

دانشگاه یزد

دانشکده علوم پایه

گروه شیمی

پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد شیمی معدنی

مطالعه سرعت واکنش جانشینی لیگاند بزرگ حلقه با SALSC
در کمپلکس‌های $\text{Cu}(\text{SALSC})\text{X}$

استاد راهنما:

دکتر رسول وفازاده

استاد مشاور:

دکتر علیرضا گرجی

پژوهش و نگارش:

احمدرضا شیرالی‌نیا

شهریور ۱۳۹۲

صلى الله عليه وسلم

تقدیم بہ پدر و مادر عزیزم

به نام آرام دلها

پاس خدای را که هر آنچه دارم از لطف اوست و هر آنچه ندارم از حکمتش

صمیمانه‌ترین تشکر خود را به استاد راهنمای بزرگوارم جناب آقای دکتر رسول وفازاده تقدیم می‌کنم که مرا از راهنمایی‌های خویش بهره‌مند ساخته و از هیچ کمک و مساعدتی دریغ نفرمودند.

از استاد مشاور ارجمندم جناب آقای دکتر علیرضا کرجی که در طی این دو سال به‌مواره از کمک‌ها و راهنمایی‌های ایشان استفاده کرده‌ام کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از اساتید محترم جناب آقای دکتر دهقانی و دکتر حاجی شعبانی که داور این پایان‌نامه را بر عهده گرفته‌اند تشکر می‌کنم.

در پایان از خانواده عزیزم که به‌مواره حامی من بوده‌اند تشکر می‌کنم.

چکیده

در این پایان نامه، سینتیک جانشینی لیگاند در $[\text{Cu}(\text{SALSC})(\text{NO}_3)].\text{H}_2\text{O}$ ، $[\text{Cu}(\text{SALSC})\text{Cl}].2\text{H}_2\text{O}$ ، $[\text{Cu}(\text{SALSC})\text{Br}].1.5\text{H}_2\text{O}$ و $[\text{Cu}(\text{SALSC})(\text{ClO}_4)]_2$ که SALSC لیگاند سه دندانه‌ای سالیسیل آلدهید سمی کاربازون است با لیگاند بزرگ حلقه‌ی $\text{N}_4\text{H}_2(\text{ClO}_4)_2$ در حلال DMF، دمای 25°C و قدرت یونی NaNO_3 ، 0.1 M به روش اسپکتروسکوپی UV-Vis مورد مطالعه قرار گرفت. واکنش در 700 nm که بیشترین تغییرات جذب میان واکنش دهنده‌ها و محصولات وجود دارد دنبال شد.

$\text{N}_4\text{H}_2(\text{ClO}_4)_2 = 5,7,7,12,14\text{-Hexaniethyl-1,4,8,11-tetraazacyclo tetradeca-4,11-diene dihydrogen perchlorate}$

واکنش‌ها تحت شرایط شبه مرتبه اول انجام شد، که در آن $[\text{N}_4\text{H}_2(\text{ClO}_4)_2] \geq [\text{Cu}(\text{SALSC})\text{X}]$



داده‌های حاصل از واکنش نشان داد که در دمای 25°C واکنش دو مرحله‌ای است. ثابت سرعت‌های $k_{\text{obs}(1)}$ و $k_{\text{obs}(2)}$ با برآزش جذب واکنش برحسب زمان به دست آمده است. مرحله اول واکنش سریع و وابسته به غلظت $\text{N}_4\text{H}_2(\text{ClO}_4)_2$ است و مرحله دوم واکنش کند ($k_{\text{obs}(2)} < k_{\text{obs}(1)}$) و مستقل از غلظت $\text{N}_4\text{H}_2(\text{ClO}_4)_2$ است. بر اساس این نتایج مکانیسم جانشینی لیگاند پیشنهاد شد.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱.....	فصل اول
۲.....	۱-۱- مقدمه
۲.....	۱-۱-۱ واکنش گرها
۳.....	۱-۱-۲ استوکیومتری واکنش
۳.....	۱-۱-۳ محصولات واکنش
۳.....	۱-۱-۴ وجود ناخالصی ها
۴.....	۱-۱-۵ تثبیت شرایط محیطی
۵.....	۱-۲- روش های اندازه گیری تجربی سرعت واکنش
۶.....	۱-۲-۱ روش های طیف سنجی
۶.....	۱-۱-۲-۱ طیف سنجی فرابنفش-مرئی
۷.....	۱-۲-۱-۲ طیف سنجی دو رنگی دورانی و پراکندگی چرخش نوری
۷.....	۱-۲-۱-۳ طیف سنجی مادون قرمز و رامان
۸.....	۱-۲-۱-۴ طیف رزونانس مغناطیسی هسته ای
۹.....	۱-۲-۱-۵ طیف سنجی رزونانس اسپین الکترون
۱۰.....	۱-۲-۱-۶ طیف سنجی نشر فلورسانس
۱۱.....	۱-۲-۲- روش های غیر طیفی
۱۱.....	۱-۲-۲-۱ تغییرات pH
۱۲.....	۱-۲-۲-۲ الکتروود انتخابی
۱۳.....	۱-۲-۲-۳ روش های الکتروشیمیایی
۱۳.....	۱-۲-۲-۴ هدایت سنجی
۱۴.....	۱-۲-۲-۵ اندازه گیری تغییرات دما

