

УДК:546.71
ББК:24.1(2Т)
Х-18

Ба ҳуқуқи дастнавис

ҲАМИДОВА ФИРУЗА РАУФОВНА

ПАЙВАСТАҲОИ КООРДИНАТСИОНИИ МОЛИБДЕН (V) БО 1,2,4-
ТРИАЗОЛТИОЛ ВА ТИОСЕМИКАРБАЗИД

А в т о р е ф е р а т и
диссертатсия барои дарёфти дараҷаи
илмии номзади илмҳои химия

02.00.01 - Химияи ғайриорганикӣ

Душанбе – 2023

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

Рохбари илмӣ: **Азизкулова Она Азизкуловна**
доктори илмҳои химия, профессори кафедраи химияи ғайриорганикии Донишгоҳи миллии Тоҷикистон

Муқарризони расмӣ:

- **Раҷабов Умаралӣ Раҷабович**, доктори илмҳои химия, профессори кафедраи химияи фармасевтӣ ва захршиносии МДТ «Донишгоҳи давлатии тиббии Тоҷикистон ба номи Абуалӣ ибни Сино».

- **Мусочонова Чамила Мансур**- номзади илмҳои химия, дотсенти кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикии ДДОТ ба номи С. Айнӣ

Муассисаи пешбар: Донишгоҳи техникийи Тоҷикистон ба номи академик М.С. Осимӣ, кафедраи химияи умумӣ ва ғайриорганикӣ

Ҳимояи диссертатсия «28» сентябри соли 2023, соати 10:00 дар чаласаи шурои диссертатсионии 6Д.ҚОА - 010-и назди Донишгоҳи миллии Тоҷикистон баргузор мегардад. Суроға: 734025, ш. Душанбе, хиёбони Рӯдакӣ, 17 Донишгоҳи миллии Тоҷикистон бинои асосӣ, толори шурои диссертатсионӣ, ошёнаи 2. E-mail: ikromovich80@mail.ru

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

Автореферат «_____» _____ соли 2023 фиристода шудааст.

Котиби илмии шурои
диссертатсионӣ, д.и.х, и.в. профессор

Раҷабов С.И.

МУҚАДДИМА

Мубрами мавзуи таҳқиқот. Молибден яке аз микроэлементҳои муҳими таркиби ғизои инсон, ҳайвонот ва растаниҳо мебошад, ки барои ташаккули муътадил, сабзиш ва афзоиши организми зинда таъсири мусбат мерасонад. Ин элемент дар организми инсон барои нигоҳ доштани фаъолияти ферменти ксантиноксидаза, ки дар бофтаҳо мубодилаи нитрогенро метезонад, зарур мебошад. Намаки ҳалшавандаи тиомолибдати аммоний антогонисти мис буда, барои аз организм баровардани он мусоидат менамояд. Молибден барои технологияи муосир ниҳоят зарур мебошад. Қисми зиёди молибдене, ки дар саноат истифода мешавад, аз ҷумла дар металлургияи сиёҳ барои истеҳсоли пӯлодҳои ба гармӣ тобовар ва дигар навъҳои хӯлаҳо, инчунин дастгоҳҳои зудбурранда, тайёр намудани ноқилҳо, варақаҳо барои электроника, саноати радиотехникӣ, мавриди истифодаи васеъ қарор дорад. Дар айнаи ҳол пайвастаҳои гуногуни молибден, аз ҷумла, пайвастаҳои координатсионии онро бо лигандҳои органикӣ барои истеҳсоли моддаҳои биофаъл, рангу бор ва дорувориҳо истифода менамоянд.

Дар байни лигандҳои органикӣ пайвастаҳои синфи триазол ва ҳосилаҳои онҳо мавқеи хоса доранд. Зеро аксарияти ҳосилаҳои триазол дорои фаъолияти баланди биологӣ мебошанд. Инчунин ҳосилаҳои триазол дар саноати химия ҳамчун маҳсулоти мобайнӣ барои истеҳсоли катализаторҳои самаранок, равшанкунандаи оптикӣ, пластификаторҳо, ингибиторҳо ва гербитсидҳо истифода мешаванд.

Триазол ва ҳосилаҳои он бо ҳосият ва сохти гуногуни структуриашон диққати муҳаққиқонро ба худ ҷалб намудааст. Дар таркиби онҳо якчанд атомҳои донорӣ мавҷуд аст, ки қобилияти бо ионҳои металлҳо, бо тарзҳои гуногун: монодентатӣ, бидентатӣ ва бидентатӣ-кӯпрукчавӣ координатсия шуда, пайвастаҳои координатсионии таркибан мураккаб ва гуногунро метавонанд ҳосил намоянд.

Таҳлили систематикӣ адабиёти илмӣ нишон медиҳад, ки дар ду даҳсолаи охир, қорҳои илмӣ-таҳқиқотӣ, ки ба омӯзиши раванди комплексҳосилкунии d-металлҳои интиқолӣ, бо лигандҳои органикӣ нитроген ва сулфурдори қатори алифатӣ ва гетеросиклӣ маълумот нисбатан каманд.

Дарачаи таҳқиқи мавзӯи илмӣ. Дар адабиёт оид ба пайвастаҳои координатсионии молибден бо як қатор лигандҳои органикии нитроген ва сулфурдор, ба монанди 1-метил-2-меркаптоимидазол, 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион ва 8-оксихинолин, пайвастагиҳои координатсионии d-металлҳои интиқоли бо ҳосилаҳои 1,2,4-триазол ва равандҳои комплексоилкунии d-металлҳои интиқоли бо лигандҳои номбурда маълумот оварда шудааст.

Таҳлили адабиёт нишон дод, ки омӯзиши раванди комплексоилкунии молибден (V) дар маҳлул инчунин синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ ва дуядроии молибден (V) бо лигандҳои органикии 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид дар муҳити кислотаҳои органикии яқасоса омӯхта нашудааст.

Ҳамин тариқ дар кори диссертатсионии мазкур таҳқиқи раванди комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4- триазолтиол дар муҳитҳои 4,5-6 мол/л HCl бо усули потенциометрӣ, инчунин методикаи синтези 15 пайвастаҳои нави координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид коркард намуда, бо усулҳои муосири таҳқиқот, таркиб, сохт ва ҳосиятҳои пайвастаҳои синтезкардашуда муайян карда шуд.

Робитаи таҳқиқот бо барномаҳо (лоиҳаҳо) ва ё мавзӯҳои илмӣ

Кори диссертатсионии мазкур дар кафедраи химияи ғайриорганикии факултети химияи Донишгоҳи миллии Тоҷикистон иҷро гардидааст. Диссертатсияи номзадӣ мувофиқ ба нақшаи корҳои илмӣ-таҳқиқотии кафедраи химияи ғайриорганикии ДМТ “Пайвастҳои комплекси металлҳои интиқоли ва ҷанбаҳои татбиқи амалии онҳо (маводҳои полимерӣ-композитсионӣ, маводи доруворӣ, электролитҳо барои руйпушкунӣ, истихроҷи металлҳои қиматбаҳо ва пароканда аз партовҳои истеҳсоли)” (рақами бақайдгирии давлатӣ № 0107 ТД 601). ба анҷом расидааст.

ТАВСИФИ УМУМИИ ТАҲҚИҚОТ

Мақсади таҳқиқот. Омӯзиш ва муайян намудани қонуниятҳо дар раванди комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид, синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид дар муҳитҳои кислотагӣ ва обӣ, инчунин раванди ҷойивазкунии лигандҳо дар пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ ва дуядроии молибден (V) мебошад.

Вазифаҳои таҳқиқот:

- омӯзиши раванди комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳитҳои 4,5-6 мол/л HCl ва ҳароратҳои 273-338 К. Бо истифода аз усулҳои замонавии физикию химиявӣ, муайян кардани собитҳои устуворӣ ва функцияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси;

- бо усулҳои коэффитсиенти ҳароратӣ ҳисоб кардани функцияҳои термодинамикӣ (ΔH , ΔS ва ΔG) ва муайян кардани саҳми ΔH ва ΔS дар худ аз худ гузаштани раванди комплексоилшавӣ;

- коркарди усулҳои синтези пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид. Бо усулҳои гуногуни физикӣ-химиявӣ муайян намудани таркиб ва сохти пайвастаҳои координатсионии синтез кардашуда.

Объекти таҳқиқот: Омӯзиши раванди комплексоилкунии дар системаи $[MoOCl_5]^{2-}$ -1,2,4-триазолтиол-HCl дар ҳароратҳои 273-338 К дар концентратсияҳои 4,5-6 мол/л HCl, инчунин ҷустуҷӯи усулҳои синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ ва дуядрӣ молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид мебошад.

Мавзӯи таҳқиқот. Комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид дар ҳароратҳои 273-338 К, инчунин синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид аст.

Навгониҳои илмӣ таҳқиқот

1. Аввалин маротиба раванди комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар маҳлули кислотаи гидрогенхлорид дар ҳароратҳои 273-338 К омӯхта шуд. Бо истифода аз усулҳои замонавии физикию химиявӣ имконияти муайян кардани собитҳои устуворӣ ва функцияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси муҳайё гардид.
2. Муайян карда шуд, ки бо зиёд шудани ҳарорат, миқдори зарраҳои комплекси тағйир намеёбад, аммо собитҳои устувори зарраҳои комплекси кам мешавад. Муқаррар карда шудааст, ки дар ҳама ҳароратҳо зина ба зина аз як то панҷто зарраҳои комплекси ҳосил мешавад.
3. Бо теъдоди 15-адад пайвастаҳои нави координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид синтез карда шуд. Сохт ва таркиби пайвастаҳои координатсионии синтезкардашуда бо усулҳои таҳлили элементии химиявӣ, кондуктометрӣ, спектроскопияи инфрасурх ва термогравиметрӣ муайян карда шудааст.

Аҳамияти илмӣ-назариявӣ ва амалии таҳқиқот

- дар асоси таҳқиқотҳо ба даст овардани натиҷаҳои аниқ ва саҳеҳи қиматҳои эксперименталӣ;

- муқоисаи натиҷаҳо бо натиҷаҳои дар адабиёт овардашуда, зоҳиркунии мувофиқатии онҳо;

- саҳеҳии қонуниятҳои назариявии муқарраршуда ва хулосаҳои асосии кори диссертатсионӣ бо асосҳои химияи координатсионӣ;

- моддаҳои синтезшуда бо усули муосири физикӣ-химиявӣ ва таносуби моддаҳои боҳамтаъсиркунанда, шароити оптималии реаксия вобаста аз омилҳои физикавӣю химиявӣ илман асоснок карда шудааст.

Аҳамияти илмию амалии таҳқиқот дар он аст, ки методикаи синтези пайвастаҳои координатсионӣ, ки дар диссертатсия коркард шудааст, барои синтези пайвастаҳои нави координатсионии d-металлҳои интиқоли дорои лигандҳои органикии гетеросикли мақсаднок истифода бурдан мумкин аст.

- натиҷаҳои кори диссертатсионӣ барои омӯзгорони фанни химияи ғайриорганикии барои гузаронидани лексия аз химияи ғайриорганикӣ ва курсҳои махсус, барои гузаронидани корҳои илмӣ таҳқиқотии магистрон, унвонҷӯён, корҳои курсӣ ва рисолаи хатми донишҷӯёни мактабҳои олӣ бо самти химиявӣ аз манфиат холи нест.

- пайвастаҳои координатсионии синтезкардашудаи оксохлоро 1,2,4-триазолтиолӣ ва тиосемикарбазиди молибден (V) моддаҳои нави устувори дорои фаъолияти баланди биологӣ буда, ба сифати моддаҳои биофаъл, инчунин катализатор ва наноиловаҳо ба маводҳои композитсионӣ истифода бурдан мумкин аст.

Нуқтаҳои ба химоя пешниҳодшаванда:

- муайянкунии собитҳои устуворӣ ва функцияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси Мо(V) бо 1,2,4-триазолтиол дар маҳлулҳои 4,5-6 мол/л HCl дар ҳароратҳои 273-338 К. Баҳодиҳии таъсири ҳалкунанда ва ҳарорат ба устувории пайвастаҳои комплекси Мо(V) бо 1,2,4-триазолтиол;

- дарёфти қонуният дар тағирёбии функцияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплекси Мо (V) бо 1,2,4-триазолтиол вобаста аз миқдори лиганд дар сфераи дохилии пайвастаҳои комплексӣ. Таъсири ΔH , ΔS ва ΔG (энергияи Гиббс) дар реаксияҳои комплексҳосилшавӣ;

- коркарди методикаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии Мо(V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид дар намуди моддаи

сахт бо баромади максималии маҳсули реаксия. Натиҷаҳои омӯзиши хосиятҳои спектралӣ, ҳароратӣ ва кондуктометрии пайвастаҳои координатсионии ҳосилкардашуда.

Дарачаи эътимоднокии натиҷаҳо: таҳқиқи раванди комплексҳосилшавии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол барои муайян намудани функсияи ҳосилшавии комплексҳо, консентратсияи мувозинатии лиганд, бузургиҳои собитҳои устуворӣ, ҳиссаи молиии зарраҳои комплексӣ бо усули потенциометрӣ (дар таҷҳизоти компаратори Р-3003 МІ ва рН-метри П-25) истифода намудем.

Барои муайян намудани таркиб, сохт ва хосиятҳои моддаҳои синтезкардашуда таҳқиқотҳои зерин гузаронида шуд: кондуктометрӣ (дар таҷҳизоти HANNA “HI 8733 Conductivity meter”), спектрҳои инфрасурх (дар асбоби “Specord IR-75” ва спектромер “SHIMADZU”), таҳқиқоти термогравиметрӣ (дар таҷҳизоти Паулик-Паулик-Эрдей, тамғаи Q-1500) анҷом додем.

Мутобиқати диссертатсия ба шиносномаи ихтисоси илмӣ

Диссертатсия ба якҷанд банди шиносномаи ихтисоси 02.00.01-“Химияи ғайриорганикӣ” мутобиқат мекунад:

Мувофиқи банди 1. Таҳқиқи равандҳои комплексҳосилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар маҳлулҳои 4,5-6,0 мол/л бо усули титронидани потенциометрӣ. -бобҳои 2.1, 2.2 ва 2.3;

Мувофиқи банди 2. Синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид. -бобҳои 3.1, 3.2, 3.3, 3.4 ва 3.5;

Мувофиқи банди 3. Хосиятҳои физикию химиявии пайвастаҳои координатсионии молибден (V). -бобҳои 4.1, 4.2 ва 4.3;

Саҳми шахсии докталаби дарачаи илмӣ дар таҳқиқот:

муаллифи кори диссертатсионӣ дар ҳамаи марҳилаҳои таҳқиқот аз гузоштани масъала ва иҷрои амалҳои он то таҳлили натиҷаҳои бадастовардашудаи эксперименталӣ иштироқи бевосита намуд. Дар диссертатсия натиҷаҳои таҳқиқоти муаллиф оид ба омӯзиши равандҳои комплексҳосилкунии Mo(V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид, инчунин оиди синтез ва таҳқиқи физикӣ химиявии пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4- триазолтиол ва тиосемикарбазид баррасӣ шудааст.

Тасвир ва амалисозии натиҷаҳои диссертатсия. Натиҷаҳои асосии кори диссертатсионӣ дар конференсияҳои зерин маъруза ва муҳокима карда шуд:

-байналмилалӣ: конференсияи байналмилалӣ дар мавзӯи “Илми химияи муосир ва чанбаҳои амалии он”, Душанбе, 2006; “Кимиёи пайвастиҳои алифатӣ, сиклии глитсерин ва соҳаҳои истифодабарии он”, Душанбе, 2016; Конференсияи IV-и илми байналмилалӣ “Масъалаҳои кимиёи физикӣ ва координатсионӣ”, Душанбе, 2019; “Масъалаҳои муосири химия, татбиқӣ ва дурнамои онҳо”, Душанбе, 2019; “Дурнамои рушди таҳқиқи пайвастиҳои координатсионӣ ва истифодаи амалии онҳо”, Душанбе, 2022.

