

that meets all criteria is the combined method. The use of ultraviolet disinfection with the further use of secondary chlorination.

Table 1

ANNUAL COSTS OF OZONE GENERATOR AND UV DISINFECTION.

Annual costs	Method of disinfection	Ozon generator	UV disinfection
Electric power		227003,72 rub/year	123516,73 rub/year
Depreciation deductions		418000 rub/year	816189 rub/year
Total annual costs		645003,72 rub/year	939705,73 rub/year

From the calculations of economic efficiency (Table 1) it can be seen that UV cleaning is more economical in terms of electricity consumption (by 103486.99 rubles) compared to ozonation. Depreciation charges for the ozon generator for the warranty period (4,5 years) will cover capital investments for the introduction of UV disinfection.

From the point of view of ecological safety, UV disinfection does not harm health to personnel and visitors, while ozone poses a high threat to the health of personnel and is a class of danger.

References

1. Khokhryakova E.A. Modern methods of water disinfection. Moscow: "Aqua-Therm" Publishing Center, 2014, 55 p.
2. SanPiN 2.1.4.1074-01. Moscow: Ministry of Health of Russia, 2002.
3. Mosin O.V. The use of ozone in water treatment [Plumbing, heating, air conditioning], issue. 9, Moscow. 2011, pp. 40-43.
4. Maydalyan T.M. The Right Pool in the House and the Site. Moscow: Publishing House "XXI Century", 2007, 256 p.
5. J. Paul Guyer, P.E., R.A. Introduction to Water Treatment. Continuing Education and Development, 2010, pp 26 – 38.

УДК: 743.565.83

СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНАЯ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ПАРА – ОКСИБЕНЗОАТА Yb(III).

*Касумова Самира Али кызы.
Докторант Гянджинского филиала
Национальная АН Азербайдана*

SYNTHESIS OF MOLECULAR AND CRYSTALLINE STRUCTURE OF PARA-HYDROXYBENZOATE Yb (III).

*Kasımova Samira Ali kızı
Doctoral student of the Ganja branch
of the National Academy of Sciences of the Republic of Azerbaijan*

АННОТАЦИЯ

Синтезировано новый комплекс пара-оксibenзойной кислоты с Yb (III), - получена монокристаллы для рентгенструктурного анализа и расшифрована молекулярная и кристаллического структура нового комплекса. Установлено что, метал координируется килодами карбоксильной группы монодентатно, бидентатно и бидентатно-мостикова типа.

ABSTRACT

New para-oxybenzoic acid complex with Yb (III) was synthesized, single crystals were obtained for X-ray diffraction analysis and the molecular and crystalline structure of the new complex was deciphered. It has been established that the metal is coordinated by the carboxyl group kilorods monodentadno, bidentate and bidentate-bridge type.

Ключевые слова: пара-оксibenзойной кислота, рентгенструктурный анализ, комплекс Yb (III), монодентадный, бидентатный, бидентатно-мостиковые связи.

Key words: para-oxybenzoic acid, X-ray analiz, complex Yb (III), monodentadno, bidentate and bidentate-bridge.

Пара – оксibenзойная кислота -4 –НО-С₆H₄COOH встречается в почвах [1], в морской воде [2] и различных органах растений: листьях и ягодах винограда [3], сахарной свекле [4], томатах [5]. Биологическая активность пара –

оксibenзойной кислоты изучено достаточно: синтез стероидов в ткани головного мозга, стимулирует реакции секреции кислоты желудка на тетрачестрин и повышает базальную секрецию [6].

Строение пара – оксибензойной кислоты установлено при расшифровке структуры [7]. Монокристаллы п –НО-С₆Н₄СООН моноклинны: $a = 17,752(9)$, $b = 6,442(2)$, $c = 6,731(3)$ Å, $\beta = 105,48^\circ$, $Z = 4$, пр. гр. P_{2_1}/a

Комплексы металлов п –оксибензойной кислоты изучены хорошо. Расшифровано кристаллические структуры пара –оксибензоатов Ag(I) [8], Mg(II), Ca(II) [9], Pb(II) [10].

Экспериментальная часть.

