

მელანო აბესაძე

შერეულიგანდიანი ბიოლითონების შემცველი  
კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და კვლევა

სადოქტორო პროგრამა - ქიმია

შიფრი - 0503

წარმოდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის

მოსაპოვებლად

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

თბილისი, 0175, საქართველო

2020

საავტორო უფლება ©2020 წელი, აბესაძე მელანო

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი  
ქიმიური ტექნოლოგიის და მეტალურგიის ფაკულტეტი

ჩვენ, ქვემოთ ხელისმომწერნი ვადასტურებთ, რომ გავეცანით მელანო აბესაძის მიერ შესრულებულ სადისერტაციო ნაშრომს დასახელებით: „შერეულიგანდიანი ბიოლითონების შემცველი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და კვლევა“ და ვაძლევთ რეკომენდაციას საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის სადისერტაციო საბჭოში მის განხილვას დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად.

2020 წ.

ხელმძღვანელი: პროფესორი: მ.ცინცაძე

რეცენზენტი:

---

რეცენზენტი:

---

რეცენზენტი:

---

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი  
2020

ავტორი: აბესაძე მელანო

დასახელება: შერეულიგანდიანი ბიოლითონების შემცველი  
კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და კვლევა

ფაკულტეტი: ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტი

ხარისხი: ქიმიის დოქტორი

სხდომა ჩატარდა: 2020 წ.

ინდივიდუალური პროგნოზების ან ინსტიტუტების მიერ შემომოყვანილი დასახელების დისერტაციის გაცნობის მიზნით მოთხოვნის შემთხვევაში მისი არაკომერციული მიზნებით კოპირებისა და გავრცელების უფლება მინიჭებული აქვს საქართველოს ტექნიკურ უნივერსიტეტს.

---

ავტორის ხელმოწერა

ავტორი ინარჩუნებს დანარჩენ საგამომცემლო უფლებებს და არც მთლიანი ნაშრომის და არც მისი ცალკეული კომპონენტების გადაბეჭდვა ან სხვა რაიმე მეთოდით რეპროდუქცია დაუშვებელია ავტორის წერილობითი ნებართვის გარეშე.

ავტორი ირწმუნება, რომ ნაშრომში გამოყენებული საავტორო უფლებებით დაცული მასალებზე მიღებულია შესაბამისი ნებართვა (გარდა ის მცირე ზომის ციტატებისა, რომლებიც მოითხოვენ მხოლოდ სპეციფიურ მიმართებას ლიტერატურის ციტირებაში, როგორც ეს მიღებულია სამეცნიერო ნაშრომების შესრულებისას და ყველა მათგანზე იღებს პასუხისმგებლობას.

## რეზიუმე

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

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

ასევე ჩატარებულ იქნა N,N-დიმეთილფორამიდთან 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-ქიმიურმა გათვლებმა გვაჩვენა რომ, N,N-დიმეთილფორამიდი მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან საკოორდინაციო ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.

აღნიშნული კვლევით ასევე გამოვლენილია მოლეკულის წარმოქმნის სიტბო, სრული ენერჯის მნიშვნელობა, იონიზაციის პოტენციალის მნიშვნელობა, ატომთშორისი მანძილები, სავალენტო კუთხეები, ბმის სიგრძე, ევექტური მუხტები და ელექტრონებით დასახლება ატომურ ორბიტალებზე.

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

ყველა კომპლექსნაერთი გამოყოფილია მყარი სახით, მდგრადია ჰაერზე. დადგენილია მათი ქიმიური შედგენილობა, შეფერილობა, ხსნადობა სხვადასხვა ორგანულ გამხსნელებში და განსაზღვრულია ლღობის ტემპერატურები.

N,N-დიმეთილფორამიდის კომპლექსწარმოქმნელთან (მეტალთან) 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 შედეგებთან, ხოლო თიოციანატური ჯგუფი კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან აზოტის ატომის საშუალებით (მიიღება იზოციანატური სტრუქტურა  $M \leftarrow NCS$ ).

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.

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.

## 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 synthesized 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 estabilish the rule or coordination with the N,N-dimethylformamide complex (metal) compiler,the spectrum of synthesized compounds has been studied,based on the study of spectra it has been established that in synthesized 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 thyocyanate groupe is coordinated with the central atomic structure with nitrogen atom.

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

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

## შინაარსი

შესავალი	15
1. ლიტერატურის მიმოხილვა.....	17
1.1. N,N დიმეთილფორმამიდი.....	17
1.2. თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები.....	19
შერეულლიგანდიანი ჰომო და ჰეტერო ლითონური კოორდინაცი-	
ული ნაერთები.....	29
1.3. შერეულლიგანდიანი კომპლექსური ნაერთები.....	36
1.4. თიოციანატური ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები.....	38
1.5. შერეულლიგანდიანი კომპლექსური ნაერთები.....	38
2. შედეგები და მათი განსჯა.....	48
2.1. გამოსავალი ნივთიერებები და კვლევის მეთოდები.....	48
გამოსავალი საწყისი ნივთიერებების გასუფთავება და მომზადება	
2.1.1. სინთეზისთვის.....	48
2.1.2. ქიმიური ელემენტური ანალიზი.....	48
2.1.3. შთანთქმის იწ სპექტრები.....	49
2.1.4. კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები.....	49
N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ნიტრატის, სულფატის და	
ბრომიდის კომპლექსური ნაერთების შესწავლა კვანტურ -ქიმიური	
2.2 ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d მეთოდებით.....	50
N,N- დიმეთილფორმამიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამხსნე-	
ლის გავლენის შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული	
2.2.1 AM1 მეთოდით.....	51
N,N დიმეთილფორმამიდთან თუთიის კომპლექსური ნაერთების	
კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამხსნელის გავლენის შესწავლა	
კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1, MP3 და MNDO-d	
2.2.2 მეთოდებით.....	53
3. ექსპერიმენტული ნაწილი.....	74
N,N -დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთ ბიოლითონთან კოორ-	
დინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური	
3.1 თვისებები.....	74
N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუ-	
მის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის კოორდინაციული ნაერთების	
3.1.1. სინთეზი.....	74
N,N -დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3 d გარდამავალი ლით-	
ონები ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების	
3.2. სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები.....	80
N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d გარდამავალი ლითონის	
ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების	
3.3. სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები.....	83
N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d ლითონის კოორდინა-	
ციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების აღნაგობა.....	86
N,N-დიმეთილფორმამიდთან 3d ლითონის ქლორიდული და სულ-	
ფატური კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების	
3.4.1. ანალიზი.....	86
N,N-დიმეთილფორმამიდთან 3d ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორ-	
დინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი.....	96
3.4.2. N,N-დიმეთილფორმამიდთან 3d ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი	
3.4.3. N,N-დიმეთილფორმამიდთან 3d ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი	101

კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი	
დასკვნა.....	110
გამოყენებული ლიტერატურა.....	114
დანართი.....	125



## ცხრილების ნუსხა

<b>ცხრილი 1.</b>	XCN-ჯგუფის ვალენტური რხევების სიხშირეების მიახლოებითი ინტერვალები (X-S,Se) $\text{სმ}^{-1}$ .....	20
<b>ცხრილი 2.</b>	ატომთშორისი მანძილების და ძალოვანი კონსტანტების მნიშვნელობები NCX-იონებში .....	21
<b>ცხრილი 3.</b>	ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდის გათვლის შედეგები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში.....	54
<b>ცხრილი 4.</b>	ატომთშორისი ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაშიგამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	55
<b>ცხრილი 5.</b>	ატომთა შორის სავალენტო კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით .....	56
<b>ცხრილი 6.</b>	ნახევრად ემპირიული კვანტურ ქიმიური AM1 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ნიტრატის და სულფატი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში .....	61
<b>ცხრილი 7.</b>	ატომთშორისი ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2(\text{DMFA})_2$ მოლეკულაში მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	62
<b>ცხრილი 8.</b>	ატომთშორისი ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები $\text{ZnSO}_4(\text{DMFA})_2$ მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	63
<b>ცხრილი 9.</b>	ატომთა შორის სავალენტო კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2(\text{DMFA})_2$ მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	64
<b>ცხრილი 10.</b>	$\text{ZnSO}_4(\text{DMFA})_2$ მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	64
<b>ცხრილი 11.</b>	ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში.....	69
<b>ცხრილი 12.</b>	ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MNDO-d მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში.....	70
<b>ცხრილი 13.</b>	ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MP3 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი	70

	N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში.....	
<b>ცხრილი 14.</b>	(DMF) <sub>2</sub> მოლეკულის ბმის სიგრძის (R <sub>ij</sub> ) და ბმის რიგის (P <sub>ij</sub> ) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარ-ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით.....	<b>71</b>
<b>ცხრილი 15.</b>	ZnBr <sub>2</sub> (DMF) <sub>2</sub> მოლეკულის ბმის სიგრძის (R <sub>ij</sub> ) და ბმის რიგის (P <sub>ij</sub> ) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარ-ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MNDO-d მეთოდით.....	<b>71</b>
<b>ცხრილი 16.</b>	ZnBr <sub>2</sub> (DMF) <sub>2</sub> მოლეკულის ბმის სიგრძის (R <sub>ij</sub> ) და ბმის რიგის (P <sub>ij</sub> ) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარ-ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MP3 მეთოდით.....	<b>71</b>
<b>ცხრილი 17.</b>	ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) <sub>2</sub> მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევარ-ემპირიული AM1 მეთოდით.....	<b>72</b>
<b>ცხრილი 18.</b>	ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) <sub>2</sub> მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევარ-ემპირიული MNDO-d მეთოდით.....	<b>72</b>
<b>ცხრილი 19.</b>	ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) <sub>2</sub> მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევარ-ემპირიული PM3 მეთოდით.....	<b>73</b>
<b>ცხრილი 20.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება.....	<b>77</b>
<b>ცხრილი 21.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები .....	<b>77</b>
<b>ცხრილი 22.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება.....	<b>80</b>
<b>ცხრილი 23.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები.....	<b>80</b>
<b>ცხრილი 24.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), სპილენძის (II), მანგანუმის (II) და თუთიის ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება.....	<b>82</b>
<b>ცხრილი 25.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან ნიკელის (II), კობალტის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და თუთიის ორმაგი კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის	<b>82</b>

	შედევები.....	
<b>ცხრილი 26.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), რკინის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), ტყვიის (II), თუთიის და კადმიუმის ბიმეტალური შერეულ-ლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება.....	<b>85</b>
<b>ცხრილი 27.</b>	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.....	<b>85</b>
<b>ცხრილი 28.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული მონობირთვული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ) .....	<b>86</b>
<b>ცხრილი 29.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული კობალტის (II), ნიკელის (II), სპილენძის (II), მანგანამის (II) კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდული და სულფატური კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ).....	<b>89</b>
<b>ცხრილი 30.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ) .....	<b>95</b>
<b>ცხრილი 31.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ) .....	<b>98</b>
<b>ცხრილი 32.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი მიღებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ) .....	<b>101</b>
<b>ცხრილი 33.</b>	N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ <sup>-1</sup> ) .....	<b>106</b>

## ნახაზების ნუსხა

<b>ნახ.1.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის სულფატის და ნიტრატის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულები.....	57
<b>ნახ.2.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულა (მეთოდი AM1).....	65
<b>ნახ.3.</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულა (ა - MP3 მეთოდი და ბ - MNDO მეთოდი).....	67
<b>ნახ.4.</b>	DMF-ს შთანთქმის იწ სპექტრი .....	55
<b>ნახ.5.</b>	$\text{CoSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	73
<b>ნახ.6.</b>	$\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	90
<b>ნახ.7.</b>	$\text{CuSO}_4 \cdot 4\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	90
<b>ნახ.8.</b>	$\text{ZnSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	91
<b>ნახ.9.</b>	$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრები .....	91
<b>ნახ.10.</b>	$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	92
<b>ნახ.11.</b>	$\text{CuCl}_2 \cdot 4\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	92
<b>ნახ.12.</b>	$\text{MnCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	93
<b>ნახ.13.</b>	$\text{CdCl}_2 \cdot 4\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი .....	93
<b>ნახ.14.</b>	$[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Co}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრები .....	99
<b>ნახ.15.</b>	$[\text{Cu}(\text{DMF})_6][\text{Cu}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი .....	99
<b>ნახ.16.</b>	$[\text{Mn}(\text{DMF})_6][\text{Mn}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ .....	100
<b>ნახ.17.</b>	$[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი.....	100
<b>ნახ.18.</b>	$[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი .....	105
<b>ნახ.19.</b>	$[\text{Zn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი.....	107
<b>ნახ.20.</b>	$[\text{Pb}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი .....	107
<b>ნახ.21.</b>	$[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი .....	108
<b>ნახ.22.</b>	$[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრები .....	108
<b>ნახ.23.</b>	$[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი.....	109
<b>ნახ.24.</b>	$[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი.....	109

## დისერტაციაში გამოყენებული აბრევიატურა

<b><math>\alpha</math>-Dipy</b>	2,2'-დიპირიდილი
<b>Phen</b>	1,10-ფენანტროლინი
<b>Py</b>	პირიდინი
<b>Ampy</b>	2-ამინოპირიდინი
<b><math>\gamma</math>-Dipy</b>	4,4'-დიპირიდილი
<b>AF</b>	ფორმამიდი
<b>MFA</b>	მეთილფორმამიდი
<b>DMF</b>	N,N-დიმეთილფორმამიდი
<b>DMSO</b>	დიმეთილსულფოქსიდი
<b>BH</b>	ბენზოილჰიდრაზინი
<b>Ur</b>	უროტროპინი
<b>dmtp</b>	5,7-დიმეთილ-1,2,4-ტრიაზოლო [1,5-a] პირიმიდინი
<b>DH</b>	დიმეთილგლიოქსიმის მინოანიონი
<b>Thio</b>	თიოშარდოვანა
<b>NioxH</b>	1,2-ციკლოჰექსანდიონდიოქსიმის მონოანიონი
<b>Anil</b>	ანილინი
<b>dpop'</b>	დიპირიდო (2,3-a:3',2'-j)ფენაზინი
<b>Otf</b>	ტრიფტორმეთანსულფონატი
<b>TMEDA</b>	ტეტრამეთილეთილენდიამინი
<b>BQ</b>	ქინოლინი
<b>HL</b>	ბენზჰიდრაზიდი
<b>BENDAMB</b>	N, N', - ბის ბენზილიდენ -1,2 - ფენილენდიამინი

## მადლიერება

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.

მადლობას ვუხდით ა(ა)იპ სასწავლო კვლევითი სამეცნიერო ცენტრის ხელმძღვანელს და მთავარი სპეციალისტს ქიმია - ბიოლოგიის დარგში.

მადლობას ვუხდით სადისერტაციო ნაშრომის ხელმძღვანელს თემის შერჩევისა და ყოველდღიური ყურადღებისთვის, ნაშრომის შესრულების დროს გაწეული კონსულტაციებისთვის, აგრეთვე ქიმიის დეპარტამენტის ზოგადი, არაორგანული და ანალიზური ქიმიის, მიმართულების თანამშრომლებს.

## შესავალი

კოორდინაციული ქიმია, რომლის შესწავლის საგანს წარმოადგენს კოორდინაციული ნაერთები, ჩამოყალიბდა მე-19 საუკუნის ბოლოს და ევოლუციის დიდი გზა განვლო. მისი ფუძემდებელი არის შვეიცარიელი მეცნიერი ა.ვერნერი.

კოორდინაციული (კომპლექსური) ნაერთები განსაზღვრული მოლეკულური ნაერთებია, რომლებიც წარმოქმნილია ცალკეული კომპონენტების შერწყმით და წარმოადგენენ როგორც კრისტალურ მდგომარეობაში, ისე ხსნარში არსებობის უნარის მქონე რთულ იონებს ან მოლეკულებს.

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 თანამდეროვე 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 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 მიკრო-ელემენტები 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.

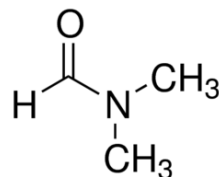


# 1. ლიტერატურის მიმოხილვა

## 1.1. N,N-დიმეთილფორმამიდი

უკანასკნელ წლებში გაიზარდა ინტერესი აპროტონული გამხსნელების მიმართ.

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

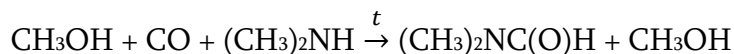


N,N-დიმეთილფორმამიდი

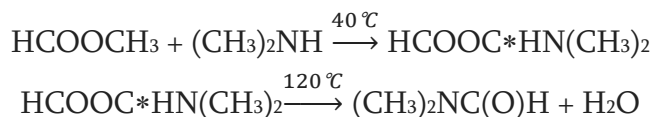
N,N-დიმეთილფორმამიდი (DMF) უფერო, ბლანტი სითხეა, კარგად ერევა წყალს და მრავალ ორგანულ ნივთიერებას. ფართოდ გამოიყენება როგორც გამხსნელი მრავალი ქიმიური რეაქციისთვის. სუფთა დიმეთილფორმამიდს არ აღენიშნება სუნი, მაგრამ დაშლის პროდუქტები ან დიმეთილამინის მინარევები ანიჭებენ მას დამახასიათებელ „თევზის სუნს“. როგორც დასახელებიდანაც ჩანს, N,N-დიმეთილფორმამიდი წარმოადგენს ფორმამიდის, ჭიანჭველმჟავას ამიდის წარმოებულის ნაწარმია. N,N-დიმეთილფორმამიდი პოლარული (ჰიდროფილური) აპროტონული გამხსნელია დუდილის მაღალი ტემპერატურით.

N,N-დიმეთილფორმამიდის პირველად მიღებული იქნა 1893 წელს ალფრედ ვერლის მიერ დიმეთილამინის ჰიდროქლორიდის და კალიუმის ფორმატის გადადენით[1].

ამჟამად მიიღება დიმეთილამინის ურთიერთქმედებით ნახშირბადის მონოქსიდთან [2]:



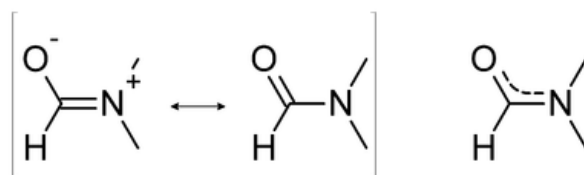
მისი მიღება აგრეთვე შესაძლებელია მეთილფორმიატის ურთიერთქმედებით დიმეთილამინთან (80-120 °C და 0,1-0,4 მპა):



N,N-დიმეთილფორმამიდის როგორც გამხსენლის ფართო გამოყენება განპიროვნებულია მისი აორთქლების სიჩქარით. გამოიყენება პლასტმასების და აკრილური ბოჭკოს წარმოებაში.

ფართოდ გამოიყენება როგორც გამხსნელი პეპტიდური ბმების წარმოქმნისთვის ფარმაცევტულ პრეპარატებში, პესტიციდების შემუშავებისა და წარმოებაში. სინთეტიკური ტყავის, ბოჭკოს, წებოს წარმოებაში.

ამიდეგის მსგავსად, სპექტროსკოპული მონაცემები მიუთითებენ C-N და C-O ნაწილობრივ ორმაგი ბმების ხასიათზე. ამრიგად, C = O ბმების სიხშირეები აღინიშნება 1675 სმ<sup>-1</sup> უბანში, როდესაც კეტონისთვის ანალოგიური ჯგუფის შთანთქმა აღინიშნება 1700 სმ<sup>-1</sup> უბანში.



### N,N-დიმეთილფორმამიდის ორი რეზონანსული სტრუქტურა

მთელი რიგი მკვლევარების მიერ დადგენილია რომ მეტალკომპლექს-წარმომქმნელებთან N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კოორდინირება ხორციელდება ჟანგბადის ატომის საშუალებით. მაგალითად, კომპლექსებისთვის ტრანს-[Me(NCX)<sub>2</sub>· 4DMF], სადაც Me = Mn, Fe, Co, Ni, ხოლო X = S, Se ν(CO) ჯგუფის რხევითი სიხშირეები გამოვლენილია 1647-1650 სმ<sup>-1</sup> უბანში, რაც თავისუფალი, არაკოორდინირებული N,N-დიმე-

თილფორმამიდის მოლეკულის  $\nu(\text{CO})$  ჯგუფის რხევითი სიხშირეებთან შედარებით შემცირებულია. ეს კი მიუთითებს N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კოორდინირებაზე ლითონ-ლომპლექსწარმომქმნელთან ჟანგბადის ატომის საშუალებით [3-6].

ჩვენ მიზნად დავისახედ N,N-დიმეთილფორმამიდთან და მის წარმოებულებთან ზოგიერთი d-ელემენტის კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების შესწავლა.

## 1.2. თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები

სამეცნიერო ლიტერატურაში ფართოდ არის წარმოდგენილი მასალა XCN-ჯგუფების ( $X = \text{S}, \text{Se}$ ) კრისტალური სტრუქტურის და იწ სპექტრული მახასიათებლების შესახებ. შრომების ანალიზის თანახმად თიოციანატური ნაერთები შეგვიძლია გავყოთ ოთხ ძირითად ჯგუფად [7-15]:

1. თიო- და სელენოციანატური ნაერთები, რომლებშიც XCN ჯგუფი კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან  $X=\text{S}$  ან  $\text{Se}$  ატომის საშუალებით (სტრუქტურა  $\text{M}-\text{XCN}$ )
2. იზოთიო- და იზოსელენოციანატური ნაერთები, რომლებშიც XCN ჯგუფი კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან აზოტის ატომის საშუალებით (სტრუქტურა  $\text{M}-\text{NCX}$ )
3. ნაერთები, რომლებშიც XCN ჯგუფი ასრულებს ხიდურ ფუნქციას (სტრუქტურა  $\text{M}-\text{NCX}-\text{M}'$ ) ( $\text{M}'$  და  $\text{M}$  შეიძლება იყოს ერთი და იგივე ან სხვადასხვა ლითონი)
4. ნაერთები, რომლებშიც XCN ჯგუფები ასრულებენ გარესფერული ლიგანდების ფუნქციას (იონური XCN-ჯგუფები)
5. ნაერთები, რომლებიც შეიცავენ როგორც იონურ, ასევე კოორდინირებულ XCN-ჯგუფებს

მთელ რიგ შრომებში კარგად არის ნაჩვენები, რომ XCN-ჯგუფების კოორდინირებისას ხდება  $\nu(\text{CN})$  და  $\nu(\text{CX})$  სიხშირეების მნიშვნელოვანი გადანაცვლება XCN-იონების სიხშირეების მიმართ არაკოორდინირებული

თიოციანატ-იონების სავალენტო რხევების სიხშირეებია  $\nu(\text{CN})$  2050-2060  $\text{სმ}^{-1}$ ,  $\nu(\text{CX})$  750  $\text{სმ}^{-1}$ . დეფორმაციული რხევის სიხშირეა  $\delta(\text{NCS}) \approx 470 \text{ სმ}^{-1}$  [16-23].

არაკოორდინირებული  $\text{SCN}$ -იონისთვის  $\nu(\text{CS})$  ვალენტური რხევის სიხშირეებთან შედარებით იზოთიოციანატურ ნაერთებში  $\nu(\text{CS})$  ვალენტური რხევის სიხშირეები იზრდება და ვლინდება 780-860  $\text{სმ}^{-1}$  უბანში, თიოციანატურ ნაერთებში  $\nu(\text{CS})$  რხევის სიხშირეები მცირდება და აღინიშნება 690-740  $\text{სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო ნაერთებში ხიდური სტრუქტურით  $\nu(\text{CS})$  რხევის სიხშირის მნიშვნელობა შეიძლება როგორც გაიზარდოს, ასევე შემცირდეს.

$\nu(\text{CN})$  ვალენტური რხევის სიხშირე არაკოორდინირებული  $\text{SCN}$ -იონის შესაბამისი ვალენტური რხევის სიხშირესთან შედარებით იზრდება: იზოთიოციანატურ სტრუქტურებში (2080-2111  $\text{სმ}^{-1}$ ), თიოციანატურ სტრუქტურებში (2100-2130  $\text{სმ}^{-1}$ ), ხოლო ხიდური ფუნქციის შემცველ სტრუქტურებში  $\nu(\text{CN})$  ვალენტური რხევის სიხშირე იზრდება 2130-2180  $\text{სმ}^{-1}$ -მდე. ამრიგად, კომპლექსურ ნაერთში ხიდური ფუნქციის არსებობა შეიძლება მიჩნეული იყოს  $\nu(\text{CN})$  ვალენტური რხევის სიხშირის მკვეთრი ზრდა, ხოლო  $\text{M-NCS}$  და  $\text{M-SCN}$  სტრუქტურების არსებობა  $\nu(\text{CS})$  ვალენტური რხევის სიხშირის მატება  $\nu(\text{CN})$  ვალენტური რხევის სიხშირის ნაკლებ გამოხატული მატების ფონზე.

**ცხრილი 1. XCN-ჯგუფის ვალენტური რხევების სიხშირეების მიახლოებითი ინტერვალები (X-S,Se)  $\text{სმ}^{-1}$**

კოორდინაციის ტიპის	NCS		NCSe	
	$\nu(\text{CN})$ $\text{სმ}^{-1}$	$\nu(\text{CS})$ $\text{სმ}^{-1}$	$\nu(\text{CN})$ $\text{სმ}^{-1}$	$\nu(\text{CSe})$ $\text{სმ}^{-1}$
$\text{NCX}^-$	~2040-2020	~720-758	~2050-2100	~549-563
$\text{M-XCN}$	~2010-2130	~670-800	~2080-2124	~520-550
$\text{M-NCX}$	~2000-2110	~760-840	~2060-2105	~600-650
$\text{M-NCS-M}'$	~2090-2180	~712-830	~2135-2154	~528-539

ჩატარებულია კოორდინირებული XCN ჯგუფების რხევების თეორიული (ნახევარემპირიული) ანალიზი. დასკვნების საფუძველზე ნაჩვენებია, რომ გათვლების შედეგები სრულ თანხვედრაშია ექსპერიმენტულ

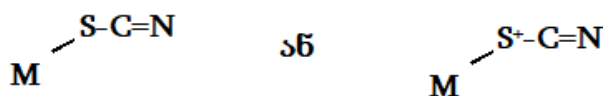
მონაცემებთან. კონკრეტულად, კი SCN-ჯგუფების კოორდინირებისას აზოტის ატომის საშუალებით აღინიშნება  $\nu(\text{CN})$  და  $\nu(\text{CS})$  სავალენტო რხევის სიხშირეები CN და CS ბმების უცვლელი ძალოვანი კონსტანტების მნიშვნელობებისას [24].

ქვემოთ მოყვანილია XCN-იონების ატომთშორისი მანძილების და ძალოვანი კონსტანტების მნიშვნელობები საიდანაც შესაძლებელია დასკვნის გაკეთება, რომ C—N ბმის ჯერადობა სამზე ნაკლებია  $3 > \nu(\text{CN}) > 2,5$ , ხოლო C—X ბმის ჯერადობა ნაკლებია ორზე, მაგრამ მეტია ერთნახევარზე  $2 > \nu(\text{CX}) > 1,5$  აქედან გამომდინარე XCN-იონის ბმის რიგები სქემატურად შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სახით  $\text{N} \equiv \text{C} \text{---} \text{X}$ . [25-26].

**ცხრილი 2. ატომთშორისი მანძილების და ძალოვანი კონსტანტების მნიშვნელობები NCX-იონებში**

NCX	ატომთშორისი მანძილები, Å		ძირითადი კონსტანტები		
	C-N	C-X	$K_{\text{CN}}$	$K_{\text{CX}}$	$K_{\text{CN,CX}}$
NCS	1,17	1,61	15,95	5,18	0,9
NCS <sub>e</sub>	1,22	1,83	15,1	3,88	0,25
	1,117	1,829			

თიო- და სელენოციანატურ კომპლექსებში M—XCN თიოციანატური ჯგუფის ბმის ღერძის დახრის კუთხე შეადგენს 95-110°. ამ ტიპის ნაერთებში ბმა ხორციელდება XCN-ჯგუფის  $\pi$ -ბმის ელექტრონული ღრუბლის ხარჯზე, რომლის მაქსიმალური სინკვრივის მიმართულება პერპენდიკულარულია XCN ღერძის მიმართ. სქემატურად ბმა შეგვიძლია გამოვსახოთ შემდეგნაირად:

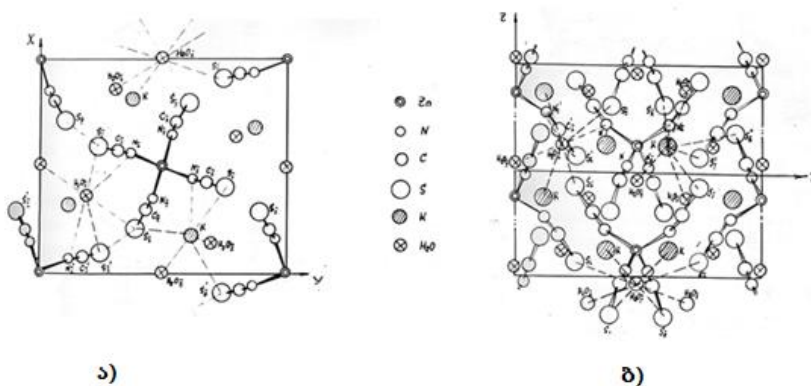


იზოთიო- და იზოსელენეციანატურ კომპლექსებში M—N—C ბმის კუთხე ახლოსაა 180°. ეს ფაქტი მიუთითებს, რომ ბმა M—N ხორციელდება აზოტის ატომის ელექტრონული ღრუბლის ხარჯზე და არა C—N ბმის ელექტრონული ღრუბლის ხარჯზე [27].

ნაერთებში ხიდური SCN და SeCN ჯგუფებით M—N—C ბმის კუთხე ახლოსაა 180°, ხოლო M—X—C ბმის კუთხე ახლოსაა 90°. M—N და M—X ბმების სიმკვრივეზე დამოკიდებულებით შეიძლება განხორციელდეს ერთ-ერთი სტრუქტურა:



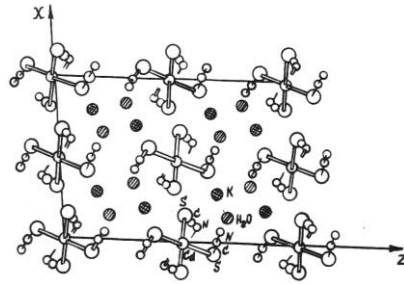
თუ უპირატესად წარმოიქმნება M—N ბმა მაშინ ხორციელდება სქემა I, ხოლო M—S ბმის განხორციელების შემთხვევაში სქემა II.



კომპლექსური ნაერთის  $\text{K}_2[\text{Zn}(\text{NCS})_4]\cdot 3\text{H}_2\text{O}$  სტრუქტურა ა. პროექციაზე (001), ბ. პროექციაზე (100).

თუთიის ატომის კოორდინაცია ოქტაედრულია, SCN-ჯგუფები თუთიის ატომთან დაკავშირებული არიან აზოტის ატომის საშუალებით. ანალოგიური აგებულება აქვს თუთიის კომპლექსის იზოსტრუქტურულ ნაერთს  $\text{Cd}(\text{N}_2\text{H}_4)_2(\text{NCS})_2$  [28].

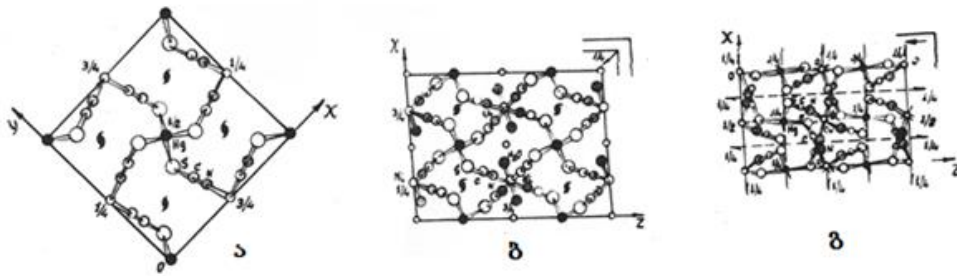
კომპლექსური ნაერთის  $\text{K}_2[\text{Cd}(\text{NCS})_4]\cdot 2\text{H}_2\text{O}$  კრისტალური სტრუქტურა შედგება პოლიმერული ჯაჭვებისგან, რომელშიც კადმიუმის იონები დაკავშირებული არიან ერთმანეთთან ხიდური SCN-ჯგუფებით. კადმიუმის თითოეული ატომის გარემოცვა შედგება კვადრატის მიხედვით გოგირდის ოთხი ატომისგან. კოორდინაცია დასრულებულია ოქტაედრამდე აზოტის ორი ატომით [29,30]:



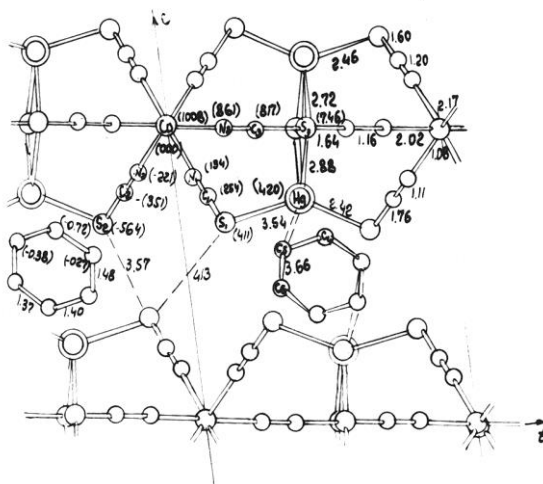
**კომპლექსური ნაერთის  $K_2Cd(NCS)_4 \cdot 2H_2O$  კრისტალური სტრუქტურა**

საინტერესო სტრუქტურა გააჩნიათ ვერცხლისწყლის (II) ორმაგ თიოციანატებს სპილენძთან (II), ნიკელთან (II) და კობალტთან (II) [31,32].

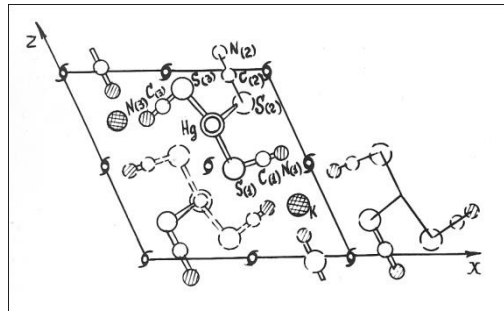
რაც შეეხება კომპლექსურ ნაერთს  $NiHg(SCN)_4 \cdot 2H_2O$ , ვერცხლისწყლის (II) ატომი ინარჩუნებს ტეტრაედრულ სტრუქტურას ბმით Hg—S, ხოლო ნიკელისთვის (II) ხორციელდება ოქტაედრული კონფიგურაცია  $NiN_4O_2$ , სადაც დამატებით ლიგანდების ფუნქციას ასრულებენ წყლის მოლეკულები.



**კრისტალების  $Co[Hg(SCN)_4]$  (ა),  $Ni[Hg(SCN)_4] \cdot 2H_2O$  (ბ) ი  $CuHg(SCN)_4$  (გ) სტრუქტურული მოტივები**



**სტრუქტურის  $CoHg_2(SCN)_6 \cdot C_6H_6$  (100) პროექცია**



კრისტალის  $\text{Hg}(\text{SCN})_2 \cdot \text{KSCN}$  ( $\text{Hg}(\text{SCN})_2 \cdot \text{NH}_4\text{SCN}$ ) სტრუქტურა

შესწავლილია კობალტის (II), ნიკელის (II), თუთიის და კადმიუმის (II)  $\text{M}'\text{M}(\text{NCS})_3 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ზოგადი შედგენილობის 24 კოორდინაციული ნაერთის იწ სპექტრი კრისტალურ მდგომარეობაში ( $400\text{-}4000 \text{ სმ}^{-1}$ ), სადაც  $\text{M}'=\text{Na, K, Cs, NH}_4, [\text{C}(\text{NH}_2)_3], 1/2\text{Ba}$ ,  $\text{M}=\text{Co, Ni, Zn, Cd}$ ,  $n=0\text{-}4$  [33].

განსაზღვრულია რხევითი სიხშირეების მიკუთვნებები. ნაჩვენებია, რომ თუთიის და ნიკელის კომპლექსებში კრისტალურ მდგომარეობაში თიოციანატური ჯგუფები არსებობენ როგორც მონოდენტატურ მდგომარეობაში, აგრეთვე ასრულებენ ხიდურ ფუნქციას. სინთეზირებულ ნაერთებში  $\text{NCS}$ -ჯგუფები ცენტრალურ ატომთან კოორდინირებული არიან აზოტის ატომის საშუალებით.

კობალტის კოორდინაციულ ნაერთებში კრისტალურ მდგომარეობაში, გარდა ცეზიუმის და ამონიუმის მარილებისა, წარმოდგენილია ხიდური და იზოთიოციანატური ჯგუფები [33,34].

შესწავლილია კომპლექსური ნაერთის  $\text{CsZn}(\text{NCS})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  იწ სპექტრები წყალხსნარში. გამოვლენილია იზოთიოციანატური ჯგუფებისთვის დამახასიათებელი  $\nu(\text{CN})$  ზოლების ინტენსივობა.

კადმიუმის ტრითიოციანატური კომპლექსების აცეტონხსნარებში არ აღინიშნება ხიდური  $\text{SCN}$ -ჯგუფების არსებობა, ხოლო მონოდენტატური თიოციანატ-ჯგუფების კოორდინირება ლითონის ატომთან ხორციელდება როგორც აზოტის, ასევე გოგირდის ატომის საშუალებით.

სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), თუთიის და კადმიუმის (II) 56 ტეტრათიოციანატური კომპლექსური ნაერთი შედგენილობით  $\text{M}'_2\text{M}(\text{NCS})_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$  და  $\text{M}'\text{M}''\text{M}(\text{NCS})_4 \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , სადაც  $\text{M}'\text{M}''=\text{Na, K, Cs, } [\text{C}(\text{NH}_2)_3]$ ,



$1/2\text{Mg}$ ,  $1/2\text{Ca}$ ,  $1/2\text{Sr}$ ,  $1/2\text{Ba}$ , ხოლო  $n=0-8$ . შესწავლილია მათი იწ სპექტრები კრისტალურ მდგომარეობაში ( $400-4000 \text{ სმ}^{-1}$ ), აგრეთვე წყალხსნარში და მეთანოლ- და აცეტონხსნარებში ( $2000-2400 \text{ სმ}^{-1}$ ). განსაზღვრულია ნაპოვნი სიხშირეების მიკუთვნებები [33].

კრისტალურ მდგომარეობაში კობალტის, ნიკელის და თუთიის კომპლექსნაერთებში გვხვდება იზოთიოციანატური მონოდენტური ჯგუფები. ნიკელის კომპლექსებში ხიდური  $\text{SCN}$ -ჯგუფების არსებობა განისაზღვრება გარესფერული კათიონის ბუნებით. თუთიის კომპლექსებში ნატრიუმშემცველი კათიონებით შესაძლებელია გოგირდის ატომებით სუსტი კონტაქტების განხორციელება მეზობელი კომპლექსების თუთიის ატომებთან.

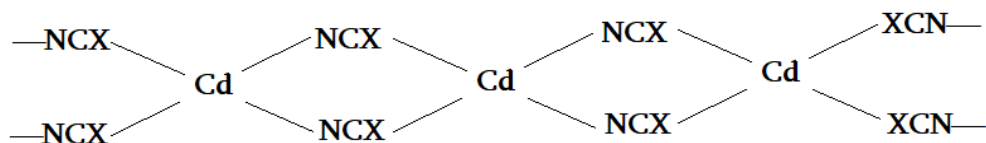
კადმიუმის ტეტრათიოციანატურ კომპლექსებში, გარდა გოგირდის ატომით კოორდინირებული თიოციანატური ჯგუფებისა, არსებობენ ფორმალური ხიდური ფუნქციის  $\text{SCN}$ -ჯგუფები, რომელთა მდგრადობა დამოკიდებულია გარესფერული კათიონის ბუნებაზე [33,35,36].

ტუტე ლითონების ტეტრათიოციონატოცინკატებში გვხვდება მონოდენტური იზოთიოციანატური ჯგუფები, ხოლო ანალოგიურ ტეტრათიოციონატოკადმატებში შესაძლებელია ხიდური  $\text{SCN}$ -ჯგუფების არსებობა.

შესწავლილია ნიკელის (II), თუთიის და კადმიუმის (II)  $66 \text{ ჰე}$ -სათიოციანატოკომპლექსის იწ სპექტრი შედგენილობით  $M'_4A \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $M'_2M''_2A \cdot n\text{H}_2\text{O}$ ,  $M'_3M''A \cdot n\text{H}_2\text{O}$ , ( $A = M(\text{NCS})_6^{-4}$ ), სადაც  $M'M'' = \text{Na}$ ,  $\text{R}$ ,  $\text{Cs}$ ,  $\text{NH}_4$ ,  $[\text{C}(\text{NH}_2)_3]$ ,  $1/2\text{Df}$ ,  $M = \text{Ni}$ ,  $\text{n}$ ,  $\text{Cd}$ ,  $n=0-6$ . იწ სპექტრების შესწავლა ხდებოდა კრისტალურ მდგომარეობაში  $400-4000 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო შესაბამისი კომპლექსების წყალხსნარების და მეთანოლ- და აცეტონხსნარების -  $2000-2400 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში. განსაზღვრულია ნაპოვნი სიხშირეების მიკუთვნებები. ნიკელის და თუთიის კომპლექსებში კრისტალურ მდგომარეობაში თიოციანატური ჯგუფების კოორდინირება ცენტრალურ ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით. კადმიუმის კომპლექსურ ნაერთებში, ცეზიუმის მარილების გარდა, თიოციანატური ჯგუფებს კოორდინირება ხორ-

ციელდება გოგირდის ატომის საშუალებით. ცეზიუმის შემცველ კომპლექსურ ნაერთებში თიოციანატური ჯგუფების ნაწილი კოორდინირებულია მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან აზოტის, ხოლო ნაწილი - გოგირდის ატომის საშუალებით.

შესწავლილია მანგანუმის (II), რკინის (II), კობალტის (II), ნიკელის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის 40 თიოციანატური კომპლექსური ნაერთის სპექტრი ორგანულ ლიგანდებთან  $\alpha$ - Dipy, Phen, FA, MFA, DMF, DMSO, Urt კრისტალური მდგომარეობაში  $400-4000 \text{ cm}^{-1}$  უბანში. გაკეთებულია რხევითი სიხშირეების მიკუთვნებები. ნაჩვენებია, რომ გარდა კადმიუმის კომპლექსებისა თიოციანატური ჯგუფების კოორდინირება ცენტრალურ ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო კადმიუმის (II) კომპლექსურ ნაერთებში SCN-ჯგუფები ასრულებენ ხიდურ ფუნქციას [33]:



ჩატარებულია კრისტალური ნივთიერების  $\text{Mn}(\text{NCS})_2 \cdot 4\text{Ur}$  რენტგენოსტრუქტურული კვლევა, სადაც Ur-კარბამიდი. კვლევებმა აჩვენა, რომ ცენტრალური ატომ-კომპლექსწარმომქმნელის - მანგანუმის ატომის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო ნაერთის სტრუქტურა შედგება მონომერული ნეიტრალური მოლკულებისგან  $[\text{Mn}(\text{NCS})_2 \cdot 4\text{Ur}]^0$ .

რაც შეეხება თიოციანატ-იონების კოორდინირებას ცენტრალურ ატომთან, კვლევების თანახმად ბმის  $\text{Mn---N}_{\text{NCS}}$  კუთხე შეადგენს  $\approx 180^\circ$ , ხოლო თიოციანატ-ჯგუფის კოორდინირება ცენტრალურ ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით.

წინა ნაერთისგან განსხვავებით, კრისტალური  $\text{Cd}(\text{NCS})_2 \cdot 2\text{Ur}$  (სადაც Ur-კარბამიდი) სტრუქტურის შესწავლამ აჩვენა, რომ თიოციანატ-იონები ასრულებენ ხიდურ ფუნქციას, რაც საშუალებას იძლევა კადმიუმის ატომ-

მებმა ერთმანეთთან წარმოქმნან უწყვეტი ჯაჭვი. კარბამიდის მოლეკულე-  
ბი ავსებენ პოლიედრს ოქტაედრამდე.