-ҷумҳуриявӣ: конференсияи ҷумҳуриявии илмӣ-назариявӣ ҳайати устодон ва корманони ДДМТ “Ба номи сулҳ ва хушбахтии рӯи замин” Душанбе, 2005; “15-солагии Истиқлолияти Ҷумҳурии Тоҷикистон”, “2700 солагии шаҳри Кӯлоб” ва “Соли тамаддуни ориёӣ”, Душанбе, 2006; “800-солагии шоир ва мутафаккири барҷаста Мавлоно Чалолуддини Балхӣ” ва “16-умин солгарди Истиқлолияти давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон”, Душанбе, 2007; “Дастовардҳои илми кимиё ва масоили таълими он”, Душанбе, 2007; “17-умин солгарди Истиқлолияти давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон”, 1150 -солагии сардафтари адабиёти классикии тоҷику форс Абӯабдуллоҳи Рӯдакӣ ва соли бузургдошти забони тоҷикӣ”, Душанбе, 2008; “Перспективаҳои инкишофи таҳқиқот дар соҳаи химияи пайвастиҳои координатсионӣ”, Душанбе, 2011; “Дурнамои истифодаи технологияҳои инноватсионӣ ва тақмили маълумоти техникӣ дар макотиби олии ИДМ”, Душанбе, 2011; “Комплексҳосилкунӣ дар маҳлулҳо”, Душанбе, 2012; “Пайвастиҳои комплексӣ ва чанбаҳои истифодабарии онҳо”, Душанбе, 2013; “Силсилаи илмҳои табиӣ ва иқтисодӣ”, Душанбе, 2014; “700-солагии Мир Сайид Алии Ҳамадонӣ”, “Соли оила” ва даҳсолаи байналмилалии амалиёти “Об барои ҳаёт” солҳои 2005-2015, Душанбе, 2015; “25-солагии Истиқлолияти давлатии Ҷумҳурии Тоҷикистон”, Душанбе, 2016; “20-солагии Рӯзи Ваҳдати миллӣ” ва “Соли ҷавонон”, Душанбе, 2017; “Пайвастиҳои комплексӣ ва чанбаҳои истифодабарии онҳо”, Душанбе, 2018; “Об барои рушди устувор, солҳои 2018-2028” ва “80-солагии Юсуфов Тилло Юсуфович”, “Синтези ҳосилаҳои нави глитсеринӣ аз ҷиҳати биологӣ фаъол дар асоси амминокислотаҳо, пептидҳо ва фуллерен C₆₀”, Душанбе, 2018; “Солҳои рушди деҳот, сайёҳӣ ва ҳунарҳои мардумӣ (солҳои 2019-2021)” ва “400-солагии Миробид Сайидои Насафӣ”, Душанбе, 2019; “Ҳолати муосири илми химия ва истифодабарии дастовардҳои он дар ҳоҷагии халқи Ҷумҳурии Тоҷикистон”, Душанбе, 2019; “5500-солагии Саразми бостонӣ”, “700-

солагии шоири барҷастаи тоҷик Камоли Хучандӣ” ва “Бистсолаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (солҳои 2020-2040)”, Душанбе, 2019; “Заминаҳои рушд ва дурнамои илми химия дар Ҷумҳурии Тоҷикистон”, Душанбе, 2020; “30-солагии истиқлолияти Ҷумҳурии Тоҷикистон, 110-солагии шоири халқии Тоҷикистон, қаҳрамони Тоҷикистон Мирзо Турсунзода, 110-солагии нависандаи халқии Тоҷикистон Сотим Улуғзода ва “20-солаи омӯзиш ва рушди фанҳои табиатшиносӣ, дақиқ ва риёзӣ дар соҳаи илму маориф (солҳои 2020-2040)”, Душанбе, 2021; “Саҳми усулҳои замонавии таҳлил дар рушди илм ва истеҳсолот”, Душанбе, 2022.

Интишорот аз рӯи мавзӯи диссертатсия. Оид ба мавзӯи кори диссертатсионӣ 6 мақола ба маҷаллаҳои тақризшавандаи КОА-и назди Президенти ҶТ ва 30 фишурдаи маъруза дар маҷлаҳои конференсияҳои байналмиллалӣ ва ҷумҳуриявӣ дарҷ гардидаанд.

Сохтор ва ҳаҷми диссертатсия. Диссертатсия аз муқаддима, чор боб, хулосаҳои таҳияшуда, саҳифаи матни асосӣ, 32 тасвири графикӣ ва 24 ҷадвалро дар бар мегирад. Рӯйхати сарчашмаҳои истифодашуда аз 169 номгӯй иборат буда, диссертатсия 170 саҳифаи ҷопии компютериеро дар бар мегирад.

МУҲИМТАРИН НАТИҶАҲОИ ТАҲҚИҚОТ ВА МУҲОКИМАИ ОНҲО

Дар муқаддима мубрамияти кори диссертатсионӣ мақсад, вазифа ва масоили таҳқиқот оварда шудааст. Инчунин нағзони илмӣ ва аҳамияти илмӣ кори диссертатсионӣ пешниҳод карда шудааст.

Дар боби аввали диссертатсия иттилоот ва таҳлил намудани адабиёти мувофиқ ба мавзӯи илмӣ оварда шуда, маълумот оиди хосиятҳои физикию химиявии 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид, соҳаҳои истифодаи онҳо дарҷ гардидааст. Оид ба ионҳои пайвастаҳои координатсионии як қатор металлҳои интиқоли бо 1-метил-2-меркаптоимидазол, 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион, 8-оксихинолин, ҳосилаҳои тиосемикарбазид, триазол ва дигар лигандҳои сохташон хаттию гетеросиклӣ низ маълумот гирд оварда шудааст.

Боби дуюм қисми таҷрибавӣ буда, усулҳои таҳқиқоти потенциометрии равандҳои комплексҳосилкунии молибден(V)

бо истифодаи лигандҳо (дар асоси 1,2,4-триазолтиол ва шакли оксидшудаи он) дар маҳлулҳои 4, 5- 6,0 мол/л HCl, дар ҳудуди ҳароратҳои 273-338 К оварда шудаанд.

Дар боби сеюм усулҳои коркардшудаи синтези пайвастаҳои нави координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид дар маҳлулҳои HCl, CH₃COOH ва HCOOH, дар иштироки NH₄SCN пешниҳод гардидаанд. Дар асоси натиҷаҳои таҳлили элементӣ муайян карда шуд, ки вобаста аз таносуби Mo:L ва шароити гузаронидани таҷриба, пайвастаҳои координатсионии гуногунлиганди оксогалогенӣ, оксогидрокси-1,2,4-триазолтиолӣ ва тиосемикарбазидии молибден (V), ки сохт ва таркиби гуногун дорад, ҳосил мешаванд.

Дар боби чорум натиҷаҳои таҳқиқоти физикию химиявӣ оид ба муқаррар намудани таркиб ва сохти пайвастаҳои координатсионии синтезшудаи молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид, пешниҳод карда шудааст. Барои муайян намудани тарзи координатсияшавии 1,2,4-тиразолтиол ва тиосемикарбазид ба иони молибден (V) таҳлили спектри инфрасурхи молекулаҳои лиганди координатсиянашуда ва пайвастаҳои координатсионии синтезшударо анҷом додем.

Кори диссертатсия бо хулоса ва феҳрасти адабиёти истифодашуда анҷом меёбад.

Таҳқиқи равандҳои комплексҳосилкунии молибден (V) бо комплексҳои тиаамидии 1,2,4-триазолтиол дар муҳити HCl

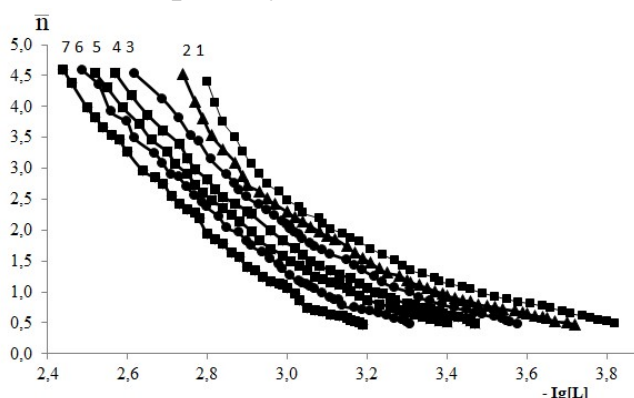
Раванди комплексҳосилкунии молибден(V) дар маҳлулҳои 4,5-6,0 мол/л HCl дар ҳароратҳои 273-338 К, бо истифода аз электроди оксиду-барқароршудаи лиганд, ки дар асоси 1,2,4-триазолтиол ва шакли оксидшудаи он ҳосил карда шудааст, таҳқиқ карда шуд.

Мувофиқи таҳлили адабиёти гирдовардашуда, баргарданда будани раванди оксидшавии 1,2,4-триазолтиол то дисулфиди он, дар маҳлули HCl тавассути омӯзиши вобастагии потенциали мувозинатии система аз нисбати логарифмаи концентратсияи шакли оксидшуда ва барқароршудаи 1,2,4-триазолтиол дар маҳлулҳои 4,5-6,0 мол/л HCl дар ҳароратҳои 273-338К исбот карда шудааст.

Таҳқиқот нишон медиҳад, ки вобастагии $E_i = f\left(\lg \frac{[R-S-S-R]}{[RS]^2}\right)$ дар муҳити 6,0 мол/л HCl дар ҳамаи ҳудудҳои ҳарорат ҳосияти хаттӣ дошта, тангенс кунҷи ҳамгашти он аз 24,68 то 33,27 мВ тағйир меёбад. Бо

истифодаи муодилаи Нернст қиматҳои аниқи потенциали реалӣ E^0 , коэффитсиенти (f), ва қимати ҳудуди имконпазири онҳо тавассути коркарди бузургиҳои эксперименталии ба дастомада, бо усули регрессионӣ муайян карда шуд.

Дар натиҷаи тавассути таҷриба муайян намудани баргардандагии системаи оксидшавӣ-барқароршавии R-S-S-R/RS дар муҳитҳои 4,5-6,0 мол/л HCl, бо усули титронидани потенциометрӣ, раванди комплексҳосилкунии молибден(V) дар муҳити зикргардида ва ҳароратҳои 273-338K, омӯхта шуд. Нишон дода шудааст, ки раванди комплексҳосилкунӣ бо ҳосилшавии панҷ шакли зарраи комплексӣ, ки ҳатто бо усули Биеррум, низ муайян карда шуда буд, ба итмом мерасад. Дар расми 1, ба сифати намуна қачхатаи ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиоли молибден(V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl, дар ҳароратҳои 273-338 K, ки дар асоси натиҷаҳои титронидани потенциометрӣ сохта шудаанд, пешниҳод карда шудааст.



Расми 1. Қачхатаи ҳосилшавии комплексҳои 1,2,4-триазолтиоли молибден (V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl, дар ҳароратҳои 273-338 K

Бо истифода аз вобастагии қимати функцияи ҳосилшавӣ (қачхатаҳои ҳосилшавӣ) ва логарифми баръакси консентратсияи мувозинатии лиганд - $Ig(L)$ қиматҳои тақрибии собитҳои устувори панҷ комплексҳои молибден(V) дар маҳлули 6 мол/л HCl дар 273-338K (ҷадвали 1) ҳисоб карда шуд.

Аз қиматҳои ҷадвали 1 дидан мумкин аст, ки дар муҳити 6,0 мол/л, бо зиёдшавии ҳарорат бузургиҳои собитҳои устувори комплексҳои зинагии оксохлоро-1,2,4-триазолтиоли молибден(V) кам мешаванд. Қиматҳои таҷрибавии ба дастомада, аз раванди экзотермӣ будани ҳосилшавии пайвастаҳои координатсионии молибден(V) бо лигандҳои тиоамидии мазкур, шаҳодат медиҳанд.

Азбаски, собитҳои устувори комплексҳо тавассути усули графיקии Биеррум муайян гардидаанд, бинобар ин, барои тасдиқ намудани онҳо

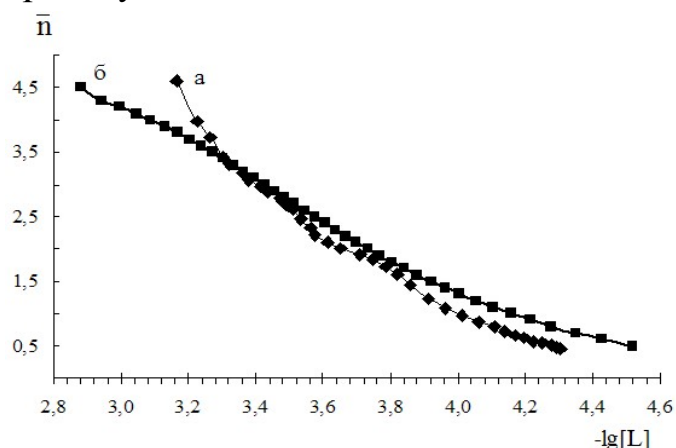
қиматҳои мазкурро аз ҳалли муодилаи 1-ум, бо истифодаи усули тақсимшавии нисфӣ нисбати концентратсияи мувозинатии лиганд [L] бо муодилаи зер коркард намудем:

$$\bar{n} = \frac{\beta_1[L] + 2\beta_2[L]^2 + 3\beta_3[L]^3 + 4\beta_4[L]^4 + 5\beta_5[L]^5}{1 + \beta_1[L] + \beta_2[L]^2 + \beta_3[L]^3 + \beta_4[L]^4 + \beta_5[L]^5} \quad (1)$$

Ҷадвали 1. Қиматҳои собитҳои устувориҳои зинагии (pK_i) комплексҳои оксохлоро 1,2,4-триазолтиолиии молибден(V)-и бо усули Биеррум дар муҳити 6 мол/л HCl ва ҳарорати 273-338 К ҳосилшуда

T, K	pK_1	pK_2	pK_3	pK_4	pK_5
273 K	3,94±0,18	3,41±0,11	3,14±0,11	2,91±0,12	2,73±0,13
288 K	3,71±0,14	3,21±0,11	2,95±0,10	2,81±0,11	2,71±0,12
298 K	3,54±0,14	3,43±0,13	3,15±0,11	2,89±0,12	2,75±0,10
308 K	3,46±0,12	3,07±0,12	2,83±0,10	2,69±0,11	2,56±0,10
318 K	3,41±0,12	3,05±0,10	2,81±0,11	2,64±0,11	2,52±0,10
328 K	3,31±0,14	2,96±0,10	2,78±0,11	2,61±0,11	2,46±0,10
338 K	3,23±0,11	2,85±0,10	2,62±0,13	2,54±0,11	2,44±0,10

Барои муайян намудани собитҳои устувориҳои комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) аз усули графикаи Биеррум истифода бурда шуд. Ҳисобкуниҳо бо барномаи коркардшудаи компютери Excel Borland Delphi иҷро гардиданд. Барои ҳамаи қиматҳои \bar{n} аз 0,5 то 4,5 бо дақиқии 0,1 концентратсияи мувозинатии лиганд ёфта шуд. Дар ин маврид аз собитҳои устувориҳои умумии (β), бо муодилаи 1 ҳисоб карда шуда, истифода намудем. Дар расми 2 қачхаттаи ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl, дар ҳарорати 298 К бо усули графикаи Биеррум (а) ва пас аз коркарди компютерӣ (б) оварда шудааст.



Расми 2. Қачхаттаи ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl, дар ҳарорати 298 К:
 а) мувофиқи натиҷаҳои эксперименталӣ;
 б) пас аз коркарди компютерӣ.

Дар чадвали 2, қимати аниқи собити устувории зинагии комплексҳои молибден(V), ки дар муҳити 6,0 мол/л HCl ва ҳароратҳои 273-338K ҳосил карда шудаанд, гирд оварда шудаанд.

Чадвали 2. Қимати аниқи собити устувории зинагии комплексҳои оксохлоро-1,2,4- триазолтиолиии молибден(V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl ва ҳароратҳои 273-338K

T, K	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄	K ₅
273 K	8,77·10 ³	2,59·10 ³	1,38·10 ³	8,06·10 ²	5,37·10 ²
288 K	5,13·10 ³	1,62·10 ³	8,84·10 ²	6,45·10 ²	5,12·10 ²
298 K	3,49·10 ³	2,69·10 ³	1,40·10 ²	7,82·10 ²	5,66·10 ²
308 K	2,90·10 ³	1,16·10 ³	6,81·10 ²	4,89·10 ²	3,60·10 ²
318 K	2,55·10 ³	1,11·10 ³	6,45·10 ²	4,36·10 ²	3,33·10 ²
328 K	2,04·10 ³	9,05·10 ²	6,07·10 ²	4,04·10 ²	2,90·10 ²
338 K	1,69·10 ³	7,13·10 ²	4,13·10 ²	3,46·10 ²	2,77·10 ²

Қимати аниқи собити устувориро истифода намуда, графики вобастагии $\lg K = f(1/T)$ -ро сохта, бузургиҳои функсияи термодинамикии раванди ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден (V)-ро дар муҳити 6,0 мол/л HCl, дар ҳароратҳои 273-338K (чадвали 3) ҳисоб намудем.

Чадвали 3. Қимати функсияҳои термодинамикии равандҳои ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) дар муҳити 6,0 мол/л HCl (273-338K)

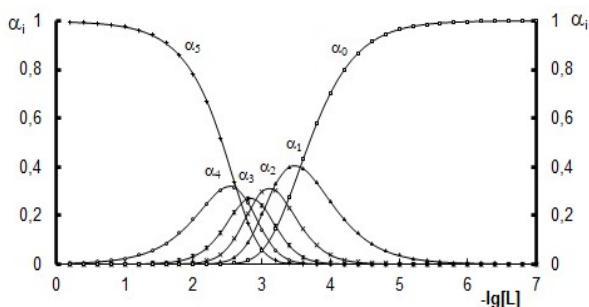
Таркиби пайвастаҳо	$-\Delta G,$ кҶ/мол	$-\Delta H,$ кҶ/мол	$\Delta S,$ Ҷ/К мол ⁻¹
$[MoO]^{3++} L = [MoOL]^{3+}$	20,62 ± 6,54	19,53 ± 3,30	3,65 ± 8,85
$[MoOL]^{3+} + L = [MoOL_2]^{3+}$	18,09 ± 6,16	13,73 ± 3,11	14,63 ± 7,22
$[MoOL_2]^{3++} L = [MoOL_3]^{3+}$	16,68 ± 7,17	12,57 ± 3,62	13,80 ± 6,89
$[MoOL_3]^{3++} L = [MoOL_4]^{3+}$	15,73 ± 1,48	9,89 ± 1,46	20,78 ± 2,46
$[MoOL_4]^{3++} L = [MoOL_5]^{3+}$	15,06 ± 2,89	9,54 ± 0,75	17,36 ± 12,16

Бузургиҳои дар чадвали 3 овардашударо метавон чунин маънидод кард, ки равандҳои ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) бо камшавии энергияи дохилии система амалӣ мешаванд. Дар ин маврид, бузургии ΔG , мувофиқи қоида зиёд мешавад. Сабаб дар он аст, ки адади молекулаҳои лиганди координатсияшуда, дар сфераи дохилии комплекс зиёд мегардад. Мушоҳида намудан мумкин аст, ки омилҳои энтропия(ΔS) ва энталпия (ΔH) дар зинаҳои гуногуни реаксияи

комплексҳосилшавӣ ба гузариши пурраи раванд таъсири якхела надоранд. Эҳтимол меравад, ки дар зинаи якуми он раванди солвататсия шудани молекулаҳои лиганди органикӣ бо ҳалкунанда афзалият мегирад ва бо ин амал ба зиёдшавии бетартибӣ дар система мусоидат менамояд. Муайян карда шуд, ки дар ҳамаи зинаҳои ихтиёран гузаштани раванди комплексҳосилшавӣ қимати энталпия манфӣ мебошад. Аз ин ҷо, чунин бармеояд, ки ҳангоми ихтиёран гузаштани реаксияи комплексҳосилшавӣ саҳми асосиро омили энталпия (ΔH) мегузорад.

