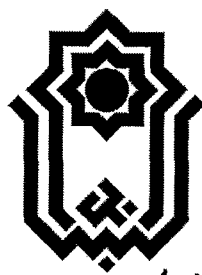


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه بوعلی سینا

دانشکده شیمی

### پایان نامه

برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در رشته شیمی (گرایش تجزیه)

عنوان:

مطالعه اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس‌های انتقال بار  $I_2$  و  $ICl_3$  با چند

لیگاند سنتزی در حلال‌های غیرآبی

استاد راهنما:

دکتر طیبه مدرکیان

استاد مشاور:

پروفسور عباس افخمی

۱۳۸۸/۱۱/۱۵

پژوهشگر:

سارا حیدری

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری  
سازمان اسناد و کتابخانه ملی

بهمن ۱۳۸۷

۱۳۱۴۲۹

کلیه امتیازهای این پایان نامه به دانشگاه بوعلی سینا همدان تعلق دارد. در صورت استفاده از تمام یا بخشی از مطالب این پایان نامه در مجلات، کنفرانس‌ها و یا سخنرانی‌ها، باید نام دانشگاه بوعلی سینا یا اساتید راهنمای پایان نامه و نام دانشجو با ذکر مآخذ و ضمن کسب مجوز کتبی از دفتر تحصیلات تکمیلی دانشگاه، ثبت شود. در غیر این صورت مورد پیگرد قانونی قرار خواهد گرفت.



دانشگاه گیلان

دانشکده شیمی  
پایان نامه کارشناسی ارشد  
شیمی تجزیه

تحت عنوان:

مطالعه اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس‌های انتقال بار  $I_2$  و  $ICl_3$  با  
چند لیگاند سنتزی در حلال‌های غیرآبی

استاد راهنما:

دکتر طیبه مدرکیان

استاد مشاور:

پروفسور عباس افخمی

پژوهشگر:

سارا حیدری

کمیته ارزیابی پایان نامه:

- ۱- استاد راهنما: دکتر طیبه مدرکیان (رئیس کمیته).....دانشیار شیمی تجزیه
- ۲- استاد مشاور: پروفسور عباس افخمی.....استاد شیمی تجزیه
- ۳- استاد داور: پروفسور محمد علی زلفی گل.....استاد شیمی آلی
- ۴- استاد داور: دکتر سعید عزیزیان.....دانشیار شیمی فیزیک
- ۵- استاد داور: دکتر مهدی هاشمی.....استادیار شیمی تجزیه



دانشگاه گیلان

دانشکده شیمی

جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد  
سارا حیدری در رشته شیمی (گرایش تجزیه)

تحت عنوان:

مطالعه اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس‌های انتقال بار  $I_2$  و  $ICl_3$  با  
چند لیگاند سنتزی در حلال‌های غیرآبی

به ارزش ۸ واحد در روز چهارشنبه ۱۳۸۷/۱۱/۱۶ ساعت ۸/۳۰ صبح در سالن آمفی تئاتر (۲)

دانشکده شیمی، با حضور دانشجویان و اعضای هیأت داوران برگزار گردید و با نمره

۱۸/۷ و درجه عالی ارزیابی گردید.

کمیته ارزیابی پایان نامه:

