



2-MERKAPTOYANTAR KISLOTA VA NIKEL ATSETAT ASOSIDA OLINGAN Ni(II) KOMPLEKS BIRIKMASINING SINTEZI VA TUZILISHINI TADQIQ ETISH

Z.A.Masharipova¹, Z.Sh Abdullayeva², O.R.Karimova³

¹Doktarant, Abu Rayhon Beruniy nomidagi Urganch davlat universiteti, Urganch

²PhD, Urganch RANCH texnologiya universiteti, Urganch

³Urganch davlat tibbiyot insituti stajyor-o‘qituvchi, Urganch

Annotatsiya. Mazkur ishda 2-merkaptoyantar kislota va ikki valentli nikel (Ni(II)) ioni asosida olingan kompleks birikmaning sintezi, tuzilishi, kvant-kimyoviy hisob-kitoblari hamda spektroskopik xossalari o‘rganildi. Dastlabki ligand sifatida 2-merkaptoyantar kislota ishlatildi. Ni(II) atsetatning 2-merkaptoyantar kislota bilan o‘zaro ta’siri asosida kompleks birikma sintez qilindi. Olingan kompleks birikmaning tuzilish xususiyatlarini aniqlash maqsadida kvant-kimyoviy hisoblashlar amalga oshirildi hamda molekulyar tuzilishi, elektron zichligining taqsimlanishi va global kimyoviy reaktivlik parametrlari tahlil qilindi. Shuningdek, kompleks birikmaning IQ spektri dastlabki ligand spektri bilan taqqoslanib, karboksil va tiol funksional guruhlariga tegishli tebranish chastotalaridagi o‘zgarishlar asosida ligandning Ni(II) ioniga koordinatsiyalanish xususiyatlari baholandi. Olingan natijalar asosida 2-merkaptoyantar kislota bilan Ni(II) ioni bilan kompleks birikma hosil qilishdagi koordinatsion xususiyatlari va kompleksning ehtimoliy tuzilishi haqida xulosa qilindi.

Kalit so‘zlar: 2-merkaptoyantar kislota, nikel(II) atsetat, Ni(II), kompleks birikma, koordinatsion birikma, kvant-kimyoviy hisoblashlar, IQ-spektroskopik tahlil, MEP, global kimyoviy reaktivlik parametrlari, IRC tahlili.

Abstract. This study investigates the synthesis, structure, quantum-chemical calculations, and spectroscopic properties of a Ni(II) complex compound obtained on the basis of 2-mercaptoposuccinic acid and nickel(II) acetate. 2-Mercaptoposuccinic acid was used as the initial ligand. The complex compound was synthesized through the interaction of nickel(II) acetate with 2-mercaptoposuccinic acid. Quantum-chemical calculations were performed to investigate the structural features of the synthesized complex, including its molecular structure, electron density distribution, and global chemical reactivity parameters. In addition, the IR spectrum of the complex compound was compared with that of the initial ligand, and changes in the vibrational frequencies associated with the carboxyl and thiol functional groups were analyzed to evaluate the coordination behavior of the ligand toward the Ni(II) ion. Based on the obtained results, the coordination properties of 2-

mercaptosuccinic acid in the formation of a complex compound with Ni(II) and the probable structure of the synthesized complex were determined.

Keywords: 2-mercaptosuccinic acid, nickel(II) acetate, Ni(II), complex compound, coordination compound, quantum-chemical calculations, IR spectroscopic analysis, molecular electrostatic potential, global chemical reactivity parameters, IRC analysis.

Аннотация. В данной работе исследованы синтез, строение, квантово-химические расчёты и спектроскопические свойства комплексного соединения Ni(II), полученного на основе 2-меркаптоянтарной кислоты и ацетата никеля(II). В качестве исходного лиганда использовали 2-меркаптоянтарную кислоту. Комплексное соединение было синтезировано взаимодействием ацетата никеля(II) с 2-меркаптоянтарной кислотой. Для изучения структурных особенностей полученного комплекса проведены квантово-химические расчёты, включая анализ молекулярной структуры, распределения электронной плотности и глобальных параметров химической реакционной способности. Кроме того, ИК-спектр комплексного соединения был сопоставлен с ИК-спектром исходного лиганда, а изменения частот колебаний, относящихся к карбоксильной и тиольной функциональным группам, были проанализированы для оценки характера координации лиганда с ионом Ni(II). На основании полученных результатов определены координационные свойства 2-меркаптоянтарной кислоты при образовании комплексного соединения с Ni(II) и предложена вероятная структура синтезированного комплекса.

Ключевые слова: 2-меркаптоянтарная кислота, ацетат никеля(II), Ni(II), комплексное соединение, координационное соединение, квантово-химические расчёты, ИК-спектроскопический анализ, молекулярный электростатический потенциал, глобальные параметры химической реакционной способности, IRC-анализ.

