

ნესტანი ბრეგაძე

ზოგიერთი 3d-მეტალის ბიოკომპლექსნაერთთა სინთეზი, აღნაგობა და თვისებები

წარმოდგენილია დოქტორის აკადემიური ხარისხის
მოსაპოვებლად
სადოქტორო პროგრამა – ქიმია
შიფრი – 0503

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი
თბილისი, 0175, საქართველო
2020

საავტორო უფლება ©2020 წელი, ნესტანი ბრეგაძე

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტი

ჩვენ, ქვემოთ ხელისმომწერნი ვადასტურებთ, რომ გავეცანით ბრეგაძე ნესტანის მიერ შესრულებულ სადისერტაციო ნაშრომს დასახელებით: „ზოგიერთი 3d-მეტალის ბიოკომპლექსნაერთთა სინთეზი, აღნაგობა და თვისებები“ და ვაძლევთ რეკომენდაციას საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ქიმიური ტექნოლოგიისა და მეტალურგიის ფაკულტეტის სადისერტაციო საბჭოში მის განხილვას დოქტორის აკადემიური ხარისხის მოსაპოვებლად.

----- 2020

თანახელმძღვანელი:

პროფესორი თ. წივწივაძე

ქიმიის დოქტორი ნ. ჩიგოგიძე

რეცენზენტი:

რეცენზენტი:

საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტი

2020 წელი

ავტორი: ბრეგაძე ნესტანი

დასახელება: „ზოგიერთი 3d-მეტალის ბიოკომპლექსნაერთთა
სინთეზი, აღნაგობა და თვისებები”

ფაკულტეტი: ქიმიური ტექნოლოგია და მეტალურგია

ხარისხი: ქიმიის დოქტორი

სხდომა ჩატარდა: 2020

ინდივიდუალური პიროვნებების ან ინსტიტუტების მიერ
ზემომოყვანილი 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 დაცულ მასალებზე მიღებულია შესაბამისი ნებართვა (გარდა ის
მცირე ზომის ციტატებისა, რომლებიც მოითხოვენ მხოლოდ სპეციფიკურ
მიმართებას ლიტერატურის ციტირებაში, როგორც ეს მიღებულია
სამეცნიერო ნაშრომების შესრულებისას) და ყველა მათგანზე იღებს
პასუხისმგებლობას.

რეზიუმე

ნაქსოჯინთან და ტინიდაზოლთან ბიოაქტიური მეტალების მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II)-ის, სპილენძ(II)-ის, და თუთიის კოორდინაციული ნაერთების საკვლევ ობიექტად შერჩევა გაპირობებულია იმით, რომ ზემოთქმული ორგანული ლიგანდები წარმოადგენენ მრავალი სამკურნალო პრეპარატისა და ბიოსტიმულატორის შემადგენელ ნაწილს. აქედან გამომდინარე, მათი სინთეზი და გამოკვლევა (აღნაგობა და თვისებები) გვესახება აქტუალურად, როგორც თეორიული, ასევე პრაქტიკული გამოყენების თვალსაზრისით.

კვანტურ-ქიმიური გამოთვლებით, ორგანული ლიგანდების - (ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლისა) და მათი ჰიპოთეკური მოდელების კოორდინაციული შესაძლებლობების დადგენა, შემდგომში მიზანმიმართული სინთეზის ჩატარების გაადვილებისა და პროგნოზირებადი სასურველი თვისებების მქონე კოორდინაციული ნაერთების მიღება.

ჩემი სადისერტაციო ნაშრომის „ზოგიერთი 3d-მეტალის კომპლექს-ნაერთების სინთეზი, აღნაგობა და თვისებები“ ძირითადად შესრულებულია საქართველოს ტექნიკური უნივერსიტეტის ბიოლოგიურად აქტიურ ნივთიერებათა კვლევის სამეცნიერო ცენტრსა და აკაკი წერეთლის სახელმწიფო უნივერსიტეტის ქიმიის ლაბორატორიაში - კერძოდ, სინთეზური სამუშაოები შესრულებულია სამეცნიერო ცენტრის ლაბორატორიებში, კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები, სპექტრალური სამუშაოები ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო უნივერსიტეტის რაფიელ აგლაძის სახელობის არაორგანული ქიმიისა და ელექტროქიმიის ინსტიტუტში.

ჩემს მიერ სინთეზირებულია მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II)-ის, სპილენძ(II)-ის, და თუთიის 16 ახალი ბიოკოორდინაციული ნაერთი სამკურნალო პრეპარატებთან -ნაქსოჯინთან და ტინიდაზოლთან. ჩატარებული ფიზიკურ-ქიმიური კვლევების ანალიზის საფუძველზე და არსებული მონაცემების გათვალისწინებით, რომლებიც არსებობს სამეცნიერო ლიტერატურაში, დახასიათებულია სინთეზირებული მეტალების ბიოკოორდინაციული ნაერთები (მოლეკულური მასა, შეფერილობა, ხსნადობა, დნობის ტემპერატურა, ელექტროგამტარობა და სხვ.) ერთმნიშვნელოვნად დადგენილია კომპლექსწარმომქმნელ 3d-მეტალებთან აციდო- და ორგანული ლიგანდების კოორდინაციის ხერხები და მათი სტერეოქიმიური თავისებურებანი.

ახლადსინთეზირებული ზოგიერთი 3d-მეტალის ბიოკოორდინაციული ნაერთების სრული ჩამონათვალი:

1. $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$
2. $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
3. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
4. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
5. $[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$

6. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
7. $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
8. $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
9. $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
10. $[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$
11. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
12. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
13. $[\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$
14. $[\text{NiCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
15. $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
16. $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$

საკვლევი ობიექტების შედგენილობა დადგენილია ტრინოლომეტრიული მეთოდით (მეტალები), დიუმას მეთოდით (აზოტი), ჟანგბადია არეში დაწვით-ნახშირბადი და წყალბადი, წონითი მეთოდით - გოგირდი. სინთეზირებულ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთები ასევე შესწავლილია კვანტურ-ქიმიური გამოთვლებით (AM1, PM3 და MNDO-d) რენტგენოგრაფიული, იწ-სპექტროსკოპული, თერმოგრაფიმეტრული და სხვ.

კვანტურ-ქიმიური გამოთვლებით პროგნოზირებულია მანგანუმის, ნიკელის, სპილენძისა და თუთიის ბიოკომპლექსნაერთების ზოგიერთი სტრუქტურული თერმოდინამიკური და ენერგეტიკული მახასიათებლები.

თეორიულად დასაბუთებულია გამოყენებული აციდო და ორგანული ლიგანდების მეტალებიდან კოორდინაციული შესაძლებლობები, რაც მნიშვნელოვნად აადვილებს მიზანმიმართული სინთეზის ჩატარებას და დასახული მიზნის მიღწევას.

ჩვენ მიერ ჩატარებული მედიკო-ბიოლოგიური გამოცდა *in vitro* (ან *in vivo*). სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთებიდან ყველაზე უფრო პერსპექტიული აღმოჩნდა: Cu(II), Zn -ის ბიოკომპლექსნაერთებისთვის.

მეტალთა ახალი კოორდინაციული ნაერთები გამოირჩევიან მაღალი ბიოლოგიური აქტივობით - გამოვლინდა მათი ძლიერი ანტიბაქტერიული და ანტივირუსული აქტიურობა, აგრეთვე გამჟღავნდა მათი მასტიმულირებელი მოქმედება ადამიანისა და ღორის ლეიკოციტებზე.

ნაშრომის შედეგებს აქვს დიდი თეორიული და პრაქტიკული მნიშვნელობა ბიომეტალთა ბიოაქტიური კოორდინაციული ნაერთების ქიმიისათვის. კვანტურ-ქიმიური მეთოდებით პირველად გამოკვლეულია ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლის და მათი ჰიპოთეტური მოდელების კომპლექსწარმოქმნის უნარი.

შესრულებული სამუშაოს ძირითადი (სინთეზი, აღნაგობა, თვისებები) შედეგების გამოყენება შეიძლება სასწავლო-საცნობარო და საინფორმაციო ლიტერატურაში, ბიომეტალთა ბიოკოორდინაციული ქიმიის სალექციო კურსში რჩეული თავების კითხვისას და სამეცნიერო-კვლევით ლაბორატორიებში ექსპერიმენტული სამუშაოების შესრულების დროს.

სადისერტაციო ნაშრომმა დააზუსტა ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის კომპლექსწარმოქმნის უნარი (კოორდინირების წესის) განსაზღვრის კრიტერიუმები ზოგიერთ 3d-მეტალთან, რომელთა შესახებ ზემოთ იყო აღნიშნული.

შეიქმნა ბიოაქტიური მეტალების კომპლექსნაერთთა სინთეზის პროგნოზირების შესაძლებლობა.

Abstract

Investigation of Manganese(II), Nickel(II), Copper(II) and Zinc coordination compounds with Naxogin and Tinidazole is motivated by the fact, that these organic ligands are contained in many medical drugs and biostimulators. Therefore, research(structure, properties) of above mentioned compounds is important theoretical as well as practical meaning.

The Dissertation - "synthesis, structure and properties of complex compounds of some 3d-metals " has been carried out at scientific-research centre of biologically active substances of Georgian Technical University and Akaki Tsereteli State University. Namely, the works connected with synthesis has been done at scientific-research centre, but quantum-chemical computations and spectral analysis was carried out at TSU Rafael Agladze Institute of Inorganic Chemistry and Electrochemistry.

It is synthesized fifteen new biocoordination compounds of Manganese(II), Nickel(II), Copper(II) and Zinc with Naxogin and Tinidazole. Taking into account data existing in the scientific literature, on based of analysis of physical-chemical investigation, it is characterized biocoordination compounds of synthesized metals (molecular mass, colouring, solubility, melting temperature, conductivity, etc.). It is established coordination methods of acid-organic ligands with complex formation 3d-metals and their stereochemical peculiarities.

Complete list of new synthesized biocoordination compounds of some 3d-metals:

1. $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$
2. $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
3. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
4. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
5. $[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$
6. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
7. $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
8. $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
9. $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
10. $[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$
11. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
12. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$
13. $[\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$
14. $[\text{NiCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
15. $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$
16. $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$

Structure of research objects have been established by trinitometric method (metals), Dumas' method (Nitrogen), burning in an Oxygen-containing area (Carbon and Hydrogen), weighted average method (Sulphur).

Biocomplexcompounds of synthesized metals are also studied by quantum-chemical calculations (AM1, PM3, MNDO-d, roentgenogram, spectroscopy, thermogravimetry, etc.).

Some structural, thermodynamic and energetic characteristics of biocomplexcompounds of Manganese, Nickel, Copper and Zinc are predicted by quantum-chemical calculations.

Coordination possibilities with metals of used acid and organic ligands, are proved theoretically, which significantly makes it easier to carry out purposeful synthesis and to achieve corresponding goal.

It was carried out medical-biological experiment "in vitro" ("in vivo"). It turned out, that the most perspective from synthesized biocomplexcompounds are: biocomplexcompounds of Copper and Zinc.

New coordination compounds are characterized with high biological activity. It was revealed their strong antibacterial and antiviral properties. Stimulating effects of these compounds on human and pig leukocytes were also detected.

The dissertation results are important theoretical as well as practical meaning for the Chemistry of coordination compounds of biometals. Quantum-chemical methods are used for researching of Naxogin, Tinidazole and complex formation ability of their hypothetic models.

The main results of the dissertation(synthesis, structure, properties) may be used for teaching selected topics in coordination chemistry of biometals, conducting various experiments and for reference books.

The dissertation thesis outlined complex formation ability of Naxogin and Tinidazole, criteria for determination of coordination rule with some 3d-metals, which were mentioned above.

It has been created the possibility of predicting of complex compound synthesis of bioactive metals.

გამოვხატავ უდიდეს პატივისცემას ქიმიის მეცნიერებათა დოქტორის, საქართველოს საინჟინრო მეცნიერებათა აკადემიის აკადემიკოსის, ნიუ-იორკის (აშშ) მეცნიერებათა აკადემიის წევრის, საქართველოს სახელმწიფო პრემიის ლაურეატის მეცნიერებისა და ტექნიკის დარგში, ავტორს „ზოგადი ქიმია“ საუკეთესო სახელმძღვანელოსთვის გამომცემლობა „მესხეთის“ პრემიის ლაურეატის უმაღლესი სასწავლებლებისათვის, ქიმიის საყმაწვილო ენციკლოპედიის ავტორის, ბიოლოგიურად აქტიურ ნივთიერებათა კვლევის სამეცნიერო ცენტრის ხელმძღვანელის, ღირსების მედლის მფლობელის პროფესორ თენგიზ წივწივამის მიმართ და ვუხდი უღრმეს მადლობას ჩემდამი გაწეული საუკეთესო სამეცნიერო ხელმძღვანელობისათვის იმ ზრუნვისა და თანადგომისათვის რასაც ყოველთვის ვგრძნობდი. ასევე უღრმეს მადლობას ვუხდი ქიმიის დოქტორს, პროფესორს, საქართველოს საინჟინრო მეცნიერებათა აკადემიის აკადემიკოსს ბატონ ნოდარ ჩიგოგიძეს, ჩემდამი გაწეული ნაყოფიერი სამეცნიერო ხელმძღვანელობისა და დიდი მხარდაჭერისათვის.

შინაარსი

შესავალი.....	16
1.ლიტერატურის მიმოხილვა.....	23
1.1. ანტიპროტოზოული Naxogin და Tinidazole-ის პრეპარატების კომპლექსწარმოქმნის გამოკვლევა.....	23
1.2. ლიგანდები - ნაქსოჯინი, ტინიდაზოლი	33
1.3. მანგანუმის, ნიკელის, სპილენძის, თუთიის მარილების აღწერა და თვისებები.....	38
2. კვლევის შედეგები და მათი განსჯა.....	45
2.1. 3d-მეტალთა კომპლექსნაერთების სინთეზი.....	45
2.1.1. ლიგანდ ნაქსოჯინის, იგივე „ნიმორაზოლის“ გამოკრისტალება.....	46
2.1.2. ლიგანდ „ტინიდაზოლის“ გამოკრისტალება	47
2.1.3. სპილენძ (II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან (96, 4%) ეთანოლში.....	49
2.1.4. სპილენძ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ტინიდაზოლთან.....	49
2.1.5. სპილენძ(II)-ის აცეტატური კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან	50
2.1.6. სპილენძის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან	51
2.1.7. სპილენძ(II)-ის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან.....	52
2.1.8. სპილენძ(II)-ის როდანიდული კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან	52
2.1.9. სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან	53
2.1.10. სპილენძ(II)-ის ბრომიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან.....	54
2.1.11. მანგანუმ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან....	55
2.1.12. ნიკელის აცეტატური კომპლექსნაერთის სინთეზი	55
2.1.13. Zn(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან.....	56

2.1.14. ნიკელის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან.....	57
2.1.15. მანგანუმის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან.....	57
2.2. კვლევის მეთოდები	59
2.2.1. რენტგენოფაზური ანალიზი	59
2.2.2. კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები.....	60
2.2.3. ინფრაწითელი სპექტროსკოპული კვლევა	61
2.2.4. თერმოგრაფიმეტრული კვლევა	62
2.2.5. იმუნოციტოტოქსიკური კვლევა	62
2.2.6. რასტრული ანუ მასკანირებელი ელექტრონული მიკროსკოპი	63
2.2.7. რენტგენოფაზური კვლევის შედეგები	65
2.2.8. ინფრაწითელი სპექტროსკოპული კვლევის შედეგები	88
2.2.9. კვანტურ-ქიმიური კვლევის შედეგები.....	122
2.2.10. თერმოგრაფიმეტრული კვლევის შედეგები	130
2.2.11. იმუნოციტოტოქსიკური კვლევის შედეგები	136
დასკვნა	137
გამოყენებული ლიტერატურა.....	139
დანართი	148

ნახაზების ნუსხა

ნახაზი 1. ნაქსოჯინის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	66
ნახაზი 2. ტინიდაზოლის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა ...	67
ნახაზი 3. სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	68
ნახაზი 4. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის რენტ- გენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	70
ნახაზი 5. სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	69
ნახაზი 6. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული ბიოკომპლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	72
ნახაზი 7. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული კომპლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა.....	72
ნახაზი 8. ნაქსოჯინთან თუთიის როდანიდული კომპლექსნაერთის რენტგე- ნოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	73
ნახაზი 9. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის კომპ- ლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	75
ნახაზი 10. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის აცეტატური დიჰიდრატის კომპ- ლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	76
ნახაზი 11. ტინიდაზოლთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა	77
ნახაზი 12. ტინიდაზოლთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული მდგომარეობა	78
ნახაზი 13. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპ- ლექსნაერთის რენტგენოგრამა.....	79
ნახაზი 14. ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)	89
ნახაზი 15. $MnCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)	900
ნახაზი 16. $[MnCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	91
ნახაზი 17. $[Ni(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)	92
ნახაზი 18. $[Ni(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	92
ნახაზი 19. $[CuBr_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)	93
ნახაზი 20. $[CuBr_2 \cdot C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	93
ნახაზი 21. $[Cu(NCS)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{ სმ}^{-1}$)	95
ნახაზი 22. $[Cu(NCS)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა.....	965
ნახაზი 23. $[Zn(NCS)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{ სმ}^{-1}$)...	97
ნახაზი 24. $[Zn(NCS)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა.....	98
ნახაზი 25. $[CuCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (HO)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)	99
ნახაზი 26. $[CuCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	100
ნახაზი 27. $[Cu(H_2O)_4SO_4] \cdot H_2O$ გრაფიკული ფორმულა.....	101

ნახაზი 28.	$[CuSO_4 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_3] \cdot (H_2O)_2$ შთანთქმის იწ სპექტრი (500-3500სმ ⁻¹)	103
ნახაზი 29.	$[CuSO_4 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_3] \cdot (H_2O)_2$ ოქტაედრული აღნაგობა	104
ნახაზი 30.	$[Cu(HCOO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრი	105
ნახაზი 31.	$[Cu(HCOO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2] \cdot (H_2O)_2$ ოქტაედრული აღნაგობა	106
ნახაზი 32.	$[Cu(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი	107
ნახაზი 33.	$[Cu(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა.....	108
ნახაზი 34.	ორგანული ლიგანდის ტინიდაზოლის C ₈ H ₁₃ N ₃ O ₄ S შთანთქმის იწ- სპექტრი (500-3500სმ ⁻¹)	109
ნახაზი 35.	$[CuCl_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი.....	110
ნახაზი 36.	$[CuCl_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	111
ნახაზი 37.	$[Ni(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრი	112
ნახაზი 38.	$[Ni(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	113
ნახაზი 39.	$[Mn(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრი	114
ნახაზი 40.	$[Mn(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა	115
ნახაზი 41.	$[MnCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$, $MnCl_2 \cdot (H_2O)_2$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	116
ნახაზი 42.	$[Cu(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 2H_2O]$, $Cu(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500სმ ⁻¹)	117
ნახაზი 43.	$[CuSO_4 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_3] \cdot (H_2O)_2$, $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	117
ნახაზი 44.	$[Cu(HCOO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 2H_2O]$, $Cu(HCOO)_2 \cdot 2H_2O$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	118
ნახაზი 45.	$[CuCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 2H_2O]$, $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	118
ნახაზი 46.	$[Zn(SCN)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2]$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500სმ ⁻¹)	119
ნახაზი 47.	$[Cu(SCN)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2]$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი(500-3500 სმ ⁻¹)	119
ნახაზი 48.	$[CuCl_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot 2H_2O]$, $CuCl_2 \cdot 2H_2O$ და $C_8H_{13}N_3O_4S$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	120
ნახაზი 49.	$[CuBr_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$, $CuBr_2 \cdot 2H_2O$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	120
ნახაზი 50.	$[Ni(CH_3COO)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 2H_2O]$, $Ni(CH_3COO)_2$ და $C_9H_{14}N_4O_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ ⁻¹)	121
ნახაზი 51.	ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი AM1მეთოდით).....	122
ნახაზი 52.	ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი AM1მეთოდით).....	123
ნახაზი 53.	ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით)	124
ნახაზი 54.	ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით)	125

ნახაზი 55. ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)	125
ნახაზი 56. ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)	126
ნახაზი 57. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი AM1 მეთოდით).....	127
ნახაზი 58. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით).....	127
ნახაზი 59. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)	128
ნახაზი 60. $[Ni(HCOO)_2 \cdot (Tinid)_2 \cdot (H_2O)_2]$ თერმოგრამა.....	131
ნახაზი 61. $Ni(CH_3COO)_2 \cdot (Naxogin)_2 \cdot (H_2O)_2$ თერმოგრამა	132
ნახაზი 62. $[CuSO_4 \cdot (Naxogin)_2 \cdot (H_2O)_3] \cdot (H_2O)_2$ თერმოგრამა.....	133
ნახაზი 63. $[Cu(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ თერმოგრამა	133
ნახაზი 64. $[Mn(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ თერმოგრამა.....	133

ცხრილების ნუსხა

ცხრილი 1. საწყისი ნივთიერებების ფიზიკური თვისებები	43
ცხრილი 2. სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთების ფიზიკური თვისებები.....	44
ცხრილი 3. სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთების ელემენტური შედგენილობა გამოთვლილი რემ მეთოდით	64
ცხრილი 4. რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამების სიბრტყეთა- შორისი მანძილები ($d_a/n\text{\AA}$) და ინტენსიობები (I/I_0)	80
ცხრილი 5. სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთებში მეტალთა ექსპერიმენტული და თეორიული შემცველობა (%) რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით.....	87

შესავალი

უკანასკნელ ათწლეულში მსოფლიოში აღინიშნება სოკოვანი დაავადებების მკვეთრი ზრდა, რის გამოც გაიზარდა სოკოს საწინააღმდეგო სამკურნალო საშუალებებზე მოთხოვნა. უამრავ ბიოლოგიურად აქტიურ და სამკურნალო ნივთიერებებს შორის მნიშვნელოვანი როლი უჭირავს 5-მეტრონიდაზოლის წარმოებულებს.

იმიდაზოლის ორგანული ჰეტეროციკლი ფართოდაა გავრცელებული ცოცხალ ბუნებაში და მნიშვნელოვან როლს ასრულებს მაკრო- და მიკრო- ორგანიზმების ნივთიერებათა ცვლაში.

გარკვეული მეტალების მიმართ მაღალი სპეციფიურობა ახასიათებთ მხოლოდ ფერმენტებს და კომპლექსონებს. სინთეზურ მეტალდამაკავშირებელ ლიგანდებს შორის (მათ რიცხვს მიეკუთვნება სამკურნალო პრეპარატი ნაქსოჯინი და ტინიდაზოლი) მსგავსი შერჩევითობა გაცილებით იშვიათად გვხვდება. ამიტომ განსაკუთრებულ ინტერესს წარმოადგენს მოცემული ლიგანდების კომპლექსწარმოქმნის უნარის შესწავლა ისეთ ბიოლოგიურ მიკროელემენტებთან რომლებიც შედიან 3d-მეტალის ჯგუფში, როგორიცაა მანგანუმი, ნიკელი, სპილენძი და თუთია.

მეტალების იონები თავისი მსგავსებით ლიგანდებთან განლაგებულია დაახლოებით შემდეგნაირად: $\text{Fe}^{3+} > \text{Hg}^{2+} > \text{Cu}^{2+} > \text{Al}^{3+} > \text{Ni}^{2+} > \text{Pb}^{2+} > \text{Co}^{2+} > \text{Zn}^{2+} > \text{Fe}^{2+} > \text{Cd}^{2+} > \text{Mn}^{2+} > \text{Mg}^{2+} > \text{Ca}^{2+} > \text{Li}^+ > \text{Na}^+ > \text{K}^+$.

მეტალების იონების მსგავსება ლიგანდებთან არის შედეგი იონური რადიუსის კლებისა, ესე იგი მეტალების ვალენტობის გაზრდით ხდება მისი რადიუსის შემცირება, ამიტომ იონი Fe^{3+} წარმოქმნის უფრო მტკიცე კომპლექსს ვიდრე Fe^{2+} , მაგრამ ამ მარტივი წესის შერულებას ზოგჯერ ხელს უშლის მეორადი ფაქტორები. ბიოლოგიურ პროცესებში მძიმე მეტალების მნიშვნელობა განპირობებულია მათი უნარით წარმოქმნან უფრო მტკიცე კოორდინაციული კავშირები ვიდრე ჩვეულებრივი იონური.

დაკვირვებებმა გვიჩვენა, რომ მსოფლიოში პროტოზოული ინფექციების მნიშვნელოვანი ზრდა დაკავშირებულია შემდეგ ფაქტორებთან:

- 1) არსებული სამკურნალო პრეპარატების მიმართ მდგრადობის გადიდება;
- 2) სამედიცინო პრაქტიკაში ანტიბიოტიკების ფართო გამოყენება;
- 3) კლინიკურ მედიცინაში იმუნოდეპრესანტების გამოყენება ორგანოების გადანერგვისას, მათი ორგანიზმის მიერ ნაკლოვანებათა დასათრგუნად;
- 4) ВИЧ-ინფექციებთან ასოცირებული სოკოვანი დაავადების ზრდა;
- 5) ონკოჰემატოლოგიური დაავადების დროს სხივური თერაპია;
- 6) პათოგენურობის გამოვლენა იმ სოკოვანი დაავადებების ტიპებში, რომლებიც ადრე უსაფრთხოდ ითვლებოდა.

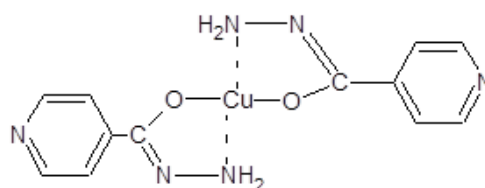
დღეისათვის 400 სახეობამდე სოკო ითვლება მიკოზების გამომწვევად. ამიტომ გაიზარდა მოთხოვნა მიკოზების და პროტოზოული ინფექციების პროფილაქტიკისთვის და მათ სამკურნალოდ ეფექტურ ფარმაცოლოგიურ პრეპარატებზე.

გარდა ამისა 5-ნიტრომიდაზოლის წარმოებული სინთეზური სამკურნალო პრეპარატები ტინიდაზოლი და ნაქსოჯინი წარმოადგენენ უნივერსალურ საშუალებებს ამებიაზის, ტრიქომონოზის, ლამბლიოზის, აგრეთვე ანაერობული ბაქტერიების მიერ გამოწვეული ინფექციების სამკურნალოდ.

ანაერობული ინფექციების მკურნალობის დასაწყებად მოცემული პრეპარატების დანიშვნა გამართლებულია წინასწარი ბაქტერიოლოგიური ანალიზის ჩატარების გარეშე. მაგრამ პარალელურად რეკომენდებულია მასალის აღება დეტალური ბაქტერიოლოგიური კვლევისთვის. ნაქსოჯინი და ტინიდაზოლი წარმოადგენენ განსაკუთრებულ ეფექტურ საშუალებას ანაერობული კოკების წინააღმდეგ. მათი გამოყენება მიზანშეწონილია ანაერობული ინფექციების პროფილაქტიკისთვის კუჭ-ნაწლავის ტრაქტის ოპერაციების დროს. პრეპარატი ასევე გამოიყენება ვაგინალური ტრიქომონელოზის და ლამბლიოზისას. მოცემული პრეპარატი უკეთ გადაიტანება

ვიდრე მეტრონიდაზოლი, მაგრამ მასთან მსგავსი სტრუქტურის გამო ავლენს მსგავს გვერდით მოვლენებს. შეიძლება აღინიშნოს კუჭ-ნაწლავის ტრაქტის აშლილობა, მადის დაკარგვა, პირში მეტალის გემო, თავის ტკივილი, დაღლილობის შეგრძნება, ქავილი და კანზე გამონაყარი. დიდი დოზის შემთხვევაში შესაძლებელია ნევრალგიური გართულების განვითარება: პერიფერიული ნეიროპათიები, ხანმოკლე ეპილეფსიური გულყრის ფორმები.

მოცემული სამკურნალო საშუალებების თერაპიის პერიოდში არ შეიძლება ალკოჰოლური სასმელების მიღება, ტეტურამის მსგავსი რეაქციის განვითარების გამო. პრეპარატი არღვევს ალკოჰოლის დეზინტოქსიკაციას ორგანიზმში და ახდენს დამთრგუნველ ზემოქმედებას აცეტალდეჰიდოგენაზის ფერმენტზე. სისხლში იზრდება აცეტალდეჰიდის დონე, რაც ახდენს ალკოჰოლური სასმელების მიმართ ორგანიზმის სენსიბილიზაციას. გარდა ამისა, რეკომენდებულია სიფრთხილით ჩატარდეს ავადმყოფთა თერაპია ნაქსოჯინით და ტინიდაზოლით ტუბერკულოზის საწინააღმდეგო პრეპარატის იზონიაზიდის (ტუბაზიდის) გამოყენებისას. მწვავე ნევროფსიქიური აშლილობის თავიდან ასაცილებლად. როგორც ცნობილია იზონიაზიდი (იზონიკოტინის მჟავას ჰიდრაზიდი), იძლევა ძალზე მტკიცე კომპლექსს Cu(II)-ის იონებთან.



სპილენძის იონების დამაკავშირებელი ორი სამკურნალო ლიგანდის ერთდროული მიღება აძლიერებს ნაქსოჯინის ან ტინიდაზოლის გვერდით მოვლენებს.

ამიტომ ფარმაკოლოგიური პრეპარატების ნაქსოჯინის და ტინიდაზოლის ლიგანდებად გამოყენება საკმაოდ საინტერესოა და მიმზიდველი, ცოცხალ ორგანიზმში კომპლექსწარმოქმნის პროცესის ქიმიური და სტრუქტურული მოდელირებისთვის.

ამ პროცესების მექანიზმის გამოსაცნობად აუცილებელია წარმოქმნილი კომპლექსების სტრუქტურული თავისებურებების ცოდნა, რომელთა გამოვლენა in vivo დაკავშირებულია საკმაო სირთულეებთან.

ასეთი კვლევითი სამუშაოები ტარდება მთელ მსოფლიოში ორი მიმართულებით. პირველი მიმართულება მდგომარეობს მათი ხელოვნურად შექმნის მიზნით ბუნებრივი ბიოკომპლექსების შესწავლაში.

მეორე მიმართულება გულისხმობს სინთეზის მეთოდის თანდათან გართულებას და დაბალმოლეკულური კოორდინაციული შენაერთების მოდიფიკაციას, მათი ბიოლოგიური აქტიობის გამოვლენას.

ორი მიმართულების მსგავსი შეთავსება გვამღევს საშუალებას გადავწყვიტოთ ფუნდამენტური კანონზომიერებების კოორდინაციული შენაერთების შედგენლობას, აგებულებას და ბიოლოგიური აქტიობას შორის.

ბევრი ფარმაკოლოგიური საშუალება წარმოადგენს ძლიერ კომპლექსწარმოქმნელს და მსგავსი პრეპარატების კოორდინირებულ მდგომარეობაში ბიოლოგიური აქტიობა შეიძლება მნიშვნელოვნად გაიზარდოს, ასევე შემცირდეს მათი ტოქსიკურობა. უკანასკნელს აქვს საკმაო მნიშვნელობა გართულების თავიდან ასაცილებლად, ქიმიოთერაპიის კურსისთვის. გარდა ამისა, კომპლექსწარმოქმნის პროცესში შესაძლებელია სრულიად ახალი ბიოლოგიური აქტიობის გამოვლენა. მოცემული საშუალებებით და მიღებული კომპლექსებით ახალი თვისებების გამოვლენა.

მოცემული ჯგუფის სამკურნალო პრეპარატების მოლეკულებში ერთდროულად არსებობს რამდენიმე დონორული ჯგუფი. რაც მოითხოვს კოორდინირების რეალური ხერხის განსაზღვრას. წარმოქმნილი ბიოკომპლექსების სივრცული სტრუქტურის და მათ მიერ გამოვლენილი ბიოლოგიური აქტიობის განსაზღვრას.

ბიოარაორგანულ ქიმიაში მიღწეული განვითარების დონე გვამღევს იმედს, რომ ბიოკოორდინაციული ნაერთების ქიმიოთერაპიაში გამოყენება მნიშვნელოვნად გაიზრდება. ერთ-ერთ პერსპექტიულ მიმართულებას

წარმოადგენს კოორდინაციული ნაერთების გამოყენება ონკოლოგიური დაავადებების წინააღმდეგ საბრძოლველად.

კიბო წარმოადგენს მრავალუჯრდიანი ორგანიზმების დაავადებას, რომლის მახასიათებელია საკუთარ უჯრედებში ანომალური ფორმების უკონტროლო ზრდა და მათი გავრცელება ორგანიზმში. კიბოს იწვევს კანცეროგენები, რომლებიც შეიძლება განისაზღვროს როგორც სიმსივნის წარმომქმნელი ნივთიერებები, მათი მოქმედების მექანიზმის მიუხედავად.

ზოგიერთ კანცეროგენს შეუძლია ლიგანდის როლის შესრულება წყალხსნარში ან არაწყალხსნარში. შენაერთისთვის დამახასიათებელია მეტალების იონების დაკავშირება. კანცეროგენები, რომლებსაც თვითონ არ შეუძლიათ მეტალების იონების კოორდინაცია, მეტაბოლიზმის შედეგად გარდაიქმნებიან ტიპურ ლიგანდებად.

სიმსივნის საწინააღმდეგო პრეპარატები მიეკუთვნება ტიპურ ლიგანდებს და შეუძლიათ ორგანიზმში მეტალთა იონებთან კომპლექსების წარმოქმნა. ამ ნაერთების სიმსივნის საწინააღმდეგო აქტიობა იზრდება თუ მათ შევიყვანთ ორგანიზმში მეტალებთან ერთად.

სიმსივნის საწინააღმდეგო პრეპარატებს არ შეუძლიათ მტკიცე კავშირების წარმოქმნა მეტალთა იონებთან, მეტაბოლურად გარდაიქმნებიან ორგანიზმში ტიპური ლიგანდების თვისებების მქონე ნაერთებად.

სიმსივნის საწინააღმდეგო პოტენციური პრეპარატები ასევე უნდა ვეძებოთ იმ ლიგანდებს შორის, რომლებიც წარმოქმნიან საკმაოდ მტკიცე კავშირებს მეტალების დაბალდამუხტულ იონებთან.

შეიძლება მნიშვნელოვანი დასკვნის გაკეთება, რომ სიმსივნის საწინააღმდეგო პრეპარატების აქტიობა დაკავშირებულია მათ ლიგანდურ თვისებებთან ან ორგანიზმში ეფექტურ ლიგანდებად გარდაქმნის უნართან.

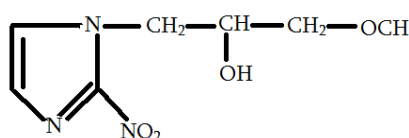
აღვნიშნავთ, რომ ორვალენტიანი პლატინის კოორდინაციული ნაერთები ხასიათდებიან სიმსივნის საწინააღმდეგო აქტიობით. დიდ ინტერესს წარმოადგენს პლატინის კომპლექსური ნაერთების ფიზიოლოგიური მოქმედება მათი აგებულების მიხედვით.

ეფექტურად გვევლინება ცის-იზომერები; ტრანს-იზომერებს აქტი-ობა არ გააჩნიათ. სიმსივნის საწინააღმდეგო პლატინის კომპლექსების მოქმედების მექანიზმი დაკავშირებულია დნმ-ის ძაფების ბიფუნქციური ალკინირების უნართან. ამ უნარს მივყავართ ნუკლეინის მჟავების ბიო-სინთეზის ხანგრძლივ დათრგუნვამდე და უჯრედების სიკვდილამდე.

პლატინის პრეპარატები ინიშნება ვენური ინექციებისათვის, შინაგა-ნად მიღებისას ისინი არაეფექტურები არიან.

პლატინის პრეპარატები საკმაოდ ტოქსიკურები არიან, ამ მიზეზით ღვიძლის და თირკმლის ფუნქციის დარღვევების დროს მათი დანიშვნა შეუძლებელია. ძვლისტვინის სისხლწარმოქმნის, არასაკმარისი სისხლის მიმოქცევის, კუჭისა და თორმეტგოჯა ნაწლავის წყლულოვანი დაავადების, ორსულობის დროს, და ძუძუთი კვებისას არარეკომენდირებულია პლატი-ნის კომპლექსის შეწყვილება ოტოტოქსიკური გავლენის გამომწვევ პრე-პარატებთან.

მსგავსი ეფექტები მიიღება როდიუმის და ირიდიუმის კომპლექსების გამოკვლევისას. უკანასკნელ წლებში მიიღეს სპილენძი(II)-ს და თუთიის კოორდინაციული ნაერთები 5-ნიტრომიდაზოლის წარმოებით, კერძოდ, პრეპარატ კლოტრიმაზოლით. მოცემული ნივთიერებების მედიკო-ბიოლო-გიური გამოკვლევის შედეგად დადგენილ იქნა, რომ ნაჩვენები პრეპარატების ანტიპროტოზოული და ანტიბაქტერიული აქტიობის გაძლიერებით შეი-ნიშნებოდა საერთოდ ახალი ციტოტოქსიკური აქტიობა ავთვისებიანი უჯ-რედების საწინააღმდეგოდ. ამასთან ამ რიგის ძველი პრეპარატი მიზონი-დაზოლი ახდენს სიმსივნურ უჯრედებზე ციტოსტატიკურ ეფექტს.



მიზონიდაზოლი

მნიშვნელოვან ინტერესს წარმოადგენდა ჩვენს მიერ სინთეზირებული 3d-მეტალის ნაქსოჯინთან და ტინიდაზოლთან 16 ბიოკოორდინაციული ნაერთის მედიკო-ბიოლოგიური გამოკვლევების ჩატარება, რათა გამოგვევლინა მათი ციტოტოქსიკური აქტიობა სიმსივნური უჯრედის მიმართ.

1. ლიტერატურის მიმოხილვა

1.1. ანტიპროტოზოული Naxogin და Tinidazole-ის პრეპარატების კომპლექსწარმოქმნის გამოკვლევა

უკანასკნელ პერიოდში მნიშვნელოვანად გაფართოვდა ინოვაციურ ტექნოლოგიებში ახალი მიმართულების ბიოაქტიური ბიოკომპლექსნაერთების გამოყენების მასშტაბები. ამის დადასტურებაა ზოგიერთი 3d-ბიომეტალისა და მათი კომპლექსნაერთების ბიოლოგიური როლის კვლევა-ძიებითი სამუშაოების გაძლიერება.

ბიოკომპლექსნაერთის ორგანული ნაწილის (პრეპარატის, როგორც ლიგანდის) აქტიურობა, კოორდინირებულ მდგომარეობაში, ხშირად უფრო მაღალია, ვიდრე თავისუფალ (არაკოორდინირებულ მდგომარეობაში, რადგან უმჯობესდება კომპლექსწარმოქმნელ ბიომეტალთა შემთვისებლობა ორგანიზმთა მიერ, მცირდება მათი ტოქსიკურობა (არ ხდება უცხო კომპლექსნაერთთა წარმოქმნა ორგანიზმში) და სხვ.

ამასთან, აღსანიშნავია ისიც, რომ ბოლო პერიოდში განსაკუთრებული ყურადღება ექცევა ფართო სპექტრის მქონე სოკოს საწინააღმდეგო პრეპარატებს. ამის დადასტურებაა იმიდაზოლის წარმოებულებისადმი მეცნიერ-მკვლევართა დიდი დაინტერესება, რადგან იმიდაზოლის ორგანული ჰეტეროციკლი განსაკუთრებულ როლს ასრულებს ცოცხალ ორგანიზმთა ნივთიერებების მეტაბოლიზმში.

ზემოაღნიშნულს ხელს უწყობს ის გარემოებაც, რომ იმიდაზოლის სისტემა წარმოადგებს მრავალი ფარმაცევტული პრეპარატის, მათ შორის ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის საყრდენს, რომლებიც ძალიან ეფექტურია დერმატოფიტების, საფუარის სოკოებისა და სხვათა წინააღმდეგ. ისინი ავლენენ, აგრეთვე, ანტიბაქტერიულ მოქმედებას სტაფილოკოკებსა და სტრეფტოკოკებზე. ბიოაქტიურ სამკურნალო ნივთიერებებს შორის მნიშვნელოვანია იმიდაზოლის წარმოებულები. ცოცხალი ორგანიზმის ნივთიერებათა ცვლაში ძალზედ დიდ როლს ასრულებს იმიდაზოლის ორგანულ ნაერთთა

ჰეტეროციკლი, იგი შედის α -ამინომჟავების ჰისტიდინისა და მისი მონათესავე ჰორმონის ჰისტამინის სტრუქტურების შედგენილობაში.

თანამედროვე ანტიპროტოზოულ და ანტიბაქტერიულ პრეპარატებს შორის წამყვან პოზიციებს იკავებს სამკურნალო პრეპარატები: მეტრონიდაზოლი, ტინიდაზოლი, ტიბერალი, ნაქსოჯინი იგივეა, რაც აქტიური ნივთიერება ნიმორაზოლი, ნირიდაზოლი, ნიტაზოლი და სხვ. ამ პრეპარატებს გააჩნიათ ანტიპროტოზოული და ანტიბაქტერიული მოქმედების ფართო სპექტრი [1-6].

ბოლო პერიოდში მნიშვნელოვნად გაფართოვდა ახალი მიმართულების – ბიოაქტიური კომპლექსნაერთების ახალ ტექნოლოგიებში გამოყენების კვლევა-ძიებითი მასშტაბები [7-12].

სამეცნიერო ნაშრომი ეძღვნება სადღეისოდ ძალიან აქტუალურ პრობლემას - პროტოზოულ დაავადებათა ქიმიოთერაპიას.

ნაშრომში გაშუქებულია 5-ნიტროიმიდაზოლისა და ნიტროთიაზოლის წარმოებულ პრეპარატთა ჯგუფის ისტორია. განხილულია მოცემული პრეპარატების სინთეზი და მათი მოქმედების მექანიზმი, გვერდითი მოვლენები და მათი პროფილაქტიკა. ასევე შეხებაშია აღნიშნულ სამკურნალო საშუალებათა პრაქტიკული გამოყენების საკითხები და მათი ეფექტურობა. ყურადღება ეთმობა ამ ჯგუფის ნივთიერებათა კომპლექსწარმოქმნას „ბიოგენურ“ მიკროელემენტებთან, რომლებიც შედიან 3d-მეტალების მწკრივში - მანგანუმი, კობალტი, ნიკელი, სპილენძი, თუთია. ასევე მნიშვნელოვანია ლიგანდების სახით 5-ნიტროიმიდაზოლისა და ნიტროთიაზოლის წარმოებული ფარმაცოლოგიური პრეპარატების გამოყენება ცოცხალ ორგანიზმებში [13,14].

თითოეულ ბიოკოორდინაციულ ნაერთში ერთმანეთთან შერწყმულია სხვადასხვა აქტივობის მქონე ელემენტთა ატომები (აზოტი, ჟანგბადი და ბიომეტალები), რომლებსაც ერთმანეთის გაძლიერების ხარჯზე სინთეზირებული კომპლექსნაერთების გაძლიერება შეუძლიათ. ბიოკომპლექსური

ნაერთების ახალ ტექნოლოგიებში გამოყენების კვლევა-ძიებამ უკვე მასშტაბური სახე მიიღო, რადგანაც ძალზედ მნიშვნელოვანია ახალი, ბიოლოგიურად აქტიური კომპლექსნაერთების სინთეზი და კვლევა [15].

ცოცხალი ორგანიზმის ფუნქციონირებისა და რეგულირების უნარს ზოგიერთი ბიომეტალის (Mn, Ni, Cu, Zn) ატომები უზრუნველყოფენ, ისინი სიცოცხლისათვის აუცილებელ მიკროელემენტებს მიეკუთვნებიან, შედიან რა მრავალი ვიტამინის, ფერმენტისა, ჰორმონისა და სხვა აქტიური ცენტრების შედგენილობაში [16-18].

ამ პროცესების ღრმა გაცნობისათვის აუცილებელია მსგავსი ბიოკომპლექსების სტრუქტურული ასპექტების ცოდნა. სტერეოქიმიური თავისებურებების გამოვლენა დიდ სიძნელეებთან არის დაკავშირებული [20-24].

მოცემულ ჯგუფთა სამკურნალო პრეპარატების მოლეკულებში ერთდროულად არსებობს რამდენიმე დონორული ჯგუფი, რომლებიც უდაოდ მოითხოვს კოორდინირების რეალური ხერხების, წარმოქმნილი ბიოკომპლექსების სივრცითი სტრუქტურებისა და მათ მიერ გამოვლენილი ბიოაქტიურობის განსაზღვრას.

ბიოაქტიური ბიოკომპლექსნაერთების მოდელირება არა მხოლოდ სამეცნიერო-თეორიული სფეროს ინტერესებს წარმოადგენს, არამედ მას უდიდესი პრაქტიკული მნიშვნელობა აქვს ახალი თაობის მაღალეფექტური და წინასწარპროგნოზირებადი თვისებების მქონე მიზნობრივ დაავადებათა განკურნებისათვის საჭირო სამკურნალო პრეპარატების მისაღებად [25-28].

პრეპარატების ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის კოორდინირებულ მდგომარეობაში გადასვლას შეუძლია მნიშვნელოვნად გაზარდოს მათი ბიოლოგიური აქტივობა, ამავე დროს შეამციროს მათი ტოქსიკურობა, ეს უკანასკნელი (არანაკლებ) მნიშვნელოვანია ქიმიოთერაპიის კურსის პროცესში გართულებების თავიდან ასაცილებლად. გარდა ამისა, კომპლექსწარმოქმნის პროცესში შესაძლებელია ახალი ტიპის კომპლექსნაერთების მიღება ანალოგიური აქტივობითა და ახალი თვისებების გამომჟღავნებით. მოცემული

ჯგუფის სამედიცინო პრეპარატების მოლეკულებში ერთდროულად არსებობს რამდენიმე დონორული ჯგუფი, რაც აუცილებლად საჭიროებს რეალური კოორდინირების მეთოდის (საშუალებების) განსაზღვრას, ასევე წარმოქმნილი ბიოკომპლექსების სივრცითი სტრუქტურებისა და ბიოაქტივობის დადგენას [29-31].

გარდამავალი ბიომეტალებისა და მათი კომპლექსნაერთების ბიოლოგიური როლის შესწავლა დღეისათვის ერთ-ერთ პერსპექტიულ მიმართულებად ითვლება. პრეპარატის, როგორც ლიგანდის აქტიურობა კოორდინირებულ მდგომარეობაში უმეტესად უფრო მაღალია, ვიდრე თავისუფალ - არაკოორდინირებულ მდგომარეობაში, ამ დროს უმჯობესდება კომპლექსწარმოქმნელ მიკროელემენტთა შემთვისებლობა ცოცხალი ორგანიზმის მიერ და მცირდება მათი ტოქსიკურობა [32-38].

მრავალი ფარმაცევტული საშუალება ძლიერი კომპლექსწარმოქმნელია, ამის გათვალისწინებით მათი ლიგანდებად სწორი შერჩევის შემთხვევაში ძირითად სამკურნალო-პროფილაქტიკურ ეფექტთან ერთად შეიძლება ისეთი გვერდითი მოვლენების ლიკვიდაცია, რომლებიც მიკროელემენტების დეფიციტის ნიადაგზე ენტერალური პათოლოგიის შედეგად ვითარდება [39-45].

ბიოკომპლექსნაერთების გამოყენება ქიმიოთერაპიაში სხვადასხვა დაავადებების დროს თანდათანობით უფრო შესამჩნევი გახდება ბიომეტალთა როლის შესწავლის შემდგომ. ბიომეტალთა შემცველი კომპლექსური ნაერთებისა და კოორდინაციული ქიმიის მეთოდების გამოყენება ვირუსულ დაავადებათა წინააღმდეგ ძალზედ მნიშვნელოვანი მიმართულებაა [46-52].

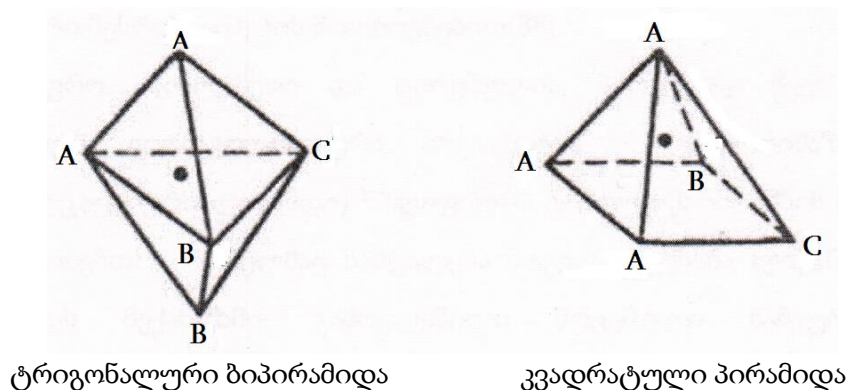
ქიმიოთერაპიის წარმატებით მიმდინარეობა მდგომარეობს ბიოაქტიურ კომპლექსნაერთთა სწორად შერჩევაში, რომელთაც მოლეკულათა დონეზე შეედრებათ ვირუსსპეციფიკური პროცესები დაავადებულ უჯრედებში დათრგუნოს ისე რომ არ დააზიანოს ჯანმრთელ უჯრედთა მეტაბოლიზმი [52-57].

ბიოაქტიური კომპლექსების მოდელირებაში ორი ურთიერთდამაკავშირებელი მიმართულებით მიმდინარეობს კვლევები, ერთი მდგომარეობს ბუნებრივი ბიოკომპლექსების შედგენილობისა და აღნაგობის შესწავლაში მათი სინთეზური გზით მიღების მიზნით, ხოლო მეორე სინთეზის თანდათან გართულების გზით დაბალმოლეკულური ბიოკომპლექსნაერთების მოდიფიკაცია. მათი უთიერთშერწყმა უზრუნველყოფს ფუნდამენტური პრობლემის წარმატებით გადაწყვეტას - ბიოკომპლექსნაერთების შედგენილობას, აღნაგობასა და ბიოლოგიურ აქტიურობას შორის ურთიერთკავშირის დადგენას [58].

ანტიბაქტერიული ქიმიოთერაპიის წარმატება მდგომარეობს ბიოაქტიურ ბიოკომპლექსნაერთთა სწორად შერჩევაში, რომელთაც მოლეკულურ დონეზე შეეძლება მიკრობსპეციფიკური პროცესების დათრგუნვა დასნეზოვნებულ უჯრედებში ისე, რომ არ შეეხოთ ჯანმრთელ უჯრედთა მეტაბოლიზმს. სწორედ ასეთი სპეციფიკური თვისებების მქონე ბიოკომპლექსნაერთების გამოყენების მიზანია მიკრობთა აქტიურობის ინაქტივაცია ან მათი მინიმუმამდე შემცირება [59-62].

ითვლება რომ კომპლექსები 5-კოორდინაციული რიცხვით ნაკლებად მნიშვნელოვნები იყვნენ, მაგრამ რენტგენოსტრუქტურული კვლევების შედეგად, ისინი მნიშვნელოვანი და შეუცვლელნი გახდნენ გამორჩეული ბიოაქტიურობის გამო [63,64].

კომპლექსნაერთათვის, რომელთაც გააჩნიათ 5-კოორდინაციული რიცხვი შესაძლებელია ლიგანდების ორი საკმაოდ სწორი გეომეტრიული განლაგება შიდა კოორდინაციულ სფეროში:



მეტალთა კომპლექსებს დაბალ ვალენტურ მდგომარეობაში ტრიგონალურ ბიპირამიდის ფორმა აქვთ.

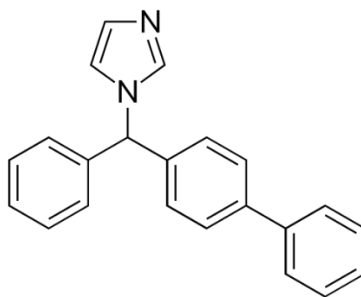
3d-მეტალთა კომპლექსებისათვის, რომელთაც განსაკუთრებული ბიოლოგიური მნიშვნელობა აქვთ და განლაგებულნი არიან მწკრივში Mn(II), Co(II), Ni(II), Cu(II), Zn(II), აქვთ კვადრატულ პირამიდული ფორმა [65,66].

სპილენძის კომპლექსები შეიცავენ პირამიდის წვეროსაკენ მიმართულ გრძელ და შედარებით სუსტ ბმებს, სინამდვილეში ტრიგონალური პირამიდა და კვადრატული პირამიდას ფორმები ერთმანეთისაგან მხოლოდ უმნიშვნელოდ განსხვავდებიან, ერთი ფორმიდან მეორეში გადასასვლელად საკმარისია მხოლოდ კუთხეთა უმნიშვნელო ცვლილება.

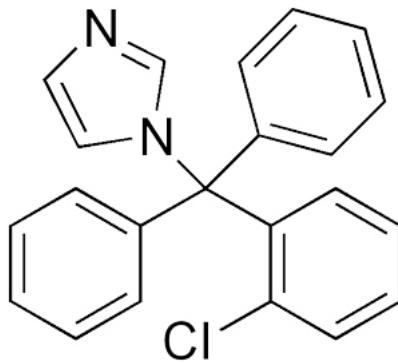
სპილენძ(II)-ის პეპტიდურ კომპლექსებს აქვთ კვადრატული პირამიდის ფორმა 5-კოორდინაციული რიცხვით, რაც მოცემული კოორდინაციული რიცხვის განსაკუთრებულ მნიშვნელობას ადასტურებს ბიოლოგიური აქტივობის გამოვლენაში.

სპილენძ(II)-ის დაბალმოლეკულური კომპლექსების შემთხვევაში, კრისტალურ მდგომარეობაში, მათ ზოგჯერ აქვთ მსგავსი კონფიგურაცია 5-კოორდინაციული რიცხვით. სპილენძ(II)-ის კრისტალურ მდგომარეობაში სტრუქტურათა მრავალსახეობის წარმოქმნა შეუძლია 4, 5 და 6 კოორდინაციული რიცხვების შესაბამისობით, მათი გეომეტრია განისაზღვრება ლიგანდების კონფორმაციებით და კრისტალური მესრის ტიპების მიხედვით [67-68].

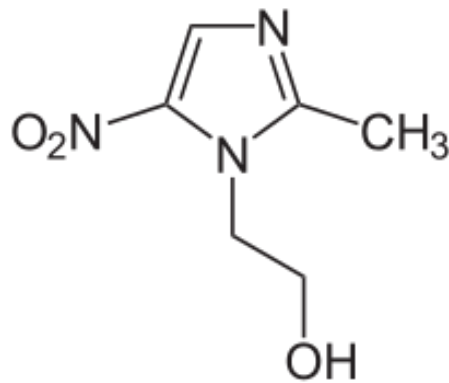
მრავალი ფარმაცევტული პრეპარატის საყრდენს წარმოადგენს იმიდაზოლის სისტემა - ნაქსოჯინი, ტინიდაზოლი, ნირიდაზოლი, ეთიმიზოლი, ბიფონაროლი, ტიბერალი, კლოტრიმაზოლი, მეტრონიდაზოლი და სხვ.



