

دانشگاه تهران

دانشکده شیمی

سنتز تک ظرفی ۲-آمینوتیوفن‌ها از طریق
واکنش گوالد

نگارش:

پیمان محمودی

اساتید راهنما

دکتر مهدی ادیب

دکتر محمد مجید مجتهدی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد

در

رشته شیمی آلی

مهر ۸۷



دانشگاه تهران

دانشکده شیمی

سنتز تک ظرفی ۲-آمینوتیوفن‌ها از طریق
واکنش گوالد

نگارش:

پیمان محمودی

اساتید راهنما

دکتر مهدی ادیب

دکتر محمد مجید مجتهدی

پایان‌نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد
در رشته شیمی آلی

مهر ۸۷

University of Tehran

University College of Science
School of Chemistry

**One-pot synthesis of 2-aminothiophenes by
Gewald reaction**

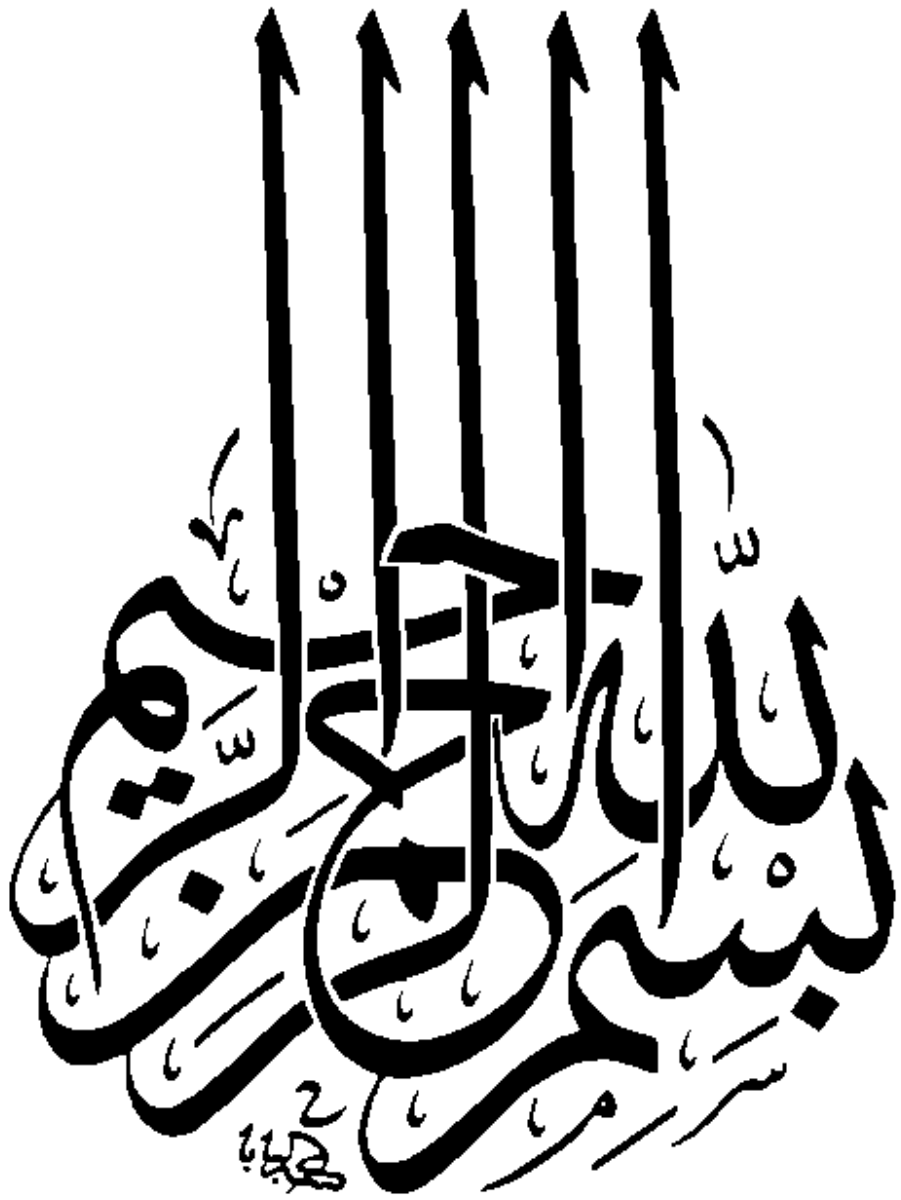
By:
Peyaman Mahmuodi

Under Supervision of:
Dr. Mehdi Adib
Dr. Mohammad Majid Mojtahedi

A thesis submitted to the Graduate Studies Office
In partial fulfillment of the requirements
For MSc. Degree

In Organic Chemistry

October 2008



.....: تقدیم به پدر و مادر عزیزم ::::...