- ۱۴-۲-۲-۱-۶- ضریب شکست
- ۱۵-۲-۲-۱-۷- شدت رنگ واکنش دهنده‌ها یا محصول
- ۱۵-۲-۲-۱-۸- ویسکوزیته
- ۱۵-۲-۲-۱-۹- اندازه‌گیری جریان
- ۱۶-۳-۱- واکنش‌های جانشینی
- ۱۶-۳-۱- واکنش‌های جانشینی لیگاند
- ۱۷-۳-۲- جانشینی یون فلزی موجود در کمپلکس با یون فلزی حلال‌پوش شده
- ۱۸-۴-۱- چند نمونه واکنش تبادل لیگاند
- ۱-۴-۱- سینتیک و مکانیسم جانشینی لیگاند در کمپلکس دی- μ -هیدروکسو بیس (بی‌پریدیدل) دی پالادیم (II) با برخی از لیگاندهای زیستی مربوطه
- ۲-۴-۱- مطالعه‌ی سرعت واکنش و مکانیسم تبادل لیگاند چهاردندانه‌ی باز شیف H_2salen با $salpn$ در کمپلکس $Cu(salpn)$
- ۳-۴-۱- بررسی مکانیسم جانشینی لیگاند در $[Ru(tap)_2Ru(tap)_2(H_2O)]^{2+}$ توسط برخی از اسیدهای آمینه در محیط آبی در pH فیزیولوژیک
- ۴-۴-۱- مطالعه‌ی سرعت واکنش جانشینی لیگاند تری بوتیل فسفین (PBU_3) در کمپلکس‌های باز شیف اورانیل (VI)
- فصل دوم..... ۳۷**
- ۱-۲- مقدمه
- ۲-۲- مشخصات دستگاه‌های مورد استفاده
- ۳-۲- سنتز مواد مورد استفاده
- ۱-۳-۲- سنتز لیگاند SALSC
- ۲-۳-۲- سنتز کمپلکس (۱) $[Cu(SALSC)(NO_3)].H_2O$
- ۳-۳-۲- سنتز کمپلکس (۲) $[Cu(SALSC)Br].1.5H_2O$
- ۴-۳-۲- سنتز کمپلکس (۳) $[Cu(SALSC)(ClO_4)]_2$

۴۱ [Cu(SALSC)Cl].2H ₂ O (۴) سنتز کمپلکس
۴۲ (N ₄):N ₄ H ₂ (ClO ₄) ₂ سنتز لیگاند بزرگ حلقه
۴۲ [Cu(N ₄)](ClO ₄) ₂ سنتز کمپلکس
۴۳ مطالعه‌ی سرعت واکنش‌ها:
۴۴ ۱-۴-۲ واکنش تبادل لیگاند بزرگ حلقه‌ی N ₄ با لیگاندهای کمپلکس (۱)، (۲) و (۳)
۴۸ ۲-۴-۲ واکنش تبادل لیگاند بزرگ حلقه N ₄ با لیگاندهای کمپلکس (۴)
۵۰ فصل سوم
۵۱ ۱-۳- طیف‌های ارتعاشی (FT-IR)
۵۲ ۲-۳- بررسی طیف‌های الکترونی (UV-Vis)
۵۴ ۳-۳- بررسی سینتیک واکنش‌ها
۵۵ ۱-۳-۳- بررسی سینتیک تبادل لیگاند N ₄ با لیگاندهای کمپلکس (۱)، (۲) و (۳)
۶۱ ۲-۳-۳- بررسی سینتیک تبادل لیگاند چهاردندانه N ₄ با لیگاندهای کمپلکس (۴)
۶۴ ۳-۳-۳- مقادیر k _{obs(1)} و k _{obs(2)} برای کمپلکس‌های (۱)، (۲)، (۳) و (۴)
۶۵ ۴-۳-۳- پیشنهاد مکانیسم و نتیجه‌گیری
۶۵ ۱-۴-۳-۳- پیشنهاد مکانیسم برای واکنش تبادل لیگاند N ₄ با کمپلکس (۱)، (۲) و (۳)
۶۶ ۲-۴-۳-۳- پیشنهاد مکانیسم برای کمپلکس (۴)
۶۸ اطلاعات تکمیلی
۷۶ مراجع

