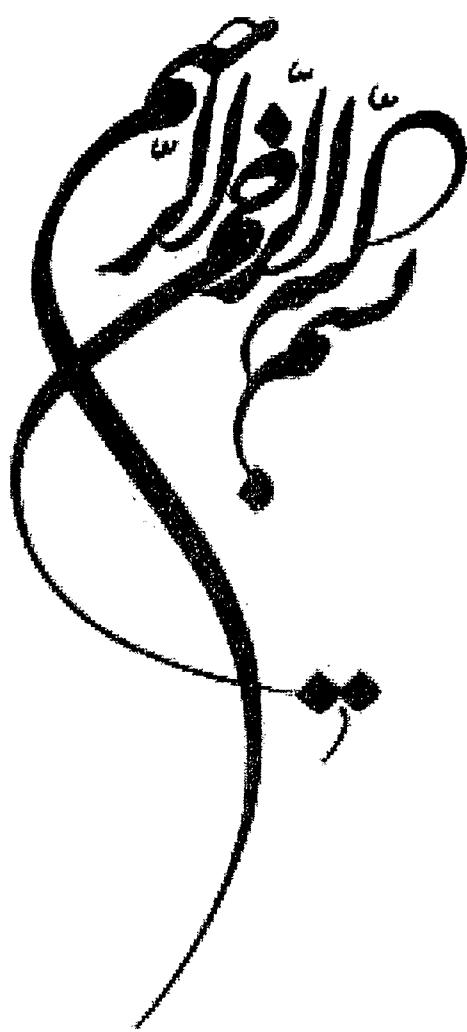


N.I.I.-PAX

N.I.I.



✓.N.I.I.



دانشگاه رتجان

دانشکده علوم - گروه شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد
گرایش شیمی معدنی

سنتر، تعیین ساختار و الکتروشیمی کمپلکس‌های آهن با لیگاندهای دهنده N و O

نگارش:

سلیمان خواجه

استاد راهنما:

دکتر حسن حسینی منفرد

استاد مشاور:

دکتر محمدعلی کامیابی

۱۳۸۷ / ۹ / ۱۷

۸۷ مهر



دانشگاه شهرستان

صور تجلیسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد

شماره: ۱۷۶۰۴ - رم

تاریخ: ۲۰ مرداد ۱۳۹۸

ا تأییدات خداوند متعال و با استعانت از حضرت ولی عصر (عج) جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد
قای: سلیمان خواجه رشتہ: شیمی گرایش: معدنی

تحت عنوان: سنتز، تعیین ساختار و الکتروشیمی کمپلکس‌های آهن با لیگاندهای دهنده N و O

در تاریخ ۲۰/۷/۸۷ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه زنجان برگزار گردید و نظر هیأت داوران بشرح زیر می‌باشد:

قبول (با درجه:^{عالی}..... امتیاز:^{۱۹۴۴}.....) دفاع مجدد مردود

- عالی (۲۰-۱۸)

- بسیار خوب (۹۹-۱۷)

- خوب (۹۹-۱۵)

- قابل قبول (۹۹-۱۳)

امضاء

رتبه علمی

نام و نام خانوادگی

عضو هیأت داوران

- استاد راهنمای

دکتر حسن حسینی منفرد

- استاد مشاور

دکتر محمدعلی کامیابی

- استاد ممتحن داخل دانشگاه

دکتر علی رمضانی

- استاد ممتحن خارج از دانشگاه

دکتر فرزین مرندی

- نماینده تحصیلات تکمیلی

آقای ابراهیم ولی بور

دکتر محمدعلی اسم خانی

دکتر نعمت ارشدی

مدیر تحصیلات تکمیلی دانشگاه

معاون آموزشی و تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم

دکتر محمدعلی اسم خانی

تقدیر و تشکر

سپاس و ستایش پروردگار یکتا را که توفیق اجرای این تحقیق را به من عطا نمود.
صمیمانه ترین تشکر و قدردانی ام را به استاد بزرگوار و ارجمند جناب آقای دکتر حسن حسینی
منفرد استاد راهنمای این پژوهه تقدیم می دارم، که در کسب علم و دانش و تجربه با تواضع روحی و
اخلاقی و اقتدار علمی شان مرا یاری نمودند، حال سپاس بی پایان دارم از ایشان که بزرگوارانه مرا
رهسپار جاده های دانش نمودند و همراهم بودند، از خداوند متعال برای ایشان سلامتی و سرافرازی
روزافزون خواهانم.