KIRISH. Hozirgi kunda organik va noorganik tabiatga ega bo‘lgan turli xil ligandlar asosida yangi koordinatsion birikmalarni olish, ularning tuzilishi va fizik-kimyoviy xossalarni chuqur tadqiq etishga katta e‘tibor qaratilmoqda. Ayniqsa, tarkibida bir nechta elektronodonor atomlar va funksional guruhlarni saqlagan ligandlarning o‘tish metallari ionlari bilan kompleks hosil qilish xususiyatlarini o‘rganish koordinatsion kimyoning dolzarb yo‘nalishlaridan biridir. Nikel(II) kompleks birikmalari kataliz, materialshunoslik, bioanorganik kimyo va boshqa amaliy sohalarda muhim ahamiyatga ega bo‘lib, ularning fizik-kimyoviy xossalari markaziy Ni(II) ionlari va ligandlar o‘rtasidagi koordinatsion bog‘larning tabiati hamda ligandning tuzilishiga bevosita bog‘liq. 2-Merkaptoyantar kislota tarkibida karboksil va tiol funksional guruhlarni saqlagan organik ligand bo‘lib, uning molekulasidagi kislorod va oltingugurt atomlari elektron juftlarini donor sifatida namoyon qilishi mumkin. Shu sababli mazkur ligand turli metall ionlari, jumladan, Ni(II) ionlari bilan koordinatsion bog‘lar hosil qilish imkoniyatiga ega. Ligandning tarkibidagi karboksil guruhning kislorod atomlari hamda tiol guruhining oltingugurt atomi metall markazi bilan o‘zaro ta’sirlashib, kompleks birikmaning turli koordinatsion tuzilishga ega bo‘lishini ta’minlashi mumkin. Nikel(II) ionining 2-merkaptoyantar kislota bilan kompleks hosil qilishi

jarayonida ligandning qaysi donor markazlari orqali koordinatsiyalanishi, koordinatsion soni, metall–ligand bog‘larining tabiati va kompleksning geometrik tuzilishini aniqlash muhim ilmiy masalalardan hisoblanadi. Ushbu xususiyatlarni aniqlashda infraqizil spektroskopiya, elementar tahlil, termik va rentgen-fazaviy tahlil kabi zamonaviy fizik-kimyoviy usullar bilan bir qatorda kvant-kimyoviy hisoblash usullaridan foydalanish komplekslarning elektron va molekulyar tuzilishini chuqurroq tushunish imkonini beradi. Mazkur tadqiqotda 2-merkaptoyantar kislota va nikel(II) atsetat asosida Ni(II) kompleks birikmasini sintez qilish, uning tarkibi va tuzilishini aniqlash, spektroskopik xususiyatlarini o‘rganish hamda kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida ligandning elektron tuzilishi va koordinatsion xususiyatlarini baholash maqsad qilib olindi. Shuningdek, kompleks hosil bo‘lish jarayonida ligandning funksional guruhlarida yuzaga keladigan o‘zgarishlarni IQ-spektrlar asosida tahlil qilish va olingan natijalarni nazariy hisoblashlar bilan taqqoslashga alohida e‘tibor qaratildi.

ADABIYOTLAR TAHLILI

Nikel(II) ionlari o‘zining o‘ziga xos koordinatsion xususiyatlari, turli donor atomlarga ega ligandlar bilan barqaror kompleks birikmalar hosil qilishi hamda muhim fizik-kimyoviy xossalari sababli koordinatsion kimyo sohasida keng tadqiq qilinayotgan o‘tish metall ionlaridan biridir. Ni(II) ionining elektron tuzilishi turli xil ligandlar bilan tetraedrik, kvadrat-planar yoki oktaedrik koordinatsion muhitlarning shakllanishiga imkon beradi. Hosil bo‘ladigan komplekslarning tarkibi, tuzilishi va xossalari markaziy metall ionining tabiati hamda ligandning donor atomlari va elektron tuzilishiga bevosita bog‘liq.

Adabiyotlarda Ni(II) ionining tarkibida kislorod, azot va oltingugurt donor atomlarini saqlagan organik ligandlar bilan hosil qilgan kompleks birikmalari keng o‘rganilgan. Bunday tadqiqotlarda komplekslarning tarkibi va tuzilishini aniqlash uchun infraqizil spektroskopiya, elektron spektroskopiya, termik tahlil, rentgen-fazaviy va rentgen-strukturaviy tahlil usullaridan foydalanilgan. Spektroskopik natijalar ligand tarkibidagi funksional guruhlarining metall ioniga koordinatsiyalanishi natijasida ularning xarakterli tebranish chastotalarida siljishlar yuzaga kelishini ko‘rsatadi.