Abstract

فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۱: کمپلکس دی- μ -هیدروکسو بیس (بی‌پریدیل) دی‌پالادیم (II).....	۱۸
شکل ۲-۱: شروع طیف‌گیری از کمپلکس (۱)، تا جانشینی لیگاند تیوگلیکولیک اسید (HL^1), کمپلکس (۲).....	۱۹
شکل ۳-۱: نمودار جاب برای واکنش کمپلکس (۱) با تیوگلیکولیک اسید (HL^1).....	۱۹
شکل ۴-۱: نمودار جذب نسبت به زمان، واکنش تیوگلیکولیک اسید (HL^1) با کمپلکس (۱) با تنظیم pH در ۷/۴ در دمای $35^\circ C$	۲۰
شکل ۵-۱: رسم نمودار $\ln \Delta$ نسبت به زمان برای کمپلکس (۱) و لیگاند HL^1	۲۰
شکل ۶-۱: رسم $k_{1(obs)}$ بر حسب غلظت لیگاند HL^1 در دماهای مختلف.....	۲۳
شکل ۷-۱: رسم نمودار $1/k_{1(obs)}$ نسبت به $1/[ligand]$ در دماهای مختلف.....	۲۶
شکل ۸-۱: نمودار ایرینگ $\ln\{k_1h/k_B T\}$ نسبت به $1/T$ برای برهم‌کنش لیگاند تیوگلیکولیک اسید (HL^1) با کمپلکس (۱) در مرحله $A \rightarrow B$	۲۷
شکل ۹-۱: نمودار ایرینگ $\ln\{k_2h/k_B T\}$ نسبت به $1/T$ برای برهم‌کنش لیگاند تیوگلیکولیک اسید (HL^1) با کمپلکس (۱) در مرحله $B \rightarrow C$	۲۸
شکل ۱۰-۱: مکانیسم پیشنهادی برای برهم‌کنش لیگاند با کمپلکس (۱).....	۲۹
شکل ۱۱-۱: طیف کمپلکس‌های $Cu(salen)$ و $Cu(salpn)$ در حلال استونیتریل در $25^\circ C$	۳۱
شکل ۱۲-۱: تغییرات طیفی برای واکنش $[H_2salen] = 0.02 M$ با $[Cu(salpn)] = 0.02 M$ در حلال استونیتریل بعد از ۳۰ دقیقه در دمای $25^\circ C$	۳۱
شکل ۱۳-۱: مکانیسم واکنش تبادل H_2salen با $salpn$ در کمپلکس $Cu(salpn)$	۳۳
شکل ۱۴-۱: ساختار لیگاند $tab=2-(m-tolylazo) pyridine$	۳۳
شکل ۱۵-۱: ساختار کمپلکس $[(H_2O)(tap)_2RuORu(tap)_2(H_2O)]^{2+}$	۳۳
شکل ۱۶-۱: مکانیسم جانشینی لیگاند در کمپلکس $[(H_2O)(tap)_2RuORu(tap)_2(H_2O)]^{2+}$	۳۴
شکل ۱۷-۱: ساختار کمپلکس‌های باز شیف اورانیل.....	۳۵