از جناب آقای دکتر کامیابی استاد مشاور این پایان نامه که در تمامی لحظات سخت با تلاش
بی وقفه و خالصانه مرا یاری نمودند کمال تشکر و قدردانی را دارم.
از جناب آقای دکتر رمضانی و جناب آقای دکتر مرندی که زحمت داوری این پایان نامه را بر عهده
داشتند کمال تشکر را دارم.

از جناب آقای دکتر رعیتی و جناب آقای دکتر ارشدی و سرکار خانم دکتر پیری و مدیر گروه
محترم شیمی جناب آقای دکتر واحد پور که در طول مدت تحصیل در این دانشگاه از راهنمایی های
تک تک ایشان بهره مند شده ام کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از آقای حسن ابراهیمی اولین و بهترین مشوقم در راه کسب علم که مرا امید دادند به فردا و همواره
مشوق و پشتیبان من بودند و همچنین از آقای برگستان که همیشه مشوق و پشتیبان من بودند
کمال تشکر و قدردانی را دارم و امیدوارم که همواره موفق و مؤید باشند.

از هم دوره ای های خوبم آقایان مهدوی، زینل خانی، نظری، مرسلی و خانم ها صدیقیان و مهاجری
و همچنین دوستان عزیزم در طول این دوره آقایان ایوبی، نریمانی، تقوی، کریمی، بخشی، احمدی،
تفنگچی، ولی زاده، فولادی و سایر دوستانم آقایان عربی، دیناری، سمویی، نعلچگر، خلیلی، آبسالار،
برخی، کامکار، عزتی، صحبتیان، سیروسیان، حسینخانی، اصغر رضایی و علی حجی که همواره
مشوق و پشتیبان من بودند کمال تشکر را دارم و امید دارم که همواره موفق و مؤید باشند.

این دفتر را با مهر و ستایش پیش کش می کنم به

پدر عزیز و مهر بام

و

خانواده عزیزم

که همواره مشوق و پشتیبان من بودند

و

همیشه از محبت بی دریغشان برخوردار بوده ام

تقدیم به

روح بزرگ مادرم

تقدیم به گریه های شبانه اش که مر همی بود مدام بر دردهایم،

نگاهش که گاه برجاده خشکید از پی آمدنم و باز

چهره تکیده و نورافی اش مرا امیدی بود برای بودن

مادر! با این ناقابل خواهم شد مرید اشکهای صادقانه ات،

و در پایان عاشقم بر صفاتیت، می ستایست

مادر

علامت های اختصاری

نام کامل	علامت اختصاری
مغناطیس تک مولکولی	SMM
مغناطیس های کایرال مولکولی	SCM
ولتاومتری چرخه ای	CV
پتانسیل پیک	E_p
پتانسیل نیمه پیک	$E_{p/2}$
بنزوویک اسید (۲-هیدروکسی-بنزیلیدین) هیدرازید	H_2L^1
بنزوویک اسید (۲-هیدروکسی-۳-متوکسی بنزیلیدین) هیدرازید	H_2L^2
نیکوتین آمید	L^3
(۱-کلرو وینیل) هیدرازونو(متیل)فنول (E)	(L^4 -thioseme)
تیوسیمی کاربازید	(CH_5N_3S)