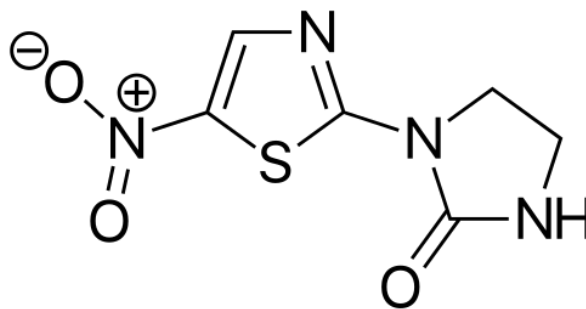
ბიფონაროლი, Bifonazole.



კლოტრიმაზოლი, klotrimazole.



მეტრონიდაზოლი, Metronidazole.

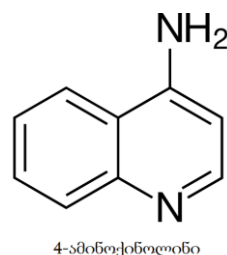
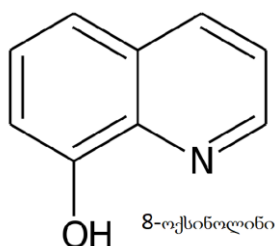


ნირიდაზოლი, Niridazole.

ამ პრეპარატ - ლიგანდების თითოეულ მოლეკულაში რამდენიმე დონორული ჯგუფის ერთდროული არსებობა საჭიროებს კომპლექსწარმო-
ქმნელ ატომთა კოორდინირების ხერხებისა და სტრუქტურული ფრაგმენტ-
ბის ზუსტ განსაზღვრას, მათი ბიოაქტიური, ბაქტერიციდური, ფუნგიციდუ-
რი და სხვა თვისებების დადგენას [69-75].

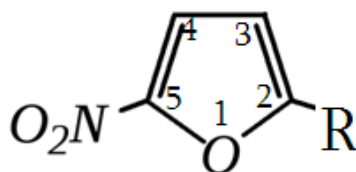
სხვადასხვა ქიმიური ჯგუფის (8-ოქსიქინოლინის, 4-ამინოქინოლინის, 5-ნიტროფურფუროლის წარმოებულები და სხვ.) სამკურნალო ეფექტურობის არსებობის მიუხედავად, სადღეისოდ პროტოზოული ინფექციების კლინიკაში პირველხარისხიანი მნიშვნელობა აქვს 5-ნიტროიმიდაზოლის [76] წარმოებულ პრეპარატებს Naxogin და Tinidazole, რომლებიც ხასიათდებიან ქიმიოთერაპიული მოქმედების ფართო სპექტრით არა მხოლოდ ამებიაზე, ლამბლიოზზე, ტრიქომონიაზე, არამედ, აგრეთვე ანაერობული შერეული ინფექციების (ნაწლავური ინფექციურ-ინვაზიური დაავადებების, ფილტვებისა და ტვინის აბსცესის, ენდოკარდიტის ჯგუფების) შემთხვევაშიც [77,78].

ანტიბაქტერიულ საშუალებებად ანტიბიოტიკებისა და სულფანილამიდების გამოყენებამ მიგვიყვანა სინთეზური ნაერთების ფართომასშტაბიან ძიებამდე, რომლებსაც ექნებოდათ მაღალი აქტიურობა.



1946 წლიდან სამკურნალო ნივთიერებათა პრაქტიკაში 5-ნიტროფურფუროლის წარმოებულების შემოტანამ აღმოაჩინა უმდიდრესი წყარო ახალი ქიმიოთერაპიული საშუალებების მისაღებად.

ნიტროფურანების ნაწარმების ქიმიურ ხასიათს განსაზღვრავს ფურანების ბირთვში ნიტროჯგუფის - NO₂ შემცველობა 5-მდგომარეობაში და ასევე, სხვადასხვა ჩამნაცვლებლები -R 2-მდგომარეობაში.



5-ნიტროფურანის ნაწარმთა ნაწილს ახასიათებთ მაღალი ანტიმიკრობული და ანტიპროტოზოული აქტივობა.

ისინი წარმატებით გამოიყენებიან სამედიცინო პრაქტიკაში ინფექციური დაავადებების თერაპიისას (სამკურნალოდ). ნიტროფურანი ეფექტურია, როგორც გრამდადებითი, ისე გრამუარყოფითი მიკროორგანიზმებისადმი, ასევე ის აქტიურია ზოგიერთი ძლიერი ვირუსისა და ანაერობული ბაქტერიებით გამოწვეული ინფექციების მიმართ (ტრიხომონადების, ლამბლიების და ა. შ.). რიგ შემთხვევაში ისინი აფერხებენ მიკროორგანიზმების ზრდას, რომლებიც იჩენენ მდგრადობას სულფანილამიდებსა და ანტიბიოტიკების მიმართ.

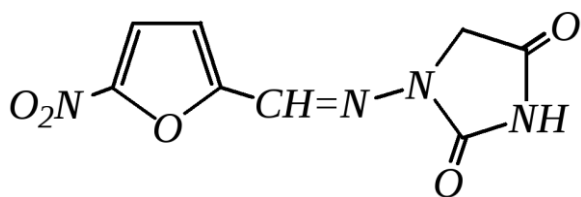
ქიმიურ სტრუქტურაზე დამოკიდებულებით აღნიშნული კლასის ცალკეული წარმომადგენლები განსხვავდებიან მოქმედების სპექტრით:

1. ფურაცილინი მოქმედებს გრამდადებით და გრამუარყოფით ბაქტერიებზე;
2. ფურაზოლიდონი, გვერდით ჯაჭვში შეიცავს ოქსაზოლიდონის ბირთვს, ის ეფექტურია როგორც გრამდადებითი ბაქტერიებისათვის, ასევე უმარტივესებისათვის;
3. ფურაზოლინი, რომელიც გამორჩეულია ოქსაზოლინის ბირთვში დამატებითი მორფოლინომეთილური ჯგუფის არსებობით, მეტად აქტიურია გრამდადებითი ბაქტერიების მიმართ;
4. ფურადონინი და ფურაგინი, გვერდით ჯაჭვში ამინოგიდანტონის ბირთვის შემცველობით, უფრო ეფექტურია შარდგამომყოფ ორგანოთა ინფექციებისას.

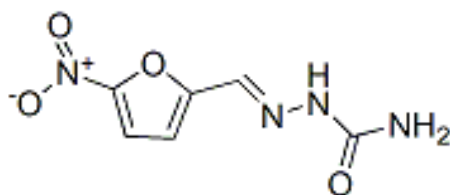
სამკურნალო თერაპიისას პრეპარატების დანიშნულებას და მიღების მეთოდებს განსაზღვრავს სამკურნალო პრეპარატების დამახასიათებელი თავისებურებები.

ბოლო დროს ახალი სინთეზური ქიმიოთერაპიული პრეპარატების (ფთორქინოლონი და სხვ.) გამოჩენით შედარებით შეიზღუდა ნიტროფურა-

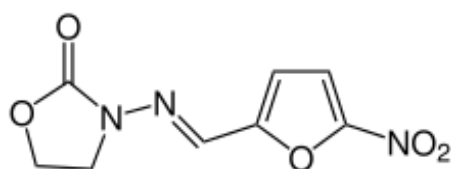
ნების გამოყენება, ახალ კომბინირებული პრეპარატების (ფულევილი, კლეფურინი, ალგოპორი და სხვ.) შედგენილობაში, როგორც სისტემური ანტი-მიკრობული საშუალების მოქმედება.



ფურადონინი



ფურაცილინი



ფურაზოლიდონი

5-ნიტროფურანის ნაწარმები, როგორც ქიმიოთერაპიული საშუალებები, შემოთავაზებული იქნა Stilman-ის მიერ 1944 წელს. ამ დრომდე ითვლება, რომ შეუძლებელი იყო ნიტროჯგუფის შეყვანა სამკურნალო საშუალებებში მისი მაღალი ტოქსიკურობის გამო. ასეთი მოსაზრების მიზეზი გახდა ის მრავალრიცხოვანი მეტჰემოგლობინების შემთხვევები სამხედრო ქარხნების მუშებში, რაც გამოწვეული იყო ტრინიტროტოლოლის ტიპის ნაერთებით, რომლებიც კანიდან ორგანიზმში მოხვედრისას აღდგებოდნენ ანილინამდე. თუმცა ასეთი საშიშროება ნიტრონაწარმებისათვის, რომელიც არ შეიცავს ბენზოლის ბირთვს, არ არსებობს.

1946 წელს Dodd-მა პრაქტიკაში შემოიტანა 5-ნიტრობენზოლის ნაწარმი სამკურნალო საშუალებები, რაც გახდა პრეპარატების მიღების უმდიდრესი წყარო ახალი ანტიმიკრობული და ანტიპროტოზოული პრეპარატებისათვის.

ყოფილ საბჭოთა კავშირში 5-ნიტროფურანის წარმოებული დაასინთეზეს 1953 წელს სატყეო მეურნეობის პრობლემების შემსწავლელ ინსტიტუტში ფურფულილის სექტორში, რომელიც შემდეგ გარდაიქმნა ლატვიის სსრ-ის მეცნიერებათა აკადემიის ორგანულ სინთეზის ინსტიტუტად, სადაც იმ დროს მიმდინარეობდა 5-ნიტრო-2-ფურფურილიდენსემიკარბაზონის 2-ოქსიეთილირებულ გარდაქმნათა კვლევები [78-82].

ამ რიგის პრეპარატებს აერთიანებენ საერთო ანტიმიკრობულ და ანტიპროტოზოულ ეფექტებად, რომლებიც მიკროორგანიზმების ერთტიპიური გვერდითი ეფექტების ზემოქმედების მსგავსია.

პროტოზოულ აღმზნებათა მწკრივში ისინი ახშობენ ტრიპანოსომით ცხოველქმედებას, რომელიც წარმოადგენს როგორც აფრიკული, ასევე ამერიკული ტრიპანოსომოზის ამგზნებს.

ნიტროფურანი ძალზედ ეფექტურია იმ ინფექციებისათვის, რომლებიც გამოწვეულია *Candida albicans* და სხვა სოკოებით. პრეპარატების ამ ჯგუფის ზოგიერთი წარმომადგენელი ხასიათდება ლამბლიის საწინააღმდეგო მკვეთრად გამოხატული აქტივობით. ამ კლასის ნაერთები ახდენენ ბაქტერიოსტატიკურ ქმედებას, მაგრამ მაღალი კონცენტრაციებისას შეიძლება გამოავლინონ ბაქტერიოციდული აქტივობაც.

1.2. ლიგანდები - ნაქსოჯინი, ტინიდაზოლი

Naxogin და Tinidazole მეტრონიდაზოლის მსგავსი სტრუქტურებით ავლენენ ერთტიპიურ გვერდით მოვლენებს. მიღებული პრეპარატებისათვის თანმდევია გვერდითი მოვლენები: თავის ტკივილი, მადის დაკარგვა, მეტაბოლური გემო პირში, კუჭ-ნაწლავის აშლილობა, ალერგიული რეაქციები. დიდი დოზებისას შესაძლოა ნევროლოგიური გართულებების განვითარება. აღნიშნული პრეპარატები ახდენენ, აგრეთვე ორგანიზმის სენსიბილიზაციას ალკოჰოლური სასმელების მიმართ. ლიგანდური აქტიურობის გამო მათ

უნარი აქვთ მოახდინონ 3d-მეტალებთან კოორდინირება (ფერმენტული სისტემის მიკროელემენტების შეკავშირება), რაც გავლენას ახდენს ორგანიზმის ნივთიერებებისა და, აგრეთვე მარტივი პათოგენური ანაერობების უჯრედთა ცვლაზე.

ფარმაკოლოგიური პრეპარატების, 5-ნიტროიმიდაზოლის და ნიტროთიაზოლის ნაწარმების გამოყენება ლიგანდებად ცოცხალ ორგანიზმებში მიმდინარე პროცესების ქიმიური და სტრუქტურული მოდელირებისათვის ძალზედ აქტუალურია.

აღსანიშნავია, რომ 3d-მეტალების იონთა კოორდინაციის ხარჯზე შეიძლება გაძლიერდეს ამ მეტალთა თანმდევი ტოქსიკურობა.

ერთი მხრივ, ხდება მოცემული პრეპარატების პროტოზოული და ანტიბაქტერიული აქტიურობის გაძლიერება, ხოლო მეორე მხრივ - მათი მხრიდან გვერდითი ეფექტების გამოვლენა [83-86].

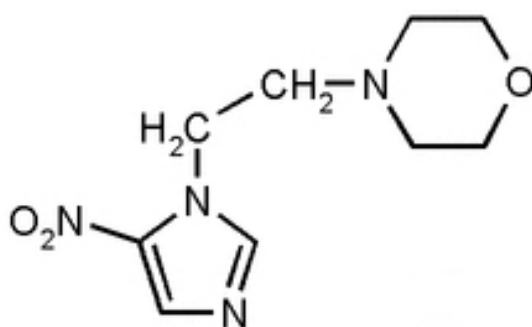
მნიშვნელოვან ინტერესს წარმოადგენენ ნაქსოჯინთან და ტინიდაზოლთან გარდამავალი 3d-მეტალების კომპლექსური ნაერთების სინთეზი და მიღება, რომლის მიზანია აღნიშნულ ნივთიერებათა ფიზიკურ-ქიმიური და მედიკო-ბიოლოგიური თვისებების გამოკვლევები და საბოლოო ჯამში პროცესის მექანიზმის ახსნა, რაც საშუალებას მოგვცემს დავადგინოთ სინთეზირებულ კომპლექსნაერთთა სტრუქტურებსა და მათ აქტიურობებს შორის კორელაციური დამოკიდებულება, აგრეთვე განვსაზღვროთ მიღებული პრეპარატებით თერაპიის დროს წარმოშობილ შესაძლო გართულებათა პროფილაქტიკის მეთოდები, რაც ხელს შეუწყობს ახალი სამკურნალო ფორმების შემუშავებას და გამოავლენს თვისებათა მზარდ აქტიურობას, შერჩევითობას და შემცირებულ ტოქსიკურობას [87-89].

უდავოა ისიც, რომ ბიოკომპლექსნაერთში ორგანული ნაწილის (ლიგანდის) აქტიურობა კოორდინირებულ მდგომარეობაში ხშირად უფრო მაღალია, ვიდრე თავისუფალ (არაკოორდინირებულ) მდგომარეობაში, რადგან უმჯობესდება კომპლექსწარმომქმნელ მიკროელემენტთა შემთვისებლო-

ბა ორგანიზმის მიერ, მცირდება მათი ტოქსიკურობა და გვერდითი მოვლენები (არ ხდება უცხო კომპლექსნაერთთა წარმოქმნა ორგანიზმში), რომლებიც ვითარდება მიკროელემენტთა დეფიციტის ხარჯზე.

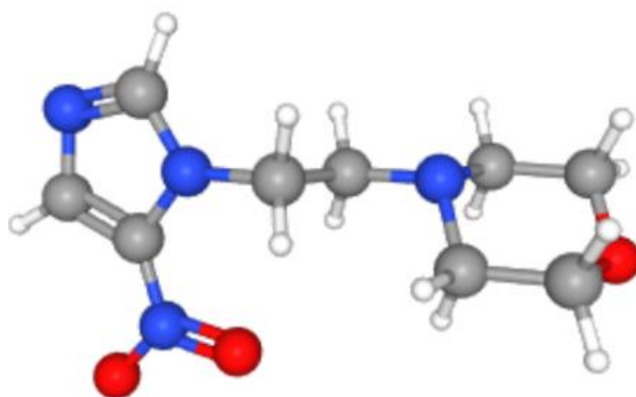
ნაქსოჯინი (აქტიური ნივთიერება - ნიმორაზოლი) - 5-ნიტროიმიდაზოლის წარმოებული ეს არის ქიმიოთერაპიული პრეპარატი, ანტიპროტოზოული და ანტიბაქტერიული ეფექტური საშუალება, რომელიც ავლენს აქტივობას ისეთი მიკროორგანიზმების მიმართ, რომლებიც მგრძნობიარენი არიან აქტიურ ნივთიერება ნიმორაზოლთან, ესენია: *Trichomonas vaginalis* და სხვა უმარტივესების (მათ შორის *Giardia intestinalis* და *Entamoeba histolytica*), აგრეთვე ანაერობული ბაქტერიების, კერძოდ კი *Bacteroides* და *Gardnerella vaginalis* მიმართ.

ნაქსოჯინი ღია მოყვითალო, უსუნო კრისტალური ნივთიერებაა. წყალში თითქმის არ იხსნება, ძნელად იხსნება ეთერში და ძალიან კარგად იხსნება ეთანოლში, პოლიეთილენგლიკოლში და ქლოროფორმში.



ნაქსოჯინი $C_9H_{14}N_4O_3$

ქიმიური დასახელება - (4-[2-(5-ნიტროიმიდაზოლი-1-ილ) ეთილ]მორფილინი



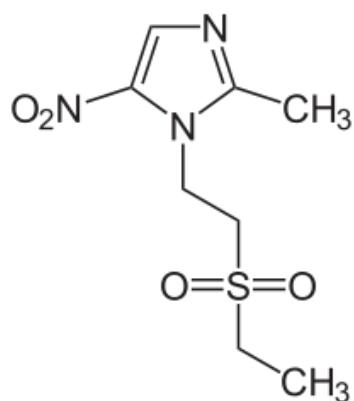
ნაქსოჯინის მოლეკულის სტრუქტურული აღნაგობა

უკანასკნელი 10—15 წლის განმავლობაში დიდ ინტერესს იწვევს სოკოსაწინააღმდეგო პრეპარატები და მასთან უშუალოდ დაკავშირებული იმიდაზოლის წარმოებულები, რაც გამოწვეულია იმით, რომ ამ უკანასკნელის ორგანული ჰეტეროციკლი მნიშვნელოვან როლს ასრულებს ცოცხალ ორგანიზმთა ნივთიერებების ცვლაში. იმიდაზოლის სისტემა წარმოადგენს სამკურნალო პრეპარატთა საკმაოდ დიდი ნაწილის, მათ შორის, ტინიდაზოლის საფუძველს. ტინიდაზოლი მნიშვნელოვან როლს ასრულებს დერმატოფიტების წინააღმდეგ, ავლენს ანტიბაქტერიულ მოქმედებას სტაფილოკოკებსა და სტრეფტოკოკებზე.

ტინიდაზოლის მოლეკულაში დონორული ჯგუფების არსებობამ განაპირობა კომპლექსწარმომქმნელ მეტალებთან კოორდინირების ხერხებისა და სტრუქტურული ფრაგმენტების ზუსტი განსაზღვრა, აგრეთვე მათი ბაქტერიციდური, ფუნგიციდური და სხვა თვისებების დადგენა. აღნიშნული მედიკო-ბიოლოგიური თვისებებისა და ეფექტურობის გაძლიერების მიზნით სინთეზირებულია ტინიდაზოლის ბიოკოორდინაციული ნაერთები ბიომეტალებთან მანგანუმთან, სპილენძთან და სხვ.

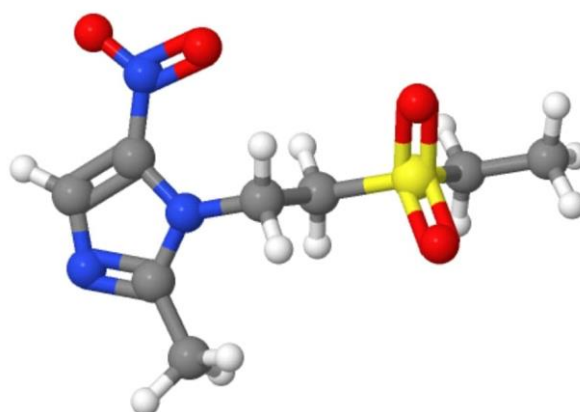
ტინიდაზოლი არის იმიდაზოლის წარმოებული, იგი პროტოზოული და ანაერობული ბაქტერიებით გამოწვეული ინფექციების მიმართ, აქტიურია *Trichomonas vaginalis*, *Entamoeba histolytica*, *Lambdia* ანაერობული ინფექციების გამომწვევის (*Bacteroides* spp., მათ შორის *B. flagilis*, *B. Melaninogenicus*, *Clostridium* spp., *Fuvacterum* spp., *Fusobaqterium* spp., *Peptococcus* spp., *Pepotostreptococcus* spp.) მიმართ. ტინიდაზოლი მაღალპროფილური საშუალებაა, იგი აღწევს ტრიქომონადებსა და ანაერობულ მიკროორგანიზმებში, სადაც ხდება ნიტრორედუქტოზის სახით აღდგენა, თრგუნავს სინთეზს და აზიანებს დნმ-ის სტრუქტურას.

ტინიდაზოლი თეთრი, უსუნო კრისტალური ნივთიერებაა. წყალში თითქმის არ იხსნება, ძნელად იხსნება ეთერში და ძალიან კარგად იხსნება ეთანოლში, პოლიეთილენგლიკოლში და ქლოროფორმში.



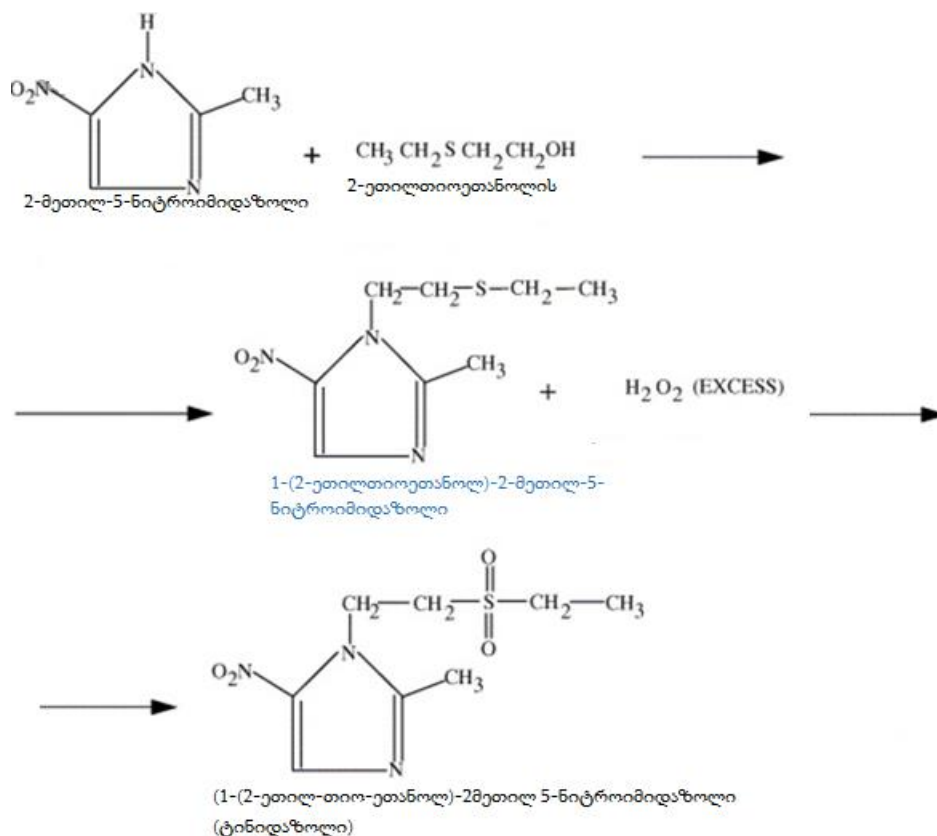
ტინიდაზოლი - $C_8H_{13}N_3O_4S$

ქიმიური დასახელება 1-(2-ეთილსულფოეთილ)-2-მეთილ-5-ნიტრო-
იმიდაზოლი. მისი მოლეკულური მასაა 247, 273



ტინიდაზოლის მოლეკულური აღნაგობა

ანტიპროტოზოურ და ანტიბაქტერიული პრეპარატის ტინიდაზოლის სინთეზირება ხდება 2-მეთილ,5-ნიტროიმიდაზოლისა და 2-ეთილთიოეთანოლის კონდენსაციით, MoO_3/SiO_2 კატალიზატორის თანაობისას და მიიღება 1-(2-ეთილთიოეთანოლ)-2-მეთილ-5-ნიტროიმიდაზოლი, რომელიც შემდგომ იჟანგება წყალბადის ზეჟანგის გამოყენებით.



1.3. მანგანუმის, ნიკელის, სპილენძის, თუთიის მარილების აღწერა და თვისებები

სპილენძის ფორმიატი - $\text{Cu}(\text{HCOO})_2$ – სპილენძ(II)-ისა და ჭიანჭველ-მჟავას არაორგანული მარილი ცისფერი, მყარი ნივთიერებაა. მოლური მასა: 153,58 გ/მოლი. სიმკვრივე 1,831 გ/სმ³, ლღობის ტემპერატურა 200°C. ხსნადობა წყალში - 125 გ/100 მლ, სპირტში - 0,25 გ/100 მლ. ცხელ წყალში განიცდის ჰიდროლიზს. წარმოქმნის კრისტალჰიდრატებს ფორმულით $\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, სადაც $n=2$ და 4.



სპილენძის ფორმიატი - $\text{Cu}(\text{HCOO})_2$

სპილენძის აცეტატი - $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ სპილენძ(II)-ისა და მმარმჟავას
 რთული, არაორგანული მარილი. მუქი ლურჯ-მომწვანო ფერის. წარმოქმნის
 მონოჰიდრატს $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$. მოლური მასა 181,63 გ/მოლი, სიმკვრივე
 1,882გ/სმ³, ლღობის ტემპერატურა 115°C. ხსნადობა ცივ წყალში - 7,2გ/100მლ,
 ცხელ წყალში 20გ/100მლ, სპირტში - 0,28გ/100მლ. ცხელ წყალში განიცდის
 ჰიდროლიზს.



სპილენძის აცეტატი - $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2$

ნიკელ(II)-ის აცეტატი - $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$. ნიკელ(II)-ისა და მმარმჟავას
 რთული არაორგანული ნაერთი. მწვანე ფერის, მყარი ნივთიერება. მოლური
 მასა 176,78გ/მოლი, სიმკვრივე 1,744გ/სმ³, ლღობისას იშლება. ძალიან კარგად
 იხსნება ცივ და ცხელ წყალში, ასევე მეთანოლში, არ იხსნება დიეთილეთერ-
 ში. სტრუქტურა-მონოკლინური. განიცდის ჰიდროლიზს.



ნიკელ(II) -ის აცეტატი - $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$

ნიკელ(II)-ის ფორმატი - $\text{Ni}(\text{HCOO})_2$ ნიკელ(II)-ისა და ჰიანჰველმჟა-
 ვას რთული არაორგანული ნაერთი. ღია მწვანე ფერის მყარი ნივთიერება. მო-
 ლური მასა 148,728 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,154 გ/სმ³, ლღობის ტემპერატურა
 180~200°C. იხსნება წყალში 2, 2გ/100მლ. წარმოქმნის მწვანე ფერის კრისტალ-
 ჰიდრატებს.



ნიკელ(II)-ის ფორმატი - $\text{Ni}(\text{HCOO})_2$

სპილენძ(II)-ის ქლორიდი $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ - ქიმიური ნაერთი, უსუნო, მოცისფრო-მომწვანო მყარი ნივთიერება, მოლური მასა 134,45 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,51 გ/სმ³, ლღობის ტემპერატურა 180~200°C. იხსნება წყალში 70,6გ/100მლ (0°C); 75,67 გ/100მლ (25°C); 107,9გ/100მლ (100°C) წარმოქმნის მწვანე ფერის კრისტალჰიდრატებს.



სპილენძ(II)-ის ქლორიდი $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

სპილენძ(II)-ის სულფატის პენტაჰიდრატი - $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$. არის ქიმიური არაორგანული ნაერთი, ცისფერი ნივთიერება, მოლური მასა 249,68 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,286 გ/სმ³, ლღობის ტემპერატურა 110~230°C-ზე იშლება, ხდება უწყლო. იხსნება წყალში 35,6გ/100მლ (20°C); 205გ/100მლ (100°C); წარმოქმნის ლურჯი ფერის კრისტალებს.



სპილენძ (II) -ის სულფატის პენტაჰიდრატი - $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

სპილენძ(II)-ის როდანდი - $\text{Cu}(\text{SCN})_2$ არის ქიმიური ნაერთი, შავი ფერის ნივთიერება, მოლური მასა 179,71 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,47 გ/სმ³, დნობის წერტილი 180°C-ზე იშლება. იხსნება წყალში 35,6გ/100მლ (20°C); 205გ/100მლ (100°C).



სპილენძ(II)-ის როდანდი - $\text{Cu}(\text{SCN})_2$

სპილენძ(II)-ის ბრომიდი - CuBr_2 არის ქიმიური ნაერთი, შავი ფერის ნივთიერება, მოლური მასა 223,7 გ/მოლი, სიმკვრივე 4,710 გ/სმ³, დნობის წერტილი 498°C-ზე იშლება. იხსნება წყალში 55,7გ/100მლ (20°C); არ იხსნება ბენზოლში, ეთილეთერში, გოგირდმჟავაში.



სპილენძ(II)-ის ბრომიდი - CuBr_2

თუთიის ქლორიდი - ZnCl_2 არის ქიმიური ნაერთი, უსუნო, თეთრი ფერის კრისტალური ჰიგროსკოპული ნივთიერება, მოლური მასა 136,315 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,907 გ/სმ³, დნობის წერტილი 290°C. იხსნება წყალში 432გ/100მლ (25°C), ეთანოლში, გლიცერინში, აცეტონში. არ იხსნება ბენზოლში, ეთილეთერში, გოგირდმჟავაში.



თუთიის ქლორიდი - ZnCl_2

მანგანუმის ქლორიდი - $\text{MnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ არის ქიმიური ნაერთი, ვარდისფერი კრისტალური ნივთიერება, მოლური მასა 161,844 გ/მოლი, სიმკვრივე 2,27 გ/სმ³, დნობის წერტილი 654°C. იხსნება წყალში 63,4გ/100მლ (0°C); 73,9გ/100მლ (20°C); 88,5გ/100მლ (40°C); 123,8გ/100მლ (100°C) ეთანოლში ხსნადია, ეთერში უხსნადია.



მანგანუმის ქლორიდი - $\text{MnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

ცხრილი 1. საწყისი ნივთიერებების ფიზიკური თვისებები

ქიმიური ფორმულა	ქიმიური დასახე- ლება	ფერი	აგრეგატული მდგომარეობა	მოლური მასა M გ/მოლი	სიმკვრივე	ხსნადობა გ/100მლ		დნობის წერტილი t°C
						წყალში	სპირტში	
$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	სპილენძ (II) -ის ქლორიდის დი- ჰიდრატი	მოცისფრო-- მომწვანო	მყარი	134, 45	2, 51	+		180~200
$\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	სპილენძ (II) -ის აცეტატის დიჰიდ- რატი	ლურჯ-მომ- წვანო	მყარი	181, 63	1, 882	+	მცირედ	115°
$\text{Cu}(\text{HCOO})_2$	სპილენძ (II) -ის ფორმატი	ცისფერი	მყარი	153, 58	1, 831	+	-	200
$\text{Cu}(\text{SCN})_2$	სპილენძ (II) -ის როდანდი	შავი	მყარი	179, 71	2, 47	+	+	180
$\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	სპილენძ (II) -ის სულფატის პენტა- ჰიდრატი	ცისფერი	მყარი	249, 68	2, 286	+	+	110-230
$\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	სპილენძ (II) -ის ბრომიდის დიჰიდ- რატი	შავი	მყარი	223, 7	4. 710	+	+	498
$\text{MnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	მანგანუმ (II) -ის ქლორიდის დი- ჰიდრატი	ვარდისფერი	მყარი	161, 844	2, 27	+	+	654
ZnCl_2	თუთი (II) -ის ქლორიდის	თეთრი	მყარი	136, 28	2, 907	+	+	290
$\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$	ნიკელ (II) -ის აცე- ტატი	მწვანე	მყარი	176, 78	1, 744	+	+	იშლება გაცხე- ლებისას
$\text{Ni}(\text{HCOO})_2$	ნიკელ (II) -ის ფორმატი	ღია მწვანე	მყარი	148, 728	2, 154	+	-	180-200
$\text{Mn}(\text{HCOO})_2$	მანგანუმ (II) -ის ფორმატი.	ღია ვარდის- ფერი	მყარი	144, 97	1, 953	კარგად	-	-

ცხრილი 2. სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთების ფიზიკური თვისებები

№	კომპლექსნაერთის ქიმიური ფორმულა	ფერი	მოლეკულური მასა	ხ ს ნ ა დ ო ბ ა						დნობის ტემპერატურა °C
				დიმეტილფორმაზი	ქლოროფორმი	წყალი	სპირტი	აცეტონი	ბენზოლი	
1.	$[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$	ღია ყავისფერი	701,1	+	+	+	-	+	+	170
2.	$[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	ღია ლურჯი	669,65	+	+	-	-	+	+	198
3.	$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	ლურჯი	677,54	+	+	-	-	+	+	180
4.	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	მოყვითალო	622,48	+	+	-	-	+	+	178
5.	$[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	ყავისფერი	631,55	+	+	-	+	+	+	160
6.	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	მომწვანო-მოყვითალო	665,55	+	+	-	-	+	+	185
7.	$[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	ყავისფერი	675,8	+	+	-	-	+	+	204
8.	$[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	ვარდისფერი	577,93	+	+	-	-	+	+	222
9.	$[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	მწვანე	707,7	+	+	-	-	+	+	180
10.	$[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	თეთრი	588,2	+	+	+	-	+	+	170-185
11.	$[\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	თეთრი	632	+	+	-	+	+	+	150
12.	$[\text{NiCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	ღია მწვანე	616,7	+	+	+	-	+	+	175
13.	$[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	მწვანე	643	+	+	-	-	+	+	200-205
14.	$[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	ბავი ვარდისფერი	638	+	+	+		+	+	195-200
15.	$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	ცისფერი	648,1	+	+	-	-	+	+	184
16.	ნაქსოჯინი	ღია მოყვითალო	226,23	+	+	-	+	+	+	110-115
17.	ტინიდზოლი	თეთრი	247,253	+	+	+	+	+	+	120

2. კვლევის შედეგები და მათი განსჯა

2.1. 3d-მეტალთა კომპლექსნაერთების სინთეზი

ჩატარებულმა სინთეზურმა სამუშაოებმა გვიჩვენა, რომ მეტალთა (მანგანუმი, ნიკელი, თუთია, სპილენძი) შესაბამისი მარილებისა (ქლორიდები, ბრომიდები, სულფატები, ფორმატები, აცეტატები, როდანიდები) და ლიგანდების ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის ეთანოლ-წყალხსნარებში რეაქციებისას წარმოიქმნება კომპლექსნაერთები, რომლებიც შეიცავს ნაქსოჯინის ან ტინიდაზოლის ორ მოლეკულას მეტალის ერთ იონზე. აქედან გამომდინარე, კომპლექსწარმოქმნის შემდგომი რეაქციები მიზანდასახულად ჩატარდა მორეაგირე ნივთიერებათა კომპონენტების 1:2:3:4 თანაფარდობით-ბიომეტალის ბუნებისა და აციდოლიგანდის ტიპზე დამოკიდებულებით.

მეტალების – Mn(II); Ni(II); Cu(II) და Zn-ის მარილთა ქლორიდების, ბრომიდების, სულფატების, ფორმატების, აცეტატების, როდანიდების წყალხსნარებს ემატებოდა ნაქსოჯინისა ან ტინიდაზოლის სპირტხსნარი, მოლური თანაფარდობა 1:2; 1:3; 1:4. შესაბამისი ხსნარების ურთიერთშერევა ხდებოდა მაგნიტური სარეველით და ცხელდებოდა წყლის აბაზანაზე, დაახლოებით 3-4 საათის განმავლობაში. კრისტალების სახით გამოყოფილ კომპლექსნაერთებს ვაცალკევებდით ხსნარებისგან და ჩავრეცხავდით ეთანოლ-წყალხსნარით, ვაშრობდით ექსიკატორში (CaCl₂)-ზე და ვაანალიზებდით [90,91].

რეაგენტების სხვადასხვა მოლური თანაფარდობით ურთიერთშერევის შედეგად ჩატარებული ექსპერიმენტების საფუძველზე, შევარჩიეთ აღნიშნული კომპლექსნაერთების სინთეზისთვის საჭირო ოპტიმალური პირობები, რომლებიც აღწერილია ქვევით.

2.1.1. ლიგანდ ნაქსოჯინის, იგივე „ნიმორაზოლის“ გამოკრისტალება

პრეპარატი „ნაქსოჯინი“ იგივე აქტიური ნივთიერება ნიმორაზოლი, დავაქუცმაცეთ ფაიფურის როდინში წვრილ დისპერსიულ ნაწილაკებად. გადმოვიტანეთ 300მლ. მოცულობის ქიმიურ ჭიქაში, მცირე ულუფებით დავამატეთ 100მლ მოცულობის (96,4%) სპირტი და კარგად გავხსენით მაგნიტურ სარეველაზე მუდმივი მორევის პირობებში.

„ნაქსოჯინი“ - აქტიური ნივთიერება - ნიმორაზოლი იხსნება (96,4%) ეთანოლში (გამხსნელი ეთანოლი შერჩეულ იქნა იმ მიზნით, რომ მასში იხსნება ჩვენი საკვლევი ნივთიერება ნიმორაზოლი და არ იხსნება შემავსებლები.

პრეპარატი „ნაქსოჯინი“-ს აქტიური ნივთიერება: ნიმორაზოლი, დამხმარე ნივთიერებებია:

მიკროკრისტალური ცელულოზა - არ იხსნება წყალში და ორგანულ გამხსნელებში

სტეარინის მჟავა ----- არ იხსნება წყალში, იხსნება ეთერებში

სახამებელი ----- იხსნება წყალში

მეთილცელულოზა ----- იხსნება წყალში

ჩვენს მიერ მიღებული ხსნარი გავფილტრეთ BaSO₄-ის ფილტრის ქაღალდით (ფილტრაციის ხანგრძლივობა 1სთ) ნ. პ.

ფილტრატი კრისტალიზატორით მოვათავსეთ ექსიკატორში (ექსიკატორში საშრობად გამოვიყენეთ CaCl₂), გამოსაკრისტალებლად,

გამოკრისტალებას (მუდმივ მასამდე დასაყვანად) დასჭირდა 5 დღე. მიღებული უკვე გამოკრისტალებული საკვლევი ნივთიერება ფრთხილად გადმოვიტანეთ კრისტალიზატორიდან.



ლიგანდ „ნიმორაზოლის“ გამოკრისტალეზა

2.1.2. ლიგანდ „ტინიდაზოლის“ გამოკრისტალეზა

პრეპარატი „ტინიდაზოლი“ დავაქუცმაცეთ ფაიფურის როდინში წვრილ დისპერსიულ ნაწილაკებად. გადმოვიტანეთ 300მლ. მოცულობის ქიმიურ ჭიქაში, მცირე ულუფებით დავამატეთ 100მლ მოცულობის (96,4%) სპირტი და კარგად გავხსენით მაგნიტურ სარეველაზე მუდმივი მორევის პირობებში.

„ტინიდაზოლი“ - აქტიური ტინიდაზოლი - იხსნება (96,4%) ეთანოლში (გამხსნელი ეთანოლი შერჩეულ იქნა იმ მიზნით, რომ მასში იხსნება ჩვენი საკვლევი ნივთიერება ტინიდაზოლი და არ იხსნება შემავსებლები.

პრეპარატი „ტინიდაზოლი“-ს დამხმარე ნივთიერებებია:

მიკროკრისტალური ცელულოზა, სტეარინის მჟავა, ალგინის მჟავა, სიმინდის სახამებელი, ნატრიუმის ლაურილსულფატი, მაგნიუმის სტეარატი.

ჩვენს მიერ მიღებული ხსნარი გავფილტრეთ BaSO_4 -ის ფილტრის ქაღალდით (ფილტრაციის ხანგრძლივობა 1სთ) ნ.პ.

ფილტრატი კრისტალიზატორით მოვათავსეთ ექსიკატორში (ექსიკატორში საშრობად გამოვიყენეთ CaCl_2), გამოსაკრისტალეზლად,

გამოკრისტალებას (მუდმივ მასამდე დაყვანას) დასჭირდა 4 დღე. მიღებული უკვე გამოკრისტალებული საკვლევი ნივთიერება ფრთხილად გადმოვიტანეთ კრისტალიზატორიდან.



ლიგანდ „ნიმორაზოლის„ გამოკრისტალება



ლიგანდ „ნიმორაზოლის„ გამოკრისტალება

2.1.3. სპილენძ (II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან (96, 4%) ეთანოლში

ავწონეთ 0,66გ ($\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) სპილენძ (II) -ის ქლორიდის დიჰიდრატი დავამატეთ მცირე (20მლ) რაოდენობის 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით (მაგნიტური სარეველას დახმარებით). მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 1,13გ. ნიმორაზოლი დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს წვეთ წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი. თანდათან წარმოიქმნა ხაჭოსებრი ნალექი, მიღებული ნალექი გავფილტრეთ BaSO_4 -ის ფილტრის ქაღალდით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით, დავდეთ გამო-საშრობად ექსიკატორში (CaCl_2 -ის თანაობისას).

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ნალექი იხსნება 96,4% ეთანოლში, არ იხსნება წყალში.



$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.4. სპილენძ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ტინიდაზოლთან

ავწონეთ 0,66გ ($\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) სპილენძ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატი დავამატეთ მცირე (20მლ) რაოდენობის 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით (მაგნიტური სარეველას დახმარებით), მივიღეთ ღია მწვანე ფერის ხსნარი. მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 2,47გ. ტინიდაზოლი, დავუმატეთ 30მლ 96,4% ეთანოლი (ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაში) კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს წვეთ-წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი. თანდათან

წარმოიქმნა მომწვანო-მოყვითალო ფერის ნალექი, მიღებული ნალექი გავ-
ფილტრეთ BaSO₄-ის ფილტრის ქაღალდით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნა-
რით დავდეთ გამოსაშრობად ექსიკატორში (CaCl₂-ის თანაობისას).

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა -
[CuCl₂·(C₈H₁₃N₃O₄S)₂·(H₂O)₂].



[CuCl₂·(C₈H₁₃N₃O₄S)₂·(H₂O)₂] ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.5. სპილენძ(II)-ის აცეტატური კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 0,61 გ (Cu(CH₃COO)₂·2H₂O სპილენძ(II)-ის აცეტატის დი-
ჰიდრატი კარგად გავხსენით (მაგნიტური სარეველას დახმარებით) მცირე
(20მლ) რაოდენობის დისტილირებულ წყალში, მივიღეთ მომწვანო-მო-
ლურჯი ხსნარი. ავწონეთ 2,26 გ. ნიმორაზოლი დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთა-
ნოლი, კარგად გავხსენით. მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. პირველ ხსნარს
წვეთ-წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი, რომელიც გავაცხელეთ წყლის
აბაზანაზე. ნალექი არ წარმოიქმნა, ამიტომ დავაყოვნეთ კრისტალიზატორ-
ში, რომელიც მოვათავსეთ ექსიკატორში (მუდმივი მასის მიყვანამდე CaCl₂-
ის თანაობისას), თანდათანობით 2 დღის განმავლობაში წამოიქმნა ღია
ლურჯი კრისტალები.

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა -
[Cu(CH₃COO)₂·(C₉H₁₄N₄O₃)₂·(H₂O)₂].



$[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1. 6. სპილენძის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 1,53გ. მყარი სპილენძ(II)-ის ფორმიატის დიჰიდრატი, გავხსენით 20მლ. მოცულობის დისტილირებულ წყალში, ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაზე. 4,52გ. ნაქსოჯინი გავხსენით 50მლ. სპირტში და ორივე ხსნარი გავფილტრეთ. შემდეგ, მეორე ხსნარი დავამატეთ პირველს. მივიღეთ ლურჯი ხსნარი. გავაცხელეთ წყლის აბაზანაზე 3 სთ-ის განმავლობაში. გამოიყო ლურჯი კრისტალური ნივთიერება. მიღებული კომპლექსნაერთი გავფილტრეთ ბიუხნერის ძაბრით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით და გავაშრეთ ექსიკატორში CaCl_2 -ზე.

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.7. სპილენძ(II)-ის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან

ავწონეთ 1,53 გ. მყარი სპილენძ(II) -ის ფორმიატის დიჰიდრატი, გავხსენით 20მლ. მოცულობის დისტილირებულ წყალში, ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაზე. ავწონეთ 2,47გ. ტინიდაზოლი, დავუმატეთ 30მლ 96,4% ეთანოლი (ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაში), პირველ ხსნარს წვეთ წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი. მივიღეთ ღია ლურჯი ხსნარი. გავაცხელეთ წყლის აბაზანაზე 3 საათის განმავლობაში. გამოიყო ღია ლურჯი კრისტალური ნივთიერება. მიღებული კომპლექსნაერთი გავფილტრეთ ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით და გავაშრეთ ექსიკატორში CaCl_2 -ზე.

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.

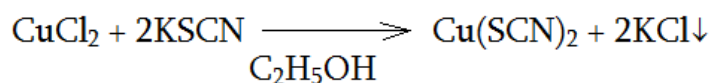


$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.8. სპილენძ (II) -ის როდანიდული კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან

სპილენძ(II)-ის როდანიდის და ნაქსოჯინის სინთეზი განვახორციელებთ რამოდენიმე საფეხურად. პირველ საფეხურზე სპილენძ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატს დავამატეთ კალიუმის როდანიდი და მივიღეთ სპილენძ(II)-ის როდანიდი. 0,67გრ CuCl_2 დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით მივიღეთ მწვანე ფერის ხსნარი. 0,97 გრ KCSN დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი, (გამჭირვალე უფერო ხსნარი), პირველ ხსნარს მუდმივი მორევის პირობებში წვეთ-წვეთობით დავუმატეთ მეორე ხსნარი წარმოიქმნა თეთრი

ფერის ნალექი (კალიუმის ქლორიდი ეთანოლში მცირედ ხსნადია 0,52გ/100გ წყალში), ხსნარი გავფილტრეთ.



ავიღეთ 2,26გ ნიმორაზოლი გავხსენით 50მლ. ეთანოლში და დავუმატეთ ჩვენს მიერ მიღებულ ხსნარს, მივიღეთ ყავისფერი ხსნარი, ნალექი არ წარმოიქმნა, ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაზე 3 საათის განმავლობაში, ნელ-ნელა წარმოიქმნა მუქი ყავისფერი ნალექი, მიღებული კომპლექსნაერთი გავფილტრეთ ბიუხნერის ძაბრით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით და გავაშრეთ ექსიკატორში CaCl_2 -ზე, მუდმივი მასის მიღებამდე.

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.9. სპილენძ (II) -ის სულფატური პენტაჰიდრატის კომპლექსნაერთის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 2,49გ ($\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატი დავამატეთ მცირე (20მლ) რაოდენობის დისტილირებული წყალი კარგად გავხსენით. მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 4,52 გ. ნიმორაზოლი დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს წვეთ წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი. თანდათან წარმოიქმნა ხაჭოსებრი ნალექი, მიღებული ნალექი გავფილტრეთ BaSO_4 -ის ფილტრის ქაღალდით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით დავდეთ გამოსაშრობად ექსიკატორში (CaCl_2 -ის თანაობისას).

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა -
 $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$.



$[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.10. სპილენძ(II)-ის ბრომიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 1,1გ ($\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) სპილენძ(II)-ის ბრომიდის დიჰიდრატის დავამატეთ (20მლ) რაოდენობის 96,4%-იან ეთანოლში, კარგად გავხსენით (მუქი ყავისფერი ხსნარი). მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 4,52გ. ნი-მორაზოლი დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი (მომწვანო-მოყვითალო) კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს წვეთ-წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი, მუდმივი მორევის პირობებში, ნალექი არ წარმოიქმნა, ხსნარი დავაყოვნეთ კრისტალიზატორში. 2სთ-ის შემდეგ გამოიყო ყავისფერი ნალექი. მიღებული კომპლექსნაერთი გავფილტრეთ, ჩავრეცხეთ ეთანოლით და გავაშრეთ ექსიკატორში.

მიღებული ნალექი გავფილტრეთ BaSO_4 -ის ფილტრის ქაღალდით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით დავდეთ გამოსაშრობად ექსიკატორში (CaCl_2 -ის თანაობისას).

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა -
 $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.11. მანგანუმ(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 1,62 გ ($\text{MnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) დავამატეთ მცირე (20მლ) რაოდენობის 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით (მაგნიტური სარეველას დახმარებით), მივიღეთ ვარდისფერი ხსნარი. მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 4,42გ. ნიმორაზოლი, დავამატეთ 20მლ 96,4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს დავამატეთ მეორე ხსნარი მუდმივი მორევის პირობებში, მივიღეთ ღია ვარდისფერი ხსნარი, ნალექი არ წარმოიქმნა, ხსნარი დავაყოვნეთ კრისტალიზატორში. 3 სთ-ის შემდეგ გამოიყო ვარდისფერი ნალექი, მიღებული ნალექი გავფილტრეთ BaSO_4 -ის ფილტრის ქაღალდით, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით დავდეთ გამოსაშრობად ექსიკატორში (CaCl_2 -ის თანაობისას).

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.

ნალექი იხსნება 96, 4% ეთანოლში, არ იხსნება წყალში.



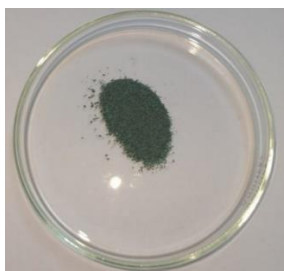
$[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.12. ნიკელის აცეტატური კომპლექსნაერთის სინთეზი

ავწონეთ 2,48გ. მყარი ნიკელ(II)-ის აცეტატის დიჰიდრატი, გავხსენით 20მლ. მოცულობის დისტილირებულ წყალში. 4,52გ. ნაქსოჯინი გავხსენით 50მლ. სპირტში. ორივე ხსნარი გავფილტრეთ და მეორე ხსნარი დავამატეთ პირველს. მივიღეთ მწვანე ფერის ხსნარი. გავაცხელეთ წყლის აბაზანაზე 3 საათის განმავლობაში. ნალექი არ წარმოიქმნა, დავაყოვნეთ კრისტალიზატორში, დაახლოებით ორი საათის განმავლობაში. გამოიყო მუქი მწვანე ფერის

კრისტალური ნივთიერება. მიღებული კომპლექსნაერთი გავფილტრეთ, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით და გავაშრეთ ექსიკატორში CaCl_2 -ზე (მუდმივი მასის მიღებამდე).

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{NiCH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{NiCH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.13. Zn(II) -ის ქლორიდის დიჰიდრატის სინთეზი ნაქსოჯინთან

ავწონეთ 1,36 გ (ZnCl_2) თუთი(II)-ის ქლორიდს დავამატეთ მცირე (20მლ) რაოდენობის დისტილირებული წყალი, კარგად გავხსენით (მაგნიტური სარეველას დახმარებით). მიღებული ხსნარი დავაყოვნეთ. ავწონეთ 4,52გ. ნიმორაზოლი, დავამატეთ 20მლ 96, 4% ეთანოლი, კარგად გავხსენით. პირველ ხსნარს წვეთ-წვეთობით დავამატეთ მეორე ხსნარი. ნალექი არ წარმოიქმნა, დავაყოვნეთ კრისტალიზატორში, დაახლოებით სამი საათის განმავლობაში. დავდეთ ასაორთქლებლად ექსიკატორში (CaCl_2 -ის თანაობისას). 5-7 დღის შემდეგ წარმოიქმნა თეთრი ფერის კრისტალები.

დადგენილი იქნა მიღებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$. ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.14. ნიკელის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან

ავწონეთ 1,48გ. ნიკელ(II)-ის ფორმიატი და გავხსენით 50მლ დისტილირებულ წყალში. ავწონეთ 4,94გ. ტინიდაზოლი, დავუმატეთ 30მლ 96,4% ეთანოლი (ხსნარი შევათბეთ წყლის აბაზანაში) კარგად გავხსენით. მივიღეთ მომწვანო-მოყვითალო ფერის ხსნარი. პირველ ხსნარს დავამატეთ მეორე ხსნარი გავაცხელეთ წყლის აბაზანაზე, ნალექი არ წარმოიქმნა, ხსნარი დავაყოვნეთ კრისტალიზატორში, გამოიყო ორი საათის შემდეგ. წარმოიქმნა მწვანე ფერის კრისტალური ნივთიერება, რომელიც გავფილტრეთ, ჩავრეცხეთ ეთანოლ-წყალხსნარით და გავაშრეთ ექსიკატორში, CaCl_2 -ზე.

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.1.15. მანგანუმის ფორმიატული კომპლექსნაერთის სინთეზი ტინიდაზოლთან

ავწონეთ 1,45გ მყარი მანგანუმის ფორმიატი და გავხსენით 20მლ. მოცულობის დისტილირებულ წყალში. მივიღეთ ვარდისფერი შეფერილობის ხსნარი. 4,94 გ. ტინიდაზოლი გავხსენით 50მლ. სპირტში. ორივე ხსნარი გავფილტრეთ. შემდეგ, მეორე ხსნარი დავამატეთ პირველს. გავაცხელეთ წყლის აბაზანაზე 3 საათის განმავლობაში ნალექი არ წარმოიქმნა, მიღებული ხსნარი კრისტალიზატორით მოვათავსეთ ექსიკატორში 5-6 დღის შემდეგ მივიღეთ ბაცი ვარდისფერი ნივთიერება.

ელემენტური ანალიზის საფუძველზე დადგინდა სინთეზირებული
კომპლექსნაერთის ფორმულა - $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$.



$[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთი

2.2. კვლევის მეთოდები

2.2.1. რენტგენოფაზური ანალიზი

ჩვენს მიერ ჩატარებული სინთეზის მეთოდების მიზანმიმართული გამოყენებით მიღებულ სხვადასხვა მეტალის (მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II)-ის, თუთიის, სპილენძ(II)-ის) ბიოკომპლექსებსა და მათ საწყის ქლორიდებს, სულფატებს, თიოციანატებს, ფორმიატებსა და აცეტატებს, ასევე მათი შემადგენელი ცალკეული ფაზების რაობისა და რაოდენობის დადგენის მიზნით ჩატარდა რენტგენოფაზური ანალიზი.