- شکل ۱-۱۸: نمودار شبه مرتبه اول که از رسم k_{obs} نسبت به غلظت‌های مختلف لیگاند PBu_3 در غلظت ثابت کمپلکس در دماهای مختلف ۳۶
- شکل ۱-۱۹: مکانیسم پیشنهادی جانشینی لیگاند PBu_3 در کمپلکس‌های باز شیف اورانیل (VI) با حلال ۳۶
- شکل ۲-۱: لیگاند بزرگ حلقه $N_4H_2(ClO_4)_2$ ۳۸
- شکل ۲-۲: فرمول کلی $[Cu(SALSC)X]$ ۳۸
- شکل ۲-۳: لیگاند بازشیف SALSC ۳۹
- شکل ۲-۴: کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)].H_2O$ ۴۰
- شکل ۲-۵: کمپلکس $[Cu(SALSC)Br].1.5H_2O$ ۴۰
- شکل ۲-۶: کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)]_2$ ۴۱
- شکل ۲-۷: کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl].2H_2O$ ۴۲
- شکل ۲-۸: کمپلکس $[Cu(N_4)](ClO_4)_2$ ۴۳
- شکل ۲-۹: طیف UV-Vis دو کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)]$ و $[Cu(N_4)]$ در حلال DMF در دمای $25^\circ C$ با غلظت‌های برابر $0.01 M$ ۴۴
- شکل ۲-۱۰: طیف UV-Vis دو کمپلکس $[Cu(SALSC)Br]$ و $[Cu(N_4)]$ در حلال DMF در دمای $25^\circ C$ با غلظت‌های برابر $0.01 M$ ۴۵
- شکل ۲-۱۱: طیف UV-Vis دو کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)]_2$ و $[Cu(N_4)]$ در حلال DMF در دمای $25^\circ C$ با غلظت‌های برابر $0.01 M$ ۴۵
- شکل ۲-۱۲: تغییرات الکترونی حاصل از اضافه کردن حجم‌های برابر (۱ mL) از محلول لیگاند N_4 با غلظت (۰/۰۱ M) و $NaNO_3$ ۰/۱ M و کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)]$ با غلظت (۰/۰۱ M) در حلال DMF در مدت ۱۰۰ دقیقه ۴۶
- شکل ۲-۱۳: تغییرات الکترونی حاصل از اضافه کردن حجم‌های برابر (۱ mL) از محلول لیگاند N_4 با غلظت (۰/۰۱ M) و $NaNO_3$ ۰/۱ M و کمپلکس $[Cu(SALSC)Br]$ با غلظت (۰/۰۱ M) در حلال DMF در مدت ۳۰ دقیقه ۴۷

- شکل ۲-۱۴: تغییرات الکترونی حاصل از اضافه کردن حجم‌های برابر (۱ mL) از محلول لیگاند N_4 با غلظت (۰/۰۱ M) و $NaNO_3$ ۰/۱ M و کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)_2]$ با غلظت (۰/۰۱ M) در حلال DMF در مدت ۱۰۰ دقیقه ۴۷
- شکل ۲-۱۵: طیف UV-Vis دو کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl]$ و $[Cu(N_4)]$ در حلال DMF در دمای $25^\circ C$ با غلظت‌های برابر ۰/۰۱ M ۴۹
- شکل ۲-۱۶: تغییرات الکترونی حاصل از اضافه کردن حجم‌های برابر (۱ mL) از محلول لیگاند N_4 با غلظت (۰/۰۱ M) و $NaNO_3$ ۰/۱ M و کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl]$ با غلظت (M) در حلال DMF در مدت ۲۰ دقیقه ۴۹
- شکل ۳-۱: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)(NO_3)]$ با N_4 (۰/۰۱ M) در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۵
- شکل ۳-۲: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)(NO_3)]$ با N_4 (۰/۰۵ M) در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۶
- شکل ۳-۳: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)Br]$ با (۰/۰۱ M) N_4 در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۶
- شکل ۳-۴: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)Br]$ با (۰/۰۵ M) N_4 در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۷
- شکل ۳-۵: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)(ClO_4)_2]$ با N_4 (۰/۰۱ M) در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۷
- شکل ۳-۶: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)(ClO_4)_2]$ با N_4 (۰/۰۵ M) در DMF و دمای $25^\circ C$ ۵۸
- شکل ۳-۷: نمودار ثابت سرعت $k_{obs(1)}$ ● و $k_{obs(2)}$ ○ برحسب غلظت N_4 در کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)]$ ۵۹
- شکل ۳-۸: نمودار ثابت سرعت $k_{obs(1)}$ ● و $k_{obs(2)}$ ○ برحسب غلظت N_4 در کمپلکس $[Cu(SALSC)Br]$ ۶۰
- شکل ۳-۹: نمودار ثابت سرعت $k_{obs(1)}$ ● و $k_{obs(2)}$ ○ برحسب غلظت N_4 در کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)_2]$ ۶۰