۱- استاد راهنما: دکتر طیبه مدرکیان (رئیس کمیته).....دانشیار شیمی تجزیه

۲- استاد مشاور: پروفسور عباس افخمی.....استاد شیمی تجزیه

۳- استاد داور: پروفسور محمد علی زلفی گل.....استاد شیمی آلی

۴- استاد داور: دکتر سعید عزیزبان.....دانشیار شیمی فیزیک

۵- استاد داور: دکتر مهدی هاشمی.....استادیار شیمی تجزیه

الهی؛

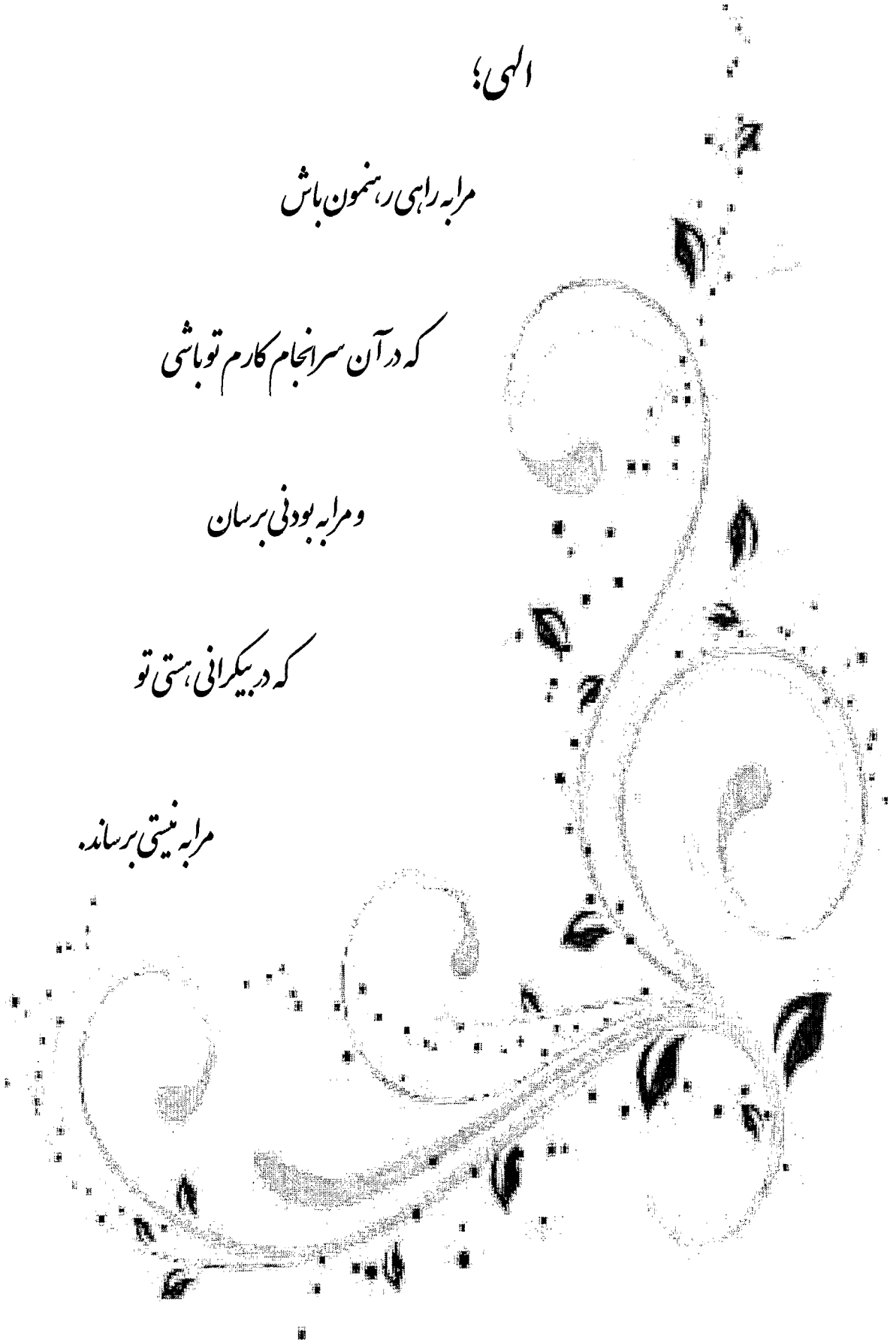
مرا به راهی ره نمون باش

که در آن سرانجام کارم تو باشی

و مرا به بودنی برسان

که در بیکرانی هستی تو

مرا به نیستی برساند.





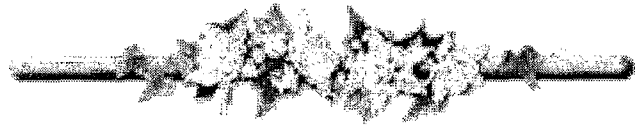
آنگاه که برای تختین بار چشم کشودم  
تصویر دو فرشته در افق نگاهم پدیدار شد  
آنگاه که تن نحیف من یارای ایستادن نداشت

دستان مرا گرفتند  
یکی تکیه گاه زندگیم  
و دیگری آموزگار محتم شد

اینک شمره تلاشم را که دقیرست کوچک  
به این دو فرشته مهر

پدر و مادر عزیزم  
تقدیم می کنم.