ორგანული ლიგანდების ნაქსოჯინის ($C_9H_{14}N_4O_3$), ტინიდაზოლისა ($C_8H_{13}N_3O_4S$) და მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთების რენტგენოგრამები გადაღებულია დიფრაქტომეტრზე DPOH-3M, Cu-ის რენტგენის მილაკის Ka ელექტრომაგნიტური ტალღების ზემოქმედებით კრისტალური ნივთიერების მესრის სტრუქტურულ ერთეულებზე ხორციელდება დიფრაქციის და ინტერფერენციის მოვლენები. მიღებული დიფრაქციული სურათი ასახავს გამოსაკვლევ ნიმუშში არსებულ ცალკეულ დამოუკიდებელ კრისტალურ ფაზებს. რენტგენოგრამა საშუალებას გვაძლევს ცალსახად განვსაზღვროთ ნიმუშში არსებული განსხვავებული სტრუქტურის მქონე კრისტალური ფაზები. რენტგენოგრამაზე არსებული პიკები შეესაბამება კონკრეტული ფაზის სიბრტყეებს $d_{a/n}$ -სიბრტყეთაშორისი მანძილი, Å-ში, ($d_{a/n}$), რომელთა მიხედვითაც შესაძლებელია გამოსაკვლევი ნიმუშის შემადგენელი თითოეული ფაზის იდენტიფიცირება, ხოლო რენტგენოგრამის სპექტრში შემავალი ხაზების ინტენსივობით I/I_0 -ფარდობითი ინტენსივობა განვსაზღვრეთ თითოეული ფაზის პროცენტულ შემცველობა [92,93].

ნაქსოჯინსა და ტინიდაზოლთან მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთების რენტგენოფაზური კვლევით მიღებული სიბრტყეთაშორისი მანძილების ($d_{a/n}$) მიხედვით ნაქსოჯინსა და ტინიდაზოლის მეტალთა კომპლექსნაერთების ნიმუშებში დადგენილია მათში არსებული ცალკეული დამოუკიდებელი კრისტალური ფაზები.

რენტგენოგრამაზე არსებული პიკები შეესაბამება კონკრეტული ფაზის სიბრტყეთაშორის მანძილს ($d_{a/n}$), რომელთა მიხედვითაც შესაძლებელია გამოსაკვლევი ნიმუშის შემადგენელი თითოეული ფაზის იდენტიფიცირება, ხოლო რენტგენოგრამის სპექტრში შემავალი ხაზების ინტენსივობით (I) განისაზღვრება თითოეული ფაზის პროცენტული შემცველობა.

სინთეზის გზით მიღებულ სხვადასხვა მეტალის ბიოკომპლექსნაერთის და მათი საწყისი ქლორიდის, როდანიდის, სულფატის, აცეტატის, ფორმატის, ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის ნიმუშებს ქიმიური შედგენილობის დადგენის მიზნით ჩაუტარდათ რენტგენოფლოუორესცენტული მეთოდით გამოკვლევები [94].

მიმდინარე კვლევის პროცესში შემუშავებული იქნა მიღებული შედგენილობის ნიმუშებისათვის შესაბამისი მეთოდიკები და ანალიზთა სისწორის შესადარებლად გამოყენებულ იქნა მიახლოებული შედგენილობის მსგავსი სტანდარტული ნიმუშები.

2.2.2. კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები

კვანტურ-ქიმიური გამოთვლების ჩასატარებლად გამოყენებულია პროგრამების პაკეტი „ChemOffice” შემავალი მოდული „MOPAK”, რომლის არსენალი წარმოდგენილია ნახევრადემპირიული მეთოდებით. გამოყენებულია შემდეგი მეთოდები: AM1 (Austin Model 1) (აუსტინის მოდელი 3), PM3 (Parametrized model revision 3) (პარამეტრიზებული მოდელი 3). კვანტურ-ქიმიური გამოთვლების შედეგად დადგენილია საკვლევი მოლეკულების სტრუქტურული, თერმოდინამიკური და ენერგეტიკული მონაცემები.

გამოთვლები ჩავატარეთ „პენტიუმ 3“-ის ტიპის პერსონალურ კომპიუტერზე [95,96].

2.2.3. ინფრაწითელი სპექტროსკოპული კვლევა

ორგანული ნაერთების ფიზიკურ-ქიმიური კვლევის ერთ-ერთი მნიშვნელოვანი მეთოდია ინფრაწითელი სპექტროსკოპული კვლევა [97-100].

იწ-სპექტრები შეიცავენ თითქმის ყველა ფუნქციონალური ჯგუფისთვის დამახასიათებელ რხევებს და შეუძლიათ ნივთიერებათა მოლეკულების სტრუქტურის შესახებ მნიშვნელოვანი ინფორმაციის მოწოდება. ინფრაწითელი უბანი საერთო ელექტრომაგნიტურ სპექტრში იკავებს $4000 - 400 \text{ სმ}^{-1}$ დიაპაზონს. ინფრაწითელი გამოსხივების შთანთქმით გამოწვეული რხევები ცვლიან ფუნქციონალურ ჯგუფებში ბმების სიგრძეს ან მათ შორის კუთხეებს. ეს მიუთითებს იმაზე, რომ გამოსხივების შთანთქმის სიხშირისაგან დამოკიდებულებით იცვლება გარკვეული ბმის სიგრძე ან ბმებს შორის კუთხე. ერთსა და იმავე ფუნქციონალურ ჯგუფში ბმების ურთიერთქმედება მუდმივია და მხოლოდ უმნიშვნელოდ არის დამოკიდებული იმ ნახშირწყალბადური ჩონჩხის ბუნებაზე, რომელთანაც არიან დაკავშირებული. აქედან გამომდინარე, შესაძლებელია შესაბამისობის დადგენა სხვადასხვა ფუნქციურ ჯგუფებსა და მათთვის დამახასიათებელ სიხშირებს შორის. სწორედ ამან განაპირობა ინფრაწითელი სპექტროსკოპიის გამოყენება ნივთიერებათა მოლეკულებში ფუნქციური ჯგუფების შესწავლაში.

ჩვენ მიერ სინთეზირებული მეტალების ბიოკომპლექსნაერთების იწ- სპექტრების შესწავლა განვახორციელეთ FT-IR Spectrometer TENSOR II ფურიე გარდაქმნის ინფრაწითელ სპექტომეტრის მეშვეობით. გაკეთდა შედარება მიღებული კომპლექსების სპექტრებსა და თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ლიგანდის ნაქსოჯინის (ნიმორაზოლი) სპექტრებს შორის. რომელიც ავტომატურად არეგულირებს საკვლევ ხსნარში ინფრაწითელი სპექტრის გავლას $4000 - 400 \text{ სმ}^{-1}$ დიაპაზონში, ვინაიდან, ძირითადად, ამ სპექტრალურ დიაპაზონშია თითქმის ყველა ფუნქციური ჯგუფებისათვის დამა-

ხასიათებელი შთანთქმის ზოლები. მიღებული შედეგების საფუძველზე შესაძლებელია როგორც ნივთიერების იდენტიფიკაცია, ასევე მისი სტრუქტურის ანალიზი [101-104].

2.2.4. თერმოგრავიმეტრული კვლევა

თერმოგრავიმეტრული კვლევა, იძლევა საშუალებას ერთი და იმავე ნიმუშისთვის ერთდროულად ჩაიწეროს ოთხი მრუდი: ტემპერატურის ცვლილების (T); ტემპერატურის ცვლილების დიფერენციალური მრუდი(DTA), რომელზეც მკაფიოდ აისახება გარემოსა და საკვლევი ნიმუშის ტემპერატურებს შორის უმნიშვნელო ცვლილებებიც; მასის ცვლილების მრუდი (TG) და მასის ცვლილების დიფერენციალური მრუდი (DTG). (TG) მრუდზე, ერთმანეთის მიყოლებით, მიმდინარე პროცესები ძნელი გასარჩევია, ხოლო DTG მრუდზე ისინი განცალკევებულად აისახება. თერმოგრავიმეტრული კვლევა ჩატარდა „STA 2500 Regulus“ სისტემის დერივატოგრაფზე.

2.2.5. იმუნოციტოტოქსიკური კვლევა

იმუნოციტოტოქსიკური კვლევა, ჩატარდა კანის ბრტყელუჯრედოვანი კიბოს (კარცინომის) უჯრედებზე, რომლებიც აპრიორი დამუშავებულნი იყვნენ Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} და Zn^{2+} ნაქსოჯინის და ტინიდაზოლის კოორდინაციული ნაერთების ხსნარებით, სუფთა ლიგანდების იმავე კონცენტრაციის ხსნარებით და უკვე ცნობილი პრეპარატის - ცის-პლატინის საკონტროლო ხსნარებით.

2.2.6. რასტრული ანუ მასკანირებელი ელექტრონული მიკროსკოპი

რასტრული ანუ მასკანირებელი ელექტრონული მიკროსკოპით შესაძლებელია, როგორც ელექტრონებისთვის განჭოლვადი ასევე არაგანჭოლვადი მასალის შესწავლა. ამ შემთხვევაში ნიმუშზე ეცემა ელექტრონების ვიწრო კონა, რომელსაც შეუძლია გადაადგილება ნიმუშის ზედაპირის მოცემულ უბანზე (ანუ ახდენს მის სკანირებას). რასტრული მიკროსკოპების გარჩევის უნარი 3 - 20 ნმ - ის ფარგლებშია. ამრეკლი ელექტრონული მიკროსკოპები ობიექტის გამოსახულებას იძლევიან გაბნეული ელექტრონებით, მათი ლინზათა სისტემაში გავლის შემდეგ გამოსახულება წარმოადგენს გადიდებულს. ამ ტიპის მიკროსკოპის გამოყენებით შეიძლება მივიღოთ სურათი 1 მკმ ზომის უბნიდან, გამოვიკვლიოთ $\sim 0,1$ მკმ სისქის ფირები, გამოვავლინოთ ობიექტში განსხვავებული კრისტალური აგებულების უბნები, კრისტალური სტრუქტურის დარღვევები, ნიმუშის ქიმიური შედგენილობის შესახებ ინფორმაცია, შესაძლებელია ნიმუშების მორფოლოგიური აღწერილობა და ა.შ.

ჩვენს მიერ კვლევა ჩატარებული იქნა TESCAN-VEGA3 მასკანირებელ ელექტრონულ მიკროსკოპზე. ანალიზის ჩატარებისას ელექტრონების აჩქარება იყო 20000 ვოლტი, სურათის გადიდება (გარჩევადობა) ~ 1500 ჯერ.

სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთებში ანალიზის შედეგად მიღებული მონაცემების შედარებისას ჩვენს მიერ თეორიულად გამოთვლილ შედეგებთან ცდომილება მერყეობს 0,6 და 0,4%-ით ზღვრებში, მცირე უზუსტობას წარმოქმნის ნიმუშის ზედაპირზე ჟანგბადისა და ნახშირწყალბადების მოლეკულების ადსორბცია მისი ჰაერზე ექსპონირებისას, რაც უნდა გათვალისწინებული იქნას ანალიზისას. კერძოდ, უნდა ვიცოდეთ, რომ სპექტრი გვაძლევს ჟანგბადისა და ნახშირბადის რამდენადმე გაზრდილ მნიშვნელობას, რაც მათი ჰაერიდან ადსორბციითაა გამოქვეული. სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთების შემადგენელი ელემენტების მასური წილები გამოთვლილი რასტრული ანუ მასკანირებელი ელექტრონული მიკროსკოპით წარმოდგენილია ცხრილში 3:

ცხრილი 3. სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთების ელემენტური შედგენილობა გამოთვლილი რემ მეთოდით

№	ბიოკომპლექსნაერთი	თეორიული %							ექსპერიმენტული %						
		Me	H	C	N	Cl	S	Br	Me	H	C	N	Cl	S	Br
1	$[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$	9,117	5,413	30,769	15,954		4,558		8,9	8,64	31	16,49		4,46	
2	$[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9,48	5,67	39,40	16,72				9,76	5,98	40	17,1			
3	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	10,273	5,136	34,671	17,978	11,396			10,54	5,5	37,06	18,08	11,95		
4	$[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	10,127	4,430	37,975	22,152		10,127		10,81	4,9	38	23,8		11	
5	$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9,378	5,608	35,422	16,530				9,8	5,9	35,9	16,97			
6	$[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9,396	4,14	32	16,57			23,68	9,8	5	32,56	15,34			23,97
7	$[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9,503	4,80	37,370	19,33	12,28			9,9	5,3	38,1	19,1	11,9		
8	$[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	8,4	6	37,7	15,98				8,64	6,4	38,12	30,67			
9	$[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	8,464	4,389	33,856	13,166		10,031		8,8	4	34,3	13,87		10	
10	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9,62	4,511	29	13	10,8	9,64		10,25	4,9	45,13	15,13	10,90	10,46	

2.2.7. რენტგენოფაზური კვლევის შედეგები

მიზანმიმართული სინთეზით მიღებულია ნაქსოჯინთან ($C_9H_{14}N_4O_3$) სხვადასხვა მეტალის (მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II)-ის, სპილენძ(II)-ისა, თუთი-ის) და ბიოორგანულ ლიგანდებიანი კომპლექსნაერთები ქლორთან, თიოცი-ანატთან, ფორმიატთან და აცეტატთან, ხოლო მათი შემადგენელი ცალკეული ფაზების რაობისა და რაოდენობის დადგენის მიზნით ჩატარებულია რენტგენოფაზური ანალიზი.

სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთთა რენტგენოგრამებზე არსებული პიკები სრულ შესაბამისობაშია კონკრეტული ფაზების სიბრტყეთაშორის მანძილებთან (d_a/n), რომელთა მიხედვითაც გაკეთებულია ჰნიმუშის შემადგენელი თითოეული ფაზის იდენტიფიცირება, ხოლო რენტგენოგრამათა სპექტრებში შემავალი ხაზების ინტენსივობებით (I) განსაზღვრულია თითოეული ფაზის პროცენტული შემცველობა [105,106].

აღსანიშნავია ისიც, რომ სინთეზის გზით მიღებულ სხვადასხვა მეტალის ბიოკომპლექსნაერთის და მათი საწყისი ქლორიდის, როდანიდის, სულფატის, ფორმიატის, აცეტატისა და ნაქსოჯინის ნიმუშებს ქიმიური შედგენილობის დადგენის მიზნით ჩატარდა რენტგენოფლოუორესცენტული მეთოდით გამოკვლევები. მიღებული შედგენილობის ნიმუშებისათვის მიმდინარე კვლევის პროცესში შემუშავებულია შესაბამისი მეთოდიკები და ანალიზთა სისწორის შესადარებლად გამოყენებულია მიახლოებითი შედგენილობის მსგავსი სტანდარტული ნიმუშები.

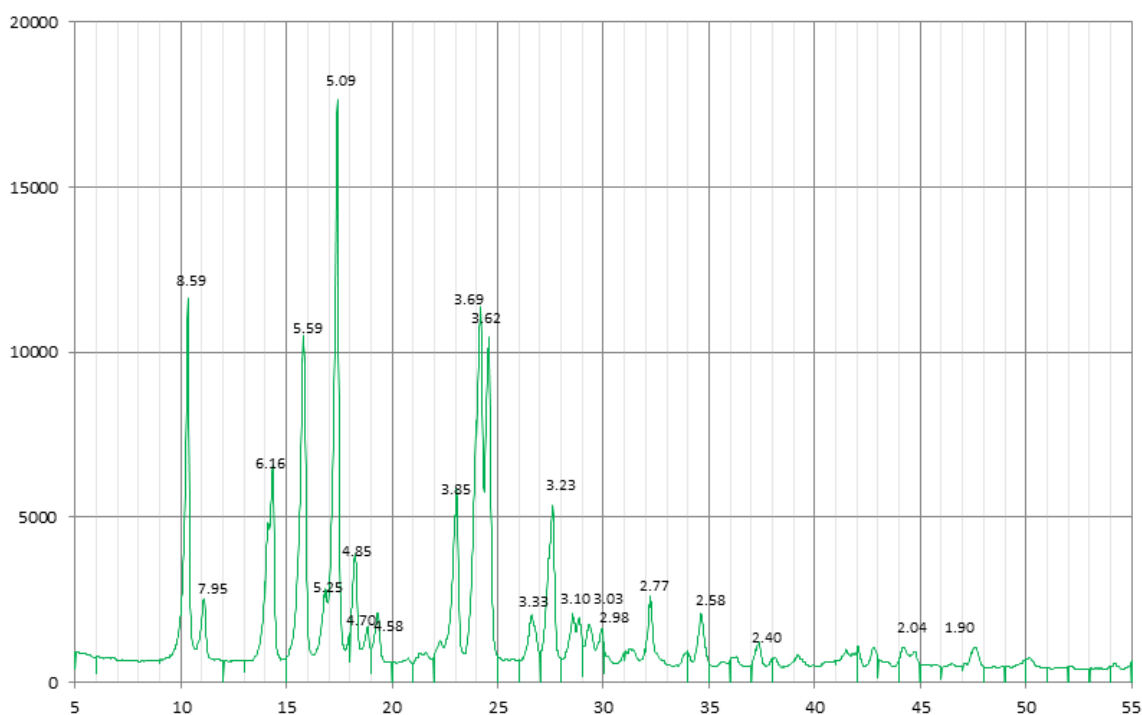
ორგანული ლიგანდების ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის რენტგენოგრამებზე (ნახ. 1 და 2) თვალსაჩინოდ იკვეთება მხოლოდ მათი კრისტალური სტრუქტურების შესაბამისი სიბრტყეთაშორისი მანძილები და მათი შესაბამისი ინტენსივობები.

კერძოდ, ნაქსოჯინისათვის (d_a/n 8, 59; 7, 95; 6, 16; 5, 59; 5, 25; 5, 09; 4, 85; 4, 70; 4, 58; 3, 85; 3, 69; 3, 62; 3, 33; 3, 23; 3, 10; 3, 03; 2, 98; 2, 77; 2, 58; 2, 40; 2, 04;

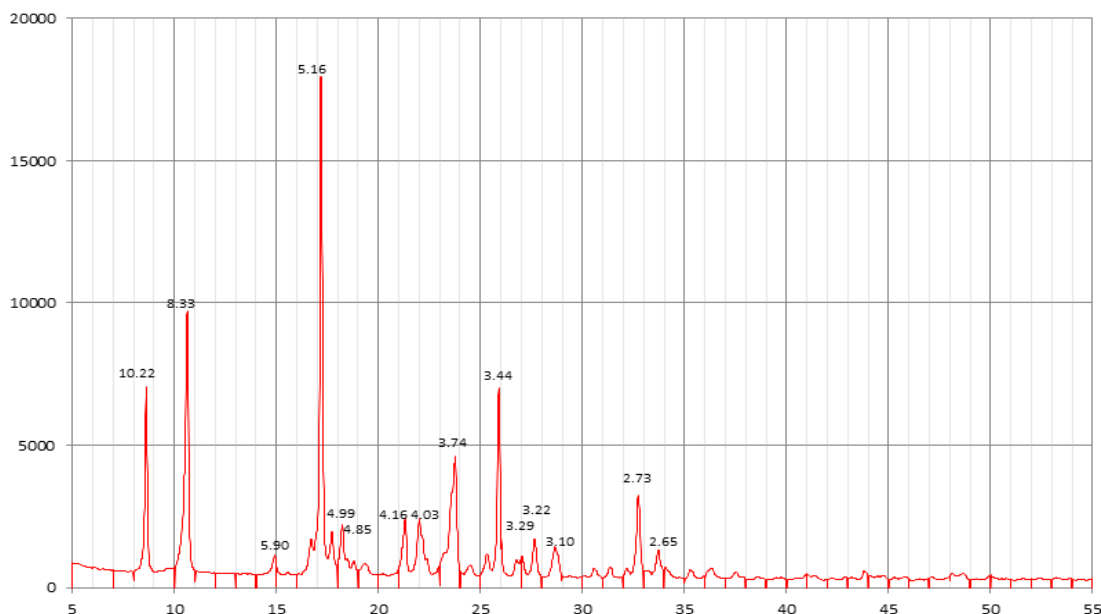
1, 90 Å და სხვ.). ტინიდაზოლისათვის ($d_{a/n}$ 10, 22; 8, 33; 5, 90; 5, 16, 4, 99; 4, 25; 4, 16; 4, 03; 3, 74; 3, 44; 3, 29; 3, 22; 3, 10; 2, 73; 2, 65 Å და სხვ.).

მიღებული დიფრაქციული (ნახ.1) ასახავს გამოსაკვლევ ნიმუშში არსებულ ცალკეულ დამოუკიდებელ კრისტალურ ფაზებს. რენტგენოგრამა საშუალებას იძლევა ცალსახად განისაზღვროს საცდელ ნიმუშში არსებული განსხვავებული სტრუქტურის მქონე კრისტალური ფაზები.

აღსანიშნავია ის გარემოება, რომ საცდელ ნიმუშებში საწყის მარილთა (ფორმატის, აცეტატის და სხვ.) არსებობა აიხსნება მიმდინარე ექსპერიმენტის ბოლომდე არ მიყვანით. ასეთ შემთხვევაში საცდელ ნიმუშში არ განხორციელდა სპირტში ზედმეტი მარილების გახსნა და სარეაქციო არედან მათი მოცილება.



ნახაზი 1. ნაქსოჯინის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა

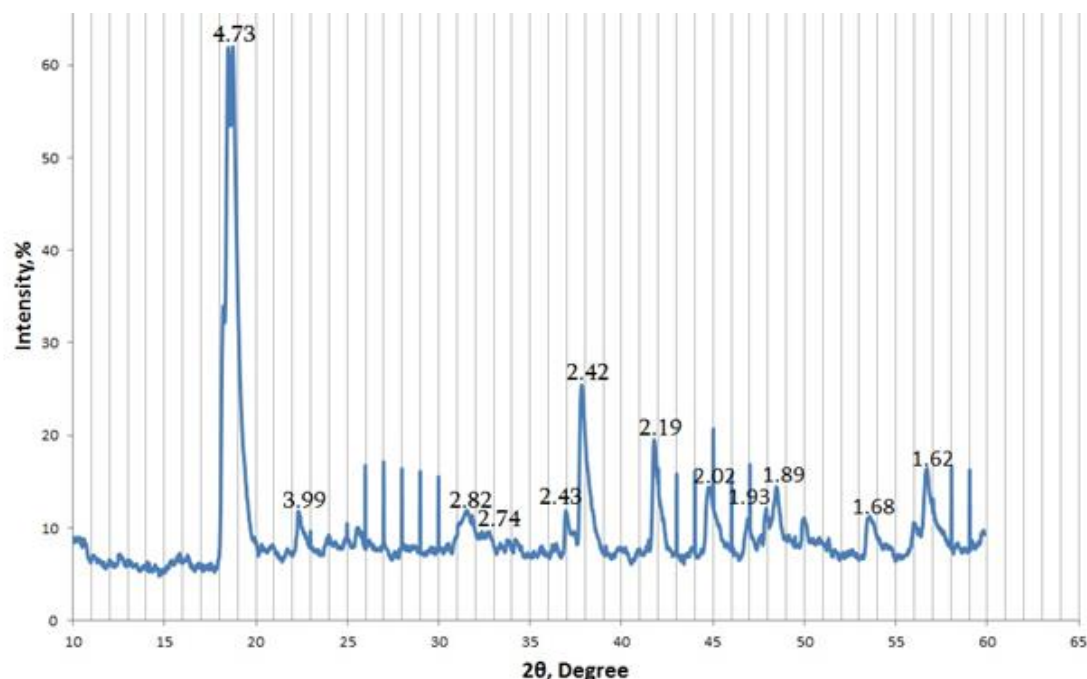


ნახაზი 2. ტინიდაზოლის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა

ამ და მსგავს ბიოკოორდინაციულ ნაერთებში ერთმანეთთან შერწყმულია განსხვავებული აქტიურობის მქონე ელემენტები (ქანგბადი, აზოტი, გოგირდი, ნახშირბადი, ბიომეტალები და სხვ.), რომლებსაც აშკარად ძალუბთ გააძლიერონ მხოლოდ ერთმანეთი და მთლიანობაში სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთები.

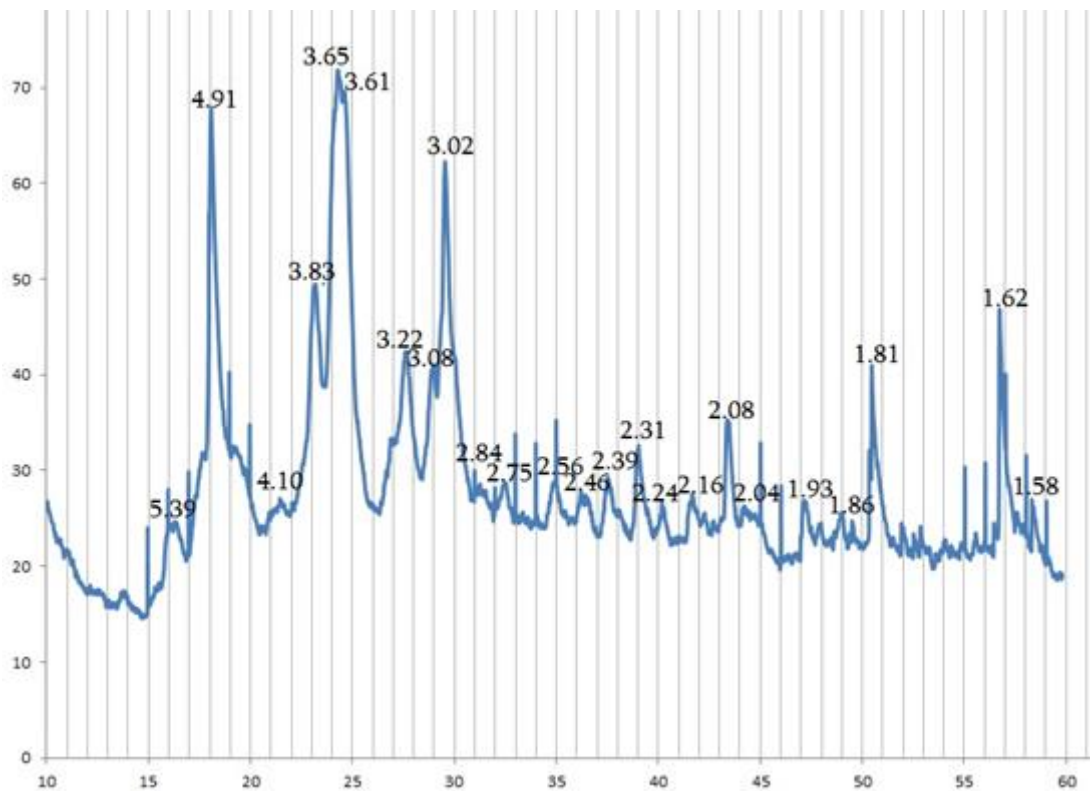
მხოლოდ ასეთი დამოკიდებულება იძლევა წინაპირობას ბიოკომპლექსნაერთების ქიმიურ შედგენილობას, აღნაგობასა და თვისებებს შორის კორელაციის დადგენაში. უდავოა ისიც, რომ ბიოკომპლექსნაერთში ორგანული ნაწილის (ლიგანდის) აქტიურობა კოორდინირებულ მდგომარეობაში, ხშირად უფრო მაღალია, ვიდრე თავისუფალ (არაკოორდინირებულ) მდგომარეობაში. რადგან უმჯობესდება კომპლექსწარმოქმნელ მიკროელემენტთა შემთვისებლობა ორგანიზმის მიერ, მცირდება მათი ტოქსიკურობა და გვერდითი მოვლენები (არ ხდება უცხო კომპლექსნაერთთა წარმოქმნა ორგანიზმში, რომლებიც ვითარდება მიკროელემენტთა დეფიციტის ხარჯზე) [107-109]. სპილენძ(II)-ის სულფატისა (ნახ. 3) და ნაქსოჯინის სინთეზის გზით მიღებული სპილენძის სულფატური კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოგრაფიული ანალიზის (ნახ. 4) რენტგენოგრამაზე ნათლად ფიქსირებულია მხოლოდ სპილენძ(II)-ის სულფატური კომპლექსნაერთის $d_{a/n}$ 5,39; 4,91; 4,10; 3,83; 3,65;

3,61; 3,22; 3,08; 3,02; 2,84; 2,75; 2,56; 2, 46; 2,39; 2,31; 2,24; 2,16; 2,08; 2,04; 1,93; 1,86; 1,81; 1,62; 1,58 Å კრისტალური სტრუქტურის ფაზები.



ნახაზი 3. სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

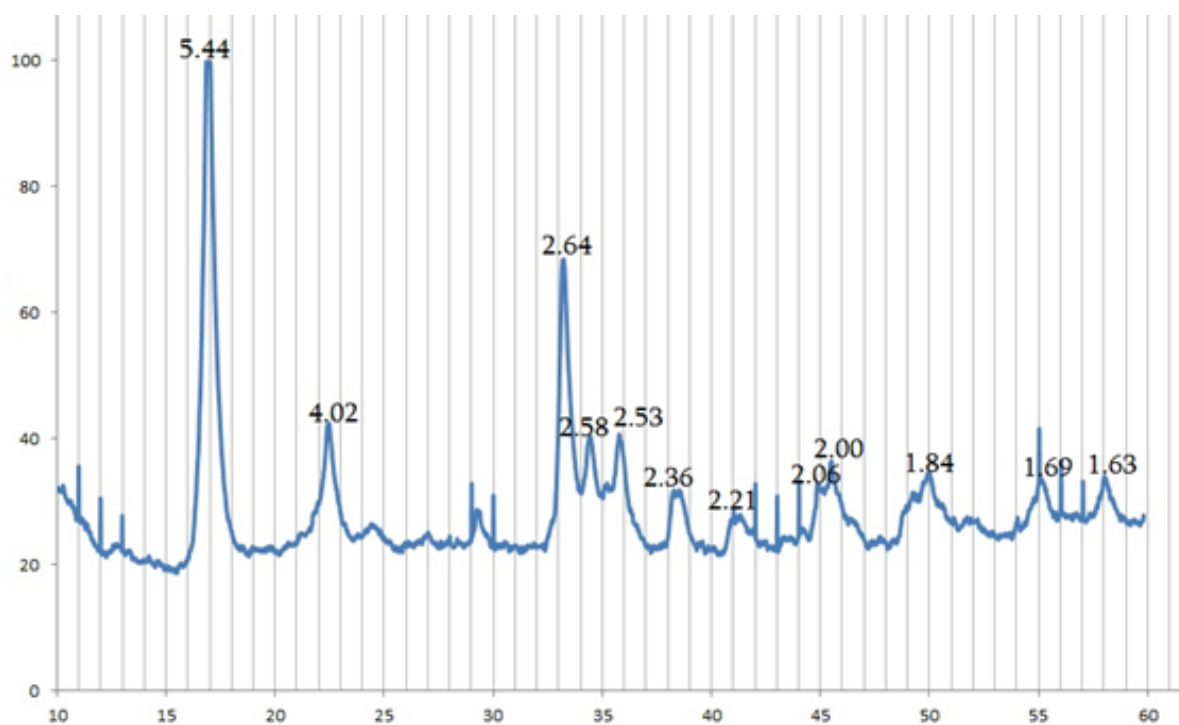
რაც შეეხება ნაქსოჯინისა და სპილენძ(II)-ის სულფატის დამოუკიდებულ სტრუქტურულ ფაზებს ისინი ამ კონკრეტულ შემთხვევაში არ ფიქსირდება, რაც იმაზე მიანიშნებს, რომ ნიმუშში მათი არ არსებობა განხორციელდა ექსპერიმენტის ბოლომდე მიყვანით. სპილენძ(II)-ის სულფატისა და ნაქსოჯინის ზედმეტი რაოდენობა სპირტში გაიხსნა, სარეაქციო არეს ჩამოშორდა და რენტგენოგრამაზე აღარ დაფიქსირდა, როგორც დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზები [110].



ნახაზი 4. ნაქსოვინთან სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

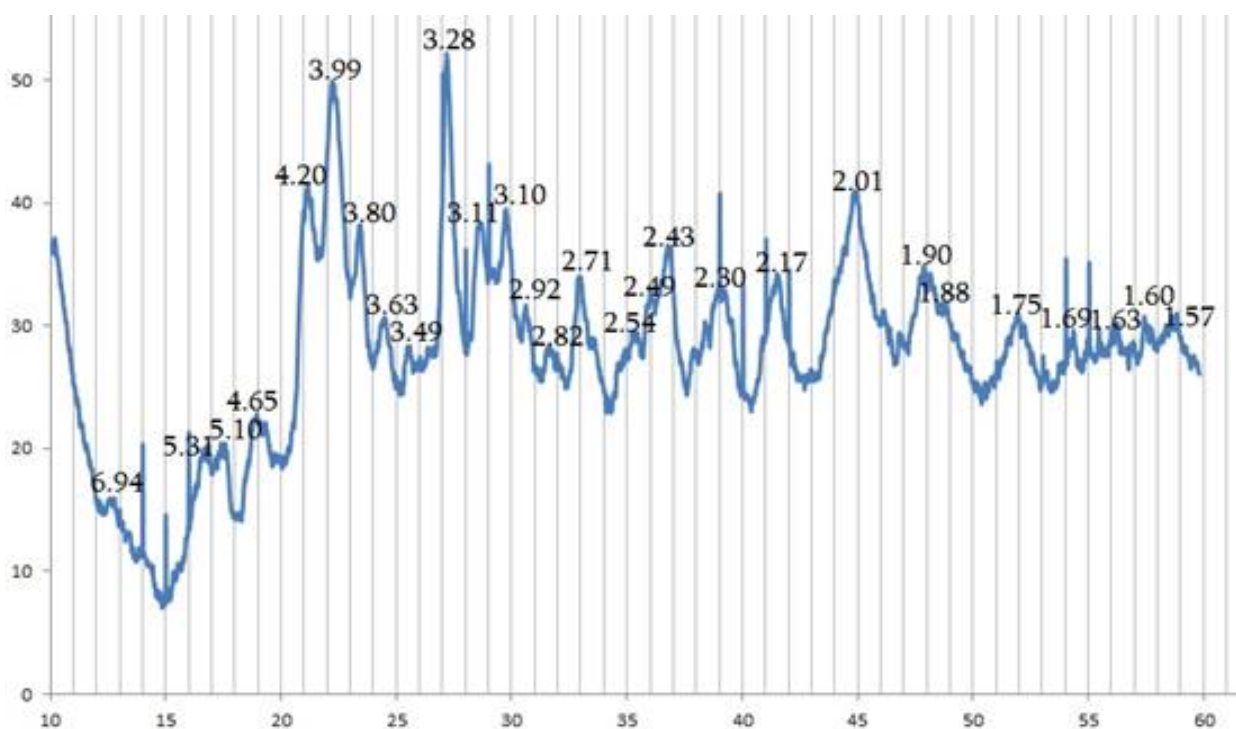
სპილენძ(II)-ის ქლორიდის $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ რენტგენოგრამაზე (ნახ.5) თვალსაჩინოდ ფიქსირდება სიბრტყეთაშორისი პიკები, რომლებიც შეესაბამება მხოლოდ და მხოლოდ სპილენძ(II)-ის ქლორიდის კრისტალურ ფაზებს.

სინთეზის გზით მიღებულ სპილენძ(II)-ის ქლორიდული კომპლექსნაერთის (ნახ.6) ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე გამოკვეთილად ფიქსირდება მხოლოდ სპილენძ(II)-ის კომპლექსის (d_a/n 5, 44; 4, 02; 2, 64; 2, 58; 2, 53; 2, 36; 2, 21; 2, 06; 2, 00; 1, 84; 1, 69; 1, 60Å) კრისტალური ფაზები.



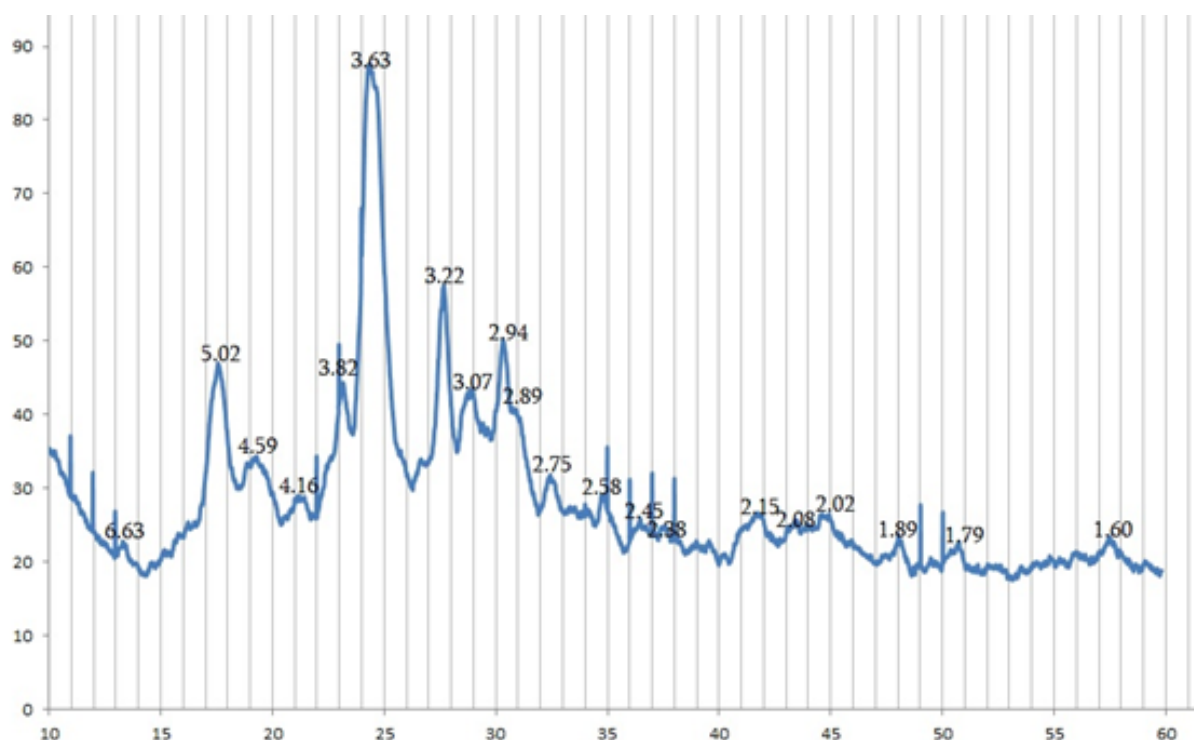
ნახაზი 5. სპილენძ (II) -ის ქლორიდული დიჰიდრატის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა

აღსანიშნავია ის ფაქტიც, რომ სინთეზური გზით მიღებული სპილენძ(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოგრამებზე სპილენძ(II)-ის ქლორიდისა და ორგანული ლიგანდის ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზები არ ფიქსირდება. სპილენძ(II)-ის ქლორიდული კომპლექსნაერთის ნიმუშში ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზის არ არსებობა შეიძლება აიხსნას ექსპერიმენტის შედეგად მისი მონაწილეობით სპილენძ(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის სტრუქტურის ჩამოყალიბება- წარმოქმნაში, ხოლო ჭარბი (ზედმეტი) ნაქსოჯინი, ასევე ზედმეტი (ჭარბ) სპილენძ(II)-ის ქლორიდთან ერთად, სრულად გაიხსნა და ჩამოცილდა სარეაქციო არეს, ეთანოლით დამუშავების პროცესში [111-112].



ნახაზი 6. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული ბიოკომპლექსნაერთის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

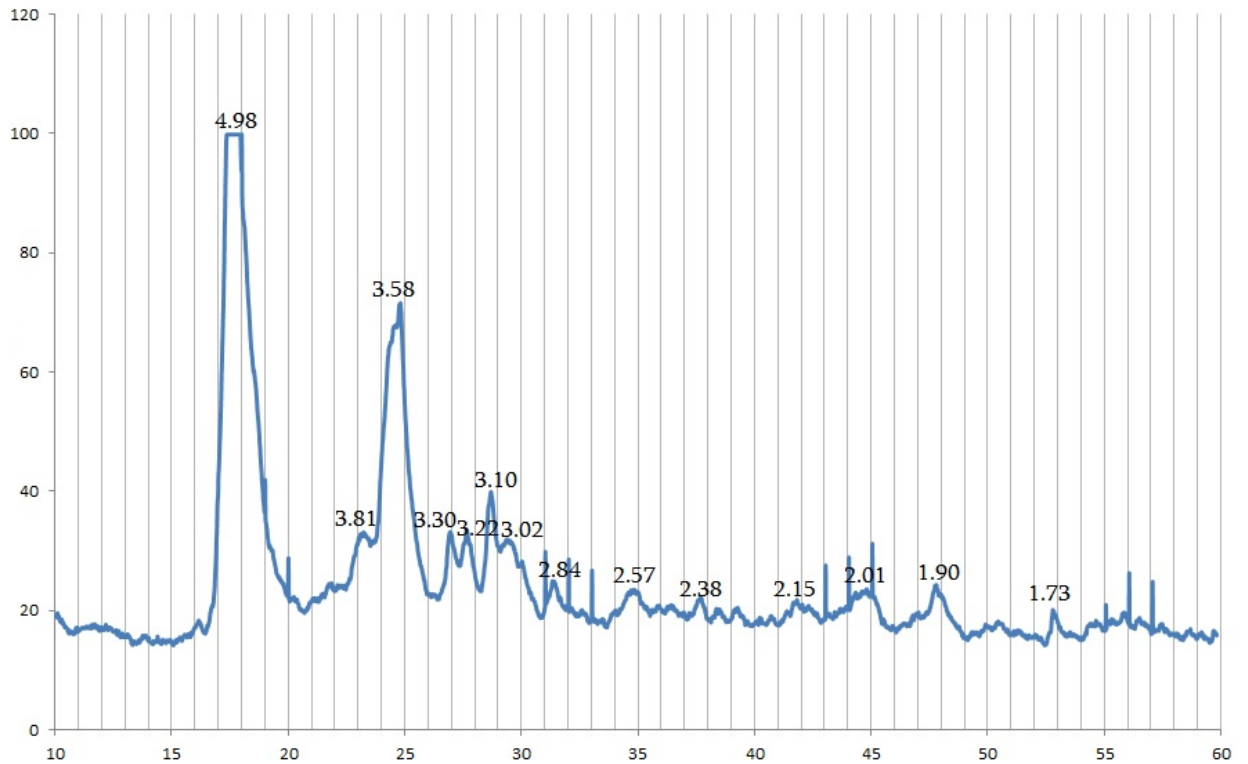
$\text{Cu}(\text{NCS})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2$ - ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული კომპლექსნაერთის რენტგენოგრამაზე ნათლად ფიქსირდება სიბრტყეთაშორისი მანძილები და შესაბამისი ინტენსივობები (ნახ.7). სახელდობრ: (d_{hkl} 6, 63; 5, 02; 4, 59; 4, 16; 3, 82; 3, 63; 3, 22; 3, 07; 2, 94; 2, 89; 2, 75; 2, 58 Å და ა. შ) კრისტალური სტრუქტურის ფაზები, ხოლო რაც შეეხება ნაქსოჯინისა და სპილენძ(II)-ის როდანიდის მარილის დამოუკიდებელ სტრუქტურულ ფაზებს ისინი კომპლექსნაერთის რენტგენოგრამაზე არ ფიქსირდება, რაც დასტურია იმისა, რომ აღნიშნული მეთოდით - ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული კომპლექსის მიღების ექსპერიმენტი ბოლომდე წარმატებით ხორციელდება და მისი მომავალში გამოყენება ყოველთვის შეიძლება ამ და მისი მსგავსი კომპლექსნაერთების მისაღებად, რამეთუ ამ ტიპის კომპლექსები ძალიან პერსპექტიულია, როგორც პრაქტიკული, ისე თეორიული მნიშვნელობით [113].



ნახაზი 7. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული კომპლექსნაერთის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

ზემოთქმული განპირობებულია კომპლექსწარმომქმნელი მეტალის ბუნებითა და აციდოლიგანდის ბრუნვის უნარით მეტალის გარშემო: M-NCS და M-SCN კატიონის გავლენით მიმდინარეობს ელექტრონული სიმკვრივის ისეთი გადანაწილება, რომ მეტალი ხდება უფრო „ხისტი“ და უფრო მიდრეკილი პოლარული ბმისადმი. მიერთებული SCN-ჯგუფების რიცხვი ცვლის არა მხოლოდ მეტალთან მათი მიერთების ხერხს, არამედ მათ სტერეოქიმია-საც. აქედან გამომდინარე, დასკვნის სახით შეიძლება ითქვას, რომ SCN-ჯგუფები ძალიან მოხერხებულია მრავალი სტერეოქიმიური ეფექტის გამოსავლენად კომპლექსწარმომქმნელ მეტალთან ნაერთებში [114, 115].

$\text{Zn}(\text{NCS})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2$ - თუთიის როდანიდული კომპლექსნაერთის სინთეზის გზით მიღებული ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (ნახ.8) მკაფიოდ დაფიქსირდა შესაბამისი ბიოკომპლექსნაერთის სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{h/k}$ 4,98; 3,81; 3,58; 3,30; 3,22; 3,10; 3,02; 2,84; 2,57; 2,38; 2,15; 2,01; 1,90; 1,73; 1,64 Å და ა.შ.) შესაბამისი ინტენსიობებით.



ნახაზი 8. ნაქსოჯინთან თუთიის როდანიდული კომპლექსნაერთის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამა

ამასთან, თუთიის როდანიდის რენტგენოგრამაზე მკაფიოდ დაფიქსირებულია სხვადასხვა ინტენსიობის კრისტალური სტრუქტურის შესაბამისი სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}$ 5,40; 4,33; 3,81; 3,38; 2,86; 2,53; 2,41; 2,28; 2,10; 1,94; 1,84; 1,78; 1,71; 1,66; 1,57 Å), რომლებიც დიდი ალბათობით შესაბამისობაშია თუთიის როდანიდის კრისტალური სტრუქტურის ფაზებთან (ცხრ.3).

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ, თუთიის როდანიდისა და ნაქსოჯინის სინთეზით ექსპერიმენტულად მიღებული კომპლექსნაერთის ნიმუშის რენტგენოგრაფიული ანალიზის რენტგენოგრამაზე ნათლად ფიქსირდება თუთიის როდანიდული კომპლექსის კრისტალური სტრუქტურის ფაზები, ხოლო რაც შეეხება ნაქსოჯინის დამოუკიდებელ სტრუქტურულ ფაზებს, ისინი ამ შემთხვევაში არ ფიქსირდება. საცდელ ნიმუშში თუთიის როდანიდის არსებობა

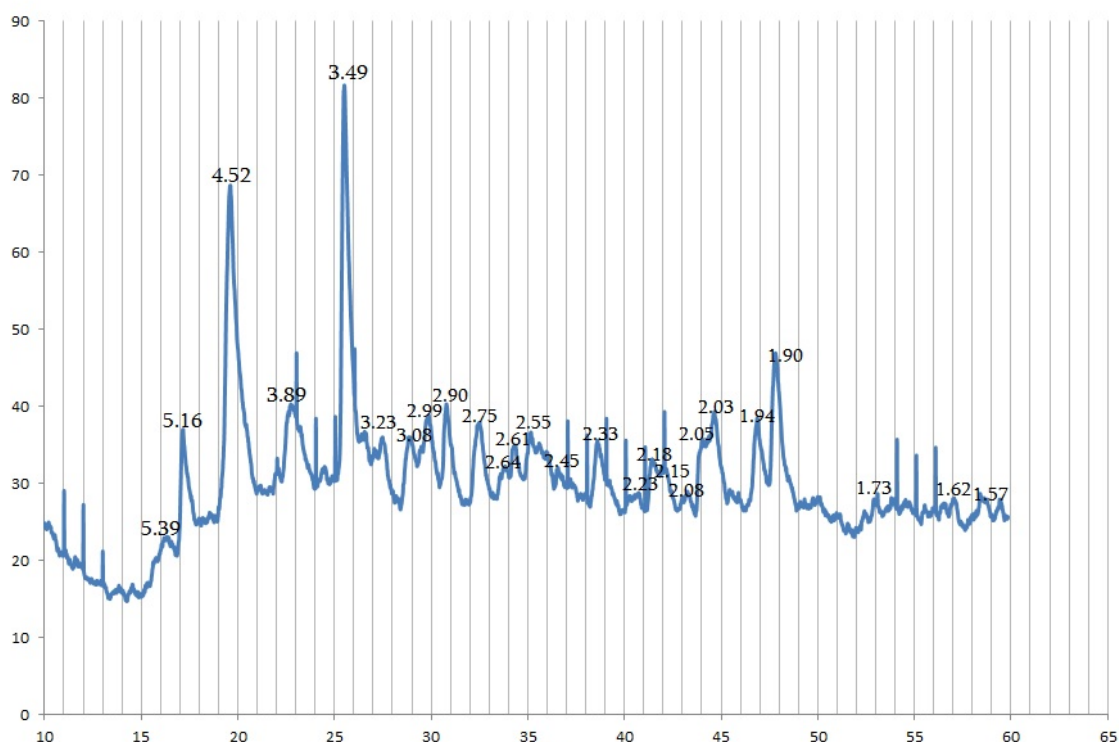
აიხსნება ექსპერიმენტის ბოლომდე არ მიყვანით. მოცემულ შემთხვევაში ნიმუშში არ განხორციელდა სპირტში ზედმეტი (ჭარბი) თუთიის როდანიდის ბოლომდე გახსნა და მისი მოშორება სარეაქციო არედან.

თუთიის როდანიდული კომპლექსის ნიმუშში ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზის არ არსებობა აიხსნება ექსპერიმენტის შედეგად მისი მონაწილეობით თუთიის როდანიდის კომპლექსნაერთის სტრუქტურის წარმოქმნაში. საანალიზო ნიმუშის სპირტში დამუშავებით, ზედმეტი (ჭარბი) ნაქსოჯინი სრულად გაიხსნა და მოშორდა სარეაქციო არეს.

ექსპერიმენტით მიღებული თუთიის როდანიდული კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (სპირტში დამუშავებული) მკაფიოდ ფიქსირდება მხოლოდ თუთიის როდანიდული კომპლექსის (ცხრ.4) კრისტალური ფაზები. მოცემულ შემთხვევაში თუთიის როდანიდი გაიხსნა სპირტში და რენტგენოგრამაზე აღარ ფიქსირდება [116].

თუთიის როდანიდული კომპლექსნაერთის ნიმუშში ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზა არც ამჯერად არ ფიქსირდება.

$\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე მკაფიოდ ფიქსირდება განსხვავებული ინტენსიობის კრისტალური სტრუქტურის შესაბამისი სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}$ 4, 88; 4,68; 4,56; 4,31; 3,63; 3,56; 3,51; 3,41; 3,33; 3,14; 3,05; 2,84; 2,62; 2,60; 2,56; 2,44; 2,34; 2,30 Å და სხვ.), ცხრ.2, რომლებიც მთლიანად შეესაბამება სპილენძ(II)-ის ფორმიატის კრისტალურ ფაზებს.



ნახაზი 9. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის კომპლექსნა-ერთის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

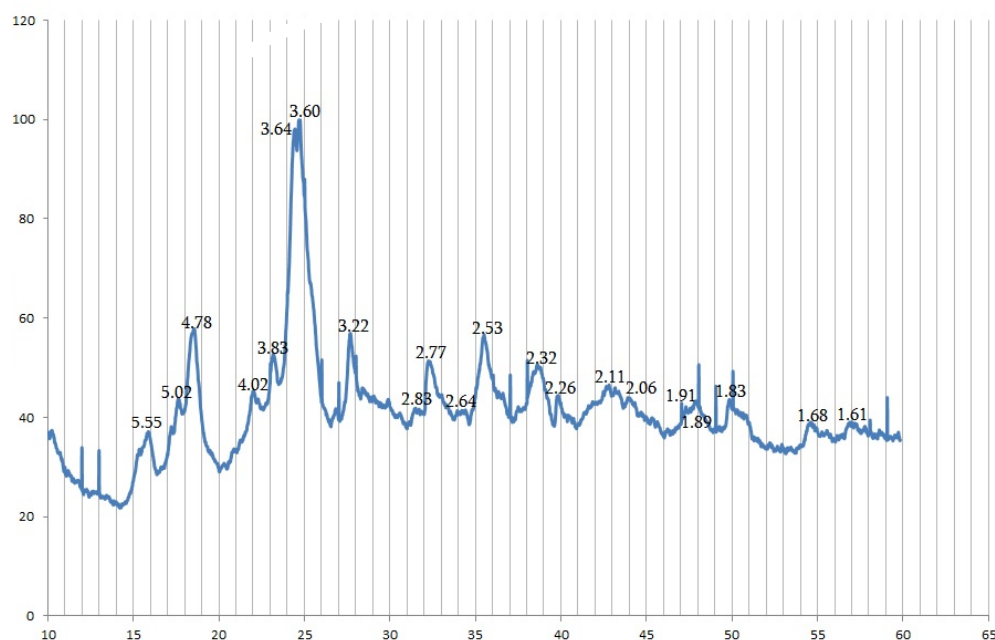
ჩვენს მიერ სინთეზირებული და ექსპერიმენტით მიღებული სპილენძ(II)-ის ფორმიატული კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (ნახ.9) მკაფიოდ ფიქსირდება სპილენძ(II)-ის ფორმიატული კომპლექსის ფორმიატული ($d_{a/n}$ 5,39; 5,16; 4, 42; 3,89; 3,49; 3,23; 3,08; 2,99; 2,90; 2,90; 2,75; 2,64; 2,61; 2,55 Å და სხვ.) კრისტალური ფაზები მაშინ, როდესაც სპილენძ(II)-ის ფორმიატის კომპლექსის ნიმუშში საწყისი სპილენძ(II)-ის ფორმიატისა და ორგანული ლიგანდის ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი (ნახ.1) სტრუქტურული ფაზები არ ფიქსირდება. როგორც დასტურდება ზემოაღნიშნული მონაცემებითა და ფაქტიური მასალებით ექსპერიმენტი ამ ნიმუშში ბოლომდე არის მოყვანილი და ამიტომაც რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე საწყისი სპილენძ(II)-ის ფორმიატისა და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი კრისტალური ფაზები აღარ ფიქსირდება [117].

სამუშაო პროცესში ექსპერიმენტით მიღებული ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის აცეტატური დიჰიდრატის $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ - რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (ნახ.10) მკაფიოდ ფიქსირდება

აღნიშნული მეტალის კომპლექსისა ($d_{a/n}$ 5,55; 5,02; 4,78; 4,02; 3,83; 3,64; 3,60; 3,22; 2,83; 2,77; 2,64; 2,53 Å და სხვ.), ნაქსოჯინის ($d_{a/n}$ 8,59; 7,95; 6,16; 5,59; 5,25; 4,85; 4,70; 4,58; 3,85; 3,69; 3,62; 3,33; 3,23; 3,10; 3,03; 2,98; 2,77; 2,58; 2,40; 2,04; 1,90 Å იხ. სურ. 1) და სპილენძ(II)-ის აცეტატის ($d_{a/n}$ 7,91; 7,40; 6,00; 4,96; 4,73; 4,23; 3,76; 3,33; 3,15 Å და სხვ.) კრისტალური ფაზები.