2-Merkaptoyantar kislota tarkibida ikkita karboksil guruh hamda tiol guruhini saqlagan ko‘p funksional organik ligand hisoblanadi. Mazkur ligand tarkibidagi kislorod va oltingugurt atomlari elektron juftlarini donor sifatida namoyon qilishi mumkin. Shu sababli 2-merkaptoyantar kislota metall ionlari bilan turli koordinatsion bog‘lanishlarni hosil qilish imkoniyatiga ega. Ayniqsa, karboksil guruhlarining deprotonlanishi natijasida hosil bo‘ladigan karboksilat ionlari metall markazi bilan monodentat, bidentat yoki ko‘priklovchi koordinatsiya orqali bog‘lanishi mumkin. Tiol guruhidagi oltingugurt atomi ham metall markazi bilan koordinatsion bog‘ hosil qilishda ishtirok etishi ehtimoldan xoli emas.

2-Merkaptoyantar kislota asosidagi metall komplekslarini o‘rganishda ligandning koordinatsiyalanish markazlarini aniqlash alohida ahamiyatga ega. Kompleks hosil bo‘lish jarayonida ligandning $\nu(\text{C}=\text{O})$, $\nu(\text{C}-\text{O})$, $\nu(\text{O}-\text{H})$ va $\nu(\text{S}-\text{H})$ tebranish chastotalarida o‘zgarishlar kuzatilishi mumkin. Xususan, karboksil guruhga tegishli assimetrik va simmetrik tebranishlar orasidagi farqning o‘zgarishi karboksilat guruhining metall ioniga

koordinatsiyalanish usuli haqida ma’lumot beradi. S–H guruhiga tegishli tebranishning holati esa oltingugurt atomining koordinatsion jarayondagi ishtirokini baholash imkonini beradi.

Nikel(II) atsetat esa Ni(II) ionini kompleks hosil qilish jarayoniga kiritish uchun qulay boshlang‘ich birikmalardan biri hisoblanadi. Ni(II) atsetatning organik ligandlar bilan o‘zaro ta’siri natijasida ligand molekulalarining donor markazlari orqali koordinatsiyalangan yangi kompleks birikmalar hosil bo‘lishi mumkin. Bunday komplekslarning hosil bo‘lishida erituvchining tabiati, komponentlarning molyar nisbati, harorat, pH va reaksiya davomiyligi kabi omillar muhim rol o‘ynaydi.

Kompleks birikmalarning tuzilishini o‘rganishda infraqizil (IQ) spektroskopiya eng samarali usullardan biri hisoblanadi. IQ-spektrda ligand va kompleks birikmaga tegishli yutilish chiziqlarini taqqoslash orqali koordinatsiyalanish natijasida funksional guruhlarda sodir bo‘lgan o‘zgarishlarni aniqlash mumkin. Shuningdek, kompleksning elektron tuzilishini chuqurroq tavsiflash maqsadida kvant-kimyoviy hisoblashlardan foydalanish mumkin. Molekulyar geometriyaning optimallashtirilishi, Mulliken zaryadlarining taqsimlanishi, yuqori va quyi chegaraviy molekulyar orbitallar, molekulyar elektrostatik potensial hamda global kimyoviy reaktivlik parametrlari ligandning elektronodonorlik xususiyatlarini baholash imkonini beradi.

So‘nggi yillarda koordinatsion birikmalarni nazariy jihatdan tadqiq etishda kvant-kimyoviy hisoblash usullaridan foydalanish tobora kengayib bormoqda. Ushbu usullar yordamida ligandning eng faol elektron donor markazlarini aniqlash, metall–ligand o‘zaro ta’sirining ehtimoliy yo‘nalishini baholash va kompleksning energetik jihatdan qulay tuzilishini prognoz qilish mumkin. Shu jihatdan 2-merkaptoyantar kislotaning Ni(II) ionini bilan kompleks hosil qilish xususiyatlarini tajribaviy spektroskopik ma’lumotlar hamda kvant-kimyoviy hisoblashlar asosida kompleks tarzda o‘rganish muhim ilmiy ahamiyatga ega.

Shu nuqtai nazardan, 2-merkaptoyantar kislota va nikel(II) atsetat asosida yangi Ni(II) kompleks birikmasini sintez qilish, uning tarkibi va tuzilish xususiyatlarini aniqlash, ligandning koordinatsiyalanish markazlarini IQ-spektroskopik ma’lumotlar asosida belgilash hamda kvant-kimyoviy hisoblashlar yordamida elektron tuzilishini tavsiflash mazkur tadqiqotning asosiy yo‘nalishini tashkil etadi.

