

Кыргызский национальный университет им. Ж. Баласагына
Кыргызский государственный технический университет им. И. Раззакова
Ошский государственный университет

Диссертационный совет Д 02.24.692

На правах рукописи
УДК: 544.344: 546(575.2) (04)

Сапалова Салтанат Асановна

**Фазовые равновесия в тройных водных системах, содержащих амиды
кислот, соли двухвалентных металлов**

02.00.01 - неорганическая химия

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук

Бишкек – 2025

Работа выполнена на кафедре неорганической химии и химической технологии факультета химии и химической технологии Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына

Научный руководитель:

Байдинов Туратбек Байдинович

кандидат химических наук, доцент, профессор кафедры неорганической химии и химической технологии Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына, Кыргызская Республика, г. Бишкек

Официальные оппоненты: **Буркитбаев Мухамбеткали Мырзабаевич**

академик АН РК, доктор химических наук, профессор, профессор кафедры общей и неорганической химии Казахского национального университета им. аль-Фараби, Республика Казахстан, г. Алматы

Бердалиева Жылдыз Имакеевна

кандидат химических наук, с.н.с., доцент кафедры биохимии с курсом общей и биоорганической химии им. Джумалиева А.Д. Кыргызской государственной медицинской академии им. И.К. Ахунбаева, Кыргызская Республика, г. Бишкек

Ведущая организация:

Таджикский национальный университет, кафедра неорганической химии, адрес: 734025, Республика Таджикистан, г. Душанбе, проспект Рудаки, 17

Защита диссертации состоится 23 мая 2025 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета Д 02.24.692 при Кыргызском национальном университете имени Ж. Баласагына, Кыргызском государственном техническом университете имени И. Раззакова, Ошском государственном университете по адресу: 720033, Кыргызская Республика, г. Бишкек, ул. Фрунзе, 547. Ссылка для доступа к видеоконференции защиты диссертации: <https://vc.vak.kg/b/022-tml-ajx-hs0>

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеках Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына (720033, г. Бишкек, ул. Жибек Жолу, 394), Кыргызского государственного технического университета им. И. Раззакова (720044, г. Бишкек, пр. Ч. Айтматова, 66), Ошского государственного университета, (723500, г. Ош, ул. Борубаева, 2) и на сайте Национальной аттестационной комиссии при Президенте Кыргызской Республики: https://vak.kg/diss_sovety/d-02-24-692/

Автореферат разослан «23» апреля 2025г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к. х. н., доцент



Субанкулова Д.А.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования. Синтез и изучение координационных соединений для использования их в сельском хозяйстве, ветеринарии и медицине являются одним из актуальных направлений современной неорганической химии. Различие свойств органических и неорганических солей и их сочетание в координационных соединениях дают возможность не только получить новые вещества, но и выявить участие комплексных соединений в химико-биологических процессах. Данные по исследованию влияния различных по природе заместителей в молекулах амидов на их взаимодействие с солями «металлов жизни» могут способствовать внесению большой ясности в процесс образования комплексов, представляющих интерес в прикладном отношении. По этой причине исследование процесса комплексообразования ионов металлов с амидами кислот представляет определенный интерес.

К настоящему времени детально исследованы взаимодействия ацетамида и, в определенной степени, формамида с солями металлов. Вместе с тем сведения о комплексных соединениях амидов и их производных являются ограниченными. Исследование процесса комплексообразования солей двухвалентных металлов с формамидом, диметилформамидом, диметилацетамидом позволяет выявить роль алкильного радикала на физико-химические свойства и строение комплексов. Выбор неорганических компонентов обусловлен тем, что соли магния, кальция и переходных металлов играют важную роль в жизнедеятельности растений и животных. В этой связи проведение целенаправленных исследований по синтезу, изучению строения, свойств, поиску практических аспектов применения комплексов амидов с солями двухвалентных металлов, в том числе металлов «жизни», представляет собой актуальную в научном и практическом отношениях задачу.

Связь темы диссертации с приоритетными научными направлениями, научными проектами. Работа выполнена в соответствии с планом НИР кафедры неорганической химии и химической технологии КНУ им. Ж. Баласагына по теме: «Взаимодействие солей переходных металлов с кислород-, азот- и серосодержащими лигандами» (№ гос. регистрации 79073891), грантами Министерства образования и науки Кыргызской Республики на проекты: «Разработка научных основ синтеза и получения биологически активных соединений с целью создания препаратов пролонгированного действия» (2007-2009 гг., Договор МО ПМБН от 08.01. 2007 г.), «Координационные соединения би- и трехвалентных металлов как

стимуляторы роста и развития растений и животных» (№ гос. регистрации 0005789, 2010-2012 г.г.), «Исследование процессов комплексообразования солей d- и f-элементов с амидами и их производными с целью получения новых биологически активных веществ» (2013, № гос. регистрации 0007000, 2015 г № гос. регистрации 0007177), «Физико-химические основы синтеза биологически активных соединений на основе амидов и неорганических солей и их свойства» (№ гос. регистрации 0007175, 2016 г).

Цель исследования. Получение новых комплексных соединений солей двухвалентных металлов с амидами кислот, установление их составов, изучение свойств и строения.

Задачи исследования:

1. Методом растворимости изучить взаимодействия хлоридов магния, и кальция, сульфатов меди и цинка, нитрата кадмия с формамидом, диметилформамидом, диметилацетамидом, соответственно. Установить концентрационные пределы образования, характер растворения в воде и оптимальные условия кристаллизации комплексов из насыщенных растворов.

2. Методами термогравиметрии, рентгенофазового анализа дать характеристику термической устойчивости синтезированных координационных соединений, получить кристаллографические данные новых твердых фаз.

3. При использовании ИК-спектроскопии, квантово-химических расчетных методов определения геометрических и электронных характеристик новых комплексных соединений (на примере формамида и его координационных соединений) изучить их строение, возможный способ координации лиганда к комплексообразователю.

4. Исследовать биологическую активность синтезированных комплексов для получения на их основе новых биологически активных препаратов.

Научная новизна. Впервые методом растворимости при 25⁰С проведены систематические исследования четырнадцати тройных водно-солевых систем, включающих хлориды магния и кальция, сульфаты меди и цинка, нитрат кадмия, формамид, диметилформамид, диметилацетамид. Установлено образование и определены оптимальные условия кристаллизации тринадцати новых комплексов: $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{L}$, ($\text{L} - \text{HCONH}_2, \text{HCON}(\text{CH}_3)_2, \text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$); $\text{MeX}_2 \cdot 4\text{HCONH}_2$, ($\text{Me} - \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$; $\text{X} - 2\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}$); $\text{MeX}_2 \cdot 2\text{L} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, ($\text{Me} - \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Cd}^{2+}$; $\text{X} - 2\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}, 2\text{NO}_3^-$; $\text{L} - \text{HCON}(\text{CH}_3)_2, \text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$). Разграничены концентрационные пределы выделения и определен тип растворимости комплексов. Различными методами физико-химического анализа идентифицирована индивидуальность полученных комплексов. Впервые полуэмпирическим квантово-химическим методом на

примере формамида определены равновесные конфигурации его комплексных соединений с Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} . Найдены длины и кратность связей, валентные углы, эффективные заряды атомов в исследуемых комплексах. По совокупности данных ИК-спектроскопии, квантово-химических расчетов предложен способ координации донорных атомов лиганда с металл-ионами и оптимизированы конфигурации полученных соединений. Проведены биологические испытания комплексов диметилформамида с хлоридами магния и кальция, сульфатом меди (II). Установлено, что данные соединения обладают ростостимулирующими и антигельминтными свойствами.