- شکل ۱۰-۳: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)Cl]$ با (۰/۰۱ M) N_4 در DMF و دمای $25^\circ C$ ۶۲
- شکل ۱۱-۳: نمودار جذب برحسب زمان برای واکنش (۰/۰۱ M) $[Cu(SALSC)Cl]$ با (۰/۰۵ M) N_4 در DMF و دمای $25^\circ C$ ۶۲
- شکل ۱۲-۳: نمودار ثابت سرعت $k_{obs(1)}$ ● و $k_{obs(2)}$ ○ برحسب غلظت N_4 در کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl]$ ۶۳
- شکل ۱۳-۳: نمودار $k_{obs(1)}$ و $k_{obs(2)}$ برحسب N_4 برای کمپلکس‌های (۱)، (۲) و (۳) ۶۵
- شکل ۱۴-۳: مکانیسم جانشینی لیگاند N_4 در کمپلکس (۱)، (۲) و (۳) ۶۶
- شکل ۱۵-۳: مکانیسم جانشینی لیگاند N_4 در کمپلکس (۴) ۶۷
- شکل ۱۶-۳: طیف زیر قرمز لیگاند SALSC ۶۹
- شکل ۱۷-۳: طیف جذبی لیگاند SALSC ۶۹
- شکل ۱۸-۳: طیف زیر قرمز کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)].H_2O$ ۷۰
- شکل ۱۹-۳: طیف جذبی کمپلکس $[Cu(SALSC)(NO_3)].H_2O$ ۷۰
- شکل ۲۰-۳: طیف زیر قرمز کمپلکس $[Cu(SALSC)Br].1.5H_2O$ ۷۱
- شکل ۲۱-۳: طیف جذبی کمپلکس $[Cu(SALSC)Br].1.5H_2O$ ۷۱
- شکل ۲۲-۳: طیف زیر قرمز کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)]_2$ ۷۲
- شکل ۲۳-۳: طیف جذبی کمپلکس $[Cu(SALSC)(ClO_4)]_2$ ۷۲
- شکل ۲۴-۳: طیف زیر قرمز کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl].2H_2O$ ۷۳
- شکل ۲۵-۳: طیف جذبی کمپلکس $[Cu(SALSC)Cl].2H_2O$ ۷۳
- شکل ۲۶-۳: طیف زیر قرمز لیگاند $N_4H_2(ClO_4)_2$ ۷۴
- شکل ۲۷-۳: طیف جذبی کمپلکس $N_4H_2(ClO_4)_2$ ۷۴
- شکل ۲۸-۳: طیف زیر قرمز کمپلکس $[Cu(N_4)](ClO_4)_2$ ۷۵
- شکل ۲۹-۳: طیف جذبی کمپلکس $[Cu(N_4)](ClO_4)_2$ ۷۵