Синтезировано нами новый комплекс в составе $(4 \text{ –НО-С}_6\text{Н}_4\text{СООН})_3\text{Yb(III)} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ и расшифровано кристаллическая структура. Для синтеза монокристаллов трис – аква –трис – (п – оксибензоата) иттрия (III) – Yb (п –НО-С₆Н₄СОО)₃ · 3Н₂О. Использовали обменные реакции между Yb₂(SO₄)₃ и п- оксибензоатом натрия в водной среде при 25-30°С. Чтобы избежать выпадения мелкокристаллического осадка комплекса, были взяты очень разбавленные растворы указанных солей в стехиометрическом соотношении. Через 4-5 дней после смешения растворов выпадали пластинчатые кристаллы.

Параметры триклинной ячейки определены и уточнены на кристалле размером 0,16x0,29x0,22 мм³ на четырехкружном автоматическом дифрактометре БРУКЕР АПЕКСС ССД (λ Мо – K α , графитовый монохроматор):

$$a = 11,968(15), b = 14,606(20), \\ c = 14,109(14) \text{ \AA}, \alpha = 92,155(9),$$

$\beta = 106,011(10), \gamma = 102,818(9)^\circ$, пр. гр. $P\bar{1}$, $Z=4$, $R = 0,076$.

Кристаллическая структура

Yb (п –НО-С₆Н₄СОО)₃ · 3Н₂О состоит из линейных тетрамерных молекул рис. 1. Соседствующие в линейном тетрамере атомы иттрия объединяются с помощью двух карбоксильных лигандов бидентатно-мостикового типа.

Формулу тетрамерной молекулы можно записать в виде

$[\text{Yb}_4 (\text{п –НО – С}_6\text{Н}_4\text{СОО})_{12} \cdot 8\text{H}_2\text{O}]$. На рис.1 приведена проекция кристаллической структуры $[\text{Yb}_4 (\text{п –НО – С}_6\text{Н}_4\text{СОО})_{12} \cdot 8\text{H}_2\text{O}]$ на плоскость (010).

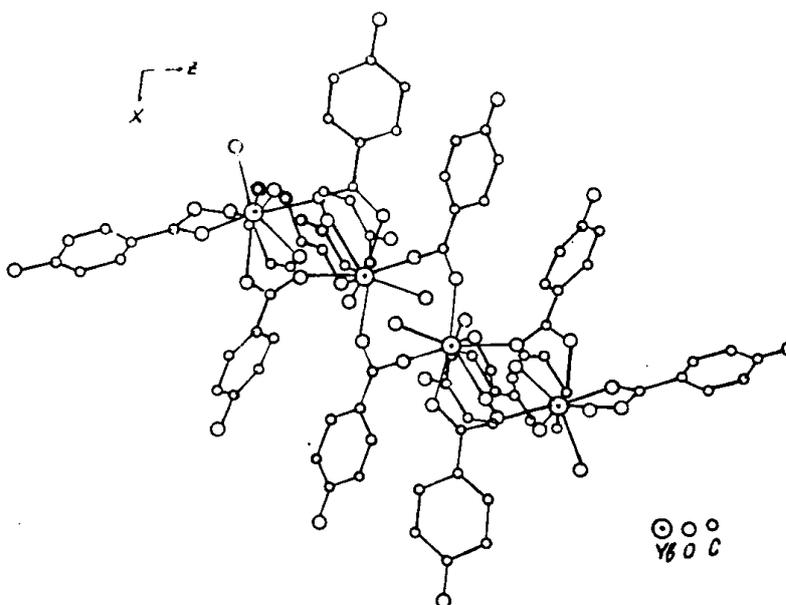


Рис. 1. Кристаллическая и молекулярная структура пара-оксибензоата Yb (III).

Все атомы иттрия восьми координационные, однако состав координационной сферы симметрически независимых атомов металла разный. Полиэдр, образуемый атомом Yb(I) состоит из двух атомов кислорода O (7) и O (14) мостиковых карбоксильных групп, которые имеют син –антиконфигурацию (Yb(I) –O_{мост.} 2,31 Å ср.), четырех атомов O (4), O (5), O (16) и O(17) двух бидентатно – циклических групп (Yb(I) –O_{цикл.} 2,41Å) и двух молекул воды (Yb(I) – OH₂ 2,38Å ср.).

В координацию Yb(2) входят четыре атома кислорода O(8), O(10), O(11), O(14) от четырех карбоксильных групп (Yb(2) –O_{мост.} 2,39 Å ср.), два атома кислорода O(1) и O(2) от одного бидентатно – циклического карбоксила (Yb(2) – O_{цикл.} 2,49Å ср.) и две молекулы воды (Yb –OH₂ 2,44 Å ср.).