Практическая значимость полученных результатов. Полученные результаты исследования об условиях образования, синтеза, состава, строения и свойствах комплексных соединений металлов, о характере координации амидов представляют собой несомненный вклад в развитие координационной химии, могут быть использованы в спецкурсе по координационной химии программы подготовки магистров по направлению «Химия». Данные квантово-химических исследований амидов и их комплексных соединений необходимы при оценке прочности химических связей, свойств, строения координационных соединений металлов с другими амидными лигандами.

На основании изучения биологической активности и токсичности новое соединение $CuSO_4 \cdot 2HCON(CH_3)_2$ рекомендовано как эффективный антигельминтный препарат. На способ применения этого соединения получен патент Кыргызской Республики №1746. Соединения $MgCl_2 \cdot 2HCON(CH_3)_2 \cdot 2H_2O$ и $CaCl_2 \cdot 2HCON(CH_3)_2 \cdot 2H_2O$ могут быть использованы в качестве эффективных стимуляторов роста и развития пшеницы и сахарной свеклы при предпосевной обработке семян.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

- Синтез, определение составов тринадцати новых координационных соединений на основе хлоридов магния и кальция, сульфатов меди и цинка, нитрата кадмия, формамида, N,N-диметилформамида, N,N-диметилацетамида и воды.
- Доказательство индивидуальности синтезированных новых комплексных соединений совокупностью современных физико-химических методов исследования: колебательная спектроскопия, термогравиметрия, рентгенофазовый анализ, метод растворимости.
- Пространственные электронные характеристики формамида и его комплексов на основе квантово-химических расчетов.

- Практическое применение синтезированных комплексных соединений в качестве новых биологически активных препаратов.

Личный вклад соискателя. Автором непосредственно проведен весь химический эксперимент. Впервые экспериментально изучены гетерогенные равновесия в четырнадцать тройных водных системах с участием формамида, диметилформамида, диметилацетамида и неорганических солей. Соискателем установлены составы комплексных соединений, исследованы их физико-химические свойства с помощью современных методов исследования. Проведен анализ полученных данных, которые были сформулированы в виде основных положений диссертации, составляющих ее новизну и практическую значимость, а также обобщены и опубликованы полученные результаты. Автором проведено испытание биологической активности комплексных соединений.

Апробация результатов исследования. Материалы диссертационной работы докладывались на международных и республиканских конференциях: «Научно-практическая конференция молодых ученых КНУ им. Ж. Баласагына», Бишкек, 2007-2022.; «Республиканская научно-практическая конференция: Проблемы и перспективы», посвященная юбилею Иссык-Кульского государственного университета им. К. Тыныстанова, Каракол, 2010; «Международная научно-практическая конференция студентов и молодых ученых: Молодежь и инновации в области химии», посвященная Международному году химии, Алматы, 2011; «Международная научно-практическая конференция: Проблемы современной координационной химии», Душанбе, 2011; «Международная научная конференция: Актуальные научные исследования в современном мире», Переяслав-Хмельницкий, Украина, 2018.

Полнота отражения результатов диссертации в публикациях. По результатам исследований опубликовано 15 статей в материалах международных конференций, в рецензируемых научных журналах, индексируемых системами РИНЦ, из них 13 статей опубликованы в рекомендованных НАК ПКР изданиях. Получен патент Кыргызской Республики.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, выводов, практических рекомендаций, списка используемых источников. Диссертация изложена на 157 страницах компьютерного текста, содержит 61 рисунок, 45 таблиц, список использованных источников включает 147 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Введение.

Обоснована актуальность темы диссертации, сформулированы цель и задачи исследования, основные положения, выносимые на защиту, показаны научная новизна и практическая значимость результатов исследования.

Глава 1. Обзор литературы.

В литературной части обобщены данные по физико-химическим свойствам и структурам исходных веществ (формамида, диметилформамида, диметилацетамида), по взаимодействию указанных амидов в водных растворах с солями щелочных, щелочноземельных, переходных и редкоземельных металлов. Описаны результаты ИК-спектроскопических, термических, рентгеноструктурных исследований ряда известных металлоамидных комплексов.

Несмотря на достижения, имеется ряд проблем, связанных с недостаточной исследованностью металлоамидных комплексов. Информация по взаимодействию формамида, диметилформамида, диметилацетамида с хлоридами магния, кальция, сульфатами меди, цинка, нитратом кадмия в публикациях других авторов отсутствует.

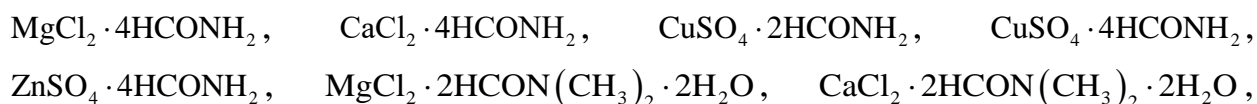
Глава 2. Методология и методы исследования.

Объект исследования. Гетерогенные системы, включающие неорганические соли, амиды кислот и продукты их взаимодействия.

Предмет исследования. Фазовые диаграммы, характеризующие возможности комплексообразования в зависимости от фазового состава. Физико-химическая характеристика синтезированных соединений, выделенных в кристаллическом состоянии в ходе исследования систем путем изотермического испарения соответствующих растворов.

Глава 3. Результаты собственных исследований.

3.1 Фазовые равновесия тройных систем из хлоридов магния, кальция, сульфатов меди, цинка, нитрата кадмия, формамида, *N,N*-диметилформамида, *N,N*-диметилацетамида и воды при 25⁰С. Методом растворимости впервые исследованы тройные водные системы из хлоридов магния, кальция, сульфатов меди, цинка, нитрата кадмия, формамида, диметилформамида и диметилацетамида при 25⁰С. В системах происходит комплексообразование указанных солей с кристаллизацией соединений следующих составов:



$\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$, $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

На рис. 3.1, в качестве примера, представлена диаграмма $\text{MgCl}_2 - \text{HCONH}_2 - \text{H}_2\text{O}$.

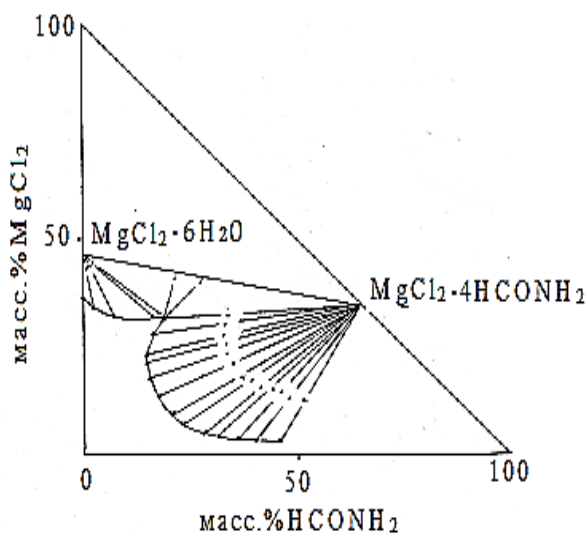


Рисунок 3.1 - Изотерма растворимости системы $\text{MgCl}_2 - \text{HCONH}_2 - \text{H}_2\text{O}$ при 25°C

Из рис.3.1 видно, что соединение $\text{MgCl}_2 \cdot 4\text{HCONH}_2$ кристаллизуется в интервале 32,25-3,20 масс. % MgCl_2 ; 18,23 - 45,65 масс. % HCONH_2 .