آنان که وجودم برایشان همه رنج بود و وجودشان برایم همه مهر.
توانشان رفت تا به توانایی برسم و مویشان سپید گشت تا رویم سپید بماند.
آنان که فروغ نگاهشان، گرمی کلامشان و روشنی رویشان سرمایه های
جاودانی زندگی من است.

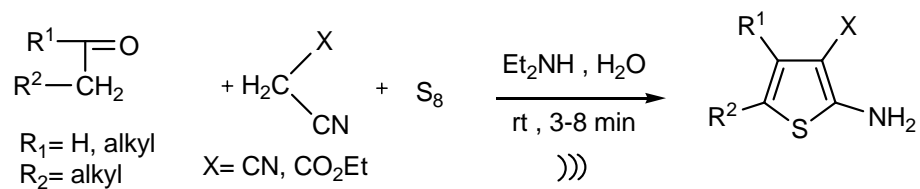
آنان که راستی قامت در شکستی قامتشان تجلی یافت.
در برابر وجود گرامیشان زانوی ادب بر زمین می زنم و با دلی مملو از

عشق، محبت و خضوع

بر دستشان بوسه می زنم.

چکیده:

با توجه به اهمیت ۲-آمینو تیوفن‌ها در داروسازی، تولید رنگدانه‌ها و غیره با ارئه روشی کارا و ساده با استفاده از ترکیبات کربونیل‌دار و نیتریل‌های فعال شده و گوگرد عنصری در مجاورت دی‌اتیل آمین به عنوان باز در حلال محیط دوست آب در مدت زمان سه تا هشت دقیقه در دمای محیط با تابش امواج فرا صوت ۲-آمینو تیوفن‌ها با بازده قابل قبولی بدست می‌آیند.



زکات علم ترویج آن است

امام علی (ع)

شکر سپاس خدای متعال را که توفیق ارزانی داشت تا بتوانم در زمینه ای که علاقه مند بودم به مطالعه بپردازم.

در این مسیر از کمک و همراهی انسان های فرزانه ای برخوردار بوده ام که فرصت بدست آمده را مغتنم شمرده و مراتب قدردانی و تشکر خود را نسبت به ایشان ابراز می نمایم. در آغاز از زحمات اساتید ارجمند جناب آقای دکتر مهدی ادیب و جناب آقای دکتر محمد مجید مجتهدی که با راهنمایی های ارزنده خود مرا در طول انجام تمام مراحل این پایان نامه یاری نمودند تشکر و قدر دانی می نمایم.

از آقای دکتر ابراهیم کیانمهر و خانم دکتر جعفر پور که زحمت داوری این پایان نامه را کشیدند کمال تشکر را دارم.

در پایان بر خود لازم می دانم از زحمات بی دریغ تمامی دوستانم از جمله آقای محمد اقتداری که در طول دوره در آزمایشگاه به من یاری رساندند و همچنین خانم افسانه محمدی که در مراحل نوشتن پایان نامه با لطف خویش به من کمک کردند کمال تشکر را داشته باشم.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: بخش تئوری
۱	۱-۱ فراصوت
۲	۲-۱ شیمی صوتی
۳	۱-۲-۱ پدیده کویتیشن
۴	۳-۱ دستگاه‌های فراصوت
۴	۱-۳-۱ انواع مبدل
۶	۲-۳-۱ حمام فراصوت
۷	۳-۳-۱ سیستم پروب
۷	۴-۱ واکنش‌های صدا شیمی
۱۰	۵-۱ ترکیبات حلقوی
۱۰	۱-۵-۱ ترکیبات هموسیکلی
۱۰	۲-۵-۱ ترکیبات هتروسیکلی
۱۱	۶-۱ تیوفن
۱۲	۱-۶-۱ سنتز پال کنور
۱۳	۲-۶-۱ واکنش تیو دی استات‌ها و ۲،۱-دی کربونیل‌ها
۱۳	۳-۶-۱ واکنش تیو گلاکولات و ۳،۱-دی کربونیل‌ها
۱۴	۴-۶-۱ واکنش آلفا تیو کربونیل‌ها
۱۴	۵-۶-۱ واکنش کربن دی سولفید
۱۵	۷-۱ واکنش گوآلد
۱۸	۸-۱ واکنش‌های چند جزئی
۱۸	۱-۸-۱ واکنش‌های چند جزئی با ترکیبات کربونیل‌دار