Бо мақсади муқаррар намудани таъсири консентратсияи HCl ба таркиб ва устувории комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолии молибден(V), раванди комплексҳосилшави дар муҳитҳои 4,5-6,0 мол/л HCl , дар ҳароратҳои 273-338 К омӯхта шуд. Қиматҳои ҳосилшудаи қачхаттаи собитҳои устувории комплексҳои оксохлоридии 1,2,4-триазолии молибден (V), ки бо усули Биеррум муайян карда шудаанд, нишон медиҳанд, ки қиматҳои ҳамаи собитҳои устувории зинагӣ бо зиёд шудани ҳарорат чун қоида кам шуда, аммо зиёдшавии консентратсияи маҳлули HCl ба болоравии ин қиматҳо мусоидат менамояд. Зиёдшавии бузургҳои собити устувории комплексҳо бо барзиёд солвататсияи ионҳои молибденил $(\text{MoO})^{3+}$ ва молекулаҳои 1,2,4-триазолтиол, дар маҳлулҳои консентратсияаш болотар HCl мувофиқат менамояд.

Ҳисоб намудани консентратсияи ҳар як компонентаҳои системаи мураккабро ташкилдиҳанда, яке аз вазифаҳои асосии таҳқиқоти системаи мувозинатӣ мебошад. Бо мақсади муайян намудани бартарияти ҳудудҳои муайяншуда (доминирование) барои ҳамаи шаклҳои комплексҳои ҳосил гардида, дар системаи $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ -1,2,4-триазолтиол- HCl , дар ҳарорати 273-338 К диаграммаи тақсимотӣ (расми 3) сохта шуд.



Расми 3. Қачхатаи тақсимоти комплексҳои 1,2,4-триазолтиолии Mo(V) .

Вобастагии α аз $-\text{Lg}[L]$ дар ҳарорати 298: $\alpha_0 - (\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$; $\alpha_1 - [\text{MoOLCl}_4]^-$; $\alpha_2 - [\text{MoOL}_2\text{Cl}_3]^0$; $\alpha_3 - [\text{MoOL}_3\text{Cl}_2]^+$; $\alpha_4 - [\text{MoOL}_4\text{Cl}]^{2+}$; $\alpha_5 - [\text{MoOL}_5]^{3+}$

Таҳлили диаграммаи тақсимоти мазкур нишон медиҳад, ки дар системаи $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ -1,2,4-триазолтиол- HCl , дар ҳудудҳои васеи

концентратсияи лиганд дар маҳлул, комплексҳои моноивазшуда $[\text{MoOLCl}_4]^-$ бартарият доранд. Бо афзудани концентратсияи лиганд комплекси $[\text{MoOLCl}_4]^-$ ба $[\text{MoOL}_2\text{Cl}_3]$ ва ҳамин тавр, ба сеивазшуда, чор-, ва панчивазшуда мубаддал мешавад. Ҳисобкуниҳоеро, ки аз рӯи қиматҳои эксперименталӣ ба даст овардем, нишон доданд, ки дар системаи $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5] \cdot 1,2,4\text{-триазолтиол} \cdot \text{HCl}$, 5 заррачаи комплекси ҳосил мешавад.

Синтез ва таҳқиқи хосиятҳои физикию химиявӣ пайвастаҳои координатсионии синтезшудаи молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид, пешниҳод карда шудааст. Барои муайян намудани тарзи координатсияшавии 1,2,4-тиразолтиол ва тиосемикарбазид ба иони молибден (V) таҳлили спектри инфрасурхи молекулаҳои лиганди координатсиянашуда ва пайвастаҳои координатсионии синтезшударо анҷом додем.

Муқоиса намудани спектрҳои 1,2,4-триазолтиол бо спектри инфрасурхи пайвастаҳои координатсионии синтезшуда нишон доданд, ки хатҳои фурӯбарӣ дар ҳудудҳои 746-754, 624-630 ва 2555-2617 cm^{-1} , ки ба лаппиши валентӣ, деформатсионии банди ҳалқаи азолӣ $\nu(\text{C-N})$ ва $\nu(\text{N-N})$, $\nu(\text{N-H})$ молекулаи лиганди гетеросикли мувофиқ меояд ва дар спектрҳои инфрасурхи комплексҳои синтезшуда бе тағйироти нигоҳ дошта мешаванд. Дар ин асно намоёншавии хатҳои фурӯбариро дар ҳудудҳои 825, 1010 ва 1025 cm^{-1} ба лаппиши координатсияшудаи лиганди органикӣ (C=S) метавон нисбат дод, аён мегарданд.

Дар спектрҳои инфрасурхи ҳамаи пайвастаҳои координатсионӣ, ки дар нисбати молии $\text{Mo:L}=1:2$ то $\text{Mo:L}=1:4$ ҳосил карда шудаанд, дар ҳудудҳои 948-974 cm^{-1} хатҳои интенсивие намоён шуда, аз рӯи маълумоти адабиёт ба лаппиши валентии гурӯҳҳои молибденилӣ $\nu(\text{Mo=O})$ рост меояд. Бояд қайд намуд, ки дар спектрҳои моддаҳои байни ҳам таъсиркунандаи комплексҳо бо кислотаҳои органикӣ ва тиосианати аммонии, таркиби $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2\text{Cl}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2(\text{HCOO})] \cdot \text{Cl} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ мавҷудияти хатҳои фурӯбарии тавсифдиҳандаи як қатор гурӯҳҳои функционалӣ, ба монандӣ: $\nu(\text{OH})$ -3350-3380, $\nu(\text{SCN})$ -2040-2056, $\nu(\text{C-N})$ -1560-2098, $\nu_{\text{as}}(\text{C=S})$ - 1298-1305, 1364-1354 лиганди органикӣ ва $\nu(\text{C=O})$ 1064-1080 cm^{-1} кислотаи яқасосаи карбонӣ ба амал меояд.

Дар ҳудуди 2040-2056 cm^{-1} хатҳои фурӯбарии интенсивии $\nu(\text{C=N})$ дар комплексҳои таркиби тиосианатӣ ба амал меоянд, ки онҳоро ба

координатсия шудани ионҳои тиосианат тавассути атоми нитроген бо молибден (V) нисбат додан мумкин аст. Хатҳои фурӯбарии $\nu(\text{C}=\text{O})$ -и гурӯҳи карбоксилии иони атсетат ва формиат дар спектрҳои инфрасурхи комплексҳои таркибашон: $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})\text{Cl}_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_3(\text{HCOO})\text{Cl}]\text{Cl}\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COO})\text{Cl}_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ ба ҷониби худудҳои басомадашон пасттар майл мекунад, аммо бо интенсивияти баландтар дар худудҳои 1064 см^{-1} ва 1080 см^{-1} намоён мегарданд. Хосиятҳои муайянкардаи хатҳои спектралӣ комплексҳои таҳқиқшуда, гувоҳи медиҳанд, ки координатсияи формиат-, атсетат-ионҳо ба иони молибден(V) ба таври монодентатӣ, тавассути атоми оксигени гуруҳи карбоксилӣ амалӣ мешаванд.

Барои муайян намудани хосияти координатсияшавии молекулаи лиганди тиосемикарбазидӣ бо атоми марказӣ спектрҳои инфрасурхи тиосемикарбазид, кислотаи формиат, тиосианати аммоний ва ҳамаи комплексҳои ҳосилшуда дар ҳудуди $400\text{-}3600\text{ см}^{-1}$ омӯхта шудаанд.

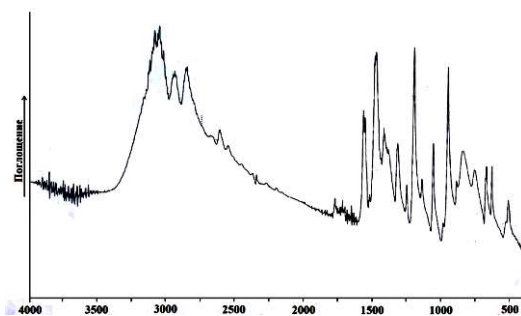
Таҳлили спектрҳои инфрасурх нишон медиҳад, ки хатҳои лаппиши валентии гурӯҳи $\nu(\text{NH}_2)$ -молекулаи тиосемикарбазид дар спектрҳои ҳамаи комплексҳо амалан тағйир намеёбад ва бо интенсивияти миёна дар худудҳои $3150\text{-}3250\text{ см}^{-1}$ намоён мешавад. Дар ин маврид тағйирёбии кулӣ дар худудҳои лаппиши валентӣ ва дефарматсионии гурӯҳи $\nu(\text{C}=\text{S})$ -и молекулаи тиосемикарбазид ва $\nu(\text{COO}^-)$ - кислотаи формиат ба амал меояд. Дар спектрҳои пайвастаҳои координатсионии хатҳои $\nu(\text{C}=\text{S})$ дар худудҳои $1012\text{-}810\text{ см}^{-1}$ ва хатҳои $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$ дар ҳудуди $1580\text{-}1610\text{ см}^{-1}$, $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$ - $1350\text{-}1380\text{ см}^{-1}$ мувофиқан намоён мешаванд. Муқоиса намудани спектрҳои инфрасурхи лиганд ва пайвастаҳои координатсионӣ синтез шуда нишон медиҳанд, ки координатсия шудани тиосемикарбазид ба иони молибден (V) тавассути атоми сулфури гуруҳи тионӣ, ионҳои формиат ва атсетат ба воситаи атоми оксигени гуруҳи карбоксилӣ ба амал меоянд.

Барои ҳосил намудани пайвастаҳои дуядроги тиосианидӣ-тиосемикарбазидии молибден (V) ҳамчунмоддаи аввала аз $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]$ истифода намудем. Ин мода бо усуле, ки дар адабиёт оварда шудааст, синтез карда шуд.

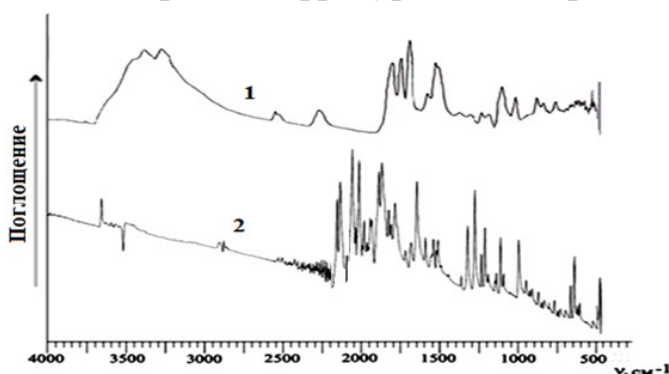
Спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои координатсионии дуядроги тиосемикарбазидӣ; ки таркибан: $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]$, $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4\text{L}_2(\text{OH})_4]$, $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4\text{L}_2(\text{OH})_2(\text{SCN})_2]$ мебошанд, нишон доданд, ки дар спектрҳои онҳо хатҳои фурӯбарии интенсивӣ дар худудҳои $710\text{-}740\text{ см}^{-1}$; $870\text{-}1030\text{ см}^{-1}$, $940\text{-}960$, $2045\text{-}2060\text{ см}^{-1}$; $3200\text{-}3270\text{ см}^{-1}$,

ба гурӯҳҳои $\nu(\text{Mo-O})$, $\nu(\text{Mo=O})$ ва ба гурӯҳҳои купрукчагии $[\text{Mo}_2\text{O}_4]^{+2}$, $\nu(\text{C=S})$, $\nu(\text{CN})$, $\nu(\text{NH}_2)$ ва $\nu(\text{OH}^-)$ мувофиқан рост меоянд.

Дар спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои координатсионии тиосианидии молибден (V) бо тиосемикарбазид хатҳои нави фурӯбарии интенсивии $\nu(\text{SCN}^-)$ дар ҳудуди $2040\text{-}2050\text{ см}^{-1}$ намоён мешаванд. Лағчиши ин спектрҳо дар ҳудудҳои зуддиашон паст, оид ба координатсияшавии ионҳои тиосианат ба молибден(V), тавассути атоми нитроген шаҳодат медиҳанд.



Расми 4. Спектрҳои инфрасурхи 1,2,4-триазолтиол;



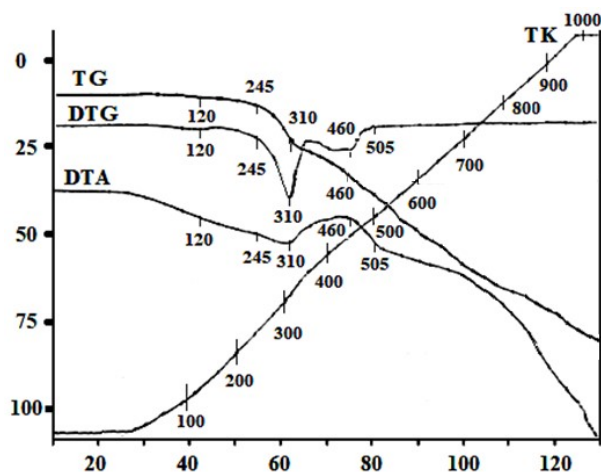
Расми 5. Спектрҳои инфрасурхи пайвастаҳои координатсионӣ:
1. $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COO})\text{Cl}_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, 2. $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Бо усули кондуктометрӣ, ҳангоми омӯзиши ҷараёнгузаронии молярии маҳлулҳои диметилформамидии пайвастаҳои координатсионии синтезнамудаи оксогалогено-1,2,4-триазолтиолӣ ва тиосемикарбазидии молибден(V) мавҷудияти сфераи дохилӣ ва берунӣ муайян ва ба кадом навъи электролит мансуб будани онҳо муқаррар карда шуд.

Муайян карда шуд, ки барои пайвастаҳои координатсионии синтезшудаи таркибашон: $[\text{MoOL}_2\text{Cl}_3]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2\text{Br}_3]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_2\text{L}_2(\text{SCN})_2]$ ҷараёнгузаронии молярӣ бо илова намудани миқдори барзиёди маҳлули ДМФА меафзояд ва он дар ҳудудҳои $84,3\text{-}119,2\text{ Ом}^{-1}\text{ см}^2\text{мол}^{-1}$ тағйир меёбад, ки қимати ҷараёнгузаронӣ ба электролити навъи 1:1 мувофиқ меояд. Қиматҳои гузаронандагии ҷараёнгузаронии молярии маҳлулҳои диметилформамидии пайвастаҳои нави координатсионии синтезшудаи

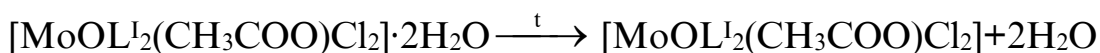
молибден (V) вобаста аз ҳарорат дар ҳудудҳои 47-110 Ом⁻¹см²мол⁻¹ тағйир меёбанд. Натиҷаи таҳқиқоти гузаронидашуда нишон медиҳанд, ки пайвастаҳои координатсионии таркиби [MoOL₂Cl₃] \cdot 2H₂O, [MoOL₂Br₃] \cdot 2H₂O, [MoOL₂(HCOO)(SCN)₂] \cdot 2H₂O, (N₂H₅)₂[Mo₂O₄(OH)₂L₂(SCN)₂] дар диметилформаид то ҳарорати 35^oC ҳамчун ғайриэлектrolит рафтор намуда, болотар аз ин ҳарорат бо сабаби ивазшавии ионҳои хлориди сфераи дохилӣ ба молекулаҳои ДМФА, ки боиси ҳосил шудани комплексҳои нав мегардад, ба навъи электrolитҳо дохил мешаванд.

Табдилёбии термикии пайвастаҳои координатсионии молибден(V)-ро бо лигандҳои гетеросиклӣ тавассути таҳқиқоти термогравиметрӣ муайян карда шуд. Ба сифати мисол, дар расми 5 раванди табдилёбии термикии пайвастаи координатсионии таркиби: [MoOL₂(CH₃COOH)Cl₂] \cdot 2H₂O нишон дода шудааст.



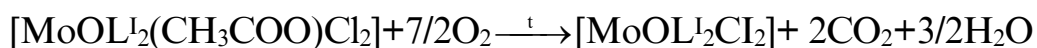
Расми 6. Дериватограммаи пайвастаи координатсионии таркиби [MoOL₂(CH₃COOH)Cl₂] \cdot 2H₂O

Нишон дода шуд, ки таҷзияи термикии пайвастаи [MoOL₂(CH₃COOH)Cl₂] \cdot 2H₂O мураккаб ва зина ба зина ба амал меояд, ки шаҳодати ин амал шаклҳои қачхатта дар ДТА ва DTG зухурёфта мебошад. Муайян гардид, ки дар ҳароратҳои 318-473K зинаҳои аввали табдилёбии термикӣ амалӣ гардида, бухоршавии молекулаҳои оби кристаллизатсионии дар таркиби пайвастаи координатсионӣ буда ба таври зайл мегузарад:



Зинаҳои минбаъда, дар ҳудуди ҳароратҳои 473-643^oC ва баландтар аз он мегузаранд, ба қушодашавии пайвастаи координатсионӣ, яъне таҷзияшавии лиганди органикӣ ва хоричшавии моддаҳои газшакл оварда мерасонад. Дар ин асно, дар қачхаттаҳои ДТА ва ТГ тағйирёбии

масса бо ҷазб ва хоричшавии эффеќти гармӣ хатҳои фурубарӣ ба амал меоянд:



Камшавии массаи пайвастаи координатсионӣ ба реаксияҳои пешниҳоднамуда бухоршавии молекулаи об ва миқдори моддаҳои дар шакли газ хоричшуда, мувофиќат мекунад. Зинаи охирини табилшавии термикии пайвастаи координатсионӣ, ки дар ҳароратҳои 646-710°C ба амал меояд, ки дар натиҷа пурра таҷзияшавии лиганди органикӣ ба анҷом мерасад. Реаксияи зинаи охиронро ба шакли зэйл навиштан мумкин аст:



Муайян гардид, ки маҳсулоти охирини раванди табилёбии термикии пайвастаи координатсионии $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COOH})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, MoO_3 мебошад.