На рис. 3.2 представлена изотерма растворимости для системы хлорид кальция - диметилацетамид – вода при 25°C , которая состоит из двух ветвей кристаллизации, первая ветвь соответствует кристаллизации исходной соли, а вторая - отвечает выделению в твердую фазу конгруэнтно растворимого в воде соединения.

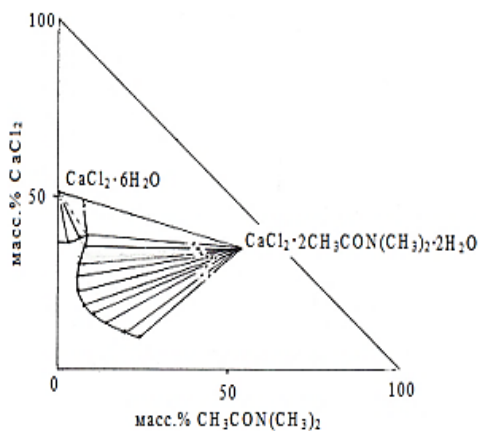


Рисунок 3.2. - Изотерма растворимости системы $\text{CaCl}_2 - \text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 - \text{H}_2\text{O}$ при 25°C

Диаграмма растворимости системы хлорид кальция – диметилацетамид – вода может служить примером, где образуется гидратированное соединение $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$. Методом растворимости также найдены: $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$.

Аналогическим образом, на рис. 3.3 представлена диаграмма растворимости системы сульфат меди (II) – N,N-диметилформамид – вода при 25°C, которая состоит из двух ветвей кристаллизации, соответствующих выделению в твердую фазу кристаллогидрата сульфата меди и нового соединения – $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$.

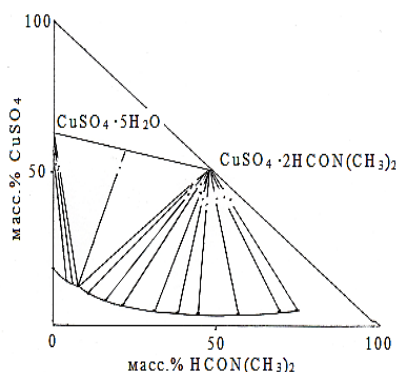


Рисунок 3.3 - Изотерма растворимости системы $\text{CuSO}_4 - \text{HCON}(\text{CH}_3)_2 - \text{H}_2\text{O}$ при 25°C

Состав $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$ определяется пересечением прямолинейных лучей на диаграмме в точке, отвечающей составу комплекса: 52,28% CuSO_4 , 47,71% $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$. Данные химического анализа подтверждают указанный состав: 52,12% CuSO_4 ; 47,40% $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$. Соединение растворяется в воде конгруэнтно.

Исследованием равновесий в системе сульфат меди – формамид – вода при 25°C установлено образование двух безводных координационных соединений $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{HCONH}_2$ и $\text{CuSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$, соответственно, конгруэнтно и инконгруэнтно растворимых в воде. В тройной системе сульфат меди – диметилацетамид – вода при 25°C также образуется безводное соединение $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$.

Результаты исследования системы сульфат цинка – формамид – вода при 25°C показывают, что в системе образуется одно инконгруэнтно растворимое в воде соединение состава $\text{ZnSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$. Тройные системы, включающие сульфат цинка, ДМФА и ДМАА, относятся к простому типу без образования соединений, что свидетельствует о влиянии алкильного радикала на комплексообразование. Таким образом, в результате изучения фазовых

равновесий, за исключением $\text{ZnSO}_4 - \text{HCON}(\text{CH}_3)_2$ ($\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$) - H_2O , установлено образование и определены оптимальные условия кристаллизации тринадцати новых комплексов.

3.2. Физико-химическая характеристика синтезированных соединений. Все металлоамидные комплексы выделены в кристаллическом состоянии в ходе исследования систем путем изотермического испарения соответствующих растворов.

Растворимость соединений в органических растворителях. Из экспериментальных данных следует, что каждое соединение имеет определенные значения плотности, удельного и молекулярного объемов, которые характеризуют его индивидуальность. Из полученных результатов можно заметить, что формаимидные, диметилформаимидные и диметилацетаимидные соединения металлов хорошо растворяются в спирте, мало в ацетоне, хлороформе, а в бензоле, четыреххлористом углероде практически не растворяются.

ИК-спектры поглощения. С целью определения места локализации координационной связи в металлоамидных комплексах и установления предполагаемого строения соединений были исследованы ИК-спектры поглощения комплексов в области $4000-400 \text{ см}^{-1}$. На рис. 3.4 и 3.5 представлены ИК-спектры $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$ и $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, соответственно.

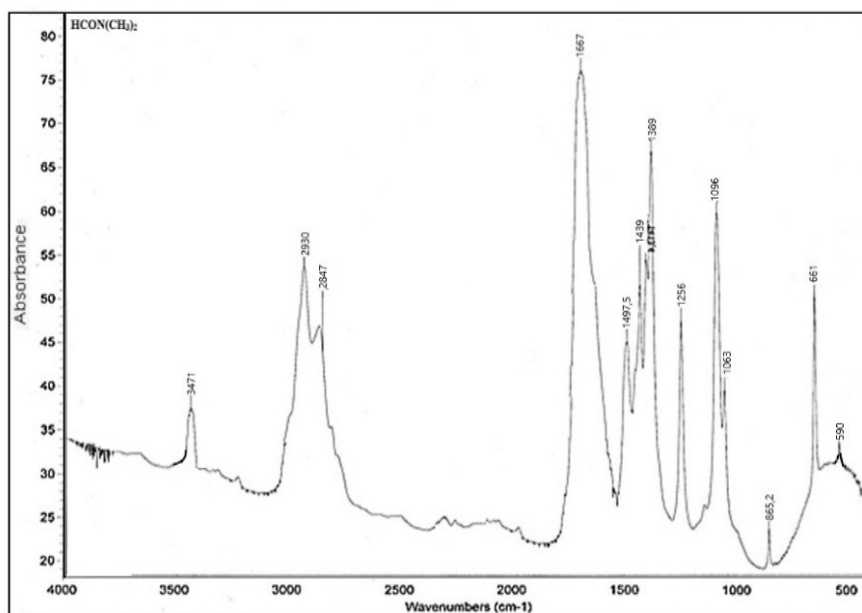


Рисунок 3.4 - ИК-спектры поглощения $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$

