

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
ხელნაწერის უფლებით

მელანო აბესაძე

შერეულიგანდიანი ბიოლითონების შემცველი
კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და კვლევა

სადოქტორო პროგრამა - ქიმია
შიფრი - 0503

დოქტორის აკადემიური ხარისხის
მოსაპოვებლად წარდგენილი დისერტაციის

ავტორეფერატი

თბილისი
2020 წ

სამუშაო შესრულებულია საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის
ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის
ქიმიის დეპარტამენტი

ხელმძღვანელი: პროფესორი მათა ცინცაძე

რეცენზენტები: _____

დაცვა შედგება 2020 წლის”-----”-----, -----საათზე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და
მეტალურგიის ფაკულტეტის სადისერტაციო კოლეგიის სხდომაზე,
კორპუსი-----, აუდიტორია -----

მისამართი: 0175, თბილისი, კოსტავას 69.

დისერტაციის გაცნობა შეიძლება საქართველოს ტექნიკური უნივერსი-
ტეტის ბიბლიოთეკაში, ხოლო ავტორეფერატის - ქიმიური ტექნოლოგიისა
და მეტალურგიის ფაკულტეტის ვებ-გვერდზე

სადისერტაციო საბჭოს მდივანი -----

შესავალი

თემის აქტუალურობა. უკანასკნელ პერიოდში განსაკუთრებულად გაიზარდა ინტერესი კოორდინაციული ნაერთების მიმართ მათი სპეციფიკური თვისებების გამო. კოორდინაციული ნაერთები ფართოდ გამოიყენება ქიმიურ ანალიზში, მათ შორის ქრომატოგრაფიულ და ელექტროქიმიურ ანალიზში, ქიმიური ელემენტების დაცილებისათვის და ზესუფთა ლითონთა მისაღებად. ასევე თანამედროვე ტექნოლოგიებში, სენსორების შემუშავების და დანაფარების დატანის ტექნოლოგიაში.

მნიშვნელოვანი გამოყენების სფეროს წარმოადგენს ბიოქიმიური და ახალი სამედიცინო პრეპარატების წარმოება.

მაგალითად, როგორც ცნობილია, სხვადასხვა ინფექციური დაავადებების სამკურნალოდ გამოყენებული უკვე არსებული პრეპარატების მიმართ მიკროორგანიზმები ამჟღავნებენ რეზისტენტულობას ან ნახევრადრეზისტენტულობას. ამიტომ, უკანასკნელ წლებში გაიზარდა ინტერესი ახალი სამკურნალო საშუალებების მიღების ან უკვე არსებული სამკურნალო პრეპარატების ახალი ქიმიური მოდიფიკაციების რაციონალური გამოყენების თვალსაზრისით.

ჩვენი კვლევის მიზანს წარმოადგენს N,N-დიმეთილფორმამიდთან ე.წ. „სიცოცხლის ლითონების“ (Na, K, Mg, Ca, V, Mn, Fe, Co, Cu, Zn, Mo) კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და სინთეზირებული ნაერთების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების შესწავლა.

ფიზიოლოგიური გამოკვლევებით დადგენილია, რომ მიკროელემენტები წარმოადგენენ მრავალი ფერმენტისა და ვიტამინის განუყოფელ ნაწილს. ისინი მნიშვნელოვან როლს ასრულებენ ბიოლოგიურ პროცესებში. თუმცა ბიოლოგიურ ორგანიზმს მათი გამომუშავება არ შეუძლია. ეს უნდა მიიღოს საკვების ან საკვები დანამატების სახით.

სწორედ ამიტომ განსაკუთრებით საინტერესოა აღნიშნული ბიოლითონების კოორდინაციული ნაერთები და მათი გავლენა ბიოლოგიურ ორგანიზმზე.

ნაშრომის მიზანი. ჩვენი კვლევის მიზანს წარმოადგენდა N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი ბიოლითონის კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და სინთეზირებული ნაერთების ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების შესწავლა.

N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით ჩატარებულ იქნა აღნიშნული მოლეკულის კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1მეთოდით სხვადასხვა გამხსნელში.

შედეგების დაზუსტების მიზნით ჩატარებულ იქნა N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და ბრომიდის კომპლექსნაერთების მოლეკულების კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდით სხვადასხვა გამხსნელში, კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით.

კვანტურ-ქიმურმა გათვლების საფუძველზე გამოვლენილია N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში დონორი ატომები, დადგენილია რომ მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან საკოორდინაციო ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.

ჩვენს მიერ სინთეზირებულია კობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II), სპილენძის(II), კადმიუმის და თუთიის შერეულიგანდიანი ქლორიდული და სულფატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან, ასევე სინთეზირებულია კობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II), სპილენძის(II) და თუთიის ბილითონური შერეულიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან.

თეორიული და პრაქტიკული ღირებულება, მნიშვნელობა: სადისერტაციო ნაშრომს აქვს თეორიული და პრაქტიკული მნიშვნელობა, ვინაიდან

უკანასკნელ წლებში გაიზარდა ინტერესი აპროტონული გამხსნელების მიმართ.

აპროტონული გამხსნელები - დიმეთილსულფოქსიდი, N,N-დიმეთილფორმამიდი, დიეთილაცეტამიდი და სხვ. - ფართოდ გამოიყენებიან ქიმიის სხვადასხვა დარგში, მათ შორის ფარმაცოლოგიაში. ამიტომ, განსაკუთრებულად საინტერესოა კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და კვლევა ე.წ. „სიცოცხლის ლითონებთან“.

ლიტერატურის მონაცემების ანალიზი აჩვენებს, რომ N,N -დიმეთილფორმამიდთან სინთეზირებულია მთელი რიგი მონიბირთვული კოორდინაციული ნაერთები 3d-ლითონებთან. აგრეთვე ორმაგი და ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები. ყველა ეს ნაერთი მიღებულია მყარ მდგომარეობაში, შესწავლილია მათი ფიზიკურ - ქიმიური თვისება და ბიოლოგიური აქტივობა.

ლიტერატურაში არაა ცნობები ისეთი შერეულლიგანდიანი კომპლექსნაერთების სინთეზის შესახებ, სადაც ლიგანდებად შერჩეულია N,N-დიმეთილფორმამიდი და თიოციანატ-იონი. სინთეზირებულია აღნიშნული ლიგანდების გამოყენებით ზოგიერთი გარდამავალი ლითონის შერეულლიგანდიანი ორმაგი და ბიმეტალური კოორდინაციული ნაერთები და შესწავლილია მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები კვლევის თანამედროვე მეთოდებით.

ასევე N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის და N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და ბრომიდის კომპლექსნაერთების კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით შესწავლილია სხვადასხვა გამხსნელში კვანტურ-ქიმიურინახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-მეთოდით. გამოთვლილია აღნიშნულ მოლეკულის ძირითადი ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები.

კვლევის ობიექტები და მეთოდები: მიღებული და გამოყენებული რეაგენტების იდენტიფიკაცია ჩატარებულ იქნა იწ სპექტრებისა და მათი ელემენტური ანალიზის შედეგების მიხედვით,

მიღებული ნაერთების ელემენტური შედგენილობის დასადგენად ლითონების შემცველობის განსაზღვრა ხდებოდა ტრილონომეტრული მეთოდით.

აზოტის, ნახშირბადის და წყალბადის შემცველობას ვსაზღვრავდით ელექტრო მასკანირებელ მიკროსკოპზე “Tescan Vega 3” მოდელზე.

ღვთობის ტემპერატურა ისაზღვრებოდა დახურულ კაპილარებში.

თერმოგრაფიკული კვლევა ხდებოდა თერმულ ანალიზატორზე „NETSCH STA 2500 REQULUS“ მარკის, რომელიც საშუალებას იძლევა ერთი და იმავე ნიმუშისთვის ჩაიწეროს ოთხი მრუდი: ტემპერატურის ცვლილების (T), მასის ცვლილების (TG), აგრეთვე შესაბამისი დიფერენციალური DTA და DTC მრუდები.