Дар асоси натиҷаҳои таҳқиќоти термогравиметрӣ пайвастаи координатсионии таркиби $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COOH})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ параметрҳои раванди таҷзияшавии термикии пайвастаи координатсионӣ додасударо (ҷадвали 4) ҳисоб намудем.

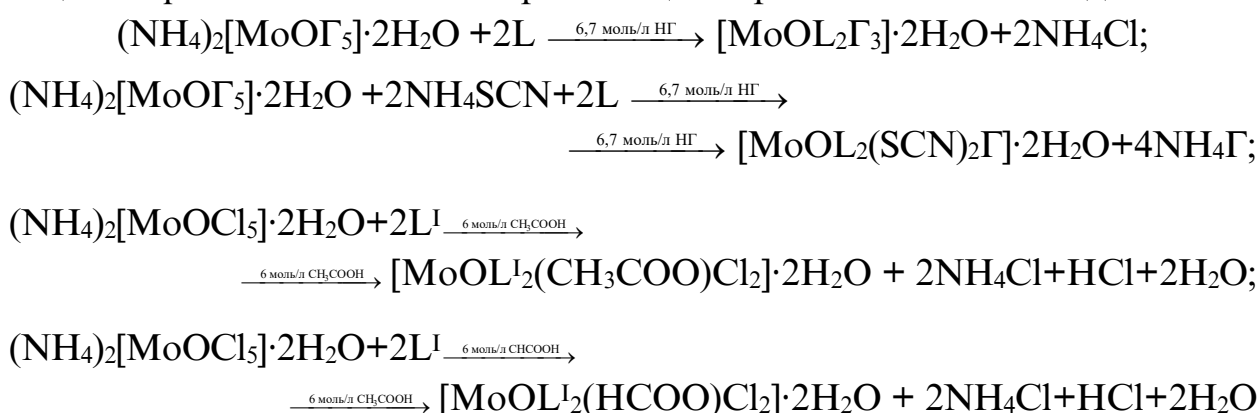
Ҷадвали 4. Қимати функсияи термодинамикии равандҳои термолизи пайвастаи координатсионии $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COOH})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ бо усули Коатс-Редферн (К.Р.) ва Хоровиц-Метсгер (Х.М.) ёфташуда

Ҳисоб бо муодилаҳои	E, кҶ/мол	ΔH, кҶ/мол	ΔG, кҶ/мол	- ΔS, кД кҶ/мол ж/моль	A, с ⁻¹
К.Р.	9,25	5,315	5,3463	0,06022	5,31·10 ³
Х.М.	7,43	3,584	3,6176	0,06312	2,33·10 ³
К.Р.	16,67	11,9907	12,0242	0,06250	3,32·10 ³
Х.М.	19,34	14,7511	14,7836	0,06136	4,56·10 ³
К.Р.	27,16	21,6682	21,7087	0,06436	2,37·10 ³
Х.М.	27,95	22,4083	22,4502	0,06587	1,54·10 ³
К.Р.	58,42	51,9521	52,0033	0,06771	1,2·10 ⁴
Х.М.	46,84	40,3521	40,3978	0,06060	7,89·10 ³

Қиматҳои таҳлили элементӣ ва таҳқиќоти физикӣ-химиявии гузаронидашуда нишон медиҳанд, ки таркиби пайвастаҳои координатсионии 1,2,4-триазолтиолии молибден (V) аз шароити гузаронидани таҷриба, нисбати моддаҳои баҳамтаъсиркунанда, табиат ва таркиби ҳалкунанда вобаста мебошанд.

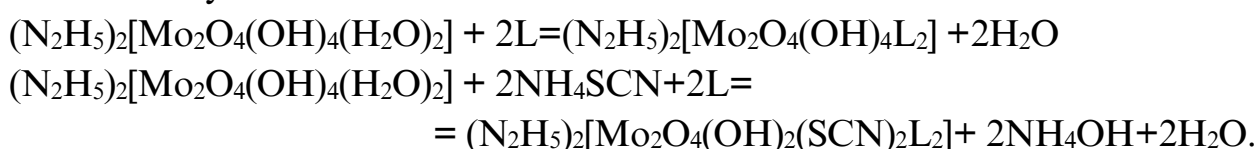
Мақаррар карда шуд, ки дар нисбати молии моддаҳои ба реаксия дохилшавандаи 1:1 ва 1:2, дар омехтаи маҳлулҳои кислотаи гидрогенхлорид ва атсетат, асосан пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ, ки дар сфераи дохилиашон атсидолигандҳои гуногун доранд, ҳосил мешаванд. Бо ибораи дигар, пайвастаи координатсионӣ дар таркибашон анионҳои атсетат, формиат, хлорид, тиосеанат ва бромид доранд.

Нишон дода шуд, ки координатсия шудани атсидолигандҳо тавассути банди ионӣ ба вучуд меояд, аммо молекулаи 1,2,4-триазолтиол бо механизми донори-аксепторӣ (координатсионӣ) пайваст мешаванд. Ҳосилшавии ин пайвастаҳо мувофиқи таҳлили элементии химиявӣ ва таҳлили физикию химиявӣ бо реаксияҳои зерин амалӣ мешаванд:



Муқаррар карда шудааст, ки ҳангоми байни ҳам таъсирунии $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]$ бо миқдори муайяни тиосианати аммоний дар маҳлул будани он бо тиосемикарбазид, дар муҳити обӣ-спиртӣ пайвастаҳои координатсионии дуядроғии бадҳалшаванда ҳосил мешавад, ки дар таркибашон як ҷузъи кӯпрӯкҷавии $[\text{Mo}_2\text{O}_4]^{2+}$ доранд.

Таҳқиқоти гузаронида, нишон дод, ки ҳангоми бо ин пайдарпай илова намудани реагентҳои аввала, пайвастаҳои гидроксотиосианитии ҳосил шуда, транс-фаъл мебошанд ва бо тиосемикарбазид ба осонӣ ба реаксия дохил мешаванд. Муодилаи реаксияҳоро мувофиқи нақшаи зерин навиштан мумкин аст:



Натиҷаҳои таҳлили элементии химиявӣ муайян намуд, ки дар иштироки ионҳои тиосианат чунин пайвастаҳои координатсионии молибден(V) ҳосил мешаванд, ки ба ҳар як атоми молибден дуто молекулаи тиосемикарбазид мувофиқ меояд. Ионҳои тиосианат дар ҳамвории экваторӣ транс-мавқеро нисбат ба ионҳои гидроксилӣ соҳиб

мешаванд, ки он ионҳоро фаъол (лабилӣ) менамоянд. Шояд дар натиҷаи маҳз ин амал, ивазшавии ионҳои гидроксилӣ ба тиосемикарбазид ба вукӯъ мепайвандад.

Ҳамин тавр, таҳқиқоти гузаронидашуда, имкон дод, ки вобаста ба таносуби моддаҳои ба реаксия дохилшаванда ва таркиби ҳалқунанда, пайвастаҳои нави координатсионии молибден(V) бо 1,2,4-триазолтиол ва бо тиосемикарбазид, ки аз ҷиҳати биологӣ фаъол аст, синтез карда шаванд.

Хулосаҳо

1. Бо усули титронидани потенсиометрӣ, тавассути истифодаи лиганди оксидшавӣ барқароршавӣ, раванди комплексҳосилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити 4,5-6,0 мол/л HCl ва ҳароратҳои 273-338 K омӯхта шуд. Дар асоси маълумотҳои таҷрибавӣ бо усули Биеррум қиматҳои зинагии собитҳои устувории ҳамаи шаклҳои комплексҳо, инчунин функсияҳои термодинамикии раванди ҳосилшавии комплексҳои оксохлоро-1,2,4-триазолтиолӣ дар системаи $[MoOCI_5]^{2-}$ -1,2,4-триазолтиол-HCl ҳисоб карда шуд [М-4, 6, 15, 26, 29, 27, 33, 36].
2. Шароити оптималии синтези 15-адад пайвастаҳои нави координатсионии моноядрӣ ва дуядроги молибден (V) коркард карда шуд [М-2, 7, 8, 10, 14].
3. Таъсири концентратсияи моддаи аввала ва лиганди органикӣ ба сохт ва таркиби пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид муқаррар карда шуд, инчунин пайвастаҳои координатсионии дуядрӣ, ҳосил мешаванд, ки дар таркибашон иони купрукчагии $[Mo_2O_3]^{4+}$ мавҷуд мебошад. [М-1, 13, 18, 21, 23].
4. Таҳлили спектроскопияи инфрасурхи пайвастаҳои координатсионии синтезкардашуда нишон медиҳад, ки молекулаи 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид бо иони молибден (V) ба тариқи монодентатӣ, тавассути атоми сулфури гурӯҳи тионӣ координатсия мешаванд [М-9, 20, 24].
5. Бо усули кондуктометрӣ чараёнгузаронии молярии маҳлули диметилформаидии оксогалогено-1,2,4-триазолтиолӣ ва оксогалогено-тиосемикарбазидии пайвастаҳои координатсионии молибден(V) омӯхта шуд. Дар натиҷа сфераи дохили ва берунӣ, ба кадом навъи электролит мансуб будани пайвастаҳои координатсионӣ,

инчунин формулаҳои химиявии моддаҳои синтезкардашуда тасдиқ гардид [М-11, 17].

6. Омӯзиши раванди табдили термикии пайвастаҳои координатсионии 1,2,4-триазолтиолиии молибден(V) дар ҳудуди ҳароратҳои 298-970К нишон дод, ки раванди таҷзияи термикии онҳо серзинаю мураккаб мебошад. Муқаррар карда шудааст, ки маҳсули ниҳии раванди табдили термикии пайвастаҳои координатсионӣ сеоксиди молибден- MoO_3 мебошад [28].

Тавсия оид ба истифодаи амалии натиҷаҳои таҷқиқот

Бори аввал коркарди методикаи синтези пайвастаҳои координатсионии молибден ба даст оварда шуда, вобастагии таъсири ҳалқунанда ба комплексҳосилшавии онҳо ва устувории термодинамикӣ, ба инкишофи химияи координатсионӣ, ҳиссаи калон мегузоранд. Дар асоси лигандҳои органикии таҷқиқшуда ва пайвастаҳои координатсионии онҳо, ҳамчун электролитҳои самаранок дар соҳаҳои гуногуни саноат, хоҷагии халқ ва барои эҳтиёҷоти бисёр соҳаҳои илм истифода бурда мешаванд.

ФЕҲРАСТИ ИНТИШОРОТИ ИЛМИИ ДОВТАЛАБИ ДАРЁФТИ ДАРАҶАИ ИЛМӢ АЗ РӯИ МАВЗӢИ ДИССЕРТАТСИЯ

**Мақолаҳои дар маҷаллаҳои илмӣ тавсияшудаи ҚОА-и назди Президенти
Ҷумҳурии Тоҷикистон нашршуда:**

- [1-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Роданидо-тиосемикарбазидные биядерные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Доклады Академии наук РТ, 2011, том 54, №4Стр. 314-317.
- [2- М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Синтез и физико-химические исследования координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Доклады АН РТ, Том 60, №1-2, Душанбе -2017. -С. 73-78.
- [3- М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Координационные соединения молибдена(V) с 1-фенил-2,3-диметилпирозолин -5-тионом (L) и 1,2,4-триазолтиолом (L¹) в среде 6 моль/л HCl / О.А. Азизкулова, Г.Ф. Рачинская, А.Ш. Эгамбердиев, **Ф.Р. Ҳамидова**, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Наука и инновация Душанбе -2019, №3. -С. 154-156.
- [4- М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 6 моль/л HCl 298 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова**, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, У.М.

Джурабеков // Известия Ошского технологического университета. №2, - Ош 2020, - С 94-98.

[5-М]. **Хамидова, .Р.** Исследование комплексообразования молибдена(V) с 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 4,0 моль/л HCl при 288К методом потенциометрического титрования / О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков // Вестник педагогического Университета. Издание Таджикского государственного педагогического университета имени Садриддина Айни №1(10-11). Душанбе -2021, -С. 29-34.

[6- М]. **Хамидова, Ф.Р.** Таҳқиқи потенциометрии комплексоилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити 5 мол/л HCl ва ҳарорати 328 К / **Ф.Р. Хамидова** // Паёми Донишгоҳи миллии Тоҷикистон. Бахши илмҳои табиӣ. -2022. -№3. -С. 257-269.

Мақолаҳои дар дигар маҷаллаҳои илмӣ, маводҳои конференсияҳои байналмиллалӣ ва ҷумҳуриявӣ нашршуда

[7-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Синтез и свойства формиато-тиосемикарбазидных комплексов молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной “15-й годовщине независимости республики Таджикистан”, “2700-летию города Куляба” и “году арийской цивилизации” ч. 1. Душанбе - 2006. -С. 90-91

[8-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Взаимное замещения лигандов в новых координационных соединениях молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Международная конференция: “Современная химическая наука и её прикладные аспекты” (25-27 октября 2006 года) (материалы). Институт химии им. В.И. Никитина АН Республики Таджикистан. Душанбе - 2006. -С. 23 - 24.

[9-М]. **Хамидова, Ф.Р.** ИК-спектроскопическое исследования смешаннолигандных координационных соединений молибдена (V) с тиосемикарбазидом. / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной “800-летию поэта, великого мыслителя Мавлоно Джалолуддина Балхи” и “16-й годовщине независимости Республики Таджикистан”, ч. 1, Душанбе - 2007. -С. 81-82

[10-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Реакционная способность ацидокомплексов молибдена (V) с тиосемикарбазидом / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы научно-практической конференции «Достижения химической науки и проблемы ее преподавания» Душанбе -2007.-С.72-77.

- [11-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Молярная электрическая проводимость разнолигандных комплексных соединений молибдена (V) с тиосемикарбазидом / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной «17-й годовщине независимости Республики Таджикистан», 1150-летию основоположника таджикско-персидской литературы Абу Абдулло Рудаки и году таджикского языка. ч.1. Душанбе -2008. -С. 67-68.
- [12-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Ацетато-тиосемикарбазидные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы республиканской научно-практической конференции «Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений», посвященной 70-летию д.х.н., профессора Азизкуловой О.А. Душанбе -2011. -С. 67-69.
- [13-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Роданидо-тиосимокарбазидные биядерные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы V-й международной научно-практической конференции «Перспективы применения инновационных технологий и усовершенствования технического образования в высших учебных заведениях стран СНГ», ч.1, Душанбе-2011. С. 289-292.
- [14-М] **Ҳамидова, Ф.Р.** Реакционная способность роданидных комплексов молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы республиканской конференции «Комплексообразование в растворах» Душанбе-2012. С. 74-75.
- [15-М] **Ҳамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 в средах 6 моль/л HCl при 288K / **Ф.Р. Ҳамидова**, О.А. Азизкулова // ТНУ научно-исследовательский институт, химический факультет, Сборник международной конференции: «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2013. -С. 110-114.
- [16-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 в растворе 6 моль/л HCl при температуре 273 K / **Ф.Р. Ҳамидова**, О.А. Азизкулова // ТНУ, Наука и инновация, серия естественных и экономических наук. Душанбе: «Сино»-2014. -С. 100-102.
- [17-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Молярная электрическая проводимость растворов комплексов $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOBr}_5]$ с 1,2,4-триазолтиолом-5 / **Ф.Р. Ҳамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «700-летию Мир Сайида Али

Хамадони», «Году семьи» и Международному десятилетию действия «Вода для жизни» 2005-2015 годы. Душанбе -2015. -С. 34-35.

[18-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Ацидолигандные 1,2,4-триазолтиольные координационные соединения молибдена (V) / **Ф.Р. Ҳамидова, О.А. Азизкулова** // ТНУ неделя науки, Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «25-летию государственной Независимости Республики Таджикистан». Душанбе -2016. -С. 92-93.

[19-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Пайвастаҳои координационии молибден (V) бо ҳосилаҳои пиразолин (L) ва 1,2,4-триазол (L¹) / **О.А. Азизкулова, М.И. Абдулхаева, А.Ш. Эгамбердиев, Ф.Р. Ҳамидова** // ТНУ Материалы II Международной научной конференции «Химия алифатических и циклических производных глицерина и аспекты их применения», посвященной 75-летию памяти д.х.н., профессор член-корр. АН РТ Кимсанов Бури Хакимович. Душанбе -2016. -С. 201-204.

[20-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** ИК-спектроскопическое исследование 1,2,4-триазолтиольных координационных соединений молибдена (V) / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Ҳамидова** // ТНУ неделя науки, Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «20-ой годовщине Дня национального единства» и «Году молодежи». Душанбе -2017. -С. 101.

[21-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Реакционная способность тиоционатных координационных соединений пентабромooksомолибдата аммония с 1,2,4-триазолтиолом / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2018. -С. 55-57.

[22-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 6 моль/л HCl при температуре 318 К. / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2018. -С. 63-65.

[23-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Синтез и исследование координационных соединений молибдена (V) с некоторыми тиоамидными лигандами. / **О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы Республиканской научно-практической конференции посвященной Международному десятилетию действия «Вода для устойчивого развития, 2018-2028 годы», «80-ой годовщине со дня

рождения Юсупова Тилло Юсуповича» на тему: «Синтез новых биологически активных производных глицерина на основе аминокислот, пептидов и фуллерена C₆₀». Душанбе -2018. -С. 63-67.