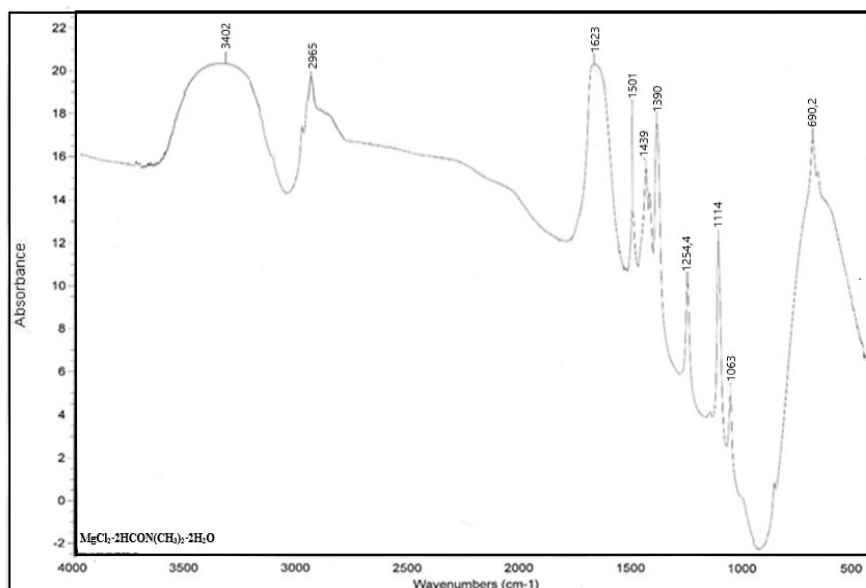


Рисунок 3.5 - ИК-спектры поглощения соединения $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

При рассмотрении ИК-спектров поглощения, в первую очередь, мы обратили внимание на нормальные колебания связей в молекулах амидов для детального и обоснованного отнесения колебательного спектра. Определены области основных колебательных частот: $\nu(\text{C}=\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{N})$, $\nu(\text{NH})$, так как при образовании координационной связи должно наблюдаться изменение, прежде всего, этих колебаний амидов.

Значения основных колебательных частот в ИК-спектрах поглощения свободного формамида, диметилформамида, диметилацетамида и их координационных соединений приведены в табл.3.1. Сравнение ИК-спектров свободного амида и комплексных соединений показывает, что частоты валентных колебаний связей NH смещаются в высокочастотную область, в то время как частота преимущественно валентного колебания связи [$\nu(\text{C}=\text{O})$] понижается при координировании на 19-47 cm^{-1} по сравнению с частотами некоординированных амидов.

Такое смещение валентных колебаний [$\nu(\text{C}=\text{O})$] обусловлено образованием связи $\text{Me} \rightarrow \text{O}$, что, в свою очередь, приводит к упрочнению связи $\text{C}-\text{N}$. Действительно, частота [$\nu(\text{C}-\text{N})$] при 1309 cm^{-1} в спектре свободного формамида в случае комплексов смещается на 75-127 cm^{-1} в высокочастотную область, то есть происходит ослабление связи $\text{C}=\text{O}$ и усиление связи $\text{C}-\text{N}$, а это соответствует координации органического лиганда с центральным атомом металла через кислород карбонильной группы.

Таблица 3.1 - Экспериментально полученные частоты валентных и деформационных колебаний формамида, N,N-диметилформамида, N,N-диметилацетамида и их соединений

Отнесение	ФА	MgCl ₂ · 4ФА	CaCl ₂ · 4ФА	CuSO ₄ · 2ФА	CuSO ₄ · 4ФА	ZnSO ₄ · 4ФА	ДМФ А	MgCl ₂ · 2ДМФА· 2H ₂ O	CaCl ₂ · 2ДМФА· 2H ₂ O	CuSO ₄ · 2ДМФА	ДМА А	MgCl ₂ · 2ДМАА· 2H ₂ O	CaCl ₂ · 2ДМАА· 2H ₂ O	CuSO ₄ · ДМАА
$\nu_{as}[(CH_3)N]$, $\nu(OH)$	3345 3450	3313 3407	3313, 3426	3360, 3256	3345	3451	3471	3402	3416	-	3452 3015	3361	3402	3339
$\nu_s(CH_3)$	2883	2928	2917	2878	2878	2850	2930, 2847	2965	2936	2938	2932	2943, 2237	2359	2915
$\nu(CO) + \delta(H_2O)$	1710	1691	1663	1683, 1653	1687	1685	1667	1623	1642	1636	1650	1624	1623	1622
$\delta_s[(CH_3)N]$	1615	1384	1392	1583	1558	1616	1497	1501	1498	1544	1500	1522	1516	
$\nu(CN)$	1309	1365	1392	1429	1436	1394	1389	1390	1390	1398	1397	1366	1405	1418
$\delta_s(CH_3) + \nu(CN)$	670	789	633	-	-	-	1439	1439	1441	1544	1452	1422, 1411	1423	1386
$\delta_s[(CH_3)N]$, $\nu_s(CNC)$	925	1081	1054				1256	1254	1252	1371	1268	1270	1264	1318
$\nu_3(SO_4^{2-})$	-	-	-	1144, 1133	1142	1131	-	-	-	1198, 1151				1144, 1094
$r(CH_3)C$, $r(CH_3)N$							1096	1114	1111,4	1044	1185	1199	1197	-
$r(CH_3)C$, $r(CH_3)N$	-	-	789				1063	1063	1061	1198, 1151	1014	1046, 1031	1024	1020
$\nu_1(SO_4^{2-})$				982	981	835, 982	-	-	-	986	-	-	-	983
$r(CH_3)N$, $\nu_s(CNC)$	1055	1055	1085	1092	1090	1117	865	-	860	1092	960	974	969	1198
$\delta(OCN)$	605		592	618	617	619	661	690	676	-	738	783	750	777
$\delta(C_1O)$							590	-	557	-	590	613	597	
$\nu(MO)$, $\delta[(CH_3-N-CH_3)]$	-	-	-	-	-	456	405	421	420	456	462	486, 418	452	456
$\nu_4(SO_4^{2-})$	-	-	-	618, 629	-	623	-	-	-	603, 583				645, 618

Соединения хлоридов магния, кальция с ДМФА и ДМАА содержат в своем составе две молекулы воды. На ИК-спектрах указанных соединений происходит наложение полос поглощения валентных и деформационных колебаний воды [ν (ОН), δ (ОН)] с полосами карбонильной и амидной групп, вследствие чего они не проявляются отдельной полосой. Тем не менее, проявление частот в области валентных колебаний ν (NH) и ν (OH), а также данные термического анализа позволяют предположить о наличии связанной воды в составе соединений. Молекулы воды находятся во внутренней координационной сфере.

Анализ ИК-спектров сульфатных комплексов меди и цинка показывает, что обнаруживаются несколько полос в области $1144\text{--}617\text{ см}^{-1}$, которые относятся к колебаниям сульфатных ионов. В спектрах комплексов меди наблюдается расщепление полос поглощения, которое свидетельствует о том, что сульфат-ион в амидных комплексах состава 1:2 непосредственно координирован к атому меди, т.е. находится во внутренней сфере комплекса, выполняя роль бидентатного лиганда. В случае соединений $\text{CuSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$, $\text{ZnSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$ сульфат-ион находится во внешней сфере. Это хорошо согласуется с данными для типичных сульфатных комплексов.

Таким образом, независимо от состава комплексов и природы центрального атома, во всех изученных нами солях магния, кальция и переходных металлов координация молекул формамида, диметилформамида и диметилацетамида осуществляется через атом кислорода карбонильной группы. Исходя из вышеизложенного, предполагаемое строение комплексных соединений можно представить следующим образом (рис. 3.6 – 3.8).