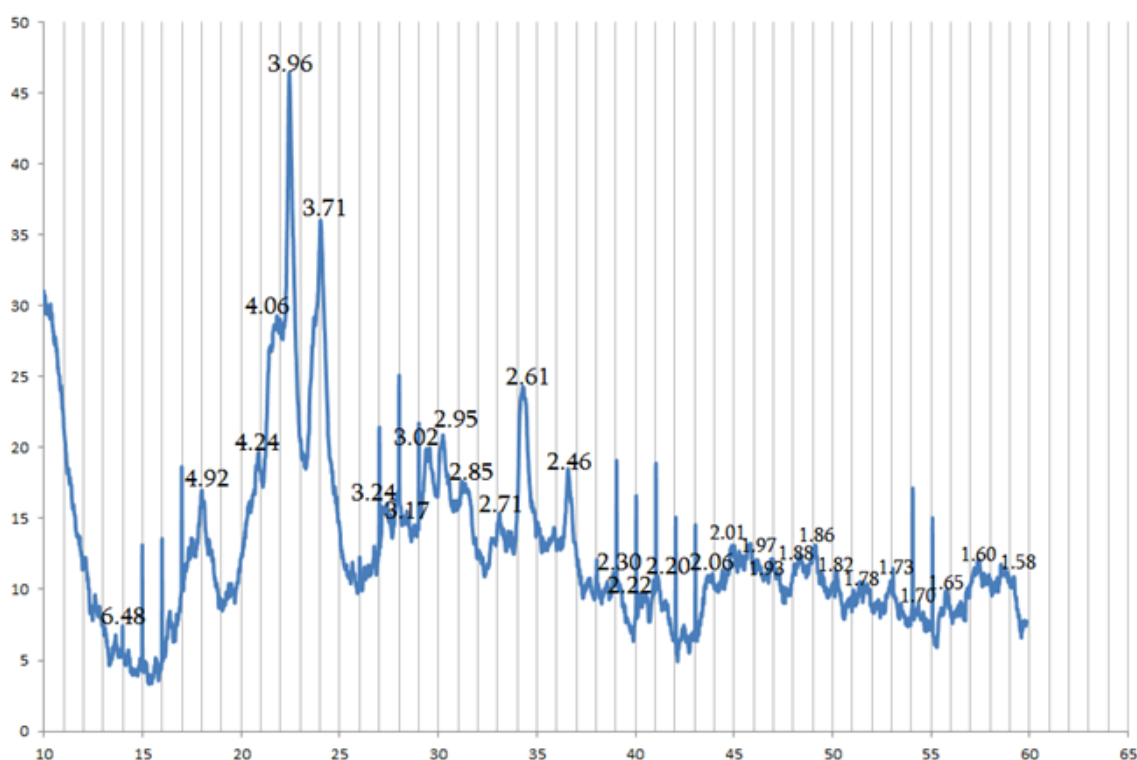
აღსანიშნავია, რომ ამ კონკრეტულ შემთხვევაში ექსპერემენტი ბოლომდე არ არის მიყვანილი. აქედან გამომდინარე, ხელახლა ჩატარდა ექსპერიმენტი -ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის აცეტატური კომპლექსნაერთის მისაღებად.

ახლადსინთეზირებული კომპლექსის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე თვალსაჩინოდ დაფიქსირდა მხოლოდ სპილენძ(II) -ის აცეტატური კომპლექსის ($d_{a/n}$ 5,55; 5, 02; 4,78; 4,02; 3,83; 3,64; 3,60; 3,22; 2,83; 2,77; 2,64 Å და სხვ.), კრისტალური ფაზები, ხოლო ჭარბი (ზედმეტი) ორგანული ლიგანდი - ნაქსოჯინი და მეტალის აცეტატი მოცილდნენ სარეაქციო არეს, საცდელი ნიმუშის სპირტით დამუშავების პროცესში.



ნახაზი 10. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის აცეტატური დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

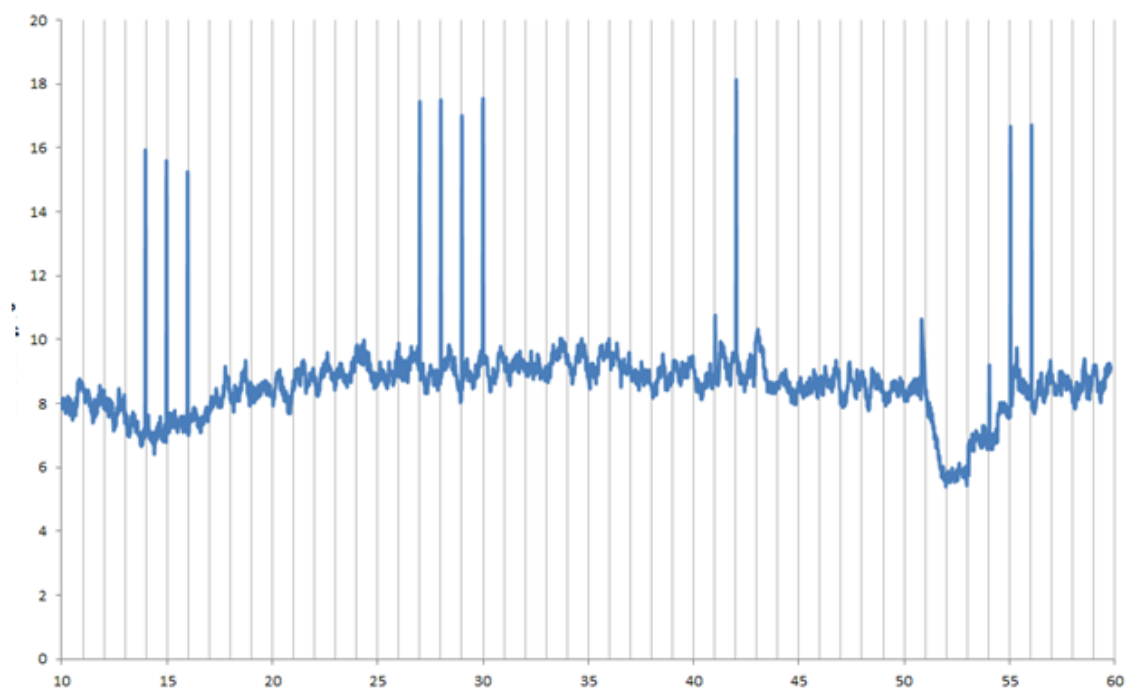
სპილენძ(II)-ის ქლორიდისა და ორგანული ლიგანდის ტინიდაზოლის სინთეზით ექსპერიმენტით მიღებული Cu(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (ნახ.11) თვალსაჩინოდ დაფიქსირებულია ტინიდაზოლთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის (d_a/n 6,48; 4,92; 4,24; 4,06; 3,96; 3,71; 3,24; 3,17; 3,02; 2,95; 2,85; 2,71; 2,61; 2,46; 2,30; 2,22; 2,20 Å) კრისტალური სტრუქტურის ფაზები. ხოლო რაც შეეხება ტინიდაზოლის დამოუკიდებელ სტრუქტურულ ფაზებს (ნახ.2) ისინი ამ კონკრეტულ შემთხვევაში არ ფიქსირდება. ექსპერიმენტით მიღებულ ტინიდაზოლთან Cu(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის ნიმუშში ასევე არ ფიქსირდება $CuCl_2$ -ის დამოუკიდებელი კრისტალური სტრუქტურის ფაზები, რაც შეიძლება აიხსნას ექსპერიმენტის შედეგად მისი მონაწილეობით Cu(II)-ის ქლორიდის კომპლექსის სტრუქტურის წარმოქმნაში, ხოლო ზედმეტი Cu(II)-ის ქლორიდი (ნახ.5) სრულად გაიხსნა და მოცილდა სარეაქციო არეს სპირტით დამუშავების დროს.



ნახაზი 11. ტინიდაზოლთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამა

ცნობილია, რომ ამიდშემცველ კოორდინაციულ ნაერთებში ჰალოგენიდ - (Cl, Br და I) და სულფატ-იონები ხშირად გამოძევდება შიდასაკოორდინაციო სფეროდან, ხოლო პსევდოჰალოგენიდები (NCS, NCSe) თითქმის ყოველთვის შიდასფერულია და ხშირად წარმოქმნიან ამიდურ ხიდებს. ყოველზე ეს ხელს უწყობს კონკურენციის ამაღლებას, ზემოაღნიშნულ ჰალოგენიდ- და სულფატ- ჯგუფებში შემავალ ატომებს შორის, საკოორდინაციო ადგილისათვის ბრძოლაში.

ზოგიერთ შემთხვევაში, ჩვენს მიერ შერჩეული ორგანული ლიგანდი - ტინიდაზოლი ცდილობს სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთი გადაიყვანოს რენტგენამორფულ მდგომარეობაში და ამით საგრძნობლად შეაფერხოს სრული მონაცემების მიღება (ნახ.12) ქიმიური და ფიზიკურ-ქიმიური თვისებების შესწავლაში.

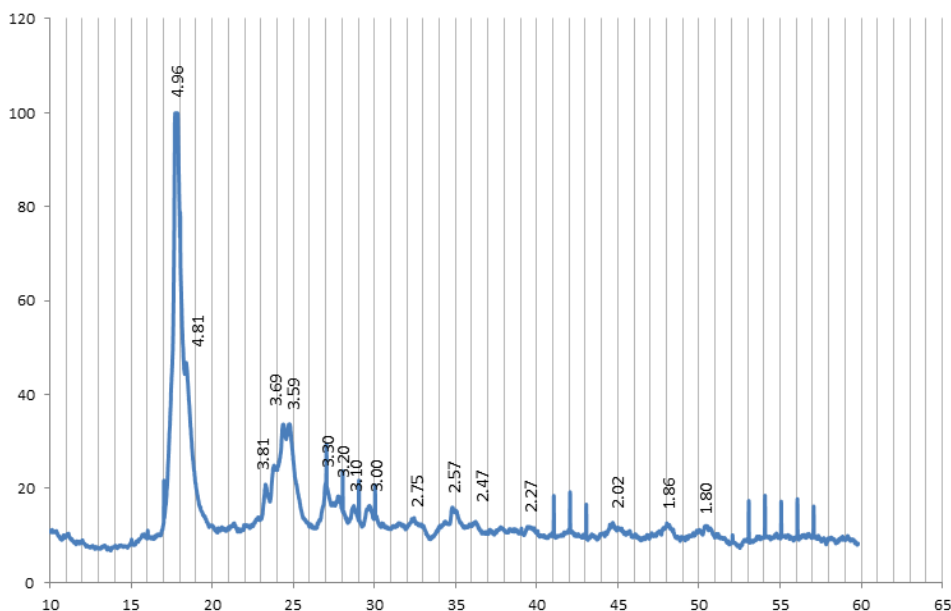


ნახაზი 12. ტინიდაზოლთან სპილენძ (II) -ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენამორფული მდგომარეობა (ეთანოლში)

თუთი(II)-ის ქლორიდის $ZnCl_2 \cdot 2H_2O$ რენტგენოგრამაზე თვალსაჩინოდ ფიქსირდება სიბრტყეთაშორისი პიკები, რომლებიც შეესაბამება მხოლოდ და მხოლოდ თუთი(II)-ის ქლორიდის კრისტალურ ფაზებს (d_n/n 7, 97;

6,41; 5,95; 5,32; 4, 99; 4,61; 3,91; 3,87; 3,45; 3,42; 3,38; 3,37; 3,25; 3,23; 3,14; 3, 05; 2, 95; 2,92; 2,85; 2,81; 2,78; 2,65; 2,60; 2,51; 2,50; 2,40; 2,35; 2,32; 2,24 Å). სინთეზის გზით მიღებულ თუთი(II)-ის ქლორიდული კომპლექსნაერთის ნიმუშის რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამაზე (ნახ.13) გამოკვეთილად ფიქსირდება მხოლოდ თუთი(II)-ის კომპლექსის (d_a/n 4, 96; 4, 81; 3, 81; 3, 69; 3, 59; 3, 30; 3, 20; 3, 10; 3, 00; 2, 75; 2, 57; 2, 47; 2, 27; 2, 02; 1, 86; 1, 80 Å) კრისტალური ფაზები.

აღსანიშნავია ის ფაქტიც, რომ სინთეზური გზით მიღებული თუთი(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის ნიმუშის რენტგენოგრამებზე თუთი(II)-ის ქლორიდისა და ორგანული ლიგანდის ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზები არ ფიქსირდება. თუთი(II)-ის ქლორიდული კომპლექსნაერთის ნიმუშში ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი სტრუქტურული ფაზის არ არსებობა შეიძლება აიხსნას ექსპერიმენტის შედეგად მისი მონაწილეობით თუთი(II)-ის ქლორიდული კომპლექსის სტრუქტურის ჩამოყალიბება - წარმოქმნაში, ხოლო ჭარბი (ზედმეტი) ნაქსოჯინი, ასევე ზედმეტი (ჭარბ) თუთი(II)-ის ქლორიდთან ერთად, სრულად გაიხსნა და ჩამოცილდა სარეაქციო არეს, ეთანოლით დამუშავების პროცესში.



ნახაზი 13. ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის რენტგენოგრამა

ცხრილი 4. რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამების სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}\text{\AA}$) და ინტენსიობები (I/I_0)

ნაქსოვინი $C_9H_{14}N_4O_3$		ტინიდაზოლი $C_8H_{13}N_3O_4S$		$CuSO_4 \cdot 5H_2O$		$CuSO_4 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 5H_2O$		$CuCl_2 \cdot 2H_2O$		$CuCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot 2H_2O$	
I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$
67	8.59	40	10.22	35	5.73	17	5.39	100	5.44	24	6,94
18	7.95	52	8.33	20	5.68	93	4.91	14	4.02	31	5.31
36	6.16	6	5.90	55	5.48	20	4.10	2	3.72	31	5.10
60	5.59	100	5.16	9	5. 21	60	3.83	2	3.69	35	4.65
16	5.25	11	4.99	25	5.15	100	3 65	2	3.32	77	4.20
100	5. 09	12	4.85	10	4.84	94	3.61	4	3.07	100	3.99
22	4. 85	13	4.16	100	4.73	5	3.22	2	2.73	68	3.80
8	4. 70	13	4.03	20	4.66	43	3.08	10	2.64	48	3.63
12	4. 58	25	3.74	13	4.28	82	3.02	6	2.53	41	3.49
33	3. 85	38	3. 44	11	4.00	22	2.84	6	2.06	100	3.28
67	3. 69	5	3.29	60	3.99	22	2.75	8	1.85	63	3.11
60	3. 62	8	3.22	85	3.71	22	2.56	4	1.70	65	3.00
11	3.38	7	3.10	7	3.57	17	2.46	2	1.63	44	2.92
30	3.23	18	2.73	20	3.54	22	2.39			35	2.82
12	3.10	7	2.65	7	3.48	28	2.31			48	2.711
8	2.98			17	3.45	18	2.24			35	2.54
15	2.77			60	3.30	18	2.16			41	2.49
12	2.58			20	3.26	32	2.08			49	2.43
6	2.40			17	3.18	16	2.04			40	2.30
6	2.04			5	2.45	16	1.93			40	2.17
6	1.90			40	2.42	14	1.86			53	2.01
				10	2.19	41	1.81			33	1.90
				11	2.14	50	1.62			32	1.88
				20	2.02	16	1.58			20	1.75
				9	1.98					15	1.69
				10	1.90					13	1.63
				11	1.88					13	1.60
										13	1.57

ცხრილი 4. რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამების სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}\text{\AA}$) და ინტენსიობები (I/I_0)

$\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$		$\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$		$\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$		$\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$		$\text{Cu}(\text{SCN})_2$		$\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2$	
I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$
12	5.39	100	4.88	100	7.9	19	5.55	90	5.94	6	6.63
33	5.16	65	4.68	100	7.4	27	5.02	55	5.50	42	5.02
82	4.42	85	4.56	80	6.0	45	4.78	35	5.09	24	4.59
37	3.89	10	4.31	40	4.96	27	4.02	70	4.27	15	4.16
100	3.23	10	3.63	30	4.73	38	3.83	25	3.72	38	3.82
29	3.49	10	3.56	10	4.23	97	3.64	40	3.28	100	3.63
28	3.08	6	3.51	80	3.76	100	3.60	100	3.20	57	3.22
32	2.99	20	3.41	50	3.33	44	3.82	25	3.06	36	3.07
34	2.90	18	3.33	30	3.15	25	2.83	20	2.93	46	2.94
29	2.75	6	3.14	50	3.05	36	2.77	50	2.85	32	2.89
21	2.64	8	3.05	50	2.71	22	2.64	15	2.74	19	2.75
24	2.61	20	2.84	30	2.64	44	2.53	20	2.65	17	2.58
27	2.55	40	2.62	10	2.60	35	2.32	10	2.59	12	2.45
19	2.45	20	2.60	50	2.49	28	2.26	20	2.51	11	2.38
24	2.33	6	2.56	30	2.39	30	2.11	15	2.46	13	2.15
11	2.23	10	2.44	40	2.36	30	2.09	20	2.39	12	2.08
19	2.18	6	2.34	30	2.31	28	2.06	20	2.14	13	2.02
19	2.15	6	2.30			24	1.91	10	1.94	8	1.89
11	2.08	6	2.28			26	1.89			7	1.76
22	2.02	6	2.24			26	1.83			8	1.60
28	2.03	18	2.21			20	1.68				
25	1.94	6	2.12			20	1.61				
39	1.90	6	2.02								
8	1.73	10	1.95								
7	1.62	6	1.91								
7	1.57	10	1.82								
		8	1.76								
		6	1.65								

ცხრილი 4 . რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამების სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}\text{\AA}$) და ინტენსივობები (I/I_0)

$\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$		$\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$		$\text{Zn}(\text{SCN})_2$		$\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2$		$\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$		$\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	
I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$	I/I_0	$d_{a/n}\text{\AA}$
5	7.97	100	4.96	80	5.40	100	4.98	100	5.44	9	6.48
8	6.41	44	4.81	18	4.33	17	3.81	14	4.02	32	4.92
12	5.95	15	3.81	6	3.81	53	3.58	2	3.72	37	4.24
50	5.32	18	3.69	100	3.38	17	2.50	2	3.69	60	4.06
100	4.99	18	3.59	24	2.86	17	3.22	2	3.32	100	3.96
57	4.61	15	3.30	32	2.53	24	3.10	4	3.07	75	3.71
7	3.91	12	3.20	16	2.41	17	3.02	2	2.73	28	3.24
31	3.87	10	3.10	12	2.28	10	2.84	10	2.64	30	3.17
5	3.45	10	3.00	32	1.94	9	2.57	6	2.53	37	3.02
6	3.42	7	2.75	10	1.84	7	2.38	6	2.06	40	2.95
7	3.38	10	2.57	6	1.71	7	2.15	8	1.85	31	2.85
7	3.37	6	2.47	6	1.66	9	2.01	4	1.70	26	2.71
36	3.25	5	2.27	10	1.57	10	1.90	2	1.63	47	2.61
13	3.23	5	2.02			5	1.73			33	2.46
51	3.14	5	1.86			5	1.64			16	2.30
30	3.05	5	1.80							11	2.22
7	2.94									14	2.20
4	2.92									14	2.06
9	2.85									19	2.01
7	2.81									19	1.97
13	2.78									17	1.93
25	2.65									17	1.88
12	2.60									18	1.86
5	2.51									14	1.78
7	2.50									14	1.73
7	2.40									7	1.70
14	2.35									10	1.65
6	2.32									15	1.60
9	2.24									15	1.58

ჩვენს მიერ სინთეზირებული ნაქსოჯინთან და ტინიდაზოლთან მეტალთა კომპლექსების რენტგენოფაზური ანალიზის რენტგენოგრამების სიბრტყეთაშორისი მანძილები ($d_{a/n}$) და ინტენსივობები (I/I_0) მოცემულია ცხრ.4.

მთლიანობაში, შეიძლება ითქვას, რომ სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთების ნიმუშთა რენტგენოგრაფიული ანალიზის მეთოდით შესწავლის დროს განიხილებოდა შემდეგი შემთხვევები:

- ახლადსინთეზირებულ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთებთან ერთად ფიქსირდებოდა საწყისი ფაზებიც;
- ახლადსინთეზირებულ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთებთან ერთად ფიქსირდებოდა ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის დამოუკიდებელი კრისტალური ფაზებიც;
- შემთხვევა, როდესაც ფიქსირდებოდა მხოლოდ და მხოლოდ ახლადსინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთი და მასთან ერთად საწყისი კრისტალური ფაზა, ნაქსოჯინი, ტინიდაზოლი ან სხვა რომელიმე განსხვავებული კრისტალური ფაზა აღარ ფიქსირდებოდა;

ექსპერიმენტთა მიმდინარეობის პროცესში დაიხვეწა თითოეული მეტალის კომპლექსნაერთის სინთეზის დეტალები, პროცესის ბოლომდე მიყვანისა და მიღებული კომპლექსების გასუფთავების გზები - ექსპერიმენტით მიღებულ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთებთან ერთად დარჩენილი ორგანული ლიგანდების - ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლისა და საწყისი მარილების მოცილების პირობები.

ჩვენს მიერ ჩატარებულ კვლევათა საფუძველზე ცალსახად და ბოლომდე განისაზღვრა სრულიად ახალ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთების სინთეზის ექსპერიმენტის პირობები და მახასიათებლები, რომელთა საფუძველზეც მომავალში შესაძლებელი შეიქმნება ამ და სხვა შედგენილობათა მიზანმიმართული და წინასწარგანსაზღვრული თვისებების მქონე მეტალების ბიოკომპლექსნაერთთა სინთეზის დაგეგმვა და განხორციელება.

ასევე ცალსახად და მაღალი სიზუსტით განისაზღვრა მეტალთა მასური წილი ჩვენს მიერ სინთეზირებულ მეტალთა ბიოკომპლექსნაერთებში რენტგენოფლუორესცენტული ანალიზით.

სპილენძის სულფატის ნაქსოჯინთან $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ კომპლექსნაერთში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 9,786%-ს თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,117%-ს. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით ცალსახად დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის სულფატის კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის სულფატისა და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. ექსპერიმენტისას მიღებულ სპილენძის სულფატის კომპლექსში საწყისი სულფატისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1:2.

სპილენძის აცეტატის $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ კომპლექსნაერთში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით სპილენძის შემცველობა შეადგენს 9,87%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,48%-ს. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით აქაც ცალსახად დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის აცეტატური კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის აცეტატისა და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. სპილენძის აცეტატურ კომპლექსში საწყისი აცეტატისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1: 2.

სპილენძის ფორმატის ნაქსოჯინთან კომპლექსნაერთში $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 9,778%-ს თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,37%. ექსპერიმენტულად მიღებულ ნიმუშში მხოლოდ სპილენძის ფორმატული კომპლექსი ფიქსირდება. კომპლექსში სპილენძის ფორმატისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1:2.

სპილენძის როდანიდის ნაქსოჯინთან კომპლექსნაერთში $[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 10,404%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი

10,127%. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის როდანიდული კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის როდანიდისა და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. სპილენძის როდანიდურ კომპლექსში საწყისი როდანიდისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1:2.

სპილენძის ქლორიდის ნაქსოჯინთან კომპლექსნაერთში $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 10,473%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 10,273%. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის ქლორიდული კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის ქლორიდისა და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. სპილენძის ქლორიდულ კომპლექსში საწყისი ქლორიდისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1:2.

სპილენძის ბრომიდის ნაქსოჯინთან $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ კომპლექსნაერთში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 9,848%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,4 %. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით ცალსახად დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის ბრომიდის კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის ბრომიდის და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. ექსპერიმენტისას მიღებულ სპილენძის ბრომიდის კომპლექსში საწყისი ბრომიდისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1: 2.

ნიკელის აცეტატის ნაქსოჯინთან $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ კომპლექსნაერთში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Ni-ის შემცველობა შეადგენს 8,95%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 8,4%-ს.

მანგანუმის ქლორიდის ნაქსოჯინთან $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ კომპლექსნაერთში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Mn-ის შემცველობა შეადგენს 9,91%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,503%. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით აქაც ცალსახად დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ მანგანუმის ქლორიდის კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი მანგანუმის ქლორიდის და ნაქსოჯინის დამოუკიდებელი ფაზები. მანგანუმის ქლორიდის კომპლექსში საწყისი ქლორიდისა და ნაქსოჯინის ფაზების თანაფარდობაა 1: 2.

სპილენძის ქლორიდის ტინიდაზოლთან კომპლექსნაერთში (ეთანოლში) $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 9,824%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 9,624%. ქიმიური და რენტგენოფაზური ანალიზით აქაც ცალსახად დასტურდება, რომ ექსპერიმენტის შედეგად მიღებული ნიმუში ახალი კრისტალური ნაერთია, რომელიც მხოლოდ სპილენძის ქლორიდის კომპლექსითაა წარმოდგენილი. მასში არ ფიქსირდება საწყისი სპილენძის ქლორიდის და ტინიდაზოლის დამოუკიდებელი ფაზები. სპილენძის ქლორიდის კომპლექსში საწყისი ქლორიდისა და ტინიდაზოლის ფაზების თანაფარდობაა 1: 2.

სპილენძის ქლორიდის ტინიდაზოლთან კომპლექსნაერთში (წყალხსნარში) $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზით Cu-ის შემცველობა შეადგენს 8,898%-ს, თეორიულად ჩვენს მიერ გამოთვლილი 8,546% ამორფულია .

ანალიზის ექსპერიმენტული კომპლექსნაერთების შემავალი მეტალების მასური წილები მოცემულია (ცხრ.4).

სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთებში რენტგენოფლოუორესცენტული ანალიზის შედეგად მიღებული მონაცემების შედარებით ჩვენს მიერ თეორიულად გამოთვლილ შედეგებთან ცდომილება მერყეობს 0,6 და 0,4%-ით ზღვრებში, რაც სრულიად დასაშვებია.

ცხრილი 5. სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთებში მეტალთა ექსპერიმენტული და თეორიული შემცველობა (%) რენტგენოფლორესცენტული ანალიზით

№	მოლეკულური მასა	ბიოკომპლექსნაერთი	მეტალები	
			ექსპრ.,%	თეორ.,%
1.	701.1	$[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$	9.786 %	9.117 %
2.	669.65	$[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	9.87 %	9.48 %
3.	677.54	$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	9.778 %	9.378%
4.	622.48	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	10.473 %	10.273 %
5.	631.55	$[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	10.404 %	10.127 %
6.	665.55	$[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	9.824 %	9.624 %
7.	675.8	$[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9.848 %	9.396 %
8.	577.93	$[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9.91 %	9.503 %
9.	707.7	$[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	8.95 %	8.4 %
10.	588.2	$[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	11,1%	11.054%
11.	632	$[\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$	10.404 %	10.127 %
12.	616,7	$[\text{NiCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9.82	8.511
13.	643	$[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	9.432	9.176
14.	638	$[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$	8.75	8.464
15.	648,1	$[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$	10.2	10.23

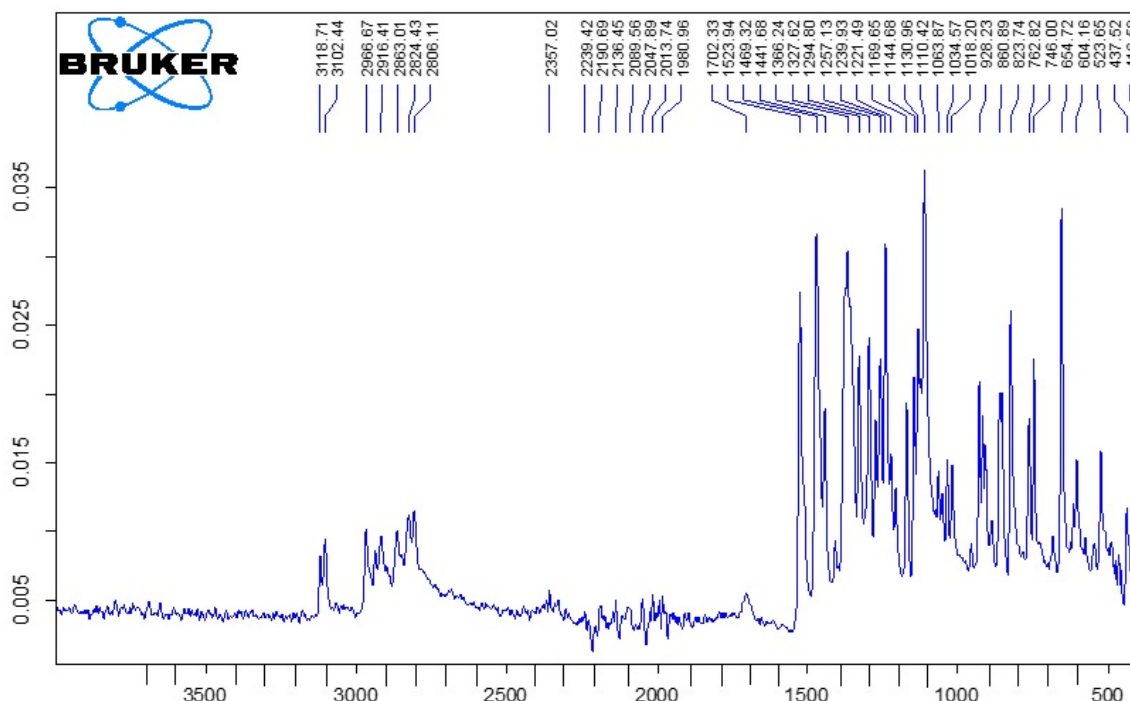
2.2.8. ინფრაწითელი სპექტროსკოპული კვლევის შედეგები

ორგანულ ლიგანდ - ნაქსოჯინთან (ნიმორაზოლთან) და ტინიდაზოლთან ჩვენ მიერ სინთეზირებული მეტალების ბიოკომპლექსნაერთების იწ სპექტრების შესწავლა განვახორციელეთ FT-IR Spectrometer TENSOR II ფურიე გარდაქმნის ინფრაწითელ სპექტომეტრის მეშვეობით. გაკეთდა შედარება მიღებული კომპლექსების სპექტრებსა და თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ლიგანდის ნაქსოჯინის (ნიმორაზოლი) სპექტრებს შორის. კვლევის შედეგად აღმოჩნდა, რომ ν (C=N) ვალენტურ რხევათა სიხშირეები წანაცვლებულია $\sim 10\text{-}25\text{cm}^{-1}$ -ით მაღალსიხშირიან უბანში, ხოლო იშვიათად უფრო მეტადაც (მაგრამ დასაშვებ ფარგლებში), რაც იმის დამადასტურებელია, რომ ნაქსოჯინი (ნიმორაზოლი) ამ მეტალთა კომპლექსნაერთებში არის კოორდინირებულ მდგომარეობაში იმიდაზოლის ციკლის ორი აზოტიდან ერთ-ერთი აზოტის ატომის მეშვეობით [118-122].

შედარება გაკეთდა, აგრეთვე ჩვენ მიერ სინთეზირებული მეტალებისა (მანგანუმი, ნიკელი, სპილენძი, თუთია) და სხვა მეტალთა (ქრომი, რკინა(II) და რკინა(III)) ნაქსოჯინური (ნიმორაზოლური) კომპლექსების სპექტრებთან, რამაც დაგვარწმუნა, რომ ორგანული ლიგანდები ცენტრალურ კომპლექსწარმომქმნელ ატომებთან დაკავშირებულია მონოდენტურად-მხოლოდ აზოტის ატომით.

როგორც ზემოთ აღვნიშნეთ ორგანულ ლიგანდიან ნაქსოჯინთან (ნიმორაზოლთან) მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II) -ის, სპილენძ(II)-ის და თუთიის სულფატურ, ქლორიდულ, როდანიდულ, ფორმიატულ და აცეტატურ ბიოკოორდინაციულ ნაერთებში კოორდინირების ხერხებისა და შესაბამისი ნაერთების მოლეკულური აღნაგობის შესწავლისთვის ჩავატარეთ შთაქნთქმის იწ სპექტროსკოპული კვლევითი სამუშაოები. ამ მიზნით გადავიღეთ თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ლიგანდის-ნაქსოჯინის (ნიმორაზოლის) შთანთქმის იწ (ინფრაწითელი) სპექტრები (ნახ. 14) და გავარკვიეთ, რომ მისი იმიდაზოლური მოლეკულების დონორული ჰეტეროციკლების აზოტის

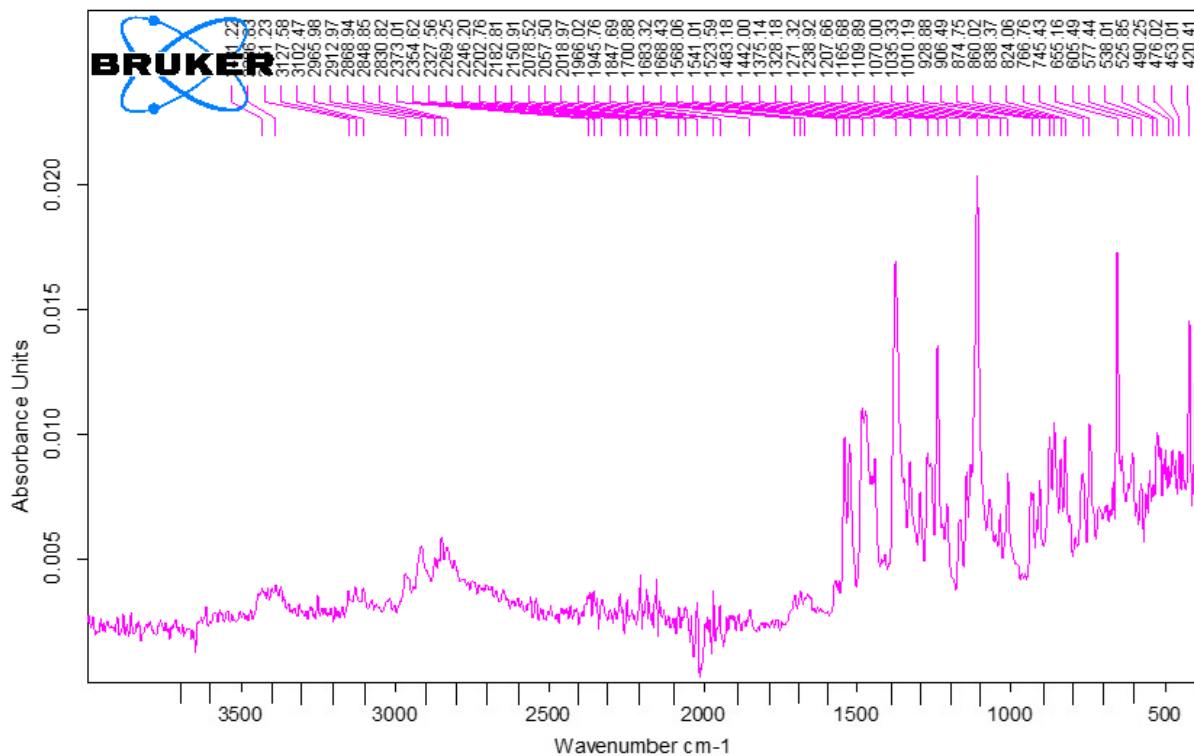
ატომთა დამახასიათებელი შთანთქმის ინტენსიური ზოლები დაფიქსირებულია $\sim 1018, 1034, 1063, 1524 \text{ სმ}^{-1}$ და ა. შ. უბნებში, ხოლო კარბონილისა (CO) $\sim 1620-1630 \text{ სმ}^{-1}$ და წყლის მოლეკულებისა $\nu (\text{H}_2\text{O}) \sim 3300-3450 \text{ სმ}^{-1}$ დიაპაზონში.



ნახაზი 14 . ნაქსოჯინის $\text{C}_6\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის იწ სპექტრი ($500-3500 \text{ სმ}^{-1}$)

ნაქსოჯინთან მანგანუმ(II)-ის ქლორიდულ დიჰიდრატში თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ნაქსოჯინის (ნიმორაზოლის) ერთ-ერთი აზოტის რხევის სიხშირე გადანაცვლებულია შედარებით მაღალი სიხშირის უბანში $\sim 15-20 \text{ სმ}^{-1}$ და შეადგენს $\sim 1593-1995 \text{ სმ}^{-1}$ (ნახ.15), რაც ნიშანია იმისა, რომ Mn(II)-ის კომპლექსწარმომქმნელ იონთან ორგანული ლიგანდის -ნაქსოჯინის მოლეკულის კოორდინირება ხორციელდება იმიდაზოლის ჰეტეროციკლური დონორული აზოტის (N4) ატომით და შესაბამისად, დიდი ალბათობით, ადგილი აქვს $\text{Mn} \leftarrow \text{N}=\text{CH}-$ დონორულ-აქცეპტორული ბმის რეალიზებას. ნაქსოჯინი გვევლინება მონოდენტური ლიგანდის როლში, რაც სრულ შესაბამისობაშია სხვა ავტორების ნაშრომთა შედეგებთან.

კომპლექსნაერთში წყლის მოლეკულის რხევათა სიხშირის $\nu (\text{H}_2\text{O})$ მნიშვნელობის $\sim 3380 \text{ სმ}^{-1}$ შემცირება მიანიშნებს მისი მოლეკულების შესაძლო შიდასფერულ არსებობაზე.

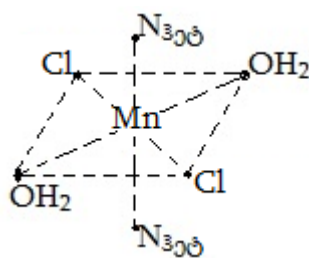


ნახაზი 15 . $\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ შთანთქმის იწ სპექტრი ($500\text{-}3500 \text{ სმ}^{-1}$)

წყლის მოლეკულათა რხევის სიხშირეთა შემცირება შეიძლება დაკავშირებულია კომპლექსნაერთის სტერეოქიმიურ ცვლილებებთანაც.

შთანთქმის იწ სპექტრის გრძელტალღიან უბანში დაფიქსირებულია ინტენსიური ზოლი $\sim 215\text{-}238 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, რაც დიდი ალბათობით მიანიშნებს ქლორიდული აციდოლიგანდის განლაგებაზე მეტალ-კომპლექსნაერთის შიდასფეროში.

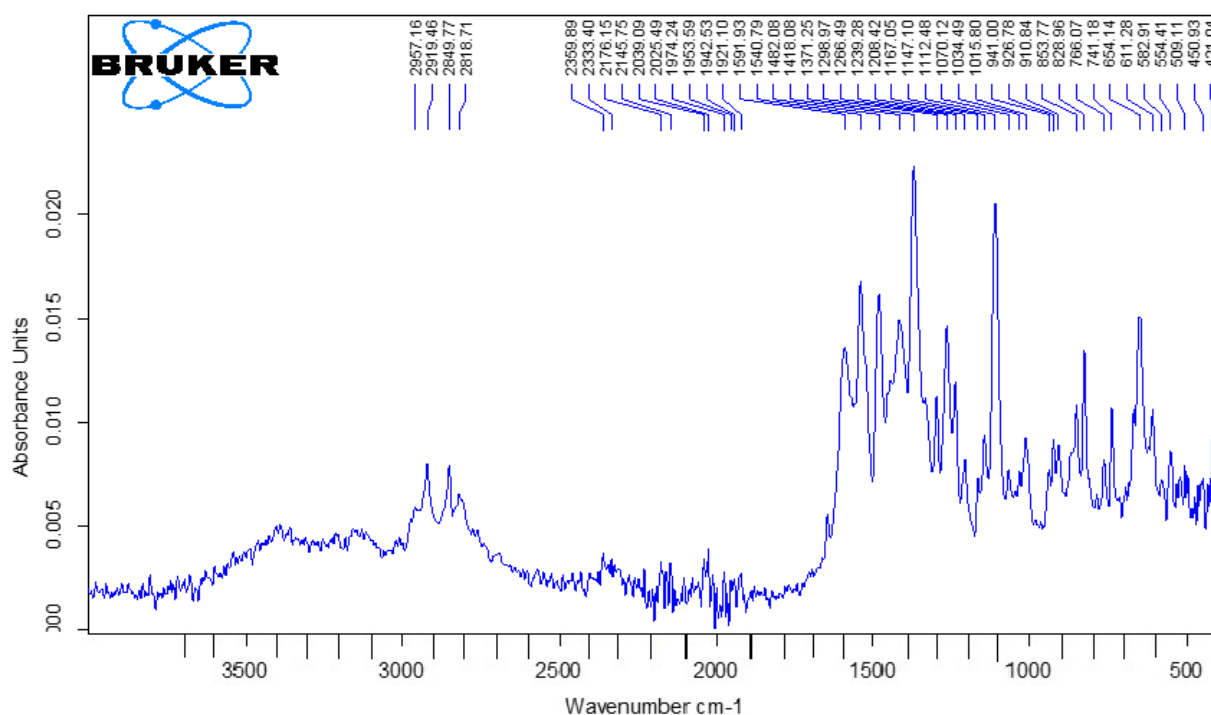
ზემოაღნიშნული იწ სპექტროსკოპული შედეგების მიხედვით კომპლექსწარმომქმნელი მანგანუმ(II)-ის გარშემო რეალიზდება ოქტაედრული კოორდინაცია - მონოდენტური ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის ჰეტეროციკლის აზოტის ორი ატომით, მონოდენტური ორი აციდოლიგანდის - ქლორის ორი ატომით და მონოდენტური წყლის ორი მოლეკულის - ჟანგბადის ორი ატომით (ნახ.16).



ნახაზი 16. $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

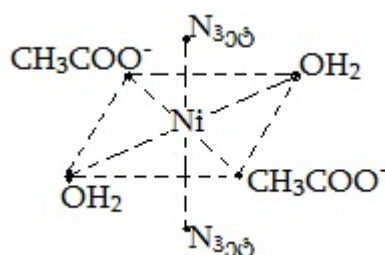
$[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ნაქსოჯინთან $\text{Ni}(\text{II})$ -ის აცეტატური ნაერთის იწ სპექტრში ფიქსირდება ჰეტეროციკლის დონორული აზოტის ატომის რხევის სიხშირე $\sim 1592 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში (ნახ. 17), რაც მიაწინებს ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის კოორდინირებაზე ცენტრალურ კომპლექსწარმომქმნელ $\text{Ni}(\text{II})$ -ის იონთან: $\text{Ni} \leftarrow \text{N}_{\text{ჰეტ.}}$, რაც არის ძალიან მაღალი მტკიცებულება იმის შესახებ, რომ ორგანული ლიგანდი ნაქსოჯინი გვევლინება მონოდენტური ლიგანდის როლში (მეორე აზოტის რხევის სიხშირის უცვლელობისას).

აღნიშნული შთანთქმის იწ სპექტრის უბანში ($\sim 3000\text{-}3500 \text{ სმ}^{-1}$) არ არის დაფიქსირებული წყლის მოლეკულისთვის დამახასიათებელი შთანთქმის ინტენსიური ზოლები $\nu(\text{H}_2\text{O})$ მაშინ, როდესაც კონკრეტული $\text{Ni}(\text{II})$ -ის კომპლექსნაერთის ქიმიური ანალიზის მიხედვით, მასში დიდი ალბათობით, უნდა იყოს წყლის განსაზღვრული რაოდენობა (ჩვენი მრავალჯერადი გაანგარიშებით და სამეცნიერო ლიტერატურაში არსებული მონაცემების მიხედვით დაახლოებით წყლის ორი მოლეკულა). ზემოაღნიშნული გაპირობებული უნდა იყოს, ძირითადად, წყლის მოლეკულების შიდასფერული განლაგებით, ხოლო ნაწილობრივ კომპლექსნაერთის სტერეოქიმიური ცვლილებებითაც.



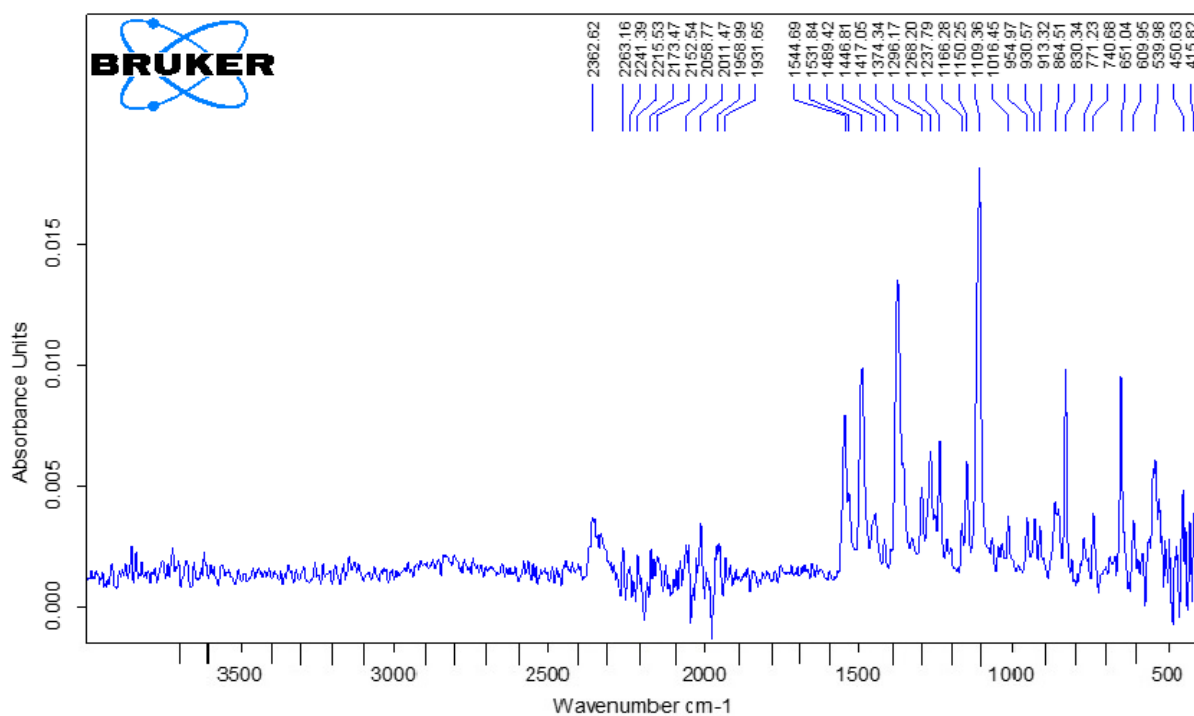
ნახაზი 17. $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ- სპექტრი ($500\text{--}3500\text{სმ}^{-1}$)

საკვლევი კომპლექსნაერთის შემადგენელი აციდოჯგუფების შესაბამისი რხევათა სიხშირეები დაფიქსირებულია გრძელტალღიან უბანში $\sim 421\text{--}451\text{სმ}^{-1}$, რომლებიც შეიძლება მიეკუთვნოს $\nu(\text{NiO})$. ნიკელის აცეტატური ნაერთების სპექტრებში ზემოაღნიშნული შთანთქმის ზოლები დაფიქსირებულია $\sim 415\text{--}455\text{სმ}^{-1}$ უბანში. აქედან გამომდინარე Ni(II) -ის იონის გარშემო ოქტაედრული კოორდინაცია რეალიზდება ნაქსოჯინის ორი ჰეტეროატომ აზოტის მონოდენტატურად კოორდინირებული აცეტატოჯგუფების ჟანგბადის ორი ატომით და ორი მოლეკულა წყლის ჟანგბადის ორი ატომით $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{Nag})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ (ნახ.18).



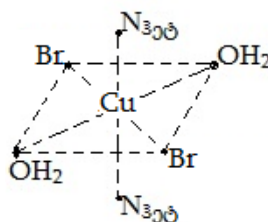
ნახაზი 18. $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ბრომიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ მოლეკულის დონორული ჰეტეროციკლის აზოტის შესაბამისი რხევის სიხშირე $\nu(\text{N}_3)$ დაფიქსირებულია, როგორც უკვე აღინიშნა 1574 სმ^{-1} უბანში (ნახ.19), რომელიც სინთეზირებულ ბიოკომპლექსნაერთში გადანაცვლებულია სპექტრის მაღალსიხშირიან უბანში $\sim 18\text{-}20 \text{ სმ}^{-1}$ და შეადგენს $\sim 1592 \text{ სმ}^{-1}$, რაც უდავოდ მიაწინებს ნაქსოჯინის მონოდენტურ კოორდინაციაზე სპილენძ(II) -ის კომპლექსწარმოქმნელ იონთან.



ნახაზი 19 . $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500\text{-}3500 \text{ სმ}^{-1}$)

ნაქსოჯინის მეორე არადონორული ჰეტეროციკლის აზოტის შესაბამისი რხევის სიხშირე უცვლელია თავისუფალ (არაკოორდინირებულ) სიხშირესთან ($\sim 1574 \text{ სმ}^{-1}$) შედარებით, რაც დადასტურებაა იმის, რომ სპილენძ(II)-ის იონთან კოორდინაციაში უშუალოდ არ მონაწილეობს.



ნახაზი 20. $[\text{CuBr}_2 \cdot \text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ბრომიდულ ბიოკომპლექსნაერთის იწ-სპექტრში $\nu(\text{H}_2\text{O})$ მნიშვნელობის ($\sim 3380 \text{ სმ}^{-1}$) შემცირება $\sim 30\text{--}50 \text{ სმ}^{-1}$ -ით მიანიშნებს სინთეზირებულ კომპლექსნაერთში წყლის მოლეკულების არსებობაზე კომპლექსის შიდა სფეროში. აქვე აღსანიშნავია ისიც, რომ რხევის სიხშირის $\nu(\text{H}_2\text{O})$ შემცირება, წყლის მოლეკულების რიცხვის შემცირებისას, შესაძლოა დაკავშირებული იყოს კომპლექსნაერთის სტეროქიმიურ ცვლილებებთანაც.

შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრის გრძელტალღიან უბანში დაფიქსირებულია რხევათა სიხშირეები $\sim 430\text{--}465 \text{ სმ}^{-1}$ დიაპაზონში, რომლებიც დიდი ალბათობით შეიძლება ჩაითვალოს ბრომის ატომთა შესაბამის რხევათა სიხშირეებად და უშუალოდ კოორდინირებულია კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონებთან. აციდოლიგანდ ბრომის იონები გვევლინება მონოდენტური ლიგანდის როლში (ნახ.20).

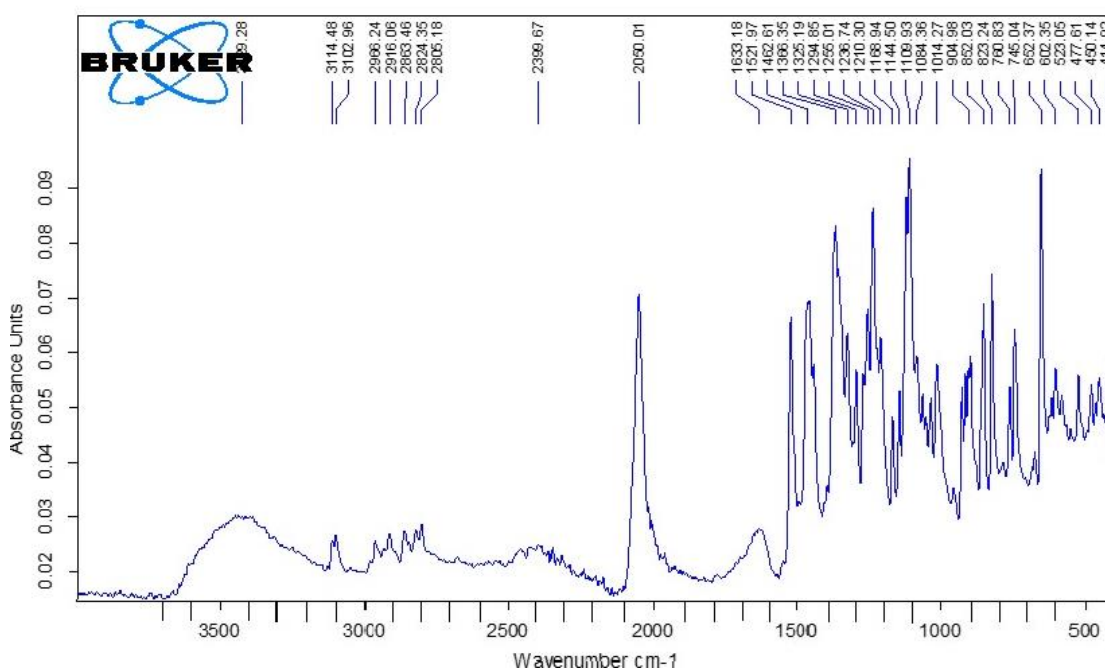
ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის $[\text{Cu}(\text{NCS})_2 \cdot (\text{Nag})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შესახებ კვლევის დაწყებამდე ცნობილი იყო, რომ მეტალთა კომპლექსნაერთებში შემავალი SCN^- -ჯგუფები კომპლექსწარმომქმნელს შეიძლება შეუკავშირდნენ სამი სხვადასხვა სახით: აზოტის ატომით (M-NCS), გოგირდის ატომით (M-SCN) და ერთდროულად -აზოტისა და გოგირდის ატომებით (M-NCS-M) - ხიდური კოორდინაცია.

ბოლო პერიოდში, რენტგენოსტრუქტურული გამოკვლევებით აღმოჩენილია SCN^- -ჯგუფების კადმიუმთან კოორდინაციის მეოთხე ტიპი: NCS-M-NCS (ბმა ერთდროულად აზოტისა და გოგირდის ატომებით აციდოლიგანდის მონოდენტურობის პირობებში). ზემოაღნიშნული მეტალის (კადმიუმი) კომპლექსნაერთის ასეთი არაორდინარული აღნაგობით გაპირობებულია მისი განსაკუთრებულად მაღალი ბიოაქტიურობა (აღნაგობასა და ბიოაქტიურობას შორის კორელაცია).

ჩვენ კონკრეტულ შემთხვევაში $\nu(\text{CN})$ სავალენტო რხევის სიხშირე NCS^- - ჯგუფისა, კობალტისა და მანგანუმის კომპლექსნაერთების შემთხვევაში ვლინდება დაახლოებით $\sim 2050 \text{ სმ}^{-1}$, ხოლო ნიკელის კომპლექსნაერთის შთანთქმის იწ სპექტრის დაახლოებით $\sim 2065, 2105$ და 2140 სმ^{-1} უბნებში.