[24-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Физико-химические исследования свойств координационных соединений молибдена(V) с некоторыми тиоцианатными гетероциклическими и тиоамидными лигандами / О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, **Ф.Р. Ҳамидова**, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Материалы IV Международной научной конференции: «Вопросы физической и координационной химии», посвященной памяти докторов химических наук, профессоров Якубова Хамида Мухсиновича и Юсуфова Зухуриддина Нуриддиновича. Душанбе -2019. -С. 45-50.

[25-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Реакция замещения лигандов в 1,2,4-триазолтиольных координационных соединениях молибдена(V) / **Ф.Р. Ҳамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «Годам развития села, туризма и народных ремесёл (2019-2021 гг.)» и «400-летию Миробида Сайидо Насафи». Том 1, Душанбе -2019, -С.97-98.

[26-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Образование координационных соединений молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 6 моль/л HCl при температуре 338К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Сборник материалов XV Нумановские чтения «Современное состояние химической науки и использование её достижений в народном хозяйстве республики Таджикистан». Душанбе -2019 г, -С. 201-202.

[27-М]. **Ҳамидова Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 5 моль/л HCl при температуре 318 К / **Ф.Р.Ҳамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков// Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников и студентов ТНУ, посвященной «5500-летию древнего Саразма», «700-летию выдающегося таджикского поэта Камола Худжанди» и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» Душанбе -2019. -С 205-206.

[28-М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Термические свойства координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова**, У.М. Джурабеков // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников и студентов ТНУ, посвященной «5500-летию

древнего Саразма», «700-летию выдающегося таджикского поэта Камола Худжанди» и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» Душанбе -2019. - С 207-208.

[29-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Потенциометрическое исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 5 моль/л HCl при 273 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции на тему «Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан», посвященной 60-летию химического факультета и памяти д.х.н., профессора, академика АН РТ Нуманова Ишанкула Усмановича. Душанбе -2020. -С. 119-121.

[30-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 6 моль/л HCl при 328 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции на тему «Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан», посвященной 60-летию химического факультета и памяти д.х.н., профессора, академика АН РТ Нуманова Ишанкула Усмановича (12-14 сентября). Душанбе -2020., С. 128-129.

[31-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена(V) с 1-формил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 4 моль/л HCl при 298К/ О.А.Азизкулова, А.Ш.Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, **Ф.Р. Хамидова** // Республиканская научно-практическая конференция студентов ТНУ, посвященной 30-летию Государственной независимости Республики Таджикистан, 110-летию со дня рождения Народного поэта Таджикистана, Героя Таджикистана Мирзо Турсунзаде, 110 летию со дня рождения Народного писателя Таджикистана Сотима Улугзода и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 г)». Душанбе -2021. С. 84-87.

[32-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование комплексообразования молибдена (V) с 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 4,0 моль/л HCl при 288 К методом потенциометрического титрования / О.А., Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И Абдулхаева, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков // Вестник педагогического Университета. Издание Таджикского государственного педагогического университета имени Садриддина Айни №1(10-11). Душанбе-2021, С. 29-34.

[33-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 5 моль/л HCl при 298 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков, А.Ш. Эгамбердиев // Сборник статей и международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы химии, применение и их перспективы», посвященная 60-летию кафедры органической химии и памяти д.н.х. профессора Холикова Ширинбека Халиковича Душанбе -2021, -С. 150-155.

[34-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования в системе $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ -1,2,4-триазолтиол-5 моль/л HCl при 288 К / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков // Материалы III Международной научно-практической конференции на тему: (Развитие химической науки и области их применения), посвященной 80-летию памяти д.х.н., член корр, НАНТ, профессора Кимсанова Бури Хакимовича. Душанбе -2021, -С. 200-204.

[35-М]. **Хамидова Ф.Р.** Комплексообразование Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 4,5 моль/л HCl при 273 К / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков // Материалы республиканской научно-теоретической конференции преподавателей, сотрудников НИИ ТНУ посвященной “Годам развития промышленности (2022-2026)” и “Чествованию Мавлоно Джалолоддина Балхи” Душанбе-2022, С.279-282.

[36-М]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 4 моль/л HCl при 308К / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков // Материалы 13 международной теплофизической школы “Теплофизика и информационные технологии” Душанбе -2022, -С. 209-212.

УДК:546.71
ББК:24.1(2Т)
Х-18

На правах рукописи

ХАМИДОВА ФИРУЗА РАУФОВНА

КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ МОЛИБДЕНА(V)

С 1,2,4-ТРИАЗОЛТИОЛОМ И ТИОСЕМИКАРБАЗИДОМ

Специальность 02.00.01-Неорганическая химия

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени
кандидата химических наук

Душанбе – 2023

Работа выполнена на кафедре неорганической химии Таджикского
национального университета

Научный руководитель: **Азизкулова Она Азизкуловна**
доктор химических наук, профессор кафедры
неорганической химии Таджикского
национального Университета

Официальные оппоненты:
Раджабов Умарали Раджабович, доктор
химических наук, профессор кафедры
фармацевтической и токсикологической химии
ТГО Таджикского государственного
медицинского университета им. Абуали ибн
Сино.

Мусоджонзода Джамила Мансур, кандидат
химических наук, доцент кафедры общей и
неорганической химии Таджикского
государственного педагогического
университета им. С. Айни

Ведущая организация: Таджикский технический университет имени
академика М.С. Осими, кафедра общей и
неорганической химии.

Защита диссертации состоится **“28” сентября 2023 года в 10.00** часов на
заседании диссертационного совета, главный корпус, зал методического
совета 6D.КOA-010 при Таджикском национальном университете по
адресу: 734025, г. Душанбе, пр. 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, пр. Рудаки, 17.

Автореферат разослан «___» _____ 2023 г.

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



Раджабов С.И.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность работы. Для нормального роста и положительного формирования и развития живых организмов, молибден считается важным микроэлементом и входит в состав в пище людей, животных, растений. Данный элемент является необходимым для развития активности фермента нормализации и поддержания ксантиноксидазы, который ускоряет азотистый обмен в тканях. Порошковая тиомолибдатная соль аммония считается антагонистом меди и способствует ее выведению из организма.

Для развития техники молибден является необходимым металлом в современном мире. Большая часть молибдена используется в промышленности, для резки скоростных станков, для разных видов сплавов, для подготовки проволок, листов для электрических и радиотехнических промышленностей. Сегодня используются различные соединения молибдена, в том числе его координационные соединения с органическими лигандами, также можно приобрести лекарственные препараты и биоактивные вещества.

Среди органических лигандов особое место занимают соединения класса триазолов и их производные, потому что большинство производных триазола обладают высокой биологической активностью. Следовательно, производные триазола, для эффективного катализатора, оптического отбеливателя, промежуточного продукта используются для приобретения пластификаторов, ингибиторов и гербицидов.

В настоящее время триазол и его производные привлекают внимание исследователей, благодаря своим свойствам и различным строениям. В состав производных триазолов имеются определённое количество донорных атомов, которые координируются с ионами металлов: монодентатно, бидентатно и бидентатно-мостиковые, а также могут создавать координационные соединения различного и сложного состава.

Данной проблематике, в последние два десятилетия, исследователи обращали мало внимания. Об этом говорится в научной литературе по процессу комплексообразования d-переходных металлов с органическими азот- и серосодержащими лигандами алифатического и гетероциклического ряда.

Степень изученности темы. В научной литературе имеются сведения по координационным соединениям молибдена с рядом азот- и серосодержащих органических лигандов, таких как 1-метил-2-меркаптоимидазол, 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион, 8-оксихинолин и процессы комплексообразования указанных лигандов с d-

переходными металлами.

При анализе научной литературы установлено, что комплексообразование молибдена(V) в растворе, а также синтез и исследование моноядерных и биядерных координационных соединений молибдена(V), содержащие такие органические лиганды, как 1,2,4-триазолтиол и тиосемикарбазид по сегодняшний день не изучены.

Таким образом, в данной диссертации потенциометрическим методом определен процесс комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 4,5-6 моль/л HCl, а также разработаны методика синтеза 15 новых координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом, а также определены методами современных исследований их состав, строение и свойства.

Отношение исследований к программам (проектам) или научным темам.

Исследовательская работа выполнена на кафедре неорганической химии химического факультета Национального университета Таджикистана.

Диссертационная работа завершена согласно научно-исследовательскому плану кафедры неорганической химии ТНУ "Комплексные соединения d-переходных металлов и аспекты их практического применения (полимерно-композиционные материалы, медицинские материалы, электролиты для покрытий, извлечение благородных и рассеянных металлов из промышленных отходов)» (номер государственной регистрации № 0107 ТД 601).

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Цель исследования. Исследование и выявление закономерностей процессов образования комплексов молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде HCl, получение и изучение состава и свойств комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом в нейтральной и кислой средах, а также замещение лигандов в одноядерных и биядерных соединениях исследуемого металла.

В соответствии с целью диссертационной работе поставлены следующие **задачи**:

- изучение процессов образования комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом при температурах 273-338 К, в среде хлористоводородной кислоты концентраций 4,5-6,0 моль/л. Расчет констант устойчивости и значений термодинамических функций с использованием современных физических и химических методов;

- расчет термодинамических функций (ΔH , ΔS и ΔG) методами температурного коэффициента и определение вклада ΔH и ΔS в самопроизвольном протекании процесса комплексообразования;

- разработать методику синтеза 1,2,4- триазолтиольных тиосемикарбазидных комплексов молибдена (V). С использованием современных физико-химических методов исследований определить их состав и строения.

Объектом исследования является система: $[\text{MoOCl}_5]^{2-}$ -1,2,4- триазолтиол- HCl , одноядерные и биядерные комплексы Mo(V) с лигандом 1,2,4-триазолтиол и тиосемикарбазид.

Предмет исследования. Изучение процессов образования комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде HCl при ее концентрациях 4,5-6,0 моль/л, выявление закономерностей влияния температуры от 273 до 338 К и на этот процесс, а также получение и изучение комплексов исследуемого металла с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом.

Научная новизна работы.

1. Впервые исследованы процессы образования комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе с различными количествами HCl , от температуры 273 до 338 К. Константы устойчивости и термодинамические функции комплексных соединений определены с привлечением современных физических и химических методов.
2. Как было выявлено нами, с возрастанием температуры, количество комплексных частиц не меняется, но их константы устойчивости уменьшаются. Установлено, что при всех температурах поэтапно образуется от одной до пяти комплексных частиц.
3. Синтезировано 15 новых координационных соединений молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом. Строение и состав синтезированных соединений уточнено методами элементного химического анализа, кондуктометрии, ИК-спектроскопии и термогравиметрии.

Теоретическая значимость исследования.

- получать точные и подлинные экспериментальные значения на основе исследований;
- сравнение результатов с результатами, представленными в литературе, показывая их совместимости;
- точность установленных теоретических закономерностей и основных выводов диссертации с основами органической химии.
- синтезированные вещества и соотношение реагирующих веществ, оптимальные условия реакции в зависимости от физико-химических факторов научно обоснованы современными физико-химическими методами.

Практическая значимость исследования заключается в следующем:

-разработанный в диссертации метод синтеза координационных соединений может быть использован для синтеза новых координационных соединений d-переходных металлов, содержащих гетероциклические органические лиганды;

- полученные результаты, могут быть применяться как в теоретических так и на практических занятиях по неорганической химии, для спецкурсов, для проведения научно-исследовательских работ магистров, дипломников, курсовых работ студентов высших учебных заведений с химическим направлением;

-результаты экспериментальных работ позволили совершенствовать условия синтеза новых координационных соединений молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиольными и тиосемикарбазидными лигандами, ранее не опубликованных в литературе;

- результаты исследования могут быть использоваться в народном хозяйстве, промышленности и для нужд различных областей науки.

На защиту выносятся следующие положения:

- определение констант устойчивости и термодинамических функций комплексных соединений Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде HCl. Установление закономерностей в концентрациях 4,5 - 6,0 моль/л хлороводородной кислоты в интервале температур 273-338 К. Выявить закономерности влияния температуры и концентрации кислоты на устойчивость комплексов молибдена(V) с данными лигандами;

- определено правило цифровой трансформации семантика термодинамических функций 1,2,4- триазолтиольных координационных соединений молибден(V) связанного от его количества во внутренней сфере комплекса. В реакциях образования комплексов установлено влияние значений ΔH и ΔS на величины энергии Гиббса;

- разработаны способы получения новых координационных соединений Mo (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом в виде твердого вещества с максимальным выходом продукта реакции. Обобщены результаты изучения спектральных, термических и кондуктометрических свойств полученных координационных соединений.

Степень достоверности результатов:

Исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом для определения функции комплексообразования, равновесной концентрации лиганда, значений констант устойчивости,

молярной фракции сложных частиц потенциометрическим методом (на оборудовании компаратора П-3003 МИ и рН-метром П-25).

С целью определения состава, структуры и свойств синтезированных веществ были проведены следующие исследования: кондуктометрические (на кондуктометре HANNA HI 8733), инфракрасные спектры (на приборе Specord IR-75 и спектрометре SHIMADZU), термогравиметрические исследования (в районе Паулик-Паулик-Эрдей, марка Q-1500).

Соответствие диссертации паспорту научной специальности: Диссертация соответствует нескольким пунктам паспорта специальности 02.00.01-«Неорганическая химия»:

В соответствии с пунктом 1. Исследование процессов комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворах 4,5-6,0 моль/л методом потенциометрического титрования - главы 2.1, 2.2 и 2.3;

В соответствии с пунктом 2. Синтез и исследование координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом. - главы 3.1, 3.2, 3.3, 3.4 и 3.5;

В соответствии с пунктом 3. Физико-химические свойства координационных соединений молибдена (V). - главы 4.1, 4.2 и 4.3;

Личный вклад соискателя, научной степени исследования. Автор диссертации принимал непосредственное участие на всех этапах исследования, от постановки задачи и реализации ее действий до анализа полученных экспериментальных результатов. В исследовательской работе приведены результаты авторских изысканий по изучению процессов комплексообразования Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде хлороводородной кислоты, влияние различных факторов на закономерность образования координационных соединений.

Утверждение и внедрение результатов диссертации (Апробация работы)

Основные результаты диссертации были представлены и обсуждены на:

- Международных конференциях, “Современная химическая наука и её прикладные аспекты” (Душанбе, 2006); “Химия алифатических и циклических производных глицерина и аспекты их применения” (Душанбе, 2016); “Вопросы физической и координационной химии” (Душанбе, 2019); “Современные проблемы химии, применение и их перспективы” (Душанбе, 2021); “Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений и аспекты их применения” (Душанбе, 2022).

- Республиканских конференциях, научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов ТГНУ,

посвященной 60-летию победы в ВОв “Во имя жизни и счастья на Земле”(Душанбе, 2005); “15 годовщине независимости Республики Таджикистан”, “2700-летию города Куляба” и “Году арийской цивилизации”(Душанбе, 2006); 800-летию поэта, великого мыслителя Мавлоно Джалолуддина Балхи и “16 годовщине независимости Республики Таджикистан” (Душанбе, 2007); “17 годовщине независимости Республики”, 1150-летию основоположника таджикско-персидской литературы Абу Абдулло Рудаки и году таджикского языка (Душанбе, 2008); “Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений” (Душанбе, 2011); “Перспективы применения инновационных технологий и усовершенствования технического образования в высших учебных заведениях стран СНГ” (Душанбе, 2012); “Комплексообразование в растворах” (Душанбе, 2012); “Комплексные соединения и аспекты их применения” (Душанбе, 2013); “700-летию Мир Сайида Али Хамадони”, “Году семьи” и Международному десятилетию действия “Вода для жизни” 2005-2015 годы (Душанбе, 2015); “25-летию государственной Независимости Республики Таджикистан” (Душанбе, 2016); “20 годовщине Дня национального единства” и “Году молодежи” (Душанбе, 2017); “Комплексные соединения и аспекты их применения” (Душанбе, 2018); “Вода для устойчивого развития, 2018-2028 годы”, “80 годовщине со дня рождения Юсупова ТиллоЮсуповича” на тему: “Синтез новых биологически активных производных глицерина на основе аминокислот, пептидов и фуллерена C₆₀” (Душанбе, 2018); “Годы развития села, туризма и народных ремёсел (2019-2021 годы) “400-летию МиробидаСайидоНасафи” (Душанбе, 2019);Сборник материалов XVНумановских чтений “Современное состояние химической науки и использование её достижений в народном хозяйстве республики Таджикистан” (Душанбе,2019); “5500-летию древнего Саразма”, «700-летию выдающегося таджикского поэта КамолаХуджанди» и “20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)” (Душанбе, 2020); “Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан” (Душанбе, 2020); “30-летия Государственной независимости Республики Таджикистан”, 110-летию со дня рождения Народного поэта Таджикистана, Героя Таджикистана МирзоТурсунзоде, 110-летию со дня рождения Народного писателя Таджикистана СотимаУлугзода и “20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)”, (Душанбе, 2021); “Роль современных методов анализа в развитие науки и производства” (Душанбе, 2022);

Публикация результатов диссертации. По результатам исследования опубликовано 6 научных статей в рецензируемые журналы, рекомендованных ВАК при Президенте РФ, 30 тезисов докладов.

Структура и объем диссертации: Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка цитируемой литературы. Работа изложена на 170 страницах машинописного текста, включает 32 графических изображения, 24 таблицы и 169 библиографических ссылок

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении диссертационной работе представлена актуальность темы, цель, задачи, новизна, объект, степень разработанности, теоретическая и практическая значимость.