MATERIALLAR VA USULLAR

Tadqiqot ishida 2-merkaptoyantar kislota va nikel(II) atsetat asosida Ni(II) kompleks birikmasi sintez qilindi. Dastlab 0,50 g 2-merkaptoyantar kislota 40 ml distillangan suvda aralashtirilib, asta-sekin qizdirildi. Kislota eritmada to‘liq erigandan so‘ng eritmaga 5 ml 0,1 N KOH eritmasi qo‘shildi va ishqoriy muhit hosil qilindi. Alohida idishda 0,75 g $\text{Ni}(\text{CH}_3\text{COO})_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ 10 ml distillangan suvda eritildi. Tayyorlangan nikel(II) atsetat eritmasi ligand eritmasiga asta-sekin qo‘shilib, doimiy aralashtirib turildi. Reaksiya aralashmasi ma’lum vaqt davomida qizdirilib, so‘ng xona haroratida sovitildi. Hosil bo‘lgan kompleks birikma eritmadan ajratib olindi, distillangan suv bilan yuvildi va quritildi. Olingan mahsulotning tarkibi va tuzilishi IQ-spektroskopik hamda kvant-kimyoviy usullar yordamida tadqiq qilindi.

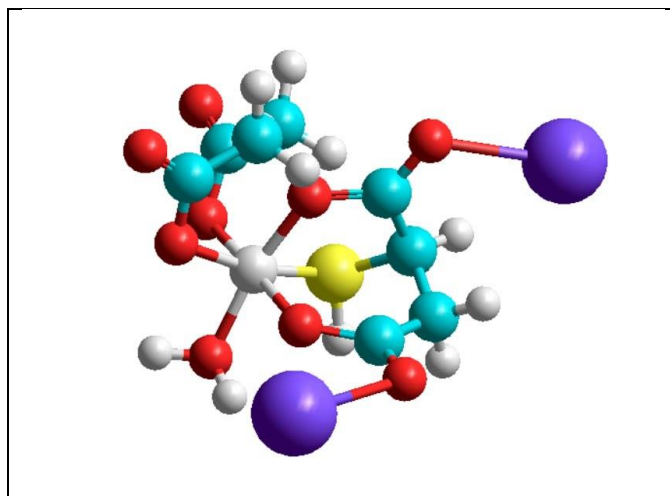


Natijalar va ularning muxokamasi.

Kvant-kimyoviy hisoblash usullari koordinatsiyaga uchraydigan ko‘p funksiyali ligandlarning raqobatdosh donor markazlarini aniqlash va ularning metall ionlari bilan o‘zaro ta’sirlashish xususiyatlarini oldindan baholash imkonini beradi. Mazkur tadqiqotda 2-merkaptoyantar kislota va Ni(II) ioni asosida sintez qilingan kompleks birikmaning energetik, geometrik va elektron xossalari HyperChem 8.07 dasturi yordamida kvant-kimyoviy usullar asosida o‘rganildi.

Hisoblashlar davomida molekulyar geometriya optimallashtirilib, bog‘ uzunliklari va bog‘lanish burchaklarining qiymatlari aniqlandi. Shuningdek, molekulaning elektron tuzilishi, zaryadlarning taqsimlanishi va kompleks hosil bo‘lishida ishtirok etishi mumkin bo‘lgan donor markazlarning elektron xususiyatlari tahlil qilindi. Hisoblashlar Semi-empirical/AM1/UHF usuli yordamida amalga oshirildi (1-rasm).

Olingan kvant-kimyoviy natijalar 2-merkaptoyantar kislota molekulasidagi karboksil guruhlarining kislorod atomlari hamda tiol guruhidagi oltingugurt atomining elektronodonorlik xususiyatlarini baholash va ularning Ni(II) ioni bilan koordinatsiyalanish ehtimolini aniqlash uchun qo‘llanildi. Hisoblash natijalari eksperimental IQ-spektroskopik ma’lumotlar bilan taqqoslanib, kompleksning ehtimoliy koordinatsion tuzilishi haqida xulosa chiqarildi.



1-rasm. 2-Merkaptoyantar kislota asosidagi Ni(II) kompleksining optimallashtirilgan molekulyar tuzilishi.

O‘tkazilgan kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida 2-merkaptoyantar kislota va Ni(II) asosida hosil bo‘lgan kompleks birikmaning minimal energiyaga mos keluvchi barqaror geometrik tuzilishi aniqlandi. Hisoblash natijalari asosida kompleks molekulasining energetik holati, geometrik parametrlari va elektron tuzilishi baholandi. Kompleksning hosil bo‘lish energiyasining nisbatan past qiymati uning energetik jihatdan barqaror tuzilishga ega ekanligini ko‘rsatadi (1-jadval). Shuningdek, hisoblangan bog‘ uzunliklari va bog‘lanish burchaklari kompleksda ligand va Ni(II) ioni o‘rtasidagi koordinatsion o‘zaro ta’sirning xususiyatlarini baholash imkonini berdi.