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის როდანიდული ბიოკოორდინაციული ნაერთის $[\text{Cu}(\text{NCS})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრის დაახლოებით $\sim 2050 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში გამოვლენილია საკმაოდ ინტენსიური შთანთქმის ზოლი (ნახ.21), რომელიც შეიძლება მიეკუთვნოს $\nu(\text{CN})$ სავალენტო რხევის სიხშირეს, რაც დიდი ალბათობით მინიშნებაა იმის შესახებ, რომ როდანიდული ჯგუფი (CSN^-) უშუალოდ დაკავშირებულია კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონთან $\nu(\text{Cu} \leftarrow \text{NCS})$. ამავე კომპლექსნაერთის შთანთქმის იწ სპექტრში ფიქსირებულია ინტენსიური ზოლი $\sim 1633 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, რაც მინიშნებს ნაქსოჯინის მოლეკულის კოორდინაციაზე სპილენძ(II)-ის იონთან პეტეროციკლის აზოტის ატომის ($\text{Cu} \leftarrow \text{N}_{\text{პეტ.}}$) მეშვეობით.

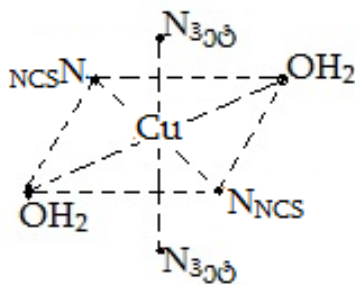
ამავე კომპლექსნაერთის მაღალსიხშირიან უბანში თავს იჩენს შედარებით დაბალი ინტენსივობის შთანთქმის ზოლები, რომელთაგან ~ 3114 და 3400 სმ^{-1} დიდი ალბათობით შეიძლება ჩაითვალოს $\nu(\text{H}_2\text{O})$ წყლის მოლეკულათა არსებობის დასაბუთებად.



ნახაზი 21 . $[\text{Cu}(\text{NCS})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500\text{-}3500 \text{ სმ}^{-1}$)

მთლიანობაში სპილენძ(II)-ის იონის გარშემო ხორციელდება ოქტაედრული კოორდინაცია - ორი მონოდენტური ნაქსოჯინის აზოტის ორი

ატომით, ორი მონოდენტური იზოთიოციანატის მოლეკულის აზოტის ორი ატომით და წყლის ორი მოლეკულის ჟანგბადის ორი ატომით (ნახ.22).



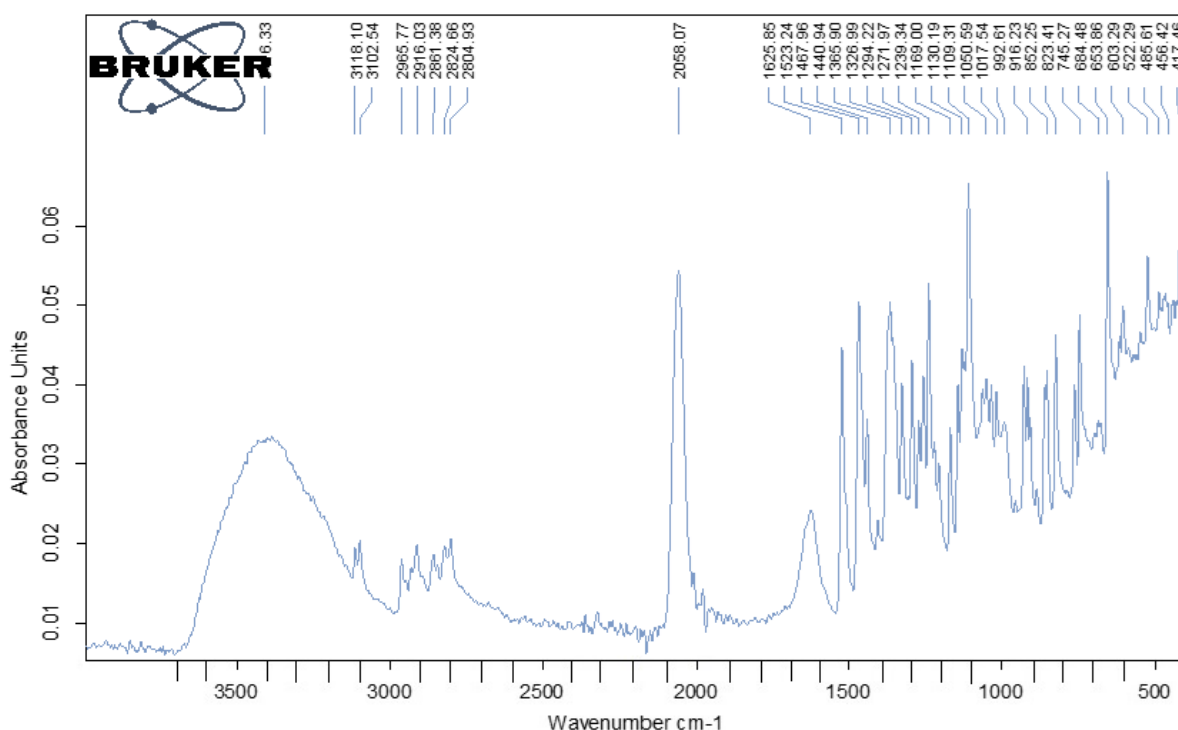
ნახაზი 22. $[\text{Cu}(\text{NCS})_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან თუთიის როდანიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის $[\text{Zn}(\text{NCS})_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ აღნაგობის იწ სპექტროსკოპული კვლევის მიხედვით დაახლოებით $\sim 1625 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში არსებული ინტენსიური ზოლი შეიძლება მიეკუთვნოს დონორული ჰეტეროციკლის აზოტის ატომს ან კარბონილის (CO) ჟანგბადის ატომს, რომლის მეშვეობითაც ორგანული ლიგანდი ნაქსოჯინი ($\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$), დიდ ალბათობით, კოორდინირებულია კომპლექსწარმომქმნელ თუთიის ($\text{Zn} \leftarrow \text{N}_{3\text{ეტ}}$ ან O_{co}) ატომთან.

კვლევის მოცემულ ეტაპზე დიდი ალბათობით შეიძლება თქმა იმისა, რომ ნაქსოჯინის მოლეკულის კარბონილის ჯგუფის (CO) ჟანგბადის ატომი კომპლექსწარმომქმნელ თუთიის ატომთან არ მონაწილეობს კოორდინაციაში - შესაბამისი სიხშირის მქონე შთანთქმის ზოლები $\nu(\text{CO})$ კომპლექსნაერთის იწ-სპექტრში არ გადაადგილდება დაბალსიხშირიან უბანში საწყისი ლიგანდის სიხშირესთან შედარებით.

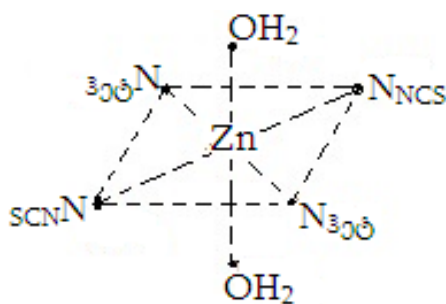
ამავე კომპლექსნაერთის იწ მაღალსიხშირიან $\sim 3370\text{-}3400 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში დაფიქსირებული საკმაოდ დიდი მოცულობის ინტენსიური ზოლი შეიძლება მიჩნეულ იქნას წყლის მოლეკულის რხევის სიხშირედ, რომელიც, უშუალოდ კოორდინირებულია ცენტრალურ კომპლექსწარმომქმნელ თუთიის ატომთან ($\text{Zn} \leftarrow \text{OH}_2$), სინთეზირებული კომპლექსნაერთის შიდასაკოორდინაციო სფეროში განლაგებით (ნახ.23).

თუთიის ამავე კომპლექსნაერთის იწ-სპექტრში სავალენტო რხევის სიხშირე $\nu(\text{CN})$ NCS^- - ჯგუფისა, დაახლოებით $\sim 2050 \text{ სმ}^{-1}$, რაც დიდი ალბათობით დადასტურებაა იმისა, რომ NCS^- როდანიდული ჯგუფები მონოდენტურია- თუთიის ატომთან კოორდინირებულია აზოტის ატომით, განთავსებულია შიდა საკოორდინაციო სფეროში და რეალიზებულია იზოთიაციანატური ($\text{Zn} \leftarrow \text{N}_{\text{NCS}}$) სტრუქტურა. ამ მტკიცებულებას ამაგრებს ისიც, რომ კომპლექსნაერთის იწ სპექტრში დაფიქსირებულია დაბალსიხშირიანი და დაბალინტენსიური შთანთქმის ზოლი $\sim 780 \text{ სმ}^{-1}$, რომელიც შეიძლება მიეკუთვნოს იზოთიაციანატურ ჯგუფის $\nu(\text{CS})$.



ნახაზი 23. $[\text{Zn}(\text{NCS})_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500\text{-}3500 \text{ სმ}^{-1}$)

ზემოაღნიშნული მონაცემების ანალიზის საფუძველზე, დიდი ალბათობით, შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა, რომ ნაქსოჯინთან თუთიის როდანიდულ კომპლექსნაერთს აქვს ოქტაედრული აღნაგობა - ნაქსოჯინის ორი მოლეკულის ჰეტეროციკლის აზოტის (ან კარბონილის ჯგუფის ჟანგბადის) ორი ატომით, ორი როდანიდული ჯგუფის აზოტის ორი ატომით და წყლის ორი მოლეკულის ჟანგბადის ორი ატომით (ნახ.24).



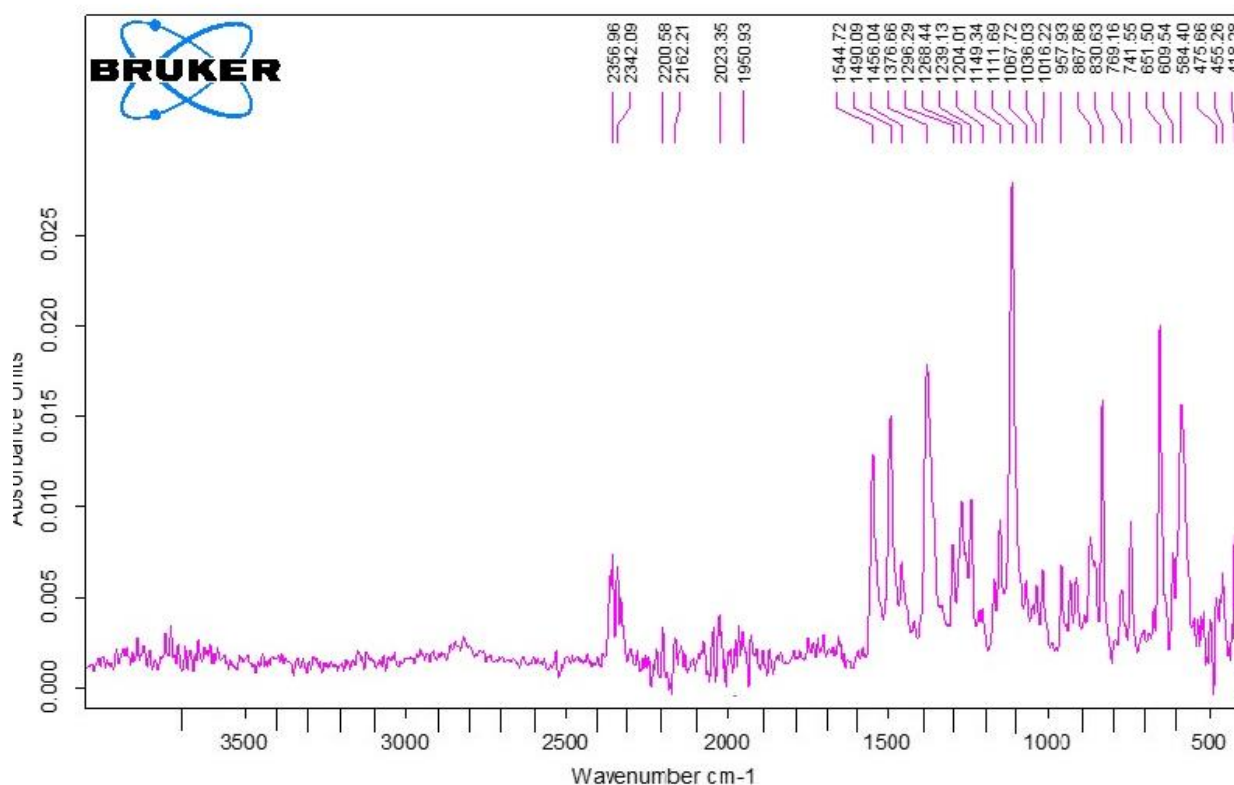
ნახაზი 24. $[Zn(NCS)_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთი $[CuCl_2 \cdot (C_9H_{14}N_4O_3) \cdot (H_2O)_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრის ერთ-ერთ უბანში (ნახ.25) დაფიქსირებული რხევის სიხშირე ($\sim 1544 \text{ სმ}^{-1}$) დიდი ალბათობით შეიძლება მიეკუთვნოს ნაქსოჯინის იმიდაზოლის ჰეტეროციკლური აზოტის სავალენტო რხევის სიხშირეს, რომელიც თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ორგანული ლიგანდის იმიდაზოლის ჰეტეროციკლის აზოტის სავალენტო რხევის სიხშირესთან შედარებით (1524 სმ^{-1}) გაზრდილია $\sim 20 \text{ სმ}^{-1}$, რომელიც გარკვეული ალბათობით ადასტურებს კომპლექსნაერთში სპილენძ(II)-ის ატომთან ნაქსოჯინის კოორდინირებას იმიდაზოლის ჰეტეროციკლის ორიდან ერთ-ერთი აზოტის ატომით. რაც შეეხება ნაქსოჯინის იმიდაზოლის არადონორული მეორე აზოტის ატომს იგი კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონთან კოორდინაციაში შეიძლება ითქვას, რომ არ შედის და მისი შესაბამისი შთანთქმის ზოლის სიხშირე ($\sim 1524 \text{ სმ}^{-1}$) არ იცვლება.

კომპლექსის სპილენძ(II)-ის იონთან, დიდი ალბათობით, კოორდინაციაშია წყლის მოლეკულები, რომელთა რხევის სიხშირეები დაახლოებით $\sim 3580\text{-}3620 \text{ სმ}^{-1}$ უბანშია დაფიქსირებული და რამდენადმე ამაღლებულია სხვა ანალოგიური კომპლექსნაერთების შესაბამის იწ სპექტრებთან შედარებით, მაგრამ ეს არ გამორიცხავს წყლის მოლეკულათა კოორდინაციას მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან (ჩვენ შემთხვევაში სპილენძ(II)-ის იონებთან). ამის დასტურია ნაშრომთა ავტორების მტკიცებულება იმის შესახებ, რომ რადგან $\sim 3500 \text{ სმ}^{-1}$ ზევით არ არის მკაფიოდ გამოვლენილი შთანთქმის ზოლები, შეიძლება მაინც ვივარაუდოთ კომპლექსის შიდასფერული წყლის მოლეკულების არსებობა, რამეთუ ამის დასტურად გამოდგება კომპლექსში წყალბადური

ბმების არსებობა, რომლებიც აერთიანებენ მოლეკულებს სამგამზომილებიან კარკასში.

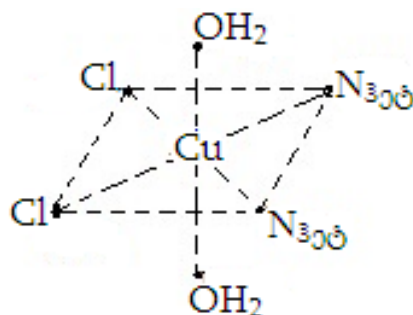
განსაკუთრებულ ყურადღებას იმსახურებს ზემოაღნიშნულ კომპლექსნაერთში აციდოლიგანდ ქლორის (Cl^-) იონთა რხევების სიხშირეების სიდიდეთა მნიშვნელობები, რომელთა ანალიზით, დიდი ალბათობით, შეიძლება დადგენა იმისა, რომ თუ სად არის განლაგებული (კომპლექსის შიდა თუ გარე სფეროში) და რით არის დაკავებული ქლორის იონები. შთანთქმის იწ სპექტრების მიხედვით, ქლორის იონების რხევის სიხშირეები დაფიქსირებულია გრძელტალღიან უბანში $\sim 217\text{--}270\text{ სმ}^{-1}$, რომელიც დიდ ალბათობით დასტურია იმისა, რომ ქლორის იონები უშუალოდ კოორდინირებულია კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონთან და განთავსებულია კომპლექსის შიდასაკოორდინაციო სფეროში.



ნახაზი 25. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_6\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{HO})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი ($500\text{--}3500\text{ სმ}^{-1}$)

აქედან გამომდინარე, დიდი ალბათობით შეიძლება ითქვას რომ სპილენძ(II)-ის გარშემო განხორციელებული პოლიედრი - ოქტაედრია (ნახ.26.), რომელიც აგებულია მონოდენტური ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის

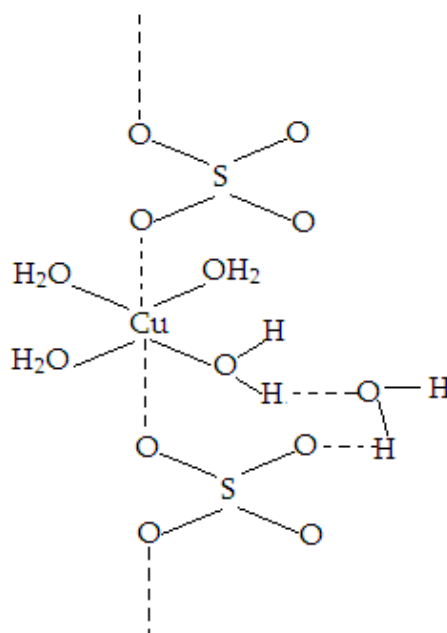
ორი მოლეკულის ჰეტეროციკლის აზოტის ორი ატომით და შესაბამისი რხევის სიხშირე $\nu(\text{N}_{3\text{გ}}=\text{C})$ განლაგებულია $\sim 1544 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში და თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ნაქსოჯინის იმიდაზოლის ჰეტეროციკლური აზოტის რხევის სიხშირესთან შედარებით ($\sim 1524 \text{ სმ}^{-1}$) გაზრდილია ($\sim 18\text{-}20 \text{ სმ}^{-1}$), ორი მოლეკულა წყლის შესაბამის რხევათა სიხშირეები განლაგებულია $\sim 3580\text{-}3600 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში და რამდენადმე ამაღლებულია სხვა კომპლექსნაერთების ანალოგიურ რხევათა სიხშირეებთან შედარებით, რაც დიდი ალბათობით გაპირობებულია საკმაოდ რთული და დიდი მოცულობის ნაქსოჯინის მოლეკულათა სტერიული წინაღობებით წყალბადურ ბმებთან კავშირში და, რა თქმა უნდა, მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელის ბუნებით. ხოლო რაც შეეხება ქლორიდულ-იონებს, მათი შესაბამისი რხევათა სიხშირეები დაფიქსირებულია რხევის სიხშირეთა გრძელტალღიან უბანში $\sim 200\text{-}270 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში, რაც დასტურია იმისა, რომ ისინი კოორდინირებულია მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძის ატომებთან.



ნახაზი 26. $[\text{CuCl}_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის კომპლექსნაერთი $[\text{CuSO}_4(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_3](\text{H}_2\text{O})_2$. როგორც სამეცნიერო ლიტერატურიდანაა ცნობილი სპილენძ (II) -ის საკოორდინაციო რიცხვი ხშირ შემთხვევაში 4 ან 6 ტოლია (რაც ჩვენს ერთ-ერთ რეაგენტ შაბიამანშიც ხორციელდება): წყლის ერთი მოლეკულა (H_2O), სულფატის ანიონი (SO_4^{2-}) და ტეტრაჟევასპილენძის კატიონი, $\text{Cu}(\text{OH}_2)^{2+}$ რომლებსაც ერთმანეთთან წყალბადური ბმები აკავშირებს - $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4 \cdot \text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$.

შევეცადეთ გამოგვევლია რა ცვლილებას განიცდიდა სპილენძ(II) - ის სულფატური პენტაჰიდრატი (შაბიამანი) ორგანულ ლიგანდ ნაქსოჯინთან სინთეზის გზით მიღებულ კომპლექსნაერთში (ნახ. 27).



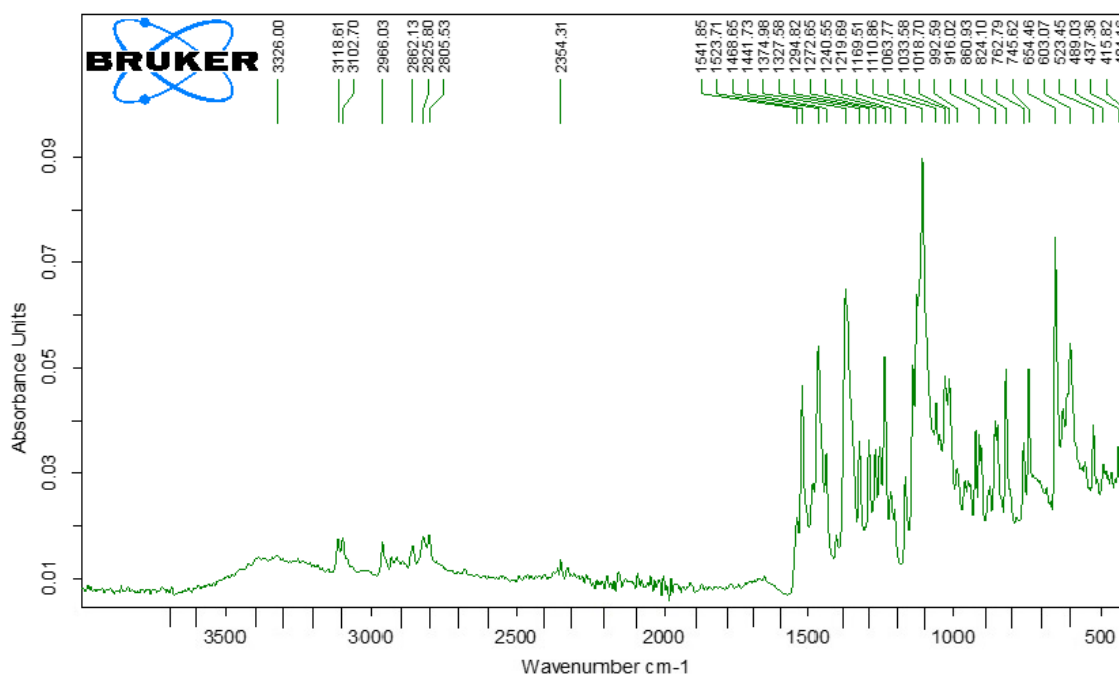
ნახაზი 27. $[\text{Cu}(\text{H}_2\text{O})_4\text{SO}_4] \cdot \text{H}_2\text{O}$ გრაფიკული ფორმულა

იწ სპექტროსკოპული მეთოდით დადგენილია, რომ ინტენსიური რხევითი სიხშირეები თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ნაქსოჯინის შემთხვევაში განთავსებულია დაახლოებით $\sim 1523, 1524 \text{ სმ}^{-1}$ უბნებში მაშინ, როდესაც ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის სულფატურ პენტაჰიდრატის კომპლექსნაერთში რხევათა სიხშირეების ეს მნიშვნელობები $\sim 15-20 \text{ სმ}^{-1}$ -ით გადაცვლებულია მაღალსიხშირიან უბნებში ($\sim 1541-1542 \text{ სმ}^{-1}$) და ისინი უნდა მიეკუთვნონ ორგანული ლიგანდის -ნაქსოჯინის მოლეკულის იმიდაზოლური ბირთვის ერთ-ერთ ჰეტეროციკლური აზოტის (N4) ატომს, რადგან მეორე ჰეტეროციკლური აზოტის (N1) ატომი, გარდა თავისი არადონორულობისა, დიდი სტერიული წინააღობების გამოც (მეზობლად დიდი მოცულობის ფენილის ბირთვები, არახელსაყრელი ადგილმდებარეობა, სხვა პოტენციურ მზადყოფნაში არსებული დონორული ატომები და ა. შ) არ მონაწილეობს კომპლექსწარმომქნელ სპილენძის ატომთან დონორულ-აქცეპტორულ კოორდინაციაში, რაც შეეხება წყლის მოლეკულებს იწ სპექტრის მოკლეტალღიან უბანში დაფიქსირებულია ორიოდ ინტენსიური რხევის სიხშირე ($\sim 3330-$

3340 სმ⁻¹), რომლებიც დიდი ალბათობით შეიძლება ჩაითვალოს ν (H₂O) შესაბამის რხევის სიხშირეებად და წყლის იმ მოლეკულებად, რომლებიც სპილენძის ატომთან არიან კოორდინაციაში და განლაგებულია კომპლექსის შიდა სფეროში. დანარჩენი წყლის მოლეკულები, როგორც ჩანს კომპლექსის გარე სფეროშია, რადგან იწ სპექტრის ~3350-3390სმ⁻¹ ფარგლებში არ ფიქსირდება მათი შესაბამისი რხევათა სიხშირეები (ნახ.28).

საყოველთაოდ ცნობილია, რომ ამიდშემცველ კომპლექსურ ნაერთებში ჰალოგენიდ- და სულფატ- იონები ხშირად გამოიდევენ კომპლექსის გარე სფეროში, ხოლო პსევდოჰალოგენიდური ჯგუფები თითქმის ყოველთვის არის შიდასფერული და ხშირად წარმოქმნის ამიდურ ხიდებს. ჩვენ შემთხვევაში სულფატური ჯგუფის ოთხივე ჟანგბადატომი, რომლებიც არ განსხვავდება ერთმანეთისაგან დონორული თვისებებით, თუ არა სტერიული ეფექტებით, რომლებიც ვლინდება ცალკეულ შემთხვევაში - თუ როგორ იქნებიან ორიენტირებული ცენტრალური კომპლექსწარმომქმნელი მეტალის - სპილენძის ატომის მიმართ, რომ აღარაფერი ვთქვათ საკუთარი ჯგუფის

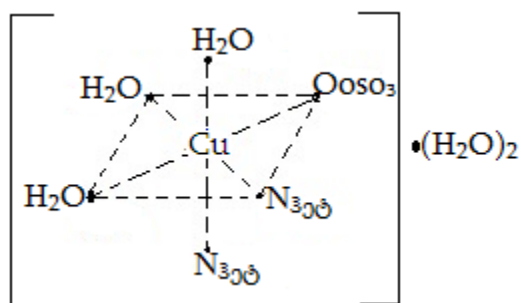
(სულფატური ჯგუფი $\left[\begin{array}{c} \text{O} \\ || \\ \text{O}=\text{S}=\text{O} \\ || \\ \text{O} \end{array} \right]^{2-}$ თავად გვევლინება „კომპლექსის“ ფორმით) კომპლექსურობაზე.



ნახაზი 28. $[\text{CuSO}_4(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_3](\text{H}_2\text{O})_2$ შთანთქმის იწ სპექტრი ($500\text{-}3500\text{სმ}^{-1}$)

შთანთქმის იწ სპექტრის გრძელტალღიან $\sim 480\text{-}530\text{ სმ}^{-1}$ დიაპაზონში დაფიქსირებულია რხევათა სიხშირეები, რომლებიც შემცირებულია $\sim 15\text{-}20\text{ სმ}^{-1}$ ანალოგიურ მეტალ-კომპლექსნაერთებში (შესაბამის მარილთა იწ სპექტრებთან შედარებით). იქმნება დიდი ალბათობა იმის შესახებ, რომ ისინი შეიძლება მიეკუთვნონ სულფატური ჯგუფის ოთხიდან რომელიმე ჟანგბადატომს (რომლის გარკვევას ვაპირებთ მომავალში რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის მეთოდით).

ზემოაღნიშნულ კვლევათა შედეგად შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა, რომ სპილენძის კომპლექსწარმომქმნელი ატომის გარშემო რეალიზებულია ოქტაედრი-ნაქსოჯინის ორი მოლეკულის ჰეტეროციკლის აზოტთა ორი ატომით (ნახ.29), სულფატური ჯგუფის ჟანგბადის ოთხიდან ერთი ატომით და წყლის ხუთი მოლეკულიდან სამი ჟანგბადის ატომით (წყლის ორი მოლეკულა რჩება კომპლექსის გარე საკოორდინაციო სფეროში) - ორგანული ლიგანდის ნაქსოჯინისა და სულფატოჯგუფის მონოდენტურობის შემთხვევაში.



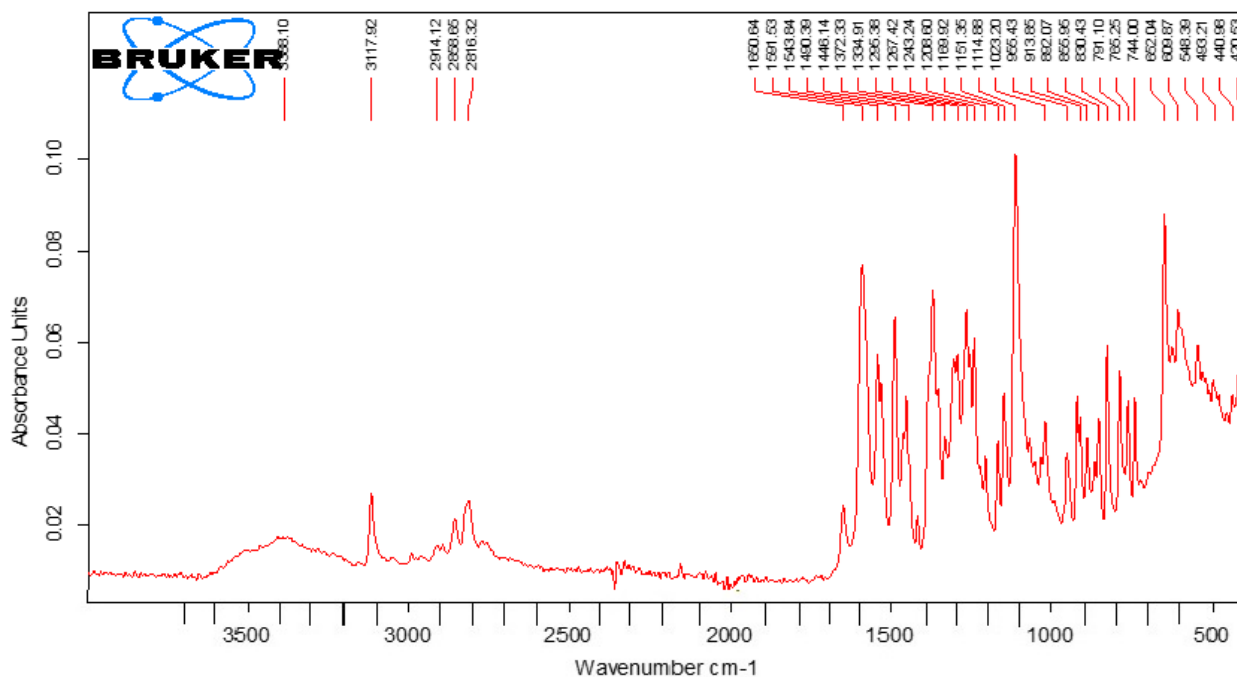
ნახაზი 29. $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის სულფატური პენტაჰიდრატის კომპლექსნაერთში მოსალოდნელია ძლიერი წყალბადური ბმების არსებობა, რომლის საწინდარია მის შედგენილობაში რამდენიმე დონორული თვისებების მქონე (აზოტი, ჟანგბადი და სხვ.) ატომის არსებობა და მათი ხელსაყრელი განლაგება სტრუქტურაში. ამის აღნიშვნის წინაპირობას იძლევა თუნდაც ის, რაც კომპლექსნაერთში ხორციელდება - წყლის მოლეკულების სულფატური და სპილენძის ტეტრაედრული ჯგუფების ძლიერი კორელაცია წყალბადური ბმების ძლიერი ქსელის არსებობის შემთხვევაში.

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთში $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ კომპლექსწარმომქმნელი მეტალის (სპილენძი) ატომთან ორგანული ლიგანდის (ნაქსოჯინი) და აციდოლიგანდის (ფორმიატი) კოორდინირების ხერხებისა და შესაბამისი კომპლექსნაერთის მოლეკულური აღნაგობის დასადგენად ჩატარდა შთანთქმის იწსპექტროსკოპული კვლევა.

სპილენძის ფორმიატული კომპლექსნაერთის შთანთქმის იწსპექტრიდან ირკვევა, რომ ნაქსოჯინის იმიდაზოლური მოლეკულის დონორული ჰეტეროციკლის აზოტის შთანთქმის ინტენსიური ზოლი დაფიქსირებულია $\sim 1591\text{სმ}^{-1}$ უბანში, რომელიც თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ორგანული ლიგანდის (ნაქსოჯინი) რხევის სიხშირესთან შედარებით გადანაცვლებულია მაღალსიხშირიან უბანში $\sim 17\text{სმ}^{-1}$, რაც დასტურია იმისა, რომ ადგილი აქვს ნაქსოჯინის მოლეკულის კოორდინირებას მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან (სპილენძი) ჰეტეროციკლური აზოტის ატომით დონორულ-აქცეპტორული ბმის რეალიზებას ($\text{Cu} \leftarrow \text{N}_{3\text{C}_6\text{H}_4} = \text{C} =$) - ნაქსოჯინი გვევლინება

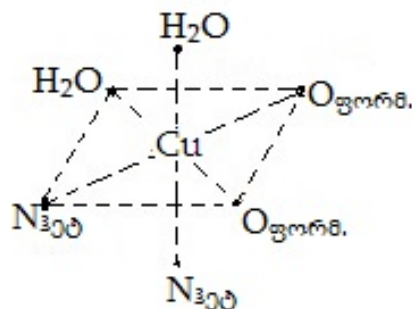
მონოდენტური ლიგანდის როლში. იწ-სპექტრის მაღალსიხშირიან დიაპაზონში ($\sim 3200-3400\text{სმ}^{-1}$) არსებული რხევის სიხშირე $\nu(\text{OH})$, დიდი ალბათობით, მიეკუთვნება წყლის ორ მოლეკულას და მიაწინებს მათ კოორდინაციაზე სპილენძთან (ნახ.30).



ნახაზი 30. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწსპექტრი

შთანთქმის იწსპექტრის გრძელტალღიან უბანში გამოვლენილია ინტენსიური ზოლი $\sim 421-441\text{სმ}^{-1}$ ფარგლებში, რაც დიდი ალბათობით შეიძლება ჩაითვალოს ჟანგბადის ატომით სპილენძის ატომთან აციდო ლიგანდ ფორმიატო ჯგუფის კოორდინირების ნიშნად და აშკარად მიაწინებს ფორმიატის მონოდენტურობაზე.

ამრიგად, ჩვენ მიერ მიზანმიმართულად ჩატარებული კვლევების შედეგად ცალსახად და დიდი ალბათობით დასტურდება, რომ კომპლექსწარმომქმნელი სპილენძ(II)-ის ატომის გარშემო წარმოიქმნება ოქტაედრული კოორდინაცია -ორი მონოდენტური ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის ჰეტერციკლის აზოტის ორი ატომით, ორი მონოდენტური აციდოჯგუფის - ფორმიატის განაპირა ჟანგბადის ორი ატომით და ორი მოლეკულა წყლის ჟანგბადის ორი ატომის მეშვეობით (ნახ. 31).



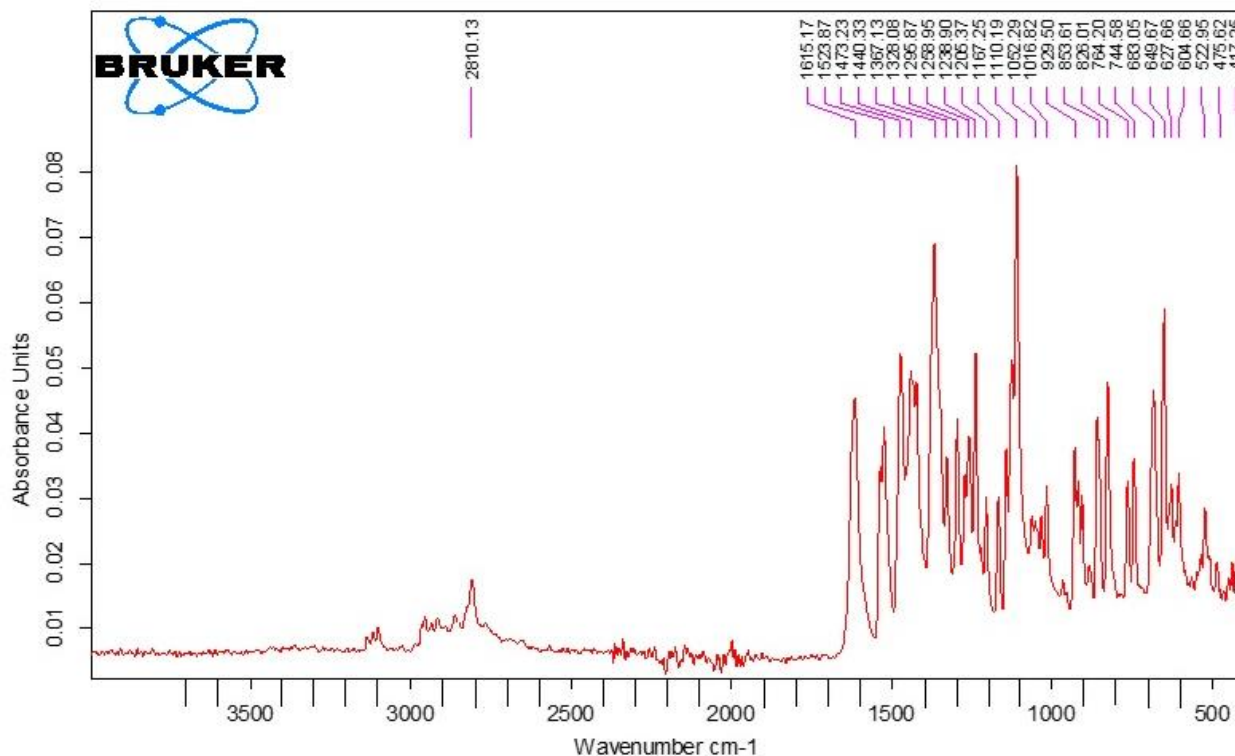
ნახაზი 31. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ ოქტაედრული აღნაგობა

ნაქსოჯინთან სპილენძ(II)-ის აცეტატური დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ (ნახ.32) სტრუქტურაში მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონთან ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის მოლეკულა კოორდინირებულია დონორული ჰეტეროციკლური აზოტის ატომით, რადგან მისი შესაბამისი რხევის სიხშირის ზოლი დაფიქსირებულია $\sim 1615 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში და გაზრდილია $\sim 15\text{-}25 \text{ სმ}^{-1}$ თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ნაქსოჯინის მოლეკულის შესაბამისი რხევის სიხშირესთან ($\sim 1595 \text{ სმ}^{-1}$) შედარებით; ხოლო ნაქსოჯინის მოლეკულის არადონორული მეორე აზოტის ატომი მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელ სპილენძ(II)-ის იონთან კოორდინაციაში არ შედის სტერიული წინაღობების გამო და მისი შესაბამისი შთანთქმის ზოლის სიხშირე ($\sim 1590 \text{ სმ}^{-1}$) არ იცვლება, რაც დადასტურებაა იმისა, რომ იგი არ შედის შესაბამის მეტალთან დონორულ-აქცეპტორულ კოორდინაციაში.

კომპლექსის იწ-სპექტრის $\sim 3000\text{-}4500 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში ვერ იქნა ნაპოვნი $\nu(\text{H}_2\text{O})$ ინტენსიური შთანთქმის ზოლები, რომლებიც გარკვეული ალბათობით შეიძლება ჩაგვეთვალო წყლის შესაბამისი რხევათა სიხშირეებად, მაგრამ ეს არ გამორიცხავს კომპლექსნაერთში შიდასფერული წყლის მოლეკულების არსებობას, რაც შეიძლება დაკავშირებული იყოს სტერეოქიმიურ ცვლილებებთან.

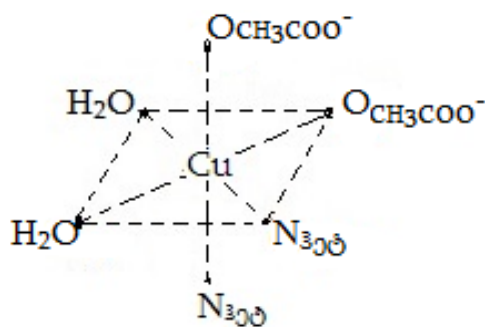
რაც შეეხება აციდო ლიგანდ აცეტატოჯგუფებს (CH_3COO^-) მათი შესაბამისი რხევათა სიხშირეები გამოვლენილია იწ-სპექტრის რხევის სიხშირე-

თა გრძელტალღიან უბანში ($\sim 417\text{--}475\text{ სმ}^{-1}$), რაც დასტურია იმისა, რომ, აცეტატო-ჯგუფები მონოდენტურია და სპილენძის ატომთან დაკავშირებულია განაპირა ჟანგბად - ატომებით.



ნახაზი 32. $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი

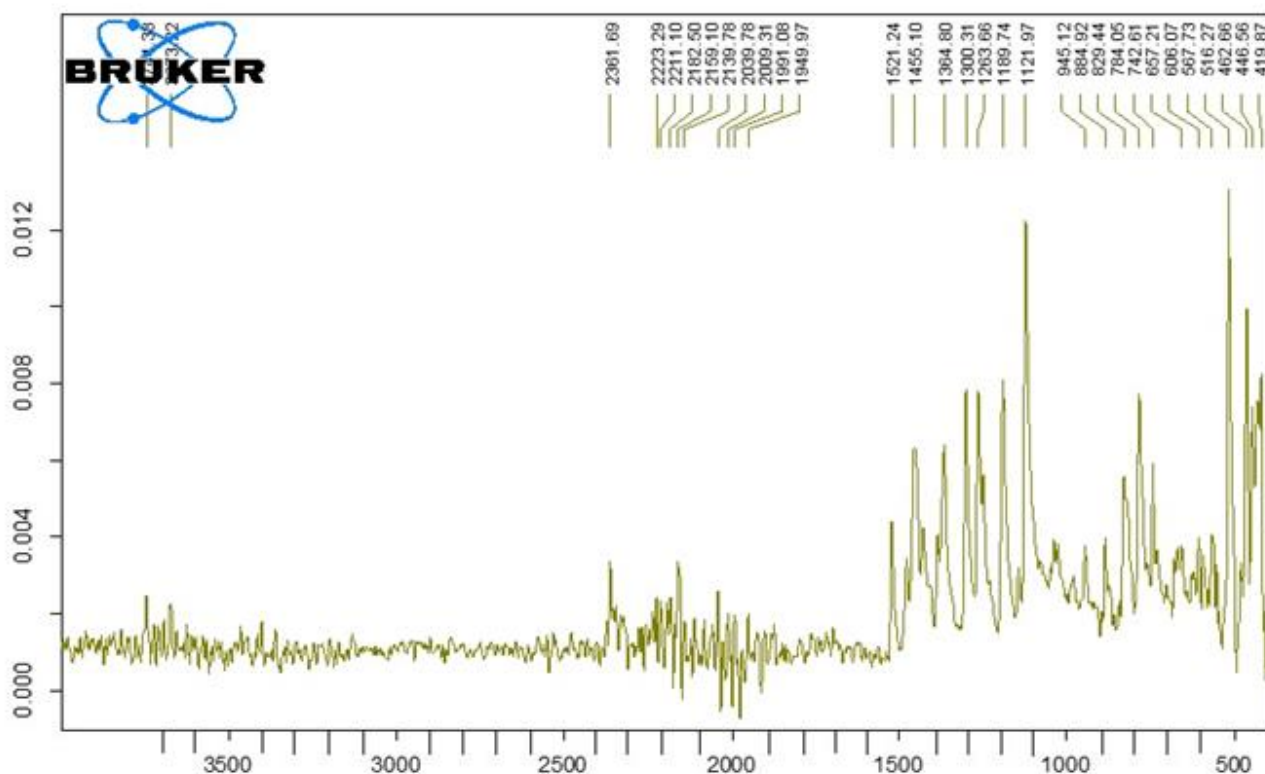
აღსანიშნავია ასეთი გრძელი ინტერვალი, რომელიც ალბათ გამოწვეულია წყლის მოლეკულების მიერ წარმოქმნილი შიდამოლეკულური წყალბადური ბმებით აცეტატო ჯგუფის არაკოორდინირებულ ჟანგბადატომებთან. წყლის მოლეკულათა მეორე წყალბადატომები ასევე წარმოქმნიან მტკიცე მოლეკულათშორის წყალბადურ ბმებს აცეტატ-ანიონის არაკოორდინაციაში მონაწილე ჟანგბად-ატომებთან (ნახ.33) ეს წყალბადური ბმები მოლეკულებს აერთიანებენ სამგანზომილებიან კარკასში.



ნახაზი 33. $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2(\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2(\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ზემოაღნიშნულის საფუძველზე, ჩატარებული კვლევების შედეგების მიხედვით შეიძლება ითქვას, რომ სპილენძის კომპლექსნაერთის იწ-სპექტრში მეტალ - კომპლექსწარმოქმნელის გარშემო რეალიზებულია ოქტაედრული აღნაგობა - მონოდენტური ნაქსოჯინის ორი მოლეკულის ჰეტეროციკლის აზოტის ორი ატომით, მონოდენტური აციდო - ლიგანდ აცეტატის ორი მოლეკულის ორი განაპირა ჟანგბად ატომით და წყლის ორი მოლეკულის ორი ჟანგბადის ორი ატომის მეშვეობით.

ჩვენ მიერ სინთეზირებულ ორგანულ ლიგანდ ტინიდაზოლთან ზოგიერთი ბიომეტალის კომპლექსნაერთის იწ-სპექტროსკოპული მეთოდით კვლევას და მონაცემების ანალიზით ვადასტურებთ, რომ ზემოაღნიშნული კომპლექსის შთანთქმის იწ სპექტრში მკაფიოდ დაფიქსირებულია ინტენსიური ზოლი $\sim 1616 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში (ნახ.34), რომელიც დიდი ალბათობით შეიძლება მიეკუთვნოს ტინიდაზოლის ჰეტეროციკლის აზოტის ატომის სავალენტო რხევის სიხშირეს და თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ტინიდაზოლის ჰეტეროციკლური აზოტის შესაბამის რხევის სიხშირესთან შედარებით გაზრდილია $\sim 15\text{-}20 \text{ სმ}^{-1}$ -ით, რაც სრულ შებამისობასია ლიტერატურაში არსებულ მონაცემებთან.

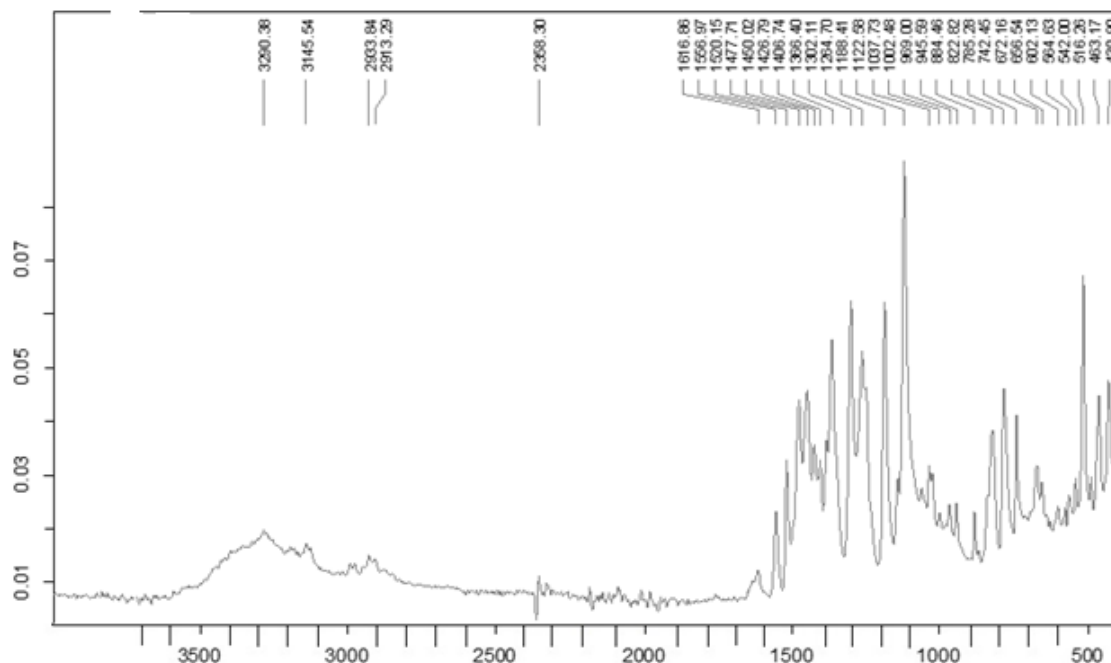


ნახაზი 34. ორგანული ლიგანდის ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ შთანთქმის
იწ- სპექტრი ($500-3500\text{სმ}^{-1}$)

ჩვენს მიერ სინთეზირებულ მეტალთა კოორდინაციული ნაერთების აღნაგობის, აგრეთვე აციდო- და ორგანული ლიგანდების მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელებთან კოორდინირების ხერხების დადგენის მიზნით შესწავლილი ინფრაწითელი სპექტრების მონაცემები სრულ შესაბამისობაშია ანალოგიურ კომპლექსნაერთთა რენტგენოსტრუქტურული კვლევის მონაცემებთან.

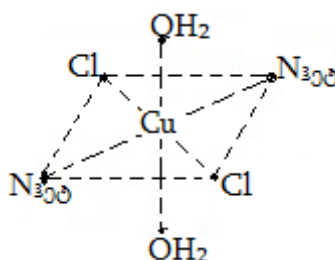
ტინიდაზოლთან ბიოაქტიური კომპლექსნაერთის (ნახ.35) $CuCl_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2$ შთანთქმის იწ-სპექტრში მკაფიოდ დაფიქსირებულია ინტენსიური ზოლი ($\sim 1616\text{სმ}^{-1}$), რომელიც უდავოდ მიეკუთვნება ორგანული ლიგანდის - ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ იმიდაზოლის ჰეტეროციკლის აზოტის ატომის სავალენტო რხევის სიხშირის და თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ტინიდაზოლის ჰეტეროციკლური აზოტის შესაბამისი რხევის სიხშირესთან ($\sim 1521\text{სმ}^{-1}$) შედარებით საკმაოდ გაზრდილია ($\sim 95\text{სმ}^{-1}$ -ით), რაც თავისთავად იშვიათობაა და იგი შეიძლება გამოწვეული იყოს ქიმიურად

შეკავშირებულ ატომბირთვებს შორის ბმების სიგრძეთა გადიდებით და აგრეთვე ზოგიერთი სტერეოქიმიური თავისებურებებით - კონკრეტულად ჯერადი ბმების ორდინალურ ბმებზე გადასვლით.



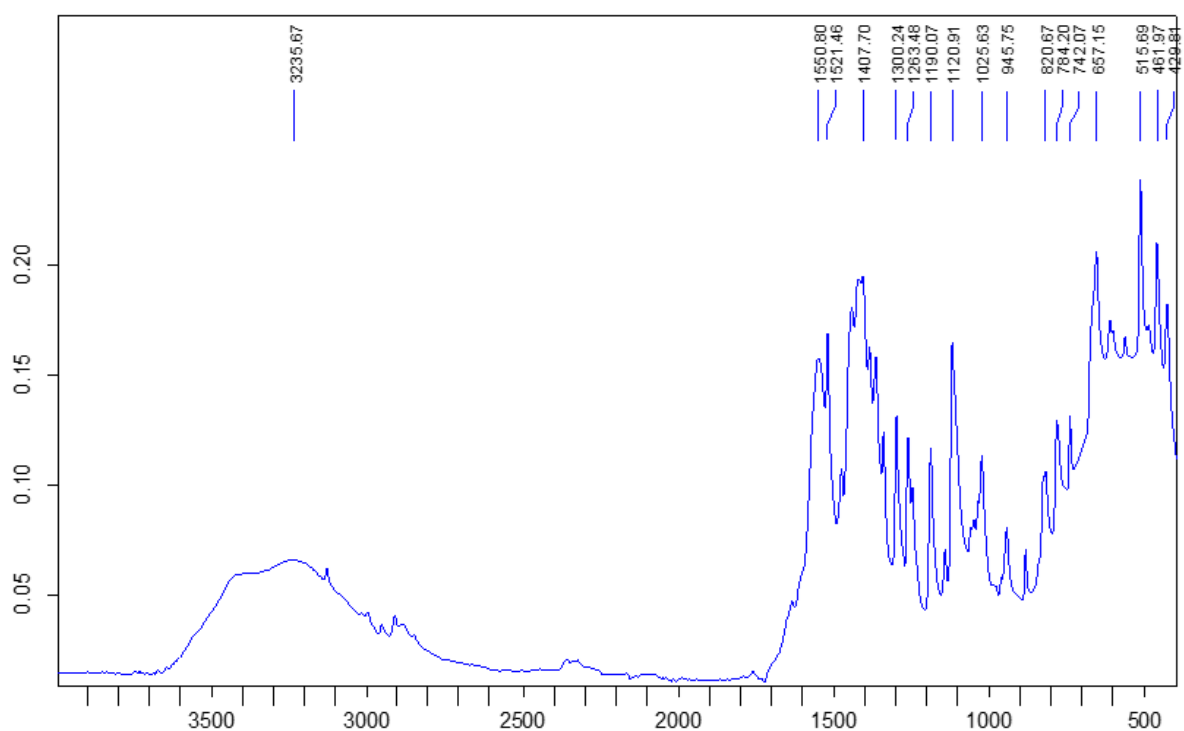
ნახაზი 35. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტრი

ამავე კომპლექსნაერთის იწ სპექტრში დაფიქსირებულია ორი საკმაოდ ინტენსიური შთანთქმის ზოლი ~ 3146 და 3388 cm^{-1} უბნებში, რომლებიც მიაწინებენ $\nu(\text{H}_2\text{O})$ შესაბამის რხევათა სიხშირეების მნიშვნელობათა შემცირებასა და ნაერთში შიდასფერული მოლეკულების არსებობაზე. $\nu(\text{H}_2\text{O})$ დაბლება წყლის მოლეკულათა რიცხვის შემცირებასთან ერთად კომპლექსის შედგენილობაში, დაკავშირებულია სტერეოქიმიურ ცვლილებასთან. ამასთან ერთად, ზემოაღნიშნული რხევათა სიხშირეები დასტურია იმისა, რომ ისინი კოორდინირებულია მეტალ-კომპლექსწარმოქმნელთან და განთავსებულია კომპლექსის შიდა სფეროში (ნახ. 36).