فهرست مطالب

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

۴۷	فصل دوم: بخش تجربی	۱-۲- مواد شیمیایی
۴۷		۲-۲- لوازم و دستگاه ها
۴۸	۳-۲- سنتز لیگاند (E)-۲-(۱-کلرو وینیل) هیدرازوونو(متیل)فنول	۲- سنتز لیگاند (E)-۲-(۱-کلرو وینیل) هیدرازوونو(متیل)فنول
۴۹		۴-۲- سنتز کمپلکس $[Fe(HL^1)_2Cl]$ (۱)
۵۰	(۲) $[Fe_2(CH_5N_3S)_2Cl_3C_2H_5O]$	۵-۲- سنتز کمپلکس (۲) $[Fe_2(CH_5N_3S)_2Cl_3C_2H_5O]$
۵۰	(۳) $[Fe_3(L^2)Cl_7(OH_2)_3(OC_2H_5)]$	۶-۲- سنتز کمپلکس (۳) $[Fe_3(L^2)Cl_7(OH_2)_3(OC_2H_5)]$
۵۱		۷-۲- سنتز کمپلکس (۴) $[Fe(ox)(H_2O)_2]$
۵۱	(۵) $[Fe_3(L^3)(EtOH)(OH_2)_3Cl_5]$	۸-۲- سنتز کمپلکس (۵) $[Fe_3(L^3)(EtOH)(OH_2)_3Cl_5]$
۵۲	۹-۲- اندازه گیری مقدار آهن در کمپلکس های تهیه شده	
۵۲		۱۰-۲- بررسی خاصیت کاتالیزوری کمپلکس ها
۵۲	۱۰-۲- شرایط دستگاه کروماتوگرافی گازی	
۵۳	۱۰-۲- بررسی اپوکسایش اولفین ها با ترسیبوبوتیل هیدرون پرکسید (TBHP)	
۵۳	۱۰-۳- زمان های بازداری مواد اولیه و محصولات در واکنش اپوکسایش سیکلواکتن	
۵۴	۱۱-۲- آزمایش های الکتروشیمی	

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل سوم: نتایج و بحث
۵۶	۱-۳- سنتز و شناسایی لیگاند (E)-(۲)-(۱-کلرو وینیل) هیدرازونو(متیل)فنول
۵۷	۱-۱-۳- اطلاعات طیفی و خواص فیزیکی لیگاند (E)-(۲)-(۱-کلرو وینیل) هیدرازونو(متیل)فنول
۶۶	۲-۳- سنتز و شناسایی کمپلکس (۱) $[\text{Fe}(\text{HL}^1)_2\text{Cl}]$
۷۳	۳-۳- سنتز و شناسایی کمپلکس (۲) $[\text{Fe}_2(\text{CH}_5\text{N}_3\text{S})_2\text{Cl}_3\text{C}_2\text{H}_5\text{O}]$
۷۸	۴-۳- سنتز و شناسایی کمپلکس (۳) $[\text{Fe}_3(\text{L}^2)\text{Cl}_7(\text{OH}_2)_3(\text{OC}_2\text{H}_5)]$
۸۵	۵-۳- سنتز و شناسایی کمپلکس (۴) $[\text{Fe}(\text{ox})(\text{H}_2\text{O})_2]$
۹۲	۶-۳- سنتز و شناسایی کمپلکس (۵) $[\text{Fe}_3(\text{L}^3)(\text{EtOH})(\text{OH}_2)_3\text{Cl}_5]$
۹۸	۷-۳- بررسی فعالیت کاتالیزوری کمپلکس‌های تهیه شده
۹۸	۱-۷-۳- بهینه‌سازی نسبت اکسنده (TBHP) به سوبسترا (سیکلواکتن)
۱۰۳	۲-۷-۳- بررسی اثر حلال
۱۰۷	۳-۷-۳- بررسی اثر دما
۱۱۱	۴-۷-۳- بررسی خاصیت کاتالیزوری کمپلکس‌های تهیه شده در شرایط بهینه
۱۱۳	۸-۳- مطالعه رفتار الکتروشیمیایی کمپلکس‌های تهیه شده
۱۱۷	نتیجه گیری
۱۱۸	منابع و مراجع

چکیده

تک بلور لیگاند (E)-(۲-(۱-کلرو وینیل) هیدرازونو) متیل) فنول (L⁴-thioseme)، از واکنش بین سالیسیل آلدید، بنزهیدرازید و تیوسومی کاربازید در حضور FeCl₃ تهیه شد. این ترکیب (L⁴-thioseme) توسط آنالیز عنصری، طیف بینی IR، UV-vis، ¹H-NMR و ¹³C-NMR و پراش پرتو X شناسایی شد. ساختار X-ray لیگاند (L⁴-thioseme) نشان می دهد که مولکول مسطح و دارای پیوند های هیدروژنی درون مولکولی قوی است.