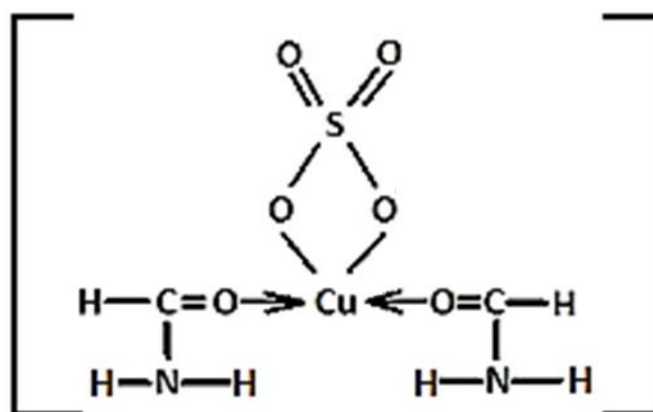


Рисунок 3.6 - Предполагаемая структура комплексов типа: $[\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{HCONH}_2]$
 $[\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{L}]$, (L– $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$, $\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$)

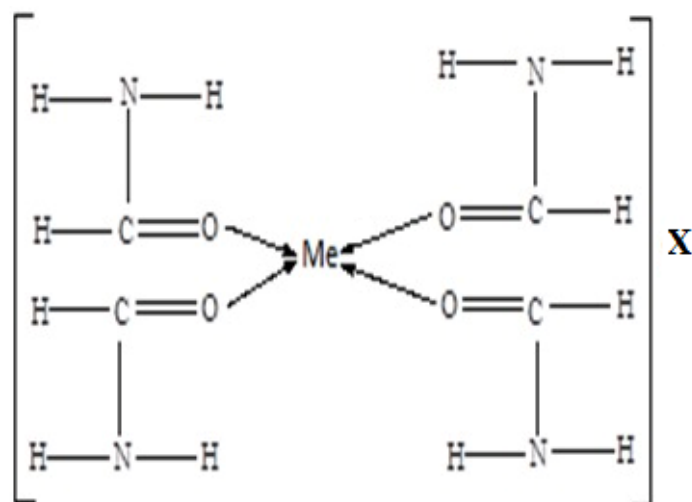


Рисунок 3.7 - Предполагаемая структура комплексов типа: $\text{MeX} \cdot 4\text{HCONH}_2$,
 ($\text{Me} - \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}, \text{Cu}^{2+}, \text{Zn}^{2+}$; $\text{X} - 2\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}$)

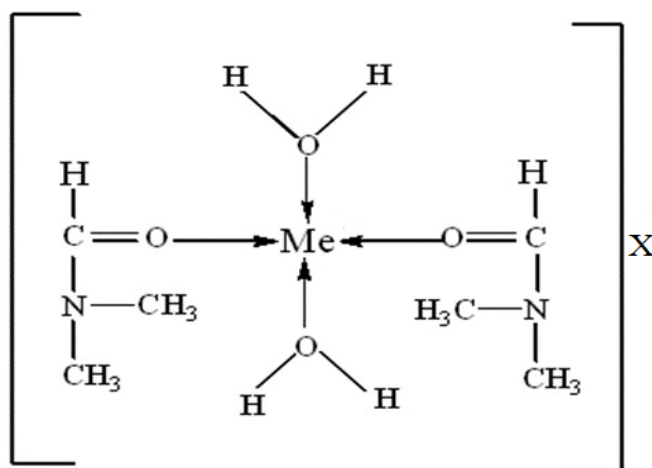


Рисунок 3.8 – Предполагаемая структура комплексов типа: $\text{MeX} \cdot 2\text{L} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$,
 ($\text{Me} - \text{Mg}^{2+}, \text{Ca}^{2+}$; $\text{L} - \text{HCON}(\text{CH}_3)_2, \text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$; $\text{X} - 2\text{Cl}^-, \text{SO}_4^{2-}$)

Дериватографический анализ. Результаты изучения термической устойчивости показывают, что термические характеристики синтезированных комплексов имеют более сложный характер, чем у исходных компонентов. Каждому соединению характерны свои температурные интервалы превращений, которые свидетельствуют об индивидуальности каждого соединения.

Кривые нагревания (ДТА) комплексов, характеризующиеся несколькими эндо- и экзотермическими эффектами, соответствующими процессам дегидратации, плавления, разложения и окисления оставшихся продуктов распада, представлены на рис. 3.9. В гидратированных соединениях отщепление молекул воды происходит в интервале температур от 50 до 140°С,

а молекул лиганда – 222–445⁰ С. Дегидратация происходит ступенчато и в одну стадию. Убыль массы вещества по кривой ТГ, соответствующей полной дегидратации, подтверждается расчетами количества молекул воды в комплексах, установленного из диаграмм растворимости составов.

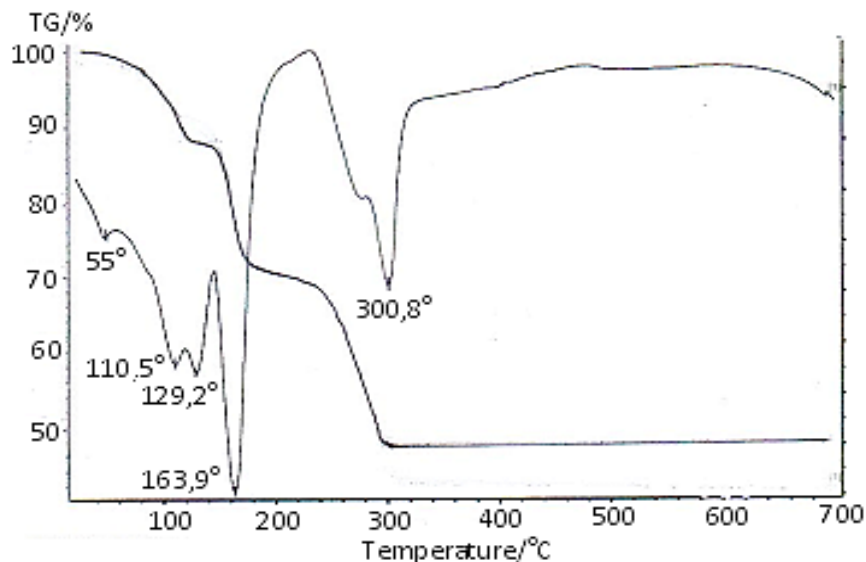


Рисунок 3.9 - Дериватограмма соединения $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Рентгенографический анализ. Проведен рентгенофазовый анализ исходных и полученных соединений. Все соединения дают дифракционную картину, отличающуюся от исходных веществ. По данным рентгенографического анализа вычислены межплоскостные расстояния, интенсивности пиков дифрактограмм, параметры элементарной ячейки, число формульных единиц в элементарной ячейке, пространственная группа и значения рентгеновской плоскости, которые подтвердили индивидуальность полученных соединений. Сульфатные соединения меди имеют триклинную кристаллическую решетку. Остальные соединения относятся к моноклинной сингонии.

Квантово-химические расчеты соединений. Проведение квантово-химических расчетов как свободного формамида, так и его координационных соединений с солями металлов представляет большой интерес, поскольку позволяет провести анализ в изменениях пространственного и электронного строения исследуемых соединений. Расчетно-теоретическое исследование квантово-химическим методом ZINDO/1 структур комплексных соединений хлоридов магния, кальция, сульфатов меди и цинка, свободного формамида и их сравнительный анализ показывают, что молекула формамида сохраняет свое плоское строение и в координационных соединениях. Рассчитанные значения

эффективных зарядов на атомах молекул формамида показывают, что отрицательные заряды сосредоточены на атомах кислорода и азота (табл. 3.2).