Расстояние между атомами металла Yb(1) – Yb(2) 4,511 Å, а между Yb(2) –Yb(2) 4,851Å.

Сопоставление средних значений расстояний Me –O_{мост.} и Me –O_{цикл.} показывает, что так же, как и в некоторых других карбоксилатах атомы кислорода лигандов мостикового типа значительно ближе к атомам металла, чем кислородные атомы хелатирующих лигандов.

Связи C – O карбоксильных групп всех лигандов почти эквиваленты (1,27 Å ср.).

Среднее значение расстояний C_{карб} – C_{фен.} 1,48 Å и совпадает с соответствующим значением в структуре пара- оксибензойной кислоты с другими металлами. Длина связи C- OH меняется в пределах 1,36 -1,41 Å (1,39 Å ср.). Межатомные расстояния и валентные углы в лигандах

[8,9,10,11], в целом практически те же, что и в аналогичных фрагментах других близких по строению лигандов. Среднее значение ОСО для мостиковых лигандов 120,28°, а для хелатных естественно меньше (116,15°).

Все фенильные кольца в пределах погрешностей плоские; отклонение оксигруппы от плоскости соответствующего кольца во всех лигандах не превышает 0,05 Å. Однако молекулы лигандов в целом неплоские; карбоксильные группы, в зависимости от выполняемой функции, имеют различную степень наклона к плоскости

фенильного кольца. В случае циклических групп этот наклон изменяется в небольших пределах от 1,8 до 9,8°. Мостиковые группы, соединяющие Yb(1) и Yb(2) и имеющие конфигурацию син – анти, существенно плоские (углы отклонения 17,35 и 24,89° соответственно). В случае же группы, соединяющей Yb(2) и Yb(2') и имеющей син – син – конфигурацию, угол отклонения незначительный и составляет всего 6,6°.

Между линейными тетрамерами осуществляются водородные связи.