پنج کمپلکس آهن (II) با لیگاندهای بازشیف سه دندانه هیدرازین H₂L¹ {=H₂L¹}، هیدروکسی بنزیلیدن) هیدرازید (۲-هیدروکسی-۳-متوكسی بنزیلیدن) هیدرازید و H₂L² {=H₂L²}، هیدرازید (۲-هیدروکسی-۳-متوكسی بنزیلیدن)، [Fe₃(L²)Cl₇(OH₂)₃(OC₂H₅)]، [Fe₂(CH₅N₃S)₂Cl₃C₂H₅O]، [Fe(HL¹)₂]Cl، [Fe(OX)(H₂O)₂] و [Fe₃(L³)(EtOH)(OH₂)₃Cl₅] (۴) سنتز و به وسیله آنالیز عنصری، طیف بینی UV-Vis و FT-IR شناسایی شدند. توانایی کاتالیستی کمپلکس های سنتز شده بررسی شدند. اثر غلظت اکسیده، دما، حلول و کمک کاتالیزور در اکسایش کاتالیزوری سیکلواکتن مورد مطالعه قرار گرفت. گزینش پذیری اپوکسید برای سیکلواکتن ۱۰۰٪ بود. مشخص شد که کمپلکس (۲) [Fe₂(CH₅N₃S)₂Cl₃C₂H₅O] بیشترین فعالیت کاتالیزوری و گزینش پذیری بالایی در اپوکسایش اولفین ها در حلول استونیتریل با TBHP دارد. همچنین خصوصیات الکتروشیمی کمپلکس های سنتز شده با تکنیک ولتامتری چرخه ای نیز بررسی شدند.

واژه های کلیدی: کمپلکس های آهن؛ هیدرازین؛ ترسیوبوتیل هیدروژن پرکسید؛ اکسایش؛ ولتامتری چرخه ای.

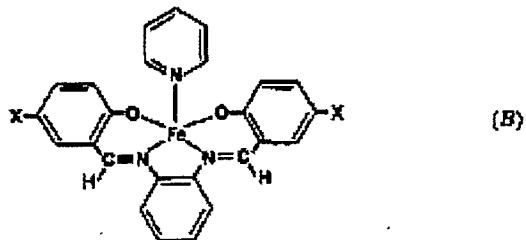
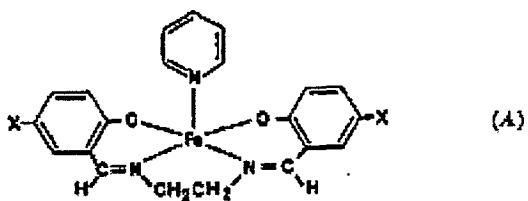
فصل اول

مقدمة

شیمی فلزات واسطه ارتباط زیادی با شیمی ترکیبات کوئوردیناسیون دارد. این ترکیبات که به کمپلکس‌ها موسومند، نقش بسیار مهمی در زندگی روز مره دارند. مطالعه و بررسی آن‌ها برای درک مفاهیم پیوند شیمیایی و قوانین حاکم بر شیمی معدنی بسیار مهم است. تعداد کمپلکس‌های موجود تقریباً بی‌شمار است و به دلیل سنتز مداوم آن‌ها توسط شیمیدانان معدنی به سرعت بر تعداد آن‌ها افزوده می‌شود. این کمپلکس‌ها علاوه بر اهمیت کاربردی و اقتصادی، از جنبه بررسی‌های محض نیز اهمیت زیادی دارند. این ترکیبات در ابتدا مورد توجه شیمیدانان نظری و معدنی قرار گرفت ولی با توجه به کاربردهای متنوع و وسیع آن‌ها در پزشکی، صنعت و زمینه‌های دیگر مانند کatalیست کردن واکنش‌ها و یا فتو حساس کنندگی، این شاخه از شیمی مورد توجه گروه‌های تحقیقاتی زیادی قرار گرفته است. از جمله مهمترین کمپلکس‌ها می‌توان به کلروفیل و هموگلوبین اشاره کرد. کمپلکس‌ها فلزات واسطه به دلایل بسیار زیادی، از جمله رنگی بودن، داشتن خصلت‌های مغناطیسی متفاوت، تنوع ساختاری و پایداری بهتر نسبت به کمپلکس‌های عناصر اصلی، بیشتر مورد توجه شیمیدانان قرار گرفته اند. برای مطالعه و شناسایی کمپلکس‌ها می‌توان از روش‌های طیف سنجی متداول در شیمی استفاده کرد. همچنین برخی از روش‌های دستگاهی بیشتر برای کمپلکس‌ها به کار می‌روند، که می‌توان به تکنیک پراش پرتو X که در سالهای اخیر گسترش چشمگیری داشته است اشاره نمود. کمپلکس‌های عناصر واسطه بسته به آرایش الکترونی یون فلز مرکزی و ساختار لیگاندها خواص متنوعی از خودشان نشان می‌دهند.