لقدیم به

برادر مهربان و دلسوزم

ساره درخشان زندگیم

که آفتاب وجودش را در پیچ آسمانی نخواهم یافت.





## تقدیر و تشکر:

حمد و سپاس بی انتها، پروردگار دانا و توانا را که توفیق داد تا سرشارترین محظوظانه های زندگی را در راه دانش سپری کنم. خدایا تو را با تمام وجود سپاس می گویم که هدایت کردی و لطف را شامل عالم ساختی و از تو مددی گیرم تا پاسم را بر تمامی آنانی که کام های استوار و دستان پر از لطف شان تکیه گاه محنتی را بهم بودند تقدیم کنم.

از استاد راهنمای گرامی ام سرکار خانم دکتر طیبه مددکیان به خاطر تمام محبت ها و راهنمایی های ارزنده شان و تمامی زحماتی که در طول انجام پروژه متحمل شدند و من، همواره پاسکزار حسن برخوردار ایشان، هستم، بسیار متشکرم.

از استاد مشاور بزرگوارم جناب آقای پروفیسور عباس افغانی که افتخار شاگردی ایشان را داشتم و به خاطر راهنمایی های ارزنده شان و آنچه که از علم ایشان آموختم پاسکزاری می کنم.

از اساتید بزرگوار جناب آقایان، پروفیسور محمد علی زلفی گل، دکتر مهدی هاشمی و دکتر سعید عزیزیان که زحمات قرانت و داوری پایان نامه را به عهده داشتند، پاسکزارم. همچنین از پروفیسور نعمت الهی، دکتر هاشمی، خانم دکتر حسنی، دکتر آذینفر، دکتر قربانی و دکتر زارعی که از محضر علم شان بهره مند شده ام، کمال ادب و تشکر را دارم.

از دو دوست بسیار عزیزم، خانم باایلا محمدی بزاز و گلاره سلطانی که در طی این مدت لطف و محبت شان، همواره همراهم بود صمیمانه پاسکزارم. از این دو توانا سعادت و سربلندی را برای ایشان آرزو مندم.

از دوستان همیشگی ام خانم باساواتی، اکبریان، محمدزاده، بزرگ زاده، جنتی، زارع، سعادت، محمدی، بزم زاده، ورمغانی، اسمعیلی، قاضی زاده، روحانی، حاج نادری، ابوالقاسمی، نادری، کشوری، نیکویی، ملکی، موسوی، جباری و آقایان؛ آل سید، نوروز اصل، خواجوی، سیری، خوش سفر، موسوی، قربانی، شوشتری، قادری، شریعتی، ملکی، سایان و کلوری که هدیه ها، همراهی ها و دلگرمی های شان، سردی و سنگینی محظوظانه سخت را بر ایتم گرم و آسان ساخت تشکر می کنم. از خداوند منان، موفقیت و شادکامی روز افزون همه این عزیزان را خواستارم.