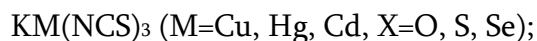
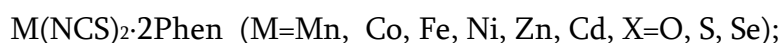
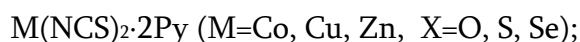
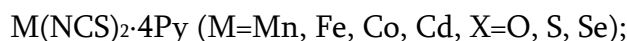
სინთეზირებული და შესწავლილია  $M(NCS)_{2 \cdot n}FA$  ტიპის კომპლ-  
ექსური ნაერთები, სადაც  $M=Mn, Co, Ni, Zn$ , ხოლო  $n=4$  და  $M=Cd$ , აგრეთვე  
 $M(NCX)_{2 \cdot n}L$ , სადაც  $M=Mn, Fe, Co, Ni, Zn$ , ხოლო  $n=4$  და  $M=Cd$ ,  $L=MFA,$   
 $DMF, X=S, Se$ .

თიოციანატური ჯგუფის კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით  
შესწავლილია  $M(NCX)_{2 \cdot n}FA$  ( $M=Mn, Co, Ni, Zn, X=S, Se$ ) შედგენილობის  
კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრები. გამოვლენილია აღნიშნული  
ჯგუფის ყველა დამახასიათებელი რხევითი სიხშირეები. კერძოდ,  $2070 \text{ სმ}^{-1}$   
უბანში გამოვლენილია  $\nu(CN)$  რხევითი სიხშირე, ხოლო  $780-790 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში  
-  $\nu(CS)$ , რაც მიუთითებს თიოციანატური ჯგუფის კოორდინირებაზე  
ცენტრალურ ატომ-კომპლექსწარმომქნელთან აზოტის ატომის საშუ-  
ალრბით.  $\nu(CX)$  რხევითი სიხშირეები თიოციანატო- და სელენოციან-  
ატოკომპლექსებში შესაბამისად გამოვლენილია  $790$  და  $610 \text{ სმ}^{-1}$ . კვლევის  
შედეგების საფუძველზე შეიძლება დავასკვნათ, რომ აღნიშნული ნაერთები  
წარმოადგენენ იზოთიო- და იზოსელენოციანატოკომპლექსებს. ანალოგიურ  
შედეგებს ვაკვირდებით N-მეთილფორმამიდის კომპლექსური ნაერთების  
შემთხვევაში.

$M(NCX)_{2 \cdot n}DMF$  ( $X=S, Se$ ) შედგენილობის დიმეთილფორმამიდური კო-  
მპლექსების იწ სპექტრების გამოკვლევების საფუძველზე დადგენილია,  
რომ NCX-ჯგუფები მანგანუმის (II), კობალტის (II) და ნიკელის (II) კოორ-  
დინაციულ ნაერთებში ცენტრალურ ატომთან კოორდინირებულები არიან  
აზოტის ატომის საშუალებით. თიოციანატოკომპლექსებში  $\nu(CN)$  რხევითი  
სიხშირეები გამოვლენილია  $2035-2102 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო  $\nu(CS)$  -  $790 \text{ სმ}^{-1}$   
უბანში. სინთეზირებულ ნაერთებში კარბონილის ჯგუფის  $\nu(CO)$  რხევითი  
სიხშირეები შემცირებულია  $\sim 1650 \text{ სმ}^{-1}$ -მდე, რაც მიუთითებს N,N-დიმე-  
თილფორმამიდის მოლეკულის კოორდინირებაზე კარბონილის ჯგუფის  
ჟანგბადის ატომის საშუალებით.

შესწავლილია  $M(NCX)_2 \cdot 4L$  ტიპის კომპლექსური ნაერთები, სადაც  $L=DMSO$ ,  $X=S, Se$ . მანგანუმის(II), კობალტის(II), ნიკელის(II) და თუთიის თიოციანატკომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრებში  $\nu(CN)$  რხევითი სიხშირეები გამოვლენილია  $2065-2100 \text{ cm}^{-1}$  უბანში, ხოლო  $\nu(CS)$  -  $795-855 \text{ cm}^{-1}$ . ამ მონაცემების მიხედვით  $NCX$ -ჯგუფების კოორდინირება ლითონ-კომპლექსწარმომქმნელთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით. იგივეს ადასტურებენ  $M(NCX)_2 \cdot 4DMSO$  მანგანუმის(II), რკინის(II), კობალტის(II), ნიკელის(II) და თუთიის, ხოლო  $X=S, Se$  ნაერთების რენტგენოგრაფული კვლევა [37].

ავტორის მიერ სინთეზირებულია და გამოკვლეულია შემდეგი ტიპის ნაერთები[38]:



შემუშავებულია იმ ტიპის კომპლექსური ნაერთების მეთოდის, რომლებიც ერთდროულად შეიცავენ თიოციანატ- და სელენციანატ-იონებს. გარდა აღნიშნული ლიგანდებისა სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთები შეიცავენ ორგანულ ლიგანდებს, როგორცაა 2,2'-დიპირიდინი ( $\alpha$ -Dipy), 1,10-ფენანტროლინი (Phen), ამიაკი, პირიდინი (Py), 2-ამინო-პირიდინი (Ampy), 4,4'-დიპირიდინი ( $\gamma$ -Dipy), ფორმამიდი (FA), მეთილფორმამიდი (MFA), დიმეთილფორმამიდი (DMF), დიმეთილსულფოქსიდი (DMSO), ბენზოილჰიდრაზინი (BH), უროტროპინი (Ur) და სხვა.

ჩატარებულია სინთეზირებული შერეულილიგანდიანი კომპლექსური ნაერთების რენტგენოსტრუქტურული, მაგნეტოქიმიური და სპექტრალური (ელექტრონული სპექტრების) კვლევები.

კვლევების შედეგად დადგენილია მრავალი ციანატური, თიოციანატური და სელენოციანატური ნაერთის იზოსტრუქტურულობა.

შესწავლილია  $M(NCS)_2 \cdot 2L$  ტიპის კომპლექსური ნაერთების აგებულება, სადაც  $M = Mn, Fe, Co, Ni$  და  $Zn$ ,  $L = \alpha\text{-Dipy, Phen}$ . კვლევებს შედეგად დადგენილია, რომ სინთეზირებულ ნაერთებს აქვთ ოქტაედრულ აგებულება.

ნაერთებში  $Ni(NCS)_2 \cdot 2Py$ ,  $Fe(NCS)_2 \cdot 2Py$ ,  $Co(NCS)_2 \cdot 2Py$  და ა.შ. SCN-ჯგუფები ერთმანეთის მიმართ იმყოფებიან ტრანს- მდგომარეობაში.

სინთეზირებული და შესწავლილია  $La, Ce, Pr, Nd, Sm$  და  $Gd$  თიოციანატური და სელენოციანატური 22 ნაერთი. იწ სპექტრალურმა და რემტგენოგრაფულმა კვლევის შედეგებმა აჩვენა, რომ ნაერთებში  $M'Ln(NCS)_4 \cdot 4C_2H_5OH$  ( $M' = K, Pb, Cs, Ln = Sm, Gd$ ),  $Sm(NCS)_3 \cdot 4C_4O_2H_8$  და  $Na_2Gd(NCS)_5 \cdot nC_2H_5OH$ , SCN-ჯგუფები კოორდინირდებიან აზოტის ატომის საშუალებით.

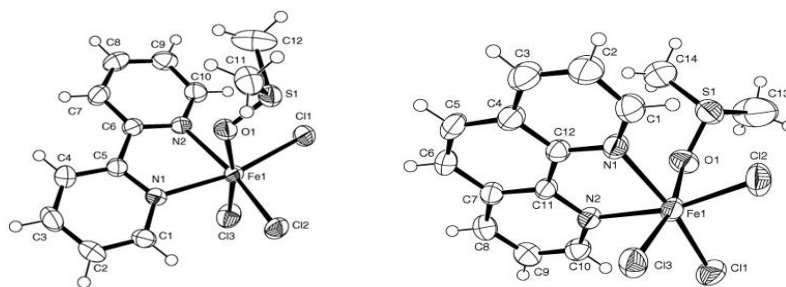
### 1.3. შერეულლიგანდიანი ჰომო და ჰეტერო ლითონური კოორდინაციული ნაერთები

ტექნოლოგიური პროგრესი წარმოუდგენელია ახალი თაობის ფუნქციონალური მასალების შექმნის გარეშე, რომლებიც მიიღება სინთეზირებული ქიმიური ნაერთების და მათი კომპოზიციების საფუძველზე. მრავალფეროვანი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების მქონე ნივთიერებების მისაღებად კარგ მასალას წარმოადგენენ ჰეტერობიმეტალური შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთები. ისინი შეგვიძლია განვიხილოთ ახალი კატალიზატორების, ანალიტიკური რეაგენტების, თერმომგრძობიარე პიგმენტების როგორც მოლეკულური და იონური წინამორბედები. ამ მხრივ საინტერესოა როგორც მონო-, ასევე ჰეტერობირთვული შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზის მეთოდის შექმნა და მათი თვისებების შემდგომი კვლევა.

სინთეზირებულია ნიკელის (II) და კობალტის (II) მონობირთვული, შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთები ტრიფენილფოსფინთან, N,N-დიმეთილფორმამიდთან (DMF) და დიმეთილსულფოქსიდთან (DMSO): Ni (PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>X<sub>2</sub> (სადაც, L - DMF ან DMSO, ხოლო X - Cl ან Br) და CoX<sub>2</sub>(PPh<sub>3</sub>)<sub>2</sub>L (სადაც, L - DMF ან DMSO, ხოლო X - Cl ან Br). მათი სინთეზი განხორციელდა ორი სხვადასხვა მეთოდით, ჩატარებულია სინთეზირებული ნაერთების ელემენტური ანალიზი, ჩატარებული იწ და ელექტრონული სპექტროსკოპული კვლევა, თერმოგრავიმეტრული ანალიზი, შესწავლილია მათი მაგნიტური თვისებები[39].

ავტორების მიერ სინთეზირებულია მონობირთვული შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთები [Fe(bipy)Cl<sub>4</sub>][bipy·H] (1) და [Fe(phen)Cl<sub>4</sub>][phen·H] (3) (სადაც, bipy - 2,2'-ბიპირიდინი, ხოლო phen - 1,10-ფენანტროლინი), ხოლო დიმეთილსულფოქსიდის და მეთანოლის ნარევიში წარმოიქმნება [Fe(bipy)Cl<sub>3</sub>(DMF)] (2) და [Fe(phen)Cl<sub>3</sub>(DMF)] (4) (სადაც, DMF – N,N-დიმეთილფორმამიდი)[40].

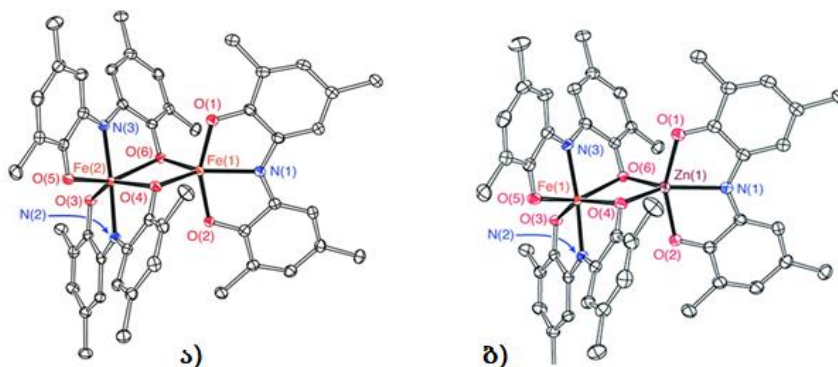
ჩატარებულია სინთეზირებული ნაერთების ელემენტური ანალიზი, ნაერთები შესწავლილია სპექტროსკოპული, რენტგენული დიფრაქციის და ЯМР სპექტროსკოპიის მეთოდებით.



მონობირთვული შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების [Fe(bipy)Cl<sub>4</sub>][bipy·H] (1) და [Fe(phen)Cl<sub>4</sub>][phen·H] (3) სტრუქტურები

Fe(ONO)<sub>2</sub>-ისფორმალური აღდგენა წარმოქმნის ლიგანდს, რომლის ელექტრონულ სტრუქტურას ყველაზე კარგად აღწერს ფორმულა [Fe<sup>II</sup>(ON-O<sup>δ-</sup>)(ONO<sup>δ+</sup>)]. ის შეიძლება გამოვიდეს მონოანონური ხელატური კომპლექსის როლში, რომლის საფუძველზეც წარმოიქმნება ახალი

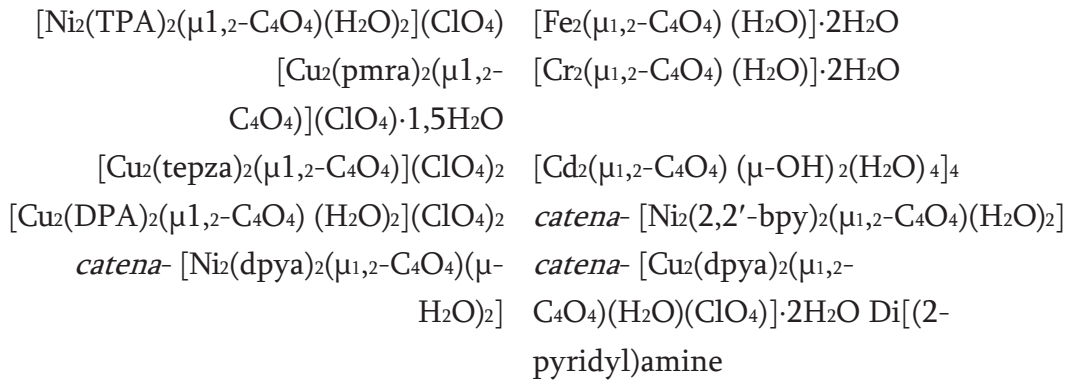
ბიმეტალური კომპლექსები საინტერესო ჟანგვა-აღდგენითი ან მაგნიტური თვისებებით.  $[Fe^{II}(ONO^{sq})(ONO^q)]$ -ანიონი კოორდინირებს მეორე მეტალთან ორი  $\mu^2$ -ფენოქსიდური ჟანგბადის ატომებისხარჯზე. რკინა-თუთიის კომპლექსის შედგენილობა ავტორებმა აღწერეს ფორმულით  $Fe^{II}(ONO^{sq})-(ONO^q)Zn^{II}(ONO^q)$  ძირითადიმდგომარეობით  $S = 3/2$ . სინთეზირებულია სხვადასხვა ვალენტობის რკინის იონის შემცველი ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთი  $Fe^{II}(ONO^{sq})(ONO^q)Fe^{III}(ONO^{sq})$ . კომპლექსში რკინის (II) და რკინის (III) იონებს ახასიათებთ სხვადასხვა გეომეტრიული კოორდინაცია, რაც საინტერესოს ხდის კომპლექს-ჟანგვა-აღდგენითი და მაგნიტური თვისებების შესწავლის თვალსაზრისით, ხოლო ამგვარი მოლეკულების ბუნება მოითხოვს მულტილითონური სისტემების სინთეზის ახალი სტრატეგიის შემუშავებას [41].



ა)  $Fe^{II}(ONO^{sq})(ONO^q)Fe^{III}(ONO^{sq})$  დაბ)  $Fe^{II}(ONO^{sq})(ONO^q)Zn^{II}(ONO^q)$   
მოლეკულებისსტრუქტურა

შესწავლილია ლიგანდების 3,4-დიჰიდროქსიცეკლობუტ-3-ენ-1,2-დიონატისდასკვარატ-დიანიონის  $C_4O_4^{2-}$  კომპლექსწარმოქმნის უნარილითონებთან ურთიერთქმედებისას. სინთეზირებულია მთელი რიგი პოლიბირთვული და პოლიმერული კოორდინაციული ნაერთები აღნიშნულ ლიგანდებთან. შესწავლილია  $Cu(II)$  და  $Ni(III)$  ხიდურ-სკვარატონაერთების მაგნიტური თვისებები [42].

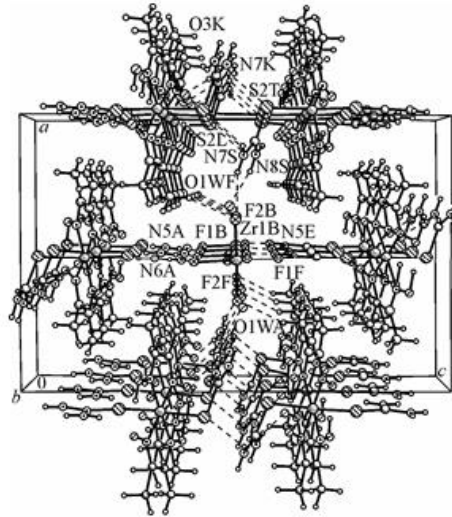




სადაც, TPA - *Tris* -[(2-პირიდილმეთილ)ამინი, pmra - *Bis*[2-(2-პირიდილმეთილ)]-(2-პირიდილმეთილ)ამინი, tepza - *Tris*[(2-ეთილ)-1-*H*-პირაზოლილ]ამინი, DPA - *Bis*[(2-პირიდილმეთილ)ამინი, SalNEt<sub>2</sub> - [N-(2-დიეთილამინო)-ეთილ] სალიცილდიამინი, 2,2'-bpy - *Bis*[(2-პირიდილ), dpya - დი[(2-პირიდილ)ამინი.

სინთეზირებულია  $[\text{Co}(\text{DH})_2(\text{Thio})_2]_2[\text{ZrF}_6]\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{NioxH})_2(\text{Thio})_2]_2[\text{ZrF}_6]3\text{H}_2\text{O}$ ,  $[\text{Co}(\text{DH})_2(\text{Anil})_2]_2[\text{ZrF}_6]2\text{H}_2\text{O}$  და  $[\text{Co}(\text{NioxH})_2(\text{Anil})_2]_2[\text{ZrF}_6]3\text{H}_2\text{O}$  ტიპის ნაერთების, სადაც DH - დიმეთილგლიოქსიმის მონოანიონი, Thio - თიოშარდოვანა, NioxH - 1,2-ციკლოჰექსანდიონდიოქსიმის მონოანიონი, Anil - ანილინი. კომპლექსები შედგებიან კრისტოლოგრაფიულად დამოუკიდებელი კომპლექსური კათიონებისა და ანიონებისგან, ხოლო წყალბადური ბმები  $[\text{ZrF}_6]^{2-}$  ანიონის ფტორიდ-იონთან ახორციელებენ სტრუქტურის ფორმირებას [43,44].

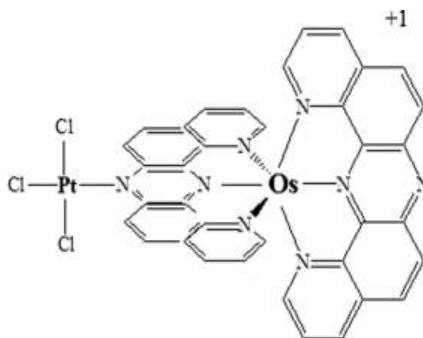




**კომპლექსური ნაერთის  $[Co(DH)_2(Thio)_2][ZrF_6] \cdot H_2O$  კრისტალური  
სტრუქტურა  $[010]$  მიმართულების გასწვრივ**

სინთეზირებულია ორი ახალი ბიმეტალური კომპლექსი  $[(Cl)_3Pt(dpop-M(dpop))](PF_6)$ , სადაც სტრუქტურული ლიგანდი  $dpop'$  - დიპირიდო (2,3- $\alpha:3',2'$ -)ფენაზინი,  $M = Ru(II)$  და  $Os(II)$ . პირველად იქნა გამოყენებული  $dpop'$  ხიდური ლიგანდის როლში (BL) მონოდემტატური კოორდინაციით Pt(II) მიმართ და ტრიდენტატური კოორდინაციით Ru(II) და Os(II) მიმართ. შთანქმის ელექტრონული სპექტრები ახასახვენ გადასვლას Ru(II) and Os(II) ( $d\pi \rightarrow dpop'(\pi^*)$ ) (BL) MLCT, გადასაცვლება ხდება უმცირესი ენერჯის მხარეს  $dpop'(\pi^*)$  ხიდური აქცეპტორული ორბიტალების სტაბილიზაციის ხარჯზე [45].

$Dpop'$  პირველად იქნა გამოყენებული ხიდური ლიგანდის სახით. სინთეზირებულია ორი ახალი კომპლექსური ნაერთი  $[(Cl)_3Pt(dpop')Os(dpop')](PF_6)$  და  $[(Cl)_3Pt(dpop')Ru(dpop')](PF_6)$  ტრიდენტატური კოორდინაციით Os(II) მიმართ და მონოდემტატური კოორდინაციით Pt(II) მიმართ. შესწავლილია მათი ელექტრონული, ატომურ-აბსორბციული და ЯMP სპექტრები.



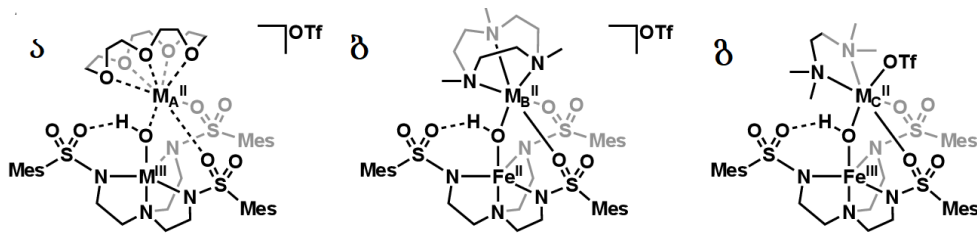
### კომპლექსური ნაერთის $[(Cl)_3Pt(dpop')Os(dpop')](PF_6)$ სტრუქტურა

ავტორების მიერ ლიგანდად შერჩეულია სულფონამიდო-ლიგანდი  $N,N',N - 2,2',2''$  - ნიტრილოტრის (ეთან - 2,1 - დიილ) ტრის( 2,4,6 - ტრი- მეთილბენზოსულფონამიდი) ( $[MST]^{3-}$ ). სულფონამიდო O-ატომები შეიძლება გამოვიდნენ ლითონების შემაკავშირებელ მეორეულ ცენტრებად, რაც იძლევა დისკრეტული ბიმეტალური კომპლექსების მიღების საშუალებას  $[MST]^{3-}$ -თან [46] .

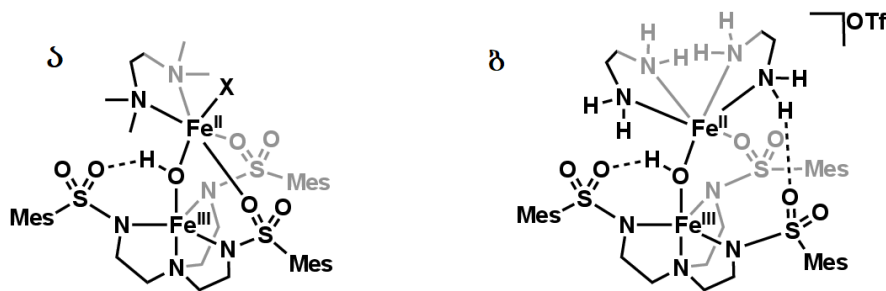
ბიმეტალური კომპლექსების მიღება ხდებოდა  $[MST]^{3-}$ -ს შემცველი მონოლითონური კომპლექსური ნაერთების დამუშავებით მეორე მარილის ხსნარის და მეორე პოლიდენტატური ლიგანდით. მეორე ლიგანდი საჭიროა ლითონური ცენტრების „ჩასაკეტად“, რასაც მივყავართ დისკრეტულ ბიმეტალური კომპლექსების წარმომქნამდე.

სინთეზირებულია მთელი რიგი  $Fe(II)(OH)Fe(III)$ ,  $Co(II)(OH)Fe(III)$  и  $Ni(II)(OH) Fe(III)$  ბირთვების შემცველი ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები ბიდენტატური ლიგანდის - ტეტრამეთილეთილენდიამინის (TMEDA).

ბიდენტატური ლიგანდი TMEDA შესაძლებლობას აძლევს გარე სფეროში მყოფ ტრიფტორმეთანსულფონატს (OTf), გახდეს შიგა სფერული და დაიკავოს მეორე ლითონური ცენტრის მეექვსე საკოორდინაციო სფერო. სისტემაში  $Fe(II)(OH)Fe(III)$  OTf-ლიგანდი შეიძლება უშუალოდ ჩანაცვლებული იყოს იზოთიოციანატ-იონით ( $NCS^-$ ) ან აზიდური ( $N^3^-$ ) ლიგანდებით.



[MST]<sup>3-</sup>-თან ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურები



TMEDA-თან ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურები

სინთეზირებულია ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები N,N,N',N'-ტეტრამეთილეთან-1,2-დიამინთან (TMEDA) და N, N', N'' - [2,2', 2'' - ნიტრილოტრის (-2,1-დიილ)] ტრის (2,4,6- ტრიმეთილბენზოლსულფონამიდთან) ([MST]<sup>3-</sup>).

აგრეთვე სინთეზირებულია ორი ჰეტერობიმეტალური კომპლექსური ნაერთი შედგენილობით (TMEDA)M(II)(OTf)-(μ-OH)-Fe(III)MST, სადაც M(II) = Co(II) ან Ni(II), OTf - ტრიფტორმეთანსულფონატი.

ყველა ნაერთი ხასიათდება მსგავსი სპექტროსკოპული და სტრუქტურული თვისებებით.

დიირონის ნაერთები ამჟღავნებენ ელექტრონული სპექტრების პარამაგნიტური რეზონანს რაც სავარაუდოა მაღალსპინური Fe(II) და Fe(III) ცენტრებისთვის ანტიფერომაგნიტური კავშირებით.

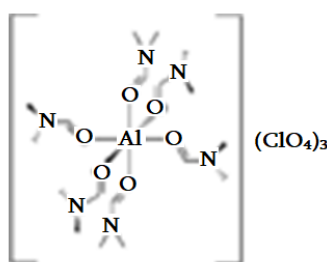
ამ სისტემის მოდულაციის უნარი მჟღავნდება TMEDA ლიგანდის ჩანაცვლებით ეთილენდიამინით (en); en-ის ორი ექვივალენტი კოორდინირდება Fe(II) ცენტრთან [(en)<sub>2</sub>Fe(II)-(μ-OH)-Fe(III)MST]OTf წარმოქმნით. კვლევის შედეგები აჩვენებენ, რომ შემუშავებულია მოდულური

სისტემა, რომელშიც შესაძლებელია საკვანძო კომპონენტების მოდიფიცირება [47].

#### 1.4. შერეულიგანდიანი კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან

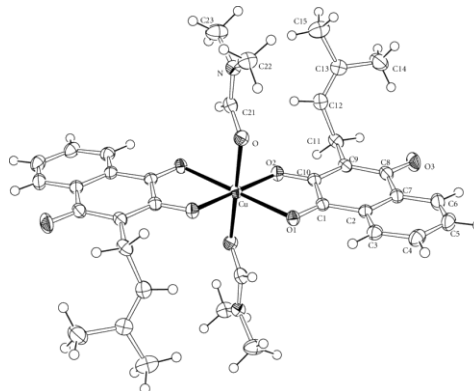
სინთეზირებულია ალუმინის ტრიპერქლორატის კომპლექსნაერთი N,N-დიმეთილფორმამიდთან  $[Al\{(CH_3)_2NCHO\}_6](ClO_4)_3$  [48].

ნაერთს აქვს ოქტაედრული საკოორდინაციო სტრუქტურა სიმეტრიის ცენტრით ალუმინის იონზე  $Al^{3+}$ . N,N-დიმეთილფორმამიდის კოორდინაცია ალუმინის იონთან ხორციელდება კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომით გაუწყვილებელი  $sp^2$  წყვილის მიმართულებით. იმის მიუხედავად, რომ ალუმინის გარემოცვა შეადგენს ექვს ბრტყელ ლიგანდს, მნიშვნელოვანი სტერიული წინააღობები არ აღინიშნება. კოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის შედამოლეკულური ბმების სიგრძეები მნიშვნელოვნად განსხვავდებიან არაკოორდინირებული არაკოორდინირებული მოლეკულის შესაბამისი ბმების სიგრძეებისგან.

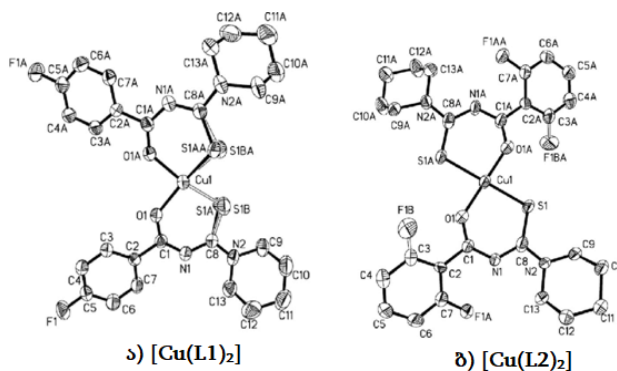


კომპლექსის  $[Al\{(CH_3)_2NCHO\}_6](ClO_4)_3$  სტრუქტურა

სინთეზირებულია სპილენძის (II) კოორდინაციული ნაერთები N-4-ფტორბენზოილპიპერიდინ-1-კარბოიმიდატთან ( $L_1$ ), N-2-ფტორბენზოილპიპერიდინ-დინ-1-კარბოთიოიმიდატთან ( $L_2$ ), 2-ფტორბენზოატთან ( $L_3$ ) და N,N-დიმეთილფორმამიდთან (DMF). სინთეზირებული ნაერთები შესწავლილია იწ, ულტრაიისფერი და ფლუორესცენტული სპექტროსკოპული კვლევის მეთოდით. დადგენილია ნაერთების  $[Cu(L_1)_2]$ ,  $[Cu(L_2)_2]$  და  $[Cu_2(L_3)_4(DMF)_2]$  კრისტალური სტრუქტურა.



კომპლექსური ნაერთის  $[Cu_2(L3)_4(DMF)_2]$  სტრუქტურა, სადაც (L3) - 2-ფტორბენზოატი



ა)  $[Cu(L1)_2]$

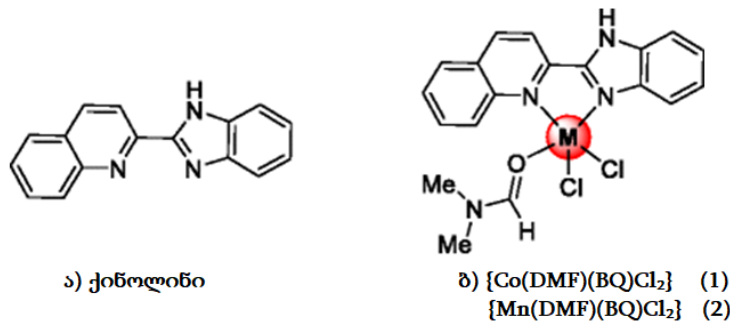
ბ)  $[Cu(L2)_2]$

კომპლექსური ნაერთების  $[Cu(L1)_2]$ ,  $[Cu(L2)_2]$  სტრუქტურები, სადაც (L1) - N-4-ფტორბენზოილპიპერიდინ-1-კარბოიმიდატი, (L2) - N-2-ფტორბენზოილპიპერიდინ-დინ-1-კარბოთიოიმიდი

განსაზღვრული სინთეზირებული ნაერთების ანტიბაქტერიული აქტივობა ბაქტერიების *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, *Bacillus subtilis*, *Pseudomonas aeruginosa* და *Shewanella* sp., აგრეთვე სოკოების *Botrytis cinerea*, *Trichoderma* spp., *Myrothecium* და *Verticillium* spp. მიმართ. კვლევებმა აჩვენა, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებს ახასიათებთ მაღალი ანტიბაქტერიული და სოკოს საწინააღმდეგო აქტივობა ვიდრე შესაბამის ლიგანდებს [49].

სინთეზირებულია კობალტის (II) და მანგანუმის (II) კოორდინაციული ნაერთები 2-(1H-ბენზო[d]იმიდაზოლ-2-ილ) ქინოლინთან (BQ) და N,N-დიმეთილფორმამიდთან  $\{Co(DMF)(BQ)Cl_2\}$  და  $\{Mn(DMF)(BQ)Cl_2\}$  [50].

კობალტის და მანგანუმის ავლენენ ტროგინალურ ბიპირამიდალურ კოორდინაციას. ნაერთების კვლევები მიუთითებენ წყალბადური ბმების არსებობაზე N – H... Cl, C – H ... Cl და შიდამოლეკულურ ურთიერთქმედებებზე C – H ... O. განსაზღვრულია სტრუქტურის პარამეტრები, რომლებიც სრულ თანხვედრაშია ექსპერიმენტალურად განსაზღვრულ პარამეტრებთან. თეორიულად განსაზღვრულია კომპლექსების ზღვრული მოლეკულური ორბიტალები (HOMO – LUMO) და მათი ენერგია მიუთითებს მუხტის შიდამოლეკულურ გადატანაზე და მოლეკულაში ელექტრონული სიმკვრივის დელოკალიზაციაზე.



ქინოლინის (ა) და სინთეზირებული კობალტის (II) და მანგანუმის (II) კოორდინაციული ნაერთები 2-(1H-ბენზო[d]იმिდაზოლ-2-ილ) ქინოლინთან (BQ) და N,N-დიმეთილფორმამიდთან  $\{Co(DMF)(BQ)Cl_2\}$  (1) და  $\{Mn(DMF)(BQ)Cl_2\}$  (2)

## 1.5. თიოციანატური ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები

ავტორების მიერ სინთეზირებულია ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები, რომელთა შედგენილობაში შედის ბენზჰიდრაზიდი. აღწერილია DMF და DMSO-ში ხსნადი  $MHg(HL)_2(SCN)_4$  შედგენილობის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები ტეტრაციანომერკურატ-იონთან, სადაც HL - ბენზჰიდრაზიდია, M – Cu(II), Zn, Co(II), Ni(II) [51].

მიღებულია ბემზჰიდრაზიდის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები ნიკელის და კობალტის ტეტრაციანოარგენტატებთან:  $Ni[Ag(SCN)_2]_2 \cdot HL$  და  $Co[Ag(SCN)_2]_2 \cdot HL$ , სადაც HL - ბენზჰიდრაზიდია. დადგენილია, რომ

სინთეზირებულ ნაერთებს აქვთ პოლიმერული სტრუქტურა SCN-იონების ხიდური ფუნქციის გამო[52 - 54].

ბენზჰიდრაზიდთან ნიკელის და კობალტის ანალოგიური ნაერთები აგრეთვე მიღებულია ტეტრაციანოკუპრატებთან (I) [55].

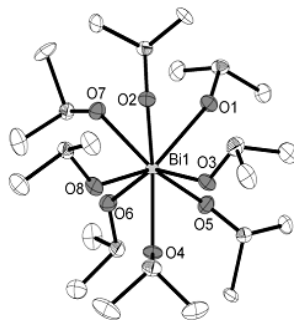
სინთეზირებულია იონური ტიპის ბიმეტალური შერეულიგანდიანი კომპლექსური ნაერთი შედგენილობით  $[Bi(DMSO)_8][Fe(NCS)_6]$ , სადაც DMSO - დიმეთილსულფოქსიდი[56].

$[Fe(NCS)_6]^{3-}$ -იონის შემცველი ნაერთების აგებულება ნაკლებად არის შესწავლილი. სტრუქტურული მონაცემების კემბრიჯის ბაზაში მოყვანილია ამ იონის შემცველი მხოლოდ რვა ნაერთის სტრუქტურული მახასიათებელი, ხოლო შესაბამისი ბიმეტალური ნაერთები ცნობილი არ არის [57].

ავტორების მიერ შესწავლილია ახალი ნაერთის - ბისმუტი (III) ოქტადიმეთილსულფოქსიდის ჰექსაიზოციანატოფერრატის (III) სტრუქტურა[58,59].

სინთეზირებული ნაერთი მურა-წითელი ფერის კრისტალური ნივთიერებაა, ჰაერზე მგრადი, წყალთან ხანგრძლივი კონტაქტისას იშლება.

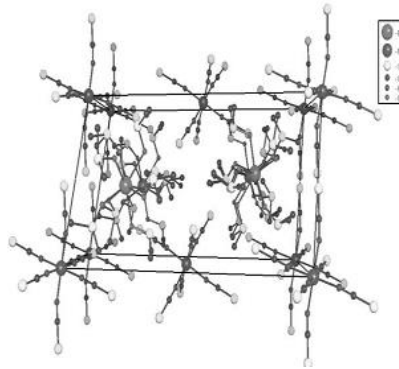
რენტგენოსტრუქტურული კვლევების თანახმად კომპლექსური ნაერთი წარმოადგენს იონური ტიპის ნაერთს, რომელიც შედგება  $[Bi(DMSO)_8]^{3+}$  კათიონისგან და  $[Fe(NCS)_6]^{3-}$  ანიონისგან:



კათიონის  $[Bi(DMSO)_8]^{3+}$  სტრუქტურა

ელემენტარული უჯრედი შეიცავს კრისტალოგრაფიულად დამოუკიდებელ კათიონს და ორ ანიონს. ბისმუტის ატომი კათიონში კოორდი-

ნირებულია დიმეთილსულფოქსიდის რვა მოლეკულასთან. Bi – O ბმის სიგრძე შეადგენს 2.368 – 2.582 Å.



**კომპლექსური ნაერთის [Bi(DMSO)<sub>8</sub>][Fe(NCS)<sub>6</sub>] კრისტალური სტრუქტურა**

[Fe(NCS)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>-ანიონს ოქტაედრული აგებულება აქვს. რკინის იონი კომპლექსურ ანიონში კოორდინირებულია ექვს იზოთიოციანატ-იონთან. მანძილი ატომებს შორის Fe-N შეადგენს 2.059 – 2.068 Å. მონაცემები სრულ თანხვედრაშია სტრუქტურული მონაცემების კემბრიჯის ბაზაში დაცულ მონაცემებთან [60,61].

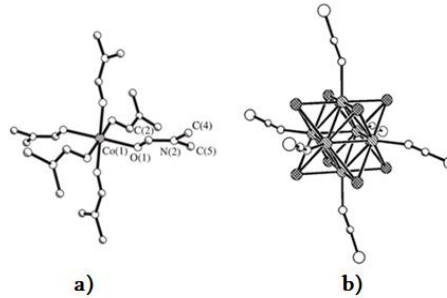
წყალხსნარებიდან სინთეზირებულია ბიმეტალური შერეულილიგანდიანი [MHg(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>ON<sub>2</sub>)<sub>2</sub>(SCN)<sub>4</sub>], ტიპის კომპლექსური ნაერთები, სადაც M<sup>2+</sup> = Co (I), Ni (II), Cu (III), ხოლო C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>ON<sub>2</sub> - ნიკოტინამიდი (NA) [62]. ვინაიდან ნიკოტინამიდი შეიძლება იყოს როგორც ხიდური, აგრეთვე ბიდენტატური ლიგანდი, ხოლო თიოციანატ-იონი ანბიდენტატური, კომპლექსების სტრუქტურა შეიძლება იყოს როგორც პოლიმერული, აგრეთვე მოლეკულური. კრისტალებს გააჩნიათ მონოკლინური სტრუქტურა.

სინთეზირებული ნაერთების რენტგენოგრამების შედარებამ აჩვენა [CoHg(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(SCN)<sub>4</sub>] და [NiHg(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(SCN)<sub>4</sub>] სტრუქტურული ფაზების მსგავსება.

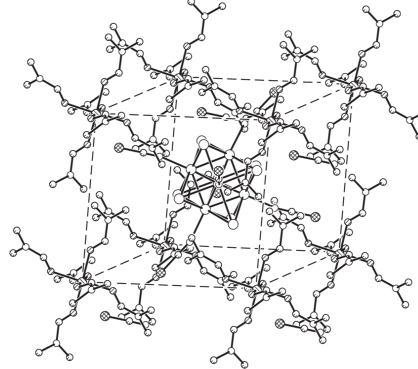
სინთეზირებულია [M(DMF)<sub>6</sub>][Mo<sub>6</sub>Br<sub>8</sub>(NCS)<sub>6</sub>], ტიპის კომპლექსური ნაერთების მთელი რიგი, სადაც DMF – N,N-დიმეთილფორმამიდი, M= Mn<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup>, Ni<sup>2+</sup>, Cu<sup>2+</sup> და Cd<sup>2+</sup>). ჩატარებული სინთეზირებული ნაერთების რენტგენისტრუქტურული ანალიზი რომლის თანახმადაც კობალტის (II) და მანგანუმის (II) თიოციანატურ კომპლექსებში NCS<sup>-</sup> ჯგუფის კოორდინირება



ლითონის ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით, ანუ სინთეზირებული კომპლექსები იზოსტრუქტურული არიან. სინთეზირებული ნაერთების იწ სპექტრების მონაცემები სრულ თანხვედრაშუა რენტგენული დიფრაქციის მონაცემებდან. კომპლექსების გახურებისას თავდაპირველად ხდება DMF მოლეკულების მოხლეჩვა  $MMo_6Br_8(NCS)_6$  შედგენილობის მარილის წარმოქმნით[63]:



$[Co(DMF)_6]^{2+}$  კომპლექსური კათიონის (a) და  $[Mo_6Br_8(NCS)_6]^{2-}$  კომპლექსური ანიონის (b) სტრუქტურები

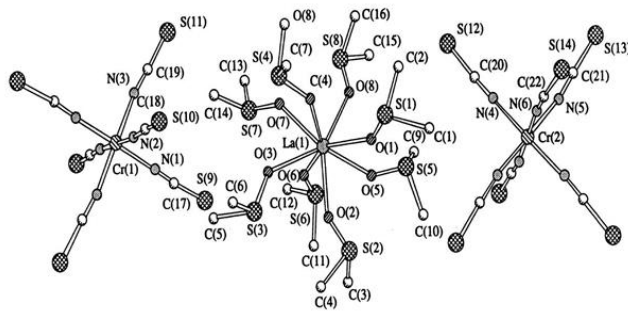


$[Co(DMF)_6][Mo_6Br_8(NCS)_6]$  კრისტალის სტრუქტურა

ავტორების მიერ სინთეზირებულია და შესწავლილია ნეოდიუმის და ერბიუმის ჰექსაიზოთიოციანატოქრომატის(III) კოორდინაციული ნაერთები  $\epsilon$ -კაპროლაქტამთან  $[Lu(\epsilon C_6H_{11}NO)_4(H_2O)_4][Cr(NCS)_6]$ , შესწავლილია სინთეზირებული ბიმეტალური შერეულიგანდიანი ნაერთების ფიზიკო-ქიმიური თვისებები [64 - 67]. ჩატარებულია სინთეზირებული ნაერთების რენტგენოსტრუქტურული გამოკვლევა. დადგენილია რომ ლანდანოიდის (III) შიგა საკოორდინაციო სფერო შეიცავს მხოლოდ  $\epsilon$ -კაპროლაქტამის მოლეკულებს.