۱۹	۹-۱ فرآیند حلقوی شدن
۲۰	۱۰-۱ توسعه و بهبود واکنش گوالد
۲۰	۱-۱۰-۱ تهیه ۵-آلکوکسی-۲-آمینوتیوفن ها
۲۱	۲-۱۰-۱ تهیه ۴،۲-دی آمینوتیوفن ها
۲۱	۳-۱۰-۱ آلکیل-۲-آمینوتیوفن ها
۲۲	۴-۱۰-۱ تیوفن های ۴-استخلافی
۲۲	۵-۱۰-۱ آریل-۲-آمینوتیوفن ها
۲۲	۶-۱۰-۱ گلایکو پیرانوزیل C-نوکلئوزیدها
۲۳	۷-۱۰-۱ استفاده از کاتالیزورهای ناهمگن در واکنش گوالد
۲۳	۸-۱۰-۱ استفاده از امواج ریز موج در واکنش گوالد
۲۵	۹-۱۰-۱ استفاده از مایعات یونی در واکنش گوالد
۲۵	۱۱-۱ واکنش استخلاف آمینو در ۲-آمینوتیوفن ها
۲۶	۱۲-۱ کربوکسیل زدائی ۲-آمینوتیوفن ها
۲۶	۱۳-۱ واکنش باز شدن حلقه ۲-آمینوتیوفن ها
۲۸	۱۴-۱ واکنش های حلقه ۲-آمینوتیوفن ها
۲۸	۱۵-۲ آمینو تیوفن های متراکم شده
۳۰	۱۶-۱ اهمیت و کاربرد ۲-آمینوتیوفن ها
۳۴	فصل دوم: بحث و نتیجه گیری
۳۵	۱-۲ بحث و نتایج
۳۶	۲-۲ بهینه سازی شرایط واکنش
۳۸	۳-۲ نتیجه گیری
۳۹	فصل سوم: بخش تجربی
۴۰	۱-۳ مواد و دستگاه های مورد استفاده
۴۱	۲-۳ سنتز ۲-آمینو تیوفن ها
۴۱	۱-۲-۳ تهیه ۴،۵،۶،۷-تتراهیدروبنزو[<i>b</i>]تیوفن-۳-کربونیتریل
۴۲	۲-۲-۳ تهیه ۴،۵،۶،۷،۸-تتراهیدرو- <i>H</i> -سیکلوهپتا[<i>b</i>]تیوفن-۳-کربونیتریل

- ۴۳ ۳-۲-۲ آمینو-۴،۵،۶،۷،۸،۹-هگزا هیدرو اکتا [b] تیوفن -۳- کربونیتریل
- ۴۴ ۳-۲-۴ اتیل ۲-آمینو-۵،۶-دی هیدرو-۴H-سیکلوپنتا [b] تیوفن -۳- کربو کسيلات
- ۴۵ ۳-۲-۵ تهيه اتيل ۲-آمینو-۴،۵،۶-تترا هیدرو بنزو [b] تیوفن -۳- کربو کسيلات
- ۴۶ ۳-۲-۶ تهيه اتيل ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷،۸-۴H-تترا هیدرو سیکلو هپتا [b] تیوفن -۳- کربو کسيلات
- ۴۷ ۳-۲-۷ تهيه اتيل ۲-آمینو-۶-متیل-۴،۵،۶،۷-تترا هیدرو تینو [C-۳،۲] پیریدین -۳- کربو کسيلات
- ۴۸ ۳-۲-۸ تهيه اتيل ۲-آمینو-۵-اتیل تیوفن -۳- کربو کسيلات
- ۴۹ ۳-۲-۹ تهيه اتيل ۲-آمینو-۵-ایزو پروپیل تیوفن -۳- کربو کسيلات

فهرست جداول

- جدول ۱-۱ کاربرد صنعتی امواج صوتی ۱
- جدول ۱-۲ O-آلکیلاسیون ۲و۶-دی متیل فنول ۹
- جدول ۱-۳ O-آلکیلاسیون ۵-هیدروکسی کرومن ها ۹

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱ محدوده فرکانس امواج فرا صوت ۲
- شکل ۲-۱ رها شدن و فشرده شدن فنر ۳
- شکل ۳-۱ پدیده کویتیشن ۳
- شکل ۴-۱ مناطق دمایی حباب حاصل از پدیده کویتیشن ۴
- شکل ۵-۱ ترانسدیوسر پیزوالکتریک ساندویچی ۵
- شکل ۶-۱ تغییر شکل دهنده مغناطیسی ۶
- شکل ۷-۱ حمام فراصوت ۷
- شکل ۸-۱ سیستم پروب ۷
- شکل ۹-۱ ضد قارچ ۱۱
- شکل ۱۰-۱ انواع ترکیبات طبیعی تیوفن دار ۱۲
- شکل ۱۱-۱ شکل فرضی واکنش های چند جزئی ۱۸
- شکل ۱۲-۱ فرم کلی مشتقات آزو تشکیل شده از ۲-آمینو تیوفن ها ۲۵
- شکل ۱۳-۱ ترکیب حاصل از سولفور زدایی ۲-آمینو تیوفن ها ۲۷
- شکل ۱۴-۱ بازدارنده های رقابتی پروتئین تیروزین فسفاتاز ۳۰
- شکل ۱۵-۱ بازدارنده های الاستازهای گلبول های سفید خون بر پایه ۲-آمینو تیوفن ها ۳۰
- شکل ۱۶-۱ ۲-آمینو ۳-بنزویل تیوفن ها، بازدارنده در دریافت کننده A_1 آدونوزین ۳۱
- ۵۰
- طیف های ترکیبات**
- طیف های رزونانس مغناطیسی هسته پروتون ترکیبات**
- شکل ۱ طیف ۲-آمینو-۷،۶،۵،۴-تتراهیدروبنزو[b]تیوفن-۳-کربونیتریل ۶۰ ۵۱
- شکل ۲ طیف ۲-آمینو-۸،۷،۶،۵-تتراهیدرو- $H-4$ -سیکلوهپتا[b]تیوفن-۳-کربونیتریل ۶۱ ۵۲
- شکل ۳ طیف ۲-آمینو-۹،۸،۷،۶،۵،۴-هگزا هیدرواکتا[b]تیوفن-۳-کربونیتریل ۶۲ ۵۳
- شکل ۴ طیف اتیل ۲-آمینو-۶،۵-دی هیدرو- $H-4$ -سیکلوپنتا[b]تیوفن-۳-کربوکسیلات ۶۳ ۵۴
- شکل ۵ طیف اتیل ۲-آمینو-۶،۵،۴-تتراهیدروبنزو[b]تیوفن-۳-کربوکسیلات ۶۴ ۵۵