نام خانوادگی: حیدری	نام: سارا
عنوان پایان نامه: مطالعه اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس های انتقال بار $I_2$ و $ICl_3$ با چند لیگاند سنتزی در حلال های غیر آبی	
استاد راهنما: دکتر طیبه مدرکیان	استاد مشاور: پروفیسور عباس افخمی
مقطع تحصیلی: کارشناسی ارشد	رشته: شیمی
گرایش: تجزیه	تعداد صفحه: ۸۴ صفحه
دانشگاه: بوعلی سینا	دانشکده: شیمی
تاریخ دفاعیه: ۱۳۸۷/۱۱/۱۶	
واژه های کلیدی: کمپلکس های انتقال بار، ید، $ICl_3$ ، کراون اتر، پیکریک اسید	
چکیده	
<p>در این پایان نامه تشکیل کمپلکس های انتقال بار پذیرنده های ید، تری کلرویدید و پیکریک اسید با دو لیگاند سنتزی در حلال های آلی به صورت اسپکتروفتومتری بررسی شده است. مطالعه ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار ید و <math>ICl_3</math> با یک آزا کراون اتر سنتزی در حلال های کلروفرم و دی کلرومتان صورت گرفت. استوکیومتری و ثابت های تشکیل برای کمپلکس ها با استفاده از روش نسبت مولی و تغییرات پیوسته اندازه گیری شد. اثر دما و عدد دهندگی حلال بر روی پایداری کمپلکس ها بررسی گردید. ثابت های پایداری در دماهای مختلف محاسبه شده و با استفاده از معادله وانتف و با توجه به وابستگی ثابت های پایداری به دما پارامترهای ترمودینامیکی محاسبه شد.</p> <p>همچنین بررسی سینتیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار <math>ICl_3</math> با لیگاند سنتزی ۳، ۶- بیس ((۲- آمینو اتیل سالیسیلیدن) تیو) پیریدازین (PATS)) در حلال های کلروفرم، دی کلرومتان و دی متیل فرمامید در دمای محیط صورت گرفت. نمودار جذب - زمان برای هر کدام از کمپلکس ها ثبت شد و ثابت سرعت در هر حلال محاسبه شد.</p> <p>مطالعه سینتیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید با لیگاند PATS در حلال های کلروفرم و دی متیل فرمامید در دمای محیط انجام شد و مقادیر ثابت سرعت محاسبه گردید.</p>	

--	--	--

فهرست

# فهرست مطالب

<u>عنوان</u>	<u>صفحه</u>
مقدمه	
<b>فصل اول: مقدمه و مروری بر کارهای انجام شده</b>	
۱-۱-۱- کمپلکس‌های انتقال بار.....	۱
۱-۱-۱- تاریخچه کمپلکس‌های انتقال بار.....	۲
۱-۱-۲- تئوری کمپلکس‌های انتقال بار.....	۳
۱-۱-۳- انواع کمپلکس‌های انتقال بار.....	۴
۱-۱-۴- مطالعه کمپلکس‌های انتقال بار.....	۴
۱-۱-۵- بررسی پایداری کمپلکس‌های انتقال بار و عوامل مؤثر بر آن.....	۵
۱-۱-۶- عوامل مؤثر بر پایداری کمپلکس‌های انتقال بار.....	۶
۱-۱-۶-۱- اثر دما.....	۶
۱-۱-۶-۲- اثر حلال.....	۶
۱-۱-۷- کاربردهای بیولوژیکی کمپلکس‌های انتقال بار.....	۸
۱-۲- ید و کمپلکس‌های انتقال بار آن.....	۹
۱-۳- تری کلرویدید ( $ICl_3$ ) و کمپلکس‌های انتقال بار آن.....	۱۴
۱-۴- پیکریک اسید (۲,۴,۶-تری نیترو فنول) و کمپلکس‌های انتقال بار آن.....	۱۶
<b>فصل دوم: بخش تجربی</b>	
۱-۲- مواد شیمیایی.....	۲۰
۱-۱-۲- لیگاندها.....	۲۰
۱-۲-۲- حلال‌ها.....	۲۱
۲-۲- وسایل و تجهیزات.....	۲۲
۲-۳- تهیه محلول‌ها.....	۲۳
۲-۴- روش کار.....	۲۳
۲-۵- روش محاسبه پارامترها.....	۲۳
۲-۵-۱- محاسبه ثابت سرعت تک مرحله‌ای.....	۲۳

۲-۵-۲- محاسبه ثابت سرعت دو مرحله‌ای..... ۲۴

۳-۵-۲- مدل ریاضی برای اندازه‌گیری ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار در نسبت استوکیومتری ۱:۱..... ۲۵

۴-۵-۲- مدل ریاضی برای اندازه‌گیری ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار در نسبت استوکیومتری ۲:۱..... ۲۶