Таблица 3.2 – Эффективные заряды на атомах молекул формамида и его комплексов $[\text{Mg}(\text{HCONH}_2)_4]\text{Cl}_2$, $[\text{Ca}(\text{HCONH}_2)_4]\text{Cl}_2$, $[\text{Cu}(\text{HCONH}_2)_4]\text{SO}_4$, $[\text{Zn}(\text{HCONH}_2)_4]\text{SO}_4$

Комплексы	HCONH_2	$[\text{Mg}(\text{HCONH}_2)_4]\text{Cl}_2$	$[\text{Ca}(\text{HCONH}_2)_4]\text{Cl}_2$	$[\text{Cu}(\text{HCONH}_2)_4]\text{SO}_4$	$[\text{Zn}(\text{HCONH}_2)_4]\text{SO}_4$
Атом	Эффективные заряды				
O ¹	-0,395	-0,361	-0,317	-0,382	-0,324
N ¹	-0,038	-0,278	-0,265	-0,282	-0,267
C ¹	0,221	0,284	0,278	0,296	0,285
H ¹	0,081	0,224	0,036	0,026	0,038
H ²	0,073	0,183	0,207	0,168	0,132
H ³	0,057	0,155	0,122	0,124	0,156
Me		0,472	0,440	0,654	0,376

Наибольшее сосредоточение отрицательного заряда ($-0,395e^-$) наблюдается, как и ожидалось, на атомах кислорода. Поэтому молекулы указанных амидов координируются к атомам металлов-комплексобразователей, в первую очередь, через атом кислорода карбонильной группы. Эти предположения подтверждаются при расчете геометрической структуры комплексов хлоридов магния, кальция, сульфатов меди и цинка (табл. 3.3).

Таблица 3.3 –Рассчитанные геометрические параметры комплексов

[Mg(HCONH₂)₄]Cl₂, [Ca(HCONH₂)₄]Cl₂, [Cu(HCONH₂)₄]SO₄, [Zn(HCONH₂)₄]SO₄

Комплексы		HCONH ₂		[Mg(HCONH ₂) ₄]Cl		[Ca(HCONH ₂) ₄]Cl ₂		[Cu(HCONH ₂) ₄]SO ₄		[Zn(HCONH ₂) ₄]SO	
				2						4	
Углы, градусы	Связи	∠	r, Å	∠	r, Å	∠	r, Å	∠	r, Å	∠	r, Å
∠O ¹ C ¹ N ¹	OC	117,705	1,0969	112,623	1,1022	108,708	1,1087	113,644	1,1185	109,10	1,1189
∠H ¹ C ¹ N ¹	H ¹ C	117,981	1,0886	114,108	1,0887	114,567	1,4464	119,223	1,4462	115,346	1,4766
∠O ¹ C ¹ H ¹	CN	124,314	1,246	111,143	1,209	115,181	1,188	114,102	1,194	113,943	1,198
∠C ¹ N ¹ H ²	NH ²	121,591	1,5183	114,235	1,5186	101,549	1,4867	110,698	1,4871	108,052	1,4149
∠C ¹ N ¹ H ³	NH ³	120,596	1,099	114,444	1,0995	114,875	1,0876	112,514	1,0875	109,471	1,0976
∠H ² N ¹ H ³	-	117,812	-	103,464	-	101,219	-	108,078	-	108,083	-
∠CO ¹ Me	MeO	-	-	111,165	1,0719	114,479	1,0884	109,840	1,0883	109,475	1,0987

В соединениях $\text{MgCl}_2 \cdot 4\text{HCONH}_2$, $\text{CaCl}_2 \cdot 4\text{HCONH}_2$, $\text{CuSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$, $\text{ZnSO}_4 \cdot 4\text{HCONH}_2$ центральный атом соединяется с органическим лигандом (формами́д) через атомы кислорода карбонильных групп. Хлорид-ионы и сульфат-ионы остаются во внешней сфере и образуют группировку из атомов металла, четырех атомов кислорода, которая представляет собой искаженный тетраэдр (рис. 3.10).

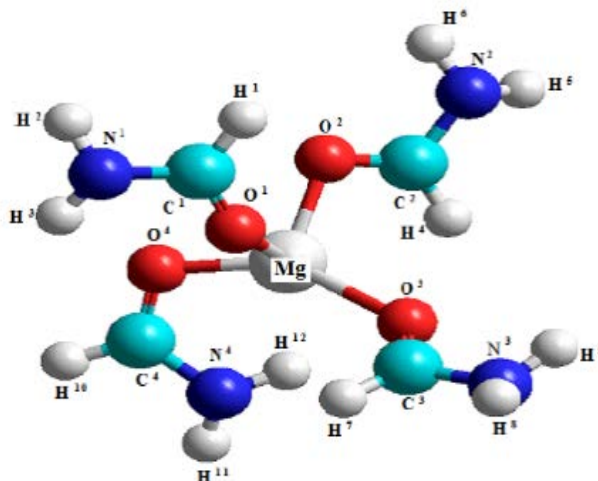


Рисунок 3.10 - Оптимизированная конфигурация комплексного катиона $[\text{Mg}(\text{HCONH}_2)_4]^{2+}$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Установлено образование тринадцати новых комплексных соединений щелочноземельных и d-металлов с формамидом, диметилформамидом, диметилацетамидом трех типов: $\text{CuSO}_4 \cdot 2\text{L}$ (L – HCONH_2 , $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$, $\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$); $\text{MeX}_2 \cdot 4\text{HCONH}_2$ (Me – Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} ; X – 2Cl^- , SO_4^{2-}); $\text{MeX}_2 \cdot 2\text{L} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ (Me – Mg^{2+} , Ca^{2+} , Cd^{2+} ; L – $\text{HCON}(\text{CH}_3)_2$, $\text{CH}_3\text{CON}(\text{CH}_3)_2$; X – 2Cl^- , SO_4^{2-} ; 2NO_3^-). Определены концентрационные границы образования, характер растворимости комплексов в насыщенных водных растворах и выделены новые соединения в виде устойчивых кристаллов.

2. Показано, что все комплексные соединения формамида, диметилформамида, диметилацетамида с солями двухвалентных металлов плавятся с разложением. Процесс разложения сопровождается поглощением тепла и характеризуется определенными значениями убыли массы веществ, подтверждающей состав соединений. При этом, рентгенографический анализ однозначно подтвердил кристалличность и индивидуальность синтезированных новых координационных соединений, которые характеризуются менее плотной упаковкой кристаллов, чем исходные соли и растворяются в жидкостях с большой диэлектрической проницаемостью.

3. По данным ИК–спектров, квантово-химических расчетов комплексных соединений исследуемых солей двухвалентных ионов с формамидом, диметилформамидом, диметилацетамидом показана возможность образования связи металл-лиганд через атом кислорода карбонильной группы амидов.