۱-۲-۱- اهمیت و کاربرد کمپلکس های باز شیف آهن

باز شیف ها نقش بسیار مهمی در شیمی معدنی ایفا می کنند، به صورتی که آن ها با اغلب یون های فلزات واسطه به آسانی کمپلکس های پایداری را تشکیل می دهند [۱]. شیمی اکسایش-کاهش آهن و حضور همیشگی آنها همراه موجودات زنده باعث تمایل فوق العاده ای برای مطالعه و بررسی شیمی کمپلکس های آهن شده است [۲]. توسعه در زمینه شیمی معدنی زیستی باعث افزایش علاقه در بررسی کمپلکس های باز شیف شده است، زیرا مشخص شده است که تعدادی از این کمپلکس ها به صورت الگو برای گونه های مهم زیستی می توانند به کار روند [۷-۳]. کمپلکس های آهن متعددی با آمین، پیریدین، فنولی و نیمه واحد های دهنده کربوکسیلات به عنوان الگوی ساختاری مکان های پیوندی آمینو اسید موجود در پروتئین های غیر هیم آهن، سنتز شده اند (شکل ۱-۱)، [۲]. به خصوص از لیگاند های کربوکسیلات، عنوان الگویی برای سیستم های آنزیمی که مولکول های آلی و پروتئین های مسئول ذخیره آهن را اکسید می کنند استفاده شده و در بعضی از نمونه ها خواص اکسایشی کمپلکس ها برای مولکول های آلی (شامل DNA) بررسی شده است [۲]. تعدا زیادی از کمپلکس های باز شیف به خاطر کاربردهای گسترده در زمینه کاتالیستی، داروسازی، فتوشیمی و شیمی مغناطیس، سنتز شده و مورد تحقیق قرار گرفته اند [۸]. کمپلکس های باز شیف فلزات واسطه از جمله آهن به علت خاصیت کاتالیستی در پلیمر کردن اولفین ها کاربرد زیادی دارند [۸]. کمپلکس های باز شیف فلزات واسطه به علت وجود خاصیت دارویی و ضد باکتری [۱]، و همچنین خاصیت زیستی و ضد سرطانی [۸]، و عاملی برای مقابله با بیماریهای ویروسی [۸] مورد توجه می باشند. به علت تنوع و گسترده‌گی که در ساختار ترکیب های کوئوردیناسیونی آهن و ویژگی های آن ها وجود دارد و پیش بینی کاربردهای گسترده و ویژه برای کمپلکس های آهن بالیگاند های نیتروژن واکسیژن دهنده، مطالعه در مورد سنتز و شناسایی این ترکیب ها جالب توجه است.



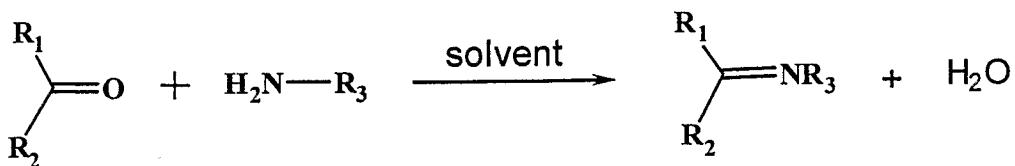
(A)= Fe(SALEN)Py, x=H ; Fe(5-BrSALEN)Py, x=Br

(B)= Fe(SAL-O-PhEN)Py, x=H ; Fe(5-BrSAL-O-PhEN)Py, x=Br

شکل ۱-۱ دو نمونه از کمپلکس های باز شیف آهن (II)

۱-۳-۱- لیگاندهای ایمین (باز شیف)

این ترکیبات از آبگیری آمین های نوع اول و گروه های کربونیل فعال (آلدهید یا کتون) تهیه می شوند (شکل ۱-۲)، که در آن گروه های آزومتین ($C=N^-$) که به آن ها ایمین نیز گفته می شود به وجود می آیند. ایمین ها به دو دسته آромاتیک (مانند فنانترولین) و غیر آروماتیک (مانند بیس سالیسلیدین اتیلن) تقسیم بندی می شوند. به ایمین های غیر آروماتیک، باز شیف نیز می گویند [۹]. سنتز کمپلکس های فلزی با استفاده از این لیگاندها در سال های اخیر رشد چشمگیری داشته است. با توجه به اوربیتال مولکولی این لیگاندها متوجه می شویم که این لیگاندها هم دهنده الکترون (دهنده II) و هم پذیرنده الکترون (پذیرنده II) هستند ولی در کل آن ها پذیرنده الکترون هستند [۱۰].