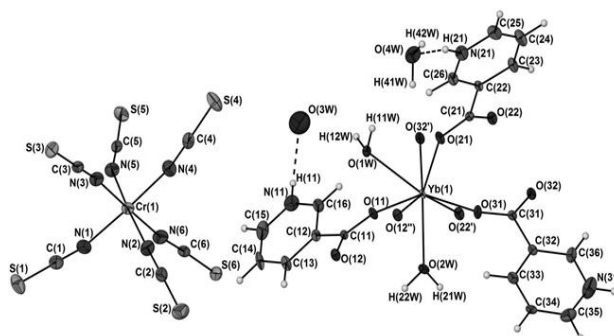
სინთეზირებულია ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები შედგენილობით  $[LnL_8][Cr(NCS)_6]$  (L = დიმეთილსულფოქსიდი,  $\epsilon$ -კაპროლაქტამი, Ln

= La<sup>3+</sup>, Ce<sup>3+</sup>, Pr<sup>3+</sup>, Nd<sup>3+</sup>, Sm<sup>3+</sup>, Eu<sup>3+</sup>, Gd<sup>3+</sup>, Tb<sup>3+</sup>, Dy<sup>3+</sup>, Ho<sup>3+</sup>, Er<sup>3+</sup>, Tm<sup>3+</sup>, Yb<sup>3+</sup>, Lu<sup>3+</sup>, Y<sup>3+</sup>), [LuL<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>][Cr(NCS)<sub>6</sub>] (L = ε-კაპროლაქტამი), [LnL<sub>8</sub>][HgI<sub>4</sub>] (Ln = La<sup>3+</sup>, Ce<sup>3+</sup>, Pr<sup>3+</sup>, Nd<sup>3+</sup>, Sm<sup>3+</sup>, L = εKΠΛ), [La(L)<sub>9</sub>][(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(NCS)<sub>4</sub>]<sub>3</sub>·4L, (L – DMCO, DMΦA), [In(DMCO)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>][(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(NCS)<sub>4</sub>], [Me(KΠΛ)<sub>4</sub>(NCS)<sub>2</sub>], (Me – Mn(II), Co(II), Ni(II), კაპროლაქტამი – C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>NO). დადგენილია სინთეზირებული ნაერთების შედგენილობა. ლანთანის კოორდინაციული პოლიედრი წარმოადგენს კვადრატულ ანტიპრიზმას, ხოლო ქრომს ოქტაედრული გარემოცვა აქვს. სინთეზირებული ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთების თერმოლიზისას წარმოიქმნება ნანოფხვნილები, ამრიგად ნაერთები შეიძლება განხილულ იქნან როგორც პრეკურსორები მაღალდისპერსიული სისტემების შესაქმნელად [68-70].

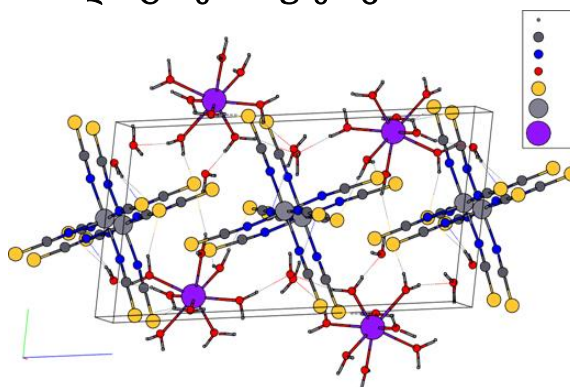


#### კომპლექსური ნაერთის [La(DMCO)<sub>8</sub>][Cr(NCS)<sub>6</sub>] აღნაგობა და ატომების ნუმერაცია

ინერტული ანიონების, ლითონთა მარილების წყალხსნარების, ინერტული ანიონების [Cr(NCS)<sub>6</sub>]<sup>3-</sup>, [HgI<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>, [Cr(NH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(NCS)<sub>4</sub>], [Hg(SCN)<sub>4</sub>]<sup>2-</sup>, [CoCl<sub>4</sub>]<sup>2-</sup> და ორგანული ლიგანდების შერევით (თანაური პროდუქტების თავიდან აცილების მიზნით pH=4-6) სინთეზირებულია ორმაგი კომპლექსური ნაერთები. Ln(NO<sub>3</sub>)<sub>3</sub>·6H<sub>2</sub>O (Ln=Er,Lu), K<sub>3</sub>[Cr(NCS)<sub>6</sub>]·4H<sub>2</sub>O და 8-ოქსიქინოლინის (C<sub>9</sub>H<sub>7</sub>NO) წყალხსნარების ურთიერთქმედებისას მიღებულია ახალი კომპლექსი შედგენილობით [Ln(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>][Cr(NCS)<sub>6</sub>]·5H<sub>2</sub>O. ქიმიური ანალიზის საშუალებით დადგენილია სინთეზირებული ნაერთების შედგენილობა.

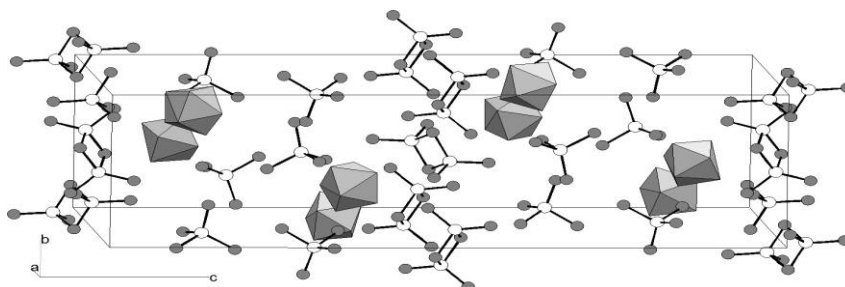


კომპლექსური ნაერთის  $[Yb(C_5H_5NCOO)_3(H_2O)_2][Cr(NCS)_6] \cdot 2H_2O$  აღნაგობა და ატომების ნუმერაცია



კომპლექსური ნაერთის  $[Lu(H_2O)_8][Cr(NCS)_6] \cdot 5H_2O$  კრისტალური აგებულება

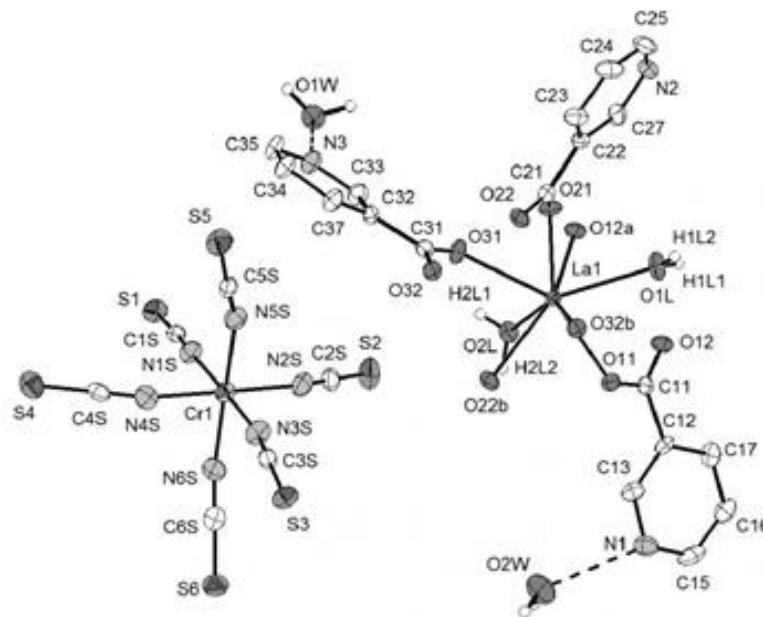
სინთეზირებული ნაერთების თერმული ანალიზისას დადგენილია, რომ იონური ტიპის ორმაგი კომპლექსურ ნაერთებს ახასიათებთ შექცევადი თერმომგრძობელი თვისებები: გაცხელებისას გარკვეულ ტემპურატურამდე ისინი იცვლიან შეფერილობას, ხოლო გაცივებისას იბრუნებენ პირვანდელ შეფერილობას. პოლიმერული ტიპის ნაერთებს ამგვარი თვისებები არ ახასიათებთ. თერმომგრძობიარე პიგმენტები ასრულებენ ქიმიურ სენსორების ფუნქციას თერმოინდიკატორულ ხელსაწყოებში [71].



კომპლექსური ნაერთის  $[La(C_7H_{11}NO)_7(H_2O)_2][Hg_2I_4]_2[Hg_2I_6]$  კრისტალური აგებულება

სისტემაში  $\text{Ln}(\text{NO}_3)_3 - \text{K}_3[\text{Cr}(\text{NCS})_6] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$  ურთიერთქმედებით სინთეზირებულია  $[\text{Ln}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NCOO})_3 (\text{H}_2\text{O})_2][\text{Cr}(\text{NCS})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Ln}=\text{La, Md, N}=1, 2$ ) ტიპის კომპლექსური ნაერთები, შესწავლილია ლითონების კომპლექსწარმოქმნის უნარიანობა ორგანულ ლიგანდებთან და ჰექსა(იზოთიოციანატო)ქრომატ (III) და ტეტრა(იზოთიოციანატო)დიამინქრომატ (III)-იონებთან.

ნაერთის  $[\text{Ln}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NCOO})_3(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Cr}(\text{NCS})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  ( $\text{Ln}=\text{La, Nd, N}=1, 2$ ) კრისტალურ სტრუქტურაში კათიონს აქვს ჯაჭვური პოლიმერული აგებულება ნიკოტინმჟავას ბიდენტატურ-ხიდური ფუნქციის გამო. მოლეკულთაშორისი და შიგამოლეკულური წყალბადური ბმები აერთიანებენ პოლიმერულ კათიონს, ანიონს  $[\text{Cr}(\text{NCS})_6]^{3-}$  და წყლის სოლვატურ მოლეკულებს სამგანზომილებიან სისტემად [72].



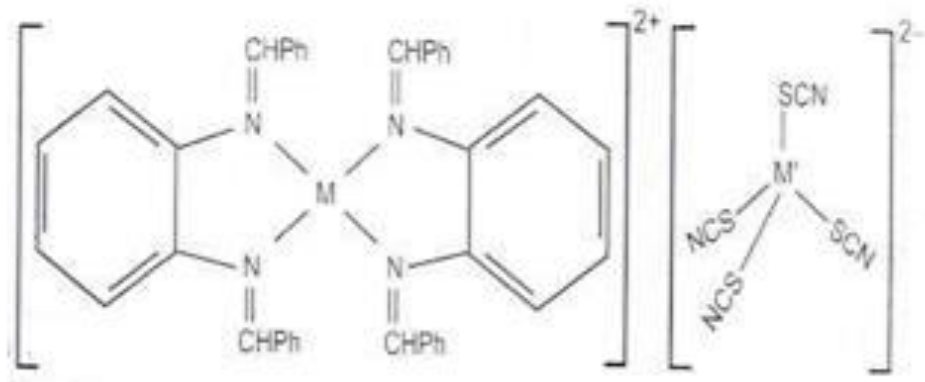
კომპლექსური ნაერთის  $[\text{Ln}(\text{C}_6\text{H}_5\text{NCOO})_3 (\text{H}_2\text{O})_2][\text{Cr}(\text{NCS})_6] \cdot n\text{H}_2\text{O}$  დამოუკიდებელი ნაწილი და ნუმერაციის სქემა სტრუქტურაში. წყალბადური ბმები N-H...O(H<sub>2</sub>) ნაჩვენებია პუნქტორით

სინთეზირებულია Co (II), Cd (II) და Hg (II) ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები შიფის ფუძესთან - N, N', - ბის(ბენზილიდენ -1,2 - ფენილენდიამინთან (BENDAMB 1,2): $[(\text{BENDAMB}(1,2)_2\text{Co}(\text{NCS})_2\text{Cd}(\text{SCN})_2]$ ,  $[(\text{BENDAMB}(1,2)_2\text{Co}(\text{NCS})_2\text{Hg}(\text{SCN})_2]$ ,  $[(\text{BENDAMB}(1,2)_2\text{Cd}(\text{NCS})_2\text{Hg}(\text{SCN})_2]$ . ელემენტური ანალიზით დადგენილია სინთეზირებული ნაერთების შედგენილობა, განსაზღვრულია მოლეკური ელ.გამტარობა, მაგნიტური მომენტი,

ჩატარებულია იწ, ელექტრონული და ЯМР სპექტრული ანალიზი. შესწავლილია თიოციანატური ლიგანდის შემაკავშირებელი ფუნქცია.

იწ, ელექტრონული და ЯМР სპექტრების შესწავლის საფუძველზე ავტორები ვარაუდობენ, რომ სინთეზირებულ კომპლექსურ ნაერთებს აქვთ კათიონურ-ანიონური სტრუქტურა, რომელშიც საბაზო შიფის ლიგანდი დაკავშირებულია შედარებით ხისტ ლითონთან რასაც მიყვავართ ხისტ ურთიერთობასთან.

შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების ანტომიკრობული და სოკოს საწინააღმდეგო აქტივობა. დადგენილია, რომ სინთეზირებული კომპლექსური აქტივობა მაღალია შესაბამისი შიფის ფუძის, ლიგანდთან - BENDAMB 1,2 შედარებით [73].



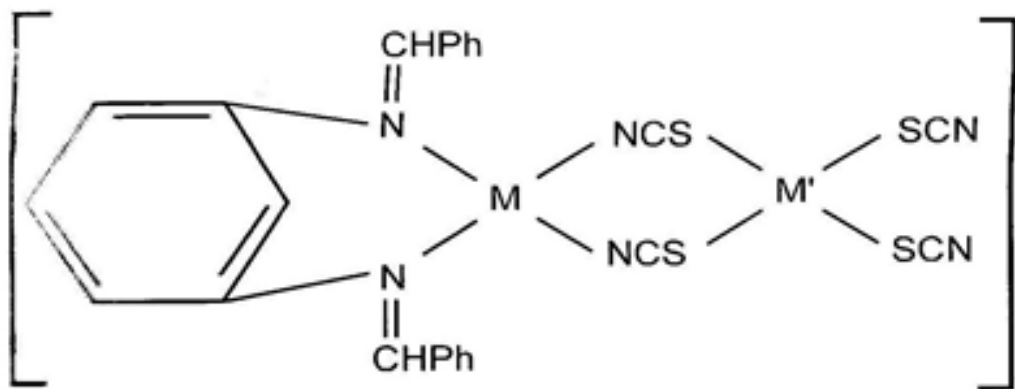
$[(\text{BENDAMB}(1,2))_2\text{M}(\text{NCS})_2\text{M}'(\text{SCN})_2]$  ტიპის კომპლექსური ნაერთის სტრუქტურა, სადაც  $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Ni}^{2+}, \text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{M}' = \text{Cd}^{2+}, \text{Hg}^{2+}$

სინთეზირებულია Co (II), Cd (II) და Hg (II) ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები შიფის ფუძესთან - N, N', - ბის (ბენზილიდენ) -1, 3 - ფენილენდიამინთან (BENDAMB 1,3). ელემენტური ანალიზით დადგენილია სინთეზირებული ნაერთების შედგენილობა, განსაზღვრულია მოლური ელ.გამტარობა, მაგნიტური მომენტი, ჩატარებულია იწ, ელექტრონული და ЯМР სპექტრული ანალიზი. შესწავლილია თიოციანატური ლიგანდის შემაკავშირებელი ფუნქცია.

იწ, ელექტრონული და ЯМР სპექტრების შესწავლის საფუძველზე ავტორები ვარაუდობენ, რომ სინთეზირებულ კომპლექსურ ნაერთებში

შიფის ლიგანდი დაკავშირებულია ხისტ ლითონთან  $\text{Co}^{2+}$ , ხოლო თიოციანატ-იონები  $\text{SCN}^-$  ასრულებენ ხიდურ ფუნქციას ლითონებს შორის. მაგნიტური ამთვისებლობის განსაზღვრა მიანიშნებს ტეტრაედრულ გეომეტრიაზე კობალტის იონის გარშემო. ხისტი-რბილი პარამეტრები სინთეზირებულია კომპლექსებისთვის ითვალისწინებენ მონომერულ ხიდურ სტრუქტურას.

შესწავლილია სინთეზირებული ნაერთების ანტომიკრობული და სოკოს საწინააღმდეგო აქტივობა. დადგენილია, რომ სინთეზირებული კომპლექსური აქტივობა მაღალია საწყის ლიგანდთან - BENDAMB 1,3 შედარებით [74].

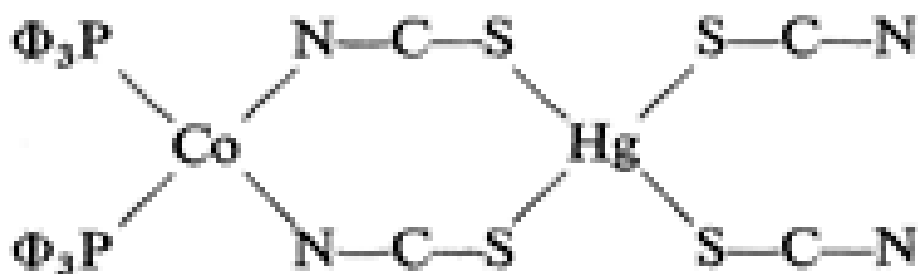


$[(\text{BENDAMB}(1,3))_2\text{M}(\text{NCS})_2\text{M}'(\text{SCN})_2]$  ტიპის კომპლექსური ნაერთის სტრუქტურა, სადაც  $\text{M} = \text{Co}^{2+}, \text{Cd}^{2+}$ ,  $\text{M}' = \text{Cd}^{2+}, \text{Hg}^{2+}$

კობალტის (II) ნაერთების  $\text{CoX}$ , ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{Br}, \text{I}, \text{SCN}$ ) ურთიერთქმედებით  $\text{Hg}(\text{SCN})_2$ -თან ლუისის მჟავას თანაობისას სინთეზირებულია მთელი რიგი კობალტის (II) ტეტრაედრული კომპლექსები. კომპლექსური ნაერთები შედგენილობით  $\text{CoHg}(\text{SCN}) \cdot 2\text{L}$ , სადაც  $\text{L} =$  დიოქსანი, პირიდინი, ანილინი - მყარი ნივთიერებებია შეფერილობით ვარდისფერიდან იასამნისფრამდე. ჰაერზე ნელა იშლებიან ლურჯი ფერის მყარ კრისტალურ მდგომარეობამდე [75].

კვლევების საფუძველზე ავტორები ვარაუდობენ კობალტის (II) და ვერცხლისწყლის (II) იონების ტეტრაედრულ კოორდინაციას. სინთეზირებული ნაერთების სავარაუდო სტრუქტურაა:

სინთეზირებულია კომპლექსური ნაერთები  $[CuL_2]_3[Cr(NCS)_6]_2 \cdot xH_2O$  (L - 2,2'-ბიპირიდინი (bpy),  $x = 0$ ; L - o-ფენანტროლინი (phen),  $x = 1$ ),  $[Cu(dien)]_3[Cr(NCS)_6]_2 \cdot 3H_2O$  (dien = დიეთილტეტრამინი) და  $[Ni(phen)_2]_3[Cr(NCS)_6]_2 \cdot 2H_2O$ . დადგენილია სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების შედგენილობა. განსაზღვრულია  $[Cu(phen)_2]_3[Cr(NCS)_6]_2 \cdot 2H_2O$  და  $[Ni(phen)_2]_3[Cr(NCS)_6]_2 \cdot 2H_2O$  ანტიფერომაგნიტური თვისებები. ფიზიკურ-ქიმიური კვლევები მიუთითებენ პოლიმერულ სტრუქტურაზე თიოციანატური ხიდური ფუნქციებით სპილნძის (II) ატომებსა ოქტაედრული გარემოცვის მქონე ქრომის (III) ატომებს შორის [76].



## **2. შედეგები და მათი განსჯა**

### **2.1. გამოსავალი ნივთიერებები და კვლევის მეთოდები**

#### **2.1.1. გამოსავალი საწყისი ნივთიერებების გასუფთავება და მომზადება სინთეზისთვის**

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 შესაბამებოდნენ მარკას “ა.ა.ა. ნივთიერებებს გასუფთავებით გადაკრისტალებით. გამხსნელებად გამოყენებულიქნა ეთანოლი, მეთანოლი, დიმეთილფორმამიდი, დიმეთილსულფოქსიდი, აცეტონი დაბენზოლი [77,78].

#### **2.1.2. ქიმიური (ელემენტური) ანალიზი**

მიღებული ნაერთების ელემენტური შედგენილობის დასადგენად ლითონების შემცველობის განსაზღვრა ხდებოდა ტრილონომეტრული მეთოდით. ელემენტურ შემცველობას ვსაზღვრავდით ელექტრო მასკანირებელ მიკროსკოპზე “Tescan Vega 3” მოდელზე.

ღლობის ტემპერატურა ისაზღვრებოდა დახურულ კაპილარებში.

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



### 2.1.3. შთანთქმის იწ სპექტრები

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

### 2.1.4. კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები

თეორიული კვანტურ-ქიმიური გამოთვლებისათვის გამოყენებულ იქნა პროგრამა, რომელიც ახორციელებს ახალი თაობის AM1, MP3 და MNDO-d ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური გამოთვლელ სქემას [79]. მოლეკულური ორბიტალები-ატომური ორბიტალების წრფივი კომბინაციები - მოაოწკ - დაფუძნებულია ორატომიანი დიფერენციალური გადაფარვის ეარყოფაზე - ოდგუ[80].

მეთოდი იძლევა გეომეტრიის გამოთვლის საშუალებას შიდა კოორდინაციის გრადიენტზე სრული ენერჯის გამოყენებით ფლექტერის მეთოდის ჩარჩოებში [81].

ეგმ-ზე პროგრამის რეალიზაციის დეტალები: საწყისი მონაცემების მომზადება და მიღებული შედეგების ინტერპრეტაციის რეკომენდაციები მოცემულია შრომაში [82].

მეთოდი შესაძლებლობას იძლევა დადგენილ იქნეს კომპლექსწარმოქმნაზე გამხსნელის (წყალი, ეთანოლი, აცეტონი, დიმეთილფორმამიდი, დიმეთილსულფოქსიდი, ჰექსანი და სხვა.) უნარის გავლენა. გამოთვლების შედეგად ვლუბულობთ წარმოქმნის სითბოს, დიპოლურ მომენტს, ეფექტურ მუხტებს ატომებზე, ელექტრონულ სიმ-

კვრივს ატომებზე, ელექტრონების განაწილებას ატომურ ორბიტალებზე მნიშვნელობებს. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდის საფუძველზე N,N-დიმეთილფორმამიდის (DMF) მოლეკულის ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლების დადგენა. გამხსნელებში გათვლების შედეგად მიღებულ სიდიდეებს ვადარებთ გაზურ ფაზაში მიღებულ ანალოგიურ სიდიდეებთან და მიღებული გარკვეული დასკვნების შედეგად ვვარაუდობთ ლითონებთან ზემოთ ჩამოთვლილი მოლეკულების (ლიგანდების) კომპლექსწარმოქმნის ყველაზე ხელსაყრელი მექანიზმის შესახებ.

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

N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარის პროგნოზირებისთვის და დონორული ატომების გამოვლენის მიზნით ჩატარებულ იქნა აღნიშნული მოლეკულის კვანტურ-ქიმიური კვლევა ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით სხვადასხვა გამხსნელში.

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

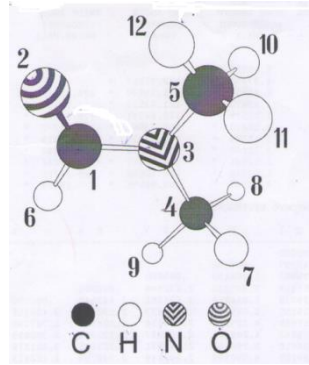
### **2.2.1. N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამხსნელის გავლენის შესწავლა კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდებით**

ავტორების მიერ კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდის გამოყენებით გამოკვლეულია N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმოქმნის უნარზე გამხსნელის გავლენა [83,84].

გამხსნელებად გამოყენებულია წყალი, ეთანოლი, აცეტონი, დიმეთილფორმამიდი, ჰექსანი და სხვა. გამოთვლილია მოლეკულის წარმოქმნის სითბო, სრული ენერჯის, იონიზაციის პოტენციალის მნიშვნელობა, დიპოლური მომენტი, ატომთა შორისი მანძილები, სავალენტო კუთხეები, ბმის სიგრძე, ეფექტური მუხტები ატომებზე, ელექტრონული სიმკვრივე ატომებზე და ელექტრონების დასახლება ატომურ ორბიტალებზე.

გამხსნელებში გათვლების შედეგად მიღებული სიდიდეები შედარებულია აირად ფაზაში მიღებულ ანალოგიურ სიდიდეებთან და გარკვეული დასკვნების შედეგად ნავარაუდებია ლითონებთან N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის (ლიგანდის) კომპლექსწარმოქმნის ყველაზე ხელსაყრელი მექანიზმი.

ლიგანდი - კერძოდ, N,N-დიმეთილფორმამიდი, შესწავლილია კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით როგორც აირად მდგომარეობაში, ასევე სხვადასხვა გამხსნელებში, რომლებიც თავის მხრივ, სხვადასხვა დიელექტრიკული შეღწევადობით ხასიათდებიან. გათვლების შედეგების ანალიზი (ცხრილი 3.), საშუალებას იძლევა წინასწარ შეირჩეს გამხსნელი და სინთეზი ჩატარდეს ოპტიმალური პირობებში.



**N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულა**

ცხრილი 3.-ის მონაცემების მიხედვით N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის წარმოქმნის სიტბოს სხვადასხვა გამხსნელში უარყოფითი მნიშვნელობა აქვს, ხოლო ყველაზე მაღალი მნიშვნელობა კი - აირად ფაზაში, რაც იმაზე მიუთითებს, რომ გამხსნელები მნიშვნელოვნად ზრდიან მოლეკულის მდგრადობას. სხვა სურათია დიპოლური მომენტების მნიშვნელობებისთვის. ამ შემთხვევაში რაც უფრო დიდია დიპოლური მომენტის მნიშვნელობა (წყალი- $\mu=5.85$ ; დიმეთილსულფოქსიდი-  $\mu=5.88$  ), მით უფრო მდგრადია მოლეკულა.

ელექტრონული ორბიტალების დასახლების ანალიზის მიხედვით(ცხრილი3.), ელექტრონული სიმკვრივეების (ფორმალური დასახლება) და ეფექტური მუხტების მნიშვნელობების გათვალისწინებით ნებისმიერ გამხსნელში ყველაზე მაღალი ელექტრონული სიმკვრივით ხასიათდება ჟანგბადის O(2) ატომი.

ჟანგბადის O(2) ატომს აქვს  $\sigma$ -ტიპის გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილი ანუ, გააჩნია  $sp^2$ - ტიპის ელექტრონული ორბიტალი S – მდგენელით:დასახლება 1,915 (აირი), 1,914 (წყალი), 1,914 (დიმეთილსულფოქსიდი), 1,914 (მეთანოლი), 1,914 (ეთანოლი), 1,915 (აცეტონი), 1,915 (ქლოროფორმი),1,915 (ჰექსანი). ეს გარემოება, თავის მხრივ, განაპირობებს ჟანგბადის O(2) ატომის უნარს ლითონთან წარმოქმნას დონორულ-აქცეპტორული ბმა.

რაც შეეხება აზოტის N(3) ატომს, მას თითქოს უნდა გამოემჟღავნებია მკვეთრად გამოხატული ელექტროდონორული თვისებები. ელექტრონული

წყვილი მოთავსებულია  $2p_z$  ორბიტალზე, რომელსაცუნარი აქვს მონაწილეობა მიიღოს  $\pi$ -და არა  $\sigma$ -ტიპის ბმის წარმოქმნაში კომპლექს-წარმოქმნელ მეტალთან. ამრიგად, აზოტის ატომში  $\pi$  ტიპის გაუზიარებელი ელექტრონული წყვილის არსებობა გამორიცხავს ლითონი - N(3) ატომის  $\sigma$  ტიპის ბმის წარმოქმნას [79,85,86].

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

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

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

ცხრილში მოცემულია გამხსნელების დიელექტრიკული შეღწევადობის ( $\epsilon$ ), წარმოქმნის სითბოს ( $\Delta H$ ), დიპოლური მომენტების ( $\mu$ ), ატომებზე მუხტების ( $q$ ), ელექტრონული სიმკვრივის და ატომურ ორბიტალებზე ელექტრონული განაწილების ( $s,p$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები

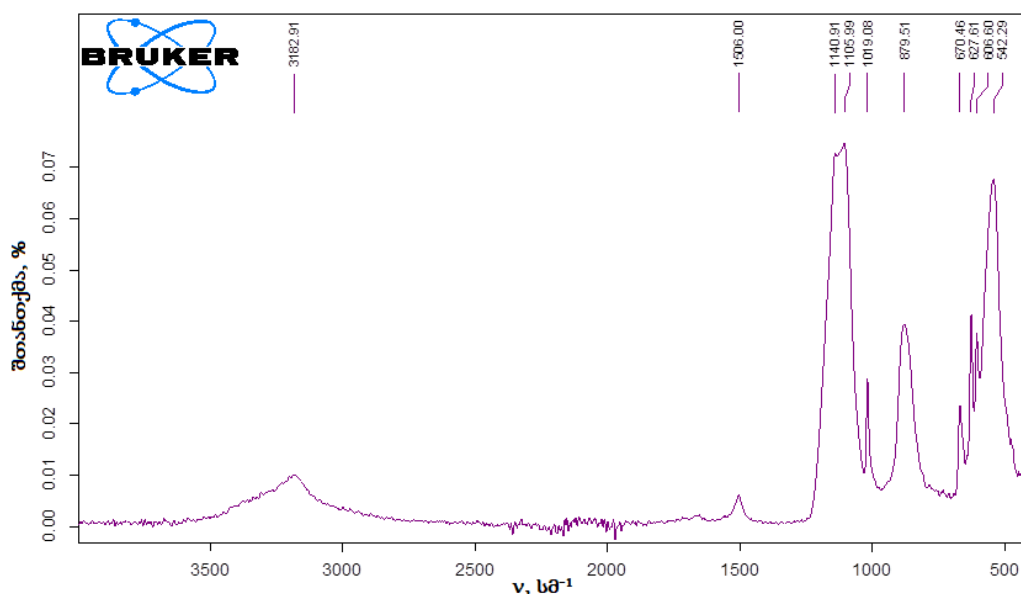
ცხრილი 3. ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდის გათვლის შედეგები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში.

№	გამხსნელი, ε	ΔH, კჯ/მოლი	μ, D	ატომი	q	ელექტროსიმკვერთვე	ელექტრონების განაწილება ორბიტალებზე			
							2S	2P <sub>x</sub>	2P <sub>y</sub>	2P <sub>z</sub>
1	აირი	-154.60	3.55	C(1)	0.262	3.738	1.245	0.890	0.857	0.746
				O(2)	-0.365	0.365	1.915	1.110	1.873	1.466
				N(3)	-0.353	5.353	1.417	1.063	1.073	1.746
2	წყალი, 78.5	-208.52	5.85	C(1)	0.262	3.738	1.256	0.873	0.879	0.682
				O(2)	-0.365	0.365	1.914	1.156	1.907	1.610
				N(3)	-0.353	5.353	1.472	1.086	1.073	1.681
3	დიმეთილსულფოქსიდი 49.0	-204.72	5.88	C(1)	0.307	3.693	1.254	0.873	0.882	0.684
				O(2)	-0.580	6.580	1.914	1.156	1.907	1.610
				N(3)	-0.314	5.314	1.472	1.086	1.073	1.681
4	მეთანოლი 32.6	-203.01	5.81	C(1)	0.305	3.695	1.255	0.874	0.881	0.685
				O(2)	-0.575	6.575	1.914	1.156	1.908	1.597
				N(3)	-0.315	5.315	1.474	1.082	1.073	1.686
5	ეთანოლი 24.3	-205.02	5.69	C(1)	0.309	3.692	1.255	0.874	0.877	0.685
				O(2)	-0.574	6.574	1.914	1.154	1.905	1.601
				N(3)	-0.316	5.316	1.472	1.084	1.073	1.687
6	აცეტონი 20.7	-204.23	5.67	C(1)	0.308	3.692	1.254	0.875	0.877	0.686
				O(2)	-0.571	6.571	1.915	1.153	1.905	1.599
				N(3)	-0.316	5.316	1.471	1.084	1.073	1.688
7	ქლოროფორმი 4.7	-188.93	4.97	C(1)	0.297	3.703	1.251	0.880	0.870	0.701
				O(2)	-0.507	6.507	1.915	1.140	1.896	1.558
				N(3)	-0.331	5.332	1.417	1.077	1.073	1.710

8	ჰექსანი 1.9	-170.37	4.1 7	C(1)	0.280	3.720	1.248	0.886	0.863	0.72 4
				O(2)	-0.430	6.430	1.915	1.124	1.884	1.50 7
				N(3)	-0.345	5.345	1.471	1.070	1.073	1.73 2

ცხრილი 4. ატომთაშორისი ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით

	გამხსნელი, $\epsilon$	$R_{1,2}$	$P_{1,2}$	$R_{1,3}$	$P_{1,3}$	$R_{3,4}$	$P_{3,4}$	$R_{3,5}$	$P_{3,5}$
1	აირი	1.243	1.780	1.380	1.080	1.433	0.950	1.435	0.943
2	წყალი	1,264	1.581	1.362	1.217	1.441	0.933	1.439	0.934
3	დიმეთილ-სულფოქსიდი	1.262	1.591	1.364	1.213	1.441	0.930	1.440	0.933
4	მეთანოლი	1.262	1.597	1.365	1.208	1.441	0.931	1.439	0.934
5	ეთანოლი	1.262	1.595	1.364	1.207	1.440	0.934	1.439	0.935
6	აცეტონი	1.262	1.597	1.363	1.206	1.440	0.934	1.439	0.935
7	ქლოროფორმი	1.255	1.597	1.369	1.162	1.438	0.939	1.438	0.937
9	ჰექსანი	1.248	1.727	1.375	1.115	1.435	0.945	1.436	0.940



ნახ.4. DMF-ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)

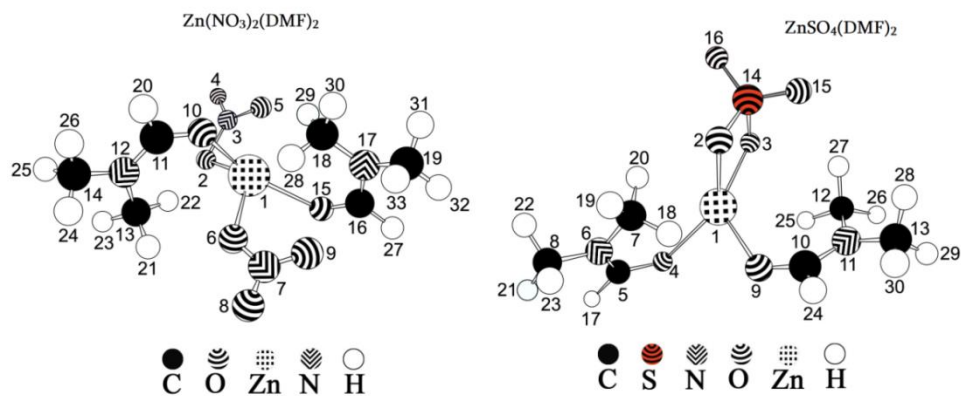
ცხრილი 5. ატომთა შორის სავალენტო კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევრადემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით

კუთხე	გამხსნელი							
	აირი	წყალი	დიმეთილ სულფოქსიდი	მეთანო-ლი	ეთანო-ლი	აცეტო- ნი	ქლორო- ფორმი	ჰექსა- ნი
O <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -N <sub>3</sub>	122.92	121.88	122.20	121.76	121.86	122.00	122.24	122.61
C <sub>1</sub> -N <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	121.26	120.80	119.75	119.48	120.80	120.87	121.01	121.15
C <sub>1</sub> -N <sub>3</sub> -C <sub>5</sub>	121.81	122.36	120.81	120.76	122.48	122.51	121.33	122.08
O <sub>2</sub> -C <sub>1</sub> -H <sub>6</sub>	122.68	121.60	121.52	121.63	121.80	121.66	121.99	122.36
N <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -H <sub>7</sub>	110.24	109.71	110.57	11.53	109.64	109.63	109.79	109.99
N <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -H <sub>8</sub>	109.94	109.52	110.01	110.24	109.54	109.64	109.82	109.91
N <sub>3</sub> -C <sub>4</sub> -H <sub>9</sub>	110.88	110.83	110.44	110.03	110,87	110.83	110.82	110.88
N <sub>3</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>10</sub>	110.02	109.62	110.41	110.66	109.61	109.66	109.81	109.94
N <sub>3</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>11</sub>	110.13	110.12	110.36	110.28	110.08	110.02	110.01	110.03
N <sub>3</sub> -C <sub>5</sub> -H <sub>12</sub>	109.89	110.08	109.75	109.54	110.15	110.13	110.10	110.00



## 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 (სურათი 1) 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.1 N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის სულფატის და ნიტრატის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულები**

კვანტურ-ქიმიური გათვლების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის მარილების კომპლექსური ნაერთების მოლეკულების წარმოქმნის სიტბოს მნიშვნელობებს ორივე მოლეკულის შემთხვევაში უარყოფითი მნიშვნელობა აქვს (ცხრილინ.), რაც მიუთითებს მოლეკულების სტაბილურობაზე. ამავდროულად,  $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$  მოლე-

კულის წარმოქმნის სითბო (-318.937 კჯ/მოლი) ნაწილობრივ უფრო მაღალია, ვიდრე  $ZnSO_4(DMF)_2$  მოლეკულის(-656.093 კჯ/მოლი).

სხვა სურათს აქვს ადგილი მოცემული მოლეკულების დიპოლური მომენტების შესწავლისას:  $Zn(NO_3)_2(DMF)_2(7.081D)$  და  $ZnSO_4(DMF)_2(15.121D)$  შესაბამისად.

$ZnX_2(DMF)_2$  მოლეკულაში, სადაც  $X=SO_4^{2-}$  და  $NO_3^-$  (ცხრილი 6.) ელექტრონული სიმკვრივეების და მოლეკულის ატომებზე უარყოფითი მუხტების ანალიზმა გვიჩვენა, რომ N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში ყველაზე მაღალი ელექტრონული მუხტით და ელექტრონული სიმკვრივით ხასიათდებიან ჟანგბადის და აზოტის ატომები.

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 მჭკრივში  $p_x < p_y < p_z$ .

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

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 6.).  $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$  მოლეკულაში ჟანგბადის O(15) ატომს აქვს  $\sigma$ -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) ატომების  $ZnSO_4(DMF)_2$  მოლეკულაში, შესაბამისად, p-ორბიტალების დასახლება (ცხრილი 6.) 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 ავღნიშნოთ, რომ აზოტის N(12) ატომის ელექტრონული წყვილი  $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$  მოლეკულაში შესაბამისად განთავსებულია არა  $2s$ , არამედ  $2p_x$  ორბიტალზე (ცხრილი 6.), 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 გამო-რიცხავს ამ ატომის მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან  $\sigma$  - 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  $2p_x$  ორბიტალზე (ცხრილი 6.). ეს კი იმაზე მიუთითებს, რომ აზოტის ამ

ატომის ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან  $\sigma$  - ტიპის ქიმიური ბმის წარმოქმნაში მონაწილეობა შეუძლებელია.

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

$Zn(NO_3)_2(DMF)_2$  და  $ZnSO_4(DMF)_2$  მოლეკულებში ატომებს შორის ბმის სიგრძის და ბმის რიგის მნიშვნელობების გათვლების შედეგების (ცხრილი 7,8.) ანალიზმა გვიჩვენა, რომ ატომთშორისი მანძილების მნიშვნელობები  $1.253 - 1.476 \text{ \AA}$  - ის ფარგლებშია. რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის მონაცემების მიხედვით Zn - O ბმის სიგრძის მნიშვნელობა  $\sim 2 \text{ \AA}$  ფარგლებშია, რაც სრულ თანხვედრაშია ჩვენს მიერ ჩატარებულ კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგებთან [87].

მოლეკულებში ვალენტური კუთხეების მნიშვნელობების შესწავლამ გვიჩვენა, რომ მათი უმრავლესობის მნიშვნელობები  $\sim 120^\circ$  ფარგლებშია, რაც შეესაბამება ატომების  $sp^2$  - ჰიბრიდულ მდგომარეობას (ცხრილი 7,8.).

კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირირული AM1 მეთოდის გათვლების მონაცემების ანალიზი გვიჩვენებს, რომ მიუხედავად იმისა, თუთიის რომელი მარილი (ნიტრატული თუ სულფატური) მიიღებს მონაწილეობას კომპლექსური ნაერთის წარმოქმნაში, N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულები ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინაციას ახორციელებენ კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომების საშუალებებით და ამიდური ჯგუფის აზოტის ატომის ქიმიურ ბმაში მონაწილეობა შეუძლებელია [88].