Таблица 1

ДЛИНЫ СВЯЗЕЙ

Связь	d, Å	Связь	d, Å	Связь	d, Å
Yb(1)–O(4)	2.40(1)	C(15)–C(16)	1.47(2)	C(27)–C(28)	1.47(6)
Yb(1)–O(5)	2.41(1)	C(16)–C(17)	1.38(2)	C(28)–C(23)	1.34(7) 1.42
Yb(1)–O(7)	2.35(1)	C(7)–C(18)	1.42(3)	C(22)–C(23)	1.54(6)
Yb(1)–O(13)	2.37(1)	C(18)–C(19)	1.40(3)	C(22)–O(13)	1.26(5)
Yb(1)–O(16)	2.42(1)	C(19)–C(20)	1.40(3)	C(22)–O(14)	1.28(5)
Yb(1)–O(17)	2.42(1)	C(20)–C(21)	1.40(3)	C(30)–C(31)	1.43(4)
Yb(1)–O(19)	2.41(1)	C(21)–C(16)	1.40(3)	C(31)–C(32)	1.41(4)
Yb(1)–O(23)	2.36(1)	среднее	1.40	C(32)–C(33)	1.39(6)
Yb(2)–O(1)	2.42(1)	C(22)–C(23)	1.50(2)	C(33)–C(34)	1.42(6)
Yb(2)–O(2)	2.57(1)	C(23)–C(24)	1.40(2)	C(34)–C(35)	1.44(6)
Yb(2)–O(8)	2.38(1)	C(24)–C(25)	1.42(2)	C(35)–C(30)	1.40(6)
Yb(2)–O(10)	2.27(1)	C(25)–C(26)	1.39(2)	среднее	1.43
Yb(2)–O(11)	2.27(1)	C(26)–C(27)	1.38(2)	C(29)–C(30)	1.55(6)
Yb(2)–O(14)	2.37(1)	C(27)–C(28)	1.40(3)	C(29)–O(17)	1.23(5)
Yb(2)–O(20)	2.42(1)	C(28)–C(23)	1.40(2)	C(29)–O(18)	1.32(5)
Yb(2)–O(21)	2.45(1)	среднее	1.40	C(37)–C(38)	1.43(4)
O(1)–C(1)	1.24(2)	C(29)–C(30)	1.47(3)	C(38)–C(39)	1.52(5)
O(2)–C(1)	1.30(2)	C(30)–C(31)	1.37(2)	C(39)–C(40)	1.37(6)
O(4)–C(6)	1.27(2)	C(31)–C(32)	1.43(3)	C(40)–C(41)	1.34(6)
O(5)–C(6)	1.27(2)	C(32)–C(33)	1.41(2)	C(41)–C(42)	1.47(6)
O(7)–C(15)	1.25(2)	C(33)–C(34)	1.36(2)	C(42)–C(37)	1.37(6) 1.42
O(8)–C(15)	1.27(2)	C(34)–C(35)	1.43(3)	C(36)–C(37)	1.52(6)
O(10)–C(22)	1.28(2)	C(35)–C(30)	1.40(2)	C(36)–O(21)	1.30(4)
O(11)–C(22)	1.25(2)	среднее	1.40	C(36)–O(22)	1.28(4)
O(13)–C(29)	1.26(2)	C(36)–C(37)	1.52(2)	N(1)–C(5)	1.74(6)
O(14)–C(29)	1.29(2)	C(37)–C(38)	1.39(2)	N(1)–O(3)	1.16(4)
O(16)–C(36)	1.28(2)	C(38)–C(39)	1.41(3)	N(1)–O(4)	1.08(6)
O(17)–C(36)	1.25(2)	C(39)–C(40)	1.41(3)	N(2)–C(12)	1.48(3)
C(1)–C(2)	1.48(2)	C(40)–C(41)	1.37(3)	N(2)–O(7)	1.21(5)
C(2)–C(3)	1.44(2)	C(41)–C(42)	1.41(3)	N(2)–O(8)	1.18(5)
C(3)–C(4)	1.41(2)	C(42)–C(37)	1.41(3)	N(3)–C(19)	1.56(5)
C(4)–C(5)	1.40(3)	среднее	1.40	N(3)–O(11)	1.16(5)
C(5)–C(6)	1.41(3)	C(5)–O(3)	1.38(2)	N(3)–O(12)	1.29(5)
C(6)–C(7)	1.35(2)	C(12)–O(6)	1.40(2)	N(4)–C(26)	1.54(6)
C(7)–C(2)	1.37(2)	C(19)–C(9)	1.39(2)	N(4)–O(15)	1.16(5)
среднее	1.40	C(26)–O(12)	1.41(2)	N(4)–O(16)	1.23(5)
C(8)–C(9)	1.46(2)	C(33)–O(15)	1.41(2)	N(5)–C(33)	1.52(6)
C(9)–C(10)	1.46(3)	C(40)–O(18)	1.38(2)	N(5)–O(19)	1.20(5)
C(10)–C(11)	1.40(2)	C(15)–O(9)	1.24(4)	N(5)–O(20)	1.21(5)
C(11)–C(12)	1.39(3)	C(15)–O(10)	1.22(4)	N(6)–C(40)	1.58(6)
C(12)–C(13)	1.42(3)	C(23)–C(24)	1.44(6)	N(6)–O(23)	1.23(5)
C(13)–C(14)	1.40(2)	C(24)–C(25)	1.43(6)	N(6)–O(24)	1.19(5)
C(14)–C(9)	1.37(2)	C(25)–C(26)	1.42(6)		
среднее	1.41	C(26)–C(27)	1.39(7)		