شکل ۲-۱ طرح کلی سنتر لیگاند باز شیف

۴-۴- تاریخچه بازهای شیف

در سال ۱۸۴۰ اتلینگ^۱ محصول کریستالی سبز رنگ متمایل به تیره را از واکنش مس(II) استات با سالیسیل آلدهید و محلول آمونیاک جدا کرد [۹]. چند سال بعد شیف^۲ اثبات کرد که کمپلکس سالیسیل آلدیمین محصول واکنش سالیسیل آلدهید- فلز با آمونیاک می باشد [۱۰]. پیفیر^۳ و همکارانش مطالعه سیستماتیک کمپلکس های باز شیف را در دهه ۱۹۳۰-۱۹۴۰ مورد بررسی قرار دادند و نقش یون فلزی را مشخص کردند. اینکورن^۴ و لتیف^۵ خود تراکمی ارتو آمینوبنز آلدهید را در حضور یون های دو ظرفیتی فلزات واسطه مورد مطالعه قرار دادند، اما آن ها قادر به جدا سازی و شناسایی کمپلکس های ماکروسیکل درون مخلوط واکنش نبودند [۱۱]. بنابراین اهمیت یون فلزی در سنتز این گونه ترکیبات مورد توجه قرار گرفت و منجر به جمع آوری اطلاعات کیفی در این زمینه شد.

۵-۱- کمپلکس های حاصل از لیگاندهای سه دندانه

ساختار طبیعی کمپلکس های یون فلزی با تیوسمی کارباژون های درشت مولکول و S-آلکیل دی تیوکربازات ها به رفتار کوئوردینانسی آن ها نسبت به یون های فلزی وابسته است، زیرا عمدتاً مفهوم پزشکی دارند [۱۶-۱۷]. علاوه بر این کمپلکس های یون فلزی مشتق شده از پیریمیدین به

¹Ettling

²Schiff

³Pfeiffer

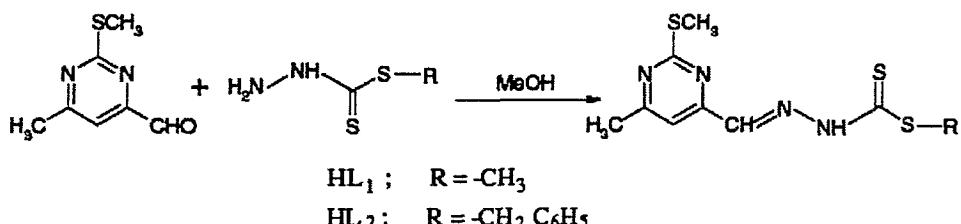
⁴Einchorn

⁵Latif

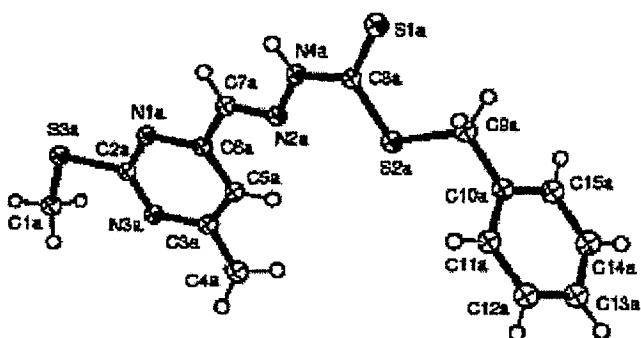
طور وسیع مورد مطالعه قرار گرفته اند، و در سال های اخیر مشخص شده که آن ها فعالیت های گوناگون زیستی زیادی در زمینه ضد مalaria، ضد باکتری، ضد توموری و ضد ویروسی دارا هستند [۱۸-۳۰]. و این فعالیت ها غالباً به توانایی کی لیت شدن آن ها با یون های فلزی ارتباط دارد. بتازگی کشف شده که حضور پیوندهای گوگرد-فلز و نیتروژن-فلز یک محل فعال از لحاظ اکسایش-کاهش می باشد [۳۱، ۳۲] که باعث برانگیخته شدن علاقه زیاد در شیمی پیریمیدین [۳۳-۳۸] به وسیله مخلوط اتم های دهنده گوگرد و نیتروژن می شود. سنتز، توصیف ساختار و مطالعه واکنش پذیری این قبیل کمپلکس ها با لیگاند های دهنده N، S، N، S منجر به اطلاعات با ارزش برای فهمیدن کارکرد آنزیم های متفاوت در مقیاس مولکولی می شود [۳۱]. نوکلئیک اسید، ویتامین ها و کوآنزیم ها شامل سیستم های حلقوی پیریمیدین، پتانسیل پیوند را برای یون های فلزی فراهم می کنند [۳۹-۴۳].