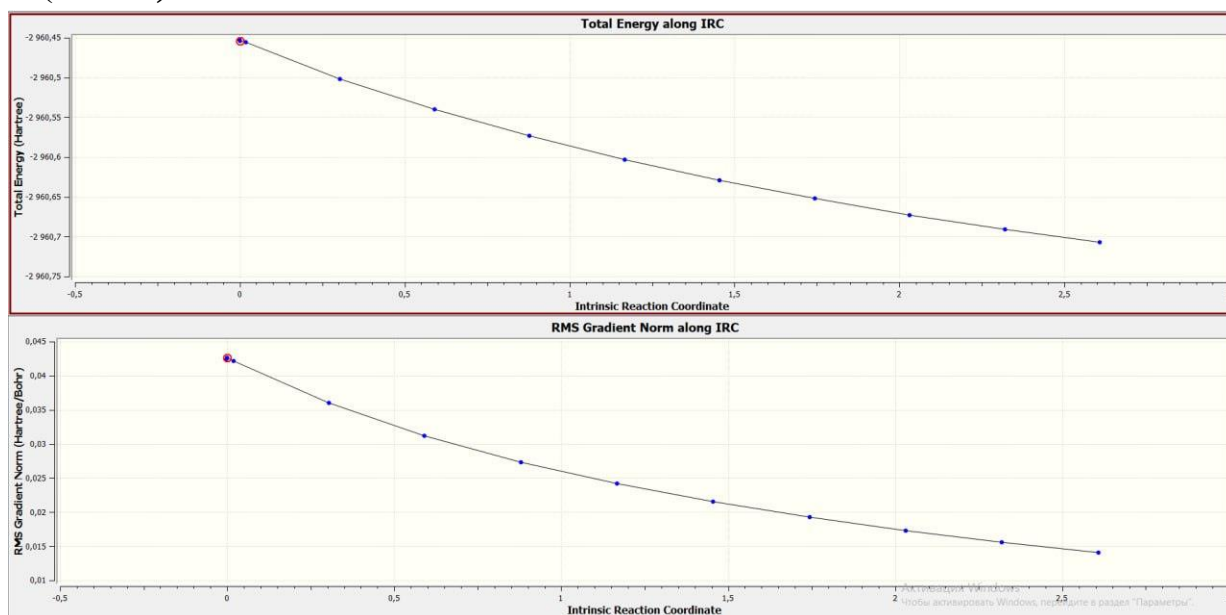
1-jadval

Kompleks nomi	Semi-empirical/AM1/UHF
---------------	------------------------

	E (Hartree)	Ni	N2	O2
[Ni(C4H4O4S)]	-7174,4	-0,182	-0.103	-0,382

2-merkaptoyantar kislota va Ni(II) ioni asosida hosil bo'lgan kompleks birikmaning shakllanish mexanizmini nazariy jihatdan baholash maqsadida o'tish holati uchun ichki reaksiya koordinatasi (Intrinsic Reaction Coordinate, IRC) hisoblashlari amalga oshirildi. IRC tahlili reaksiya jarayonining o'tish holatidan boshlang'ich reagentlar va hosil bo'lgan kompleks tomon qanday yo'nalishda kechishini aniqlash, shuningdek, reaksiya yo'li bo'ylab umumiy energiyaning o'zgarishini kuzatish imkonini beradi.

Hisoblash natijalari asosida 2-merkaptoyantar kislota molekulasidagi donor markazlarning Ni(II) ioni bilan o'zaro ta'sirlashishi natijasida kompleks hosil bo'lish jarayonining energetik jihatdan qulay yo'nalishi baholandi. IRC egri chizig'idagi energiya o'zgarishi reaksiya koordinatasi bo'ylab tizimning barqarorroq holatga o'tishini ko'rsatadi. Olingan natijalar kompleks birikmaning hosil bo'lish mexanizmini nazariy jihatdan asoslash va taklif etilgan koordinatsion tuzilmaning energetik barqarorligini baholash uchun qo'llanildi (2-rasm).