- شکل ۶ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸- $H-4$ -تتراهیدرو سیکلو هپتا[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۵ ۵۶
- شکل ۷ طیف اتیل ۲-آمینو-۶-متیل-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو تینو[$c-2,3$] پیریدین -۳- کربو کسيلات ۶۶ ۵۷
- شکل ۸ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-اتیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۷ ۵۸
- شکل ۹ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-ایزوپروپیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۸ ۵۹

طیف‌های رزونانس مغناطیسی هسته کربن ۱۳

- شکل ۱۰ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو بنزو[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۰ ۶۰
- شکل ۱۱ طیف ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸-تترا هیدرو- $H-4$ -سیکلو هپتا[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۱ ۶۱
- شکل ۱۲ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷،۸،۹-هگزاهیدرو اکتا[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۲ ۶۲
- شکل ۱۳ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶-دی هیدرو- $H-4$ -سیکلو پنتا[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۳ ۶۳
- شکل ۱۴ طیف اتیل ۲-آمینو-۴،۵،۶-تتراهیدرو بنزو[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۴ ۶۴
- شکل ۱۵ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸- $H-4$ -تتراهیدرو سیکلو هپتا[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۵ ۶۵
- شکل ۱۶ طیف اتیل ۲-آمینو-۶-متیل-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو تینو[$c-2,3$] پیریدین -۳- کربو کسيلات ۶۶ ۶۶
- شکل ۱۷ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-اتیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۷ ۶۷
- شکل ۱۸ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-ایزوپروپیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۸ ۶۸

طیف‌های زیر قرمز ترکیبات

- شکل ۱۹ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو بنزو[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۰ ۶۹
- شکل ۲۰ طیف ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸-تترا هیدرو- $H-4$ -سیکلو هپتا[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۱ ۷۰
- شکل ۲۱ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷،۸،۹-هگزاهیدرو اکتا[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۲ ۷۱
- شکل ۲۲ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶-دی هیدرو- $H-4$ -سیکلو پنتا[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۳ ۷۲
- شکل ۲۳ طیف اتیل ۲-آمینو-۴،۵،۶-تتراهیدرو بنزو[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۴ ۷۳
- شکل ۲۴ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸- $H-4$ -تتراهیدرو سیکلو هپتا[b] تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۵ ۷۴
- شکل ۲۵ طیف اتیل ۲-آمینو-۶-متیل-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو تینو[$c-2,3$] پیریدین -۳- کربو کسيلات ۶۶ ۷۵
- شکل ۲۶ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-اتیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۷ ۷۶
- شکل ۲۷ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-ایزوپروپیل تیوفن -۳- کربو کسيلات ۶۸ ۷۷

طیف‌های جرمی ترکیبات

- شکل ۲۸ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷-تتراهیدرو بنزو[b] تیوفن -۳- کربو نیتریل ۶۰ ۷۸

- شکل ۲۹ طیف ۲-آمینو-۵،۶،۷،۸-تترا هیدرو-۴H-سیکلو هپتا [b] تیوفن-۳-کربونیتریل ۶۱ ۷۹
- شکل ۳۰ طیف ۲-آمینو-۴،۵،۶،۷،۸،۹-هگزا هیدرو اکتا [b] تیوفن-۳-کربونیتریل ۶۲ ۸۰
- شکل ۳۱ طیف اتیل ۲-آمینو-۵،۶-دی هیدرو-۴H-سیکلو پنتا [b] تیوفن-۳-کربو کسیلات ۶۳ ۸۱
- شکل ۳۲ طیف اتیل ۲-آمینو-۴،۵،۶-تترا هیدرو بنزو [b] تیوفن-۳-کربو کسیلات ۶۴ ۸۲
- شکل ۳۳ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-اتیل تیوفن-۳-کربو کسیلات ۶۷ ۸۳
- شکل ۳۴ طیف اتیل ۲-آمینو-۵-ایزوپروپیل تیوفن-۳-کربو کسیلات ۶۸ ۸۴
- ۸۵ مراجع