بیش از همه یک چنین تحقیقاتی روی لیگاند های گوناگون مشتقات پیریمیدین مرکز بوده است [۴۴-۴۶]. در مقایسه با شیمی کوئور دینانسی بازهای پیریمیدین و کارکرد بهتر نمونه ها در سیستم های زیستی، در پیریمیدین بیشتر II-اسیدی و حضور یک هترواتوم نقش مهمی را ایفا می کنند [۴۷-۵۰]. نسبتاً بر روی شیمی فلزهای واسطه با لیگاند های باز شیف که دارای پیریمیدین با جزء درشت مولکول می باشند تحقیقات کمتری صورت گرفته است. این مسیری برای کشف لیگاند های دی تیوکربازات بازهای پیریمیدین با یونهای فلزی مختلف را بوجود می آورد.

دو نمک پیریمیدین جدید NNS لیگاند های باز شیف سه دندانه (شکل ۱-۳) S-متیل-۳-S-۲-متیل-۶-متیل-۴-پیریمیدیل (متیل) دی تیوکربازات [HL₁] و S-بنزیل-۳-(S-۲-متیل-۶-متیل-۴-پیریمیدیل) دی تیوکربازات [HL₂] به وسیله متراکم کردن ۱:۱ از S-متیل مرکاپتو-۶-متیل پیریمیدین-۴-کربالدهید و S-متیل / S-بنزیل دی تیوکربازات سنتز شده اند [۵۱].



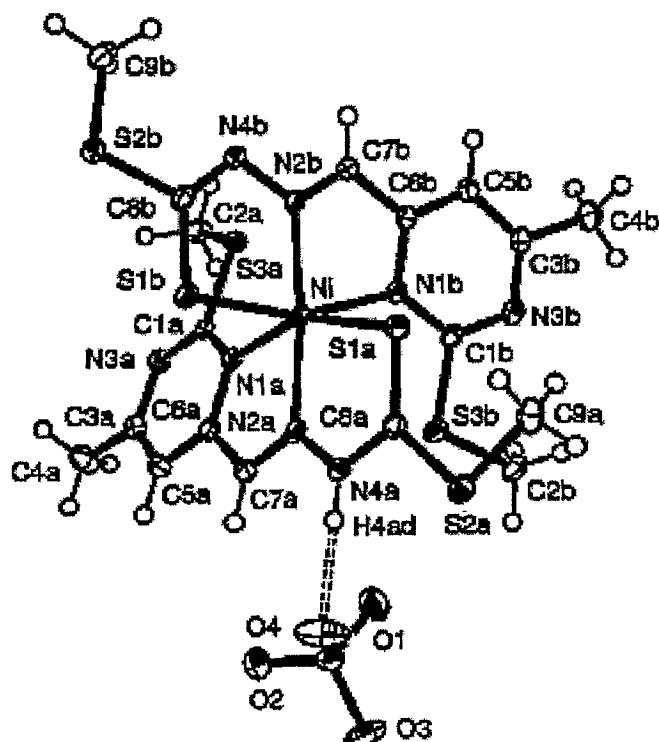
شکل ۱-۳ ساختار شیمیایی برای لیگاندهای HL₁ و HL₂



