

**КВАНТОХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ И
РЕАКЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ КООРДИНАЦИОННЫХ СОЕДИНЕНИЙ
НИРАТА КАЛЬЦИЯ**

Джуманазарова Зулфия Кожабоевна

Доцент кафедры «Органическая и неорганическая химия» факультета Химия
технология, Каракалпокский Государственный университет имени Бердаха, Нукус,
Каракалпакистан

Каттаев Нуритдин Тўраевич

Доцент кафедры «Физическая химия» факультета Химия, Национальный Университет
имени Мирзо Улугбека, Ташкент, Узбекистан

Буркитбаева Гулмира Сарсенбаевна

Магистрант кафедры «Органическая и неорганическая химия» факультета Химия
технология, Каракалпокский Государственный университет имени Бердаха, Нукус,
Каракалпакистан

Как известно, полифункциональные лиганды, содержащие несколько донорных атомов при координации с центральным атомом проявляют конкурентность по отношению друг к другу, изучение данной проблемы и установление конкурирующей способности лигандов является актуальной задачей координационной химии. Изучение данной проблемы традиционными методами требует большой затраты времени. Поэтому в настоящее время все больше внимания при решении таких задач обращается на использование вычислительных программ. Следует отметить, что органические молекулы и лиганды при координации с центральным атомом меняют свои свойства, и в то же время влияние электронных пар лигандов приводит к появлению в координационных соединениях, присущих им свойств(1).

Нами проведен расчет электронной структуры четырех смешанноамидных координационных соединений нитрата кальция с помощью полуэмпирического метода PM3 в рамках модели самосогласованного поля по методу молекулярных орбиталей (МО ЛКАО), позволяющий производить учет водородных связей при расчете. Объектами наших квантовохимических исследований смешанноамидных координационных соединения нитрата кальция: $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ и $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CS}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Сравнение энергетических характеристик двух комплексных соединений показывает, что значения общей энергии близки. В то время как, значения энергий связей, электронной энергии, межъядерной энергии, теплоты образования, энергии верхних занятых и нижних вакантных молекулярных орбиталей значительно

отличаются. Значения длин связей, зарядов на атомах также отличаются. Повышение значения разности $\Delta = \text{ВЗМО} - \text{НВМО}$ свидетельствует о том, что комплексные соединения кальция являются более реакционно способными к нуклеофильным агентам и это более повышает стимулирующую активность роста растения, чем соединения магния аналогичного состава. Методами элементного, дериватографического и рентгенофазового анализов и ИК-спектров поглощения установлены состав, индивидуальность и способы координации молекул амидов и никотинатных фрагментов(2).

Для комплексного соединения состава $\text{Ca}(\text{NO}_3)_2 \cdot \text{HCONH}_2 \cdot \text{CO}(\text{NH}_2)_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ (1) предложены четыре тетраэдреческих строения и четыре октаэдреческих окружения с различными способами координации нитратных групп и наличием внутримолекулярных водородных связей. Из восьми строений оказалась энергетически выгодной по значению теплоты образования структура, где центральной атом кальция окружен тетраэдрическим узлом за счет монодентатной координации молекул формамида и тиокарбамида через атомы кислорода карбонильной группы и через атом серы тиогруппы. Внутримолекулярные водородные связи осуществляются за счет атомов кислорода двух нитратных фрагментов с участием одной молекулы воды (таблица-1)

Соединения	I-1	I-2	I-3	I-4	I-5	I-6	I-7	I-8
Общая энергия, ккал/моль	-80644.7031651	-80639.5541957	-80642.4198431	-80641.6244644	-80634.8355595	-80625.8277819	-80621.3452442	-80639.7076824
Общая энергия (а.е.)	-128.515499027	-128.507293623	-128.511860322	-128.510592806	-128.499773998	-128.485419193	-128.478275815	-128.507538219
Связывающая энергия, ккал/моль	-3332.5853601	-3327.4363907	-3330.3020381	-3329.5066594	-3322.7177545	-3313.7099769	-3309.2274392	-3327.5898774
Энергия изолированных атомов, ккал/моль	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050	-77312.1178050
Электронная энергия, ккал/моль	-504315.6693402	-506077.9453542	-508011.7126307	-505747.9649183	-505306.3769930	-496290.6059761	-505223.7273278	-509125.4113947
Энергия межъядерного взаимодействия, ккал/моль	423670.9661750	425438.3911585	427369.2927876	425106.3404539	424671.5414335	415664.7781942	424602.3820836	428485.7037123
Теплота образования, ккал/моль	-831.4063601	-826.2573907	-829.1230381	-828.3276594	-821.5387545	-812.5309769	-808.0484392	-826.4108774
Градиент	0.0470055	0.0100303	0.0354598	0.0507997	0.0086861	0.0079337	0.0092038	0.0095166
ВЗМО	-10.127773	-10.389343	-10.236742	-10.384957	-10.132769	-10.485210	-8.977159	-9.873706
НВМО	-0.943934	-0.628052	-0.563037	-0.464496	-1.299092	-0.764633	-1.547589	-0.750417
ВЗМО-НВМО	-9.183839	-9.4996	-9.6737	-9.9205	-8.833677	-9.720577	-7.42957	-9.1232289

Литература

1. Войтюк А, А., Близнюк А. Квантовохимическое изучение ион-молекулярных комплексов с водородными связями // Ж. структур. Химии.- 1992.- В.33. .-№6. –С.157-183.
2. Азизов Т.А. Амидокарбоксилатные координационные соединения металлов.// Узб.хим.журнал, 2008. – №4. – С.81-85.
3. Jumanazarova Z.K., Azizov T. A.Mixed amide complexes of magnesium nitrate // International Journal of Recent Advancement In Engineering & Research, Ijraer, 4, 5, 2018.