ცხრილში მოცემულია წარმოქმნის სითბოს ( $\Delta H$ ), დიპოლური მომენტის ( $\mu$ ), ატომებზე ელექტრონული მუხტების ( $q$ ), ელექტრონული სიმკვრივეებისა და ატომური ორბიტალების დასახლების ( $s, p$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები

ცხრილი 6. ნახევრად ემპირიული კვანტურ ქიმიური AM1 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ნიტრატის და სულფატი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში

მოლეკულა	$\Delta H$ , კჯ/მოლი	$\mu$ , D	ატომ ო	q	ელექტრ. სიმკვრივე	ატომური ორბიტალების დასახლება			
						2S	2P <sub>x</sub>	2P <sub>y</sub>	2P <sub>z</sub>
Zn(NO <sub>3</sub> ) <sub>2</sub> (DMF) <sub>2</sub>	-318.937	7.081	Zn(1)	0.740	1.260	0.454	0.302	0.248	0.256
			O(2)	- 0.470	6.470	1.921	1.778	1.011	1.760
			N(3)	0.695	4.305	1.401	0.989	0.977	0.938
			O(4)	- 0.340	6.340	1.942	1.120	1.714	1.537
			C(5)	- 0.475	6.475	1.925	1.185	1.618	1.747
			O(6)	- 0.532	6.532	1.899	1.275	1.784	1.547
			N(7)	0.718	4.282	1.394	0.954	0.991	0.942
			O(8)	- 0.394	6.394	1.943	1.736	1.033	1.682
			O(9)	- 0.507	6.507	1.943	1.606	1.392	1.565
			O(10)	- .0400	6.400	1.865	1.599	1.477	1.459
			C(11)	0.306	3.694	1.248	0.729	0.782	0.935
			N(12)	0.292	5.292	1.470	1.552	1.162	1.108
			C(13)	- 0.080	4.080	1.230	1.024	0.995	0.831
			C(14)	- 0.088	4.088	1.231	1.033	0.957	0.867
			O(15)	- 0.359	6.359	1.869	1.249	1.498	1.743
			C(16)	0.324	3.676	1.254	0.812	0.708	0.903
			N(17)	- 0.297	5.297	1.480	1.216	1.489	1.112
			C(18)	- 0.105	4.105	1.219	1.022	1.032	0.833
			C(19)	-- 0.082	4.082	1.230	0.825	0.998	1.029

ZnSO <sub>4</sub> (D MF) <sub>2</sub>	-656.093	15.12 1	Zn(1)	0.705	1.295	0.504	0.284	0.274	0.233
			O(2)	-1.011	7.011	1.900	1.661	1.533	1.918
			O(3)	-0.981	6.981	1.898	1.445	1.721	1.917
			O(4)	-0.365	6.365	1.871	1.758	1.316	1.421
			C(5)	0.285	3.715	1.253	0.859	0.784	0.819
			N(6)	-0.308	5.308	1.472	1.148	1.307	1.381
			C(7)	-0.108	4.108	1.225	0.860	1.067	0.957
			C(8)	-0.085	4.085	1.231	1.038	0.895	0.922
			O(9)	-0.418	6.418	1.870	1.563	1.798	1.186
			C(10)	0.297	3.703	1.249	0.716	0.861	0.876
			N(11)	-0.283	5.283	1.474	1.603	1.082	1.123
			C(12)	-0.109	4.109	1.236	1.087	0.282	0.958
			C(13)	-0.091	4.091	1.232	1.024	1.030	0.805
			S(14)	2.833	3.167	0.990	0.730	0.729	0.718
			O(15)	-1.048	7.048	1.929	1.821	1.834	1.464
			O(16)	-1.017	7.017	1.928	1.724	1.804	1.561

ცხრილი 7. ატომთაშორისი ბმის სიგრძის (R<sub>ij</sub>) და ბმის რიგის (P<sub>ij</sub>) ზოგიერთი მნიშვნელობები Zn(NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(DMFA)<sub>2</sub> მოლეკულაში მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
<sup>o</sup> R <sub>1,2</sub> , Å	P <sub>1,2</sub>	<sup>o</sup> R <sub>2,3</sub> , Å	P <sub>2,3</sub>	<sup>o</sup> R <sub>3,4</sub> , Å	P <sub>3,4</sub>	<sup>o</sup> R <sub>3,5</sub> , Å	P <sub>3,5</sub>	<sup>o</sup> R <sub>1,6</sub> , Å	P <sub>1,6</sub>	<sup>o</sup> R <sub>6,7</sub> , Å	P <sub>6,7</sub>
2.269	0.339	1.253	1.159	1.192	1.476	1.248	1.181	2.161	0.407	1.266	1.086

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
<sup>o</sup> R <sub>7,8</sub> , Å	P <sub>7,8</sub>	<sup>o</sup> R <sub>7,9</sub> , Å	P <sub>7,9</sub>	<sup>o</sup> R <sub>1,10</sub> , Å	P <sub>1,10</sub>	<sup>o</sup> R <sub>10,11</sub> , Å	P <sub>10,11</sub>	<sup>o</sup> R <sub>11,12</sub> , Å	P <sub>11,12</sub>	<sup>o</sup> R <sub>12,13</sub> , Å	P <sub>12,13</sub>
1.202	1.424	1.216	1.314	2.210	0.308	1.269	1.557	1.357	1.243	1.443	0.922

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	36
<sup>o</sup> R <sub>12,14</sub> , Å	P <sub>12,14</sub>	<sup>o</sup> R <sub>1,15</sub> , Å	P <sub>1,15</sub>	<sup>o</sup> R <sub>15,16</sub> , Å	P <sub>15,16</sub>	<sup>o</sup> R <sub>16,17</sub> , Å	P <sub>16,17</sub>	<sup>o</sup> R <sub>17,18</sub> , Å	P <sub>17,18</sub>	<sup>o</sup> R <sub>17,19</sub> , Å	P <sub>17,19</sub>
1.442	0.934	2.186	0.349	1.269	1.580	1.368	1.195	1.444	0.940	1.440	0.933

ცხრილი 8 ატომთაშორისი ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) ზოგიერთი მნიშვნელობები  $ZnSO_4(DMFA)_2$  მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
$R_{1,2}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{1,2}$	$R_{1,3}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{1,3}$	$R_{1,4}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{1,4}$	$R_{1,9}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{1,9}$	$R_{4,5}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{4,5}$	$R_{5,6}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{5,6}$
2.078	0.527	2.047	0.588	2.206	0.335	2.220	0.302	1.270	1.576	1.361	1.227

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
$R_{6,7}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{6,7}$	$R_{6,8}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{6,8}$	$R_{9,10}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{9,10}$	$R_{10,11}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{10,11}$	$R_{11,12}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{11,12}$	$R_{11,13}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{11,13}$
1.446	0.922	1.439	0.931	1.273	1.532	1.355	1.265	1.446	0.917	1.442	0.933

13	14	15	16	17	18	19	20
$R_{2,14}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{2,14}$	$R_{3,14}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{3,14}$	$R_{14,15}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{14,15}$	$R_{14,16}, \overset{o}{\text{Å}}$	$P_{14,16}$
1.577	0.742	1.590	0.726	1.395	1.120	1.385	1.158

**ცხრილი 9. ატომთა შორის სავალენტო კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები  $Zn(NO_3)_2(DMFA)_2$  მოლეკულაში გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით**

	კუთხე	ω
1	Zn(1) – O(2) – N(3)	97.09
2	O(2) – N(3) – O(4)	122.81
3	O(2) – N(3) – O(5)	114.83
4	O(2) – Zn(1) – O(6)	122.53
5	Zn(1) – O(6) – N(7)	127.90
6	O(6) – N(7) – O(8)	117.74
7	O(6) – N(7) – O(9)	118.79
8	O(2) – Zn(1) – O(10)	98.75
9	Zn(1) – O(10) – C(11)	132.75
10	O(10) – C(11) – N(12)	126.52
11	C(11) – N(12) – C(13)	123.20
12	C(11) – N(12) – C(14)	120.48
13	O(2) – Zn(1) – O(15)	109.87
14	Zn(1) – O(15) – C(16)	122.63
15	O(15) – C(16) – N(17)	123.46
16	C(16) – N(17) – C(18)	119.34

	კუთხე	ω
17	C(16) – N(17) – C(19)	120.73
18	O(10) – C(11) – H(20)	117.21
19	N(12) – C(13) – H(21)	109.98
20	N(12) – C(13) – H(22)	110.67
21	N(12) – C(13) – H(23)	109.40
22	N(12) – C(14) – H(24)	109.55
23	N(12) – C(14) – H(25)	109.42
24	N(12) – C(14) – H(26)	111.11
25	O(15) – C(16) – H(27)	118.87
26	N(17) – C(18) – H(28)	110.83
27	N(17) – C(18) – H(29)	110.00
28	N(17) – C(18) – H(30)	109.71
29	N(17) – C(19) – H(31)	109.07
30	N(17) – C(19) – H(32)	110.29
31	N(17) – C(19) – H(33)	110.53

**ცხრილი 10.  $ZnSO_4(DMFA)_2$  მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით**

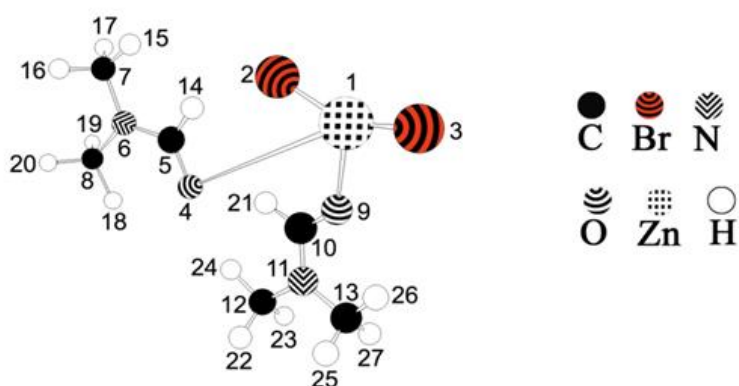
№	კუთხე	ω
1	O(2) – Zn(1) – O(3)	65.00
2	O(2) – Zn(1) – O(4)	139.96
3	Zn(1) – O(4) – C(5)	124.32
4	O(4) – C(5) – N(6)	123.78
5	C(5) – N(6) – C(7)	120.23
6	C(5) – N(6) – C(8)	121.57
7	O(2) – Zn(1) – O(9)	106.26
8	Zn(1) – O(9) – C(10)	127.75
9	O(9) – C(10) – N(11)	125.65
10	O(10) – C(11) – C(12)	122.53
11	O(10) – C(11) – C(13)	120.75
12	Zn(1) – O(2) – S(14)	102.54
13	O(2) – S(14) – O(15)	110.59
14	O(2) – S(14) – O(16)	112.19

№	კუთხე	ω
15	O(4) – C(5) – H(17)	118.55
16	N(6) – C(7) – H(18)	119.41
17	N(6) – C(7) – H(19)	109.84
18	N(6) – C(7) – H(20)	111.10
19	N(6) – C(8) – H(21)	110.76
20	N(6) – C(8) – H(22)	109.72
21	N(6) – C(8) – H(23)	109.60
22	O(9) – C(10) – H(24)	117.64
23	C(11) – C(12) – H(25)	110.53
24	C(11) – C(12) – H(26)	108.94
25	C(11) – C(12) – H(27)	110.84
26	C(11) – C(13) – H(28)	109.66
27	C(11) – C(13) – H(29)	109.11
28	C(11) – C(13) – H(30)	111.03



## N,N-დიმეთილფორმამიდთან (DMF) თუთიისბრომიდის 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.2 N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის ბრომიდის კოორდინაციული ნაერთების მოლეკულა (მეთოდი AM1)

წინამდებარე შემთხვევებში, ანუ, N,N-დიმეთილფორმამიდთან თუთიის სულფატური -  $ZnSO_4(DMF)_2$  და ნიტრატული -  $Zn(NO_3)_2(DMF)_2$  კომპლექსნაერთების შესწავლა ხდებოდა მხოლოდ კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული AM1 მეთოდით.  $ZnBr_2(DMF)_2$  კომპლექსური ნაერთის (სურათი 2) შემთხვევაში AM1 მეთოდის გამოყენების შემთხვევაში შეინიშნებოდა გარკვეული ცდომილებები ატომთაშორისი ბმების სიგრძეების და გართულდა ორბიტალებზე ელექტრონების განაწილების მნიშვნელობებში, ამიტომ აღნიშნული ნაერთის გათვლები განვახორციელეთ MNDO-d მეთოდითაც. მიუხედავად ამისა, ამ უკანასკნელი მეთოდიდან გართულდა ორბიტალებზე ელექტრონების განაწილების გათვლა. დაზუსტების მიზნით გამოვიყენეთ PM3 მეთოდიც. გადამოწმების მიზნით დამატებით გამოვიყენეთ ნახევრადემპირიული MP3 და MNDO-d მეთოდები. კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგები მოყვანილია ცხრილებში (11-13-ში.)

როგორც ცხრილი (11 – 13)-ის მონაცემებიდან ჩანს თუთიის ბრომიდის მოლეკულის წარმოქმნის სიბოხს N,N-დიმეთილფორმამიდთან აქვს უარყოფითი მნიშვნელობა, რაც მიუთითებს მოლეკულის მდგრადობაზე.

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

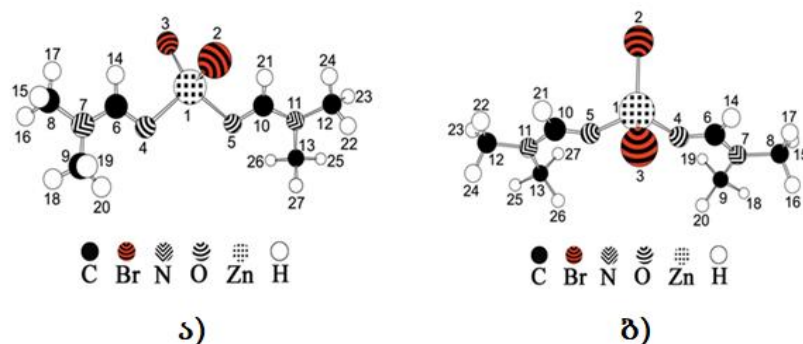
სხვადასხვა ემპირიული მეთოდებით ჩატარებული გათვლების შედეგების შედარება გვიჩვენებს, რომ სიდიდეები პრაქტიკულად არ განსხვავდებიან ერთმანეთისგან.

ატომურ ორბიტალებზე ატომების განსახლების შესწავლამ გვჩვენა, რომ  $ZnBr_2(DMF)_2$  მოლეკულაში უარყოფითი მუხტების და ელექტრონული სიმკვრივების 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 ავღნიშნეთ, 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. 3. 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-კომპლექსწარმომქმ-

ნელთან (თუთიის ატომთან) მონაწილეობას იღებს N,N-დიმეთილფორმამიდის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომი.

რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის შედეგების მიხედვით, Zn – O ბმის სიგრძის მნიშვნელობა  $\sim 2\text{\AA}$  საზღვრებშია [88]. აღნიშნული ატომების ბმის სიგრძის იგივე მნიშვნელობებს უნდა ვღებულობთ ჩვენს მიერ ჩატარებული კვანტურ-ქიმიური გათვლების შედეგად. მაგრამ, AM1 მეთოდით ჩატარებული ბმის რიგის და ატომთშორისი მანძილების გათვლების შედეგების ანალიზისას ჩვენ შეგვექმნა გარკვეული სიძნელეები.  $\text{ZnBr}_2(\text{DMF})_2$  მოლეკულის ბმის სიგრძის ( $R_{ij}$ ) და ბმის რიგის ( $P_{ij}$ ) მნიშვნელობების შედარებისას გამოთვლილი ნახევარემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1, MP3 და MNDO-მეთოდით ადვილად შევამჩნევთ ამ ცდომილებებს(ცხრილი 14-16).

კერძოდ, აღნიშნული მეთოდით მიღებული შედეგების თანახმად, Zn(1)-O(4) ბმის სიგრძის მნიშვნელობა შეადგენს  $5.231\text{\AA}$ , რაც ეწინააღმდეგება რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის მონაცემების მნიშვნელობებს [88].

ამიტომ, ჩვენს მიერ დამატებით იქნა ჩატარებული კვანტურ-ქიმიური გათვლები ნახევრადემპირიული MP3 და MNDO-d მეთოდებით. ამ შემთხვევაში ბმის სიგრძის და ბმის რიგის მნიშვნელობები  $2.036 - 2.137\text{\AA}$  ფარგლებშია, რაც შეესაბამება როგორც თეორიულ, ასევე რენტგენოსტრუქტურული მონაცემების შედეგებს.

რაც შეეხება  $\text{ZnBr}_2(\text{DMFA})_2$  მოლეკულაში ბმის სიგრძეების მნიშვნელობებს სხვა ატომებს შორის, ისინი  $1.135 - 1.566\text{\AA}$  ფარგლებშია, რაც შეესაბამება მოლეკულაში ატომების  $sp^2$ -ის ჰიბრიდულ მდგომარეობას.

მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების მნიშვნელობების ანალიზმა გვიჩვენა, რომ მათი უმრავლესობა  $\sim 120^\circ$  ფარგლებშია, რაც ასევე მეტყველებს ატომების  $sp^2$ - ჰიბრიდულ მდგომარეობაზე (ცხრილი. 17-19.).

კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მონაცემების ანალიზების შედეგების თანახმად, თეორიულად შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ N,N-

დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კოორდინაცია ატომ-კომპლექსწარმომქმნელთან (თუთიის ატომთან) უშუალოდ ხორციელდება კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის საშუალებით და არა აზოტის ატომის საშუალებით.

ცხრილში მოცემულია წარმოქმნის სითბოს ( $\Delta H$ ), დიპოლური მომენტის ( $\mu$ ), ატომებზე ელექტრონული მუხტების ( $q$ ), ელექტრონული სიმკვრივეებისა და ატომურიორბიტალების ( $s, p$ ) ელექტრონების განაწილების ზოგიერთი მნიშვნელობები.

**ცხრილი 11.** ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური AM1 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში

მოლეკულა	$\Delta H$ , კჯ/მოლი	$\mu$ , D	ატომი	$q$	ელექტრ. სიმკვრივე	ატომური ორბიტალების დასახლება			
						2S	2P <sub>x</sub>	2P <sub>y</sub>	2P <sub>z</sub>
ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) 2	-590.029	7.668	Zn(1)	0.486	1.514	0.654	0.419	0.263	0.177
			Br(2)	-0.339	7.339	1.926	1.558	1.933	1.921
			Br(3)	-0.280	7.280	1.925	1.627	1.817	1.911
			O(4)	-0.428	6.428	1.914	1.437	1.569	1.508
			C(5)	0.267	3.733	1.253	0.803	0.952	0.726
			N(6)	-0.339	5.339	1.470	1.067	1.073	1.728
			C(7)	-0.077	4.077	1.226	0.911	0.922	1.018
			C(8)	-0.083	4.083	1.226	1.015	0.833	1.008
			O(9)	-0.424	6.424	1.878	1.633	1.344	1.569
			C(10)	0.278	3.722	1.261	0.945	0.810	0.706
			N(11)	-0.300	5.300	1.467	1.082	1.066	1.686
			C(12)	-0.096	4.096	1.232	0.980	0.866	1.018
			C(13)	-0.095	4.095	1.230	0.806	1.044	1.014

ცხრილში მოცემულია წარმოქმნის სითბოს ( $\Delta H$ ), დიპოლური მომენტის ( $\mu$ ), ატომებზე ელექტრონული მუხტების ( $q$ ), ელექტრონული სიმკვრივეებისა და ატომურიორბიტალების ( $s, p$ ) ელექტრონების განაწილების ზოგიერთი მნიშვნელობები.

**ცხრილი 12. ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MNDO-d მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში**

მოლეკულა	$\Delta H$ , კჯ/მოლი	$\mu$ , D	ატომი	q	ელექტრ. სიმკვრივე	ატომური ორბიტალების დასახლება			
						2S	2P <sub>x</sub>	2P <sub>y</sub>	2P <sub>z</sub>
ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) 2	-621.096	8.880	Zn(1)	-0.184	2.184	0.747	0.591	0.461	0.386
			Br(2)	-0.224	7.224	1.937	1.395	1.948	1.940
			Br(3)	-0.223	7.223	0.001	0.001	0.001	0.001
			O(4)	-0.248	6.248	0.001	1.937	1.753	1.590
			O(5)	-0.248	6.248	1.940	0.001	0.0001	0.001
			C(6)	0.440	3.560	0.001	0.001	1.780	1.576
			N(7)	-0.437	5.437	1.729	1.163	1.781	1.575
			C(8)	0.203	3.797	1.729	1.163	1.227	0.714
			C(9)	0.209	3.791	0.803	0.816	1.502	1.611
			C(10)	0.440	3.560	1.231	1.093	1.220	0.921
			N(11)	-0.437	5.437	0.923	0.733	1.220	0.887
			C(12)	0.203	3.797	0.784	0.900	1.227	0.715
			C(13)	0.209	3.791	0.803	0.815	1.502	1.611

ცხრილში მოცემულია წარმოქმნის სითბოს ( $\Delta H$ ), დიპოლური მომენტის ( $\mu$ ), ატომებზე ელექტრონული მუხტების (q), ელექტრონული სიმკვრივეებისა და ატომური ორბიტალების (s, p) ელექტრონების განაწილების ზოგიერთი მნიშვნელობები.

**ცხრილი 13. ნახევრად ემპირიული კვანტურ-ქიმიური MP3 მეთოდით გამოთვლილი შედეგები თუთიის ბრომიდი N,N-დიმეთილფორმამიდთან მოლეკულაში**

მოლეკულა	$\Delta H$ , კჯ/მოლი	$\mu$ , D	ატომი	q	ელექტრ. სიმკვრივე	ატომური ორბიტალების დასახლება			
						2S	2P <sub>x</sub>	2P <sub>y</sub>	2P <sub>z</sub>
ZnBr <sub>2</sub> (DMFA) 2	-542.477	6.351	Zn(1)	0.235	1.765	0.600	0.441	0.397	0.327
			Br(2)	-0.445	7.445	1.860	1.650	1.970	1.964
			Br(3)	-0.443	7.443	1.860	1.901	1.718	1.964
			O(4)	-0.276	6.276	1.823	1.547	1.486	1.420
			O(5)	-0.278	6.278	1.823	1.458	1.582	1.414
			C(6)	0.235	3.765	1.223	0.736	0.950	0.855
			N(7)	0.019	4.981	1.358	1.617	0.992	1.014
			C(8)	-0.086	4.086	1.151	1.026	0.968	0.941
			C(9)	-0.080	4.080	1.147	1.023	0.885	1.025
			C(10)	0.234	3.766	1.222	0.893	0.806	0.845
			N(11)	0.022	4.978	1.354	1.139	1.450	1.035
			C(12)	-0.085	4.085	1.151	0.954	1.026	0.955
			C(13)	-0.080	4.080	1.147	0.946	0.968	1.019

**ცხრილი 14.** ZnBr<sub>2</sub>(DMF)ზმოლეკულის ზმის სიგრძის (R<sub>ij</sub>) და ზმის რიგის (P<sub>ij</sub>) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარემპირული კვანტურ-ქიმიური AM1მეთოდით

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
R <sub>1,2</sub> , o A	P <sub>1,2</sub>	R <sub>1,3</sub> , o A	P <sub>1,3</sub>	R <sub>1,4</sub> , o A	P <sub>1,4</sub>	R <sub>4,5</sub> , o A	P <sub>4,5</sub>	R <sub>5,6</sub> , o A	P <sub>5,6</sub>	R <sub>6,7</sub> , o A	P <sub>6,7</sub>
2.152	0.996	2.132	1.077	5.231	0.0001	1.249	1.720	1.375	1.118	1.435	0.94 5

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
R <sub>6,8</sub> , o A	P <sub>6,8</sub>	R <sub>1,9</sub> , o A	P <sub>1,9</sub>	R <sub>9,10</sub> , o A	P <sub>9,10</sub>	R <sub>10,11</sub> , o A	P <sub>10,11</sub>	R <sub>11,12</sub> , o A	P <sub>11,12</sub>	R <sub>11,13</sub> , o A	P <sub>11,13</sub>
1.435	0.942	2.336	0.219	1.266	1.595	1.364	1.121	1.439	0.937	1.439	0.93 7

**ცხრილი 15.** ZnBr<sub>2</sub>(DMF)ზმოლეკულის ზმის სიგრძის (R<sub>ij</sub>) და ზმის რიგის (P<sub>ij</sub>) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარემპირული კვანტურ-ქიმიური MNDO-მეთოდით

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
R <sub>1,2</sub> , o A	P <sub>1,2</sub>	R <sub>1,3</sub> , o A	P <sub>1,3</sub>	R <sub>1,4</sub> , o A	P <sub>1,4</sub>	R <sub>1,5</sub> , o A	P <sub>1,5</sub>	R <sub>4,6</sub> , o A	P <sub>4,6</sub>	R <sub>6,7</sub> , o A	P <sub>6,7</sub>
2.296	1.020	2.295	1.020	2.035	0.470	2.036	0.470	1.248	1.649	1.393	1.121

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
R <sub>7,8</sub> , o A	P <sub>7,8</sub>	R <sub>7,9</sub> , o A	P <sub>7,9</sub>	R <sub>5,10</sub> , o A	P <sub>5,10</sub>	R <sub>10,11</sub> , o A	P <sub>10,11</sub>	R <sub>11,12</sub> , o A	P <sub>11,12</sub>	R <sub>11,13</sub> , o A	P <sub>11,13</sub>
1.47	0.912	1.474	0.902	1.248	1.649	1.393	1.121	1.471	0.912	1.474	0.902

**ცხრილი 16.** ZnBr<sub>2</sub>(DMF)ზმოლეკულის ზმის სიგრძის (R<sub>ij</sub>) და ზმის რიგის (P<sub>ij</sub>) ზოგიერთი მნიშვნელობები გამოთვლილი ნახევარემპირული კვანტურ-ქიმიური MP3 მეთოდით

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
R <sub>1,2</sub> , o A	P <sub>1,2</sub>	R <sub>1,3</sub> , o A	P <sub>1,3</sub>	R <sub>1,4</sub> , o A	P <sub>1,4</sub>	R <sub>1,5</sub> , o A	P <sub>1,5</sub>	R <sub>4,6</sub> , o A	P <sub>4,6</sub>	R <sub>6,7</sub> , o A	P <sub>6,7</sub>
2.285	0.808	2.284	0.811	2.137	0.492	2.135	0.494	1.257	1.566	1.384	1.2 75

13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
R <sub>7,8</sub> , o A	P <sub>7,8</sub>	R <sub>7,9</sub> , o A	P <sub>7,9</sub>	R <sub>5,10</sub> , o A	P <sub>5,10</sub>	R <sub>10,11</sub> , o A	P <sub>10,11</sub>	R <sub>11,12</sub> , o A	P <sub>11,12</sub>	R <sub>11,13</sub> , o A	P <sub>11,13</sub>
1.480	0.969	1.478	0.964	1.257	1.561	1.382	1.281	1.479	0.969	1.478	0.964

**ცხრილი 17.** ZnBr<sub>2</sub>(DMFA)<sub>2</sub> მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევრად ემპირიული AM1 მეთოდით

	კუთხე	ω
1	Br(2)-Zn(1)-Br(3)	150.44
2	Br(2)-Zn(1)-O(4)	51.46
3	Zn(1)-O(4)-C(5)	86.14
4	O(4)-C(5)-N(6)	122.57
5	C(5)-N(6)-C(7)	121.05
6	C(5)-N(6)-C(8)	122.14
7	Br(2)-Zn(1)-O(9)	105.05
8	Zn(1)-O(9)-C(10)	130.02
9	O(9)-C(10)-N(11)	120.56
10	C(10)-N(11)-C(12)	120.87
11	C(10)-N(11)-C(13)	122.51
12	O(4)-C(5)-H(14)	122.22
13	N(6)-C(7)-H(15)	110.89

	კუთხე	ω
14	N(6)-C(7)-H(16)	109.85
15	N(6)-C(7)-H(17)	110.01
16	N(6)-C(8)-H(18)	109.95
17	N(6)-C(8)-H(19)	110.06
18	N(6)-C(8)-H(20)	109.98
19	O(9)-C(10)-H(21)	123.15
20	N(11)-C(12)-H(22)	109.53
21	N(11)-C(12)-H(23)	109.55
22	N(11)-C(12)-H(24)	111.04
23	N(11)-C(13)-H(25)	109.72
24	N(11)-C(13)-H(26)	110.29
25	N(11)-C(13)-H(27)	109.72

**ცხრილი 18.** ZnBr<sub>2</sub>(DMFA)<sub>2</sub> მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევრად ემპირიული MNDO-d მეთოდით

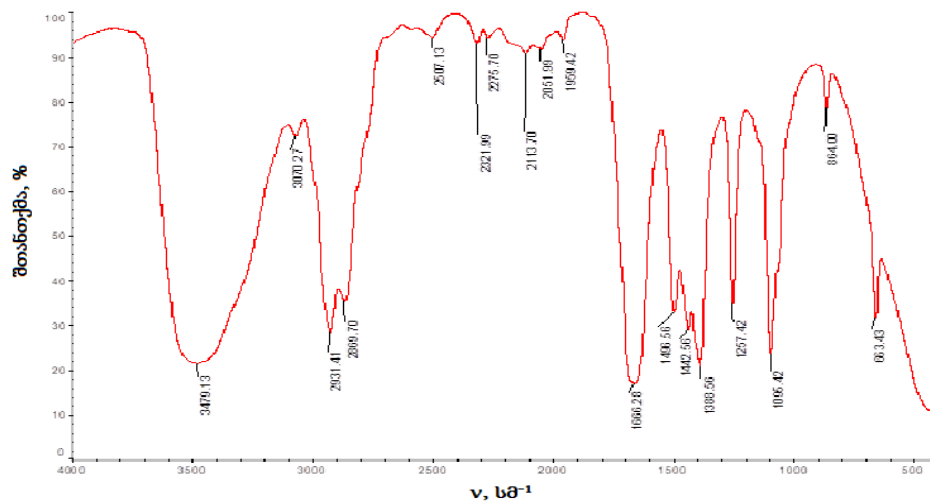
	კუთხე	ω
1	Br(2)-Zn(1)-Br(3)	125.95
2	Br(2)-Zn(1)-O(4)	107.44
3	Br(2)-Zn(1)-O(5)	107.33
4	Zn(1)-O(4)-C(6)	131.73
5	O(4)-C(6)-N(7)	119.82
6	C(6)-N(7)-C(8)	119.49
7	C(6)-N(7)-C(9)	122.79
8	Zn(1)-O(5)-C(10)	131.56
9	O(5)-C(10)-N(11)	119.84
10	C(10)-N(11)-C(12)	119.48
11	C(10)-N(11)-C(13)	122.80
12	O(4)-C(6)-H(14)	123.25
13	N(7)-C(8)-H(15)	110.35

	კუთხე	ω
14	N(7)-C(8)-H(16)	110.38
15	N(7)-C(8)-H(17)	111.73
16	N(7)-C(9)-H(18)	110.51
17	N(7)-C(9)-H(19)	110.78
18	N(7)-C(9)-H(20)	110.85
19	O(5)-C(10)-H(21)	123.26
20	N(11)-C(12)-H(22)	111.73
21	N(11)-C(12)-H(23)	110.35
22	N(11)-C(12)-H(24)	110.39
23	N(11)-C(13)-H(25)	110.50
24	N(11)-C(13)-H(26)	110.88
25	N(11)-C(13)-H(27)	110.75



ცხრილი 19.  $ZnBr_2(DMFA)_2$  მოლეკულაში ვალენტური კუთხეების ზოგიერთი მნიშვნელობები კვანტურ-ქიმიური ნახევრად ემპირიული PM3 მეთოდით

	კუთხე	$\omega$		კუთხე	$\omega$
1	Br(2)-Zn(1)-Br(3)	117.11	14	N(7)-C(8)-H(16)	109.57
2	Br(2)-Zn(1)-O(4)	108.84	15	N(7)-C(8)-H(17)	111.44
3	Br(2)-Zn(1)-O(5)	106.96	16	N(7)-C(9)-H(18)	109.56
4	Zn(1)-O(4)-C(6)	105.94	17	N(7)-C(9)-H(19)	111.23
5	O(4)-C(6)-N(7)	117.38	18	N(7)-C(9)-H(20)	110.80
6	C(6)-N(7)-C(8)	119.15	19	O(5)-C(10)-H(21)	122.82
7	C(6)-N(7)-C(9)	123.34	20	N(11)-C(12)-H(22)	110.68
8	Zn(1)-O(5)-C(10)	105.85	21	N(11)-C(12)-H(23)	109.71
9	O(5)-C(10)-N(11)	117.33	22	N(11)-C(12)-H(24)	111.47
10	C(10)-N(11)-C(12)	119.38	23	N(11)-C(13)-H(25)	109.69
11	C(10)-N(11)-C(13)	123.41	24	N(11)-C(13)-H(26)	110.78
12	O(4)-C(6)-H(14)	122.80	25	N(11)-C(13)-H(27)	111.13
13	N(7)-C(8)-H(15)	110.83			



ნახ. 5.  $CoSO_4 \cdot 6DMF$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში ( $400-4000 \text{ cm}^{-1}$ )

### 3.ექსპერიმენტული ნაწილი

#### 3.1. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთ ბიოლითონთან კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები

##### 3.1.1. N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდული და სულფატური 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 [89-93].

ნაერთების სინთეზისთვის შესაბამისი მარილების 0.01 მოლს ვხსნიდით ~5 მლ ეთილის სპირტში. მიღებულ სპირტხსნარს ვადულებდით 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 ვადულებდით და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე.

ყველა მიღებულ ნაერთს ვფილტრავდით, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლით და ვაშრობდით  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

#### ქლორიდული ნაერთები

$\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$  - 0,01 მოლ  $\text{CoCl}_2$  გაცხელებით ვხსნიდით 10 მლ ეთანოლში, ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით  $\approx 10$  წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვექონდა ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით

ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო **ვარდისფერი** კრისტალები, რომლებიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

მიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$  (მეთოდი 1).** 0,01 მოლ  $\text{NiCl}_2$  გაცხელებით ვხსნიდით 10 მლ ეთანოლში ( $\text{pH} = 6$ ), ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი: N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით  $\approx 10$  წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვქონდა ფაიფურის ჯამზე. გამოიყო მწვანე კრისტალები, რომლებიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის ხსნარით.

**$\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$  (მეთოდი 2).** ხსნარის ნაწილი გადაგვქონდა ქიმიურ ჭიქაში და ვუმატებდით ეთილის ეთერის ხსნარს. ეთერხსნარი დავაყოვნეთ. გამოიყო **მწვანე** კრისტალები, რომლებიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის ხსნარით.

ორივე მეთოდით მიღებულია **მწვანე** წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადი. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**$\text{MnCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$**  - 0,01 მოლ  $\text{MnCl}_2$  გაცხელებით ვხსნიდით 10 მლ ეთანოლში, ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით  $\approx 10$  წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვქონდა ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო ღია **ვარდისფერი** წვრილი კრისტალები, რომლებიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

მიღებული ნივთიერები ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**CdCl<sub>2</sub>·4DMF** - ვინაიდან კადმიუმის ქლორიდი არ იხსნება ეთილის სპირტში ამიტომ 0,01 მოლ CdCl<sub>2</sub> ვხსნიდით ჭარბი რაოდენობის N,N-დიმეთილფორმამიდში თანაფარდობით 1:4 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით ≈10 წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვქონდა ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო **თეთრი** ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერება, რომელიც გადაგვქონდა ფილტრის ქალაღზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში CaCl<sub>2</sub>-ის თანაობისას.

მიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**CuCl<sub>2</sub>·4DMF** - ვინაიდან სპილენძის ქლორიდი არ იხსნება ეთილის სპირტში 0,01 მოლი CuCl<sub>2</sub> ვხსნიდით ჭარბი რაოდენობის N,N-დიმეთილფორმამიდში თანაფარდობით 1:4 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით ≈10 წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვქონდა ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო **მწვანე** ფერის წვრილი კრისტალები, რომლებიც გადაგვქონდა ფილტრის ქალაღზე და ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის ხსნარით.

მიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია, დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

სინთეზირებული ნაერთების ინდივიდუალობის და შედგენილობის დადგენის მიზნით განსაზღვრულ იქნა სინთეზირებული კოორდინაციული

ნაერთების ლღობის ტემპერატურა და ხსნადობა სხვადასხვა ორგანულ გამხსნელებში. მიღებული შედეგები მოყვანილია ცხრილი20.-ში.

ელემენტური ანალიზის შედეგები მოყვანილია ცხრილი21.-ში.

**ცხრილი 20.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და კადმიუმის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი				ფერი	T <sub>ლ</sub> , C°
		აცეტონი	ეთანოლი	ეთერი	წყალი		
1	CoCl <sub>2</sub> ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	120-123
2	NiCl <sub>2</sub> ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	120-122
3	MnCl <sub>2</sub> ·6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	117-119
4	CuCl <sub>2</sub> ·4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	118-121
5	CdCl <sub>2</sub> ·4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	თეთრი	118-120

**ცხრილი 21.** 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 <sub>2</sub> ·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 <sub>2</sub> ·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 <sub>2</sub> ·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 <sub>2</sub> ·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 <sub>2</sub> ·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

### სულფატური ნაერთები

CoSO<sub>4</sub>·6DMF - 0,01 მოლ CoSO<sub>4</sub> ვხსნიდით გაცხელებით 10 მლ ეთანოლში, ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით ≈10 წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვეკონდათ ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო ვარდისფერი ფხვნილისებრი ნივთიერება,

რომლებიც გადაგვექონდა ფილტრის ქალაღზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

მიიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**$\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$**  - 0,01 მოლ  $\text{NiSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$  გაცხელებით ვხსნიდით 10 მლ ეთანოლში, ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით  $\approx 10$  წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვექონდათ ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო **მწვანე** ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერება, რომლებიც გადაგვექონდა ფილტრის ქალაღზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

მიიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**$\text{ZnSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$**  - 0,01 მოლ  $\text{ZnSO}_4$  ვხსნიდით გაცხელებით 10 მლ ეთანოლში, ვუმატებდით N,N-დიმეთილფორმამიდს თანაფარდობით 1:6 (მარილი : N,N-დიმეთილფორმამიდი). ხსნარს ვათავსებდით წყლის აბაზანაზე და მუდმივი მორევით ვაცხელებდით  $\approx 10$  წუთის განმავლობაში. ხსნარი გადაგვექონდათ ფაიფურის ჯამზე და ვაყოვნებდით ნალექის გამოყოფამდე. გამოიყო **თეთრი** ფერის კრისტალები, რომლებიც გადაგვექონდა ფილტრის ქალაღზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში  $\text{CaCl}_2$ -ის თანაობისას.

მიიღებული ნივთიერება ჰაერზე მდგრადია. დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**CuSO<sub>4</sub>·4DMF (მეთოდი 1).** 0,01 მოლ CuSO<sub>4</sub> ადულებით ვხსნიდით N,N-დიმეთილფორამიდში თანაფარდობით 1:4 (მარილი: N,N-დიმეთილფორამიდი). ადულების თანავე წარმოიქმნა ნალექი. გამოიყო **ცისფერი** ნალექი, რომელიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში CaCl<sub>2</sub>-ის თანაობისას.

მიიღება **ცისფერი** ფერის კრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია, დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

**CuSO<sub>4</sub>·4DMF (მეთოდი 2).** 0,01 მოლ CuSO<sub>4</sub> ვხსნიდით ჭარბ რაოდენობა ცივი N,N-დიმეთილფორამიდში თანაფარდობით 1:4 (მარილი : N,N-დიმეთილფორამიდი), ვფილტრავდით და გადაგვქონდა ფაიფურის ჯამზე. გამოიყო **ცისფერი** ნალექი, რომელიც გადაგვქონდა ფილტრის ქაღალდზე, ვრეცხავდით ცივი ეთანოლის მცირე ულუფებით და ვაშრობდით ექსიკატორში CaCl<sub>2</sub>-ის თანაობისას.

მიიღება **ცისფერი** კრისტალები, ჰაერზე მდგრადი, დახურულ ჭურჭელში ინახება დიდხანს. კარგად იხსნება წყალში, ეთანოლში, აცეტონში; არ იხსნება ეთერში.

სინთეზირებული ნაერთების ინდივიდუალობის და შედგენილობის დადგენის მიზნით განსაზღვრულ იქნა სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების ლღობის ტემპერატურა და ხსნადობა სხვადასხვა ორგანულ გამხსნელებში. მიღებული შედეგები მოყვანილია ცხრილი 22.-ში.

ელემენტური ანალიზის შედეგები მოყვანილია ცხრილი 23.-ში.

**ცხრილი 22.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი				ფერი	T <sub>ლ</sub> , C°
		აცეტონი	ეთანოლი	ეთერი	წყალი		
1	CoSO <sub>4</sub> · 6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ვარდისფერი	119-120
2	NiSO <sub>4</sub> · 6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	მწვანე	120-122
3	ZnSO <sub>4</sub> · 6DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	თეთრი	118-120
4	CuSO <sub>4</sub> · 4DMF	ხსნ.	ხსნ.	X	ხსნ.	ცისფერი	118-120

**ცხრილი 23.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), ნიკელის (II), კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდების კოორდინაციული ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

	ნაერთი	ნაპოვნია, % / გამოთვლილი, %						Mr
		Me	C	N	H	O	S	
1	CoSO <sub>4</sub> · 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
2	NiSO <sub>4</sub> · 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
3	ZnSO <sub>4</sub> · 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
4	CuSO <sub>4</sub> · 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

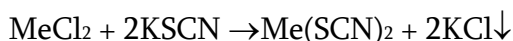
### 3.2. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d გარდამავალი ლითონების ორმაგი შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები

კოორდინაციული ნაერთების მიღების საერთო მეთოდიკა: სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), და თუთიის ბილითონური შერეულლიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან [94-96].

სინთეზისთვის 0.01 მოლ ლითონის (II) ქლორიდს გაცხელებით წყლის აბაზანაზე ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში. ვუმატებდით კალი-

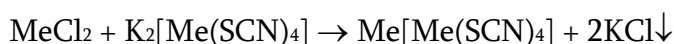


უმის თიოციანატის ეთანოლხსნარს ჭარბი რაოდენობით. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით. მიიღებოდა მწვანე ფერის ხსნარი (ხსნარი 1).



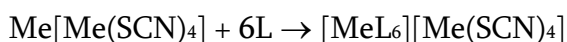
სადაც, **Me** - Co (II), Ni (II), Mn (II), Cu (II) და Zn

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 ულუფებით. ვაშრობდით ჰაერზე ფილტრის ქაღალდზე.

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

$[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Co}(\text{NCS})_4]$  - ცისფერი ფერის ფხვნილესებრი ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია, კარგად იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - მწვანე ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. კარგად იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

[Cu(DMF)<sub>5</sub>][Cu(NCS)<sub>4</sub>] - მუქი-ყვითელი ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. კარგად იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

[Mn(DMF)<sub>6</sub>][Mn(NCS)<sub>4</sub>] - ღია-ვარდისფერი ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. კარგად იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთები გამოყოფილია თავისუფალი სახით ფხვნილისებურ ან წვრილკრისტალურ მდგომარეობაში. მათი ინდივიდუალობის დასადგენად განსაზღვრული იქნა თითოეული მათგანის ლღობის ტემპერატურა. შესწავლილია ხსნადობა სხვადასხვა ორგანულ გამხსნელებში: დიმეთილფორმამიდში, დიმეთილსულფოქსიდში, აცეტონში, აცეტონიტრილში და სხვ. მიღებული შედეგები მოყვანილია ცხრილი 24.-ში.

ელემენტური ანალიზის შედეგები მოყვანილია ცხრილი 25.-ში.

**ცხრილი 24.** 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 <sub>ღ</sub> , °C
		აცეტონი	მეთანოლი	დმფ	დმს	ბენზოლი	წყალი		
1	[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Co(NCS) <sub>4</sub> ]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ლურჯი	118-120
2	[Ni(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	მწვანე	120-123
3	[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Cu(NCS) <sub>4</sub> ]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ყვითელი	117-120
4	[Mn(DMF) <sub>6</sub> ][Mn(NCS) <sub>4</sub> ]	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ღია-ვარდისფერი	118-121

**ცხრილი 25.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან ნიკელის (II), კობალტის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II) და თუთიის ორმაგი კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

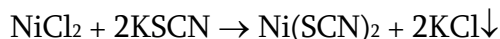
	ნაერთი	ნაპოვნია, % / გამოთვლილი, %						Mr
		Me	C	N	H	O	S	
1	[Ni(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	14.95 (15.00)	33.69 (33.29)	17.86 (17.36)	5.41 (5.46)	12.33 (12.28)	16.35 (16.40)	784.28
2	[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Co(SCN) <sub>4</sub> ]	14.94 (14.74)	33.50 (33.57)	17.76 (17.56)	5.38 (5.40)	12.16 (12.36)	16.26 (16.29)	788.72
3	[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Cu(SCN) <sub>4</sub> ]	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) <sub>6</sub> ][Mn(NCS) <sub>4</sub> ]	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
---	--	------------------	------------------	------------------	----------------	------------------	------------------	--------

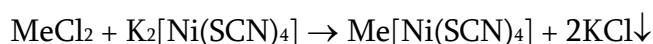
### 3.3. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ზოგიერთი 3d გარდამავალი ლითონის ბიმეტალური შერეულლიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი და მათი ფიზიკურ-ქიმიური თვისებები

კოორდინაციული ნაერთების მიღების საერთო მეთოდიკა: სინთეზირებულია კობალტის (II), ნიკელის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), რკინის (II), ტყვიის (II), კადმიუმის და თუთიის ბიმეტალური შერეულლითონთა შერეულლიგანდიანი თიოციანატური კომპლექსური ნაერთები N,N-დიმეთილფორმამიდთან [94 - 107].

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).

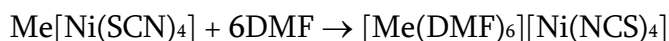


0.01 მოლ ლითონის (II) ქლორიდს (Me=Co(II), Cu(II), Mn(II), Fe(II), Cd(II), Pb(II), Zn) გაცხელებით ვხსნიდით 5 მლ ეთილის სპირტში. მარილის სპირტხსნარს წვეთ-წვეთობით ვუმატებდით ცხელ ფილტრატს. გამოყოფილ ნალექს ვფილტრავდით:



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 გადაგვქონდა 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.

$[Zn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$  - ღია-მწვანე ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Cu(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$  - ყვითელი ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Cd(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$  - თეთრის ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Co(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$  - ლურჯი ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Fe(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$  - მურა-წითელი ფერის ფხვნილისებრი ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Mn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$  - ღია-ყვითელი ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

$[Pb(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$  - მწვანე ფერის წვრილკრისტალური ნივთიერება, ჰაერზე მდგრადია. იხსნება წყალში, აცეტონში, მეთანოლში, არ იხსნება ბენზოლში, დიმეთილსულფოქსიდში.

სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთები გამოყოფილია თავისუფალი სახით ფხვნილისებრ ან წვრილკრისტალურ მდგომარეობაში. მათი ინდივიდუალურობის დასადგენად განსაზღვრული იქნა თითოეული მათგანის ლღობის ტემპერატურა. შესწავლილია ხსნადობა სხვადასხვა ორგანულ გამხსნელებში: დიმეთილფორმამიდში, დიმეთილსულფოქსიდში, აცეტონში, აცეტონიტრილში და სხვ. ანალიზით მიღებული შედეგები სხვადასხვა გამხსნელებში მოცემულია ცხრილი 26.-ში.

**ცხრილი 26.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან კობალტის (II), რკინის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), ტყვიის (II), თუთიის და ბიმეტალურიკოორდინაციული ნაერთების ზოგიერთი ფიზიკურ-ქიმიური თვისება

№	ნაერთი	გამხსნელი						ფერი	T <sub>ლ.</sub> , C°
		აცეტონი	მეთანოლი	დმფ	დმს	ბენზოლი	წყალი		
1	$[Co(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ლურჯი	118-121
2	$[Fe(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	მურა-წითელი	122-124
3	$[Mn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ღია-ყვითელი	119-122
4	$[Cu(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	ყვითელი	120-123
5	$[Pb(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	მწვანე	117-120
6	$[Zn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	მწვანე	118-120
7	$[Cd(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$	ხსნ.	ხსნ.	X	X	X	ხსნ.	თეთრი	117-120

სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები მოყვანილია ცხრილი 27.-ში.