۵-۵-۲- محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی..... ۲۷

۶-۵-۲- محاسبه انرژی آزاد گیبس..... ۲۷

فصل سوم: بحث و نتیجه گیری

۱-۳- بررسی ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار ید و لیگاند سنتزی (BDSAK) در حلال‌های غیرآبی..... ۲۹

۱-۱-۳- تعیین استوکیومتری کمپلکس  $BDSAK.I_2$ ..... ۳۲

۲-۱-۳- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار  $BDSAK.I_2$ ..... ۳۶

۳-۱-۳- محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی  $\Delta H^\circ$ ،  $\Delta S^\circ$  و  $\Delta G^\circ$  کمپلکس  $BDSAK.I_2$ ..... ۴۲

۲-۳- بررسی ترمودینامیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار تری‌کلرویدید با لیگاند BDSAK در حلال‌های غیر آبی..... ۴۴

۱-۲-۳- تعیین استوکیومتری کمپلکس  $BDSAK.ICl_3$ ..... ۴۷

۲-۲-۳- تعیین ثابت پایداری کمپلکس انتقال بار  $BDSAK.ICl_3$ ..... ۵۰

۳-۲-۳- محاسبه پارامترهای ترمودینامیکی کمپلکس  $BDSAK.ICl_3$ ..... ۵۶

۳-۳- بررسی سینتیکی تشکیل کمپلکس‌های انتقال بار تری‌کلرویدید و پیکریک اسید با لیگاند PATS در حلال‌های غیر آبی..... ۵۸

۱-۳-۳- بررسی سینتیک تشکیل کمپلکس انتقال بار  $ICl_3$  با PATS در حلال‌های غیر آبی..... ۵۹

۱-۱-۳-۳- تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار  $ICl_3$  با PATS در حلال‌های غیر آبی..... ۶۲

۲-۳-۳- بررسی سینتیکی تشکیل کمپلکس انتقال بار پیکریک اسید (PCA) با PATS در حلال‌های غیر آبی..... ۷۱

۱-۲-۳-۳- تعیین ثابت سرعت تشکیل کمپلکس انتقال بار (PCA) با PATS در حلال‌های غیر آبی..... ۷۳

۸۰- منابع..... ۸۰

<u>صفحه</u>	<u>عنوان</u>
	<b>فصل اول: مقدمه و مروری بر کارهای انجام شده</b>
۸	شکل (۱-۱) دیاگرام سطوح انرژی اوربیتال‌های n و $\pi$ و $\pi^*$ در حلال قطبی و غیر قطبی.....
	<b>فصل دوم: بخش تجربی</b>
۲۰	شکل (۱-۲) ساختار شیمیایی پیکریک اسید.....
۲۰	شکل (۲-۲) ساختار شیمیایی لیگاند BDSAK.....
۲۱	شکل (۳-۲) ساختار شیمیایی PATS.....
	<b>فصل سوم: بحث و نتیجه گیری</b>
۳۰	شکل (۱-۳). طیف‌های جذبی محلول $I_2$ با غلظت $5 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ . محلول BDSAK با غلظت $5 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ و مخلوط BDSAK و $I_2$ (نسبت ۱۰:۱) در حلال کلروفرم.....
۳۱	شکل (۲-۳). طیف‌های جذبی محلول BDSAK با غلظت $1 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$ ، محلول $I_2$ با غلظت $5 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$ و مخلوط BDSAK و $I_2$ با نسبت‌های مولی مختلف در حلال کلروفرم.....
۳۱	شکل (۳-۳). طیف‌های جذبی محلول BDSAK با غلظت $1 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$ ، محلول $I_2$ با غلظت $1 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$ و مخلوط BDSAK و $I_2$ با نسبت‌های مولی مختلف در حلال دی‌کلرومتان.....
۳۴	شکل (۴-۳). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی برای کمپلکس $BDSAK.I_2$ در دمای محیط در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان.....
۳۵	شکل (۵-۳). نمودار جذب بر حسب کسر مولی لیگاند در دمای محیط و در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان.....
۳۹	شکل (۶-۳). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی در حلال کلروفرم در دماهای مختلف.....
۳۹	شکل (۷-۳). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی در حلال دی‌کلرومتان در دماهای مختلف.....
۴۰	شکل (۸-۳). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار $BDSAK.I_2$ در حلال دی‌کلرومتان.....
۴۰	شکل (۹-۳). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار $BDSAK.I_2$ در حلال کلروفرم.....