Первая глава данной работе предоставлен библиографический список

по теме, где приведены физико-химические свойства исследуемых лигандов: тиосемикарбазида и 1,2,4-триазолтиола, аспекты их использования. Дано достаточно полное описание комплексов катионов ряда переходных элементов с такими лигандами как 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тион, 8-оксихинолин, 1-метил-2-меркаптоимидазол, производными триазола, тиосемикарбазида, а также другими линейными и гетероциклическими лигандами.

Вторая глава рассматривает экспериментальный результат, полученные методом потенциометрии при исследовании процессов образования комплексов Mo(V) с применением лигандного электрода на фоне 1,2,4-триазолтиола и его окисленной форме в средах соляной кислоты, в концентрации 4,5-6 моль/л и пределах 273-338 К температуры.

Третья глава работы посвящена описанию разработанных методик получения новых комплексных соединений Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом. Комплексы получены в растворах HCOOH, CH₃COOH, HCl, а также в присутствии NH₄SCN. Взаимосвязь отношения металла к лиганду (Mo:L) и их зависимость от экспериментального условия на фоне данных элементного химического анализа, образуются разнолигандные оксогалогено- и оксогидроксо-1,2,4-триазолтиольные и тиосемикарбазидные комплексы Mo(V) разными составами и строениями.

Четвертая глава посвящается с использованием современного физико-химического метода определения состава и строения синтезированных комплексов. Так, например, для установления способа координации 1,2,4-триазолтиола и тиосемикарбазида к катиону Mo(V) были изучены ИК-спектры полученных комплексов и чистых (некоординированных) лигандов.

Диссертационная работа завершается заключением и списком цитируемой литературы.

Изучение реакций образования комплексов Mo(V) в среде HCl разнообразной концентрации с рассматриваемыми лигандами

В составе HCl фиксации 4,5- 6,0 моль/л в интервала температуры с 273 по 338 Кисследован ход образования комплексов Mo(V) с лигандным электродом на фоне 1,2,4-триазолтиола и его окисленными формами.

Обратимость окисления 1,2,4-триазолтиола до его дисульфида в растворах хлористоводородной кислоты доказана исследованием зависимости потенциала системы (равновесного) от логарифма отношений концентрации восстановленной и окисленной форм лиганда в указанных выше средах и температурах. Экспериментальные зависимости показали,

что $E_t = f\left(\lg \frac{[R-S-S-R]'}{[RS]}\right)$ в растворе HCl в изученном интервале температур проявляет однолинейный характер. При этом, углы склона тангенса меняется с 26,48 по 33,27 мВ. Истинные значения потенциала E^0 и коэффициента (f) найдены с помощью уравнения Нернст, а статистической обработкой экспериментальных результатов, регрессионным методом определены величины их доверительных интервалов. Установив экспериментально обратимость системы по схеме R-S-S-R / RS в растворах 4,5-6,0 моль/л HCl изучено формирование комплекса Mo(V), выявлено образование пяти комплексных соединений различного состава, что подтверждено графическим методом Бьеррума.

В качестве примера на рисунке 1 по данным потенциометрического исследования, приведены кривые образования комплексов Mo (V) с 1,2,4-триазолтиолом при 6,0 моль/л HCl в температурах 273- 338 К

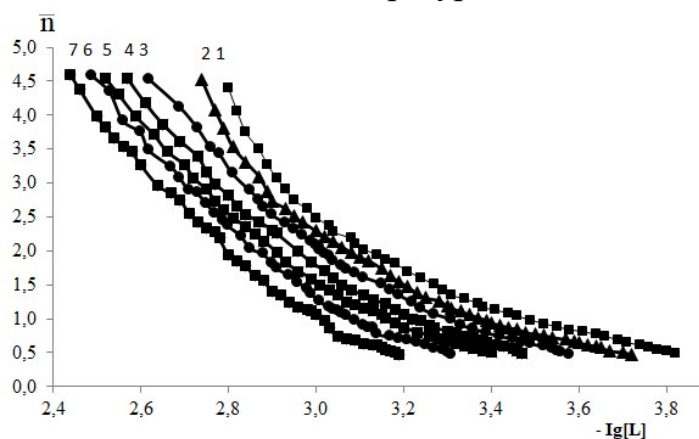


Рисунок 1. Рассмотрение кривых образований комплекса Mo(V) с изученным лигандом в интервале 273-338 К температуры в растворе 6,0 моль/л HCl

По данной цифровой тематике функции образования комплексов с обратным логарифмом равновесной концентрации лиганд ($-\lg L$) мотивирован приближенной величины пятиступенчатого константа устойчивости комплексов Mo(V) в интервале 273-338 К температуре в среде 6,0 моль/л HCl (табл. 1).

Из приведенной таблицы видно, что с возрастанием температуры в среде 6,0 моль/л HCl величины констант устойчивости (ступенчатых) исследованных комплексов снижаются. Экспериментальные результаты говорит о том, что реакция образования комплекса Mo (V) с рассматриваемой лигандой, экзотермична.

Так, как устойчивость констант комплексов были выявлены способом графики Бьеррума, уточнены данные величины и исследованы разрешением уравнения 1 в отношении истинной равновесной концентрации лиганда [L] с методом половинного деления.

$$\bar{n} = \frac{\beta_1[L] + 2\beta_2[L]^2 + 3\beta_3[L]^3 + 4\beta_4[L]^4 + 5\beta_5[L]^5}{1 + \beta_1[L] + \beta_2[L]^2 + \beta_3[L]^3 + \beta_4[L]^4 + \beta_5[L]^5} \quad (1)$$

Таблица 1. Определённые графическим методом Бьеррума значения ступенчатых констант устойчивости (pK_i) оксохлоро-1,2,4-триазолтиольных комплексов молибдена (V) в среде 6,0 моль/л HCl при 273 - 338 К

T, К	pK_1	pK_2	pK_3	pK_4	pK_5
273 К	3,94±0,18	3,41±0,11	3,14±0,11	2,91±0,12	2,73±0,13
288 К	3,71±0,14	3,21±0,11	2,95±0,10	2,81±0,11	2,71±0,12
298 К	3,54±0,14	3,43±0,13	3,15±0,11	2,89±0,12	2,75±0,10
308 К	3,46±0,12	3,07±0,12	2,83±0,10	2,69±0,11	2,56±0,10
318 К	3,41±0,12	3,05±0,10	2,81±0,11	2,64±0,11	2,52±0,10
328 К	3,31±0,14	2,96±0,10	2,78±0,11	2,61±0,11	2,46±0,10
338 К	3,23±0,11	2,85±0,10	2,62±0,13	2,54±0,11	2,44±0,10

Графический метод Бьеррума применен при вычислении общих констант устойчивости комплексов. Обработка данных осуществлена с помощью созданного компьютерного программирования (языка Excel Borland Delphi). При шаге 0,1 в значении \bar{n} от 0,5 до 4,5 выявлены соответствующие концентрации лиганд. В тоже время, использованы общие константы устойчивости (β), что вычислен по уравнению 1. Выявлено максимально близкие кривые образования комплексов Mo(V) в сфере 6,0 моль/л HCl для 298 К, методом графики Бьеррума (а), а затем обработка компьютера (б) (рис. 2):

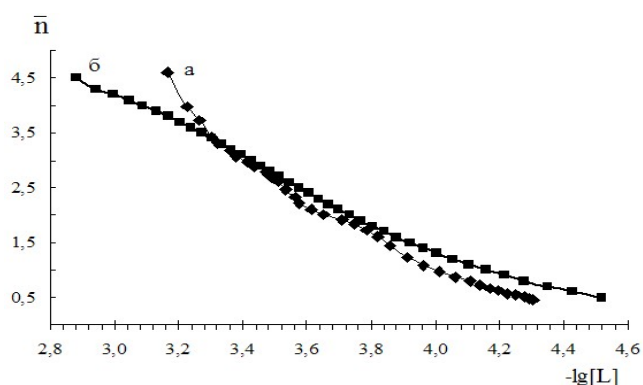


Рисунок 2. Представлена близкие кривые образования комплекса Mo(V) в среде 6,0 моль/л HCl для 298 К, методом графики Бьеррума (а), а затем обработка компьютера (б)

Вычислены уточнённые величины констант (ступенчатых) устойчивости комплексов Mo(V) в интервале температур 273- 338 К, среде 6,0 моль/л HCl(табл. 2).

Таблица 2. Уточнённые значения констант (ступенчатых) устойчивости комплексов Mo(V) в интервале температур 273- 338 К, среде 6,0 моль/л HCl

T, K	K ₁	K ₂	K ₃	K ₄	K ₅
273 K	8,77·10 ³	2,59·10 ³	1,38·10 ³	8,06·10 ²	5,37·10 ²
288 K	5,13·10 ³	1,62·10 ³	8,84·10 ²	6,45·10 ²	5,12·10 ²
298 K	3,49·10 ³	2,69·10 ³	1,40·10 ²	7,82·10 ²	5,66·10 ²
308 K	2,90·10 ³	1,16·10 ³	6,81·10 ²	4,89·10 ²	3,60·10 ²
318 K	2,55·10 ³	1,11·10 ³	6,45·10 ²	4,36·10 ²	3,33·10 ²
328 K	2,04·10 ³	9,05·10 ²	6,07·10 ²	4,04·10 ²	2,90·10 ²
338 K	1,69·10 ³	7,13·10 ²	4,13·10 ²	3,46·10 ²	2,77·10 ²

Вычислены значения термодинамических характеристик реакций формирования комплексов Mo(V) с оксохлоро-1,2,4-триазолтиолом в интервале температур 273 - 338 К и среде 6,0 моль/л HCl (табл. 3). Графики зависимости $\lg K=f(1/T)$ построены с прилагаемой конкретной семантики константа устойчивости

Таблица 3. Значения термодинамических характеристик реакций формирования комплексов Mo(V) оксохлоро-1,2,4-триазолтиолом в интервале температур 273- 338 К и среде 6,0 моль/л HCl

Состав комплексов	-ΔG, кДж/моль	-ΔH, кДж/моль	ΔS, Дж/К моль ⁻¹
[MoO] ³⁺ + L=[MoOL] ³⁺	20,62 ± 6,54	19,53 ± 3,30	3,65 ± 8,85
[MoOL] ³⁺ +L=[MoOL ₂] ³⁺	18,09 ± 6,16	13,73 ± 3,11	14,63 ± 7,22
[MoOL ₂] ³⁺ +L=[MoOL ₃] ³⁺	16,68 ± 7,17	12,57 ± 3,62	13,80 ± 6,89
[MoOL ₃] ³⁺ +L=[MoOL ₄] ³⁺	15,73 ± 1,48	9,89 ± 1,46	20,78 ± 2,46
[MoOL ₄] ³⁺ +L=[MoOL ₅] ³⁺	15,06 ± 2,89	9,54 ± 0,75	17,36 ± 12,16

Согласно данной таблицы³, при экзотермическом образовании комплексов Mo(V) с оксохлоро-1,2,4-триазолтиолом в системе происходит уменьшение внутренней энергии. Отмечено закономерное возрастание значения ΔG . Это можно объяснить возрастанием количества связанных комплексов молекулы лиганда в координационной области. Энтальпийный (ΔH) и энтропийный (ΔS) факторы, по разному воздействуют на дно протекания реакции в различных стадиях процесса образования комплексов. В первоначальной стадии, по всей видимости, превалирует сольватация молекул органического лиганда с растворителем. Данный процесс действует на значение ΔS , беспорядок в системе возрастает. Выявлен все стадии самопроизвольного течения реакции образования комплексов величины энтальпии (ΔH) отрицательны. В таком случае, значительный вклад вносит фактор энтальпии (ΔH).

Исследовано воздействие концентрации HCl на состав и устойчивость комплексов Mo(V) с указанным выше лигандом. Анализ численных значений констант устойчивости образующихся комплексов, определённые методом Бьеррума из кривых образования показал, что их величина при увеличении температуры закономерно уменьшаются. С ростом концентрации растворов HCl значения констант устойчивости комплексов увеличиваются, что может быть объяснено пересольватацией ионов молибдена (MoO)³⁺ и молекул-1,2,4-триазолтиола.

Одним из важных проблем изучения равновесной системы является определения концентрации любого из компонентов исследуемой системы. При температурах 273-338 К для системы $[MoOCl_5]^{2-}$ - 1,2,4-триазолтиол – HCl с целью установления области доминирования комплексных форм построены диаграммы распределения. В качестве примера на рисунке 3 приведены кривые распределения комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом при 298 К.

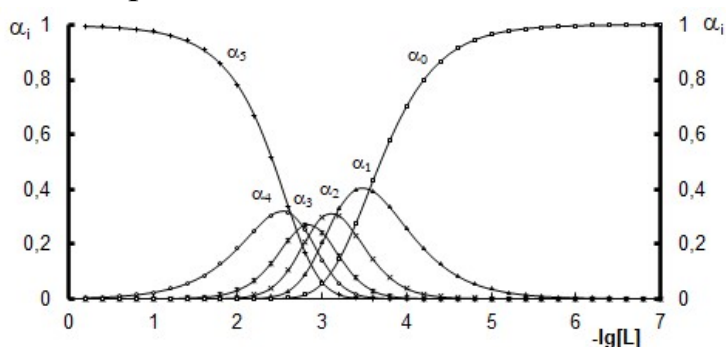


Рисунок 3. Комплекс кривых распределений Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом. Зависимость α_i от $-\lg[L]$ при 298 К, где: α_0 - $(NH_4)_2[MoOCl_5]$; α_1 - $[MoOLCl_4]$; α_2 - $[MoOL_2Cl_3]^0$; α_3 - $[MoOL_3Cl_2]^+$; α_4 - $[MoOL_4Cl]^{2+}$; α_5 - $[MoOL_5]^{3+}$

При изучении диаграмм распределения системы $[\text{MoOCl}_5]^{2-}$ - 1,2,4-триазолтиол – HCl , то можно увидеть, что в большом интервале концентраций лиганда в растворе превалирует монозамещённая комплексная частица состава $[\text{MoOLCl}_4]$. Оно переходит с повышением количества лиганда в двух замещённый, а затем, постепенно в трёх замещённый и т.д. Расчеты на основе экспериментальных данных показывают, что в изученной системе растворах 4,5-6,0 моль/л HCl образуются всего пять присоединенных комплексных частиц.

Для выявления координации лиганда к иону молибдена (V) были исследованы инфракрасные спектры неприсоединённых молекул 1,2,4-триазолтиола, $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$, роданида аммония и некоторых синтезированных 1,2,4-триазолтиольных координационных соединений молибдена (V).

На рисунке 4 представлены инфракрасные спектры неприсоединённого 1,2,4 – триазолтиола (L^1) и координационного соединения состава: $[\text{MoOL}^1_2(\text{CH}_3\text{COO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}^1_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$;

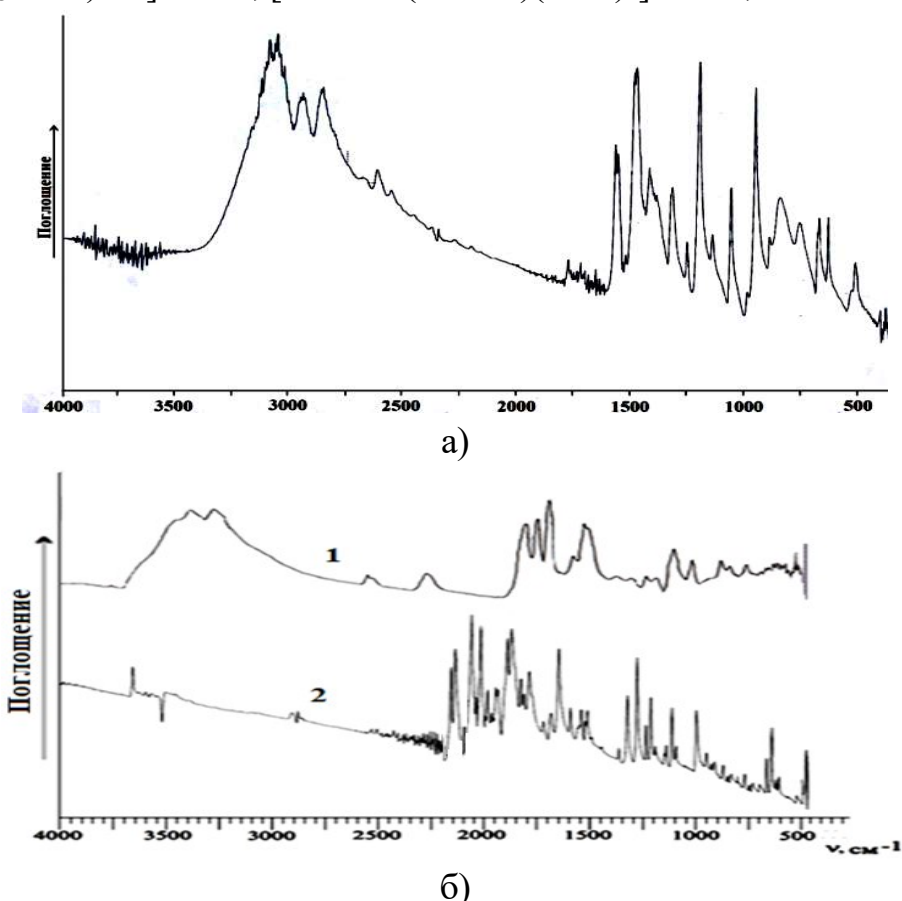


Рисунок 4. ИК-спектры. а) - 1,2,4-триазолтиола;
б)- координационных соединений: 1- $[\text{MoOL}^1_2(\text{CH}_3\text{COO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$;
2 - $[\text{MoOL}^1_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Сравнения инфракрасных спектров синтезированных координационных соединений молибдена (V) с некоординированным 1,2,4-триазолтиолом показывает, что проявления полос колебаний в сфере 746 – 754, 624-630 см⁻¹ и 2555-2617 см⁻¹, соответствуют колебаниям связи $\nu(\text{C-N})$ и $\nu(\text{N-N})$, $\nu(\text{N-H})$ азольного кольца, что в спектрах исследуемых соединений неменяется. Наблюдаются смещения в низкочастотных областях полоса поглощения при 825, 1010 и 1025 см⁻¹, которые соответствуют колебанию связи $\nu(\text{C=S})$. Обнаруженные изменения показывают, что в координационных соединениях составов: $[\text{MoOL}^1_2(\text{HCOO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $[\text{MoOL}^1_2(\text{CH}_3\text{COO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}^1_2(\text{SCN})_2(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ полученных при мольном соотношении Mo: L=1:2, молекулы 1,2,4 – триазолтиола координируются монодентатно через атом серы группы (C=S).