Таблица 2

ВАЛЕНТНЫЕ УГЛЫ

Угол	ω , град.	Угол	ω , град.
O(5)–Yb(1)–O(4)	53.3(4)	O(1)–Yb(2)–O(21)	140.7(4)
O(5)–Yb(1)–O(7)	77.1(4)	O(2)–Yb(2)–O(8)	72.0(4)
O(5)–Yb(1)–O(8)	81.9(3)	O(2)–Yb(2)–O(10)	126.0(4)
O(5)–Yb(1)–O(9)	147.7(3)	O(2)–Yb(2)–O(11)	78.1(4)
O(5)–Yb(1)–O(13)	78.5(4)	O(2)–Yb(2)–O(14)	83.6(4)
O(5)–Yb(1)–O(16)	135.6(4)	O(2)–Yb(2)–O(20)	145.4(3)
O(5)–Yb(1)–O(17)	87.1(4)	O(2)–Yb(2)–O(21)	135.7(3)
O(4)–Yb(1)–O(7)	124.4(4)	O(8)–Yb(2)–O(10)	82.0(4)
O(4)–Yb(1)–O(8)	131.0(3)	O(8)–Yb(2)–O(11)	147.4(4)
O(4)–Yb(1)–O(9)	155.4(3)	O(8)–Yb(2)–O(14)	105.8(4)
O(4)–Yb(1)–O(13)	82.6(4)	O(8)–Yb(2)–O(20)	141.6(4)
O(4)–Yb(1)–O(16)	123.8(4)	O(8)–Yb(2)–O(21)	73.7(4)
O(4)–Yb(1)–O(17)	78.9(4)	O(10)–Yb(2)–O(11)	106.0(4)
O(7)–Yb(1)–O(8)	47.2(3)	O(10)–Yb(2)–O(14)	150.0(4)
O(7)–Yb(1)–O(9)	70.8(3)	O(10)–Yb(2)–O(20)	77.5(4)
O(7)–Yb(1)–O(13)	113.2(4)	O(10)–Yb(2)–O(21)	75.0(4)
O(7)–Yb(1)–O(16)	73.9(4)	O(11)–Yb(2)–O(14)	83.3(4)
O(7)–Yb(1)–O(17)	74.8(4)	O(11)–Yb(2)–O(20)	70.4(4)
O(8)–Yb(1)–O(9)	73.6(3)	O(11)–Yb(2)–O(21)	138.8(4)
O(8)–Yb(1)–O(13)	68.4(4)	O(14)–Yb(2)–O(20)	79.1(4)
O(8)–Yb(1)–O(16)	101.3(3)	O(14)–Yb(2)–O(21)	79.5(4)
O(8)–Yb(1)–O(17)	122.0(3)	O(20)–Yb(2)–O(21)	69.7(4)
O(9)–Yb(1)–O(13)	110.5(3)	C(2)–C(3)–C(4)	117.9(15)
O(9)–Yb(1)–O(16)	36.3(3)	C(3)–C(4)–C(5)	118.7(16)
O(9)–Yb(1)–O(17)	88.4(3)	C(4)–C(5)–C(6)	122.7(16)
O(13)–Yb(1)–O(16)	144.3(4)	C(5)–C(6)–C(7)	117.5(15)
O(13)–Yb(1)–O(17)	161.0(4)	C(6)–C(7)–C(2)	123.2(15)
O(16)–Yb(1)–O(17)	53.4(4)	среднее	120.0
O(1)–Yb(2)–O(2)	52.3(3)	C(4)–C(8)–C(5)	116.3(15)
O(1)–Yb(2)–O(8)	76.3(4)	C(4)–C(8)–C(9)	120.9(15)
O(1)–Yb(2)–O(10)	76.2(4)	C(6)–C(8)–C(9)	122.7(15)
O(1)–Yb(2)–O(11)	75.1(4)	среднее	119.9
O(1)–Yb(2)–O(14)	133.6(4)	C(8)–C(9)–C(14)	122.4(16)
O(1)–Yb(2)–O(20)	128.2(4)	C(8)–C(9)–C(10)	117.6(15)
C(10)–C(9)–C(14)	120.0(16)	C(21)–C(16)–C(17)	121.1(15)
C(9)–C(10)–C(11)	119.3(16)	C(16)–C(17)–C(18)	121.8(16)
C(10)–C(11)–C(12)	118.0(16)	C(17)–C(18)–C(19)	116.1(16)
C(11)–C(12)–C(13)	124.4(16)	C(18)–C(19)–C(20)	122.1(16)
C(12)–C(13)–C(14)	116.3(15)	C(19)–C(20)–C(21)	120.1(17)
C(13)–C(14)–C(9)	122.1(16)	C(20)–C(21)–C(16)	118.1(17)
среднее	120.0	среднее	119.9
O(7)–C(15)–O(8)	120.2(15)	O(10)–C(22)–O(11)	121.8(15)
C(7)–C(15)–C(16)	119.7(15)	O(10)–C(22)–C(23)	117.5(14)
C(8)–C(1)–C(16)	120.1(15)	O(11)–C(22)–C(23)	120.7(14)
среднее	120.0	среднее	120.0
C(8)–C(15)–C(16)	118.5(15)	C(22)–C(23)–C(24)	116.8(14)
O(13)–C(29)–O(14)	119.8(14)	C(22)–C(23)–C(28)	121.0(14)
O(1)–C(1)–O(2)	119.7(14)	C(28)–C(23)–C(24)	122.3(15)
O(1)–C(1)–C(2)	120.5(14)	C(23)–C(24)–C(25)	118.5(15)
среднее	120.0	C(24)–C(25)–C(26)	117.7(15)
C(1)–C(2)–C(3)	118.6(14)	C(25)–C(26)–C(27)	124.3(16)
C(1)–C(2)–C(7)	121.4(14)	C(26)–C(27)–C(28)	118.1(16)
C(3)–C(2)–C(7)	120.1(15)	C(27)–C(28)–C(23)	119.0(15)
C(15)–C(16)–C(17)	120.7(15)	среднее	119.9
C(15)–C(16)–C(21)	118.1(15)	O(16)–C(36)–O(17)	118.5(15)
O(13)–C(29)–C(30)	121.9(15)	O(16)–C(36)–C(37)	118.9(15)