სინთეზირებული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრები ჩაწერილია FTIR ფურიე გარდაქმნის იწ სპექტრომეტრით „TENSOR II (დიაპაზონი 400 – 4000 სმ⁻¹, გაზომვის სიზუსტე 0,5 სმ⁻¹). ჩვეულებრივ გამოიყენებოდა ნიმუშის ვაზელინის ზეთში გასრესვის მეთოდიკა. ვაზელინის ზეთის შთანთქმა შეძლებისდაგვარად კომპენსირდებოდა. სპექტრების ჩაწერა ხდებოდა 400 – 4000 სმ⁻¹ უბანში.

თეორიული კვანტურ-ქიმიური გამოთვლებისათვის გამოყენებულ იქნა პროგრამა, რომელიც ახორციელებს ახალი თაობის AM1, MP3 და MNDO-d ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური გამოთვლელ სქემას.

სადოქტორო ნაშრომი შესრულებულია საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის ქიმიის დეპარტამენტის (#405) ზოგადი, არაორგანული და ანალიზური ქიმიის მიმართულებაზე, აგრეთვე თბილისის ივ.ჯავახიშვილის სახელმწიფო უნივერსიტეტის რ. აგლაძის არაორგანული ქიმიის და ელექტროქიმიის ინსტიტუტში, თბილისის ივ.ჯავახიშვილის სახელმწიფო

უნივერსიტეტის პ. მელიქიშვილის სახელობის ფიზიკური და ორგანული ქიმიის ინსტიტუტში, თბილისის ივ.ჯავახიშვილის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ე. ანდრონიკაშვილის სახელობის ფიზიკის ინსტიტუტში.

მეცნიერული სიახლე: N,N-დიმეთილფორამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და ბრომიდის კომპლექსნაერთების კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით ჩატარებულია აღნიშნული მოლეკულების კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით. შესწავლილია N,N-დიმეთილფორამიდთან თუთიის ბრომიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარი. კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგების მიხედვით ქიმიური ბმის წარმოქმნაში ატომკომპლექსწარმოქმნელთან (თუთიის ატომთან) მონაწილეობას ღებულობს N,N-დიმეთილფორამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.

სინთეზირებულია ახალი 20 კოორდინაციული ნაერთი: კობალტის(II), ნიკელის(II), სპილენძის(II), მანგანუმის(II), კადმიუმის და თუთიის ქლორიდული და სულფატური კოორდინაციული ნაერთი N,N-დიმეთილფორამიდთან, კობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II) და სპილენძის ორმაგი თიოციანატური კომპლექსნაერთები N,N-დიმეთილფორამიდთან დაკობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II), სპილენძის(II), რკინის(II), ტყვიის(II), კადმიუმის და თუთიის ბიმეტალური შერეული ლიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორამიდთან.

N,N-დიმეთილფორამიდის კომპლექსწარმოქმნელთან კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების იწ სპექტრები. სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგენილია, სინთეზირებულ კომპლექსებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულა და თიოციანატ-იონის კოორდინირების წესი. სინთეზირებულია ნაერთების იწ სპექტრების შედეგები სრულ თანხვედრაშია ჩატარებულ კვანტურ-ქიმიურ გათვლებთან.

ნაშრომის აპრობირება. დისერტაციის ძირითადი შინაარსი წარდგენილი იქნა შემდეგი საკონფერენციო თეზისების სახით:

1. Абесадзе М., Цинцадзе М., Гегешидзе Н., Цинцадзе Г. Синтез и исследование ИК спектров биметаллических разнолигандных переходных металлов с N,N-диметилформамидом. ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის პროფესორ ვიქტორ დიმიტრის-ძე ერისთავის დაბადებიდან 80 წლისადმი მიძღვნილი საერთაშორისო სამეცნიერო-ტექნიკური კონფერენციის „გარემოს დაცვა და მდგრადი განვითარება“ 11-12 ნოემბერი, 2019. თბილისი. გვ. 23
2. М.Абесадзе, Н.Гегешидзе, М.Цинцадзе. Синтез и ИК спектроскопическое исследование комплексных соединений N,N-диметилформамида (DMF) с хлоридами некоторых биологически активных металлов. ბაქოს სახელმწიფო უნივერსიტეტში ნაციონალური ლიდერის გ.ალიენის დაბადებიდან 96 წლისადმი მიძღვნილი XIII საერთაშორისო სამეცნიერო კონფერენციაზე „ქიმიის აქტუალური პრობლემები“ 15-16 მაისი, ბაქო, 2019. გვ.17-19.
3. მ.აბესაძე, მ.ცინცაძე, ნ.გეგეშიძე, ნ.კილასონია. N,N- დიმეთილფორმამიდთან შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი ბიოლოგიურად აქტიურ ლითონებთან. ი. ჯავახიშვილის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის კონფერენციაზე „ნაერთები და მასალები სპეციფიკური თვისებებით“, თბილისი, 10-11 ივლისი, 2020.

სამუშაოს მოცულობა. დისერტაციის სრული მოცულობა შეადგენს 125 ნაბეჭდ გვერდს. ნაშრომი შეიცავს რეზიუმეს (ორ ენაზე), შინაარსს, ლიტერატურის მიმოხილვის 5 თავს, შედეგები და მათი განსჯის 8 თავს, ექსპერიმენტალური ნაწილის 8 თავს, ლიტერატურულ ნუსხას, დანართს, 33 ცხრილს და 24 სურათს.

სამუშაოს ძირითადი შინაარსი

ლიტერატურის მიმოხილვაში მოყვანილია საკვლევი თემის გარშემო არსებული ინფორმაციის კრიტიკული განხილვა, აღწერილია N,N - დიმეთილფორმამიდთან სინთეზირებულია მთელი რიგი კოორდინაციული ნაერთები 3d-ლითონებთან. ასევე მასალა XCN-ჯგუფების (X = S, Se) კრისტალური სტრუქტურის და იწ სპექტრული მახასიათებლების შესახებ და შერეულიგანდიანი ჰომო- და ჰეტეროლითონური კოორდინაციული ნაერთების შესახებ.

ექსპერიმენტული ნაწილი

მეორე თავი მოიცავს ექსპერიმენტული ნაწილს სადაც წარმოდგენილია ახალი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი იდენტიფიკაცია.

გამოსავალ ნივთიერებებად გამოყენებულ იქნა კობალტის(II), ნიკელის(II), სპილენძის(II), მანგანუმის(II) კადმიუმის(II), რკინის(II), ტყვიის(II) და თუთიის ქლორიდები, ბრომიდები და სულფატები, კალიუმის როდანიდი, აგრეთვე N,N-დიმეთილფორმამიდი. რეაქტივები შეესაბამებოდნენ მარკას“ყ.დ.ა. ნივთიერებებს ვასუფთავებდით გადაკრისტალებით.

მიღებული ნაერთების ელემენტური შედგენილობის დასადგენად ლითონების შემცველობის განსაზღვრა ხდებოდა ტრილონომეტრული მეთოდით.

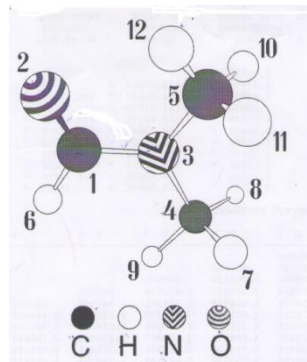
აზოტის, ნახშირბადის და წყალბადის შემცველობას ვსაზღვრავდით ელექტრო მასკანირებელ მიკროსკოპზე “Tescan Vega 3” მოდელზე.

სინთეზირებულია ნაერთების სინთეზირებული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრები ჩაწერილია FTIR ფურიე გარდაქმნის იწ სპექტრომეტრით „TENSOR II (დიაპაზონი 400 – 4000 სმ^{-1} , გაზომვის სიზუსტე 0,5 სმ^{-1} .

N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და ბრომიდის კომპლექსური ნაერთების შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით

N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსწარმოქმნაზე უნარზე გამხსნელისგავლენის შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდებით

N,N-დიმეთილფორმამიდი, შესწავლილია კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით როგორც აირად მდგომარეობაში, ასევე სხვადასხვა გამხსნელებში, რომლებიც თავის მხრივ, სხვადასხვა დიელექტრიკული შეღწევადობით ხასიათდებიან. გათვლების შედეგების ანალიზი, საშუალებას იძლევა წინასწარ შეირჩეს გამხსნელი და სინთეზი ჩატარდეს ოპტიმალური პირობებში.