- شکل (۳-۱۰). نمودار وانتیپ کمپلکس BDSAK.I<sub>2</sub> در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان ..... ۴۳
- شکل (۳-۱۱). طیف‌های جذبی محلول ICl<sub>3</sub> در حضور لیگاند در مدت زمان ۳۰ دقیقه  
در حلال کلروفرم..... ۴۵
- شکل (۳-۱۲). طیف‌های جذبی محلول ICl<sub>3</sub> در حضور لیگاند در مدت زمان ۳۰ دقیقه در  
حلال ۱ و ۲- دی‌کلرواتان..... ۴۵
- شکل (۳-۱۳). طیف‌های جذبی محلول BDSAK با غلظت  $1 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$  محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  
 $1 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$  مخلوط BDSAK و ICl<sub>3</sub> با نسبت‌های مولی مختلف در حلال کلروفرم..... ۴۶
- شکل (۳-۱۴). طیف‌های جذبی محلول BDSAK با غلظت  $1 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$  محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  
 $1 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$  مخلوط BDSAK و ICl<sub>3</sub> با نسبت‌های مولی مختلف در حلال دی‌کلرومتان..... ۴۶
- شکل (۳-۱۵). طیف‌های جذبی محلول BDSAK با غلظت  $1 \times 10^{-2} \text{ mol L}^{-1}$  محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  
 $1 \times 10^{-3} \text{ mol L}^{-1}$  مخلوط BDSAK و ICl<sub>3</sub> با نسبت‌های مولی مختلف در حلال ۱ و ۲- دی‌کلرواتان..... ۴۷
- شکل (۳-۱۶). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی در دمای محیط و در حلال‌های کلروفرم،  
دی‌کلرومتان و ۱ و ۲- دی‌کلرواتان..... ۴۹
- شکل (۳-۱۷). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی در حلال کلروفرم در دماهای مختلف، ..... ۵۴
- شکل (۳-۱۸). منحنی جذب بر حسب نسبت مولی در حلال دی‌کلرومتان در دماهای مختلف ..... ۵۴
- شکل (۳-۱۹). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار BDSAK.2ICl<sub>3</sub>  
در حلال کلروفرم ..... ۵۵
- شکل (۳-۲۰). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار BDSAK.2ICl<sub>3</sub>  
در حلال دی‌کلرومتان..... ۵۵
- شکل (۳-۲۱). نمودار وانتیپ کمپلکس BDSAK.ICl<sub>3</sub> در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان ..... ۵۷
- شکل (۳-۲۲). طیف‌های جذبی محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  محلول PATS  
با غلظت  $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  و مخلوط PATS و ICl<sub>3</sub> با زمان در دمای محیط در حلال کلروفرم ..... ۶۰
- شکل (۳-۲۳). طیف‌های جذبی محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  محلول PATS با غلظت  
 $2/5 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$  و مخلوط ICl<sub>3</sub> و PATS با زمان در دمای محیط در حلال دی‌کلرومتان..... ۶۱
- شکل (۳-۲۴). طیف‌های جذبی محلول ICl<sub>3</sub> با غلظت  $10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  محلول PATS با غلظت  
 $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  و مخلوط ICl<sub>3</sub> و PATS با زمان در حلال دی‌متیل‌فرمامید در دمای محیط ..... ۶۱