4. Результаты испытаний показали, что амидные комплексы $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ являются биоактивными веществами. Они положительно влияют на энергию прорастания и всхожесть семян пшеницы. Соединение $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ является эффективным и удобным в применении средством повышения сахаристости и урожайности корнеплодов сахарной свеклы. Новое комплексное соединение бис-(N,N-диметилформамид) сульфата меди (II) обладает высокой антигельминтной активностью (100%), умеренной токсичностью ($\text{LD}_{50}=804,5$ мг/кг) и рекомендовано для применения как препарат «Дифомед».

ПРАКТИЧЕСКИЕ РЕКОМЕНДАЦИИ

Синтезированные металлоамидные комплексы были испытаны в качестве биологически активных веществ в лабораторных и полевых условиях. Установлено, что $\text{MgCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, $\text{CaCl}_2 \cdot 2\text{HCON}(\text{CH}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ являются стимуляторами роста пшеницы и сахарной свеклы.

Исследование нового комплексного соединения бис-(N,N-диметилформамид) сульфата меди (II) показало, что максимально переносимая доза для белых мышей при пероральном введении составляет 400 мг/кг, средняя смертельная доза $\text{LD}_{50}=804,5(696,2 \div 945,6)$ мг/кг и абсолютно смертельная доза (LD_{100}) равнялась 1200 мг/кг живой массы животных. По классификации токсичности химических веществ данное соединение соответствует классу малотоксичных соединений. Комплексное соединение обладает высокой антигельминтной активностью (100%) и умеренной токсичностью. Патент зарегистрирован в Государственном реестре изобретений КР.

СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. **Махмадназарова, Н.Д.** Системы хлорид (сульфат) магния - N,N-диметилформамид - вода при 25°C [Текст] / Н.Д. Махмадназарова, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова, О.С. Сатывалдиев, С.А. Сапалова // Вестник

- Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына. – 2007. - Серия 5. – Выпуск 1. – С. 250–251.
<https://scholar.google.com/citations?user=oUVGm5sAAAAJ&hl=ru>.
2. **Мураталиева, А.Д.** Тройные системы из хлоридов магния, кальция, N,N-диметилацетамида и воды при 25⁰С [Текст] / А.Д. Мураталиева, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова, А.К. Садыкова, С.А. Сапалова // Вестник Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына. – 2007. - Серия 5. – Выпуск 1. – С. 265–269.
<https://scholar.google.com/citations?user=oUVGm5sAAAAJ&hl=ru>
 3. **Сапалова, С.А.** Исследование взаимодействия сульфата цинка с формамидом и N,N-диметилформамидом [Текст] / С.А. Сапалова, Н. Акынбекова, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова, Н.О. Орозбаева // Вестник Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына. – 2008. - Серия 5. – Выпуск 1. – С. 86–87.
<https://scholar.google.com/citations?user=oUVGm5sAAAAJ&hl=ru>
 4. **Сапалова, С.А.** Взаимодействие солей двухвалентных металлов с некоторыми амидами в водной среде [Текст] / С.А. Сапалова, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова, Н.Д. Махмадназарова, Б.И. Иманакунов // Вестник Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына. – 2008. - Серия 5. – Выпуск 1. – С. 87–89.
<https://scholar.google.com/citations?user=oUVGm5sAAAAJ&hl=ru>.
 5. **Сапалова, С.А.** Взаимодействие сульфата меди с амидами [Текст] / С. А. Сапалова // Вестник Иссык-Кульского университета. – 2010. – № 26. – С. 212–217. <https://libraryksu.kg/vestnik/arhiv/28>
 6. **Сапалова, С.А.** Дифференциально-термический анализ металлоамидных комплексов двухвалентных металлов [Текст] / С.А. Сапалова, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова // Интернет-журнал ВАК КР. – 2012. – № 3. – С. 12–20. <http://journal.vak.kg/category/god-2012/3-kvartal-god-2012/>
 7. **Сапалова, С.А.** Колебательные спектры комплексов хлоридов магния и кальция с диметилформамидом и диметилацетамидом [Текст] / С.А. Сапалова // Издeниe Поиск. – 2013. – № 3(1). – С. 5–11.
<https://scholar.google.com/citations?user=oUVGm5sAAAAJ&hl=ru>
 8. **Сапалова, С.А.** Исследование взаимодействия хлорида магния с амидом муравьиной кислоты [Текст] / С.А. Сапалова, А.А. Абдрасулова, Б.С. Намазова, Т.Б. Байдинов, Б.И. Иманакунов // Известия ВУЗов. – 2014. – № 5. – С.70–72. http://lib.knu.kg/files/2014/vestnik_spec_2014.pdf
 9. **Сапалова, С.А.** Исследование взаимодействия хлорида кальция с амидом муравьиной кислоты в водной среде при 298К [Текст] / С.А. Сапалова, Т.Б. Байдинов, Б.С. Намазова, Б.И. Иманакунов // Вестник Кыргызского национального университета им. Ж. Баласагына. – 2015. – Спец. выпуск. – С. 223–227.
http://lib.knu.kg/files/2014/vestnik_spec_2014.pdf

10. **Арзыбаев, М.А.** Острая токсичность бис-(N,N-диметилформамид) сульфата меди (II) [Текст] / М.А. Арзыбаев, Т.Б. Байдинов, М.А. Исаев, А.Т. Аламанов, С.А. Сапалова // Вестник Кыргызского национального аграрного университета им. К.И. Скрябина. – 2015. – № 1(33). – С. 42–44. <https://elibrary.ru/item.asp?id=25106287>
11. Пат. 1746. Кыргызская Республика. МПК C07F 1/08 (2015/1). Бис-(N,N-диметилформамид) сульфат меди (II), обладающий антигельминтной активностью [Текст] / М.А. Арзыбаев, Т.Б. Байдинов, С.А. Сапалова, Б.С. Намазова, М.А. Исаев, Н. Ажибеков; Бишкек. Кыргызский национальный аграрный университет. – № 20140048.1 заяв. 07.05.2014, опубл. 31.06.2015. Интеллектуальная собственность. Официальный бюллетень № 6. – 12 с. <https://base.patent.kg/d/iz/pp/PPPDF/PP1746.pdf>
12. **Арзыбаев, М.А.** Антигельминтная активность бис-(N,N-диметилформамид) сульфата меди (II) [Текст] / М.А. Арзыбаев, М.А. Исаев, А.Т. Аламанов, К.Р. Тоимбетова, Т.Б. Байдинов, С.А. Сапалова // Вестник национального аграрного университета им. К.И. Скрябина. – 2015. – № 2 (34). – С. 27–30. <https://elibrary.ru/item.asp?id=25106334>
13. **Байдинов, Т.Б.** ИК-спектроскопические исследования соединений формамида с солями двухвалентных металлов divalents [Текст] / Т.Б. Байдинов, С.А. Сапалова, Б.С. Намазова // Проблемы современной науки и образования. – 2016. – № 19 (61). – С. 17–20. <https://ipi1.ru/images/PDF/2016/61/PMSE-19-61.pdf>
14. **Байдинов, Т.Б.** Взаимодействие сульфата цинка с формамидом, N,N-диметилформамидом и N,N-диметилацетамидом в водной среде при 25°C [Текст] / Т.Б. Байдинов, С.А. Сапалова, Б.С. Намазова, Б.И. Иманакунов // Актуальные научные исследования в современном мире: сб. науч. тр. – Переяслав-Хмельницкий, 2018. – Выпуск 3 (35). – Ч. 7. – С. 50–60. [https://dspace.udpu.edu.ua/bitstream/6789/9174/1/%D0%90%D0%BA%D1%82%D1%83%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D1%96_%D0%A5%D0%A5%D0%A5V_part_7%20\(web\).pdf](https://dspace.udpu.edu.ua/bitstream/6789/9174/1/%D0%90%D0%BA%D1%82%D1%83%D0%B0%D0%BB%D1%8C%D0%BD%D1%96_%D0%A5%D0%A5%D0%A5V_part_7%20(web).pdf)
15. **Байдинов, Т.Б.** ИК-спектроскопическое и термографическое исследование комплексов хлоридов магния, кальция с N,N-диметилформамидом и N,N-диметилацетамидом [Текст] / Т.Б. Байдинов, С.А. Сапалова, Б.С. Намазова, Б.И. Иманакунов // East European Science Journal. – 2018. – Vol. 1. – 6(34). – P.56–61. <https://cyberleninka.ru/article/n/ik-spektroskopicheskoe-i-termograficheskoe-issledovanie-kompleksov-hloridov-magniya-kaltsiya-s-n-n-dimetilformamidom-i-n-n/viewer>
16. **Сапалова, С. А.** Исследование взаимодействия нитрата кадмия с N,N-диметилформамидом и N,N-диметилацетамидом в водной среде при 25°C [Текст] / С.А. Сапалова, Ж. Чыныбек кызы, Т.Б. Байдинов // Известия ВУЗов Кыргызстана. – 2021. – № 1. – С.19-21. <http://www.science-journal.kg/ru/journal/2/2021/1/>