ნახ 1. N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულა

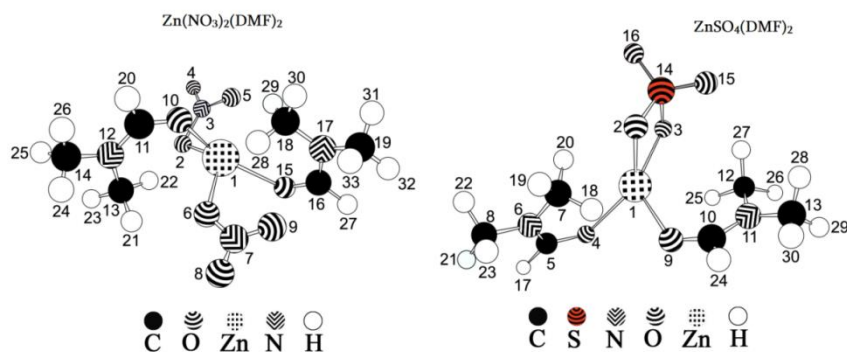
ამრიგად, კვანტურ-ქიმიური გათვლების თანახმად N,N-დიმეთილფორმამიდის მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან საკოორდინაციო ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის O(2) ატომი.

**N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის კომპლექსური
ნაერთების კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამსხნელის
გავლენის
შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და
MNDO-d მეთოდებით**

N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და ბრომიდის კომპლექსნაერთების კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამსხნელის გავლენის შესწავლის მიზნით ჩატარებულ იქნა აღნიშნული მოლეკულების კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდით.

**N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის და
სულფატის
კომპლექსური ნაერთების შესწავლა კვანტურ-ქიმიური
ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით**

მიზანმიმართული სინთეზის ჩასატარებლად და წინასწან განსაზღვრული თვისებების მქონე ნაერთების მიღების მიზნით, ჩატარებულია გათვლები კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით და შესწავლილია N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის სულფატური - $ZnSO_4(DMF)_2$ და ნიტრატული - $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ კომპლექსნაერთების ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები, გამოვლენილია გამსხნელის გავლენა N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმოქმნის უნარზე, მაგ, დიპოლურ მომენტზე, ატომურ ორბიტალებზე ელექტრონების განაწილებას და სხვ. გათვლების შედეგად გამოვლენილია დონორი ატომები და შერჩეულია ოპტიმალური პირობები სინთეზის ჩასატარებლად. ასევე დადგენილია მათი ელექტრონული სტრუქტურა და ლიგანდთან კოორდინირების წესი.



ნახ. 2. N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის სულფატის და ნიტრატის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულები

ატომური ორბიტალების დასახლების შესწავლამ კომპლექსური ნაერთის $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ შემთხვევაში N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში ჟანგბადის O(10) და O(15) ატომებზე და კომპლექსური ნაერთის $ZnSO_4(DMF)_2$ შემთხვევაში ჟანგბადის O(4) და O(9) ატომებზე აჩვენა, რომ p-ორბიტალების დასახლება მცირდება მწკრივში $p_x < p_y < p_z$.

ამრიგად, კვანტურ-ქიმიური გათვლების ანალიზის საფუძველზე შეგვიძლია ვიმსჯელოთ N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის ნიტრატული კომპლექსის შემთხვევაში ჟანგბადის O(10) ატომების და სულფატურო კომპლექსის შემთხვევაში O(4) მონაწილეობაზე ქიმიური ბმის წარმოქმნაში ატომ-კომპლექსწარმოქმნელთან.

სხვა სურათს გვიჩვენებს $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულაში ჟანგბადის O(15) ატომის და $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულაში ჟანგბადის O(9) ატომის ატომური ორბიტალების დასახლების შესწავლა (ცხრილი 3.4). $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულაში ჟანგბადის O(15) ატომს აქვს σ -ტიპის გაუწყვილებელი ელექტრონული წყვილი. უფრო ზუსტად, sp^2 ჰიბრიდული ატომური ორბიტალი s-მდგენელით: ატომური ორბიტალების დასახლების მნიშვნელობით 1.869. ეს კი განაპირობებს ჟანგბადის O(15) ატომის ფუძე თვისებებს, ანუ მის უნარს წარმოქმნას მეტალთან დონორულ-აქცეპტორული ბმა.

რაც შეეხება ჟანგბადის O(9) ატომს $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულაში, მოცემული ატომის ორბიტალების დასახლება ანალოგიურია ჟანგბადის O(10) ატომების $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულაში და ჟანგბადის O(4) ატომ-

მების $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულაში, შესაბამისად, p-ორბიტალების დასახლება ამ შემთხვევაში მცირდება მწკრივში $p_x < p_y < p_z$.

კვანტურ-ქიმიური გათვლების თანახმად, N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულის შემთხვევაში აზოტის N(12) და N(17) ატომები და $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულის შემთხვევაში აზოტის N(6) და N(11) ატომები ხასიათდებიან მაღალი ელექტრონული სიკვრივეების მნიშვნელობებით, ანუ რაც იმას ნიშნავს, რომ ამჟღავნებენ მკეთრად გამოხატულ ელექტროდონორულ თვისებებს.

კვანტურ-ქიმიური გათვლების მონაცემების მიხედვით უნდა ავლნიშნოთ, რომ აზოტის N(12) ატომის ელექტრონული წყვილი $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულაში შესაბამისად განთავსებულია არა $2s$, არამედ $2p_x$ ორბიტალზე, რაც იმაზე მიუთითებს, რომ ამ ატომის ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან ქიმიური ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას შეუძლებელს ხდის.

აზოტის N(17) ატომის ელექტრონული წყვილი, აზოტის N(12) ატომისგან განსხვავებით, განთავსებულია $2p_y$ ორბიტალზე, რაც გამორიცხავს ამ ატომის მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან σ - ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას.

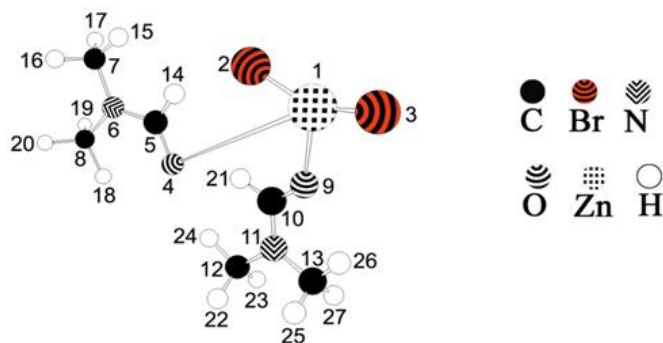
რაც შეეხება $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულის აზოტის N(6) და N(11) ატომებს, მათ ასევე ახასიათებთ ელექტრონული სიმკვრივეების და უარყოფითი მუხტების მაღალი მნიშვნელობები. მაგრამ ატომური ორბიტალების დასახლების შესწავლამ აჩვენა, რომ $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულაში აზოტის N(6) ატომის ელექტრონული წყვილი, $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულის აზოტის N(11) ატომის ელექტრონული წყვილის მსგავსად განთავსებულია $2p_x$ ორბიტალებზე. ეს კი იმაზე მიუთითებს, რომ აზოტის ამ ატომის ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან σ - ტიპის ქიმიური ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობა შეუძლებელია.

ამრიგად, კვანტურ-ქიმიური ანალიზის შედეგების შესწავლა გვიჩვენა, რომ ქიმიური ბმის წარმოქმნაში მეტალ-კომპლექსწარმომქმ-

ნელთან მონაწილეობას იღებენ $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$ მოლეკულის შემთხვევაში ჟანგბადის ატომები O(11) და O(15) და $ZnSO_4(DMF)_2$ მოლეკულის შემთხვევაში ჟანგბადის O(11) და O(15) ატომები. მიუხედავად აზოტის ატომებზე ელექტრონული სიმკვრივის მაღალი მნიშვნელობისა, მათ არ შეუძლიათ გამოამჟღავნოს ელექტროდონორული თვისებები.