۱-۱- فراصوت^۱:

اگر از شما پرسیده شود که در مورد فراصوت چه اطلاعاتی دارید، حتماً با این واقعیت شروع می‌کنید که آن در ارتباط بین حیوانات دیده می‌شود. (مثل هدایت کردن خفاش در تشخیص طعمه، در دلفین‌ها و وال‌ها، در ماهی‌ها که نوعی ماهی اروپایی می‌تواند صداهای بالای ۱۸۰ کیلو هرتز را شناسایی کند، موشها و) و همچنین ممکن است به خاطر بیاورید که از آن در پزشکی برای تشخیص روند رشد جنین و در دندانپزشکی استفاده می‌شود و اینکه از آن به عنوان وسیله جستجو در زیر دریایی‌ها برای تشخیص کشتی‌های روی آب و بالعکس در جنگ جهانی دوم استفاده می‌شد [۱]. اما در مورد کاربرد فراصوت در علم شیمی چه اطلاعاتی وجود دارد؟

تابش فراصوت در زمینه‌های مختلفی از شیمی آلی و آلی فلزی [۲]، دانش مواد، شیمی مواد غذایی و دارویی مورد استفاده قرار گرفته است. مهمترین کاربردهای صنعتی استفاده از امواج فراصوت به طور خلاصه در جدول ۱-۱ به طور خلاصه ذکر شده است [۳]. یکی از مزیت‌های مهم استفاده از تابش فراصوت در شیمی ارزان بودن و محیط دوست بودن این روش در این رشته از علوم است که برای چند دهه با موفقیت‌های نسبی مورد استفاده قرار گرفته است. شاید این گونه تصور شود که برهم‌کنش امواج صوتی با یک سیستم شیمیایی فقط روشی سودمند برای مخلوط کردن مواد و پاک‌سازی سطوح آنها می‌باشد ولی علاوه بر این شامل پدیده‌های فیزیکی - شیمیایی پیچیده‌ای است که همین امر باعث تحقیقات پیشرفته‌ای در این موضوع شده است.

جدول ۱-۱ کاربرد صنعتی امواج صوت

کاربرد	زمینه
جرم‌گیری سطح دندان و تراشیدن پوسیدگی‌های داخل آن	دندانپزشکی
۱) سونوگرافی (۲ تا ۱۰ مگاهرتز) ۲) فیزیوتراپی (۲۰ تا ۵۰ کیلوهرتز) ۳) از بین بردن لخته‌های خونی	پزشکی
همگن‌سازی و تخریب دیواره سلول به منظور مطالعه اجزای داخل سلولی	زیست‌شناسی، بیوشیمی
۱) تخمین عمق و مکان‌یابی کانی‌ها و مخازن نفتی	جغرافیا، زمین‌شناسی

ادامه جدول ۱-۱

فرآیندهای صنعتی
(۲) سیستم‌های رادار و مسافت‌یاب
(۱) سوراخ‌کردن، سایش و قطع کردن مواد فلزی و سرامیکی
(۲) پخش کردن رنگدانه‌ها و جامدات در رزین‌ها و پلیمرها
(۳) پاک‌سازی سطح مواد

شیمی صوتی^۱ با هدف به کاربردن حداقل مواد و حلال‌های خطرناک شیمیایی، کاهش مصرف انرژی و زمان و همچنین گزینش‌پذیری محصولات به یکی از شاخه‌های قابل تأمل در شیمی تبدیل شده است [۴].

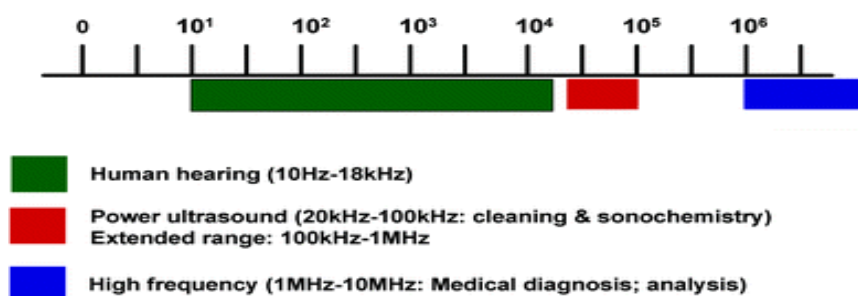
۱-۲- شیمی صوتی

شیمی صوتی موضوعی جدید در علم شیمی نیست، بلکه آن در نیمه اول قرن بیستم بطور جدی مورد بررسی قرار گرفته است. در کل شیمی صوتی کاربرد فراصوت در واکنش‌ها و فرآیندهای شیمیایی است. اثراتی که شیمی صوتی در واکنش‌های شیمیایی می‌گذارد عبارتند از: ۱- افزایش سرعت واکنش، ۲- افزایش در بازده واکنش، ۳- کاربرد موثر انرژی، ۴- افزایش فعالیت واکنشگرها و کاتالیزورها، ۵- فعال-سازی فلزات و جامدات و [۵].