ნახაზი 36. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ტინიდაზოლთან ნიკელ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ-სპექტროგრაფი (ნახ.37) დაფიქსირებულია შთანთქმის ინტენსიური ზოლი $\sim 1550,8\text{სმ}^{-1}$ უბანში, რომელიც დიდი ალბათობით, შეიძლება მიჩნეულ იქნას ორგანული ლიგანდის - ტინიდაზოლის ჰეტეროციკლის აზოტის ატომის სავალენტო რხევის სიხშირედ. ზემოხსენებული იწ რხევის სიხშირე ასევე დიდი ალბათობით შეიძლება მიჩნეულ იქნას იმ დონორულ-აქცეპტორულ ბმად, რომლითაც იგი დაკავშირებულია (კოორდინირებულია) კომპლექსწარმომქმნელ ნიკელ(II)-ის იონთან (კოორდინირებულ და არაკოორდინირებულ აზოტის ატომთაშორის შთანთქმის იწ რხევათა სიხშირებს შორის სხვაობა შეადგენს $\sim 29,3\text{სმ}^{-1}$, რაც თავისთავად რამდენადმე გადიდებულია, მაგრამ თავისთავად მაინც დასაშვებ ფარგლებშია და თანხვედრაშია სამეცნიერო ლიტერატურაში არსებულ მონაცებებთან). ზემოაღნიშნული დასტურია იმისა, რომ ორგანული ლიგანდი დაკავშირებულია მეტალკომპლექსწარმომქმნელთან მხოლოდ ჰეტეროციკლის აზოტის ატომის მეშვეობით და გვევლინება მონოდენტანტული ლიგანდის როლში.



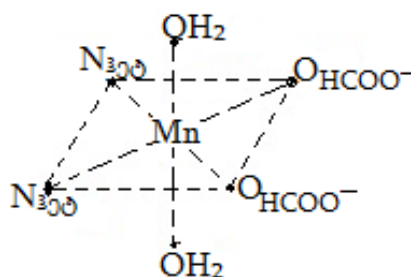
ნახაზი 37. $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრი

რაც შეეხება კომპლექსნაერთის აციდოლიგანდ ფორმიატ (HCOO^-) - იონს მასაც ჰქონდა არჩევანი გამოსულიყო მონო-ან ბიდენტატური ლიგანდის როლში მასში არსებული ჟანგბადის ორი ატომის ხარჯზე, რასაც ასევე ხელს უწყობდა კომპლექსნაერთის სტერეოქიმიური თავისებურებანი.

ტინიდაზოლის ნიკელის ფორმიატული ბიოკომპლექსნაერთის შთანთქმის იწ სპექტრის დაბალსიხშირიან უბანში დაფიქსირებულია ინტენსიური ზოლები $\sim 420\text{-}461\text{ სმ}^{-1}$, რაც აშკარად მიაჩნებოდა იმის შესახებ, რომ დაფიქსირებულია შთანთქმის სიხშირეები, დიდი ალბათობით შეიძლება მიეკუთვნოს ფორმიატის ჟანგბადატომს და განხორციელდეს კოორდინაცია მეტალატომსა და ჟანგბადატომს შორის აციდოლიგანდის მონოდენტურობის პირობებში.

ზემოთქმულიდან გამომდინარე ინფრაწითელი სპექტრებით მიღებული შედეგების საფუძველზე შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა იმის შესახებ, რომ ტინიდაზოლი - კომპლექსნაერთის ორგანული ლიგანდი კოორდინირებულია ნიკელ(II)-ის ატომთან, იმიდაზოლის ბირთვის ჰეტეროციკლის აზოტის ერთ-ერთი ატომით, ხოლო მეორე აზოტის ატომი არ ღებულობს მონაწილეობას მეტალთან კოორდინაციაში. ასევე არ არის ნიკელ(II)-ის ატომთან, კოორდინაციაში ამიდური ჯგუფის ჟანგბადისა და აზოტის ატომები, თუმცა მათ ამისათვის დიდი პოტენციური შესაძლებლობა აქვთ მაგრამ, როგორც ჩანს ამ კონკრეტულ შემთხვევაში გადაწყვეტ როლს ასრულებს შიგამოლეკულების აღნაგობა და მათი ატომთაშორისი ბმების ურთიერთგარდაქმნა.

ტინიდაზოლთან ნიკელ(II)-ის ფორმიატული კომპლექსის ინფრაწითელ სპექტრში ნაპოვანია ინტენსიური ზოლები $\nu(\text{H}_2\text{O})$ დაახლოებით $3150\text{-}3200\text{ სმ}^{-1}$ ფარგლებში, რაც საშუალებას იძლევა ვივარაუდოთ შიდასფერული წყლის მოლეკულების არსებობა ამ კომპლექსნაერთში. სავარაუდოა ისიც, რომ აღნიშნული წყლის მოლეკულების წარმოქმნაში, რაც ხელს უწყობს შესაბამის კომპლექსნაერთის სტრუქტურის მდგრადობის ამაღლებას (ნახ. 38).



ნახაზი 38. $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

ჩვენს მიერ შესწავლილია ორგანულ ლიგანდ ტინიდაზოლთან მანგანუმ(II)-ის ფორმიატული დიჰიდრატის $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთის შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრებით (ნახ.39) შესაბამის მოლეკულათა სააღბათო აღნაგობა და ამასთან ერთად გამოვთქვით ვარაუდი, როგორც ორგანული, ასევე აციდოლიგანდის ბიდენტურობის შესახებ - ჰეტეროციკლის აზოტთა და კარბონმჟავათა ჟანგბადატომებით - მეტალკომპლექსწარმომქმნელ ატომთან (მანგანუმში).

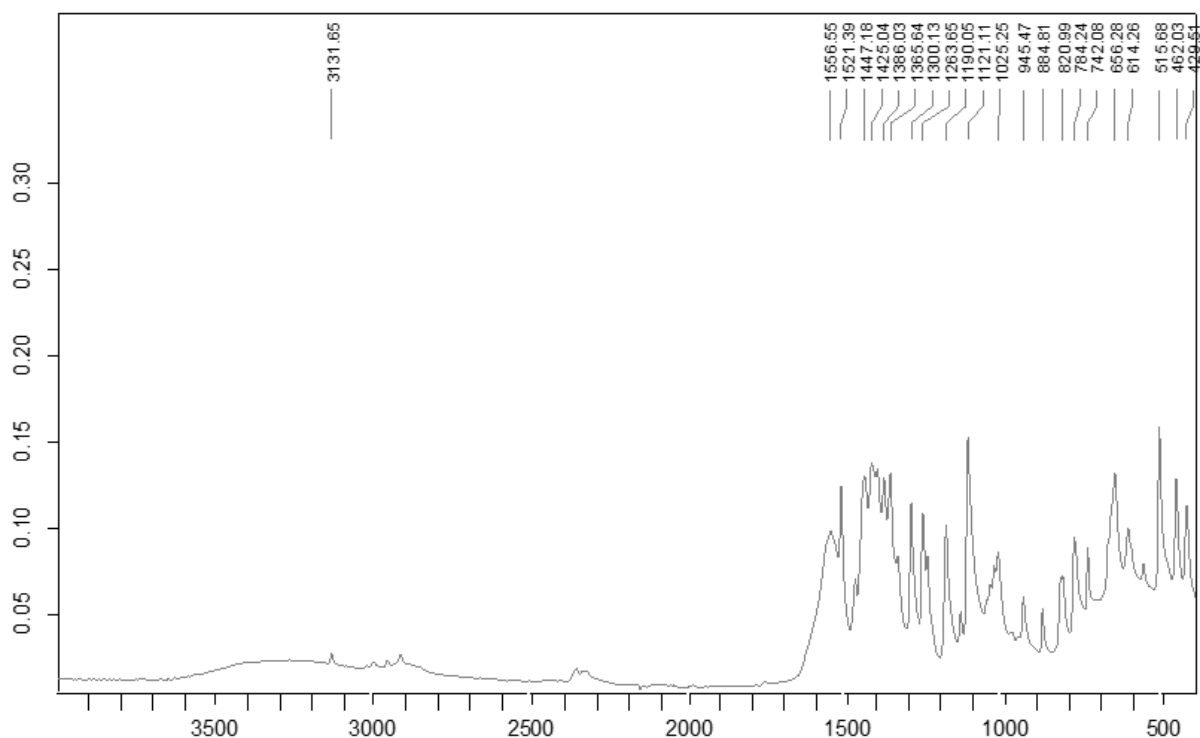
ჩატარებული კვლევის შედეგად აღმოჩნდა, რომ შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრის დაახლოებით $\sim 1556, 55 \text{ სმ}^{-1}$ უბანში საკმაოდ ინტენსიური ზოლი, დიდი ალბათობით, შესაბამისობაში იყო იმიდაზოლის ბირთვის ჰეტეროატომ აზოტის ერთ-ერთ ატომთან და კოორდინირებდა მეტალკომპლექსწარმომქმნელთან (რაც დადასტურდა კიდევ შემდგომი კვლევებით).

აღნიშნული უბნის სავალენტო რხევის სიხშირე ($\sim 1556 \text{ სმ}^{-1}$) თავისუფალ (არაკოორდინირებულ) ჰეტეროციკლ აზოტის რხევის სიხშირესთან შედარებით ($\sim 1521 \text{ სმ}^{-1}$) გადანაცვლებულია მაღალსიხშირიან უბანში $\sim 35 \text{ სმ}^{-1}$, რაც დასტურია იმისა, რომ ხორციელდება დონორულ-აქცეპტორული ტიპის ბმა: $\text{Mn} \leftarrow \text{N}_{3\text{O}3\text{S}}(\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})$.

ორგანული ლიგანდის -ტინიდაზოლის დარჩენილი დონორული უნარის მქონე ატომები (ჟანგბადი, აზოტი, გოგირდი და სხვ.) არ იცვლიან შესაბამის რხევათა სიხშირეებსა და დიდ ალბათობით არ მონაწილეობენ მეტალ-კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინაციის წარმოქმნაში. ზემოაღნიშ-

ნულის საფუძველზე შეიძლება ითქვას, რომ ტინიდაზოლი ყველა ჩვენ შემთხვევაში მონოდენტურია და კოორდინირებულია მანგანუმის ატომთან მხოლოდ ჰეტეროციკლის აზოტის ერთი ატომით.

მოცემული ბიოკომპლექსნაერთის ინფრაწითელი სპექტრების მონაცემების მიხედვით აციდოლიგანდ ფორმატის (HCOO^-) სავალენტო რხევათა სიხშირეები განთავსებულია დაახლოებით $\sim 400\text{-}500\text{სმ}^{-1}$ უბანში და ეს სადავოს არ წარმოადგენს, მაგრამ სირთულეს ქმნის ის, რომ ფორმატო - ჯგუფი ჟანგბადის ორი ატომიდან რომელი მათგანი იღებს მონაწილეობას მანგანუმთან კოორდინაციაში (ამ საკითხის გადაწყვეტის პირდაპირი საშუალება არის შესაბამისი ნაერთების კვლევა რენტგენოსტრუქტურული ანალიზის მეტოდი).

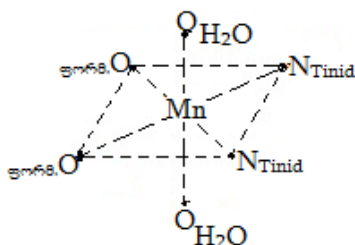


ნახაზი 39. $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ შთანთქმის იწ სპექტრი

ჩვენ სინამდვილეში შთანთქმის იწ-სპექტრების მიხედვით, მეტნაკლები ალბათობით, ვადასტურებთ ფორმატო- ჯგუფების მონოდენტურობას ჟანგბადის ორიდან ერთ-ერთი ატომის შემვეობით (სხვა შემთხვევაში, ანუ ფორმატო-ჯგუფის ბიდენტობის დაშვებისას - მეტალთან კოორდინა-

ცია ორივე ჟანგბადატომისას წარმოქმნილი 4-წევრიანი მეტალოციკლი არამდგრადია და მისი განხორციელება უკიდურესად საეჭვოა. შთანთქმის იწსპექტრების მონაცემებით ირკვევა, რომ მაღალსიხშირიან უბანში დაახლოებით $\sim 3200-3500\text{cm}^{-1}$ ფარგლებში თავს იჩენს $\nu(\text{H}_2\text{O})$ საკმაოდ ინტენსიური შთანთქმის ზოლები, რომელთა მიკუთვნება შეიძლება კომპლექსნაერთის შიდასფერული წყლის მოლეკულებისათვის.

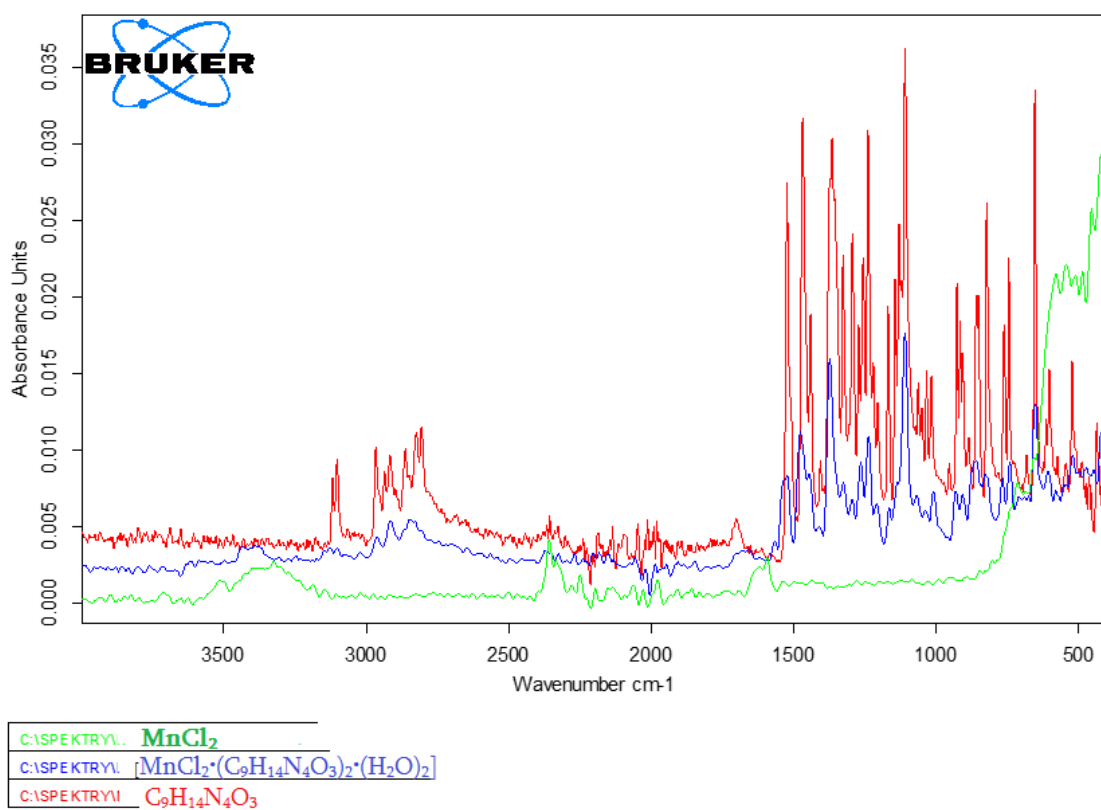
დიდი ალბათობით შეიძლება ითქვას, რომ იქმნება მძლავრი წყალბადური ბმების სისტემა, რომლებიც კომპლექსის მოლეკულებს გააერთიანებს მტკიცე სამგანზომილებიან კარკასად, სადაც ყველა განაპირა ფორმიატული ჟანგბადის ატომი მონაწილეობს წყალბადური ბმების წარმოქმნაში.



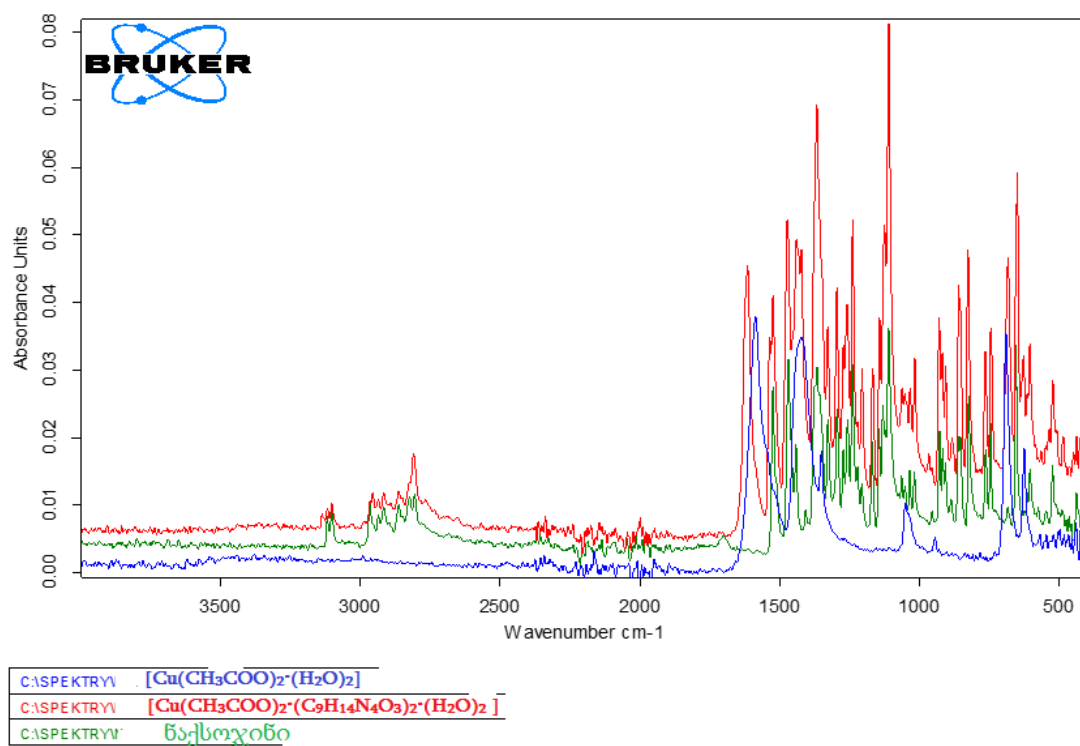
ნახაზი 40. $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ოქტაედრული აღნაგობა

მანგანუმ(II) -ის ატომის გარშემო, დიდი ალბათობით ხორციელდება ოქტაედრული კოორდინაცია - ორგანული ლიგანდის ტინიდაზოლის აზოტის ორი ატომით, ფორმიატო - ჯგუფების ჟანგბადის თითო ატომით და წყლის ორი მოლეკულის ჟანგბადის ორი ატომით (ნახ. 40).

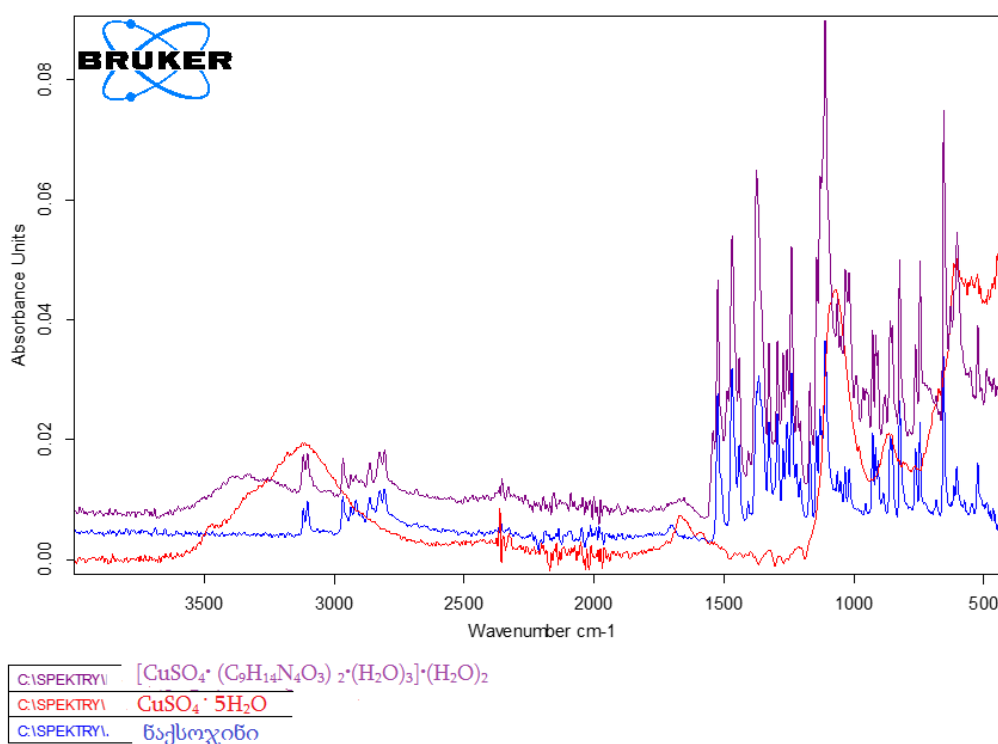
აღებული მეტალების – Mn(II) ; Ni(II) ; Cu(II) და Zn -ის მარილთა ქლორიდების, ბრომიდების, ფორმიატების, აცეტატების, როდანიდების, ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლის და მიღებული ბიოკომპლექსნაერთების სპექტრები გაერთიანებული სახით წარმოდგენილია შემდეგი ნახაზების სახით:



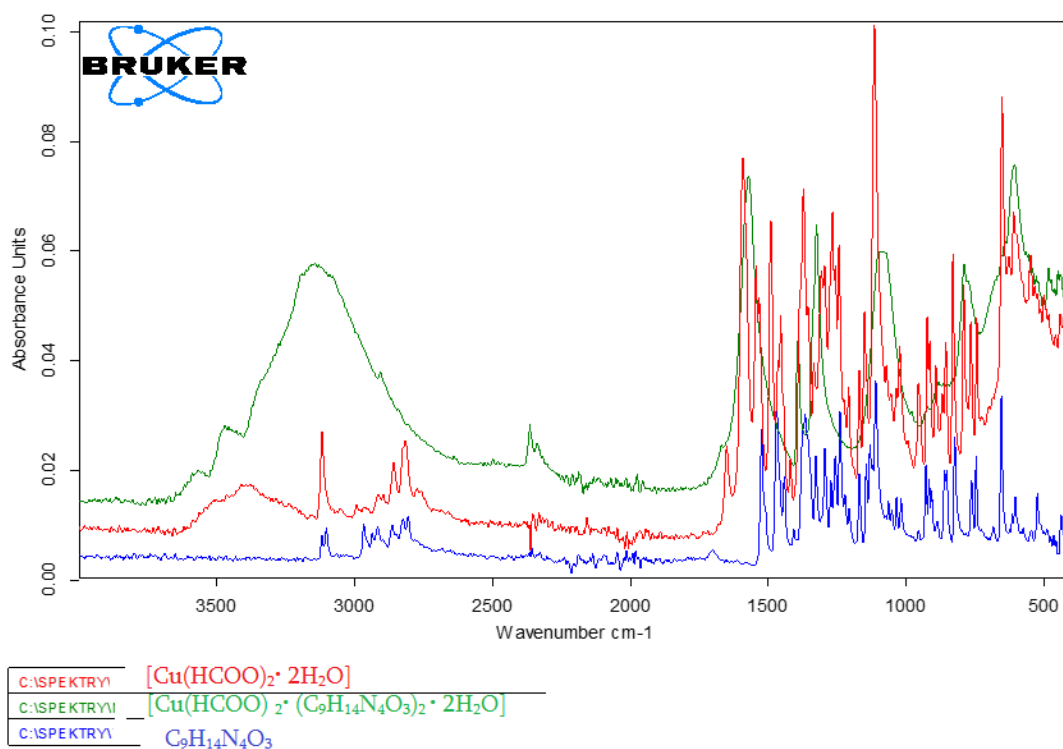
ნახაზი 41. $[\text{MnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$, $\text{MnCl}_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი ($500\text{--}3500\text{ სმ}^{-1}$)



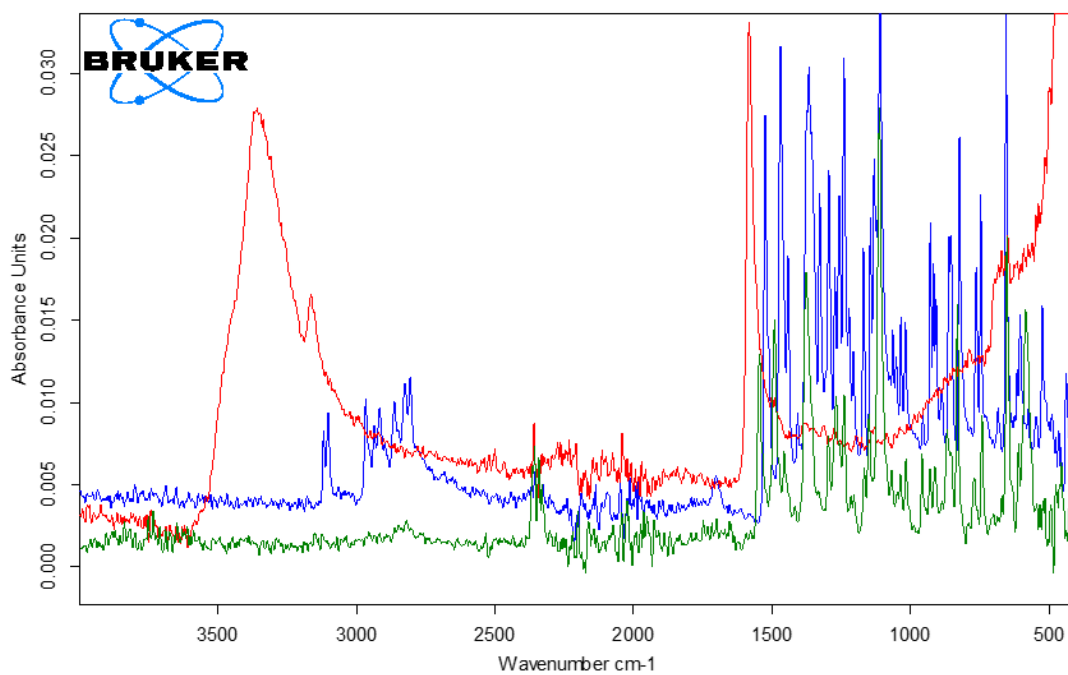
ნახაზი 42. $[\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$, $\text{Cu}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)



ნახაზი 43. $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$, $[\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}]$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)

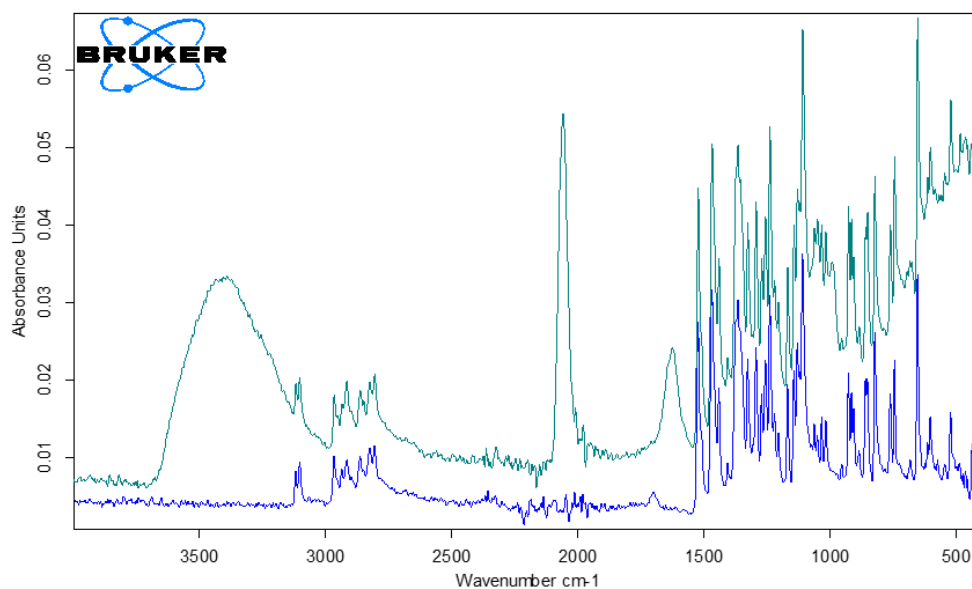


ნახაზი 44. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$, $\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)



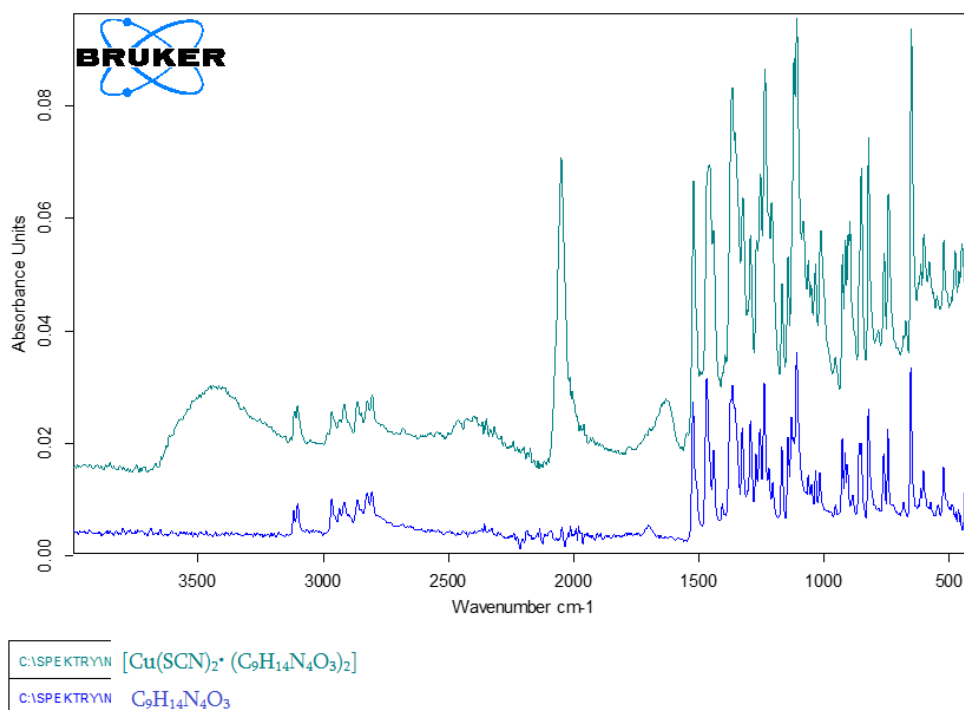
C:\SPEKTRY\ [CuCl₂·(C₉H₁₄N₄O₃)₂·2H₂O]
 C:\SPEKTRY\ [CuCl₂·2H₂O]
 C:\SPEKTRY\N\ C₉H₁₄N₄O₃

ნახაზი 45. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$, $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)

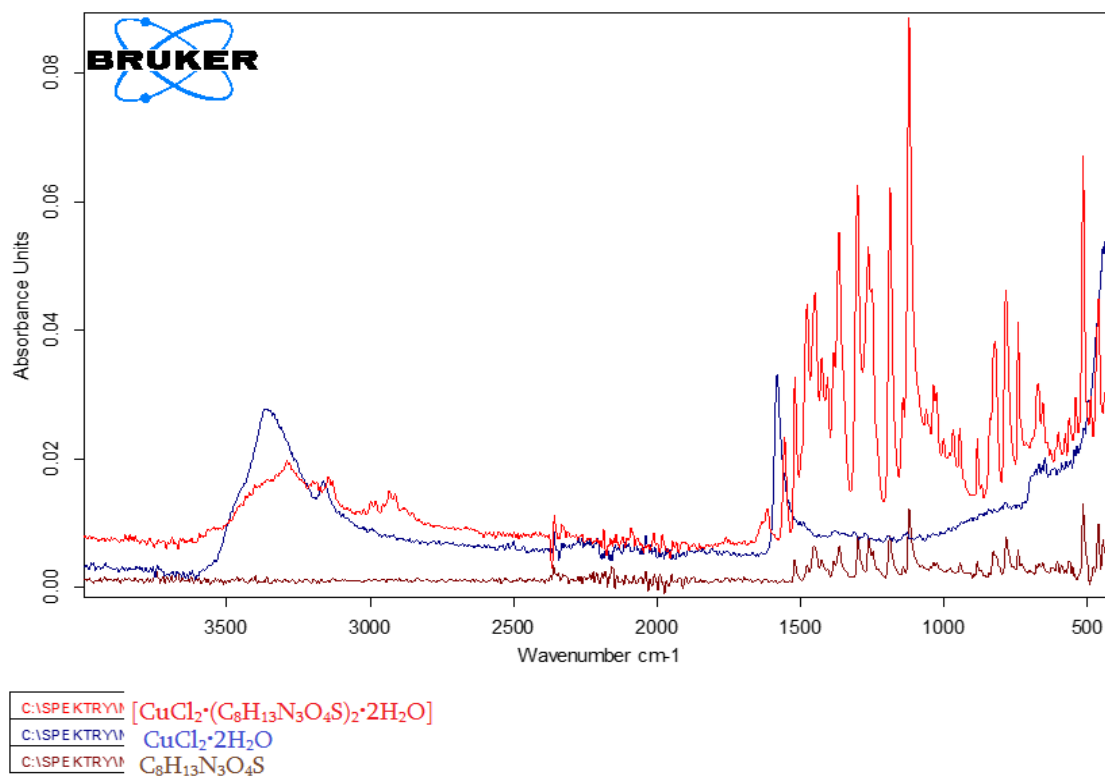


C:\SPEKTRY\N [Zn(SCN)₂·(C₉H₁₄N₄O₃)₂]
 C:\SPEKTRY\N (C₉H₁₄N₄O₃)₂

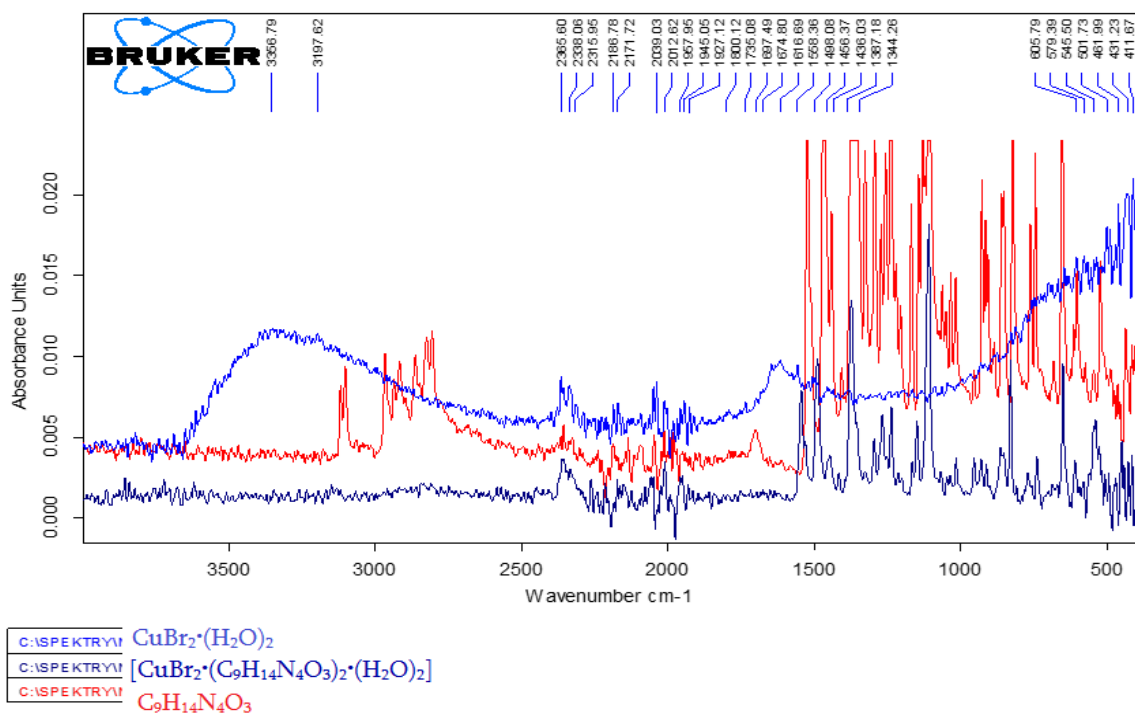
ნახაზი 46. $[\text{Zn}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ⁻¹)



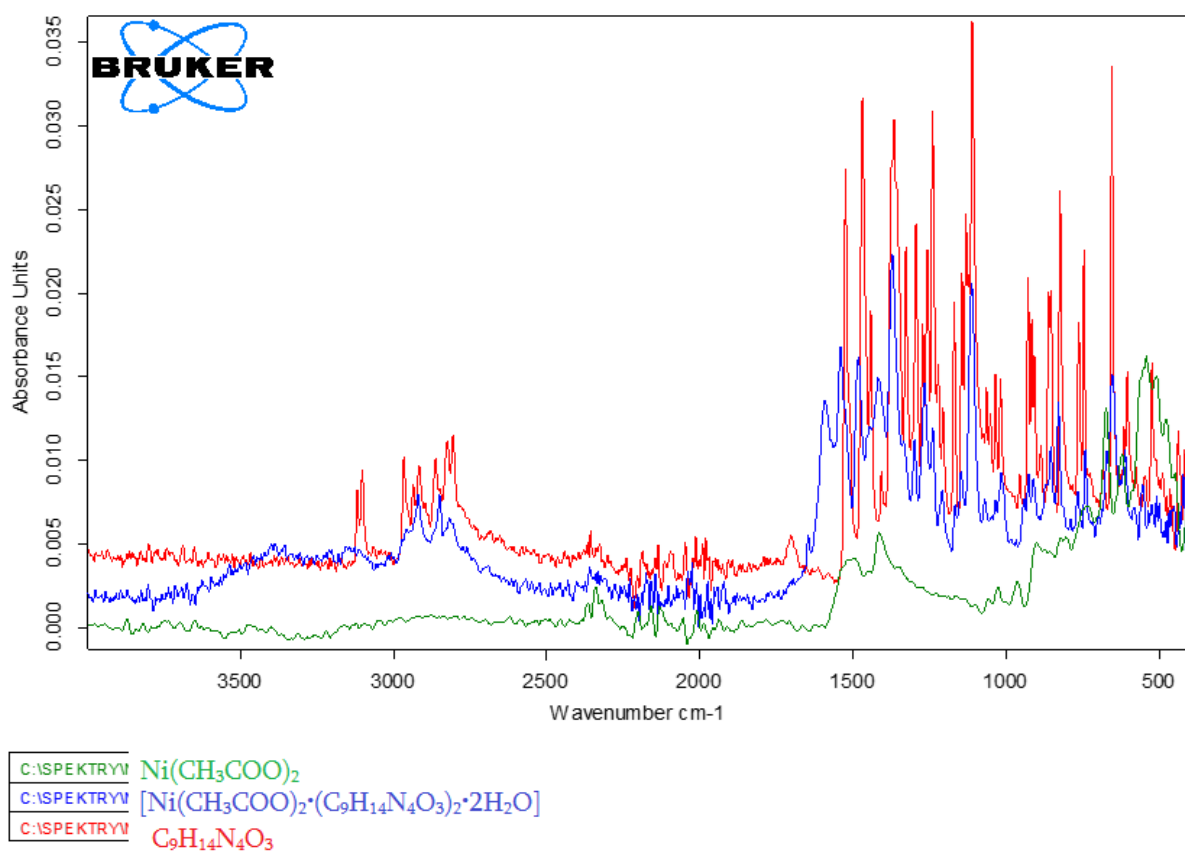
ნახაზი 47. $[\text{Cu}(\text{SCN})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2]$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის იწ-სპექტრი (500-3500 სმ⁻¹)



ნახაზი 48. $[\text{CuCl}_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$, $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ და $\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_3\text{O}_4\text{S}$ შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)



ნახაზი 49. $[\text{CuBr}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$, $\text{CuBr}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრაწითელი სპექტრი ($500\text{-}3500\text{ სმ}^{-1}$)

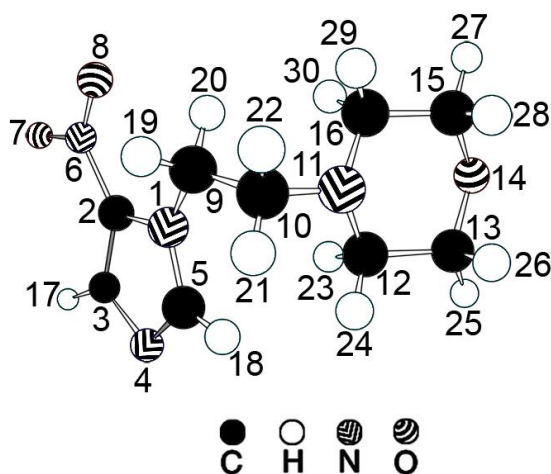


ნახაზი 50. $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}]$, $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2$ და $\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3$ შთანთქმის ინფრასპექტრი (500-3500 სმ⁻¹)

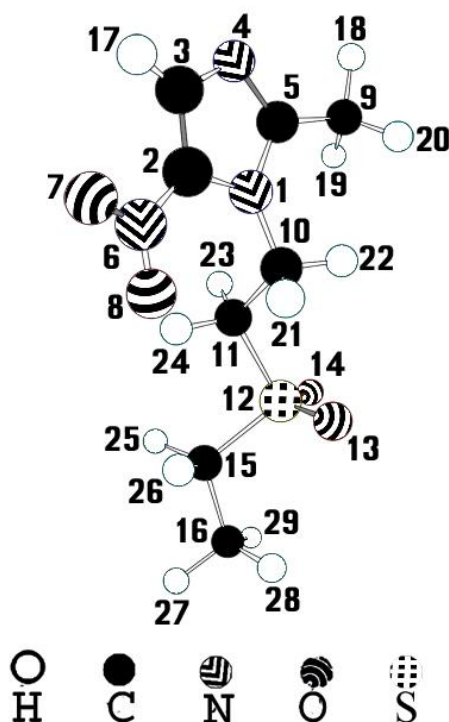
2.2.9. კვანტურ-ქიმიური კვლევის შედეგები

ჩვენს მიერ კვლევის ობიექტად შერჩეული ორგანული ლიგანდის - ნაქსოჯინის მოლეკულის (ნახ.51) ზოგადი ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები გამოთვლილი კვანტურ-ქიმიური მეთოდებით ასეთია (იხ.დანართი ცხრ.1-5): ნაქსოჯინის მოლეკულის წარმოქმნის სითბო (ΔH) 93,808 კჯ/მოლი (AM1 მეთოდით), -74,086 კჯ/მოლი (PM3 მეთოდით), 87,588 კჯ/მოლი (MNDO მეთოდით), ელექტრონების ენერგია -18381 ევ (AM1 მეთოდით), -17763,813 ევ (PM3 მეთოდით), - 18352,040 ევ (MNDO მეთოდით). ბირთვების განზიდვის ენერგია 15253, 970 ევ, 14954,793 ევ, 15212,210 ევ. იონიზაციის პოტენციალი 9,734 ვ, 9,883 ვ, 9,863 ვ შესაბამისად მეთოდების მიხედვით. შევსებული მოლეკულური ორბიტალების რაოდენობა სამივე მეთოდის შემთხვევაში ერთმანეთის ტოლია.

ნაქსოჯინის (ნახ. 51-53) და ტინიდაზოლის (ნახ. 54-56):მოლეკულათა კონფიგურაციები წარმოდგენილი კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირული AM1, PM3 და MNDO მეთოდებით

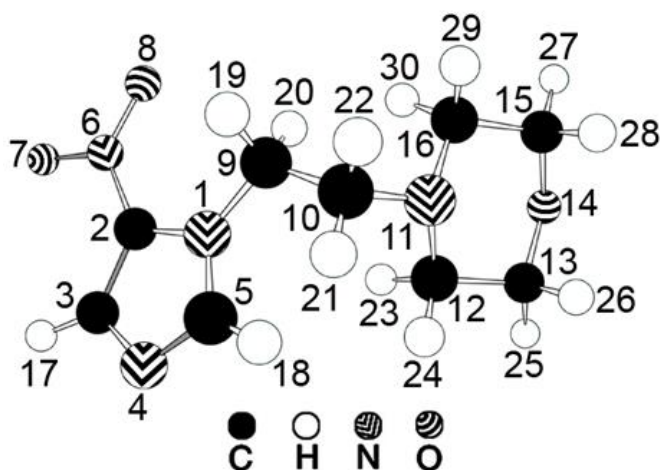


ნახაზი 51. ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი AM1მეთოდით)



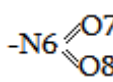
ნახაზი 52. ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა
(გამოთვლილი AM1მეთოდით)

ჩატარებული ექსპერიმენტების ფარგლებში ნახშირბადის ატომთა-შორისი სავალენტო ბმები C–C აღმონდა 1,422 -1,544 Å, მათ შორის საშუალო ბმათა სიგრძეები ნახშირბადატომებს შორის 1,483 Å (AM1 მეთოდით); 1,468 Å (PM3 მეთოდით) და 1,479 Å (MNDO მეთოდით). ნახშირბად- და აზოტის ატომთაშორისი ბმათა სიგრძეები აღმოჩნდა C – N 1,364 -1,456 Å, ხოლო საშუალო ბმათა სიგრძე 1,40 Å (AM1 მეთოდით), C – N 1,361 -1,491 Å, ხოლო საშუალო ბმის სიგრძე 1,426 Å (PM3 მეთოდით) და C – N 1,343 -1,474 Å, ხოლო საშუალო ბმის სიგრძე 1,408 Å (MNDO მეთოდით). როგორც ზემოაღნიშნული მონაცემებიდან ჩანს ნახშირბადატომებსა და ნახშირბად-აზოტის ატომებშორისი ქიმიურ ბმათა სიგრძეები საკმაოდ ფართო ინტერვალში (მაგრამ დასაშვებ ფარგლებში) იცვლება, რაც შესაბამისი ბმების შედარებით სისუსტეზე მიანიშნებს მაშინ, როდესაც ნახშირბად-ჟანგბადატომთაშორისი ბმათა სიგრძეები, გამოთვლილი ზემოაღნიშნული სამივე მეთოდით, თითქმის ერთმანეთთან თანხვედრაშია: C13 –O14 1,422; 1,415; 1,400 და C15 –O14 1,423; 1,414; 1,400 Å (შესაბამისი მეთოდების თანამიმდევრობით), რაც შესაბამის ატომთაშორის კოვალენტურ-პოლარულ ბმათა გაძლიერებაზე მიანიშნებს.



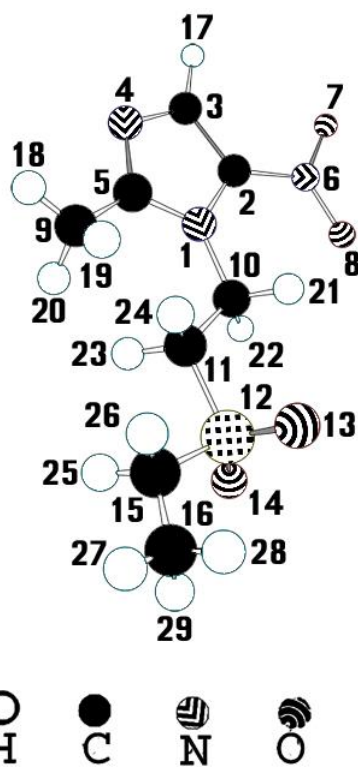
ნახაზი 53. ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით)

ზემოაღნიშნული კიდეც უფრო მკვეთრად იკვეთება აზოტ-ჟანგბადის

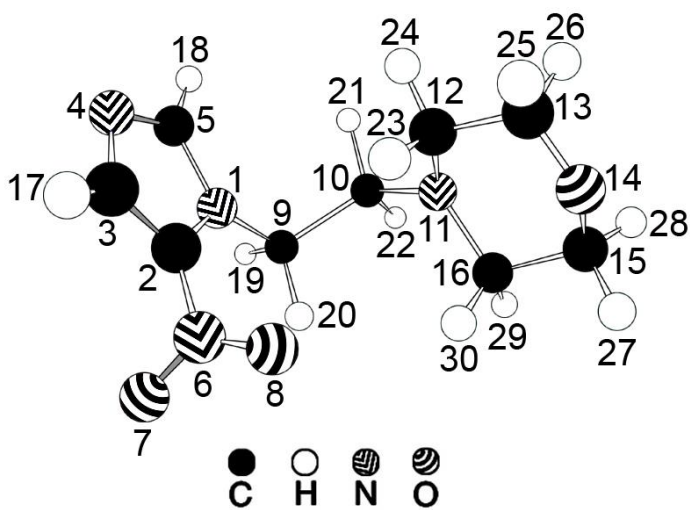
ატომთშორის ურთიერთქმედებისას  ჯგუფში, სადაც ატომთშორისი მანძილები შესაბამისად 1,202; 1,212; 1,210 და 1,205; 1,219; 1,210 Å, ხოლო ბმა-თა რიგი 1,462; 1,530; 1,465; და 1,430; 1,456; 1,458 ტოლია (მეთოდების თანამიმდევრობით), რაც შესაბამისი ატომთშორისი ბმების გაძლიერების დასტურია.

რაც შეეხება ნაქსოჯინის მოლეკულის ციკლში დაფიქსირებულ ჟანგბად (O14) - და ნახშირბადატომებს (C13 და C15) შორის ქიმიური ბმების სიგრძეთა მნიშვნელობებს (1,428; 1,415; 1,400 და 1,423; 1,414; 1,400 Å), ისინი შედარებით გადიდებულია, რაც ციკლის კონფიგურაციით (დაჭიმულობით) არის გამოწვეული და ეს ასახულია კიდეც შესაბამისი კუთხის ($C13\ O14\ C15\ 116,5^\circ$) სამივე მეთოდის საშუალო) სიდიდეში.

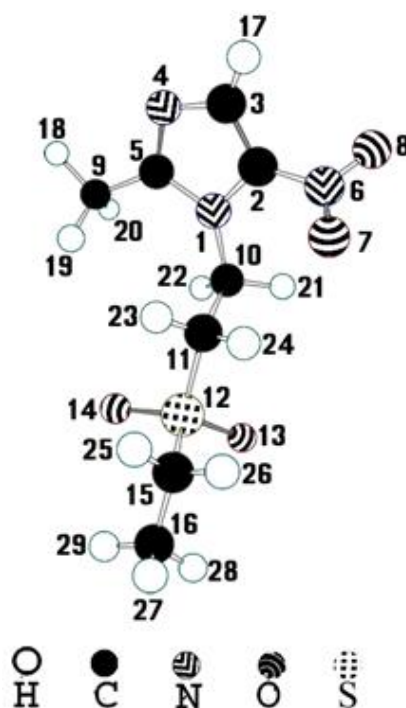
ნაქსოჯინის სავალენტო კუთხეები გამოთვლილია, როგორც ბირთვებთან C-C-O, C-O-C, C-C-N, ასევე ბირთვების მიმდებარე ჯგუფებში C-N-O, O-C-O და სხვ. სადაც კუთხეები შესაბამისად 115-116° ფარგლებშია, რაც ნახშირბადის, აზოტისა და ჟანგბადის ჰიბრიდიზაციაზე მიანიშნებს.



ნახაზი 54. ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით)



ნახაზი 55. ნაქსოჯინის $C_9H_{14}N_4O_3$ მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)

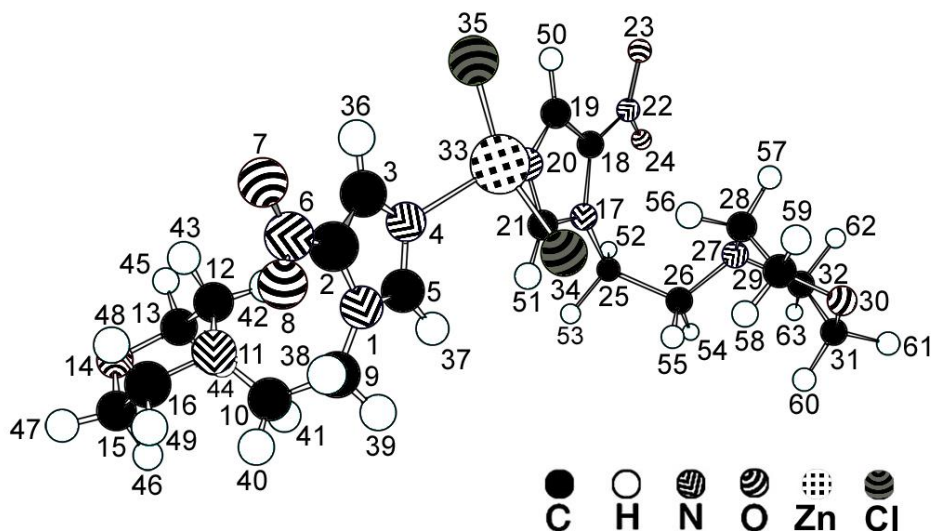


ნახაზი 56. ტინიდაზოლის $C_8H_{13}N_3O_4S$ მოლეკულის აღნაგობა
(გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)

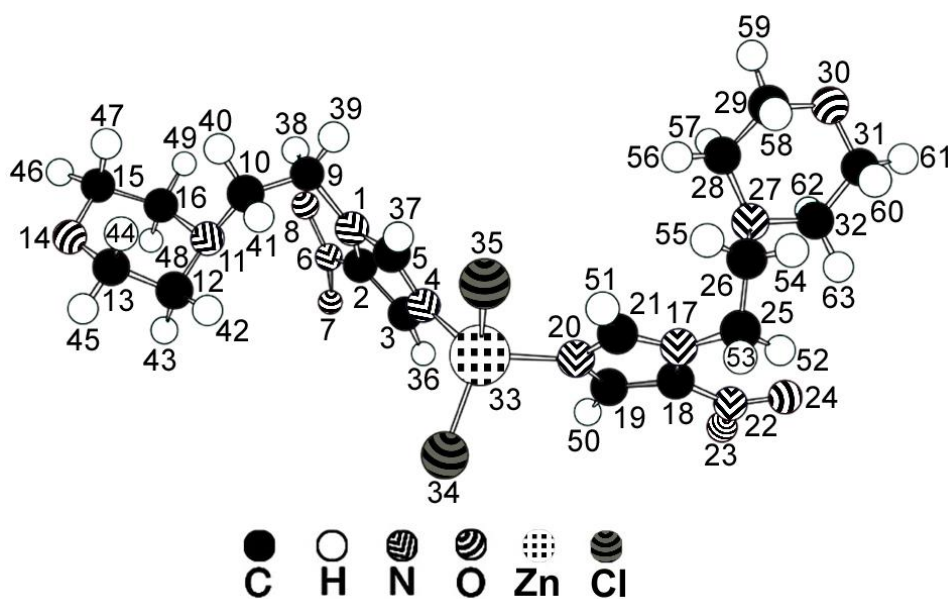
ყველა ზემოაღნიშნულიდან გამომდინარე, შეიძლება გაკეთდეს დასკვნა, რომ მიღებული ექსპერიმენტული მონაცემები ატომთშორისი ქიმიური ბმების, სავალენტო კუთხეებისა და ბმების რიგის შესახებ სრულ თანხვედრაშია. მსოფლიოში სადღეისოდ ცნობილ სტანდარტულ მნიშვნელობათა სიდიდეებთან.