## فهرست شکل‌ها

- شکل (۳-۲۵). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در حلال کلروفرم و در دمای محیط ..... ۶۶
- شکل (۳-۲۶). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در حلال کلروفرم و در دمای محیط ..... ۶۶
- شکل (۳-۲۷). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در حلال دی‌کلرومتان و در دمای محیط ..... ۶۷
- شکل (۳-۲۸). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در حلال دی‌متیل‌فرمامید و در دمای محیط ..... ۶۷
- شکل (۳-۲۹). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در دمای محیط و در حلال کلروفرم ..... ۶۸
- شکل (۳-۳۰). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در دمای محیط و در حلال کلروفرم ..... ۶۸
- شکل (۳-۳۱). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در دمای محیط و در حلال دی‌کلرومتان ..... ۶۹
- شکل (۳-۳۲). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در دمای محیط و در حلال دی‌متیل‌فرمامید ..... ۶۹
- شکل (۳-۳۳). طیف‌های جذبی محلول PCA با غلظت  $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ ، محلول PATS با غلظت  $2/5 \times 10^{-4} \text{ mol L}^{-1}$  و مخلوط PATS و PCA با زمان در حلال کلروفرم در دمای محیط ..... ۷۲
- شکل (۳-۳۴). طیف‌های جذبی محلول PCA با غلظت  $10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$ ، محلول PATS با غلظت  $5 \times 10^{-5} \text{ mol L}^{-1}$  و مخلوط PATS و PCA با زمان در حلال دی‌متیل‌فرمامید در دمای محیط ..... ۷۲
- شکل (۳-۳۵). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار PCA.PATS در حلال کلروفرم و در دمای محیط ..... ۷۶
- شکل (۳-۳۶). منحنی جذب- زمان کمپلکس انتقال بار PCA.PATS در حلال دی‌متیل‌فرمامید و در دمای محیط ..... ۷۶
- شکل (۳-۳۷). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار PCA.PATS در دمای محیط و در حلال کلروفرم ..... ۷۷
- شکل (۳-۳۸). نمونه‌ای از فیت کامپیوتری توسط برنامه QBASIC برای کمپلکس انتقال بار PCA.PATS در دمای محیط و در حلال دی‌متیل‌فرمامید ..... ۷۷



## فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول (۱-۲) خواص فیزیکی حلال‌های مورد استفاده	۲۲
جدول (۱-۳). داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی در دمای محیط و در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان،.....	۳۳
جدول (۲-۳). داده‌های جذب بر حسب کسر مولی مربوط به روش تغییرات پیوسته در دمای محیط در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان.....	۳۵
جدول (۳-۳). داده‌های جذب- نسبت مولی برای کمپلکس BDSAK.I <sub>2</sub> حلال کلروفرم و در دماهای مختلف .....	۳۷
جدول (۴-۳) داده‌های جذب- نسبت مولی برای کمپلکس BDSAK.I <sub>2</sub> در حلال دی‌کلرومتان و در دماهای مختلف.....	۳۸
جدول (۵-۳). مقادیر ثابت پایداری کمپلکس BDSAK.I <sub>2</sub> در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان و در دماهای مختلف.....	۴۱
جدول (۶-۳). مقادیر ثابت‌های ترمودینامیکی کمپلکس انتقال بار BDSAK.I <sub>2</sub> در حلال‌های مختلف.....	۴۳
جدول (۷-۳). داده‌های جذب بر حسب نسبت مولی در دمای محیط و در حلال‌های مختلف.....	۴۸
جدول (۸-۳). داده‌های جذب- نسبت مولی برای کمپلکس BDSAK. ICl <sub>3</sub> در حلال کلروفرم و در دماهای مختلف.....	۵۲
جدول (۹-۳). داده‌های جذب- نسبت مولی برای کمپلکس BDSAK. ICl <sub>3</sub> در حلال دی‌کلرومتان و در دماهای مختلف.....	۵۳
جدول (۱۰-۳). مقادیر ثابت پایداری کمپلکس BDSAK.ICl <sub>3</sub> در حلال‌های کلروفرم و دی‌کلرومتان و در دماهای مختلف.....	۵۶
جدول (۱۱-۳). مقادیر ثابت‌های ترمودینامیکی کمپلکس انتقال بار BDSAK.ICl <sub>3</sub> در حلال‌های مختلف.....	۵۸
جدول (۱۲-۳). مقادیر ثابت‌های ترمودینامیکی کمپلکس انتقال بار BDSAK.2ICl <sub>3</sub> در حلال‌های مختلف.....	۵۸
جدول (۱۳-۳). داده‌های جذب- زمان کمپلکس ICl <sub>3</sub> .PATS در حلال کلروفرم و در دمای محیط.....	۶۳
جدول (۱۴-۳). داده‌های جذب- زمان کمپلکس ICl <sub>3</sub> .PATS در حلال دی‌کلرومتان و در دمای محیط.....	۶۴