Сапалова Салтанат Асановнанын “Кислоталардын амиддерин, эки валенттүү металлдардын туздарын камтыган үчтүк суу системаларындагы фазалык тең салмактуулуктар” темасындагы 02.00.01- органикалык эмес химия адистиги боюнча химия илимдеринин кандидаты окумуштуулук даражасын изденип алуу үчүн жазылган диссертациясынын

КОРУТУНДУСУ

Негизги сөздөр: формамид, диметилформамид, диметилацетамид, комплекс пайда кылуучу, синтез, полуэмпирикалык, кванттык-химиялык, оптимизацияланган, биологиялык активдүүлүк.

Изилдөө объектиси: формамид, диметилформамид, диметилацетамид жана алардын кальций, магний хлориддери, жез, цинк сульфаттары жана кадмий нитраты менен болгон координациялык бирикмелери.

Изилдөөнүн максаты: Эки валенттүү металлдардын амид кислоталары менен жаңы комплекстүү бирикмелерин алуу, алардын курамын тактоо, касиеттерин жана түзүлүшүн аныктоо.

Изилдөө методдору: химиялык, пикнометриялык, ИК-спектроскопиялык, термикалык, кванттык-химиялык жана рентгенографиялык анализ.

Илимий изилдөө жабдуулары: “Nikolet-IR-1200” ИК-спектрофотометри, “Paulik” системасынын дериватографы, ДРОН-3.0 (СоК α -нурлануу) дифрактометри.

Эки валенттүү металлдардын туздарынын формамид, диметилформамид жана диметилацетамид менен он үч жаңы комплекстик бирикмелеринин пайда болушу белгиленди. Рентгенографиялык анализ синтезделген жаңы координациялык бирикмелердин кристаллдык түзүлүшүн жана индивидуалдуулугун ырастады. ИК-спектрлердин маалыматтарынын негизинде комплекстерде формамид, диметилформамид жана диметилацетамид молекулалары карбонил топторунун кычкылтеги аркылуу металл иондору менен координацияланат деп болжолдонду. Магний, кальций хлориддеринин жана жез, цинк сульфаттарынын комплекстик бирикмелеринин кванттык-химиялык эсептөөлөрү металл-лиганд байланыштын кычкылтек атому аркылуу мүмкүндүгүн ырастайт. Кээ бир жаңы бирикмелердин биологиялык активдүүлүгү аныкталды, патент алынды.

Колдонуу аймагы: айыл чарба.

РЕЗЮМЕ

диссертации Сапаловой Салтанат Асановны на тему: “Фазовые равновесия в тройных водных системах, содержащих амиды кислот, соли двухвалентных металлов”, представленной на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности 02.00.01 — неорганическая химия

Ключевые слова: формамид, диметилформамид, диметилацетамид, комплексообразователь, синтез, полуэмпирический, квантово-химический, оптимизированный, биологически активный.

Объект исследований: формамид, диметилформамид, диметилацетамид и их координационные соединения с хлоридами магния, кальция и сульфатами меди, цинка, нитратом кадмия.

Цель исследования. Получение новых комплексных соединений солей двухвалентных металлов с амидами кислот, установление их составов, изучение свойств и строения.

Методы исследований: химический, пикнометрический, ИК-спектроскопический, термический, квантово-химический и рентгенографический анализ.

Научное оборудование: ИК-спектрофотометр “Nikolet-IR-1200”, дериватограф системы “Paulik”, дифрактометр ДРОН-3.0 (CoK α -излучение).

Установлено образование тринадцати новых комплексных соединений двухвалентных металлов с формамидом, диметилформамидом, диметилацетамидом. Рентгенографический анализ однозначно подтвердил кристалличность и индивидуальность синтезированных новых координационных соединений. По данным ИК-спектров сделано предположение о том, что молекулы формамида, диметилформамида, диметилацетида в комплексах координированы к ионам металлов через кислород карбонильных групп. Квантово-химические расчеты комплексных соединений хлоридов магния и кальция, сульфатов меди и цинка подтверждают возможность связи металл-лиганд через атом кислорода. Установлена биологическая активность некоторых новых соединений, получен патент.

Область применения: сельское хозяйство.

SUMMARY

of Saltanat Asanovna Sapalova's dissertation on the topic: "Phase Equilibria in Ternary Aqueous Systems Containing Amides of Acids, Divalent Metal Salts" for the degree of the candidate of chemical sciences in the specialty 02.00.01 — inorganic chemistry

Key words: formamide, dimethylformamide, dimethylacetamide, complexes, synthesis, semi-empirical, quantum-chemical, optimized, biologically active.

Object of research: coordination compounds of formamide, dimethylformamide, dimethylacetamide with magnesium and calcium chlorides, and copper and zinc sulfates.

The aim of the study. Obtaining new complex compounds of divalent metal salts with acid amides, establishing their compositions, studying their properties and structure.

Methods of investigation: chemical, pycnometric, IR-spectroscopic, thermal, quantum-chemical, and X-ray analysis.

Research equipment: "Nikolet-IR-1200" spectrophotometer, "Paulik" system derivatograph, ДРОН-3.0 diffractometer.

Thirteen new coordination compounds of formamide, dimethylformamide, and dimethylacetamide with magnesium and calcium chlorides, copper and zinc sulfates have been synthesized. The complexes were obtained in crystalline form. The chemical bond in these coordination compounds is formed between the ion of the corresponding metal and the carbonyl oxygen of the formamide, dimethylformamide, or dimethylacetamide molecule. New properties of the synthesized compounds have been identified, confirming their individuality. The novelty of the complexes has also been confirmed by thermal and X-ray analysis. The biological activity of some of the new compounds has been demonstrated. Quantum-chemical calculations revealed that the central atom binds through the oxygen in the ligand. The biological activity of some new compounds was determined, and a patent was obtained.

Field of application: agriculture.