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۱: برخی واکنش‌های مطالعه شده با تکنیک رزونانس مغناطیسی هسته‌ای	۸.....
جدول ۲-۱: محدوده‌ی بررسی چند شناساگر متداول	۱۲.....
جدول ۳-۱: مقادیر $k_{1(obs)}$ برای هر غلظت لیگاند در محدوده‌ی $۱۰^{-۳} \text{ mol.dm}^{-۳}$ تا $۸/۵۵ \times ۱۰^{-۳} \text{ mol.dm}^{-۳}$ ، و غلظت ثابت کمپلکس (۱) $(۲/۸۵ \times ۱۰^{-۴} \text{ mol.dm}^{-۳})$	۲۳.....
جدول ۴-۱: مقادیر k_1 و K_E به‌دست آمده از عرض از مبدأ و نسبت شیب به عرض از مبدأ	۲۵.....
جدول ۵-۱: مقادیر k_2 برای مرحله‌ی دوم واکنش $(B \rightarrow C)$	۲۵.....
جدول ۶-۱: پارامتر فعال سازی برای کمپلکس (۱) توسط لیگاندها در محیط آبی، $\text{pH} = ۷/۴$	۲۷.....
جدول ۱-۳: مشخصات طیف IR لیگاند SALSC و کمپلکس‌ها	۵۲.....
جدول ۲-۳: مشخصات طیف الکترونی لیگاند SALSC و کمپلکس‌ها	۵۳.....
جدول ۳-۳: ثابت سرعت‌های محاسبه شده در غلظت‌های $۰/۰۱ \text{ M}$ تا $۰/۱۵ \text{ M}$ برای کمپلکس $[\text{Cu}(\text{SALSC})(\text{NO}_3)]$	۵۸.....
جدول ۴-۳: ثابت سرعت‌های محاسبه شده در غلظت‌های $۰/۰۱ \text{ M}$ تا $۰/۱۵ \text{ M}$ برای کمپلکس $[\text{Cu}(\text{SALSC})\text{Br}]$	۵۹.....
جدول ۵-۳: ثابت سرعت‌های محاسبه شده در غلظت‌های $۰/۰۱ \text{ M}$ تا $۰/۱۵ \text{ M}$ برای کمپلکس $[\text{Cu}(\text{SALSC})(\text{ClO}_4)_2]$	۵۹.....
جدول ۶-۳: ثابت سرعت‌های محاسبه شده در غلظت‌های $۰/۰۱ \text{ M}$ تا $۰/۱۵ \text{ M}$ برای کمپلکس $[\text{Cu}(\text{SALSC})\text{Cl}]$	۶۳.....
جدول ۷-۳: مقادیر $k_{(1)}$ و $k_{(2)}$ برای واکنش تبادل لیگاند N_4 با کمپلکس‌های (۱)، (۲) و (۳)	۶۴..
جدول ۸-۳: مقادیر $k_{(1)}$ و $k_{(2)}$ برای واکنش تبادل لیگاند N_4 با کمپلکس (۴)	۶۴.....

فصل اول

مقدمه

۱-۱-۱- مقدمه

بررسی و اندازه‌گیری سرعت یک واکنش مستلزم رعایت اصول زیر است:

۱. انجام تحقیقات کامل برای مشخص نمودن؛ الف) واکنش‌گرها، ب) استوکیومتری واکنش، ج) محصولات واکنش، د) وجود ناخالصی‌ها و ه) تثبیت شرایط محیطی.
۲. اندازه‌گیری سرعت واکنش تحت شرایط محیطی به کمک تکنیک دستگاهی مناسب.
۳. دنبال کردن تغییرات غلظت واکنش‌گرها و محصولات و یا سیگنال خروجی مورد نظر از دستگاه اندازه‌گیری، با زمان.

۱-۱-۱- واکنش‌گرها

شناخت گونه‌های درون محلول از نظر ویژگی‌های شیمیایی و فیزیکی بسیار ضروری است. برای مثال یکی از مشکلات عمده‌ی بررسی سرعت اکسایش به‌وسیله یون‌های سریم(IV) یا کبالت(III) ناشی از دشواری‌های شناسایی این گونه‌ها در محلول آبی است [۱].

مثال دیگر تجزیه‌ی هیدروژن پراکسید در حضور یک کاتالیست ماکروسیکل^۱ آهن(III) است. بررسی سرعت واکنش گویای آن است که در شرایط خاصی از غلظت و pH، این کمپلکس خصلت کاتالیستی ندارد. این امر ناشی از دimer شدن کمپلکس آهن است و مشخص شده که این دimer قدرت کاتالیز کردن واکنش را ندارد [۲].

با شناخت ویژگی‌های برخی کمپلکس‌های پورفیرین^۲ آهن(II) و آهن(III) مشابه سیستم بیولوژیکی همین^۳، با قرار دادن پورفیرین در یک میسل^۴، از بروز مشکلاتی چون دimer شدن و حلالیت کم جلوگیری شده است [۳].

ناتوانی و کاستی در توصیف گونه‌های واکنش‌پذیر ممکن است منجر به ایجاد مشکلات حادی در تفسیر سینتیک واکنش‌ها شود. در کمپلکس‌های M(II)(edta)، عدد کوئوردیناسیون لیگاند ممکن است ۵ و یا ۶ باشد. یکی از عوامل ثبت نتایج متضاد از سرعت واکنش‌های این کمپلکس‌ها در برخی منابع، ناشی از آن است که عدد کوئوردیناسیون به درجه حرارت و قدرت یونی حساس است [۴].

^۱ Macrocycle

^۲ Porphyrin

^۳ Hemin

^۴ Micelle