**ცხრილი 27.** N,N-დიმეთილფორმამიდთან ნიკელის (II), კობალტის (II), მანგანუმის (II), სპილენძის (II), კადმიუმის (II), რკინის (II), ტყვიის (II) და თუთიის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთების ელემენტური ანალიზის შედეგები

	ნაერთი	ნაპოვნია, % / 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) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	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) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	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) <sub>6</sub> ][Zn(SCN) <sub>4</sub> ]	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) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	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) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	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

### 3.4. N,N-დიმეთილფორამიდთან ზოგიერთი 3d ლითონის კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების აღნაგობა

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

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

ლიგანდის და სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების ჩაწერას ვახდენდით 400-4000 სმ<sup>-1</sup> უბანში. ვიყენებდით პოლიკრისტალური ნიმუშების ვაზელინის ზეთში გასრესით სუსპენზიების მომზადების მეთოდს. სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების იწ სპექტრების ზოგიერთი მახასიათებელი რხევის სიხშირეები მოყვანილია ცხრილი 28.-ში.

**ცხრილი 28.** N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული მონობირთვული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ<sup>-1</sup>)

DMF	663.43	864.00	1095.42	1257.42	1388.56	1442.56
	1496.56	1666.28	1959.42	2113.70	2275.70	2321.99
	2507.13	2931.41	3070.27	3479.13		
CoSO <sub>4</sub> · 6DMF	542.29	606.60	627.61	670.46	879.51	1019.08
	1105.99	1140.91	1506.00	3182.91		

NiSO <sub>4</sub> · 6DMF	463.89	607.39	666.28	832.60	1083.78	1635.14
CuSO <sub>4</sub> · 4DMF	3188.93	3230.23				
	441.35	464.65	511.99	532.25	548.50	609.64
	870.58	1066.88	1665.70	2360.60	3145.50	
ZnSO <sub>4</sub> · 4DMF	417.83	433.06	607.66	988.42	1074.93	1625.29
	1654.03	2356.54	3234.60	3397.27		
CoCl <sub>2</sub> · 6DMF	461.52	561.33	653.00	793.00	1019.09	1061.36
	1118.50	1250.95	1384.82	1450.05	1497.21	1614.26
	1644.58	3197.26	3300.12	3389.26	3423.33	
NiCl <sub>2</sub> · 6DMF	422.56	519.77	585.81	626.28	807.92	1619.17
	1641.58	3175.76	3221.78			
CuCl <sub>2</sub> · 4DMF	406.96	628.62	699.90	747.76	819.73	868.56
	1017.65	1061.02	1121.49	1157.37	1250.22	1375.96
	1431.09	1449.08	1498.88	1604.71	1640.98	2022.24
	2362.41	3297.50	3376.56			
MnCl <sub>2</sub> · 6DMF	409.92	482.37	560.56	629.98	678.24	862.45
	1017.63	1061.01	1115.43	1250.89	1387.14	1427.34
	1447.94	1497.55	1618.40	1646.88	3218.26	3320.75
	3391.14					
CdCl <sub>2</sub> · 4DMF	405.39	454.90	485.71	526.46	575.24	603.11
	680.52	1064.71	1113.77	1251.60		

ლიტერატურული მონაცემების მიხედვით [145 - 149], მესამეული ამიდების იწ სპექტრებში, განსხვავებით პირველადი და მეორეული ამიდების სპექტრებისა, გამოვლენილია მხოლოდ C=O ჯგუფის შთანთქმის ზოლი (ე.წ. “ამიდ - I”) 1670 - 1630 სმ<sup>-1</sup> უბანში.

N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსების იწ სპექტრებში გამოვლენილია ზოლის ნაკლებ ინტენსიური გახლეჩვა რამოდენიმე კომპონენტად ~2850-3000 სმ<sup>-1</sup> უბანში. ისინი მიეკუთვნებიან მეთილის ჯგუფის  $\nu(\text{CH}_3)$  ვალენტურ რხევებს.

გამოკვლეული კომპლექსების სპექტრებში გამოვლენილია ინტენსიური ზოლები ~1640.98 - 1642.28 სმ<sup>-1</sup> უბანში. სინთეზირებული ნაერთების სპექტრებში კარბონილის ჯგუფის რხევითი სიხშირეები არაასოცირებული ლიგანდის შესაბამისი რხევის სიხშირეებთან შემცირებულია ~21.7 - 25.3 სმ<sup>-1</sup>-ით.

საშუალო ინტენსივობის სინგლეტური ზოლი, რომელიც შეესაბამება N,N-დიმეთილფორმამიდის კომპლექსური ნაერთების სპექტრებში ე.წ. “ამიდ - III”-ის სიხშირეებს, როგორც არაკოორდინირებული, ასევე

სინთეზირებულის ნაერთების სპექტრებში გამოვლენილია  $\sim 1431.09 - 1450.05 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში.

ცალკე უნდა აღინიშნოს, რომ N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კოორდინირებისას აღინიშნება რხევის სიხშირეების გარკვეული მატება, რაც სავარაუდოდ მიეკუთვნება  $\text{—N—C=O}$  ჯგუფის მონაწილეობით დეფორმაციულ რხევებს. თავისუფალი, არაკოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის შესაბამისი სიხშირეები გამოვლენილია  $\sim 657 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო კოორდინირებისას ისინი გადანაცვლებულია უფრო მაღალ სიხშირულ უბანში  $\sim 675-682 \text{ სმ}^{-1}$ , როგორც ეს აღინიშნება, მაგალითად, ისეთი ტიპის ნაერთში, როგორიცაა ტრანს  $[\text{Me}(\text{NCX})_2 \cdot 4\text{DMF}]$ , სადაც  $\text{Me} = \text{Mn, Fe, Co, Ni}$ , ხოლო  $\text{X} = \text{S, Se}$  [108,109].

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

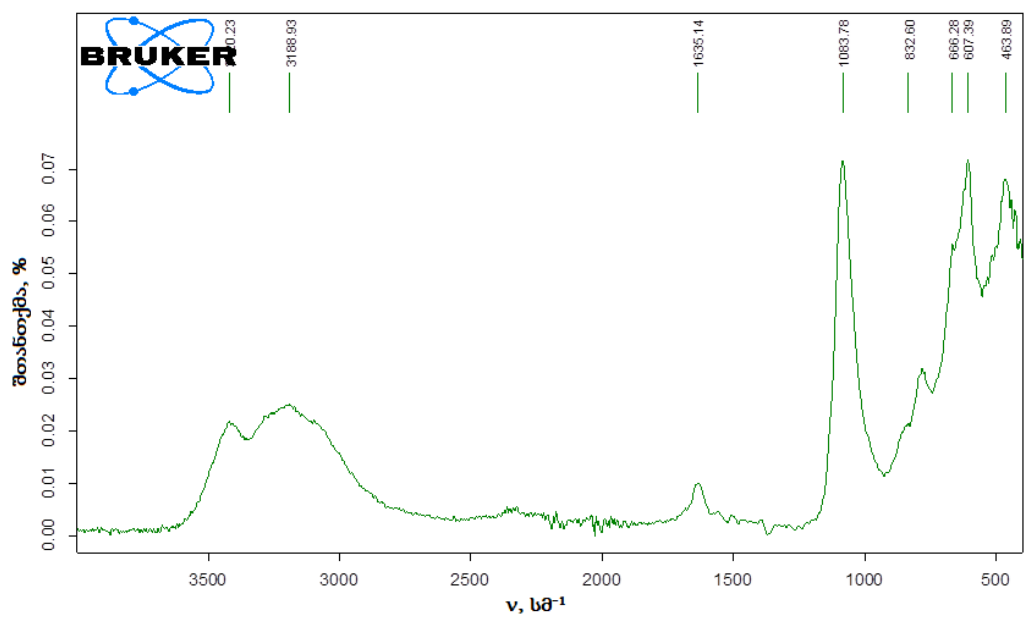
თუ გავითვალისწინებთ DMF მოლეკულების შიდასფერულობას, შეგვიძლია კობალტის(II), ნიკელის(II) და მანგანუმის(II) ქლორიდული კომპლექსნაერთებისთვის ვივარაუდოთ ოქტაედრული აგებულება, ხოლო სპილენძის(II) და კადმიუმის(II) ქლორიდისთვის - ტეტრაედრული აგებულება.

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

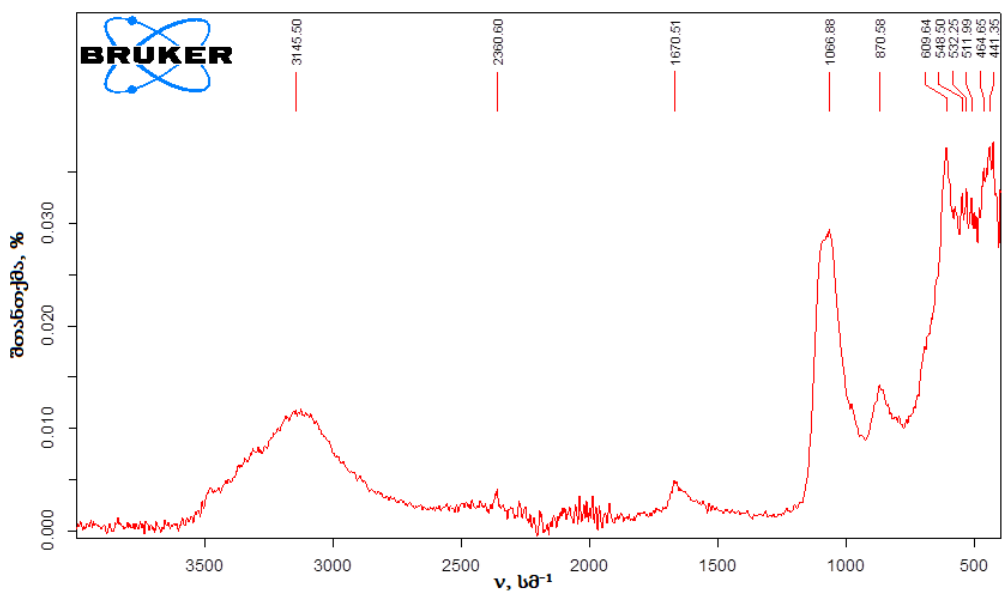


ცხრილი 29. N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული კობალტის (II), ნიკელის (II), სპილენძის (II), მანგანუმის (II) კადმიუმის (II) და თუთიის ქლორიდული და სულფატური კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ<sup>-1</sup>)

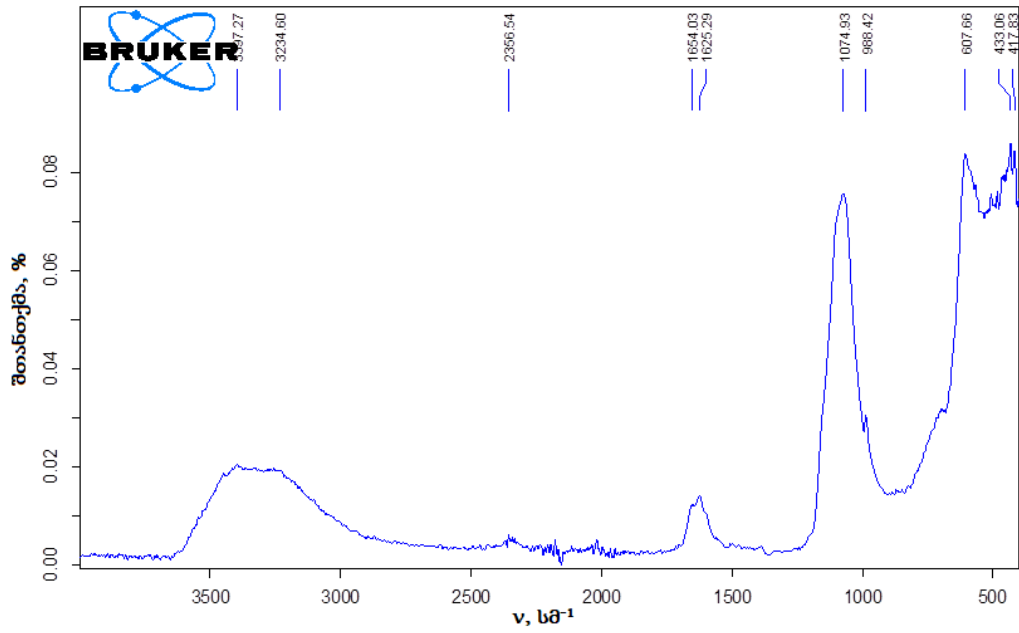
ნაერთები/მიკუთვნება	$\nu_{as}(CH_3)$	$\nu(CO)$	$\nu(CN)$	$\delta(CH)$	$\nu_{as}(CN)$	$r(CH_3)$	$\nu_s(CN)$	$\delta(CON)$	$\delta_{(R_{OH})}$
DMF	3070.27 2931.41	1666.28	1496.56 1442.56	1388.56	1257.42	1095.42	864.00	663.43	
CoSO <sub>4</sub> ·6DMF	3182.91	1506.00			1140.91	1019.08	879.51	670.46	
NiSO <sub>4</sub> ·6DMF	3188.93	1635.14				1083.78	832.60	666.2	463.89
CuSO <sub>4</sub> ·4DMF	3145.50	1665.70				1066.88	870.58	609.64	464.65
ZnSO <sub>4</sub> ·6DMF	3234.60	1654.03 1625.29				1074.93		607.66	433.06
CoCl <sub>2</sub> ·6DMF		1644.58	1450.05	1384.82	1250.95	1061.36 1019.09			461.52
NiCl <sub>2</sub> ·6DMF	3175.76	1641.58 1619.17					807.92		442.55
CuCl <sub>2</sub> ·4DMF		1640.98 1604.71	1449.08 1431.09	1375.96	1250.22	1061.02 1017.65	819.73	699.90	
MnCl <sub>2</sub> ·6DMF	3218.26	1646.88 1618.40	1447.94 1427.34	1387.14	1250.89	1061.01 1017.63	862.45	678.24	482.37
CdCl <sub>2</sub> ·4DMF		1649.69	1445.34 1433.29	1374.34	1251.60	1064.71		680.52	485.71



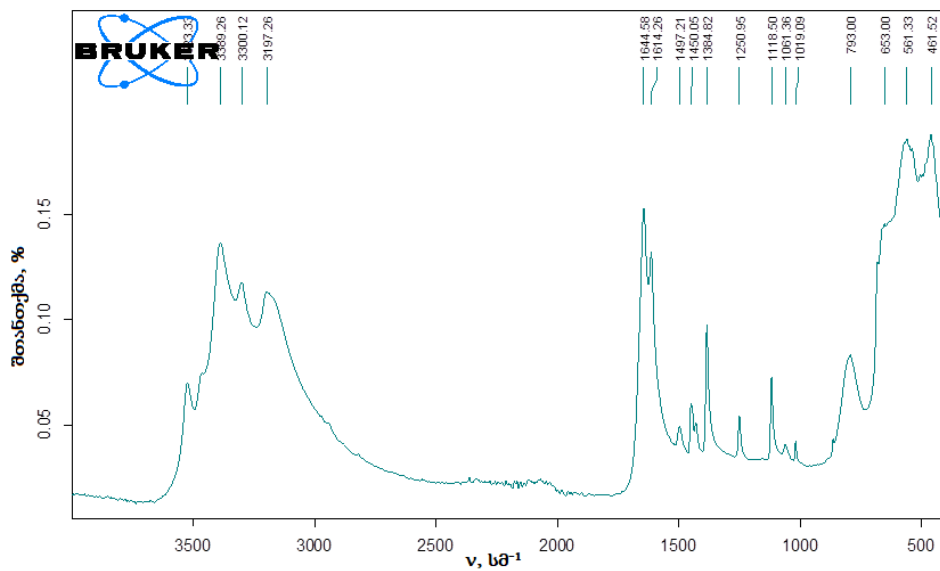
ნახ. 6. NiSO<sub>4</sub>·6DMF-ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)



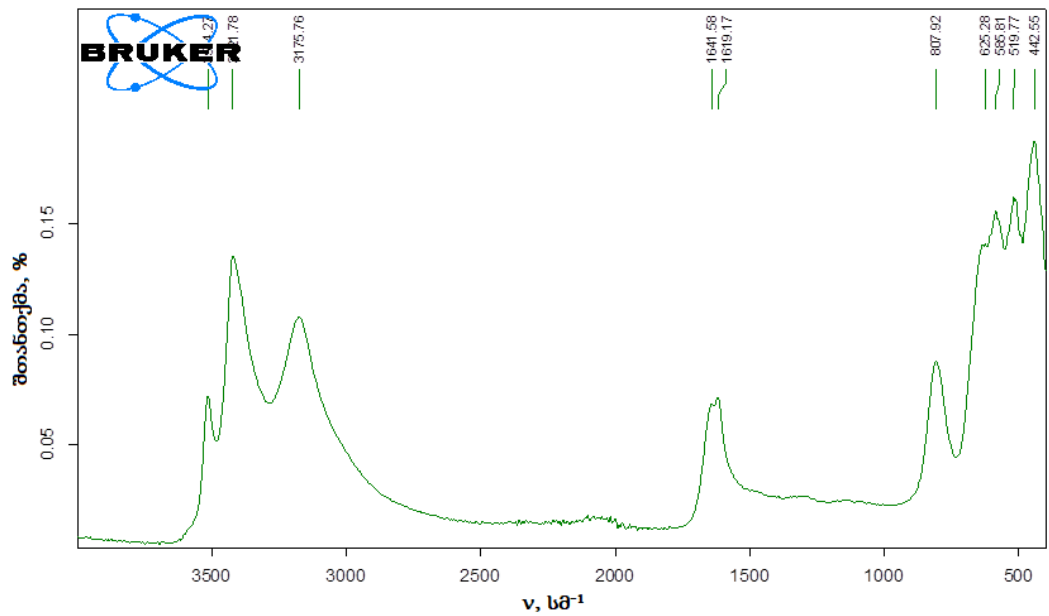
ნახ. 7. CuSO<sub>4</sub>·4DMF -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)



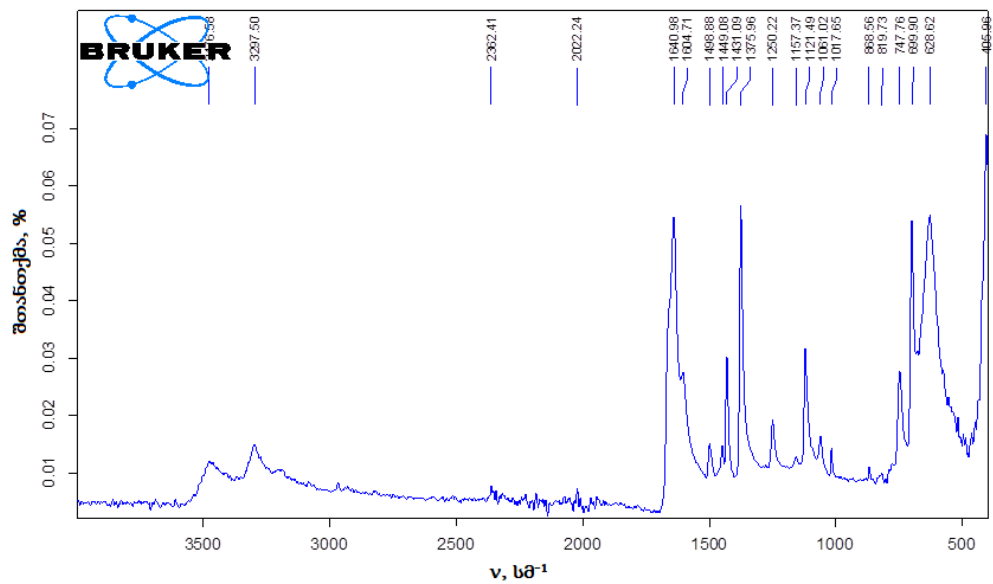
ნახ. 8.  $ZnSO_4 \cdot 6DMF$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)



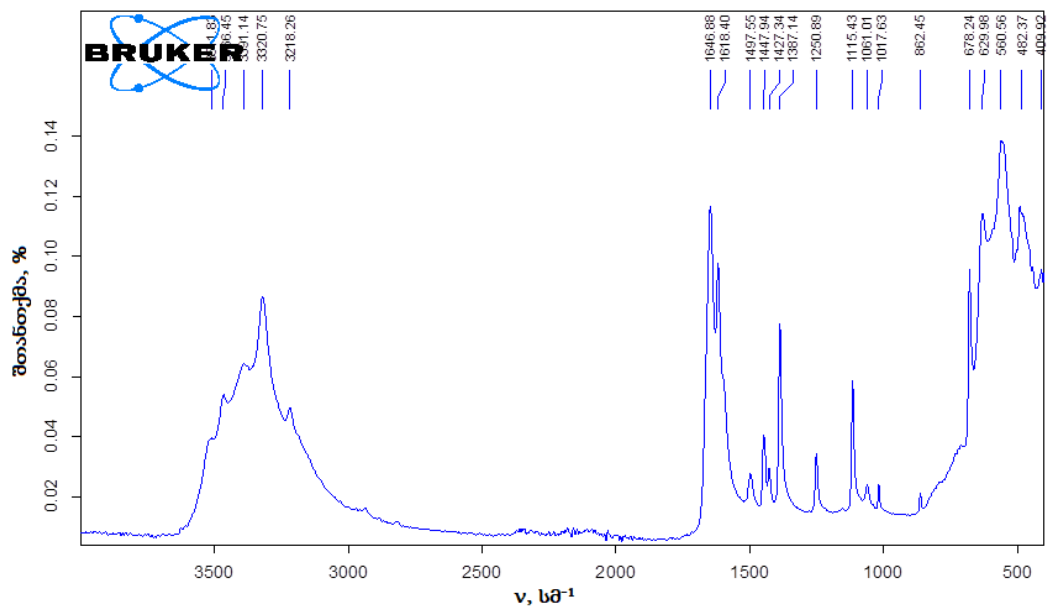
ნახ. 9.  $CoCl_2 \cdot 6DMF$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრები ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)



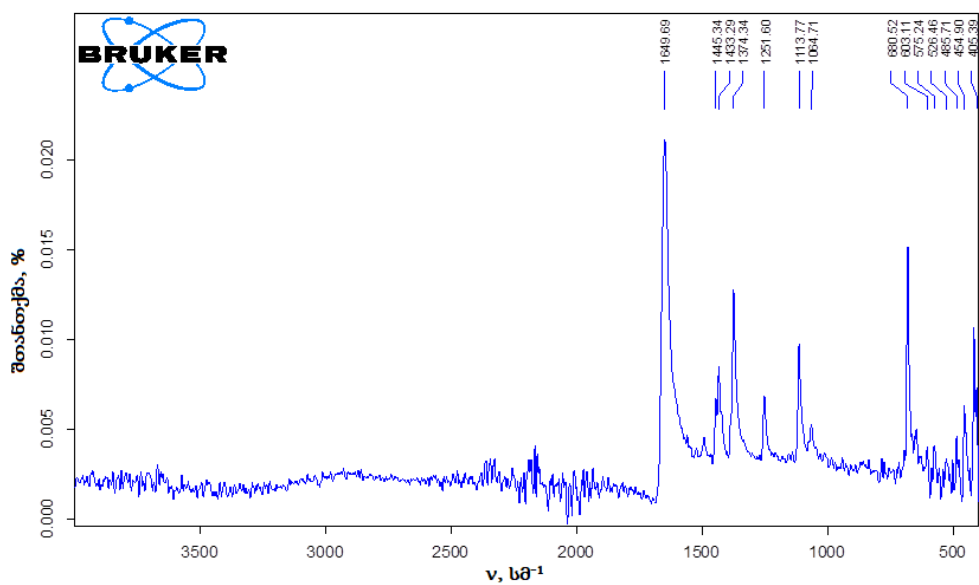
ნახ.10.  $\text{NiCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში ( $400\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$ )



ნახ.11.  $\text{CuCl}_2 \cdot 4\text{DMF}$  -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში ( $400\text{--}4000 \text{ cm}^{-1}$ )



ნახ.12.  $MnCl_2 \cdot 6DMF$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში ( $400-4000 \text{ სმ}^{-1}$ )



ნახ. 13.  $CdCl_2 \cdot 4DMF$ -ის შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში ( $400-4000 \text{ სმ}^{-1}$ )

### 3.4.2. N,N-დიმეთილფორამიდთან 3d ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი

N,N-დიმეთილფორამიდის (DMF) მოლეკულის, აგრეთვე SCN<sup>-</sup> - ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან (მეტალებთან) კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ორმაგი შერეული-განდიანი კოორდინაციული ნაერთების იწსპექტრები.

ლიგანდის და სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების ჩაწერას ვახდენდით 400-4000 სმ<sup>-1</sup> უბანში. ვიყენებდით პოლიკრისტალური ნიმუშების ვაზელინის ზეთში გასრესით სუსპენზიების მომზადების მეთოდს. სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების იწ სპექტრების ზოგიერთი მახასიათებელი რხევის სიხშირეები მოყვანილია ცხრილი 30.-ში.

**ცხრილი 30.** N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ორმაგიშერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ<sup>-1</sup>)

[Ni(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	416.5	477.1	682.1	789.3	863.7	955.1
	1057.6	1109.8	1252.4	1376.3	1411.7	1443.4
	1495.6	1655.9	2055.5	2103.2	2164.7	2940.9
	2970.7	3627.6	3647.2	3709.6		
[Mn(DMF) <sub>6</sub> ][Mn(SCN) <sub>4</sub> ]	675.6	786.5	861.9	957.9	1057.6	1108.9
	1251.5	1378.2	1420.1	1442.5	1497.5	1654.0
	1735.1	2078.0	2936.2	2969.8	3569.9	3652.8
[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Cu(SCN) <sub>4</sub> ]	609.8	662.7	740.5	862.3	1050.0	1098.8
	1250.3	1385.6	1443.1	1642.2	2151.7	3042.1
[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Co(SCN) <sub>4</sub> ]	469.8	483.9	685.6	746.7	1011.0	1017.4
	1112.0	1616.8	2056.9	2817.8	3061.4	

სინთეზირებული კომპლექსების იწ სპექტრებში გამოვლენილია ზოლის მცირედინტენსიური გახლეჩა რამოდენიმე კომპონენტად ~2969.8 - 3061.4 სმ<sup>-1</sup> უბანში. ისინი მიეკუთვნებიან მეთილის ჯგუფის ν(CH<sub>3</sub>) ვალენტურ რხევით სიხშირეებს.

ლიტერატურული მონაცემებიდან ცნობილია, რომ მესამეული ამიდების იწ სპექტრებში გამოვლენილია C=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  $1666.28 \text{ სმ}^{-1}$ , 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 კომპლექსწარმოქმნელ ლითონთან ხორციელდება DMF-ს მოლეკულის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.

საშუალო ინტენსივობის სინგლეთური რხევის სიხშირეები, რომლებიც კომპლექსების სპექტრებში შეესაბამება „ამიდ - III“-ს, როგორც არაკოორდინირებული, აგრეთვე კოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში გამოვლენილია  $\sim 1442.0 - 1497.5 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში.

— N — C = O ჯგუფის დეფორმაციული რხევითი სიხშირეები თავისუფალი, არაკოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულისთვის გამოვლენილია  $\sim 663.43 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო კოორდინირებისას გადანაცვლებულია უფრო მაღალ სიხშირულ უბანში  $\sim 662.79 - 685.61 \text{ სმ}^{-1}$ .

სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების მიხედვით დადგენილია  $\text{SCN}^-$  - 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.

მეტალის ატომების 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-კომპლექსწარმომქნელთან თიოცინატ-იონების კოორდინირებაზე აზოტის ატომის საშუალებით [110].

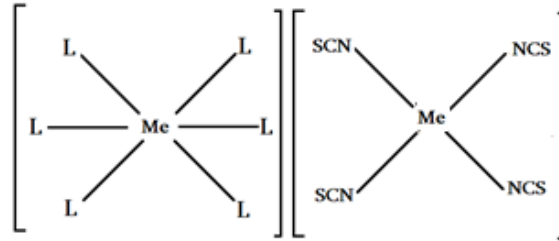
ნაერთები/მიკუთვნება	$\nu(\text{CN})$	$\nu(\text{CS})$	$\delta(\text{NCS})$
$[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{SCN})_4]$	2103.2 2055.6	789.3	477.1
$[\text{Mn}(\text{DMF})_6][\text{Mn}(\text{SCN})_4]$	2078.0	786.5	
$[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Cu}(\text{SCN})_4]$	2151.7	740.5	
$[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Co}(\text{SCN})_4]$	2056.9	746.7	469.7

რხევითი სიხშირეების ამგვარი მომატება მეტყველებს იმაზე, რომ სინთეზირებულ ნაერთებში  $\text{NCS}^-$  ჯგუფის კოორდინირება მეტალ (II) ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა  $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$ ) [111].

სინთეზის მეთოდიკიდან გამომდინარე შეგვიძლია ვთქვათ, რომ ეთანოლ ხსნარში წარმოიქმნება კომპლექსები ორგანული კათიონით. ზემოთ მოყვანილი განსჯის შედეგების და ექსპერიმენტალური მონაცემების საფუძველზე შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ კობალტის (II) და მანგანუმის (II) შემთხვევაში სინთეზირებულია იონური ტიპის კომპლექსური ნაერთები  $[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$ , სადაც  $\text{Me} = \text{Co (II), Mn (II)}$ , 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  $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$ ).

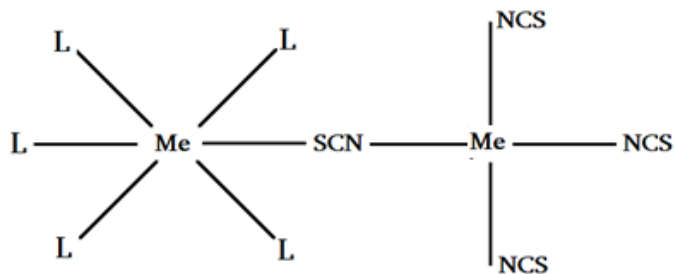
$[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$  ტიპის კომპლექსური ნაერთებისთვის, სადაც  $\text{Me} = \text{Co(II), Ni (II) და Mn(II)}$  აგებულება შეგვიძლია წარმოვიდგინოთ შემდეგი სტრუქტურის სახით:





**[Me(DMF)<sub>6</sub>][Me(NCS)<sub>4</sub>] ტიპის კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც Me=Co(II), Ni (II),Mn(II), L – N,N-დიმეთილფორმამიდი**

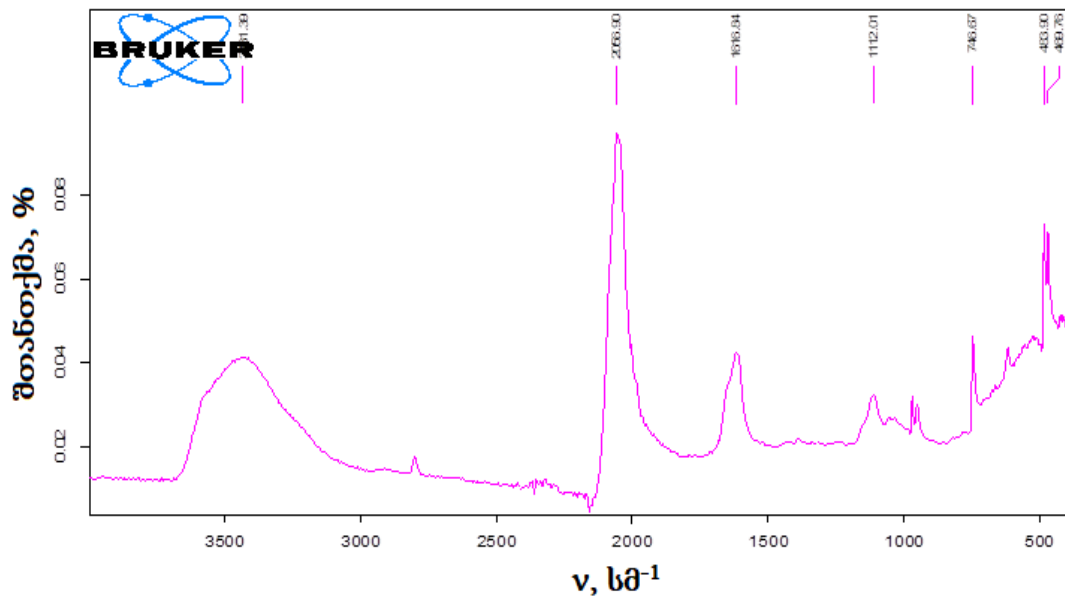
რაც შეეხება სინთეზირებულ [Cu(DMF)<sub>5</sub>][Cu(NCS)<sub>4</sub>] კომპლექსურ ნაერთებს, მის შემთხვევაში სინთეზირებული კომპლექსური კათიონის აგებულება ოქტაედრულია, ხოლო კომპლექსურ ანიონში ლითონის იონის - Cu<sup>2+</sup> გარემოცვა შედგება სამი მონოდენტური თიოციანატ-იონისგან, რომლებიც კოორდინირებული არიან ნიკელის იონთან აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოციანატ-იონი ასრულებს ხიდურ ფუნქციას.



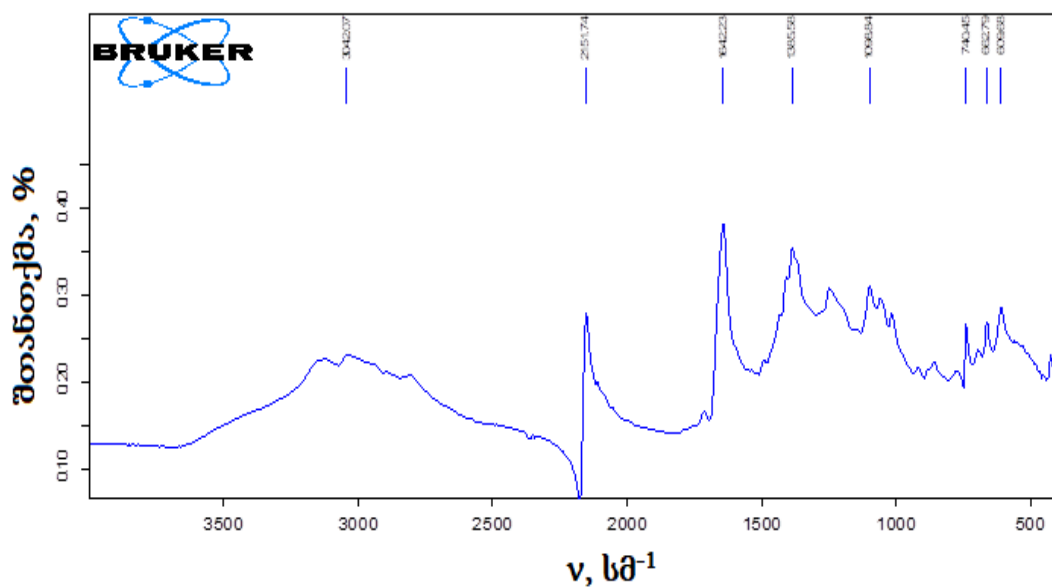
**[Cu(DMF)<sub>5</sub>][Cu(NCS)<sub>4</sub>] კომპლექსური ნაერთის სტრუქტურა**

ცხრილი 31. N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ორმაგი შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებშინაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ<sup>-1</sup>)

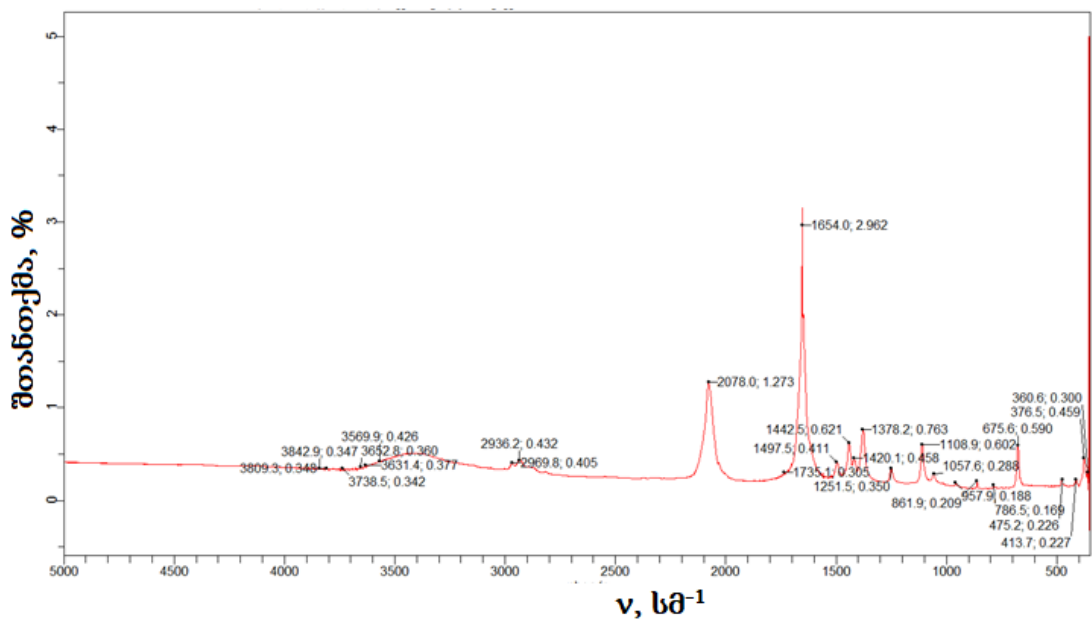
ნაერთები/მიკუთვნება	$\nu_{as}(CH_3)$	$\nu(CO)$	$\nu(CN)$	$\delta(CH)$	$\nu_{as}(CN)$	$r(CH_3)$	$\nu_s(CN)$	$\delta(CON)$	$\delta_{(ჩონჩხ)}$
DMF	3070.27 2931.41	1666.28	1496.56 1442.56	1388.56	1257.42	1095.42	864.00	663.43	442.55
[Ni(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]		16455.9	1495.6 1443.4	1376.3	1252.4	1057.6	865.7	682.1	477.1
[Mn(DMF) <sub>6</sub> ][Mn(SCN) <sub>4</sub> ]	2969.8	1654.0	1497.5 1442.5	1378.2	1251.5	1057.6	861.9	675.6	
[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Cu(SCN) <sub>4</sub> ]	3042.1	1642.2	1443,1	1385.6	1250.3	1094.8 1050.0	862.4	662.8	
[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Co(SCN) <sub>4</sub> ]	3061.4	1616.8			1112.0			685.6	



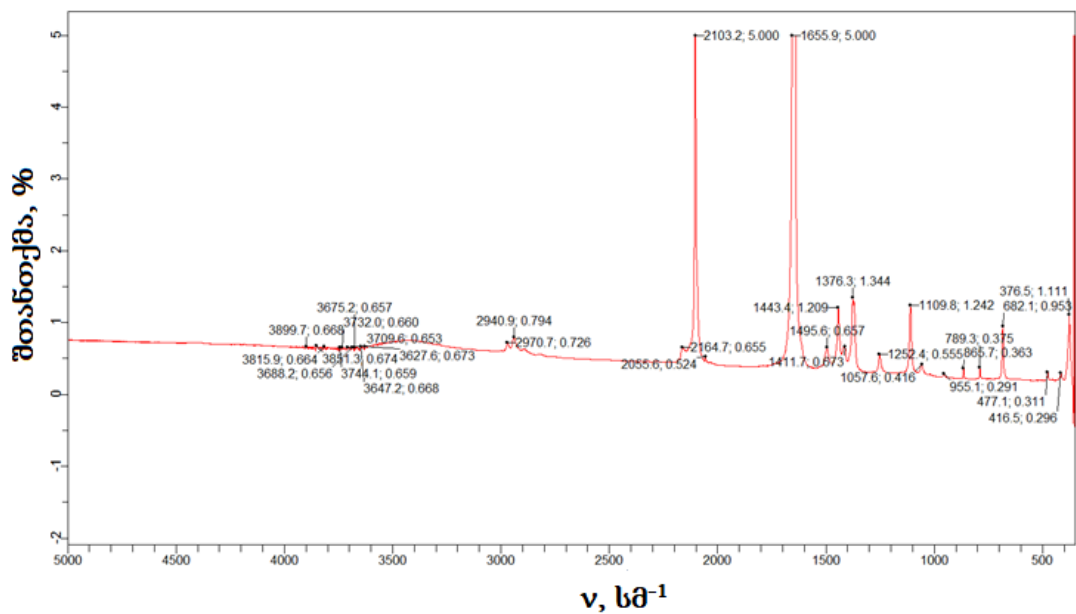
ნახ. 14.  $[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Co}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრები ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{სმ}^{-1}$ )



ნახ.15.  $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Cu}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{სმ}^{-1}$ )



ნახ. 16.  $[\text{Mn}(\text{DMF})_6][\text{Mn}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{cm}^{-1}$ )



ნახ. 17.  $[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{cm}^{-1}$ )

### 3.4.3. N,N-დიმეთილფორამიდთან 3d ბიმეტალური შერეულიღანდიანი კოორდინაციული ნაერთების ინფრაწითელი სპექტრების ანალიზი

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

ღიგანდის და სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრების ჩაწერას ვახდენდით  $400\text{-}4000\text{ სმ}^{-1}$  უბანში. ვიყენებდით პოლიკრისტალური ნიმუშების ვაზელინის ზეთში გასრესით სუსპენზიების მომზადების მეთოდს. სინთეზირებული კოორდინაციული ნაერთების იწ სპექტრების ზოგიერთი მახასიათებელი რხევის სიხშირეები მოყვანილია ცხრილი 32.-ში.

**ცხრილი 32.** N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე ბიმეტალური შერეულიღანდიანი მიღებული კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები ( $\text{სმ}^{-1}$ )

[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	478.0	604.8	615.9	644.8	657.9	705.4
	755.7	1109.8	1126.6	1138.7	1193.7	1384.7
	1193.7	1384.7	1463.9	1553.4	1652.1	2088.2
	2351.0	3403.1	3644.4	3707.8		
[Pb(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	416.5	477.1	682.1	789.3	825.6	864.7
	955.1	1057.6	1109.8	1251.5	1376.3	1419.2
	1496.6	1520.8	1558.0	1654.0	1733.2	1762.1
	1791.9	1844.1	2102.2	2894.3	2940.9	2968.8
[Fe(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	476.2	511.6	617.8	983.1	1117.3	1367.9
	1505.8	1558.0	1652.1	1733.2	1791.0	2064.0
	2359.4	2340.8	3391.9	3468.3	3586.6	3592.2
	3646.3	3668.6	3674.2	3687.3		
[Mn(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	416.5	455.7	617.8	668.1	720.3	1048.3
	1108.9	1388.4	1395.9	1437.8	1421.0	1491.9
	1458.3	1465.8	1500.3	1508.6	1540.3	1560.8
	1571.1	1629.8	1654.9	1664.3	1685.7	1719.2

	1752.8	1764.0	1786.3	1838.5	1919.6	2077.7
	2163.7	2341.7	2360.0	2974.4	3435.7	3461.8
[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	373.7	392.3	604.8	657.9	1113.5	1137.8
	1173.2	1194.6	1274.7	1419.2	1558.0	1606.5
	1657.7	1733.2	1747.2	1791.9	2077.1	2340.8
	2351.0	2850.5	2919.4	3429.2	3547.7	3571.7
	3618.3					
[Cd(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	392.3	457.5	668.0	1109.8	1656.8	2118.1
	2160.9	2146.0	2364.1	3235.0	3415.2	3435.7
	3497.2	3520.5	3563.3	3660.2		
[Zn(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(SCN) <sub>4</sub> ]	439.82	566.00	606.11	681.01	876.60	1070.00
	1083.65	1250.20	1382.63	1435.38	1647.28	2078.51
	2166.50	3173.92				

სინთეზირებული კომპლექსების იწ სპექტრებში გამოვლენილია ზოლის მცირედ ინტენსიური გახლეჩა რამოდენიმე კომპონენტად ~2919.4 - 3044.61 სმ<sup>-1</sup>უბანში. ისინი მიეკუთვნებიან მეთილის ჯგუფის ν(CH<sub>3</sub>) ვალენტურ რხევით სიხშირეებს.