В инфракрасных спектрах $[\text{MoOL}^1_2(\text{HCOO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}^1_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, полученных при мольном соотношении Mo: L=1:2 до 1:4, обнаружены полосы поглощения со слабой интенсивностью в области 948-974 см⁻¹, которые по данным источникам можно отнести к валентным колебаниям молибденильной группы $\nu(\text{Mo=O})$.

А полосы поглощения, которые проявляются в области 3350 -3380 см⁻¹, нами отнесены валентным колебаниям $\nu(\text{OH})$ кристаллизационных молекул воды. Проявление в области 2040-2056 см⁻¹ интенсивной полосы поглощения $\nu(\text{C=N})$ в тиосеанатсодержащих комплексах составов $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2\text{Cl}] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2(\text{HCOO})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, может быть интерпретировано в пользу координации тиосеанат иона к молибдену (V), через атома азота. Полосы поглощения $\nu(\text{C=O})$ карбоксильной группы ацетат и формиат ионов в инфракрасных спектрах комплексов составов: $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{-COO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{SCN})_2(\text{CH}_3\text{COO})] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ смешаются в низкочастотные области и проявляются высокой интенсивностью при 1064-1080 см⁻¹. Выявленные изменения в характере спектров исследуемых комплексов, свидетельствует о монодентатной координации ацетат ионов к молибдену (V) посредством атома кислорода карбоксильных групп.

На основании анализа ИК-спектров тиосемикарбозида и синтезированных комплексов общего состава: $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})\text{Cl}_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ определен характер локализации ионов координационных сфер.

При рассмотрении в спектрах тиосемикарбозида и формиато-тиосемикарбазидных комплексов молибдена (V), выявлено незначительные изменения в характере полос поглощений $\nu_s(\text{COO}^-)$ и

$\nu(\text{C}=\text{S})$, которые относятся молекулам тиосемикарбазида, тиосианата, формиата и ацетат ионам.

Приводимые данные выясняет то, что молекулы тиосемикарбазида координируется к молибдену (V) монодентатна, через донорные атомы серы тионной группы. Интенсивные полосы поглощения в области 2040-2055 см^{-1} в тиосианат, содержащих комплексный состав $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ соответствует $\nu(\text{SCN})$. Смещения спектров тиосианатных ионов в низкочастотной области показывает координацию SCN^- - ионов к молибдену (V) по средством атома азота. Выявлено, что исследованные комплексы молибдена (V) галогенидные ионы, входящие вовнутреннюю сферу, являются лабильными и легко заменяется на ионы или молекулы, имеющие более сильные донорные атомы.

Для выяснения характера координации биядерных координационных соединений молибдена (V) с тиосемикарбазидом, изучен инфракрасные спектры неприсоединенных молекул тиосемикарбазида и синтезированные биядерные комплексы. Анализ инфракрасных спектров показывают, что в спектрах наблюдаются полосы колебания в сфере 710-740 см^{-1} , 870-1030 см^{-1} , 940-960 см^{-1} , 2045-2060 см^{-1} , 3200-3270 см^{-1} , которые соответственно предопределили к $\nu(\text{Mo}-\text{O})$, $\nu(\text{Mo}=\text{O})$ мостиковой группы $[\text{Mo}_2\text{O}_4]^{3+}$, $\nu(\text{C}=\text{S})$, $\nu(\text{CN})$, $\nu(\text{NH}_2)$ и $\nu(\text{OH})$. В спектре $(\text{N}_2\text{H}_4)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]$ при 1615 см^{-1} наблюдаются изменения соответствующие деформационным колебаниям молекул воды.

Методом кондуктометрии исследован молярная электрическая проводимость ДМФА растворов комплексов. Выявлены существования внутреннее и внешнее сферы комплекса и тип электролита, к которым можно отнести, полученные комплексы. Установлено, что полученные комплексы при разбавлении раствором диметилформаида, молярная электрическая проводимость оксогоалогено-1,2,4-триазолтиольные комплексы состава $[\text{MoOL}_2\text{Cl}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2\text{Br}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ и $(\text{NH}_4)[\text{MoOLCl}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $(\text{NH}_4)[\text{MoOLBr}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ увеличивается и находится в области 84,3-119,2 $\text{Ом}^{-1}\text{см}^2\text{моль}^{-1}$, следовательно, их необходимо отнести к слабым электролитам типа 1:1. Значения молярной электрической проводимости (μ) синтезированных комплексов в зависимости от температуры, лежат в области 47 -110 $\text{Ом}^{-1}\text{см}^2\text{моль}^{-1}$. Проведённые исследования методом кондуктометрии, молярной электрической проводимости для комплексов составов: $[\text{MoOL}_2\text{Cl}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2\text{Br}_3] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $[\text{MoOL}_2(\text{HCOO})(\text{SCN})_2] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ в диметилформаиде при 35°C

проявляется как электролит, а выше этой температуры, входит в тип электролита.

Характер термического распада комплексов Mo(V) с исследуемыми гетероциклическими лигандами изучен методом дериватографии. Процесс термического превращения комплекс состава $[MoOL_2(CH_3COOH)Cl_2] \cdot 2H_2O$, где: L-1,2,4-триазолтиол приведен в качестве примера на рисунке 5.

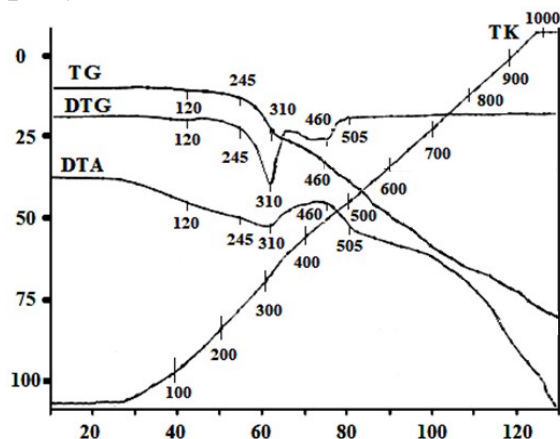
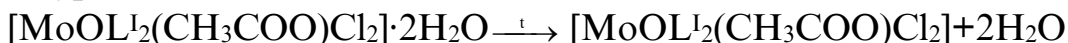
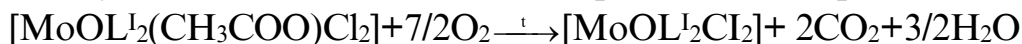


Рисунок 5. Дериватограмма комплекса $[MoOL_2(CH_3COOH)Cl_2] \cdot 2H_2O$

Установлено, что термолитиз приведенного выше комплекса, является многоступенчатым и сложным. Об этом говорят формы кривых на ДТГ и ДТА. Показано, что на первой стадии термического разложения в области температур 318-473К происходят удаления кристаллизационных молекул воды по уравнению:



При более высоких температурах, последующие стадии протекают уже при 473-643⁰С, при этом комплекс и органический лиганд разлагаются с выделением газообразных продуктов распада, что подтверждается эндо- и экзотермическими эффектами на кривой ДТА. Кроме того, изменяется масса исследуемого вещества, что можно проследить на кривой ТГ:



Потеря масс комплексов соответствуют молекуле воды и количествам выделенных газообразным веществам.

Разложения, протекающие при температуре 646-710⁰С:, охватывают последнюю стадию термического превращения комплекса, согласно следующей реакции:



Конечными продуктами процесса термического разложения комплекса являются MoO₃ и газообразный хлор. Вышеописанное термическое исследование было проведено методами Хоровиц-Метсгер (Х.М.) и Коатс-Редферн (К.Р.). При термическом разложении комплекса

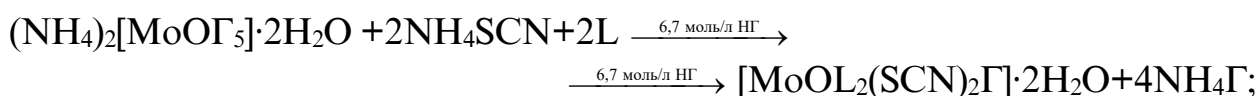
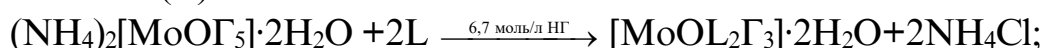
$[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COOH})\text{Cl}_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$, проводимые термогравиметрическим методом рассчитывали кинетические параметры процессов (табл. 4).

Таблица 4. Величины термодинамических характеристик реакций

термолиза комплексного соединения
состава $[\text{MoOL}_2(\text{CH}_3\text{COOH})\text{Cl}_2]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$

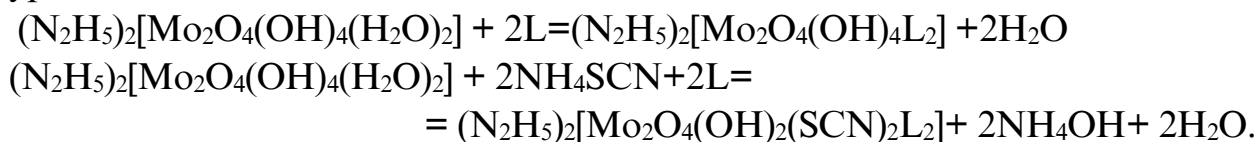
Участок термолиза	Расчеты по уравнению	E, кДж/моль	ΔH , кДж/моль	ΔG , кДж/моль	$-\Delta S$, кДж/моль	A, с ⁻¹
I	К.Р.	9,25	5,315	5,3463	0,06022	$5,31\cdot 10^3$
	Х.М.	7,43	3,584	3,6176	0,06312	$2,33\cdot 10^3$
II	К.Р.	16,67	11,9907	12,0242	0,06250	$3,32\cdot 10^3$
	Х.М.	19,34	14,7511	14,7836	0,06136	$4,56\cdot 10^3$
III	К.Р.	27,16	21,6682	21,7087	0,06436	$2,37\cdot 10^3$
	Х.М.	27,95	22,4083	22,4502	0,06587	$1,54\cdot 10^3$
IV	К.Р.	58,42	51,9521	52,0033	0,06771	$1,2\cdot 10^4$
	Х.М.	46,84	40,3521	40,3978	0,06060	$7,89\cdot 10^3$

Выделенные в твёрдом виде комплексы Mo(V) с 1,2,4-триазолтиольными и тиосемикарбазидными, проведен элементный химический анализ, физико-химическими методами, определены их состав и строения. Установлено, что в соотношениях $\text{Mo}:\text{L}^1(\text{L}) = 1:2$ при взаимодействии $(\text{NH}_4)_2[\text{MoO}_5]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ с 1,2,4-триазолтиолом (L^1) и тиосемикарбазидом (L) в растворах HCOOH , CH_3COOH и HCl синтезированы координационные соединения имеющие в своем составе ацетат, формиат, хлорид, тиосеанат и бромид ионы. Полученные результаты позволили предложить следующие реакции образования новых комплексов Mo(V):



Выявлено, что при взаимодействии $(\text{N}_2\text{H}_5)_2[\text{Mo}_2\text{O}_4(\text{OH})_4(\text{H}_2\text{O})_2]$ с определенным количеством тиосемикарбазид аммония при присутствии тиосемикарбазид в водно-спиртовой среде синтезировали труднорастворимые координационные соединения, имеющих в составе фрагмент $[\text{Mo}_2\text{O}_4]^{2+}$.

Проведенные исследования показывают, что при последовательном добавлении начальных реагентов, получают транс-активные гидроксотииосианитные тиосемикарбазидные соединения молибдена (V), которые с легкостью вступают в реакцию. Реакция протекает по уравнению:



Систематические исследования, варьируя соотношения составов растворителей и компонентов системы получили новые биоактивные комплексы Mo(V) с 1,2,4 – триазолтиолом и тиосемикарбазидом. Они ранее не были описаны в литературе.

ВЫВОДЫ

1. Процессы образования комплексов Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом в интервале температур 273-338 К в среде 4,5-6,0 моль/л HCl изучены методом потенциометрии с использованием окислительно-восстановительного лигандного электрода. Показано, что образование комплексов между катионами Mo(V) с 1,2,4-триазолтиолом происходит ступенчато и обратимо. С использованием метода Бьеррума вычислены величины ступенчатых констант устойчивости комплексных частиц и значения термодинамических функций реакций формирования оксохлоро-1,2,4-триазолтиольных комплексов молибдена в системах: Mo(V) - 1,2,4-триазолтиол - HCl (S).
2. Разработаны оптимальные условия 15 новых разнолигандных моноядерных и биядерных комплексов Mo(V) с исследованными лигандами. Предложены методики получения комплексов молибдена с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом в среде уксусной и галогеноводородных кислот и смеси с органическими растворителями.
3. Выявлено влияние концентрации органического лиганда и растворителя на состав и строение формирующихся комплексов Mo(V), а также образование биядерных координационных соединений, содержащих мостиковый фрагмент $[\text{Mo}_2\text{O}_3]^{4+}$.
4. Катионы Mo(V), как показано методами элементного анализа и ИК-спектроскопии, координируются с молекулой 1,2,4-триазолтиола, и тиосемикарбазидом соединяется с серой тионной группы. Следовательно, формиат и ацетат ионы координируются к центральному иону посредством кислорода гидроксильной группы.
5. Молярно-электрическая проводимость растворов оксогалогено-1,2,4-триазолтиольных и оксогалогено-тиосемикарбазидных комплексов Mo(V) в

диметилформаидных растворах было изучено кондуктометрическим методом. Выявлено, что синтезированных соединениях имеются внутренние и внешние сферы, а также типа электролита.

6. В интервале температур 298÷970 К изучено термическое разложение комплексов Mo(V) с тиосемикарбазидом и 1,2,4-триазолтиолом. Установлено, что этот процесс является многостадийным и сложным. На кривой ДТА проявились эндо- и экзотермические эффекты, которые соответствуют определённым изменениям состава и массы комплексов. Показано, что триоксид MoO₃ является конечным продуктом разложения комплексов.

Рекомендации к использованию результатов исследования

Методики синтеза, разработанные для полученных впервые комплексов, выявленные зависимости влияния растворителя на реакции их образования, термодинамическая их устойчивость вносят большой вклад в развитие координационной химии Mo. Высокоэффективные электролиты на основе изученных органических лигандов и их комплексов могут быть применены в разнообразной сфере народного хозяйства, промышленности, для нужд многих областей науки.

СПИСОК ПУБЛИКАЦИЙ СОИСКАТЕЛЯ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ

**Статьи опубликованные соискателя в научных журналах,
рекомендованных ВАК при Президенте Республики Таджикистан:**

- [1-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Роданидо-тиосемикарбазидные биядерные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Доклады Академии наук РТ, 2011, том 54, №4 Стр. 314-317.
- [2- М]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Синтез и физико-химические исследования координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Доклады АН РТ, Том 60, №1-2, Душанбе -2017. -С. 73-78.
- [3-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Координационные соединения молибдена(V) с 1-фенил-2,3-диметилпирозолин -5-тионом (L) и 1,2,4-триазолтиолом (L¹) в среде 6 моль/л HCl / О.А. Азизкулова, Г.Ф. Рачинская, А.Ш. Эгамбердиев, **Ф.Р. Ҳамидова**, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Наука и инновация Душанбе -2019, №3. -С. 154-156.
- [4-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 6 моль/л HCl 298 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова**, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Известия Ошского технологического университета. №2, - Ош 2020, - С 94-98.
- [5-А]. **Ҳамидова, .Р.** Исследование комплексообразования молибдена(V) с 1-фенил-2,3-диметилпирозолин-5-тионом в среде 4,0 моль/л HCl при

288К методом потенциометрического титрования / О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков // Вестник педагогического Университета. Издание Таджикского государственного педагогического университета имени Садриддина Айни №1(10-11). Душанбе -2021, -С. 29-34.

[6-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Таҳқиқи потенциометрии комплексҳосилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити 5 мол/л HCl ва ҳарорати 328 К / **Ф.Р. Хамидова** // Паёми Донишгоҳи миллии Тоҷикистон. Бахши илмҳои табиӣ. -2022. -№3. -С. 257-269.

Публикации опубликованные в других научных журналах и материалах конференции:

[7-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Синтез и свойства формиато-тиосемикарбазидных комплексов молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной “15-й годовщине независимости республики Таджикистан”, “2700-летию города Куляба” и “году арийской цивилизации” ч. 1. Душанбе - 2006. -С. 90-91

[8-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Взаимное замещения лигандов в новых координационных соединениях молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Международная конференция: “Современная химическая наука и её прикладные аспекты” (25-27 октября 2006 года) (материалы). Институт химии им. В.И. Никитина АН Республики Таджикистан. Душанбе - 2006. -С. 23 - 24.

[9-А]. **Хамидова, Ф.Р.** ИК-спектроскопическое исследования смешаннолигандных координационных соединений молибдена (V) с тиосемикарбазидом. /**Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной “800-летию поэта, великого мыслителя МавлоноДжалолуддинаБалхи” и “16-й годовщине независимости Республики Таджикистан”, ч. 1, Душанбе - 2007. -С. 81-82

[10-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Реакционная способность ацидокомплексов молибдена (V) с тиосемикарбазидом / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы научно-практической конференции «Достижения химической науки и проблемы ее преподавания» Душанбе -2007. -С. 72-77.