N,N-დიმეთილფორმამიდთან (DMF) თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთის შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით

კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით შესწავლილია თუთიის ბრომიდის N,N-დიმეთილფორმამიდთან (DMF) კოორდინაციული ნაერთი. გამოთვლილია მისი ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები.



ნახ. 3. N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულა (მეთოდი AM1)

$ZnBr_2(DMF)_2$ კომპლექსური ნაერთის შემთხვევაში AM1 მეთოდის გამოყენებისას შეინიშნებოდა გარკვეული ცდომილებები ატომთაშორისი ბმების სიგრძეების და გართულდა ორბიტალებზე ელექტრონების განაწილების მნიშვნელობებში, ამიტომ აღნიშნული ნაერთის გათვლები განვახორციელეთ MNDO მეთოდიდან. მიუხედავად ამისა, ამ უკანასკნელი მეთოდიდან გართულდა ორბიტალებზე ელექტრონების განაწილების გათვლა. დაზუსტების მიზნით გამოვიყენეთ PM3 მეთოდიც. გადამოწმების

მიზნით დამატებით გამოყენეთ ნახევრადემპირიული MP3 და MNDO-d მეთოდები.

კვანტურ-ქიმიური გათვლები გვიჩვენებს, რომ N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულა შეიცავს ორ დონორ ატომს: ჟანგბადის და აზოტის ატომებს, რომელთაც უნარი აქვთ ლითონ - კომპლექსწარმომქმნელთან წარმოქმნან ქიმიური ბმა, სწორედ ეს ორი ატომი ხასიათდება $ZnBr_2(DMF)_2$ მოლეკულაშიც უარყოფითი მუხტების და ელექტრონული სიმკვრივეების მაღალი მნიშვნელობებით. $ZnBr_2(DMF)_2$ მოლეკულის ელექტრონული სიმკვრივეების და ატომებზე უარყოფითი მუხტების ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდით.

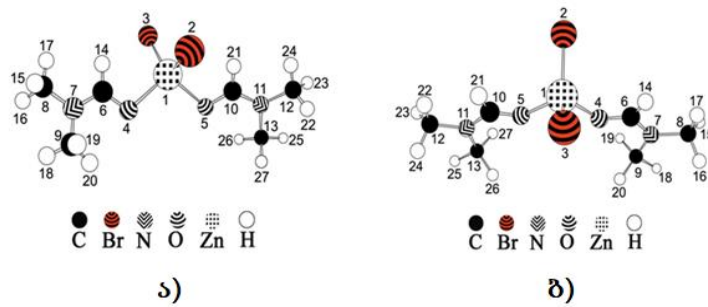
სხვადასხვა ემპირიული მეთოდებით ჩატარებული გათვლების შედეგების შედარება გვიჩვენებს, რომ სიდიდეები პრაქტიკულად არ განსხვავდებიან ერთმანეთისგან.

ატომურ ორბიტალებზე ატომების განსახლების შესწავლამ გვიჩვენა, რომ $ZnBr_2(DMF)_2$ მოლეკულაში უარყოფითი მუხტების და ელექტრონული სიმკვრივეების მაღალი მნიშვნელობებით ხასიათდებიან ჟანგბადის O(4) და O(9) ატომები, ატომების ელექტრონული წყვილები განთავსებულია არაჰიბრიდიზირებულ p-ორბიტალებზე, ხოლო მეორე თავისუფალი ელექტრონების წყვილი განთავსებულია ჰიბრიდულ sp-ორბიტალებზე და მკვეთრად გამოხატული s ბუნების გამო მნიშვნელოვნადაა დაკავებული აღნიშნული ორბიტალით.

აქედან გამომდინარე შეგვიძლია ვიმსჯელოთ ქიმიური ბმის წარმოქმნაზე თუთიის ატომის და N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის ჟანგბადის O(4) და O(9) ატომების საშუალებით.

როგორც უკვე ავლნიშნეთ, ჩვენ პარალელურად ვატარებდით კვანტურ-ქიმიურ გათვლებს ნახევრად ემპირიული MP3 და MNDO-d მეთოდებით, მაგრამ MNDO-d მეთოდმა მოგვცა ცდომილება, მივიღეთ დამახინჯებული სურათი. რაც შეეხება MP3 მეთოდს, ატომური ორბიტალების

დასახლებების მონაცემები ემთხვევა AM1 მეთოდით მიღებულ ანალოგიურ მონაცემებს, ანუ პრაქტიკულად იდენტურია.



ნახ. 4. N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულა (ა) - მეთოდი MP3 და ბ) - MNDO)

აზოტის ატომსაც აგრეთვე ახასიათებს მაღალი ელექტრონული სიმკვრივე და უარყოფითი მუხტის მნიშვნელობა. მაგრამ, ატომური ორბიტალების დასახლების შესწავლა გვიჩვენებს, რომ აზოტის N(6) და N(11) ატომის ელექტრონული წყვილი განთავსებულია $2p_x$ და არა $2s$ ორბიტალზე.

ამიტომ, მიუხედავად მაღალი ელექტრონული სიმკვრივის მნიშვნელობისა, აღნიშნული ატომი ვერ იღებს მონაწილეობას ქიმიური ბმის წარმოქმნაში.

MP3 და MNDO-d მეთოდებით მიღებული კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგების შესწავლისას, ვაკვირდებით იგივე სურათს, რაც ჟანგბადის ატომის შედეგების შემთხვევაში AM1 მეთოდის გამოყენებით.

როგორც კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგების ანალიზი გვიჩვენებს, AM1 და MP3 მეთოდებით მიღებული შედეგები უმნიშვნელოდ განსხვავდებიან ერთმანეთისგან, ხოლო MNDO-d მეთოდი აქაც იძლევა დამახინჯებულ სურათს, საკმაოდ დიდ ცდომილებას.

ამრიგად, კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგები ჩატარებული ნახევრად ემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდების მიხედვით გვიჩვენებს, რომ ქიმიური ბმის წარმოქმნაში ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან (თუთიის ატომთან) მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.

**N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთ ბიოლითონთან
კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-
ქიმიური თვისებები**

**N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II),
მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის კოორდინაციული
ნაერთების სინთეზი
კოორდინაციული ნაერთების მიღების საერთო მეთოდიკა**

სინთეზირებულია კობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II), სპილენძის(II), კადმიუმის და თუთიის შერეულიგანდიანი ქლორიდული და სულფატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან.

ნაერთების სინთეზისთვის შესაბამისი მარილების 0.01 მოლს ვხსნიდით ~5 მლ ეთილის სპირტში. მიღებულ სპირტხსნარს ვადუღებდით რამდენიმე წუთი და ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდის ხსნარს მოლური თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი) კობალტის(II), ნიკელის(II) და მანგანუმის(II) შემთხვევაში, ხოლო კადმიუმის(II) და სპილენძის(II) შემთხვევაში 1:4. მიღებულ ხსნარს კვლავ ვადუღებდით და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე.

ყველა მიღებულ ნაერთს ვფილტრავდით, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლით და ვაშრობდით CaCl₂-ის თანაობისას.