همان‌طور که گفته شد شیمی صوتی شاخه‌ای از تحقیقات شیمی است که با آثار شیمیایی و کاربردهای امواج صوتی سر و کار دارد و آن شامل اصواتی با فرکانس‌های بالای ۲۰ کیلوهرتز می‌شود که بالاتر از حد شنوایی انسان است (شکل ۱-۱). اگرچه گستره امواج فراصوت می‌تواند بالای ۱۰۰ کیلوهرتز نیز کشیده شود اما به طور مرسوم به دو ناحیه مجزا تقسیم‌بندی می‌شود.

فراصوت قوی قرار دادی - تا ۱۰۰ کیلوهرتز که به طور ویژه در فعالیت شیمیایی مایعات اثر دارد.

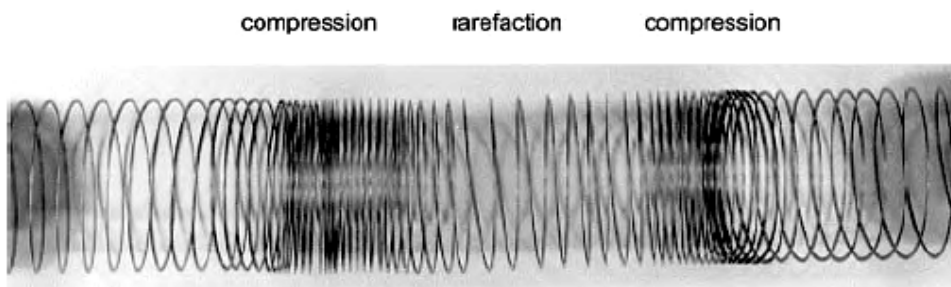
فراصوت تشخیصی - بالای ۲ مگاهرتز تا ۱۰ مگاهرتز که در پزشکی و فرآوری مواد کاربرد دارد.



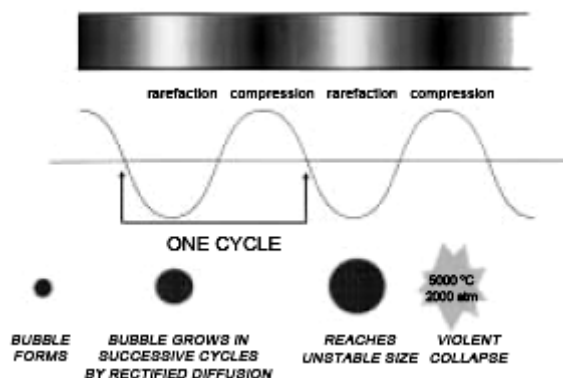
شکل ۱-۱ - محدوده فرکانس امواج فراصوت (هرتز)

۱-۲-۱- پدیده کویتیشن^۱:

اما چگونه تابش فراصوت ۱۰۰-۲۰ کیلو هرتز باعث انجام واکنش شیمیایی می‌شود؟ با توجه به محدوده مشخص شده در بالا انرژی فراصوت در حدی نیست که بتواند باعث انجام واکنش‌های شیمیایی شود. به عبارتی نمی‌تواند سبب تغییرات الکترونی و ارتعاشی و چرخشی ترازهای مولکولی شود. ولی در اثر پدیده‌ای به نام کویتیشن می‌تواند سبب تولید آثار شیمیایی در واکنش‌های مختلف شود [۶]. فشار صوتی موج شامل فشرده شدن و رها شدن متناوب در محیط انتقال‌دهنده در راستای انتشار موج است (مثل فشرده شدن و رها شدن یک فنر) (شکل ۱-۲). وقتی فشار منفی زیادی به مایع اعمال می‌شود، نیروهای واندر-والس بین مولکولی به اندازه کافی قوی نیستند که چسبندگی بین مولکول‌ها را حفظ کنند و در نتیجه شکاف‌های کوچک یا حباب‌های ریز پدید می‌آید. مدبرکی که بتواند تشکیل حباب‌ها را توجیح کند وجود ندارد ولی برخی تئوری‌ها وجود برخی ذرات نامرئی را که باعث کاهش نیروهای بین مولکولی می‌شوند دلیل تشکیل این حباب‌ها می‌دانند. هسته‌زایی، رشد و فروپاشی این حباب‌ها در مقیاس میکرو پدیده کویتیشن نامیده می‌شود (شکل ۱-۳). دومین مرحله در این پدیده رشد حباب‌ها است که در اثر انتشار بخار جسم حل شده، حجمی از حباب‌ها تشکیل می‌شود و مرحله فروپاشی حباب‌ها زمانی است که اندازه حباب‌ها به بیشترین مقدار خود می‌رسد [۷].