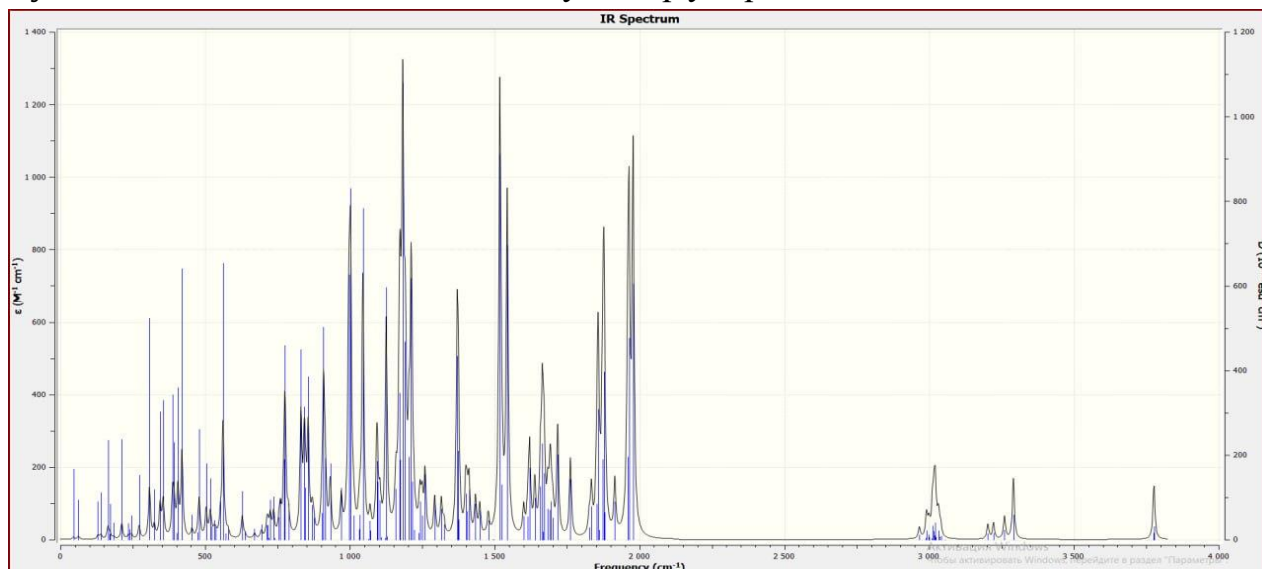


2-rasm. Umumiy energiyaning IRC bo'ylab o'zgarishi va RMS gradient normaning kamayishi

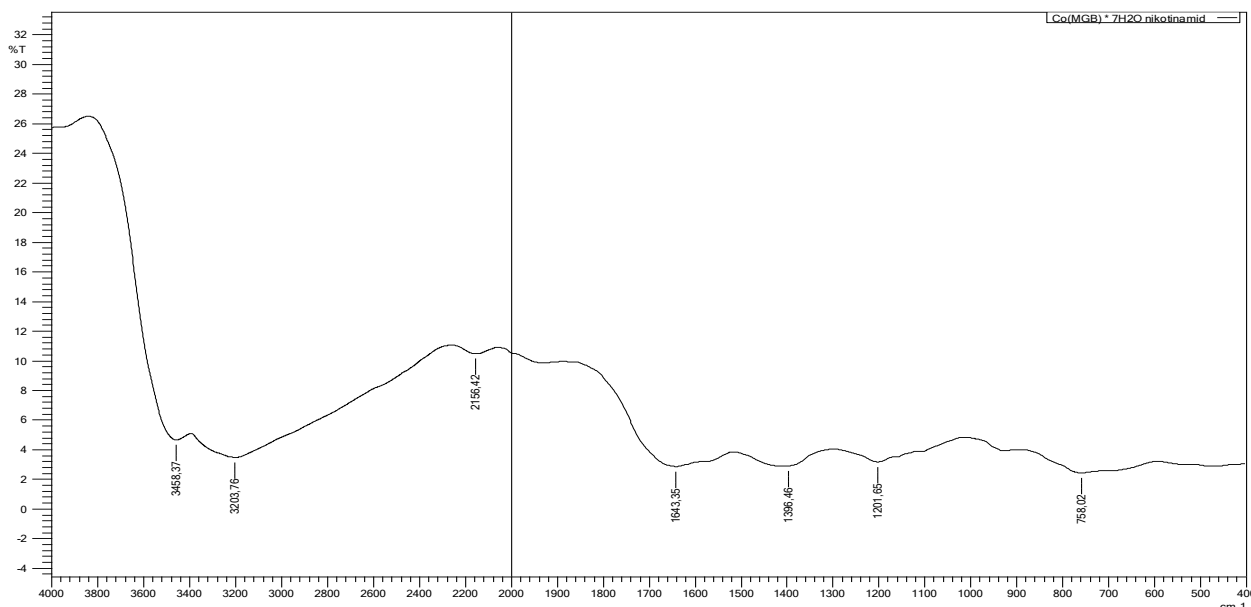
IRC egri chizig'idan ko'rinib turibdiki, reaksiya koordinatasi bo'ylab harakatlanish jarayonida umumiy energiya uzluksiz ravishda kamayib boradi. Reaksiya boshlanish nuqtasida (o'tish holatiga yaqin sohada) energiya maksimal qiymatga ega bo'lib, koordinata bo'ylab harakatlangan sari energiya minimumga intiladi. Energiya egri chizig'ida qo'shimcha maksimum yoki minimumlarning yo'qligi reaksiya mexanizmining bir bosqichli ekanligidan dalolat beradi. IRC hisoblashlarida RMS gradient normasi reaksiya koordinatasi bo'ylab muntazam kamayib boradi. Boshlang'ich nuqtada gradient normaning nisbatan katta qiymati o'tish holatiga xos bo'lsa, koordinata bo'ylab harakat davomida uning qiymati minimumga yaqinlashadi. Gradient normaning pasayishi strukturaning barqaror holatga o'tayotganligini va optimallashtirilgan minimumga yaqinlashayotganini ko'rsatadi. Bu holat o'tish holatidan boshlab reaksiya mahsulotiga tomon uzluksiz energiya pasayishini yana bir