ცხრილი 1. N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი				ფერი	T _ღ , C°
		აცეტონი	ეთანოლი	ეთერი	წყალი		
1	CoCl ₂ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	120-123
2	NiCl ₂ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	120-122
3	MnCl ₂ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	117-119
4	CuCl ₂ ·4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	118-121
5	CdCl ₂ ·4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	თეთრი	118-120
6	CoSO ₄ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	119-120
7	NiSO ₄ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	120-122
8	ZnSO ₄ ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	თეთრი	118-120
4	CuSO ₄ ·4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ცისფერი	118-120

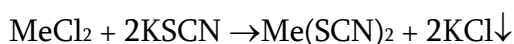
ცხრილი 2. N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

	ნაერთი	ნაპოვნია, % / გამოთვლილი, %						Mr
		Me	C	N	H	O	Cl	
1	CoCl ₂ ·6DMF	10.36 (10.21)	38.02 (37.89)	14.79 (14.50)	7.46 (7.28)	16.89 (17.11)	12.49 (12.02)	568.47
2	NiCl ₂ ·6DMF	10.33 (10.76)	38.04 (38.28)	14.79 (14.42)	7.47 (7.21)	16.90 (16.25)	12.49 (13.00)	568.24
3	MnCl ₂ ·6DMF	9.73 (9.12)	38.39 (38.67)	14.89 (15.02)	7.52 (7.14)	17.01 (17.46)	12.57 (12.51)	564.47
4	CuCl ₂ ·4DMF	15.28 (15.37)	33.60 (33.71)	13.06 (13.26)	6.59 (6.87)	14.93 (14.73)	16.55 (16.43)	428.9
5	CdCl ₂ ·4DMF	23.63 (23.69)	30.29 (30.56)	11.78 (11.69)	5.94 (6.01)	13.46 (13.54)	14.92 (14.79)	465.78
6	CoSO ₄ ·6DMF	9.93 (10.00)	36.42 (36.64)	14.16 (14.65)	7.15 (7.47)	26.97 (27.02)	5.39 (5.50)	593.55
7	NiSO ₄ ·6DMF	9.89 (10.02)	36.44 (36.67)	14.17 (14.31)	7.15 (7.24)	26.90 (26.89)	3.50 (3.52)	593.32
8	ZnSO ₄ ·6DMF	10.89 (10.7)	36.01 (36.31)	14.01 (14.21)	7.07 (7.17)	26.69 (26.57)	5.33 (5.39)	600
9	CuSO ₄ ·4DMF	14.44 (14.22)	31.75 (31.81)	12.34 (12.40)	6.23 (6.29)	28.21 (28.28)	7.06 (7.10)	453.98

N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d გარდამავალი ლითონები ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები

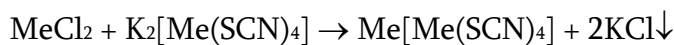
კოორდინაციული ნაერთების მიღების საერთო მეთოდიკა: სინთეზირებულია კობალტის(II), ნიკელის(II), მანგანუმის(II), სპილენძის(II) და თუთიის ბილითონური შერეულლიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან.

სინთეზისთვის 0.01 მოლ ლითონის (II) ქლორიდს გაცხელებით წყლის აბაზანაზე ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში. ვუმატებდით კალიუმის თიოციანატის ეთანოლხსნარს ჭარბი რაოდენობით. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით. მიიღებოდა მწვანე ფერის ხსნარი (ხსნარი 1).



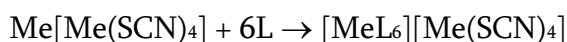
სადაც, **Me** - Co (II), Ni (II), Mn (II), Cu (II) და Zn

0.01 მოლ იგივე ლითონის (II) ქლორიდს გაცხელებით ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში. მარილის სპირტხსნარს წვეთ-წვეთობით ვუმატებთ ცხელ ფილტრატს (ხსნარ1-ს). გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით:



სადაც, **Me** - Co (II), Ni (II), Mn (II), Cu (II) და Zn

ცხელ ფილტრატს წვეთ-წვეთობით მუდმივი მორევით ვუმატებდით 6 მლ N,N-დიმეთილფორმამიდს(DMF):



სადაც, L - N,N-დიმეთილფორმამიდი (DMF).

ნარევი გადაგვქონდა წყლის აბაზანაზე. ვადულებდით 10-15 წუთის განმავლობაში მუდმივი მორევით. ნარევის გაცივებისას რამოდენიმე საათის შემდეგ აღინიშნებოდა ნალექის გამოყოფა.

მიიღებოდა წვრილკრისტალური ან ფხვნილისებრი ნივთიერებები, რომლებსაც ვფილტრავდით, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფე-ბით. ვაშრობდით ჰაერზე ფილტრის ქაღალდზე.

მიიღებულ ნივთიერებები ჰაერზე მდგრადია. იხსნებიან ეთანოლ-ში, აცეტონში, არ იხსნება წყალსა და ჰექსანში.

ცხრილი 3. N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), სპილენძის (II), მანგანუმის (II) და თუთიის ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი					ფერი	T _ლ , C°
		აცეტონი	მეთანოლი	დმფ	დმს	წყალი		
1	[Co(DMF) ₆][Co(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ლურჯი	118-120
2	[Ni(DMF) ₆][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	მწვანე	120-123
3	[Cu(DMF) ₅][Cu(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ყვითელი	117-120
4	[Mn(DMF) ₆][Mn(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ღია-ვარდისფერი	118-121

ცხრილი 4. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ნიკელის (II), კობალტის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და თუთიის ორმაგი კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

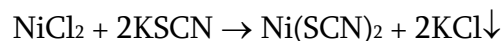
	ნაერთი	ნაპოვნია, % / გამოთვლილი, %						Mr
		Me	C	N	H	O	S	
1	[Ni(DMF) ₆][Ni(SCN) ₄]	14.95 (15.00)	33.69 (33.29)	17.86 (17.36)	5.41 (5.46)	12.33 (12.28)	16.35 (16.40)	784.28

2	[Co(DMF) ₆][Co(SCN) ₄]	14.94 (14.74)	33.50 (33.57)	17.76 (17.56)	5.38 (5.40)	12.16 (12.36)	16.26 (16.29)	788.72
3	[Cu(DMF) ₅][Cu(SCN) ₄]	17.53 (17.51)	31.48 (31.51)	17.40 (17.45)	4.88 (4.82)	11.03 (11.33)	17.69 (17.79)	724.85
4	[Mn(DMF) ₆][Mn(NCS) ₄]	14.07 (14.17)	33.84 (33.64)	17.93 (17.23)	5.43 (5.49)	12.30 (12.39)	16.42 (16.48)	780.72

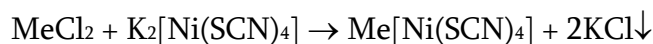
N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d გარდამავალი ლითონის ბიტალური შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები

კოორდინაციული ნაერთების მიღების საერთო მეთოდიკა: სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), რკინის (II), ტყვიის (II), კადმიუმის და თუთიის ბიმეტალური შერეულილითონთა შერეულიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან.

სინთეზისთვის 0.01 მოლ ნიკელის (II) ქლორიდს გაცხელებით ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში წყლის აბაზანაზე. ვუმატებდით კალიუმის თიოციანატის ეთანოლხსნარს ჭარბი რაოდენობით. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით. მიიღებოდა მწვანე ფერის ხსნარი (ხსნარი 1).

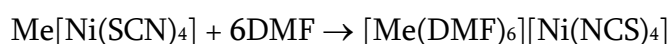


0.01 მოლ ლითონის (II) ქლორიდს (Me=Co(II), Cu(II), Mn(II), Fe(II), Cd(II), Pb(II), Zn) გაცხელებით ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში. მარილის სპირტხსნარს წვეთ-წვეთობით ვუმატებდით ცხელ ფილტრატს. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით:



სადაც Me - Co(II), Cu(II), Mn(II), Fe(II), Cd(II), Pb(II) და Zn.

ცხელ ფილტრატს წვეთ-წვეთობით მუდმივი მორევით ვუმატებდით 6 მლ N,N-დიმეთილფორმამიდს.



სადაც M - Co(II), Cu(II), Mn(II), Fe(II), Cd(II), Pb(II), Zn. ნარევი გადაგვექონდა წყლის აბაზანაზე.

ნარევის ვადულებდით 10-15 წუთის განმავლობაში მუდმივი მორევით. რამოდენიმე საათის შემდეგ აღინიშნებოდა ნალექის გამოყოფა.

მიიღებოდა წვრილკრისტალური ან ფხვნილისებრი ნივთიერებები, რომლებსაც ვფილტრავდით, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით. ვაშრობდით ჰაერზე ფილტრის ქაღალდზე.

მიიღებული ნივთიერებები ჰაერზე მდგრადია. იხსნებიან ეთანოლში, აცეტონში, არ იხსნება წყალსა და ჰექსანში.

