имидазолами, в последние десятилетия, как показывает приведенный литературный обзор, сильно возрос. Такой интерес, прежде всего вызван тем, что координационные соединения ионов d-элементов на основе азот и серосодержащих лигандов обладают эффективными фармакологическими действиями. Как показывают многочисленные исследования такие вещества широко распространены в природе и являются неотделимыми элементами живых организмов.

В результате реакции Zn(II) и Fe(II) с лигандами т.е. с гетероциклами, получается координационные вещества, которые проявляет фармакологические свойства. Алексеенком показано активность Zn(II) которые лежат в пределах от 39 до 89%.

Сегодня широко используется координационное соединение (1-метил-2-меркаптамидазол), с металлами. Поэтому исследование комплексов Zn(II) и Fe(II) с (1-метил-2-меркаптамидазол), актуально.

Научная новизна работы:

- методом окислительной функции исследованы реакции образования комплексов Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазол;
- установлены химический состав комплексов в области различных рН среды раствора, выявление максимального выхода образующихся комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с 1-метил-2-меркаптамидазолом;
- разработаны впервые условия синтеза комплексных соединений железа(II) и цинка(II) с с 1-метил-2-меркаптамидазолом в твердом виде;
- методами элементного анализа, ИК-спектроскопии, кондуктометрии, криоскопии, молярная электропроводности, дервотография и электропарамагнитным резонансом определены состав и строение комплексное соединение железа(II) и цинка(II) с 1-метил-2-меркаптамидазолом.
- для выявления механизмов образования комплексных соединений рассчитаны термодинамические характеристики реакций комплексообразования железа и цинка с 1-метил-2-меркаптамидазолом;
- изучены впервые острая, хроническая и раздражающие свойства комплексов Fe(II) и Zn(II) с 1-метил-2-меркаптамидазолом.

Ключивые слова: комплексное соединение, железа, цинк, оксидметрия, окислительный потенциал, комплексообразования, окислительная функция.

Шарҳи мухтасар

Ба диссертатсияи Камолова И.У дар мавзуи “Равандҳои комплексошукунии Fe(II) ва Zn(II) бо мерказолил” барои дарёфти дараҷаи доктори фалсафа (Ph.D) – доктор аз рӯи ихтисос 6D060600 - «Химия» (6D060604- Химияи физикӣ)

Мубрамиш мавзӯи таҳқиқот. Дар асоси таҳлили адабиёт маълум гардид, ки солҳои охир оид ба синтез ва таҳқиқи хосиятҳои физикӣ-химиявии пайвастагиҳои нави координатсионии ионҳои металлҳои интиқоли бo гетеросиклҳои нитрогендор, аз ҷумла имидазолҳо асарҳои зиёде ба таърифи расидаанд. Пайвастиҳои координатсионии ионҳои металлҳои интиқоли дар асоси лигандҳои нитрогендор ва сулфурдор хосияти баланди фармакологӣ доранд.

Бояд гуфт, ки ҳангоми бo пайвастагиҳои аз ҷиҳати биологӣ фаъол, аз ҷумла азолҳо таъсир намудани биометалҳои руҳ ва оҳан пайвастагиҳои комплексие ҳосил мешаванд, ки дорои фаъолияти биологӣ хос мебошанд. Самаранокӣ ва мавҷудияти руҳ дар меъдаи ҳоли аз 39 то 89% аст.

Имрӯз пайвастагии координаторӣ (1-метил-2-меркаптамидазол) бo металлҳои васеъ истифода мешавад. Аз ин рӯ, омӯзиши комплексҳои Zn(II) ва Fe(II) бo (1-метил-2-меркаптамидазол) муҳим аст.

Навоариш илмӣ кор:

- бo усули функцияи оксидонӣ реаксияи ҳосилшавии пайвасти комплекси Fe(II) ва Zn(II) бo мерказолил омӯхта шуд;

- таркиби комплексҳои Fe(II) ва Zn(II) бo 1-метил-2-меркаптоимидазол дар муҳити обӣ дар ҳудудҳои гуногун муайян карда шуд.

- бори аввал шароити синтез кардани пайвастагиҳои координатории оҳан(II) ва руҳ(II) бo 1-метил-2-меркаптамидазол муайян карда шуданд;

- бo усулҳои таҳлили элементӣ, спектроскопияи инфрасурх, кондуктометрия, криоскопия, дервотография ва резонанси электропарамагнитӣ таркиб ва сохти пайвасти комплекси Fe(II) ва Zn(II) бo 1-метил-2-меркаптоимидазол муайян карда шуд;

- барои муайян кардани механизмҳои ҳосилшавии пайвастагиҳои комплексӣ хосиятҳои термодинамикии реаксияҳои комплекси ҳосилшавии оҳан ва руҳ бo 1-метил-2-меркаптоимидазол ҳисоб карда шуданд;

- хосиятҳои захрнокии шадид, музмин, хосиятҳои аллергенӣ ва ангезандагии комплексҳои Fe(II) ва Zn(II) с 1-метил-2-меркаптоимидазол бори аввал омӯхта шуданд;

Калидвожаҳо: пайвастагиҳои комплексӣ, оҳан, руҳ, оксидметрия, , потенциали оксидонӣ, комплексҳосилкунӣ, функцияи оксидонӣ.

ANNATATION

on the dissertation work of Kamolova Iklima Usmonovna on the topic: "Processes of complexation of Fe (II) and Zn (II) with mercazolil" for the degree of Doctor of Philosophy (PhD) - Doctor in the specialty 6D060600 - 02.04.00. Physical Chemistry

Relevance and necessity of conducting research on this problem. Interest in the study and synthesis of coordination compounds of ions of d-elements with nitrogen-containing heterocycles, including imidazoles, in recent decades, as shown by the above literature review, has greatly increased. Such interest is primarily due to the fact that coordination compounds of ions of d-elements based on nitrogen and sulfur-containing ligands have effective pharmacological effects. As numerous studies show, such substances are widespread in nature and are inseparable elements of living organisms. As a result of the reaction of Zn (II) and Fe (II) with ligands, i.e. with heterocycles, coordination substances are obtained that exhibit pharmacological properties. Alekseenko showed the activity of Zn (II) which lies in the range from 39 to 89%.

Today, the coordination compound (1-methyl-2-mercaptimidazole) with metals is widely used. Therefore, the study of Zn (II) and Fe (II) complexes with (1-methyl-2-mercaptimidazole) is relevant.

Scientific novelty of the work:

- the oxidation function method was used to study the reactions of formation of Fe (II) and Zn (II) complexes with 1-methyl-2-mercaptimidazole;

- the chemical composition of the complexes in the range of different pH of the solution medium was determined, the maximum yield of the resulting complex compounds of iron (II) and zinc (II) with 1-methyl-2-mercaptimidazole was identified;

- conditions for the synthesis of complex compounds of iron (II) and zinc (II) with 1-methyl-2-mercaptimidazole in solid form were developed for the first time;

- the composition and structure of the complex compound of iron (II) and zinc (II) with 1-methyl-2-mercaptimidazole were determined using elemental analysis, IR spectroscopy, conductometry, cryoscopy, molar conductivity, dervotography and electroparamagnetic resonance.

- the thermodynamic characteristics of the complexation reactions of iron and zinc with 1-methyl-2-mercaptimidazole were calculated to identify the mechanisms of formation of complex compounds;

- acute, chronic and irritant properties of Fe(II) and Zn(II) complexes with 1-methyl-2-mercaptimidazole were studied for the first time.

Keywords: complex compound, iron, zinc, oxrenometry, oxidation potential, complex formation, oxidation function.