როგორც (იხ. დანართი ცხრ.2-ის) ანალიზი გვიჩვენებს ნაქსოჯინის მოლეკულის ატომების ელექტრონულ სიმკვრივეთა და ეფექტური მუხტების სიდიდეთა შედარებით დიდი მნიშვნელობები ახასიათებს აზოტის N1 და N4 ატომებს. ასევე შეიძლება ითქვას sp^2 - ჰიბრიდიზებულ მდგომარეობაში მყოფ იმიდაზოლური აზოტის ატომის N1 შესახებ, რომელსაც გააჩნია ძლიერ ლოკალიზებული 2P-ორბიტალი. ამ 2P-ორბიტალისა კომპლექსწარმომქმნელი მეტალის d-ორბიტალის გადაფარვისათვის აუცილებელია მათი მაქსიმალური დაახლოება, რაც გამორიცხებულია, რადგან სინამდვილეში ძლიერ იზრდება მათ შორის განზიდულობა. ზემოაღნიშნული გვაძლევს საფუძველს ვივარაუდოთ, რომ ლიგანდის (ნაქსოჯინის) კოორდინირება კომპლექსწარმომქმნელ მეტალებთან ხორციელდება მონოდენტატური ნაქსოჯინის დონორული ჰეტეროციკლის აზოტის N4 ატომით, რომელსაც ელექტრონული მუხტი ლოკალიზებული აქვს, ძირითადად, 2S-ორბიტალზე.

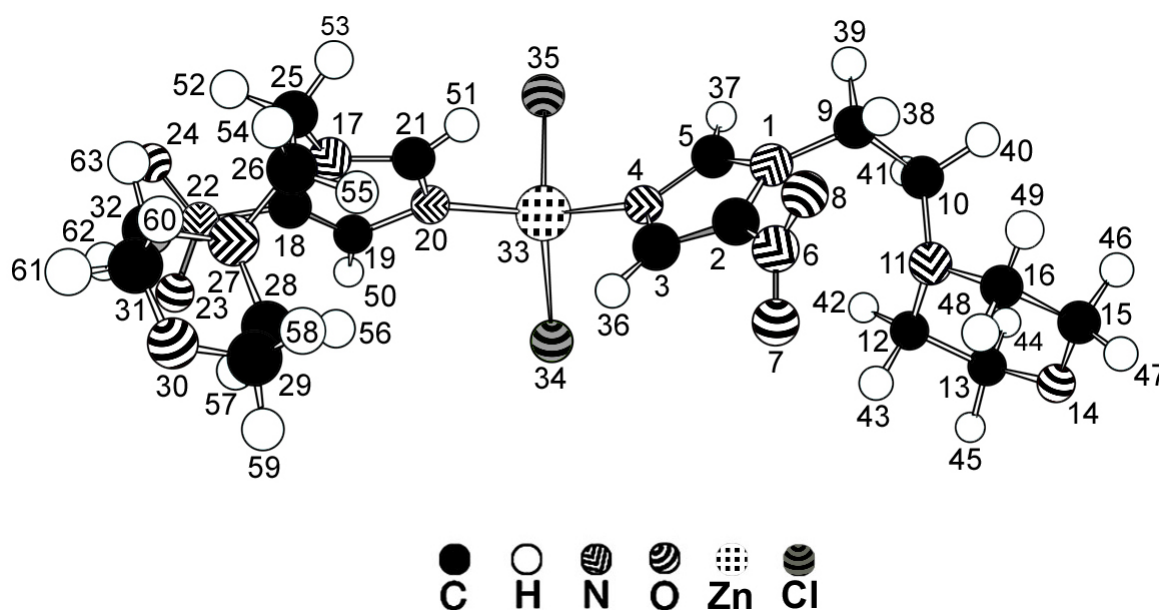
კვანტურ-ქიმიური გათვლების AM1, PM და MNDO-d მეთოდებით გამოთვლილია ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის $[\text{ZnCl}_2 \cdot (\text{C}_9\text{H}_{14}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ (ნახ. 47-49).



ნახაზი 57. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი AM1მეთოდით)



ნახაზი 58. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი PM3 მეთოდით)



ნახაზი 59. ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის მოლეკულის აღნაგობა (გამოთვლილი MNDO-d მეთოდით)

ზოგადი ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები (იხ. დანართი ცხრ.12): წარმოქმნის სითბო (ΔH), ელექტრონების ენერგია, იონიზაციის პოტენციალის მნიშვნელობა, დიპოლური მომენტი და სხვ. კომპლექსნაერთთა შესაძლო სტრუქტურებიდან რეალურად იქმნება ისეთი სტრუქტურა, რომელსაც გააჩნია შედარებით მცირე წარმოქმნის სითბო (ცხრ.4), ჩვენს შემთხვევაში ეს არის ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდული კომპლექსნაერთის მოლეკულის სტრუქტურა .

დადგენილია, რომ სტანდარტულ პირობებში ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდული დიჰიდრატის კომპლექსნაერთის თბოტევადობა, ენთროპია, იონიზაციის პოტენციალის მნიშვნელობა, დიპოლური მომენტი (იხ. დანართი 1.ცხრ.12):

ჩვენი გათვლების მიხედვით (AM1, PM და MNDO-d მეთოდებით), თავისუფალი (არაკოორდინირებული) ორგანული ლიგანდის პარამეტრების მნიშვნელობები კომპლექსში შესვლისას შეიცვალა დაშვებულ ფარგლებში (იხ.დანართი ცხრ.13) ისინი უმნიშვნელოდ განსხვავდებიან ერთმანეთისაგან ($\pm 0,056-0,98 \text{ \AA}$), რაც მიაწინებს ლიგანდისა და ბიოკომპლექსნაერთის სტაბი-

ლურობას ბირთვში და აგრეთვე ბირთვსგარეშე პარამეტრები C-C-N დაახლოებით $117 - 122^{\circ}\text{C}$ ფარგლებშია, რომლებიც ნახშირბადისა და აზოტის Sp^2 - ჰიბრიდიზაციაზე მიანიშნებს.

დანართი ცხრ.14 ანალიზი გვიჩვენებს, რომ ეფექტური მუხტებისა და ელექტრონულ სიდიდეთა შედარებით დიდი მნიშვნელობები ახასიათებს პირველი ნაქსოჯინის მოლეკულის იმიდაზოლის N_1 და N_4 ატომებს, აგრეთვე მეორე ნაქსოჯინის მოლეკულის იმიდაზოლის აზოტის N_{17} და N_{20} ატომებს. ამასთან Sp^2 ჰიბრიდიზებული მდგომარეობაში მყოფ N_1 და N_{17} ატომებს გააჩნიათ ძლიერ ლოკალიზებული 2P_z - ორბიტალები; ამ ორბიტალების და კომპლექსწარმომქმნელი თუთიის d-ორბიტალების გადაფარვისათვის საჭიროა მათი მაქსიმალური დაახლოება, რაც შეუძლებელია, რადგან სინამდვილეში ძლიერ იზრდება მათ შორის განზიდულობა [6].

ზემოაღნიშნული გარემოება გვადლევს საფუძველს ვივარაუდოთ, რომ ნაქსოჯინის კოორდინირება კომპლექსწარმომქმნელ მეტალებთან ხორციელდება ლიგანდის - ნაქსოჯინის დონორული ჰეტეროციკლის აზოტთა N_4 და N_{20} ატომებით, რომლებსაც ელექტრონული მუხტები ლოკალიზებული აქვთ, ძირითადად 2S - ორბიტალებზე.

გაკეთებულია ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდის დიჰიდრატის ბიოკომპლექსნაერთის სტრუქტურის კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები;

დადგენილია კომპლექსწარმომქმნელ თუთიის - ატომთან ლიგანდის - ნაქსოჯინის კოორდინაციული შესაძლებლობა - მონოდენტურობა, იმიდაზოლის ციკლის ერთ-ერთი აზოტის ატომით;

პროგნოზირებულია ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდის დიჰიდრატის ბიოკომპლექსნაერთის სტრუქტურული, თერმოდინამიკური და ენერგეტიკული მახასიათებლები.

2.2.10. თერმოგრაფიმეტრული კვლევის შედეგები

სინთეზირებულ ნაერთთა თერმული მდგრადობის დასადგენად ჩავატარეთ დერივატოგრაფიული გამოკვლევა. რომელიც იძლევა საშუალებას ერთი და იმავე ნიმუშისთვის ერთდროულად ჩაიწეროს ოთხი მრუდი: ტემპერატურის ცვლილების (T); ტემპერატურის ცვლილების დიფერენციალური მრუდი(DTA), რომელზეც მკაფიოდ აისახება გარემოსა და საკვლევი ნიმუშის ტემპერატურებს შორის უმნიშვნელო ცვლილებებიც; მასის ცვლილების მრუდი (TG) და მასის ცვლილების დიფერენციალური მრუდი (DTG). (TG) მრუდზე, ერთმანეთის მიყოლებით, მიმდინარე პროცესები ძნელი გასარჩევია, ხოლო DTG მრუდზე ისინი განცალკევებულად აისახება. თერმოგრაფიმეტრული კვლევა ჩატარდა „ STA 2500 Regulus“ სისტემის დერივატოგრაფზე.

$[Ni(HCOO)_2 \cdot (C_8H_{13}N_3O_4S)_2 \cdot (H_2O)_2]$ ბიოკომპლექსნაერთის, თერმული ქცევა გახურებისას, როგორც მოსალოდნელი იყო, ნიმუშის თერმული დაშლა იწყება დეჰიდრატაციით, პროცესი მიმდინარეობს ტემპერატურულ ინტერვალში 80-110°C, DTA მრუდზე შეინიშნება მცირე ზომის ენდოფექტები, პიკებით 82,4°C-ზე და 108,2°C-ზე. ამ დროს მასის კლება შეადგენს 5,66%-ს რას შეესაბამება 2 მოლი წყლის ჩამოცილებას (თეორიული 5,30%).

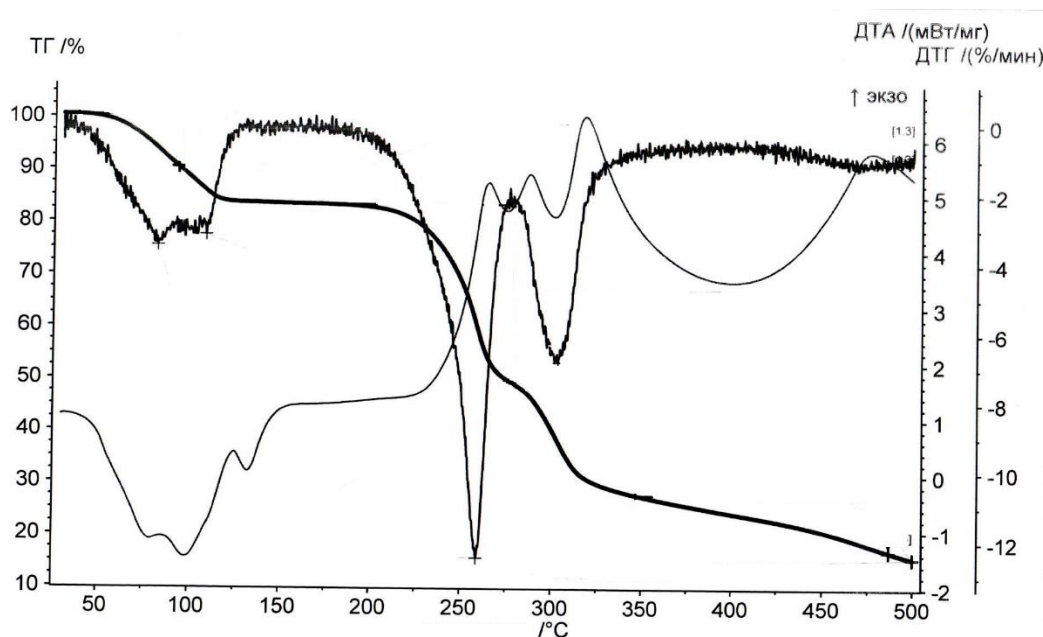
კომპლექსნაერთის შემდგომი გახურებისას ადგილი აქვს ნიმუშის საკმაოდ საინტერესო გარდაქმნებს: ლიგანდი ცენტრალურ ატომთან კოორდინირებულია საკმაოდ მტკიცედ ამიტომ მისი მოცილება (მოწყვეტა) საჭიროებს მაღალ ტემპერატურას, კერძოდ, ტემპერატურულ ინტერვალში 230-270°C ფიქსირდება ძლიერი ენდოფექტი, მინიმუმით 258,9°C. ამ მომენტში მასის კლება შეადგენს 73,08%-ს. რაც გამოწვეულია ორგანული ლიგანდის მოწყვეტით (თეორიული - 72,75 %).

ლიგანდის სრული ჩამოცილების შემდეგ დარჩენილი ნაშთის მასა მცირდება 10,70%-ით. ტემპერატურულ ინტერვალში 270-350°C შეინიშნება

მესამე ენდოფექტი, პიკით 303,1°C-ზე. აღნიშნული მასის კლება შეესაბამება ფორმალდეჰიდის მოლეკულის მოწყვეტას (თეორიული 9,57%). აღნიშნულ ტემპერატურულ ინტერვალში არსებობს მცირე ზომის ეგზოფექტებიც, რაც გამოწვეული უნდა იყოს ნაშთის ფრაგმენტების შიგამოლეკულური გადაჯგუფებით.

ნიმუშის უფრო მაღალ ტემპერატურაზე გახურებისას ადგილი აქვს დარჩენილი ნაშთის დაშლას. უმეტესწილად შესაბამისი ოქსიდური პროდუქტების გამოყოფით. ბოლო სტადიაზე, ტემპერატურულ ინტერვალში, 420-470°C, მასის კლება შეადგენს 4,8%-ს. რაც შეესაბამება ნიკელ(II)-ის კარბონატის დაშლას (თეორიული 4,42%).

ზემოთქმულიდან გამომდინარე $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{Tinid})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ნიმუშის თერმული დაშლის სააღბათო სქემა შეიძლება შემდეგნაირად წარმოვადგინოთ:

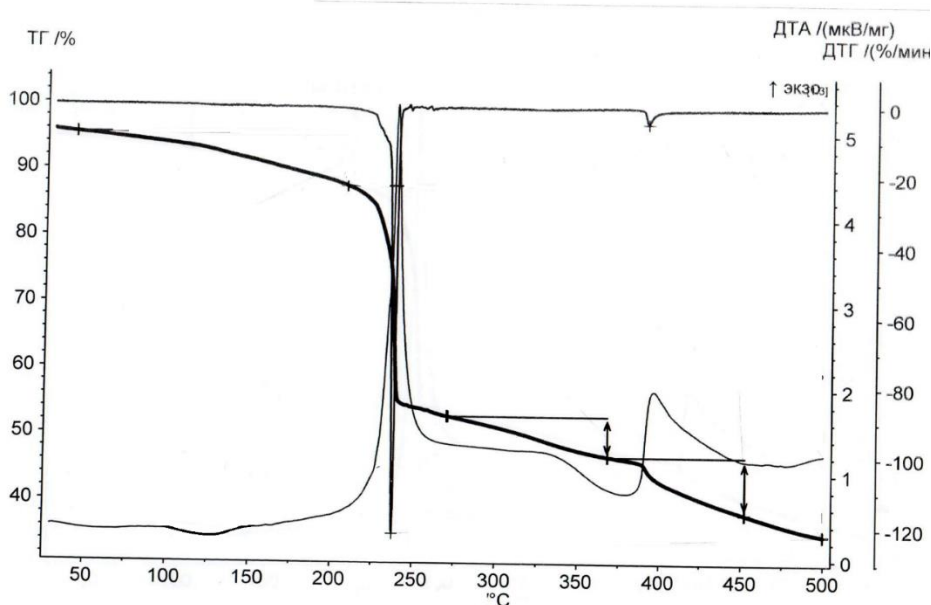
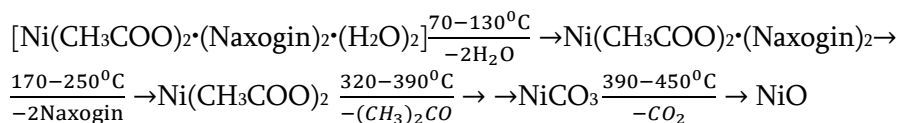


ნახაზი 60. $[\text{Ni}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{Tinid})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ თერმოგრამა ბიოკომპლექსური ნაერთის $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{Naxogin})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$

თერმული დაშლა იწყება 70°C DTA მრუდზე, მცირე ენდოფექტი პიკით 125°C, სადაც მასის კლებამ შეადგინა 5,79%, რაც შეესაბამება ნიმუშიდან 2 მოლი წყლის მოწყვეტას (თეორიული 5,09%), დეჰიდრატაციის შემდეგ

შეინიშნება დიდი ენდოფექტი, ინტერვალში 175-250°C, პიკით 237,5°C-ზე. მასის კლებამ შეადგინა 64,12%, რაც შეესაბამება ლიგანდიის მოხლეჩა - ჩამოცილებას (თეორიული 63,84%). ნიმუშის შემდგომი გახურებისას კიდევ შეინიშნება მნიშვნელოვანი ენდოფექტი, ტემპერატურულ ინტერვალში 330-400°C, პიკით 381,1°C, მასის კლება შეადგენს 8,58%-ს, რაც შეესაბამება აცეტონის მოლეკულის ჩამოცილებას, (თეორიული 8,76%). უფრო მაღალ ტემპერატურაზე ადგილი აქვს კომპლექსის დარჩენილი ნაწილის დაშლად დაჟანგვას, უმეტესწილად შესაბამისი ოქსიდური პროდუქტების გამოყოფით. 390-450°C-ზე შეინიშნება მეოთხე ენდოფექტი, მასის კლება შეადგენს 4,85%-ს. რაც შეესაბამება ნიკელ(II)-ის კარბონატის დაშლას (თეორიული 4,42%).

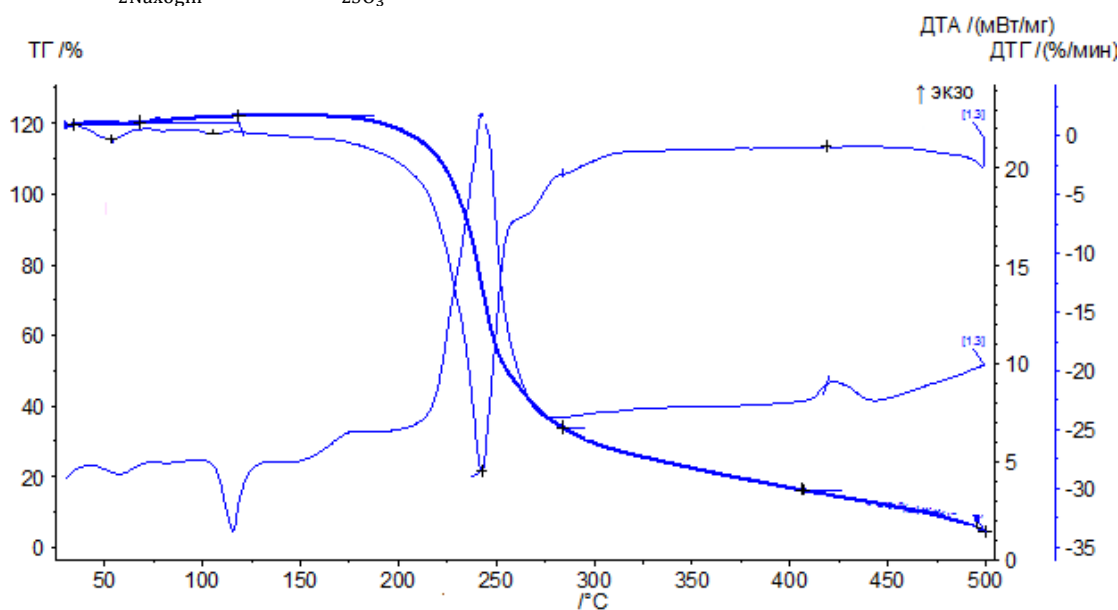
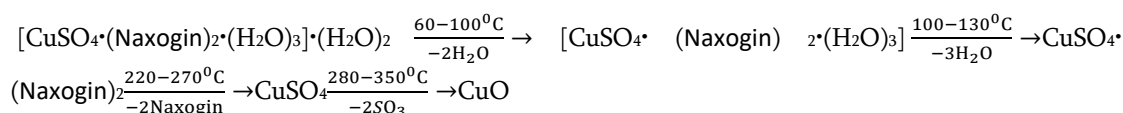
ზემოთქმულიდან გამომდინარე $[\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{Naxogin})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ნიმუშის თერმული დაშლის სააღბათო სქემა შეიძლება შემდეგნაირად წარმოვადგინოთ:



ნახაზი 61. $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot (\text{Naxogin})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ თერმოგრამა

ბიოკომპლექსნერთ $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{Naxogin})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ თერმოლიზი. ნიმუშის თერმული დაშლა დაიწყო დეჰიდრატაციით, ტემპერატურულ

ინტერვალში 60-130°C, DTA მრუდზე შეინიშნება ორი მცირე ენდოფექტი, პიკებით 70°C და 105,6°C, პირველ შემთხვევაში მასის კლებამ შეადგინა 5,38% რაც შეესაბამება 2 მოლი წყლის ჩამოცილებას (თეორიული 5,14%), მეორე ენდოფექტის შემთხვევაში მასის კლება არის 7,56% და შეესაბამება 3 მოლი წყლის ჩამოცილებას (თეორიული 7,70%). ნიმუშის სრული დეჰიდრატაციის შემდეგ, ტემპერატურულ ინტერვალში 220-270°C, ადგილი აქვს ძლიერ ენდოფექტს, მინიმუმით 242,6°C, აქ მასის კლებამ შეადგინა 66,08 %, რაც აიხსნება ორგანული ლიგანდის მოწყვეტით (თეორიული 64,48%), ნიმუშის შემდგომი გახურებისას ტემპერატურულ ინტერვალში 280-350°C შეინიშნება მასის მონოტორული კლება 10,97%, რაც შეესაბამება გოგირდ(VI)-ის ოქსიდის მოცილებას (თეორიული 11,41%).



ნახაზი 62. $[\text{CuSO}_4 \cdot (\text{Naxogin})_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_3] \cdot (\text{H}_2\text{O})_2$ თერმოგრამა

ბიოკომპლექსნაერთ $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ თერმოლიზი.

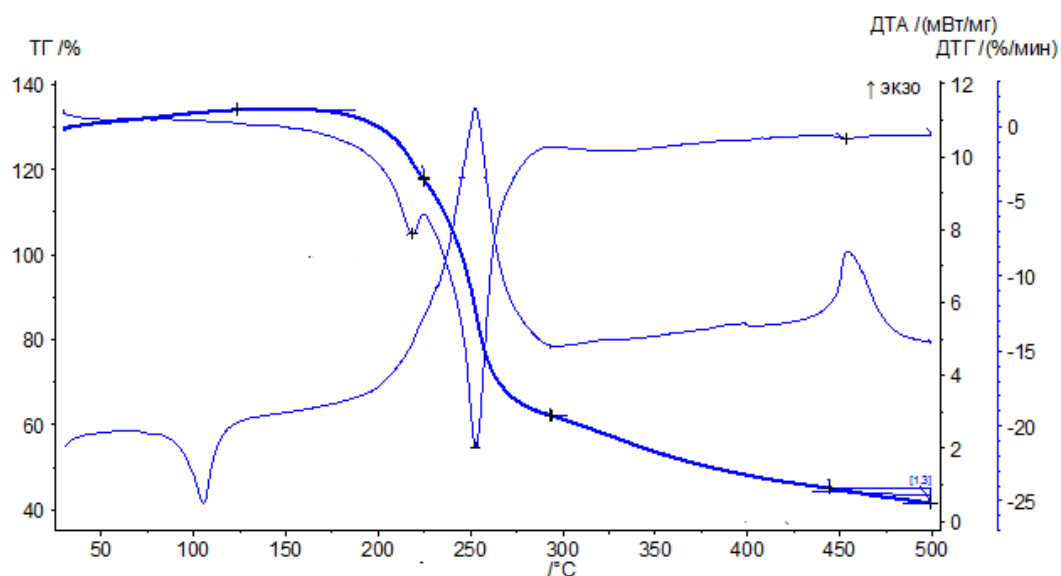
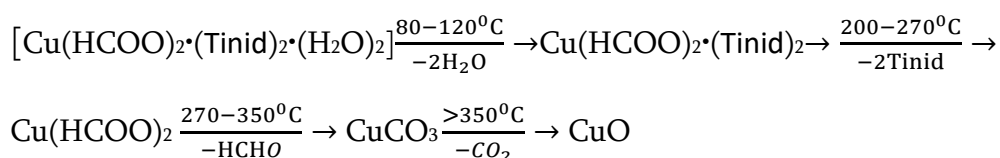
ნიმუშის თერმული დაშლა იწყება დეჰიდრატაციით ინტერვალში 80-120°C, პიკით 110°C-ზე, მასის კლება შეადგენს 5,87%-ს, რაც შეესაბამება 2 მოლი წყლის მოწყვეტას (თეორიული 5,56%).

ნიმუშის შემდგომი გახურებისას ტემპერატურულ ინტერვალში 200-270°C შეინიშნება ერთი მცირე ენდოფექტი, პიკით 218,5°C და მეორე

დიდი ენდოფექტი, პიკით 252,9°C. ჯამში მასის კლებამ შეადგინა 75,46%, რაც აიხსნება ორგანული ლიგანდის მოწყვეტით (თეორიული 76,23%). ლიგანდის სრული ჩამოცილების შემდეგ, ტემპერატურულ ინტერვალში 270-350°C შეინიშნება მესამე ენდოფექტი, პიკით 300°C-ზე. აღნიშნული მასის კლება შეადგენს 4,22%, რაც შეესაბამება ფორმალდეჰიდის მოლეკულის მოწყვეტას (თეორიული 4,63%).

ნიმუშის უფრო მაღალ ტემპერატურაზე გახურებისას ადგილი აქვს მასის მონოტორულ კლებას და 499,4°C მასის ნაშთი შეადგენს 12,62%-ს, რაც შეესაბამება სპილენძ(II)-ის ოქსიდის მასას (თეორიული 12,34%-ს).

ზემოთქმულიდან გამომდინარე $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ნიმუშის თერმული დაშლის სააღბათო სქემა შეიძლება შემდეგნაირად წარმოვადგინოთ:

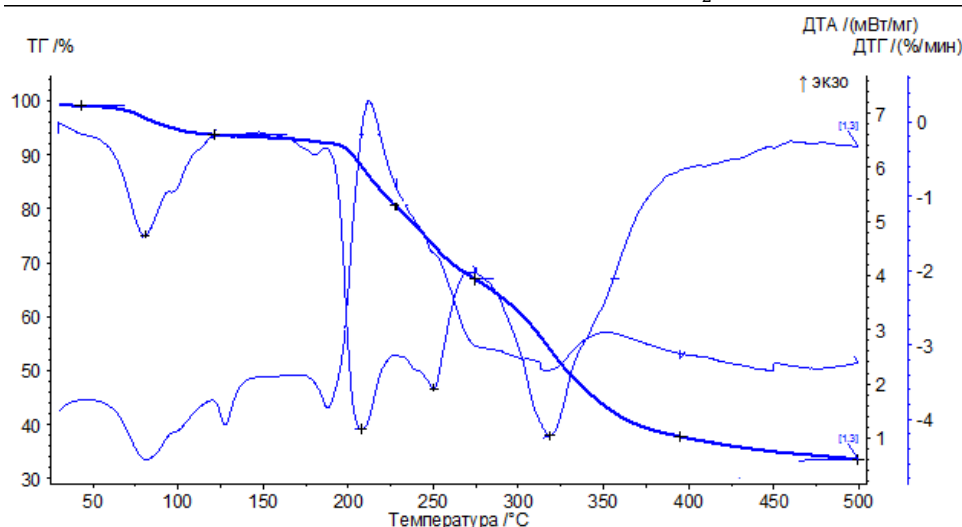
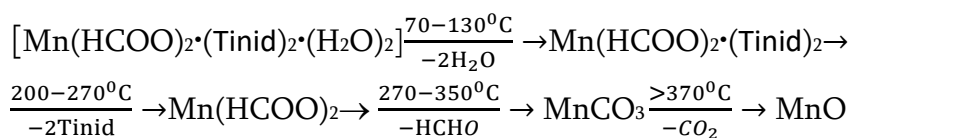


ნახაზი 63. $[\text{Cu}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ თერმოგრამა

$[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ ბიოკომპლექსნაერთის თერმული დაშლა იწყება დეჰიდრატაციით, ტემპერატურულ ინტერვალში 70-130°C, პიკებით 80,6°C და 118°C, მასის კლებამ შეადგინა 5,37%, რაც აიხსნება 2 მოლი წყლის ჩამოცილებით (თეორიული 5,64%). ნიმუშის შემდგომი გახურებით

ტემპერატურულ ინტერვალში 200-270°C, აღინიშნება დიდი ენდოფექტი, პიკით 250°C, მასის კლება 76,54%, რაც შეესაბამება ორგანული ლიგანდის მოწყვეტას (თეორიული 77,43%). შემდგომ ტემპერატურულ ინტერვალში, 270°C, 360°C პიკით 318,4°C შეინიშნება მესამე ენდოფექტი, სადაც მასის კლება შეადგენს 5,12%, რაც გამოწვეულია ფორმალდეჰიდის ჩამოცილებით (თეორიული 4,7%). აღნიშნულ ტემპერატურულ ინტერვალში არსებობს მცირე ზომის ეგზოფექტებიც, რაც გამოწვეული უნდა იყოს ნაშთის ფრაგმენტების შიგამოლეკულოური გადაჯგუფებით.

ნიმუშის შემდგომი გახურებისას, უფრო მაღალ ტემპერატურაზე ადგილი აქვს კომპლექსის დარჩენილი ნაწილის დაშლას, შესაბამისი ოქსიდური პროდუქტის მიღებით. მასის ნაშთი შეადგენს 12,08%, რაც შეესაბამება მანგანუმ(II)-ის არსებობას, (თეორიული 11,13%).



ნახაზი 64. $[\text{Mn}(\text{HCOO})_2 \cdot (\text{C}_8\text{H}_{13}\text{N}_4\text{O}_3)_2 \cdot (\text{H}_2\text{O})_2]$ თერმოგრამა

განხილული ბიოკომპლექსნაერთების თერმული ქცევა გახურებისას შეიძლება წარმოვადგინოთ შემდეგი სქემის მიხედვით: დეჰიდრატაცია, ლიგანდთა მოლეკულების თანდათანობით მოწყვეტა, მინერალური მარილების დაშლა და ჟანგვა შესაბამის ოქსიდებამდე.

2.2.11. იმუნოციტოტოქსიკური კვლევის შედეგები

კლინიკური კვლევების შედეგებმა, გვიჩვენა, რომ ბიოლოგიურად აქტიური ლიგანდების - ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლის და 3d-მეტალების ისეთი იონების, როგორებიცაა Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} და Zn^{2+} , კომპლექსთა წარმოქმნის რეაქციების შედეგად ძლიერდება ნაქსოჯინის და ტინიდაზოლის ციტოტოქსიკური აქტივობა. ეს ეფექტი შეიძლება გამოყენებულ იქნას ადამიანის სიმსივნური უჯრედების გამრავლების ინჰიბიციისათვის.

იმუნოციტოტოქიმიურმა ანალიზმა, ჩატარებულმა კანის ბრტყელუჯრედოვანი კიბოს (კარცინომის) უჯრედებზე, რომლებიც აპრიორი დამუშავებულნი იყვნენ Mn^{2+} , Ni^{2+} , Cu^{2+} და Zn^{2+} ნაქსოჯინის და ტინიდაზოლის კოორდინაციული ნაერთების ხსნარებით, სუფთა ლიგანდების იმავე კონცენტრაციის ხსნარებით და უკვე ცნობილი პრეპარატის - ცის-პლატინის საკონტროლო ხსნარებით, გვიჩვენა, რომ $Cu(II)$ ფორმიატის კომპლექსური ნაერთები ნაქსოჯინსა და ტინიდაზოლთან სინერგიული ეფექტი ინდუცირებს სიმსივნური უჯრედების განადგურებას, აპოპტოზის გზით. ამასთან, მომატებული ციტოტოქსიკური აქტივობა მრავალჯერადად აღემატება ანალოგიურს ნაქსოჯინის და ტინიდაზოლის სუფთა ლიგანდების შემთხვევაში; ცალკეულ შემთხვევაში კი - საკონტროლო პრეპარატის - ცის-პლატინის გამოყენებისას.

გარდა ამისა, Zn^{2+} იონებისა და ნაქსოჯინის კომპლექსები განზავებულ ხსნარებში ურთიერთქმედებენ სიმსივნური უჯრედების დნმ-ის მოლეკულების ფრაგმენტებთან და იწვევენ მათ დეგრადაციას.

ეს ადასტურებს იმ მოსაზრებას, რომ სიმსივნური უჯრედების დნმ-ი წარმოადგენს რეალურ სამიზნეს მსგავსი კომპლექსებისათვის და არაერთ ბიოლოგიურ რეაქციას თან ახლავს დნმ-ის მოლეკულების ცვლილებები.

დასკვნა

1. სინთეზირებულია მეტალების მანგანუმ(II)-ის, ნიკელ(II)-ის, სპილენძ(II)-ის, და თუთიის აციდო - ლიგანდური: ჰალოგენიდური (ქლორი, ბრომი), სულფატური, როდანიდული, ფორმიატული, აცეტატური, ბიოკოორდინაციული ნაერთები ორგანულ ლიგანდებთან - ნაქსოჯინსა და ტინიდაზოლთან (სულ 16 ბიოკომპლექსნაერთი);
2. ჩატარებულია ორგანული ლიგანდების - ნაქსოჯინის ($C_9H_{14}N_4O_3$) და ტინიდაზოლის ($C_8H_{13}N_3O_4S$) მოლეკულებისა და აგრეთვე ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდის დიჰიდრატული კომპლექსნაერთის კვანტურ-ქიმიური გამოთვლები (AM1, PM3 და MNDO-d) მეთოდების გამოყენებით;
3. დადგენილია სინთეზირებული ნაერთების ელემენტთა ქიმიური შედგენილობა, აგრეგატული მდგომარეობა, შეფერილობა, ხსნადობა სხვადასხვა გამხსნელებში, სავარაუდო მოლეკულური აღნაგობა, ფიზიკურ-ქიმიური და მედიკო-ბიოლოგიური თვისებები და სხვ;
4. დადგენილია ორგანული ლიგანდების ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის კოორდინაციული შესაძლებლობები. პროგნოზირებულია ნაქსოჯინთან თუთიის ქლორიდული ბიოკოორდინაციული ნაერთის სტრუქტურული, თერმოდინამიკური და ენერგეტიკული მახასიათებლები;
5. ჩატარებულია ლიგანდების - ნაქსოჯინის, ტინიდაზოლისა და მიღებული ბიოკომპლექსნაერთების კვანტურ-მექანიკური გამოთვლები AM1, PM3 და MNDO-d მეთოდების გამოყენებით. დადგენილია: კომპლექსური ნაერთების შესაძლო წარმოქმნის სიძლიერე, ატომთაშორისი მანძილები, სავალენტო კუთხეები, ბმის რიგი, დიპოლური მომენტი, ენთროპია, ენთალპია, იონიზაციის პოტენციალი, ელექტრონების ენერგია, ატომებზე მუხტების სიდიდე და სხვ.
6. განსაზღვრულია სინთეზირებული ბიოკომპლექსნაერთების ქიმიური და ფაზური გარდაქმნების თხური ეფექტები, დადგენილია მეტალკომ-

პლექსწარმომქმნელებთან აციდო- და ორგანული ლიგანდების (ნაქსოჯინი, ტინიდაზოლი), აგრეთვე წყლის მოლეკულების შესაძლო კოორდინირების წესები;

7. ორგანული ლიგანდების - ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის მოლეკულები გამოდიან მონოდენტური ლიგანდის როლში და კომპლექსწარმომქმნელთან კოორდინირდებიან იმიდაზოლის ციკლური ფრაგმენტის აზოტის ორი ატომიდან ერთ-ერთის მეშვეობით ხოლო აციდოლიგანდები (სულფატურ-, ქლორიდული-, ბრომიდული- როდანიდული-, ფორმიატული- და აცეტატური იონები) შესაბამისად ქლორის, ბრომის, აზოტის და ჟანგბადის ატომებით.
8. გამოთქმულია მოსაზრებები AM1, PM3 და MNDO-d კვანტურ-ქიმიური მეთოდებით ნაქსოჯინთან, ტინიდაზოლთან და მათ წარმოებულებთან მეტალთა კოორდინაციული ნაერთების სავარაუდო აღნაგობისა და ზოგიერთი თვისების პროგნოზირების შესახებ.
9. განხილული ბიოკომპლექსნაერთების თერმული ქცევა გახურებისას წარმოდგენილია შემდეგი სქემის მიხედვით - დეჰიდრატაცია, აციდო- და ორგანულ ლიგანდთა მოლეკულების თანდათანობით მოწყვეტა, მარილების დაშლა და ჟანგვა შესაბამის ოქსიდებამდე.
10. ჩვენს მიერ სინთეზირებული სპილენძ(II)-ის ფორმიატის ბიოკომპლექსნაერთის იმუნოციტოტოქსიკურმა ანალიზმა გვიჩვენა, რომ მისი სინერგიული ეფექტი ინდუცირებს სიმსივნური უჯრედების განადგურებას აპოპტოზის გზით (რომლის ერთ-ერთი უმთავრესი ფუნქციაა დეფექტური, მუტანტური, ინფიცირებული უჯრედების განადგურება). ამასთან სპილენძის ფორმიატული კომპლექსნაერთის მომატებული ციტოტოქსიკური აქტიურობა მრავალჯერადად აღემატება სუფთა ლიგანდების ნაქსოჯინისა და ტინიდაზოლის ეფექტურობას, ხოლო ცალკეულ შემთხვევაში საყოველთაოდ ცნობილი საკონტროლო პრეპარატის, ცის-პლატინის ბიოლოგიურ აქტიურობასაც.

გამოყენებული ლიტერატურა

1. Бриан Л.Е. Бактериальная резистентность и чувствительность к химическим препаратам. М., Медицина, 1984. 272с.
2. Альберт А. Избирательная токсичность. Физико-химические основы терапии. Пер. с англ. В 2 томах. . М., Медицина, 1989. 432с.
3. Вартанян Р.С. Синтез основных лекарственных средств. М. Медицинское информационное агентство. М. 2004. 845 с.
4. Клименко Б.В. трихомониаз. М., Медицина 1983. 160 с. .
5. Страчунский Л.С. Белоусов Ю.Б. Козлов С.Н. Антибактериальные средства. М, Медицина. 2000.
6. Корешкин И.А. Современные лекарства от А до Я. 2009. 560 с.
7. წიფწივაძე თ., ჩიგოგიძე ნ., კლდიაშვილი რ., სხილაძე რ., სულაქველიძე გ., ბიოაქტიური კომპლექსნაერთები ახალ ტექნოლოგიებში. მონოგრაფია, 2011, გვ. 255.
8. Чигогидзе Н.Ш., Георгадзе И.И., Гогбаидзе Г.А., Сесиашвили И.И. Исследование ингибирующего действия координационных соединений переходных металлов на репродукцию некоторых вирусов. Труды III Всесоюзной межуниверситетской конференции по "Физико-химической биологии". Часть II. Тбилиси, 1982, с. 471-472 с.
9. სკოპენკო ვ., ცინცაძე გ., სავრანსკი ლ., ცინცაძე მ. „კოორდინაციული ქიმი-ა“. თბილისი 2011. 291გვ.
10. Соловьев В.Н.. Стратегия современной химиотерапии бактериальных инфекций. М.: Медицина, 1973, 320 с.
11. Ноздрюхина Л.Р., Семенович И.И., Юренев П.Н.. Иммунопатология. Микроэлементы. Атеросклероз. М.: Наука, 1973, 356 с.
12. Ионы металлов в биологических системах. Под ред. Х.М. Зигель М.: Мир, 1982. 72 с.
13. Падейская Е. Н. 5- нитроимидазолы - антимикробные препараты для лечения бактериальных и протозойных инфекций. // consilium medicum 2004. T.6 N 1 с. 1-6 с.

14. Падейская Е. Н. Препараты группы 5- нитроимидазоля - для лечения анаэробных и протозойных инфекций. // инфекция и антимикробная тер. 2000.т.2. N 4 110-116 с.
15. Краснов Е.А. Ермилова Е.В. курс лекций по фармацевтической химии часть. 1. Лекарственные средства гетероциклического ряда. СГМУ, 2010. 196 с.
16. Гиоргадзе И.И., Чигогидзе Н.Ш., Топурия Н.В., Хасенова З. Х., бухникашвили И. Д. Способ стабилизации иттерферона. Авторское свидетельства СССР №1406852, приоритет изобретения с 07,08, 1985.
17. Белозкрцев Ю.А. Основы доказательной фармакологии. Курс лекций. 4-е издание. Чита. 2012. 120 с.
18. Солдатенков А.Т. коладина Н.М. Шендрик И.В. Основы органической химии лекарственных веществ. М., БИНОМ лаборатория знаний. 2007.192 с.
19. Каркишенко В.Н. Каркишенко Н. Н. Шустов Е.Б. фармакологические основы терапии. Тезаурус. Изд. 3-е новая редакция. М., СПб 2018. 288 с.
20. Оксенгендлер Г.И. Яды и противоядия. Л.: Наука, 1982.101-103 С
21. Машковский М.Д. лекарственные средства. – 15-е изд. М.,ООО „изд-во новое волна” 2005. 1200 с.
22. Дайсон Г. Мейн П.Химия синтетических лекарственных веществ. М. : Мир, 1964, 660с.
23. Швайкова М. Д. Токсикологическая химия. М.: Медицина 1975, 376с.
24. Булова А. В. Руководство к практическим занятиям токсикологической химии. М.: Медицина, 1976, 232 с.
25. Арзамасцев А.П. фармацевтическая химия. М., ГЕОТАР-МЕД. 2004. 640с.
26. Беликов В.Д., фармацевтическая химия.М., медпресс- информ. 2007 624с.
27. Кукес В.Г. Клиническая фармакология. М., ГЕОТАР-МЕД. 2006 944с.
28. Пассет Б.В. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ. (БАВ) ГЕОТАР-МЕД. 2004. 376с.
29. Ковальский А.М. Федотов В.П. Шаленная Н.С. Лечение урогенитального трихомониаза ниморазолом (наксоджин): результаты получения на 300 больных. //аптека 1997. N 2 с.7

30. Абдумаликов Р.М. Маликов Е. Е. Изучение действия комплексного соединения метронидазол-кобальт на влагалищные трихомонады *in vitro* //вестник дерматолог. и венеролог. 1995 N5 с.22-24.
31. Самохин В.Л. морфология *Trichomonas vaginalis* и современные противотрихомонадные срдства. // ИППП. 2002 N 5 с.15-18
32. Елинов М.И. химическая микробиология. М.Высшая школа 1989. 448 с.
33. Преч Э. Бюлманн Ф. Аффольтер К.М. Определения строения органических соединений. М., Мир. Бином, 2006.438 с.
34. Пассет Б.В. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ. (БАВ) ГЕОТАР-МЕД. 2004. 376с.
35. Галкина И.В. Основы химии биологически активных веществ.Казань. 2009.152 с.
36. Цинцадзе Г.В., Чигогидзе Н.Ш., Загоруйяенко В.С. Исследование антимикробной активности нового препарата комплексного соединения хлористого кобальта с никодином. Сообщения АН ГССР, 1975, Т. 80, №3.
37. Харкевич Д. А. Фармакология. М. 2005.
38. Кукеч В.Г., Стародубсев А.К. Клиническая фармакология и фармакотерапия. М. 2006.
39. Петков. Лекарство, организм фармакологический эффект. София: „медицина и физкультура“, 1974. 350 с.
40. Чигогидзе Н.Ш., Гиоргадзе И.И. Активаторы, стимуляторы интерфероногенеза и стабилизация интерферонов. Материялы всесоюзного симпозиума. Тбилиси, 1984, с. 632-636.
41. Хьюз М. Неорганическая химия биологических процессов. Пер. С англ. М.Мир.1983. 416с.
42. Тюкавина Ю.А. Бауков Ю.И. Биоорганическая химия. М.Медицина. 1991. 528с.
43. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия. М.просвещение.1987. 815 с.
44. Николаев А.А.биологическая химия М.высш. школа. 1989. 495 с.

45. Березов Т.Т. Коровкин Б.Ф. Биологическая химия. Второе издание. М. Медицина. 1990. 528с.
46. Бондарев Л. Г. Микроэлементы – благо и зло .: Знание, 1984. 144с.
47. Шнулин А. Н., Кигурадзе Р. А., Цинцадзе Г.В., Цивцивадзе Т.И., Чигогидзе Н.Ш., Мамедова Ф.Н. Кристаллические молекулярные структуры комплексов меди(II) с N-оксиметилникотинами пиридин-3-карбоновой кислоты. Коорд. Химия. 1991, т. 17, вып. 2, с 168-182
48. Чуешов В.И. и др. Промышленная технология лекарств. В двух томах. изд. Укр фар. 1999.
49. Котов А.Д. Бегунов Р.С. Консервирующее и синтез лекарственных и биологически активных веществ. Ярославл. ЯрГУ 2016. 40с.
50. Граник В.Г. Основы медицинской химии. М., вузовская книга. 2001. 384 с.
51. Мокрушин В.С. Вавилов Г.А. Основы химии и технологии биоорганических и синтетических лекарственных веществ. СПб. Проспект науки. 2018. 496с.
52. Силкина О.В. Химия биологически активных веществ. Йошкар-ола. ПГТУ. 20017. 96 с.
53. Гурьянова Е.Н., Гольдштейн И. П., Ромм И.П. доноро-акцепторная связь. М.: Химия, 1976. 384 с.
54. Дей К. Селбин Д. Теоретическая неорганическая химия. М. :Химия, 1976. 384с.
55. Котон Ф., Уилкинсон Дж. Основы неорганической химия. М. :Мир, 1979ю 420 с.
56. Третьяков Ю.Д., Мартиненко Л.И., Григорьев А.Н., Цивадзе Л.Ю. Неорганическая химия. М. :Химия, 2001. 490 с.
57. Иозеп А.А. Химическая технология лекарственных веществ. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ. М.Лань. 2017. 356 с.
58. Ленинджер А. Основы биохимии. М. Мир. 1985.
59. Сколоенко И.А., Цивадзе Л.Ю., Савранский Л.И., Гарновский А.Д. Координационная химия. М.: ИКС Академкнига, 2007. 487с.

60. Помогайло А. Д., Нфлянд И. Е. макромолекулярные металлохелаты. М. : Химия, 1991. 310 с.
61. Бесков В. Г. Фармацевтическая химия. М.:Высш.Шк., 1985. 768с.
62. Елинов Н.П. Химическая микробиология. М.:Высш.Шк., 1989. 448с.
63. Цинцадзе Г.В., Цивцивадзе Т.И., Орбеладзе ф.В., Кигурадзе Р.А, Петриашвили Ж.Д., Микелашвили З. В.,Гонгадзе Н.П., Чигогидзе Н. Ш. Кристаллические и молекулярные структуры координационных соединений. XX республиканская научно-техническая конференция проф.Преп. Состава ГПИ и работников производства. Тезисы докладов. Тбилиси 1976.
64. Воинар А. О. Биологическая роль микроэлементов в организме животных и человека. М.: Высш. Шк. 1960. 540с.
65. Цинцадзе Г.В., Цивцивадзе Т.И., Орбеладзе ф.В., Кигурадзе Р.А., Петриашвили Ж.Д., Микелашвили З. В., Гонгадзе Н.П., Чигогидзе Н.Ш. Кристаллические и молекулярные структуры координационных соединений. XX республиканская научно-техническая конференция проф.Преп. Состава ГПИ и работников производства. Тезисы докладов. Тбилиси 1976.
66. Ноздрюхина Л.Р. Биологическая роль микроэлементов в организме животных и человека. М.: наука. 1977.
67. Бабенко Г. А. Рещеткина А. П. Применения микроэлементов в медицине. Киев: Здоровье, 1971. 220с.
68. Райнс В.с. нейрофизиологические основы действия микроэлементов. М.: Медицинв, 1981.
69. Терлецкий Е.д., Металлы, которые всегда с тобой. Микроэлементы и жизнеобеспечение организма. М.: Знание., 1986. 144с.
70. Швелашвили А.Е. Порай-кошиц М.а. Стереokoординационных соединений некоторых металлов с циклообразующими аминами. Тбилиси. 1969. 166с.
71. Шлегел г. Общая микробиология. М.:Мир, 1987. 567с.
72. Земсков М.В., Соколов М. и., Земсков в.м., Основы общей микробиологии, вирусологии и иммунологии. М.:Колос, 1977, 312с.
73. Езепчук Ю.В. патогенность как функциф биомолекул. М.:Медицина, 1985,352.с
74. Беили Н. Статистические методы в биологии. М.:Мир 1962.

75. Петриашвили Ж.Д., Исследование координационных соединений некоторых металлов с гидрамидами пиридинкарбоновых кислот. Автореф. Дисс.канд.хим.наук. Тбилиси, ТГУ, 1978.
76. წივწივაძე თ., ჩიგოგიძე ნ., კლდიაშვილი რ., სხილაძე რ., სულაქველიძე გ. მეტრონიდაზოლის სტრუქტურულ თავისებურებათა გამოკვლევადა 5-კოორდინაციულ სპილენძის კომპლექსთა ბიოაქტიურობის კონცეფცია. მონოგრაფია. თბილისი, 2013, 72 გვ.
77. Зиганшина Н.Х.,Фузайлов Ю. М. Эффективность и переносимость тинидазола при лечении лямблиоза. Мед. Паразитол. – 1991, №3, с.58.
78. Овчинникова Л.К., Кремнева В.Ф. Фармакология антипротозойных средств. М., Изд-в УДН, 1990,с.163.
79. Коноплева Е.В. противопротоzoиные средства.
80. Грудянов А.И. Овчинникова В.,В. Дмитриева Н.А. Антимикробная и противовоспалительная терапия в пародонтологии. М., медицинское информационноу агентство. 2004. 80 с.
81. Хакимов Х.Х. Ходжаев О.Ф. Азизов Т.А. комплексы переходных металлов с циклическими амидами. Ташкент ФАН. Узб.ССР 1984. 136с.
82. Овчинникова Л.К. Кремнева В.Ф. фармакология антипротозойных средств. М. УДН. 1990.163 с.
83. Машковский М.Д. Лекарственные средства. 15-е издание. М. Новая волна 2005. 1200 с.
84. Сатокар Р.С. Бандарак С.Д. фармакология и фармакотерапия. М. Медицина. 1986.
85. Побочные действия лекарственных средств. Под. Ред. М.Н. Дюкса М. Медицина. 1983.
86. Чекман И.С. Осложнения фармакотерапии. 1980. Киев Здоров'я. 1980
87. Практическое руководство по антиинфекционной химиотерапии. М. С 248
88. Тихомиров А.Л. Олейник Ч.Г. урогенитальный трихоиониаз. Лечащий врач 2003 N 7 с.10-14

89. Лоуренс В.Г. клиническая фармакология. В 2-ч томах. Пер. С англ. м., медицина. 2002. 438 с.
90. Шарло Г. Методы аналитической химии. М.: Химия, 1966, 975 с.
91. Шарло Г. Методы аналитической химии. Количественный анализ. часть вторая. М. Химия. 1969. 1206с.
92. Белкий Г. Б. Перай-Кошиц М. А. Рентгенно-структурный анализ. Руководство в двух томах. М.: Изд. МГУ, 1964.
93. Рентгенометрический определитель минералов. В.И. Михеев. Э.П. Сальдау II том. издательство „недра" Ленинградское отделение. Ленинград 1965.
94. Рентгенофлуоресцентный анализ. Москва „Металлургия" 1985, 254 стр
95. Уэлс А.Ф. Структурная неорганическая химия. Т.1. М.Мир.1987.407 с.
96. Цинцадзе Г. В., Цивцивадзе Т. И., Джавахишвили З. О., Микелашвили З. В., Нариманидзе А.П., Чигогидзе Н.Ш., Цивадзе А.Ю., Кигурадзе Р. А. Стереохимия координационных соединений металлов с биоактивными лигандами, содержащими пептидные группы. XIII Всесоюзное Чугаевское совещание по химии комплексных соединений. Тезисы докладов, Москва, 1978.
97. Рубцов М. В., Байчиков А. Г. Синтетические химико-фармацевтические препараты. М.: Медицина, 1971. 328 с.
98. პეტრიაშვილი ჟ., მოსაშვილი ი., ჯაფარიძე რ. „კოორდინაციული ნაერთების მიღება, სტრუქტურა და დახასიათება ვირტუალური მეთოდით“. საერთაშორისო-სამეცნიერო პრაქტიკული კონფერენცია, მეცნიერება და ინოვაციური ტექნოლოგიები. ქუთაისის, 2014, გვ. 289-290.
99. Chigogidze N. Sh., Petriashvili J. D., Japaridze R. J. „, Searching and synthesis of new chelating derivatives of the thiourea as antitumor remedies“. 3Rd International conference on Pharmaceutical sciences. „, Looking towards the future, honoring the past“. 2015, Tbilisi, Georgia, Pg. 102-103.
100. ზიგოგიძე ნ., ჯაფარიძე რ., „ახალი, პერსპექტიული ნაერთების სინთეზი ონკოდაავადებათა ქიმიოთერაპიისთვის“. საერთაშორისო სამეცნიერო--პრაქტიკული კონფერენცია, ფუნქციონალური დანიშნულების კვების

- პროდუქტების წარმოების ინოვაციური ტექნოლოგიები. ქუთაისი, 2015, გვ. 426.
101. Цивадзе А. Ю. Спекрохимия амидокомплексов металлов. Дисс. докт. хим. наук, ИОНХ АН СССР, М. 1978.
 102. Мачхошвили Р.И. Спектроскопическое исследование координационных соединений металлов с гидразидами карбоновых кислот. Автореф. канд. дисс. ИОНХ АН СССР, М. 1970
 103. Цинцадзе Г. В., Цивадзе А. Ю., Чигогидзе Н. Ш., Нариманидзе А. П., Гонгадзе Н. П., Манвелидзе Г. М., Мдивани М. А., Порай-Кошиц М. А., Ходашова Т. С. Некоторые аспекты химии, спектрохимии и биохимии координационных соединений микроэлементов с амидом никотиновой и гидрозидом изоникотиновой кислот и их производными. Выездная сессия Научного совета АН СССР, посвященная проблемам бионеорганической химии. Тезисы докладов. Геледжик, 1976, с. 11.
 104. Альберт А. Избирательная токсичность. Физико-химические основы терапии. Пер. С англ. М. Медицина. 1989 т.1, 2
 105. Потапов В.М. стереохимия. М. Химия. 1976. 696с.
 106. Белкий Г. Б., Порой - Кошиц М. А. Рентгенноструктурный анализ. Руководство в двух томах. М.: Изд. МГУ 1964.
 107. Краснов Е.А. Ермилова Е.В. курс лекций по фармацевтической химии часть.1. Лекарственные средства гетероциклического ряда. Томск. СГМУ, 2010
 108. Белозкрцев Ю.А. Основы доказательной фармакологии. Курс лекций. 4-е издание. Чита. 2012. 120 с.
 109. Солдатенков А.Т. коладина Н.М. Шендрик И.В. Основы органической химии лекарственных веществ. М., БИНОМ лаборатория знаний. 2007. 192 с.
 110. Брауншейн А. Е. На стыке химии и биологии. М.: наука, 1987, 239 стр.
 111. Яцимирский К. Б. Проблемы бионеорганической химии. М.: Знание, 1976.
 112. Котов А.Д. Бегунов Р.С. Конструирование и синтез лекарственных и биологически активвных веществ. Ярославл. ЯРГУ 2016. 40с.