bor tasdiqlaydi. Bu esa 2-merkaptoyantar kislota va Ni(II) ioni asosida yangi kompleks birikmaning hosil bo‘lishi nazariy jihatdan asoslanganligini ko‘rsatadi.

Ligandlardagi funksional guruhlarining o‘zgarishini, koordinatsiya turini hamda yangi bog‘lar hosil bo‘lganligini aniqlash maqsadida dastlabki moddalar va hosil bo‘lgan kompleks birikmaning IQ spektrlari taqqoslab tahlil qilindi. Namunalarning IQ spektrlari «IRTracer-100» (SHIMADZU CORP., Yaponiya, 2017) spektrometrida MIRacle-10 diamond/ZnSe prizmasi yordamida $400\text{--}4000\text{ cm}^{-1}$ soha bo‘yicha qayd qilindi.



3-rasm. $[\text{Ni}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4\text{S})]$ kompleks birikmaning kvant-kimyoviy usulda nazariy hisoblangan IQ spektri



4-rasm. $[\text{Ni}(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4\text{S})]$ kompleks birikmasining IQ spektri

Sintez qilingan kompleks birikmaning nazariy hisoblangan IQ spektri (3-rasm) amaliy olingan IQ spektri (4-rasm) bilan taqqoslandi. Taqqoslash jarayonida 2-merkaptoyantar kislota ligandining asosiy funksional guruhlariga tegishli yutilish chastotalari, ularning kompleks hosil bo‘lish jarayonidagi siljishi va intensivligi tahlil qilindi. Amaliy IQ spektrida $1600\text{--}1650\text{ cm}^{-1}$ va $1350\text{--}1450\text{ cm}^{-1}$ oralig‘ida kuzatilgan kuchli yutilish cho‘qqilari mos ravishda karboksilat guruhining asimmetrik (vas) va simmetrik (vs) tebranishlariga tegishlidir. Ushbu cho‘qqilarning nazariy spektrda ham deyarli shu sohalarda namoyon

bo‘lishi kompleks tarkibida 2-merkaptoyantar kislota ligandining karboksilat guruhlar mavjudligini ko‘rsatadi.

1000–1300 sm^{-1} oralig‘ida kuzatilgan o‘rtacha intensivlikdagi yutilishlar C–O va C–C bog‘larining tebranishlariga mos keladi. Amaliy spektrdagi ushbu signallarning nazariy spektr bilan yaxshi mosligi ligand molekulasi asosiy skeleti saqlanganligini ko‘rsatadi. Shuningdek, 2-merkaptoyantar kislota tarkibidagi C–S va S–H guruhlariga tegishli tebranish chastotalarida kuzatilgan o‘zgarishlar oltingugurt atomining Ni(II) ioni bilan koordinatsion o‘zaro ta’sirda ishtirok etishi ehtimolini ko‘rsatadi.

Amaliy IQ spektrining 400–600 sm^{-1} past chastotali sohasida paydo bo‘lgan yutilish cho‘qqilari Ni–O va/yoki Ni–S bog‘larining tebranishlariga tegishli bo‘lishi mumkin. Nazariy spektrda ham ushbu sohada mos signallarning kuzatilishi Ni(II) ionining 2-merkaptoyantar kislota ligandidagi kislorod va oltingugurt donor atomlari bilan koordinatsion bog‘ hosil qilganligini ko‘rsatadi. Amaliy spektrda 3200–3500 sm^{-1} oralig‘ida kuzatilgan keng yutilish sohasi O–H guruhlarining tebranishlari hamda vodorod bog‘lanishlarining mavjudligi bilan bog‘liq bo‘lishi mumkin. Nazariy spektrda ushbu cho‘qqining nisbatan past intensivlikda yoki umuman kuzatilmayligi hisoblashlarda muhit omillari va molekulalararo vodorod bog‘lanishlarining to‘liq inobatga olinmaganligi bilan izohlanadi.

Nazariy va amaliy IQ spektrlari orasidagi kichik siljishlar (10–40 sm^{-1}) tajribaviy sharoit, qattiq fazadagi kristall panjara ta’siri, vodorod bog‘lanishlari, ligandning haqiqiy koordinatsiya muhiti hamda hisoblash usulida ideal sharoitning qabul qilinganligi bilan izohlanadi. Sintez qilingan 2-merkaptoyantar kislota–Ni(II) kompleksining IQ spektrida funksional guruhlarining tebranish chastotalarida sezilarli siljishlar va past chastotali sohada yangi yutilish signallari aniqlanib, bu holat 2-merkaptoyantar kislota ligandining Ni(II) ioni bilan koordinatsiyalanganligini ko‘rsatadi (2-jadval).