شکل ۱-۲- رها شدن و فشرده شدن فنر

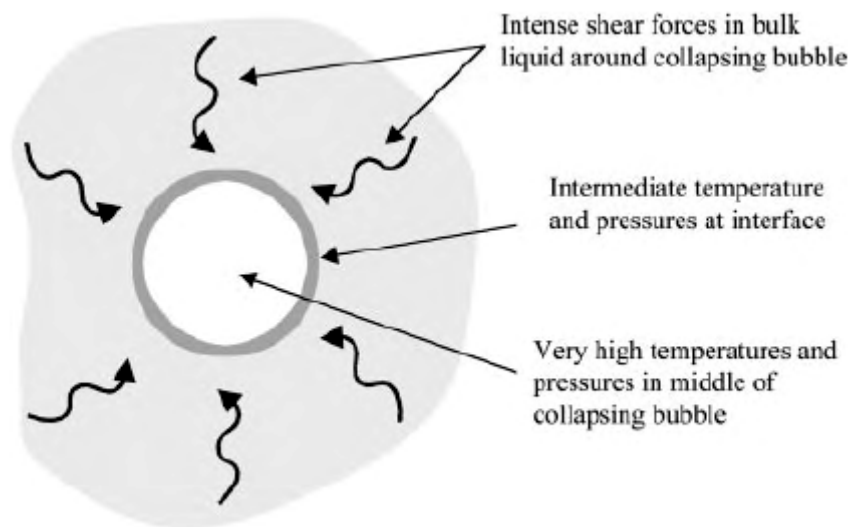


شکل ۱-۳- پدیده کویتیشن

برای توضیح پدیده کویتیشن دو تئوری مهم وجود دارد که براساس اهمیت عبارتند از:

(۱) تئوری نقطه داغ^۱:

براساس این تئوری دمایی، دما و فشار موضعی فوق‌العاده‌ای در داخل حباب‌های حاصل از پدیده کویتیشن و روی سطح تماس آنها با محیط در مرحله فروپاشی بوجود می‌آید [۸]. دمای موضعی در حدود ۴۵۰۰-۵۰۰۰ کلوین تخمین زده شده است [۹-۱۰]. فشار این منطقه با رجوع به معادله وان در والس حدود ۱۷۰۰ اتمسفر و سرعت سرد شدن برای نقطه داغ متجاوز از 10^{10} کلوین بر ثانیه تخمین زده شده است [۱۰-۱۱] (شکل ۱-۴).



شکل ۱-۴- مناطق دمایی حباب حاصل از پدیده کویتیشن

(۲) تئوری تخلیه الکتریکی:

این تئوری بر اساس یک مدل دو لایه الکتریکی پیشنهاد شده است [۱۲-۱۳-۱۴] و نظر بر این است که دما و فشار موضعی کمتری بوجود می‌آید و فروپاشی حباب‌ها با تخلیه الکتریکی همراه است [۱۵]. ولی در کل این تئوری به دلیل عدم آشکارسازی صحیح الکترون‌های هیدراته مورد انتقادات بسیاری قرار گرفته است.

۳-۱- دستگاه فرا صوت:

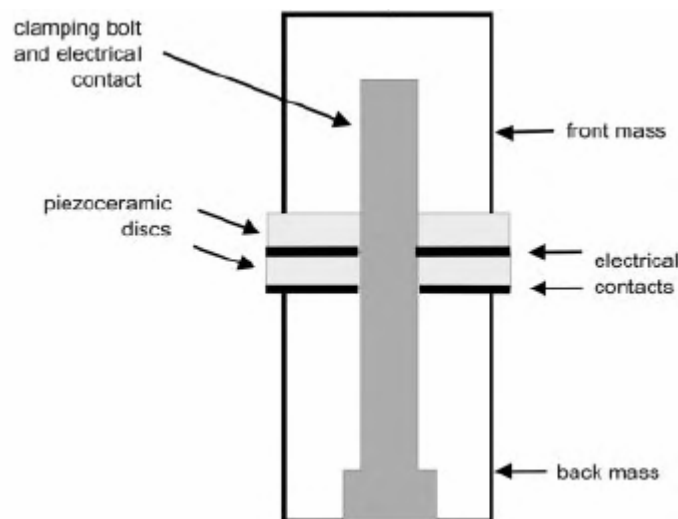
قبل از بررسی دستگاه‌های فراصوت لازم است به مهمترین قسمت دستگاه فراصوت که در تمام آنها وجود دارد اشاره کنیم.