O(14)–C(29)–C(30)	119.4(15)	O(17)–C(36)–C(37)	122.6(15)
среднее	119.9	среднее	120.0
C(29)–C(30)–C(31)	123.2(15)	C(36)–C(37)–C(38)	118.0(15)
C(29)–C(30)–C(35)	115.2(15)	C(36)–C(37)–C(42)	118.5(15)
C(31)–C(30)–C(35)	121.7(16)	C(42)–C(37)–C(38)	123.5(16)
C(30)–C(31)–C(32)	120.7(16)	C(37)–C(38)–C(39)	117.2(16)
C(31)–C(32)–C(33)	115.9(16)	C(38)–C(39)–C(40)	119.1(16)
C(32)–C(33)–C(34)	124.6(16)	C(39)–C(40)–C(41)	123.3(17)
C(33)–C(34)–C(35)	118.2(16)	C(40)–C(41)–C(42)	118.5(17)
C(34)–C(35)–C(30)	119.0(15)	C(41)–C(42)–C(37)	118.4(16)
среднее	120.0	среднее	120.0

ЛИТЕРАТУРА

1. Царева Р.И., Семенова Т. А. Идентификации и количественное определение пара – оксибензойной кислоты в торфяной почве. В книге плетидный аппарат и жизнедеятельность растений Минск 2011, 213 стр.
2. Dgens E. T., Renter Y. H., Shaw K.H. Biochemical compounds of offshore California Sediments and sea water. *Geochim Com. Chim. Acta*, 1998, V. 54, № 1, p.45-66/
3. Rapp A., Zieqler A. Bestimmung der phenolcarbonsauren – Hidrobenzol sauren und Hydroxyzinrt sauren –in Rebblattern, Weinrauben und Wein mittels Micro –Pojiqminq – Dunschi thermoqraphic. *Vitea*, 1973, V.12, p. 226-236.
4. Obala Y., Senla P., Koshika M. Detection of phenolic compound by chromotoqraphy in beet sugar molasses. *Agr. Boil. Chem. (Tokyo)*, 1983, V.27, p. 340-341.
5. Relations polyphenols – croissance chez lycopersicum escultum mill. *C. r. Acad. Sci*, 1976, v 283, p. 239 -243.
6. Colapietro M., Domenicano A., Marciante C. Structure studies of benzene derivatives. VI. Refinement of the crystal structure of p –hydrobenzoic acid. *Acta Cryst.* 1979, V 35, p. 2177- 2180.
7. Thijsson H.H. p-Оxybeu\enzoic acid derivatives as inhibitors of the cell free H₂-pteroate synthesizing system of. *E. Coli. J. Med. Chem*, 1977, V20, № 2, p. 233-236.
8. Усубалиев В. Т., Мамедов Х. С., Мовсумов Э. М. Кристаллическая и молекулярная структура п - оксибензоата Ag(I). *Журнал Структ. Химии* 1981, т. 22, с. 98-108.
9. Шнулин А. П., Наджафов Г. Н., Усубалиев Б. Т. Ионные структуры пара – оксибензоатов Со (II), Mg (II). *Ж. Координ. Химия*, 1981, т. 7, с. 1409-1416.
10. Джафаров Н. А., Мамедов Х. С., Мовсумов Э. М. Кристаллическая и молекулярная структура моногидрата бис – п –оксибензоата Pb(II). *Журнал структур. Химии*, 1981, 22, с. 125-129.
11. Касумова С. А., Гасанова С. С., Мовсумов Э. М. Синтез и физико – химические исследование новых комплексов металлов Nd (III), Tb (III), Er (III), Tm (III) с 5-нитро, 2-ацетамидо-бензойной кислоты. *Miedzynarodowe czasopismo naukowe, Colloquium-journal, chemical sciences, the Polish international journal of scientific publications, ISSN 2520-6990 № 5, (16), 2018, p. 63-66.*