2-jadval

Kompleks nomi	Asosiy tebranishlar (ligand) kompleksda siljishlar		Kompleks barqarorligi (nazorati pH = 6–7)	Kompleks rangi	Hosil bo‘lish darajasi
[Ni(C ₄ H ₄ O ₄ S)]	$\nu(\text{C}=\text{O}) \approx 1620\text{--}1645 \text{ sm}^{-1}$, $\nu(\text{S}\text{--}\text{H})$, $\nu(\text{O}\text{--}\text{H})$	$\nu(\text{O}\text{--}\text{H}), \approx 3200\text{--}3250 \text{ sm}^{-1}$	Yuqori	Yashil	85–90%

XULOSA. Tadqiqot natijalariga ko‘ra, 2-merkaptoyantar kislota va Ni(II) ionlari asosida kompleks birikma muvaffaqiyatli sintez qilindi va uning koordinatsion tuzilishi o‘rganildi. Olingan natijalar 2-merkaptoyantar kislota tarkibidagi karboksil va tiol guruhlarining Ni(II) ioni bilan koordinatsion o‘zaro ta’sirlashishida ishtirok etishini ko‘rsatdi. IQ-spektroskopik tahlil natijalarida funksional guruhlariga tegishli tebranish chastotalarining siljishi hamda 400–600 sm^{-1} sohada yangi yutilish signallarining kuzatilishi

kompleks hosil bo‘lganligini tasdiqladi. Semiempirical/AM1/UHF usuli bo‘yicha o‘tkazilgan kvant-kimyoviy hisoblashlar natijasida kompleks molekulasining minimal energiyaga mos keluvchi barqaror geometrik tuzilishi aniqlandi. Nazariy hisoblangan va amaliy olingan IQ spektrlari orasidagi moslik 2-merkaptoyantar kislota ligandining Ni(II) ioni bilan koordinatsiyalanganligini tasdiqladi. Olingan natijalar 2-merkaptoyantar kislota Ni(II) ioni bilan barqaror kompleks birikma hosil qilishga qodir samarali ko‘p funksional ligand ekanligini ko‘rsatadi.

ADABIYOTLAR RO‘YXATI.

1. Porter L.J., Perrin D.D. Nickel(II) and zinc(II) complexes of mercaptosuccinic acid // *Australian Journal of Chemistry*. – 1969. – Vol. 22, No. 1. – P. 267–270. DOI: 10.1071/CH9690267.
2. Lenz G.R., Martell A.E. The binding of metal ions by mercaptoacids. I. Formation constants for the complexes of mercaptosuccinate with zinc(II), nickel(II), and hydrogen ions // *Journal of Inorganic Biochemistry*. – 1986. – Vol. 28, No. 1. – P. 1–12. DOI: 10.1016/0162-0134(86)80018-6.
3. Jarrett P.S., Ni Dhubhghaill O.M., Sadler P.J. Amphiphilic bis(thiolato)-nickel(II), -palladium(II) and -platinum(II) complexes with diphosphine or phosphinoarsine ligands // *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*. – 1993. – P. 1863–1870. DOI: 10.1039/DT9930001863.
4. Benzi G., Morelli S., et al. Speciation of aqueous Ni(II)-carboxylate and Ni(II)-fulvic acid solutions: Combined ATR-FTIR and XAFS analysis // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 2004. – Vol. 68.
5. Gupta K.K., Kaur T., Dadhich E. Potentiometric and thermodynamic studies of some metal complexes with carboxy methyl mercapto succinic acid // *Oriental Journal of Chemistry*. – 2013. – Vol. 29, No. 1.
6. Hu S., Wu X., et al. New magnetic nickel(II)-thiolate cluster-based coordination polymer constructed from 2-mercaptopyridine-3-carboxylic acid // *Crystal Growth & Design*. – 2018. – Vol. 18, No. 5. – P. 2667–2671. DOI: 10.1021/acs.cgd.7b01709.
7. Solomon E.I., Heppner D.E., Johnston E.M., Ginsbach J.W., et al. Copper active sites in biology // *Chemical Reviews*. – 2014. – Vol. 114. – P. 3659–3853.
8. Nakamoto K. *Infrared and Raman Spectra of Coordination Compounds*. – 6th ed. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2009.
9. Housecroft C.E., Sharpe A.G. *Inorganic Chemistry*. – 5th ed. – Harlow: Pearson, 2018.
10. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry*. – 3rd ed. – Chichester: John Wiley & Sons, 2017.