1. hot spot

۱-۳-۱- انواع مبدل

ترانسدیوسر^۱، دستگاهی است که انرژی مکانیکی یا الکتریکی را به انرژی صوتی تبدیل می‌کند. سه نوع عمده ترانسدیوسر به ترتیب اهمیت عبارتند از:

(۱) **پیزوالکتریک**^۲: امروزه متداول‌ترین روش برای تولید امواج فراصوت بواسطه خاصیت پیزوالکتریکی برخی مواد مثل کوارتز، متانیوبات سرب ($PbNb_2O_6$)، تیتانات باریم ($BaTiO_3$)، مخلوط کریستال تیتانات زیرکونات سرب و ... می‌باشد [۱۶]. در اکثر دستگاه‌ها از سرامیک‌های پیزوالکتریک استفاده می‌شود که به دلیل شکننده بودن این سرامیک‌ها آنها را میان دو بلوک فلزی قرار می‌دهند. ساختار کلی این نوع ترانسدیوسر تحت عنوان پیزوالکتریک ساندویچی^۳ مشهور است (شکل ۱-۵). برای کارایی بیشتر دو صفحه سرامیکی را به هم متصل می‌کنند تا تمام حرکات مکانیکی را بطور کامل منتقل کند. این نوع سیستم براساس سرامیک‌های بکار رفته می‌تواند تقریباً تمام گستره فراصوت را تحت پوشش قرار دهد.

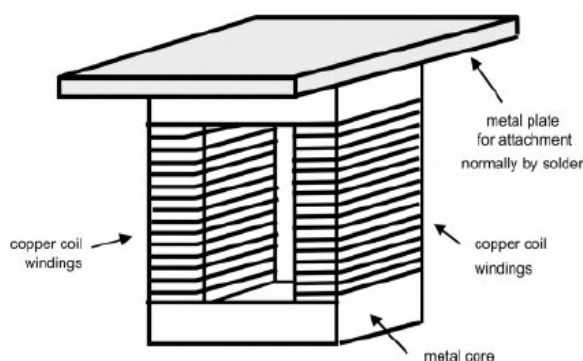


شکل ۱-۵- ترانسدیوسر پیزوالکتریک ساندویچی

(۲) **تغییر شکل دهنده‌های مغناطیسی**^۴: در این نوع با تابش پالسی امواج مغناطیسی به فلزات معین در اثر تغییر اندازه این فلزات انرژی صوتی ایجاد می‌شود. مثلاً اندازه فلز نیکل با قرار گرفتن در میدان مغناطیسی کوچک شده و با برداشتن میدان مغناطیسی به حالت اولیه خود باز می‌گردد. این پدیده که تغییر شکل بر اثر مغناطیس نامیده می‌شود در سال ۱۸۴۷ میلادی توسط ژائول کشف شد [۱۶] (شکل ۱-۱)

1. Transducer
2. Piezoelectric
3. Piezoelectric "sandwich" transducer
4. Magnetostrictive

۶). وقتی میدان مغناطیسی با تپ‌های کوتاه به کار می‌رود، فلز با فرکانس یکسان به اندازه تپ‌های اعمال شده شروع به ارتعاش می‌کند. چنین ترانسدیوسری از یک هسته مرکزی با مواد تغییر شکل دهنده مغناطیسی که به دور آن سیم پیچی از مس قرار دارد تشکیل شده است. مزیت اصلی این سیستم‌ها ساختار محکم و با دوام و تولید نیرو محرکه بسیار قوی است.



شکل ۱-۶- تغییر شکل دهنده مغناطیسی

۳) **محرکه مایع**^۱: این نوع انرژی مکانیکی وارد شده به مایعات را به انرژی صوتی تبدیل می‌کند. دارای کاربردهایی مثل همگن کردن و مخلوط موثر هستند.

به طور کلی از میان دستگاههای فراصوت موجود دو نوع برای تحقیقات شیمی صوتی وجود دارد. حمام فراصوت^۲ و سیستم پروب^۳ که به ترتیب در فرکانس‌هایی حدود ۲۰ و ۴۰ کیلو هرتز کار می‌کنند [۱۷].

۱-۳-۲- حمام فراصوت:

ارزانترین و قابل دسترس‌ترین وسایل فراصوت موجود برای شیمی‌دانهاست. دارای ساختاری بسیار ساده است و بطور کلی از یک مخزن ضد رنگ با یک ترانسدیوسر که به زیر آن متصل شده، ساخته می‌شود (شکل ۱-۷). امواج فراصوت از طریق آب داخل حمام و پس از گذشتن از دیواره ظرف واکنش به مخلوط واکنش می‌رسند. به همین دلیل شدت کمی در حدود یک تا دو کیلو وات بر سانتیمتر مربع دارند. در این سیستم توزیع انرژی از طریق دیواره ظرف واکنش، اعمال شرایط مختلف واکنش مثل اتمسفر بی‌اثر، فشار، رفلاکس به راحتی انجام می‌پذیرد. دارای تکرارپذیری کم است و فرکانس‌های اعمال شده بسته به نوع ظرف و دیواره آن و محل قرار گرفتن آن در مخزن دارد.

-
1. Liquid-driven
 2. Ultrasonic cleaning bath
 3. Probe system