113. Пассет Б.В. Основные процессы химического синтеза биологически активных веществ. (БАВ) ГЕОТАР-МЕД. 2004
114. Шнулин А. Н., Кигурадзе В. А., Цинцадзе Г. В., Цивцивадзе Т. И., Чигогидзе Н. Ш., мамедов ф. Н. Кристаллические молекулярные структуры комплексов меди(II) с N-оксиметилникотинамидом пиридин -3-карбоновой кислоты. Коорд. Химия, 1991, вып. 2, 168-182 стр.
115. წივწივაძე თ., კლდიაშვილი რ., სხილაძე რ., ჩიგოგიძე ნ., სულაქველიძე გ. ბიოკოორდინაციული ნაერთების შედგენილობა- აღნაგობა- თვისებები და მათი როლი არატრადიციული სამკურნალო საშუალებების, ბიოლოგიურად აქტიური დანამატებისა და კვების პროდუქტების შემუშავებაში. მონოგრაფია, თბილისი, 2009. 171 გვ.
116. Цинцадзе Г.В. Исследования цианатных, тиоцианатных и селеноцианатных соединений металлоов. Автореферат дисс. докт. хим. Наук. Тбилиси, ТГУ, 1970, 43стр.
117. Чигогидзе Н.Ш., Цивцивадзе Т.И., Надирадзе И. Ш., Клдиашвили Р.Ш., Петриашвили Ж.Д., Джапаридзе Р.Дж. Противоопухолевая активность комплексов меди Cu^{2+} с клотримазолом как следствие формирования специфической пентакоординационной структуры. Georgian Engineering Newg. №1 (vol. 77), 2016.
118. Гилсон П. Хендрат Т. Лекарственная спектроскопия в химии. М.Мир. 1973 438.с Каток Я.М. Основные процссы химического синтеза биологически активных вкществ. Мнск. БГТУ, 2017. 149 с.
119. Смит В. Органический синтез: наука и искусство. М., мир 2001. 573с.
120. Коваленко Л.В. Биохимические основы химии биологически активных веществ. М., лаборатория знаний. 2020. 230 с.
121. Беллами М. Инфракрасные спектры некоторых сложных молекул. М.Мир. 1964. 590с.
122. Наканиси К. Инфракрасные спектры и строение органических соединений. М. Мир. 1995.

დანართი

ცხრილი 1. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინის მოლეკულის წარმოქმნის სითბო (ΔH) და დიპოლური მომენტი (μ) ნაქსოჯინის მოლეკულაში

№		გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	წარმოქმნის სითბო, კჯ/მოლი	93.808	-74.086	87.588
2	დიპოლური მომენტი, დებაი	4.621	4.617	4.527

ცხრილი 2. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინის მოლეკულის ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები

N	ატომი	გამოთვლის მეთოდი	ატომებზე მუხტი	ელექტრონების განაწილება ორბიტალებზე			
				2S	2P _x	2P _y	2P _z
1	N(1)	AM1	-0.105	1.462	1.044	1.078	1.522
		PM3	0.387	1.269	0.928	0.971	1.445
		MNDO	-0.233	1.482	1.052	1.095	1.604
2	C(2)	AM1	-0.227	1.247	0.813	0.893	1.275
		PM3	-0.664	1.299	0.958	1.045	1.363
		MNDO	-0.096	1.214	0.788	0.853	1.241
3	C(3)	AM1	-0.044	1.255	0.995	0.845	0.949
		PM3	0.015	1.207	0.987	0.867	0.924
		MNDO	0.045	1.224	0.942	0.830	0.960
4	N(4)	AM1	-0.145	1.752	0.955	1.239	1.200
		PM3	-0.126	1.649	0.950	1.348	1.179
		MNDO	-0.227	1.745	0.976	1.287	1.219
5	C(5)	AM1	-0.053	1.277	1.005	0.780	0.991
		PM3	-0.206	1.256	1.018	0.889	1.044
		MNDO	0.100	1.248	0.949	0.753	0.950
6	N(6)	AM1	0.616	1.401	1.004	0.997	0.982
		PM3	1.381	1.072	0.883	0.863	0.801
		MNDO	0.516	1.421	1.038	1.022	1.003
7	O(7)	AM1	-0.340	1.943	0.957	1.913	1.526
		PM3	-0.591	1.927	1.142	1.917	1.605
		MNDO	-0.315	1.929	1.365	1.767	1.253
8	O(8)	AM1	-0.380	1.943	1.779	1.104	1.553
		PM3	-0.639	1.929	1.823	1.245	1.642
		MNDO	-0.323	1.929	1.688	1.489	1.238
9	C(9)	AM1	-0.078	1.240	0.931	0.853	1.056
		PM3	-0.165	1.192	0.955	0.943	1.076

		MNDO	0.133	1.231	0.870	0.815	0.951
10	C(10)	AM1	-0.060	1.229	0.899	1.043	0.889
		PM3	-0.088	1.180	0.910	1.036	0.963
		MNDO	0.168	1.216	0.888	0.920	0.808
11	N(11)	AM1	-0.277	1.569	1.658	1.043	1.015
		PM3	-0.072	1.501	1.629	0.981	0.960
		MNDO	-0.459	1.525	1.744	1.060	1.130
12	C(12)	AM1	-0.098	1.234	1.002	0.895	0.966
		PM3	-0.113	1.184	0.996	0.976	0.957
		MNDO	0.134	1.222	0.901	0.875	0.868
13	C(13)	AM1	-0.023	1.273	0.987	0.910	0.889
		PM3	0.057	1.158	0.987	0.863	0.936
		MNDO	0.161	1.225	0.920	0.782	0.913
14	O(14)	AM1	-0.267	1.882	1.815	1.137	1.434
		PM3	-0.255	1.857	1.827	1.140	1.432
		MNDO	-0.326	1.824	1.799	1.163	1.540
15	C(15)	AM1	-0.024	1.237	0.997	0.868	0.921
		PM3	0.058	1.157	0.979	0.922	0.882
		MNDO	0.162	1.225	0.902	0.877	0.834
16	C(16)	AM1	-0.097	1.233	0.995	0.932	0.936
		PM3	-0.116	1.185	1.006	0.935	0.989
		MNDO	0.130	1.223	0.918	0.786	0.943
17	H(17)	AM1	0.209	0.790			
		PM3	0.161	0.839			
		MNDO	0.128	0.872			
18	H(18)	AM1	0.212	0.788			
		PM3	0.177	0.823			
		MNDO	0.139	0.861			
19	H(19)	AM1	0.116	0.884			
		PM3	0.094	0.906			
		MNDO	0.021	0.979			
20	H(20)	AM1	0.138	0.862			
		PM3	0.115	0.885			
		MNDO	0.040	0.960			
21	H(21)	AM1	-0.098	0.902			
		PM3	0.073	0.927			
		MNDO	0.012	0.988			
22	H(22)	AM1	0.113	0.887			
		PM3	0.079	0.921			
		MNDO	0.016	0.984			
23	H(23)	AM1	0.070	0.930			

		PM3	0.044	0.956			
		MNDO	0.001	0.999			
24	H(24)	AM1	0.089	0.911			
		PM3	0.063	0.937			
		MNDO	0.009	0.991			
25	H(25)	AM1	0.113	0.887			
		PM3	0.062	0.937			
		MNDO	0.027	0.973			
26	H(26)	AM1	0.082	0.918			
		PM3	0.046	0.954			
		MNDO	-0.003	1.003			
27	H(27)	AM1	0.113	0.887			
		PM3	0.063	0.937			
		MNDO	0.028	0.972			
28	H(28)	AM1	0.082	0.918			
		PM3	0.045	0.955			
		MNDO	-0.003	1.003			
29	H(29)	AM1	0.098	0.902			
		PM3	0.066	0.934			
		MNDO	0.010	0.990			
30	H(30)	AM1	0.070	0.930			
		PM3	0.051	0.949			
		MNDO	0.003	0.997			

ცხრილი 3. AM1, PM3 და MNDO კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინის მოლეკულაში ატომთაშორისი მანძილების მნიშვნელობები

№	ატომთაშორისი ზმა		გამოთვლის მეთოდი		
			AM1	PM3	MNDO
1	N(1)–C(2)	მანძილი, Å ⁰	1.415	1.421	1.409
		რიგი	1.109	1.149	1.089
2	C(2)–C(3)	მანძილი, Å ⁰	1.426	1.406	1.396
		რიგი	1.415	1.407	1.521
3	C(3)–N(4)	მანძილი, Å ⁰	1.377	1.373	1.385
		რიგი	1.366	1.405	1.281

4	N(4)–C(5)	მანძილი, Å ⁰	1.364	1.361	1.343
		რიგი	1.468	1.441	1.552
5	N(1)–C(5)	მანძილი, Å ⁰	1.389	1.380	1.404
		რიგი	1.241	1.355	1.166
6	C(2)–N(6)	მანძილი, Å ⁰	1.456	1.467	1.474
		რიგი	0.898	0.914	0.852
7	N(6)–O(7)	მანძილი, Å ⁰	1.202	1.212	1.210
		რიგი	1.462	1.513	1.465
8	N(6)–O(8)	მანძილი, Å ⁰	1.205	1.219	1.210
		რიგი	1.430	1.456	1.458
9	N(1)–C(9)	მანძილი, Å ⁰	1.437	1.477	1.474
		რიგი	0.904	0.960	0.882
10	C(9)–C(10)	მანძილი, Å ⁰	1.544	1.537	1.562
		რიგი	0.943	0.966	0.927
11	C(10)–N(11)	მანძილი, Å ⁰	1.439	1.483	1.456
		რიგი	0.986	0.993	0.957
12	N(11)–C(12)	მანძილი, Å ⁰	1.453	1.491	1.465
		რიგი	0.965	0.9769	0.934
13	C(12)–C(13)	მანძილი, Å ⁰	1.535	1.531	1.557
		რიგი	0.961	0.974	0.943
14	C(13)–O(14)	მანძილი, Å ⁰	1.422	1.415	1.400
		რიგი	0.984	0.984	0.970
15	O(14)–C(15)	მანძილი, Å ⁰	1.423	1.414	1.400
		რიგი	0.982	0.984	0.971
16	C(15)–C(16)	მანძილი, Å ⁰	1.535	1.530	1.556
		რიგი	0.962	0.974	0.943
17	N(11)–C(16)	მანძილი, Å ⁰	1.454	1.492	1.466
		რიგი	0.963	0.979	0.934
18	C(3)–H(17)	მანძილი, Å ⁰	1.093	1.093	1.084
		რიგი	0.918	0.945	0.944
19	C(5)–H(18)	მანძილი, Å ⁰	1.098	1.100	1.087

		რიგი	0.910	0.930	0.933
20	C(9)–H(19)	მანძილი, Å ⁰	1.131	1.111	1.121
		რიგი	0.948	0.969	0.959
21	C(9)–H(20)	მანძილი, Å ⁰	1.131	1.120	1.113
		რიგი	0.945	0.953	0.966
22	C(10)–H(21)	მანძილი, Å ⁰	1.127	1.114	1.118
		რიგი	0.955	0.963	0.960
23	C(10)–H(22)	მანძილი, Å ⁰	1.131	1.108	1.122
		რიგი	0.949	0.972	0.958
24	C(12)–H(23)	მანძილი, Å ⁰	1.129	1.111	1.119
		რიგი	0.951	0.971	0.952
25	C(12)–H(24)	მანძილი, Å ⁰	1.126	1.108	1.117
		რიგი	0.957	0.974	0.963
26	C(13)–H(25)	მანძილი, Å ⁰	1.121	1.103	1.120
		რიგი	0.949	0.970	0.958
27	C(13)–H(26)	მანძილი, Å ⁰	1.122	1.107	1.123
		რიგი	0.953	0.971	0.949
28	C(15)–H(27)	მანძილი, Å ⁰	1.121	1.103	1.120
		რიგი	0.949	0.970	0.958
29	C(15)–H(28)	მანძილი, Å ⁰	1.122	1.107	1.123
		რიგი	0.953	0.971	0.011
30	C(16)–H(29)	მანძილი, Å ⁰	1.125	1.107	1.117
		რიგი	0.957	0.975	0.963
31	C(16)–H(30)	მანძილი, Å ⁰	1.129	1.117	1.119
		რიგი	0.951	0.962	0.952

ცხრილი 4. AM1, PM3 და MNDO კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული
მეთოდებით გამოთვლილი სავალენტო კუთხეთა მნიშვნელო-
ბები ნაქსოჯინის მოლეკულაში

№	ვალენტური კუთხე	გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	N(1)–C(2)–C(3)	106.618	105.597	107.868
2	C(2)–C(3)–N(4)	109.378	108.708	108.778
3	C(2)–N(1)–C(5)	105.360	107.935	104.608
4	N(1)–C(2)–N(6)	126.213	127.612	123.841
5	C(2)–N(6)–O(7)	117.887	118.994	118.454
6	C(2)–N(6)–O(8)	119.880	119.360	119.728
7	C(2)–N(1)–C(9)	125.371	126.590	129.378
8	N(1)–C(9)–C(10)	116.368	114.316	115.223
9	C(9)–C(10)–N(11)	119.475	116.011	118.980
10	C(10)–N(11)–C(12)	116.083	113.998	119.838
11	N(11)–C(12)–C(13)	111.970	109.573	110.549
12	C(12)–C(13)–O(14)	111.675	112.027	113.684
13	C(13)–O(14)–C(15)	112.214	112.762	118.391
14	C(10)–N(11)–C(16)	115.010	112.793	119.198
15	C(2)–C(3)–H(17)	127.076	128.675	129.894
16	N(1)–C(5)–H(18)	122.907	125.175	123.582
17	N(1)–C(9)–H(19)	107.546	107.558	107.344
18	N(1)–C(9)–H(20)	108.051	109.449	110.117
19	C(9)–C(10)–H(21)	109.782	111.927	109.730
20	C(9)–C(10)–H(22)	104.820	108.641	105.135
21	N(11)–C(12)–H(23)	111.959	111.610	112.149
22	N(11)–C(12)–H(24)	108.163	108.036	109.981
23	C(12)–C(13)–H(25)	109.994	111.660	109.087
24	C(12)–C(13)–H(26)	110.638	111.573	109.798
25	O(14)–C(15)–H(27)	104.476	102.644	106.654
26	O(14)–C(15)–H(28)	109.640	109.836	110.756
27	N(11)–C(12)–H(29)	108.175	107.878	109.917
28	N(11)–C(12)–H(30)	111.729	110.385	112.063

ცხრილი 5. AM1, PM3 და MNDO-ს მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინის მოლეკულის სრული ენერგიის, ელექტრონების ენერგიის, ბირთვების განზიდვის ენერგიის, იონიზაციის პოტენციალის და შევსებული მოლეკულური ორბიტალების მნიშვნელობები

№		გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	სრული ენერგია, ევ	-3129.524	-2809.020	-3139.830
2	ელექტრონების ენერგია, ევ	-18383.493	-17763.813	-18352.040
3	ბირთვების განზიდვის ენერგია, ევ	15253.970	14954.793	15212.210
4	იონიზაციის პოტენციალი, ვ	9.734	9.883	9.863
5	შევსებული მოლეკულური ორბიტალების რაოდენობა	44	44	44

ცხრილი 6. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ტინიდაზოლის მოლეკულის ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები

N		გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	წარმოქმნის სითბო, კჯ/მოლი	-69.850	-221.282	413.249
2	დიპოლური მომენტი, დებაი	2.438	8.357	4.577

ცხრილი 7. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ტინიდაზოლის მოლეკულის ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები

N	ატომი	გამოთვლის მეთოდი	ატომებზე მუხტი	ელექტრონების განაწილება ორბიტალებზე			
				2S	2P _x	2P _y	2P _z
1	N(1)	AM1	-0.117	1.462	1.039	1.072	1.544
		PM3	0.382	1.268	0.929	0.957	1.464
		MNDO	-0.237	1.481	1.051	1.085	1.620
2	C(2)	AM1	-0.226	1.244	0.813	0.891	1.279
		PM3	-0.665	1.300	0.957	1.045	1.364
		MNDO	-0.110	1.213	0.787	0.855	1.255
3	C(3)	AM1	-0.035	1.254	0.995	0.845	0.941
		PM3	0.019	1.205	0.986	0.869	0.921
		MNDO	0.066	1.225	0.943	0.831	0.934
4	N(4)	AM1	-0.146	1.753	0.949	1.235	1.209
		PM3	-0.132	1.648	0.947	1.347	1.190
		MNDO	-0.225	1.745	0.971	1.287	1.221

5	C(5)	AM1	0.021	1.259	0.974	0.777	0.969
		PM3	-0.171	1.257	0.991	0.887	1.036
		MNDO	0.093	1.247	0.966	0.755	0.938
6	N(6)	AM1	0.617	1.401	1.004	0.997	0.981
		PM3	1.379	1.072	0.882	0.864	0.803
		MNDO	0.522	1.420	1.026	1.016	1.016
7	O(7)	AM1	-0.337	1.943	0.960	1.912	1.522
		PM3	-0.594	1.927	1.144	1.914	1.609
		MNDO	-0.350	1.929	1.760	1.345	1.317
8	O(8)	AM1	-0.391	1.943	1.784	1.105	1.560
		PM3	-0.630	1.929	1.830	1.235	1.636
		MNDO	-0.305	1.929	1.202	1.838	1.337
9	C(9)	AM1	-0.165	1.213	0.869	1.049	1.034
		PM3	-0.037	1.119	0.892	1.029	0.997
		MNDO	0.085	1.204	0.828	0.945	0.938
10	C(10)	AM1	0.014	1.216	0.949	0.870	0.951
		PM3	-0.083	1.172	0.901	0.926	1.084
		MNDO	0.191	1.215	0.878	0.821	0.895
11	C(11)	AM1	-0.890	1.326	1.266	1.231	1.068
		PM3	-0.573	1.252	1.049	1.172	1.100
		MNDO	-0.223	1.286	0.952	0.991	0.995
12	S(12)	AM1	2.808	0.999	0.724	0.731	0.737
		PM3	2.194	1.249	0.867	0.849	0.842
		MNDO	1.329	1.539	1.034	1.043	1.056
13	O(13)	AM1	-0.926	1.932	1.829	1.797	1.367
		PM3	-0.819	1.890	1.829	1.709	1.391
		MNDO	-0.676	1.960	1.907	1.474	1.335
14	O(14)	AM1	-0.928	1.932	1.454	1.772	1.770
		PM3	-0.819	1.890	1.828	1.711	1.389
		MNDO	-0.683	1.960	1.373	1.438	1.912
15	C(15)	AM1	-0.863	1.310	1.154	1.205	1.194
		PM3	-0.518	1.233	1.120	1.076	1.089
		MNDO	-0.169	1.280	1.022	0.973	0.895
16	C(16)	AM1	-0.196	1.220	0.980	0.957	1.039
		PM3	-0.082	1.131	0.949	0.971	1.031
		MNDO	0.022	1.218	0.882	0.930	0.948
17	H(17)	AM1	0.209	0.791			
		PM3	0.161	0.839			
		MNDO	0.131	0.869			
18	H(18)	AM1	0.129	0.871			
		PM3	0.084	0.916			
		MNDO	0.040	0.960			

19	H(19)	AM1	0.104	0.896			
		PM3	0.050	0.950			
		MNDO	0.020	0.980			
20	H(20)	AM1	0.106	0.894			
		PM3	0.050	0.950			
		MNDO	0.022	0.978			
21	H(21)	AM1	0.149	0.851			
		PM3	0.108	0.892			
		MNDO	0.056	0.944			
22	H(22)	AM1	0.116	0.884			
		PM3	0.108	0.892			
		MNDO	0.053	0.947			
23	H(23)	AM1	0.163	0.837			
		PM3	0.113	0.887			
		MNDO	0.067	0.933			
24	H(24)	AM1	0.176	0.824			
		PM3	0.113	0.887			
		MNDO	0.075	0.925			
25	H(25)	AM1	0.155	0.845			
		PM3	0.099	0.901			
		MNDO	0.056	0.944			
26	H(26)	AM1	0.165	0.835			
		PM3	0.099	0.901			
		MNDO	0.061	0.939			
27	H(27)	AM1	0.097	0.903			
		PM3	0.046	0.954			
		MNDO	0.021	0.979			
28	H(28)	AM1	0.096	0.904			
		PM3	0.059	0.941			
		MNDO	0.033	0.967			
29	H(29)	AM1	0.098	0.902			
		PM3	0.058	0.942			
		MNDO	0.032	0.968			

ცხრილი 8. AM1, PM3 და MNDO კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ტინიდაზოლის მოლეკულაში ატომთაშორისი მანძილების მნიშვნელობები

N	ატომთაშორისი ბმა		გამოთვლის მეთოდი		
			AM1	PM3	MNDO
1	N(1)–C(2)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.414	1.425	1.412
		რიგი	1.097	1.144	1.075
2	C(2)–C(3)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.424	1.404	1.396
		რიგი	1.415	1.408	1.505
3	C(3)–N(4)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.375	1.369	1.381
		რიგი	1.368	1.410	1.293
4	N(4)–C(5)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.372	1.369	1.349
		რიგი	1.445	1.415	1.526
5	N(1)–C(5)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.401	1.389	1.411
		რიგი	1.208	1.332	1.151
6	C(2)–N(6)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.455	1.470	1.470
		რიგი	0.902	0.910	0.867
7	N(6)–O(7)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.201	1.213	1.213
		რიგი	1.466	1.508	1.435
8	N(6)–O(8)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.206	1.217	1.209
		რიგი	1.420	1.465	1.474
9	C(5)–C(9)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.486	1.481	1.500
		რიგი	0.976	0.984	0.953
10	N(1)–C(10)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.436	1.485	1.475
		რიგი	0.916	0.956	0.888
11	C(10)–C(11)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.525	1.517	1.542
		რიგი	0.974	0.996	0.961
12	C(11)–S(12)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.721	1.835	1.838
		რიგი	0.594	0.684	0.745
13	S(12)–O(13)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.399	1.459	1.531
		რიგი	1.253	1.211	1.071
14	S(12)–O(14)	მანძილი, $\overset{\circ}{\text{\AA}}$	1.400	1.459	1.532
		რიგი	1.252	1.211	1.069

15	S(12)–C(15)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.699	1.817	1.837
		რიგი	0.643	0.733	0.751
16	C(15)–C(16)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.508	1.512	1.522
		რიგი	0.989	0.996	0.983
17	C(3)–H(17)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.093	1.093	1.085
		რიგი	0.918	0.944	0.942
19	C(9)–H(18)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.119	1.097	1.110
		რიგი	0.964	0.980	0.975
20	C(9)–H(19)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.119	1.103	1.109
		რიგი	0.962	0.970	0.970
21	C(9)–H(20)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.119	1.104	1.110
		რიგი	0.960	0.970	0.969
22	C(10)–H(21)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.133	1.114	1.117
		რიგი	0.944	0.964	0.962
23	C(10)–H(22)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.130	1.114	1.117
		რიგი	0.951	0.964	0.961
24	C(11)–H(23)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.124	1.115	1.108
		რიგი	0.953	0.963	0.970
25	C(11)–H(24)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.125	1.115	1.107
		რიგი	0.949	0.964	0.969
26	C(15)–H(25)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.123	1.108	1.108
		რიგი	0.956	0.973	0.968
27	C(15)–H(26)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.108
		რიგი	0.953	0.973	0.968
28	C(16)–H(27)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.117	1.098	1.111
		რიგი	0.974	0.987	0.969
29	C(16)–H(28)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.118	1.099	1.108
		რიგი	0.972	0.986	0.976
30	C(16)–H(29)	მანძილი, $\text{\AA}$	1.119	1.099	1.108
		რიგი	0.972	0.986	0.976

ცხრილი 9. AM1, PM3 და MNDO კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი სავალენტო კუთხეთა მნიშვნელობები ტინიდაზოლის მოლეკულაში

N	ვალენტური კუთხე	გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1.	N(1)–C(2)–C(3)	106.600	106.057	107.663
2.	C(2)–C(3)–N(4)	109.591	108.709	108.755
3.	C(2)–N(1)–C(5)	105.824	107.518	105.156
4.	N(1)–C(2)–N(6)	126.346	128.103	124.516
5.	C(2)–N(6)–O(7)	117.946	118.644	120.060
6.	C(2)–N(6)–O(8)	120.008	119.647	118.388
7.	N(1)–C(5)–C(9)	123.296	128.523	126.278
8.	C(2)–N(1)–C(10)	127.017	123.678	128.180
9.	N(1)–C(10)–C(11)	114.950	114.842	112.085
10.	C(10)–C(11)–S(12)	111.872	113.360	113.235
11.	C(11)–S(12)–O(13)	109.427	108.636	109.139
12.	C(11)–S(12)–O(14)	107.771	108.636	108.039
13.	S(12)–C(15)–C(16)	111.294	113.693	113.741
14.	C(2)–C(3)–H(17)	127.118	128.726	130.029
15.	C(5)–C(9)–H(18)	110.022	111.502	110.653
16.	C(5)–C(9)–H(19)	110.288	110.659	111.391
17.	C(5)–C(9)–H(20)	110.022	110.67	111.081
18.	N(1)–C(10)–H(21)	108.239	107.931	109.740
19.	N(1)–C(10)–H(22)	107.447	107.886	108.172
20.	C(10)–C(11)–H(23)	109.794	109.629	112.553
21.	C(10)–C(11)–H(24)	107.599	109.642	110.961
22.	S(12)–C(15)–H(25)	111.940	110.179	105.878
23.	S(12)–C(15)–H(26)	111.516	110.191	105.861
24.	C(15)–C(16)–H(27)	110.375	110.925	108.651
25.	C(15)–C(16)–H(28)	110.497	111.799	112.050
26.	C(15)–C(16)–H(29)	110.508	111.785	112.074

ცხრილი 10. AM1, PM3 და MNDO-ს მეთოდებით გამოთვლილი ტინიდაზოლის მოლეკულის სრული ენერგიის, ელექტრონების ენერგიის, ბირთვების განზიდვის ენერგიის, იონიზაციის პოტენციალის და შევსებული მოლეკულური ორბიტალების მნიშვნელობები

N		გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	სრული ენერგია, ევ	-3295.324	-2992.316	-3336.255
2	ელექტრონების ენერგია, ევ	-18850.177	-17949.867	-18473.021
3	ბირთვების განზიდვის ენერგია, ევ	15554.823	14957.551	15136.766
4	იონიზაციის პოტენციალი, ევ	10.072	10.386	10.288

5	შეესებულის მოლეკულური ორბიტალების რაოდენობა	45	45	45
---	--	----	----	----

ცხრილი 11. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის კომპლექსის მოლეკულაში წარმოქმნის სითბო (ΔH) და დიპოლური მომენტი (μ) ნაქსოჯინის მოლეკულაში

№		გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO
1	წარმოქმნის სითბო, კჯ/მოლი	-59.217	-547.752	-227.893
2	დიპოლური მომენტი, დეზაი	12.614	8.869	10.544

ცხრილი 12. AM1, PM და MNDO-d მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის ბიოკომპლექსნაერთის მოლეკულის თერმოდინამიკური თვისებები (სხვადასხვა ტემპერატურაზე $p=101325$ პა)

T, K	გამოთვლის მეთოდი	წარმოქმნის სითბო, კკალ მოლზე	ენტალპია, კკალ მოლზე	თბოტევადობა, კალ მოლი·გრად	ენტროპია, კალ მოლი·გრად
298	AM1	-14.153	12.773	87.665	141.685
	PM3	-130.913	14.341	99.401	150.594
	MNDO-d	-54.468	12.833	87.501	141.696
300	AM1	-13.977	12.949	88.339	142.274
	PM3	-130.631	14.540	100.150	151.261
	MNDO-d	-54.292	13.009	88.146	142.283
350	AM1	-9.137	17.790	105.288	157.164
	PM3	-125.158	20.013	118.652	168.096
	MNDO-d	-49.480	17.821	104.367	157.088
400	AM1	-3.454	23.473	121.928	172.316
	PM3	-118.781	26.390	136.234	185.101
	MNDO-d	-43.859	23.442	120.360	172.074
450	AM1	3.042	29.969	137.719	187.599
	PM3	-111.558	33.613	152.451	202.098
	MNDO-d	-37.456	29.845	135.623	187.140
500	AM1	10.299	37.226	152.378	202.878
	PM3	-103.561	41.610	167.163	218.935
	MNDO-d	-30.314	36.986	149.864	202.176
550	AM1	18.259	45.186	165.817	218.042
	PM3	-94.866	50.305	180.406	235.500
	MNDO-d	-22.488	44.812	162.968	217.084
600	AM1	26.861	53.788	178.063	233.003
	PM3	-85.543	59.628	192.306	251.716
	MNDO-d	-14.036	53.265	174.939	231.785
650	AM1	36.047	62.974	189.198	247.702

T, K	გამოთვლის მეთოდი	წარმოქმნის სიბო, $\frac{\text{კკალ}}{\text{მოლზე}}$	ენთალპია, $\frac{\text{კკალ}}{\text{მოლზე}}$	თბოტევადობა, $\frac{\text{კალ}}{\text{მოლი} \cdot \text{გრად}}$	ენტროპია, $\frac{\text{კალ}}{\text{მოლი} \cdot \text{გრად}}$
	PM3	-75.655	69.515	203.013	267.539
	MNDO-d	-5.012	62.289	185.846	246.225
700	AM1	45.764	72.691	199.326	262.100
	PM3	-65.259	79.912	212.674	282.944
	MNDO-d	4.532	71.833	195.782	260.367
750	AM1	55.964	82.892	208.549	276.171
	PM3	-54.403	90.768	221.421	297.920
	MNDO-d	14.551	81.852	204.847	274.188
800	AM1	66.606	93.533	216.966	289.904
	PM3	-43.130	102.040	229.366	312.468
	MNDO-d	25.004	92.305	213.134	287.677

ცხრილი 13. AM1, PM3 და MNDO-d კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილ ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის კომპლექსის მოლეკულაში ატომთაშორისი მანძილთა მნიშვნელობები

N	ატომთაშორისი ზმა		გამოთვლის მეთოდი		
			AM1	PM3	MNDO-d
1	N(1)–C(2)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.418	1.417	1.410
		რიგი	1.103	1.175	1.090
2	C(2)–C(3)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.425	1.404	1.398
		რიგი	1.471	1.445	1.528
3	C(3)–N(4)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.384	1.380	1.389
		რიგი	1.307	1.369	1.246
4	N(4)–C(5)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.369	1.374	1.355
		რიგი	1.437	1.398	1.464
5	N(1)–C(5)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.388	1.378	1.395
		რიგი	1.262	1.391	1.231
6	C(2)–N(6)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.465	1.482	1.473
		რიგი	0.877	0.886	0.862
7	N(6)–O(7)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.200	1.210	1.209
		რიგი	1.465	1.526	1.473
8	N(6)–O(8)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.202	1.216	1.211
		რიგი	1.453	1.473	1.445
9	N(1)–C(9)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.438	1.477	1.480

		რიგო	0.908	0.963	0.869
10	C(9)–C(10)	სიგრძე, Å ^o	1.544	1.534	1.559
		რიგო	0.951	0.971	0.937
11	C(10)–N(11)	სიგრძე, Å ^o	1.447	1.491	1.464
		რიგო	0.982	0.986	0.960
12	N(11)–C(12)	სიგრძე, Å ^o	1.455	1.490	1.475
		რიგო	0.968	0.979	0.936
13	C(12)–C(13)	სიგრძე, Å ^o	1.532	1.532	1.557
		რიგო	0.955	0.970	0.940
14	C(13)–O(14)	სიგრძე, Å ^o	1.423	1.415	1.401
		რიგო	0.983	0.984	0.968
15	O(14)–C(15)	სიგრძე, Å ^o	1.424	1.415	1.400
		რიგო	0.980	0.984	0.971
16	C(15)–C(16)	სიგრძე, Å ^o	1.530	1.532	1.556
		რიგო	0.956	0.970	0.940
17	N(11)–C(16)	სიგრძე, Å ^o	1.457	1.491	1.475
		რიგო	0.964	0.979	0.938
18	N(17)–C(18)	სიგრძე, Å ^o	1.418	1.419	1.410
		რიგო	1.105	1.169	1.089
19	C(18)–C(19)	სიგრძე, Å ^o	1.422	1.404	1.399
		რიგო	1.463	1.426	1.528
20	C(19)–N(20)	სიგრძე, Å ^o	1.383	1.379	1.391
		რიგო	1.316	1.385	1.247
21	N(20)–C(21)	სიგრძე, Å ^o	1.372	1.378	1.353
		რიგო	1.426	1.377	1.466
22	N(17)–C(21)	სიგრძე, Å ^o	1.385	1.373	1.393
		რიგო	1.278	1.415	1.229
23	C(18)–N(22)	სიგრძე, Å ^o	1.464	1.475	1.475
		რიგო	0.876	0.900	0.859
24	N(22)–O(23)	სიგრძე, Å ^o	1.200	1.208	1.209
		რიგო	1.463	1.538	1.472
25	N(22)–O(24)	სიგრძე, Å ^o	1.200	1.222	1.210
		რიგო	1.456	1.444	1.450

26	N(17)–C(25)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.436	1.476	1.479
		რიგი	0.904	0.963	0.870
27	C(25)–C(26)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.546	1.529	1.558
		რიგი	0.951	0.975	0.938
28	C(26)–N(27)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.445	1.492	1.465
		რიგი	0.984	0.984	0.958
29	N(27)–C(28)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.456	1.490	1.474
		რიგი	0.966	0.980	0.938
30	C(28)–C(29)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.531	1.532	1.556
		რიგი	0.956	0.970	0.939
31	C(29)–O(30)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.424	1.415	1.401
		რიგი	0.979	0.985	0.970
32	O(30)–C(31)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.422	1.416	1.401
		რიგი	0.983	0.983	0.970
33	C(31)–C(32)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.532	1.532	1.557
		რიგი	0.955	0.970	0.940
34	N(27)–C(32)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.458	1.491	1.476
		რიგი	0.965	0.979	0.938
35	N(4)–Zn(33)	სიგრძე, $\text{\AA}$	2.283	2.063	2.104
		რიგი	0.261	0.612	0.477
36	N(20)–Zn(33)	სიგრძე, $\text{\AA}$	2.266	2.062	2.096
		რიგი	0.272	0.611	0.484
37	Zn(33)–Cl(34)	სიგრძე, $\text{\AA}$	2.175	2.182	2.192
		რიგი	0.787	0.914	1.090
38	Zn(33)–Cl(35)	სიგრძე, $\text{\AA}$	2.124	2.240	2.206
		რიგი	0.895	0.772	1.048
39	C(3)–H(36)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.099	1.096	1.086
		რიგი	0.904	0.940	0.938
40	C(5)–H(37)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.099	1.111	1.091
		რიგი	0.901	0.903	0.919
41	C(9)–H(38)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.132	1.112	1.113
		რიგი	0.942	0.960	0.964

42	C(9)–H(39)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.129	1.111	1.120
		რიგი	0.954	0.972	0.962
43	C(10)–H(40)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.130	1.112	1.120
		რიგი	0.953	0.968	0.958
44	C(10)–H(41)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.132	1.111	1.118
		რიგი	0.952	0.971	0.963
45	C(12)–H(42)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.116
		რიგი	0.959	0.973	0.966
46	C(12)–H(43)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.129	1.108	1.119
		რიგი	0.952	0.972	0.960
47	C(13)–H(44)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.123
		რიგი	0.953	0.970	0.949
48	C(13)–H(45)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.123	1.102	1.120
		რიგი	0.949	0.969	0.958
49	C(15)–H(46)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.123	1.108	1.123
		რიგი	0.953	0.969	0.949
50	C(15)–H(47)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.122	1.102	1.120
		რიგი	0.949	0.969	0.958
51	C(16)–H(48)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.128	1.108	1.119
		რიგი	0.952	0.972	0.960
52	C(16)–H(49)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.115
		რიგი	0.958	0.973	0.967
53	C(19)–H(50)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.097	1.096	1.087
		რიგი	0.908	0.941	0.933
54	C(21)–H(51)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.103	1.111	1.088
		რიგი	0.898	0.903	0.927
55	C(25)–H(52)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.131	1.127	1.113
		რიგი	0.945	0.935	0.963
56	C(25)–H(53)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.129	1.110	1.120
		რიგი	0.954	0.969	0.963
57	C(26)–H(54)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.130	1.112	1.120
		რიგი	0.953	0.968	0.956

58	C(26)–H(55)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.133	1.111	1.118
		რიგი	0.952	0.971	0.963
59	C(28)–H(56)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.119	1.108	1.115
		რიგი	0.958	0.974	0.966
60	C(28)–H(57)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.128	1.108	1.119
		რიგი	0.954	0.973	0.960
61	C(29)–H(58)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.123
		რიგი	0.954	0.970	0.949
62	C(29)–H(59)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.123	1.102	1.120
		რიგი	0.949	0.969	0.958
63	C(31)–H(60)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.123	1.108	1.123
		რიგი	0.953	0.969	0.949
64	C(31)–H(61)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.122	1.102	1.120
		რიგი	0.950	0.969	0.958
65	C(32)–H(62)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.128	1.108	1.119
		რიგი	0.953	0.973	0.960
66	C(32)–H(63)	სიგრძე, $\text{\AA}$	1.124	1.108	1.115
		რიგი	0.959	0.972	0.967

ცხრილი 14. AM1, PM3 და MNDO-d კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი სავალენტო მნიშვნელობები ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის კომპლექსის მოლეკულაში

N	ვალენტური კუთხე	გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO-d
1	N(1)–C(2)–C(3)	106.021	106.349	107.979
2	C(2)–C(3)–N(4)	109.199	108.199	108.083
3	C(2)–N(1)–C(5)	106.572	108.033	105.476
4	N(1)–C(2)–N(6)	126.860	127.883	124.472
5	C(2)–N(6)–O(7)	117.456	118.444	118.397
6	C(2)–N(6)–O(8)	119.891	119.309	119.732
7	C(2)–N(1)–C(9)	123.982	128.940	130.813
8	N(1)–C(9)–C(10)	118.724	112.830	115.023
9	C(9)–C(10)–N(11)	116.186	110.581	112.697
10	C(10)–N(11)–C(12)	116.075	113.884	117.880
11	N(11)–C(12)–C(13)	115.713	112.833	113.580
12	C(12)–C(13)–O(14)	114.858	112.585	113.788

N	ვალენტური კუთხე	გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO-d
13	C(13)–O(14)–C(15)	112.858	113.347	118.917
14	C(10)–N(11)–C(16)	113.927	113.639	117.362
15	N(20)–C(21)–N(17)	111.431	108.360	111.026
16	C(21)–N(17)–C(18)	106.233	108.225	105.456
17	N(17)–C(18)–C(19)	106.534	106.404	108.022
18	C(18)–C(19)–N(20)	109.067	107.949	107.936
19	C(19)–N(20)–C(21)	106.691	109.058	107.549
20	N(17)–C(18)–N(22)	127.201	125.591	124.275
21	C(18)–N(22)–O(23)	117.224	119.580	118.212
22	C(18)–N(22)–O(24)	119.880	117.973	119.741
23	C(18)–N(17)–C(25)	127.982	125.352	130.860
24	N(17)–C(25)–C(26)	117.717	113.542	114.173
25	C(25)–C(26)–N(27)	119.028	110.830	112.443
26	C(26)–N(27)–C(28)	116.200	113.601	117.945
27	N(27)–C(28)–C(29)	115.742	112.928	113.559
28	C(28)–C(29)–O(30)	114.749	112.476	113.497
29	C(29)–O(30)–C (31)	112.853	113.248	118.956
30	C(26)–N(27)–C(32)	113.235	113.766	117.321
31	C(3)–N(4)–Zn(33)	119.991	135.264	130.029
32	C(19)–N(20)–Zn(33)	130.217	134.714	123.981
33	N(4)–Zn(33)–Cl(34)	90.997	108.742	104.608
34	N(20)–Zn(33)–Cl(34)	90.636	108.357	108.528
35	N(4)–Zn(33)–Cl(35)	101.858	100.151	105.724
36	N(20)–Zn(33)–Cl(35)	105.775	100.167	102.762
37	C(2)–C(3)–H(36)	127.902	128.018	129.948
38	N(1)–C(5)–H(37)	123.279	128.777	123.659
39	N(1)–C(9)–H(38)	106.858	110.126	109.821
40	N(1)–C(9)–H(39)	107.405	107.378	107.124
41	C(9)–C(10)–H(40)	104.120	108.053	105.947
42	C(9)–C(10)–H(41)	106.952	110.409	108.626
43	N(11)–C(12)–H(42)	110.600	109.874	111.152
44	N(11)–C(12)–H(43)	105.708	105.927	107.526
45	C(12)–C(13)–H(44)	110.120	111.486	109.976
46	C(12)–C(13)–H(45)	109.710	111.826	109.204
47	O(14)–C(15)–H(46)	109.079	109.662	110.546
48	O(14)–C(15)–H(47)	104.095	102.515	106.654
49	N(11)–C(16)–H(48)	106.230	106.059	107.670
50	N(11)–C(16)–H(49)	110.095	109.544	110.942

N	ვალენტური კუთხე	გამოთვლის მეთოდი		
		AM1	PM3	MNDO-d
51	C(18)–C(19)–H(50)	127.578	128.135	130.032
52	N(17)–C(21)–H(51)	123.227	129.080	123.672
53	N(17)–C(25)–H(52)	107.877	106.904	109.993
54	N(17)–C(25)–H(53)	107.656	108.168	107.268
55	C(25)–C(26)–H(54)	103.531	108.054	106.067
56	C(25)–C(26)–H(55)	106.668	110.474	109.083
57	N(27)–C(28)–H(56)	110.894	109.769	110.986
58	N(27)–C(28)–H(57)	105.163	105.945	107.641
59	C(28)–C(29)–H(58)	110.094	111.485	110.099
60	C(28)–C(29)–H(59)	109.800	111.856	109.307
61	O(30)–C(31)–H(60)	109.288	109.663	110.505
62	O(30)–C(31)–H(61)	104.108	102.501	106.598
63	N(27)–C(32)–H(62)	106.209	106.009	107.620
64	N(27)–C(32)–H(63)	110.233	109.598	110.974

ცხრილი 15. კვანტურ-ქიმიური ნახევრადემპირიული მეთოდებით გამოთვლილი ნაქსოჯინთან თუთი(II)-ის ქლორიდის დიჰიდრატის კომპლექსის მოლეკულის ენერგეტიკული, ელექტრონული და სტრუქტურული მონაცემები

N	ატომი	გამოთვლის მეთოდი	ატომებზე მუხტი	n	ელექტრონების განაწილება ორბიტალებზე			
					nS	nP _x	nP _y	nP _z
1	N(1)	AM1	-0.085	2	1.473	1.050	1.072	1.491
		PM3	0.450		1.256	0.926	0.970	1.397
		MNDO-d	-0.205		1.480	1.057	1.095	1.574
2	C(2)	AM1	-0.198	2	1.252	0.815	0.899	1.232
		PM3	-0.611		1.300	0.961	1.038	1.312
		MNDO-d	-0.074		1.212	0.786	0.855	1.221
3	C(3)	AM1	-0.022	2	1.259	0.982	0.848	0.933
		PM3	-0.065		1.215	0.996	0.888	0.966
		MNDO-d	0.074		1.224	0.920	0.829	0.953
4	N(4)	AM1	-0.184	2	1.655	0.981	1.270	1.279
		PM3	0.210		1.416	0.930	1.211	1.234
		MNDO-d	-0.126		1.578	0.998	1.234	1.316
5	C(5)	AM1	-0.007	2	1.277	0.989	0.787	0.954
		PM3	-0.276		1.281	1.047	0.904	1.043
		MNDO-d	0.170		1.250	0.934	0.753	0.893
6	N(6)	AM1	0.625	2	1.400	1.000	0.991	0.984
		PM3	1.381		1.073	0.876	0.857	0.813
		MNDO-d	0.525		1.419	1.023	1.014	1.019

7	O(7)	AM1	-0.331	2	1.943	0.969	1.885	1.534
		PM3	-0.577		1.927	1.171	1.901	1.579
		MNDO-d	-0.301		1.929	1.181	1.837	1.355
8	O(8)	AM1	-0.351	2	1.943	1.788	1.135	1.485
		PM3	-0.621		1.928	1.826	1.271	1.596
		MNDO-d	-0.333		1.929	1.758	1.342	1.303
9	C(9)	AM1	-0.055	2	1.237	0.954	0.868	0.996
		PM3	-0.138		1.187	0.979	0.963	1.009
		MNDO-d	0.155		1.230	0.834	0.819	0.962
10	C(10)	AM1	-0.077	2	1.232	0.909	1.019	0.917
		PM3	-0.095		1.181	0.960	1.029	0.924
		MNDO-d	0.1334		1.220	0.848	0.931	0.868
11	N(11)	AM1	-0.256	2	1.586	1.315	1.060	1.295
		PM3	-0.090		1.511	1.419	1.093	1.098
		MNDO-d	-0.430		1.568	1.472	1.110	1.280
12	C(12)	AM1	-0.105	2	1.234	1.023	0.912	0.936
		PM3	-0.112		1.184	1.020	0.991	0.917
		MNDO-d	0.105		1.227	0.950	0.876	0.842
13	C(13)	AM1	-0.059	2	1.241	1.003	0.895	0.920
		PM3	0.029		1.163	0.961	0.848	1.000
		MNDO-d	0.137		1.228	0.913	0.790	0.932
14	O(14)	AM1	-0.260	2	1.883	1.835	1.181	1.362
		PM3	-0.248		1.857	1.925	1.211	1.255
		MNDO-d	-0.324		1.824	1.897	1.164	1.439
15	C(15)	AM1	-0.060	2	1.241	0.966	0.901	0.952
		PM3	0.030		1.162	0.971	0.970	0.867
		MNDO-d	0.139		1.227	0.918	0.878	0.838
16	C(16)	AM1	-0.101	2	1.234	1.040	0.921	0.907
		PM3	-0.118		1.184	1.014	0.908	1.011
		MNDO-d	0.103		1.227	0.945	0.800	0.925
17	N(17)	AM1	-0.090	2	1.459	1.080	1.054	1.497
		PM3	0.466		1.254	0.926	1.193	1.160
		MNDO-d	-0.205		1.477	1.428	1.121	1.178
18	C(18)	AM1	-0.201	2	1.248	0.877	0.840	1.237
		PM3	-0.639		1.299	0.977	1.190	1.173
		MNDO-d	-0.079		1.214	1.121	0.823	0.922
19	C(19)	AM1	-0.014	2	1.254	0.971	0.854	0.934
		PM3	-0.047		1.213	0.982	0.930	0.922
		MNDO-d	0.103		1.227	0.898	0.868	0.904
20	N(20)	AM1	-0.180	2	1.650	1.078	1.173	1.279
		PM3	0.201		1.418	0.944	1.222	1.215
		MNDO-d	-0.116		1.575	1.281	1.106	1.154
21	C(21)	AM1	-0.009	2	1.278	0.903	0.873	0.957

		PM3	-0.263		1.279	1.046	0.974	0.964
		MNDO-d	0.141		1.243	0.877	0.894	0.845
22	N(22)	AM1	0.622	2	1.400	1.005	0.985	0.988
		PM3	1.382		1.072	0.871	0.844	0.831
		MNDO-d	0.528		1.418	1.026	1.019	1.009
23	O(23)	AM1	-0.332	2	1.943	1.244	1.638	1.507
		PM3	-0.568		1.926	1.196	1.702	1.745
		MNDO-d	-0.302		1.929	1.274	1.649	1.451
24	O(24)	AM1	-0.347	2	1.942	1.251	1.727	1.427
		PM3	-0.632		1.928	1.868	1.376	1.460
		MNDO-d	-0.327		1.929	1.642	1.642	1.114
25	C(25)	AM1	-0.043	2	1.236	0.764	1.046	0.997
		PM3	-0.179		1.196	1.046	0.960	0.978
		MNDO-d	0.157		1.230	0.922	0.959	0.732
26	C(26)	AM1	-0.074	2	1.231	0.957	0.963	0.922
		PM3	-0.087		1.179	0.955	0.982	0.971
		MNDO-d	0.136		1.220	0.863	0.868	0.914
27	N(27)	AM1	-0.252	2	1.588	1.206	1.330	1.129
		PM3	-0.089		1.512	1.336	1.072	1.170
		MNDO-d	-0.428		1.569	1.270	1.403	1.186
28	C(28)	AM1	-0.106	2	1.234	0.952	1.006	0.914
		PM3	-0.111		1.184	0.974	0.964	0.989
		MNDO-d	0.105		1.227	0.888	0.930	0.850
29	C(29)	AM1	-0.058	2	1.241	0.897	0.944	0.976
		PM3	0.028		1.163	0.933	0.988	0.889
		MNDO-d	0.138		1.228	0.893	0.873	0.869
30	O(30)	AM1	-0.262	2	1.882	1.338	1.746	1.296
		PM3	-0.248		1.857	1.619	1.462	1.309
		MNDO-d	-0.323		1.824	1.469	1.705	1.325
31	C(31)	AM1	-0.060	2	1.241	0.925	0.980	0.914
		PM3	0.030		1.163	0.932	0.896	0.980
		MNDO-d	0.138		1.228	0.892	0.911	0.832
32	C(32)	AM1	-0.101	2	1.234	0.921	0.979	0.967
		PM3	-0.119		1.184	0.982	1.026	0.927
		MNDO-d	0.103		1.227	0.890	0.908	0.872
33	Zn(33)	AM1	0.563	4	0.576	0.376	0.271	0.214
		PM3	-0.029		0.707	0.427	0.445	0.451
		MNDO-d	-0.273		0.728	0.542	0.435	0.568
34	Cl(34)	AM1	-0.488	3	1.971	1.693	1.943	1.881
		PM3	-0.354		1.963	1.861	1.894	1.637
		MNDO-d	-0.183		1.953	1.867	1.893	1.463
35	Cl(35)	AM1	-0.416	3	1.968	1.578	1.930	1.940
		PM3	-0.454		1.965	1.596	1.953	1.940

		MNDO-d	-0.220		1.955	1.507	1.901	1.850
36	H(36)	AM1	0.236	1	0.764			
		PM3	0.178		0.822			
		MNDO-d	0.141		0.859			
37	H(37)	AM1	0.231	1	0.769			
		PM3	0.228		0.772			
		MNDO-d	0.173		0.827			
38	H(38)	AM1	0.156	1	0.844			
		PM3	0.122		0.878			
		MNDO-d	0.055		0.945			
39	H(39)	AM1	0.111	1	0.889			
		PM3	0.083		0.917			
		MNDO-d	0.028		0.972			
40	H(40)	AM1	0.111	1	0.889			
		PM3	0.065		0.935			
		MNDO-D	0.014		0.986			
41	H(41)	AM1	0.058	1	0.942			
		PM3	0.074		0.926			
		MNDO-d	0.015		0.985			
42	H(42)	AM1	0.091	1	0.909			
		PM3	0.073		0.927			
		MNDO-d	0.022		0.978			
43	H(43)	AM1	0.117	1	0.883			
		PM3	0.080		0.920			
		MNDO-d	0.033		0.967			
44	H(44)	AM1	0.062	1	0.938			
		PM3	0.035		0.965			
		MNDO-d	-0.007		1.007			
45	H(45)	AM1	0.117	1	0.883			
		PM3	0.072		0.928			
		MNDO-d	0.038		0.962			
46	H(46)	AM1	0.066	1	0.934			
		PM3	0.033		0.967			
		MNDO-d	-0.009		1.009			
47	H(47)	AM1	0.119	1	0.881			
		PM3	0.071		0.929			
		MNDO-d	0.035		0.965			
48	H(48)	AM1	0.117	1	0.883			
		PM3	0.081		0.919			
		MNDO-d	0.032		0.968			
49	H(49)	AM1	0.102	1	0.898			
		PM3	0.074		0.926			
		MNDO-d	0.017		0.983			

50	H(50)	AM1	0.230	1	0.770			
		PM3	0.177		0.823			
		MNDO-d	0.159		0.841			
51	H(51)	AM1	0.233	1	0.767			
		PM3	0.228		0.772			
		MNDO-d	0.149		0.851			
52	H(52)	AM1	0.149	1	0.851			
		PM3	0.153		0.847			
		MNDO-d	0.061		0.939			
53	H(53)	AM1	0.105	1	0.895			
		PM3	0.090		0.910			
		MNDO-d	0.024		0.976			
54	H(54)	AM1	0.106	1	0.894			
		PM3	0.066		0.934			
		MNDO-d	0.010		0.990			
55	H(55)	AM1	0.060	1	0.940			
		PM3	0.070		0.930			
		MNDO-d	0.010		0.990			
56	H(56)	AM1	0.102	1	0.898			
		PM3	0.069		0.931			
		MNDO-d	0.014		0.986			
57	H(57)	AM1	0.111	1	0.889			
		PM3	0.075		0.925			
		MNDO-d	0.036		0.964			
58	H(58)	AM1	0.071	1	0.928			
		PM3	0.037		0.963			
		MNDO-d	-0.009		1.009			
59	H(59)	AM1	0.121	1	0.879			
		PM3	0.069		0.931			
		MNDO-d	0.037		0.963			
60	H(60)	AM1	0.065	1	0.935			
		PM3	0.036		0.964			
		MNDO-d	-0.009		1.009			
61	H(61)	AM1	0.115	1	0.885			
		PM3	0.071		0.929			
		MNDO-d	0.036		0.964			
62	H(62)	AM1	0.116	1	0.884			
		PM3	0.076		0.924			
		MNDO-d	0.036		0.964			
63	H(63)	AM1	0.097	1	0.903			
		PM3	0.079		0.921			
		MNDO-d	0.018		0.982			