ცხრილი. 5. N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), რკინის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), ტყვიის (II), თუთიის და კადმიუმის ბიმეტალური შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი					ფერი	T _{ლ.} , C°
		აცეტონი	მეთანოლი	დმფ	დმს	წყალი		
1	[Co(DMF) ₆][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ლურჯი	118-121
2	[Fe(DMF) ₆][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	მურა-წითელი	122-124
3	[Mn(DMF) ₅][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ღია-ყვითელი	119-122
4	[Cu(DMF) ₆][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	ყვითელი	120-123
5	[Pb(DMF) ₆][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	მწვანე	117-120
6	[Zn(DMF) ₅][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	მწვანე	118-120
7	[Cd(DMF) ₅][Ni(NCS) ₄]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	ხსნ.	თეთრი	117-120

ცხრილი.6. N,N-დიმეთილფორმამიდამ ნიკელის (II), კობალტის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), კადმიუმის (II), რკინის (II), ტყვიის (II) და თუთიის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

	ნაერთი	ნაპოვნი, % / გამოთვლილი, %						Mr	
		Me	Ni	C	N	H	O		S
1	[Cu(DMF) ₅][Ni(SCN) ₄]	9.08 (9.28)	8.13 (8.19)	31.60 (31.68)	17.46 (17.42)	4.91 (4.97)	11.07 (11.10)	17.75 (17.79)	722.01
2	[Zn(DMF) ₅][Ni(SCN) ₄]	9.06 (9.11)	8.13 (8.15)	31.61 (31.68)	17.47 (17.49)	4.90 (4.92)	11.08 (11.12)	17.47 (17.49)	721.85
3	[Cd(DMF) ₅][Ni(SCN) ₄]	14.62 (14.68)	7.66 (7.62)	29.86 (29.88)	16.40 (16.49)	4.60 (4.59)	10.40 (10.48)	16.69 (16.71)	768.88
4	[Fe(DMF) ₆][Ni(SCN) ₄]	7.21 (7.29)	7.48 (7.51)	33.61 (33.68)	17.82 (17.89)	6.29 (6.31)	12.20 (12.27)	16.31 (16.37)	786.22
5	[Pb(DMF) ₆][Zn(SCN) ₄]	22.12 (22.19)	6.27 (6.30)	28.21 (28.26)	14.96 (15.00)	5.28 (5.31)	10.24 (10.25)	13.70 (13.76)	936.71
6	[Co(DMF) ₆][Ni(SCN) ₄]	7.47 (7.50)	7.45 (7.49)	33.51 (33.56)	17.77 (17.71)	6.28 (6.30)	12.17 (12.22)	16.26 (16.28)	788.50
7	[Mn(DMF) ₅][Ni(SCN) ₄]	7.72 (7.77)	11.24 (11.27)	32.08 (32.11)	17.72 (17.76)	4.94 (4.92)	18.02 (18.10)	8.25 (8.29)	711.4

N,N-დიმეთილფორამიდთან 3d ლითონის ქლორიდული და სულფატური კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი

N,N-დიმეთილფორამიდის (DMF) მოლეკულის კომპლექსწარმოქმნელთან (მეტალბთან) კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების იწ-სპექტრები.

ლიგანდის და სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების ჩაწერას ვახდენდით $400 - 4000 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში. ვიყენებდით პოლიკრისტალური ნიმუშების ვაზელინის ზეთში გასრესით სუსპენზიების მომზადების მეთოდს.

გამოკვლეული კომპლექსების სპექტრებში გამოვლენილია ინტენსიური ზოლები $\sim 1640.98 - 1642.28 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში. სინთეზირებული ნაერთების სპექტრებში კარბონილის ჯგუფის რხევითი სიხშირეები არაასოცირებული ლიგანდის შესაბამისი რხევის სიხშირეებთან შემცირებულია $\sim 21.7 - 25.3 \text{ სმ}^{-1}$ -ით.

ყველა სპექტრალური ცვლილება იმაზე მეტყველებს, რომ გამოკვლეულ კომპლექსურ ნაერთებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულის კოორდინირება ხორციელდება კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის საშუალებით, რაც სრულ თანხვედრაშია კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგებთან.

თუ გავითვალისწინებთ DMF მოლეკულების შიდასფერულობას, შეგვიძლია კობალტის(II), ნიკელის(II) და მანგანუმის(II) ქლორიდული კომპლექსნაერთებისთვის ვივარაუდოთ ოქტაედრული აგებულება, ხოლო სპილენძის(II) და კადმიუმის(II) ქლორიდისთვის - ტეტრაედრული აგებულება.

აგრეთვე ოქტაედრული აგებულება შეგვიძლია ვივარაუდოთ კობალტის (II), ნიკელის (II) და თუთიის(II) სულფატური კომპლექსური ნაერთებისთვის, ხოლო სპილენძის (II) სულფატისთვის - ტეტრაედრული აგებულება.

N,N-დიმეთილფორამიდთან ZrO_2 -ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი

N,N-დიმეთილფორამიდის (DMF) მოლეკულის, აგრეთვე SCN^- - ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან (მეტალებთან) კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების იწ სპექტრები.

ლიტერატურული მონაცემებიდან ცნობილია, რომ მესამეული ამიდების იწ სპექტრებში გამოვლენილია $\text{C}=\text{O}$ ჯგუფის რხევითი სიხშირე (ე.წ. „ამიდ - I“) $1670 - 1730 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში. როგორც გვიჩვენებს სპექტრების ანალიზი, სინთეზირებული კომპლექსების იწ სპექტრებში აღინიშნება DMF-ის მოლეკულისთვის დამახასიათებელი ვალენტური ბმის რხევითი სიხშირეები. არაკოორდინირებული DMF-ს მოლეკულის სპექტრში $\nu(\text{CO})$ გამოვლენილია 1666.28 სმ^{-1} , ხოლო კოორდინირებული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში, აღნიშნული რხევის სიხშირეები მდებარეობს $\sim 1616.8 - 1655.9 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, ე.ი. შემცირებულია $\sim 10.38 - 49.48 \text{ სმ}^{-1}$ -ით, ანუ გადანაცვლებულია მაღალსიხშირულ უბანში. ეს კი მიუთითებს, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებში DMF-ს მოლეკულის კოორდინირება კომპლექსწარმომქმნელ ლითონთან ხორციელდება DMF-ს მოლეკულის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.

სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების მიხედვით დადგენილია SCN^- - ჯგუფის რხევის სიხშირეები: $\nu(\text{CN}) \sim 2056.9 - 2151.7 \text{ სმ}^{-1}$, $\nu(\text{CS}) \sim 740.5 - 789.3 \text{ სმ}^{-1}$ და $\delta(\text{NCS}) \sim 469.7 - 477.1 \text{ სმ}^{-1}$ შესაბამისად.

მეტალისატომის კოორდინირება თიოციანატ-იონთან ყველა სინთეზირებულ კომპლექსში ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით რაზეც მიუთითებს $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ ბმის სავალენტო რხევითი სიხშირეების არსებობა $2056.9 - 2078.0 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში.

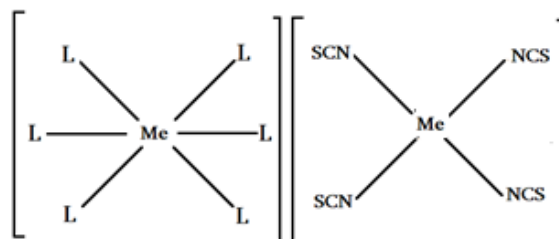
$\nu(\text{CS})$ ჯგუფის სავალენტო რხევის სიხშირეების არსებობა $740.5 - 789.3 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, აგრეთვე $\delta(\text{NCS})$ ჯგუფის არსებობა $469.7 - 477.1 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში ასევე

მიუთითებს ლითონ-კომპლექსწარმოქმნელთან თიოცინატ-იონების კოორდინირებაზე აზოტის ატომის საშუალებით.

რხევითი სიხშირეების ამგვარი მომატება მეტყველებს იმაზე, რომ სინთეზირებულ ნაერთებში NCS^- ჯგუფის კოორდინირება მეტალის (II) ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$).