ლიტერატურული მონაცემებიდან ცნობილია, რომ მესამეული ამიდების იწ სპექტრებში გამოვლენილია C=O ჯგუფის რხევითი სიხშირე (ე.წ. „ამიდ - I“) 1670 -1730 სმ<sup>-1</sup> უბანში. როგორც გვიჩვენებს სპექტრების ანალიზი, სინთეზირებული კომპლექსების იწ სპექტრებში აღინიშნება DMF-ის მოლეკულისთვის დამახასიათებელი ვალენტური ბმის რხევითი სიხშირეები. არაკოორდინირებული DMF-ს მოლეკულის სპექტრში ν(CO) გამოვლენილია 1666.28 სმ<sup>-1</sup>უბანში, ხოლო კოორდინირებული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში, აღნიშნული რხევის სიხშირეები მდებარეობს ~1629.8 – 1657.7 სმ<sup>-1</sup> უბანში, ე.ი. შემცირებულია ~8.58 -36.485 სმ<sup>-1</sup>-ით. ეს კი მიუთითებს იმაზე, რომ სინთეზირებულ კომპლექსებში DMF-ს მოლეკულის კოორდინირება კომპლექსწარმოქმნელ ლითონთან ხორციელდება DMF-ს მოლეკულის კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის ატომის მეშვეობით.

საშუალო ინტენსივობის სინგლეტური რხევის სიხშირეები, რომლებიც კომპლექსების სპექტრებში შეესაბამება „ამიდ - III“-ს, როგორც

არაკოორდინირებული, აგრეთვე კოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულაში გამოვლენილია  $\sim 1419.20 - 1496.6 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში.

— N — C = O ჯგუფის დეფორმაციული რხევითი სიხშირეები თავისუფალი, არაკოორდინირებული N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულისთვის გამოვლენილია  $\sim 663.43 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, ხოლო კოორდინირებისას გადანაცვლებულია უფრო მაღალ სიხშირულ უბანში  $\sim 678.75 - 681.09 \text{ სმ}^{-1}$  (ცხრილი 33.).

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

ნიკელის ატომების კოორდინირება თიოციანატ-იონთან ყველა სინთეზირებულ კომპლექსში ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით, რაზეც მიუთითებს  $\nu(\text{C}\equiv\text{N})$  ბმის სავალენტო რხევითი სიხშირეების არსებობა  $2064.0 - 2078.51 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში.

გამოვლენილია  $\nu(\text{CS})$  ჯგუფის ვალენტური ბმების რხევითი სიხშირეები  $745.06 - 835.01 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში, აგრეთვე  $455.7 - 477.1 \text{ სმ}^{-1}$  უბანში. გამოვლენილია  $\delta(\text{NCS})$  ჯგუფის დეფორმაციული რხევითი სიხშირეები, რაც ადასტურებს როდანიდული ჯგუფის კოორდინაციაზე ლითონის ატომთან აზოტის ატომის საშუალებით [110].

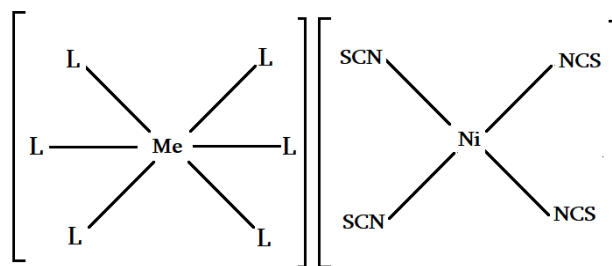
რხევითი სიხშირეების ამგვარი მომატება მეტყველებს იმას, რომ სინთეზირებულ ნაერთებში  $\text{NCS}^-$  - ჯგუფის კოორდინირება ნიკელის (II) ატომთან ხორციელდება აზოტის ატომის საშუალებით (იზოციანატური სტრუქტურა  $\text{M} \leftarrow \text{NCS}$ ).

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  $\nu(\text{CN}) \sim 2163.7 - 2172.89 \text{ სმ}^{-1}$  შესაბამისად.

ლიტერატურული მონაცემების მიხედვით 2100 სმ<sup>-1</sup> უბანში რხევითი სიხშირეების არსებობა მიუთითებს თიოციანატური ჯგუფის ხიდური ფუნქციის არსებობაზე [ 144].

$\nu(\text{CN})$  ჯგუფის მაღალსიხშირული კომპონენტი მიუთითებს  $\text{NCS}^-$  - ჯგუფის ხიდურ ფუნქციაზე, ხოლო დაბალსიხშირიანი კომპონენტი აგრეთვე მონოდენტური  $\text{NCS}^-$  ჯგუფის არსებობაზეც.  $\delta(\text{NCS})$  და  $2\delta(\text{NCS})$  სიხშირეები გამოვლენილია  $\sim 429.91 - 455.7$  სმ<sup>-1</sup> და  $955.1$  სმ<sup>-1</sup> უბანში შესაბამისად.

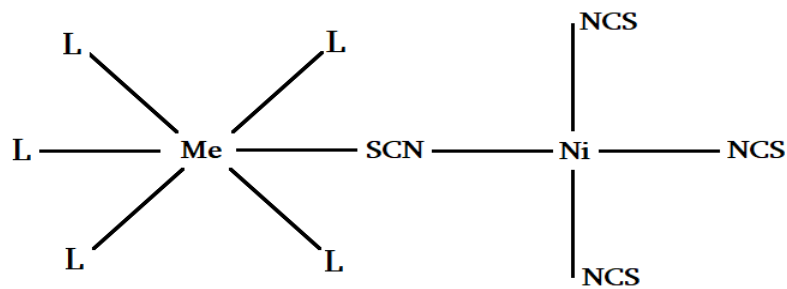
სინთეზირებული კომპლექსური ნაერთების იწ სპექტრების შესწავლის საფუძველზე შეგვიძლია ვივარაუდოთ, რომ სინთეზირებულია იონური ტიპის ბიმეტალური კომპლექსური ნაერთები, რომლებშიც კომპლექსურ ანიონს  $[\text{Ni}(\text{NCS})_4]^{2-}$  აქვს ტეტრაედრული აგებულება და თიოციანატური ჯგუფი კოორდინირებულია ცენტრალურ ატომთან 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.



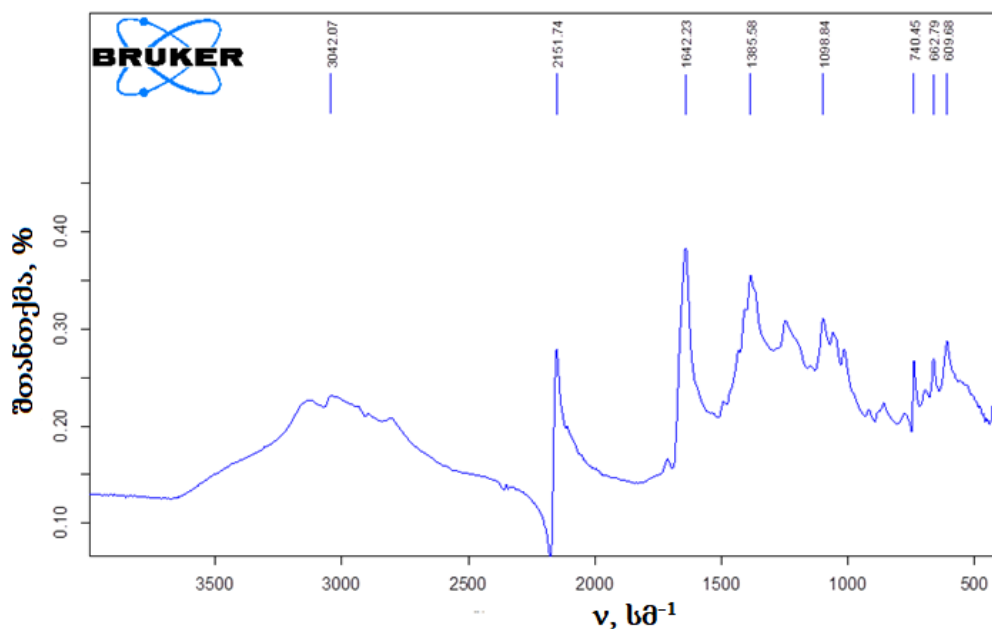
**$[\text{Me}(\text{DMF})_6][\text{Me}(\text{NCS})_4]$  ტიპის კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც  $\text{Me} = \text{Co}(\text{II}), \text{Fe}(\text{II}), \text{Pb}(\text{II}), \text{L} - \text{N,N-დიმეთილფორმამიდი}$**

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 -  $\text{Ni}^{2+}$  სამი მონოდენტატური თიოციანატ-იონი კოორდინირებული აზოტის ატომის საშუალებით, ხოლო მეოთხე თიოციანატ-იონი ასრულებს ხიდურ ფუნქციას.





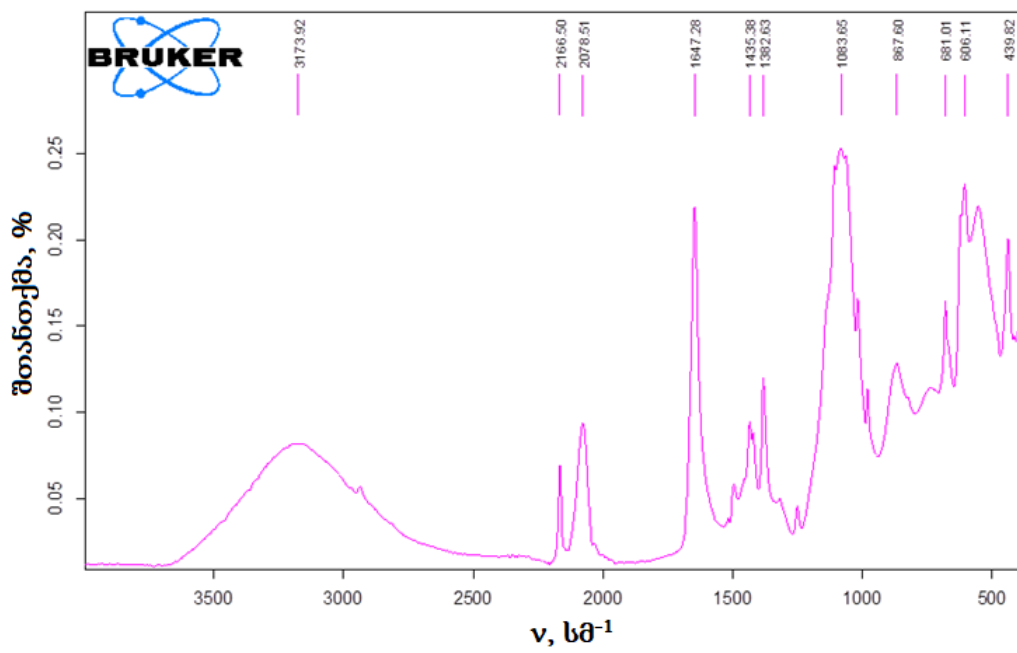
[Cu(DMF)<sub>5</sub>][Ni(NCS)<sub>4</sub>], [Zn(DMF)<sub>5</sub>][Ni(NCS)<sub>4</sub>], [Cd(DMF)<sub>5</sub>][Ni(NCS)<sub>4</sub>] და [Mn(DMF)<sub>5</sub>][Ni(NCS)<sub>4</sub>] კომპლექსური ნაერთების სტრუქტურა, სადაც L – N,N-დიმეთილფორმამიდი



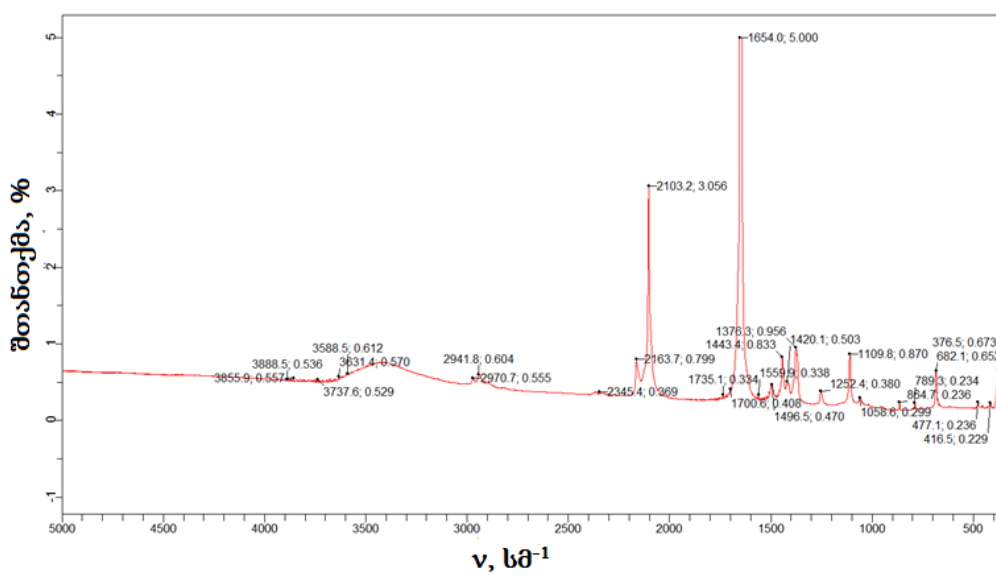
ნახ. 18. [Cu(DMF)<sub>5</sub>][Ni(NCS)<sub>4</sub>]-ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000 სმ<sup>-1</sup>)

ცხრილი 33. N,N-დიმეთილფორამიდის და მის საფუძველზე მიღებული ბიმეტალური შერეულიგანდიანი კოორდინაციული ნაერთების შთანთქმის იწ სპექტრებში ნაპოვნი ზოგიერთი მახასიათებელი რხევითი სიხშირეების მინიმუმები (სმ<sup>-1</sup>)

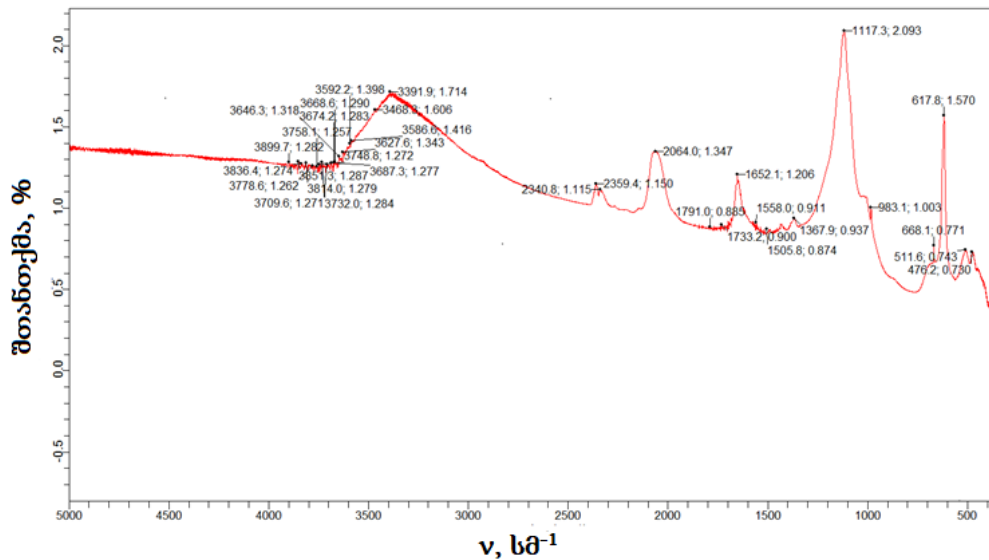
ნაერთები/მიკუთვნება	$\nu_{as}(CH_3)$	$\nu(CO)$	$\nu(CN)$	$\delta(CH)$	$\nu_{as}(CN)$	$r(CH_3)$	$\nu_s(CN)$	$\delta(CON)$	$\delta_{(წონწხ)}$
DMF	3070.27 2931.41	1666.28	1496.56 1442.56	1388.56	1257.42	1095.42	864.00	663.43	442.55
[Cu(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]		1644.23	1426.44	1384.83	1250.20	1066.31	863.03	678.75	429.91
[Zn(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]		1647.28	1435.38	1382.63	1250.20	1083.65	867.60	681.01	439.82
[Cd(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]		1656.8 1648.8		1382.44		1077.70 1109.70	870.00	681.09	437.86
[Co(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]	2919.4	1657.7	1419.2		1274.7				
[Fe(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]		1652.1		1367.9					
[Mn(DMF) <sub>5</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]	2974.4	1654.9 1629.8	1465.8	1388.4		1108.9 1048.4			
[Pb(DMF) <sub>6</sub> ][Ni(NCS) <sub>4</sub> ]	2941.8	1654.0	1496.5 1420.1		1250.4	1058.6	864.7	682.1	477.1



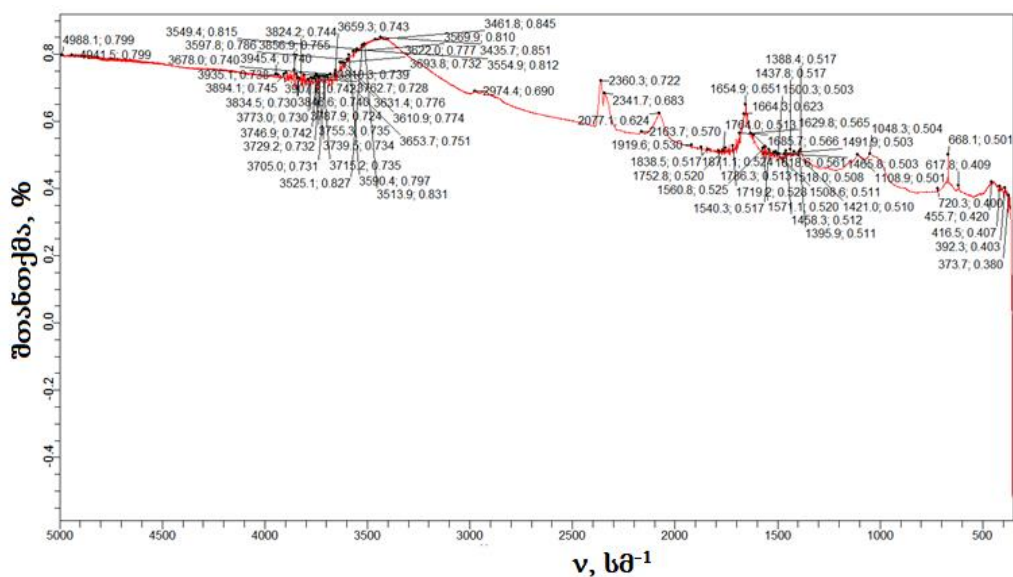
ნახ. 19.  $[Zn(DMF)_5][Ni(NCS)_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $cm^{-1}$ )



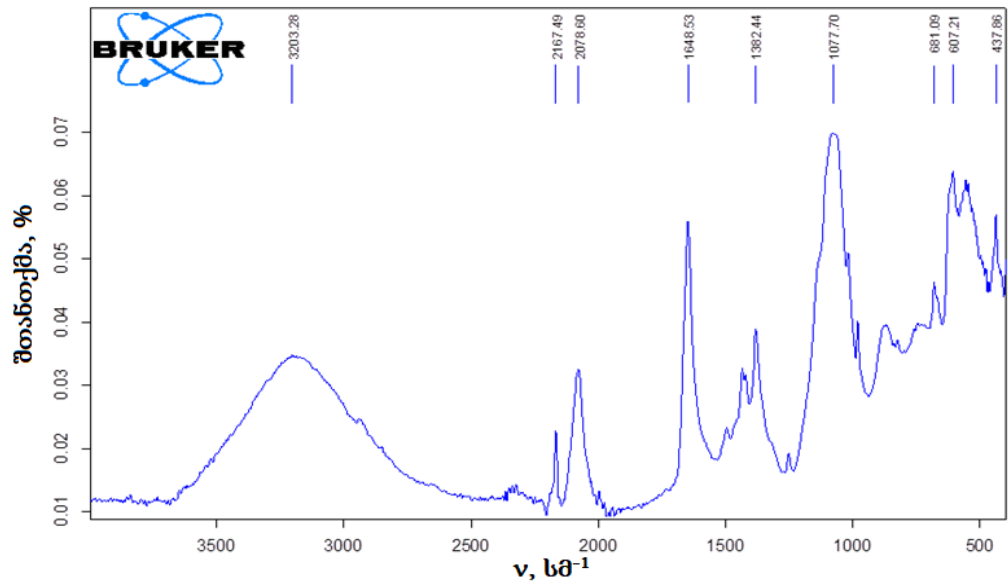
ნახ. 20.  $[Pb(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $cm^{-1}$ )



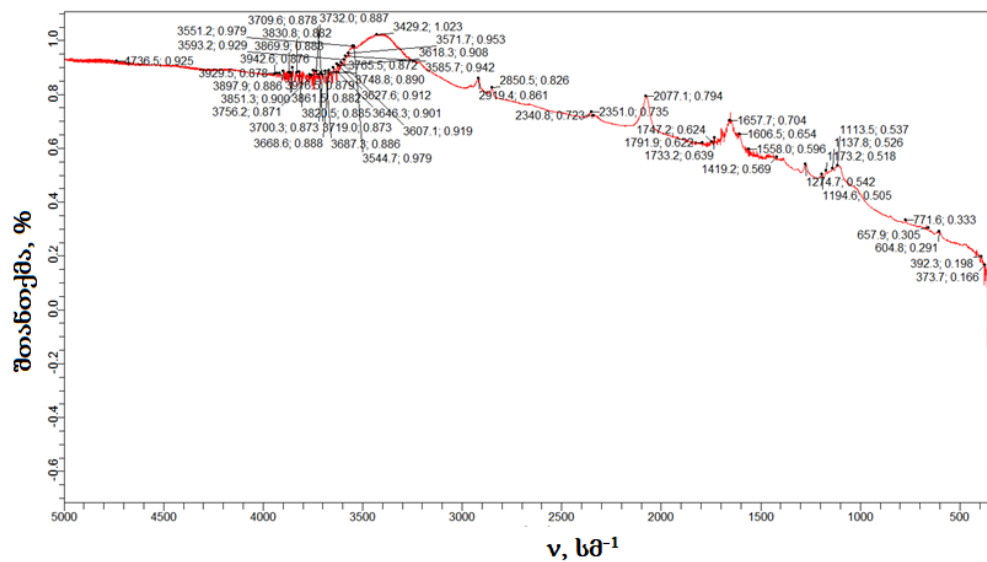
ნახ.21.  $[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{cm}^{-1}$ )



ნახ. 22.  $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრები ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{cm}^{-1}$ )



ნახ. 23.  $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{სმ}^{-1}$ )



ნახ. 24.  $[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$ -ს შთანთქმის იწ სპექტრი ვაზელინის ზეთში (400-4000  $\text{სმ}^{-1}$ )

## დასკვნა

1. შესწავლილია N,N-დიმეთილფორმამიდის მოლეკულის კომპლექს-წარმოქმნის უნარი სხვადასხვა გამხსნელში კვანტურ-ქიმიური ნახევრა-დემპირიული AM1 მეთოდით. გამოთვლილია აღნიშნულ მოლეკულის ძირითადი ენერგეტიკული, გეომეტრიული და სტრუქტურული მახასიათებლები, N,N-დიმეთილფორმამიდის მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან საკოორდინაციო ბმის წარმოქმნაში მონა-წილეობას 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-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-დიმეთილფორამიდთან თუთიის ყველა კომპლექსნაერთის მოლეკულის წარმოქმნის სიბზო 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 ნაციული 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), ტყვის (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 ლლობის ტემპერატურები. ასევე შესწავლილია დინამიური თერმოგრაფიუმეტრის მეთოდი- დადგენილია მასის ცვლილება %-ში და მასის ცვლილების სიჩქარე.
9. N,N-დიმეთილფორამიდის ექსწარმომქმნელთან 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 ექსნაერთებისთვის 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<sup>-</sup> 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  $[Cu(DMF)_5][Cu(NCS)_4]$ , მისშემთხვევაში 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 ასრულებს ხიდურ ფუნქციას.



17. N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულის კომპლექსწარმომქმნელთან და ასევე SCN<sup>-</sup>ჯგუფის კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირების წესის დადგენის მიზნით შესწავლილია სინთეზირებული ბიმეტალური შერეულიგანდიანინაერთების იწ სპექტრები.
18. სპექტრების შესწავლის საფუძველზე დადგენილია, რომ სინთეზირებულ ბიმეტალურ შერეულიგანდიანიკომპლექსებში N,N-დიმეთილფორამიდის მოლეკულა კოორდინირდება კომპლექსწარმომქმნელ 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.

## გამოყენებული ლიტერატურა

1. Verley, A. (1893). "Sur la préparation des amides en général" [On the preparation of amides in general]. Bulletin de la Société chimique de Paris. 3rd series (in French). 9: 690–692. On p. 692, Verley states that DMF is prepared by a procedure analogous to that for the preparation of dimethylacetamide (see p. 691), which would be by distilling dimethylamine hydrochloride and potassium formate.
2. Weissermel, K.; Arpe, H.-J. Industrial Organic Chemistry: Important Raw Materials and Intermediates. Wiley-VCH. pp. 45–46. ISBN 3-527-30578-5.
3. I.Archabault, R.Riverst. Canad. I. Chem. 36, 1461. 1958
4. Ю.Я.Харитонов, Г.В.Цинцадзе. Ж. Неорган. Химии. 10. 1, 35. 1965
5. В.В.Скопенко. Автореферат докторской диссертации. КГУ, Киев. 1970
6. A.I.Ingbanar, L.Curran. Nature, 202, 209. 1964
7. H.R.Klug.Z.Kristallogr., 86,№3-4,214 (1933)
8. Г.В.Цинцадзе. Кандидатская диссертация. Грузинский политехнический институт им.В.И.Ленина, Тбилиси,(1964).
9. Ю.Я.Харитонов, И.А.Розанов. Изв. АН.СССР, отд.хим. 4, вып.3, 402 (1962)
10. Г.С.Жданов, В.В.Санадзе, Ж.физ.химии, 26,469 (1952)
11. М.А.Порай-Кошиц. Автореф. докторской диссертации.ИКАН СССР,М., (1959)
12. J.Lewis, R.S.Nyholm, P.W.Smith. J.Chem.Soc. 4590(1961)
13. A.Tramer. Comp.rend., 250,3150(1960)
14. Э.К.Юхно, М.А.Порай-Кошиц, Кристаллография, 2, №2, 239 (1957)
15. М.А.Порай-Кошиц, Г.В.Цинцадзе. Труды грузинского политехн. Ин-та, 4(102), 61(1965)
16. M.Bassiere. Compt.rend., 206,1309(1937)
17. Ю.Я.Харитонов, Г.В.Цинцадзе, Ж. Неорг.химии, 10,1191 (1965)
18. A.Traner, J.Chem. hhys., 59, 232(1962)
19. J.Chatt, L.A.Duncanson, Nature, 178, 997 (1956)
20. L.Vallerino, J.Chem.Soc., 1957, 2473

21. Z.Chatt, L.A.Duncanson, E.A.Hart, P.G.Owston, *Nature*, 181,43,(1958)
22. M.M.Chamberlein, J.C.Bailar, *J.Amer.Chem.Soc.*,81,6412(1959)
23. P.C.H.Mitahell, R.J.P.Williams, *J.Chem.Soc.*, 1960,1912.
24. Ю.Я.Харитонов, Г.В.Цинцадзе, М.А.Порай-Кошиц. Докл. АН СССР, 160, №6, 1351 (1965)
25. A.Holm. *ActaChem.Scand.*, 22,№6,2019(1968)
26. D.Forster, D.M.I.Goodgame. *J.Chem.Soc.*,262(1965)
27. Ю.Я.Харитонов, Г.В.Цинцадзе, М.А.Порай-Кошиц. *Ж. неорган. химии*, 10, 792 (1965)
28. Z.Azoks, S.W.Peterson, R.B.Willet. *J.Amer.Chem.Soc.*,89,6131(1967)
29. Г.С.Жданов, З.В.Звонкова, *Успехи хим.*, 22, 3 /1953/
30. З.В.Звонкова, *Ж. Физ. хим.*, 26, 1798 /1952/
31. J.W.Jeffery, *Actacrjstalogr.*, 16, 13 (1963)
32. E.Prasson, A.Turco, C.Penattoni, *Gazz.Chim.Ital.*, 91,750(1961)
33. Гиви Цинцадзе, Маиа Цинцадзе, Тамар Гиоргадзе. Изучение инфракрасных спектров поглощения соединений с XCN-группами. Технический университет. Тбилиси. 2017
34. Г.В.Цинцадзе, М.А.Порай-Кошиц, А.С.Анцышкина, *Ж.структурн.хим.*, 5,148, 796 /1964/ 8, 296 /1967/
35. M.Nordelli, G.FavaGasparri, G.GizaldiBattistini, P.Domino, *Actacristallorg.*, 20, 349(1966)
36. J.W.Jeffery, *Actacrjstalogr.*, 16, 13 (1963)
37. В.В.Скопенко, Г.В.Цинцадзе, А.И.Брусилонец. *Укр. Хим. Ж.* 36, 5 (1970)
38. Г.В.Цинцадзе. Исследование цианатных, тиоцианатных и селеноцианатных соединений металлов. Автореферат на соиск. ученой степени доктора химических наук. Тбилиси. 1970
39. K.P.Sarma, Raj K.Poddar. MIXED LIGAND COMPLEXES OF NICKEL(II) AND COBALT(II). *Journal of Coordination Chemistry* . Volume 12, 1983 - Issue 4. Pages 237-242 | Received 17 Aug 1982, Published online: 13 Dec 2006

40. VahidAmani, Nasser Safari, Hamid Reza Khavasi, PeimanMirzaei. Iron(III) mixed-ligand complexes: Synthesis, characterization and crystal structure determination of iron(III) hetero-ligand complexes containing 1,10-phenanthroline, 2,2'-bipyridine, chloride and dimethyl sulfoxide, [Fe(phen)Cl<sub>3</sub>(DMSO)] and [Fe(bipy)Cl<sub>3</sub>(DMSO)]. *Polyhedron*. Volume 26, Issue 17, 30 October 2007, Pages 4908-4914
41. Janice L. Wong, Robert F. Higgins, IndraniBhowmick, David Xi Cao,<sup>a</sup> GézaSzigethy, Joseph W. Ziller, Matthew P. Shores, Alan F. Heyduk. Bimetallic iron-iron and iron-zinc complexes of the redox-active ONO pincer ligand. *Chem Sci*. 2016 Feb 1; 7(2): 1594-1599. Published online 2015 Dec 8. doi: 10.1039/c5sc03006d
42. Salah Massoud, FebeeLouka, Franz Andreas Mautner. Polynuclear and Polymeric Squarato-Bridged Coordination Compounds. *CrystEngComm*, 2015, 17, 7604
43. Малиновский С.Т., Коропчану Э.Б., Болога О.А. и др. // Журн. структурн. химии. – 2007. -48. №3. – С. 548
44. Рижан А.П., Коропчану Э.Б., Болога О.А. и др. // Журн. структурн. химии. – 2007. -48. №6. – С. 1197
45. Ronald R. Ruminiski, Jeffrey A. Canaria, Roberto Padilla. New bimetallic [(Cl)<sub>3</sub>Pt(dpop')M(dpop')](PF<sub>6</sub>) (M = Ru(II) and Os(II); dpop' = dipyrido (2,3-*a*:3',2'-*j*)phenazine) complexes using dpop' as a novel mixed denticity bridging ligand. *Inorganica Chimica Acta*. Volume 401, 24 May 2013, Pages 95-100
46. Nathanael Lau. Monometallic and Bimetallic Complexes with Sulfonamido-Based Tripodal Ligands. DISSERTATION submitted in partial satisfaction of the requirements for the degree of DOCTOR OF PHILOSOPHY In Chemistry. UNIVERSITY OF CALIFORNIA, IRVINE. 2017
47. Nathanael Lau, Yohei Sano, Joseph W. Ziller and A.S. Borovik. Modular bimetallic complexes with a sulfonamido-based ligand. 2017
48. H. Suzuki and S.-I. Ishiguro. *N,N*-Dimethylformamide Complex of Aluminium(III) Perchlorate. *Acta Cryst.* (1998). C54, 586-588.

49. Huanhuan Liu, Wen Yang, Weiqun Zhou, Yunlong Xu, Juan Xie, Mengying Li. Crystal structures and antimicrobial activities of copper(II) complexes of fluorine-containing thioureido ligands. *Inorganica Chimica Acta* 405 (2013) 387–394
50. FERIEL AOUATEF SAHKI, LYAMINE MESSAADIA, HOCINE MERA-ZIG, AISSA CHIBANI, ABDELMALEK BOURAIOU & SOFIANE BOUACIDA. Synthesis, X-ray structure and theoretical investigation of 2-(2'-quinoly)benzimidazole metal complexes. *Journal of Chemical Sciences* volume 129, pages 21–29 (2017)
51. Narang K.K., Singh M. Complexes of Zn(II), Cu(II), Ni(II) and Co(II) TetrathiocyanatoMercurates(II) with Hydrazides and Their Biological Activity // *Synth. React. Inorg. Metal-Org. Chem.* – 1985. – Vol. 15, N 6. – P. 821-837.
52. Narang K.K., Pandey J.P., Singh K.P., Rai P.K. Synthesis, Characterization, IR and Electronic Spectra, Magnetic Moments and Biological Activity of Trinuclear Nickel(II) TetrathiocyanatoBisArgentate(I) Complexes with Hydrazides and Hydrazones // *Synth. React. Inorg. Metal-Org. Chem.* – 1990. – Vol. 20, N 10. – P. 1301- 1316. <http://dx.doi.org/10.1080/00945719008048635>.
53. Narang K.K., Pandey J.P. Synthesis, Characterization, Solid State Conductance and Thermal Studies of Trinuclear Cobalt(II) Tetrathiocyanatodiargentate(I) Complexes with Hydrazides and Hydrazones // *Synth. React. Inorg. Metal-Org. Chem.* – 1992. – Vol. 22, N 1. – P. 65-81.
54. Narang K.K., Pandey J.P. Synthesis, Characterization, Solid State Conductance and Thermal Studies of Trinuclear Cobalt(II) Tetrathiocyanatodiargentate(I) Complexes with Hydrazides and Hydrazones // *Synth. React. Inorg. Metal-Org. Chem.* – 1992. – Vol. 22, N 1. – P. 65-81.
55. Narang K.K., Pandey J.P. Synthesis, Characterization, Solid State Conductance and Thermal Studies of Some Bivalent Transition Metal TetrathiocyanatoBiscuprate(I) Complexes with Hydrazides and Hydrazones // *Synth. React. Inorg. Metal-Org. Chem.* – 1994. – Vol. 24, N 4. – P. 589-611. <http://dx.doi.org/10.1080/00945719408000136>.

56. Е.Г. Гумбрис. СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ГЕКСА(ИЗОТИОЦИАНАТО)ФЕРРАТА (III) ОКТА(ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИД) ВИСМУТА (III). ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2010. Стр. 84-86
57. Cambridge Structural Database. Release 2010 (V5.31), Cambridge.
58. Bowmaker G.A., Yffrowfield J.M., Junk P.C., Skelton B.W., White A.H. // *Aust.J.Chem.* 1998. V.51. P.285
59. Naslund J., Persson I., Sandstrom M. // *J. Inorg. Chem.* 2000. V. 39. P.4012
60. Shi Wang, Yi-Zhi Li, Jing-Lin Zuo, Cheng-Hui Li, Xiao-Zeng You // *J. Acta Crystallogr., Sect. C:Cryst.Struct.Commun.* 2004. V.60.
61. Addison A.W., Dutcher R.J., Homonnay Z., Pavlishchuk V.V., Prushan M.J., Thompson L.K. // *Eur. J. Inorg. Chem.* 2005. P.2404.
62. T. G. Cherkasova, N. V. Kurateva, N. V. Pervukhina, D. A. Barantsev. Bimetallic Mixed-Ligand Cobalt(II), Nickel(II), and Copper(II) Complexes [MHg(C<sub>6</sub>H<sub>6</sub>N<sub>2</sub>O)<sub>2</sub>(SCN)<sub>4</sub>]: Synthesis and Crystal Structure. *Russian Journal of Inorganic Chemistry* . April 201964(4):459-464
63. V. A. Khutornoi, NikolayNaumov, Yuri V. Mironov, O. Oeckler. *Russian Journal of Coordination Chemistry* 28(3) · Vol. 28, No. 3, 2002, pp. 183–190
64. Е.В.Черкасов. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ БИМЕТАЛЛИЧЕСКОГО РАЗНОЛИГАНДНОГО КОМПЛЕКСА [Lu(ε-C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>NO)<sub>4</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>][Cr(NCS)<sub>6</sub>]. Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2009. № 120
65. Cherkasova E. V. Synthesis and crystal structure of octa(ε-caprolactam) neodium(III) hexa(isothiocyanate)chromate(III) / E. V. Cherkasova, A. V. Virovets, E. V. Peresypkina, N. V. Podberezskaya, T. G. Cherkasova // *Inorg. Chem. Commun.* - 2006. - V. 9. -№ 1. -P. 4-6.
66. Cherkasova E. V. Octakis(ε-caprolactam-kO) erbium(III) hexaisothiocyanatechromate(III)/ E. V. Cherkasova, A. V. Virovets, E. V. Peresypkina, N. V. Podberezskaya, T. G. Cherkasova // *Acta Crystallogr. Sect. C.: Cryst. Struct. Comm.* - 2007. V. 63. - P. m195-m198.

67. Черкасова Е. В. Сесквигидрат гекса(изотиоцианато)хромат(III) тетрааква(ε-капролактама) лютеция(III) / Е. В. Черкасова, А. В. Вировец, Е. В. Пересыпкина, Т. Г. Черкасова // Журн. неорган. химии. - 2009. – Т. 54. - № 2. – С. 315-320.
68. Т.Г. Черкасова, Э.С. Татарина, Е.В. Черкасова, И.П. Горюнова. СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ. ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2010, стр. 30-31
69. Cherkasova E. V., Virovets A. V., Peresyupkina E. V., Podberezskaya N. V., Cherkasova T. G. // Inorg. Chem. Commun., 2006. – V. - №1. – P. 4-6.
70. Cherkasova E. V., Peresyupkina E. V., Virovets A. V., Podberezskaya N. V., Cherkasova T. G. // Acta Crystallogr. Sect. C: Cryst. Struct. Comm., 2007. – V. 63. – P. 195-198.
71. Т.Г. Черкасова. ДВОЙНЫЕ КОМПЛЕКСНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ – КООРДИНАЦИОННЫЕ ПРЕКУРСОРЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАТЕРИАЛОВ. IV Всероссийская конференция “Химия и химическая технология: достижения и перспективы” 27-28 ноября 2018 г. Стр. 158.1-158.5
72. Е.В.Черкасова, Т.Г.Черкасова, И.П.Горюнова, И.В.Исакова, Т.В.Буланова. Получение и сравнительная характеристика комплексных соединений на основе роданидных анионов хрома (III). Вестник Кузбасского государственного технического университета. 2016. №1. Стр. 161- 163
73. N. Upadhayay. SYNTHESIS, SPECTRAL CHARACTERIZATION AND ANTIMICROBIAL SCREENING OF CO(II), CD(II) AND HG(II) COMPLEXES WITH N, N', - BIS (BENZYLIDENE)-1, 2 – PHENYLENEDIAMINE SCHIFF BASE. World Journal of Pharmaceutical Research Volume 5, Issue 4, 1034-1041.
74. N. UPADHAYAY. Metal complexes of Co(II), Cd(II) and Hg(II) with N, N',-Bis (Benzylidene)-1,3, Phenylenediamine Schiff Base, Synthesis, Characterization and Antimicrobial studies. International Journal of Chemical and Physical Sciences. IJCPS Vol. 6, No.6, Nov-Dec 2017

75. R. MAKHIJA, L. PAZDERNIK, AND R. RIVEST. Cobalt(II) Mercury Tetrathiocyanate Complexes with Lewis Bases. CAN J CHEM VOL 51, 1973. P. 438-447
76. Zdeněk Smékal, František Březina, Zdeněk Šindelař and Roman Klička. Polynuclear complexes of chromium(III), copper(II) or nickel(II) with thiocyanate as a bridging ligand. Transition Met. Chem., 22, 299±301 (1997). 299- 312
77. Органические растворители. Вайсенберг А., Прокауэр Э., Риддик Дж., Тупе Э.М.: 1958. 516 с.
78. Теоретическая и экспериментальная химия. Пилипенко А.Е., Заец В.А., Фелендыш У.Р., Горлов Ю.Н. 1988. Т. 24, №6. 713 с.
79. Dewart M.S., Zoebish E.G., Rcoly E.F., Stewart I.I.// AM1: A New Purpose quantum Mechanical Molekular Model. A.Amer. chem. Soc. 1985. V. 107. P. 3902-3909.
80. Pople I.A., Santry D.P., Segal G.A. Apporoximate self-consistent molecular orbital reory. I. Chem. Prys. 1963. V. 43. N. 10. P. 129-130.
81. Fletcher R.// H.K.Stom. Energy Anth Res. Group. NAERER 7125. 1972. 29 p.
82. Компьютерная химия. Кларк Т.М. Мир. 1990. 88 с.
83. N.Gegeshidze, L.Skhirtladze, A.Mamulashvili, T.Edilashvili, N.Maisuradze. Solvent Effect on Complex Formationon Dimethylsulfoxide. Modern Researcehes snd Prospects of their Use in Chemistry, Chemical Engineering and Related FieldsInternationsl Scienrific Conference, September 21-23, 2016, Ureki, Georgia
84. N.Gegeshidze, L.Skhirtladze, A.Mamulashvili, T.Edilashvili, N.Maisuradze. Solvent Effect on Complex Formation on Dimethylsulfoxide. საქართველოს მეცნიერებათა ეროვნული აკადემიის მაცნე, ქიმიის სერია, 2016. ტ.42,№3 გვ. 312-313
85. Маррел Дж., Кент С., Тедер Дж. Химическая связь. М.Мир. 1980. 383 с.
86. D.Martu, A.Neise, U.Niclas. Angew. Chem. 79, 340 (1967)



87. Цинцадзе М.Г. Координационные соединения металлов с азот- и кислородосодержащими лигандами – производными алифатического, ароматического и гетероциклического ряда. Национальная Академия Наук Грузии. Тбилиси 2008. 247с
88. М.Г.Абесадаძე, Н.Г.Гегეშიძე, Н.О.Киласонია, Д.М.Лочошвили, М.Г.Цинцаძე.  
Квантовохимическое исследование координационных соединений нитрата и сульфата цинка с N,N-диметилформамидом (DMF). *კერამიკა* ISSN 1512-0325
89. N.Gegeshidze, M.Tsintsadze, L.Skhirtladze, A.Mamulashvili, T.Edilashvili. Synthesis and Spectra of Coordination compounds of 3d-metals with N,N-Dimethylformamide. International Mini-Symposium “Bioactive Compounds, Antimicrobial and Biomedical Products & Materials for Protection of Human and Environment”. May 4-5, 2018, Tbilisi, Georgia. p.56-57
90. N.Gegeshidze, N.Bolqvadze, A.Mamulashvili, M.Tsintsadze. Coordination compounds of Manganese (II) Chloride with DMSO and DMFA: synthesis, structure, properties. International Scientific and Methodological conf. “Chemistry- Achievements and Prospects” dedicated to the 85<sup>th</sup> Anniversary of Acad. Givi Tsintsadze. Scientific Works. 19-20 October, Tbilisi. 2019. p.31-34
91. D.Margievi, N.Gegeshidze, M.Tsintsadze, N.Kilasonia. Synthesis of coordination compounds of some biologically d-metals. International Conference of Students and Young Scientists “Chemistry Today and in Future” November 16-17, 2018, Tbilisi, Georgia. p. 53-54
92. ლ.ჩხატარაშვილი, დ.მარგიევი, ნ.გეგეშიძე, ნ.ბოლქვაძე. მანგანუმის (II) და ნიკელის (II) კოორდინაციული ნაერთების სინთეზი N,N-დიმეთილფორმამიდთან და შთანთქმის იწ სპექტრები. სტუდენტთა 86-ე ღია საერთაშორისო სამეცნ. კონფერენცია. საქ. ტექნიკური უნივერსიტეტი. თბილისი. 15 ივნისი 2018. გვ. 197
93. ნ.გეგეშიძე, ა.მამულაშვილი, ნ.ბოლქვაძე, თ.ედილაშვილი. გ.ცინცაძე. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ბიოლოგიურად აქტიური ლითონების ქლორიდების კომპლექსური ნაერთების სინთეზი და იწ სპექტრების

- კვლევა. 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. ISBN 978-9941-8-1875-2 გვ. 24
94. ლ. არაბული, ნ. გეგეშიძე, ლ. ხირტლადე, მ. ცინცაძე. Синтез и исследование ИК спектров полиядерных разнолигандных металлов с N,N-диметилформамидом. Межд. Науч.-тех. конф. «Охрана природы и устойчивое развитие» посв. 80 лет. Проф. В. Эристави. Тезисы докладов. 11-12 Ноябрь, 2019. ISBN 978-9941-8-1875-2. с. 22
95. აბესაძე მ., გეგეშიძე ნ., ცინცაძე მ., ცინცაძე გ. Синтез и исследование ИК спектров биметаллических разнолигандных переходных металлов с N,N-диметилформамидом. Межд. Науч.-тех. конф. «Охрана природы и устойчивое развитие» посв. 80 лет. Проф. В. Эристави. Тезисы докладов. 11-12 Ноябрь, 2019. ISBN 978-9941-8-1875-2. с. 23.
96. Гутман В. Химия координационных соединений в неводных растворах. - М.: Мир, 1971. - С. 197-202 (диметилсульфоксид как растворитель)
97. V. A. Khutornoi, Nikolay Naumov, Yuri V. Mironov, O. Oeckler. Russian Journal of Coordination Chemistry 28(3) · Vol. 28, No. 3, 2002, pp. 183–190
98. R. MAKHIJA, L. PAZDERNIK, AND R. RIVEST. Cobalt(II) Mercury Tetrathiocyanate Complexes with Lewis Bases CAN. J. CHEM. VOL. 51, 1973
99. Upadhyay N., Synthesis, Characterization and Biological Studies of Some Thiocyanato-bridged Bimetallic Complexes Containing Co(II), Cd(II), Hg(II) and N, N'-Bis(benzylidene)- 1,2-phenylene-diamine Schiff Base, Chem. Sci. Trans., 2013; 2(2): 455-460.
100. Tomkiewicz A., Kłak J. and Mroziński J., Bimetallic complexes with macrocyclic ligands. Variation of magnetic exchange interactions in some heteronuclear thiocyanato-bridged compounds, Materials Science-Poland, 2004; 22(3): 253.