شکل ۱-۴ نمودار ORTEP برای لیگاند HL₂

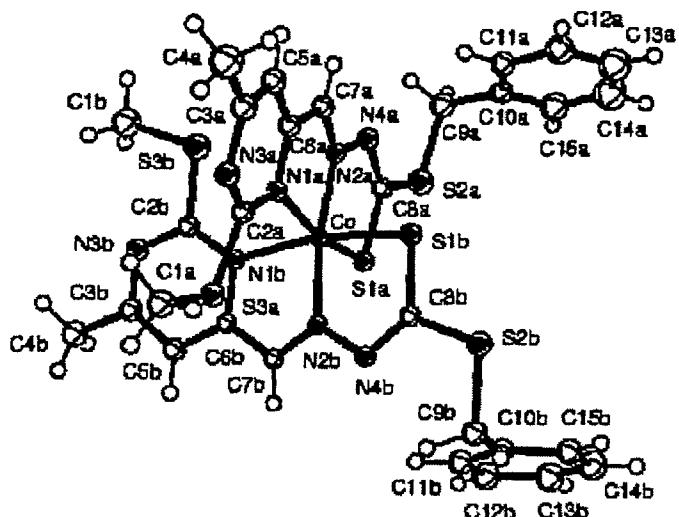
یک کمپلکس (II) Ni با [Ni(HL₁)(L₁)]ClO₄ HL₁ و کمپلکس های (III) Co(III) و Fe(III) با [Fe(L₂)₂]ClO₄ و [Co(L₂)₂]ClO₄ ساخته شده اند (شکل ۱-۵ و شکل ۱-۶) و شکل ۱-۷ که به وسیله آنالیز عنصری و مطالعه مغناطیس پذیری و طیف بینی بررسی و توصیف شده اند. همه کمپلکس های دوکی لیت دارای یک ترکیب هشت وجهی واپیچیده هستند که یک N₄S₂ رنگ ساز در اطراف یون فلز مرکزی خود دارند. در هر مولکول لیگاند با استفاده از پیریمیدیل و نیتروژن آزمتین و اتم های سولفور تیولاتو (به جز در کمپلکس های نیکل، که یک مولکول لیگاند

سولفورتیون به جای اتم سولفور تیولاتو استفاده شده است) به یون فلز متصل می شود. در کمپلکس های Ni(II) لیگاند به صورت سه دندانه خنثی رفتار می کند و در مولکول های دیگر به صورت سه دندانه غیر یونی عمل می کنند، در صورتی که در کمپلکس های Co(III) و Fe(III) مولکول های لیگاند به صورت سه دندانه آنیونی رفتار می کنند. تمام کمپلکس ها به وسیله پراش پرتو X آنالیز شده اند و شکل هندسی هشت وجهی واپیچیده در اطراف محیط کوئوردیناسیون مشاهده شده است [۵۱].

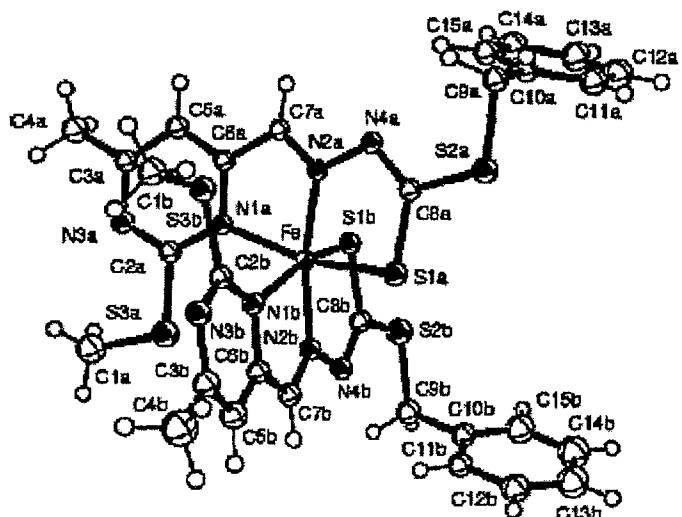
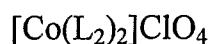


شکل ۱-۵- ساختار مولکولی کمپلکس $[Ni(HL_1)(L_1)]ClO_4$.

پیوند هیدروژنی به صورت نقطه چین نشان داده شده است.



شکل ۱-۶ نمودار ORTEP و شماره گذاری اتم ها برای قسمت کاتیونی کمپلکس



شکل ۱-۷ نمودار ORTEP و شماره گذاری اتم ها برای قسمت کاتیونی کمپلکس