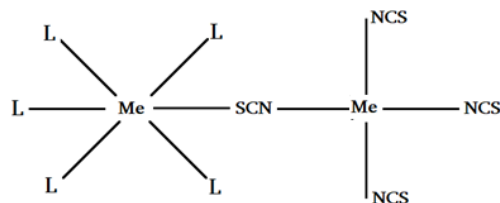
სინთეზის მეთოდიკიდან გამომდინარე შეგვიძლია ვთქვათ, რომ ეთანოლ ხსნარში წარმოიქმნება კომპლექსები ორგანული კათიონით. კობალტის (II), ნიკელის (II) და მანგანუმის (II) შემთხვევაში სინთეზირებულია იონური ტიპის კომპლექსური ნაერთები $[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$, სადაც $\text{Me} = \text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Mn}(\text{II})$, ხოლო L – N,N-დიმეთილფორამიდი. სინთეზირებული კომპლექსური კათიონის $[\text{Me}(\text{DMF})_6]^{2+}$ აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო ანიონის $[\text{Me}(\text{NCS})_4]^{2-}$ აგებულება ტეტრაედრული და ლითონის ატომთან თიოციანატური ჯგუფის კოორდინირება ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$).

$[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$ ტიპის კომპლექსური ნაერთებისთვის, სადაც $\text{Me} = \text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II})$ და $\text{Mn}(\text{II})$ აგებულება შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სტრუქტურის სახით:



ნახ. 5 . $[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$ ტიპის კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც $\text{Me}=\text{Co}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Mn}(\text{II})$, L – N,N-დიმეთილფორამიდი

რაც შეეხება სინთეზირებულ $[Cu(DMF)_5][Cu(NCS)_4]$ კომპლექსურ ნაერთებს, მის შემთხვევაში სინთეზირებული კომპლექსური კათიონის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო კომპლექსურ ანიონში ლითონის იონის - Cu^{2+} გარემოცვა შედგება სამი მონოდენტური თიოციანატ-იონისგან, რომლებიც კოორდინირებული არიან ნიკელის იონთან აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოციანატ-იონი ასრელებს ხიდურ ფუნქციას.



ნახ. 6. $[Cu(DMF)_5][Cu(NCS)_4]$ კომპლექსური ნაერთის სტრუქტურა

N,N-დიმეთილფორამიდთან 3d ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი

N,N-დიმეთილფორამიდის (DMF) მოლეკულის, აგრეთვე SCN^- ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან (ლითონებთან) კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების იწ სპექტრები.

სინთეზირებული კოორდინირებული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში, $\nu(CO)$ ჯგუფის რხევის სიხშირეები მდებარეობს $\sim 1629.8 - 1657.7$ cm^{-1} უბანში, ე.ი. შემცირებულია $\sim 8.58 - 36.485$ cm^{-1} -ით. ეს კი მიუთითებს იმაზე, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებში DMF-ს მოლეკულის კოორდინირება კომპლექსწარმომქმნელ ლითონთან ხორციელდება DMF-ს მოლეკულის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.

სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების მიხედვით დადგენილია SCN^- - ჯგუფის რხევის სიხშირეები: $\nu(CN) \sim 2064.0 - 2102.2$ cm^{-1} , $2\delta(NCS) \sim 955.1$ cm^{-1} , $\nu(CS) \sim 720.3 - 867.6$ cm^{-1} და $\delta(NCS) \sim 429.9 - 476.2$ cm^{-1} შესაბამისად.

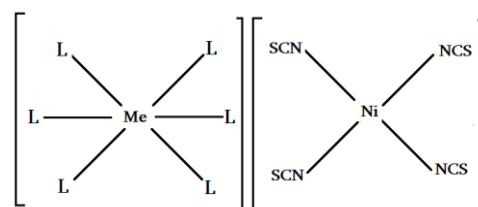
ნიკელის ატომების კოორდინირება თიოციანატ-იონთან ყველა სინთეზირებულ კომპლექსში ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით,

რაზეც მიუთითებს $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$ ზმის სავალენტო რხევითი სიხშირეების არსებობა 2064.0 - 2078.51 cm^{-1} უბანში.

სინთეზირებულ ნაერთებში NCS^- - ჯგუფის კოორდინირება ნიკელის (II) ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$).

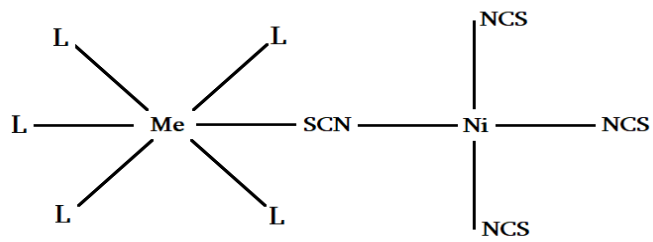
კომპლექსური ნაერთის $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Zn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ და $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ იწ სპექტრებში გამოვლენილია თიოციანატური ჯგუფის $\nu(\text{CN})$ ~2163.7 - 2172.89 cm^{-1} შესაბამისად.

სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების შესწავლის საფუძველზე შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ სინთეზირებულია იონური ტიპის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები, რომლებშიც კომპლექსურ ანიონს $[\text{Ni}(\text{NCS})_4]^{2-}$ აქვს ტეტრაედრული აგებულება და თიოციანატური ჯგუფი კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან აზოტის ატომის საშუალებით. სინთეზირებულ კომპლექსურ კათიონს $[\text{Me}(\text{DMF})_6]^{2+}$, სადაც $\text{Me} = \text{Co}(\text{II}), \text{Fe}(\text{II})$ და $\text{Pb}(\text{II})$ ოქტაედრული აგებულება აქვს.



ნახ. 7. $[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ ტიპის კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც $\text{Me} = \text{Co}(\text{II}), \text{Fe}(\text{II}), \text{Pb}(\text{II}), \text{L} = \text{N,N-დიმეთილფორმამიდი}$

რაც შეეხება სინთეზირებულ ნაერთებს $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Zn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ და $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, ამ შემთხვევაში კომპლექსური კათიონის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო კომპლექსურ ანიონში ნიკელის იონთან - Ni^{2+} სამი მონოდენტატური თიოციანატ-იონი კოორდინირებული აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოციანატ-იონი ასრულებს ხიდურ ფუნქციას.



ნახ. 8. $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Zn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$, $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ და $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც L – N,N-დიმეთილფორმამიდი

დასკვნა

1. შესწავლილია N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმოქმნის უნარი სხვადასხვა გამხსნელში კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით. გამოთვლილია აღნიშნულ მოლეკულის ძირითადი ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები, N,N-დიმეთილფორმამიდის მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან საკოორდინაციო ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.
2. N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის და სულფატის კომპლექსნაერთების კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით ჩატარებულია აღნიშნული მოლეკულების კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით სხვადასხვა გამხსნელში. მონაცემების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ მიუხედავად იმისა, თუთიის რომელი მარილი (ნიტრატული თუ სულფატური) იღებს მონაწილეობას კომპლექსური ნაერთის წარმოქმნაში, N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულები ატომ-კომპლექსწარმოქმნელთან კოორდინაციას ახორციელებენ კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომების საშუალებებით, ხოლო ამიდური ჯგუფის აზოტის ატომის ქიმიურ ბმაში მონაწილეობა შეუძლებელია.
3. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით შესწავლილია N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარი. კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგების მიხედვით ქიმიური ბმის წარმოქმნაში ატომ-კომპლექსწარმოქმნელთან (თუთიის ატომთან) მონაწილეობას ღებულობს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.
4. N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ყველა კომპლექსნაერთის მოლეკულის წარმოქმნის სიბზოს აქვს უარყოფითი მნიშვნელობა, რაც მიუთითებს მოლეკულის მდგრადობაზე/სტაბილურობაზე.

5. სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), სპილენძის (II), მანგანუმის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდული და სულფატური კოორდინაციული ნაერთი N,N-დიმეთილფორამიდთან.
6. სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II) და სპილენძის (II) ორმაგი თიოციანატური კომპლექსნაერთები N,N-დიმეთილფორამიდთან.
7. სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), რკინის (II), ტყვიის (II), კადმიუმის და თუთიის ბიმეტალური შერეულიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორამიდთან.
8. ყველა კომპლექსნაერთი გამოყოფილია მყარი სახით, მდგრადია ჰაერზე. დადგენილია მათი ქიმიური შედგენილობა, შეფერილობა, ხსნადობა სხვადასხვაორგანულ გამხსნელებში და განსაზღვრულია ლღობის ტემპერატურები.
9. N,N-დიმეთილფორამიდის კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების იწ სპექტრები. სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგენილია, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულა კოორდინირდება კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით, რაც სრულ თანხვედრაშია კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგთან.
10. თუ გავითვალისწინებთ DMF მოლეკულების შიდასფერულობას, შეგვიძლია კობალტის (II) ნიკელის (II) და მანგანუმის (II) ქლორიდული კომპლექსნაერთებისთვის ვივარაუდოთ ოქტაედრული აგებულება, ხოლო სპილენძის (II) და კადმიუმის (II) ქლორიდისთვის - ტეტრაედრული აგებულება.
11. სულფატურ ნაერთებში DMF მოლეკულების შიდასფერულია, ამიტომ კობალტის (II) ნიკელის (II) და თუთიის სულფატების კომპლექსნაერთებისთვის ვივარაუდოთ ოქტაედრული აგებულება, ხოლო სპილენძის (II) სულფატისთვის - ტეტრაედრული აგებულება.

12. N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმომქმნელთან და ასევე SCN⁻ ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ორმაგი კომპლექსნაერთების იწ სპექტრები.
13. სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგენილია, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულა კოორდინირდება კომპლექსწარმომქმნელ ლითონთან კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.
14. სინთეზირებულ კომპლექსებში ლითონ-კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირება თიოციანატ-იონთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით და მიიღება იზოციანატური სტრუქტურა $M \leftarrow NCS$.
15. შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ კობალტის (II), ნიკელის (II) და მანგანუმის (II) შემთხვევაში სინთეზირებულია იონური ტიპის კომპლექსური ნაერთები $[Me(DMF)_6][Me(NCS)_4]$, $Me = Co(II), Ni(II), Mn(II)$, $L - N,N$ -დიმეთილფორამიდი. სინთეზირებული კატიონის $[Me(DMF)_6]^{2+}$ აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო ანიონის $[Me(NCS)_4]^{2-}$ აგებულება ტეტრაედრული და ლითონის ატომთან თიოციანატური ჯგუფი კოორდინირება ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა).
16. რაც შეეხება სინთეზირებულ კომპლექსურ ნაერთს $[Cu(DMF)_5][Cu(NCS)_4]$, მის შემთხვევაში სინთეზირებულ კომპლექსურ კატიონის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო კომპლექსურ ანიონში ლითონის იონის Cu^{2+} -ის გარემოცვა შედგება სამი მინოდენტური თიოციანატ-იონისგან, რომლებიც კოორდინირებული არიან ნიკელის იონთან აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოციანატ-იონი ასრელებს ხიდურ ფუნქციას.
17. N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმომქმნელთან და ასევე SCN⁻ ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ბიმეტალური შერეულიგანდიანინაერთების იწ სპექტრები.

18. სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგენილია, რომ სინთეზირებულ ბიმეტალურ შერეულლიგანდიანიკომპლექსებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულა კოორდინირდება კომპლექსწარმოქმნელ ლითონთან კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.
19. სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების შესაწავლის საფუძველზე შეგვიძლია ვივარაუდოთ რომ სინთეზირებული იონური ტიპის ბიმეტალური ნაერთები, რომლებშიც სინთეზირებულ კომპლექსურ კათიონს $[Me(DMF)_6]^{2+}$, სადაც $Me = Co(II), Fe(II), Pb(II)$ ოქტაედრული აგებულება აქვს. ხოლო კომპლექსურ ანიონს $[Ni(NCS)_4]^{2-}$ აქვს ტეტრაედრული აგებულება და თიოციანატური ჯგუფის კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან აზოტის ატომის საშუალებით (მიიღება იზოციანატური სტრუქტურა $M \leftarrow NCS$).
20. რაც შეეხება სინთეზირებულ ნაერთებს $[Cu(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$, $[Zn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$, $[Cd(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$ და $[Mn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$, ამ შემთხვევაში კომპლექსური კათიონის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო კომპლექსურ ანიონში ნიკელის იონთან Ni^{2+} სამი მონოდენტატური თიოცნატ-იონი კოორდინირებულია აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოცნატ-იონი ასრულებს ხიდურ ფუნქციას.

დისერტაციის ძირითადი შედეგები გამოქვეყნებულია
შემდეგ შრომებში

1. М.Г.Абесадзе, Н.Г.Гегешидзе, Н.О.Киласония, Д.М.Лочошвили, М.Г.Цинцадзе. Квантово-химическое исследование координационных соединений нитрата и сульфата цинка с N,N-диметилформамидом (DMF). Керамика да მოწინავე ტექნოლოგიები.ტ.21.2(42).2019. გვ.3-8.
2. М.Абесадзе. Н.Гегешидзе, М.ЦинцадзеН.Киласония.Квантово-химическое исследование координационных соединений бромида цинка N,N-диметилформамидом (DMF)полуэмпирическими методами AM1, MP3 и MNDO-d. Химический журнал Грузии Т.19 N.1. 2019. с.42-46.
3. თ.გიორგაძე, ნ.თაბუაშვილი, მ.კერესელიძე, ლ.სხირტლაძე, მ.აბესაძე. ქიმიური ჟურნალი - ნიკელის შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთის სინთეზი. სტუ, სამეცნიერო შრომების კრებული, თბილისი, 2019, გვ. 60-63.

Abstract

The aim of study was to synthesis some of the biometal coordinate compounds with N,N-dimethylformamide and to study the phisico-chemical properties of the synthesized compounds.

In order to predict the ability of N,N -dimethylformamide to form a complex and to detect donor atoms, quantum-chemical research of this molecule was carried out using the half empirical AM1 method in various solvent.

Quantum-chemical research of molecules of zinc nitrate and sulfate and zinc bromide complex with N,N-dimethylformamide was also conducted half empirical AM1,MP3 and MND-d methods in different solvents to predict complex generation capacity and to detect donor atoms.

Quantum-chemical calculations have shown that the N,N-dimethylformamide participates in the formation of a coordinate bond with the metal-complex generator.

The study also idetified the heat generated by the molecule,the total energy value, the ionization potential value,the atomic distances, the valence angles, the bond length,the effective charges and the electron settlement on the atomic orbitals.

We have synthesized complex chloride and sulfate complex compounds of cobalt (II),Nickel (II),Manganese (II),Copper (II),Cadmium and Zinc with N,N-dimethylformamide,and also sinthesized cobalt (II),Nickel (II),Manganese (II),Copper (II),Cadmium and Zinc biometal mixed with thiocyanate N,N-dimethylformamide.

All complex units are separated by solid form,resistent to air. Their chemical composition color,solubility in different organic solvents have been determined.

In order to establish the rule or coordination with the N,N-dimethylformamide complex (metal) compiler,the spectrum of sinthesized compounds has been studied,based on the study of spectra it has been established that in sinthesized complex the N,N-dimethylformamide molecule is coordinated by the carbonyl group oxygen atom,which is in complete agreement with the quantum-chemical calculations.The thyocianate groupe is coordinated with the central atomic structure with nitrogen atom.

Based on the study of the spectra of the sinthesized complex compounds, we can assume that the synthesized ionic type bimetalic compounds,in which the synthesized complex cation $[Me(DMF)_6]^{2+}$, where $Me = Co(II), Fe(II), Pb(II)$ have an octahedral structure while complex anion $[Ni(NCS)_4]^{2-}$ has a tetrahedral structure.

As for the synthesized compounds $[Cu(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$, $[Zn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$, $[Cd(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$ and $[Mn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$,in which case the complex cation structure is octahedral, while in the complex anion with nikcel ion Ni^{2+} three monodentate thiocianat ions are coordinated by a nitrogen atom,and the fourth thiocianate ion performs a bridge function.