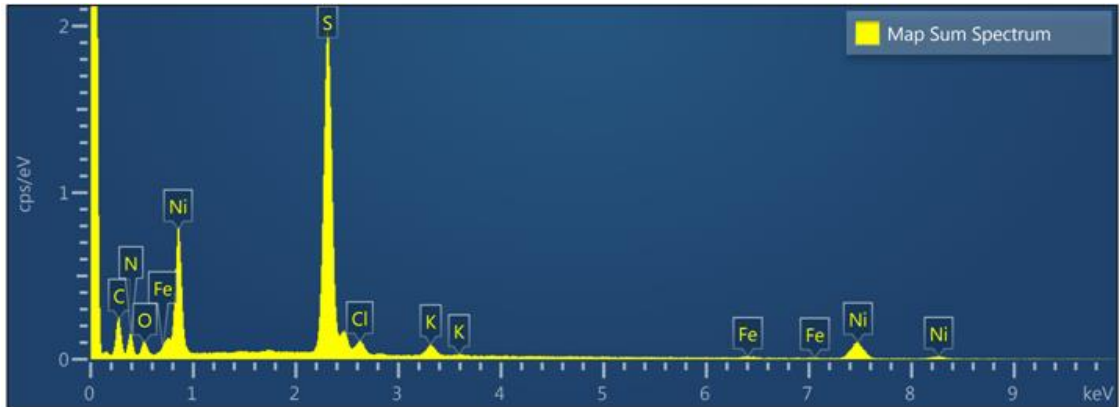
101. Shukla S. N., Nigam H. K., Upadhayay N., Khan S. and Srivastava A., J Appl. Biosci., 2006, 32(1), 68.
102. Usha R.J., Mani J.A.M and Joseph V., Impedance analysis of bimetallic thiocyanate ligand based single crystals of  $\text{MnHg}(\text{SCN})_4$  and  $\text{CdHg}(\text{SCN})_4$ , Archives of Appl. Sci. Res. 2012; 4(1): 638-644.
103. Т.Г. Черкасова, Э.С. Татарина, Е.В. Черкасова, И.П. Горюнова, И.В. Исакова, А.А. Бобровникова, А.В. Тихомирова, С.В. Кочнев. СИНТЕЗ, СВОЙСТВА И ПЕРСПЕКТИВЫ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ БИМЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ. ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 3 2010. С. 30-31
104. Е.В. Черкасова, Т.Г. Черкасова, Э.С. Татарина. ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СОЛЕЙ МЕТАЛЛОВ С ГЕКСА (ИЗОТИОЦИАНАТО) ХРОМАТОМ(III) КАЛИЯ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ. ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 4-1 2011. С. 32-34
105. Т.Г.Черкасова, А.В. Тихомирова, Е.В.Черкасова. ДВОЙНЫЕ КОМПЛЕКСНЫЕ СОЛИ С КАТИОНАМИ ОКТА(ε-КАПРОЛАКТАМ)ЛАНТАНОИДОВ(III) ЦЕРИЕВОЙ ГРУППЫ. ХИМИЧЕСКАЯ ТЕХНОЛОГИЯ. УДК 54-386:[ 546.494.654-659.763.]:547.18
106. Т.Г. Черкасова. БИМЕТАЛЛИЧЕСКИЕ ТИОЦИАНАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ: СИНТЕЗ, ИССЛЕДОВАНИЕ, НОВЫЕ МАТЕРИАЛЫ Химическая технология 123- 125 УДК 54-386
107. E. A. Gerasimova, T. V. Utkina, E. V. Peresypkina, A. V. Virovets, T. G. Cherkasova Mixed-ligand complexes  $[\text{Cd}(\text{DMSO})_5(\text{NCS})][\text{Cr}(\text{NH}_3)_2(\text{NCS})_4] \cdot 3\text{DMSO}$  and  $[\text{Mn}(\text{DMSO})_4(\text{H}_2\text{O})_2][\text{Cr}(\text{NH}_3)_2(\text{NCS})_4]_2 \cdot 6\text{DMSO} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ : Syntheses and crystal structures Russian Journal of Inorganic Chemistry volume **54**, pages 692–697(2009)
108. Z.Gogberashvili, M.Tsintsadze, N.Gegeshidze. QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF THE COORDINATION COMPOUNDS OF NITRATE, SULFATE, CHLORIDE AND ZINC BROMIDE WITH DIMETHYL SULFOXIDE (DMSO) International Conference of Students International Conference of Students and

Young Scientists and Young Scientists “CHEMISTRY TODAY AND IN FUTURE” “CHEMISTRY

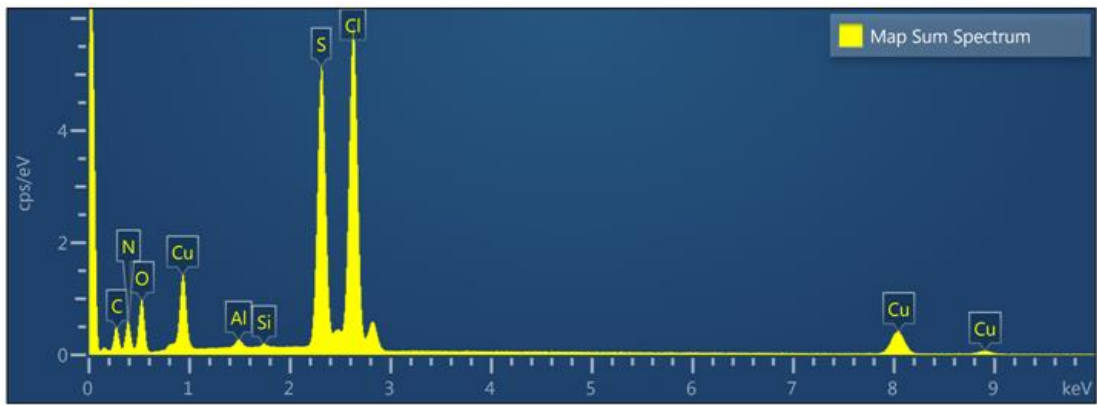
109. ნ.გეგეშიძე, ა.მამულაშვილი, ნ.ბოლქვაძე, თ.ედელაშვილი, გ.ცინცაძე. N,N-დიმეთილფორმამიდთან ბიოლოგიურად აქტიური ლითონების ქლორიდების კომპლექსური ნაერთების სინთეზი და იწ სპექტრების კვლევა. ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის პროფესორ ვიქტორ დიმიტრის-ძე ერისთავის დაბადებიდან 80 წლისადმი მიძღვნილი საერთაშორისო სამეცნიერო-ტექნიკური კონფერენციის „გარემოს დაცვა და მდგრადი განვითარება“. 11-12 ნოემბერი, 2019. ISBN 978-9941-8-1875-2. გვ. 24
110. Голуб А.М. Химия псевдогалогенидов / А.М. Голуб, Х. Келер, В.В. Скопенко // Киев: Вища шк. , 1981. –360с.
111. Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений. –М.: Мир, с. 1966

დანართი

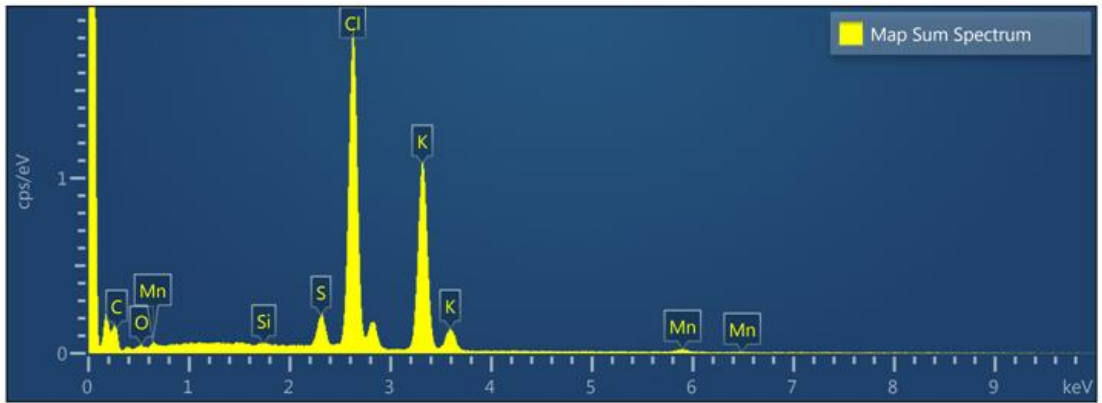
## ელემენტური ანალიზის სპექტრები და სურათები



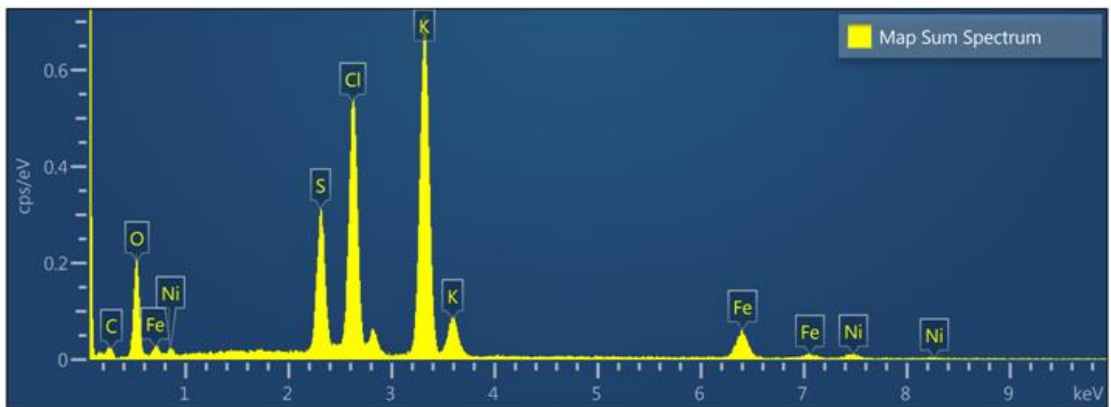
სურ:1  $[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი



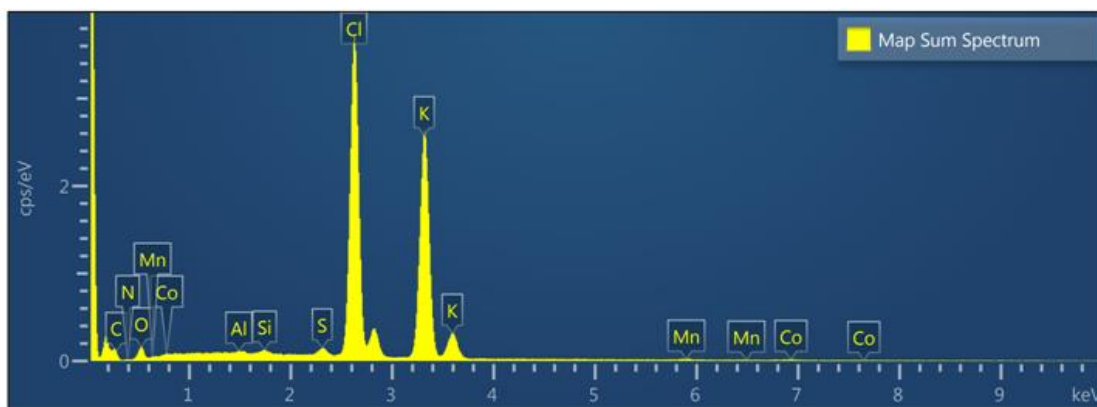
სურ.2  $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Cu}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი



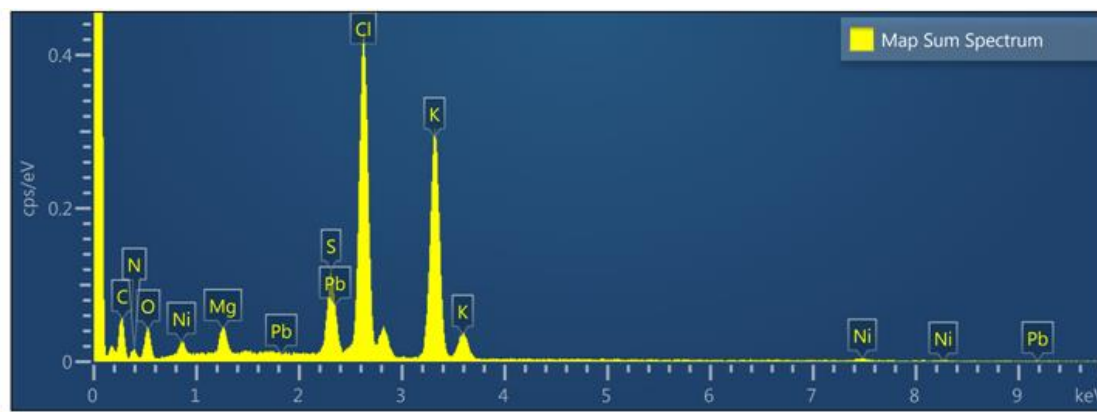
სურ.3  $[\text{Mn}(\text{DMF})_6][\text{Mn}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი



სურ.4  $[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი

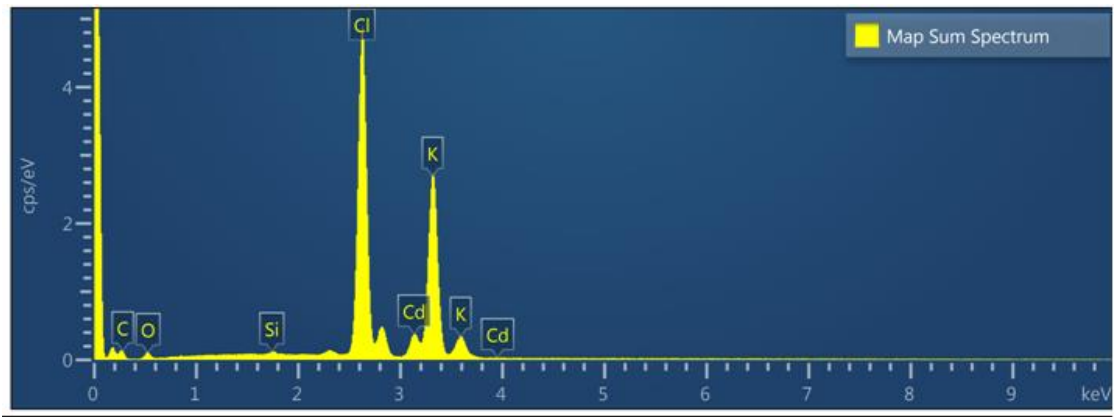


სურ.5  $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი

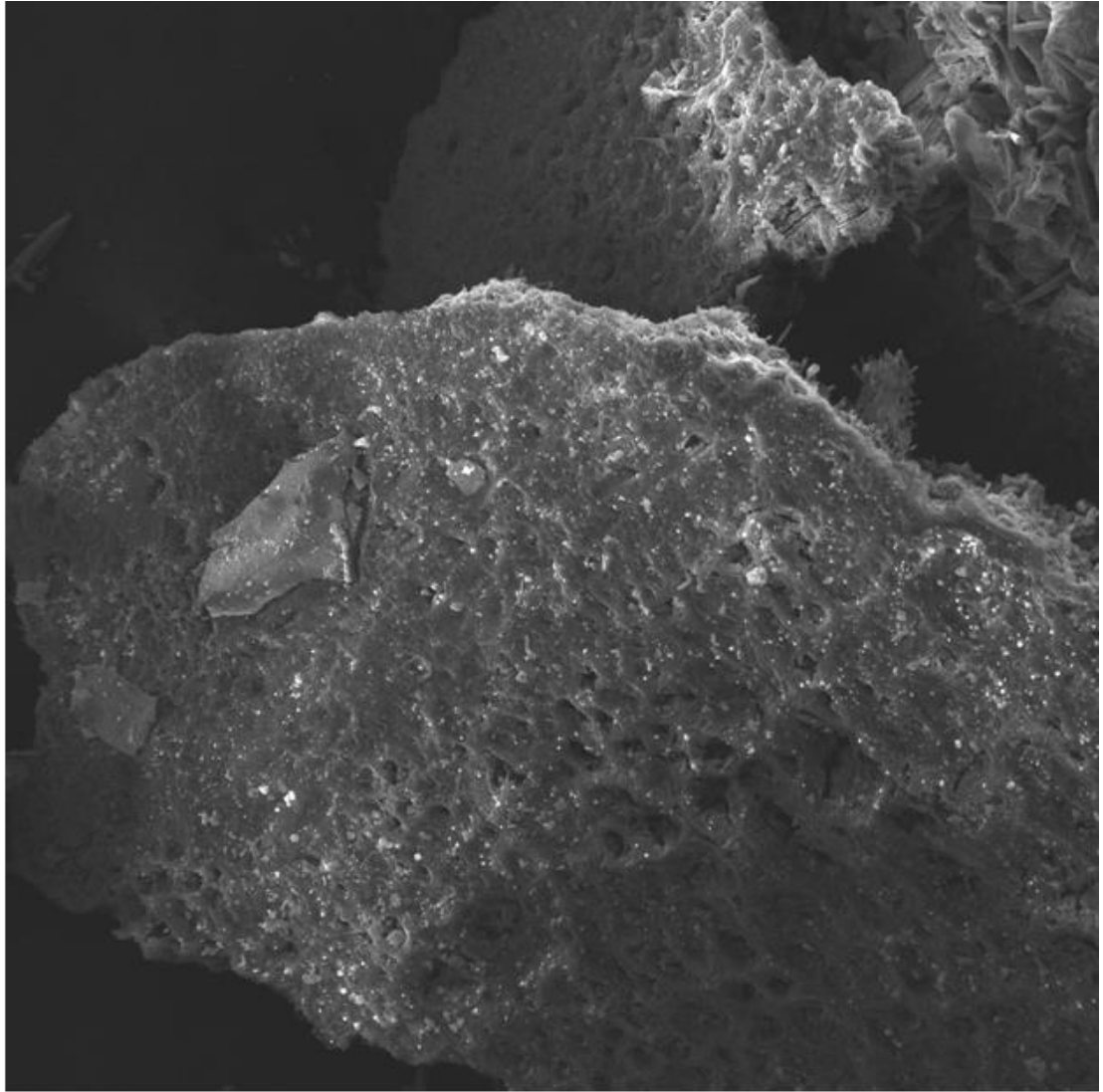


სურ.6  $[\text{Pb}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი

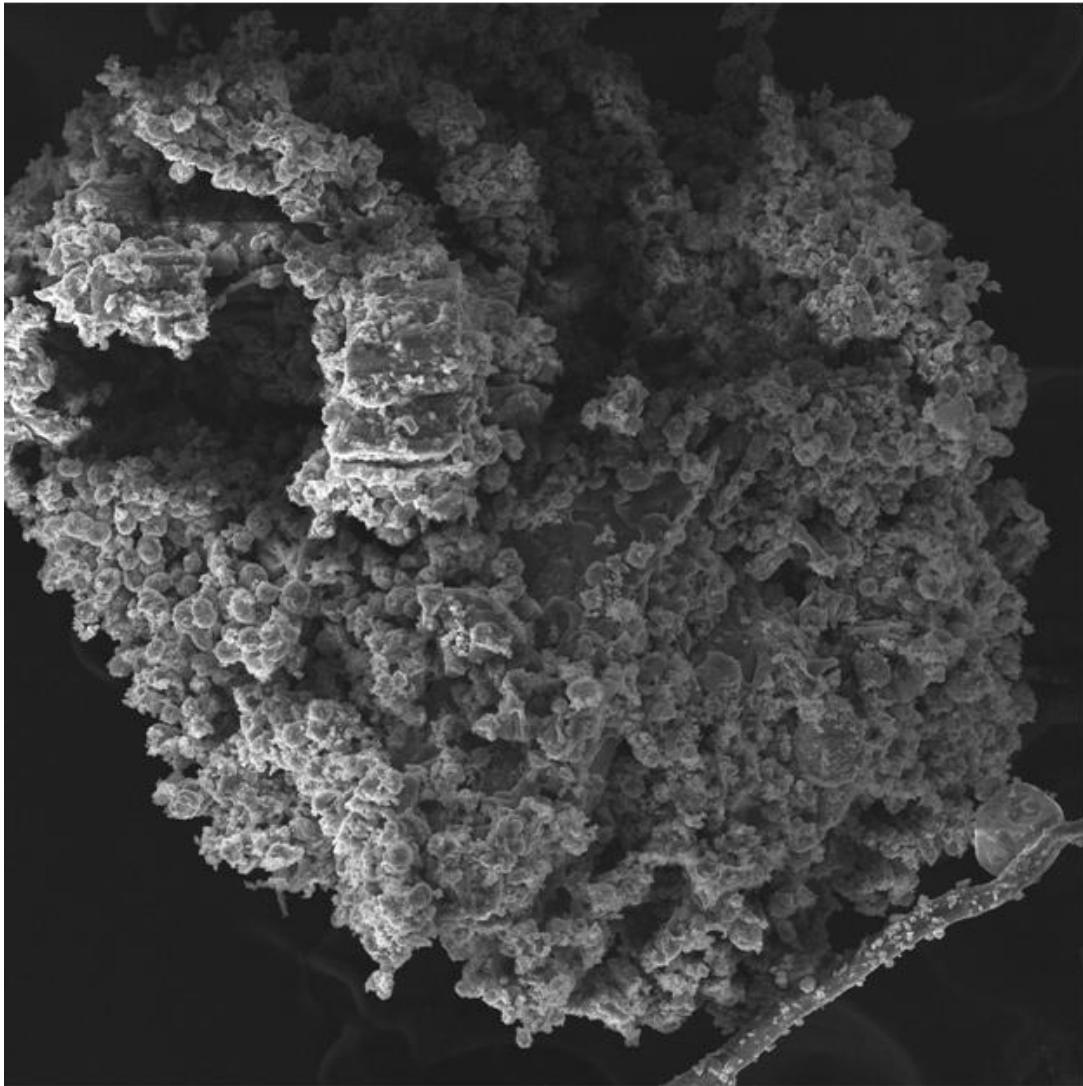




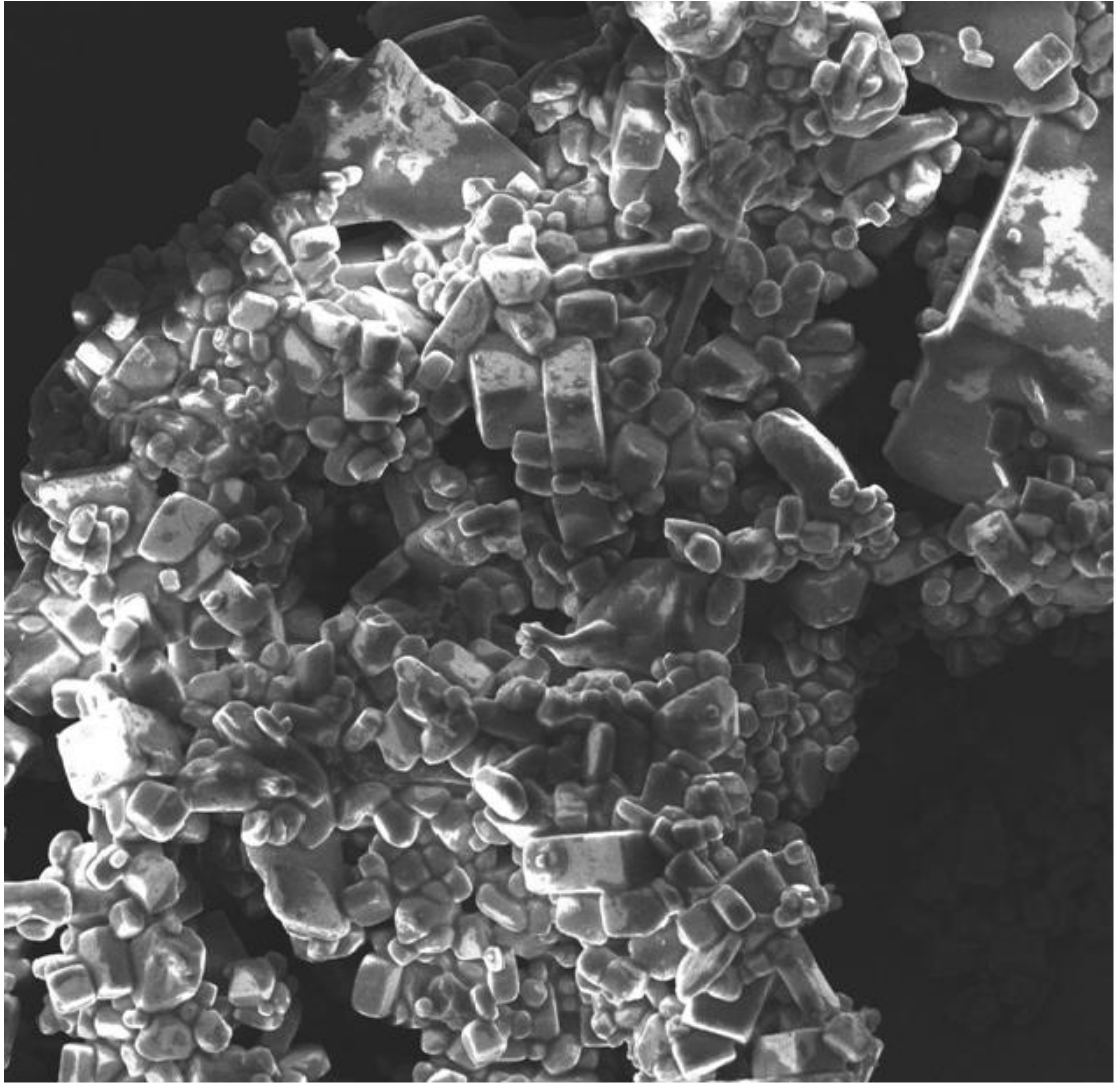
სურ.7  $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რენტგენული გამოსხივების ენერგოდისპერსული სპექტრი



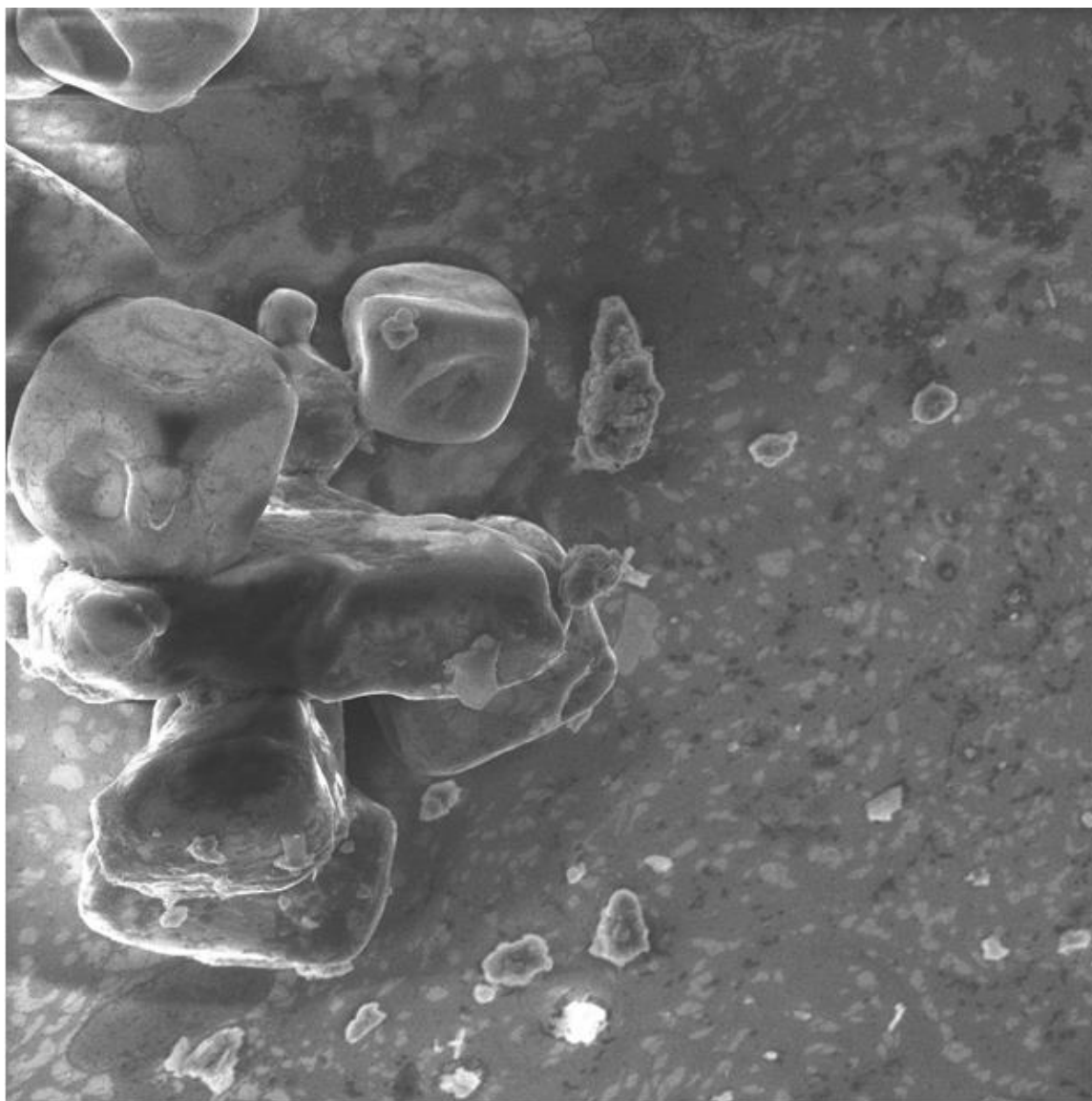
სურ.8  $[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.



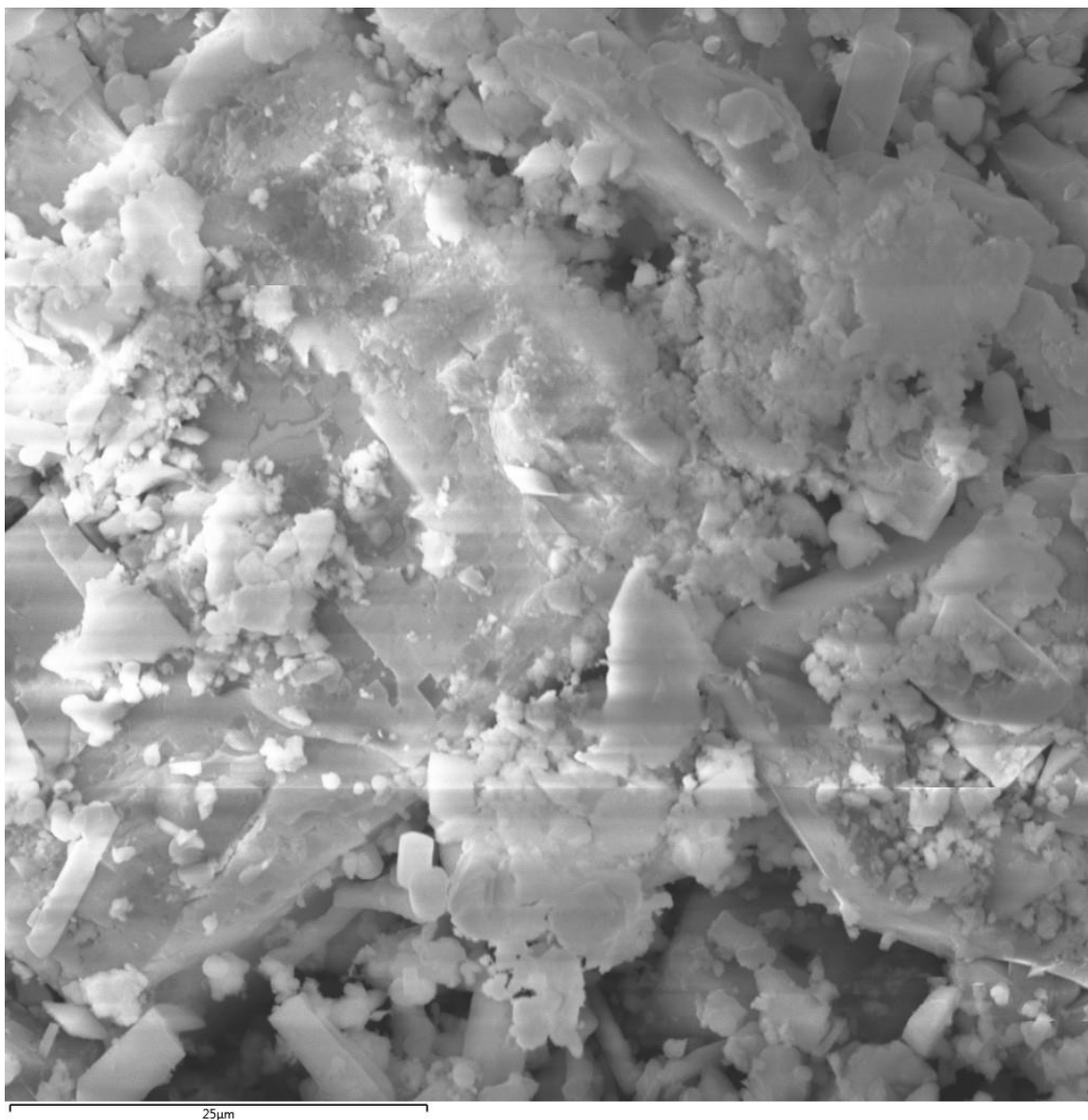
სურ.9  $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Cu}(\text{NCS})_4]$  - ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.



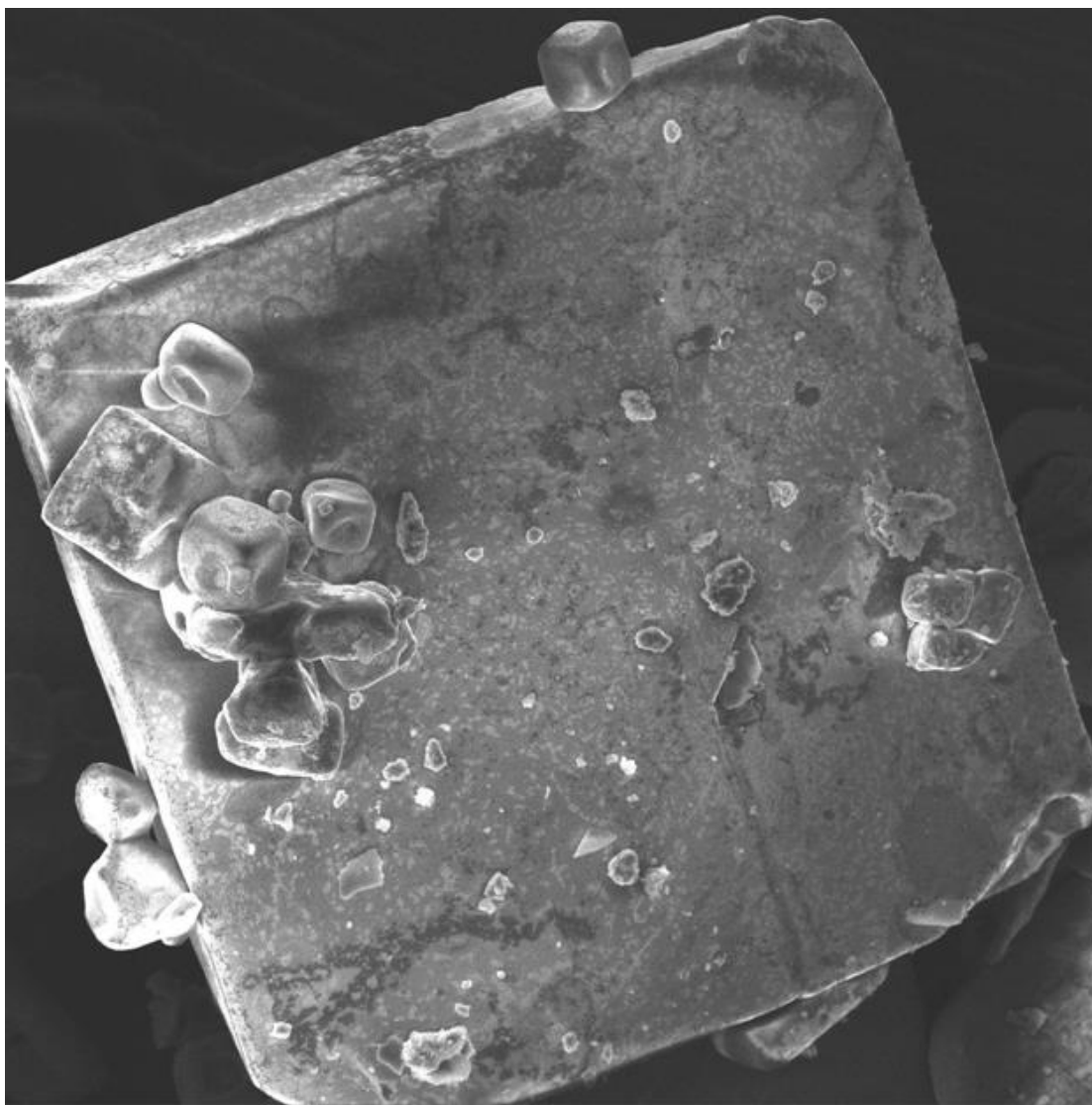
სურ.10  $[\text{Mn}(\text{DMF})_6][\text{Mn}(\text{NCS})_4]$  -ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.



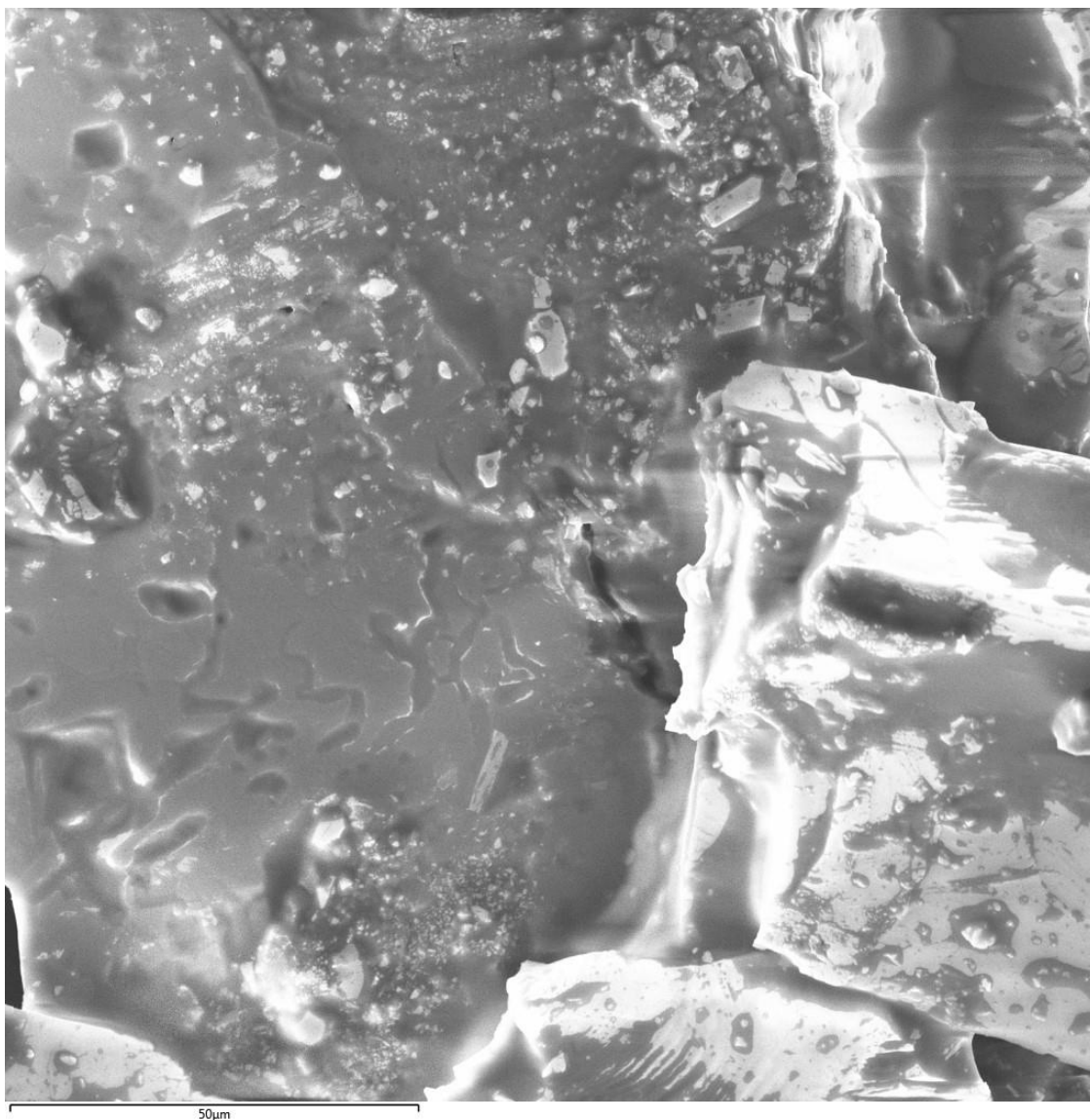
სურ.11  $[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.



სურ.12  $[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.