[11-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Молярная электрическая проводимость разнолигандных комплексных соединений молибдена (V) с тиосемикарбазидом/ О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова** // Материалы научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и студентов, посвященной «17-й годовщине независимости Республики Таджикистан», 1150-летию основоположника таджикско-персидской литературы Абу Абдулло Рудаки и году таджикского языка.ч.1. Душанбе -2008. -С. 67-68.

- [12-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Ацетато-тиосемикарбазидные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы республиканской научно-практической конференции «Перспективы развития исследований в области химии координационных соединений», посвященной 70-летию д.х.н., профессора Азизкуловой О.А. Душанбе -2011. -С. 67-69.
- [13-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Роданидо-тиосимокарбазидные биядерные координационные соединения молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы V-й международной научно-практической конференции «Перспективы применения инновационных технологий и усовершенствования технического образования в высших учебных заведениях стран СНГ», ч.1, Душанбе-2011.С. 289-292.
- [14-А] **Ҳамидова, Ф.Р.** Реакционная способность роданидных комплексов молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы республиканской конференции «Комплексообразование в растворах» Душанбе-2012. С. 74-75.
- [15-А] **Ҳамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 в средах 6 моль/л HCl при 288K / **Ф.Р. Ҳамидова, О.А. Азизкулова** // ТНУ научно-исследовательский институт, химический факультет, Сборник международной конференции: «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2013. -С. 110-114.
- [16-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом-5 в растворе 6 моль/л HCl при температуре 273 K / **Ф.Р. Ҳамидова, О.А. Азизкулова** // ТНУ, Наука и инновация, серия естественных и экономических наук. Душанбе: «Сино»-2014. -С. 100-102.
- [17-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Молярная электрическая проводимость растворов комплексов $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOBr}_5]$ с 1,2,4-триазолтиолом-5 / **Ф.Р. Ҳамидова, О.А. Азизкулова** // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «700-летию Мир Сайида Али Ҳамадони», «Году семьи» и Международному десятилетию действия «Вода для жизни» 2005-2015 годы. Душанбе -2015. -С. 34-35.
- [18-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Ацидолигандные 1,2,4-триазолтиольные координационные соединения молибдена (V) / **Ф.Р. Ҳамидова, О.А. Азизкулова** // ТНУ неделя науки, Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «25-летию государственной Независимости Республики Таджикистан». Душанбе -2016. -С. 92-93.
- [19-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Пайвастаҳои координационии молибден (V) бо ҳосилаҳои пиразолин (L) ва 1,2,4-триазол (L^1) / О.А. Азизкулова, М.И. Абдулхаева, А.Ш. Эгамбердиев, **Ф.Р. Ҳамидова** // ТНУ Материалы II Международной научной конференции «Химия алифатических и циклических производных глицерина и аспекты их применения»,

посвященной 75-летию памяти д.х.н., профессор член-корр. АН РТ Кимсанов Бури Хакимович. Душанбе -2016. -С. 201-204.

[20-А].**Ҳамидова, Ф.Р.** ИК-спектроскопическое исследование 1,2,4-триазолтиольных координационных соединений молибдена (V) / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова**// ТНУ неделя науки, Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «20-ой годовщине Дня национального единства» и «Году молодежи». Душанбе -2017. -С. 101.

[21-А].**Ҳамидова, Ф.Р.** Реакционная способность тиоцианатных координационных соединений пентабромooksомолибдата аммония с 1,2,4-триазолтиолом / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова** // Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2018. -С. 55-57.

[22-А].**Ҳамидова, Ф.Р.**Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 6 моль/л HCl при температуре 318 К. / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Ҳамидова**// Материалы международной конференции «Комплексные соединения и аспекты их применения». Душанбе -2018. -С. 63-65.

[23-А].**Ҳамидова, Ф.Р.** Синтез и исследование координационных соединений молибдена (V) с некоторыми тиоамиднымилигандами. / О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, **Ф.Р. Ҳамидова**// Материалы Республиканской научно-практической конференции посвященной Международному десятилетию действия «Вода для устойчивого развития, 2018-2028 годы», «80-ой годовщине со дня рождения Юсупова ТиллоЮсуповича» на тему: «Синтез новых биологически активных производных глицерина на основе аминокислот, пептидов и фуллерена C₆₀». Душанбе -2018. -С. 63-67.

[24-А].**Ҳамидова, Ф.Р.** Физико-химические исследования свойств координационных соединений молибдена(V) с некоторыми тиоцианатными гетероциклическими и тиоамиднымилигандами / О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, **Ф.Р. Ҳамидова**, М.И. Абдулхаева, У.М. Джурабеков // Материалы IV Международной научной конференции: «Вопросы физической и координационной химии», посвященной памяти докторов химических наук, профессоров Якубова Хамида Мухсиновича и ЮсуфоваЗухуриддинаНуриддиновича. Душанбе -2019. -С. 45-50.

[25-А]. **Ҳамидова, Ф.Р.** Реакция замещения лигандов в 1,2,4-триазолтиольных координационных соединениях молибдена(V) / **Ф.Р. Ҳамидова**, О.А. Азизкулова // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава и сотрудников ТНУ, посвященной «Годам развития села, туризма и народных ремесёл (2019-2021 гг.)» и «400-летию МиробидаСайидоНасафи». Том 1, Душанбе -2019, -С.97-98.

- [26-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Образование координационных соединений молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 6 моль/л HCl при температуре 338K / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Хамидова** // Сборник материалов XV Нумановские чтения «Современное состояние химической науки и использование её достижений в народном хозяйстве республики Таджикистан». Душанбе -2019 г, -С. 201-202.
- [27-А]. **Хамидова Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 5 моль/л HCl при температуре 318 K / **Ф.Р.Хамидова, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков**// Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников и студентов ТНУ, посвященной «5500-летию древнего Саразма», «700-летию выдающегося таджикского поэта Камола Худжанди» и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» Душанбе -2019. -С 205-206.
- [28-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Термические свойства координационных соединений молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом / **О.А. Азизкулова, Ф.Р.Хамидова, У.М. Джурабеков** // Материалы Республиканской научно-теоретической конференции профессорско-преподавательского состава, сотрудников и студентов ТНУ, посвященной «5500-летию древнего Саразма», «700-летию выдающегося таджикского поэта Камола Худжанди» и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 годы)» Душанбе -2019. - С 207-208.
- [29-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Потенциометрическое исследование процесса комплексообразования молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 5 моль/л HCl при 273 K / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Хамидова**// Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции на тему «Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан», посвященной 60-летию химического факультета и памяти д.х.н., профессора, академика АН РТ Нуманова Ишанкула Усмановича. Душанбе -2020. -С. 119-121.
- [30-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена(V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе 6 моль/л HCl при 328 K / **О.А. Азизкулова, Ф.Р. Хамидова** // Сборник статей республиканской научно-теоретической конференции на тему «Основы развития и перспективы химической науки в Республики Таджикистан», посвященной 60-летию химического факультета и памяти д.х.н., профессора, академика АН РТ Нуманова Ишанкула Усмановича (12-14 сентября). Душанбе -2020., С. 128-129.
- [31-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена(V) с 1-формил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 4 моль/л HCl при 298K / **О.А. Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И. Абдулхаева, Ф.Р. Хамидова**// Республиканская научно-практическая конференция студентов ТНУ,

посвященной 30-летию Государственной независимости Республики Таджикистан, 110-летию со дня рождения Народного поэта Таджикистана, Героя Таджикистана Мирзо Турсунзаде, 110 летию со дня рождения Народного писателя Таджикистана СотимаУлугзода и «20-летию изучения и развития естественных, точных и математических наук в сфере науки и образования (2020-2040 г)». Душанбе -2021. С. 84-87.

[32-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование комплексообразования молибдена (V) с 1-фенил-2,3-диметилпиразолин-5-тионом в среде 4,0 моль/л HCl при 288 К методом потенциометрического титрования / О.А., Азизкулова, А.Ш. Эгамбердиев, М.И Абдулхаева, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков // Вестник педагогического Университета. Издание Таджикского государственного педагогического университета имени Садриддина Айни №1(10-11). Душанбе-2021, С. 29-34.

[33-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Комплексообразование молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 5 моль/л HCl при 298 К / О.А. Азизкулова, **Ф.Р. Хамидова**, У.М. Джурабеков, А.Ш. Эгамбердиев // Сборник статей и международной научно-практической конференции на тему «Современные проблемы химии, применение и их перспективы», посвященная 60-летию кафедры органической химии и памяти д.н.х. профессора ХоликоваШиринбекаХаликовича Душанбе -2021, -С. 150-155.

[34-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования в системе $(\text{NH}_4)_2[\text{MoOCl}_5]$ -1,2,4-триазолтиол-5 моль/л HCl при 288 К / **Ф.Р.Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Джурабеков // Материалы III Международной научно-практической конференции на тему: (Развитие химической науки и области их применения), посвященной 80-летию памяти д.х.н., член корр, НАНТ, профессора Кимсанова Бури Хакимовича. Душанбе -2021, -С. 200-204.

[35-А]. **Хамидова Ф.Р.** Комплексообразования Мо(V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити 4,5 мол/л HCl дар ҳарорати 273 К / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Чурабеков // Материалы республиканской научно-теоретической конференции преподавателей, сотрудников НИИ ТНУ посвященной “Годам развития промышленности (2022-2026)” и “Чествованию Мавлоно Джалолиддина Балхи” Душанбе-2022, С.279-282.

[36-А]. **Хамидова, Ф.Р.** Исследование процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде 4 моль/л HCl при 308K / **Ф.Р. Хамидова**, О.А. Азизкулова, У.М. Чурабеков // Материалы 13 международной теплофизической школы “Теплофизика и информационные технологии” Душанбе -2022, -С. 209-212.

АННОТАТСИЯИ

диссертатсияи Ҳамидова Фируза Рауфовна
дар мавзуи “Пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-
триазолтиол ва тиосемикарбазид” барои дарёфти дараҷаи илмӣ номзади
илмҳои химия аз рӯи ихтисоси 02.00.01-Химияи ғайриорганикӣ

Калидвожаҳо: молибден, 1,2,4-триазолтиол, тиосемикарбазид, раванди комплексҳосилшавӣ, собитҳои устуворӣ, функсияҳои термодинамикӣ, пайвастаҳои координатсионӣ.

Объекти таҳқиқот: Омӯзиши раванди комплексҳосилкунӣ дар системаи $[MoOCl_5]^{2-}$ -1,2,4-триазолтиол-НСІ дар ҳароратҳои 273-338 К ва концентратсияҳои 4,5-6,0 мол/л НСІ, инчунин ҷустуҷӯи усулҳои синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ ва дуядрӣ молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид мебошад.

Ҳадафи таҳқиқот. Омӯзиш ва муайян намудани қонуниятҳо дар раванди комплексҳосилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити кислотаи хлорид, синтез ва таҳқиқи пайвастаҳои координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид дар муҳитҳои кислотагӣ ва обӣ, инчунин раванди ҷойивазкунии лигандҳо дар пайвастаҳои координатсионии моноядрӣ ва дуядрӣ молибден мебошад.

Натиҷаҳои таҳқиқот ва навроғониҳо. Аввалин маротиба раванди комплексҳосилкунии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар маҳлули кислотаи хлорид дар ҳароратҳои 273-338 К омӯхта шуд. Бо истифода аз усулҳои замонавии физикию химиявӣ имконияти муайян кардани собитҳои устуворӣ ва функсияҳои термодинамикии пайвастаҳои комплексӣ муҳайё гардид.

Муайян карда шуд, ки бо зиёд шудани ҳарорат, миқдори зарраҳои коамплексӣ тағйир намеёбад, аммо собитҳои устувории зарраҳои комплексӣ кам мешавад. Муқаррар карда шудааст, ки дар ҳама ҳароратҳо зина ба зина аз як то панҷто зарраҳои комплексӣ ҳосил мешавад.

Бо теъдоди 15-адад пайвастаҳои нави координатсионии молибден (V) бо 1,2,4-триазолтиол ва тиосемикарбазид синтез карда шуд. Сохт ва таркиби пайвастаҳои координатсионии синтезкардашуда бо усулҳои таҳлили элементии химиявӣ, кондуктометрӣ, спектроскопияи инфрасурх ва термогравиметрӣ муайян карда шудааст.

Дараҷаи истифода: Омӯзиши раванди комплексҳосилкунии Мо (V) бо 1,2,4-триазолтиол дар муҳити кислотаи гидрогенхлорид имкон дод, ки собитҳои устуворӣ, функсияҳои термодинамикӣ, баромади максималӣ ва соҳаҳои мавҷудияти ҳамашаклҳои комплексҳо ва вобастагии онҳо аз логарифми баръакси концентратсияи мувозинатии 1,2,4-триазолтиол муайян карда шаванд.

Татбиқи амалии натиҷаи таҳқиқот: Натиҷаҳои таҷрибавӣ ба дастомада, имкон дод, ки шароити синтези нави пайвастаҳои координатсионии 1,2,4-триазолтиолӣ ва тиосемикарбазидии молибден(V)-ро, ки қаблан дар адабиёт оварда нашудаанд, коркард намуда, роҳҳои истифодаи амалии онҳо дар ҳоҷагии халқ, саноат ва барои эҳтиёҷоти соҳаҳои гуногуни илм пешниҳод карда шавад.

АННОТАЦИЯ

диссертации Хамидовой Фирузы Рауфовны
на тему: «Координационные соединения молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01-Неорганическая химия

Ключевые слова: молибден, 1,2,4-триазолтиол, тиосемикарбазид, процесс комплексообразования, константа устойчивости, термодинамические функции, координационные соединения.

Объект исследования: изучение процесса комплексообразования в системе $[\text{MoOCl}_5]^{2-}$ -1,2,4-триазолтиол- HCl при температурах 273-338 К и концентрациях 4,5-6,0 моль/л HCl , а также поиском методов синтеза и исследования соединения является одноядерная и биядерная координация молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом.

Цель исследования. Изучение и установление закономерностей процесса комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в солянокислой среде, синтез и исследование координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом в кислой среде. и водных средах, а также процесс вытеснения лигандов в одноядерных и биядерных координационных соединениях молибдена.

Результаты исследований и инновации. Впервые изучен процесс комплексообразования молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом в растворе соляной кислоты при температурах 273-338 К. С помощью современных физико-химических методов удалось определить константы устойчивости и термодинамические функции сложных соединений.

Установлено, что с повышением температуры количество сложных частиц не меняется, но константы устойчивости сложных частиц уменьшаются. Установлено, что при всех температурах поэтапно образуется от одной до пяти сложных частиц.

Синтезировано 15 новых координационных соединений молибдена (V) с 1,2,4-триазолтиолом и тиосемикарбазидом. Строение и состав синтезированных координационных соединений установлены методами элементного химического анализа, кондуктометрии, инфракрасной спектроскопии и термогравиметрии.

Уровень применения: Изучение процесса комплексообразования Mo (V) с 1,2,4-триазолтиолом в среде соляной кислоты позволило определить константы устойчивости, термодинамические функции, максимальный выход и области существования всех форм комплексов и их зависимости по обратному логарифму следует определить равновесную концентрацию 1,2,4-триазолтиола.

Практическое применение результатов исследований: Полученные экспериментальные результаты позволили разработать новые условия синтеза 1,2,4-триазолтиоловых и тиосемикарбазидных координационных соединений молибдена(V), ранее не представленные в литературе, и разработать пути их практического использования в сельском хозяйстве людей, промышленности и для нужд различных областей науки.

ANNOTATION

dissertations of Khamidova Firuza Raufovna

on the topic: "Coordination compounds of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolethiol and thiosemicarbazide" for the degree of candidate of chemical sciences in the specialty 02.00.01-Inorganic chemistry

Keywords: molybdenum, 1,2,4-triazolethiol, thiosemicarbazide, complexation process, stability constant, thermodynamic functions, coordination compounds.

Object of study: study of the process of complex formation in the $[\text{MoOCl}_5]^{2-}$ -1,2,4-triazolthiol-HCl system at temperatures of 273-338 K and concentrations of 4,5-6,0 mol/l NSI, as well as the search for methods of synthesis and research compounds is the mononuclear and binuclear coordination of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolthiol and thiosemicarbazide.

Purpose of the study. Study and establishment of regularities in the process of complexation of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolethiol in hydrochloric acid medium, synthesis and study of coordination compounds of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolethiol and thiosemicarbazide in an acidic medium. and aqueous media, as well as the process of displacement of ligands in mononuclear and binuclear coordination compounds of molybdenum.

Research results and innovations. The process of complex formation of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolthiol in a solution of hydrochloric acid at temperatures of 273-338 K was studied for the first time. Using modern physicochemical methods, it was possible to determine the stability constants and thermodynamic functions of complex compounds.

It has been established that the number of complex particles does not change with increasing temperature, but the stability constants of complex particles decrease. It has been established that from one to five complex particles are formed step by step at all temperatures.

15 new coordination compounds of molybdenum (V) with 1,2,4-triazolethiol and thiosemicarbazide have been synthesized. The structure and composition of the synthesized coordination compounds were established by elemental chemical analysis, conductometry, infrared spectroscopy, and thermogravimetry.

Application level: The study of the process of complex formation of Mo (V) with 1,2,4-triazolthiol in hydrochloric acid made it possible to determine the stability constants, thermodynamic functions, the maximum yield and the range of existence of all forms of complexes and their dependence on the inverse logarithm, it is necessary to determine the equilibrium concentration 1, 2,4-triazolthiol.

Practical application of the research results: The obtained experimental results made it possible to develop new conditions for the synthesis of 1,2,4-triazolthiol and thiosemicarbazide coordination compounds of molybdenum(V), which were not previously presented in the literature, and to develop ways for their practical use in human agriculture, industry and for the needs various fields of science.