## فهرست جدول‌ها

- جدول (۳-۱۵). داده‌های جذب- زمان کمپلکس  $ICl_3.PATS$  در حلال دی‌متیل‌فرمامید و در دمای محیط..... ۶۵
- جدول (۳-۱۶). مقادیر ثابت سرعت کمپلکس‌های انتقال بار  $ICl_3.PATS$  در حلال‌های مختلف ..... ۷۰
- جدول (۳-۱۷). داده‌های جذب- زمان کمپلکس  $PCA.PATS$  در حلال کلروفرم و در دمای محیط ..... ۷۴
- جدول (۳-۱۸). داده‌های جذب- زمان کمپلکس  $PCA.PATS$  در دی‌متیل‌فرمامید و در دمای محیط ..... ۷۵
- جدول (۳-۱۹). مقادیر ثابت سرعت کمپلکس‌های انتقال بار  $PCA.PATS$  در حلال‌های مختلف ..... ۷۸

در اوایل دهه ۱۹۵۰ مشاهدات جدید، پدیده ای نو را معرفی می کرد که برهم کنش های بین مولکولی در آن نقش اساسی داشت. این پدیده بعدها تحت عنوان کمپلکس های انتقال بار شناخته شد. طولی نکشید که پدیده کمپلکس های انتقال بار، اهمیتی فراگیر یافت از یک طرف دستاوردهای تئوری آن عرصه شیمی نظری را توسعه می داد و از طرف دیگر پدیده های تجربی بسیاری با کمک آن توجیه می شد. از جمله می توان به نقش اساسی کمپلکس های انتقال بار در چرخه های فوتوسنتزی اشاره کرد. همچنین این کمپلکس ها نقش قابل توجهی را در برهم کنش های دارویی ایفا می کنند. به عبارتی بسیاری از داروها و سموم صرفاً بر اساس این نوع ویژه برهم کنش طراحی می شوند. در بسیاری از واکنش های شیمیایی چنین کمپلکس هایی به عنوان حدواسط به کار می روند که از مهمترین این واکنش ها می توان به واکنش معروف دیلرز-آلدر اشاره کرد. تشکیل کمپلکس انتقال بار از مطالعه خصوصیات فیزیکی نظیر نقطه ذوب، ویسکوزیته، ثابت دی الکتریک، ضریب شکست، جذب ناحیه مرئی و فرابنفش، اندازه گیری ممان دوقطبی، شیفت رامان و IR مشخص می شود.

یکی از مباحث مهم در شیمی تجزیه به دست آوردن ثابت پایداری کمپلکس های انتقال بار می باشد. از روش های متداول برای این منظور می توان به پلاریمتری، هدایت سنجی، اسپکتروفتومتری مرئی و فرابنفش، NMR، ESR و رامان اشاره کرد که روش اسپکتروفتومتری مرئی و فرابنفش یکی از روش های معمول برای مطالعه تشکیل کمپلکس ها به خصوص کمپلکس های انتقال بار می باشد.

در این پایان نامه بررسی اسپکتروفتومتری تشکیل کمپلکس انتقال بار  $I_2$ ،  $ICl_3$  و پیکریک اسید با چند لیگاند سنتزی در حلال های غیر آبی صورت گرفته است.

## Abbreviations

B15C5	Benzo-15-crown-5
DB18C6	Dibenzo-18-crown-6
DB30C10	Dibenzo-30-crown-10
DB24C8	Dibenzo-24-crown-8
DDQ	2,3-Dichloro- 5,6-dicyanobenzoquinon
DEA	2,6-Diethylaniline (DEA)
NEA	N-Ethylaniline (NEA)
TCNE	Tetracyanoethene
TCNQ	7,7,8,8-Tetracyanoquinodimethane
TCNE	Tetracyanoethene