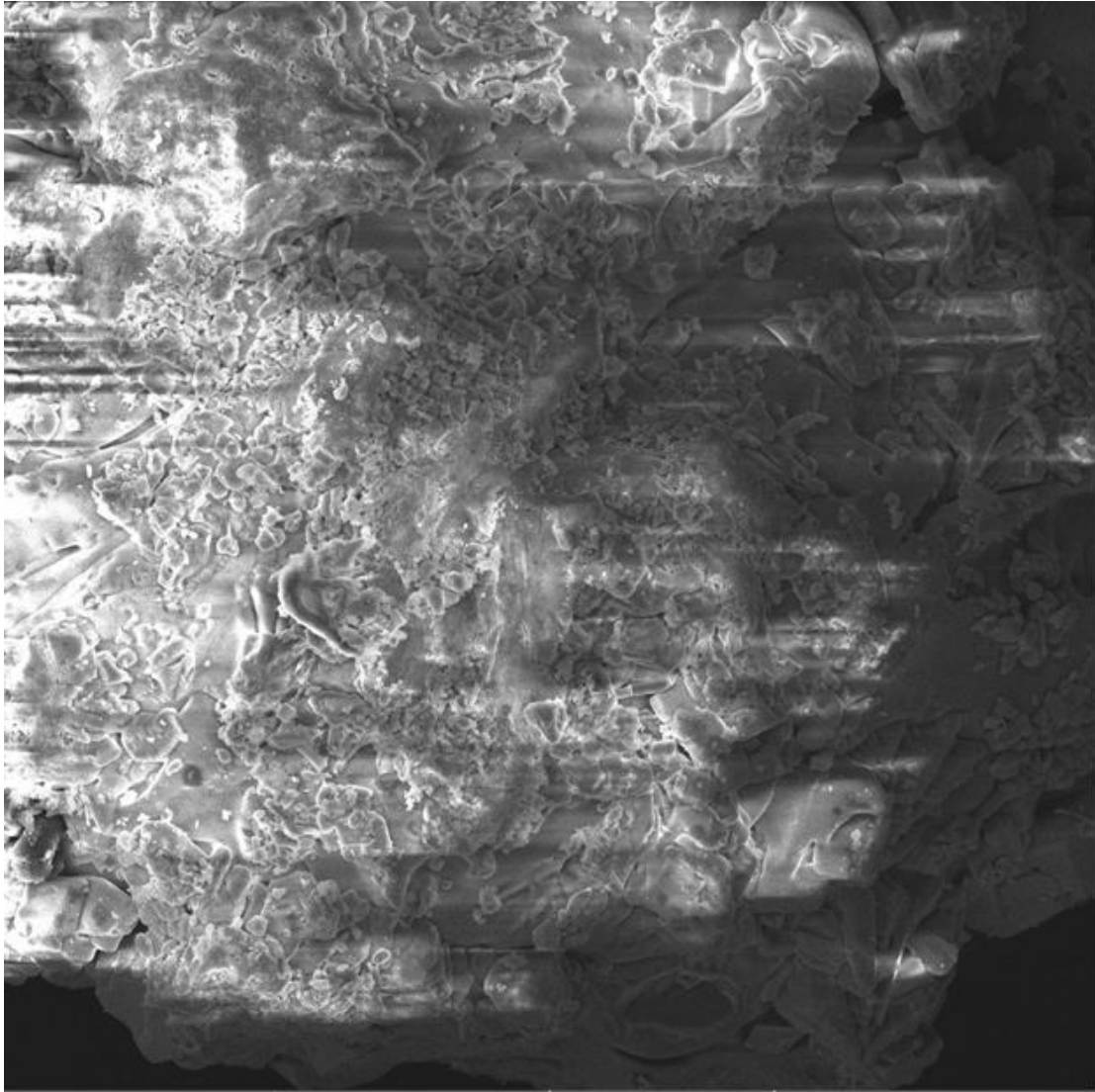


სურ.13  $[\text{Mn}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.



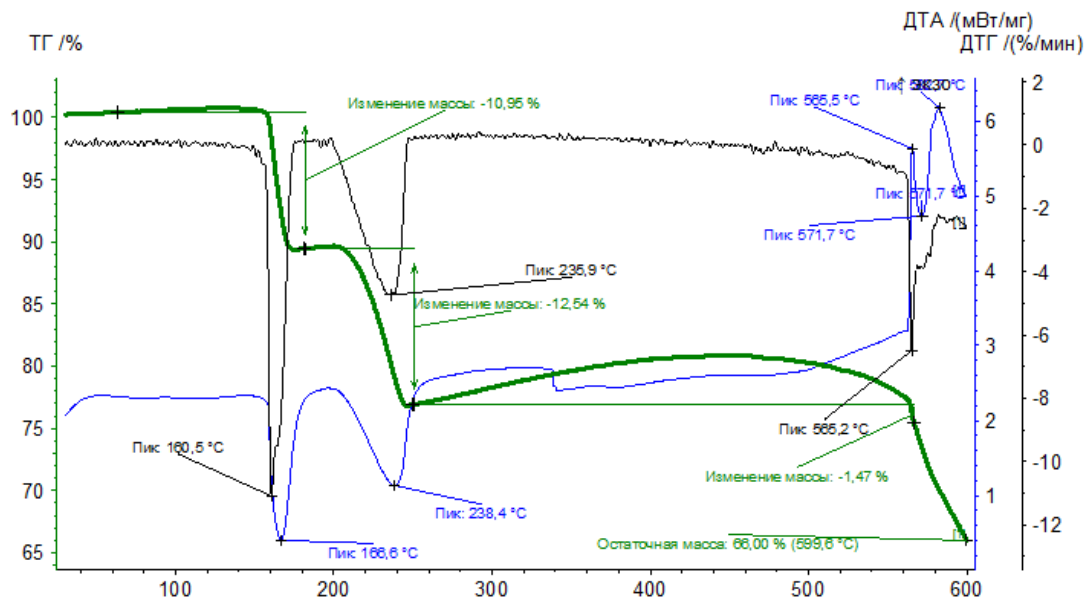
სურ.14  $[\text{Pb}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.





სურ.15  $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{SCN})_4]$  -ის რასტრული ელექტრონული მიკროსკოპი (რემ) გამოსახულება რენტგენული გამოსხივების გამოყენებით.

## თერმოგრაფიკული კვლევა

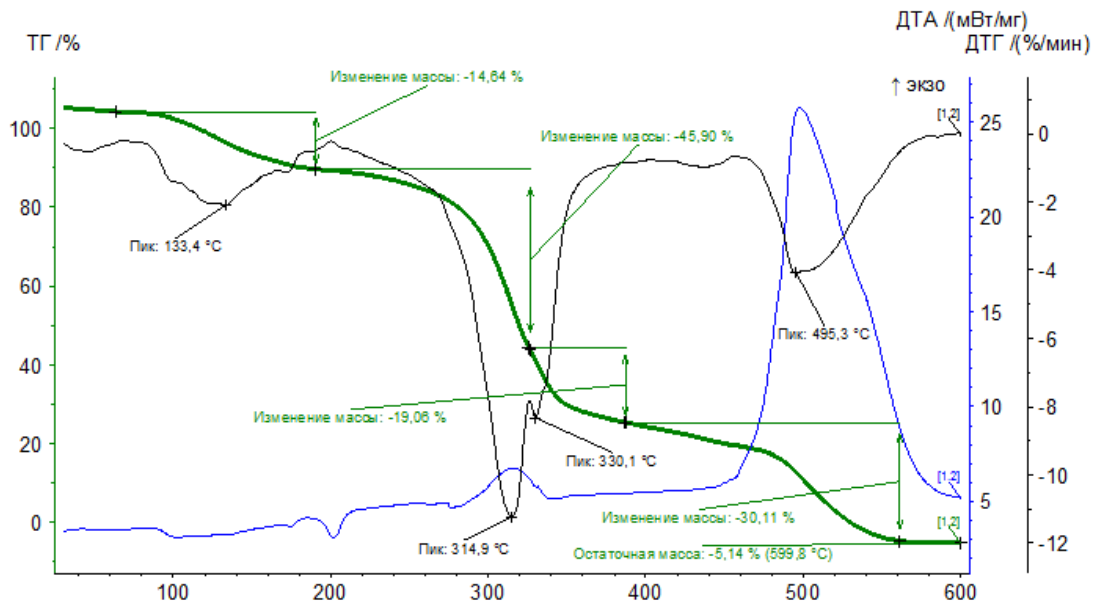


სურ.16  $\text{CdCl}_2 \cdot 4\text{DMF}$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 166.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 10.95 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 238.4 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 12.54 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 565.2 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 1.47 % (ეგზოთერმული ეფექტი).

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 160 °C-მდე გახურებისას.

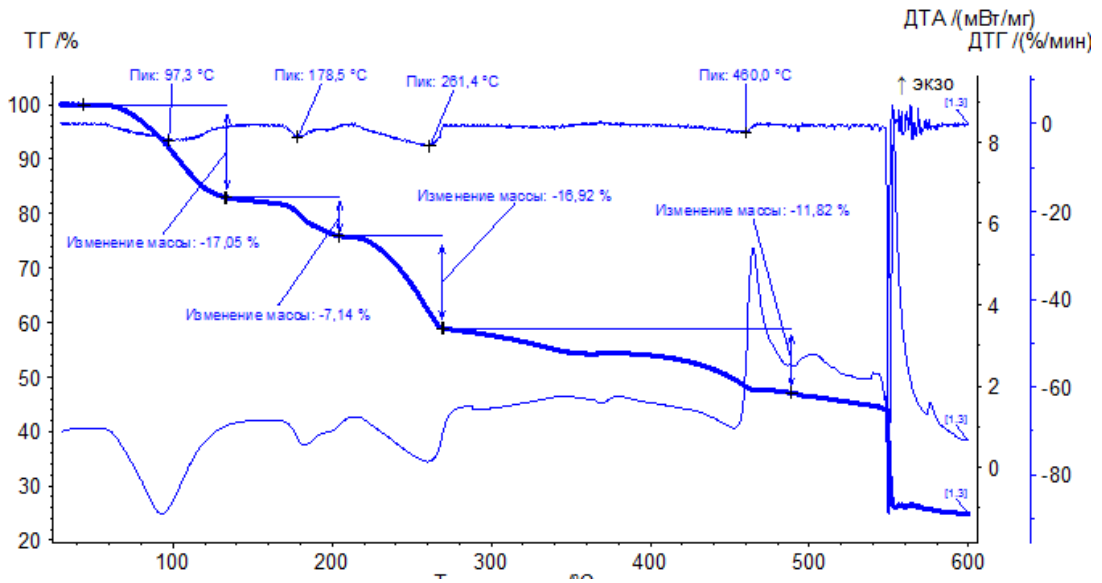


სურ.17  $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{DMF}$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 133.4 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 14.64 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 314.9 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 45.90 %.(ეგზოთერმული ეფექტი)
3. 495.3 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 30.11 % (ეგზოთერმული ეფექტი).

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს, რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.

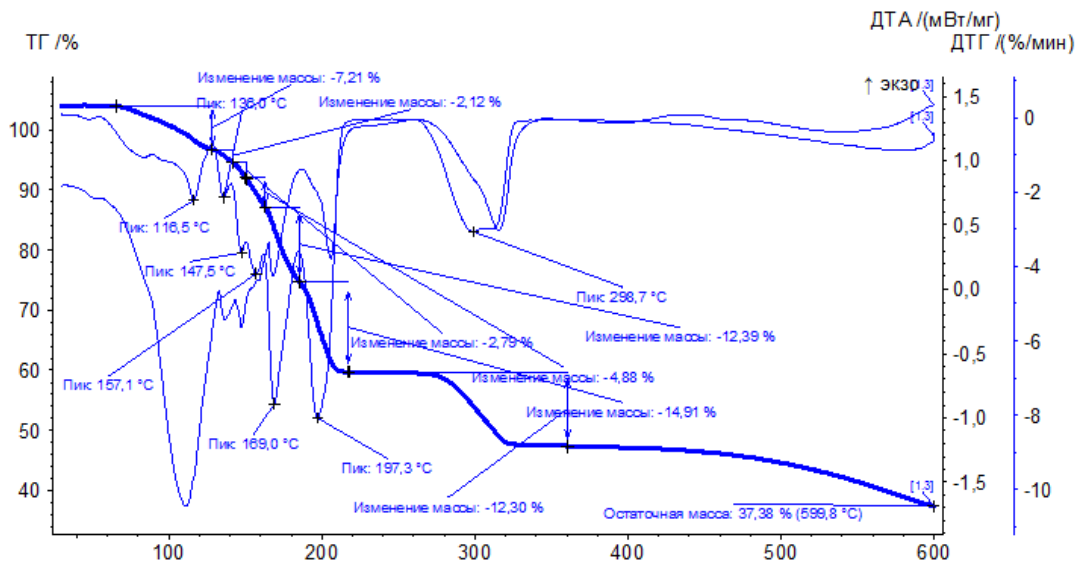


სურ.18  $\text{CuCl}_2 \cdot 4\text{DMF}$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 97.3 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 17.05 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 178.5 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 7.14 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 261.4 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 16.92 % (ენდოთერმული ეფექტი).
4. 460.0 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 11.82 % (ეგზოთერმული ეფექტი).

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 60 °C-მდე გახურებისას.

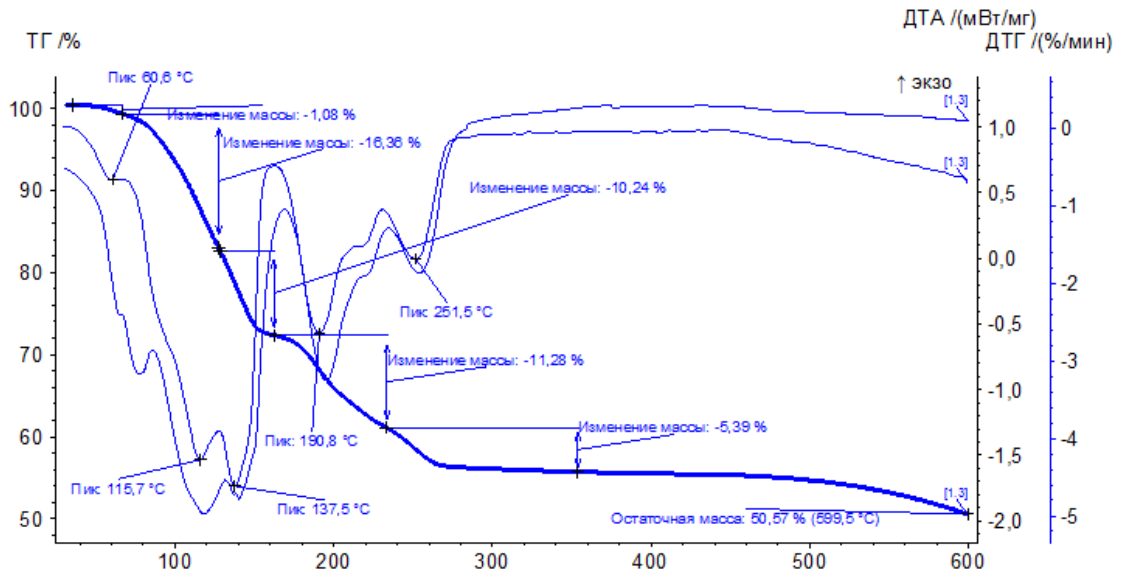


სურ.19  $MnCl_2 \cdot 6DMF$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 110.7 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 2.12 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 136.5 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 12.39 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 147.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 2.79 % (ენდოთერმული ეფექტი).
4. 165.5 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 4.88 % (ეგზოთერმული ეფექტი).
5. 205.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 14.91 % (ენდოთერმული ეფექტი).
6. 315.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 12.30 % (ენდოთერმული ეფექტი).

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.

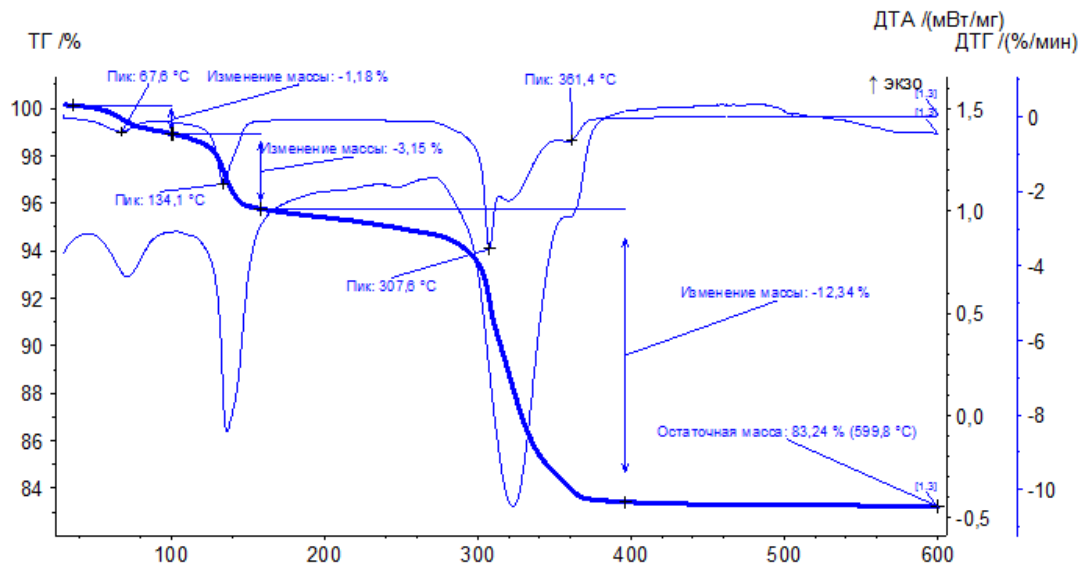


სურ.20 NiCl<sub>2</sub>·6DMF -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 60.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 1.08 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 115.7 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 16.36 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 137.5 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 10.24 % (ენდოთერმული ეფექტი).
4. 190.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 11.28 % (ენდოთერმული ეფექტი).
5. 251.5 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 5.39 % (ეგზოთერმული ეფექტი).

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 60 °C-მდე გახურებისას.

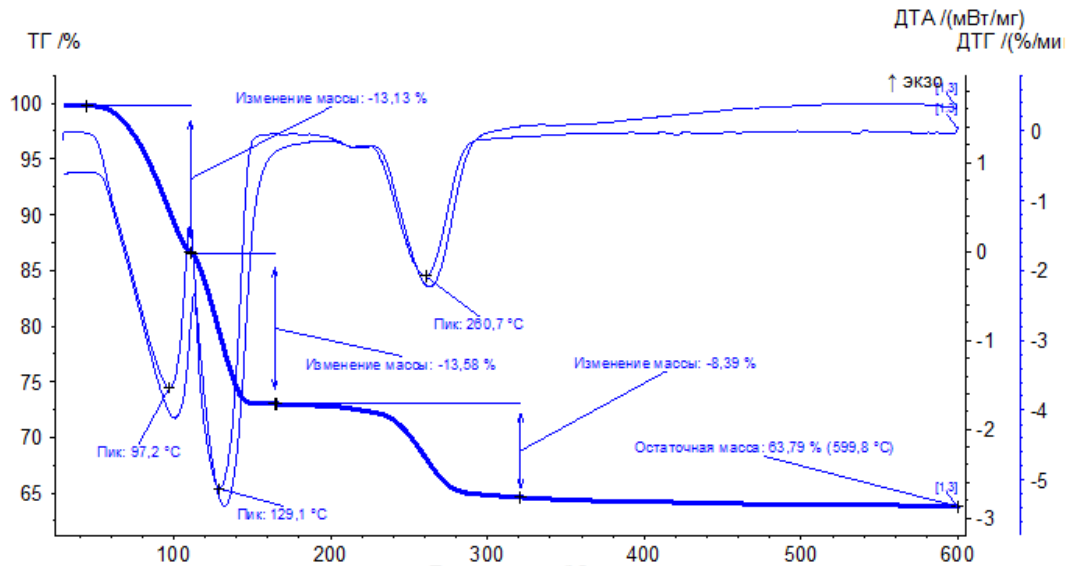


სურ.21  $\text{CoSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$  ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 71.1 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 1.18 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 136.3°C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 3.15 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 361.4 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 12.34 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
- 4.

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 60 °C-მდე გახურებისას.



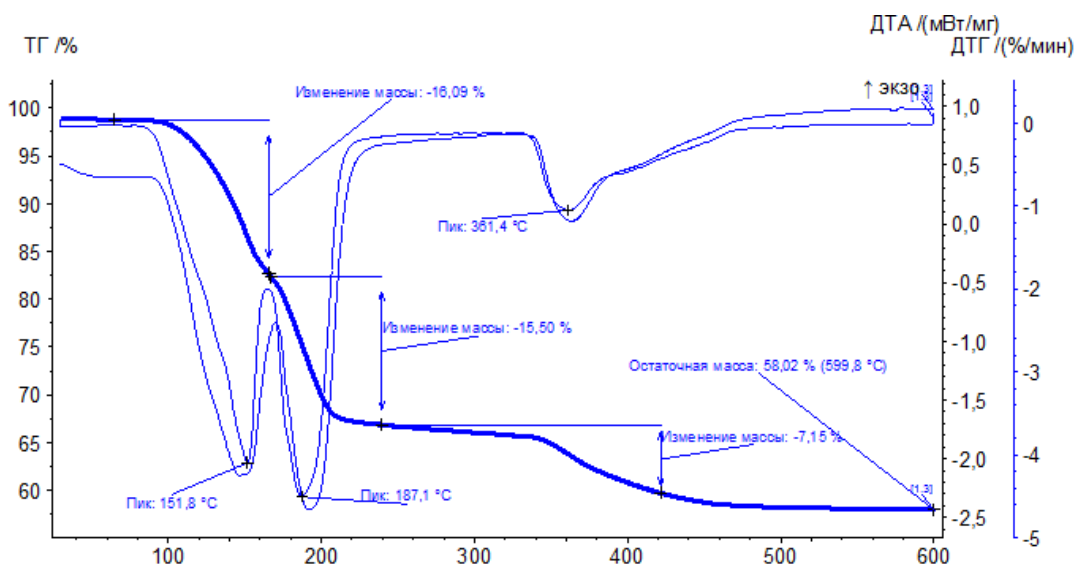
სურ.22  $\text{CuSO}_4 \cdot 4\text{DMF}$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 97.2 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 13.13 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 129.1°C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 13.58 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 260.7 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 8.39 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
- 4.

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 65 °C-მდე გახურებისას.



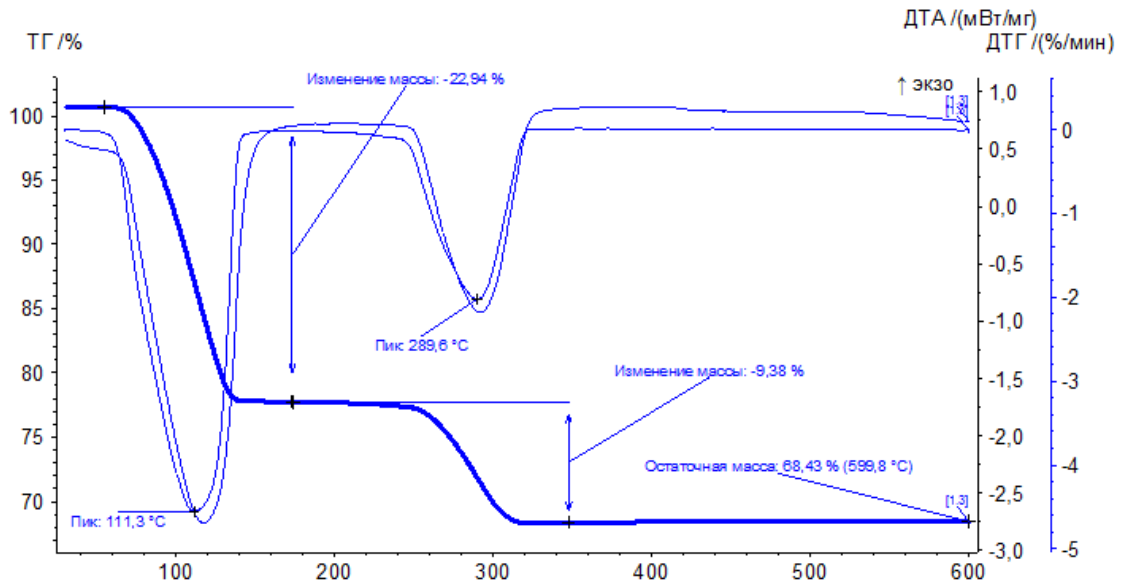


სურ.23  $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{DMF}$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 151.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 16.09 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 187.1°C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 15.50 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 361.4 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 7.15%.(ენდოთერმული ეფექტი)
- 4.

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.

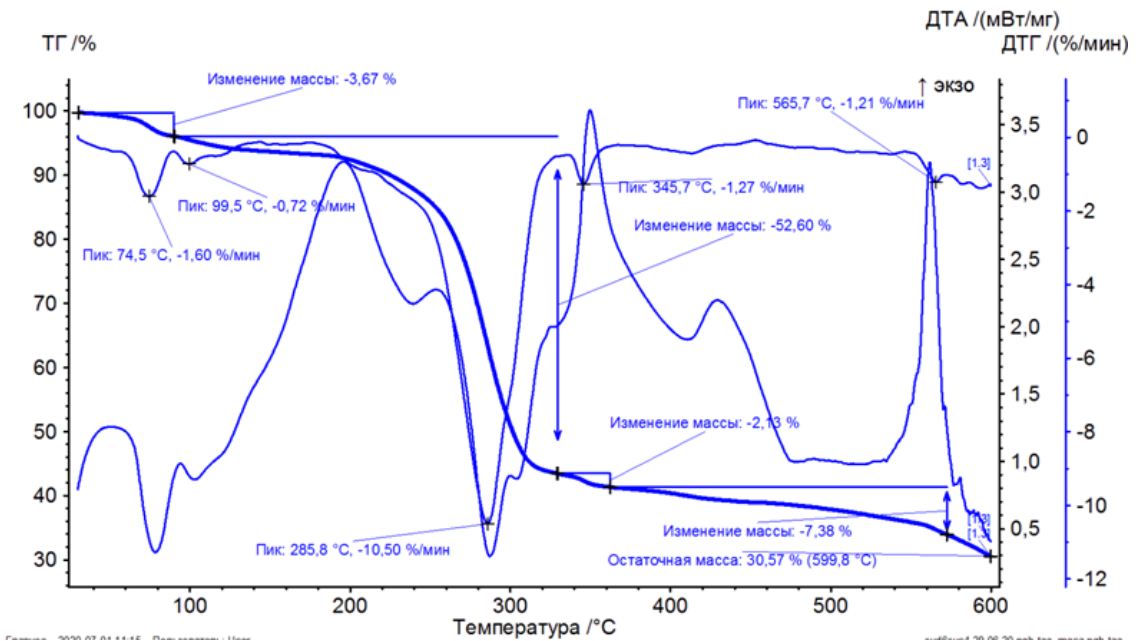


სურ.24  $ZnSO_4 \cdot 6DMF$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 111.3 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 22.94 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 289.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 9.38 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 65 °C-მდე გახურებისას.

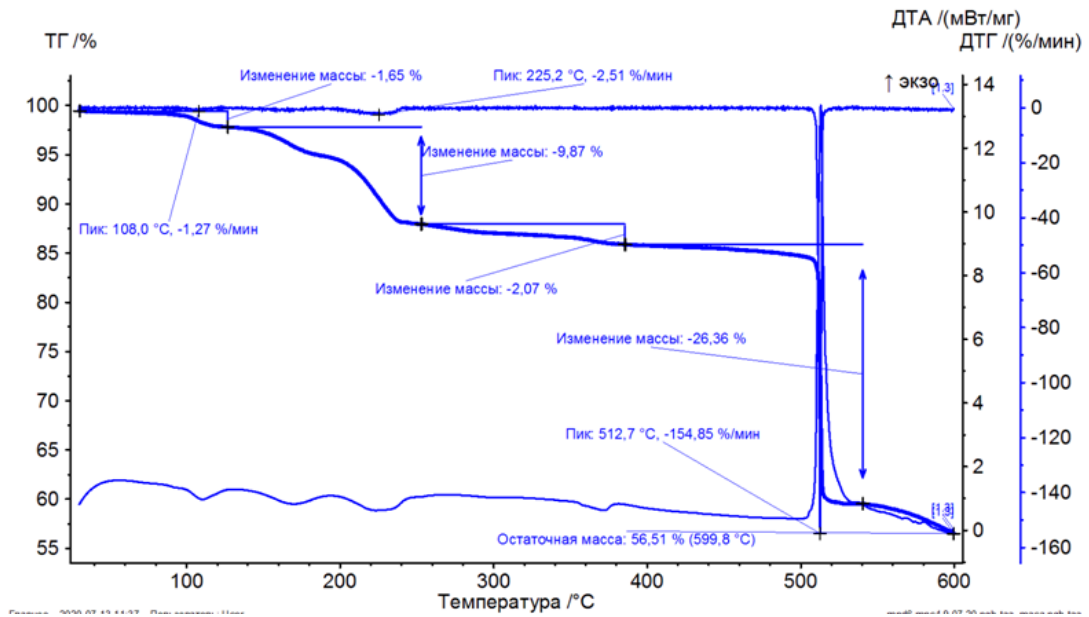


სურ.25  $[\text{Cu}(\text{DMF})_5][\text{Cu}(\text{SCN})_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 100 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 3.67 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 285.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 52.60 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.

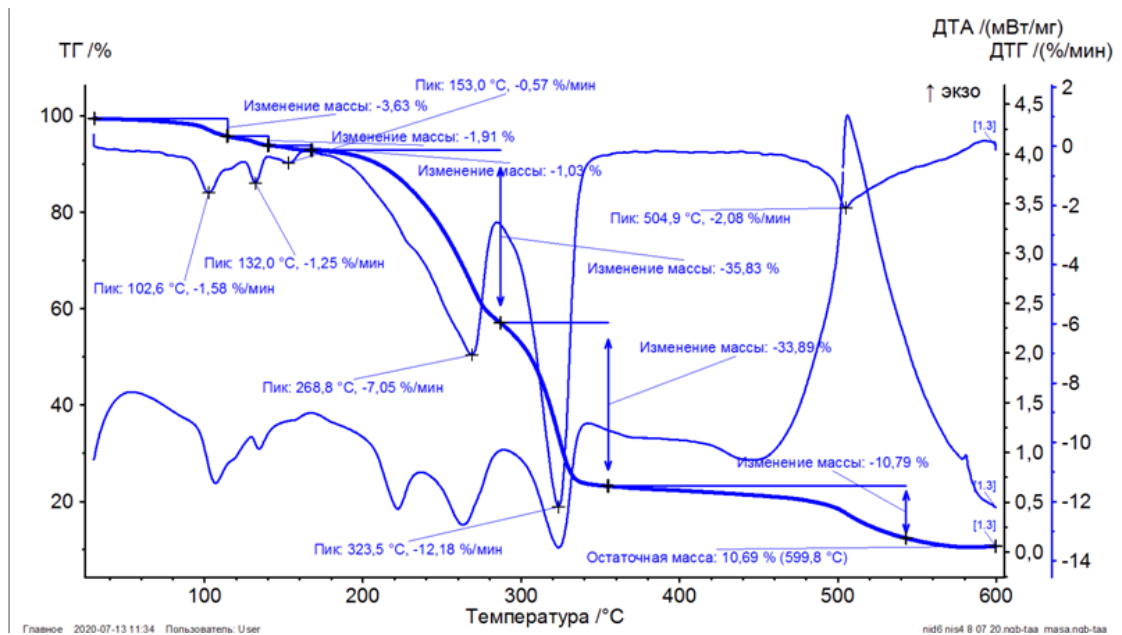


სურ.26  $[Mn(DMF)_6][Mn(NCS)_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 106 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 1.65 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 225 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 9.87 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 105 °C-მდე გახურებისას.

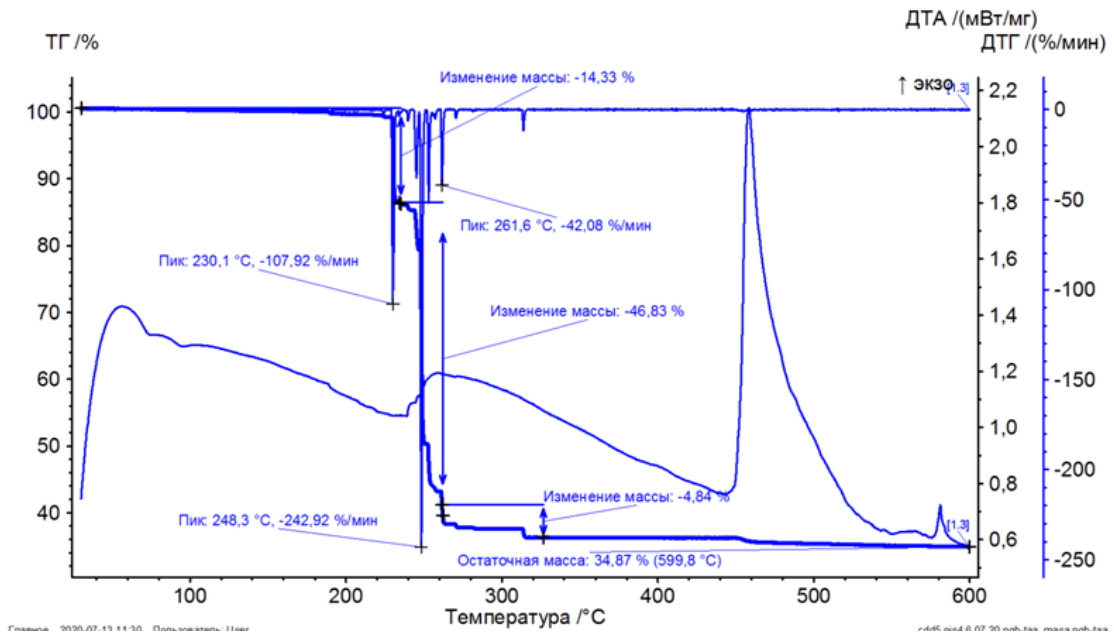


სურ.27  $[\text{Ni}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{SCN})_4]$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 102.6 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 3.63%. (ენდოთერმული ეფექტი)
2. 153 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 1.91 %. (ენდოთერმული ეფექტი)
3. 269.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 35.83 %. (ენდოთერმული ეფექტი)
4. 323 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 33.89 %. (ენდოთერმული ეფექტი)
- 5.

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს, რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 200 °C-მდე გახურებისას.

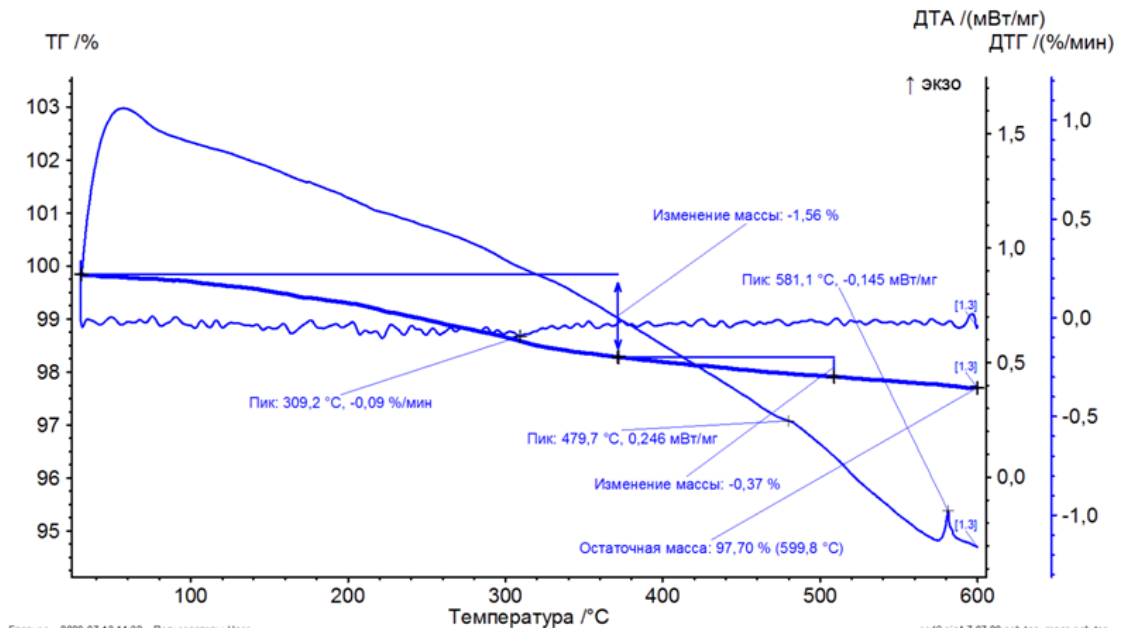


სურ.28  $[\text{Cd}(\text{DMF})_5][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 230 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 14.33 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 242 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 46.83 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 230 °C-მდე გახურებისას.

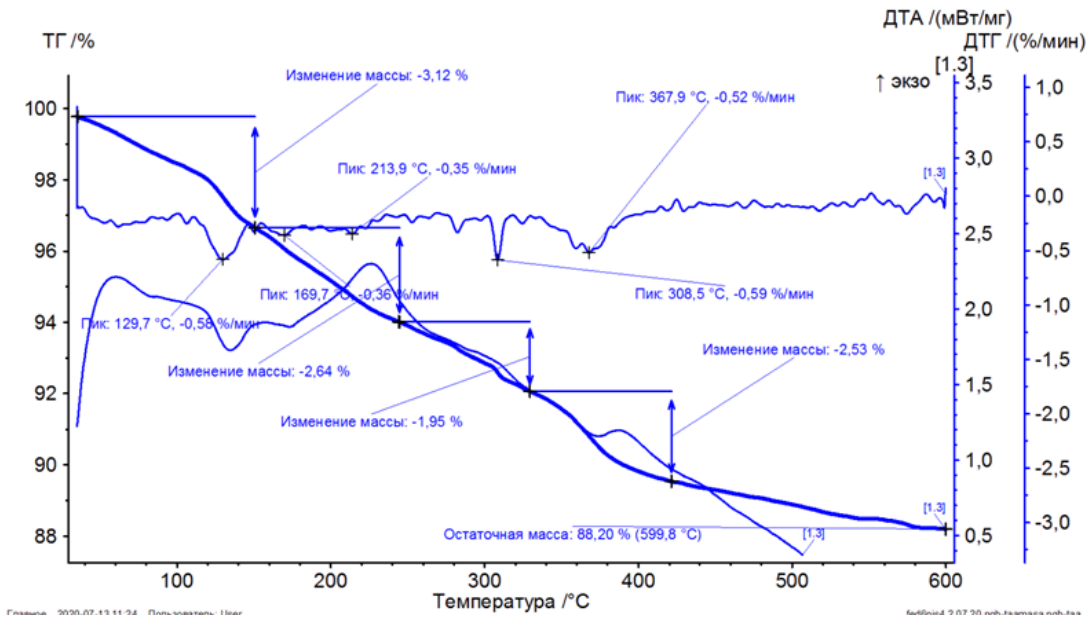


სურ.29  $[\text{Co}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  -ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 309.2 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 1.56%. (ენდოთერმული ეფექტი)
2. 479 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 0.37%. (ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს, რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 200 °C-მდე გახურებისას.



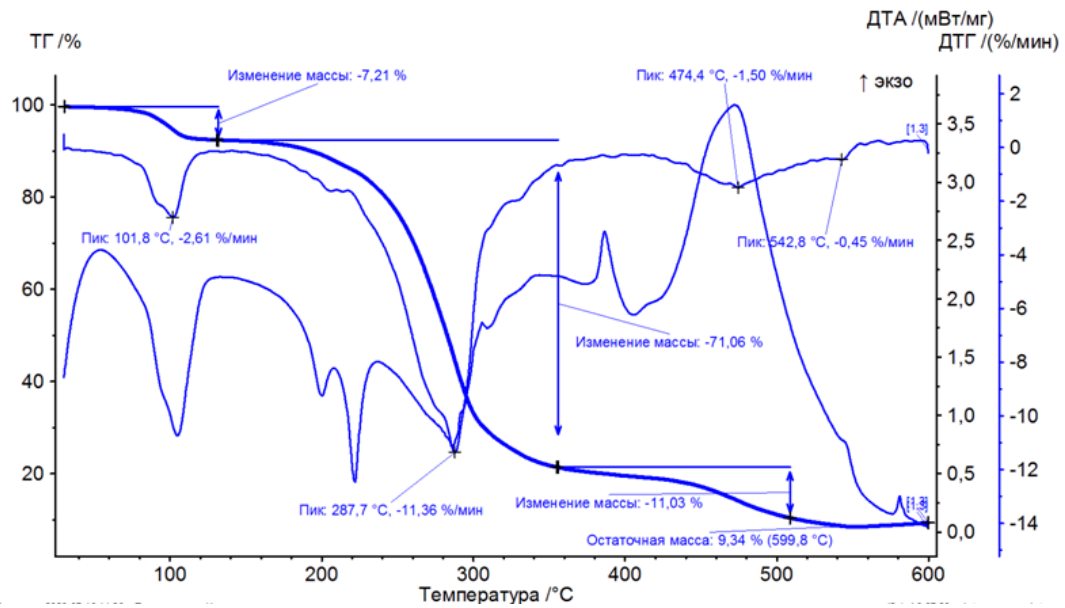
სურ.30  $[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 129 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 3.12%. (ენდოთერმული ეფექტი)
2. 213 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 2.64 %. (ენდოთერმული ეფექტი)
3. 367 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 1.95 %. (ენდოთერმული ეფექტი)
4. 400 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 2.53 %. (ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს, რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.



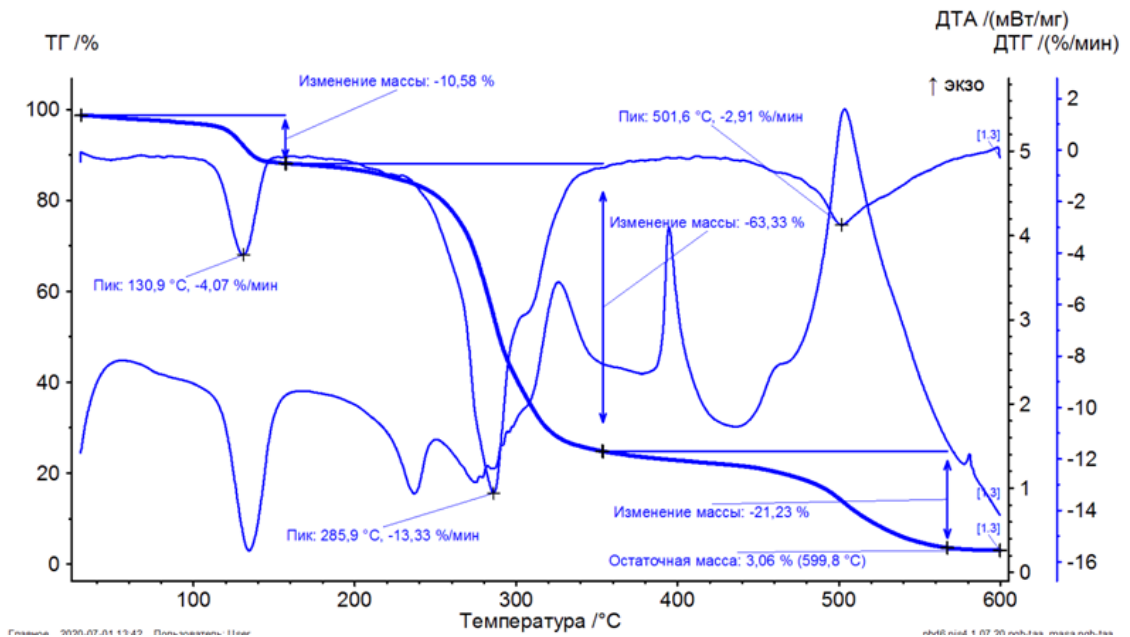


სურ.31  $[\text{Fe}(\text{DMF})_6][\text{Ni}(\text{NCS})_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 101.8 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 7.21 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 287 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 71.06 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 420 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 11.03 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 100 °C-მდე გახურებისას.



სურ.32  $[Pb(DMF)_6][Ni(NCS)_4]$  - ის თერმოგრამა

თერმოგრამა გვიჩვენებს საკვლევი ნივთიერები 600 °C-მდე გახურების დროს გამოვლენილ თერმულ ეფექტებს და საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგს თითოეულის დროს.

1. 130 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი გვაქვს 10.58 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
2. 285 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 63.33 %.(ენდოთერმული ეფექტი)
3. 501 °C-ზე საკვლევი ნივთიერების მასის დანაკარგი არის 21.23 %.(ენდოთერმული ეფექტი)

თერმოგრამიდან ნათლად ჩანს,რომ საკვლევი ნივთიერება მდგრადია 130 °C-მდე გახურებისას.